

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Смолькова М.И.

«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

Рассматриваемая работа посвящена разработке метода математического моделирования материалов на различных пространственных масштабах, объединяющего тополого-геометрические модели, методы вычислительной геометрии и машинного обучения, а также применению развитого подхода для различного рода задач. Тематика работы является весьма актуальной, так как в настоящее время математическое моделирование новых материалов и прогнозирование их физических свойств являются основными направлениями развития современного материаловедения, которое, в свою очередь, играет ключевую роль в развитии важнейших прорывных технологий и устройств нового поколения.

В ходе диссертационных исследований автором получен ряд новых результатов, к числу которых следует отнести:

1. Сформулирован и реализован в виде веб-сервиса подход, основанный на проведенном тополого-геометрическом анализе структуры кристаллов и методе машинного обучения, позволяющий предсказывать степени окисления металлов в различных окружениях.

2. Создан и реализован в виде программного комплекса алгоритм генерации трех-периодических, в том числе, минимальных, поверхностей, основанный на топологическом представлении атомных сеток природных кристаллов, который обеспечил возможность получения неограниченного числа трех-периодических поверхностей и позволил найти четыре ранее неизвестные трех-периодические минимальные поверхности.

3. Создан и реализован в виде программного комплекса метод построения макроскопических пористых структур на основе трех-периодических поверхностей, который позволяет использовать их в аддитивном производстве и стандартных комплексах программ для расчета физических свойств материалов.

4. Рассчитаны и размещены в базе данных сети Интернет значения механических характеристик полученных в диссертации новых пористых структур, которые позволяют выбрать материалы с оптимальными для инженерных приложений свойствами.

Практическая значимость диссертации заключается, в частности, в том, что разработанный метод прогнозирования степени окисления металлов позволяет с высокой точностью предсказать значение данного химического свойства без затратных экспериментальных и расчетно-теоретических исследований. Кроме того, созданные автором программный комплекс, веб-сервис и база данных активно используются исследователями из различных стран мира.

Автореферат удовлетворяет действующим требованиям и создает достаточно полное представление о диссертации.

В то же время, по содержанию автореферата имеются следующие замечания:

- в названии работы речь идет о моделировании новых материалов, однако, в автореферате не сказано, что это за материалы и каково их практическое применение;
- из текста автореферата остается не ясным, предложены ли метрики качества выбранной модели (формулы (5) – (8)) автором, или они взяты из литературы;
- на стр. 16 автореферата указано, что разработанный программный комплекс Rogous 3D использует для получения трех-периодических поверхностей файлы .stl формата. При этом остается неясным, каким образом регулируется точность получаемых таким образом геометрических объектов, и оказывает ли влияние изменение достигаемой точности на получаемые в результате моделирования характеристики материалов;
- в автореферате не приводятся сведения о проведении физических экспериментов по измерению характеристик материалов, не описана измерительная база и не даны ошибки измерений, что затрудняет оценку полученных результатов.

Отмеченные недостатки, однако, не снижают общей положительной оценки работы.

На основании прочтения автореферата можно сделать вывод о том, что представленная диссертация является завершенной научно-квалификационной работой, состоящей в решении актуальной задачи разработки нового метода моделирования материалов на различных пространственных масштабах, имеющей существенное значение для области математического моделирования, численных методов и комплексов программ. Диссертация отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Смольков Михаил Игоревич, заслуживает присуждения ему искомой ученой степени кандидата физико-математических наук.

Лица, подписавшие отзыв на автореферат, выражают согласие на обработку и включение в аттестационное дело соискателя своих персональных данных.

Отзыв составили:

Заместитель начальника научного отдела 3
научно-исследовательского отделения 235,
д.ф.-м.н.

А.М. Нещерет

Главный научный сотрудник
научного отдела 3
научно-исследовательского отделения 235,
ученый секретарь НТС, д.т.н., доц.



М.А. Бузова

« 10 » 06 2025 г.

АО «Самарское инновационное предприятие радиосистем».
443052, г. Самара, ул. Земеца, 26Б.
Тел.: +7 (846) 203-19-63.
E-mail: bma@siprs.ru.
Сайт: <https://siprs.ru/>.