

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

**Федеральное государственное бюджетное научное учреждение**

**Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук**

**(УФИЦ РАН)**

|  |
| --- |
| 450054, г. Уфа, проспект Октября, 71. Тел./факс: (347) 235-60-22, 284-56-52, e-mail: [presidium@ufaras.ru](mailto:presidium@ufaras.ru), [presid@anrb.ru](mailto:presid@anrb.ru) |
| Код организации 81, ОГРН 1030204207582, ИНН 0274064870, КПП 027601001 |



|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
|  | | № |  |
| На № |  | | |

**Решение о выдвижении в члены-корреспонденты**

**Российской академии наук Губайдуллина Ирека Марсовича**

по Отделению математических наук РАН по специальности Прикладная математика и информатика

р. 21 мая 1959 г., доктор физико-математических наук, профессор.

Объединенный ученый совет Уфимского федерального исследовательского центра РАН на своем заседании от 24 февраля 2022 года выдвинул кандидатуру Губайдуллина Ирека Марсовича в члены-корреспонденты Российской академии наук, отметив значительный вклад Губайдуллина Ирека Марсовича в развитие науки.

Губайдуллин Ирек Марсович – ученый, обогативший науку выдающимися научными трудами в области математического моделирования и оптимизации процессов и аппаратов химических технологий, нефтедобычи. Заведующий лабораторией математической химии, ведущий научный сотрудник Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН.

Автор более 450 научных статей, свыше 60 из которых реферируются в международных базах данных Web of Science и Scopus (Q1, Q2, Q3 b Q4), 3 монографий, 35 зарегистрированных результатов интеллектуальной деятельности. Кроме того, Ирек Марсович - прекрасный педагог, активно работающий с талантливой молодежью, вовлекающий ее в научную деятельность. Под его руководством защищены 1 докторская и 7 кандидатских диссертаций по специальности 02.00.04 – Физическая химия по физико-математическим наукам. В настоящее время является руководителем 5 аспирантов по специальности 1.2.2. – математическое моделирование, численные методы и комплекс программ.

Губайдуллин И.М. являлся руководителем более 10 проектов РФФИ, в том числе трёх инициативных. Многие проекты РФФИ выполнялись совместно с коллегами из МГТУ им. Н.Э. Баумана, Институтом катализа им. Г.К. Борескова СО РАН. В настоящий момент является руководителем проекта РНФ совместно с ИМП им. М.В. Келдыша РАН.

Губайдуллин И.М. является экспертом РФФИ и членом редколлегии трёх журналов из списка ВАК: 1) «Математическое моделирование» (переводная версия SCOPUS); 2) «Вестник Башкирского университета»; 3) «Журнал средневолжского математического общества».

Основные научные результаты Губайдуллина Ирека Марсовича:

- разработана информационно-вычислительная аналитическая система обратных задач химической кинетики (ИВАС ОЗХК), включающая в себя базу данных натурных и вычислительных экспериментов, а также методы обработки кинетических измерений с использованием технологии параллельных вычислений;

- выявлен и изучен внутренний параллелизм решения многопараметрической обратной задачи химической кинетики. На основе внутреннего параллелизма разработана эффективная трехуровневая методология распараллеливания обратной задачи химической кинетики;

- с применением ИВАС ОЗХК разработаны кинетические модели следующих реакций: 1) каталитического циклоалюминирования алкенов и ацетиленов триэтилалюминием в алюминациклопентаны и алюминациклопентены в присутствии Cp2ZrCl2; 2) гидроалюминирования олефинов алкилаланами (ClAlBui2 - диизобутилалюминийхлорид (ДИБАХ), AlBui3 - триизобутилалюминий (ТИБА), HAlBui2 - диизобутилалюминийгидрид (ДИБАГ)), катализируемых Cp2ZrCl2, на основе итоговых и общих схем; 3) гидроалюминирования олефинов диизобутилалюминийхлоридом на основе кинетических моделей частных выделенных детализированных стадий; 4) каталитической реакции синтеза бензилбутилового эфира; 5) промышленно значимых процессов – каталитического риформинга и изомеризации бензина; применен метод группировки компонентов по принадлежности к классу углеводородов и количеству атомов углерода в структуре молекулы; 6) реакции газофазного пиролиза этана и пропана;

- на основе разработанных кинетических моделей определены математические пространственно-временные условия возникновения и развития индукционного периода реакций, адекватные химическому смыслу процесса;

- разработана методика упрощения схемы химических превращений, основанная на анализе чувствительности функционала модели к изменению ее кинетических параметров;

- создано программное обеспечение, позволяющее проводить локальный и глобальный анализ чувствительности выходных параметров модели к ее входным параметрам с целью выявления значимых параметров и для редуцирования схемы реакции.

- разработана и апробирована методология постановки и решения задачи многокритериальной оптимизации условий проведения химических реакций, учитывающая варьируемые параметры, физико-химические ограничения и критерии оптимальности по кинетической модели. Результатом является полное множество неулучшаемых решений, позволяющее сделать обоснованный выбор условий проведения как лабораторного, так и промышленного процессов;

- впервые сформулированы математические зависимости по технологическим, экологическим и экономическим критериям оптимальности проведения каталитических реакций: выход целевого продукта, выход побочного продукта, конверсия, селективность, производительность, прибыль, рентабельность, зависящие от кинетической модели и цели конкретного процесса. Критерии оптимальности позволяют реализовать вариативность оценки процесса;

- определены оптимальные условия проведения исследуемых реакций на основе многокритериальной оптимизации и оптимального управления по детализированным кинетическим моделям: показано, что для реакции синтеза бензилбутилового эфира в присутствии медного катализатора увеличение содержания дибензилового эфира позволяет добиться роста выхода целевого бензилбутилового эфира;

- впервые для каталитического риформинга бензина определен режим, при котором достигается снижение содержания суммы бензола с 4 до 3 % масс с потерей октанового числа на 1 пункт и увеличение выхода риформата на 1,5 % масс: температура входа в Р-1 - 480°C, температура входа в Р-2 - 479°C, температура входа в Р-3 - 500°C, октановое число – 91,8, выход бензола – 3.08 % масс, выход риформата – 85,6 % масс. Выбор данного режима обусловлен минимальным снижением октанового числа по сравнению с исходным режимом и при этом обеспечивающий снижение содержания бензола на 23%;

- разработан параллельный программный модуль для моделирования полей давлений в коллекторе трещиновато-порового типа с целью проведения экспресс-оценок длительности гидродинамических исследований нефтегазовых скважин и расчета времени подключения матрицы в работу при запуске скважины;

- разработаны методы решения уравнений пьезопроводности в нерегулярных областях с депрессионными зонами для получения дополнительной информации об этих процессах на фоне известных сатурационных параметров для дальнейшей реализации внешнего взаимодействия в четырехуровневой математической модели;

- разработан программный комплекс с реализацией методов моделирования пространственно-одномерных сатурационных процессов в четырехблочной математической модели с использованием параллельных вычислений OpenMP и MPI;

- в околоскважинном пространстве построена и исследована динамика изменения давления в матрице и системе трещин в зависимости от времени. Построены зависимости давления в трещине и матрице от времени, где отмечается, что давление в системе трещин просаживается быстрее, чем в матрице, затем после перераспределения жидкости давление в общей системе выравнивается;

- проведены расчеты при различных значениях проницаемостей, которые показали, чем выше проницаемость, тем давление в пласте просаживается быстрее и подключение матрицы в работу, соответственно, происходит быстрее. Получены зависимости давления от пространственной координаты для различных значений времени. Установлено, что чем дольше работает скважина, тем воронка депрессии становится больше;

- проведено кинетическое моделирование процесса гибели 2,4-диметоксифенил-нитрозооксида, 2-метил-4-[(2E)-1-метилбут-2-ен-1-ил] фенилнитрозо-оксида и 3-трифторметил-4-метоксифенилнитрозооксида, которое в совокупности с анализом продуктов реакции и квантово-химическим моделированием дает целостную, непротиворечивую картину, из которой следует, что конформационные переходы в ароматических нитрозооксидах, обусловленные умеренной конформационной подвижностью нитрозооксидной группы, существенным образом влияют на реакционную способность и химические превращения замещенных ArNOO; - разработаны алгоритмы и комплекс программ для моделирования реакции низкотемпературной паровой конверсии легких углеводородов.

Результаты тайного голосования Объединенного ученого совета УФИЦ РАН следующие:

Присутствовали - 21 чел. (численный состав Совета - 25 чел.)

За - ??? чел. НОО укажет

Против - 0 чел.

Недействительных бюллетеней - 0 чел.

На основании результатов тайного голосования Объединенный ученый совет УФИЦ РАН решил выдвинуть кандидатуру Губайдуллина Ирека Марсовича для избрания членом-корреспондентом Российской академии наук по специальности «Прикладная математика и информатика» на вакансию Отделения математических наук РАН.

Председатель

Объединенного ученого

совета УФИЦ РАН В.П. Захаров

м.п.

Ученый секретарь Объединенного

ученого совета УФИЦ РАН Р.Ф. Салимьянов