

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

Диссертация посвящена актуальной задаче сопряженного моделирования гидродинамики и химических превращений в реакторах с псевдооживленным слоем. Работа представляет интерес прежде всего методологией верификации континуальной (TFM) модели на базе данных дискретного (DEM) расчета, а также подходом к интеграции макрокинетической подмодели в коммерческий CFD-пакет.

Методическая основа исследования – последовательная двухэтапная процедура. На первом этапе на модельной системе (воздух, нормальные условия) проводится параметризация замыкающих соотношений TFM по результатам DEM-моделирования. Затем, на втором этапе, в верифицированную гидродинамическую схему интегрируется редуцированная кинетическая модель и проводится вычислительный эксперимент. Такой подход позволяет локализовать источники погрешностей и минимизировать их накопление при сопряжении физических подмоделей, что является общепринятой практикой в современных CFD-исследованиях многофазных систем.

Особого внимания заслуживает проведение анализа сеточной независимости. Автор демонстрирует, что увеличение числа ячеек сверх ~18 000 не приводит к существенному изменению амплитуды пульсаций давления, что обосновывает выбор расчетной сетки. Также корректно применен FFT-анализ для идентификации режимов псевдооживления по спектральным характеристикам флуктуаций давления – данный метод широко используется в задачах диагностики нестационарных течений.

Важным результатом является количественная оценка расхождений между дискретной и континуальной моделями: систематическое завышение гидравлического сопротивления в TFM, отсутствие высокочастотных хаотических составляющих в спектре, более «вязкое» поведение твердой фазы. Эти наблюдения согласуются с известными ограничениями континуального приближения при описании полидисперсных систем и локальных межчастичных взаимодействий.

Однако имеется ряд вопросов к исследованию:

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. Использовался ли операторное расщепление (operator splitting), 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.

Указанные замечания не затрагивают фундаментальных выводов работы.

По совокупности признаков – актуальности задачи, оригинальности методики сопряженного моделирования, достоверности результатов и практической значимости выводов – диссертация соответствует пунктам 5 и 6 паспорта специальности 1.4.14. Кинетика и катализ, а также требованиям п. 9–14 «Положения о присуждении ученых степеней» (Постановление Правительства РФ № 842 от 24.09.2013). Работа представляет собой завершённое исследование, вносящее вклад в развитие методов вычислительной гидродинамики для анализа многофазных реакционных систем.

Автор диссертационной работы достоин звания кандидата химических наук по специальности 1.4.14. Кинетика и катализ.

Доктор технических наук (специальность 1.1.9. Механика жидкости, газа и плазмы), доцент кафедры радиофизики института физики ФГАОУ ВО "Казанский (Приволжский) федеральный университет"

Шемахин Александр Юрьевич  «22» июня 2026 г.

Даю согласие на обработку персональных данных.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет". Адрес: 420008, Россия, Республика Татарстан, г. Казань, ул. Кремлевская, д.18, корп.1. Тел.: +7 (843) 233-74-00, public.mail@kpfu.ru

Подпись Шемахина А.Ю.



Степанов С.А.

Вход. № 05-9082
« 23 » 06 20 26 г.
подпись *Степанов*