

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА

Д 212.204.03 на базе Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета
от «29» июня 2017 года, протокол № 4

О присуждении Митричеву Ивану Игоревичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата технических наук.

Диссертация «Моделирование и оптимизация каталитических процессов окисления СО с использованием детальных кинетических механизмов реакций» в виде рукописи по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий, технические науки, принята к защите «27» апреля 2017 года, протокол № 3, диссертационным советом Д 212.204.03 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» Министерства образования и науки Российской Федерации (125047, Москва, Миусская площадь, 9, приказ о создании диссертационного совета от «15» октября 2014 года № 574/нк).

Соискатель **Митричев Иван Игоревич**, «16» апреля 1991 года рождения, в 2012 году окончил, а с «22» октября 2012 года по «22» октября 2016 года обучался в аспирантуре Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации. Работает в должности ведущего программиста кафедры информационных компьютерных технологий Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации с 2013 года по настоящее время.

Диссертационная работа выполнена на кафедре информационных компьютерных технологий Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научный руководитель кандидат технических наук, доцент Женса Андрей Вячеславович, гражданин Российской Федерации, доцент кафедры информационных компьютерных технологий Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева Министерства образования и науки Российской Федерации.

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор Холоднов Владислав Алексеевич, гражданин Российской Федерации, профессор кафедры системного анализа и информационных технологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)» Министерства образования и науки Российской Федерации, Санкт-Петербург;

доктор технических наук, профессор Лабутин Александр Николаевич, гражданин Российской Федерации, заведующий кафедрой технической кибернетики и автоматике Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет» Министерства образования и науки Российской Федерации, Иваново, дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт катализа имени Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук, Новосибирск, в своем **положительном заключении**, подписанном заместителем директора по научной работе, заведующим лабораторией исследования наноструктурированных катализаторов и сорбентов, кандидатом химических наук, доцентом Ведягиным Алексеем Анатольевичем, и ученым секретарем, доктором химических наук, профессором Российской академии наук Козловым Денисом Владимировичем,

утвержденном директором, академиком Российской академии наук Бухтияровым Валерием Ивановичем, указала, что диссертация является законченной научно-квалификационной работой, заслуживает высокой оценки и соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», а ее автор Митричев Иван Игоревич заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий (отзыв заслушан и утвержден на расширенном семинаре лаборатории исследования наноструктурированных катализаторов и сорбентов «5» мая 2017 года, протокол №8).

Соискатель имеет **23** опубликованных работы, все по теме диссертации, общим объемом 88 страниц, в том числе 7 – в научных журналах, включенных в перечень рецензируемых научных изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций. Публикации выполнены в соавторстве с научным руководителем и другими авторами на русском и английском языках. Личный вклад соискателя (от 70 до 90 %) состоит в анализе литературы, разработке математических моделей и компьютерных программ для проведения вычислительных экспериментов, проведении вычислительных экспериментов, обработке результатов, написании публикаций. Соискателем опубликованы 12 работ в материалах всероссийских и международных конференций и конгрессов, получено 2 авторских свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ. Монографий, депонированных рукописей не имеет.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Митричев И.И., Женса А.В., Кольцова Э.М. Термодинамические критерии оценки кинетических параметров каталитических реакций // Журнал физической химии. 2017. Т. 91. № 1. С. 49-57.

2. Митричев И.И., Варданян А.Э., Женса А.В., Кольцова Э.М. Оптимизация макроструктуры высокопористого ячеистого катализатора для взаимной детоксикации NO и CO // Химическая промышленность сегодня. 2016. № 7. С. 8-14.

3. Митричев И.И., Женса А.В., Василенко В.А., Кольцова Э.М. Роль поверхности диоксида церия в процессе окисления CO на CuO–CeO₂ катализаторе: вычислительное исследование // Современные наукоемкие технологии. 2016. № 6, ч.1. С. 55-59.

На автореферат диссертации поступило **9** отзывов, **все положительные**. Отзывы поступили от доктора технических наук, профессора Ахмадиева Ф.Г., заведующего кафедрой «Прикладная математика» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский государственный архитектурно-строительный университет»; доктора химических наук, профессора Дьячкова П.Н., ведущего научного сотрудника лаборатории квантовой химии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей и неорганической химии имени Н.С. Курнакова Российской академии наук; доктора химических наук, профессора Захарова В.П., проректора по научной работе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет»; доктора технических наук, доцента Хаустова И.А., заведующего кафедрой информационных и управляющих систем Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Воронежский государственный университет инженерных технологий», и доктора технических наук, профессора Тихомирова С.Г., профессора той же кафедры; доктора технических наук, профессора Хасанова О.Л., заведующего кафедрой наноматериалов и нанотехнологий, директора Научно-образовательного инновационного центра «Наноматериалы и нанотехнологии» Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет»; доктора физико-математических наук, профессора Урманчеева С.Ф., главного научного сотрудника лаборатории «Механика многофазных систем» Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института механики имени Р.Р. Мавлютова Уфимского научного центра Российской академии наук; доктора технических наук, доцента Рухова А.В., заведующего кафедрой «Химия и химические технологии» Федерального

государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тамбовский государственный технический университет»; кандидата технических наук Зубова Д.В., доцента кафедры «Аппаратурное оформление и автоматизация технологических производств» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский политехнический университет»; кандидата физико-математических наук Семендяевой Н.Л., научного сотрудника кафедры вычислительных методов Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова». В отзывах указывается, что представляемая работа отличается высоким теоретическим уровнем, работа имеет большое научное и практическое значение и по своей новизне и актуальности соответствует требованиям Высшей аттестационной комиссии.

В отзывах содержатся следующие замечания: отсутствует явная математическая постановка задач оптимизации; не отмечено, кем введен критерий термодинамической непротиворечивости; неясно, как были выбраны интермедиаты для катализатора CuO-CeO_2 ; неясно, как определено, что на рис. 1 изображен переходный режим течения; с чем связан S-образный характер зависимости интенсивности турбулентности от скорости газа и числа Рейнольдса (рис. 3); не указан экономический эффект, стоимость эксплуатации конструкции реактора; техническая задача разработки системы автоматического регулирования – получения оптимальных настроек ПИ-регуляторов, не является предметом исследований без предъявления особых требований к системе регулирования, однако выносится на защиту, но ее обзору посвящен один абзац; конкретные результаты от сокращения детальных кинетических механизмов не приведены; описание высокопористого ячеистого материала методами механики многофазных сред позволило бы корректно оценить все межфазные взаимодействия и могло бы дать дополнительную информацию; критерий термодинамической непротиворечивости требует некоторых пояснений или ссылок; чем обосновано применение внесистемных единиц измерения числа пор на единицу длины; неясно, в чем заключается новизна математической модели стационарного течения и реакций (стр. 7); непонятно, как согласуются переменные с разной размерностью в целевой функции (стр. 8); не обосновано допущение об изотермическом режиме протекания процесса при оценке кинетических параметров; нет ни одной строгой постановки задачи оптимизации, и нельзя оценить их корректность; в литературном обзоре не упомянуты работы российских авторов; в математической модели не указаны другие допущения, помимо изотермичности и представления реактора как последовательности ячеек идеального смешения; неясно, каков был критерий поиска оптимальных настроек ПИ-регуляторов; упомянута аналогия высокопористых ячеистых носителей катализаторов с диффузор-конфузорными аппаратами, но эта аналогия не пояснена.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации определен соответствием тематики работы соискателя областям их научных интересов и направлениям деятельности, что подтверждается большим числом научных публикаций. Высокая квалификация в области процессов и аппаратов химической технологии, моделирования и оптимизации каталитических процессов позволяет им оценить научную и практическую значимость диссертационной работы.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана новая процедура идентификации параметров детальных кинетических механизмов каталитических реакций с применением термодинамического согласования кинетических параметров элементарных стадий;

установлены зависимости режима течения от числа Рейнольдса для высокопористых ячеистых носителей катализаторов с различной порозностью и числом пор на дюйм; влияние структуры высокопористых ячеистых носителей на конверсию CO и NO на Pt катализаторе; оптимальная макроструктура высокопористых ячеистых носителей для процесса одновременного окисления CO и восстановления NO на Pt катализаторе при различных технологических ограничениях (перепад давления на носителе, нагрузка смеси на катализатор); маршруты протекания реакции селективного окисления CO

на катализаторе CuO-CeO_2 ;

созданы термодинамически непротиворечивые детальные кинетические модели для процесса одновременного окисления CO и восстановления NO на Pt катализаторе и процесса селективного окисления CO на катализаторе CuO-CeO_2 ;

предложена масштабируемая конструкция реактора селективного окисления CO с высокопористым ячеистым носителем CuO-CeO_2 катализатора, которую можно использовать в топливных процессорах.

Теоретическая значимость исследований обоснована тем, что:

изложена методика оценки кинетических параметров детальных механизмов каталитических реакций, которая позволяет сократить область решений обратной кинетической задачи при использовании критерия термодинамической непротиворечивости, ограничений на значения параметров и теплоемкости интермедиатов;

объяснен механизм реакции селективного окисления CO на катализаторе CuO-CeO_2 , включающий конкурирующую адсорбцию CO и H_2 и перенос кислорода через поверхность диоксида церия, который позволил отразить изменение лимитирующей стадии процесса с ростом температуры;

применительно к тематике диссертации результативно использованы методы математического моделирования, механики сплошных сред, кинетики, равновесной и неравновесной термодинамики;

изучено влияние гидродинамических режимов на каталитический процесс одновременного окисления CO и восстановления NO на Pt , нанесенной на высокопористый ячеистый носитель.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработан программный комплекс (языки программирования C++ , shell, свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ № 2012660475, № 2016618809), который можно использовать для получения детальных кинетических моделей, отражающих физико-химическую сущность протекающих на катализаторе явлений, для широкого ряда процессов, протекающих с участием твердого катализатора, а также реагентов и продуктов в газовой фазе;

определены оптимальные значения порозности и числа пор на дюйм высокопористых ячеистых носителей для повышения конверсии NO и CO на катализаторе Pt при заданных 1) величине нагрузки смеси, 2) перепаде давления на носителе, 3) длине носителя; оптимальный диапазон содержания меди для катализатора CuO-CeO_2 , приготовленного методом соосаждения, для достижения максимальной селективности при селективном окислении CO (от 5,5 до 6,5 масс. %);

созданы кинетические модели, согласующиеся с термодинамикой процесса: 1) процесса одновременного окисления CO и восстановления NO на Pt , модель применима для расчета конверсии NO и CO при различном их соотношении, 2) процесса селективного окисления CO на CuO-CeO_2 катализаторе, модель применима для моделирования и оптимизации реакторов при содержании Cu в катализаторе до 9 масс. %;

разработана конструкция реактора селективного окисления CO с высокопористым ячеистым носителем катализатора для снижения концентрации CO с уровня 1% до 10 ppm с селективностью 60,3 % в водородсодержащей смеси, поступающей на топливный элемент мощностью 20 кВт.

Результаты работы могут быть рекомендованы для изучения и внедрения в научных и образовательных организациях, а также производителям и разработчикам систем автономного электроснабжения и автомобилей, работающих на водородном топливе (Инженерно-технический центр «Водородные технологии»), компаниям, занимающимся очисткой отходящих газов с применением высокопористых ячеистых катализаторов (Акционерное общество «ЭКАТ»).

Оценка достоверности результатов выявила:

– достоверность полученных результатов подтверждается корректным применением методов математического моделирования, оптимизации, параллельного программирования, использованием детальных математических моделей кинетики, гидродинамики, и сопоставлением результатов вычислительных экспериментов на моделях с данными экспериментальных исследований;

– полученные результаты обоснованы, выводы следуют из анализа результатов и не противоречат современным представлениям теории гидродинамики, катализа, химических процессов и реакторов;

– использовано современное, прошедшее верификацию и валидацию, программное обеспечение для моделирования гидродинамики, процессов переноса, химических реакций (FLUENT, Cantera).

Личный вклад соискателя состоит в участии на всех этапах выполнения диссертации: в анализе литературы, постановке задач, в разработке программного комплекса для оценки кинетических параметров и анализа детальных моделей кинетики каталитических реакций, процедуры идентификации кинетических параметров в этих моделях, в проведении вычислительных экспериментов по оценке кинетических параметров в детальных механизмах реакций, по моделированию гидродинамических и каталитических процессов, по оптимизации параметров каталитических реакторов, в интерпретации результатов, в подготовке публикаций по теме работы.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана исследования, непротиворечивой методологической платформы, концептуальности и взаимосвязи выводов. По своему содержанию диссертация отвечает паспорту специальности 05.17.08 – «Процессы и аппараты химических технологий» в части «совершенствование аппаратного оформления технологических процессов с позиций энерго- и ресурсосбережения», «способы, приемы и методология исследования гидродинамики движения газов», «методы изучения химических процессов и аппаратов», «методы изучения и создания ресурсо- и энергосберегающих процессов и аппаратов в химической и смежных отраслях промышленности, обеспечивающие минимизацию газовых выбросов», а также с учетом того, что математическое описание изучаемых процессов «базируется на физических и химических явлениях (перенос энергии и массы, химические превращения, катализ), физической химии (в наибольшей мере – термодинамике)».

Диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация представляет собой самостоятельно выполненную завершенную научно-квалификационную работу, где решена научная задача создания многомасштабных детальных кинетических моделей каталитических процессов с использованием термодинамических критериев, что важно для химической технологии, предложена совокупность новых научно-обоснованных технологических решений в отношении разработки конструкции реактора селективного окисления СО в водородсодержащей смеси, а также выбора структуры высокопористого ячеистого носителя катализатора для минимизации выбросов NO и СО в отходящих газах при различных технологических ограничениях, что имеет важное значение для развития экономики страны.

По актуальности, новизне, практической значимости диссертация соответствует требованиям, установленным «Положением о присуждении ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842 (с изменениями и дополнениями), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук.

На заседании «29» июня 2017 года, протокол № 4, диссертационный совет **принял решение присудить Митричеву Ивану Игоревичу ученую степень кандидата технических наук по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий.**

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 7 докторов наук по специальности и отрасли наук рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, **проголосовали: за присуждение учёной степени – 16**, против присуждения учёной степени – **нет**, **недействительных бюллетеней – нет.**

Председатель диссертационного совета

М. Б. Глебов

Ученый секретарь заседания
диссертационного совета

Е. В. Писаренко

