

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу **Милосердова Олега Александровича** на тему: «Математическое моделирование полимерных цепей в задачах предсказания транспортных характеристик стеклообразных полимеров», представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки)».

Актуальность темы исследования. В настоящее время существует острая потребность в создании новых полимерных материалов в машиностроении, электронике, текстильной и пищевой промышленности, сельском хозяйстве и медицине. Мембранное газоразделение, не является исключением, так как в большинстве мембранных установок используются полимерные материалы, разработанные еще в прошлом веке. Диссертационная работа О.А. Милосердова нацелена на решение задач предсказания транспортных характеристик стеклообразных полимеров методами математического моделирования полимерных цепей. Разработанные математические модели и программный комплекс призваны облегчить и ускорить работу специалистов по синтезу полимеров, а также сократить финансовые затраты на синтез полимеров, которые, согласно моделированию, не обладают нужными транспортными характеристиками. Существующие модели предсказания транспортных характеристик предъявляют высокие требования к вычислительным мощностям и, зачастую, обладают слабой обобщающей способностью. О.А. Милосердов в своей работе учитывает эти недостатки и предлагает свой подход к их устранению.

Рассмотрение содержания диссертационной работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложений. Объем диссертационной работы составляет 159 страниц, в том

числе 143 страницы основного текста, 8 таблиц и 31 иллюстрацию. Список использованных источников из 114 наименований занимает 14 страниц, а приложения занимают 2 страницы.

Во введении. Определена проблематика и обоснована актуальность темы исследования, поставлена цель исследования, определены объект и предмет исследования, выбраны методы исследования, сформулирована научная новизна и практическая ценность результатов исследования, достоверность полученных результатов. Приведены основные положения, выносимые на защиту, а также сведения о внедрении результатов работы и их апробации. Описана структура диссертационной работы.

В первой главе. Вводятся основные транспортные характеристики полимерных материалов, дается постановка задачи дизайна материалов с экстремальными характеристиками. Приведены основные методы предсказания транспортных характеристик: методы QSPR, методы групповых вкладов, методы молекулярной механики и динамики, методы Монте-Карло, методы большого канонического ансамбля и методы машинного обучения.

Во второй главе. В разделе 2.1 описываются три блока, составляющие предложенный автором метод ППКПЦ (предсказания транспортных характеристик полимеров на основе площади поверхности коротких полимерных цепей). В начале раздела описаны идеи применения молекулярно-механического моделирования к моделированию основных транспортных характеристик коэффициентов проницаемости, растворимости и диффузии. В подразделе 2.1.2 вводятся поверхностные и поверхностно-зарядные геометрические индексы, в основе которых лежит площадь поверхности доступной для обкатки газом пенетрантом. Автор вводит новые индексы, основанные на линейной аппроксимации зависимости геометрических индексов в зависимости от радиуса обкатки. В разделе 2.1.3 автор использует зависимость логарифма коэффициента растворимости газа в полимере от максимальной площади проекции молекулы газа и характеристик полимера для построения регрессионной модели.

В разделе 2.2 автор последовательно описывает метод получения конформаций, метод вычисления геометрических индексов и сам подход к обучению регрессионной модели. В данном разделе стоит выделить оригинальный алгоритм получения конформаций, который применим для специфических полимеров, используемых в мембранном газоразделении, и удовлетворяет требованиям точности, устойчивости и экономичности.

В третьей главе. Описывается комплекс программ для предсказания характеристик полимерных газоразделительных мембран. При разработке комплекса программ автором были поставлены следующие критерии: комплекс должен иметь блочную архитектуру, должен обеспечивать стабильность результатов и быть применимым для специфических полимеров, используемых в мембранном газоразделении, а также иметь возможность автоматизации и распараллеливания. Важным плюсом является использование свободно распространяемого программного обеспечения. Разработанный комплекс программ рассчитан на два сценария использования: исследовательский и пользовательский. Исследовательский сценарий позволяет использовать полный функционал комплекса программ, включающий в себя разработку новых регрессионных моделей и использование моделей, предложенных автором. Также можно исследовать влияние отличных от предложенных автором геометрических и прочих индексов на транспортные свойства полимерных мембран. Пользовательский комплекс представляет собой урезанный функционал программ и может быть интересен и полезен ученым, занимающимся синтезом полимеров для сокращения набора исследуемых полимеров за счет предсказания транспортных характеристик и отбора наиболее перспективных структур.

В четвертой главе. Описаны прикладные задачи анализа и синтеза полимерных материалов, решенные автором в процессе написания диссертационной работы. В начале главы приведено описание базы данных, используемой автором в качестве источника экспериментальных данных для обучения регрессионных моделей и моделей кластеризации. В разделе 4.2

дается обоснование достаточной длины полимерной цепи и количества генерируемых конформаций, автор показывает, что для устойчивых значений индексов достаточно использовать макромолекулы длиной в 600 атомов и генерировать 6 конформаций для дальнейшего усреднения значений геометрических индексов. В разделе 4.3 представлена обученная универсальная регрессия для предсказания коэффициента растворимости S , которую можно использовать на широком наборе химических классов полимеров и газов. Также обучены частные регрессии по отдельным газам, которые дают более точный результат предсказания, однако обладают меньшей обобщающей способностью. В разделе 4.4 приведен процесс обучения регрессионной модели, способной предсказать значение константы Генри k_D , а в разделе 4.5 – метод кластеризации полимеров на основе их геометрии и анализ связей между геометрией полимерных цепочек и транспортными характеристиками веществ.

Научная новизна полученных результатов. Работа Милосердова О.А. сочетает в себе результаты и подходы физической химии, компьютерного моделирования и современные инструменты машинного обучения. Основным элементом научной новизны является применение современных инструментов компьютерного моделирования, анализа данных и оптимизации для повышения эффективности принимаемых решений при поиске новых соединений. Предложены новая модель, численный метод и алгоритм предсказания транспортных характеристик аморфных полимеров на основе площади поверхности коротких полимерных цепей. Предложено новое семейство геометрических поверхностно и поверхностно-зарядных индексов, основанных на линейной аппроксимации зависимости геометрических индексов в зависимости от радиуса обкатки на некотором диапазоне эффективных радиусов обкатки. Разработан комплекс программ, который может быть использован исследователями для более эффективного поиска полимеров с экстремальными транспортными характеристиками.

Замечания по диссертационной работе.

- 1) В работе не проведен аналитический анализ алгоритмической сложности предложенных алгоритмов, приводится только экспериментальная оценка.
- 2) Нигде не написано, что алгоритмы вычисления индексов — это разновидность методов интегрирования функций по сложной поверхности полимерной молекулы.
- 3) Описание алгоритмов выполнено не по ГОСТ.
- 4) Введение диссертации несколько затянуто.
- 5) В работе имеются грамматические и пунктуационные ошибки.

Указанные замечания не снижают ценность и качество научно-исследовательской работы и не являются определяющими

Заключение

Диссертационная Милосердова Олега Александровича «Математическое моделирование полимерных цепей в задачах предсказания транспортных характеристик стеклообразных полимеров» является законченной научно-квалификационной работой, содержит новые результаты, имеющие практическую значимость и научную ценность, и новое решение актуальной задачи моделирования транспортных характеристик полимерных мембранных материалов. Диссертационная работа Милосердова О.А. отвечает всем критериям, изложенным в постановлении ВАК «О присуждении ученых степеней» и полностью соответствует специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки)». Автор диссертационной работы заслуживает присуждения степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки).

Официальный оппонент

Кузнецов Сергей Олегович, доктор физико-математических наук по специальности 05.13.17 – Теоретические основы информатики, профессор, руководитель Департамента анализа данных и искусственного интеллекта факультета компьютерных наук, заведующий международной научно-учебной лабораторией «Интеллектуальные системы и структурный анализ» Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики».

109028, Россия, г. Москва,

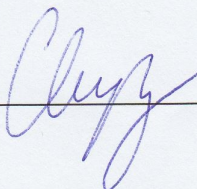
Покровский б-р, д. 11, каб. Т719

Ординарный профессор, руководитель департамента

Телефон: +7 (495) 772-95-90 (27318)

Электронная почта: skuznetsov@hse.ru

«20» декабря 2022 г.

 /С.О. Кузнецов

Подпись официального оппонента Сергея Олеговича Кузнецова д.ф.-м.н.,
Профессора Национального исследовательского университета «Высшая
школа экономики» «заверяю»

