

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА

Д 212.204.03 на базе Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук.

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета
от «27» декабря 2018 года, протокол № 15

О присуждении Лебедеву Игорю Витальевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата технических наук.

Диссертация «Моделирование структуры, свойств и процессов получения кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей» в виде рукописи по специальностям 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий и 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, технические науки, принята к защите «25» октября 2018 года, протокол № 12, диссертационным советом Д 212.204.03 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (125047, Москва, Миусская площадь, 9, приказ о создании диссертационного совета от «15» октября 2014 года № 574/нк).

Соискатель **Лебедев Игорь Витальевич**, «17» апреля 1991 года рождения, в 2014 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Освоил программу подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в 2018 году.

Работает в должности ведущего инженера Международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева Министерства науки и высшего образования Российской Федерации с 2015 года по настоящее время.

Диссертационная работа выполнена на кафедре кибернетики химико-технологических процессов Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель доктор технических наук, профессор Меньшутина Наталья Васильевна, гражданка Российской Федерации, руководитель Международного учебно-научного центра трансфера фармацевтических и биотехнологий, профессор кафедры кибернетики химико-технологических процессов Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева.

Официальные оппоненты: доктор технических наук, профессор Лабутин Александр Николаевич, гражданин Российской Федерации, заведующий кафедрой технической кибернетики и автоматики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет», Иваново;

доктор технических наук, профессор Тихомиров Сергей Германович, гражданин Российской Федерации, профессор кафедры информационных и управляющих систем Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Воронежский государственный университет инженерных технологий», Воронеж,

дали **положительные** отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение высшего

образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Казань, в своем *положительном* заключении, подписанном профессором кафедры «Процессы и аппараты химической технологии», доктором технических наук, доцентом Мухаметзяновой Асией Габдулмазитовной указала, что диссертация является законченной научно-квалификационной работой, заслуживает высокой оценки и соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», а ее автор Лебедев Игорь Витальевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальностям 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий и 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (отзыв заслушан и утвержден на заседании кафедры «Процессы и аппараты химической технологии» Казанского национального исследовательского технологического университета 4 декабря 2018 года, протокол № 2).

Соискатель имеет 9 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 9 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 6 работ. Все публикации выполнены в соавторстве, личный вклад соискателя (от 40 до 70 %) состоит в анализе литературы, получении и анализе экспериментальных данных, разработке математических моделей и компьютерных программ для проведения вычислительных экспериментов, проведении вычислительных экспериментов, обработке результатов, написании публикаций. Соискателем опубликовано 6 работ в материалах всероссийских и международных конференций и конгрессов, получено 5 авторских свидетельств о государственной регистрации программы для ЭВМ. Монографий, депонированных рукописей не имеет. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. I. Lebedev, A. Tyrtysnikov, I. Khudeev, S. Ivanov, N. Menshutina. Silica-Resorcinol-Formaldehyde aerogels nanostructure modelling // CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTIONS. 2018. vol. 17. pp. 1765-1770. (Scopus)

2. Макарова И.С., Лебедев И.В., Гордиенко М.Г., Меньшутина Н.В. Получение и исследование кремний-резорцин-формальдегидных аэрогелей // Сверхкритические Флюиды: Теория и Практика. 2018. Т. 13. №4. С. 56-66. (Web of Science)

3. Лебедев И.В., Тыртышников А.Ю., Иванов С.И., Меньшутина Н.В. Моделирование нанопористых структур кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей // Программные продукты и системы. 2018. Т. 31. №3. С. 561-566.

На автореферат поступило 5 отзывов, **все положительные**. В отзывах указывается, что представляемая работа характеризуется высоким теоретическим и экспериментальным уровнем, имеет большое научное и практическое значение и по своей новизне и актуальности соответствует требованиям Высшей аттестационной комиссии.

В отзыве доктора технических наук, профессора Мищенко Сергея Владимировича, профессора кафедры мехатроники и технологических измерений Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тамбовский государственный технический университет», в качестве замечаний отмечено: в автореферате не приведены описания технологических схем получения различных аэрогелей, не даны названия и типы аппаратов.

В отзыве доктора технических наук, профессора Абиева Руфата Шовкетовича, заведующего кафедрой оптимизации химической и биотехнологической аппаратуры Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет)», в качестве замечаний отмечено: было бы уместным представить математические модели перекрывающихся пор и кластер-кластерной агрегации, ограниченной диффузией, в автореферате; из автореферата не ясно, для каких типов аэрогелей (кремний-резорцинол-формальдегидных и/или кремний углеродных) проводилось моделирование теплопроводности и модуля Юнга.

В отзыве доктора технических наук, профессора Матвеева Михаила Григорьевича, заведующего кафедрой информационных технологий управления Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Воронежский государственный университет» в качестве замечаний отмечено отсутствие каких-либо обоснований применения клеточно-автоматных моделей, а не других инструментов моделирования.

В отзыве кандидата технических наук, научного сотрудника Федерального государственного унитарного предприятия «Институт химических реактивов и особо чистых химических веществ Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» Никулиной Елены Аркадьевны в качестве замечаний отмечено: в автореферате в разделе «Рекомендации по получению аэрогеля с нужными свойствами» формулировки являются довольно расплывчатыми и не конкретными, отсутствуют анализ и четкие выводы по оптимальным параметрам ведения процесса; в пятой главе автореферата в описании клеточно-автоматных моделей расчета показателей теплопроводности и модуля Юнга не указан диапазон, или принятые допущения по параметру l (размер клетки), которые были использованы в вычислительном эксперименте.

В отзыве кандидата технических наук, заместителя начальника отдела Главного инженера проекта Частного учреждения Госкорпорации «Росатом» «Инновационный технологический центр проекта «ПРОРЫВ» Каталевича Антона Михайловича в качестве замечаний отмечено: из текста автореферата неясно, какие отличительные особенности имеет разработанный процесс получения аэрогелей, влияющий на характеристики получаемого материала или ресурсы, затрачиваемые непосредственно на процесс; автором не приведены доводы, обосновывающие возможность использования модели для расчета механических свойств, в которой не учитываются изгибающие моменты, а также не указана область применимости данной модели; в тексте автореферата отсутствует пояснение, проведена ли валидация разработанных моделей, т.е. получены ли аэрогели, соответствующие заранее смоделированным структурам.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации определен соответствием тематики работы соискателя областям их научных интересов и направлениям деятельности, что подтверждается большим числом научных публикаций. Высокая квалификация в области процессов и аппаратов химической технологии, математического моделирования, численных методов и комплексов программ позволяет им оценить научную и практическую значимость диссертационной работы.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- **разработан** способ получения кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей, подобраны параметры ведения процессов гелирования, сверхкритической сушки.

- **изучен** механизм процесса пиролиза кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей и его влияние на структуру кремний-углеродных аэрогелей, а также сделаны рекомендации по выбору оптимального температурного режима пиролиза.

- **разработаны** оригинальные клеточно-автоматные модели и алгоритмы генерации структур кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей: на основе метода перекрывающихся пор, на основе метода DLCA, а также клеточно-автоматная модель и алгоритм процесса пиролиза кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей. Предложены клеточно-автоматные модели и алгоритмы прогнозирования теплопроводности и модуля Юнга кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей. Проведена оценка адекватности разработанных моделей, даны рекомендации по их использованию.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что: определено влияние технологических параметров, в частности, разбавления, соотношения компонентов и температуры старения на формирование структуры кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей; изучено влияние параметров процесса пиролиза кремний-резорцинол-

формальдегидных аэрогелей на структуру кремний-углеродных аэрогелей; развит клеточно-автоматный подход как компьютерно-ориентированный численный метод, позволяющий решать сложные задачи моделирования структуры пористых тел; проанализированы зависимости теплопроводности и механических свойств от структуры и состава аэрогелей на основании вычислительного эксперимента по оригинальным клеточно-автоматным моделям для прогнозирования теплопроводности и механических свойств (модуля Юнга).

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что разработаны лабораторные методики по получению кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей и отдельные главы лабораторного регламента по получению кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей, включая принципиальную технологическую схему процесса; создан комплекс программ для проведения вычислительных экспериментов, который включает в себя следующие модули: 1) модуль генерации пористых структур КРФ аэрогелей с помощью двух моделей: модель на основе метода перекрывающихся пор и метода DLCA; 2) модуль генерации пористых структур КУ аэрогелей; 3) модуль расчета теплопроводности; 4) модуль расчета механических свойств.

Результаты работы могут быть рекомендованы для изучения и внедрения в научных и образовательных организациях, а также для компаний, занимающихся производством функциональных композиционных материалов.

Оценка достоверности результатов выявила:

– достоверность полученных результатов и выводов подтверждаются большой выборкой экспериментальных исследований структур кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей с использованием общепринятых аналитических методов и современного оборудования; тестированием предлагаемых в работе моделей и алгоритмов на ряде модельных задач; проверкой адекватности разработанных моделей сопоставлением с экспериментальными данными;

– полученные результаты обоснованы, выводы следуют из анализа результатов и не противоречат современным представлениям о процессах получения аэрогелей, известным зависимостям в области химии и массопереноса;

– использовано современное оборудование и общепринятые методики аналитических исследований.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии в проведении экспериментальных исследований, разработке лабораторных методик и глав лабораторного регламента, построении моделей и алгоритмов, написании программ, разработке и планировании вычислительных экспериментов, проверке адекватности, обработке полученных результатов. Автором проведена систематизация, интерпретация и оценка полученных результатов, сформулированы выводы, подготовлены материалы для публикаций и представления результатов исследований на российских и международных научных конференциях.

Диссертационный совет пришёл к выводу о том, что диссертация представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, которая направлена на решение научно-технической задачи разработки процессов получения и моделирования кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей. Разработанные лабораторные методики по получению кремний-резорцинол-формальдегидных и кремний-углеродных аэрогелей, отдельные главы лабораторного регламента по получению кремний-резорцинол-формальдегидных аэрогелей и созданный комплекс программ для проведения вычислительных экспериментов позволят получить новые перспективные функциональные композиционные

материалы для использования в качестве сорбентов газа и теплоизоляционных материалов, что вносит внесет значительный вклад в развитие страны.

По своему содержанию диссертация отвечает паспорту специальности 05.17.08 – «Процессы и аппараты химических технологий» в части «совершенствования аппаратурного оформления технологических процессов с позиций энерго- и ресурсосбережения», «исследования тепловых процессов в технологических аппаратах и технологических схемах», «исследования массообменных процессов и аппаратов». Диссертация соответствует паспорту специальности 05.13.18 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» в части «применения математического моделирования, численных методов и комплексов программ для решения научных и технических, фундаментальных и прикладных проблем», «реализации эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента», «разработки систем компьютерного и имитационного моделирования».

По актуальности, новизне, практической значимости диссертация соответствует требованиям, установленным «Положением о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842 (с изменениями и дополнениями), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук.

На заседании «27» декабря 2018 года, протокол № 15, диссертационный совет **принял решение присудить Лебедеву Игорю Витальевичу ученую степень кандидата технических наук** по специальностям 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий и 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 9 докторов наук по специальности 05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий и 3 доктора наук по специальности 05.13.18 - Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, участвовавших в заседании, из 18 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 3 человека, **проголосовали: за присуждение учёной степени – 17** , против присуждения учёной степени – **нет** , недействительных бюллетеней – 1.

Председатель диссертационного совета

М. Б. Глебов

Ученый секретарь
диссертационного совета

А. В. Женса



Женса
27.12.18