

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну
роботу **Рижої Ірини Андріївни**

«Математичне моделювання процесів оксидації чадного газу на
неоднорідних каталізаторах», подану на
здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за
спеціальністю 01.05.02 - математичне моделювання та
обчислювальні методи

Актуальність теми дисертації. На даний час відомо ряд моделей оксидації чадного газу на поверхні платинового каталізатора, які враховують основні механізми адсорбції молекул на металеву поверхню, реакції окислення та десорбції вуглекислого газу. Проте ці моделі та їх удосконалення не дозволили описати і пояснити ряд експериментально спостережуваних явищ, характерних для реакційно-дифузійних процесів, зокрема появу тонкої структури. Виникла потреба більш повно оцінити і дослідити вплив, у їх взаємодії, сукупності інших факторів на процес оксидації, зокрема: наноструктури поверхні, дифузії у різних напрямках, теплопровідності та зміни температури підкладки, випадковий характер структурування адсорбованих молекул.

Саме тому дисертаційна робота Рижої І.А., в якій запропоновано нову нелінійну двовимірну математичну модель оксидації чадного газу та досліджено вплив ряду факторів на перебіг реакційно-дифузійних процесів, є актуальною і важливою для розвитку математичного моделювання та обчислювальних методів.

Дисертаційна робота Рижої І.А. виконувалась в рамках науково-дослідних робіт Інституту прикладної математики і фундаментальних наук Національного університету "Львівська політехніка": "Моделі квантово-статистичного опису каталітичних процесів на металевих підкладах" (номер державної реєстрації 01107U001091, 2012-2013 р.); "Побудова і дослідження методів розв'язування задач прикладної математики та інформатики" (номер державної реєстрації 0113U005296, 2013-2017 р.).

Тема дисертаційної роботи відповідає закону України «Перелік

пріоритетних тематичних напрямів наукових досліджень і науково-технічних розробок на період до 2020 року» та пунктам «Найважливіші фундаментальні проблеми фізико-математичних і технічних наук» і «Створення та застосування нанотехнологій і технологій наноматеріалів» постанови «Про затвердження переліку пріоритетних тематичних напрямів наукових досліджень і науково-технічних розробок на період до 2020 року».

Структура та зміст дисертації. Робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел із 97 найменувань та додатків.

У **вступі** до дисертації зосереджено увагу на обґрунтуванні актуальності теми роботи, задачах та методах досліджень, науковій новизні та практичній цінності результатів. Наведено дані про особистий внесок здобувача в отриманні наукових результатів, кількість опублікованих дисертантом праць.

У **першому розділі** здійснено аналіз існуючих підходів до опису реакційно-дифузійних процесів окислення монооксиду вуглецю на поверхні металевого каталізатора. Побудовано та обґрунтовано математичну модель, що враховує механізми адсорбції, реакції, десорбції, дифузії, що впливають на процес каталітичного окислення чадного газу. Це дало можливість розробити континуальну модель реакційно-дифузійних процесів для механізму Ленгмюра-Гіншелвуда окислення чадного газу на платиновій поверхні, яка враховує двовимірність каталітичної поверхні, а також скінченність швидкості десорбції продукту реакції.

У **другому розділі** дисертаційної роботи розглянуто модель реакції каталітичного окислення монооксиду вуглецю в залежності від значень парціальних тисків, коефіцієнтів налипання, коефіцієнтів, що характеризують швидкості реакції і десорбції, коефіцієнтів дифузії у напрямках на поверхні. Проведено дослідження області стійкості за Ляпуновим стаціонарного розв'язку системи математичної моделі для випадку миттєвої десорбції вуглекислого газу. Проаналізовано впливи параметрів моделі на область коливного характеру реакції.

Третій розділ присвячений числовому аналізу моделі для різних варіантів її параметрів. Дослідження проведено для моделі окислення чадного газу з миттєвою швидкістю десорбції продукту реакції, а також

зі скінченою швидкістю десорбції. В обох випадках отримано просторово-часові періодичні коливання поверхневих покриттів чадного газу і кисню. Встановлено, що скінченність швидкості десорбції вуглекислого газу незначно впливає, як на область стійкості реакції, так і на характер коливної поведінки. Це стало можливим з удосконаленим автором програмним забезпеченням для числового розв'язування відповідних початково-крайових задач з візуалізацією результатів розрахунків для аналізу реакційно-дифузійних процесів.

У **четвертому** розділі розвинуто математичні моделі реакції-дифузії при врахуванні зміни температури каталізатора та з урахуванням неоднорідності поверхні. При цьому було виявлено, що врахування теплопровідності для зміни температури каталізатора незначно впливає на динаміку реакції. Зате структурні неоднорідності поверхні каталізатора суттєво впливають на проходження реакції і описують підтвержені експериментально ефекти, що не вдавалося раніше з використанням інших моделей.

У **додатках** подано тексти створених автором комп'ютерних програм, що використовувалися для розрахунків, та довідки про використання результатів дисертаційного дослідження.

Достовірність одержаних результатів, обґрунтованість наукових положень, висновків і рекомендацій визначається відповідністю їх сучасним теоретичним уявленням про адсорбцію молекул кисню та монооксиду вуглецю наноструктурованою поверхнею платинового каталізатора, відповідністю прийнятим при моделюванні механізмів реакції-дифузії експериментальним дослідженням, застосуванням перевірених методів моделювання, зокрема методу нерівноважного статистичного оператора Д. Зубарева.

При розв'язанні нелінійних початково-крайових задач автор спирається на обґрунтовані методи математичної фізики та числові методи досліджень, що знайшло втілення у створенні відповідного програмного забезпечення.

Про обґрунтованість та достовірність отриманих результатів також свідчить їх опублікування у рецензованих спеціалізованих виданнях та апробація їх на наукових конференціях, симпозіумах та семінарах.

Новизна отриманих результатів. У дисертаційній роботі розв'язано актуальне наукове завдання математичного моделювання та дослідження реакційно-дифузійних процесів каталітичної оксидації чадного газу на наноструктурованих платинових каталізаторах.

При цьому побудовано нову математичну модель, що враховує особливості протікання хімічних реакцій типу окислення на поверхні платинового каталізатора. Досліджено області стійкості стаціонарних розв'язків системи кінетичних рівнянь оксидації чадного газу на наноструктурованій плоскій поверхні платинового каталізатора при різних значеннях параметрів моделі. Вперше побудовано взаємозв'язану математичну модель адсорбції, десорбції, дифузії та теплопровідності, що дозволило оцінити вплив зміни температури на проходження процесу оксидації.

Зміст дисертації належним чином відображає мету роботи та основні поставлені задачі для досягнення мети.

Практична цінність одержаних результатів полягає в отриманні математичної моделі процесів реакції-дифузії на поверхні металевих каталізаторів, що дало можливість розробити комплекс програм для числового розв'язання отриманої системи нелінійних диференціальних рівнянь призначених для кількісного і якісного аналізу процесу окислення монооксиду вуглецю і утворення діоксиду вуглецю. Двовимірною моделлю реакційно-дифузійних процесів на поверхні металевих каталізаторів, рекомендації щодо проектування структури каталізатора використані при розробці нових технологій, що підтверджено актом про використання результатів роботи у додатках до дисертації:

Частина теоретичних та прикладних результатів, отриманих у роботі, використана у навчальному процесі в Національному університеті Львівська політехніка.

Повнота викладу наукових положень, висновків, рекомендацій в опублікованих працях. Результати дисертаційної роботи відображені у 18 наукових працях, серед яких 6 статей у фахових виданнях з технічних наук, зокрема 3 з них в журналах, що індексуються у наукометричній базі даних SCOPUS, 2 у журналі, що індексується у наукометричній базі даних Index Copernicus, 12 - матеріали конференцій.

Відповідність автореферату змісту дисертації. Викладені в авторефераті актуальність теми, мета і задачі дослідження, наукова новизна одержаних результатів та їхня практична цінність, особистий внесок дисертанта, короткий зміст розділів повністю відповідають змісту дисертації. Автореферат оформлений згідно з вимогами МОН України.

Відповідність дисертації встановленим вимогам. Дисертація Рижої І.А. відповідає діючим вимогам МОН України щодо оформлення дисертаційних робіт. Робота написана грамотно, хорошою літературною мовою, викладення лаконічні, чіткі і достатні для повного розуміння. Однак є деякі помилки і неузгодженості. Кількість їх незначна, і вони не впливають на правильне розуміння тексту дисертації.

Відповідність дисертації паспорту спеціальності. Подана до захисту дисертаційна робота Рижої І.А. відповідає паспорту спеціальності 01.05.02 - математичне моделювання та обчислювальні методи (технічні науки), а саме напрямком "Розроблення або розвиток теорії математичного моделювання реальних явищ, об'єктів, систем чи процесів як сукупності формалізованих дій (операцій) для складання ефективних математичних описів досліджуваних об'єктів."

По суті дисертаційної роботи можна зробити такі **зауваження**.

1. При розгляді моделі окиснення монооксиду вуглецю на кристаліті, який перебудовується в процесі реакції, дисертант не враховує можливість залежності коефіцієнта дифузії від координат, що, може виявитися суттєвим в процесі окислення. При цьому числовий аналіз задачі не дуже ускладниться. На жаль, у дисертаційній роботі не наведено міркувань щодо можливості нехтування залежністю від координат коефіцієнта дифузії.

2. Рівняння еволюції для W , що позначає частку поверхні неперебудованої структури, не містить складових пов'язаних з градієнтами розподілу адсорбованих молекул монооксиду вуглецю. У роботі не наведено аргументів щодо можливості нехтування у рівнянні відповідними дифузійними доданками.

3. Твердження дисертанта, що запропонована математична модель (2.37) відноситься до класу жорстких систем диференціальних рівнянь, також не обґрунтовується.

Зроблені зауваження не мають істотного впливу на загальне позитивне оцінювання роботи.

ВИСНОВОК. Дисертаційна робота Рижої І.А. «Математичне моделювання процесів оксидації чадного газу на неоднорідних каталізаторах» є завершеним науковим дослідженням, в якому отримано нові наукові результати, що дозволяють вирішити актуальне науково-прикладне завдання моделювання реакційно-дифузійних процесів на поверхні металевих каталізаторів з врахуванням впливу її наноструктури.

Робота відповідає вимогам, які висуваються до кандидатських дисертацій, зокрема, п. 9,11, 12-14 "Порядку присудження наукових ступенів", затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24.03.2013 № 567 щодо кандидатських дисертацій, а її автор Рижа Ірина Андріївна заслуговує присвоєння їй наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 - математичне моделювання та обчислювальні методи.

Офіційний опонент,
завідувач кафедри транспортних технологій
Дніпровського національного
університету залізничного транспорту
імені академіка В.Лазаряна МОН України,
доктор технічних наук, професор



Гера Б.В.

Підпис Гери Б.В. засвідчую

Директор
Дніпровського національного університету залізничного транспорту імені академіка В.Лазаряна МОН України
(Ботширєвич)

