

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы

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)»

Работа посвящена разработке эффективных методов поиска полимерных материалов, используемых для создания газоразделительных мембран. Для расчета транспортных характеристик аморфных полимеров предлагается новый метод предсказания, основывающийся на расчете площади поверхности коротких полимерных цепей (ППКПЦ).

Среди новых научных результатов, полученных автором, стоит отметить: метод и алгоритм моделирования геометрии коротких отрезков молекул полимерных материалов, вычисления для них числовых геометрических индексов, а также предсказание транспортных характеристик материалов методами машинного обучения и регрессионного анализа. Отдельного внимания заслуживает новое семейство геометрических молекулярных дескрипторов, основанных на анализе кривых зависимости площади доступной поверхности молекул от радиуса «обкатки», а также разработанный комплекс программ, реализованный с использованием программного обеспечения с открытым исходным кодом, которое можно использовать как на персональном компьютере, так и на серверных мощностях.

Результаты работы имеют практическую значимость в задачах предсказания коэффициента растворимости легких газов в стеклообразных

полимерах различных классов, используемых в мембранной технологии, предсказания константы Генри стеклообразных полимеров различных химических классов, кластеризации полимерных материалов различных классов на основе геометрии их молекул для их типизации. Также стоит отметить применение разработанного метода для прогнозирования коэффициента растворимости и селективности растворимости новых, еще не синтезированных, полимеров.

В автореферате указан личный вклад автора Милосердова О.А. в публикациях, написанных в соавторстве. Достоверность полученных результатов подтверждена статистическими методами и соответствием полученных результатов опубликованным в рецензируемых журналах. Результаты работы внедрены в ИНХС РАН, достаточно полно опубликованы в журналах, включенных в перечень ВАК и международные реферативные базы данных, прошли достаточную апробацию на конференциях.

Судя по автореферату, содержание диссертационной работы соответствует специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки)».

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 «достаточной длины конформации». Очевидно, имеется в виду выражение «достаточной длины полимерной цепи».

Отмеченные недостатки не влияют на качество проведенного исследования и не снижают ценности и значимости результатов работы. В целом, судя по автореферату, диссертационная работа Милосердова Олега

Александровича на тему «Математическое моделирование полимерных цепей в задачах предсказания транспортных характеристик стеклообразных полимеров» является завершённым исследованием, выполнена на высоком научном уровне и отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее соискатель заслуживает присуждения учёной степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки)».

Старший преподаватель автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий», кандидат физико-математических наук
(02.00.06 – Высокомолекулярные соединения)

Владимир Владимирович Палюлин

Подпись В.В. Палюлина удостоверяю

РУКОВОДИТЕЛЬ ОТДЕЛА
КАДРОВОГО АДМИНИСТРИРОВАНИЯ



20.09.2023г.

Адрес:

121205, г. Москва, территория инновационного центра «Сколково», Большой бульвар, д. 30, стр. 1

Тел.: 8 (495) 280 14 81

эл. почта: v.palyulin@skoltech.ru