

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе ПГУТИ

д.т.н., профессор

Горячкин Олег Валериевич

« 25 »

2024 г.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики» по диссертационной работе Смолькова Михаила Игоревича «Методы вычислительной геометрии и топологии в задачах моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертационная работа Смолькова М.И. на тему «Методы вычислительной геометрии и топологии в задачах моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств» выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики» (ФГБОУ ВО ПГУТИ).

В период подготовки диссертации Смольков Михаил Игоревич работал в ФГБОУ ВО ПГУТИ в должности младшего научного сотрудника научно-исследовательской лаборатории вычислительной геометрии и теоретического материаловедения.

В 2020 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П.

Королева» с присуждением квалификации «специалист по защите информации» по специальности 10.05.03 «Информационная безопасность автоматизированных систем».

В 2020 году приказом ректора Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики» №191-2 от 28.08.2020 года Смольков Михаил Игоревич зачислен в аспирантуру 09.06.01 – Информатика и вычислительная техника, по специальности 2.3.5 – Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей.

Приказом ректора Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики» № 251-2 от 27.10.2020 года Смолькову М.И. утверждена тема диссертации «Методы вычислительной геометрии в задачах теоретического материаловедения».

Приказом о переутверждении темы диссертации и.о. ректора Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики» № 109-2 от 12.04.2024 года тема диссертации была изменена на «Методы вычислительной геометрии и топологии в задачах моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств».

В 2024 году приказом ректора Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики» №192-2 от 28.06.2024 года Смольков Михаил Игоревич отчислен из аспирантуры, успешно прошедшего государственную итоговую аттестацию, в связи с окончанием срока обучения.

Справка о сданных кандидатских экзаменах № Сп.02.03/622 выдана Федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Самарский государственный технический университет» от 22.11.2024 г.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Крутов Александр Федорович, заведующий лабораторией вычислительной геометрии и теоретического материаловедения Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики», профессор кафедры «Общая и неорганическая химия» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Самарский государственный технический университет». Научный руководитель был приказом ректора Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики» № 266-2 от 18.10.2021. Крутов А.Ф. предоставил положительный отзыв о диссертационной работе Смолькова М.И.

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Оценка выполненной соискателем работы

Диссертационная работа Смолькова М.И. является законченной научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработан новый метод моделирования свойств материалов; произведено применения развитого подхода для предсказания степени окисления металлов и создан соответствующий веб-сервис; разработаны алгоритмы для компьютерного моделирования новых пористых материалов на основе трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей, полученных в диссертации методом топологического представления атомных сеток кристаллов; создан комплекс программ для описания физических свойств пористых структур.

Диссертационная работа направлена на разработку метода моделирования структуры и свойств материалов на различных пространственных масштабах, объединяющего тополого-геометрические модели, методы вычислительной геометрии и машинного обучения, и исследование посредством этого метода ряда конкретных веществ и материалов.

Личное участие соискателя ученой степени в получении результатов, изложенных в диссертации, заключается в следующем. Результаты настоящей диссертационной работы получены и интерпретированы самим соискателем. Автором предложен метод моделирования свойств материалов, объединяющий топологические подходы и машинное обучение. Автором разработаны оригинальные алгоритмы создания трёх-периодических поверхностей на основе топологического моделирования атомных сеток кристаллов, методы трансляции поверхностной ячейки трехмерной периодической поверхности, алгоритм сглаживания, включающий оптимизацию средней кривизны; метод построения моделей пористых материалов на основе трёх-периодических поверхностей, допускающий использование в 3D печати и в стандартных комплексах программ по расчету физических свойств материалов. Автором создана база моделей макроскопических пористых материалов на основе трёх-периодических поверхностей; открыто четыре новых минимальных поверхности; создана программная часть веб-сервиса для прогнозирования степени окисления металлов. Автор также осуществлял планирование, подготовку, обсуждение и интерпретацию результатов натурных экспериментов; докладывал результаты диссертации на конференциях и готовил тексты статей к публикациям в научных журналах.

В рамках диссертации решены **следующие задачи**:

1. Выбраны и реализованы в виде веб-сервиса метод машинного обучения для предсказания степени окисления металлов в O -, H -, B -, C -, N -, F -

, Me-окружениях на основе топологического анализа данных из кристаллографических баз ICSD и CSD.

2. Построены трёх-периодические поверхности посредством реализованных в программном комплексе ToposPro процедур и проведен тополого-геометрический анализ полученных поверхностей, образованных сшитыми полиэдрами.

3. Разработан и реализован в виде программного комплекса метод построения гладких трех-периодических поверхностей, полученных из атомных сеток кристаллов, включающий процедуру сглаживания с минимизацией средней кривизны поверхности.

4. Разработан и реализован в виде программного комплекса метод построения макроскопических пористых структур на основе трёх-периодических поверхности, допускающий их использование в аддитивном производстве и стандартных комплексах программ по расчету физических свойств материалов и конструкций.

5. Рассчитан и проведен сравнительный анализ механических характеристик полученных в диссертации макроскопических пористых структур, имеющих различные топологические признаки.

6. Проведена экспериментальная верификацию вычислительных моделей для расчетов механических характеристик пористых структур.

Степень достоверности результатов проведенных исследований, их новизна и практическая значимость

Степень достоверности результатов диссертации определяется:

– использованием апробированных математических и вычислительных методов;

– использованием широко известных компьютерных программ, таких как ToposPro, ANSYS, Surface Evolver;

– подтверждением совпадения теоретических результатов, полученных в диссертации, с натурными экспериментами и, в частных случаях, с результатами других авторов.

Научная новизна диссертационной работы состоит в том, что:

1. Создан оригинальный комбинированный подход и соответствующий веб-сервис для расчета степени окисления металлов, объединяющий методы машинного обучения и тополого-геометрического анализа структуры кристаллов.

2. Впервые сформулирован и реализован в виде программного комплекса оригинальный алгоритм генерации гладких трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей, основанный на топологическом представлении атомных сеток кристаллов.

3. Впервые предложен и реализован в виде программного комплекса и базы данных в сети Интернет метод построения макроскопических пористых структур на основе трёх-периодических поверхностей.

4. Открыто четыре ранее неизвестных трёх-периодических минимальных поверхностей на основе сформулированных необходимых условий минимальности.

5. Впервые проведено сравнение механических характеристик пористых структур на основе трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей с различными топологическими признаками.

Теоретическая и практическая значимость работы, ценность научных работ соискателя

Теоретическая значимость работы состоит в разработке:

- математической модели металлов и метода машинного обучения для предсказания степени окисления металлов в различных окружениях с высокой точностью и без затратных экспериментальных и расчетно-теоретических исследований;

- метода генерации трех-периодических, в том числе минимальных, поверхностей, основанный на топологическом представлении атомных сеток природных кристаллов, что позволяет получить неограниченное число

поверхностей, а также позволило открыть четыре новых, ранее неизвестных, минимальных поверхности;

- оригинального алгоритма сглаживания, включающего оптимизацию средней кривизны; методов трансляции, и наращивания толщины поверхностных ячеек трех-периодических поверхностей для использования, полученных поверхностей в аддитивном производстве и комплексах программ для расчета физических свойств материалов;

- метода построения макроскопических пористых структур на основе трех-периодических поверхностей для использования в аддитивном производстве и в общепринятых комплексах программ для расчета физических свойств материалов.

Практическая ценность работы заключается в том, что разработаны:

- программное обеспечение, реализующее разработанные автором алгоритмы для генерации новых трех-периодических поверхностей и построение на их основе макроскопических пористых структур, обеспечивающее их получение методами аддитивного производства и исследование их свойств в распространенных комплексах программ для расчета физических свойств материалов;

- база данных в сети Интернет, содержащая макроскопические пористые структуры на основе трех-периодических поверхностей, полученных из атомных сеток кристаллов.

- веб-сервис по автоматическому предсказанию степени окисления металлов на основе кристаллографических данных о структуре химического соединения.

Корректность заимствований

В опубликованных работах диссертант является автором математических моделей, методов проведения численного моделирования и методик натурных экспериментов.

Все выносимые на защиту результаты и положения, составляющие основное содержание диссертационной работы, получены автором лично.

В работах, опубликованных в соавторстве, соискателю принадлежит часть, связанная с постановкой задачи, моделированием структуры и свойств материалов, разработкой компьютерных алгоритмов и методов, проведением численных расчетов.

Результаты других авторов, которые использовались при изложении, содержат ссылки на соответствующие источники.

Специальность и отрасль науки, которой соответствует диссертация

Диссертационное исследование соответствует следующим пунктам паспорта специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»: п. 1 «Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений (физико-математические науки)», п. 2 «Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий», п.3 «Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента» и п. 8 «Комплексные исследования научных и технических проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента».

Тема диссертации соответствует отрасли физико-математических наук.

Полнота изложения материалов диссертации в публикациях

Основные результаты диссертационной работы отражены в следующих публикациях в рецензируемых научных изданиях, включенных в перечень ВАК:

1. Smolkov, M. I. Mining knowledge from crystal structures: oxidation states of oxygen-coordinated metal atoms in ionic and coordination compounds / M. I. Smolkov, A. P. Shevchenko, [и др.] // Journal of Chemical Information and Modeling. – 2022. – Т. 62, № 10. – С. 2332-2340.

2. Smolkov, M. I. Mining Knowledge from Crystal Structures of Homoleptic Complexes: Oxidation States of Metal Atoms / M. I. Smolkov, A. P. Shevchenko, [и др.] // Pattern Recognition and Image Analysis. – 2024. – Т. 34. – С. 877-891.

3. Smolkov, M. I. Generating triply periodic surfaces from crystal structures: the tiling approach and its application to zeolites / M. I. Smolkov, A. F. Krutov, [и др.] // Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances. – 2022. – Т. 78, № 4. – С. 327-336.

4. Smolkov, M. I. Mechanical properties of porous materials based on new triply periodic and minimal surfaces / M. I. Smolkov, M. A. Frolov, [и др.] // Mechanics of Advanced Materials and Structures. – 2024. – С. 1-17.

Результаты диссертации изложены в представленных работах достаточно полно и подробно.

Диссертация «Методы вычислительной геометрии и топологии в задачах моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств» Смолькова Михаила Игоревича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико–математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Заключение принято на расширенном заседании кафедры высшей математики Федерального государственного бюджетного образовательного

учреждения высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики».

Расширенное заседание проводил заведующий кафедрой высшей математики, д.ф.–м.н., доцент Осипов О.В.

Дополнительно на заседании присутствовали:

- Волобуев Андрей Николаевич, д.т.н., профессор кафедры медицинской физики, математики и информатики института социально-гуманитарного и цифрового развития медицины Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования «Самарский государственный медицинский университет» Минздрава России.
- Карташевский Вячеслав Григорьевич, д.т.н., профессор, заведующий кафедрой информационной безопасности Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики».
- Ключев Дмитрий Сергеевич, д.ф.–м.н., профессор, заведующий кафедрой радиоэлектронных систем Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики».
- Минкин Марк Абрамович, д.т.н., профессор, главный научный сотрудник Акционерного общества «Самарское инновационное предприятие радиосистем».
- Табаков Дмитрий Петрович, д.ф.–м.н., доцент, заведующий кафедрой физики Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики».
- Пиганов Михаил Николаевич, д.т.н., профессор кафедры радиоэлектронных систем Федерального государственного автономного

- Воловач Владимир Иванович, д.т.н., доцент, и.о. директора Высшей школы передовых производственных технологий Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Поволжский государственный университет сервиса».

Результаты голосования: «За» – 20 человек, «Против» – 0 человек, «воздержались» – 0 человек. Протокол № 5 от 23 ноября 2024 г.

Секретарь кафедры



Н.А. Чуйкова

11