

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».

Диссертация Смолькова М.И. посвящена разработке новых методов моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств. Эти методы основаны на объединении тополого-геометрических методов анализа атомных сеток, которые в течение длительного времени разрабатываются в Международном научно-исследовательском центре теоретического материаловедения, и современных вычислительных методов, в частности, методов машинного обучения. Разработанные методы используются для решения математической задачи о нахождении новых трижды периодических поверхностей (ТПП), а также для вычисления важной характеристики вещества – степени окисления металлов в различных соединениях. Сгенерированные ТПП используются в диссертации для создания сложных пористых структур, обладающих двумя системами непересекающихся пор. Такого рода структуры широко применяются в современной науке и технике для создания легких и прочных механических конструкций, при получении композиционных материалов, а также метаматериалов. Таким образом, в диссертации поставлена и решена актуальная задача, результаты решения которой могут быть использованы в различных приложениях. Разработанные в исследовании методы и алгоритмы реализованы в виде комплексов программ и веб-сервисов, которые активно используются исследователями из различных стран мира.

Научная новизна диссертации обеспечивается созданием оригинальных физических и вычислительных моделей, а также новыми комплексами программ и веб-сервисами, которые позволяют моделировать различные пористые структуры на базе ТПП, а также решать другие важные теоретические и практические задачи, по предсказанию физико-химических свойств соединений.

Сочетание исходных абстрактных моделей и получившегося в результате компьютерного инструментария, позволяющего получать необходимые на практике результаты является отличительной чертой представленной диссертации.

Достоверность основных результатов обусловлена сравнением с имеющимися в научной литературе данными, а также численными и натурными экспериментами, выполненными в диссертации. Следует также отметить большое количество уникальных обращений к разработанным веб-сервисам, доступным в сети Интернет.

