

В совет по защите докторских и кандидатских  
Диссертаций Д.24.2.287.01 на базе Воронежского  
государственного университета инженерных  
технологий по адресу: 394036, г. Воронеж,  
проспект Революции, 19

### **ОТЗЫВ**

Официального оппонента Бессарабова Аркадия Марковича на  
диссертационную работу Митрофанова Игоря Владимировича «Системный  
анализ структур аэрогелей и их цифровые двойники» на соискание учёной  
степени кандидата технических наук по специальности 2.3.1 - Системный  
анализ, управление и обработка информации, статистика.

Представленная диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения,  
содержит 189 страниц, включая 5 приложений, 77 рисунков, 37 таблиц и список  
литературы из 175 наименований.

#### **Актуальность диссертационной работы**

Аэрогели представляют собой класс высокопористых материалов из  
органического, неорганического сырья и их смесей, получаемых  
преимущественно сверхкритической сушкой гелеобразных структур. По росту  
количества научных публикаций и количеству патентов можно судить о  
растущем интересе к данному типу материалов, при чем для применения в  
разных отраслях промышленности: в качестве тепло- и звукоизоляционных  
материалов, адсорбентов, матриц-носителей и другие.

Сырье и особенности проведения стадий формирования гелей,  
являющихся прекурсорами аэрогелей, функционализация поверхности, условия  
замены растворителя и сверхкритической сушки, а также постобработка  
готовых аэрогелей позволяют получать конечные продукты, различающиеся по  
структуре, механическим и физико-химическим свойствам.

На сегодняшний день накоплен большой опыт разрозненных знаний в  
технологии получения аэрогелей, но при этом не разработаны инструменты,  
позволяющие разработчикам быстро ориентироваться в имеющимся  
информационном пространстве и использовать весь объем сгенерированных  
знаний в области аэрогелей для ускорения собственных разработок.

В связи с вышесказанным цель данной работы – системный анализ

структур аэрогелей и создание их цифровых двойников с использованием клеточно-автоматного подхода для мультимасштабного моделирования – является актуальной.

### **Оценка содержания диссертации и степени обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций**

**В первой главе** приведен аналитический обзор литературы, в первой части которого автор рассматривает возможность применения клеточно-автоматного подхода в качестве базового при создании цифровых двойников аэрогелей. Приведен анализ применения КА подхода для моделирования микроструктуры материалов и его свойств, процессов диффузии, кристаллизации, растворения и эрозии, адсорбции и кинетики химических реакций.

Кроме изучения области применения КА подхода, автор рассматривает в обзоре литературы материалы, из которых получают аэрогели, приводит краткое описание основных свойств как самих материалов так и получаемых из них аэрогелей.

По результатам сделанных наблюдений Митрофанов И.В. формулирует цели и задачи диссертационного исследования.

**Вторая глава** посвящена систематизации данных о характеристиках различных видов аэрогелей, путем сбора информации от партнеров через опросные листы, которые были подготовлены и разосланы партнерам в рамках проекта № 075-15-2020-792 (уникальный идентификатор: RF–190220X0031). Разделы опросного листа охватывают как параметры основных стадий производства аэрогелей (гелеобразование, замена растворителя, сверхкритическая сушка) так и описание природы и свойств получаемых материалов.

Собранный объем структурированной информации представляет собой базу, которую Митрофанов И.В. использовал для системного анализа предметной области и разработки программного комплекса по генерации и исследованию структур аэрогелей.

**Третья глава** посвящена разработке модулей, входящих в состав программного комплекса для генерации структур аэрогелей и моделированию процессов, происходящих в них. Программный комплекс представляет собой совокупность отдельных тесно интегрированных между собой модулей, каждый из которых удовлетворяет требованию самодостаточности. Работа модулей направлена или на генерацию структур аэрогелей или на

моделирование физико-химических процессов, протекающих в структуре аэрогеля.

Для генерации структур аэрогелей разработаны шесть модулей, в основе которых лежат следующие алгоритмы: генерация структур аэрогелей с помощью метода перекрывающихся сфер; кластерной агрегации, ограниченной диффузией; агрегацией, ограниченной реакцией с несколькими центрами кристаллизации; баллистической агрегации «частица – к кластер»; случайного блуждания; на основе кривых Безье. Дополнительно разработан модуль расчета удельной поверхности, плотности, пористости структуры с помощью которого оцениваются основные характеристики сгенерированной структуры.

Автором представлены результаты серии вычислительных экспериментов, позволяющие продемонстрировать отличия виртуальных структур при их генерации разными модулями, и выявить, как параметры, используемые при генерации структур, влияют на ее характеристики (удельную площадь поверхности, распределение пор по размерам или среднего диаметра пор).

Сравнительный анализ характеристик сгенерированных структур и их экспериментальных прототипов позволил Митрофанову И.В. дать рекомендации какие алгоритмы позволяют добиться большего сходства сгенерированного прототипа с оригиналом из определенного класса аэрогелей (аэрогели из полимочевины, целлюлозы, хитозана, полиамида и т.д.). Автором показана необходимость разработки гибридных алгоритмов, которые смогли бы учитывать сложные структуры аэрогелей различной природы, состоящих как из глобул, так и из волокон.

**В четвёртой главе** дано подробное описание структуры программного комплекса (алгоритмический уровень и уровень управления моделированием), использованных технологий и языком программирования. Клиент-серверное веб-приложение состоит из клиентской части, которая представляет собой полноценное одностраничное веб-приложение с графическим пользовательским интерфейсом, и серверной части, реализующей механизмы хранения, записи и представления данных. Настройка, создание и визуализация проведенных вычислительных экспериментов по генерации структур аэрогелей в разработанном программном компьютерном комплексе может производиться с помощью графического пользовательского интерфейса, доступного в веб-приложении.

Митрофанов И.В. описывает пошаговый алгоритм работы пользователя в разработанном программном комплексе, как для генерации структур, так и для

моделирования процессов, протекающих в сгенерированных структурах. В работе автор приводит результаты вычислительных экспериментов по изучению диффузии и делает вывод как структура сгенерированного пористого тела влияет на скорость диффузии.

Проведены вычислительные эксперименты по изучению адсорбции в сгенерированных структурах аэрогелей и определены значения энергии и энтропии. По результатам был сделан вывод о том, что для моделей MultiRLA, RW и ВРСА расчетные значения соответствующих параметров в целом совпадают с заданными (средняя относительная ошибка не превышает 18% как для  $\epsilon MS$ , так и для  $sMS$ ), в то время как для моделей OSM и DLCA необходимо произвести оптимизацию задаваемых значений энергии и энтропии.

**В приложении** приведены примеры заполненных опросных листов для разных типов аэрогелей, использованные в качестве информационной базы для разработки и апробации программного комплекса.

### **Новизна и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций**

**Достоверность и обоснованность** защищаемых научных положений обеспечивается большой выборкой экспериментальных исследований структур различных типов аэрогелей с использованием общепринятых аналитических методов и современного оборудования; тестированием предлагаемых в работе клеточно-автоматных моделей и алгоритмов на ряде модельных задач; проверкой адекватности разработанных моделей путем сопоставления с экспериментальными данными.

Апробация результатов работы приведена на международных конференциях и семинарах.

#### **Научная новизна работы**

1. Разработан универсальный опросный лист для системного сбора информации по производству аэрогелей различной природы, собраны и систематизированы соответствующие исследования и результаты, в частности – условия получения, использованное оборудование, характеристики получившихся аэрогелей (площадь удельной поверхности, средний диаметр пор, распределение пор по размерам).
2. Разработаны оригинальные клеточно-автоматные алгоритмы для генерации структур различных типов аэрогелей, состоящих из глобул или волокнистых структур.
3. Систематизированы масштабные вычислительные эксперименты, на

основе которых были выданы рекомендации по использованию различных алгоритмов для генерации структур разных типов аэрогелей, что позволит изучать процессы, протекающие внутри структур, используя методы мультимасштабного моделирования.

4. Разработаны алгоритмы и методы визуализации, трансформации и анализа информации в виде программного комплекса, объединяющего методы мультимасштабного моделирования для изучения аэрогелей.

**Практическая значимость диссертационной работы** состоит в систематизации сведений о получении аэрогелей на основе полимочевины, целлюлозы, полиамида, полиуретана и хитозана, а также их характеристик. Кроме того, разработанный опросный лист позволит собирать информацию о любом типе аэрогелей в будущем.

Создан компьютерный программный комплекс, реализующий методы визуализации, трансформации и анализа информации, для генерации структур аэрогелей (состоящих из глобул или волокнистых структур) с помощью алгоритмов DLCA, OSM, MultiRLA, BPCA, Random Walker и алгоритма на основе кривых Безье, а также усовершенствован разработанный ранее клеточный автомат для изучения процессов, происходящих внутри структур аэрогелей (диффузия и адсорбция), позволивший работать с трехмерными структурами, сгенерированными с помощью указанных алгоритмов, что является обучающим этапом построения компьютерной системы искусственного интеллекта.

**Личное участие соискателя учёной степени в получении результатов, изложенных в диссертации**

Диссертационная работа И.В. Митрофанова является научной работой, выполненной самостоятельно. Личный вклад соискателя состоит в планировании и разработке исследования и алгоритмов, написании программ, проверке адекватности и интерпретации полученных данных, формулировании выводов, написании публикаций, отчетов по проектам.

Основные теоретические и практические положения диссертации, результаты исследования неоднократно докладывались автором на международных научно-практических конференциях.

### **Замечания по диссертационной работе**

1. Приведенный разработанный опросный лист содержит поля, которые заполняют специалисты, имеющие квалификацию в области химического синтеза, процессов и аппаратов. Поля опросника заданы таким

образом, что объем и формат ответа не регулируется. Как решается вопрос с разным представлением описания разными группами исследователей и разным объемом такой информации, наличием пропусков в данных?

2. Не представлены рекомендации по заполнению опросника, например, как исследователь выбирает «Механизм гелеобразования (внутреннее отверждение, диффузионное гелеобразование и т.д.)», если он не является специалистом в области математического моделирования? Как понять в каких единицах измерения требуется представить числовые характеристики, например «концентрации растворителей»?

3. В диссертационной работе не конкретизирован личный вклад автора в разработку модулей, входящих в программный комплекс.

4. В работе не приведен анализ как возрастают вычислительные затраты при увеличении размеров генерируемой структуры для разных методов генерации, каковы максимальные размеры таких объектов.

Отмеченные выше замечания не снижают значимость проведённых исследований и не отражаются на общей положительной оценке диссертации.

### **Заключение по диссертации**

Тематика исследования, цель и задачи работы, научная новизна, методы и способы, используемые в работе, подтверждают её соответствие паспорту специальности 2.3.1 Системный анализ, управление и обработка информации, статистика в пунктах 3, 4, 8, 12, 13.

На основании изложенного считаю, что диссертационная работа Митрофанов И.В. на тему: «Системный анализ структур аэрогелей и их цифровые двойники» является завершённой научно-квалификационной работой, в которой изложены результаты системного анализа способов получения аэрогелей различной природы и подходы к многоуровневому моделированию структуры свойств с использованием клеточно-автоматного подхода.

Основное содержание работы изложено в 8 публикациях, из которых 6 опубликованы в изданиях, входящих в перечень рецензируемых научных изданий, в том числе 6 работ – в изданиях, входящих в международные системы цитирования Web of Science и Scopus. По результатам работы зарегистрировано 4 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Автореферат полностью соответствует структуре и содержанию диссертации.

Таким образом, можно заключить, что диссертационная работа соответствует критериям, установленным требованиями п. 9-14 требований «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённого Постановлением Правительства Российской Федерации №842, предъявляемым к докторским диссертациям, а её автор, Митрофанов Игорь Владимирович, заслуживает присуждения учёной степени доктора технических наук по специальности 2.3.1 Системный анализ, управление и обработка информации, статистика (в химической технологии).

**Официальный оппонент**

Заместитель директора по науке,  
АО Научный центр «Малотоннажная химия»,  
доктор технических наук (специальность  
05.13.06 – Применение вычислительной  
техники, математического моделирования и  
математических методов в научных  
исследованиях (по отраслям наук), профессор

E-mail: bessarabov@nc-mtc.ru

Бессарабов А.М

01.12.2022

Подпись Бессарабова А.М. заверяю:  
Директор АО Научный центр  
«Малотоннажная химия»,  
кандидат химических наук



В.Е. Трохин

АО Научный центр «Малотоннажная химия»,  
107564, г. Москва, ул. Краснобогатырская,  
д.42, стр.1  
Тел.: +7 (495) 983-58-88  
E-mail: info@nc-mtc.ru