

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02), созданного на базе
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2)
от 20 декабря 2023 г. (протокол № 17)

Защита диссертации Захарова Степана Алексеевича
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
«Алгоритмы расчета фазовых диаграмм флюидов на основе численной оптимизации»
Специальность 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета 24.1.193.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2).
Протокол № 17 от 20 декабря 2023 г.

Диссертационный совет 24.1.193.01 (Д 002.110.02) утвержден Приказом Министерства образования и науки РФ от 26.01.2022 г. № 86/нк в составе 31 человека. На заседании присутствуют 23 члена совета, из них 13 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 8 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Дополнительно введены на разовую защиту 0 человек. Кворум имеется.

Председатель – заместитель председателя диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02) д.ф.-м.н., профессор Андреев Николай Евгеньевич.

Ученый секретарь – ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02) к.ф.-м.н. Тимофеев Алексей Владимирович.

1.	Петров О.Ф.	д.ф.-м.н., проф., академик РАН	1.3.9, техн. науки	подключен
2.	Андреев Н.Е.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.9, физ.-мат. науки	присутствует
3.	Храпак А.Г.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.14, физ.-мат. науки	присутствует
4.	Тимофеев А.В.	к.ф.-м.н.	1.3.9, техн. науки	присутствует
5.	Агранат М.Б.	д.ф.-м.н.	1.3.14, техн. науки	отсутствует
6.	Амиров Р.Х.	д.ф.-м.н., с.н.с.	1.3.9, физ.-мат. науки	подключен
7.	Беляев И.А.	к.т.н.	1.3.14, физ.-мат. науки	присутствует
8.	Вараксин А.Ю.	чл.-корр. РАН, д.ф.- м.н., проф.	1.3.14, физ.-мат. науки	подключен
9.	Васильев М.М.	д.ф.-м.н.	1.3.9, физ.-мат. науки	присутствует
10.	Васильев М.Н.	д.т.н., проф.	1.3.14, техн. науки	присутствует
11.	Василяк Л.М.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.9, техн. науки	присутствует
12.	Гавриков А.В.	д.ф.-м.н., доцент	1.3.9, техн. науки	присутствует
13.	Голуб В.В.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.14, техн. науки	отсутствует
14.	Грязнов В.К.	д.ф.-м.н.	1.3.14, физ.-мат. науки	подключен
15.	Дьячков Л.Г.	д.ф.-м.н.	1.3.9, техн. науки	присутствует
16.	Еремин А.В.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.14, физ.-мат.науки	присутствует

17.	Зейгарник Ю.А.	д.т.н., с.н.с	1.3.14, техн. науки	отсутствует
18.	Зеленер Б.Б.	д.ф.-м.н.	1.3.9, техн. науки	подключен
19.	Зобнин А.В.	д.ф.-м.н	1.3.9, техн. науки	присутствует
20.	Иосилевский И.Л.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.9, физ.-мат. науки	подключен
21.	Киверин А.Д.	д.ф.-м.н.	1.3.14, физ.-мат. науки	присутствует
22.	Лагарьков А.Н.	д.ф.-м.н., проф., академик РАН	1.3.9, физ.-мат. науки	отсутствует
23.	Левашов П.Р.	д.ф.-м.н.	1.3.14, физ.-мат. науки	отсутствует
24.	Ломоносов И.В.	чл.-корр. РАН, д.ф.- м.н., проф.	1.3.14, техн. науки	отсутствует
25.	Медин С.А.	д.т.н., проф.	1.3.14, техн. науки	подключен
26.	Норман Г.Э.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.9, физ.-мат. науки	подключен
27.	Пикуз С.А.	к.ф.-м.н.	1.3.9, физ.-мат. науки	отсутствует
28.	Савватимский А.И.	д.т.н.	1.3.14, техн. науки	подключен
29.	Стегайлов В.В.	д.ф.-м.н., доцент	1.3.9, техн. науки	присутствует
30.	Филиппов А.В.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.9, физ.-мат. науки	присутствует
31.	Яньков Г.Г.	д.т.н., с.н.с.	1.3.14, физ.-мат. науки	отсутствует

ПОВЕСТКА ДНЯ

На повестке дня защита диссертации инженера-исследователя лаборатории 14.2 – теории конденсированного состояния отдела 14 – многомасштабного суперкомпьютерного моделирования Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН) Захарова Степана Алексеевича на тему «Алгоритмы расчета фазовых диаграмм флюидов на основе численной оптимизации». Диссертация впервые представлена на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Диссертация выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» на кафедре физики высокотемпературных процессов, базирующейся в ОИВТ РАН (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, jiht.ru).

Научный руководитель:

Писарев Василий Вячеславович – к.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник международной лаборатории суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», г. Москва.

Официальные оппоненты:

Александров Игорь Станиславович – гражданин РФ, д.т.н., доцент, директор института морских технологий, энергетики и строительства Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Калининградский государственный технический университет» (КГТУ; Россия, 236022, Северо-Западный федеральный округ, Калининградская обл., г. Калининград, Советский проспект, д. 1.).

Хакимова Людмила Асановна – гражданка РФ, Ph.D Сколтеха, старший научный сотрудник Центра добычи и переработки углеводородов Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий» (Сколтех; Россия, 121205, г. Москва, территория инновационного центра «Сколково», Большой бульвар, д. 30 стр.1).

Ведущая организация:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (НИЯУ МИФИ; Россия, 115409, г. Москва, Каширское шоссе, д. 31).

На заседании присутствуют официальные оппоненты д.т.н., директор института Александров И.С. и Ph.D Сколтеха, старший научный сотрудник Хакимова Л.А., научный руководитель Захарова С.А. к.ф.-м.н. Писарев В.В.

СТЕНОГРАММА

Председатель

Уважаемые члены совета и все присутствующие, здравствуйте. У нас сегодня предпоследний в этом году совет, и мы должны сегодня заслушать, принять две защиты. Первая – Захарова Степана Алексеевича. Все документы есть, и с ними сейчас Алексей Владимирович нас ознакомит.

Ученый секретарь

(Зачитывает данные о соискателе по материалам личного дела и сообщает о соответствии представленных документов требованиям ВАК Министерства образования и науки РФ.)

Председатель

Спасибо, Алексей Владимирович. Если вопросов нет, то мы переходим к первой части нашей защиты. Степан Алексеевич, пожалуйста, вам 20 минут для представления результатов.

Захаров С.А.

(Захаров С.А. выступает с докладом по диссертационной работе. Выступление не стенографируется, доклад Захарова С.А. имеется в деле.)

Председатель

Спасибо, Степан Алексеевич. Пожалуйста, время для вопросов к соискателю. Кто хочет что-нибудь спросить? Пожалуйста, Алексей Дмитриевич.

Киверин А.Д.

У меня вопрос больше, наверно, по применению ваших уравнений состояния. Все-таки вы говорите о фазовом расслоении, а при гидродинамических расчетах уже на масштабах поры вы будете задавать несколько фаз, правильно? Или все-таки это как единое целое у вас будет, сплошная среда?

Захаров С.А.

На уровне пор это все-таки рассматривается как сплошная среда в итоге.

Киверин А.Д.

То есть там расслоение и разделение фаз не предусматриваются?

Захаров С.А.

Да, здесь я говорю про фазовое расслоение в том смысле, что это этап расчета двухфазного равновесия. Как они локализованы, алгоритм не отвечает.

Киверин А.Д.

А какие-то уже гидродинамические расчеты проводились с вашими методами?

Захаров С.А.

Да, я пробовал проводить их, но там такие пока результаты... Не очень интересные.

Киверин А.Д.

А в других научных группах?

Захаров С.А.

В других научных группах применяется изохорная постановка, которую я решаю. Там рассматривается обычно закачка чего-нибудь, вытесняя вещество из пласта.

Киверин А.Д.

Ну так, в качестве ликбеза, там результаты уравнения Дарси и вот таким уравнениям состояния соответствуют экспериментальным выводам?

Захаров С.А.

Из тех работ, что я видел, там не было сравнения с экспериментом. То есть они тестировали сами расчеты: насколько они сходятся, насколько им можно верить. Без сравнения с экспериментом.

Киверин А.Д.

Хорошо, спасибо.

Председатель

Спасибо, еще вопросы, пожалуйста. Это надо понимать, что всем все ясно? Похоже, что полная ясность у нас есть. Ну, тогда, значит, у нас может выступить руководитель...

Амиров Р.Х.

Можно еще один вопрос задать?

Председатель

Пожалуйста, да.

Амиров Р.Х.

Да, это Амиров. Скажите вот дилетанту, я не специалист в области термодинамики такой. Какие расчеты, на каких компьютерах? Ну, вот трудоемкость какая это? Собственно говоря, вот то, что вы показывали, скажем, там, для бинарных систем получить фазовую диаграмму. На чем считали, как это долго, чтобы получить вот эти вот расчетные данные?

Захаров С.А.

Сейчас покажу. Спасибо за вопрос.

Проводились параллельные расчеты, чтобы посмотреть на фазовую диаграмму, как долго она рассчитывается. Типичное время такое. Когда расчет идет по кубическому уравнению состояния, то это меньше двух миллисекунд занимает. Здесь общее время расчета 80 секунд, и там 40 тысяч расчетов: это вся диаграмма. Для SAFT-уравнения, поскольку оно алгебраически более сложное, в пять раз дольше считать. Такие времена позволяют использовать разработанные методы и ПО непосредственно в композиционной модели фильтрации.

На все ответил? Или что-то еще?

Амиров Р.Х.

То есть это можно что?.. На персональном компьютере считать или все-таки?..

Захаров С.А.

Фазовую диаграмму можно считать на персональном компьютере, да.

Амиров Р.Х.

Спасибо.

Захаров С.А.

Здесь время на процессорах ЕРУС, которые, по-моему, на Фишере. На Фишере эти расчеты сделаны, которые на слайде.

Амиров Р.Х.

Спасибо.

Председатель

Еще вопросы есть? В зале или дистанционно? Мы не видим. Спасибо. Тогда слово предоставляется руководителю. Василий Вячеславович, пожалуйста, расскажите нам о соискателе.

Писарев В.В.

(Выступление научного руководителя не стенографируется. Положительный отзыв Писарева В.В. имеется в деле.)

Председатель

Спасибо, Василий Вячеславович.

(Ученому секретарю.) Наверное, вы зачитаете тогда отзывы?

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, в деле имеется заключение двух организаций: МФТИ и ОИВТ, сделанные на базе семинаров. Если позволите, я не буду зачитывать заключения полностью, так как мы уже прослушали работу и с основной частью, сутью работы уже познакомились, и с описанием соискателя, с апробацией и так далее. Ограничусь только на том, что заключение МФТИ рекомендует к защите по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. В заключении семинара ОИВТ рекомендация точно такая же: тоже рекомендуется к защите и рекомендуются официальные оппоненты и ведущая организация, которые совпадают с назначенными.

(Отзыв ведущей организации.) Далее в деле имеется отзыв ведущей организации. В качестве ведущей организации выступил Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ. Отзыв подписали Сергей Александрович Губин доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедры химической физики института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ; директор института лазерных и плазменных технологий, и председатель совета по аттестации и подготовке научных кадров, доктор физико-математических наук, профессор Кудряшов. Если позволите, я опять же пропущу описание, очень подробное описание работы по главам, достаточно внимательное, и остановлюсь только на замечаниях.

По содержанию работы имеются следующие замечания. Первое. В заключении пункта 3 написано, что разработанные в диссертации методы и алгоритмы работают с произвольным уравнением состояния без указания конкретных типов уравнений состояния. Работоспособность разработанных методов и алгоритмов не подтверждена для потенциальных уравнений типа Ленарда-Джонса, Морзе и уравнений состояния Грюнайзена. Второе замечание. Нет информации о проверке и применимости алгоритма расчета фазовых диаграмм для уравнения состояния, дающих разрывы термодинамических потенциалов или их производных, или имеющих другие запрещенные области на термодинамических диаграммах. Третье замечание. Выбор изохорно-изотермической задачи для расчетов фазового равновесия недостаточно обоснован для моделирования фильтрационных течений в пористой среде применительно к добыче углеводородов из природных месторождений. Здесь дается ссылка на диссертацию Афанасьева 2016 года. Четвертое замечание. В главе 5 не конкретизированы условия, по

которым оценивались критические параметры системы. Пятое замечание. В диссертации есть опечатки, например, на странице 8, 93. Используются некоторые термины, отличающиеся от общепринятых, например, «сверхсжимаемость» (страница 34, 54, 55, 78) вместо фактора сжимаемости, «размер фазы» вместо максимальной плотности вещества, разрешенной уравнением состояния.

Отмеченные замечания не влияют на общую положительную оценку работы, рассматриваемой в диссертации. Полученные в ней результаты и выводы обоснованы и достоверны, что подтверждается сравнением полученных результатов с массивом доступных экспериментальных данных и с результатами аналогичных расчетов по другим вычислительным моделям, зарекомендованным в научном сообществе. Личный вклад Захарова С.А. является определяющим. Все основные результаты диссертации получены лично автором. Автореферат, диссертация и опубликованные работы в полной мере отражают содержание.

Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным в пункте 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней. Соответствует паспорту научной специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Захаров Степан Алексеевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Последняя часть, она повторяется и в других отзывах, они тоже положительные, если позволите, я ее пропущу.

В деле имеется два отзыва на автореферат, оба положительные, с замечаниями.

(Первый отзыв на автореферат.) Первый отзыв получен от кандидата физико-математических наук, ведущего научного сотрудника лаборатории фундаментальных проблем нефтегазовой геофизики и геофизического мониторинга Института физики Земли Российской академии наук Герке Кирилла Мироновича. Переходим к замечаниям. В качестве замечаний можно отметить, что большинство переменных в тексте автореферата не описано, что затрудняет его чтение, хотя в тексте диссертации все расшифровки присутствуют. Указанные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общей значимости диссертационной работы. На этом замечание по этому отзыву закончено.

(Второй отзыв на автореферат.) Переходим к следующему отзыву. Отзыв получен от начальника отдела компьютерного материаловедения ВНИИА имени Духова кандидата физико-математических наук Алексея Витальевича Янилкина. Автореферат позволяет получить достаточно полное представление. Имеются некоторые замечания. Первое. Обсуждение алгоритма расчета двухфазного равновесия в VT постановке приведено очень кратко и сопровождается большим количеством ссылок. Это усложняет понимание навязанного алгоритма и роль автора в его разработке. Второе замечание. Отсутствуют верификационные тесты алгоритма расчета двухфазного равновесия в VT постановке и его программной реализации. Указанные замечания носят рекомендательный характер и не снижают значимости дистанционной работы.

На этом отзывы закончены.

Председатель

Спасибо, Алексей Владимирович.

Пожалуйста, Степан Алексеевич, вам время для ответа.

Захаров С.А.

Давайте я начну с замечаний ведущей организации.

(Первое замечание.) Первое. Я указал в заключении, неаккуратно указал фразу «произвольное уравнение состояния». Тем не менее, само понятие уравнения состояния имеет более широкий смысл. Сейчас я поясню, с какими уравнениями состояния можно

использовать разработанный метод и алгоритм. Можно их использовать, чтобы производить расчеты по уравнениям состояния для флюидов, то есть для газа или жидкости, для которых возможен вывод свободной энергии Гельмгольца. Собственно, в работе рассматривалось два класса: это термическое и каноническое уравнение состояния. В чистом виде использовать потенциал типа Ленарда-Джонса или Морзе не получится, но можно использовать статистическую теорию ассоциированных жидкостей как инструмент для вывода уравнения состояния, то есть для вывода, по сути, свободной энергии Гельмгольца фазы. Например, есть уравнение SAFT-VR-Mie, где парное взаимодействие описывается потенциалом Ми. Это обобщение потенциала Ленарда-Джонса. Уравнение Грюнайзена использовать не получится, поскольку подход предполагает, что химпотенциал состоит из вклада идеального газа и неидеальной поправки, что в твердом теле неприменимо.

(Второе замечание.) Второе замечание тоже про уравнение состояния. Тут я скажу, что, вообще говоря, запрещенный... В целом я согласен, конечно, с замечанием. Но запрещенные области все-таки имеются в уравнениях состояния, которые используются в диссертации. Например, в кубическом уравнении есть ограничение на максимальную плотность. И в текущем виде, также поясню, что алгоритм не может применяться к уравнениям состояния, у которых, так скажем, есть ветви для фаз именно в NVT переменных. Кубическое уравнение состояния в изобарной задаче тоже имеет ветви, где надо выбирать корни, скажем, по энергии Гиббса. Но в изохорной задаче в кубическом уравнении таких ветвей нет, и эта проблема не возникает.

(Третье замечание.) Третье замечание касается выбора переменных для решения композиционной модели фильтрации. В диссертации Афанасьева рассматривается случай неизотермической задачи фильтрации. В этом случае, собственно, и изохорно-изотермические переменные, и изобарно-изотермические не применяются, а применяются изоэнтальпийные, которые, собственно, и у Афанасьева в диссертации, и в других работах об этом говорится. Кроме того, в диссертации Афанасьева исследуется все-таки течение слабосжимаемых сред, а в диссертации предполагается применять методы к расчетам газовых конденсатов, которые уже слабосжимаемой средой не назовешь.

(Четвертое замечание.) В главе 5 не конкретизированы условия, по которым оценивались критические параметры системы. Ну да, я согласен. Крит. точка определялась по равенству плотностей состава в фаз, пятая глава посвящена двухфазному равновесию.

(Пятое замечание.) Есть опечатки, да. Я согласен, что вместо термина «сверхсжимаемость» стоило использовать «фактор сжимаемости». И «размер фазы»... Стоило говорить про максимальную плотность вещества, которая разрешена уравнением состояния.

(Отзыв от ВНИИА им. Н.Л. Духова.) Отзыв от организации ВНИИА. «Обсуждение алгоритма расчета двухфазного равновесия приведено очень кратко и сопровождается большим количеством ссылок. Это усложняет понимание новизны и роль автора в его разработке.» Давайте я поясню новизну и мою роль. Расчет равновесия состоит из двух стадий. Это проверка стабильности и расслоение. И для проверки стабильности было использовано сочетание замены переменных и численного метода. Получается, что сама замена переменных уже известна, но выбор численного метода как бы раскрывает полный потенциал этой замены переменных, что позволяет создать быстрый алгоритм решения проверки стабильности.

Потом было проверено, что можно ли применять этот метод оптимизации BFGS для решения уже задачи полностью, с расслоением. В этой задаче нет хорошей замены переменных, она еще не найдена, поэтому были сомнения, будет он там работать или нет. Оказалось, что он работает с небольшим числом отказов. И поскольку у нас обычно есть два этапа, первый решается обычно как решение нелинейной системы, то есть на стационарную точку потенциала свободной энергии Гельмгольца. Если мы решаем как

нелинейную систему, то это другая задача, другой метод решения, а в этой работе обе стадии решаются как минимизация, и получилось, что это унифицирует решение. Можно использовать один и тот же метод, чтобы решать обе задачи. Это привлекательно с инженерной точки зрения.

Второе замечание от ВНИИА им. Духова, что нет верификационных тестов алгоритма расчета в VT постановке о его программной реализации. Да, согласен, что в тексте диссертации и в автореферате этого нет. Но численный метод, который на основе BFGS, тестировался на функциях типа, таких, стандартных функций математических, например, на функции Розенброка. И, что касается верификации, значит, верификация это либо эталонные расчеты в сравнении с некоторыми эталонными программами, либо аналитическое решение. Что касается эталонных расчетов, в докладе, значит, когда я сравнивал две постановки задач, я говорил, что свободного программного обеспечения для изохорной задачи не существует. То есть эталонного ПО, чтобы решить изохорную задачу, нет. Тем не менее, можно было бы провести перекрестные расчеты с изобарными программами, потому что они оттестированы. В этом случае расчет состоит из того, что мы решаем задачу моим методом, затем мы смотрим какое давление в фазах и решаем изобарную задачу. А в конце сравниваем, какие мы составы получили по изохорному методу и по изобарному. Такое можно было бы сделать. И что касается аналитического решения, мне стоило попробовать сделать расчет с уравнением ван дер Вальса. Там есть параметризация Лекнера. Для чистого вещества можно получить бинадаль. Я попробую сравниться.

(Отзыв от ИФЗ им. О.Ю. Шмидта РАН.) Ну и с ИФЗ РАН здесь про то, что большинство переменных не описаны в автореферате, это затрудняет чтение. Ну, с этим замечанием я полностью согласен. Стоило провести расшифровки и в автореферате тоже.

Председатель

Спасибо, Степан Алексеевич.

Мы переходим тогда к заслушиванию мнений оппонентов. И первый оппонент у нас дистанционно присутствует. Прошу тогда выступить Игоря Станиславовича Александрова. Как у нас включение будет происходить?

Александров И.С.

Здравствуйте, меня слышно?

Председатель

Да.

Александров И.С.

Хорошо.

Здравствуйте, уважаемые председатели, члены совета, коллеги, присутствующие. Отзыв надо полностью засчитывать, или я могу кратко и замечания?

Председатель

Извините, еще раз, в чем вопрос?

Александров И.С.

Мне полностью отзыв зачитывать или я могу достаточно кратко изложить?

Председатель

Нет-нет, я думаю, что нет нужды зачитывать целиком отзыв, поскольку мы работу заслушали, поэтому, пожалуйста, сконцентрируйтесь на своих оценках, что нам наиболее интересно и важно.

Александров И.С.

Спасибо.

Я детально ознакомился с работой соискателя, и я считаю, что она выполнена на достаточно актуальную тему, очень актуальную. Это связано со следующим. Ну, как вы, наверное, прекрасно знаете, проблема поиска универсального уравнения состояния, она до сих пор существует. Также вот эти методы расчета термодинамических свойств и фазовых равновесий, в частности, они тоже уже, наверное, вековую историю имеют.

В чем состоит обычно проблема? Если мы берем уравнения, скажем так, более простой структуры, но имеющих более серьезную теоретическую основу, фундамент, конечно, они имеют хорошие прогнозные возможности, но точность расчета хромает. Если исследователи пытаются увеличить точность расчета этих уравнений и вносят какой-то элемент эмпирический, это усложняет структуру уравнений. Да, это повышает нам точность расчета термодинамических свойств, но в свою очередь приводит к определенным численным проблемам в процессе применения этих моделей для расчета фазовых равновесий и термодинамических свойств. Поэтому эти проблемы до сих пор существуют.

И я считаю, что соискатель сделал достаточно серьезный шаг в решении этих проблем. Посредством того, что он предложил эти расчеты, в частности фазовых равновесий, в такой вот постановке. Где достаточно просто, и, что самое главное, без обращения матрицы производных, как он здесь представляет, это все решать.

(Далее выступление официального оппонента не стенографируется. Положительный отзыв Александрова И.С. имеется в деле.)

(Общее заключение.) Работа выполнена на высоком уровне, является законченной квалификационной работой. Я считаю, что диссертация Захарова Степана Алексеевича представляет собой законченную работу, которая удовлетворяет всем критериям, установленным в положении о порядке присуждения ученых степеней ВАК № 842 от 24 сентября 2013 года. А ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Председатель

Спасибо, Игорь Станиславович.

Пожалуйста, Степан Алексеевич. Время для ответа на замечания рецензента.

Захаров С.А.

Я могу на слайды переключиться?

Председатель

Да.

Помогите, пожалуйста, Алексей Владимирович.

Захаров С.А.

(Первое замечание.) Первый вопрос касался того, можно ли с помощью этого метода определять критическую точку, крикондентерму и криконденбару, и если да, то насколько эффективно. У меня был слайд, где я показывал, что это действительно возможно. Производится сначала серия расчетов изохорно-изотермических, получаем фазовую диаграмму, и из этого понятно, где находится бинодаль. Положение критической точки можно определять из равенства плотностей и составов фаз, либо по удовлетворению классических условий на крит. точку. Также на бинодали находятся крикондентерма и криконденбара. Температуру мы можем просто посмотреть максимальную на бинодали, это и есть крикондентерма. А давление на бинодали мы

можем посчитать. Нам известно состояние фаз, то есть NVT в каждой фазе. И давление можно посчитать явно, найти, где оно максимально. Это будет критконденбара.

Что касается эффективности, то есть точности определения... В рамках этого метода, это все-таки оценки точек. В случае криткондентермы довольно все просто. Мы можем мельчить сетку по температуре, потому что температура – это параметр задачи, и насколько у нас есть желание ее мельчить, с той точностью мы определим криткондентерму. В случае критконденбары шаг по давлению не задать, потому что давление не является параметром задачи, но можно варьировать мелкости по температуре и по концентрации, постфактум проверяя удовлетворилось ли точность, желаемая для критконденбары. По аналогичному способу, как для критконденбары, можно определять критическую точку. Единственное, для критической точки существуют более эффективные методы и алгоритмы, которые учитывают, например, в явном виде классические условия для критической точки.

(Второе замечание.) Второй вопрос про контактирование углеводородных смесей с водой и насколько применим алгоритм для систем, содержащих воду. Я, наверное, лучше скажу, какие есть ограничения для предлагаемых методов. Во-первых, метод предполагает, что каждый компонент присутствует в каждой фазе. Например, если рассматривать систему вода и тяжелая нефть, то они друг в друге нерастворимы, и для такой системы расчеты не сделать. Кроме того, поскольку это речь про воду, наверняка для нее есть специфические для воды уравнения состояния, а здесь подход требует, чтобы все компоненты, все фазы описывались одним и тем же уравнением состояния.

(Третье замечание.) Следующий вопрос. Возникает вопрос, как соотносится точность расчета по кубическим и SAFT-моделям на основе предлагаемого алгоритма с точностью расчета по модели GERG-2004 и возможно ли использование предложенного алгоритма и ПО применительно к многоконстантным уравнениям состояния.

Алгоритм можно применять к многоконстантным уравнениям состояния. Когда программное обеспечение проектировалось, мы учитывали, что уравнения состояния с точки зрения программирования как отдельные модули подключаются. В том числе с многоконстантными уравнениями состояния мы проводили расчет с modified Benedict-Webb-Rubin уравнением. Оно обычно для конденсированной фазы используется, для жидкости. Также расчеты с GERG-2004 тоже можно проводить, потому что модель GERG определяет свободную энергию Гельмгольца. И для ПО есть планы по интеграции этого алгоритма расчета с библиотекой Clapeyron, которая содержит несколько десятков уравнений состояния, что открывает возможность считать и с ними. В том числе там есть GERG-2008, уже созданный.

Ну а что касается сверки точности, как соотносится точность по этим уравнениям с GERG. Я сейчас ответить на этот вопрос не могу, но сверку точности уже можно на разработанном ПО провести. Вот этих двух уравнениях состояний из диссертации и модели GERG.

(Четвертое замечание.) Четвертое замечание. «Можно ли производить расчеты фазовых равновесий для калорических свойств? Как это повлияет на производительность программного обеспечения?» Ответ такой. Когда мы посчитали фазовое равновесие, нам становятся известны и моли, и объемы, и температуры каждой фазы. В свою очередь, теплоемкость, энтальпия и скорость звука выражаются через свободную энергию Гельмгольца и через ее производные. Саму энергию мы знаем из уравнения состояния, а производные можем посчитать автоматическим дифференцированием. Проводится расчет фазового равновесия, а потом подсчитываются калорические свойства. Алгоритм их позволяет посчитать. Ну и поскольку расчет калорических свойств, в принципе даже и давление также, рассчитывается постфактум, то расчет свойств калорических не влияет на эффективность алгоритма никак. То есть, мы можем после расчета фазового равновесия что хотим посчитать, на эффективность расчета фазового равновесия это не влияет.

(Пятое замечание.) Ну и пятое замечание. Да, я полностью согласен, что стоило использовать понятие неопределенности по ГОСТу.

Вот мой ответ.

Председатель

Спасибо, Степан Алексеевич.

У нас есть возможность лично ознакомиться с заключением официального оппонента второго. И, пожалуйста, Хакимова Людмила Асановна, если можно, тоже сосредоточьтесь на вашей оценке работы, поскольку мы в целом уже ознакомились.

Хакимова Л.А.

(Выступление официального оппонента не стенографируется. Положительный отзыв Хакимовой Л.А. имеется в деле.)

Результаты и выводы (*прим., работы*) обоснованы и достоверны. Личный вклад автора являются определяющим, и все результаты получены именно Степаном Алексеевичем. И содержание опубликованных работ, и автореферата в полной мере отражают содержание диссертации.

Диссертационная работа представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая удовлетворяет всем требованиям, установленным в пункте 9 положения о порядке присуждения ученых степеней ВАК 842 от 24 сентября 2013 года. Захаров Степан Алексеевич заслуживает присуждение ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Председатель

Спасибо, Людмила Асановна.

Пожалуйста, Степан Алексеевич, ответьте на те замечания и пожелания, которые были в отзыве оппонента.

Захаров С.А

Да, сейчас отвечу.

(Первое замечание.) Первое замечание – это отсутствие сравнения с экспериментальными данными в главе 5. В главе 5 рассматриваются... Вот у меня и в докладе тоже так было про фазовое равновесие, что сначала идут расчеты, так скажем, с синтетическими смесями и синтетическими составами, которые есть в литературе по вычислительной термодинамике. И в диссертации, так скажем, расчеты с эталонными составами смесей остались в пятой главе, но там экспериментальных данных по ним нет. А для тех смесей, для которых есть экспериментальные данные, были вынесены в отдельную главу, чтобы было удобнее читать.

И вторая часть замечания – это «есть нарушение сортировки фаз для четырехкомпонентной смеси при некоторых диапазонах давления». Да, есть нарушение сортировки. Сортировка, во-первых, скажу, что она на сам алгоритм не влияет. Внутри алгоритм не знает, какие моли про газ, а какие про жидкость. Он просто знает, что это две фазы. То есть на сам алгоритм сортировка никак не влияет. Это уже постобработка результатов. И я сортировку проводил по коэффициенту, по фактору сжимаемости. Это не всегда работало. Стоило просто сортировать по плотностям фаз.

(Второе замечание.) Второе замечание. «Кроссвалидация результатов в главе 6 представлена только для бинарных смесей. Было бы преимуществом рассмотреть многокомпонентные системы, которые включают углекислый газ. В случае многокомпонентных систем возможно образование многофазного равновесия, где более двух фаз. Позволяет ли функционал разработанного алгоритма адаптацию подобного поведения смесей?» Первая часть то, что касается... Согласен с замечанием, стоило

рассмотреть систему с числом компонентов более двух. Для них есть все-таки экспериментальные данные, хотя бы диаграммы давление-температура, или есть тернарные диаграммы для трехкомпонентных смесей. Это стоило посмотреть.

И «можно ли адаптировать алгоритм на многофазные расчеты»? Ответ – да, его можно адаптировать, но здесь применяется классический подход. У нас есть проверка устойчивости, мы проводим полностью двухфазный расчет, проверяем устойчивость каждой фазы, если хотя бы одна неустойчива, мы запускаем трехфазный расчет. Такую модификацию в алгоритм можно внести и расширить на расчеты не только двухфазных, но и многофазных равновесий во флюидах.

Председатель

Спасибо, Степан Алексеевич.

Мы закончили с ознакомлением с выводами оппонентов, и у нас наступает время для дискуссии. Пожалуйста, есть ли желающие высказать мнения, соображения, рекомендации? Да, пожалуйста. Надо к микрофону, да.

Беляев И.А.

В одном из замечаний оппонента размещалась ссылка на ГОСТ по неопределенности измерений. Можно вывести?

Тут достаточно жесткая применена формулировка: «исключающая понятие погрешности в пользу понятия неопределенности». Но этот ГОСТ, он не содержит слова «исключает» и у него есть справочное приложение, в котором указано... Что в общем, если в него вчитаться, что характер рекомендательный носит. Не предлагается мгновенно перестать использовать термин «погрешность» и лишь более плавно переходить к более четкому определению. Жесткая формулировка не исходит из самого документа.

Спасибо.

Председатель

Спасибо большое. А вообще для пояснения, действительно речь идет только о словах или что-то за этим кроется наукодержущее?

Беляев И.А.

Дело в том, что в разных областях науки и техники сформировались разные подходы к оцениванию и к самим терминам погрешности и неопределенности. Собственно, вот этот ГОСТ 2017 года и предшествующие вообще всей серии ГОСТов 34100, они пытаются объединить терминологию отечественную и зарубежную и распространить ее на страны таможенного союза.

Поэтому это такая методическая, аккуратная работа, которая в целом правильная.

Но иногда, собственно, мы часто в своей работе сталкиваемся с критикой, почему вы называете погрешностью, а не неопределенностью. Собственно, эти понятия не взаимоисключающие, но последний ГОСТ более четко формулирует, как классифицировать разные источники, собственно, неопределенности.

Председатель

Так это перевод двух различных слов, я так понял?

Беляев И.А.

Там есть вопросы связанные терминологии без перевода и с переводом.

Председатель

Хорошо, спасибо за информацию. Я думаю, что это замечание не сильно скажется на результат голосования по диссертации.

Еще есть желание высказаться? Или все достаточно ясно? Как у нас там удаленные участники не желают высказаться? Но если нет, то зачем нам терять время?

По-моему, достаточно подробно и ясно была обсуждена работа, поэтому предлагаю тогда переходить к следующему этапу.

И заключительное слово соискателя, пожалуйста.

Захаров С.А.

Я не готовил заключительное слово. Ну, я прежде всего... Поблагодарю родителей, что поступил в итоге на Физтех, отучился, потом встретил Василия Вячеславовича Писарева, попал в ИВТАН, попал в лабораторию. У нас очень хороший, дружный коллектив, у которого я многому научился и который мне помог дойти до такого этапа защиты диссертации. Поблагодарю и жену, и друзей, и всех, кто меня поддерживал на протяжении всех этих лет.

В дальнейшем я планирую продолжить работу по уточнению расчетов с SAFT уравнениями состояния, и очень хочется попробовать расчеты гидродинамические.

Вот, пожалуй, такое у меня заключительное слово.

Председатель

Спасибо, Степан Алексеевич.

Значит, мы переходим к заключительному этапу, который состоит в голосовании. Алексей Владимирович, ознакомьте, пожалуйста, с принципами.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, наше заседание проводится в комбинированном очно-дистанционном режиме. То есть голосование проводится с использованием телекоммуникационных сетей, а именно на сайте нашего института.

Прошу всех присутствующих очно или дистанционно присутствующих членов диссертационного совета войти под своим логином-паролем на сайт института. И с устройства либо своего, либо компьютера диссовета проголосовать в разделе «диссертационный совет – голосование».

(Проводится процедура тайного голосования.)

Дорогие коллеги, голосование закончено.

Всего присутствовало на заседании у нас 23 члена диссертационного совета, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации 8. Очно присутствовало 14, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации 4. Дистанционно присутствовало 9 членов диссертационного совета, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации 4.

Всего получено 23 голоса: за – 23, против – 0, недействительно – 0.

Председатель

Прошу утвердить результат голосования. Кто за? Есть ли кто-нибудь против или воздержался? Не видно. Дистанционно тоже против мы не слышали никого. Значит, таким образом единогласно утвержден протокол.

(Протокол счетной комиссии утвержден единогласно.)

Спасибо большое.

(Члены диссертационного совета обсуждают проект заключения.)

(Проект заключения принят единогласно.)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.193.01
(Д 002.110.02), СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, ПО
ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 20.12.2023 г. № 17

О присуждении Захарову Степану Алексеевичу, гражданину Российской Федерации ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Алгоритмы расчета фазовых диаграмм флюидов на основе численной оптимизации» по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника принята к защите 19.10.2023 г., (протокол заседания № 12) диссертационным советом 24.1.193.01 (Д 002.110.02), созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2, (495) 485-8345, jiht.ru), утвержденного Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель Захаров Степан Алексеевич 1996 года рождения, в 2019 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Работает в должности инженера-исследователя лаборатории 14.2 – теории конденсированного состояния отдела 14 – многомасштабного суперкомпьютерного моделирования Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

В 2023 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Диссертация выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» на кафедре физики высокотемпературных процессов, базирующейся в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенном институте высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник международной лаборатории суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики» Писарев Василий Вячеславович.

Официальные оппоненты:

– доктор технических наук, доцент, директор института морских технологий, энергетики и строительства Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Калининградский государственный технический университет» Александров Игорь Станиславович;

– Ph.D Сколтеха, старший научный сотрудник Центра добычи и переработки углеводородов Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий» Хакимова Людмила Асановна дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» в своем положительном заключении, составленном заведующим кафедрой химической физики института лазерных и плазменных технологий д.ф.-м.н. Губиным С.А. (утвержденном 4.12.2023 г. первым проректором д.ф.-м.н. Нагорновым О.В.), указала, что полученные в диссертационной работе методы решения задачи двухфазного равновесия позволяют, с одной стороны, проводить самостоятельные термодинамические исследования и, с другой стороны, решать термодинамическую подзадачу, возникающую в композиционной изотермической модели фильтрации. При этом полученные методы позволяют решать задачу двухфазного равновесия с использованием кубических уравнений состояния и уравнений состояния, основанных на статистической теории ассоциированных жидкостей (statistical associating fluid theory, SAFT).

Результаты работы могут быть использованы в научных и научно-образовательных центрах, а также в организациях, занимающихся моделированием свойств пластовых флюидов, в частности, в Объединенном институте высоких температур РАН, в Институте проблем нефти и газа РАН, в Российском государственном университете нефти и газа им. И.М. Губкина, в Сколковском институте науки и технологий, в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, в Калининградском государственном техническом университете, в Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ». Соискатель имеет 14 опубликованных работ по теме диссертации, из них 3 статьи в рецензируемых научных изданиях:

1. *Захаров С.А., Писарев В.В.* Проверка термодинамической устойчивости фазы на основе квазиньютоновской оптимизации без явного вычисления гессиана // Математическое моделирование. — 2023. — Т. 35, № 4. — С. 51
2. *Zakharov S.A., Pisarev V.V., Chudanov V.V.* One-dimensional continuum model of two-phase flows in porous media // Journal of Physics: Conference Series. — 2020. — Vol. 1556, no. 1. — P. 012064.
3. *Pisarev V.V., Zakharov S.A.* Comparison of forcefields for molecular dynamics simulations of hydrocarbon phase diagrams // Journal of Physics: Conference Series. — 2018. — Vol. 946. — P. 012100.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова»** (начальник отдела «Компьютерного материаловедения» к.ф.-м.н. Янилкин А.В.) – отзыв положительный, с замечаниями:

– Обсуждение алгоритма расчета двухфазного равновесия в изохорно-изотермической (VT) постановке приведено очень кратко и сопровождается большим количеством ссылок. Это усложняет понимание новизны алгоритма и роли автора в его разработке.

– Отсутствуют верификационные тесты алгоритма расчета двухфазного равновесия в VT постановке и его программной реализации.

2. **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики Земли им. О.Ю. Шмидта Российской академии наук** (ведущий научный сотрудник лаборатории фундаментальных проблем нефтегазовой геофизики и геофизического мониторинга (202) к.ф.-м.н. Герке Кирилл Миронович) – отзыв положительный, с замечанием:

– Большинство переменных в тексте автореферата не описаны, что затрудняет чтение (хотя в тексте диссертации все расшифровки присутствуют).

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

– д.т.н., доцент Александров И.С. является крупным специалистом в области моделирования фазового равновесия в многокомпонентных углеводородных системах и разработчиком широкодиапазонных фундаментальных уравнений состояния углеводородов нефти.

1. Григорьев Б.А., Александров И.С., Герасимов А.А. Методы моделирования термодинамических свойств природных углеводородных флюидов при планировании разработки нефтяных и газоконденсатных месторождений // Газовая промышленность. — 2021. — Т. 812, № 2. — С. 38–45.

2. Григорьев Б.А., Герасимов А.А., Александров И.С. Теплофизические свойства углеводородов нефти, газовых конденсатов, природного и сопутствующих газов: в 2-х т. // М.: Издательский дом МЭИ. — 2019. — ISBN 978-5-383-01322-9;

3. Grigoriev B., Alexandrov I., Gerasimov A. Application of multiparameter fundamental equations of state to predict the thermodynamic properties and phase equilibria of technological oil fractions // Fuel. — 2018. — Vol. 215. — P. 80–89.

– Ph.D Сколтех, Хакимова Л.А. является признанным специалистом в области моделирования многофазных течений в пористых средах, исследователем методов повышения нефтеотдачи в природных месторождения углеводородов, соавтором программного обеспечения для расчета фазовых равновесий.

1. Khakimova L., Popov E., Cheremisin A. Insights on In Situ Combustion Modeling Based on a Ramped Temperature Oxidation Experiment for Oil Sand Bitumen // Energies. — 2023. — Vol. 16, no. 18. — P. 6738.

2. Исаева А.В., Доброжанский В.А., Хакимова Л.А., Подладчиков Ю.Ю. Численное моделирование фазовых равновесий многокомпонентных углеводородных систем с помощью прямой минимизации энергии // Газовая промышленность. — Т. 812, № 2. — С. 20–29;

3. Khakimova L., Askarova A., Popov E., Gordon Moore R., Solovyev A., Simakov Ya., Afanasiev I., Belgrave J., Cheremisin A. High-pressure air injection laboratory-scale numerical models of oxidation experiments for Kirsanovskoye oil field // Journal of Petroleum Science and Engineering. — Vol. 108. — P. 106796.

– Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» является крупным научным центром, проводящим фундаментальные и прикладные исследования по нескольким направлениям, включая физику, химию и технологию материалов. На кафедре химической физики института лазерных и плазменных технологий НИЯУ МИФИ ведется разработка уравнений состояния веществ в конденсированных и газовых фазах, методов расчета фазовых и химических равновесий в многокомпонентных и многофазных системах.

1. Богданова Ю.А., Губин С.А. Исследование версий термодинамической теории возмущений для моделирования свойств бинарных смесей флюидов в широкой области давлений и температур // Теплофизика высоких температур. — 2022. — Т. 60, № 5. — С. 682–691.

2. Shargatov V.A., Gorkunov S.V., Il'ichev A.T. Stability of finite perturbations of the phase transition interface for one problem of water evaporation in a porous medium // Applied Mathematics and Computation. — 2020. — Vol. 378. — P. 125208.

3. Bogdanova Y.A., Gubin S.A., Maklashova I.V. Radial Distribution Functions for Molecules in the Universal Equation of State Model for Gaseous/ Fluid/ Condensed Systems // Physics of Atomic Nuclei. — 2019. — Vol. 82, № 11. — P. 1481–1485.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– программно реализован отказоустойчивый алгоритм расчета в изохорно-изотермической постановке неконгруэнтного фазового равновесия типа «пар-жидкость» в многокомпонентных смесях; метод решения задачи основан на минимизации свободной

энергии Гельмгольца; алгоритм и программное обеспечение применимы к расчетам двухфазных равновесий в флюидах, описываемых термическим или каноническим уравнением состояния;

– предложен вычислительно-эффективный метод проверки термодинамической устойчивости однофазного состояния многокомпонентного флюида, не требующий обращения матрицы вторых производных и хорошо масштабирующийся с числом компонентов;

– проведены расчеты фазового равновесия с использованием уравнения состояния Critical Point Perturbed Chain SAFT (CP-PC-SAFT) [I. Polishuk // Ind. Eng. Chem. Res., 2014, 36 (53), 14127-14141] для ряда содержащих алканы бинарных смесей, а также углеводородных многокомпонентных смесей, являющихся эталонными в литературе по вычислительной термодинамике;

– показано, что уравнение состояния CP-PC-SAFT точнее кубического уравнения состояния [A.I. Brusilovsky // SPE Reservoir Engineering, 1992, 7, 117-122] предсказывает равновесные составы и плотности фаз в бинарных системах в сравнении с массивом экспериментальных данных по фазовому равновесию;

– предложены рекомендации по подбору значений поправки к энергетическому параметру парного взаимодействия в уравнении состояния CP-PC-SAFT для надежного предсказания теплофизических свойств многокомпонентных систем в двухфазном равновесии.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

– развиты вычислительные методы решения задачи двухфазного равновесия в флюидах в изохорно-изотермической постановке, установлена применимость квазиньютоновских методов оптимизации к решаемой задаче и исследована их вычислительная устойчивость к входным данным.

– исследована точность уравнения состояния из семейства SAFT применительно к расчетам парожидкостных равновесий в многокомпонентных системах.

Значение полученных соискателем результатов **исследования для практики подтверждается** тем, что:

– предложенные методы расчета термодинамических свойств природных углеводородных систем могут использоваться на практике в специализированном программном обеспечении, применяемом в нефтегазовой отрасли для моделирования свойств пластовых флюидов;

– разработано программное обеспечение с открытым исходным кодом.

Результаты работы могут быть использованы в научных и научно-образовательных центрах, а также в организациях, занимающихся моделированием свойств пластовых флюидов, в частности, в Объединенном институте высоких температур РАН, в Институте проблем нефти и газа РАН, в Российском государственном университете нефти и газа им. И.М. Губкина, в Сколковском институте науки и технологий, в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, в Калининградском государственном техническом университете, в Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ».

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что полученные результаты подтверждаются использованием фундаментальных положений термодинамики многокомпонентных систем, сравнением результатов расчетов с надежными экспериментальными данными, полученными разными авторами и разными методами исследования, а также сопоставлением полученных результатов с результатами аналогичных исследований.

Личный вклад соискателя состоит в развитии конкретных направлений в рамках обозначенной тематики работы. Постановка математических задач, разработка алгоритмов их решения, реализация алгоритмов в виде программного обеспечения, проведение расчетов и сравнительный анализ с экспериментальными данными проходили при определяющем участии автора.

Апробация результатов исследования проводилась на 11 российских и международных конференциях. Основные публикации по выполненной работе также подготовлены при определяющем участии автора.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

Соискатель Захаров Степан Алексеевич ответил на заданные ему в ходе заседания вопросы, согласился с замечаниями и привел собственную аргументацию.

На заседании от 20.12.2023 г. диссертационный совет за решение научной задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний, принял решение присудить Захарову Степану Алексеевичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет 24.1.193.01 (Д 002.110.02) в количестве 23 человек, из них очно: 8 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 4 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, дистанционно: 5 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 4 доктора наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, участвовавших в заседании, из 31 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 23, против 0, недействительных бюллетеней - 0.

Зам. председателя диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)
д.ф.-м.н., профессор

Ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)
к.ф.-м.н.

Андреев Н.Е.

Тимофеев А.В.
20.12.2023 г.

