

## 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

Разработка и масштабирование реакторов с псевдооживленным слоем для процессов синтеза Фишера-Тропша, в частности получения метанола на катализаторах  $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$ , является важной технологической задачей, обусловленной высокой экзотермичностью реакций, чувствительностью катализатора к локальным перегревам и сложностью гидродинамики двухфазного потока. Актуальность исследования И.С. Родионова не вызывает сомнений, поскольку переход от традиционных неподвижных слоев к секционированным псевдооживленным системам требует надежных вычислительных инструментов, способных связать нестационарную гидродинамику с макрокинетикой гетерогенных превращений. Целью диссертационной работы выступает установление влияния гидродинамических условий на макрокинетическую синтез метанола в реакторе с распределительными решетками методами вычислительной гидродинамики.

В работе реализован комплексный подход, сочетающий дискретное (CFD-DEM) и континуальное (CFD-TFM) моделирование. Автор впервые выполнил параметризацию TFM-модели на основе результатов DEM-расчетов для полидисперсной системы «катализатор  $\text{Cu/ZnO/Al}_2\text{O}_3$  – инертный материал», идентифицировал режимы псевдооживления (поршнеобразный, кипящий, турбулентный) и соответствующие им критические скорости газа. Особого внимания заслуживает методология сопряжения гидродинамики и химической кинетики: сложная схема реакций гидрирования  $\text{CO}_2$  и пароводяной конверсии  $\text{CO}$  была успешно редуцирована к модифицированному уравнению Аррениуса путем учета массовой концентрации катализатора и подбора предэкспоненциальных множителей, энергий активации и температурных показателей, что обеспечило описание скоростей реакций с погрешностью не более  $\pm 5\%$ . Интеграция редуцированной макрокинетической модели в верифицированную TFM-модель в CFD-пакете ANSYS Fluent позволила в трехмерной нестационарной постановке выявить противофазную корреляцию между флуктуациями гидравлического сопротивления слоя и концентрацией метанола на выходе, а также продемонстрировать применимость FFT-анализа для диагностики режимов псевдооживления.

Возникли следующие замечания и вопросы.

1. При редукации 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?

Указанные замечания не снижают научной значимости выполненной работы.

По актуальности, объему выполненных исследований, достоверности результатов, научной новизне и практической значимости выводов диссертационная работа «Макрокинетика гетерогенно-каталитического процесса с псевдооживленным слоем катализатора на примере синтеза Фишера-Тропша», представленная на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ, соответствует пунктам 5 и 6 паспорта указанной специальности, а также требованиям п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842. Работа выполнена на высоком научно-техническом уровне, содержит элементы методологической новизны в области сопряженного CFD-моделирования и редукции макрокинетических схем для секционированных псевдооживленных систем. Практические рекомендации по выбору рабочих скоростей газа, диагностике режимов слоя и стратегии пуска реактора представляют интерес для проектирования промышленных аппаратов.

Автор диссертационной работы Родионов Илья Сергеевич достоин присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ.

Доктор химических наук (специальность 1.4.4. Физическая химия), Директор Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, главный научный сотрудник лаборатории математической химии ИНК УФИЦ РАН

Сабиров Денис Шамилевич

Дата « 05 » 06 2026 г.

Даю согласие на обработку персональных данных.

  
ПОДПИСЬ ЗАВЕРЕНА  
УЧЕНЫМ СЕКРЕТАРЬ ИНК УФИЦ РАН  
К. Х. Н. ПАВЛОВА И. Н.



Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (ИНК УФИЦ РАН). Почтовый адрес: 450075, Республика Башкортостан, г. Уфа, проспект Октября, 141. Тел.: +7 (347) 284-27-50. E-mail: ink@anrb.ru, sabirovdsh@mail.ru.

Вход. № 05-9026  
« 10 » 06 2026 г.  
ПОДПИСЬ 