УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, доктор биологических наук

_____ В.Б. Мартыненко

«15» 11 2024 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук

Диссертация «Кинетическое моделирование и оптимизация процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции» выполнена в Институте нефтехимии и катализа – обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (далее – ИНК УФИЦ РАН).

В период подготовки диссертации соискатель Фасхутдинова Роза Ильфатовна обучалась в аспирантуре по очной форме обучения ИНК УФИЦ РАН по специальности 1.2.2 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Работает в должности стажёра-исследователя лаборатории математической химии ИНК УФИЦ РАН.

В 2015 году окончила с отличием Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Башкирский государственный университет» по направлению подготовки 01.04.01 «Математика». Присвоена квалификация магистра. В 2022 г. соискатель окончила аспирантуру Федерального государственного

бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (УФИЦ РАН) 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 Уфимским федеральным исследовательским центром Российской академии наук в 2022 году.

Справка № 39-23 о сдаче кандидатских экзаменов по дисциплинам «История и философия науки (физико-математические)» («хорошо», 15.06.2022 г.), «Иностранный язык (английский)» («отлично», 17.06.2022 г.) выдана 14.06.2023 г. Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Уфимский университет науки и технологий». Справка № 36/652.3 о сдаче кандидатского экзамена по дисциплине «Физическая химия» («отлично», 21.06.2023 г.) выдана 18.06.2024 г. УФИЦ РАН.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Губайдуллин Ирек Марсович, заведующий лабораторией математической химии ИНК УФИЦ РАН.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Оценка выполненной соискателем работы

Диссертационная работа Фасхутдиновой Р.И. «Кинетическое моделирование и оптимизация процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции» является цельной, самостоятельной и законченной научно-исследовательской работой и отвечает критериям пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Личный вклад автора

Автором совместно с научным руководителем определена тема диссертационной работы, поставлены цели и задачи исследования. Лично автором проведен анализ литературных данных, выполнена обработка исходных данных, проведены расчетные эксперименты с описанием их результатов, обсуждением и публикацией полученных результатов.

Степень достоверности результатов проведенных исследований

Достоверность полученных результатов подтверждается базированием работы на фундаментальных законах математики и химии. Кроме того, адекватное описание результатов расчётов по составу на выходе из реакторного блока и перепадов температур после каждого реактора соответствует промышленным данным. Тепловой эффект обратимых реакций и температурная зависимость константы равновесия, рассчитанные из кинетических параметров, подобранных при решении обратной задачи, согласуются с теоретической.

Результаты работы были представлены на Международных и Всероссийских конференциях, а также опубликованы результаты в виде научных трудов в рецензируемых изданиях.

Научная новизна и практическая значимость исследований

Научная новизна данной работы заключается: в разработанной кинетической модели каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции, учитывающей образование побочных продуктов – метана, этана, пропана и бутанов, а также неизотермичность и изменение мольного расхода процесса; в программной реализации математической формализации кинетической модели с возможностью подбора конфигураций реакторного блока; в рамках многокритериальной оптимизации рассчитаны оптимальные технологические режимы, позволяющие одновременно максимизировать выход целевых продуктов и минимизировать выход побочных газов.

Практическая значимость работы определяется тем, что разработанную кинетическую модель можно использовать для подбора оптимального технологического режима и количества катализатора, а также для усовершенствования существующих промышленных установок с помощью изменения конфигураций реакторного блока. Данная модель подходит для создания учебных тренажеров для рабочего персонала, создания отечественных программных обеспечений для выполнения инжиниринговых расчетов по кинетике каталитической изомеризации.

Ценность научных работ

Ценность научной работы соискателя заключается в разработке кинетической модели процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции и многокритериальной оптимизации условий проведения процесса. В рамках многокритериальной оптимизации подобран оптимальный режим, позволяющий одновременно максимизировать выход целевых изомеров и минимизировать выход побочных газов.

Специальность, которой соответствует диссертация

Диссертационная работа Фасхутдиновой Р.И. соответствует паспорту научной специальности 1.4.4. Физическая химия, а именно пунктам: 7 – Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физико-химическая гидродинамика, растворение и кристаллизация; 9 – Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции; 10 – Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства; 12 – Физико-химические основы процессов химической технологии и синтеза новых материалов.

Полнота изложения материалов диссертации в опубликованных работах

По материалам диссертационной работы опубликовано 12 научных трудов, из них 6 научных статей: 1 – в RSCI, 4 – в зарубежных журналах, индексируемых базами данных и систем цитирования Scopus и Web of Science, 1 – в журнале, входящем в РИНЦ, тезисы 6 докладов на российских и международных конференциях.

Список основных публикаций по теме диссертации

В отечественных изданиях, которые входят в международные реферативные базы данных и системы цитирования (RSCI)

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.

Публикации в изданиях, входящих в международную базу данных и системы цитирования WoS и Scopus:

2. Barkalov B., 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.

3. 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.

4. 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.

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

В рецензируемых научных журналах, включенных в Российский индекс научного цитирования:

6. Фасхутдинова Р.И., Фасхутдинов А.Г., Еникеева Л.В., Губайдуллин И.М., Мугалимова Р.С. Численный анализ жесткости математического описания процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции // Вестник Башкирского университета. – 2021. – Т. 26, – № 1. – С. 99-105.

Опубликованные работы полностью отражают содержание диссертации, все основные положения и результаты, выносимые на защиту. В диссертации «Кинетическое моделирование и оптимизация процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции» отсутствует заимствованный материал без ссылки на автора и источник заимствования.

Диссертация «Кинетическое моделирование и оптимизация процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции» Фасхутдиновой Розы Ильфатовны рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Заключение принято на заседании объединенного научного семинара Института нефтехимии и катализа - обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

Присутствовало на заседании 29 человек, в том числе 8 докторов наук. Результаты голосования: «за» - 29 чел., «против» - 0 чел., «воздержалось» - 0 чел., протокол № 9 от « 10 » октября 2024 г.

Председатель семинара Института
нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,
главный научный сотрудник, зав. лаб.
лаборатории химии высоких энергий и катализа
ИНК УФИЦ РАН, д.х.н.,
профессор Шарипов Глюс Лябибович

Подпись д.х.н. Шарипова Г.Л. заверяю:
Главный ученый секретарь
УФИЦ РАН, к.э.н. Фаттахова Регина Халиловна