

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА
24.1.107.01 СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ
ИНСТИТУТА ПРОБЛЕМ УПРАВЛЕНИЯ ИМ. В.А. ТРАПЕЗНИКОВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ НА
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 06.02.2023 №1

О присуждении **Милосердову Олегу Александровичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата технических наук.

Диссертация «Математическое моделирование полимерных цепей в задачах предсказания транспортных характеристик стеклообразных полимеров» по специальности - 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки)» принята к защите 20 октября 2022 г., протокол № 8 диссертационным советом 24.1.107.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем управления им. В.А. Трапезникова Российской академии наук, 117997, Москва, ул. Профсоюзная, д. 65, утвержденным Приказом ВАК № 1223-в от 29.12.2000 г., перерегистрированным 11.04.2012 г., Приказ № 105НК.

Соискатель Милосердов Олег Александрович, 1992 года рождения окончил бакалавриат (2014г.) и магистратуру (2016г.) факультета радиотехники и кибернетики Московского физико-технического института, и аспирантуру Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем управления им. В.А. Трапезникова Российской академии наук (далее – ИПУ РАН) 21 октября 2021 года. В настоящее время работает в ИПУ РАН в лаборатории №77 «Вычислительной кибернетики» в должности научного сотрудника.

Диссертация выполнена в лаборатории №77 «Вычислительной кибернетики» Института проблем управления им. В.А. Трапезникова Российской академии наук.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, Профессор РАН Губко Михаил Владимирович

Официальные оппоненты:

Печников Андрей Анатольевич, доктор технических наук, доцент, главный научный сотрудник Института прикладных математических исследований – обособленного подразделения Федерального бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Карельский Научный Центр Российской академии наук»,

Кузнецов Сергей Олегович, доктор физико-математических наук, профессор Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», руководитель департамента анализа данных и искусственного интеллекта, заведующий международной научно-учебной лабораторией «Интеллектуальные системы и структурный анализ» дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН) в своем положительном отзыве, подписанным заведующий лабораторией физики и механики полимеров, доктором физико-математических наук (02.00.06 – Высокомолекулярные соединения) старшим научным сотрудником Ковалевой Маргаритой Алексеевной и утвержденным директором ФИЦ ХФ РАН доктором химических наук, профессором Надточенко В.А., указала, что результаты диссертационной работы и выводы по ней, полученные Милосердовым О.А., свидетельствуют о том, что соискатель выполнил актуальное исследование, направленное на решение теоретических и практических задач в интересах мембранного газоразделения. Проведенные исследования отличаются от ранее выполненных другими авторами тем, что соискатель разработал новый метод моделирования транспортных характеристик полимерных материалов, основанный на моделировании геометрии коротких отрезков молекул, вычислении для них оригинального семейства геометрических индексов и использовании их в качестве объясняющих переменных в регрессионных моделях. Важной частью работы является созданный комплекс программ, способный помочь специалистам в области мембранного газоразделения существенно сократить время, затрачиваемое на получение новых полимерных материалов с экстремальными характеристиками.

Заключение ведущей организации имеет следующие замечания:

1. Работу хорошо бы дополнило исследование карты Рамачадрана для различных полимерных структур.

2. Автор ограничивается использованием линейных регрессий и не приводит сравнение, например, с полиномиальными регрессиями или с простыми нейронными сетями в несколько полносвязных слоев.
3. В главе 1 хотелось бы более четкого описания метода Гастайгера-Марсили: какие данные используются как исходные и что подгоняется.
4. В главе 2 для простоты восприятия хотелось бы иллюстрации структуры всех рассматриваемых полимеров.
5. В главе 3 не хватает простого визуального интерфейса, автор предлагает использовать терминал.
6. В работе не хватает сравнения полученных разработанным методом конформаций с результатами более точных методов молекулярно-динамического моделирования.

Отмечено, что указанные замечания не снижают ценности работы и не оказывают решающего внимания на положительную оценку диссертационной работы Милосердова О.А. Она представляет собой законченную работу, в которой решена задача разработки методов математического моделирования полимерных цепей в целях предсказания транспортных характеристик стеклообразных полимеров.

Диссертация Милосердова Олега Александровича «Математическое моделирование полимерных цепей в задачах предсказания транспортных характеристик стеклообразных полимеров» является законченным научным исследованием, полностью удовлетворяет критериям положения о присуждении научных степеней, предъявляемых к диссертации на соискание степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки)», а ее автор, Милосердов Олег Александрович, заслуживает присуждения степени кандидата технических наук по этой специальности.

Соискатель по теме диссертации имеет 13 опубликованных работ, среди которых 5 публикаций в рецензируемых научных изданиях, индексируемых Web of Science и Scopus, в том числе, одна публикация за единоличным авторством соискателя, 8 публикаций в сборниках трудов и тезисов конференций.

Все исследования, изложенные в диссертационной работе, выполнены лично соискателем в процессе научной деятельности. Во всех работах, выполненных в соавторстве, автор внес значительный вклад в разработку представленных методов и алгоритмов, а также в проведение численных экспериментов и создание комплекса программ.

Наиболее значимые публикации из числа рецензируемых изданий:

- Miloserdov O. Classifying Amorphous Polymers for Membrane Technology Basing on Accessible Surface Area of Their Conformations // Adv. Syst. Sci. Appl. –2020. – Vol. 20.– No. 3. – P. 91-104.
- Alentiev, A., Chirkov, S., Nikiforov, R., Buzin, M., Miloserdov, O. et al. S. Structure-Property Relationship on the Example of Gas Separation Characteristics of Poly (Arylene Ether Ketone) s and Poly (Diphenylene Phtalide) // Membranes. – 2021. –Vol.11. –No. 9. –P. 677-697.
- Goubko M., Miloserdov O., Yampolskii Yu. et al. Prediction of Solubility Parameters of Light Gases in Glassy Polymers on the Basis of Simulation of a Short Segment of a Polymer Chain // Polymer Science, Series A. – 2019. –Т. 61. –№. 5. –С. 718-732.
- Goubko M., Miloserdov O., Yampolskii Yu. et al. A novel model to predict infinite dilution solubility coefficients in glassy polymers // J. Polym. Sci. Part B: Polym. Phys. – 2017. – Vol.55. – No. 3. – P. 228-244.
- Goubko M., Miloserdov O. Simple Alcohols with the Lowest Normal Boiling Point Using Topological Indices // MATCH Commun. Math. Comput. Chem.-2016, – P. 75, – No.1, – P. 29-56.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы, все отзывы положительные.

Отзывы с замечаниями:

1. Отзыв на автореферат д.ф.-м.н. **Павленко А.В.**, заведующего лабораторией наноразмерных активных сред и материалов «Федерального исследовательского центра Южный научный центр Российской академии наук», содержит следующие замечания:

- Недостаточно полно приведено содержание Главы 1, в которой описываются существующие методы решения поставленной задачи.
- В описании результатов внедрения, а именно качества полученных регрессий, в случае с регрессией для предсказания коэффициента растворимости приведена метрика MRE, а в случае регрессии для предсказания константы генри метрика RMSE, что мешает сравнивать результаты, также не хватает метрик на обучающих множествах.

2. Отзыв на автореферат к.ф.-м.н., **Юмашева М.В.**, доцента кафедры газовой и волновой динамики механико-математического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова», содержит следующие замечания:

- Автореферат диссертации изложен грамотно и логично, однако стоит отметить, что в нем недостаточно представлено описание и результаты моделирования с помощью метода молекулярно-механического моделирования
- Не хватает сравнения с результатами молекулярного моделирования другими известными методами, в том числе приведенными в первой главе диссертации.
- Также стоило бы больше сфокусироваться на описании и исследовании полученных регрессий.

3. Отзыв на автореферат к.т.н. **Блеканова И.С.**, доцента, заведующего кафедрой технологии программирования Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургского государственного университета», содержит следующие замечания:

- Заявлено, что структура диссертационной работы состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и двух приложений, а описание содержания работы начинается сразу с Главы 1, то есть отсутствует описание введения.
- В описании раздела 4.4 сравнение разработанного метода с методами групповых вкладов приведено недостаточно полно. Не хватает описания выборки полимеров и газов, на которых проводилось сравнение.

4. Отзыв на автореферат к.ф.-м.н. **Палюлина В.В.**, старшего преподавателя автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковского института науки и технологии», содержит следующие замечания:

- В качестве замечаний можно указать, что в работе отсутствует сравнение разработанного комплекса программ с мировыми аналогами, а также не хватает сравнения разработанного метода с другими методами предсказания транспортных характеристик, помимо методов групповых вкладов.
- Стоит отметить недостаточное на мой взгляд количество рисунков, отражающих научные результаты работы в автореферате. Текстовое описание зачастую не позволяет оценить качество полученных результатов.
- Также обнаружены опечатки. Так, на странице 17 автореферата используется фраза «достаточно длины конформации». Очевидно, имеется ввиду выражение «достаточно длины полимерной цепи».

5. Отзыв на автореферат д.т.н. **Бурмистрова И.Н.**, директора инжинирингового центра Федерального государственного бюджетного

образовательного учреждения высшего образования «Российского экономического университета имени Г.В. Плеханова», содержит следующие замечания:

- Среди прочего стоит отменить некоторые недостатки работы, в частности в тексте автореферата не отражены результаты сравнительного анализа предложенного метода молекулярно-механического моделирования с другими известными методами молекулярно-механического моделирования и методами молекулярно-динамического моделирования.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается профилем их научной деятельности и профессиональных интересов.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- **проведен анализ** существующих математических моделей стеклообразных полимеров и методов предсказания их транспортных характеристик;
- **разработан** метод моделирования конформаций полимерных цепей, позволяющий получить реалистичные модели молекул полимерных цепей;
- **предложено** семейство геометрических молекулярных дескрипторов, основанных на анализе кривых зависимости площади доступной поверхности молекул от радиуса обкатки;
- **разработаны** численные методы предсказания транспортных характеристик полимерных мембран на основе регрессионных моделей;
- **разработан** комплекс программ, позволяющий полностью автоматизировать процесс моделирования полимерных цепей стеклообразных мембранных материалов и предсказания их транспортных характеристик;
- **предложена** кластеризация конформационных структур аморфных полимеров, основанная лишь на значениях геометрических индексов;
- **показана** эффективность разработанных методов и алгоритмов в задачах предсказания транспортных характеристик полимерных мембран, таких как коэффициент растворимости S и константа закона Генри k_D .

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- **разработан** новый метод позволяющий решать задачу предсказания транспортных характеристик полимерных материалов за счет комбинации экономных с вычислительной точки зрения математических моделей полимерных цепей различных химических классов и методов машинного обучения на основе экспериментальных данных. В совокупности с комплексом программ, разработанным на языке Python и использующим библиотеки с открытым исходным кодом, он позволяет вырабатывать рекомендации по синтезу перспективных соединений даже в условиях работы на персональном компьютере.

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

- **разработанные методы и алгоритмы** успешно решают задачи предсказания транспортных свойств полимерных мембран на примере задач предсказания коэффициента растворимости (при бесконечном разбавлении) легких газов в стеклообразных полимерах различных классов, предсказания константы Генри стеклообразных полимеров различных химических классов, кластеризации полимерных материалов различных классов на основе геометрии их молекул для их типизации в интересах мембранной технологии и для исследования их физико-химических свойств.
- **разработанные методы и алгоритмы** успешно использовались для предсказания свойств еще не синтезированных полимеров
- подтверждением практической ценности полученных результатов служит акт внедрения результатов работ, выданный ИНХС РАН и приведенный в приложении диссертации.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

- в процессе решения поставленных задач использованы корректные статистические методы;
- использованы представительные валидационные выборки для проверки качества полученных регрессий;
- разработанные алгоритмы и методы прошли апробацию публикациями в международных журналах, а о результатах исследования доложено на нескольких конференциях;
- для подтверждения работоспособности регрессионных моделей были предсказаны характеристики еще не синтезированных полимеров, а также результаты предсказания сравнивались с широко известным

модифицированным методом групповых вкладов, и показали схожее качество предсказания.

Личный вклад соискателя состоит в самостоятельном получении всех основных результатов диссертационного исследования, а именно:

- разработке методов предсказания коэффициента растворимости и константы Генри;
- разработке метода кластеризации аморфных полимеров;
- программная реализация расчетов и проведение численных экспериментов;
- создании программного комплекса;
- подготовке публикаций по теме исследования;
- внедрении результатов исследования в исследовательскую деятельность подразделения ИНХС РАН.

Личное авторство всех результатов, выносимых на защиту, подтверждается публикациями статей в рецензируемых научных журналах и докладами на всероссийских и международных конференциях.

На заседании 06 февраля 2023 г. Диссертационный совет постановил за решение научной задачи по математическому моделированию полимерных цепей имеющей значение для предсказания транспортных характеристик стеклообразный полимеров в интересах мембранного газоразделения присудить Милосердову О.А. ученую степень кандидата технических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 22 человек, из них 9 докторов наук по специальности 1.2.2, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали; за присуждение ученой степени – 21, против – 1, воздержались – 0.

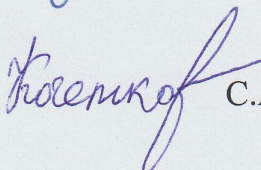
Зам. директора по научной работе, д.т.н.

 С.А. Краснова

Председатель диссертационного совета
24.1.107.01, доктор технических наук

 Б.В. Павлов

И.о. ученого секретаря диссертационного совета
24.1.107.01, доктор технических наук

 С.А. Кочетков

