

ОТЗЫВ

научного руководителя 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».

Диссертационная работа М.И. Смолькова выполнена на кафедре высшей математики Поволжского государственного университета телекоммуникаций и информатики (г. Самара) и посвящена разработке нового метода моделирования структуры и свойств материалов на различных пространственных масштабах. Этот метод является комбинацией тополого-геометрических моделей структуры вещества, методов вычислительной геометрии и машинного обучения. В диссертации рассматриваются также приложения развитых подходов к описанию свойств химических соединений и для получения новых типов материалов. Актуальность диссертационного исследования обусловлена необходимостью сокращения времени на создание материалов с заданными свойствами путем широко внедрения компьютерных методов моделирования в материаловедении. В данном направлении работает огромное число исследователей в университетах и исследовательских центрах всего мира.

М.И. Смольков обучался в аспирантуре ПГУТИ с 2020 по 2024 год. За годы обучения он принимал участие в качестве исполнителя и руководителя работ по грантам Российского научного фонда и программы УМНИК.

В диссертации М.И. Смолькова были решены важные теоретические и прикладные задачи.

Первая глава диссертации посвящена обзору существующих методов моделирования структуры и свойств материалов.

Во второй главе разработан новый метод предсказания степени окисления металлов, входящих в различные химические соединения, который объединяет методы вычислительной геометрии и машинного обучения. Метод включает в себя выбор и расчет геометрических дескрипторов для создания обучающих и тестирующих наборов из мировых кристаллографических баз данных. Расчет значений геометрических дескрипторов осуществлялся с использованием широко известного в мире комплекса программ ToposPro. Рассмотрены три варианта модели машинного обучения – метод случайного леса, метод опорных векторов и метод k-ближайших соседей. Разработанный алгоритм реализован автором диссертации в виде веб-сервиса CrystalPredictor, который получил мировое признание и принимает примерно 20 запросов в месяц из разных стран.

Третья глава диссертации посвящена разработке метода генерации трех-периодических поверхностей (ТПП) из атомных сеток природных кристаллов. Этот метод основан на разбиении сеточного пространства кристалла на

натуральные тайлы, т.е. на минимальные, не допускающие разбиений на более мелкие, многогранники, которые заполняют все пространство. После проведения такой процедуры при сформулированных в диссертации условиях и устранения некоторых граней в тайлах, получается трех-периодическая поверхность, ограниченная многоугольниками и разбивающая все пространство на две системы непересекающихся пор. Разработанная процедура была применена к анализу атомных сеток одного из классов природных кристаллов – цеолитов. Получено 98 ТПП, из которых выделены четыре ранее неизвестные минимальные поверхности, что является заметным вкладом в теорию минимальных поверхностей. В настоящее время отсутствуют общие методы построения ТПП, поэтому развитые алгоритмы, позволяющие генерировать, фактически, бесконечное число таких поверхностей, являются существенным достижением в этом направлении исследований. Разработанная процедура генерации трех-периодических поверхностей реализована в диссертации в виде программного комплекса Porous 3D, размещенного в сети Интернет.

В четвертой главе диссертации разрабатываются алгоритмы построения макроскопических пористых материалов на основе полученных в работе ТПП и описывается соответствующий программный комплекс, реализованный на базе этих алгоритмов. Программный комплекс включает в себя алгоритмы триангуляции многоугольников, ограничивающих ТПП, алгоритм трансляции элементарной ячейки поверхности, алгоритм наращивания толщины поверхности и алгоритм сглаживания. Алгоритм сглаживания включает в себя минимизацию средней кривизны поверхности. Для оценки средней кривизны кусочно-плоской поверхности используется теория нормальных циклов дифференциальной геометрии. На выходе программного комплекса пользователь получает пористую структуру в формате, допускающем ее производство методами 3D печати или использование для расчетов в стандартных комплексах программ типа ANSYS. В главе приведены результаты моделирования механических свойств трех-периодических пористых структур, полученных из ТПП на основе атомных сеток цеолитов. Отметим, что для верификации используемых в диссертации механических моделей ряд пористых структур были изготовлены методами 3D печати и их механические свойства были измерены экспериментально. Результаты компьютерного моделирования хорошо согласуются с экспериментом. В диссертации создана база данных построенных пористых структур с указанием основных механических характеристик. Это дает возможность выбора наиболее подходящей структуры для инженерных приложений.

В приложениях приведены программные коды разработанных в диссертации алгоритмов.

Полученные в диссертации результаты имеют как теоретическое, так и прикладное значение, они могут быть использованы, в частности, для создания новых типов пористых, композиционных и мета-материалов для различных областей науки и техники от механики до радиофизики и оптики.

При выполнении диссертационной работы М.И. Смольков проявил себя как способный, целеустремленный, эрудированный и самостоятельный исследователь, творчески подходящий к решению сложных задач.

М.И. Смольков является высококвалифицированным специалистом в области компьютерного моделирования структуры и свойств материалов, активно занимается научными исследованиями, пользуется заслуженным уважением в коллективе.

Основные результаты диссертации опубликованы в 10 статьях и тезисах докладов, получены три свидетельства о регистрации программ для ЭВМ.

Считаю, что диссертационная работа М.И. Смолькова удовлетворяет всем требованиям Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Научный руководитель, профессор, доктор физ.-мат. наук, профессор кафедры «Общая и неорганическая химия» химико-технологического факультета Самарского государственного технического университета

Крутов Александр Федорович
Адрес: 443100, г. Самара,
ул. Молодогвардейская, 244
эл.почта: krutov.af@samgtu.ru
тел. +7(846)2784317

15 октября 2024

Я, Крутов Александр Федорович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации М.И. Смолькова, и их дальнейшую обработку

Федеральное государственное
бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«Самарский государственный
технический университет»
(ФГБОУ ВО «СамГТУ»)

Подпись профессора кафедры «Общая и неорганическая химия», д.ф.-м.н,
профессора Крутова А.Ф. заверяю.

ученый секретарь ФГБОУ ВО «СамГТУ» Малиновская Ю.А.

