

ОТЗЫВ

о научной деятельности кандидата в члены-корреспонденты РАН

по Отделению математических наук РАН по специальности

"Прикладная математика и информатика"

заведующего лабораторией математической химии Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра

Российской академии наук (ИНК УФИЦ РАН),
доктора физико-математических наук, профессора

Губайдуллина Ирека Марсовича

Губайдуллин И.М. работает в Институте нефтехимии и катализа УФИЦ РАН с 1981 года. За время работы прошел путь от инженера исследователя до заведующего лабораторией. В 1996 году защитил кандидатскую диссертацию «Математическое моделирование динамических режимов окислительной регенерации катализаторов в аппаратах с неподвижным слоем» по специальности 05.13.16 – Применение вычислительной техники, математического моделирования и математических методов в научных исследованиях (по отраслям наук) на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук. В 2012 году защитил докторскую диссертацию «Информационно-аналитическая система решения многопараметрических обратных задач химической кинетики» по специальности 02.00.04 – Физическая химия на соискание учёной степени доктора физико-математических наук. Решением Министерства образования Российской Федерации в 2005 году присвоено учёное звание доцента математического моделирования, а в 2021 году Высшей аттестационной комиссией (ВАК) при Министерстве образования и науки Российской Федерации Губайдуллину И.М. присвоено ученое звание профессора по специальности «Физическая химия».

Губайдуллин И.М. осуществляет научное руководство научными исследованиями по актуальным направлениям математического моделирования в химии и химической технологии, таких как разработка кинетических моделей сложных гомогенных и гетерогенных реакций, решение обратных задач химической кинетики, многокритериальная и многоцелевая оптимизация экспериментальных химических реакций, сложных промышленных каталитических процессов. Математические модели процессов и аппаратов химической технологии являются фундаментом цифровизации промышленных установок нефтегазовой отрасли. Под его руководством проводится проектирование, создание и реализация информационно-аналитических вычислительных систем моделирования и оптимизации в химической технологии (ИБАС_ХТ). ИБАС_ХТ состоит из вычислительных модулей: расчет кинетических кривых с выбором математического описания и алгоритма решения; расчет кинетических параметров с выбором типа функционала невязки; база данных кинетических моделей и критериев оптимальности; однокритериальная и многокритериальная оптимизация с выбором варьируемых параметров, критериев оптимальности, алгоритма решения; оптимальное управление условиями проведения реакции. Входными данными являются – механизм

реакции, экспериментальные данные, критерии оптимальности, перечень варьируемых и управляющих параметров. Результатом решения задачи являются режимные условия оптимального ведения процесса. Входные и выходные данные объединяются и хранятся в базе данных. Каждая из подсистем выполняет решение локальной задачи. Объединение их в одну систему позволило решить глобальную задачу многокритериальной оптимизации и оптимального управления каталитическими реакциями, на основе кинетической модели. Реализована технология параллельных вычислений при разработке кинетической модели и в многокритериальной оптимизации.

Под руководством Губайдуллина И.М. в лаборатории математической химии разработана детализированная кинетическая модель промышленно значимого процесса – каталитического риформинга бензина. Адекватность кинетической модели подтверждается соответствием расчетных значений и промышленных данных состава продукта на выходе из последнего реактора и перепадов температур во всех реакторах каскада. Определены оптимальные условия проведения каталитического риформинга на основе многокритериальной оптимизации и оптимального управления по детализированной кинетической модели – определен режим, при котором достигается снижение содержания суммы бензола с 4 до 3 % масс с потерей октанового числа на 1 пункт и увеличении выхода риформата на 1.5 % масс, Выбор данного режима обусловлен минимальным снижением октанового числа по сравнению с исходным режимом и при этом обеспечивающий снижение содержания бензола на 23%.

В настоящее время, в лаборатории успешно завершается моделирование промышленно значимого процесса каталитической изомеризации пентан-гексановой фракции и начаты моделирования сложного процесса каталитического крекинга вакуумного газойля. Также, в лаборатории осуществляется математическая обработка натурных экспериментальных данных. В том числе гомогенной реакции диметилкарбоната со спиртами в присутствии металлокомплексных катализаторов октакарбонилдикообальта и гексакарбонил вольфрама, реакции гидроалюминирования олефинов алюминийорганическими соединениями в присутствии металлокомплексных катализаторов, каталитической реакции синтеза бензилалкиловых эфиров с учетом нескольких каталитических циклов.

Губайдуллин И.М. ведет также научно-организационную и педагогическую работу. Он является членом Ученого совета ИНК УФИЦ РАН, членом диссертационного совета при Башкирском государственном университете, активно осуществляет подготовку научных кадров. Под его руководством защищены 1 докторская и 7 кандидатских диссертаций по специальности 02.00.04 – Физическая химия. В настоящее время подготовлены к защите 3 кандидатских диссертаций по специальностям 1.4.4 – физическая химия и 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. В текущий момент является руководителем 5 аспирантов в ИНК УФИЦ РАН по специальности 1.2.2. – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Губайдуллин И.М. является профессором кафедры технологии нефти и газа Уфимского государственного нефтяного технического университета (УГНТУ). Читает лекции по магистерским программам по специальности «Математическое моделирование в задачах нефтегазовой отрасли». На постоянной основе является руководителем 3-4 магистерских диссертаций. Еженедельно в УГНТУ, проводит городской семинар «Информационно-вычислительные аналитические системы (ИВАС) моделирования,

оптимизации и проектирования в нефтегазовой отрасли». Подготовил свыше 10 учебных пособий. Основными из которых являются «Информационно-аналитическая система обратных задач химической кинетики», «Физико-химические основы моделирования химических реакторов: термодинамика и кинетика».

Губайдуллин И.М. в совершенстве владеет научными проблемами и направлениями развития в области цифровизации, информационных технологий, математического моделирования, кинетических исследований сложных механизмов. В своих научных исследованиях использует современные методы и средства организации и проведения научных исследований и разработок. Такие, как теория анализа и хранения больших данных, технологии параллельных вычислений в кластерных системах, видеокартах и многопроцессорных вычислительных системах.

Губайдуллин И.М. активно публикует свои научные результаты в высокорейтинговых журналах. Имеет свыше 500 научных трудов. Из них свыше 50 статей индексируются в базах данных Web of Science и Scopus, около 120 в списке из перечня ВАК. Имеет свыше 30 патентов – свидетельств о регистрации программ. Активно выступает с пленарными докладами в международных и в российских конференциях. В соавторстве изданы монографии «Математическое и программное обеспечение кинетического моделирования процессов радикально-цепных реакций (полимеризация, пиролиз алканов)», «Математическое моделирование реакций гибели нитрозооксидов», «Идентификация условий каталитической реакции по многоцелевой оптимизации».


Является постоянным членом оргкомитетов 5 международных конференций, членом редколлегий журналов «Математическое моделирование», «Вестник Башкирского университета», «Журнал Средневолжского математического общества», членом экспертной комиссии РФФИ.

Под руководством Губайдуллина И.М. за последнее 10 лет реализованы 3 инициативных проекта РФФИ и 7 молодежных проектов РФФИ. В настоящее время является руководителем проекта РНФ «Разработка теоретических основ и создание высокопроизводительных алгоритмов для двухфазных математических моделей фильтрации жидкости в коллекторах трещиновато-порового типа» и 3 грантов РФФИ. Он ответственный инициативный научный сотрудник, пользующийся уважением коллег, аспирантов и студентов.

Считаю, что по высокому уровню полученных новых научных результатов, по объёму и качеству выполненных работ, по уровню руководства лабораторией математической химии ИНК УФИЦ РАН, научными сотрудниками и аспирантами, по качеству и цитируемости научных трудов, д.ф.-м.н., профессор Губайдуллин И.М. заслуживает выдвижения на конкурс член-корреспондента Российской академии наук.

Директор Института нефтехимии и катализа –
обособленного структурного подразделения
Федерального государственного бюджетного
научного учреждения Уфимского
федерального исследовательского центра
Российской академии наук, д.х.н.




Д.И. Саби́ров
21.02.2022г.