

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

*доктора технических наук, профессора кафедры теплофизики
и информатики в металлургии Департамента металлургии и металловедения
Института новых материалов и технологий УрФУ*

Лаврова Владислава Васильевича

*на диссертацию Каграманова Юрия Александровича «Экспериментальное
и численное моделирование механизма и процесса сухой сероочистки угольного синтез-
газа в парогазовой установке»,
представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук
по специальности 1.3.14. Теплофизика и теоретическая теплотехника*

Актуальность темы диссертации

Диссертационное исследование Каграманова Ю.А. посвящено разработке модели физико-химического механизма процесса сухой сероочистки синтез-газа и созданию численной модели системы сухой сероочистки угольного синтез-газа для парогазовых установок с внутрицикловой газификацией (ПГУ ВЦГ). Выбранная тема соответствует современным тенденциям развития энергетики и экологическим требованиям, что подтверждает ее высокую актуальность, которая обусловлена следующими факторами:

- 1) уголь остается одним из основных источников энергии в мире, особенно в регионах с ограниченным доступом к другим видам топлива. Однако сжигание угля сопровождается значительными выбросами вредных веществ, включая сероводород, что негативно влияет на экологию и здоровье населения. Современные экологические стандарты требуют снижения выбросов сернистых соединений, что делает разработку эффективных методов очистки синтез-газа крайне важной задачей.
- 2) использование сухой сероочистки позволяет повысить КПД парогазовых установок за счет исключения необходимости промежуточного охлаждения синтез-газа, что делает данную технологию перспективной для внедрения в энергетике.
- 3) в настоящее время отсутствуют универсальные модели, учитывающие все аспекты процесса сухой сероочистки, включая кинетику, термодинамику и газодинамику, что делает разработку таких моделей актуальной.

Степень обоснованности научных положений, выводов, рекомендаций, сформулированных в диссертации

Научные положения, выводы и рекомендации, представленные в диссертации, основаны на глубоком анализе существующих методов и технологий сероочистки синтез-газа, а также на результатах собственных экспериментальных и численных исследований автора.

Автором проведены термоаналитические исследования сорбентов на основе оксида цинка, определены их термоустойчивость и кинетические параметры реакций хемосорбции и восстановления. Эти данные положены в основу разработанной модели.

Разработаны и валидированы газодинамическая, термодинамическая и кинетическая модели, которые позволяют прогнозировать работу реактора сухой сероочистки в различных условиях.

Автором предложена методика многофакторного анализа, которая позволяет оптимизировать параметры процесса сероочистки с учетом различных факторов, таких как температура, состав газа и конструктивные особенности реактора.

Все выводы и рекомендации диссертации подтверждены экспериментальными данными и результатами численного моделирования, что свидетельствует о высокой степени их обоснованности.

Достоверность положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации

Достоверность основных научных результатов диссертации обеспечивается выбранной методологией исследования, результатами анализа современных отечественных и зарубежных научных трудов по исследуемой проблематике. В частности:

- автором использовано современное оборудование, такое как термогравиметрический анализатор NETZSCH STA 449F3, сканирующий электронный микроскоп EVO LS 10 и анализатор удельной поверхности TriStar 3000. Это обеспечило высокую точность измерений;
- разработанные модели проверены на соответствие экспериментальным данным и известным литературным данными других исследователей. Например, проведена валидация на стендах ВТИ и DOE, что подтверждает адекватность созданных моделей;
- практические рекомендации по применению новых методических разработок прошли апробацию и внедрены в деятельность предприятия ООО «Генерация инжиниринг» (г. Екатеринбург), о чём свидетельствует представленная в Приложении 1 справка, подписанная генеральным директором компании;
- полученные результаты опубликованы в 22 статьях, из них 10 в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ, из них 9 статей в журналах, индексируемых в международной базе Scopus и Web of Science, 1 монография, 1 патент РФ на полезную модель.

Все изложенное позволяет сделать заключение о достоверности положений, выносимых на защиту.

Характеристика структуры и содержания диссертации

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы и приложений. Диссертация изложена на 155 страницах машинописного текста, содержит 58 рисунков и 31 таблицу. Список литературы включает 152 зарубежных и русскоязычных источника.

Во *введении* приведена актуальность темы исследования и степень ее разработанности, сформулированы цель и задачи исследования, отражены научная новизна, теоретическая и практическая значимость, методология и методы исследования, положения, выносимые на защиту, структура работы.

В *первой главе* автор провел всесторонний анализ современного состояния технологий сероочистки синтез-газа, уделив особое внимание особенностям применения системы сухой сероочистки в составе парогазовых установок с внутрицикловой газификацией (ПГУ ВЦГ).

Детальный обзор отечественных и зарубежных исследований, включая как классические работы по химии сероочистки, так и современные публикации по моделированию реакций на сорбентах, позволил выявить существующие пробелы

(например, недостаточную обоснованность кинетических констант в диапазоне 300–1000 °С) и обосновать необходимость разработки нового интегрированного подхода.

На основе выявленных недостатков существующих исследований автор сформулировал цель работы – создание единой математической модели физико-химического механизма процесса сухой сероочистки. Также были поставлены задачи, связанные с уточнением экспериментальных данных, разработкой кинетической, газодинамической и термодинамической моделей, а также прогнозированием работы реактора в широком диапазоне температур.

Детальный анализ существующей литературы позволил определить направление исследований и обосновать необходимость интеграции экспериментальных и численных методов для повышения точности моделирования процессов сероочистки синтез-газа.

Во *второй главе* описаны методики проведения экспериментов, включая термоаналитические исследования сорбентов, определение их компонентного состава и пористой структуры. Автор подробно описал используемое оборудование и методы обработки данных, что обеспечивает воспроизводимость результатов.

В частности, подробно отражена методика проведения неизотермического термогравиметрического анализа (ТГА) для изучения динамики изменения массы сорбента, которая позволила определить температурные зависимости процессов хемосорбции и восстановления. Представлены характеристики экспериментальных установок, примененных для определения параметров сорбентов (метод сканирующей микроскопии, анализ элементного состава с помощью масс-спектрометрии, метод ВЕТ для определения пористости и удельной площади). Автор уделил особое внимание оценке погрешностей, что повысило достоверность полученных экспериментальных данных. Проведенные экспериментальные исследования стали основой для корректной калибровки численных моделей, что обеспечило их адекватность и применимость в условиях реальных технологических процессов.

Третья глава диссертации посвящена разработке математических моделей, включая газодинамическую, термодинамическую и кинетическую модели. Автор предложил оригинальную методику многофакторного анализа, которая позволила оптимизировать параметры процесса сероочистки.

Автор описал методы линейной интерпретации данных ТГА для определения кинетических констант, что позволило установить динамику основных реакций хемосорбции и восстановительных процессов. Для анализа распределения температур и скорости в реакторе автором применены современные численные методы расчета газодинамики и тепловых процессов – метод конечных объемов, модели многофазного потока Эйлера, закон трения Гидаспова, модель турбулентности $k-\epsilon$.

Особое внимание уделено связному расчету, в котором были интегрированы CFD-модель реактора и многокомпонентная модель гетерогенных химических реакций. Это позволило не только получить качественную валидацию расчетных методик, но и определить оптимальные режимы работы реактора (температура, давление, объем).

В итоге разработанные расчетные методы обеспечили возможность точного прогнозирования работы реактора и позволили провести оптимизационный анализ с учетом множества параметров технологического цикла.

В *четвертой главе* автор объединил экспериментальные данные и результаты численных расчетов для валидации разработанных моделей. В итоге показано, что предложенные модели хорошо согласуются с экспериментальными данными и литературными источниками и имеют практическую применимость для анализа и оптимизации процессов сероочистки синтез-газа.

В частности, проведены исследования термоустойчивости и динамики разложения сорбента. Результаты анализа поведения сорбента в инертной и активной среде позволили оценить его стабильность и долговечность при работе в условиях высоких температур.

Сравнение результатов экспериментов с вычислительными моделями подтвердило корректность выбранного подхода, а также продемонстрировало возможность прогнозирования эффективности сероочистки при различных режимах работы. Полученные результаты моделирования процессов хемосорбции и восстановления позволили количественно оценить эффективность работы реактора и выявить оптимальные режимы его работы.

Пятая глава посвящена прогнозированию работы реактора сухой сероочистки. Автор провел параметрические расчеты для различных температур и составов синтез-газа, что позволило определить оптимальные условия работы реактора и подтвердило возможность практического использования разработанных моделей для прогнозирования работы системы сероочистки.

В частности, представлено описание технологической схемы ПГУ ВЦГ и характеристик реактора – определены геометрические и эксплуатационные параметры реактора, которые позволили смоделировать его работу при различных входных условиях использования синтез-газа. Полученные численные результаты позволяют количественно оценить распределение фаз в реакторе и влияние различных режимных параметров на стабильность процесса. Представленные результаты анализа влияния температуры, давления, состава синтез-газа и других факторов на эффективность сероочистки позволяют определить оптимальные режимы работы, обеспечивающие максимальное сочетание КПД, надежности и экономической эффективности.

Существенным положительным результатом работы являются выполненные автором сравнительные исследования работы реактора для разных технологий газификации (GE, KRW, Техасо, Оху-Fuel), которые продемонстрировали универсальность разработанной методики и возможность её применения в различных условиях, например, при переходе к новым, более экологически чистым технологиям.

Научная новизна исследования

В качестве научной новизны диссертационной работы следует отметить:

1. Создание многокомпонентной модели физико-химического механизма процесса сухой сероочистки, учитывающей параллельно протекающие реакции хемосорбции сероводорода, восстановления оксида цинка в водороде, монооксиде углерода, метане, углероде, учитывающей конкурентный вклад каждой реакции (селективность) в общий процесс.
2. Определение кинетических констант для реакций хемосорбции и восстановления в диапазоне температур 300–1000 °С методом неизотермического ТГ анализа, что расширяет существующие данные.

3. Разработку методики многофакторного анализа данных расчета термодинамического цикла ПГУ-ВЦГ, позволяющей оптимизировать параметры процесса сероочистки с учетом различных факторов.

4. Создание компьютерной CFD-модели реактора сухой сероочистки угольного синтез-газа, объединяющей газодинамику, термодинамику и кинетику, что позволяет выполнять комплексный расчет процесса сероочистки и прогнозировать работу реактора.

Практическая значимость полученных результатов

Практическая значимость работы заключается в возможности применения полученных расчетных моделей для оптимизации физико-химических процессов сухой сероочистки синтез-газа в парогазовых установках. Разработанные модели могут быть использованы для повышения эффективности существующих установок, а также для разработки новых технологических схем с учетом экологических требований и экономической целесообразности. Предложенная методика многофакторного анализа позволяет снизить капитальные и эксплуатационные затраты на сероочистку, что делает технологию более экономически выгодной.

Результаты диссертации уже нашли применение в конструкторской разработке системы очистки газа путевого топливного подогревателя, выполненной ООО «Генерация Инжиниринг».

Соответствие диссертации паспорту специальности

Диссертация соответствует паспорту научной специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника. Работа посвящена исследованию тепловых и массообменных процессов в системах сероочистки синтез-газа, что соответствует основным направлениям специальности – соответствует пункту 6 «Экспериментальные исследования, физическое и численное моделирование процессов переноса массы, импульса и энергии в многофазных системах и при фазовых превращениях». Автор использовал современные методы численного моделирования и экспериментального исследования, что также соответствует требованиям паспорта специальности – соответствует пункту 7 «Экспериментальные и теоретические исследования процессов совместного переноса тепла и массы в бинарных и многокомпонентных смесях веществ, включая химически реагирующие смеси».

Вопросы и замечания по диссертации

1. Как модель сухой сероочистки синтез-газа, разработанная в работе, учитывает экстремальные температурные режимы (ниже 300 °С и выше 1000 °С), и какие ограничения это накладывает на её применение?

В диссертации экспериментальные и численные исследования проведены в диапазоне 300–1000 °С. Однако в реальных условиях возможны отклонения от этого диапазона, например, при аварийных режимах или переходных процессах. Поэтому, на наш взгляд, важно понимание поведения модели за пределами исследованных температур, что является критичным для оценки её надежности и безопасности в промышленных условиях.

2. Каким образом возможно провести масштабирование модели с лабораторных установок (стендов ВТИ и DOE) на промышленные реакторы с учетом теории подобия,

которая устанавливает критерии моделирования и позволяет распространять результаты экспериментов на подобные явления?

Автор валидировал модель на экспериментальных стендах, однако переход к промышленным масштабам требует учета дополнительных факторов, таких как неоднородность тепловых потоков, износ оборудования, неравномерность газодинамики и локальные перегревы, колебания нагрузки (неравномерность подачи топлива и сорбентов), которые могут выходить за рамки классических критериев подобия. Какие дополнительные корректировки необходимы для адаптации модели к реальным условиям эксплуатации?

3. Как наличие примесей в синтез-газе (например, тяжёлых металлов, золы) влияет на эффективность сорбентов на основе оксида цинка, и были ли такие сценарии учтены в модели?

В реальных условиях синтез-газ может содержать примеси, которые не рассматривались в экспериментах (например, при использовании низкокачественного угля). На наш взгляд, их влияние на кинетику реакций и износ сорбентов необходимо изучить, чтобы гарантировать стабильность работы системы.

4. Какие меры предложены для повышения долговечности сорбентов при циклических нагрузках (нагрев-охлаждение, регенерация), и как их деградация может повлиять на КПД сероочистки?

В работе исследована термоустойчивость сорбентов, но не оценена их устойчивость к механическим и термическим циклическим нагрузкам, которые неизбежны в промышленных условиях. Деградация сорбентов со временем может привести к снижению эффективности очистки и росту эксплуатационных затрат.

Приведенные вопросы и замечания носят дискуссионный характер, не влияют на основные результаты, полученные в работе, и не снижают ее научной и практической значимости. Диссертационная работа Каграманова Ю.А. является в целом завершенным исследованием, качественно оформлена, написана грамотным языком, изложена логично и последовательно. Автореферат соответствует содержанию диссертации.

Заключение

Диссертация Каграманова Юрия Александровича на тему «Экспериментальное и численное моделирование механизма и процесса сухой сероочистки угольного синтез-газа в парогазовой установке», представленная на соискание ученой степени кандидата технических наук, является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком уровне. Достижение поставленной в диссертационном исследовании цели сопряжено с решением целого комплекса задач, имеющих теоретическое и прикладное значение.

Диссертация и автореферат соответствуют пунктам Паспорта специальности 1.3.14. Теплофизика и теоретическая теплотехника: пункт 6. Экспериментальные исследования, физическое и численное моделирование процессов переноса массы, импульса и энергии в многофазных системах и при фазовых превращениях; пункт 7. Экспериментальные и теоретические исследования процессов совместного переноса тепла и массы в бинарных и многокомпонентных смесях веществ, включая химически реагирующие смеси.

Автореферат диссертации Ю.А. Каграманова полностью соответствует тексту диссертации, отражает ее основное содержание, имеет логически грамотное построение и последовательность изложения результатов исследования.

По результатам диссертационного исследования автором опубликовано достаточное количество научных работ. Диссертационная работа удовлетворяет требованиям п.9-14 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, а ее автор, Каграманов Юрий Александрович, заслуживает присуждения степени кандидата технических наук по специальности 1.3.14. Теплофизика и теоретическая теплотехника.

Официальный оппонент:

Лавров Владислав Васильевич,
доктор технических наук, доцент,
профессор кафедры теплофизики и информатики в металлургии Департамента
металлургии и металловедения Института новых материалов и технологий ФГАОУ ВО
«Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

 В.В. Лавров

Контактная информация:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Россия, 620062, г. Екатеринбург, ул. Мира, д.19.

Тел.: раб. 8(343) 375-44-51, моб. +7 922 163 4727.

Адрес электронной почты: v.v.lavrov@urfu.ru

« 03 » _____ 03 _____ 2025 г.

Подпись В.В. Лаврова удостоверяю:

СЕКРЕТАРЬ

А.В.А.

