

ОТЗЫВ

официального оппонента Гималтдинова Ильяса Кадировича

на диссертационную работу Шостака Никиты Андреевича

«Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур»,
представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 — Физика конденсированного состояния

Актуальность темы диссертационной работы

Диссертационная работа Шостака Н.А. посвящена разработке физико-математического описания процессов образования, роста, метастабильного существования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур. Рассматриваемый круг вопросов находится на пересечении физики конденсированного состояния, термодинамики фазовых переходов, кинетики многофазных систем, тепло- и массопереноса, а также механики разрушения гидратной фазы.

Клатратные гидраты являются упорядоченными каркасными конденсированными системами включения, в которых водный каркас образует кристаллическую структуру, а гостевые молекулы занимают полости различного типа. Физические свойства таких систем определяются не только температурой, давлением и составом, но и структурой кристаллической решетки, степенью заполнения полостей, характером взаимодействия гостевых молекул с водной матрицей, условиями тепло- и массопереноса, а также механическим состоянием гидратного тела.

Актуальность работы обусловлена тем, что существующие модели клатратных гидратов, как правило, описывают отдельные стороны явления: фазовое равновесие, кинетику роста, распределение компонентов, диссоциацию или устойчивость гидратов. При этом до настоящего времени сохраняется потребность в согласованном расчетном аппарате, позволяющем связать микроструктурные параметры гидратной решетки с макроскопическими характеристиками фазовой устойчивости, кинетики, состава гидратной фазы, метастабильности и механического разрушения.

Такая постановка задачи имеет значение как для фундаментального понимания фазовых превращений в каркасных конденсированных системах, так и для анализа природных и технологических газогидратных процессов, включая формирование гидратов в многокомпонентных средах, устойчивость

гидратосодержащих систем, депрессионную и термическую диссоциацию, а также прогнозирование режимов образования и разрушения гидратной фазы. В связи с этим тема диссертационной работы является актуальной и соответствует современному состоянию исследований в области физики клатратных гидратов и многофазных систем.

Общая характеристика диссертационной работы

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка использованных источников. Общий объем работы составляет 283 страницы, включая 72 рисунка и 50 таблиц. Список использованных источников включает 374 наименования. Структура работы логична и отражает переход от анализа состояния проблемы к разработке моделей образования, фазовой устойчивости, распределения компонентов, кинетики роста, диссоциации и механического состояния клатратных гидратов.

Во введении обоснована актуальность темы, сформулированы цель и задачи исследования, представлены научная новизна, теоретическая и практическая значимость, положения, выносимые на защиту, сведения о достоверности, апробации и публикациях.

В первой главе выполнен аналитический обзор современных представлений и расчетных подходов к описанию процессов образования и диссоциации клатратных гидратов. Автором показано, что существующие термодинамические, кинетические, молекулярно-динамические и гибридные модели имеют ограниченные области применимости и не всегда обеспечивают согласованное описание равновесных, неравновесных и метастабильных состояний.

Во второй главе разработана физико-математическая модель образования клатратных гидратов кубических структур КС-I и КС-II. В рамках этой модели процесс образования гидратов рассматривается с позиций энергетического подбора и статистического заполнения полостей водного каркаса. Получены расчетные соотношения для молекулярных, энергетических и структурных параметров гидратной фазы.

В третьей главе предложены модели фазовых состояний индивидуальных и многокомпонентных гидратообразующих систем. Автором выделены термобарические диапазоны фазовой диаграммы, получены зависимости для равновесных параметров образования и диссоциации гидратов, введены псевдокритические и приведенные параметры гидратообразования, учитывающие молярную поляризуемость компонентов.

В четвертой главе разработана модель распределения компонентов между гидратной фазой и окружающей средой с учетом неравновесного характера фазового превращения. Введен параметр неравновесности, характеризующий степень завершенности фазового перехода и позволяющий связать состав гидратной фазы со скоростью гидратообразования, тепловыми потоками и массопереносом.

В пятой главе рассмотрены модели термобарической диссоциации целостных и механически разрушенных гидратов. Диссоциация представлена как неравновесный фазовый переход, сопряженный с теплопереносом, массопереносом, диффузионными ограничениями и механическим состоянием гидратного тела. Особое внимание уделено эффектам самоконсервации, динамической самоконсервации, консервации и различию скоростей диссоциации целостного и разрушенного гидрата.

В шестой главе выполнено обобщение разработанного комплекса моделей и показано, что предложенный аппарат может рассматриваться как единая физико-математическая схема описания образования, устойчивости, роста и диссоциации клатратных гидратов кубических структур.

Научная новизна диссертационной работы заключается в разработке согласованного комплекса физико-математических моделей, в котором клатратные гидраты кубических структур рассматриваются как упорядоченные каркасные конденсированные системы с включенной фазой. В отличие от частных расчетных подходов, работа направлена на объединение структурного, термодинамического, кинетического и механического уровней описания.

К наиболее существенным новым результатам работы следует отнести следующие положения.

Во-первых, разработана модель образования клатратных гидратов газообразных и жидких гидратообразователей, основанная на принципе энергетического подобия с процессом адсорбционного включения молекул в полости водного каркаса. Предложенная интерпретация позволяет связать заполнение полостей, параметры гидратной решетки и энергетические характеристики образования гидратной фазы.

Во-вторых, получены расчетные соотношения для определения молекулярных и энергетических параметров гидратов, характеристических параметров элементарной ячейки структур КС-I и КС-II, температуры образования льдоподобных ассоциатов воды и параметров кинетики при различных режимах тепло- и массообмена.

В-третьих, предложен подход к описанию равновесных термобарических условий образования и диссоциации гидратов индивидуальных и многокомпонентных гидратообразующих систем. Существенным элементом является введение псевдокритических и приведенных параметров гидратообразования, взвешенных по молярной поляризуемости компонентов, что повышает физическую интерпретируемость корреляционного описания.

В-четвертых, разработана модель неравновесного распределения компонентов между гидратной фазой и окружающей средой. Введение параметра неравновесности позволяет описывать изменение состава гидратной фазы при конечной скорости фазового превращения и учитывать влияние кинетических ограничений на распределение компонентов.

В-пятых, разработаны модели термобарической диссоциации целостных и механически разрушенных гидратов с учетом метастабильных состояний. Представляют интерес установленные автором закономерности, согласно которым механическое разрушение гидратной структуры приводит к заметной интенсификации диссоциации; в исследованных условиях скорость диссоциации разрушенного гидрата превышает скорость диссоциации целостного на 30–60 %.

Теоретическая значимость работы состоит в развитии физико-математического аппарата описания клатратных гидратов как каркасных конденсированных систем включения. Разработанный подход связывает параметры структуры, состав гидратной фазы, термобарические условия равновесия, кинетику фазового превращения, метастабильность и механическую устойчивость гидратного тела.

Существенным достоинством диссертации является стремление автора рассматривать образование и диссоциацию гидратов не как независимые процессы, а как взаимосвязанные стадии фазового превращения, в котором участвуют тепловые, массопереносные, структурные и механические факторы. Такой подход представляет интерес для дальнейшего развития моделей гидратообразования в многофазных и пористых средах, в том числе в задачах, связанных с природными газогидратами и технологическими гидратными системами.

Практическая значимость результатов определяется возможностью использования разработанных моделей для расчетного прогнозирования условий образования, устойчивости и диссоциации гидратной фазы в природных, лабораторных и технологических системах. Результаты работы могут применяться при анализе безгидратных режимов, оценке условий

диссоциации, прогнозировании устойчивости гидратных образований, моделировании процессов в многокомпонентных газовых смесях и разработке технологических решений для управления газогидратными процессами.

Практическая значимость подтверждается наличием патентов Российской Федерации, внедрением результатов в производственную деятельность профильных организаций топливно-энергетического комплекса и использованием разработанных подходов в образовательном процессе высших учебных заведений.

Достоверность и обоснованность результатов диссертационной работы обеспечиваются использованием известных положений статистической физики, термодинамики фазовых равновесий, неравновесной термодинамики, тепло- и массопереноса, а также методов механики разрушения. Предложенные автором зависимости сопоставлены с опубликованными экспериментальными и справочными данными по индивидуальным и многокомпонентным гидратообразующим системам.

В работе показана высокая степень согласованности расчетных и экспериментальных данных в исследованных диапазонах условий. В частности, средние расхождения по молекулярным и энергетическим параметрам гидратов составляют единицы процентов, а по равновесным температурам для ряда индивидуальных и многокомпонентных систем находятся на уровне, достаточном для использования разработанных зависимостей в расчетных задачах.

Дополнительным подтверждением достоверности является апробация результатов на научных конференциях, публикация основных положений в рецензируемых изданиях, а также использование результатов в прикладных расчетах и технологических решениях. Автореферат в целом отражает основное содержание диссертационной работы.

Замечания по диссертационной работе

При общей положительной оценке диссертационной работы необходимо отметить следующие замечания и вопросы.

1. В диссертации предложены новые корреляционные зависимости для описания равновесных термобарических условий гидратообразования и введены псевдокритические параметры, взвешенные по молярной поляризуемости компонентов. Вместе с тем, в работе можно было бы подробнее сопоставить данный подход с традиционными правилами смещения и статистико-термодинамическими моделями, чтобы более явно показать область, в которой введение поляризуемости дает наибольший физический и расчетный выигрыш.

2. В разделе, посвященном распределению компонентов между гидратной фазой и окружающей средой, основное внимание уделено расчетной схеме и материальному балансу. При этом полезно было бы шире обсудить предельные случаи: малую глубину превращения, практически равновесное распределение, а также ситуации, в которых один из компонентов преимущественно заполняет только один тип полостей. Такое обсуждение сделало бы физическую интерпретацию модели более наглядной.

3. Гидратная фаза рассматривается как квазихрупкое тело, а предельные состояния анализируются с использованием кругов Мора и подхода Мора-Кулона (Глава 5). Вместе с тем, в дальнейшем развитии модели целесообразно учесть влияние исходной дефектности гидратного образца, скорости депрессионного воздействия и возможной неоднородности напряженного состояния, поскольку эти факторы могут влиять на момент перехода от целостного к разрушенному состоянию гидрата.

Указанные замечания не снижают научной новизны, достоверности и практической значимости диссертационной работы. Они имеют преимущественно уточняющий и рекомендательный характер и могут быть учтены автором при дальнейшем развитии предложенного физико-математического подхода.

Заключение

Диссертационная работа Шостака Никиты Андреевича является законченной научно-квалификационной работой, в которой решена крупная научная задача, состоящая в разработке согласованного комплекса физико-математических моделей образования, роста, метастабильного существования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур.

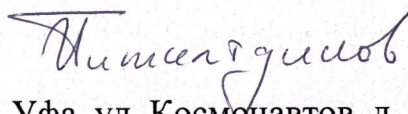
По актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости, достоверности полученных результатов, объему выполненных исследований и полноте публикаций диссертационная работа «Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур» соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, согласно пп.9-14 «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 (01.02.05 – Механика жидкости, газа и плазмы), член-корреспондент АН РБ, профессор,
заведующий кафедрой «Физика»

ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет»
Гималтдинов Ильяс Кадирович

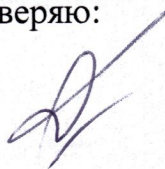


450064, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. Космонавтов, д. 1
тел.: 8-917-346-00-38; e-mail: iljas_g@mail.ru

«02» октября 2026 г.

Подпись И.К. Гималтдинова удостоверяю:

Начальник ОРП



О.А. Дадаян