

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Родионова Ильи Сергеевича

«Макрокинетика гетерогенно-каталитического процесса с псевдооживленным слоем

катализатора на примере синтеза Фишера-Тропша»,

представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук

по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ

Проектирование и масштабирование аппаратов с псевдооживленным слоем для сильно экзотермических каталитических превращений, к которым относится синтез Фишера-Тропша, традиционно осложняется нестационарной гидродинамикой газодисперсного потока, полидисперсностью твердой фазы и риском локальных перегревов катализатора. В диссертационной работе И.С. Родионова предложены последовательные этапы исследования, позволившие связать динамику псевдооживления с макрокинетикой гетерогенных реакций на примере синтеза метанола на катализаторе $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$. Исследование соответствует актуальным тенденциям развития методов проектирования эффективных реакторов, обладает выраженной научно-прикладной направленностью и отвечает современным задачам цифровой оптимизации каталитических процессов.

Методологическую основу работы составляет двухэтапное сопряжение гидродинамического и кинетического описания. На первом этапе автор проводит параметризацию континуальной (TFM) модели на результатах дискретного (DEM) моделирования, идентифицирует границы перехода между поршнеобразным, кипящим и турбулентным режимами псевдооживления, а также определяет соответствующие критические скорости газа. Выявлена необходимость эмпирической корректировки стандартного замыкающего соотношения Гидаспова: введение коэффициента 0.225 позволило компенсировать систематическое завышение гидравлического сопротивления в TFM-модели, обусловленное континуальным осреднением и упрощением межчастичных взаимодействий. Спектральный FFT-анализ пульсаций давления применен как эффективный инструмент диагностики режимных состояний слоя. На втором этапе детальная кинетическая схема реакций гидрирования CO_2 и пароводяной конверсии CO адаптирована для практической реализации в коммерческих расчетных комплексах вычислительной гидродинамики. Путем сопоставления литературных экспериментальных данных с расчетными скоростями проведена параметризация модифицированного уравнения Аррениуса, обеспечившая воспроизведение кинетики с погрешностью не более $\pm 5\%$. Интеграция данной макрокинетической подмодели в верифицированную TFM-модель в трехмерной нестационарной постановке позволила количественно описать взаимное влияние гидродинамических флуктуаций и выхода целевого продукта. В частности, установлена устойчивая противофазная корреляция между перепадами гидравлического сопротивления и концентрацией метанола, что имеет прямое значение для организации систем автоматического управления промышленными реакторами.

По материалам автореферата сформировались следующие вопросы, требующие пояснения или дальнейшего развития.

1. Моделирование ограничено одной ячейкой распределительной решетки (90×90×60 мм) при диаметре реактора 3 м. Влияют ли краевые эффекты и отсутствие учета поперечного массообмена между соседними ячейками на характер выявленной противофазной корреляции гидродинамики и макрокинетики? Планируется ли валидация на полномасштабной геометрии?

2. В работе зафиксированы флуктуации температуры газа, однако в автореферате не отражено, выполнялось ли полностью сопряженное нестационарное моделирование теплопереноса с учетом экзотермичности реакций, либо температурный анализ носил постпроцессинговый характер? Учет локального тепловыделения критичен для оценки дезактивации катализатора.

Сформулированные замечания не затрагивают фундаментальных выводов диссертации. По совокупности признаков – актуальности поставленной задачи, оригинальности методики сопряженного CFD-моделирования, достоверности результатов и практической ценности полученных закономерностей – работа полностью соответствует пунктам 5 и 6 паспорта специальности 1.4.14. Кинетика и катализ, а также требованиям п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» (Постановление Правительства РФ № 842 от 24.09.2013). Диссертация представляет собой завершённое научное исследование, вносящее существенный вклад в исследование макрокинетики гетерогенно-каталитических процессов в сложных гидродинамических условиях. Результаты могут быть непосредственно использованы при проектировании и оптимизации режимов работы реакторов синтеза Фишера-Тропша с секционированным псевдооживленным слоем. Рекомендуются продолжить исследования в направлении полномасштабного 3D-моделирования с учетом многоячеечной конструкции реактора и внедрения микроскопических кинетических моделей с явным описанием адсорбционных равновесий.

Родионов Илья Сергеевич заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ.

Главный научный сотрудник Химического института им. А. М. Бутлерова Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» (ФГАОУ ВО КФУ), доктор технических наук (специальности 05.17.04 – Технология органических веществ и 02.00.15 – Кинетика и катализ)

Ламберов Александр Адольфович

Дата «02» июня 2026 г.

Даю согласие на обработку персональных данных.

Химический институт им. А. М. Бутлерова Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» (ФГАОУ ВО КФУ)

420008, г. Казань, ул. Кремлевская д. 1, корп. 1

Тел: 8 (843) 206-52-27

E-mail: lamberov@list.ru

Вход. № 05-9005

«03» 06 20 26г.

подпись



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФГАОУ ВО «КАЗАНСКИЙ (ПРИВОЛЖСКИЙ) ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ИН 1021602811391 УПРАВЛЕНИЕ ДОКУМЕНТООБОРОТА И КОНТРОЛЯ

ПОДПИСЬ

А. А. Ламберова

зарегистрировано