

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 Stanisлавович;

– 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

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 Сколтеха, 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 докторов 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.

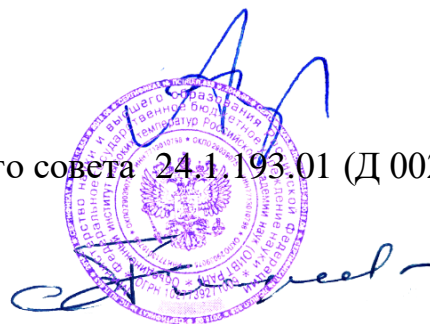
Зам. председателя диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)

д.ф.-м.н., профессор

Андреев Н.Е.

Ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)

к.ф.-м.н.



Тимофеев А.В.

20.12.2023г.