

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

диссертационного совета 24.2.312.03, созданного на базе
федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Казанский национальный исследовательский
технологический университет»

Министерства науки и высшего образования Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук
аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 26.06.2026 г. №17

О присуждении Родионову Илье Сергеевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Макрокинетика гетерогенно-каталитического процесса с псевдооживленным слоем катализатора на примере синтеза Фишера-Тропша» по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ принята к защите 24.04.2026 г., протокол заседания №10, диссертационным советом 24.2.312.03, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования (ФГБОУ ВО) «Казанский национальный исследовательский технологический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 420015, г. Казань, ул. К. Маркса, д. 68, приказ о создании диссертационного совета №426-154 от 12.03.2010 г. (приказом Минобрнауки России №75/нк от 15.02.2013 г. совет признан соответствующим действующему «Положению о совете ...»; приказом Минобрнауки России №561/нк от 03.06.2021 г. диссертационному совету 24.2.312.03 установлены полномочия по защитах диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук на срок действия номенклатуры научных специальностей).

Соискатель Родионов Илья Сергеевич, 25 марта 2000 года рождения, в 2024 г. окончил магистратуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет» по направлению подготовки 18.04.02 Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии. С 2024 г. по настоящее время является аспирантом очной формы обучения и работает в должности ассистента кафедры общей химической технологии ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет».

Диссертация выполнена на кафедре общей химической технологии ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Улитин Николай Викторович, ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», кафедра общей химической технологии, заведующий кафедрой.

Официальные оппоненты:

Прозоров Дмитрий Алексеевич, доктор химических наук, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет», лаборатория синтеза, исследований и испытаний каталитических и адсорбционных систем для процессов переработки углеводородного сырья, главный научный сотрудник,

Соловьев Сергей Анатольевич, кандидат физико-математических наук, доцент, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский государственный энергетический университет», кафедра информационных технологий и интеллектуальных систем, заведующий кафедрой, –

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук (ИНХС РАН), г. Москва, – в своем положительном отзыве, подготовленном Константином Игоревичем Дементьевым, кандидатом химических наук, заместителем директора ИНХС РАН и утвержденном Альбертом Борисовичем Куликовым, кандидатом химических наук, заместителем директора ИНХС РАН, указала, что диссертация является самостоятельно выполненной и завершенной научно-квалификационной работой, в которой решена задача установления влияния нестационарной гидродинамики псевдооживленного слоя катализатора на кинетику синтеза метанола. Результаты решения этой задачи, представленные в диссертации, значимы для кинетики и гетерогенного катализа и соответствуют пункту 5 в части «Разработка и усовершенствование промышленных катализаторов, методов их производства и оптимального использования в каталитических процессах» и пункту 6 «Разработка новых и усовершенствование существующих каталитических процессов и технологий. Макрокинетика. Математическое моделирование и оптимизация каталитических процессов и реакторов. Нестационарные химические превращения» паспорта специальности 1.4.14. Кинетика и катализ. По новизне, научной и практической значимости диссертация полностью отвечает требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено Постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г. в действующей редакции), предъявляемым к кандидатским диссертациям. Автор работы, Родионов Илья Сергеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ.

Соискатель имеет 30 опубликованных научных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 6 работ общим объемом 4.13 печатных листа (авторский вклад 85%), из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 3 статьи. В опубликованных работах отражены основные результаты диссертации, в их числе:

1. Ulitin, N.V. Numerical simulation of hydrodynamics and heat transfer in a reactor with a fluidized bed of catalyst particles in a three-dimensional formulation / N.V. Ulitin, K.A. Tereshchenko, I.S. Rodionov, K.A. Alekseev, D.A. Shiyan, K.E. Kharlampidi, Y.O. Mezhuhev // Applied Sciences. – 2024. – V. 14. – Article 5009.

2. Родионов, И.С. Верификация CFD-TFM модели псевдооживленного слоя катализатора процесса Фишера-Тропша / И.С. Родионов, Н.В. Улитин, К.А. Терещенко, В.И. Анисимова, О.В. Стоянов, Х.Э. Харлампики // Вестник Технологического университета. – 2026. – Т. 29, №3. – С. 153-158.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах, заимствованный материал без ссылок на автора и(или) источник заимствования, а также результаты научных работ, выполненных в соавторстве, без ссылок на соавторов.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

– от ведущего научного сотрудника кафедры общей химической технологии ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет», д.х.н. Гамова Г.А.; отзыв положительный, имеются вопросы и замечания: 1) Возможно ли использовать предложенные в диссертации модели для решения проблемы увеличения мольной доли метанола на выходе при данных условиях? 2) На стр. 14 сказано, что «для адекватного воспроизведения поведения слоя ввели поправочный коэффициент к модели сопротивления Гидаспова, равный 0.225 (22.5% от расчетного сопротивления)». Вопрос: чем обоснована именно такая величина коэффициента? Является ли она универсальной для данной системы (катализатор + инертные частицы) или может зависеть от скорости газа, порозности и температуры?

– от главного научного сотрудника Химического института им. А. М. Бутлерова ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», д.т.н. Ламберова А.А.; отзыв положительный, имеются вопросы и замечания: 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.

– от главного научного сотрудника АО «Центральный научно-исследовательский институт специального машиностроения», д.х.н. Далинкевича А.А.; отзыв положительный, имеются замечания: 1) При параметризации TFM автор использовал результаты CFD-DEM только для одной ячейки распределительной решетки. Однако в промышленном реакторе

взаимное влияние соседних ячеек и переток газа между ними могут существенно изменить гидродинамику и макрокинетику. В работе не обсуждается, как будут масштабироваться полученные результаты на многоячейковую конструкцию. 2) В работе утверждается, что учет химических реакций не внес качественных изменений в гидродинамику слоя, однако FFT-анализ показал рост амплитуды доминирующей частоты пульсаций. Хотя автор объясняет это флуктуациями плотности газа из-за изменения состава, следовало бы более детально проанализировать возможное влияние экзотермичности реакций на гидродинамику и оценить чувствительность модели к тепловым эффектам.

– от директора Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, д.х.н. Сабирова Д.Ш.; отзыв положительный, имеются вопросы и замечания: 1) При редукции детальной кинетической схемы, включающей кинетические, адсорбционные и равновесные члены, к модифицированному уравнению Аррениуса происходит утрата явной физической интерпретации стадий адсорбции/десорбции реагентов и продуктов. Насколько обоснована экстраполяция полученных эмпирических параметров за пределы диапазонов 50-70 бар и 503-613 К, в которых проводился подбор параметров? 2) Введение эмпирического поправочного коэффициента 0.225 к модели межфазного сопротивления Гидаспова обеспечило согласование континуальной и дискретной моделей в условиях одной расчетной ячейки. Проводилась ли проверка устойчивости этого коэффициента при изменении полидисперсности частиц или геометрии распределительного устройства, и не является ли он имеющим сугубо частный характер параметром, применимым только к рассматриваемой конфигурации?

– от заместителя начальника научно-исследовательского отделения по вопросам моделирования задач переноса и КПД Федерального государственного унитарного предприятия «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики», д.ф.-м.н. Гребенникова А.Н. и начальника научно-исследовательского отдела Института теоретической и математической физики Деулина А.А.; отзыв положительный, имеются замечания и вопросы: 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°C. 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).

– от доцента кафедры радиофизики института физики ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», д.т.н. Шемахина А.Ю.; отзыв положительный, имеются вопросы и замечания: 1) Не приведены детали численной схемы исследования – какой дискретизацией по времени и пространству пользовались (явная/неявная, порядок аппроксимации), какие критерии сходимости по невязкам применялись, как обеспечивалась устойчивость расчета при сильной нелинейности межфазного взаимодействия. Для задач с экзотермическими реакциями и резкими градиентами плотности эти параметры критичны для воспроизводимости результатов. Также не указано, проводилась ли оценка влияния шага по времени на спектральные характеристики флуктуаций (FFT-анализ чувствителен к дискретизации временного ряда). 2) Интеграция макрокинетической модели выполнена через редуцированное уравнение Аррениуса, что с инженерной точки зрения оправдано. Однако с позиции численной устойчивости сопряженных расчетов важно понимать, как организовано взаимодействие источников членов (химические превращения) с уравнениями переноса массы и энергии. Использовалось ли операторное расщепление, как контролировалась положительность концентраций, применялась ли адаптация шага по времени при резком изменении скорости реакции. Эти аспекты напрямую влияют на достоверность прогноза нестационарного поведения системы.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их высокой профессиональной квалификацией, наличием публикаций по проблематике, связанной с темой диссертации, компетентностью в области гетерогенного катализа и математического моделирования каталитических процессов, опытом работы и способностью профессиональной оценки научно-практической значимости диссертационного исследования.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– осуществлена параметризация континуальной модели на основе результатов расчетов дискретной модели для системы «газ – полидисперсные частицы катализатора $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ и инертного материала» в реакторе синтеза Фишера-Тропша с псевдооживленным слоем катализатора и распределительными решетками из вертикальных пластин; *определены* эмпирические параметры замыкающих соотношений (предел упаковки 0.64, фрикционный предел упаковки 0.6, угол внутреннего трения 29° , коэффициент восстановления 0.92); *установлена* необходимость введения поправочного коэффициента 0.225 к модели сопротивления Гидаспова для адекватного воспроизведения поведения слоя частиц катализатора $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ и инертного материала;

– *установлены* значения скоростей газа, соответствующие различным режимам псевдооживления полидисперсного катализатора $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ синтеза Фишера-Тропша и инертного материала в ячейках распределительной решетки: минимальная скорость псевдооживления – 1 м/с, поршнеобразный режим – 1.4 м/с, кипящий режим – 3 м/с, турбулентный режим – 5 м/с;

– *показано*, что переход от поршнеобразного к кипящему и турбулентному режимам псевдооживления частиц катализатора $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ и инертного материала в реакторе синтеза Фишера-Тропша сопровождается изменением частотных характеристик и появлением хаотических составляющих, что свидетельствует об улучшении массо- и теплообмена;

– на основе верифицированной континуальной модели и кинетической схемы получения метанола по Фишеру-Тропшу на катализаторе $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ построена и параметризована по независимым данным макрокинетическая модель процесса, протекающего в реакторе с секционированным псевдооживленным слоем катализатора;

– выявлена корреляция между флуктуациями гидравлического сопротивления псевдооживленного слоя частиц катализатора $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ и инертного материала и колебаниями выхода метанола в синтезе Фишера-Тропша: максимумы концентрации метанола соответствуют моментам взвешивания слоя (минимальному гидравлическому сопротивлению), что объясняется интенсификацией межфазного контакта газа с катализатором при расширении слоя; *установлено*, что колебания скорости реакции и температуры газа также коррелируют с флуктуациями гидравлического сопротивления, при этом наблюдается тенденция к охлаждению слоя частиц катализатора $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ и инертного материала после первичного разогрева в переходном режиме.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что расширены представления о взаимосвязи между нестационарной гидродинамикой секционированного псевдооживленного слоя и макрокинетикой экзотермических гетерогенно-каталитических реакций (на примере получения метанола по Фишеру-Тропшу), а также представлена

методология сопряженного моделирования гидродинамики и химической кинетики в реакторах с распределительными решетками.

Значение полученных результатов для практики подтверждается тем, что:

– значения эмпирических параметров замыкания континуальной модели и установленные гидродинамические режимы псевдооживления *позволяют выбирать* диапазон рабочих скоростей газа и *оценивать* гидравлическое сопротивление слоя частиц катализатора $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ и инертного материала при проектировании и масштабировании реакторов получения метанола по Фишеру-Тропшу;

– выявленная корреляция между флуктуациями гидравлического сопротивления слоя частиц катализатора $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ и инертного материала и колебаниями концентрации метанола в синтезе Фишера-Тропша *может использоваться* для оперативной диагностики и управления режимом псевдооживления в промышленных реакторах;

– анализ флуктуаций давления на основе быстрого преобразования Фурье *применим* для мониторинга стабильности режима псевдооживления частиц катализатора $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ синтеза Фишера-Тропша и инертного материала, а также раннего обнаружения нежелательных режимов псевдооживления слоя частиц.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:

– результаты моделирования гидродинамики псевдооживленного слоя частиц катализатора $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ и инертного материала *верифицированы* сопоставлением дискретной и континуальной моделей, показавшим адекватное воспроизведение гидравлического сопротивления слоя частиц и динамики фаз в условиях синтеза метанола по Фишеру-Тропшу с учетом выявленных систематических отклонений;

– результаты моделирования макрокинетики синтеза метанола по Фишеру-Тропшу на катализаторе $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ *согласуются* с экспериментальными данными, опубликованными в независимых источниках.

Диссертация написана соискателем самостоятельно. Личный вклад соискателя состоит в сборе и анализе литературных данных, реализации решения поставленных задач, анализе результатов, формулировании выводов и участии в написании и подготовке публикаций.

Соискатель Родионов И.С. ответил на прозвучавшие в ходе заседания замечания и вопросы. С рядом высказанных замечаний соискатель согласился.

Диссертационным советом сделан вывод, что рассматриваемая диссертация является научно-квалификационной работой и соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней (Постановление Правительства РФ №842 от 24 сентября 2013 г. в действующей редакции).

На заседании 26 июня 2026 г. диссертационный совет принял решение присудить Родионову Илье Сергеевичу ученую степень кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ за решение научной задачи установления взаимосвязи между нестационарной гидродинамикой псевдооживленного слоя гетерогенного катализатора и макрокинетикой

синтеза Фишера-Тропша на примере синтеза метанола на катализаторе Cu/ZnO/Al₂O₃ в реакторе с секционированным псевдоожиженным слоем, что имеет значение для развития макрокинетического моделирования каталитических процессов.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ, участвовавших в заседании, из 29 человек, входящих в состав совета, проголосовал: «за» – 20, «против» – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Заместитель председателя
диссертационного совета
24.2.312.03



Бухаров Сергей Владимирович

Ученый секретарь
диссертационного совета
24.2.312.03

A handwritten signature in black ink, appearing to be 'Nu'.

Нуруллина Наталья Михайловна

26.06.2026 г.