

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Милосердова Олега Александровича на тему: «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 Милосердова О.А. посвящена разработке методов и алгоритмов в области прогнозирования свойств веществ, что является крайне актуальной задачей не только в области мембранного газоразделения, но и во многих областях промышленности и медицины. Для решения поставленной задачи использованы методы молекулярного моделирования, машинного обучения и математической статистики. При реализации разработанных методов используется среда Python и различные пакеты программного обеспечения с открытым исходным кодом.

Научная новизна данной работы заключается в использовании оригинального метода молекулярного моделирования участка короткой полимерной цепи, в котором моделируется процесс последовательной полимеризации молекулы, когда все новые присоединяемые мономеры влияют лишь на соседние с ними мономеры цепи. Также новым является семейство геометрических индексов, которые характеризуются линейной зависимостью поверхностно и поверхностно-зарядных индексов от радиуса газа пенетранта на определённом ее участке, который выбирается с помощью методов машинного обучения.

К достоинствам диссертационного исследования следует отнести практическую значимость, что отмечено актом о внедрении полученных результатов и комплекса программ. По теме диссертации опубликовано 13 работ, среди которых 5 публикаций в рецензируемых научных изданиях,

индексируемых Web of Science и Scopus, и 8 публикаций в сборниках трудов и тезисов конференций.

По автореферату можно сделать следующие замечания:

1. Недостаточно полно приведено содержание Главы 1, в которой описываются существующие методы решения поставленной задачи.

2. 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.

Несмотря на вышеперечисленные замечания, можно утверждать, что кандидатская диссертация выполнена на высоком уровне, обладает научной новизной и практической значимостью. Диссертационная работа соответствует всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, соответствует критериям, установленным положением о присуждении ученых степеней, соответствует шифру специальности, а ее автор, Милосердов Олег Александрович, заслуживает присвоения степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки)».

Зав. Лаб. д.ф.-м.н.



Павленко А.В.

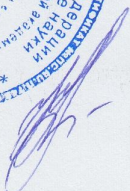
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Федеральный исследовательский центр Южный научный центр Российской академии наук».

Адрес: 344006, г. Ростов-на-Дону, пр. Чехова, 41. ЮНЦ РАН.



Подпись д.ф.-м.н. Павленко А.В. заверяю.

Ученый секретарь ЮНЦ РАН, канд.биол.наук
Тел. (863) 250-9829, e-mail: ssc-ras@ssc-ras.ru



Н.И. Булышева

11.01.23г.