

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации МИЛОСЕРДОВА Олега Александровича «Математическое моделирование полимерных цепей в задачах предсказания транспортных характеристик стеклообразных полимеров», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки)»

Диссертационная работа посвящена актуальным задачам разработки новых методов и алгоритмов для решения задач предсказания свойств веществ по их структурной формуле на примере транспортных характеристик полимерных материалов, используемых в области мембранного газоразделения.

Автор предлагает оригинальный метод предсказания транспортных характеристик аморфных полимеров, основанный на анализе кривых зависимости площади доступной поверхности коротких полимерных цепей. В основе предлагаемого метода стоит предположение, что коэффициент растворимости газа в полимере зависит от параметров поверхности контакта между молекулой полимера и молекулой газа. В качестве таких характеристик для полимера используются новые специальные поверхностные и поверхностно-зарядные геометрические индексы, которые описываются зависимостью стандартных индексов (в основном площадь поверхности обкатки газом пенетрантом) от радиуса газа пенетранта. Газ в рассматриваемой модели представляется одной характеристикой, а именно максимальной площадью проекции, что оказывается более эффективным, чем общепринятая площадь поверхности обкатки.

Для моделирования молекулярных структур полимера автор использует методы молекулярно-механического моделирования. Конформация молекулы полимера получается процедурой схожей с процедурой полимеризации.

Разработанные регрессионные модели для предсказания коэффициента растворимости и константы Генри показывают качество, схожее с методами групповых вкладов. Стоит отметить выполненную в работе разработку как универсальной регрессии, так и частных регрессий для наиболее популярных газов.

Предложенный автором комплекс программ состоит из отдельных блоков и имеет два сценария использования, что делает его удобным для использования как химикам, занимающимся синтезом полимеров, так и исследователям, специализирующимся на разработке новых моделей и методов предсказания транспортных характеристик материалов. Комплекс программ полностью состоит из программного обеспечения с открытым кодом, что является несомненным плюсом в контексте обеспечения технологической независимости.

Результаты диссертационной работы опубликованы в различных российских и международных рецензируемых журналах, а также представлены на 13 конференциях.

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

Указанный недостаток не снижает научной значимости работы и достоверности представленных результатов.

Диссертационная работа Милосердова О.А. «Математическое моделирование полимерных цепей в задачах предсказания транспортных характеристик стеклообразных полимеров» является научно-квалификационной работой и соответствует всем требованиям пунктов 9-11, 13, 14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2014 г. № 842 (с изменениями и дополнениями), соответствует паспорту

специальности, а ее автор, Милосердов Олег Александрович, заслуживает присуждения учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки)».

Доктор технических наук,
директор Инжинирингового центра Федерального
государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования «Российский
экономический университет имени Г.В. Плеханова»
(ФГБОУ ВО «РЭУ им. Г.В. Плеханова»)
117997, Российская Федерация, г. Москва,
Стремянный пер., 36
Телефон: +7 (499) 237-83-31 доб. 2575
E-mail: Burmistrov.IN@rea.ru

И.Н. Бурмистров

