

# ОТЗЫВ

г. Саров

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

Диссертационное исследование И.С. Родионова затрагивает одну из ключевых проблем современной химической технологии – обеспечение эффективного теплоотвода и управления селективностью в экзотермических гетерогенно-каталитических процессах при переходе к реакторам с псевдооживленным слоем. На примере синтеза метанола на катализаторе  $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$  автором предпринята попытка количественно связать нестационарную гидродинамику газодисперсного потока с макрокинетикой целевых реакций, что представляет несомненный интерес как для фундаментальной кинетики, так и для прикладного реакторного проектирования.

Работа отличается методической последовательностью: сначала на модельной системе (воздух, нормальные условия) проведена верификация дискретной (DEM) и континуальной (TFM) гидродинамических моделей, затем выполнена параметризация TFM по результатам DEM-расчетов, после чего в верифицированную TFM-модель интегрирована редуцированная кинетическая схема синтеза метанола. Такой поэтапный подход позволяет минимизировать накопление погрешностей и четко локализовать источники расхождений между моделями.

Исследования во многом опираются на результаты численного моделирования гидродинамики дискретной модели с учетом турбулентного перемешивания с использованием современного программного обеспечения CAE-анализа.

Применяя спектральный FFT-анализ для идентификации режимов псевдооживления, автор определяет, что переход от поршнеобразного режима к кипящему и турбулентному сопровождается характерной эволюцией частотного спектра флуктуаций давления. Этот результат может служить основой для разработки диагностических алгоритмов мониторинга состояния слоя в промышленных аппаратах.

Адаптация кинетической схемы выполнена путем редукции сложной схема реакций, включающая адсорбционные и равновесные члены, к модифицированному уравнению Аррениуса. Далее подбирались предэкспоненциальные множители, энергии активации и температурные показатели. Достигнутая точность описания скоростей реакций ( $\pm 5\%$  в диапазоне 473-573 К) представляется достаточной для задач масштабирования, однако следует отметить, что такая параметризация «скрывает» физический смысл отдельных стадий процесса.

Наиболее содержательным результатом работы является выявление устойчивой противофазной корреляции между флуктуациями гидравлического сопротивления слоя и концентрацией метанола на выходе, при которой пики выхода продукта совпадают с моментами минимального сопротивления, когда контакт газа с катализатором оптимален. Этот вывод имеет прямое прикладное значение для организации систем автоматического управления реактором.

Вместе с тем, сформировались следующие замечания:

1. Параметризация континуальной модели проводилась исключительно по данным дискретного моделирования, без привлечения независимых экспериментальных измерений для геометрии распределительной решетки. Не раскрываются критерии оценки визуального поведения слоя частиц. Насколько обоснована экстраполяция полученных эмпирических коэффициентов (в частности, поправки 0.225 к модели Гидаспова) на промышленный масштаб, и планируется ли валидация на лабораторной установке?

2. В работе не учитывается дезактивация катализатора  $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ , чувствительного к перегревам выше 300 °С. Поскольку псевдооживленный слой характеризуется существенными локальными флуктуациями температуры, игнорирование этого фактора может приводить к завышению прогноза

долговременной производительности реактора. Требуется обсуждение границ применимости модели в условиях реального технологического цикла.

3. Упрощение кинетической модели для синтеза метанола в рамках данной работы является актуальным и обоснованным, но ее применимость к другим режимам работы реактора или к другим веществам требует дополнительной проверки и адаптации.

4. Исследований достаточности выбранного сеточного разрешения описанных в работе моделей в автореферате не приведено. По факту такое разрешение может оказаться недостаточным для учета локальных гидродинамических особенностей течения. Возможно, необходимо использование высокопроизводительных суперкомпьютеров. Это также позволит проверить приведенное в работе предположение, касающееся взаимного влияния соседних ячеек реактора (формирование локальных циркуляционных зон, увеличение времени пребывания газа и катализатора над стенками распределительной решетки из-за ограниченности расчетной области).

Указанные замечания не умаляют научной ценности выполненного исследования.

Практические результаты проведенной работы, несомненно, являются важным материалом для дальнейшего развития реакторов с псевдооживленным слоем.

В качестве пожелания при проведении дальнейших исследований рекомендуется проводить их на базе отечественных аналогов зарубежного ПО в области САЕ-моделирования, в частности, с применением пакета программ «Логос» со встроенной библиотекой моделирования кинетики химических реакций разработки ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ».

По совокупности признаков – актуальности темы, оригинальности методологии, достоверности результатов и практической значимости выводов – диссертация соответствует пунктам 5 и 6 паспорта специальности 1.4.14. Кинетика и катализ, а также требованиям п. 9–11, 13–14 «Положения о присуждении ученых степеней» (Постановление Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013). Работа представляет собой заверенное научное исследование,

вносящее вклад в развитие методов сопряженного моделирования гидродинамики и макрокинетики гетерогенных процессов.

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

Отзыв подготовили:

Заместитель начальника научно-исследовательского отделения по вопросам моделирования задач переноса и КПД ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ», доктор физико-математических наук

д.ф.-м.н. (1.2.2. Математические методы и комплексы программ)  
Андрей Николаевич Гребенников

 А.Н. Гребенников

Начальник научно-исследовательского отдела института теоретической и математической физики, ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ»

Андрей Александрович Деулин

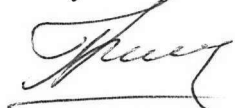
 А.А. Деулин

Адрес:

Институт теоретической и математической физики, Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики» (ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ»)

607188, Нижегородская обл., г. Саров, пр-кт Мира, д. 37,  
(83130) 2-48-02, E-mail: staff@vniief.ru.

Даем согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

 А.Н. Гребенников

 А.А. Деулин

18.06.2026

Подписи Гребенникова А.Н. и Деулина А.А. удостоверяю:

Заместитель директора ИФВ по ОКР и ПНВ –  
начальник научно-исследовательского отделения,  
ученый секретарь ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ»,  
кандидат физико-математических наук

  
 А.О. Бликов

Вход. № 05 - 9084  
«23» 06 20 26г.  
подпись 