

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Смолькова Михаила Игоревича «Методы вычислительной геометрии и топологии в задачах моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств», представленного к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Актуальность исследований определяется тем, что результаты, полученные с помощью математического моделирования процессов многофазных течений в насыщенных электролитом пористых средах с взаимосвязанными гидродинамическими и термодинамическими явлениями, обусловленными фазовыми превращениями и критическими условиями, находят широкое применение в решении задач подземной гидромеханики. Например, в задачах прогнозирования и оптимизации показателей эксплуатации нефтяных и газовых скважин, при описании природных процессов, при разработке новых технологий геологоразведки.

Целью данной диссертационной работы является разработка нового метода моделирования свойств материалов на различных пространственных масштабах, объединяющего тополого-геометрические модели, методы вычислительной геометрии и машинного обучения, а также применения развитого подхода для предсказания степени окисления металлов, компьютерного моделирования новых пористых материалов на основе трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей, полученных из природных кристаллов, создание комплекса программ для описания их физических свойств на основе развитых методов.

Для достижения цели диссертационной работы были поставлены и решены следующие **задачи**:

1. Выбрать и реализовать 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. Построить трёх-периодические поверхности (ТПП) посредством реализованных в программном комплексе ToposPro процедур и провести тополого-геометрический анализ полученных поверхностей, образованных сшитыми полиэдрами.
3. Разработать и реализовать в виде программного комплекса метод построения гладких ТПП, полученных из атомных сеток кристаллов, включающий процедуру сглаживания с минимизацией средней кривизны поверхности.
4. Разработать и реализовать в виде программного комплекса метод построения макроскопических пористых структур на основе ТПП, допускающий их использование в аддитивном производстве и стандартных комплексах программ по расчету физических свойств материалов и конструкций.

5. Рассчитать и провести сравнительный анализ механических характеристик полученных в диссертации макроскопических пористых структур, имеющих различные топологические признаки.
6. Провести экспериментальную верификацию вычислительных моделей для расчетов механических характеристик пористых структур.

Научная новизна работы заключается в следующем:

1. На основе модифицированной математической модели атомной сетки с помощью полиэдров Вороного-Дирихле, предложен 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 (ТПП/ТПМП), основанный на моделировании пустот и каналов в атомных сетках кристаллов, т.е. на их топологическом представлении.
3. Впервые предложен и реализован в виде программного комплекса и базы данных в сети Интернет метод построения макроскопических пористых структур на основе ТПП.
4. Открыто четыре ранее неизвестных ТПМП на основе сформулированных необходимых условий минимальности.
5. Впервые проведено сравнение механических характеристик пористых структур на основе ТПП/ТПМП с различными топологическими признаками.

На защиту выносятся следующие результаты:

1. Сформулированный и реализованный в виде веб-сервиса подход, основанный на проведенном тополого-геометрическом анализе структуры кристаллов и методе машинного обучения, позволяет предсказывать степени окисления металлов в различных окружениях.
2. Созданный и реализованный в виде программного комплекса алгоритм генерации трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей (ТПП/ТПМП), основанный на топологическом представлении атомных сеток природных кристаллов, дает возможность получения неограниченного числа ТПП и позволил найти четыре ранее неизвестные ТПМП.
3. Созданный и реализованный в виде программного комплекса метод построения макроскопических пористых структур на основе ТПП позволяет использовать их в аддитивном производстве и стандартных комплексах программ для расчета физических свойств материалов.
4. Рассчитанные и размещенные в базе данных сети Интернет значения механических характеристик полученных в диссертации новых пористых структур позволяют выбрать материалы с оптимальными для инженерных приложений свойствами.

По автореферату могут быть сделаны следующие **замечания**:

1. В защищаемых положениях не указано о каких математических моделях идет речь.
2. В автореферате отсутствует пункт Структура и объем диссертации.
3. На стр. 20 в предложении «Для верификации используемых численных моделей методами 3D печати...». Не совсем понятно о каких моделях идет речь, математических, геометрических и т.д.
4. Из текста автореферата не совсем понятно, какие численные методы были использованы в решении задач диссертационного исследования и есть ли в них элементы новизны.
5. В автореферате нет информации о среде разработки программных комплексов.
6. В автореферате отсутствует информация о программном комплексе Surface Extractor, хотя свидетельство на его разработку получено.

Исходя из автореферата диссертационного исследования Смолькова Михаила Игоревича, можно сделать заключение о том, что уровень решаемых задач соответствует специальности 1.1.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, а диссертант заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук.

Ведущий научный сотрудник лаборатории
моделирования физических процессов
Института космических исследований и
распространения радиоволн ДВО РАН,
д.-ф.-м.н., доцент, профессор ДВО РАН

Паровик Р.И.

ПОДПИСЬ УДОСТОВЕРЯЮ

Ведущий специалист по кадрам ИКИР ДВО РАН

«29» сентя 202 5 г.

