

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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. выполнена на стыке машинного обучения, молекулярного моделирования и компьютерных наук. Разработка новых методов предсказания свойств веществ является крайне актуальной задачей во многих областях промышленности и медицины. В своей работе автор ставит перед собой 5 задач и успешно выполняет их.

В начале работы автор проводит анализ существующих математических моделей стеклообразных полимеров и методов предсказания их транспортных характеристик. Затем разрабатывает оригинальный подход к математическому моделированию поверхности молекул аморфных полимеров и предлагает численные методы предсказания транспортных характеристик аморфных полимеров на основе площади поверхности их молекул. Отдельную главу автор посвящает разработке комплекса программ, который позволяет провести как моделирование от мономерного звена полимера до его конформаций, так и рассчитать необходимые переменные для предсказания характеристик полимерных газоразделительных мембран. В последней главе диссертации автор демонстрирует эффективность разработанных методов и алгоритмов для задач анализа и синтеза полимерных материалов с заданными свойствами в интересах мембранной технологии.

Автореферат диссертации изложен грамотно и логично, однако стоит отметить, что в нем недостаточно представлено описание и результаты моделирования с помощью метода молекулярно-механического моделирования, а также 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.

Отмеченные замечания не снижают теоретическую и практическую значимость диссертационной работы. Судя по содержанию автореферата, диссертация является законченной научно-квалификационной работой и соответствует всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, 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)».

Отзыв составлен к.ф.-м.н., доцентом кафедры газовой и волновой динамики механико-математического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова» Юмашевым Михаилом Владиславовичем.

Адрес: Ленинские горы, Москва, ГСП-1, 119991

Телефон: 8-495-939-10-00

Факс: 8-495-939-01-26

К.ф.-м.н., доцент

Юмашев М.В.

Проректор МГУ



Гусев Н.В.

19.09.2023г.