

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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».

Создание новых материалов с заданными свойствами является крайне актуальной темой современной науки. Данная область охватывает очень широкий класс задач, начиная от атомистического дизайна веществ, применения методов машинного обучения и искусственного интеллекта для прогнозирования свойств, и заканчивая разработкой способов организации вещества в конкретный материал, например, в виде пленки, пористой структуры, композита и др. В этом плане диссертационная работа Смолькова М.И. находится в русле современных тенденций, актуальна и отличается высокой степенью оригинальности. Полученные результаты, помимо научного интереса, имеют важное прикладное значение.

Проведённые исследования можно разделить на две основных темы – разработка модели прогнозирования степени окисления металлов на основе методов вычислительной геометрии и машинного обучения, и разработка способа генерации новых трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей, полученных на основе топологического представления кристаллических структур.

Прогнозирование степени окисления металлов – актуальная задача, которая была решена диссертантом. В результате создана модель машинного обучения, которая успешно работает для координационных соединений, в который металл находится в O -, H -, B -, C -, N -, F -, Me -окружениях; модель демонстрирует высокие метрики качества и реализована в виде веб-сервиса, поэтому доступна для использования сторонними исследователями, что добавляет высокую практическую ценность полученному результату.

Разработанный в диссертации способ генерации новых трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей, является крайне интересным инструментом для дизайна пористых материалов, что важно для областей метаматериалов, электрохимической энергетики, производства строительных материалов. Разработанный способ позволяет находить в том числе трёх-периодические минимальные поверхности, что представляет большой интерес для математики. Отрадно, что разработанный метод генерации трёх-периодических поверхностей также получил реализацию в виде программы, которая может быть использована другими исследователями.

Достоверность полученных результатов высокая, и обеспечивается как публикациями в рецензируемых журналах (в том числе в международных журналах из WoS и Scopus), так и выступлениями на конференциях российского и международного уровня и верификацией созданных моделей путем сравнения с результатами экспериментов, выполненных самим автором. На разработанные автором программы получены свидетельства о государственной регистрации, что также является плюсом работы.

Отмечу и некоторые замеченные недостатки:

1. В тексте нет объяснения, почему разработанная модель прогнозирования степени окисления металлов применима лишь к координационным соединениям определенного вида, а именно в которых металл находится в O -, H -, B -, C -, N -, F -, Me -

окружениях. Почему модель не работает с другими видами окружения, например, с пниктогенами, и в чем принципиальная трудность расширить эту модель на другие классы соединений?

2. Способ генерации трех-периодических поверхностей основан на использовании кристаллических структур, для которых возможно построение натурального тайлинга, в качестве «прообразов». Таким образом, разработанный метод, вероятно, не в состоянии сгенерировать принципиально новую поверхность, не встречающуюся в природных кристаллах?

3. Использование слова «предсказание» в тексте автореферата и диссертации представляется неуместным, так как отсылает к ненаучным подходам. Лучше было бы использовать «прогнозирование».

Отмеченные недостатки, которые следует воспринимать лишь как возможные точки для последующего развития разработанных методов, не влияют на общую высокую оценку диссертационного исследования. 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 сотрудник Самарского филиала Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (СФ ФИАН)

к.ф.-м.н.

(01.03.02 – астрофизика и звездная астрономия)

Кабанов А.А.

Адрес: 443011, г. Самара,
ул. Ново-Садовая, 221
эл.почта: artkabanov@mail.ru
тел. +7 (927) 719-14-04

04 июня 2025 года

Я, Кабанов Артем Анатольевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Смолькова М.И. и их дальнейшую обработку.

Самарский филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П.Н. Лебедева Российской академии наук

Подпись, должность, место работы и ученую степень Кабанова А.А. заверяю:

