

ОТЗЫВ
на автореферат диссертации Мифтахова Эльдара Наилевича
«Исследование физико-химических закономерностей процессов синтеза
полимеров методами компьютерного и имитационного моделирования»,
представленной на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
по научной специальности 1.4.4. Физическая химия

В современной индустрии модельное описание для процессов синтеза полимеров обретает особую актуальность. Сложность и разнообразие полимерных систем требуют системного, более углубленного подхода к исследованиям, позволяющего выявить зависимости между структурой, свойствами и процессами синтеза. Комбинация вычислительных методов и экспериментов сокращает время и затраты на создание и оптимизацию полимерных продуктов, а также улучшает понимание фундаментальных механизмов, лежащих в основе процессов синтеза. Такое моделирование является неотъемлемой частью современной полимерной науки и индустрии, способствуя инновационному развитию и созданию передовых технологий.

Диссертационная работа Э.Н. Мифтахова представляет собой **актуальное исследование** для физико-химической отрасли, направленное на создание нового комплексного подхода для анализа и моделирования сложных процессов. Изучаемые в работе процессы синтеза полимеров являются классическим примером сложных систем, которые характеризуются существенной нестационарностью процесса, сложно поддаются анализу и для которых накоплено достаточно много известной на сегодня кинетической информации.

Представленные в работе подходы и методы позволяет более глубоко проанализировать молекулярную структуру и динамику полимерных материалов, изучить сложные реакционные механизмы и влияние различных параметров на свойства конечных продуктов.

К основной научной новизне можно отнести:

- новый имитационный подход к решению обратных задач, позволяющий идентифицировать характер кинетической неоднородности и значения

кинетических параметров на основе первичной физико-химической информации в виде данных по скорости полимеризации и молекулярно-массовому распределению получаемого продукта;

- методологию исследования механизмов сложных процессов на основе программно-организованного комбинирования кинетического и статистического подходов, использующих итерационную последовательность решения прямых и обратных задач химической кинетики;

- методы числовой оценки молекулярно-массового распределения продуктов процесса сополимеризации в условиях возможного существования нескольких типов активных центров, а также размер-состава и композиционного состава образующихся макромолекул для процессов сополимеризации, расширенные до масштабов непрерывного промышленного производства.

Особое внимание следует уделить внедрению разработанной информационной системы, которая позволяет проводить исследования в масштабах промышленного производства. Это определяет большую практическую значимость работы и предоставляет новые возможности для оптимизации процессов синтеза полимеров.

Основное достоинство работы заключается в том, что автор активно занимается проблемами, связанными с идентификацией молекулярных характеристик в сложных физико-химических процессах, где неоднородность и нестационарность представляют значительные трудности для исследователей. Предложенная методология, основанная на различных алгоритмических подходах, дает новые инструменты для анализа и моделирования таких процессов.

Замечание: Решение оптимизационной задачи (2) с функционалами интегрального вида сводится к задаче (3)-(5) для уравнения Эйлера. При этом преобразовании была использована квадратурная формула трапеций. Из текста реферата не ясно, почему было отдано предпочтение именно этой формуле Ньютона-Котеса.

Однако, данное замечание не снижает научной значимости работы.

Учитывая вышеизложенное, считаю, что диссертация Мифтахова Э.Н. «Исследование физико-химических закономерностей процессов синтеза полимеров методами компьютерного и имитационного моделирования» по своей научной новизне, теоретической и практической значимости соответствует требованиям п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г.

Мифтахов Эльдар Наилевич заслуживает присуждения ему учёной степени доктора физико-математических наук по научной специальности 1.4.4. Физическая химия за научное достижение, выражющееся в исследовании физико-химических закономерностей процессов синтеза полимеров средствами разработанного комплексного подхода на основе методов компьютерного и имитационного моделирования.

Доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
«Информатики и компьютерных
технологий» ФГБОУ ВО
«Санкт-Петербургский горный
университет»



26.09.2023,

В.Н. Кризский

Даю согласие на обработку персональных данных.

Кризский Владимир Николаевич,
199106, Санкт-Петербург, Васильевский остров, 21 линия д.2.
тел.: (812) 382-01-28
эл. почта: krizskiy_vn@pers.spmi.ru



В.Н. Кризского

Начальник управления делопроизводства
и контроля документооборота

Е.Р. Яновицкая
26 ОКТ 2023