

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН

Стенограмма
заседания диссертационного совета
24.1.107.01

06 февраля 2023 года

Защита диссертации Милосердовым Олегом Александровичем на соискание
ученой степени кандидата технических наук на тему «Математическое
моделирование полимерных цепей в задачах предсказания транспортных
характеристик стеклообразных полимеров» по специальности – 1.2.2
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ
(технические науки)»

Москва 2023

Стенограмма
заседания диссертационного совета 24.1.107.01 при Федеральном
государственном бюджетном учреждении науки Институте Проблем
Управления им. В.А. Трапезникова РАН

Председатель диссертационного совета – д.т.н. Павлов Б.В.

И.о. ученого секретаря диссертационного совета – д.т.н. Кочетков С.А.

Состав Совета утвержден в количестве 28 человек. На заседании из 28 членов присутствует 22 человека, по профилю рассматриваемой специальности присутствует 9 докторов наук:

1	Павлов Б.В.	доктор технических наук	2.3.1.
2	Кульба В.В.	доктор технических наук	2.3.3.
3	Бахтадзе Н.Н.	доктор технических наук	2.3.3.
4	Вишневский В.М.	доктор технических наук	1.2.2.
5	Галяев А.А.	член-корреспондент	1.2.2.
6	Гребенюк Г.Г.	доктор технических наук	2.3.3.
7	Жилякова Л.Ю.	доктор физико-математических наук	1.2.2.
8	Калашников А.О.	доктор технических наук	1.2.2.
9	Каршаков Е.В.	доктор технических наук	2.3.1.
10	Кочетков С.А.	доктор технических наук	2.3.1.
11	Краснова С.А.	доктор технических наук	2.3.1.
12	Лебедев В.Г.	доктор технических наук	1.2.2.
13	Меденников В.И.	доктор технических наук	2.3.3.
14	Пашенко Ф.Ф.	доктор технических наук	1.2.2.
15	Пестерев А.В.	доктор физико-математических наук	1.2.2.
16	Рапопорт Л.Б.	доктор физико-математических наук	2.3.1.
17	Салихов З.Г.	доктор технических наук	2.3.3.
18	Уткин В.А.	доктор технических наук	2.3.1.
19	Фархадов М.П.	доктор технических наук	1.2.2.
20	Цвиркун А.Д.	доктор технических наук	2.3.3.
21	Честнов В.Н.	доктор технических наук	2.3.1.
22	Ядыкин И.Б.	доктор технических наук	1.2.2.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

В соответствии с распоряжением директора нашего института все заседания диссертационного совета мы проводим в очном режиме, поэтому сегодня у нас очное заседание. Кворум имеется. В связи с тем, что Е.Ф. Жарко – учёный секретарь диссертационного совета, в отпуске, то приказом директора исполняющим обязанности назначен Кочетков Сергей Александрович. У него опыт есть, он был в своё время секретарем диссертационного совета, поэтому я думаю, что он справится. Сегодня в повестке дня у нас защита двух

кандидатских диссертаций на соискание учёной степени кандидата технических наук. Первая диссертация – Милосердов Олег Александрович защищается по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки)». Диссертация называется «Математическое моделирование полимерных цепей в задачах предсказания транспортных характеристик стеклообразных полимеров», научный руководитель Губко Михаил Владимирович. Слово имеет ученый секретарь.

Д.т.н. С.А. Кочетков (И.о. ученого секретаря):

Соискатель Милосердов Олег Александрович, 1992 года рождения окончил бакалавриат (2014г.) и магистратуру (2016г.) факультета радиотехники и кибернетики Московского физико-технического института, и аспирантуру Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем управления им. В.А. Трапезникова Российской академии наук (далее – ИПУ РАН) 21 октября 2021 года. В настоящее время работает в ИПУ РАН в лаборатории №77 «Вычислительной кибернетики» в должности научного сотрудника. Диссертация выполнена в этой же в лаборатории №77 «Вычислительной кибернетики» Института проблем управления им. В.А. Трапезникова Российской академии наук.

Официальные оппоненты: Печников Андрей Анатольевич, доктор технических наук, доцент, главный научный сотрудник Института прикладных математических исследований – обособленного подразделения Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Карельский Научный Центр Российской академии наук». Второй оппонент – Кузнецов Сергей Олегович, доктор физико-математических наук, профессор Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», руководитель департамента анализа данных и искусственного интеллекта, заведующий международной научно-учебной лабораторией «Интеллектуальные системы и структурный анализ»

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо большое, есть ли вопросы к учёту секретарю? Нет вопросов к ученому секретарю? Спасибо большое. Тогда, Олег Александрович, вам слово. Двадцать, двадцать пять минут.

О.А. Милосердов (соискатель):

(кратко излагает актуальность темы, основные положения диссертации, содержащие научную новизну, результаты исследований. Автореферат диссертации и раздаточный материал имеется у каждого члена Совета и в личном деле соискателя.)

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо большое какие будут вопросы? Возьмите микрофон для записи.

Чл.-корр. Галяев А.А. (член Совета):

Чем форма цепи отличается от геометрии конформации цепи?

О.А. Милосердов (соискатель):

Геометрия описывает топологию цепи, то есть форма может быть клубком закручена, может быть закручена спиралью. Мой метод не учитывает межцепочечное взаимодействие и то, как она закручивается, а описывается именно геометрией, то есть локальными взаимодействиями.

Чл.-корр. Галяев А.А. (член Совета):

То есть вы предлагаете использовать только некоторую оболочку, которую вы предлагаете строить на основе, того, как вы строили шарик, который у вас обкатывает поверхность этой вот цепи.

О.А. Милосердов (соискатель):

Шарик представляет собой, то есть это какой-то, по сути, газ. Представляем газ в виде шарика, да, он обкатывает нашу макромолекулу, и на основе этого метода мы считаем поверхностные, поверхностно-зарядные индексы, то есть там не только поверхности, но и заряды.

Чл.-корр. Галяев А.А. (член Совета):

Тогда второй вопрос, который с этим связан. А на сколько вот ваш метод чувствителен к размерам вот этого шарика?

О.А. Милосердов (соискатель):

На сколько чувствителен? Он работает в пределах от 0.7 до...

Чл.-корр. Галяев А.А. (член Совета):

То есть вы это посчитали эти параметры, имеете чувствительность и...

О.А. Милосердов (соискатель):

Да, да, да, то есть он работает для большинства газов, которые используется в мембранном газоразделении.

Чл.-корр. Галяев А.А. (член Совета):

А границы применимости? Вот вы получили, то есть на сколько хорошо использовать, не знаю, крупные шарики, мелкие шарики? Как резко меняются транспортные свойства? Мне так кажется, что хорошо бы иметь грубый метод оценки, то есть вот вы просто неким шариком обкатали и вы видите, что в дальнейшем уже транспортные свойства молекул у вас не сильно зависят от того, как вы его размеры уменьшаете. И, может быть, вы тогда можете дать

рекомендации как раз на тему того, что вы можете использовать конкретные даже большие геометрические конструкции, которые позволяют оценить транспортные свойства молекул.

О.А. Милосердов (соискатель):

Получается, что для больших молекул газа метод уже работает гораздо хуже, то есть мы не использовали подобные. Во-первых, достаточно мало таких экспериментальных данных, так как редко используются такие газы в мембранном газоразделении. То есть граница этого метода это порядка там 2.3-2.4 ангстрем для радиуса этого шарика.

Чл.-корр. Галяев А.А. (член Совета):

Спасибо.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо, какие вопросы ещё будут? Вопросы?

Д.т.н. Фархадов М.П. (член Совета):

Скажите пожалуйста, какие характеристики полимерных материалов не устраивали, конкретно существующих материалов, не устраивали вас или производителей, что вы обратились именно к этой теме? И ещё, зависит ли это, скажем, от применения этих полимерных материалов, например, с какими-то экстремальными характеристиками?

О.А. Милосердов (соискатель):

Спасибо за вопрос. Часто устраивает именно качество характеристик именно транспортных, но не устраивает качество характеристик самого полимера в газоразделительной мембране. То есть она может быть слишком хрупкой и там нельзя повышать давление. Например, хочется разработать полимер, пусть даже хотя бы повторяющий эти характеристики, но при этом, чтобы он был более прочный или в другом температурном режиме работал в более широком, как правило, такие задачи решаются. Конкретно назвать какие характеристики на каком-то примере я не смогу, но и идея в том, что разработать именно полимеры с лучшими характеристиками, как транспортными, так и физическими.

Д.т.н. Фархадов М.П. (член Совета):

Понятно, спасибо. И ещё у меня такой вопрос. На основе каких критериев вы разработали кластеризацию аморфных полимеров?

О.А. Милосердов (соискатель):

Позвольте уточню, на основе каких критериев выбраны именно там пятнадцать кластеров?

Д.т.н. Фархадов М.П. (член Совета):

Да.

О.А. Милосердов (соискатель):

Мы визуально смотрели как разбиваются, и мы использовали метрики кластеризации, но они на определённом моменте перестали быть эффективными, поэтому мы консультировались с коллегами из ИНХС РАН, смотрели на какие группы разбиваются полимеры, смотрели, как полимеры разбиваются внутри химических классов, как они разбиваются согласно именно геометрии полимерной цепи. В совокупности сделали этот метод кластеризации.

Д.т.н. Фархадов М.П. (член Совета):

Спасибо. И какие перспективы, если можно, ответить на мой вопрос.

О.А. Милосердов (соискатель): Спасибо. В принципе уже получен сертификат о внедрении, то есть данный метод был использован в Институте нефтехимического синтеза, как при грантовых работах, так и в работах по госзаданию. Естественно, хочется глубже внедрить этот метод и, возможно, распространить не только метод, но и программный комплекс, на другие организации. Также хотелось бы сделать комплекс программ лучше. Сейчас он представлен в виде работы в терминале, хотелось бы сделать визуальную составляющую программного комплекса, чтобы можно было удобнее работать.

Д.т.н. Фархадов М.П. (член Совета):

Спасибо.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо большое. Уткин.

Д.т.н. В.А. Уткин (член Совета):

Внедрение есть какое-то? Где ваши результаты внедрены были?

О.А. Милосердов (соискатель):

Да, да, есть акт о внедрении в ИНХС РАН, как я сказал уже, он использовался учёными...

Д.т.н. В.А. Уткин (член Совета):

Что является объектом внедрения?

О.А. Милосердов (соискатель):

Программный комплекс и метод.

Д.т.н. В.А. Уткин (член Совета):

Где-нибудь зафиксирован программный продукт?

О.А. Милосердов (соискатель):

Да, да, программные продукт зарегистрирован, есть сертификат о регистрации. Он представлен в приложении к диссертации, так же как и акт о внедрении.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо, спасибо большое. Каршаков.

Д.т.н. Е.В. Каршаков (член Совета):

Можно, пожалуйста, вот такой вопрос, у вас тут в научных результатах второй результат содержит формулировку реалистичной молекулы полимерных цепей. Что значит реалистичный?

О.А. Милосердов (соискатель):

Объясню, спасибо за вопрос, хороший вопрос. Когда мы подбирали, вообще изначально, когда пришли вот в эту задачу, мы не хотели заниматься именно моделированием, то есть мы хотели найти уже какой-то готовый метод, который способен дать нам то, что мы хотим, а сами дальше заниматься статистикой. Но, как оказалось, нет методов, которые разрабатывались именно под полимеры, которые используются в мембранном газоразделении, и пришлось разрабатывать свой. И вот при разработке, мы общались с коллегами с химиками, которые смотрели полученные нами модели. Например, есть методы, которые бензольное кольцо сгибают, то есть оно должно быть плоским. Вот, и много-много разных таких моментов. Собственно реалистичность — это описание того, как они реально будут выглядеть в полимере. И это, по сути, определялось как с помощью параметров табличных, например, торсионных углов и прочего, так и с помощью коллег из ИНХС РАН.

Д.т.н. Е.В. Каршаков (член Совета):

Да, спасибо, ещё вопрос. Вот этот полученный программный продукт выполняет, насколько я понимаю, реализует решение прямой задачи, на сколько эта вычислительно трудоёмко? Сколько времени занимает обсчёт в конкретной задаче?

О.А. Милосердов (соискатель):

Спасибо за вопрос. Один полимер может обсчитываться от нескольких десятков минут до нескольких часов. Особо сложные, которые там сильно гнутся, могут перевалить за сутки. Здесь идея в том, что программный комплекс создан таким образом, что имеет возможность распараллеливания на кластере. И в сравнении с методами, например, молекулярной динамики, где может считаться месяц один полимер, здесь за неделю-две на кластере можно рассчитать сотни полимеров. Что позволяет, как решать прямую задачу, так и решить кусочек обратной задачи. Это когда мы ограничиваем выборку,

например, конкретным химическом классом. То есть, химики смотрят, например, вот эти 300 структур должны быть перспективными, какие из них лучше? Соответственно запускается метод, выстраиваются в порядке убывания или возрастания нужные характеристики и выбираются уже структуры, с которыми потом химики могут работать и синтезировать, не тратя время на лишние эксперименты.

Д.т.н. Е.В. Каршаков (член Совета):

Да спасибо. Собственно, это и был следующий вопрос по поводу поиска решения обратной задачи, но я так понимаю, вы уже движетесь в этом направлении. Спасибо.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо большое. Есть ли какие вопросы ещё? Пащенко.

Д.т.н. Ф.Ф. Пащенко (член Совета):

Скажите пожалуйста, вы использовали его для моделирования фактически и прогнозирования. Фактически регрессионная модель. Какая размерность в этих моделях была?

О.А. Милосердов (соискатель):

Спасибо за вопрос. Под размерностью вы подразумеваете...

Д.т.н. Ф.Ф. Пащенко (член Совета):

Факторы, которые вы учитываете сколько их было?

О.А. Милосердов (соискатель):

То есть сколько объясняющих переменных? Если говорить про, например, регрессионную модели для коэффициента растворимости, здесь 5 объясняющих переменных, описывающих полимер и одна переменная, описывающая газ.

Д.т.н. Ф.Ф. Пащенко (член Совета):

Хорошо, вот здесь у вас фактически линейная модель, а не линейные модели вы использовали?

О.А. Милосердов (соискатель):

Там мы пробовали использовать нелинейные модели. Но качество это не улучшает, лишь увеличивает количество переменных, что плохо сказывается на объясняющей способности. Проблема вообще, что достаточно мало экспериментальных данных. В том числе поэтому используются, например, регрессионные модели, а не нейронные сети, как бы хотелось, как в случае с белками, когда известны экспериментальные данные по сотням тысяч структур.

Д.т.н. Ф.Ф. Пашенко (член Совета):

Вот уравнение десять у вас, это что логарифм растворимости? Или это алгоритм коэффициента растворимости у вас получается.

О.А. Милосердов (соискатель):

Это логарифм коэффициента растворимости.

Д.т.н. Ф.Ф. Пашенко (член Совета):

Поскольку вы решаете обратную задачу как оценить сам коэффициент растворимости?

О.А. Милосердов (соискатель):

Сейчас она записана как нелинейная модель, потому что здесь есть произведение двух переменных: максимальной площади проекции и переменных, объясняющих и описывающих полимер. Но мы обучали её линейным способом, с помощью методов, которые предназначены для именно линейной регрессии, так как я ранее показал перевод этой формы в линейный вид.

Д.т.н. Ф.Ф. Пашенко (член Совета):

Спасибо, ещё один вопрос. Скажите, пожалуйста, какой горизонт предсказания у вашей модели? Сколько это год, десять часов, одна минута? У транспортных свойств полимера.

О.А. Милосердов (соискатель):

Эта модель не описывает эволюцию во времени, то есть это не молекулярная динамика. Здесь предсказывается условный коэффициент растворимости, который характеризует конкретный пример. Здесь нет какого-то горизонта.

Д.т.н. Ф.Ф. Пашенко (член Совета):

Ну да, спасибо.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо, какие вопросы ещё будут? Кульба.

Д.т.н. В.В. Кульба (член Совета):

Скажите пожалуйста, как вы считаете, какой процент от комплексного исследования, какой процент от комплекса проблем вы реализовали?

О.А. Милосердов (соискатель):

Спасибо за вопрос. Все задачи, которые были поставлены, при выполнении данного исследования выполнены.

Д.т.н. В.В. Кульба (член Совета):

Выполнены это понятно. Какой процент от комплексной проблемы выполнен?

О.А. Милосердов (соискатель):

Я бы сказал, что сделаны достаточно большие успехи в решении именно прямой задачи, но хотелось бы двигаться в сторону решения обратной задачи, поэтому есть куда стремиться в этом плане. Не оценивал точный процент. Есть ещё куда расширяться, во-первых, в плане выборки, на которой обучены регрессионной модели, так как, как я уже показывал, структуры, которые используются в мембранном газоразделении они очень разнообразны. Поэтому решить обратную задачу в ближайшем будущем пока не представляется возможным. Прямую задачу мы можем решать на каких-то конкретных химических классах, на каком-то диапазоне радиусов газов, на котором работает данный метод.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо большое, есть еще вопросы? Спасибо присаживайтесь.

По положению слово имеет научный руководитель, но он отсутствует на заседании, отзыв научный руководитель предоставил, поэтому я прошу учёного секретаря основные положения отзывы зачитать.

Д.т.н. С.А. Кочетков (И.о. ученого секретаря):

Обычно научный руководитель характеризует самого диссертанта, поэтому позвольте я из отзыва именно зачитаю то, что характеризует соискателя как специалиста и человека. Отмечается, что Олег Александрович успешно закончил обучение, отлично сдал все квалификационные экзамены и подготовил хороший выпускную квалификационную работу. За время обучения Олег Александрович принимал участие в реализации планах фундаментальных исследованиях лаборатории 57 и 77, участвовал в различных научных проектах грантов РФФИ и РФФИ, которые были связаны с цифровыми системами управления в агропромышленном комплексе и показал себя грамотным, квалифицированным, ответственным и исполнительным молодым специалистом, имеющим хорошую базовую подготовку. Его отличает высокая работоспособность в сочетании с готовностью осваивать новые для себя области знаний. Без отрыва от основной работы О.А. Милосердов подготовил и представил к защите диссертацию.

Олег Александрович является способным молодым специалистом и уже сложившимся ученым, обладающим глубокими знаниями в таких разных областях как теория графов, машинное обучение и глубокие нейронные сети, обработка изображений, математическая химия, численные методы, и многие другие.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо, нет необходимости более подробно зачитать отзыв? Нет? Спасибо большое. Ученому секретарю представляется слово для зачитания отзывов, поступивших на диссертацию и на автореферат.

Д.т.н. С.А. Кочетков (И.о. ученого секретаря):

В деле имеется заключение ведущей организации федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН), подписанное заведующий лабораторией физики и механики полимеров, доктором физико-математических наук старшим научным сотрудником Ковалевой Маргаритой Алексеевной и утвержденным директором ФИЦ ХФ РАН доктором химических наук, профессором Надточенко В.А. Я зачитаю основные замечания и заключения.

1. Работу хорошо бы дополнило исследование карты Рамачадрана для различных полимерных структур.
2. Автор ограничивается использованием линейных регрессий и не приводит сравнение, например, с полиномиальными регрессиями или с простыми нейронными сетями в несколько полносвязных слоев.
3. В главе 1 хотелось бы более четкого описания метода Гастайгера-Марсили: какие данные используются как исходные и что подгоняется.
4. В главе 2 для простоты восприятия хотелось бы иллюстрации структуры всех рассматриваемых полимеров.
5. В главе 3 не хватает простого визуального интерфейса, автор предлагает использовать терминал.
6. В работе не хватает сравнения полученных разработанным методом конформаций с результатами более точных методов молекулярно-динамического моделирования.

Отмечается, что диссертация является законченным научным исследованием, полностью удовлетворяет критериям положения о присуждении научных степеней, предъявляемых к диссертации на соискание степени кандидата технических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (технические науки)», а ее автор, Милосердов Олег Александрович, заслуживает присуждения степени кандидата технических наук по этой специальности.

В деле имеется отзывы, поступившие на автореферат. Я, с вашего позволения, зачитываю только замечания.

1. Отзыв на автореферат д.ф.-м.н. Павленко А.В., заведующего лабораторией наноразмерных активных сред и материалов «Федерального исследовательского центра Южный научный центр Российской академии наук», содержит следующие замечания:

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

2. Отзыв на автореферат к.ф.-м.н., Юмашева М.В., доцента кафедры газовой и волновой динамики механико-математического факультета Федерального

государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова», содержит следующие замечания:

- Автореферат диссертации изложен грамотно и логично, однако стоит отметить, что в нем недостаточно представлено описание и результаты моделирования с помощью метода молекулярно-механического моделирования
- Не хватает сравнения с результатами молекулярного моделирования другими известными методами, в том числе приведенными в первой главе диссертации.
- Также стоило бы больше сфокусироваться на описании и исследовании полученных регрессий.

3. Отзыв на автореферат к.т.н. Блеканова И.С., доцента, заведующего кафедрой технологии программирования Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургского государственного университета», содержит следующие замечания:

- 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.

4. Отзыв на автореферат к.ф.-м.н. Палюлина В.В., старшего преподавателя автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковского института науки и технологии», содержит следующие замечания:

- 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 «достаточно длины конформации». Очевидно, имеется ввиду выражение «достаточно длины полимерной цепи».

5. Отзыв на автореферат д.т.н. Бурмистрова И.Н., директора инженерингового центра Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российского экономического университета имени Г.В. Плеханова», содержит следующие замечания:

- 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 моделирования и методами молекулярно-динамического моделирования. Отмечу что все отзывы положительные и рекомендуется соискателю присвоение учёности степени.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо, есть ли еще вопросы?

Д.т.н. С.А. Кочетков (И.о. ученого секретаря):

Да вопрос был по результатам внедрения нас в деле имеется акт о внедрении результатов диссертационной работы. Акт подписан директором федерального государственного бюджетного учреждения науки ордена трудового красного знамени института нефтехимического синтеза им. Топчиева РАН членом корреспондентом РАН, доктором химических наук Максимовым. Значит, в отзыве отмечается, что разработан метод прогнозирования транспортных свойств стеклообразных полимеров под названием предсказания на основе поверхности коротких полимерных цепей и реализованный на его основе программный комплекс для прогнозирования транспортных свойств стеклообразных полимеров, являющийся результатами диссертационной работы Милосердного Олега Александровича были использованы в исследованиях лаборатории Мембранного газа разделения при реализации: в программе фундаментальных исследований за 2017 год по теме «Мембранное разделение и мембраны катализ в химии, энергетике, экологии: новые мембранные материалы, высокопроизводительные мембраны и процессы на их основе. Написан шифр и номер госрегистрации. Далее использованы также в программе фундаментальных исследований за 2018-2019 годы по теме «Новые материалы и высокопроизводительные мембраны для разделения жидких и газовых смесей, а также мембраны катализ в химических процессах получения продуктов высокой частоты» номер госрегистрации имеется. Также результаты были использованы в результатах работ по гранту РФФИ № 17-18-00164 «Компьютерное моделирование наноструктуры и мембранных материалов: традиционные и новые подходы» Отзыв подписан исполняющим обязанности заведующего лабораторией Мембранного газа разделения, старшим научным сотрудником, кандидатом химических наук Беловым, ведущим научным сотрудником, доктором химических наук, профессором Алентьевым и младшим научным сотрудником, кандидатом химических наук, Рыжих. У меня все, спасибо.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо большое, есть ли необходимость более подробно какой-нибудь документ или отзыв? Готовы зачитать. Уткин.

Д.т.н. В.А. Уткин (член Совета):

Разве ведущая организация и организации внедрения совместимы?

Д.т.н. С.А. Кочетков (И.о. ученого секретаря):

Подождите, ведущая организация ФИЦ ХФ РАН, а акт внедрения ИНХС РАН. Это две разных организаций.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Есть ли какие-нибудь другие вопросы, нет необходимости? По положению ВАК может диссертант выступить в соответствии с замечаниями, сейчас либо после. Я думаю, что лучше бы выступить сразу и с оппонентами, все сразу. Официальный оппонент Кузнецов Сергей Олегович доктор физико-математических наук, профессор Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики», руководитель департамента анализа данных и искусственного интеллекта, заведующий международной научно-учебной лабораторией «Интеллектуальные системы и структурный анализ».

Д.ф.-м.н. С.О. Кузнецов (официальный оппонент):

Спасибо за представление. Добрый день уважаемые коллеги. Мне как положено по положению?

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Своими словами суть работы, но замечания зачитать полностью как написано.

Д.ф.-м.н. С.О. Кузнецов (официальный оппонент):

(Зачитывает положительный отзыв, перечисляет указанные замечания.)

(Отзыв прилагается)

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо большое, Сергей Олегович. Вопросы Сергею Олеговичу? Нет вопросов? Спасибо, Сергей Олегович. Следующий оппонент Печников Андрей Анатольевич, доктор технических наук, доцент, главный научный сотрудник Института прикладных математических исследований – обособленного подразделения Федерального бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Карельский Научный Центр Российской академии наук». Не присутствует очно, в связи с производственной необходимостью, соответствующее заявление поступило в диссертационный совет. Прислал отзыв на диссертацию. Прошу ознакомиться, слово учёному секретарю.

Д.т.н. С.А. Кочетков (И.о. ученого секретаря):

(Зачитывает положительный отзыв, перечисляет указанные замечания.)

(Отзыв прилагается)

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо большое. Есть необходимость более подробно зачитать какие-нибудь положения отзыва? Нет? Спасибо большое. Олег Александрович, вам слово для ответа замечания оппонентов, ведущей организации и отзывов. Кратко.

О.А. Милосердов (соискатель):

Большое спасибо. Хочу передать спасибо коллегам за замечания. Ответы несколько сгруппирую. Есть группа замечаний, которые говорят о сравнении методов предсказания. Что нужно сравнить разработаны методы с модифицированным методом групповых вкладов и прочими методами. Сделать более массовое сравнение, то есть по большему количеству экспериментальных данных. Также касаются замечаний, где нужно сравнить методы моделирования с результатами более точных методов молекулярной динамики. С этим я полностью согласен, это хорошо бы дополнило работу и является целью дальнейших исследований. Также интересное замечание о том, что работу хорошо бы дополнил исследования карты Рамачандрана для различных полимерных структур. Вообще-то, карты Рамачандрана используются для белковых структур, также можно сделать и создать свои карты для полимеров для полимерных газоразделительных мембран и это было бы очень интересным дополнительным исследованием. И тоже важное замечание о том, что комплекс программ стоит доработать именно в сторону визуальной составляющей. Вообще, в целом, я очень благодарен за замечания. Все они важны, обязательно их учту в будущих работах.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо большое, присаживайтесь. Приступаем к свободной дискуссии кто хотел бы выступить?

К.х.н. В.Е. Рыжих (представитель ИНХС РАН (организации внедрения)):

Добрый день. Меня зовут Виктория Рыжих, я являюсь представителем Института нефтехимического синтеза РАН. Как раз мы являемся теми людьми, которые поставили задачу перед Олегом Александровичем. Хочется кратко выступить по поводу того, что задача эта действительно для нас очень важна, потому что помимо того, что вот уже было оппонентами сказано о том, что хочется искать новые полимерные материалы для мембран для газоразделения. Кроме этого, есть ещё и фундаментальная задача, потому что мы исследуем связь структуры и свойств полимеров, соответственно, очень многие вещи, которые Олег сделал в своей работе, были для нас очень полезны. В частности, классификация, реализацией которой он занимается, разбивает полимеры на различные группы. Для нас это было важно с той точки зрения, что внутри каждого класса можно оценить, почему именно так, почему у нас получился внутри одного класса такой набор структур. В целом, мы занимаемся не только исследованием экспериментальным, как химический институт, но вот вычислительные методы тоже нам стали очень интересны, и мы QSPR занимаемся и моделированием занимаемся, но есть проблема у этих

методов, это очень как бы очевидно. Потому что, когда шесть месяцев требуется на расчет одной единственной полимерной структуры, результатов каких-то хочется, мы же все-таки пользователи этих методов. Или, когда QSPR нас как-то ограничивает тем, что все-таки это совершенно чистая математика и очень мало физики, очень мало физико-химии, которая нам тоже очень важна, то хочется что-то на стыке поискать. Поэтому работа Олега была для нас очень важна, потому что это некий компромисс между одним и между вторым методами. За все время, которое мы работали с Олегом, мы поняли, что он действительно очень хороший специалист, потому что это не очень просто работать на стыке наук. В его случае, это как раз стык химии и математики, и для нас было очень приятно, что Олег очень вовлёкся в химическую часть всей этой работы, не только в математику. И я считаю, что вообще способность работать на стыке наук, уже характеризует человека как хорошего специалиста, и поэтому я считаю, что Олег достоин присуждения ему степени кандидата наук. Спасибо большое за внимание.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Кто ещё хочет выступить? Кто у нас был председатель семинара? Пожалуйста.

Д.т.н. Фархадов М.П. (член Совета):

Уважаемые коллеги, я не буду вникать в подробности работы Олега Александровича. Когда мне предложили войти в состав комиссии, который в результате предложит к защите данную диссертацию, я, конечно, обрадовался и ждал диссертацию на другую тему, потому что Олег Александрович является членом участником молодёжной научной школы, которой я руковожу. Он с двадцать первого года является активным участником данной молодёжной школы. Он действительно отличается широким кругозором, как уже было озвучено. Хорошо разбирается в машинном обучении, хорошо понимает нейронные сети, прекрасно владеет применением математических моделей для исследования различных задач. Но, с другой стороны, он является на самом деле интеллигентным, вдумчивым и очень зрелым исследователем. И он достоин. В диссертации действительно получены хорошие фундаментальные и прикладные научные результаты. Я буду голосовать за, и считаю, что он достоин присуждения искомой степени кандидата технических наук. Спасибо.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо. Кто ещё хочет выступить. Нет желающих? Пожалуйста.

Д.ф.-м.н. Л.Ю. Жиликова (член Совета):

Добрый день, уважаемые коллеги. Я не буду злоупотреблять вашим вниманием. Просто хочу сказать, что я тоже была в комиссии, которая рассматривала диссертацию Олега Александровича. У нас в лаборатории проходило два семинара, на которых он докладывал свою работу. Я считаю, работа очень хорошая, я буду голосовать за и всех вас призываю тоже

голосовать за. Спасибо большое.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо. Кто хочет ещё выступить? Нет желающих?

Тогда Олег Александрович, вам предоставляется заключительное слово. Кратко.

О.А. Милосердов (соискатель):

Спасибо за тёплые слова. Я очень хочу выразить благодарность, в первую очередь Михаилу Владимировичу за то, что провёл меня через, как оказалось, достаточно сложный и долгий путь. Что довёл до конца. Хочу поблагодарить всех коллег, кто писал отзывы. Очень хочу поблагодарить Сергея Олеговича за то, что нашёл время, дал заключение и ценные замечания.

Хочу поблагодарить всех коллег, кто помогал, участвовал, слушал мои репетиции, вначале корявые затем уже в более, надеюсь, в правильном русле. Также давали ценные замечания советы. Также хочу поблагодарить членов диссертационного совета, кто наставлял и помогал с оформлением, с кучей бумаг. Это оказалось тоже достаточно сложным испытанием. Также отдельно хочу поблагодарить общий отдел и отдел оперативной полиграфии. Они много раз выручали меня, помогали оперативно исправлять косяки и помогли в итоге все сделать в срок. Также спасибо большое родным за терпение и за поддержку.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Спасибо большое.

Предлагается избрать счётную комиссию в составе Каршаков, Честнов, Рапопорт. Кто за то, чтобы утвердить комиссию, прошу проголосовать.

Против – нет, воздержались – нет. Принято единогласно. Счётную комиссию прошу приступить к работе и раздать бюллетени. Очно, очно. Я с самого начала сказал, что голосуем очно, как по-старому. Там написано, как и что надо сделать. Счётная комиссия, раздать бюллетени и посчитать голоса.

(идет голосование и подсчет голосов)

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Пожалуйста уважаемые члены совета, прошу садиться. Слово имеет председатель счётной комиссии.

Д.т.н. Е.В. Каршаков (член Совета, председатель счетной комиссии):

Дорогие коллеги, значит, в урне оказалось все двадцать два бюллетеня из розданных. «За» проголосовал 21 человек, «против» – 1, недействительных бюллетеней – 0.

Д.т.н. Б.В. Павлов (Председатель Совета):

Кто за то, чтобы утвердить протокол, прошу проголосовать. Единогласно.

Утверждается протокол счётной комиссии. Поздравляем, Олег Александрович

вас, с успешной защитой. Уважаемые члены совета, у нас вторая защита, а, еще проект заключения. Поступили некоторые замечания технического характера, мы их исправили, есть какие-нибудь еще? Там, где было неправильно переписано из отзывов. Есть ли какие-нибудь другие замечания? (формулируются замечания)

Так, уважаемые члены диссертационного совета, кто за то, чтобы с этими изменениями проекта, проект заключения утвердить? Прошу голосовать. Кто против? Нет таких. Воздержавшихся нет. Спасибо большое за участие в работе совета.

Зам. директора по научной работе,
доктор технических наук



Handwritten signature

С.А. Краснова

Председатель диссертационного совета
24.1.107.01, доктор технических наук

Handwritten signature

Б.В. Павлов

И.о. ученого секретаря диссертационного совета
24.1.107.01, доктор технических наук

Handwritten signature

С.А. Кочетков

07.02.2023