

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР
**ЯКУТСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ЯНЦ СО РАН)**

ул. Петровского, д. 2, Якутск, 677980 Для телеграмм:
Якутск, НАУКА Факс (4112) 350263, 390525
Телефон (4112) 390500, 390503
E-mail: prezidium@prez.vsn.ru

УТВЕРЖДАЮ
Генеральный директор
ФГБУН ФИЦ «Якутский научный
центр Сибирского отделения
Российской академии наук»,
доктор технических наук,
профессор, академик РАН



10.10.2026 № 297-01-1115/1000

М.П. ЛЕБЕДЕВ

«10» октября 2026 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Федерального исследовательского центра «Якутский научный центр
Сибирского отделения Российской академии наук»; обособленного
подразделения – Института проблем нефти и газа Сибирского отделения
Российской академии наук о диссертационной работе Шостака Никиты
Андреевича «Физико-математическое моделирование процессов образования
и диссоциации клатратных гидратов кубических структур», представленной
на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по
специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Актуальность темы диссертационного исследования

Клатратные гидраты представляют собой особый класс упорядоченных
каркасных конденсированных систем включения, в которых молекулы
«гостя» (гидратообразователя) располагаются в полостях кристаллического
каркаса, построенного из молекул воды. Физические свойства таких систем
зависят от множества факторов: структуры водной матрицы, характеристик
включенных молекул, степени заполнения полостей, а также
термодинамических условий – температуры, давления и состава
гидратообразующей среды. Поэтому изучение жизненного цикла клатратных
гидратов (от зарождения, роста, метастабильного существования до

диссоциации) является важной задачей физики конденсированного состояния, так как эти процессы тесно связаны с фазовыми переходами, устойчивостью кристаллических структур, тепло- и массопереносом, а также механическим состоянием гидратной фазы.

Актуальность диссертационной работы Шостака Н.А. обусловлена тем, что существующие модели клатратных гидратов, несмотря на значительный объем экспериментальных и расчетных данных, как правило, описывают отдельные стороны явления: фазовое равновесие, заполнение полостей, кинетику роста, тепловые эффекты, состав гидратной фазы, диссоциацию или механическое разрушение. При этом отсутствует достаточно согласованное физико-математическое описание, связывающее молекулярно-структурные характеристики гидратной решетки с макроскопическими параметрами фазовой устойчивости, кинетики гидратообразования, термобарической диссоциации и механической устойчивости. Иными словами, актуальность работы продиктована фрагментарностью существующих подходов: существующие модели клатратных гидратов обычно фокусируются на каком-то одном аспекте (например, только на кинетике роста или только на фазовом равновесии). В науке ощущается дефицит комплексного физико-математического описания, которое объединило бы молекулярную структуру решетки с макроскопическими свойствами гидратов.

Научная новизна заключается в создании единой системы (или в постановке задачи построения единого комплекса) моделей для клатратных гидратов кубических структур КС-I и КС-II. Такая постановка позволяет рассматривать гидратообразование не просто как технологическую проблему нефтегазовой отрасли, но и как фундаментальный многоуровневый фазовый переход в каркасной конденсированной системе с включенной фазой. В этой связи тема диссертации является актуальной, работа соответствует современным требованиям к исследованиям в области физики конденсированных систем и фазовых превращений и вносит значимый вклад в развитие математического моделирования сложных многофазных сред.

Общая характеристика работы

Структура диссертации включает введение, шесть глав, заключение, список литературы и приложения. Работа изложена на 283 страницах, содержит 72 рисунка и 50 таблиц. Библиографический список использованных источников включает 374 наименования.

Во введении раскрывается актуальность выбранной проблематики, сформулированы цель и задачи исследования, а также представлены научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы. Там же приведены положения, выносимые на защиту, сведения о достоверности результатов, их апробации и публикациях автора.

В первой главе представлен критический обзор актуальных теоретических и экспериментальных исследований, посвященных процессам образования и диссоциации клатратных гидратов. Проведенный анализ термодинамических, кинетических, молекулярно-динамических и гибридных моделей позволил выявить отсутствие универсального методологического подхода. Автор констатирует, что существующие инструменты ограничены в своей применимости и не обеспечивают комплексного описания гидратов на микро-, мезо- и макроскопическом уровнях.

Во второй главе разработана физико-математическая модель образования клатратных гидратов, базирующаяся на концепции энергетического подобия между формированием гидратных полостей и адсорбционным включением молекул в полости водного каркаса. В работе получены расчетные соотношения для определения ключевых характеристик гидратов: молекулярных и энергетических параметров, гидратного числа, плотности, молярной массы, а также геометрических параметров элементарных ячеек структур типов КС-I и КС-II.

В третьей главе предложены математические модели фазового равновесия для индивидуальных и многокомпонентных гидратообразующих систем. Автором рассмотрена декомпозиция фазовой диаграммы на характерные термобарические диапазоны, выведены зависимости для определения

равновесных условий образования и диссоциации гидратов. Кроме того, введены псевдокритические и приведенные параметры гидратообразования, взвешенные по молярной поляризуемости компонентов системы.

Четвертая глава посвящена разработке модели распределения компонентов между гидратной фазой и окружающей средой, опирающейся на положения неравновесной термодинамики и кинетики фазовых переходов. Введен параметр неравновесности, который характеризует степень реализованности фазового превращения и устанавливает зависимость между составом взаимодействующих фаз, интенсивностью гидратообразования, а также процессами тепло- и массопереноса. Кроме того, проанализированы режимы роста гидратной фазы, лимитируемые тепловыми и диффузионными факторами, и введены соответствующие гидратные безразмерные критерии.

В пятой главе представлены теоретические модели, описывающие термобарическую диссоциацию клатратных гидратов. Процесс диссоциации рассматривается как неравновесный фазовый переход, обусловленный воздействием температуры и давления, состоянием водной фазы, поверхностными диффузионными ограничениями, метастабильностью и механическим состоянием гидратного тела. Рассмотрены режимы диссоциации при постоянной температуре, при постоянном давлении и их комбинировании, а также выявлены различия между диссоциацией целостных и механически разрушенных гидратов.

В шестой главе выполнено обобщение разработанного физико-математического комплекса, подтверждающее его эффективность при согласованном описании механизмов образования, стабильности и диссоциации гидратных систем. Также обоснована практическая значимость теоретических разработок, которые служат основой для создания расчетных методик и технических решений, направленных на прогнозирование, предупреждение и управление процессами образования и диссоциации клатратных гидратов.

Диссертационное исследование оформлено в строгом соответствии с установленными стандартами ВАК. Работа обладает четкой структурой, адекватной целям и задачам исследования. Выводы аргументированы, положения работы внутренне непротиворечивы, а графические материалы обеспечивают необходимую полноту визуализации результатов. Диссертация характеризуется концептуальной целостностью, а все сформулированные в начале работы задачи получили исчерпывающее решение.

В **заключении** сформулированы наиболее важные результаты диссертационной работы.

Новизна научных положений

Научная новизна работы заключается в создании согласованного физико-математического описания клатратных гидратов кубических структур как каркасных конденсированных систем, в котором параметры структуры, заполнения полостей, фазового равновесия, кинетики, диссоциации, метастабильности и механической устойчивости рассматриваются в единой расчетной логике.

1. Впервые разработан согласованный комплекс физико-математических моделей и методов расчета характеристик процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур КС-I и КС-II, ориентированный на их описание как каркасных конденсированных систем с упорядоченной структурой и включенной фазой. Разработанный комплекс позволяет интегрировать микроуровень (энергетические параметры включения молекул, формирования гидратного каркаса и заполнения полостей) и макроуровень описания явления (фазовое равновесие, кинетика, термобарические превращения и механическая устойчивость), обеспечивая последовательную связь молекулярных параметров с закономерностями фазовых переходов.

2. В рамках разработанной физико-математической модели сформулирована и теоретически обоснована гипотеза о псевдосжиженном состоянии молекул-гостей внутри полостей гидратной решетки. Кроме того,

предложен механизм учета в модели дополнительного вклада молекул воды в баланс заполнения полостей, что позволяет уточнить физическую картину молекулярных взаимодействий при гидратообразовании.

3. Получены новые зависимости и расчетные соотношения, обеспечивающие согласованное описание процесса гидратообразования, в т.ч. для определения: молекулярных параметров гидратов с учетом дополнительного вклада молекул воды в баланс заполнения полостей кристаллических решеток; энергетических параметров формирования кристаллических структур; температурных условий образования льдоподобных ассоциатов воды в атмосфере гидратообразователя в зависимости от давления; характеристического геометрического параметра элементарной ячейки кристаллических решеток структур КС-I и КС-II; кинетических параметров при различных режимах тепло- и массообмена. Достоверность модели подтверждена высокой сходимостью с экспериментальными данными: средняя погрешность для молекулярных параметров составила 1,70 %, для энергетических – 1,96 %, а для характеристического размера элементарной ячейки – не более 0,09 %

4. На основе принципов неравновесной термодинамики создана модель распределения компонентов между гидратом и окружающей средой. Впервые введен оригинальный параметр неравновесности, который позволяет количественно оценить степень завершенности фазового превращения и устанавливает связь между скоростью фазового превращения, тепло- и массопереносом, а также составом взаимодействующих фаз.

5. В рамках созданной модели впервые введены псевдокритические и приведенные параметры гидратообразования, взвешенные по молярной поляризуемости компонентов. Это позволило предложить физически обоснованный корреляционный подход к описанию термобарических условий формирования гидратов и распространить принципы закона соответственных состояний для описания гидратных систем.

6. Установлены закономерности изменения температурных диапазонов и математические зависимости равновесных термобарических параметров фазовых состояний системы, отличающиеся широкими диапазонами применимости в пределах исследованных условий и высокой степенью согласованности с экспериментальными данными. По данным верификации среднее отклонение по температуре составило 0,14% для 21 индивидуальной газообразной системы, 0,11% для 9 жидких гидратообразователей в рассмотренных системах, а также 0,11%, 0,19% и 1,1% для бинарных, трехкомпонентных и четырехкомпонентных систем соответственно.

7. Разработаны и теоретически обоснованы физико-математические модели процессов термобарической диссоциации целостных и механически разрушенных гидратов, учитывающие метастабильные состояния, а также критерии термодинамической и термомеханической устойчивости гидратной фазы.

8. На основании разработанных моделей процессов термобарической диссоциации выявлены закономерности и выведены расчетные зависимости, позволяющие определять механическое состояние гидратов при депрессионном воздействии, а также количество диссоциирующего гидрата при изотермическом, изобарном и комбинированном воздействии с учетом метастабильных состояний. Установлено, что в исследованных термобарических условиях скорость диссоциации механически разрушенного гидрата превышает скорость диссоциации целостного гидрата на 30–60%.

Теоретическая и практическая значимость работы

Теоретическая значимость диссертационного исследования состоит в развитии физико-математического инструментария для моделирования фазовых превращений в каркасных конденсированных системах включения. В работе установлены связи между структурными особенностями гидратной решетки, энергетическими параметрами включения молекул, степенью заполнения полостей, термобарическими условиями устойчивости, а также кинетикой фазового превращения и механическим состоянием гидратной фазы.

Предложенный автором подход позволяет интерпретировать клатратные гидраты как многоуровневые самоорганизующиеся конденсированные системы, для которых устойчивость и кинетика превращений определяются не только положением относительно равновесной линии, но и комплексом внутренних структурных, энергетических, транспортных и механических факторов. Данный подход существенно расширяет возможности теоретического анализа гидратных систем по сравнению с описаниями, ограниченными только классической равновесной термодинамикой или эмпирическими корреляциями.

Практическая ценность полученных результатов заключается в возможности применения разработанных моделей для расчетного прогнозирования условий образования, устойчивости и диссоциации гидратной фазы в природных, лабораторных и технологических системах. Выведенные зависимости могут использоваться при оценке безгидратных режимов работы газовых систем, анализе условий образования техногенных гидратов, выборе способов предупреждения и ликвидации гидратных осложнений, а также при изучении процессов добычи газа из природных газогидратных залежей.

Практическая значимость подтверждается наличием патентов Российской Федерации, внедрением результатов в производственную деятельность профильных организаций топливно-энергетического комплекса и использованием разработанных методик в образовательной деятельности высших учебных заведений. Полученные результаты также могут быть полезны при разработке учебных курсов и специальных разделов, связанных с физикой фазовых переходов, математическим моделированием гидратных систем и физикой конденсированных каркасных структур.

Степень обоснованности и достоверности научных положений и выводов, сформулированных в диссертации

Достоверность и обоснованность представленных научных положений и выводов подтверждаются логической целостностью предложенного

комплекса моделей, верификацией полученных численных результатов на основе сопоставления с известными экспериментальными данными, а также успешной практической апробацией разработанных решений. Научная значимость и практическая востребованность работы подтверждаются наличием 7 актов внедрения, представленных в приложениях работы. Высокий индекс цитируемости публикаций автора свидетельствует о признании данных результатов научным сообществом.

Личный вклад автора

Все результаты, представленные в диссертации, получены автором или при непосредственном его участии. Личный вклад Н.А. Шостака является определяющим и состоит в постановке научной проблемы, формулировке цели и задач исследования, разработке физико-математических моделей. Автор самостоятельно выполнил расчеты, провел анализ и интерпретацию выявленных закономерностей, сопоставил расчетные результаты с экспериментальными и литературными данными, сформулировал научные положения, выводы и рекомендации. Основные теоретические результаты получены соискателем лично или при его ведущем участии. Работы, выполненные в соавторстве, использованы в диссертации с указанием соответствующих публикаций и соавторов, т.е. корректно отражены все совместные публикации.

Публикации автора и апробация работы

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 68 научных работах, в том числе в 3 монографиях, 28 статьях в рецензируемых изданиях, входящих в перечень ВАК при Минобрнауки России, в 12 публикациях в изданиях, индексируемых в международных информационно-аналитических системах научного цитирования Web of Science и Scopus. Результаты работы также представлены в 12 патентах на изобретения Российской Федерации, в 1 свидетельстве о государственной регистрации базы данных, а также в 12 материалах конференций различного уровня и прочих изданиях. Таким образом, представленные соискателем ученой

степени материалы диссертации полностью изложены в работах, опубликованных автором в соответствии с требованиями ВАК в отечественных и зарубежных рецензируемых изданиях. Требования к публикациям, предусмотренные пунктами 11 и 13 «Положения о присуждении ученых степеней» соблюдены.

Основные положения диссертационного исследования докладывались и обсуждались на ряде международных и всероссийских научных конференций, симпозиумов и семинаров. Высокий индекс цитируемости публикаций автора свидетельствует о признании данных результатов научным сообществом.

Содержание автореферата в полной мере соответствует диссертации и корректно раскрывает структуру работы, основные научные результаты многолетнего цикла исследований процессов образования и диссоциации клатратных гидратов, положения, выносимые на защиту, научную новизну, достоверность выводов и практическую значимость исследования.

Использование в диссертации заимствованного материала без ссылки на автора и (или) источник заимствования; результатов научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, без ссылок на соавторов (недостоверных сведений) не выявлено. Следовательно, заимствованные материалы других авторов, использованные в диссертации, во всех случаях содержат ссылку на источник и удовлетворяют требования пункта 14 «Положения о присуждении ученых степеней».

Замечания по диссертационной работе

При общей положительной оценке диссертационной работы следует отметить следующие замечания и вопросы рекомендательного характера.

1. В диссертации предложен обширный комплекс физико-математических моделей и расчетных зависимостей. При этом желательно четче разграничить универсальную часть разработанного аппарата, описывающую общие закономерности образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур, и частные специфические

зависимости, параметры которых определяются по экспериментальным или справочным данным для конкретных гидратообразователей.

2. В работе рассматриваются гидратообразователи, находящиеся в различных фазовых и термодинамических состояниях, включая газообразные, жидкие и сверхкритические состояния. Представляется полезным дополнительно акцентировать: какие элементы модели сохраняют инвариантность при переходе между этими состояниями, а какие требуют изменения используемых термодинамических функций и параметров.

3. Введенный автором параметр неравновесности является важным элементом описания распределения компонентов между гидратной и внешней фазами. Вместе с тем отмечаем, что в дальнейшем развитии работы было бы полезно подробнее рассмотреть возможные способы его экспериментальной идентификации.

4. При описании термобарической диссоциации и механического разрушения гидратов в работе использованы механические критерии предельного состояния гидратной фазы. Важно подчеркнуть, что при переходе от модельного гидратного тела к реальным природным и техногенным гидратосодержащим средам необходимо дополнительно учитывать дополнительные факторы: пористость, дисперсность, степень насыщения, морфологию гидратов и свойства вмещающей среды.

5. Некоторые разделы диссертации перегружены расчетными коэффициентами и обозначениями. Для облегчения восприятия материала полезно было бы систематизировать обозначения, составить сводную таблицу или перечень основных параметров и шире использовать графические схемы, иллюстрирующие взаимосвязь структурного, термодинамического, кинетического и механического блоков модели.

Указанные замечания не снижают высокую научную новизну, теоретическую и практическую значимость диссертационной работы, но могут быть учтены автором при дальнейшем развитии предложенного физико-математического аппарата и подготовке последующих публикаций.

Рекомендации по использованию результатов

Разработанные в диссертации зависимости и расчетные методы могут быть использованы при определении равновесных термобарических условий гидратообразования многокомпонентных газов, прогнозировании состава образующейся гидратной фазы, оценке кинетических режимов образования и диссоциации гидратов, а также при выборе безгидратных режимов эксплуатации скважин и наземных газотранспортных систем. Модели термобарической диссоциации могут применяться при расчетном обосновании способов разрушения техногенных гидратных образований и анализе процессов разработки природных газогидратных залежей.

Заключение

Диссертационная работа Шостака Никиты Андреевича «Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур» представляет собой завершенное научно-квалификационное исследование, выполненное на высоком профессиональном уровне. В диссертации успешно решена крупная научная проблема, заключающаяся в разработке согласованного физико-математического аппарата для описания процессов образования, роста, устойчивости, метастабильного существования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур.

Все полученные соискателем результаты обладают научной новизной, имеют теоретическую и практическую значимость, отличаются высокой степенью достоверности и в полной мере опубликованы в рецензируемых научных изданиях. Диссертация написана строгим научным языком, имеет логичную структуру. Автореферат полностью соответствует основному содержанию и структуре диссертации.

Тема и содержание диссертационной работы полностью соответствуют научной специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния по физико-математическим наукам. По паспорту этой специальности

полученные научные результаты диссертации соответствуют пунктам 1, 2, 3, 5 и 7 направлений исследований.

По актуальности, научной новизне, объему выполненных исследований, достоверности результатов, теоретической и практической значимости диссертационная работа соответствует требованиям пунктов 9–14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции), предъявляемым ВАК при Министерстве науки и высшего образования РФ к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук.

Считаем, что совокупность разработанных теоретических положений, физико-математических моделей, установленных закономерностей и методов может быть квалифицирована как научное достижение в области физики конденсированного состояния, состоящее в развитии согласованного описания клатратных гидратов как каркасных конденсированных систем и установлении связей между структурным уровнем их организации и макроскопическими характеристиками фазового равновесия, состава, кинетики, метастабильности и диссоциации, и Шостак Никита Андреевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

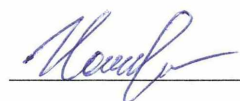
Настоящий отзыв на диссертационную работу Шостака Н.А. обсужден и одобрен на расширенном заседании Ученого совета Института проблем нефти и газа Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного подразделения ФГБУН ФИЦ «Якутский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук».

На заседании присутствовало 24 сотрудника, из них 14 членов Ученого совета, в том числе докторов наук – 7 чел., кандидатов наук – 14 чел. и приглашенные.

По результатам открытого голосования решение принято единогласно: «за» – 14 чел., «против» – нет, «воздержавшихся» – нет (протокол №7 от «09» октября 2026 г.).

Отзыв подготовил:

Главный научный сотрудник лаборатории техногенных газовых гидратов ИПНГ СО РАН, доктор технических наук (01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника), кандидат физико-математических наук (05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ), доцент (Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ)

 Рожин Игорь Иванович

Институт проблем нефти и газа Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федеральный исследовательский центр «Якутский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ИПНГ СО РАН)

Адрес: 677007, Республика Саха (Якутия), г. Якутск, ул. Петровского, д. 2

Тел.: +7 (4112) 39-06-20, e-mail: ipog@ipng.ysn.ru, <https://ipng.ysn.ru/>

Подпись Рожина Игоря Ивановича ЗАВЕРЯЮ:

Начальник отдела управления персоналом,
документации и архива ЯНЦ СО РАН



Е.В. Медвинская

Адрес: 677007, Республика Саха (Якутия), г. Якутск, ул. Петровского, д. 2

Тел.: +7 (4112) 39-05-26, e-mail: prezidium@prez.ysn.ru, <https://prez.ysn.ru/>