

ОТЗЫВ

доктора технических наук главного научного сотрудника ИНЭИ РАН Кейко Александра Владимировича на автореферат диссертации Каграманова Юрия Александровича «Экспериментальное и численное моделирование механизма и процесса сухой сероочистки угольного синтез-газа в парогазовой установке», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.3.14 (теплофизика и теоретическая теплотехника)

Диссертационная работа Ю.А. Каграманова посвящена разработке, отладке и экспериментальной апробации математической модели для процесса сухой очистки синтез-газа из ископаемого угля (кузнечного каменного) от соединений серы, а также расчету реактора с помощью указанной модели и определению оптимальных параметров процесса. Работа производит хорошее впечатление несколькими своими качествами. В частности, она сделана старательно: автор выбрал конкретный объект и всесторонне его рассмотрел с использованием имеющихся у него методов. Он построил некую математическую модель, актуализировал ее информационную базу с помощью инструментальных аналитических методов, а результат проверил по критерию расчетного воспроизведения экспериментальных величин. Это – классическая постановка задачи для кандидатской диссертации. Вместе с тем, если абстрагироваться от упомянутых по тексту современных методов вроде синхронного термического анализа на приборе Netzsch STA 449 или программных кодов CAD ANSYS, может сложиться впечатление, что работа выполнена в середине 1980-х гг. Этому способствуют оформление текста, применяемая терминология, использованные методические приемы и отсутствие сведений о статистической обеспеченности измеренных величин. Похоже, параллельные измерения в работе не проводили. Очевидно, это следовало бы сделать. По крайней мере, несколько неожиданных изгибов на графиках это, скорее всего, подправило бы.

В качестве замечаний хотелось бы отметить следующее.

1. В автореферате не обсуждены построенные автором модели – ни их математическая природа, ни примененные для решения численные методы, ни средства разработки. Местами даже не ясно, была ли модель химического процесса термодинамической, кинетической или гибридной. Между тем, от выбора структуры модели и численных методов существенно зависит то, как следует интерпретировать полученные на модели результаты.

2. На стр. 12 приведена методика расчета кинетики процесса и отмечено, что скорость реакции рассчитывается в соответствии с законом действующих масс. Вместе с тем справедливость ЗДМ доказана для элементарных и формально простых реакций в гомогенных системах. Для гетерогенных систем его обычно не применяют, а когда применяют, то посвящают отдельное обстоятельное

обсуждение допустимости такого подхода и принятым для этого допущениям. В самом деле, исследуемые в работе реакции включают 5 стадий, совокупность которых нельзя считать ни элементарной, ни формально простой реакцией. Вполне вероятно, что существенные невязки на рис. 3 «б» между опытными и расчетными величинами объясняются именно этим обстоятельством.

3. Не вполне ясно, каким образом определяли порядок реакции для пятистадийной гетерогенной реакции – из формальной кинетики его величина никак не следует. В подобных случаях иногда применяют т.н. подгонку по параметрам, которая имеет ограниченную применимость и сразу относит модель к категории *ad hoc*. Для этого, опять же, требуется некоторая статистическая обеспеченность. Однако, в данном случае нельзя говорить об универсальности математической модели. Если за расчетом порядка реакции стоит другая, более глубокая теория, ее следовало хотя бы упомянуть.

4. Для задания зависимости удельной поверхности сорбента от температуры и времени автор использовал аппроксимацию, полученную в 1981 году проф. Г.Р. Ранадой, в те годы – молоденьким выпускником американского химфака, специалистом по физхимии полимеров. При этом удельная поверхность реагирующей твердой насадки в газовом потоке – очень изменчивая величина. В 2025 году довольно странно использовать для ее оценки аппроксимацию сорокалетней давности: автор сам указывает на стр. 6, что использовал метод БЭТ для определения удельной площади поверхности. Остается загадкой, почему этот же метод не был применен для образцов сорбента с разной экспозицией факторам рабочей среды. Судя по работам ИСЭМ СО РАН, это рутинный метод для решения именно таких задач.

5. На стр. 6 указано, что для определения элементного состава применяли «метод сканирующей микроскопии». Вероятно, речь идет о методе СЭМ. При этом для электронной микроскопии невидны легкие элементы, включая углерод и водород. Соответственно, метод СЭМ непригоден для элементного анализа. Тогда какой метод применяли для элементного анализа? Или какую характеристику определяли методом СЭМ? Действительно ли применялся именно метод СЭМ?

6. На стр. 6 указано, что метод масс-спектрометрии *исследовали* для определения «элементарного состава газа» на выходе из реактора. Не вполне понятно, как соотносятся «элементный состав» в п. 2 перечня экспериментальных методов исследования с «элементарным составом» в п. 3 этого же перечня. В принципе, метод МС применим для элементного анализа, хотя и с некоторыми оговорками, в данном случае несущественными. Вероятно, в тексте автор имел в виду *элементный* состав. Если так, то вызывает некоторое недоумение, что его лишь *исследовали*, а не *применяли*. Хотелось бы узнать, какого рода сомнения возникли у автора работы в отношении применимости метода МС для элементного анализа газов. Интригует и то, зачем автору

7. По тексту автореферата не расшифрованы обозначения некоторых величин, использованных в формулах и на рисунках, но почему-то расшифрованы другие – не использованные. Это выглядит достаточно необычно и, безусловно, привлекает внимание к данной диссертационной работе.

Не смотря на сделанные замечания, необходимо отметить, что работа выполнена достаточно профессионально и тщательно. Заметен личный вклад автора в полученные результаты, построены математические модели, предлагающие качественное воспроизведение расчетными результатами экспериментальных данных. Представленная работа представляет собой завершенное квалификационное исследование и соответствует заявленной специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника по техническим наукам, а также требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ. Ее автор, Ю.А. Каграманов, бесспорно, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата технических наук.

Кейко Александр Владимирович, доктор технических наук, главный научный сотрудник, ФГБУН Институт энергетических исследований Российской академии наук, Отдел №1. Почтовый адрес: 117186 г. Москва, ул. Нагорная, д. 31, корп. 2.

Доктор технических наук,
главный научный сотрудник ИНЭИ РАН

Кейко Александр Владимирович

06 марта 2025 года

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт энергетических исследований Российской академии наук
117186, г. Москва, ул. Нагорная, д.31, корп.2
Телефон: + 7 (499) 127-46-64
Адрес электронной почты: info@eriras.ru

«Подпись А.В. Кейко заверяю»

Ученый секретарь ИНЭИ РАН, к.э.н.

«16» марта 2025 г.

/ Т. В. Новикова

Я, Кейко Александр Владимирович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Каграманова Юрия Александровича, и их дальнейшую обработку.