

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.428.02,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «УФИМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ НЕФТЯНОЙ
ТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ ПО ДИССЕРТАЦИИ НА
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 21 июня 2023 г. № 7

О присуждении Коледину Олегу Сергеевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата технических наук.

Диссертация «Прогнозирование характеристик детонации углеводородов моторных топлив» по специальности 2.6.12. – «Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ» принята к защите 18 апреля 2023 г., протокол № 3 диссертационным советом 24.2.428.02, созданным на базе ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет» Министерства науки и высшего образования РФ (450064, г. Уфа, ул. Космонавтов, д. 1, № 105/нк от 11 апреля 2012г.).

Соискатель Коледин Олег Сергеевич 1994 года рождения.

В 2018 г. окончил с отличием магистратуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный нефтяной технический университет» по направлению подготовки 18.04.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии».

В 2022 г. окончил очную аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский

государственный нефтяной технический университет» по направлению подготовки 18.06.01 «Химическая технология».

Работает в ПАО АНК «Башнефть» «Башнефть-Уфанефтехим» в должности инженера в Блоке главного технолога.

Диссертация выполнена на кафедре «Технология нефти и газа» ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет».

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Доломатов Михаил Юрьевич, ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет», профессор кафедры «Технология нефти и газа».

Официальные оппоненты:

Офицеров Евгений Николаевич – доктор химических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева», профессор кафедры «Химия и технология биомедицинских препаратов»;

Пивоварова Надежда Анатольевна – доктор технических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Астраханский государственный технический университет», заведующая кафедрой «Химическая технология переработки нефти и газа»

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук, г. Томск, в своем положительном заключении, подписанном заведующей лабораторией каталитической переработки легких углеводородов, кандидатом химических наук, доцентом Величкиной Людмилой Михайловной, указала, что автор диссертационной работы Коледин О.С. заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.6.12. – «Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ».

Соискатель имеет 28 опубликованных работ, все по теме диссертации, общим объемом 284 стр. (доля автора 74,3 стр.), в том числе 1 монография, общим объемом 164 стр. (доля автора 41 стр.), 4 статьи в журналах, индексируемых Scopus и Web of Science, общим объемом 25 стр. (доля автора 5,4 стр.), 7 статей в журналах, рекомендованных ВАК, общим объемом 45 стр. (доля автора 9 стр.), 2 статьи в журналах, не входящих в перечень ВАК, общим объемом 18 стр. (доля автора 3,9 стр.), 13 работ в материалах научных конференций, общим объемом 32 стр. (доля автора 15 стр.), 1 свидетельство о государственной регистрации программы ЭВМ и учебное пособие.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Долوماتов, М.Ю. Прогнозирование физико-химических свойств компонентов углеводородных систем с применением топологических дескрипторов. Монография. / М.Ю. Долوماتов, О.С. Коледин, Э.А. Ковалева, Т.М. Аубекеров. – Казань: Издательство ООО “Инновационно-издательский дом “Бутлеровское наследие”. 2021. – 164 с.
2. Коледин, О.С., Модель структура–свойство для прогноза октановых чисел циклоалканов по топологическим характеристикам молекул / О.С. Коледин, М.Ю. Долوماتов, Р.Ш. Япаев, А.Т. Гильмутдинов, М.Ф. Мухарметов, Р.В. Гарипов, М.Р. Валеев // *Журнал прикладной химии*. – 2022. – Т. 95, -№5. – С.666-671
3. Долوماتов, М.Ю. Модель QSPR для прогноза температур вспышки алканов по топологическим характеристикам молекул / М.Ю. Долوماتов, О.С. Коледин, К.Р. Ахтямова // *Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология*. – 2021. – Т.64, – №7. – С.96-103.
4. Коледин, О.С. Оценка октановых чисел бензиновых фракций с применением методов хромато-масс спектрометрии и “структура-свойство” / О.С. Коледин, М.Ю. Долманов, Э.А. Ковалева, А.Д. Бадикова, Р.В. Гарипов // *Бутлеровские сообщения*. – 2022. – Т.72, – №12. – С.51-59.

5. Доломатов, М.Ю. Прогноз октановых чисел замещенных алканов по топологическим характеристикам молекул / М.Ю. Доломатов, Э.А. Ковалева, О.С. Коледин, С.А. Арсланбекова // *Бутлеровские сообщения*. – 2019. – Т.59, – №7. – С.69-75.

На диссертацию и автореферат поступили положительные отзывы из следующих организаций:

1. ФГАОУ ВО Национальный исследовательский Томский политехнический университет, подписан профессором отделения химической инженерии д.т.н. Ивашкиной Е.Н. (Недостатком работы является отсутствие учета влияния гетероатомных соединений и присадок, которые есть в составе товарного бензина на их октановые числа.);

2. ООО «Уфимский научно-технический центр», подписан заместителем директора по научной работе к.х.н. Телиным А.Г. (В качестве недостатка следует отметить избыточное количество таблиц, часть из которых можно было вывести в приложения, а также незначительные стилистические ошибки.);

3. ФГБУН Федеральный исследовательский центр «Якутский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук», подписан ведущим научным сотрудником лаборатории техногенных газовых гидратов, д.х.н., доцентом Ивановой И.К. (1. Неясны ограничения модели, можно ли ее применять для товарных бензинов которые, как правило, содержат различные присадки? 2. Была ли проверена адекватность разработанных моделей для цетановых чисел, температур вспышек и других ФХС углеводородов на товарных дизельных фракциях?);

4. Институт нефтехимии и катализа Уфимского федерального исследовательского центра РАН подписан д.ф.-м.н., профессором, зав. лабораторией математической химии Губайдуллиным Иреком Марсовичем (Без замечаний.);

5. ФГБОУ ВО «Тюменский индустриальный университет» подписан к.т.н., доцентом, зав. кафедрой «Переработка нефти и газа» Мозыревым Андреем

Геннадиевичем и к.т.н., доцентом, доцентом кафедры “Переработка нефти и газа” Скворцовой Еленой Николаевной (В качестве замечаний хотелось бы отметить, что не совсем понятно, каким образом будет осуществляться корректировка качества получаемых бензиновых фракций на технологических потоках.);

6. АО “Средневолжский научно-исследовательский институт по нефтепереработке” подписан д.т.н., начальником отдела оценки качества нефти и нефтепродуктов- испытательного центра “Нефть, нефтепродукты и химреагенты” Занозиной Ириной Интерновной (Замечания по оформлению и представлению материала в автореферате отсутствуют. Однако, замечу, что в технологических рекомендациях (стр.19 автореферата) О.С. Коледин, говоря об «отечественной хроматографической технике», не приводит ни одного наименования из российских производителей поточных хроматографов. Предполагаю, что в самой диссертации это отражено, поскольку вопрос импортозамещения в настоящее время остро касается и аналитического приборостроения. Данное замечание не носит принципиального характера и не умаляет достоинств проведенного исследования.);

7. ФГБОУ ВО “Уфимский университет науки и технологий” подписан д.т.н., профессором, и.о. зав. кафедрой управления качеством Галиахметовым Раилом Нигаматьяновичем (Без замечаний.).

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что они являются компетентными в данной отрасли науки учеными, имеющими публикации в сфере исследований соискателя, ведущая организация широко известна своими достижениями в области химической технологии и энерго- и ресурсосбережения.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана оригинальная методика контроля октановых чисел бензинов на технологических потоках с применением новых моделей для прогноза октановых чисел по методу «структура-свойство» (QSPR);

предложен нетрадиционный подход, включающий хроматографическое определение состава бензиновых фракций на технологических потоках, расчет октановых чисел по модели «структура-свойство» (QSPR) и расчет дипольных моментов;

доказано наличие неизвестных ранее закономерностей «структура-свойство» для прогноза октановых чисел углеводородов ряда алканов, алкенов, циклоалканов, аренов, цетановых чисел, температур вспышек, критических параметров и коэффициентов теплопроводности углеводородов;

введены концепции о разделении топологических дескрипторов, характеризующих способность моторных топлив к воспламенению и детонации на энергетические и структурные.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказаны методики прогнозирования октановых чисел моторных топлив на основе сочетания эксперимента и расчета методом «структура-свойство» (QSPR) адекватно характеризующие физико-химические свойства – характеристики детонации и воспламеняемости. Доказана возможность прогнозирования октановых чисел бензиновых фракций с учетом их неидеальности через хроматографический анализ и учет диполь-дипольного взаимодействия молекул компонентов;

применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использован метод «структура-свойство» для построения моделей прогнозирования октановых чисел и других физико-химических свойств. Метод хроматографии и хромато-масс-спектрометрии для экспериментального определения составов бензиновых фракций. Метод определения октановых чисел бензиновых фракций на установке УИТ-85. Применены методы теории графов, многофакторного регрессионного анализа, линейной алгебры, молекулярной топологии, квантовой химии, статистической обработки данных;

изложены доказательства адекватности прогноза характеристик детонации и воспламеняемости индивидуальных углеводородов: октановых чисел, цетановых чисел, температур вспышки, критических температур и давлений, теплопроводностей с применением методов математической статистики;

раскрыты недостатки предложенных ранее моделей «структура-свойство» (QSPR) для прогнозирования октановых чисел моторных топлив в углеводородных смесях;

изучены связи октановых чисел, цетановых чисел, температур вспышки и других физико-химических свойств с топологическими дескрипторами;

проведена модернизация существующих способов определения октановых чисел на технологических потоках путем сочетания моделей «структура-свойство» (QSPR) с методами хроматографии.

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

разработаны и внедрены (указать степень внедрения, формы апробации)

Внедрены математические модели для прогноза характеристик детонации индивидуальных углеводородов и бензинов, “Программа для расчета собственных значений и соответствующих дескрипторов молекулярных графов” и “Программа для расчёта октановых чисел исследовательским методом в многокомпонентных углеводородных средах” применяются студентами в учебном процессе по дисциплине «Моделирование химико-технологических процессов с участием углерода», курсовом и дипломном проектировании для направления подготовки 18.04.01 «Химическая технология» магистерская программа: Химия и технология функциональных углеродных материалов;

определены перспективы полученных в ходе экспериментов знаний и выводов, озвученных в диссертации, как основы для дальнейших научных исследований и разработок регрессионных моделей для адекватного прогноза других физико-химических свойств углеводородов и разработок методик

технологического контроля ФХС углеводородных фракций на технологических потоках установок НПЗ;

создана система технического контроля октановых чисел бензиновых фракций на технологических потоках установок НПЗ;

представлены технологические рекомендации по аппаратуре и программному обеспечению технического контроля качества бензиновых фракций процессов каталитического риформинга, изомеризации, каталитического крекинга.

Другие научные достижения, свидетельствующие о научной новизне и значимости полученных результатов

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-38-90085 «Прогнозирование физико-химических свойств углеводородных и гетероатомных компонентов нефтяных систем и моторных топлив». Монография по материалам диссертации, изданная при поддержке РФФИ и фонда имени Бутлерова, удостоена диплома конкурса научных изданий им. первопечатника Ивана Федорова.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

экспериментальные результаты получены современными инструментальными методами хроматографии, хромато-масс-спектрометрии, определения октановых чисел и приборов, прошедших метрологическую аттестацию;

теория, изложенная в диссертации, построена на известных проверяемых данных и фактах и согласуется с опубликованными экспериментальными данными по теме работы, а также по смежным отраслям;

идея базируется на анализе и обобщении передового опыта отечественных и иностранных исследователей по дескрипторному подходу и является развитием методов «структура-свойство»;

использованы данные, содержащиеся в базах данных по физико-химическим свойствам углеводородов: ИВТАНТЕРМО, GESTIS Database,

TRC, PubChem, ChemSpider, eMolecules, NIST Chemistry WebBook и базе данных, разработанной в УГНТУ;

установлено соответствие экспериментальных и расчетных данных по прогнозу свойств углеводородных смесей, подтвержденных лабораторными испытаниями;

использованы современные компьютерные методики обработки экспериментальной информации для углеводородов ряда алканов, алкенов, циклоалканов, аренов, входящих в состав моторных топлив, а также современная аналитическая техника и методики газовой хроматографии.

Личный вклад соискателя состоит в:

самостоятельном проведении эксперимента, обработке экспериментальных данных и анализе, полученной теоретической и практической информации, совместной с коллегами подготовке публикаций в рецензируемых научных журналах и апробации результатов работы на научно-технических конференциях, патентовании технических решений и программы для ЭВМ. Соискатель принимал непосредственное участие в постановке задач, планировании экспериментов и проведении расчетов.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи (проблемы) и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана, охватывающего все аспекты исследований, связанных с поиском взаимосвязи между октановыми числами, их топологическими дескрипторами, отражающими химическую структуру молекул и их электронное состояние, и разработкой регрессионных моделей для адекватного прогноза октановых чисел углеводородов. Апробацией методики для определения октановых чисел углеводородных смесей с учетом их неидеальности, прогнозирования октановых чисел бензиновых фракций на технологических потоках.

Диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация «Прогнозирование характеристик детонации углеводородов моторных топлив» представляет собой научно-квалификационную работу, которая

соответствует критериям п. 9 – п. 14 «Положения о присуждении ученых степеней» ВАК Минобрнауки РФ, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в ред. Постановления Правительства РФ от 21.04.2016 № 335),

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации. В диссертации не используется заимствованный материал без ссылки на автора и источник заимствования.

В ходе защиты диссертации не было высказано критических замечаний.

На заседании 21 июня 2023 г. диссертационный совет принял решение за новые научно обоснованные разработки, а именно многофакторные модели «структура-свойство» (QSPR) для прогноза характеристик детонации и воспламеняемости для углеводородов ряда алканов, алкенов, циклоалканов, аренов, а также способ контроля ОЧИ неидеальных смесей бензиновых фракций на технологических потоках процессов каталитического риформинга, изомеризации, каталитического крекинга, имеющие существенное значение для развития страны, присудить Коледину О.С. ученую степень кандидата технических наук по специальности 2.6.12. – «Химическая технология топлива и высокоэнергетических веществ».

При проведении тайного голосования членов совета с использованием информационно-коммуникационных технологий диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 9 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 23 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 19, против – нет.

Председатель

диссертационного совета

Ибрагимов Ильдус Гамирович

Ученый секретарь

диссертационного совета

Бадикова Альбина Дарисовна

21 июня 2023г.

