

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».

Диссертационная работа Смолькова М.И. посвящена разработке новых методов моделирования свойств материалов на различных пространственных масштабах, объединяющих тополого-геометрические модели, методы вычислительной геометрии и машинного обучения. Развитый подход был использован для предсказания степени окисления металлов, компьютерного моделирования новых пористых материалов на основе трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей, полученных из природных кристаллов.

Актуальность исследования обусловлена тем, что разработка материалов с макроскопическими системами пор или ячеек позволяет создавать новые композиционные материалы с взаимопроникающими фазами, которые обладают уникальными механическими, термическими и функциональными свойствами и являются в настоящее время объектами интенсивных исследований. Центральное место среди подобных материалов занимают новые трёх-периодические пористые структуры, построенные на базе соответствующих поверхностей, включая минимальные (ТПП/ТПМП), алгоритмы генерации которых были разработаны соискателем в рамках выполнения диссертационной работы. В этом контексте работа Смолькова М.И. представляет собой актуальное исследование, результаты которого имеют важное теоретическое и прикладное значение.

Оригинальность проведённых исследований проявляется в создании новых математических моделей, математических алгоритмов и их программном воплощении, обеспечивающем моделирование пористых структур на основе ТПП/ТПМП и оптимизацию кристаллохимических расчетов, в частности, определение степени окисления металлов.

В диссертации на высоком уровне обоснована достоверность основных результатов, в частности, важным аспектом работы является проверка используемых теоретических и вычислительных моделей путем сравнения с результатами натурных экспериментов, выполненных самим автором.

Результаты диссертации были опубликованы в высокорейтинговых научных журналах, а также докладывались на научных конференциях российского и международного уровней. Отдельно хотелось бы выделить получение трех свидетельств о гос. регистрации программ для ЭВМ.

В качестве замечаний к автореферату диссертации можно отметить следующее:

1. В своей работе Смольков М.И. предлагает оригинальный подход для расчета степени окисления металлов. Из автореферата не совсем понятно насколько он лучше уже существующих методов (например Composition.oxi_state_guesses в программном пакете rumatgen)?

2. Проводилось ли тестирование модели на структурах, содержащих точечные дефекты? Я воспользовался сервисом для определения степеней окисления в суперячейке $\text{LiCo}^{3+}\text{O}_2$, содержащей вакансию лития и один окисленный Co^{4+} . Однако, программа выдала, что все ионы кобальта имеют с.о. 3+.

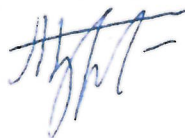
3. Было бы удобнее, если бы ссылки на веб-ресурсы, разработанные в рамках выполнения диссертационной работы, в автореферате были собраны в одном месте.

Сделанные замечания ни в коей мере не умаляют ценности полученных автором научных результатов и не снижают общей положительной оценки работы.

Диссертационная работа Смолькова М.И. является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком уровне, содержит новые результаты, имеющие теоретическую и практическую значимость, а также удовлетворяет всем требованиям Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Считаю, что соискатель заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Дано согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Смолькова М.И. и их дальнейшую обработку

кандидат физико-математических наук,
научный сотрудник,



Боев Антон Олегович

09 июня 2025 года

Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования «Сколковский институт науки и технологий»,
121205, г. Москва, территория инновационного центра «Сколково»,
Большой бульвар, д. 30 стр.1,

Почта: a.boev@skoltech.ru

Телефон: +79103633645

Подпись, должность и место работы, ученую степень Боева А.О. заверяю.

