

## УТВЕРЖДАЮ

Проректор по инновационной деятельности  
ФГБОУ ВО «Уфимский университет  
науки и технологий»

кандидат технических наук, доцент

Г.К. Агеев

« 26 »

2023 г.



## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Уфимский университет науки и технологий»

Диссертация «Исследование физико-химических закономерностей процессов синтеза полимеров методами компьютерного и имитационного моделирования» выполнена на кафедре математического моделирования Стерлитамакского филиала федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

В период подготовки диссертации Мифтахов Эльдар Наилевич работал и по настоящее время работает в Стерлитамакском филиале федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» в должностях младшего научного сотрудника научно-инновационного управления, доцента кафедры математического моделирования. В настоящее время Мифтахов Э.Н. работает в должности младшего научного сотрудника научно-инновационного управления Стерлитамакского филиала федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

В 2008 году окончил государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Стерлитамакская государственная педагогическая академия» по специальности «Прикладная математика и информатика» с присуждением квалификации «Математик, системный программист».

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук на тему «Кинетическое моделирование процессов сополимеризации бутадиена со стиролом в эмульсии» по научной специальности 02.00.04 – Физическая химия защитил в 2011 году в

диссертационном совете Д 212.013.10 при Башкирском государственном университете.

Научный консультант – доктор физико-математических наук, профессор Мустафина Светлана Анатольевна, проректор по научной работе, заведующий кафедрой математического моделирования федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

По результатам рассматриваемой диссертации «Исследование физико-химических закономерностей процессов синтеза полимеров методами компьютерного и имитационного моделирования» принято следующее заключение:

Актуальность работы. В химико-технологической отрасли все чаще ставятся задачи по совершенствованию и диверсификации продукции и повышению рентабельности непрерывного производства, масштаб которого позволяет рассматривать его как сложную физико-химическую систему, функционирующую под воздействием различных химических, физико-химических и гидродинамических явлений и эффектов. Учет этих явлений с целью организации комплексного подхода к изучению сложных процессов возможно с применением расширенной методологии исследования, которая позволяет определять не только влияние внешних факторов на кинетику ведения процесса, но и использовать полученные результаты при идентификации числовой зависимости физико-химических свойств образуемого полимерного продукта от начального состава реакционной смеси и условий организации непрерывного производства.

Имеющиеся на рынке программные продукты и цифровые инструменты исследования лишены возможности внедрения своих расчетных модулей с целью реализации системного подхода в исследовании процессов, часто требующего решения нетиповых задач. Все более актуальным в этом случае становится вопрос развития математических подходов и вычислительных методов, позволяющих с применением цифровых технологий и уникальных алгоритмов, проводить исследование сложных физико-химических систем, характеристикой которых является необходимость обработки огромного потока физико-химических данных, и хранения результатов всех натуральных и вычислительных экспериментов.

Диссертационная работа Мифтахова Э.Н. посвящена разработке методологии исследования процессов промышленного синтеза полимеров, основанной на применении фундаментальных математических моделей химической кинетики, и представление алгоритмов ее работы в составе облачного сервиса, позволяющего организовать многопоточные вычисления

для различных условий организации процессов и унифицированных модельных описаний, что является важной и актуальной задачей.

Научная новизна и практическая значимость. В результате проведенных исследований была разработана и алгоритмически представлена методология исследования процессов промышленного синтеза полимеров, представляющая собой итерационную последовательность решения прямых и обратных задач на основе фундаментальных математических моделей физико-химической гидродинамики и химической кинетики для унифицированного описания механизма ведения процессов синтеза полимеров. Разработанная методология позволяет на основе первичной физико-химической информации в виде данных по скорости полимеризации и молекулярно-массовому распределению продукта в автоматизированном решать задачу кинетической неоднородности и идентификации кинетических параметров. На основе авторских разработок в составе информационной системы путем решения обратной задачи формирования молекулярно-массового распределения (ММР) определен характер кинетической неоднородности катализатора на основе соединений сольвата хлорида гадолиния в производстве 1,4-цис-полиизопрена. Проведен анализ влияния гидродинамического режима формируемого в условиях организации непрерывного производства на молекулярные характеристики получаемого продукта.

Разработаны алгоритмы построения математических моделей процессов гомополимеризации на основе метода Монте-Карло в условиях кинетической неоднородности катализатора в периодическом/непрерывном режиме ведения процесса. Разработаны и алгоритмически представлены методы числовой оценки молекулярно-массового распределения продуктов процесса полимеризации, химического размера и состава образующих макромолекул для процессов сополимеризации, расширяющие функционал статистического подхода к решению прямых задач химической кинетики. В рамках реализации статистического подхода представлена новая методика адаптации предлагаемого модельного описания под непрерывный режим ведения процесса.

Разработана информационная система исследования процессов промышленного синтеза полимеров, включающая в себя базу данных натуральных и вычислительных экспериментов, а также алгоритмы решения прямых и обратных задач с использованием технологий облачных вычислений. Математические подходы, методы и алгоритмы представлены в составе системы и позволяют проводить контроль физико-химических свойств продукта синтеза полимеров в режиме эмпирического исследования. Разработанная информационная система развернута в сетевом

информационном пространстве центральной заводской лаборатории ОАО «Синтез-Каучук» и применяется для исследования процессов промышленного синтеза полимеров в масштабах локального производства. Указанный программный продукт применяется в качестве учебно-методического материала на факультете математики и информационных технологий Стерлитамакского филиала Уфимского университета науки и технологий.

Личное участие автора в получении научных результатов. Личный вклад Мифтахова Э.Н. является решающим на всех этапах работы и состоит в постановке цели и задач исследования, выборе объектов и методов исследования, проведении анализа литературных источников, разработке всех моделей физико-химической гидродинамики и химической кинетики, разработке всех этапов представленной методологии исследования, личном проведении или непосредственном участии в проведении численных экспериментов, интерпретации результатов, формулировании выводов и положений, определяющих научную новизну, теоретическую и практическую значимость работы, оформлении результатов в виде публикаций.

Степень обоснованности выводов и рекомендаций. Результаты, полученные в диссертационной работе, достоверны. Достоверность результатов обоснована применением в качестве исходных посылок основных законов сохранения и других фундаментальных физических и химических законов, а также подтверждается сравнительным анализом с имеющимися экспериментальными данными.

Соответствие содержания диссертации паспорту специальности. Область исследования, в которой выполнена диссертационная работа, соответствует паспорту научной специальности 1.4.4. Физическая химия, а именно: пункту 7 – «Макрокинетика, механизмы сложных химических процессов, физикохимическая гидродинамика, растворение и кристаллизация», пункту 8 – «Динамика элементарного акта химических реакций. Механизмы реакции с участием активных частиц», пункту 9 – «Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями протекания химической реакции».

Публикации, отражающие основное содержание диссертации. Список публикаций соискателя Мифтахова Э.Н. составляет 94 научные работы в рецензируемых научных журналах, из них 11 работ в журналах, рекомендованных перечнем ВАК, 20 работ в изданиях, входящих в международные базы цитирования Web of Science и Scopus, 9 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ, 4 монографии, 50 научных статей в других изданиях.

Диссертационная работа и ее результаты обсуждались на научных конференциях различного уровня, научных семинарах кафедры математического моделирования Стерлитамакского филиала федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» и объединенных научных семинарах.

Автореферат и опубликованные работы достаточно полно передают содержание диссертации. Среди основных публикаций необходимо указать следующие статьи в журналах, рекомендованных перечнем ВАК:

1. Исследование характеристик продукта свободно-радикальной сополимеризации бутадиена со стиролом в эмульсии на основе метода Монте-Карло / Т.А. Михайлова, Э.Н. Мифтахов, И.Ш. Насыров, С.А. Мустафина // Каучук и резина. – 2015. – № 2. – С. 28-31.

2. Исследование молекулярных характеристик продукта полимеризации изопрена на неодимсодержащей каталитической системе на основе моделирования методом Монте-Карло / С.А. Мустафина, Т.А. Михайлова, Э.Н. Мифтахов, В.А. Михайлов // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. – 2020. – № 4 (42). – С. 138-148.

3. Поиск оптимального значения начальной концентрации диизобутилалюминийгидрида для регулирования молекулярной массы полиизопрена на неодимсодержащей каталитической системе / Е.В. Антипина, Э.Н. Мифтахов, С.А. Мустафина // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. – 2020. – № 3 (41). – С. 52-64.

4. Исследование процессов промышленного синтеза полимеров на основе технологий облачных вычислений / Э.Н. Мифтахов, С.А. Мустафина, Т.А. Михайлова // Вестник Башкирского университета. – 2021. – № 4 (26). – С. 893-898.

5. Модифицированный метод решения обратных задач формирования молекулярно-массового распределения в условиях интервального характера исходных экспериментальных данных / Э.Н. Мифтахов, С.А. Мустафина, И.Ш. Насыров, С.И. Мустафина // Вестник Тверского государственного университета. Серия: Химия. – 2022. – № 1(47). – С. 102-112.

Входящие в международные базы цитирования Web of Science и Scopus:

6. Solving the direct problem of butadiene-styrene copolymerization / S. Mustafina, E. Miftakhov, T. Mikhailova // International Journal of Chemical Sciences. – 2014. – V. 12, № 2. – P. 564-572.

7. Mathematical Study of the butadiene-styrene copolymerization product by the Monte-Carlo method / S. Mustafina, T. Mikhailova, E. Miftakhov // *International Journal of Chemical Sciences*. – 2015. – V. 13, № 2. – P. 849-856.
8. Моделирование и численное исследование физико-химических закономерностей 1,4-цис-полиизопрена, полученного в присутствии модифицированных каталитических систем / Э.Н. Мифтахов, С.А. Мустафина, С.И. Спивак // *Вычислительные технологии*. – 2020. – Т. 25, № 3. – С. 7-17 (Modeling and numerical study of physical and chemical regularities of 1,4-cis-polyisoprene obtained in the presence of modified catalytic systems / E.N. Miftakhov, S.A. Mustafina, S.I. Spivak // *Computational technologies*. – 2020. – V. 25, № 3. – P. 7-17).
9. Developing methods and algorithms for cloud computing management systems in industrial polymer synthesis processes / E. Miftakhov, S. Mustafina, A. Akimov, O. Larin, A. Gorlov // *Emerging Science Journal*. – 2021. – V. 5, № 6. P. 964-972.
10. Kinetic heterogeneity of polymer products obtained in the presence of microheterogenic catalytic systems based on gel chromatograms / Miftakhov E., Mustafina S., Nasyrov I., Daminov A. // *Periódico Tchê Química*. – 2021. – V. 18, № 38. – P. 27-37.
11. Исследование кинетики процесса полимеризации изопрена в присутствии неодимсодержащих каталитических систем, модифицированных в турбулентных потоках / Э.Н. Мифтахов, И.Ш. Насыров, С.А. Мустафина, В.П. Захаров // *Журнал прикладной химии*. – 2021. – Т. 94, № 1. – С. 81-87 (Study of Kinetics of Isoprene Polymerization in the Presence of Neodymium-Containing Catalytic Systems Modified in Turbulent Flows / E.N. Miftakhov, I.S. Nasyrov, S.A. Mustafina S.A., V.P. Zakharov // *Journal of Applied Chemistry*. – 2021. – V. 94, № 1. – P. 77-83).
12. Исследование гидродинамического влияния на молекулярные параметры продукта полимеризации изопрена в присутствии неодимсодержащего каталитического комплекса / Э.Н. Мифтахов, С.А. Мустафина, С.Л. Подвальный, И.Ш. Насыров, В.П. Захаров // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*. – 2022. - № 5 (104). – С. 120-138.
13. Исследование кинетической неоднородности каталитической системы на основе сольвата хлорида гадолиния в производстве 1,4-цис-полиизопрена / Мифтахов Э.Н., Мустафина С.А., Насыров И.Ш., Фаизова В.Ю. // *Журнал прикладной химии*. – 2022. – Т. 95, № 3. – С. 375-381 (Kinetic Heterogeneity of the Catalytic System Based on Gadolinium Chloride Solvate in 1,4-cis-Polyisoprene Production / E.N. Miftakhov, S.A. Mustafina, I.S. Nasyrov, V.Y. Faizova // *Journal of Applied Chemistry*. – 2022. – V. 95, № 3. – P. 423-429).

14. Assessing the Hydrodynamic Effect on the Molecular Parameters of the Isoprene Polymerization Product in the Presence of a Neodymium-Based Catalytic System / S. Mustafina, E. Miftakhov, A. Akimov, S. Podvalny, K. Gabelashvili // ACS Omega. – 2022. – V. 7. – P. 17652-17657.

Монографии:

15. Михайлова, Т.А. Методы моделирования и исследования процессов промышленного синтеза свободно-радикальных сополимеров: монография / Т.А. Михайлова, Э.Н. Мифтахов, С.А. Мустафина, – Стерлитамак: Стерлитамакский филиал БашГУ, 2016. – 107 с.

16. Михайлова, Т.А. Исследование процессов промышленного производства синтетического каучука методами математического моделирования: монография / Т.А. Михайлова, С.А. Мустафина, Э.Н. Мифтахов. – Стерлитамак: Стерлитамакский филиал БашГУ, 2018. – 107 с.

17. Мифтахов, Э.Н. Исследование процессов промышленного производства полимеров с применением технологий облачных вычислений: монография / Э.Н. Мифтахов, С.А. Мустафина. – Стерлитамак: Стерлитамакский филиал БашГУ, 2022. – 79 с.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана исследования, концептуальностью и взаимосвязью выводов. Диссертационная работа является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком профессиональном уровне, по актуальности, научной новизне, практической значимости и объему полученных данных соответствует требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Исследование физико-химических закономерностей процессов синтеза полимеров методами компьютерного и имитационного моделирования» Мифтахова Эльдара Наилевича рекомендуется к защите на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Заключение принято на расширенном заседании кафедр математического моделирования, фундаментальной математики, прикладной информатики и программирования Стерлитамакского филиала федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский

университет науки и технологий». Присутствовали на заседании 12 чел. Результаты голосования: «за» – 12 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел., протокол № 8 от 26.04. 2023 г.



**Викторов Сергей Владимирович,**  
кандидат физико-математических наук,  
доцент,  
зав. кафедрой математического  
моделирования Стерлитамакского  
филиала ФГБОУ ВО «Уфимский  
университет науки и технологий»



**Коженикова Лариса Михайловна,**  
доктор физико-математических наук,  
профессор,  
зав. кафедрой фундаментальной  
математики Стерлитамакского филиала  
ФГБОУ ВО «Уфимский университет  
науки и технологий»



**Хасанов Марат Камилевич,**  
кандидат физико-математических наук,  
доцент,  
зав. кафедрой прикладной информатики и  
программирования Стерлитамакского  
филиала ФГБОУ ВО «Уфимский  
университет науки и технологий»

