

## ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора физико-математических наук, профессора, заместителя начальника факультета Федерального государственного казенного образовательного учреждения высшего образования Академии

Федеральной службы охраны Российской Федерации

Полянского Ивана Сергеевича

на диссертационную работу

Смолькова Михаила Игоревича

«Методы вычислительной геометрии и топологии в задачах моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств»

на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

### 1. Актуальность диссертационного исследования

Компьютерное моделирование новых материалов на различных пространственных масштабах и предсказание их физико-химических свойств является основным инструментом современного материаловедения. При моделировании свойств материалов на атомном и молекулярном уровнях широкое распространение получили подходы, связанные с теорией функционала электронной плотности (ТФП) и молекулярной динамики. Однако эти методы моделирования связаны со значительными вычислительными и емкостными затратами. Кроме того, упомянутые подходы имеют жесткие пределы применимости, которые очень часто не дают возможности их использования в практически интересных случаях. Например, ТФП при описании свойств кристалла строго обоснована только для основного состояния кристалла, т.е. позволяет описывать его свойства только при очень низких температурах. В связи с этим в последние годы в материаловедении получили развитие методы моделирования свойств новых материалов, связанные с тополого-геометрическими характеристиками их атомных сеток. Наряду со своей универсальностью эти методы имеют то преимущество, что за многие десятилетия накоплен огромный объем данных по топологии и геометрии атомных сеток, что дает возможность реализовывать на их основе различные варианты метода машинного обучения. Примером такого рода может служить расчет степени окисления металлов в различных окружениях, которая определяет оптические, каталитические, абсорбционные свойства соединения. Анализ топологической структуры естественных трех-периодических объектов, которыми являются атомные сетки, позволяет продвинуться в решении ряда классических математических задач, например, в задаче построения новых трех-

периодических поверхностей, включая их минимальные варианты. Решение этой задачи имеет важное практическое значение, т.к. на основе этих поверхностей создаются новые макроскопические периодические пористые структуры, которые находят широкое применение в костной имплантологии, при создании композитов и метаматериалов.

Диссертационное исследование выполнялось в рамках грантов РНФ «Разработка новых пористых материалов на основе трех-периодических поверхностей, теоретическое и экспериментальное исследование их термомеханических свойств» (проект №22-23-00300) и «Методы топологического дизайна координационных полимеров» (проект №18-73-10116).

Из вышесказанного, следует, что диссертационная работа Смолькова Михаила Игоревича, посвященная разработке нового метода моделирования, объединяющего тополого-геометрические модели, методы вычислительной геометрии и машинного обучения, вычислительных алгоритмов, компьютерных моделей и соответствующих комплексов программ для расчета степени окисления, получения новых трех-периодических поверхностей, создания на их основе новых пористых структур и исследования их механических свойств является актуальной.

**2. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций** является достаточно высокой и подтверждается корректной физической и математической постановкой задач, а также применением апробированных методов качественного и численного анализа математических моделей. Использованы методы топологического и геометрического анализа сеточных структур, методы статистической достоверности моделей машинного обучения, методы теории циклов дифференциальной геометрии, методы механики сплошных сред. Сформулированные научные положения подтверждаются также результатами выполнения грантов РНФ.

Научные положения и практические достижения диссертационной работы могут быть использованы для моделирования свойств новых материалов и структур, а также в образовательном процессе классических и технических университетов.

### **3. Достоверность и новизна научных положений и рекомендаций**

*Достоверность научных положений и рекомендаций* подтверждается корректной математической постановкой задач, адекватно описывающей рассматриваемые физико-химические системы, применением апробированных методов качественного и численного анализа математических моделей, подтверждается расчетами на основе численного моделирования и результатами проведенных автором экспериментов, а также согласованием полученных

результатов с данными экспериментальных и численных исследований других авторов.

*Новизна научных положений, значимость для науки и практики* результатов диссертационного исследования заключается в предложенной математической модели для описания окружения и связи атома металла в атомной решетке на основе ее представления в виде полиэдров Вороного-Дирихле. Полиэдры Вороного-Дирихле описываются при этом оригинальным набором дескрипторов, что отличает развитую в диссертации модель от известных аналогов. Предложен метод предсказания степени окисления металлов в различных окружениях, объединяющий предложенную модель и методы машинного обучения. Созданные автором на основе этого алгоритма программный комплекс, веб-сервис и база данных активно используются исследователями из различных стран мира. На основе топологического представления атомных решеток при помощи модели натурального тайлинга автором предложен новый метод генерации трех-периодических поверхностей (ТПП) из атомных сеток природных кристаллов, позволяющий получать бесконечное количество ТПП. Указанным методом автору удалось получить четыре неизвестные ранее минимальные ТПП. Автором предложен и реализован в виде программного комплекса алгоритм построения на основе ТПП цифровых двойников пористых структур, который позволяет использовать их в аддитивном производстве и в стандартных комплексах программ, рассчитывающих физические свойства. Автором рассчитаны и размещены в базе данных в сети Интернет значения механических характеристик новых пористых структур, что позволяет выбирать материалы с оптимальными для конкретных инженерных приложений свойствами

#### **4. Значимость для науки и практики выводов и рекомендаций диссертационного исследования**

*Значимость для науки выводов и рекомендаций* диссертационного исследования состоит в том, что развит новый метод моделирования физико-химических свойств материалов, объединяющий тополого-геометрические методы и методы машинного обучения, который позволяет предсказывать степень окисления металлов в различных соединениях, генерировать новые трех-периодические, в том числе минимальные поверхности, получать цифровые двойники новых пористых структур на их основе. и производить эти структуры методами аддитивного производства

*Значимость для практики выводов и рекомендаций* диссертационного исследования заключается в том, что полученные результаты могут быть использованы в технике при оценке степени окисления используемых в устройствах и оборудовании материалов. Цифровые двойники пористых

структур могут быть изготовлены методами 3D печати и использованы в костной имплантологии, при получении новых композитов и метаматериалов.

## **5. Общая характеристика работы**

### **5.1. Оценка диссертационного исследования как квалификационной работы**

Диссертация Смолькова Михаила Игоревича является завершенной самостоятельно выполненной научно-квалификационной работой, в которой впервые приведены результаты, позволяющие квалифицировать их как решение актуальной научной задачи, имеющей важное значение для моделирования новых материалов и предсказания их физико-химических свойств. На основании вышесказанного можно утверждать, что работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук и изложенным в Постановлении Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней» (пункты 9, 10, 11, 13, 14).

### **5.2. Оценка содержания и авторского вклада. Соответствие работы паспорту специальности.**

Диссертация соответствует следующим направлениям исследований паспорта специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (физико-математические науки):

*П.1. Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений.*

- Предложена математическая модель представления атомной сетки в виде разбиения на полиэдры Вороного-Дирихле, отличающаяся от известных аналогов оригинальным набором дескрипторов, описывающих геометрию полиэдров.

- На основе модели разбиения атомной сетки на натуральные тайлы предложен новый метод построения трех-периодических поверхностей, который позволяет установить их тополого-геометрические характеристики, в частности, выделить признаки минимальности поверхности.

*П.2. Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий.*

- На основе объединения методов топологического представления атомных сеток и методов машинного обучения предложен новый способ вычисления степени окисления металлов в различных соединениях, дающий предсказания с точностью выше 95%.

- На основе комбинации метода Лапласа и метода оптимизации средней кривизны предложена процедура сглаживания трех-периодических поверхностей, дающая поверхности с минимально возможной средней кривизной.

*П.3. Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента.*

- Создан веб-сервис для расчета степени окисления металлов в различных окружениях, размещенный в сети Интернет, который имеет около 20 уникальных запросов в месяц из различных стран мира.

- Создан программный комплекс, который позволяет генерировать пористые структуры на основе новых трех-периодических поверхностей, полученных методами, развитыми в диссертации.

*П.8. Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента.*

- Предсказаны степени окисления металлов в О-, Н-, В-, С-, N-, F-, Me-окружениях, совпадающие с экспериментальными результатами в случаях, если они были проведены.

- Получены цифровые двойники новых пористых структур, совместимые с устройствами 3D печати и стандартными комплексами программ.

- Методами аддитивных технологий получены образцы новых пористых структур и проведены экспериментальные исследования их механических свойств.

- Посредством программного комплекса ANSYS рассчитаны механические свойства цифровых двойников новых пористых структур. Результаты расчета хорошо согласуются с экспериментом.

### **5.3. Структура и объем работы.**

Диссертация включает: введение, 4 главы, заключение, 4 приложения, список литературы из 147 наименований, 71 рисунок, 19 таблиц. Полный объем диссертации составляет 172 страницы.

Во *введении* обоснована актуальность выполненного автором научного исследования. Сформулированы цель и задачи диссертационной работы. Приведены научная новизна, теоретическая и практическая значимость, методы исследования, обоснованность и достоверность полученных в работе результатов. Приведены результаты практической реализации работы. Представленное соискателем обоснование актуальности темы и цели диссертационного исследования выполнены корректно и замечаний не вызывает.

В *первой главе* приводится обзор современных методов моделирования материалов и их свойств. Особое внимание уделяется обзору тополого-геометрических методов моделирования, реализованных в программном комплексе TorosPro, а также методы машинного обучения, которые используются в диссертационном исследовании.

*Вторая глава* посвящена разработке метода предсказания степени окисления металлов, который представляет собой комбинацию методов вычислительной геометрии и машинного обучения. Приводятся результаты применения развитого подхода к предсказанию степени окисления конкретных соединений, степени окисления для которых являются известными. Результаты предсказания полностью совпадают с результатами экспериментального анализа.

В *третьей главе* на основе топологического представления атомной сетки кристаллов формулируется новый метод построения трех-периодических поверхностей. Предложены правила построения натурального тайлинга для атомной сетки. Сформулированы условия минимальности получаемых поверхностей.

В *четвертой главе* изложены алгоритмы построения пористых структур на основе построенных в диссертации трех-периодических поверхностей. Описаны основные алгоритмы получения цифровых двойников пористых структур. С использованием программного комплекса ANSYS рассчитаны механические характеристики полученных цифровых двойников. Методами 3D печати получены образцы пористых структур и экспериментально измерены их механические параметры. Результаты экспериментов хорошо согласуются с расчетами.

В *заключении* обобщены полученные в работе научные и практические результаты, определены направления дальнейших исследований.

Содержание автореферата соответствует содержанию диссертации.

В целом представленные материалы позволяют достаточно полно оценить объем, сложность, и актуальность проведенного диссертационного исследования.

## **6. Публикации**

### **6.1. Опубликование основных результатов**

По результатам исследования опубликовано 13, из них 1 – в издании, рекомендованном ВАК РФ, 4 – в изданиях, реферируемых в базах данных WoS и Scopus (Q1 и Q2). 5 – в тезисах докладов, 3 – в прочих изданиях. Получены 3 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ в Роспатенте РФ.

## 6.2. Характеристика источников результатов работы

В диссертационной работе содержатся необходимые обязательные ссылки на источники заимствования, а также отметки об авторстве новых научных результатов с указанием личного вклада.

Таким образом, работа соответствует пункту 14 Положения о порядке присуждения ученых степеней.

## 7.Замечания

1. В работе обходится вопрос о применимости модели топологического представления атомных сеток методом натурального тайлинга к другим задачам, отличным от задачи построения трех-периодических поверхностей, решенной в работе.

2. В решаемой соискателем задаче классификации методами машинного обучения применяемые методы нормализации и первичной оценки значимости признаков в выбранном списке дескрипторов не уточняются.

3. Из диссертации до конца непонятно, использовалась ли автором собственная реализация процедур машинного обучения или брались уже существующие. На этапе выбора классификационной модели ядренным методом опорных векторов автор ограничивается только гауссовым ядром без обоснованного выбора значения гиперпараметра. Также этап выбор классификационных моделей не включает исследование применимости таких известных и реализованных в пакетах прикладных программ как наивный байесовский классификатор, линейный, квадратичный и ядерный дискриминантный анализ Фишера, регрессионный модели, современные нейросетевые модели и отличные от случайного леса модели на основе деревьев (классификатор дополненных деревьев, с градиентным усилением, AdaBoost, XGBoost и пр.).

4. Остается непонятным, как использование 3D печати и моделирование в известном комплексе ANSYS механических свойств цифровых двойников пористых структур отвечает заявленным целям диссертации.

5. В параграфе 2.3 диссертации говорится о корреляциях дескрипторов для прогнозирования степени окисления, однако, как видно из таблиц A1 и A2 Приложения, выбранные признаки коррелируют с самой степенью окисления не самым лучшим образом

Указанные замечания не влияют на главные теоретические и практические результаты диссертации не изменяют общей высокой оценки работы.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертационная работа Смолькова Михаила Игоревича «Методы вычислительной геометрии и топологии в задачах моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств», представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» (физико-математические науки) отвечает формуле и пунктам паспорта специальности 1.2.2 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» и удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, изложенным в Постановлении Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней» (пункты 9, 10, 11, 13, 14), а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по заявленной специальности.

Оппонент согласен на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и дальнейшую их обработку.

Официальный оппонент,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
заместитель начальника факультета  
Федерального государственного казенного  
образовательного учреждения высшего  
образования Академии Федеральной службы  
охраны Российской Федерации.  
Специальность ВАК, по которой защищена  
докторская диссертация  
05.13.18 – «Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы  
программ»

Полянский  
Иван Сергеевич

Адрес: Россия, 302015, г. Орёл,  
ул. Приборостроительная, д. 35  
Тел.: 89536187100  
e-mail: [van341@mail.ru](mailto:van341@mail.ru)  
Сайт: <https://academ.msk.rsnet.ru/>

Подпись д.ф.-м.н., заместителя  
начальника факультета Полянского И.С. заверяю.

Руководитель кадрового аппарата



А.Б.Семибратов