

ОТЗЫВ

официального оппонента, доктора физико-математических наук, профессора, заведующего кафедрой «Математика и суперкомпьютерное моделирование» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Пензенский государственный университет»

Смирнова Юрия Геннадьевича

на диссертационную работу

Смолькова Михаила Игоревича

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

по специальности 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертационное исследование Смолькова Михаила Игоревича на тему «Методы вычислительной геометрии и топологии в задачах моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств» представляет собой научную работу, направленную на решение актуальной проблемы генерации новых трех-периодических поверхностей, моделирования новых макроскопических пористых материалов на их основе, а также создания нового подхода, объединяющего методы тополого-геометрического анализа, машинного обучения и вычислительной геометрии для предсказания степени окисления металлов в различных соединениях.

Выбор темы обусловлен её научной и технологической значимостью, что подтверждается ссылками на современные публикации в ведущих международных журналах. Компьютерное моделирование материалов на различных пространственных масштабах представляет собой ключевое направление современного материаловедения.

При моделировании на атомном уровне используются два принципиально разных подхода. Первый основан на физических моделях, включающих молекулярную динамику (МД) и теорию функционала электронной плотности (ТФП). Эти методы позволяют рассчитывать макроскопические свойства материалов, однако требуют значительных вычислительных ресурсов и сталкиваются с ограничениями, связанными, например, с ролью квантовых эффектов (МД) и невозможностью использования при описании возбужденных состояний вещества (ТФП).

Второй подход, получивший развитие в последние годы, основан на анализе геометрической и топологической структуры атомных сеток. Этот метод демонстрирует высокую эффективность в предсказании физических свойств материалов. Особое место в этом направлении занимает программный комплекс TorosPro, разработанный в Самарском государственном техническом университете и основанный на принципах ретикулярной химии и теории графов.

Современным трендом материаловедения является применение методов машинного обучения для анализа больших массивов данных о материалах, что позволяет выявлять скрытые закономерности и ускоряет процесс разработки новых соединений.

Особый научный интерес представляют трех-периодические, в том числе минимальные поверхности (ТПП/ТПМП), создание которых остается актуальной математической задачей уже многие десятилетия. Исследования в этой области открывают новые возможности для разработки перспективных пористых, композиционных и метаматериалов на основе ТПП/ТПМП.

Актуальность диссертационного исследования Смолькова Михаила Игоревича обоснована следующим:

1. Численное моделирование новых материалов на различных масштабах (атомном, микро-, макро-), развиваемое в диссертации, лежит в основе создания прорывных технологий и устройств нового поколения.
2. Современные методы, использующие геометрию и топологию атомных структур, созданные в рамках диссертационной работы, открывают новые возможности для моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств.
3. Объединение в диссертации методов машинного обучения и тополого-геометрического анализа позволяет выявить скрытые закономерности в существующих базах данных и дает возможность предсказать различные физико-химические свойства.
4. Тополого-геометрический анализ, развиваемый в работе, позволяет прогнозировать свойства материалов через структурные особенности их атомных сеток (поры, полости, каналы), а также создавать на их основе макроскопические пористые объекты.

Диссертационное исследование выполнено Смольковым М. И. 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), которые посвящены разработке методов вычислительной геометрии и топологии в задачах моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств.

Следовательно, тема диссертационной работы **является актуальной и соответствует специальности** 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Автором предложена модифицированная математическая модель атомной сетки на основе полиэдров Вороного-Дирихле, отличающаяся от известных учетом второго момента инерции полиэдра Вороного-Дирихле и

использованием нормированной суммы телесных углов его граней, соответствующих контактам атома исследуемого металла с атомами его окружения. Разработанная модель была использована в качестве основы веб-сервиса для расчета степени окисления металлов, объединяющего методы машинного обучения и тополого-геометрического анализа структуры кристаллов. В диссертации сформулирован и реализован в виде программного комплекса оригинальный алгоритм генерации гладких трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей основанный на моделировании пустот и каналов в атомных сетках кристаллов, т.е. на их топологическом представлении. Автором было открыто 4 новых трёх-периодических минимальных поверхности на основе сформулированных в диссертационном исследовании критериев минимальности. В работе был реализован в виде программного комплекса и базы данных, размещенных в сети Интернет, метод создания новых макроскопических пористых структур на основе сгенерированных трёх-периодических поверхностей. Выполнено численное и экспериментальное исследование механических свойств новых пористых структур. Произведено сравнение механических характеристик пористых структур, полученных из трёх-периодических поверхностей с различными топологическими признаками. Всем этим обеспечивается **научная новизна** представленной работы.

Достоверность полученных результатов обусловлена корректной математической постановкой задач, адекватно описывающей рассматриваемые физические объекты, применением апробированных методов качественного и численного анализа, включая машинное обучение, топологический и геометрический анализ, механику сплошных сред и теорию нормальных циклов дифференциальной геометрии. Результаты поддержаны грантами РФФИ (№22-23-00300 и №18-73-10116).

Теоретическая значимость состоит в том, что развита теория, проведена постановка задач, разработаны математические модели и создан новый подход к моделированию физико-химических свойств материалов, который интегрирует тополого-геометрические методы и машинное обучение, обеспечивая прогнозирование степени окисления металлов в различных соединениях. Также развит метод генерации новых трёх-периодических поверхностей, включая минимальные, на основе которых созданы цифровые двойники пористых материалов, позволяющий реализовывать эти конструкции с помощью аддитивного производства. Автором получено 3 свидетельства о государственной регистрации разработанных веб-сервиса и программных комплексов, что подтверждает и практическую значимость предложенных методов. Веб-сервис дает возможность оценки степени окисления без проведения трудоемких и затратных натурных экспериментов. Созданные программными комплексами цифровые двойники макроскопических пористых

структур могут быть использованы в качестве основы для костных имплантов, создании композитов и метаматериалов. Цифровые двойники макроскопических пористых структур допускают изготовление методами 3D печати. Следует заметить, что компьютерная реализация созданных автором алгоритмов интенсивно используются мировым научным сообществом. Разработанные в диссертации методы, программы и веб-сервис могут быть включены в образовательные программы ВУЗов.

Основное содержание работы изложено в 13 публикациях, из них 1 в изданиях, рекомендованных ВАК РФ (K2), 4 в изданиях, реферируемых в базах данных WoS и Scopus (Q1 и Q2).

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и 4 приложений, списка литературы из 147 наименований, содержит 71 рисунок и 19 таблиц. Полный объем диссертации составляет 172 страницы. Она написана ясным и грамотным языком и отличается последовательностью, логичностью и содержательностью изложенного материала.

Во *введении* обоснована актуальность проведенного исследования, сформулированы цель и задачи диссертационной работы. Изложены научная новизна, теоретическая и практическая значимость исследования, а также используемые методы. Показаны обоснованность и достоверность полученных результатов. Обоснование актуальности темы и постановка цели исследования выполнены корректно и не вызывают замечаний.

В *первой главе* представлен анализ современных подходов к моделированию материалов и их характеристик. Детально рассмотрены тополого-геометрические методы моделирования, реализованные в программном комплексе ToposPro, а также проанализированы методы машинного обучения, применяемые в рамках данного диссертационного исследования.

Во *второй главе* содержится описание разработанного метода прогнозирования степеней окисления металлов, основанного на интеграции методов вычислительной геометрии и машинного обучения. Представлены результаты апробации предложенного подхода на известных соединениях с экспериментально установленными степенями окисления. Полученные прогностические данные демонстрируют полное соответствие с экспериментальными результатами.

Третья глава представляет новый метод конструирования трёх-периодических поверхностей, основанный на топологическом анализе атомных сеток кристаллов. В диссертации разработаны принципы формирования натурального тайлинга для атомных сеток и установлены критерии минимальности получаемых поверхностей.

Четвертая глава содержит описание алгоритмов генерации пористых структур на базе сгенерированных трёх-периодических поверхностей. Детально изложены методики создания цифровых двойников пористых материалов. Проведен численный анализ механических характеристик полученных моделей с использованием программного комплекса ANSYS. Экспериментальные образцы, изготовленные методом аддитивного производства, продемонстрировали полное соответствие механических параметров расчетным данным.

В **заключении** систематизированы основные научные и прикладные достижения исследования, а также обозначены перспективные направления для дальнейшей разработки.

По диссертационной работе можно сделать следующие **замечания**:

1. В диссертации приведено дифференциальное уравнение в частных производных (3.18), которому удовлетворяют минимальные трех-периодические поверхности. В работе не обсуждается очевидно важный вопрос, удовлетворяют ли полученные в ней минимальные поверхности этому уравнению.

2. В таблице 4.5 диссертации приведены значения коэффициента Пуассона некоторых структур, превышающие значение 0,5. Однако, в механике сплошных сред коэффициент Пуассона не может превышать этого значения.

3. Во вступлении ко второй главе диссертации перечислены некоторые подходы к расчету степени окисления, однако, в дальнейшем отсутствует обсуждение преимуществ предложенного в работе метода расчета по сравнению с процитированными по надежности предсказаний, быстродействию и т.п.

4. В параграфе 3.2 не дано определение транзитивности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Диссертация Смолькова Михаила Игоревича является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи, включающей построение математических моделей и компьютерное моделирование физико-химических свойств материалов, объединяющих тополого-геометрические методы и методы машинного обучения, которые позволяют предсказывать степень окисления металлов в различных соединениях. Разработаны модели и алгоритмы, позволяющие 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. Диссертация выполнена самостоятельно на высоком научном уровне и является законченной научно-квалификационной работой. Полученные автором результаты достоверны, выводы и заключения обоснованы. Автореферат и опубликованные работы соответствует основному содержанию диссертации.

Диссертационная работа Смолькова Михаила Игоревича 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, заведующий кафедрой
«Математика и суперкомпьютерное
моделирование» Федерального
государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего
образования «Пензенский государственный



Смирнов Ю. Г.



Подпись Смирнова Юрия Геннадьевича заверяю
по подлиннику

Бенкова Е. Ч. 1