

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Шостака Никиты Андреевича «Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур», представленную на соискание учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Основной акцент в диссертационной работе Н.А. Шостака сделан на разработке физико-математических моделей, обеспечивающих единое и согласованное описание процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур и позволяющих выполнять расчеты с высокой степенью согласованности с экспериментальными данными в широком диапазоне термобарических условий. До настоящего времени в полной мере не была решена соответствующая задача как в отношении одинарных, так и двойных и тройных гидратов. Достаточно много моделей представлено в мировой научной литературе по синтезу и диссоциации гидратов метана и углекислого газа, но, как правило, каждая из них описывает адекватно один процесс или эффект: синтез, регазификацию, сепарацию, самоконсервацию и др. Классическая теория нуклеации не воспроизводит многоступенчатый характер гидратообразования. Для отрасли нужны программные комплексы на базе моделей, которые бы позволяли выполнять теоретические оценки и прогнозирование в рамках связанных расчетов. В этой связи **тематика диссертационных исследований** является актуальной.

Тема диссертации соответствует приоритетному направлению развития науки, техники и технологий РФ: п. 8 «Энергоэффективность, энергосбережение и ядерная энергетика», направлению Н2 стратегии научно-технического развития России «Переход к экологически чистой и ресурсосберегающей энергетике, повышение эффективности добычи и глубокой переработки углеводородного сырья, формирование новых источников, способов транспортировки и хранения энергии».

Диссертация состоит из введения, 6 глав, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации составляет 283 страницы, в т.ч. 72 рисунка, 50 таблиц. Список использованных источников включает 374 наименования.

Во введении автор сформулировал проблему, на решение которой направлены исследования, и обосновывал целесообразность их проведения с акцентом на применение совокупности экспериментальных и расчетных методов. Обоснована целесообразность применения комплексных методов и подходов. Определены потенциальные преимущества предложенных решений по сравнению с известными аналогами.

В первой главе диссертации выполнен аналитический обзор современных представлений и математических моделей, описывающих процессы образования и диссоциации клатратных гидратов, а также методов расчета их параметров.

Во второй главе представлена разработанная физико-математическая модель образования гидратов и описан метод расчета параметров процесса с учетом термобарических условий применения гидратообразующей системы.

В третьей главе представлены математические модели фазовых состояний гидратообразующих систем и методы расчета их равновесных термобарических параметров. Моделирование выполнено в виде системы функциональных зависимостей, разделяющих области фазовой диаграммы на три термобарических диапазона, ограниченных квадрупольными точками и смежными характерными областями фазовой диаграммы.

В четвертой главе представлена модель распределения компонентов между гидратной фазой и окружающей средой, а также приведены результаты теоретического анализа неравновесных режимов роста гидратов.

В пятой главе представлены модели термобарической диссоциации гидратов. Диссоциация клатратных гидратов рассматривается как обратный фазовый переход, протекающий не мгновенно, а через последовательность стадий разрушения и перестройки кристаллической структуры. Скорость и режим диссоциации определяются совместным действием термодинамической

движущей силы, механической устойчивости каркаса, а также ограничений процессов тепломассопереноса.

В шестой главе приведены результаты обобщения комплекса разработанных физико-математических моделей и показано, что его структура сохраняется при переходе от микроуровня описания к равновесным, кинетическим и механическим характеристикам гидратных систем. Универсальность предложенного аппарата понимается как инвариантность схемы описания при сохранении физической интерпретируемости параметров.

В заключении сформулированы выводы по результатам выполненных исследований.

Научная новизна основных результатов диссертационного исследования заключается в следующем:

1. Разработана совокупность физико-математических моделей и методов расчета характеристик процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур КС-I и КС-II, ориентированных на их описание как каркасных конденсированных систем с упорядоченной структурой и включенной фазой.
2. С применением разработанных физико-математических моделей выполнены параметрические исследования, результаты которых позволили сформулировать гипотезу о псевдосжиженном состоянии поглощенных молекул в полостях гидратной решетки, а также о возможности учета в модели дополнительного вклада молекул воды в баланс заполнения полостей, что уточняет физическую интерпретацию молекулярного механизма гидратообразования. Гипотеза подтверждена на основе анализа результатов диссертационных исследований.
3. Получены обобщенные зависимости и расчетные соотношения, обеспечивающие согласованное описание процесса гидратообразования.
4. Разработана модель распределения компонентов между гидратом и окружающей средой, основанная на положениях неравновесной термодинамики.

5. Предложен физически обоснованный корреляционный подход к описанию термобарических условий гидратообразования.
6. Установлены зависимости равновесных термобарических параметров фазовых состояний системы, отличающиеся широкими диапазонами применимости в пределах исследованных условий и высокой степенью согласованности с экспериментальными данными.
7. Разработаны физико-математические модели процессов термобарической диссоциации целостных и механически разрушенных гидратов, учитывающие метастабильные состояния, а также критерии термодинамической и термомеханической устойчивости гидратной фазы.
8. Получены обобщенные математические зависимости, позволяющие определять механическое состояние гидратов при депрессионном воздействии, а также количество диссоциирующего гидрата при изотермическом, изобарном и комбинированном воздействии с учетом метастабильных состояний.

Практическая значимость основных результатов диссертационного исследования заключается в следующем:

1. Получены 12 патентов РФ на изобретения технических решений автора диссертации для прогнозирования, предупреждения и управления процессами образования и диссоциации гидратов.
2. Полученные результаты легли в основу технологических решений по контролю фазового состояния гидратообразующих смесей.
3. Разработанные теоретические основы процессов образования и диссоциации гидратов используются в производственной деятельности предприятий нефтегазового сектора и Вузов, перечисленных в диссертации и автореферате.
4. Полученные результаты представляют ценность для расширения представлений о физике конденсированного состояния клатратных соединений, поскольку позволяют анализировать устойчивость и кинетику фазовых переходов в каркасных структурах включения.

Сформулированные научные положения диссертационных исследований **обоснованы**. В тексте автореферата и диссертации приведены результаты, иллюстрирующие правомерность сделанных автором заключений.

Достоверность полученных результатов подтверждается внутренней непротиворечивостью разработанного комплекса моделей, согласованностью расчетных результатов с опубликованными экспериментальными данными и их апробацией в прикладных задачах.

Личный вклад автора сформулирован развернуто в автореферате и диссертации. Отмечено, что использование представленных в работе и выносимых на защиту результатов, полученных в ходе совместных исследований, согласовано с соавторами.

Анализ содержания рукописи и автореферата диссертации дает основание для формулирования следующих **замечаний и рекомендаций**:

1. В первой главе перечислены известные теоретические подходы и модели, с применением которых можно рассчитать условия зарождения и диссоциации гидратов различных структур и из разных газов. Целесообразно было обобщить границы их применимости и ключевые недостатки в сравнительной форме в виде таблицы. Для докторских диссертаций важно концентрированно и критически проанализировать задел мировой науки по проблематике.
2. При формулировании моделей автор использует совокупность эмпирических констант из экспериментов, которые получены в определенных условиях и не всегда могут быть перенесены на другие объекты. Целесообразно было обобщить данные по соответствующим эмпирическим константам (на примере диссертации и других известных работ коллег) и с применением методов искусственного интеллекта создать базу для масштабирования и переноса на другие условия. В таком случае можно было закрыть целую отрасль комплексными моделями.
3. При описании физических моделей не хватает схематичных представлений о моделируемых объектах с учетом реальных конфигураций гидратных пластов, порошка, пленок, каркасов и других структур из экспериментов и

испытаний. Такие схемы в мировой литературе имеются. Интересно с ними сравнить модели автора диссертации.

4. При представлении экспериментальных данных для валидации модели важно строго описать доверительные интервалы в опытах, погрешности средств измерений, допущения при постановке задач, параметры расчетных сеток и другие важные аспекты.
5. В технологических условиях гидраты содержат совокупность газов. Смесевые гидраты представляют большой интерес. Особенно интересно сравнить природные и техногенные гидраты с близкими по основным газам составами.
6. Интерес представляет, как в созданных моделях автора учитывается рецикличность использования компонентов и воды при синтезе и регазификации гидратов. Такие процессы являются типичными для природных и техногенных гидратов.
7. Автором диссертации создан мощный расчетный инструмент для нефтегазовой отрасли. Интерес представляет его применение для прогнозирования условий и характеристик синтеза и регазификации гидратов с учетом строгих ограничений по технологическим целевым параметрам. Целесообразно выполнить расчет таких параметров на любом из известных гидратных реакторов (имеются публикации в России, Японии, Китае, Европе, США) по объему с учетом экономики, эксплуатации и энергетики. Понятно, что диссертация автора подготовлена на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, но практические аспекты важно раскрыть на конкретных примерах.
8. Представленные в диссертации модели доступны не всем инженерам-технологам для применения, так как требуется специальная физико-математическая подготовка. По итогу обобщения результатов целесообразно было сформулировать упрощенные инженерные выражения для применения на практике с учетом этапов гидратообразования и диссоциации, а также указать ориентировочную точность прогнозирования при их применении.

Сделанные замечания **не снижают высокой положительной оценки** диссертационной работы и носят в основном рекомендательный характер для развития исследований автора.

Тема диссертации «Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур» соответствует паспорту специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния (пп. № 1, 3, 5, 7).

Содержание автореферата соответствует содержанию рукописи диссертации.

Результаты диссертационного исследования апробированы **на всероссийских и международных научных конференциях и опубликованы в журналах**, рекомендованных ВАК РФ для публикации материалов докторских и кандидатских диссертаций. В частности, по материалам диссертационной работы опубликованы более 60 научных работ: 3 монографии, 28 статей в рецензируемых изданиях, входящих в перечень ВАК при Минобрнауки России, 12 статей в изданиях, индексируемых в международных информационно-аналитических системах научного цитирования Web of Science и Scopus; 12 патентов на изобретения РФ, 1 свидетельство о государственной регистрации базы данных; 12 публикаций в материалах конференций и прочих изданиях.

Заключение

На основании анализа содержания рукописи и автореферата диссертации Н.А. Шостака можно сделать вывод о том, что диссертация является законченной научно-квалификационной работой, в которой приведены результаты решения крупной научно-практической задачи в области прогнозирования характеристик процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур КС-I и КС-II газообразных и жидких гидратообразователей в широком диапазоне термобарических условий. Диссертационная работа «Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур» выполнена в соответствии с требованиями, предъявляемыми ВАК РФ к

докторским диссертациям, а именно пп. 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (в действующей редакции), а ее автор, Шостак Никита Андреевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент, доктор физико-математических наук,
профессор, член-корреспондент РАН,
профессор Научно-образовательного центра И.Н. Бутакова,
заведующий лабораторией тепломассопереноса
Национального исследовательского
Томского политехнического университета
Стрижак Павел Александрович
8 (3822), 701-777, доп. 1910
pavelspa@tpu.ru

Подпись П.А. Стрижака заверяю
Ученый секретарь Национального
исследовательского Томского
политехнического университета,
кандидат геолого-минералогических наук
Новикова Валерия Дмитриевна



Национальный исследовательский Томский политехнический университет
634050, г. Томск, пр. Ленина, д. 30, т. 8 (3822), 701-777, доп. 1910

23.06.2026