

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».

Машинное обучение в современной науке является незаменимым инструментом при установлении неочевидных закономерностей при анализе больших объемов данных. В частности, как это показано в диссертации, этот метод существенно упрощает исследование различных физико-химических параметров, извлекаемых из огромного объема имеющейся кристаллографической информации, автоматизируя анализ рассматриваемых данных и снижая зависимость от трудоёмких экспериментов. В диссертации данный метод продемонстрирован на примере расчета степени окисления металлов. Один из ключевых подходов, используемый в диссертации, заключается в использовании предобученных моделей, обученных на обширных базах данных, таких как ICSD или Materials Project. В своей диссертационной работе Смольков М.И. разработал новый метод предсказания степени окисления металлов в различных окружениях на основе новой формулировки математической модели атома в узле кристаллической решетки с помощью полиэдров Вороного-Дирихле. Для классификации возможных состояний металлов автор применяет ряд различных алгоритмов машинного обучения, в частности, Random Forest. На основе этих алгоритмов в диссертации создан веб-сервис для предсказания степени окисления, широко используемый исследователями из разных стран. Таким образом, разработанные автором алгоритмы и веб-сервис ускоряют процесс определения степеней окисления в различных соединениях, сокращают количество необходимых натуральных и вычислительных экспериментов и открывают новые возможности для дизайна функциональных материалов с заданными свойствами. В настоящее время в

материаловедении активно разрабатываются также материалы с макроскопическими порами разной структуры и размеров. Такие материалы особенно востребованы при создании композитов с взаимопроникающими фазами, обладающие уникальными свойствами. Аддитивные технологии позволяют создавать и применять такие материалы в различных отраслях инженерии и техники. Важную роль в этом направлении современного материаловедения играют трёх-периодические пористые структуры на основе трех-периодических, включая минимальные, поверхностей (ТПП/ТПМП), новые методы генерации которых сформулированы в диссертации. Таким образом, диссертационное исследование Смолькова М.И. имеет важное научное и практическое значение.

Научная новизна работы заключается в разработке новых математических алгоритмов и моделей, а также программных комплексов для моделирования пористых структур на базе ТПП/ТПМП и расчета степени окисления металлов.

Достоверность результатов диссертации подтверждена сравнением расчетных моделей с экспериментальными данными, полученными самим автором.

Итоги диссертационного исследования неоднократно освещались на конференциях разного уровня.

Основные материалы размещены в ведущих научных журналах.

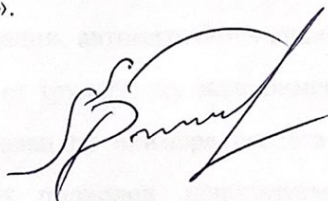
В ходе ознакомления с текстом автореферата возникли следующие *вопросы и замечания*:

1. В практической значимости автореферата написано: «Созданный в диссертации метод позволяет сгенерировать практически бесконечное число трёх-периодических поверхностей...». Что значит практически бесконечное? Есть какой-то предел? Если да, то какой?
2. Алгоритм по определению степеней окисления в зависимости от окружения демонстрирует целочисленные значения. Однако существуют соединения, где степень окисления одного и того же

элемента различна (например Fe_3O_4). Учитывает ли это Ваш алгоритм при поиске новых соединений? Можно ли провести обратную задачу задать степень окисления и определить окружение?

Отмеченные недостатки не влияют на высокую оценку диссертационного исследования. Считаю, что диссертационная работа М.И. Смолькова удовлетворяет всем требованиям Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Научный сотрудник, к.х.н.



Шиндров А.А.

26 мая 2025 г.

Шиндров Александр Александрович, кандидат химических наук (1.4.15 – Химия твердого тела), научный сотрудник лаборатории химии твердого тела ФГБУН Института химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХТТМ СО РАН).

Контактная информация: 630090, г. Новосибирск, ул. Кутателадзе 18, +7 913 397 15 28, e-mail: A.Shindrov@yandex.ru

Я, Шиндров Александр Александрович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Смолькова М.И. и их дальнейшую обработку

ФГБУН Института химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХТТМ СО РАН).

Подпись Шиндрова А.А. по

Ученый секретарь ИХТТМ

д.х.н.



Шахтшнейдер Т.П.