

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.287.01,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ «ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ ИНЖЕНЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ» МИНИСТЕРСТВА  
НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО  
ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА  
НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета 24.2.287.01 от «21» декабря 2022 г. № 23

О присуждении Митрофанову Игорю Владимировичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата технических наук.

**Диссертация** «Системный анализ структур аэрогелей и их цифровые двойники» в виде рукописи по специальности 2.3.1 – «Системный анализ, управление и обработка информации, статистика» принята к защите 10 ноября 2022г. (протокол заседания №16) диссертационным советом 24.2.287.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Воронежский государственный университет инженерных технологий» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 394036, Воронеж, проспект Революции, д. 19, приказ о создании диссертационного совета №168/нк от 13.02.2018 г.

Соискатель **Митрофанов Игорь Владимирович** 1988 года рождения, в 2010 году окончил ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д.И Менделеева», диплом инженера по специальности «Информационные системы и технологии», номер ВСГ 4869098. В 2020 году окончил аспирантуру ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева», специальность 09.06.01 «Информатика и вычислительная техника». Соискатель с 2022 г. работает в РХТУ им. Д. И. Менделеева, в настоящий момент занимает должность ведущего инженера на кафедре химического и фармацевтического инжиниринга.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук по научной специальности 2.3.1 – «Системный анализ, управление и обработка информации, статистика» выполнена на кафедре химического и фармацевтического инжиниринга федерального государственного

бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева».

**Научный руководитель:** доктор технических наук, профессор Меньшутина Наталья Васильевна, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева», кафедра химического и фармацевтического инжиниринга, заведующий кафедрой.

Официальные оппоненты:

1. Матвеев Михаил Григорьевич, доктор технических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Воронежский государственный университет», кафедра информационных технологий управления, заведующий кафедрой;

2. Бессарабов Аркадий Маркович, доктор технических наук, профессор, АО Научный центр «Малотоннажная химия», заместитель директора по науке;

дали положительные отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация** Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Ивановский государственный химико-технологический университет», г. Иваново в своем положительном заключении, подписанном на расширенном заседании кафедры технической кибернетики и автоматики, 16.11.2022 г., протокол заседания № 3, подписанном заведующим кафедрой, кандидатом технических наук, доцентом Гримицким Павлом Николаевичем, профессором кафедры, доктором технических наук Лабутиным Александром Николаевичем и утвержденном проректором по науке и инновациям ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет», доктором химических наук Гушиным Андреем Андреевичем указала, что диссертационная работа Митрофанова И.В. соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней» Высшей аттестационной комиссии при министерстве науки и высшего образования РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Автор Митрофанов Игорь Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 2.3.1 «Системный анализ, управление и обработка информации, статистика».

С помощью разработанного универсального опросного листа был собран, обработан и систематизирован большой объем данных по получению и свойствам аэрогелей на основе целлюлозы, полимочевины, полиамида, хитозана и полиуретана. Разработанный опросный лист позволит в будущем собирать данные о других аэрогелях различной природы. Разработан

программный комплекс, который позволяет создавать цифровые двойники аэрогелей, визуализировать и анализировать их структуру и свойства. Автором были использованы различные алгоритмы генерации структур, таким образом программный комплекс позволяет выбрать наиболее подходящий для нужного типа аэрогеля: кластер-кластерная агрегация, ограниченная диффузией (DLCA), алгоритм слабоперекрывающихся сфер (OSM), агрегация, ограниченная реакцией с множеством центров кластеризации (MultiRLA), баллистическая агрегация «частица-кластер» (BPСА), алгоритм случайного блуждания (RW), алгоритм на основе кривых Безье. Кроме того, предложенный программный комплекс реализует трехмерную клеточно-автоматную модель процессов диффузии и адсорбции в структуре аэрогеля.

Основное содержание диссертации с достаточной полнотой отражено в 8 печатных работах, из них 6 в журналах, индексируемых в международных базах данных Web of Science и Scopus. Получено 4 свидетельства о регистрации прав на программное обеспечение.

**Наиболее значимые работы по теме диссертации:**

1. Cellular Automata Modeling of Three-Dimensional Chitosan-Based Aerogels Fibrous Structures with Bezier Curves. I. Lebedev, D. Lovskaya, M. Mochalova, I. Mitrofanov, N. Menshutina, July 2021, Polymers 13(15):2511, DOI:10.3390/polym13152511 (Q1, Web of Science, Scopus).

2. A Cellular Automata Approach for the Modeling of a Polyamide and Carbon Aerogel Structure and Its Properties. N. Menshutina, I. Lebedev, E. Lebedev, P. Paraskevopoulou, I. Mitrofanov, October 2020, Gels 6(4):35, DOI:10.3390/gels6040035 (Q2, Web of Science, Scopus).

3. Modelling of Aerogels Structures Using Intelligent System «AeroGen Structure». I. Mitrofanov, I. Malysheva, A. Kolnoochenko, N. Menshutina, January 2017 Computer Aided Chemical Engineering, DOI:10.1016/B978-0-444-63965-3.50080-5 In book: 27th European Symposium on Computer Aided Process Engineering (pp.469-474), (Q3, Web of Science, Scopus).

**На диссертацию и автореферат поступили отзывы:**

1. Отзыв доктора технических наук, доцента, заместителя директора по науке НИЦ «Курчатовский институт» - ИРЕА, **Макаренкова Дмитрия Анатольевича**. Отзыв положительный. Имеется следующее замечание: «Из автореферата не совсем ясно, проводились ли исследования влияния на структуру первых стадий получения аэрогелей: гелеобразования, замены растворителя и сверхкритической сушки. В опросном листе присутствуют пять разделов, в автореферате приведены выводы из анализа двух разделов: химическая природа полученного аэрогеля и аналитические результаты».

2. Отзыв кандидата технических наук, заместителя директора по производству ООО «РусСилика», **Зеркаева Александра Игоревича**. Отзыв положительный. Имеются следующие вопросы и замечания: «1. Не совсем понятно, несмотря на проведенный анализ большого количества аэрогелей, аэрогели какой природы являются наиболее важными для дальнейшего исследования и какие из них наиболее перспективны для практического применения. 2. В работе был описан интерфейс для работы с реализованными алгоритмами, однако не было обозначено, кто имеет доступ к нему и имеются ли обучающие материалы для работы с ним.»

3. Отзыв кандидата технических наук, куратора цифрового развития бизнес-направления «Татнефть-Цифровое Развитие» ПАО «Татнефть» **Войновского Алексея Александровича**. Отзыв положительный. Имеются следующие вопросы и замечания: «1. Алгоритмы генерации имеют эмпирические параметры, однако в автореферате не указано, от чего они зависят и каков процесс получения их значений. 2. Не совсем ясно, какую предварительную работу нужно провести, чтобы подключить новый алгоритм генерации структур к разработанному комплексу.»

4. Отзыв кандидата физико-математических наук, начальника лаборатории ФХО-1 ГНЦ ФГУП «ЦНИИчермет им. И.П. Бардина», **Колдаева Антона Викторовича**. Отзыв положительный. Имеется следующее замечание: «В качестве замечания можно отметить, что из автореферата не совсем понятно, можно ли с помощью разработанных алгоритмов получить цифровые двойники структур, состоящих как из глобул, так и из волокон».

5. Отзыв кандидата технических наук, заведующего научно-исследовательской лабораторией «Гибридные наноструктурные материалы» ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», **Комиссарова Александра Александровича**. Отзыв положительный. Критических замечаний не имеется.

6. Отзыв доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника лаборатории технологий искусственного интеллекта НБИКС – природоподобных технологий, **Сбоева Александра Георгиевича**. Отзыв положительный. Критических замечаний не имеется.

7. Отзыв доктора химических наук, профессора, заведующего кафедрой общей химии Химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова, **Дунаева Сергея Федоровича**. Отзыв положительный. Критических замечаний не имеется.

**Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается компетентностью, достижениями в научных исследованиях с**

близкой тематикой, наличием у оппонентов и ведущей организации публикаций в рецензируемых журналах и их высоким профессиональным уровнем.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

**Разработаны** цифровые двойники аэрогелей различной природы, позволяющие учитывать особенности структуры рассматриваемых пористых материалов, а также их характеристики (площадь удельной поверхности, распределение пор по размерам).

**Предложены** нетрадиционные подходы с использованием клеточно-автоматных алгоритмов, позволяющие моделировать и изучать структуры аэрогелей различной природы на основе проведенного теоретико-информационного анализа.

**Доказана** перспективность использования методов мультимасштабного моделирования для изучения структур аэрогелей.

Новые понятия **не вводились**.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

**Доказано**, что использование моделирования структур аэрогелей с помощью клеточных автоматов в трехмерном пространстве расширяет представления об изучаемом явлении и повышает точность описания структур пористых материалов.

**Применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использован комплекс** базовых методов исследования, в том числе методы системного анализа, вычислительной математики, математической статистики; методы анализа и обработки экспертной информации; клеточно-автоматные алгоритмы, позволяющие создавать цифровые двойники аэрогелей, состоящих как из глобул, так и из волокнистых структур; алгоритмы и методы визуализации, трансформации и анализа информации.

**Изложены** стадии и условия получения аэрогелей различной природы, факторы, оказывающие доминирующее влияние на процессы образования аэрогелей и их структуры.

**Раскрыта** проблема отсутствия универсального аппарата при системном описании структур аэрогелей различной природы, а также отсутствие комплексного подхода для изучения внутренних структур аэрогелей и процессов, протекающих внутри них.

**Изучена** эффективность использования разработанных методов и алгоритмов для сбора экспертной информации о любом типе аэрогелей и для

создания цифровых двойников аэрогелей с помощью клеточно-автоматного подхода в качестве обучающего этапа системы искусственного интеллекта для проектирования и разработки материалов с заданными свойствами путем варьирования технологических параметров.

**Проведена модернизация** клеточного автомата для изучения процессов диффузии и адсорбции в порах пористых тел, отличающаяся от известного ранее подхода использованием трехмерного пространства и возможностью импорта сгенерированных структур аэрогелей.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

**Разработан и внедрен** компьютерный программный комплекс по изучению аэрогелей, реализующий визуализацию в трехмерном пространстве сгенерированных структур аэрогелей, а также их использование для моделирования различных процессов (адсорбции, диффузии), который был использован во время двух Летних Международных Летних Школах «Аэрогели: от лаборатории к производству», и используется на кафедре химического и фармацевтического инжиниринга ФГБОУ ВО «РХТУ им. Д. И. Менделеева» при обучении студентов по специальности 28.03.02 «Наноинженерия».

**Определены** перспективы практического использования разработанных клеточно-автоматных алгоритмов для создания цифровых двойников аэрогелей, описывающих структуру и свойства пористых материалов с высокой степенью точности.

**Создана** система практических рекомендаций по использованию клеточно-автоматных моделей для описания внутренних структур аэрогелей различной природы

**Представлены** рекомендации по использованию разработанных и созданию новых алгоритмов и для генерации структур аэрогелей различной природы, а также рекомендации по использованию разработанных методов и алгоритмов на обучающем этапе системы искусственного интеллекта для создания новых материалов с заданными характеристиками.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

**Для экспериментальных работ** результаты получены на сертифицированном оборудовании, показано, что средняя относительная ошибка для площади удельной поверхности и среднего диаметра пор при использовании разработанных алгоритмов не превышает 17%.

**Теория** построена на известных проверенных данных и фактах из предметных областей системного анализа, математического моделирования, математической статистики, а также полученной экспертной информации, и

согласуется с опубликованными экспериментальными других авторов по теме исследования.

**Идея базируется** на практике и обобщении передового опыта зарубежных и отечественных исследований в области системного анализа и клеточно-автоматных методов моделирования.

**Использовано** сравнение авторских результатов и информации, полученной ранее по рассматриваемой тематике.

**Установлено** качественное и количественное совпадение авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках по данной тематике.

**Использованы** современные методики сбора, анализа и обработки исходной информации по получению аэрогелей различной природы, а также современные подходы для разработки компьютерного программного комплекса.

**Личный вклад соискателя состоит в** непосредственном участии на всех этапах выполнения научно-исследовательской работы, анализе информационных источников по теме диссертации, непосредственной разработке предлагаемых методов и алгоритмов, анализе и обобщении полученных данных, подготовке и написанию публикаций по результатам исследований, представлении и обсуждении полученных результатов на международных конференциях и семинарах. Диссертация и автореферат написаны лично автором.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания:

1. Учитывая большой объём экспериментальных данных, автору следовало указать, каким образом проводилась статистическая обработка результатов экспериментальных исследований, позволившая получить исходные данные для генерации структур аэрогелей с использованием разработанных алгоритмов.

2. Во многих разработанных алгоритмах используются случайные величины для размещения исходных элементов или для вычисления траектории движения элементов, при этом в работе не приведён способ формирования случайной величины, что является важным для подтверждения отсутствия псевдослучайных алгоритмов, которые бы оказали значительное влияние на генерацию структур.

3. В работе имеется явный недостаток описания математических основ разработанных алгоритмов. В частности, не приводится способ вычисления расстояния между сгенерированной глобулой и ближайшей к ней соседней глобулой в методе перекрывающихся сфер, способ вычисления максимально

возможного количества глобул при заданной пористости в методе DLCA и т.д. Такое описание необходимо для дополнительного подтверждения обоснованности и адекватности разработанных алгоритмов.

4. Несмотря на то, что генерация структур имеет ценность сама по себе, работа стала бы ещё актуальнее, если бы автор рассмотрел способы моделирования физических процессов формирования структур гелей, протекающих до процесса сверхкритической сушки, в ходе которой структура аэрогелей может претерпевать изменения.

5. В работе отмечается, что достигнутые результаты могут быть использованы в дальнейшем для обучения системы искусственного интеллекта, которая позволит наладить производство материалов с заданными параметрами. Автору стоило привести хотя бы примерный план или направления разработки такой системы, указав, какие методы, техники и алгоритмы могут применяться, а также как полученные данные могут использоваться для решения этой задачи.

6. 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?

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

Соискатель Митрофанов И.В. ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и привел собственную аргументацию.

По тематике, методам исследования, предложенным новым научным положениям диссертационная работа соответствует следующим пунктам паспорта специальности 2.3.1 – «Системный анализ, управление и обработка информации, статистика»:

п.3. Разработка критериев и моделей описания и оценки эффективности решения задач системного анализа, оптимизации, управления, принятия решений, обработки информации и искусственного интеллекта.

п.4. Разработка методов и алгоритмов решения задач системного анализа, оптимизации, управления, принятия решений, обработки информации и искусственного интеллекта.

п.5. Разработка специального математического и алгоритмического обеспечения систем анализа, оптимизации, управления, принятия решений, обработки информации и искусственного интеллекта.

п.12. Визуализация, трансформация и анализ информации на основе компьютерных методов обработки информации.

На заседании 21 декабря 2022 г. диссертационный совет принял решение присудить Митрофанову Игорю Владимировичу ученую степень кандидата технических наук за решение научной задачи системного анализа аэрогелей и создание алгоритмов генерации и анализа их структур и цифровых двойников, имеющее существенное значение для развития страны.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 10 докторов наук по специальности 2.3.1 – «Системный анализ, управление и обработка информации, статистика», участвовавших в заседании, из 18 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за 18, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель диссертационного совета  
по защите диссертаций  
на соискание ученой степени  
кандидата наук, на соискание  
ученой степени доктора наук 24.2.287.01,  
д.т.н., профессор



Битюков  
Виталий Ксенофонтович

Ученый секретарь совета  
по защите диссертаций  
на соискание ученой степени  
кандидата наук, на соискание  
ученой степени доктора наук 24.2.287.01,  
к.т.н., доцент

Иванов  
Андрей Валентинович

Дата оформления заключения «21» декабря 2022 года.