



УТВЕРЖДАЮ:

проректор по НИР ФГБОУ ВО
«Кабардино-Балкарский
государственный
университет им. Х.М. Бербекова»

С.Ю. Хаширова

« 18 » 05 2026 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет
им. Х.М. Бербекова»

Диссертационная работа Шостака Никиты Андреевича «Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур» выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова».

Научный консультант – Запорожец Евгений Петрович, доктор технических наук.

В период подготовки диссертации соискатель работал старшим научным сотрудником «Научно-технологического центра микроэлектроники и нанотехнологий» КБГУ.

В 2010 г. Н.А. Шостак с отличием окончил Кубанский государственный технологический университет по специальности «Разработка и эксплуатация нефтяных и газовых месторождений». В 2015 г. в диссертационном совете на базе Кубанского государственного технологического университета защитил диссертацию на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 25.00.17 – разработка и эксплуатация нефтяных и газовых месторождений на тему: «Моделирование образования и диссоциации гидратов при разработке и эксплуатации нефтяных и газовых месторождений».

Диссертация Шостака Н.А. рассмотрена и обсуждена на расширенном заседании научного семинара федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» « 27 » января 2026 г., протокол № 1 .

По итогам обсуждения принято следующее **заключение:**

Диссертационная работа Шостака Н.А. посвящена актуальной проблеме физики конденсированного состояния – разработке согласованного физико-математического описания процессов образования, роста, устойчивости и диссоциации клатратных гидратов кубических структур. Рассматриваемые системы являются каркасными конденсированными структурами с включенной фазой, в которых молекулярные взаимодействия, тепловые и диффузионные

процессы, а также механическая устойчивость определяют макроскопическое фазовое поведение.

Актуальность работы определяется тем, что, несмотря на значительный объем экспериментальных данных по равновесным условиям гидратообразования, отсутствует единое описание, позволяющее последовательно связать молекулярные характеристики гидратообразователей с макроскопическими параметрами фазовой устойчивости, кинетики роста, метастабильности и диссоциации гидратной фазы. Существующие подходы, как правило, описывают отдельные стороны явления и не обеспечивают единого перехода от микроструктурного уровня к расчету реальных термобарических, кинетических и механических характеристик гидратных систем. Практическая значимость такого описания связана с задачами добычи, транспортировки и хранения углеводородного сырья, предупреждения техногенного гидратообразования, управляемой диссоциации гидратов, расчета безгидратных режимов работы технологических систем, а также с анализом природных и технологических многофазных систем. В этом отношении работа имеет одновременно фундаментальную и прикладную направленность.

Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, обеспечивается следующими обстоятельствами:

1. Постановка задачи соответствует современному состоянию исследований в области физики клатратных гидратов, термодинамики конденсированных сред, кинетики фазовых переходов и физики многофазных систем.

2. Разработанный комплекс моделей является внутренне согласованным и связывает молекулярно-структурные параметры гидратной решетки с макроскопическими характеристиками фазового равновесия, кинетики и механической устойчивости.

3. Расчетные результаты сопоставлены с опубликованными экспериментальными данными для индивидуальных газообразных и жидких гидратообразователей, а также для многокомпонентных смесей.

4. Результаты работы апробированы на российских и международных научных конференциях и опубликованы в рецензируемых научных изданиях.

5. Прикладная значимость расчетных методов подтверждена патентами Российской Федерации, внедрением в производственную деятельность профильных организаций и использованием в учебном процессе высших учебных заведений.

Научная новизна работы

В диссертационной работе получены следующие результаты, обладающие признаками научной новизны:

1. 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. Комплекс объединяет микроуровень описания, включающий энергетические параметры включения молекул, формирования

гидратного каркаса и заполнения полостей, и макроуровень, включающий фазовые равновесия, кинетику, термобарические превращения и механическую устойчивость.

2. Разработана физико-математическая модель образования клатратных гидратов газообразных и жидких гидратообразователей, основанная на принципе энергетического подобия и представлении о включении молекул гостевой фазы в формирующиеся полости водного каркаса. В рамках данной модели сформулирована и теоретически обоснована гипотеза о псевдосжиженном состоянии поглощенных молекул в полостях гидратной решетки, а также учтен дополнительный вклад молекул воды в баланс заполнения полостей.

3. Получены новые зависимости и расчетные соотношения для определения молекулярных и энергетических параметров гидратов, характеристического геометрического параметра элементарной ячейки структур КС-I и КС-II, температуры формирования льдоподобных ассоциатов воды в присутствии гидратообразователя, а также параметров кинетики гидратообразования при различных режимах тепло- и массообмена.

4. Разработана модель распределения компонентов между гидратной фазой и окружающей средой, основанная на положениях неравновесной термодинамики и фазовой кинетики. Введен параметр неравновесности, количественно характеризующий степень завершенности фазового превращения и обеспечивающий связь между скоростью гидратообразования, тепловыми потоками, массопереносом и составом взаимодействующих фаз.

5. Введены псевдокритические и приведенные параметры гидратообразования, взвешенные по молярной поляризуемости компонентов. На этой основе предложен физически обоснованный корреляционный подход к описанию термобарических условий гидратообразования, обеспечивающий унифицированное рассмотрение индивидуальных и многокомпонентных гидратных систем и распространение идей закона соответственных состояний на область гидратных систем.

6. Установлены закономерности температурных диапазонов существования фазовых состояний и получены математические зависимости для равновесных термобарических параметров гидратных систем. Верификация разработанных зависимостей выполнена для индивидуальных газообразных и жидких гидратообразователей, а также для многокомпонентных смесей.

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. Математически описаны эффекты самоконсервации и консервации, обусловленные диффузионным ограничением выделения газа через поверхностные слои льда или вновь образующегося гидрата.

8. Получены математические зависимости, позволяющие определять механическое состояние гидратов при депрессионном воздействии и количество диссоциирующего гидрата при изотермическом, изобарном и комбинированном воздействии с учетом метастабильных состояний. Показано, что механическое

разрушение гидратной структуры приводит к интенсификации диссоциации: в исследованных термобарических условиях скорость диссоциации механически разрушенного гидрата превышает скорость диссоциации целостного на 30-60 %.

Теоретическая и практическая значимость работы

Теоретическая значимость диссертационной работы состоит в развитии физико-математических представлений о клатратных гидратах как о каркасных конденсированных системах с включенной фазой, в которых фазовое состояние, скорость превращений и устойчивость определяются совместным действием энергетических, структурных, кинетических, тепловых и механических факторов.

Разработанный аппарат позволяет рассматривать гидратообразование и диссоциацию не как набор независимых расчетных процедур, а как единый многоуровневый процесс, включающий образование локально упорядоченных водных структур, заполнение полостей молекулами гидратообразователя, формирование устойчивого гидратного каркаса, рост гидратной фазы, метастабильность, самоконсервацию, механическое разрушение и термобарическую диссоциацию.

Практическая значимость результатов выражается в создании расчетных методов для определения равновесных термобарических параметров, плотности, гидратного числа, состава гидратной фазы, кинетических характеристик роста и диссоциации гидратов, а также критериев устойчивости гидратных систем при изменении состава, давления и температуры.

На основе созданного комплекса расчетных методов получено 12 патентов Российской Федерации на изобретения, направленных на описание, прогнозирование, предупреждение и управление процессами образования и диссоциации гидратов, а также одно свидетельство о государственной регистрации базы данных.

Разработанные теоретические основы процессов образования и диссоциации гидратов используются в производственной деятельности филиала «Ставропольское УПХГ» ООО «Газпром ПХГ», проектных подразделений ООО «НК «Роснефть» - НТЦ», филиала «Краснодар бурение» ООО «Газпром бурение», ООО «Гидронефтегаз», а также в учебном процессе РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, Пермского национального исследовательского политехнического университета и Кубанского государственного университета.

Полученные результаты представляют самостоятельную ценность для физики конденсированного состояния, поскольку позволяют анализировать устойчивость и кинетику фазовых переходов в каркасных структурах включения и могут быть использованы при дальнейшем развитии моделей родственных структурно-неоднородных конденсированных систем.

Полнота изложения материалов диссертации и ценность научных работ

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в научных трудах, прошли апробацию на научных конференциях и отражены в объектах интеллектуальной собственности.

По материалам диссертационной работы опубликовано 68 научных работ, в том числе 3 монографии, 28 статей в рецензируемых изданиях, входящих в

перечень ВАК при Минобрнауки России, 12 публикаций в изданиях, индексируемых в международных информационно-аналитических системах научного цитирования Web of Science и Scopus, 12 патентов на изобретения Российской Федерации, 1 свидетельство о государственной регистрации базы данных, 12 работ в материалах конференций и прочих изданиях.

Основные результаты докладывались и обсуждались на российских и международных научных мероприятиях, включая международные симпозиумы и конференции по физике конденсированного состояния, соединениям включения, супрамолекулярным архитектурам, нефтегазовым технологиям и современным проблемам физико-математических наук.

Научные работы Шостака Н.А. имеют ценность для развития физико-математического моделирования клатратных гидратов, поскольку в них последовательно представлены модели образования, равновесия, распределения компонентов, кинетики роста, диссоциации, метастабильности, механического разрушения и прикладного управления гидратными процессами.

В диссертационной работе не содержатся заимствованные материалы, представленные без ссылки на авторов и источники публикаций. Диссертация прошла проверку по системе «Антиплагиат», оригинальность составила 77,74 % (самоцитирования 17,67 %).

Личное участие автора в получении научных результатов

Личный вклад Шостака Н.А. является определяющим в постановке проблемы, формулировке цели и задач исследования, разработке теоретических моделей, построении расчетных зависимостей, систематизации и интерпретации результатов. Основные теоретические результаты получены автором лично либо при его определяющем участии в 2014-2026 гг.

Автором выполнены разработка и обоснование единого комплекса физико-математических моделей процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур; сформулированы представления о связи микроструктурных параметров гидратной фазы с макроскопическими характеристиками равновесия, кинетики и механической устойчивости; разработаны расчетные соотношения для молекулярных, энергетических, равновесных, кинетических и механических параметров гидратных систем; проведено сопоставление расчетных результатов с экспериментальными данными и физическая интерпретация выявленных закономерностей. Часть результатов получена совместно с соавторами научных публикаций и объектов интеллектуальной собственности. При этом вклад Шостака Н.А. в разработку основных теоретических положений, расчетного аппарата и интерпретацию результатов является определяющим для содержания диссертационной работы.

Диссертационная работа Шостака Никиты Андреевича представляет собой завершенное самостоятельное научное исследование, имеющее существенное значение для физики конденсированного состояния и физико-математического моделирования клатратных гидратов.

В диссертации на основании выполненных автором исследований разработан согласованный комплекс теоретических положений, физико-математических моделей и расчетных методов, обеспечивающий единое

описание процессов образования, роста, устойчивости и диссоциации клатратных гидратов кубических структур КС-I и КС-II. Полученные результаты можно квалифицировать как научное достижение, направленное на решение крупной научной задачи, связанной с установлением связи между молекулярно-структурными параметрами гидратной решетки и макроскопическими термодинамическими, кинетическими и механическими характеристиками гидратных систем.

Диссертация и автореферат изложены научным языком, структура работы соответствует поставленной цели и задачам. Основные положения, выводы и рекомендации обладают научной новизной, теоретической и практической значимостью, достаточной степенью обоснованности и достоверности.

Диссертационная работа соответствует требованиям, установленным пунктами 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук. Тема и содержание диссертации соответствуют паспорту специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния» (пп. 1, 2, 3, 5 и 7).

Диссертация Шостака Никиты Андреевича «Физико-математическое моделирование процессов образования и диссоциации клатратных гидратов кубических структур» рекомендуется к защите на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Заключение принято на расширенном заседании кафедры физики наносистем и кафедры теоретической и экспериментальной физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова».

Присутствовало на заседании всего – 30 человек, в том числе:
д.ф.-м.н. – 11 человек; к.ф.-м.н. – 15 человек.

Результаты голосования:

«за» – 30 чел., «против» – нет, «воздержалось» – нет.

Протокол № 1 от «27» января 2026 г.

Председатель заседания
зав. кафедрой физики наносистем
института математики и естественных наук,
д. ф.-м. наук, профессор

М.А. Шебзухова

