

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Дмитрия Михайловича Захарова «Изотопный обмен водорода между метаном газовой фазы и оксидными материалами на основе скандата лантана», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Диссертационная работа Д. М. Захарова посвящена изучению механизма изотопного обмена водорода между метаном и протонпроводящими материалами на основе скандата лантана. Данные материалы перспективны для использования в качестве компонентов электродов протонно-керамических электрохимических устройств, способных к прямой конверсии лёгких углеводородов таких, как метан, поэтому актуальность и практическая значимость проделанной Д. М. Захаровым работы не вызывает сомнений.

В диссертационной работе Д. М. Захарова получен ряд значимых результатов, составляющих новизну проведенного исследования. Среди наиболее интересных результатов, представленных в диссертационной работе, можно отметить следующие:

1. Разработана теория пяти типов обмена на основе решения системы дифференциальных уравнений, позволяющая описывать кинетику перераспределения изотопов между молекулами, содержащими четыре меченых атома одного сорта, и конденсированной фазой.
2. Разработанная теория пяти типов обмена опробована не только на литературных данных, но и на экспериментальных данных, полученных впервые самим соискателем методом изотопного обмена на новых материалах на основе скандата лантана.
3. Предложен оригинальный способ для определения концентрации компонентов в газовой фазе из данных, полученных методом масс-спектрометрии. Способ основан на методе машинного обучения нейронных сетей.
4. На основе проведенного математического анализа различных моделей механизма обмена водорода между метаном и исследованными материалами предложены математические критерии и разработан алгоритм выбора наиболее подходящей модели.

Оригинальной частью диссертационной работы является использование графов для представления и описания различных механизмов изотопного обмена водорода между метаном и конденсированной фазой. Полученные соискателем результаты опубликованы в соавторстве в престижных международных журналах, индексируемых в РИНЦ, Web of Science и Scopus.

В результате ознакомления с работой возникли следующие вопросы (в основном, в части раздела 2.9.4 «Способ расчета концентраций компонентов газовой фазы на основе нейросетевого алгоритма»):

- исходя из каких соображений была выбрана топология нейронной сети (количество внутренних слоев и нейронов в них)? (Это не принципиальный вопрос, поскольку выбранная топология уже обеспечивает удовлетворительную точность определения концентрации компонентов в газовой фазе, но интересно стояли ли за этим выбором какие-либо численные эксперименты);
- следовало бы пояснить нормировку значений измеренных интенсивностей сигналов от различных массовых чисел к диапазону [0,1]. По всей видимости, такая нормировка осуществляется по формуле (значение – мин_значение)/(макс_значение – мин_значение). Тогда вопрос в том, как определяются максимальные и минимальные значения? Если по обучающей выборке, то при применении этой же формулы к тестовым данным, нормированные значения могут выйти за пределы диапазона [0,1];
- стоило бы указать с помощью какого программного обеспечения проводилось обучение нейронной сети;

и замечания:

- по всей видимости, в формуле (2.1) опечатка: z вместо u в экспоненте;
- встречающееся несколько раз выражение вида «*полученные значения попадали в диапазон $\mathbb{R}^n \in [0,1]$* » не является корректным сразу по нескольким причинам: во-первых, \mathbb{R}^n это все пространство n -мерных векторов, а не диапазон, и из этого следует, во-вторых, что формула $\mathbb{R}^n \in [0,1]$ математически некорректна, поскольку пространство (уже тем более, n -мерных векторов) не может содержаться (\in) в (одномерном) отрезке $[0,1]$. Впрочем, из контекста понятно, что автор имел ввиду.
- на рис. 2.2, межвесовые коэффициенты различных слоев нейронной сети обозначены одинаковыми символами (b, w), хотя очевидно, что их значения зависят от слоя. Общепринято в таком случае использовать двойную индексацию (номер слоя, номер нейрона);
- наконец, требуется некоторое время, чтобы осознать текст после уравнений на странице 81, описывающий нейронную сеть. Причина опять же в не совсем удачном выборе обозначений: в частности, не стоило вводить уникальные имена (A, B) для матриц весов отдельных слоев: как правило, такие матрицы обозначаются одним заглавным символов с индексом, отвечающим номеру слоя; кроме того, перепутаны обозначения: в тексте x это вектор значений нейронов скрытого слоя, а на рис. 2.2 – выходного.

Высказанные вопросы (и замечания) носят уточняющий характер и не влияют на общее положительное впечатление о диссертационной работе. Кроме того, хотелось бы отметить высокую не только физико-химическую подготовку соискателя, но и владение современным математическим аппаратом.

На основании изложенного считаю, что диссертационная работа Д. М. Захарова соответствует всем требованиям п.9 положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, а соискатель Дмитрий Михайлович Захаров безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник Федерального
государственного бюджетного учреждения
науки Института математики и механики
имени Н. Н. Красовского Уральского
отделения Российской академии наук
(ИММ УрО РАН)

620108, Россия, Екатеринбург,
ул. Софьи Ковалевской, д. 16

e-mail: ax-g@mail.ru

19 сентября 2022 года

Подпись А. Л. Гаврилюка заверяю.

Ученый секретарь ИММ УрО РАН,
кандидат физико-математических наук


Гаврилюк Александр Львович



О. Н. Ульянов