

РЕЦЕНЗИЯ

на дисертационния труд „Компютърно моделиране на процеси в колонни апарати“, представен от магистър Боян Христов Бояджиев за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ по научна специалност 4.2 Химически науки „Процеси и апарати в химичната и биохимичната технология“, с научен ръководител доц. д-р Мария Димитрова Дойчинова.

Рецензент: доц. д-р Красимир Борисов Радев, Институт по механика при БАН.

Данни за докторанта

Боян Христов Бояджиев е роден на 11 февруари 1972 г. в гр. София. Висшето си образование получава в Техническия университет гр. София /1990–1995 г./ и, след защита на дипломна работа „Числено моделиране и симулиране на течение на вискозен несвиваем флуид около единична сферична твърда частица“ в катедра „Компютърни системи“ на Факултета по компютърни системи през 1996 г., получава образователно–квалификационна степен „магистър“.

Дисертантът е участвал като партньор в ХИМИНЖ ООД, в работата на International Science Centre for Power and Chemical Engineering Problems към БАН, в международния проект “Environmental management for port areas” /2002–2004 г./ с Vrije University, Brussel, Dept. Human Ecology, Prof. L. Hens. Организационен секретар е в Организационния комитет на 16th Workshop on “Transport Phenomena in Two–Phase Flows” (2016).

Боян Христов Бояджиев е съавтор на една монография, на 16 публикации в международни периодични издания, на четири патента в Р. България.

Описание на представените материали

Дисертационният труд /„докторат“/ е изложен на 97 страници и се състои от увод /„въведение“/, включващ литературен обзор с кратко изложение на обектите и проблемите на изследването, пет глави и раздел с изброяване на научните приноси със списък на публикациите и патентите на автора, върху които е построена дисертацията. Всяка глава, включително увода, завършва с изводи и списък на цитираната литература. Дисертацията съдържа 32 фигури и пет таблици.

Авторефератът с обем 35 страници правилно отразява основните резултати, описани в дисертационния труд.

Актуалност на изследванията, свързани с темата на дисертацията

Математическото моделиране е основният подход за качествен и количествен анализ на процесите в колонните апарати за оптималното им проектиране и управление в химическата промишленост, топлоенергетиката и биотехнологиите. Моделите на съвременната теория на масопренасянето не могат да опишат процесите в колонните апарати, тъй като разпределението на скоростите във фазите и междуфазовите граници са неизвестни.

В литературата се предлагат конвекционно–дифузионни модели на процесите в колонните апарати, които позволяват качествен анализ на процесите, докато моделите на средната концентрация предоставят количествено описание на процесите. Анализираните процеси в колонните апарати са простите и сложни хомогенни химични реакции, химичната и физичната абсорбция в правоток и противоток, химическата и физичната адсорбция, хетерогенните каталитични реакции с химически и физически адсорбционен механизъм.

Предложените в дисертацията нови модели на процесите в колонните апарати включват системи от диференциални уравнения, които не могат да бъдат решени със съществуващи алгоритми и трябва да бъдат създадени нови компютърни алгоритми и програми за решаване на моделните уравнения. Тези нови компютърни програми позволяват да бъдат създадени различни патенти и симулиране на процесите в тези патенти.

Анализ на научните и научно–приложните постижения

Обширният **увод** /въведение/ представлява критичен литературен обзор и завършва с извода, че предлаганите от други автори конвекционно–дифузионни модели позволяват /само/ качествен анализ на процесите, докато новите разработени модели на средната концентрация, върху които са съсредоточени усилията на автора, позволяват количествено описание на процесите.

Целта на дисертацията е създаването на подходящи алгоритми и програми за решаване на уравненията в конвективно–дифузионни модели, позволяващи качествен анализ на процесите, а използвайки модели на средните концентрации — количествено описание на процесите.

В **първа глава** „Подход на метода на пертурбациите“ е проведен анализ на компютърно моделиране и симулиране на процесите на масопренасяне в колонни апарати на базата на нов

подход с помощта на конвективно–дифузионни и средно–концентрационни модели, които водят до проблема за решаване на диференциални уравнения с малък параметър пред старшата производна. Този проблем е решен от три алгоритъма като се използва метода на пертурбациите. Предложените метод и алгоритми са основа за представянето на средно–концентрационния модел като двупараметричен модел за определянето на параметрите в него и за симулиране на химични процеси в промишлени колонни апарати.

Във **втора глава** „Модел в две координатни системи“ компютърното моделиране и симулиране на процесите на масопренасяне в колонни апарати в случаите на противоточна абсорбция на базата на новия подход с помощта на конвективно–дифузионни и средно–концентрационни модели се свежда до проблема за решаване на диференциални уравнения в две координатни системи. Това налага последователно решаване на уравненията в модела в две координатни мрежи с различни стъпки. Този проблем е решен с помощта на MATLAB функцията `interp2` и итеративна процедура. В резултат се получават разпределенията на концентрациите в колоната и ефективността на абсорбционния процес. Предложените алгоритъм и програма са основа за представянето на средно–концентрационния модел като четрипараметричен за определяне на параметрите в него и за симулиране на абсорбционни процеси в промишлени противоточни колонни апарати.

Трета глава „Многостъпков моделиращ алгоритъм“ е посветена на компютърното моделиране и симулиране на процесите на масопренасяне в колонни апарати с помощта на конвективно–дифузионни и средно–концентрационни модели в случаите на дълги адсорбционни процеси, които водят до проблема за решаване на диференциални уравнения в две координатни системи като времето е параметър в частта на модела за газовата фаза, докато аксиалните и радиалните координати са параметри в частта на модела за твърдата фаза. В тези случаи е използван многостъпков алгоритъм и програма, в които стъпката е кратък интервал от време. В резултат са получени разпределенията концентрациите в колоната. Предложените алгоритъм и програма са основа за представянето на средно–концентрационния модел като трипараметричен за определяне на параметрите в него и за симулиране на адсорбционни процеси в промишлени колонни апарати.

В **четвърта глава** „Системи от диференциални и функционални уравнения“ компютърното моделиране и симулиране на процесите на масопренасяне в колонни апарати с помощта на конвективно–дифузионни и средно–концентрационни модели в случаите на моделиране на каталитични процеси се базира на системи диференциални и функционални уравнения, което позволява определяне на разпределението на концентрациите в колоната. За определеност е разгледан каталитичен процес в система газ–твърдо, когато адсорбцията на един от реагентите на каталитичната повърхност е от физичен или химичен тип. Предложените

алгоритъм и програма са основа за представянето на средно–концентрационния модел като четрипараметричен за определянето на параметрите в него и за симулиране на каталитични процеси в промишлени колонни апарати.

В пета глава „Патенти“ решенията на компютърните изчислителни проблеми при моделиране на процесите в колонните апарати са реализирани в два патента за пречистване на газове от серен диоксид. Моделирането на абсорбцията в горната зона на противоточна колона (Патент № 1) използва методите и алгоритмите в глава 2. Основните процеси в метода на абсорбция–адсорбция (Патент № 2) са физичната абсорбция на SO_2 от H_2O в противоточно течение газ–течни капки и химична адсорбция на SO_2 от частици на синтетичен анионит в система течност–твърдо. Моделирането на противоточната абсорбция и химичната адсорбция използва методите и алгоритмите, разработени в глави 2 и 3.

Научни и научно–приложни приноси

1. Създадени са алгоритъм и програма за компютърно симулиране на процеси в колонни апарати, когато моделите представляват диференциални уравнения с малък параметър пред старшите производни;
2. Създадени са итеративен алгоритъм и програма за компютърно симулиране на абсорбционни процеси в противоточни колонни апарати, където моделите представляват системи от диференциални уравнения в две координатни системи;
3. Създадени са многостъпков алгоритъм и програма за компютърно симулиране на нестационарни адсорбционни процеси, когато в част от уравненията на модела времето е параметър;
4. Създадени са алгоритъм и програма за компютърно симулиране на хетерогенни каталитични процеси в колонни апарати, където моделите представляват системи от диференциални и функционални уравнения;
5. Създадените алгоритми и програми за компютърно симулиране се използват за изчисляване на разпределението на концентрациите, ефективността на процесите, влиянието на радиалната неравномерността на скоростта в моделите на средните концентрации, идентифициране на параметрите на моделите и за симулиране на промишлени процеси;
6. Итеративният алгоритъм и програма за компютърно симулиране на абсорбционни процеси в противоточни колонни апарати е използван за моделиране на процес в регистрирания патент „Метод и апарат за абсорбция на газове“, предлагащ колонен апарат за двузонна абсорбция, който позволява интензификация на процесите на абсорбция на средно разтворими газове в колонни апарати;

7. Итеративният алгоритъм и програма за компютърно симулиране на адсорбционни процеси в колонни апарати е използван за моделиране на процес в регистрирания патент „Метод и апарат за очистване на газове от серен диоксид“, предлагащ колонни апарати за двустепенна абсорбция–адсорбция и позволяващ регенерация на адсорбента.

Публикации и принос на докторанта

Не са представени документи, удостоверяващи приноса на докторанта при колективните публикации, което ми дава формално основание да считам, че приносите на авторите са еднакви. Резултатите от дисертационния труд са публикувани в единадесет заглавия, от които две издания /2016 и 2018 г./ на монография в Springer–Verlag, Berlin, Heidelberg, второто — преработено и допълнено в обем с повече от една трета. Публикациите в научната периодика са в международни издания и включват девет работи, от които четири — в списания с общ импакт–фактор 3,741 /по данни на дисертанта/. Една от публикациите е с един съавтор, шест от тях — с двама съавтори, останалите четири — с трима. В двата патента, разгледани в пета глава на дисертационния труд, докторантът има по трима съавтори.

Критични бележки и препоръки

Няколкото /устойчиви/ правописни грешки като „барбутаж“ вместо „барботаж“ (от френски и английски barbotage) /общо четири/ и „Поазьол“ вместо Поазьой (както е прието на български от френски) /общо седем/, неколkokратната употреба на „0“ /нула/ в химични формули вместо „O“ /кислород/ и пропуски в означаването на броя на атомите в съединението с долен индекс не пречат да бъде следвана мисълта на автора и са разбираеми.

Препоръките ми за продължаване на изследванията са както следва.

Използване в моделите на различни /от този на Поазьой, отнасящ се за еднофазно вискозно течение/ скоростни профили би показало доколко изборът на скоростен профил за многофазните течения в колонните апарати влияе върху получаваните резултати и би хвърлило допълнителна светлина върху възможността за симулиране на реални процеси.

Използването на изкуствено генерирани „експериментални“ данни за верификация на резултатите не омаловажава труда на докторанта, а демонстрира отговорност към поставените цели и работата по постигането им. Твърде препоръчително е да бъде направен опит за прилагане на разработените в дисертационния труд методи, алгоритми и програми към реално функциониращи апарати, което би дало допълнителна увереност и преценка доколко тези теоретични и изчислителни средства са подходящи за конструиране на ново и усъвършенстване на съществуващото оборудване.

Заклучение

Считам, че дисертационният труд представлява завършено научно изследване върху компютърното моделиране на процеси в колонни апарати, в който са получени нови и оригинални резултати в областта на моделирането на процеси в колонни апарати, включващи прости и сложни хомогенни химични реакции, химична и физична абсорбция в правоток и противоток, химическа и физична адсорбция, хетерогенни каталитични реакции с химически и физически адсорбционен механизъм. Докторантът демонстрира задълбочено познаване на математическите и числените методи за изследване на създадените модели и добри умения за прилагане то им към конкретни задачи, имащи практически значение в областите химични и биохимични технологии, топлоенергетика.

Дисертационният труд отговаря напълно на изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България и препоръчвам на уважаемото Научно жури да присъди на Боян Христов Бояджиев образователната и научна степен „доктор“ по научната специалност 4.2 Химически науки „Процеси и апарати в химичната и биохимичната технология“.

София, 11 януари 2019 г.

Рецензент:



доц. д-р Красимир Б. Радев