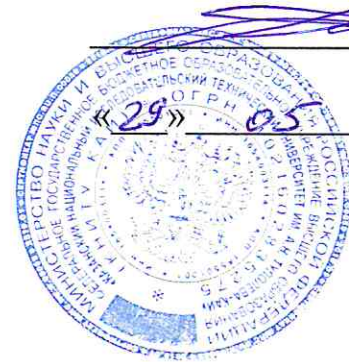


(угловой бланк)

УТВЕРЖДАЮ

Первый проректор - проректор по
научной и инновационной деятельности
доктор технических наук
В.М. Бабушкин



2025 г.

ОТЗЫВ
ведущей организации
федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования
«Казанский национальный исследовательский технический университет
им. А.Н. Туполева - КАИ»

на диссертационную работу Смолькова Михаила Игоревича на тему:
«Методы вычислительной геометрии и топологии в задачах моделирования
новых материалов и прогнозирования их свойств», представленную на
соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ».

1 Вводные положения

Диссертационная работы выполнение в ФГБОУ ВО «Поволжский
государственный университет телекоммуникаций и информатики».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор А. Ф. Крутов.

На отзыв ведущей организации были представлены:

- диссертация – 1 том, 172 листа;
- автореферат – брошюра, 1,4 усл. печ. лист.

Диссертационная работа содержит введение, четыре главы, заключение,
список литературы из 147 наименований, 71 рисунок, 19 таблиц, а также 4
приложения.

2 Актуальность темы

Диссертация Смолькова М.И. посвящена разработке нового подхода к моделированию новых материалов на разных пространственных масштабах, а также к прогнозированию их физических и химических свойств. Подход объединяет топологические и геометрические методы анализа атомных сеток материалов и быстро развивающиеся в настоящее время методы машинного обучения. Такого рода подходы находятся в фокусе внимания современного материаловедения, основным трендом которого является ускорение поиска и дизайна новых материалов за счет широкого использования компьютерного моделирования. В рамках разработанного метода в работе разработан алгоритм и его компьютерная реализация для предсказания степени окисления металлов в различных соединениях, которая является ключевым параметром при описании окислительно-восстановительных реакций, оптических и абсорбционных свойств материалов. На основе топологического представления атомных сеток кристаллов в диссертации разработан метод генерации новых трех-периодических поверхностей (ТПП), а также метод построения на их основе новых макроскопических пористых структур. Получение новых ТПП является вкладом в решение классической математической задачи по построению таких поверхностей. Макроскопические пористые структуры на их основе находят в настоящее время широкое применение в костной имплантологии, при создании новых композиционных материалов и метаматериалов.

Таким образом, актуальность темы диссертации Смолькова М.И. является несомненной.

3 Структура и содержание диссертации, ее завершенность

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы (147 наименований), содержит 71 рисунок, 19 таблиц и 4 приложения.

Во **введении** обосновывается актуальность темы диссертации, сформулированы цель и задачи работы, приведены новизна, практическая значимость и достоверность результатов проведенного исследования, отражены их апробация и публикации.

Глава 1 посвящена обзору существующих методов моделирования новых материалов и их свойств. В главе выделяются топологические и геометрические методы моделирования, которые лежат в основе диссертации, и методы машинного обучения, используемые в диссертационном исследовании. Подробно описываются алгоритмы, реализованные в комплексе программ ToposPro, которые используются в диссертации для анализа и моделирования атомных сеток. Математическим аппаратом этих алгоритмов является теория графов, которые связывают отдельные структуры, из которых может быть построена атомная сетка.

В главе 2 представлен метод моделирования атомной сетки, объединяющий методы вычислительной геометрии для описания разбиения атомной сетки на полиэдры Вороного-Дирихле и методы машинного обучения. Во-первых, определены и рассчитаны оригинальные дескрипторы, определяющие структуру полиэдров, характеризующих атомы и его окружение, выбрана классификационная модель и оценены метрики качества выбранной модели машинного обучения. Обосновывается выбор в качестве основной модели машинного обучения метод случайного леса (Random Forest, RF). Разработанный в диссертации алгоритм стал основой для созданного в диссертации предсказательного веб-сервиса CrystalPredictor, который предназначен для прогнозирования степени окисления металлов. Работа алгоритма демонстрируется на примере расчета степени окисления двух известных соединений Mn_2Fe_5 и Mn_2O_3 . Результаты прогнозирования хорошо согласуются с экспериментальными значениями, приведенными в литературе.

Глава 3 посвящена методам вычислительной геометрии и топологии для генерации трех-периодических поверхностей (ТПП) из атомных сеток природных кристаллов. Природные кристаллы представляют собой естественные трех-периодические структуры, топологический анализ которых на основе т.н. натурального тайлинга позволяет выделить в них системы двух несвязанных каналов. Вводятся выведенные в диссертации правила разбиения атомной сетки на натуральные тайлы, а также правила извлечения ТПП. В результате получается трех-периодические поверхности, ограниченные плоскими многоугольниками, и разбивающие пространство на две системы непересекающихся пор. Произведен анализ всех представителей одного из класса природных кристаллов – цеолитов и получено 98 ТПП. Из этого числа четыре поверхности представляют собой новые ранее неизвестные минимальные поверхности. Развитые алгоритмы реализованы в комплексе программ Porous3D, разработанном в диссертационном исследовании.

В главе 4 построены алгоритмы получения макроскопических пористых структур на основе ТПП, сгенерированных в главе 3, а также описан разработанный в диссертации программный комплекс для создания таких пористых структур. Получены цифровые двойники ряда таких структур и в программном комплексе ANSYS рассчитаны их механические свойства. Методами 3D печати произведены образцы данных пористых структур и экспериментально измерены их механические характеристики. Результаты эксперимента хорошо согласуются с результатами численного моделирования.

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы и перспективы дальнейших исследований.

4 Научная новизна результатов диссертационного исследования

По результатам рассмотрения диссертации и публикаций автора можно выделить ряд результатов исследований, обоснованно претендующих на научную новизну:

-новый подход к моделированию физических и химических свойств материалов, объединяющий методы вычислительной геометрии и машинного обучения, обеспечивающий, в частности, корректные предсказания степени окисления металлов в различных соединениях;

-новый метод генерации трех-периодических поверхностей на основе модели натурального тайлинга для топологического представления атомных сеток кристаллов;

-метод построения цифровых двойников макроскопических пористых структур на основе трех-периодических поверхностей, представляемых в виде, допускающем их использование в аддитивном производстве и в стандартных пакетах прикладных программ для расчета их физических свойств;

-формирование базы результатов численного моделирования и экспериментальных исследований пористых образцов, позволяющая возможность выбора пористых структур, наиболее адекватных для конкретных инженерных приложений.

5 Значимость для науки результатов диссертационных исследований автора

Обоснованные и реализованные в виде веб-сервиса и программного комплекса методы и алгоритмы моделирования новых материалов и их свойств способствуют развитию новых подходов в современном материаловедении.

Полученные результаты исследования дают новые инструменты и расширяют знания в области моделирования новых материалов и прогнозирования их физических и химических свойств.

Диссертационная работа содержит **значимые научные результаты по заявленной специальности 1.2.2 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»** (физико-математические науки), в частности, по п.1 (Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений), 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) паспорта специальности.

Обоснованность и достоверность результатов работы сомнений не вызывают и обеспечиваются, в частности, адекватностью используемых математических методов и построенных на их основе алгоритмов и компьютерных моделей. Достоверность результатов работы подтверждается хорошим согласованием результатов моделирования с результатами

экспериментальных исследований и результатами других исследований, где они имеются. Достоверность результатов подтверждается также большим количеством уникальных обращений к созданным в диссертации и размещенным в сети Интернет веб-сервису и программному комплексу.

6 Практическая значимость результатов диссертационных исследований автора

Практическая значимость результатов заключается в том, что разработанные модели, алгоритмы и методики могут быть непосредственно использованы при моделировании новых материалов и прогнозированию их свойств.

7 Рекомендации по использованию результатов и выводов, приведенных в диссертации

Основные положения и выводы диссертационной работы, в силу отмеченной выше научной и практической значимости ее результатов, могут найти применение в образовательных учреждениях и научно-исследовательских организациях, в которых проводятся исследования по дизайну новых материалов:

- Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова;
- Казанский (Приволжский) федеральный университет;
- ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского»;
- ФГБОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет»;
- АНОО ВО «Сколковский институт науки и технологий»;
- ФГБУН «Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук»;
- ФГБУН Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук;
- ФГБОУ ВО «Самарский государственный технический университет»;
- ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева»;
- ФГБУН Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича Сибирского отделения РАН и др.

Считаем целесообразным, кроме того, использование научных результатов диссертации в учебном процессе учреждений высшего образования при преподавании дисциплин, связанных с материаловедением.

Рекомендуется продолжение работ в данном направлении.

8 Замечания

1. Обзор работ по моделированию физико-технических свойств материала, определяемых его структурой, является недостаточно полным. Автор не упоминает, например, известные российские научные школы академика Панина В.Е., профессора Аскадского А.А. и др. Так, развитое Паниным В.Е. направление физической мезомеханики позволяет установить связь механических свойств материалов и их структуры с учетом ее уровней (молекулярный, надмолекулярный, мезоуровень и макроскопический уровень). Отсутствие сравнения предлагаемого автором подхода к моделированию свойств материалов с учетом их структуры с уже развитыми подходами российских научных школ не позволяет сформулировать представление о преимуществах заявляемого подхода.
2. Во второй главе диссертации предложен подход к предсказанию степени окисления металлов. Автору следовало пользоваться научной терминологией при формулировке названия главы: «прогнозирование», а не «предсказание». По сути, в этом разделе диссертации предложен метод определения, а не прогнозирования степени окисления металлов: автор пользуется «...данных об известных и точно определенных кристаллических структурах координационных соединений, содержащих атомы металлов, образующих комплексы с оксолигандами, состоящими исключительно из атомов углерода, водорода и/или кислорода». Степень окисления металлов зависит от целого комплекса внешних факторов на стадии формирования кристаллических структур. Вопросы формирования таких структур при различных условиях, влияющих на степень окисления атомов металлов в этом разделе не рассматриваются. Следует отметить путаницу в названиях параграфов и второй главы. Так в параграфе 2.4 автор пишет об определении степени окисления металлов, а в названии главы – «предсказание».
3. Автору следовало выделить отдельно разделы выводов в каждой из глав диссертации.
4. В третьей главе при формализации метода построения минимальных трех-периодических поверхностях автору следовало бы учитывать не только топологию и геометрию, но и физику взаимодействия частиц, образующих соответствующие поверхности. Особый практический интерес представляют дефекты, присутствующие в структуре любого материала. Отсутствие учета физики и особенностей структуры материалов позволило авторам предложить метод описания идеализированных структур. Автору следовало выделить раздел об адекватности предложенного им метода и сопоставить результаты моделирования и экспериментальные данные.

5. Пористые материалы могут иметь закрытые и открытые ячейки (поры). В композиционных материалах зачастую встречаются оба типа ячеек одновременно. К сожалению, автор предлагает метод описания (моделирования) только открытых ячеек, а вопрос об адекватности модели отдельно не рассмотрен.
6. Структура диссертации неудачна. Авторы следовало во второй главе формализовать метод и математический аппарат описания структуры материала, а уже в последующих главах показать применение этого метода для решения практических задач. В представленной структуре диссертации сложно понять, что общего в главах 2, 3 и 4.

Отмеченные недостатки не затрагивают основные положения, выносимые на защиту.

9 Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным положением о присуждении ученых степеней

Диссертационная работа Смолькова Михаила Игоревича «Методы вычислительной геометрии и топологии в задачах моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств», соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней и является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний, а именно – моделированию новых материалов и прогнозированию их свойств на основе интегрирования методов вычислительной геометрии и топологии и других методов, в частности, метода машинного обучения.

Результаты исследований апробированы на российских и международных конференциях.

Основные результаты диссертационной работы в достаточной степени отражены в опубликованных автором научных трудах, в том числе – в рецензируемых научных изданиях, входящих в соответствующий Перечень. Уровень и объем публикаций соответствует требованиям п. 11 и п. 13 Положения.

По результатам рассмотрения диссертации не обнаружены какие-либо факты использования заимствованных материалов без ссылки на источники, т. е. диссертация соответствует требованиям п. 14 Положения.

Автореферат диссертации, в целом, достаточно полно отражает ее содержание и соответствует требованиям п. 25 Положения.

Работа соответствует заявленной специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», по профилю – «физико-математические науки» и в полной мере отвечает требованиям Положения о присуждении ученых степеней, представляемых к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук.

Автор диссертационной работы, Смольков Михаил Игоревич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Отзыв составлен на основании обсуждения диссертационной работы на расширенном семинаре межвузовской междисциплинарной лаборатории «Технологии синтеза фрактальных структур и сложных технических систем» (ТСФС) 28.05.2025, протокол №4.

Отзыв составил:

Д.т.н., профессор, заведующий лабораторией ТСФС
Данилаев Максим Петрович

Докторская диссертация защищена
По специальности 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Адрес организации: 420111, г.Казань,
ул. К.Маркса, 10
рабочий телефон:+7(843) 231-97-34
адрес эл.почты: kai@kai.ru
Сайт: www.kai.ru

Подпись Данилаева М.П.
заверяю. Начальник управления
делопроизводства и контроля

