

О Т З Ы В

на автореферат диссертации
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)

В диссертационной работе Милосердова О.А. решается задача разработки методов математического моделирования полимерных цепей в задачах прогнозирования транспортных характеристик стеклообразных полимеров в интересах мембранного газоразделения. Разработанный автором оригинальный метод предсказания транспортных характеристик полимеров состоит из трех основных составляющих: молекулярно-механического моделирования, расчета специфических геометрических индексов и блока машинного обучения с использованием регрессий и методов кластеризации.

Предложен отличающийся от аналогов метод и алгоритм предсказания транспортных характеристик аморфных полимеров на основе площади поверхности коротких полимерных цепей. Новое семейство геометрических молекулярных дескрипторов, основанных на анализе кривых зависимости площади доступной поверхности молекул от радиуса обкатки позволяют получить индексы характеризующие геометрические и зарядные параметры полимерных структур и связать их с эффективным диапазоном радиусов обкатки.

Автором разработан комплекс программ, реализующий предложенные в работе методы и алгоритмы. Комплекс программ позволяет работать с широким набором химических классов полимеров и газов. Отдельно стоит отметить возможность работы с комплексом программ, как на стационарном персональном компьютере, так и на серверных мощностях.

Результаты и выводы, представленные в автореферате, обладают серьезной практической значимостью. Применение разработанных методов, алгоритмов и инструментария могло бы ускорить разработку и открытие новых полимерных материалов, используемых в мембранном газоразделении, а также сократить финансовые затраты на исследования и синтез подобных материалов.

Оригинальность и апробация научных положений и выводов, сформулированных в диссертационной работе, подтверждается публикациями и выступлениями на конференциях и семинарах, поэтому не вызывает сомнений.

В то же автореферат не лишён недостатков:

- 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.

Вместе с тем следует отметить, что указанные выше замечания не снижают общей положительной оценки диссертационной работы, результаты которой обладают научной новизной и практической значимостью.

На основе содержания автореферата диссертации 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), считаю её отвечающей требованиям ВАК при Министерстве науки и высшего образования Российской Федерации, приведенным в п.9 Положения о присуждении учёных степеней, а её автор – Милосердов Олег Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки).

Заведующий Кафедрой технологии программирования,
доцент, кандидат технических наук



И.С. Блеканов

ФГБОУ ВО

«Санкт-Петербургский государственный университет»
199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7-9

09 января 2023 г.



Текст документа размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
<http://spbu.ru/science/expert.html>