

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Митричева Ивана Игоревича на тему  
**«Моделирование и оптимизация каталитических процессов окисления СО  
с использованием детальных кинетических механизмов реакций»**,

представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук  
по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий

Диссертационная работа Митричева Ивана Игоревича посвящена проблеме оптимизации каталитических реакторов селективного окисления СО, решаемой путем создания детальных кинетических моделей каталитических процессов с использованием математических моделей гидродинамики.

В работе рассмотрены две важнейшие реакции экологического катализа: реакция между NO и СО (катализатор Pt), значимая для защиты окружающей среды, и селективное окисление СО (катализатор CuO-CeO<sub>2</sub>), которое является многообещающей технологией удаления нежелательной примеси СО из газа, поступающего на топливные элементы с протонно-обменной мембраной.

Разработка детальных кинетических моделей данных процессов осложняется большим числом неизвестных кинетических параметров элементарных стадий реакций. В работе изложена методология оценки кинетических параметров и анализа детальных кинетических моделей, для реализации которой диссертантом разработано соответствующее программное обеспечение. Для определения параметров в работе используется критерий согласованности значений кинетических параметров и термодинамических величин, таких как энтропия и энтальпия реакции, стандартная теплоемкость для различных частиц. Для ускорения решения обратной кинетической задачи диссертант применяет методы многопоточного программирования. В итоге применения методологии диссертант получает детальные и сокращенные кинетические модели гетерогенно-каталитических реакций, определяет лимитирующие стадии реакций, находит доверительные интервалы для оценок

кинетических параметров. К ключевым элементам новизны работы следует отнести объяснение механизма протекания селективного окисления монооксида углерода на катализаторе  $\text{CuO-CeO}_2$  с применением разработанной методологии.

На основе полученных детальных кинетических моделей в работе проводится оптимизация параметров каталитических реакторов с использованием в качестве носителей катализаторов высокопористых ячеистых материалов (ВПЯМ). Исследуется характер течения в слое ВПЯМ-носителя катализатора и влияние турбулентного перемешивания на конверсию. Для реакции между  $\text{NO}$  и  $\text{CO}$  показано, какая структура ВПЯМ оптимальна при заданной нагрузке смеси, заданном перепаде давления смеси в реакторе, заданной длине ВПЯМ с катализатором. Разрабатывается новая конструкция реактора селективного окисления монооксида углерода на ВПЯМ с  $\text{CuO-CeO}_2$  катализатором. Таким образом, в работе решены научно-технические, технологические задачи, имеющие значение для химической промышленности и катализа.

Имеется следующее замечание по работе: в автореферате указано, что причины увеличения интенсивности турбулентности с уменьшением порозности объясняются по аналогии с диффузор-конфузорными аппаратами, однако эта аналогия не пояснена. Данное замечание никак не влияет на общую положительную оценку работы.

По теме диссертации опубликован ряд работ в рецензируемых научных изданиях, в том числе 7 работ в журналах, рекомендуемых ВАК. Работа выполнена на высоком научном уровне, обладает новизной и практической значимостью. Большой объем работы позволил привести подробную аргументацию полученных выводов и результатов. Работа соответствует критериям, которым должны отвечать диссертации на соискание ученой степени кандидата наук согласно «Положению о присуждении ученых степеней», утвержденному постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 "О порядке присуждения ученых степеней".

Считаю, что Митричев Иван Игоревич заслуживает присуждения ученой степени «кандидат технических наук» по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий.

к. ф.-м. н., научный сотрудник  
Семендяева Наталья Леонидовна

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,  
факультет вычислительной математики и кибернетики  
Почтовый адрес: 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д. 1, стр. 52,  
факультет ВМК  
E-Mail: [NatalyS@cs.msu.ru](mailto:NatalyS@cs.msu.ru)  
Тел.: 8(495) 939-40-79

Подпись Семендяевой Н.Л. заверяю.

Декан факультета ВМК МГУ, академик РАН,  
доктор физико-математических наук, профессор  
Моисеев Евгений Иванович



nl  
19.06.17.