ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.479.04, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 17 апреля 2025 г. № 48

О присуждении Фасхутдиновой Розе Ильфатовне, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Кинетическое моделирование и оптимизация процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции» по научной специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 14 февраля 2025 года (протокол № 42) диссертационным советом 24.2.479.04, созданным на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32), приказ № 519/нк от 24.03.2023 г.

Соискатель, Фасхутдинова Роза Ильфатовна, 29 июля 1992 года рождения. В 2015 году окончила с отличием Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Башкирский государственный университет» по направлению подготовки 01.04.01 Математика, с присвоением квалификации магистр. В 2022 г. окончила аспирантуру по очной форме обучения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук по направлению подготовки 02.06.01 Компьютерные и информационные науки с присвоением квалификации «Исследователь. Преподаватель-исследователь». Диплом об

окончании аспирантуры выдан Федеральным государственным бюджетным научным учреждением Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук в 2022 г.

Работает в должности ассистента кафедры информационных технологий и прикладной математики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена в лаборатории математической химии Института нефтехимии и катализа – обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – Губайдуллин Ирек Марсович, доктор физико-математических наук (02.00.04 – Физическая химия), профессор, заведующий лабораторией математической химии Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского Федерального исследовательского центра Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

1. Мифтахов Эльдар Наилевич, доктор физико-математических наук (1.4.4. Физическая химия), федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «МИРЭА - Российский технологический университет», кафедра инструментального и прикладного программного обеспечения, профессор;

2. Решетников Сергей Иванович, доктор химических наук (02.00.15 - Кинетика и катализ), старший научный сотрудник, федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского

отделения Российской академии наук», отдел технологии каталитических процессов, ведущий научный сотрудник дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация — Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н. П. Огарёва», г. Саранск, в своем положительном отзыве, подписанном Томилиным Олегом Борисовичем — кандидатом химических наук (02.00.08 - Химия элементоорганических соединений), доцентом, заведующим кафедрой физической химии Института наукоёмких технологий и новых материалов ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва»; Десяевым Евгением Васильевичем — кандидатом физико-математических наук (05.13.18 - Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ), доцентом, заведующим кафедрой прикладной математики ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва», указала, что по актуальности, научному уровню проведенных исследований, новизне и значимости полученных результатов, личному вкладу автора, достоверности и обоснованности выводов диссертационная работа Фасхутдиновой Р.И. «Кинетическое моделирование и оптимизация процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции» соответствует требованиям п.п. 9-14 постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней», а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Соискатель имеет 12 научных трудов, из них 4 статьи в зарубежных журналах, индексируемых базами данных и систем цитирования Scopus и Web of Science, 1 статья в отечественных изданиях, которые входят в международные реферативные базы данных и системы цитирования (RSCI),

1 статья в изданиях, входящих в базу данных РИНЦ, а также тезисы 6 докладов на российских и международных конференциях.

Общий объем публикаций по теме диссертации 8,6 п.л., авторский вклад – 2,1 п.л. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Зайнуллин Р.З., Загоруйко А.Н., Коледина К.Ф., Губайдуллин И.М., Фасхутдинова Р.И. Многокритериальная оптимизация реакторного блока каталитического риформинга с использованием генетического алгоритма // Катализ в промышленности. – 2019. – Т.19, – № 6. – С. 465-473.

2. Faskhutdinova R.I., Faskhutdinov A.G., Enikeeva L.V, Gubaydullin I.M. Study of stiff differential equations of mathematical description of izomerization of pentane-hexane cut process // Journal of Physics: Conference Series. Intelligent Information Technology and Mathematical Modeling. – 2021. – V. 2131. – P. 022003.

3. Barkalov, K.; Gubaydullin, I.; Kozinov, E.; Lebedev, I.; Faskhutdinova, R.; Faskhutdinov, A.; Enikeeva, L. On Solving the Problem of Finding Kinetic Parameters of Catalytic Isomerization of the Pentane-Hexane Fraction Using a Parallel Global Search Algorithm // Mathematics. – 2022. – V.10, – № 19. – p. 36-65.

4. Enikeeva L.V., Koledina K.F., Gubaydullin I.M., Faskhutdinov A.G., Faskhutdinova R.I. Modeling and optimization of the catalytic isomerization of the pentane-hexane fraction with maximization of individual high-octane components yield // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. – 2021. – V. 133, – № 2. – p. 879-889.

5. Faskhutdinov A.G., Arefyev I.A., Enikeeva L.V., Faskhutdinova R.I. Numerical simulation of the catalytic process of isomerization of pentane-hexane fraction // Journal of Physics: Conference Series. – 2019. – V. 1368. –P. 042016.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Ведущей организации – Федеральное государственное бюджетное

образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва», г. Саранск. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) В работе приведен краткий обзор применения методов оптимизации в задачах химического производства, однако, не приведены исследования по использованию методов оптимизации, в которых целевой функционал содержит данные по октановому числу? 2) Проводились ли ранее другими исследователями разработки схем химических превращений процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции с образованием газов гидрокрекинга — метана, этана, пропана, н-бутана и изобутана? 3) В работе рассматривается промышленный процесс изомеризации пентан-гексановой фракции с катализатором. В первой главе приводится подробное описание используемых для исследуемого процесса разных типов катализаторов и их свойств. Можно ли на основе разработанной в работе кинетической модели, оценить эффективность работы разных катализаторов и каким образом? 4) Во второй главе описывается асинхронный параллельный алгоритм глобальной оптимизации решения обратной задачи химической кинетики. Насколько необходимо использование технологии параллельных вычислений? Оценивались ли эффективность и масштабируемость параллельных вычислений? 5) На стр. 69 диссертации в таблице приводятся значения изменений теплосодержания реагирующих смесей, которые были взяты и рассчитаны из базы NIST Chemistry WebBook. Можно ли доверять этим значениям? И не сравнились ли они со значениями из других источников? 6) В четвёртой главе, на рисунках 4.2 – 4.11 представлены графики зависимости степени превращения, селективности и выходов газов C_1 – C_4. Красным квадратным маркером обозначены промышленные значения. Что означает, когда маркер находится выше кривой Парето, или ниже кривой Парето? 7) В работе, на страницах 12, 42, 43, 81 присутствуют орфографические и стилистические ошибки. Например, «Успех установления оптимальных технологических решений *методоми*

математического моделирования зависит от *граматной* математической постановки задачи многокритериальной оптимизации». «Адекватность математического моделирования в первую очередь зависит от возможности получить необходимый и достаточный объем данных по составу исходного сырья, по *динамики* изменения в ходе химических превращений концентраций максимального числа компонентов, значения технологических параметров (температура, давление и т.п.), конструктивные показатели реакторов и химико-технологических систем оформления всего процесса в целом».

2. Официального оппонента, доктора физико-математических наук, профессора кафедры инструментального и прикладного программного обеспечения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «МИРЭА - Российский технологический университет», Мифтахова Эльдара Наилевича. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) В работе проводится решение прямой и обратной кинетических задач для процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции, характеризующегося протеканием множества элементарных реакций. Однако отсутствует детализированное математическое описание в виде конкретной системы дифференциальных уравнений, позволяющее однозначно соотнести кинетические параметры с конкретными стадиями превращения, что затрудняет дальнейшую оценку жесткости системы, а также интерпретацию полученных результатов. 2) Из представленных результатов не ясно является ли найденное решение задачи многокритериальной оптимизации единственным и проводился ли какой-либо анализ зависимости результата от выбора начальных приближений?

3) Функционал вида (2.4) отражает среднее относительное отклонение расчетных концентраций от экспериментальных сразу по всем наблюдаемым веществам, число которых достигает 17. Насколько оправдан такой подход и не возникает ли рисков возможного недооценивания отклонений для отдельных веществ. 4) Реализация генетического алгоритма (раздел 4.2) требует дополнительного пояснения. В частности, не указаны ключевые

параметры алгоритма: размер популяции, тип оператора кроссинговера, значение параметра мутации и предельное число поколений. В блок-схеме (рис. 4.1) не отражены важные этапы: процедура выборки особей на основе рассчитанных значений приспособленности и конкретный критерий завершения алгоритма. 5) Имеются мелкие замечания: в тексте встречаются орфографические и пунктуационные ошибки; наблюдается непоследовательность в обозначении чисел: в качестве разделителя целой и дробной части используются как точка, так и запятая, что нарушает единообразие оформления (например, в таблице 2.6); имеется несогласованность в обозначениях единиц измерения: в тексте используются как русскоязычные, так и англоязычные обозначения (например, в таблице 1.5).

3. Официального оппонента, доктора химических наук, старшего научного сотрудника, ведущего научного сотрудника отдела технологии каталитических процессов Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук», Решетникова Сергея Ивановича. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) В таблице 3.1 (с. 70) приведены значения кинетических параметров, в частности, для превращения бензола. Каким образом они были определены из описания промышленных данных если концентрация бензола на выходе из реактора равна нулю (табл. 3.3)?
2) Стр. 60, уравнение 2.4: – Чем обусловлен выбор функционала невязки (Z) как среднее относительное отклонение:

$$Z = \frac{\sum_{i=1}^{I} \left| \frac{x_{ij}^{exp} - x_{ij}^{calc}}{x_{ij}^{exp}} \right|}{I} \rightarrow min,$$

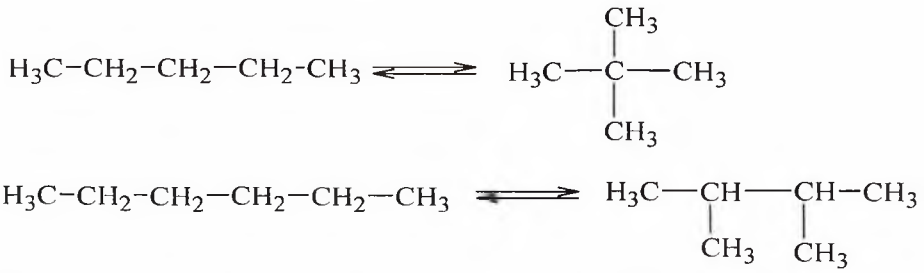
а не квадрат относительного отклонения? Сравнивались ли результаты по расчету параметров кинетической модели (константы скоростей реакций, энергии активации) при Z – относительное отклонение и Z - квадрат относительного отклонения? Как решалась проблема вычисления Z при

делении на ноль – мольная доля бензола и циклопентана на выходе из реактора? 3) На рисунках 4.1 - 4.10 представлены интересные результаты расчетов в виде графических зависимостей. Поскольку селективность зависит от конверсии реагентов, то, как правило, изменению селективности соответствует ось ординат (Y), а степень превращения - ось абсцисс (X). Рисунки же представлены в осях наоборот (X – селективность), что затрудняет восприятие полученных результатов. 4) В таблице 4.1 (с. 93) представлено сравнение данных промышленной установки и результатов расчетов. Автор утверждает, что в диапазоне изменения температур на входе в первый реактор - 146,2÷148,0°С и в третий - 145,1÷155,0°С можно «получить оптимальные режимы обеспечивающие увеличение по 2-метилбутану, сумме 2,2 (+2,3)-диметилбутану, повышение степени превращения н-пентана, н-гексана, снижение выхода продуктов гидрокрекинга» по сравнению с промышленными данными на 4, 3, 7, 2 и 10% соответственно. Приведенные цифры, фактически, соизмеримы с погрешностью (отклонением) результатов кинетического моделирования и промышленных данных (табл. 3.3, стр. 78). В диссертации отсутствует валидация на основе кинетической модели промышленного режима, приведенного в таблице 4.1. 5) В выводе 3 (с. 97) утверждается, что «Установлена динамика превращения целевых продуктов…». Что понимается под словом «Динамика», поскольку решается стационарная задача (см. модель 2.1 - 2.2, с. 54). 6) В выводе 4 (с. 97) утверждается, что «Определены области максимальной селективности…». Следовало бы конкретизировать эти «области». 7) В диссертации отсутствуют ссылки на Приложения, которые расположены в конце работы (3 шт.).

4. Доктора химических наук, профессора, профессора кафедры технологии пластмасс, органических веществ и нефтехимии института химических и нефтегазовых технологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева» Ворониной Светланы Геннадьевны и доктора химических наук, профессора,

профессора кафедры технологии пластмасс, органических веществ и нефтехимии института химических и нефтегазовых технологий Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кузбасский государственный технический университет имени Т.Ф. Горбачева» Перкель Александра Львовича. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) Почему в схеме структурной изомеризации (с. 9 автореферата) отсутствуют следующие реакции:



2) Из автореферата (с. 16, табл. 7) неясно, что автор подразумевал под термином «Ошибка %». 3) На рисунках 3-7 (в подписях) не приводится расшифровка величины τ, кг*ч/моль.

5. Доктора химических наук, профессора, профессора кафедры «Физической и органической химии» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет» Борисова Ивана Михайловича. Отзыв положительный. Вопросов и замечаний нет.

6. Доктора технических наук, младшего научного сотрудника Отделения химической инженерии инженерной школы природных ресурсов Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» Долгановой Ирэны Олеговны. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) Следовало бы отразить границы применимости разработанной кинетической модели процесса изомеризации пентан-гексановой фракции. 2) Имеется ряд опечаток и неточностей в оформлении, например, в табл. 2, 3 обозначение размерности температуры

приведено в виде ^{0}C вместо °C; в некоторых местах отсутствуют пробелы (например, «62-70^{0}C» на стр. 7 и т.д.). 3) Вероятно, вместо «фракции с пределами кипения 62-70 °C» следовало писать «фракции с концом кипения 62-70 °C).

7. Доктора физико-математических наук, заместителя директора по научной работе Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» Полякова Сергея Владимировича. Отзыв положительный.

Имеется вопрос: Почему, при решении обратной задачи, выбрана технология распараллеливания на основе липшицевой оптимизации? В чем преимущества этого метода по сравнению с другими?

8. Доктора химических наук, доцента, профессора кафедры физической химии Химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» Пичугиной Дарьи Александровны. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) В таблице 3 представлены мольные доли компонентов сырья и продукта. Видно, что для некоторых веществ как разветвлённого, гак и не разветвленного строения (2- метилбутан. 2,2-диметибутан. пропан, этан) наблюдается увеличение мольной доли на выходе. К сожалению, это никак не обсуждается. 2) Отсутствует четкая информация о том, какие новые стадии были добавлены в механизм, и почему. 3) Из каких источников были взяты коэффициенты температурной зависимости теплоемкости? 4) Не совсем понятна процедура проверки на термодинамическую согласованность.

9. Доктора физико-математических наук, профессора кафедры «Программное обеспечение вычислительной техники и автоматизированных систем» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Донской государственный технический

университет» Чистякова Александра Евгеньевича. Отзыв положительный.

Имеются замечания и вопросы: 1) В тексте автореферата не отражен личный вклад при решении обратной задачи восстановления значений кинетических параметров. Непонятно какой генетический алгоритм при этом используется (разработанный автором или известный)? 2) Создано ли программное обеспечение, реализующее используемый алгоритм?

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их высокой профессиональной квалификацией, наличием публикаций по проблематике, связанной с темой диссертации, компетенциями в вопросах, имеющих отношение к теме работы. Ведущая организация и оппоненты не имеют совместных проектов и публикаций с соискателем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований к наиболее значимым результатам необходимо отнести следующее:

– впервые на основе промышленных данных предложен механизм процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции, учитывающий образование побочных продуктов гидрокрекинга.

– разработано математическое описание изменения концентраций реакционной смеси в реакторе в зависимости от времени контакта с катализатором, что позволяет использовать данную модель для расчета количества целевых продуктов и количества катализатора в реакторах.

– на основе предложенного механизма и математического описания разработана кинетическая модель каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции процесса. Подобраны оптимальные и термодинамически согласованные кинетические параметры, описывающие схему химических превращений каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции.

– установлена динамика превращений целевых продуктов (2-метилбутана, 2,2-диметилбутана и 2,3-диметилбутана) в реакторном блоке, что позволяет повысить точность прогнозирования процессов изомеризации.

– определены области максимальной селективности целевых продуктов и минимальных концентраций побочных газов с использованием анализа кривой Парето. Предложенные температурные режимы обеспечивают: увеличение селективности по 2-метилбутану более чем на 4% по сравнению с промышленными данными; рост селективности по сумме 2,2-диметилбутана и 2,3-диметилбутана более чем на 3%; повышение степени превращения н-пентана на 7% и н-гексана на 2%; снижение выхода продуктов гидрокрекинга более чем на 10%.

Практическая значимость и ценность результатов обусловлена тем, что:

– исследования в диссертационной работе Фасхутдиновой Р.И. проведены на основе кинетических и термодинамических данных процесса изомеризации, полученных в ходе работы промышленных реакторов. Разработанная кинетическая модель позволяет в любой момент времени определить концентрации компонентов реакционной смеси. Также модель позволяет определить весь температурный профиль в каскаде реакторов.

– разработанную кинетическую модель можно использовать для подбора оптимального технологического режима, а также для усовершенствования существующих промышленных установок.

– разработанная модель подходит для создания учебных тренажеров для рабочего персонала, создания отечественных программных продуктов для выполнения инжиниринговых расчетов по кинетике каталитической изомеризации.

Достоверность представленных в диссертационной работе результатов подтверждается совпадением расчетных и экспериментальных данных в пределах погрешности. Дополнительным подтверждением адекватности модели является соответствие полученного температурного профиля

реакционной среды экспериментальным значениям, зафиксированным в действующих промышленных установках.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии во всех стадиях научно-исследовательского процесса: от постановки задач до проведения экспериментальных работ и подготовки публикаций. Все выводы основаны на данных, полученных автором.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания и вопросы: 1) Будет ли работать разработанная модель, если изменить катализатор или поменять реакторный блок? 2) Учитывается ли влияние бифункционального катализатора при моделировании?

Соискатель Фасхутдинова Р.И. ответила на задаваемые ей в ходе заседания вопросы и привела собственную аргументацию: 1) Модель будет работать, если так же будет рассматриваться низкотемпературная изомеризация с таким же компонентным составом реакционной смеси. Что касается реакторного блока: мы в модели не учитываем геометрические размеры ректоров, а только массу загруженного катализатора, поэтому при изменении массы катализатора модель также будет работать.

2) Бифункциональный катализатор в своем составе имеет как металлические активные центры, где происходит гидрирование/дегидрирование алканов, так и кислотные центры, где происходит сама изомеризация. Хоть в модели и не рассматриваются промежуточные стадии, происходящие на поверхности катализатора, все равно предлагаемые реакции учитывают природу бифункционального катализа.

На заседании 17.04.2025 г. диссертационный совет принял решение: за решение научной задачи, заключающейся в разработке кинетической модели и решении задачи многокритериальной оптимизации условий проведения промышленного процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции, и имеющей существенное значение для физической химии, присудить Фасхутдиновой Розе Ильфатовне ученую степень кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая

химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 13 человек, из них 7 докторов физико-математических наук по профилю защищаемой диссертации, участвовавших в заседании; из 17 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за – 13, против – 0.

Председатель
диссертационного совета Мустафин Ахат Газизьянович

Ученый секретарь
диссертационного совета Исмагилова Альбина Сабирьяновна

17 апреля 2025 г.