

На правах рукописи

**Смольков Михаил Игоревич**

**Методы вычислительной геометрии и топологии в  
задачах моделирования новых материалов и  
прогнозирования их свойств**

Специальность 1.2.2 —  
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы  
программ»

Автореферат  
диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Самара — 2025

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики».

Научный руководитель: доктор физ.-мат. наук, профессор  
**Крутов Александр Фёдорович**

Официальные оппоненты: **Смирнов Юрий Геннадьевич**,  
доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Пензенский государственный университет», зав. кафедрой «Математика и суперкомпьютерное моделирование».

**Полянский Иван Сергеевич**,  
доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное казенное военное образовательное учреждение высшего образования Академии Федеральной службы охраны Российской Федерации, заместитель начальника факультета.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технический университет им. А. Н. Туполева-КАИ»

Защита состоится 26 июня 2025 г. в 15:00 часов на заседании диссертационного совета Д 24.2.392.08 при Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» по адресу: 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83.

С диссертацией можно ознакомиться в зональной научной библиотеке СГУ и на сайте СГУ <https://www.sgu.ru/research/dissertation-council/24-2-392-08>.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83, ученому секретарю диссертационного совета Д 24.2.392.08.

Автореферат разослан «\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2025 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
Д 24.2.392.08,  
д-р тех. наук

Вешнева Ирина Владимировна

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы.** Математическое моделирование новых материалов на различных пространственных масштабах и прогнозирование их физических свойств является основным направлением развития современного материаловедения, которое играет ключевую роль для развития прорывных технологий и устройств нового поколения. Выделяют три основных масштаба моделирования: атомный, микро- и макромасштабы. При моделировании материалов на атомных масштабах используются два класса моделей. Один класс составляют физические модели, опирающиеся на модельные потенциалы взаимодействия в атомной и электронных подсистемах, а законы движения предполагаются либо классическими (т.н. молекулярная динамика - МД), либо квантовыми (т.н. теория функционала электронной плотности - ТФП). Большой вклад в развитие методов МД и ТФП внесли такие ученые как W. Kohn, J. Pople, M. Karplus, M. Levitt, R. Car, M. Parrinello, G. Kresse, а также А. В. Сергеев и Н. Н. Боголюбов. Они создали фундаментальные основы подходов, которые сегодня широко используются в вычислительной химии, физике и биологии. На основе таких моделей удается рассчитать макроскопические свойства материалов. Несмотря на достигнутые в последние годы результаты, этот класс моделей сталкивается с большими затратами вычислительных и временных ресурсов, с сильными ограничениями, связанными с условиями применимости таких моделей, а также с неопределенностями в задании потенциалов взаимодействия, в частности, их обменно-корреляционной части.

Другим классом моделей, получившим в последние годы большое развитие, стали подходы, связанные с анализом геометрической и топологической структуры атомных сеток, которые позволяют установить корреляции между тополого-геометрической структурой и макроскопическими свойствами материалов. Например, метод топологического анализа, исследующий атомные, молекулярные или же макроскопические структуры на наличие и расположение полостей, отверстий, пор и других структурных особенностей. Этот класс моделей доказал свою эффективность и продемонстрировал высокое качество предсказаний физических свойств материалов. Это подтверждается многочисленными работами отечественных и зарубежных ученых, посвященных моделированию новых материалов: В. А. Блатов, А. М. Оганов, Е. В. Александров, D. Proserpio, M. O’Keffe, O. M. Yaghi, S.-M. Chen и др. Таким образом, **актуальна** проблема моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств, комбинирующих вычислительную геометрию и топологию.

Особое место в топологическом анализе структуры веществ занимает комплекс программ ToposPro, разработанный сотрудниками Международного научно-исследовательского центра по теоретическому

материаловедению при Самарском государственном техническом университете. ToposPro основан на аппарате ретикулярной химии и теории графов. Структуры и вещества описываются совокупностью некоторых строительных единиц и периодическим графом, который определяет их способ связывания. Методы, реализованные в ToposPro, используются в данной диссертационной работе.

За последние 10 лет большое распространение получили методы машинного обучения, применяемые для анализа больших объемов данных о материалах и их свойствах, что помогает выявить неочевидные закономерности, которые невозможно установить без применения специальных компьютерных методов, помогающих предсказывать поведение тех или иных новых веществ. Наибольшее влияние на развитие методов машинного обучения оказали Y. LeCun, A. Ng, Y. Bengio, D. Hassabis и P. P. Салахудинов.

В настоящее время одним из перспективных направлений материаловедения является создание новых композиционных материалов на основе трех-периодических структур. Отдельно следует сказать о создании трёх-периодических структур на основе трёх-периодических, в том числе минимальных поверхностей (ТПП/ТПМП), общий метод создания которых является классической и до сих пор нерешенной задачей математики. Эти вопросы привлекают внимание множество исследователей по всему миру, среди которых можно вспомнить R. K. Abu Al-Rub, M. Ю. Арсентьев, E. И. Сысоев, M. F. Ashby, J. Pérez, W. Fisher, E. Koch и др.

В диссертационной работе предложен новый подход, объединяющий методы тополого-геометрического анализа, машинного обучения и вычислительной геометрии, который был использован для предсказания степени окисления металлов в координационных соединениях с кислородным, водородным, и т.п. окружением; для генерации новых трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей, полученных на основе топологического представления кристаллических структур; для моделирования новых макроскопических пористых материалов на их основе; выявления связи их механических свойств с топологией.

Все решенные развитыми в диссертации методами задачи являются **актуальными**. Так, степень окисления широко используется при классификации химических веществ, составлении формул соединений и при изучении окислительно-восстановительных реакций в химии. Генерация новых трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей, представляет собой классическую математическую задачу, решение которой в общем виде до сих пор не получено, поэтому любое продвижение в этой области является чрезвычайно важным. Построенные на основе трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей пористые структуры получили в последнее время широкое распространение при решении различных инженерных задач. Например, пористые структуры

могут быть основой для получения новых композитных материалов с заданными свойствами, а также метаматериалов.

**Целью** данной диссертационной работы является разработка нового метода моделирования свойств материалов на различных пространственных масштабах, объединяющего тополого-геометрические модели, методы вычислительной геометрии и машинного обучения, а также применения развитого подхода для предсказания степени окисления металлов, компьютерного моделирования новых пористых материалов на основе трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей, полученных из природных кристаллов, создание комплекса программ для описание их физических свойств на основе развитых методов.

**Объектами исследования** являются координационные *Me*-содержащие соединения в *O*-, *H*-, *B*-, *C*-, *N*-, *F*-, *Me*-окружениях; атомные сетки природных кристаллов - цеолитов; трёх-периодические поверхности; новые макроскопические пористые материалы на их основе. Для достижения поставленной цели были решены следующие **задачи**:

1. Выбрать и реализовать в виде веб-сервиса метод машинного обучения для предсказания степени окисления металлов в *O*-, *H*-, *B*-, *C*-, *N*-, *F*-, *Me*-окружениях на основе топологического анализа данных из кристаллографических баз ICSD и CSD.
2. Построить трёх-периодические поверхности (ТПП) посредством реализованных в программном комплексе ToposPro процедур и провести тополого-геометрический анализ полученных поверхностей, образованных сшитыми полиэдрами.
3. Разработать и реализовать в виде программного комплекса метод построения гладких ТПП, полученных из атомных сеток кристаллов, включающий процедуру сглаживания с минимизацией средней кривизны поверхности.
4. Разработать и реализовать в виде программного комплекса метод построения макроскопических пористых структур на основе ТПП, допускающий их использование в аддитивном производстве и стандартных комплексах программ по расчету физических свойств материалов и конструкций.
5. Рассчитать и провести сравнительный анализ механических характеристик полученных в диссертации макроскопических пористых структур, имеющих различные топологические признаки.
6. Провести экспериментальную верификацию вычислительных моделей для расчетов механических характеристик пористых структур.

#### **Научная новизна:**

1. На основе модифицированной математической модели атомной сетки с помощью полиэдров Вороного-Дирихле, предложен оригинальный комбинированный подход и соответствующий веб-сервис для расчета

степени окисления металлов, объединяющий методы машинного обучения и тополого-геометрического анализа структуры кристаллов.

2. Впервые сформулирован и реализован в виде программного комплекса оригинальный алгоритм генерации гладких трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей (ТПП/ТПМП), основанный на моделировании пустот и каналов в атомных сетках кристаллов, т.е. на их топологическом представлении.
3. Впервые предложен и реализован в виде программного комплекса и базы данных в сети Интернет метод построения макроскопических пористых структур на основе ТПП.
4. Открыто четыре ранее неизвестных ТПМП на основе сформулированных необходимых условий минимальности.
5. Впервые проведено сравнение механических характеристик пористых структур на основе ТПП/ТПМП с различными топологическими признаками.

**Практическая значимость.** Разработанный автором метод прогнозирования степени окисления металлов позволяет с высокой точностью предсказать значение данного химического свойства без затратных экспериментальных и расчетно-теоретических исследований. Созданный в диссертации метод позволяет сгенерировать практически бесконечное число трёх-периодических поверхностей, в том числе минимальных, что является существенным вкладом в развитие математической теории трёх-периодических поверхностей. Предложенный в диссертации метод моделирования пористых структур на основе трёх-периодических поверхностей позволяет существенно расширить список используемых в современных инженерных решениях материалов. Созданные автором программный комплекс, веб-сервис и база данных активно используются исследователями из различных стран мира.

### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Сформулированный и реализованный в виде веб-сервиса подход, основанный на проведенном тополого-геометрическом анализе структуры кристаллов и методе машинного обучения, позволяет предсказывать степени окисления металлов в различных окружениях.
2. Созданный и реализованный в виде программного комплекса алгоритм генерации трёх-периодических, в том числе минимальных, поверхностей (ТПП/ТПМП), основанный на топологическом представлении атомных сеток природных кристаллов, дает возможность получения неограниченного числа ТПП и позволил найти четыре ранее неизвестные ТПМП.
3. Созданный и реализованный в виде программного комплекса метод построения макроскопических пористых структур на основе ТПП позволяет использовать их в аддитивном производстве и стандартных комплексах программ для расчета физических свойств материалов.

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

**Достоверность** полученных результатов обеспечивается использованием апробированных математических и вычислительных методов и компьютерных программ, таких как ToposPro, ANSYS, Surface Evolver. Результаты диссертации в частных случаях совпадают с результатами, полученными другими авторами. Достоверность подтверждается также интенсивным использованием разработанных в диссертации методов мировым научным сообществом.

**Апробация работы.** Основные результаты работы докладывались на следующих российских и международных конференциях: Всероссийская конференция с международным участием «X Национальная кристаллохимическая конференция» (Черноголовка, 2021), XV Всероссийская конференция молодых ученых с международным участием «Современные проблемы теоретической и экспериментальной химии» (Саратов, 2021), XLIX Самарская областная студенческая научная конференция (Самара, 2023), IV Международная научная конференция «Современные проблемы прикладной математики, информатики и механики» (Нальчик, 2023), XXXI Российская научно-техническая конференция «Актуальные проблемы информатики, радиотехники и связи» (Самара, 2024), XX Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов «Физико-химия и технология неорганических материалов» (Москва, 2023). Автор также принимал участие во всероссийском конкурсе «XII Молодежная премия в области науки и инноваций НИТУ "МИСИС"» (Санкт-Петербург, 2021) с проектом Porous 3D, в выставках научных достижений технопарка ПГУТИ (Самара, 2022-2024), в программе «Навигатор Инноватора» для грантополучателей программы «УМНИК» (Тольятти, 2021).

Часть диссертационной работы выполнена в рамках проектов Российского научного фонда «Разработка новых пористых материалов на основе трёх-периодических поверхностей, теоретическое и экспериментальное исследование их термомеханических свойств» (проект № 22-23-00300) и «Методы топологического дизайна координационных полимеров» (проект №18-73-10116). Автор является также грантополучателем ФОНД-М по программе УМНИК с проектом «Разработка программного комплекса для моделирования, тестирования и печати пористых структур» (№792ГУЦЭС8-D3/63788).

**Личный вклад.** Результаты настоящей диссертационной работы получены и интерпретированы самим соискателем. Автором предложен метод моделирования свойств материалов, объединяющий топологические подходы и машинное обучение. Автором разработаны оригинальные

алгоритмы создания трёх-периодических поверхностей на основе топологического моделирования атомных сеток кристаллов, методы трансляции поверхностной ячейки трехмерной периодической поверхности, алгоритм сглаживания, включающий оптимизацию средней кривизны; метод построения моделей пористых материалов на основе трёх-периодических поверхностей, допускающий использование в 3D печати и в стандартных комплексах программ по расчету физических свойств материалов. Автором создана база моделей макроскопических пористых материалов на основе трёх-периодических поверхностей; открыто четыре новых минимальных поверхности; создана программная часть веб-сервиса для прогнозирования степени окисления металлов. Автор также осуществлял планирование, подготовку, обсуждение и интерпретацию результатов натуральных экспериментов; докладывал результаты диссертации на конференциях и готовил тексты статей к публикациям в научных журналах.

**Публикации.** Основные результаты по теме диссертации изложены в 13 печатных изданиях, 1 — в издании, рекомендованном ВАК РФ, 4 являются реферируемыми в базе данных WoS и Scopus, 5 — в тезисах докладов, 3 в прочих изданиях. Получено 3 свидетельства о регистрации программ для ЭВМ.

## Содержание работы

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приводится краткий обзор современного состояния изучаемой проблемы, формулируется цель, ставятся задачи работы, излагается научная новизна и практическая значимость представляемой работы.

Первая глава посвящена обзору современных методов моделирования материалов и их свойств. Проведенный автором литературный обзор выявил список наиболее популярных кристаллохимических методов моделирования материалов: метод топологического отбора, анализ симметрии атомных сеток, автоматическое полуэмпирическое моделирование, методы молекулярной динамики, метод парных потенциалов, квантово-химическое моделирование и метод теории функционала электронной плотности.

Особое внимание уделяется обзору используемого в диссертации программного комплекса ToposPro, основанного на теории ретикулярной химии и теории графов, т.о. вещества, исследуемые в данной программе, описываются совокупностью некоторых строительных единиц и периодическим графом, который определяет способ их связывания. В частном случае, если узлы и ребра периодического графа соответствуют атомам и химическим связям, данный граф представляет собой атомную сетку.

В главе отдельно описываются быстро развивающиеся методы машинного обучения, базисные принципы которых используются в диссертационной работе.

**Вторая глава** посвящена разработке метода для предсказания степени окисления металлов, комбинирующего методы вычислительной геометрии и машинного обучения.

Для моделирования атомов металлов и их окружения была использована модифицированная модель Вороного-Дирихле. Данная модель характеризуется параметрами представленными в таблице 1.

Таблица 1

Список дескрипторов  $D$ , используемых в прогнозировании состояния окисления атомов металлов (см. формулы (1) – (4))

$N$	$D$	Описание
0	$OxSt$	степень окисления
1	$N_{At}$	порядковый номер атома металла в периодической таблице
2	$N_{Group}$	номер группы атома металла в периодической таблице
3	$Mult$	кратность кристаллографических позиций
4	$CN$	координационное число
5	$NZ$	координационное число, взвешенное по телесными углами грани полиэдра Вороного
6	$R_{sd}$	радиус сферы с объемом полиэдра Вороного ( $\text{\AA}$ )
7	$V_{VP}$	объем полиэдра Вороного ( $\text{\AA}^3$ )
8	$S_{VP}$	площадь поверхности полиэдра Вороного ( $\text{\AA}^2$ )
9	$G_3$	второй момент инерции полиэдра Вороного
10	$V_{CP}$	объем координационного полиэдра ( $\text{\AA}^3$ )
11	$\Delta_{CM}$	смещение атома из геометрического центра его полиэдра Вороного ( $\text{\AA}$ )
12	$\Sigma\Omega(X)$	нормированная сумма телесных углов граней полиэдра Вороного, соответствующих контактам атома металла с атомами окружения, расположенными в диапазоне от 0 до 1

Главные отличия от существующих моделей атома заключается, во-первых, в расчете второго момента инерции полиэдра Вороного, характеризующий степень сферичности полиэдра:

$$G_3 = \rho \int_V r^2 dV \quad (1)$$

где  $\rho$  – средняя плотность полиэдра,  $r$  – расстояние до геометрического центра полиэдра,  $V$  – объем полиэдра.

Во-вторых, в использовании нормированной сумма телесных углов граней полиэдра Вороного, соответствующих контактам атома металла с атомами его окружения, расположенными в диапазоне от 0 до 1:

$$\Sigma\Omega(X) = \frac{\sum_i^M \Omega_i^X}{\sum_j^N \Omega_j} \quad (2)$$

где  $\Omega_i^X$  – телесный угол  $i$ -ой грани многогранника Вороного, соответствующий валентному контакту с атомом  $X$ ,  $\Omega_j$  – телесный угол  $i$ -ой грани многогранника Вороного, соответствующий валентному контакту со всеми атомами окружения,  $M = \dim\{\Omega_i^X\}$ ,  $N = \dim\{\Omega_i\}$ , где  $\{\Omega_i^X\}$  и  $\{\Omega_j\}$  – наборы телесных углов граней соответствующих валентному контакту с атомом  $X$  и со всеми атомами окружения, соответственно.

Оставшиеся параметры модели представляют собой либо табличные данные, либо ранее использованные в задаче предсказания степени окисления признаки. Например, связность атомов в кристаллических структурах была определена реализованными в TorosPro методами. Рассмотрены только валентные контакты, которые предопределяют дескрипторы  $CN$  и  $V_{CP}$ . Взвешенное координационное число  $NZ$  рассчитывается следующим образом:

$$NZ = \frac{\sum_{i=1}^{CN} \Omega_i}{\max(\Omega)}. \quad (3)$$

$R_{sd}$ ,  $V_{VP}$  – взаимосвязанные дескрипторы:

$$R_{sd} = \frac{3V_{VP}^{1/3}}{4\pi}. \quad (4)$$

Для решения задачи расчета степени окисления, а также для изучения возможности комбинации методов тополого-геометрического анализа и машинного обучения, была построена предсказательная модель, которая определяет степени окисления атомов металлов на основе данных об известных кристаллических структурах [2; 3; 9–11]. Задача решалась в несколько шагов.

Во-первых, были выбраны и рассчитаны геометрические дескрипторы для создания обучающих и тестирующих наборов данных, содержащих 6659 структур из CSD (Кембриджская структурная база данных) и 987 из ICSD (База данных неорганических кристаллических структур), соответственно. Не считая степени окисления, нами были выбраны 12 дескрипторов, характеризующих атом и его окружение (табл. 1). Все расчеты проводились с помощью программного комплекса TorosPro.

Во-вторых, необходимо выбрать классификационную модель и оценить метрики качества выбранной модели. В качестве оценивающих метрик были выбраны: достоверность (Accuracy (5)), точность (Precision (6)), полнота (Recall (7)) и F1-мера (F1-score (8)):

$$\text{Accuracy} = A(y, \hat{y}) = \frac{1}{n} \sum_{i=0}^{n-1} \mathbf{1}(\hat{y}_i = y_i) = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN}, \quad (5)$$

$$\text{Precision} = P(y, \hat{y}) = \frac{TP}{TP + FP}, \quad (6)$$

$$\text{Recall} = R(y, \hat{y}) = \frac{TP}{TP + FN}, \quad (7)$$

$$F1\text{-score} = F1(y, \hat{y}) = \frac{2(P(y, \hat{y})R(y, \hat{y}))}{(P(y, \hat{y}) + R(y, \hat{y}))}, \quad (8)$$

где  $\hat{y}$  – прогнозируемое значение класса  $i$ -го вектора дескрипторов из набора данных;  $y$  – истинное значение класса для  $i$ -го вектора дескрипторов из набора данных;  $n$  – количество образцов;  $TP$  – количество истинно положительных предсказаний;  $TN$  – количество истинно отрицательных предсказаний;  $FP$  – количество ложно положительных предсказаний;  $FN$  – количество ложно отрицательных предсказаний;  $\mathbf{1}(\hat{y}_i = y_i)$  – индикаторная функция;  $R(y, \hat{y})$  – способность классификатора находить все положительные образцы;  $F1(y, \hat{y})$  среднее гармоническое значение точности и полноты, т.е. она достигает своего наилучшего значения при 1 и наихудшего значения при 0.

В качестве модели машинного обучения были рассмотрены 3 варианта т.н. классификаторов: метод опорных векторов (Support Vector Machine, SVM), метод  $k$ -ближайших соседей (K-Nearest Neighbors, KNN) и выбранный нами в качестве основного - метод случайного леса (Random Forest, RF).

Это совокупность классификаторов  $h(x, \Theta_k)$  древовидных графов, в которых результат предсказания каждого отдельного дерева (классификатора) зависит от случайного вектора  $\Theta_k$ , который выбирается независимо и имеет одинаковое распределение для всех классификаторов совокупности.

$$RF = \{h(x, \Theta_k), k = 1, \dots\}^{\frac{1}{p}}. \quad (9)$$

Метод случайного леса демонстрирует более высокий уровень устойчивости к шуму по сравнению с другими моделями. Результаты расчета оценивающих метрик (5) – (8) для RF со стандартными гиперпараметрами, заложенными в известном пакете Scikit-Learn, на полном наборе признаков тренировочного набора данных №1 представлен в табл. 2. 10% данных из тренировочной выборки №1 были отобраны в качестве тестирующей выборки.

Таблица 2  
Значения оценочных метрик качества классификатора RF со стандартными гиперпараметрами, заложенными в пакете Scikit-Learn, на полном наборе признаков тренировочного набора данных №1

	$A(y, \hat{y})$	$P(y, \hat{y})$	$R(y, \hat{y})$	$F1(y, \hat{y})$
RF	0.977(3)	0.917(44)	0.893(39)	0.881(44)

Заметим, что полученные в таблице 2 значения достаточно близки к единице, что свидетельствует о высокой решающей силе используемого метода. Для улучшения предсказательной способности данной модели был проведен корреляционный анализ дескрипторов, а также расчет оптимальных гиперпараметров классификатора RF. Анализ 4095 комбинаций из 12 дескрипторов и 10-кратная перекрестная проверка функцией GridSearchCV библиотеки Scikit-Learn позволили получить улучшенные оценки метрик качества.

Оценки метрик качества представлены в табл. 3. Матрицы спутанности, показывающие точность предсказания каждого класса тестового набора №1 для тренировочных выборок №1 и №2, представлены на рис. 1.

Таблица 3

Значения оценочных метрик качества классификатора RF с оптимизированными гиперпараметрами для разных наборов данных

Набор данных	$A(y, \hat{y})$	$P(y, \hat{y})$	$R(y, \hat{y})$	$F1(y, \hat{y})$
Тренировочный набор №1	0.991(3)	0.972(27)	0.949(30)	0.956(28)
Тренировочный набор №2	0.980(2)	0.962(11)	0.962(9)	0.963(8)
Тестирующий набор №1 (обучен на тренировочном наборе №1)	0.987	0.984	0.964	0.973
Тестирующий набор №1 (обучен на тренировочном наборе №2)	0.959	0.918	0.891	0.903
Тестирующий набор №2 (обучен на тренировочном наборе №1)	0.990	0.985	0.991	0.988
Тестирующий набор №2 (обучен на тренировочном наборе №2)	0.981	0.949	0.952	0.950

Результаты, представленные в табл. 3, показывают существенный прирост качества классификации по сравнению с табл. 2.

Разработанный в диссертации алгоритм OxidationStatePredictor [6] является основой для созданного предсказательного веб-сервиса CrystalPredictor (<https://oxidationstate.topcryst.com/>), предназначенного для прогнозирования степени окисления металлов. Работа созданного в диссертации веб-сервиса продемонстрирована на примере предсказания степени окисления двух соединений:  $Mn_2F_5$  и  $Mn_2O_3$  (рис. 2). За 2023 год сервисом была предсказана степень окисления 648 оригинальных структур, до настоящего времени имеет место не менее 20 уникальных запросов в месяц из различных стран Европы, Северной Америки и Азии.

Результаты предсказания степени окисления  $Mn_2F_5$  и  $Mn_2O_3$ , приведенные на рис. 2, полностью совпадают с результатами экспериментального анализа приведенного в литературе.

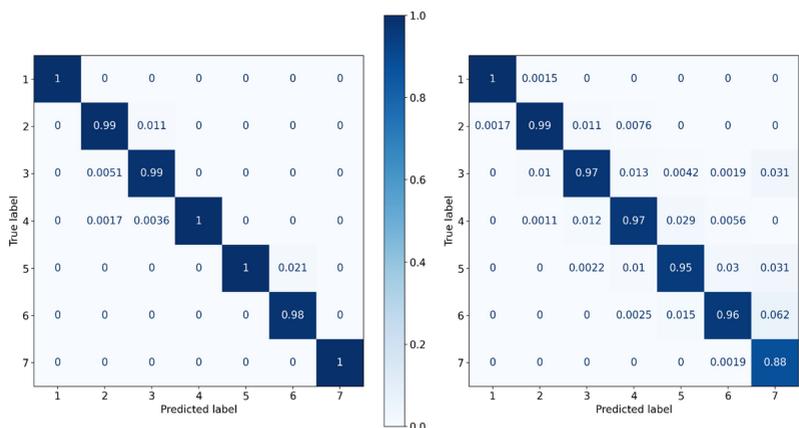


Рис. 1 — Матрица спутанности для классификаторов, обученных на тренировочном наборе №1 (слева) и №2 (справа)

<sup>25</sup>Mn Atom Mn (1)  
Manganese Coordinates (0.00000, 0.00000, 0.00000)

$\Sigma_{\text{O}} = 0.000 < 0.98 \rightarrow$  using «Non Oxygen» classification model.

Oxidation State	Prediction
0	6.0%
1	5.6%
2	17.6%
3	44.4%
4	26.4%

<sup>25</sup>Mn Atom Mn (2)  
Manganese Coordinates (0.00000, 0.46580, 0.25000)

$\Sigma_{\text{O}} = 0.000 < 0.98 \rightarrow$  using «Non Oxygen» classification model.

Oxidation State	Prediction
0	2.8%
1	2.3%
2	56.9%
3	35.2%
4	2.8%

а)  $Mn_2F_5$

<sup>25</sup>Mn Atom Mn (1)  
Manganese Coordinates (0.66667, 0.33333, 0.67408)

$\Sigma_{\text{O}} = 0.997 > 0.98 \rightarrow$  using «Oxygen» classification model.

Oxidation State	Prediction
3	13.7%
4	86.3%

<sup>25</sup>Mn Atom Mn (2)  
Manganese Coordinates (0.33333, 0.66667, 0.52976)

$\Sigma_{\text{O}} = 0.976 < 0.98 \rightarrow$  using «Non Oxygen» classification model.

Oxidation State	Prediction
2	98.6%
3	1.4%

б)  $Mn_2O_3$

Рис. 2 — Результаты предсказания степени окисления металлов с помощью сервиса CrystalPredictor для структур а)  $Mn_2F_5$  и б)  $Mn_2O_3$ .

**Третья глава** посвящена методам вычислительной геометрии и топологии в проблеме построения трёх-периодических поверхностей. Трёх-периодическая поверхность разделяет пространство на два непесекающихся канала – систему пор. Основная идея предложенного в диссертации метода генерации трёх-периодических поверхностей заключается в использовании природных трёх-периодических структур – кристаллов [4]. Атомная структура некоторых кристаллов имеет строение, схожее с лабиринтовыми сетками трёх-периодических поверхностей. В диссертации предложена математическая модель атомной сетки, позволяющая выделить из нее эту систему пор. Атомная сетка кристалла декорирует трёх-периодическую поверхность и, следовательно, нам нужно создать такой объект, ребра которого будут связями между атомами структуры. Такой объект известен как тайлинг. Тайлинг – периодическое разбиение пространства на многогранники (тайлы), которые полностью заполняют всё пространство. В качестве тайлов могут выступать как выпуклые, так и невыпуклые многогранники, содержащие двухкоординированные вершины.

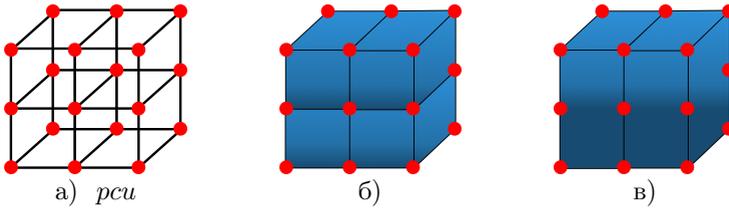


Рис. 3 – Пример разбиения некоторой атомной сетки, представленной в виде примитивной кубической сетки (рси) (а) на несколько ее возможных тайлов (б, в).

Тайлинг имеет следующее символическое именование:

$$[M^m, N^n, \dots],$$

где  $m, n$  – число граней, являющихся  $M$ - и  $N$ -членными кольцами. Следует учитывать, что значения  $M, N$  следуют в порядке возрастания. В частности, для представленных на рис. 3б и 3в тайлов состоящих из 4-членных колец обозначение имеет вид  $[4^6]$ .

Симметрия тайлинга описывается пространственной группой атомной сетки, на которой построен тайлинг, и транзитивностью:

$$T = [v e f t],$$

где  $v, e, f, t$  – число неэквивалентных вершин, ребер, граней и тайлов в тайлинге, соответственно.

Очевидно, что по мере уменьшения транзитивности симметрия возрастает. Например, тайлинг (рис. 3б), имеет транзитивность  $[1111]$ , что соответствует пространственной группе симметрии наивысшего порядка - 48 для кристаллографической точечной группы симметрии.

Таким образом, в диссертации используется модифицированная математическая модель атомной структуры, основанная на тайлингах. В отличие от существующих аналогов, данная модель использует, т.н. натуральный тайлинг.

Для реализации разбиения пространства посредством натурального тайлинга были предложены следующие правила:

- симметрия тайлинга должна совпадать с симметрией сетки;
- грани тайлов должны быть сильными кольцами (кольцами, которые не содержат колец имеющих меньшее количество вершин);
- тайл не должен содержать сильных колец, которые не являются его гранями, в случае, если они не пересекаются с другими такими же кольцами;
- когда вышеописанные правила приводят к множественным вариантам разбиения из-за пересекающейся пары сильных колец, выбирается вариант с меньшим по размеру кольцом. В случае, если пересекающиеся кольца имеют эквивалентный размер, то отбрасываются оба варианта;
- предыдущее правило может быть переопределено для тайлов, содержащих перемычки, все вершины которых имеют отрицательную кривизну.

В натуральном тайлинге тайлы минимальны, т. е. их нельзя представить в виде набора более мелких тайлов. Натуральный тайлинг играет роль минимального блока, из которого можно собрать более крупные структуры. На основе алгоритма построения натурального тайлинга было выведено правило извлечения ТПП, основанное на трех условиях, обеспечивающих отсутствие самопересечений:

1. Условие декорирования: все вершины и ребра натурального тайлинга принадлежат ТПП;
2. Условие граней: ребро сетки разделяется ровно двумя тайлами из натурального тайлинга;
3. Условие вершин: все ребра, сходящиеся в одной вершине, разделяются разными парами тайлов натурального тайлинга.

В работе [4] было получено 98 ТПП, основанных на цеолитах. Были рассчитаны их топологические дескрипторы и было обнаружено 55 различных топологических классов поверхностей. 12 поверхностей оказались изоморфными уже известным ТПП, однако 4 из 98 являются абсолютно новыми ТПП. 39 поверхностей не являются минимальными, но также относятся к ТПП. Пример рассчитанных топологических дескрипторов для новых ТПП представлен в табл. 4. Отдельный интерес представляет проблема выделения из построенных поверхностей минимальных.

Для определения является ли сгенерированная поверхность изоморфной к существующим ТПМП использовались следующие критерии:

1. Сгенерированная поверхность должна обладать парой дуальных лабиринтовых сеток (ПДЛС).
2. Если ПДЛС самодуальна, тогда ТПП изоморфна некоторой сбалансированной ТПМП.
3. Если ПДЛС взаимодуальна, тогда ТПП изоморфна некоторой несбалансированной ТПМП.
4. Род ПДЛС совпадает с родом поверхности ТПП.

Поверхности, представленные в табл. 4, соответствуют представленным критериям, но не имеют аналога среди всех существующих ТПМП, следовательно, они являются новыми трёх-периодическими минимальными поверхностями.

Таблица 4

Топологические дескрипторы четырех новых ТПМП

Цеолит	$g$ <sup>1</sup>	Кольца	Простр. группа сетки	Топология сетки Хопфа	Топология лабиринтов <sup>2</sup>	Баланс
FRA	11	4a,4b,4c,4d, 4e,6a,6d,6f, 6h,6j,6l	P-3m1	(6 <sup>6</sup> -c)	3,4,4,4,5T62; 3,4,4,4,5T62	B
IFY	7	4a,4d,6a,8c	P4/mbm	(5,6,7, 8 <sup>3</sup> , 10 <sup>2</sup> ,12,16-c)	mot; fsc	NB
LTL	5	4a,4b,4c,8d	P6/mmm	(4,6 <sup>3</sup> ,12,24-c)	tfz-d; tfz	NB
TSC	11	4a,4c,4d,6b, 6c,8a	Fm-3m	(4 <sup>2</sup> ,6,12,24, 28-c)	tbo; wzz	NB

Замечание:

<sup>1</sup> Род поверхности (genus) вычисляется по формуле:

$$g = e - v + 1,$$

где  $v, e$  – число вершин и граней в трансляционно независимой части атомной сетки.

<sup>2</sup> Лабиринт – пара дуальных лабиринтовых сеток (ПДЛС), описывающих каналы ТПП.

В работах [4; 1; 5; 12; 14; 15] представлен программный комплекс Porous 3D (<https://p3d.topocryst.com/>), разработанный в диссертации [7; 8]. Для получения трёх-периодических поверхностей и моделирования пористых материалов Porous 3D преобразует извлеченные из ToposPro каркасы, сохраненные в формате .t3g, в формат .stl – широко используемый формат для хранения трехмерных моделей объектов. Этот формат является наиболее подходящим для печати этих каркасов на 3D-принтерах. С помощью методов 3D печати были изготовлены образцы нескольких ТПП.

В четвертой главе представлена математическая модель пористого материала, основанная на каркасах трёх-периодических поверхностей, извлеченных из цеолитов. Каркас ТПП, полученный с помощью ToposPro, используя разработанные алгоритмы программного обеспечения Porous 3D, преобразовывается в цифровой двойник пористой структуры. Благодаря разработанным в диссертации методам, полученные таким образом пористые материалы можно исследовать в различных комплексах для расчета механических свойств, например ANSYS, или распечатать на 3D принтере. Далее изложены алгоритмы построения пористых структур на основе трёх-периодических поверхностей и описание разработанного программного комплекса для создания пористых материалов на основе трёх-периодических поверхностей.

Программный комплекс включает в себя следующие разработанные в диссертации алгоритмы:

1. Алгоритм триангуляции. Каркас, построенный с помощью ToposPro, представляет собой набор граней (колец) разного типа (рис. 4).

```

1 MER: 3D surface formed by rings: 4c, 8a, 8c
2 14.09200 (a) 14.09200 (b) 9.95400 (c)
3 90.00 (α) 90.00 (β) 120.00 (γ)
4 RING 4 c
5 0.61060 0.76710 0.65500
6 0.76710 0.61060 0.65500
7 0.76710 0.61060 0.34500
8 0.61060 0.76710 0.34500
9 ...

```

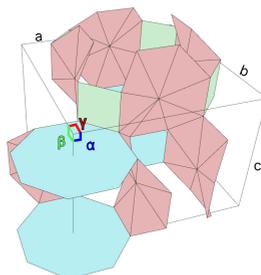


Рис. 4 — Пример содержания файла .t3g для поверхности, построенной на цеолите MER. Строка 1 содержит название извлеченного каркаса и все уникальные кольца атомов. Строка 2 и 3 - параметры атомной ячейки. Строка 4 содержит ключевое слово RING и тип кольца. Строки с 5 по 8-ю - координаты атомов, составляющих кольцо. Оставшиеся строки аналогичны строкам с 4 по 8-ю для всех оставшихся колец.

2. Алгоритм трансляции элементарной ячейки поверхности [4; 14]. После преобразования в формат .stl мы работаем в прямоугольной системе координат, и для построения бесконечной трёх-периодической поверхности необходимо сшить края элементарных ячеек. Для трансляции ТПП была предложена матрица  $T$ , матричные элементы которой зависят от параметров элементарной ячейки ТПП:

$$T = \begin{pmatrix} a & b \cdot \cos(\gamma) & c \\ a \cdot \cos(\beta) & b & c \cdot \cos(\alpha) \\ a \cdot \cos(\alpha) & b \cdot \cos(\beta) \cdot \cos(\gamma) & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_X \\ t_Y \\ t_Z \end{pmatrix}. \quad (10)$$

где  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  – параметры элементарной ячейки (рис. 4).

Тогда, используя данную матрицу, мы можем транслировать  $S$  с помощью следующих выражений:

$$t_X : \sum_0^n S(p_i) + nt_X; \quad t_Y : \sum_0^n S(p_i) + nt_Y; \quad t_Z : \sum_0^n S(p_i) + nt_Z, \quad (11)$$

где  $n$  – заданное пользователем количество необходимых ячеек для транслирования.

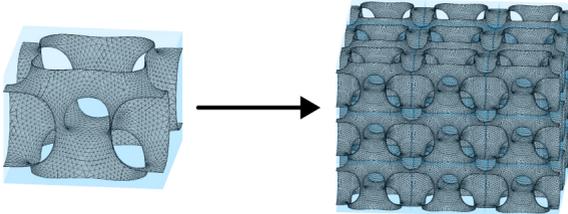


Рис. 5 — Пример трансляции элементарной ячейки поверхности, основанной на цеолите MER. Голубой параллелепипед - атомная ячейка

3. Алгоритм наращивания толщины. Для придания соответствующей модели необходимой толщины написан алгоритм, схематично представленный на рис. 6.

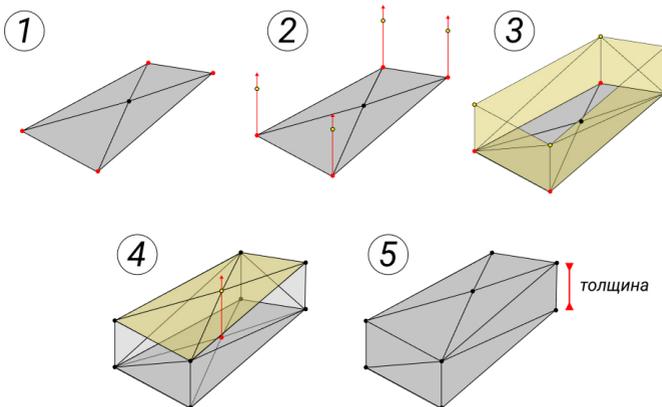


Рис. 6 — Схематичное изображение шагов алгоритма наращивания толщины

4. Алгоритм сглаживания. Разработанный в диссертации алгоритм сочетает в себе методы сглаживания (метод Лапласа и метод оптимизации)

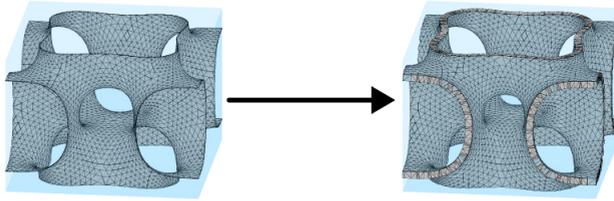


Рис. 7 – Пример добавления толщины поверхности, основанной на цеолите MER. Голубой параллелепипед – атомная ячейка

и минимизирует модуль разности между максимальным и минимальным значениями средней кривизны, вычисленными во всех вершинах сетки поверхности [4; 5; 14], для получения сглаженной поверхности, подобной ТПМП.

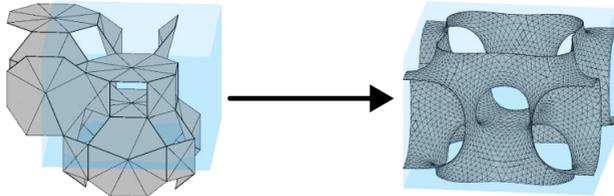


Рис. 8 – Пример сглаживания поверхности, основанной на цеолите MER. Голубой параллелепипед - атомная ячейка

5. Алгоритм расчета средней кривизны. Для расчета средней кривизны в диссертации использовался математический аппарат теории нормальных циклов дифференциальной геометрии. Средняя кривизна  $H$  в вершине оценивается в этом подходе как дискретная мера  $\Phi_B^H$ :

$$\Phi_B^H = \sum_{(e \in E)} \text{length}(e \cap B) \beta(e), \quad (12)$$

где  $B$  – сфера с радиусом равным кратчайшему ребру на поверхности;  $E$  – набор граней  $e$ ;  $\beta(e)$  – угол между нормалью и фасетом;  $\beta(e) > 0$ , если  $e$  выпукла и  $\beta(e) < 0$ , если  $e$  вогнута;  $\text{length}(e \cap B)$  – длина большого круга, пересекающего сферу  $B$  и грань  $e$ .

Описанные алгоритмы реализованы в программном комплексе Rogous 3D. Используя разработанный программный комплекс и ANSYS, автором предложен новый метод исследования новых пористых структур, основанных на полученных трёх-периодических поверхностях [5; 13; 16]. При помощи ANSYS были рассчитаны механические свойства полученных структур.

Для верификации используемых численных моделей методами 3D печати были изготовлены опытные образцы и проведены натурные эксперименты. Результаты экспериментов хорошо согласуются с результатами численных расчетов. В работе рассчитывались следующие механические характеристики образцов:

$$E_{ij}, \quad G_{ij} = \frac{\tau_{ij}}{\theta_{ij}}, \quad \nu_{ij} = \frac{\varepsilon_{\text{trans}(i)}}{\varepsilon_{\text{axial}(j)}}, \quad (13)$$

где  $G_{ij}$  – модуль сдвига, рассчитанный вдоль осей  $x, y, z$ ;  $\tau_{ij}$  – тангенциальное напряжение;  $\theta_{ij}$  – тангенциальная относительная деформация;  $\nu_{ij}$  – коэффициент Пуассона, рассчитанный вдоль осей  $x, y, z$ ;  $\varepsilon_{\text{trans}(i)}, \varepsilon_{\text{axial}(j)}$  – поперечная и продольная относительные деформации;  $E_{ij}$  – модуль сжатия, рассчитанный с помощью ANSYS.

Построенные пористые структуры обладают большим разнообразием и анизотропией механических свойств (табл. 5), а также энергией деформации (рис. 9), что делает эти структуры весьма перспективными в инженерных приложениях.

Таблица 5

Модуль сжатия, модуль сдвига и коэффициент Пуассона (13) для одиночной ячейки, рассчитанные в ANSYS для пористых структур на основе ТПП и ТППП

Образец	$E_{11}$	$E_{22}$	$E_{33}$	$G_{12}$	$G_{13}$	$G_{23}$	$\nu_{12}$	$\nu_{13}$	$\nu_{23}$
AWW	131	133	302	172	172	56.4	0.41	0.4	0.4
CGF	302	263	764	195	195	17.1	0.78	0.64	0.78
FRA	251	321	113	233	336	36.1	0.46	0.52	0.57
HEU	233	199	736	394	394	38.9	0.67	0.19	0.53
IFY	228	226	250	156	156	32.4	0.44	0.48	0.47
LTL	204	271	9.11	6.46	6.46	2.01	0.66	0.68	0.66
NPT	390	390	390	243	243	243	0.4	0.4	0.4
TSC	644	644	644	258	258	258	0.24	0.24	0.24

Замечание: модули сжатия  $E$  и сдвига  $G$  измеряются в МПа.  $E_{11}, E_{22}, E_{33}$  – модули упругого сжатия по осям  $x, y, z$  соответственно. Толщина стенки составляет 0.2 мм.

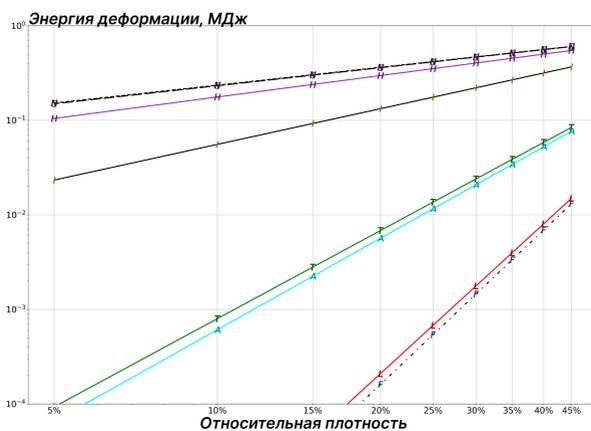
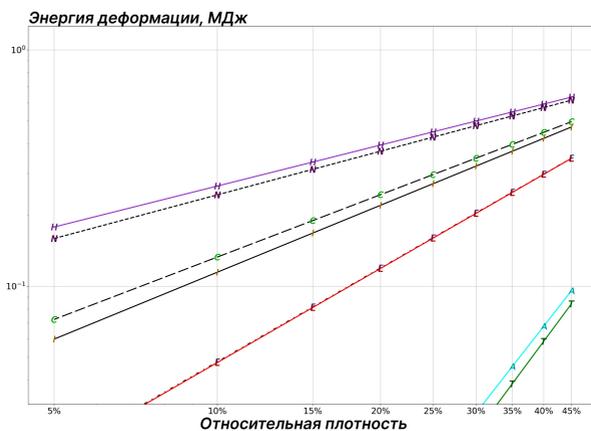
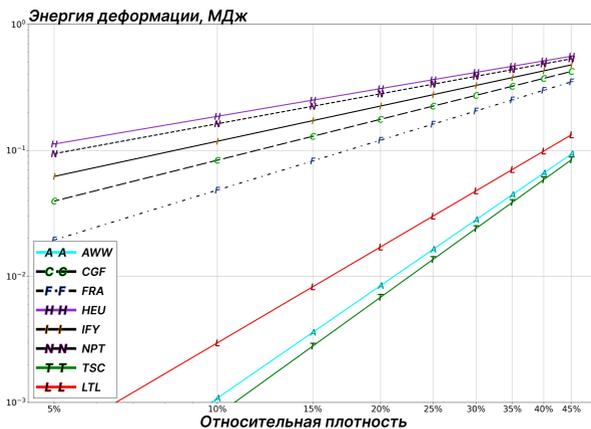


Рис. 9 — Графики энергии упругой деформации пористых образцов при сжатии по осям  $x$  – (а),  $y$  – (б),  $z$  – (в) для пористых структур на основе ТПП/ТПМП из табл. 5 в зависимости от относительной плотности  $\frac{\rho^*}{\rho_{mat}}$

В **заключении** приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

1. Создан оригинальный комбинированный подход, объединяющий методы машинного обучения и тополого-геометрический анализ структур кристаллов, для моделирования новых материалов и прогнозирования их свойств на различных пространственных масштабах.
2. На основе разработанного алгоритма для предсказания степени окисления металлов создан веб-сервис CrystalPredictor, позволяющий достоверно прогнозировать значение степени окисления в координационных соединениях с *O*-, *H*-, *B*-, *C*-, *N*-, *F*-, *Me*-окружениями. Веб-сервис получает не менее 20 уникальных запросов в месяц из различных стран Европы, Северной Америки и Азии.
3. Создан не имеющий мировых аналогов алгоритм генерации трёх-периодических поверхностей на основе атомных сеток кристаллов.
4. Открыты четыре новых минимальных поверхности, полученных с помощью разработанного метода генерации трёх-периодических поверхностей на основе цеолитных соединений.
5. Разработан программный комплекс Porous 3D. Данное ПО позволяет моделировать новые пористые структуры на основе полученных ТПП и ТПМП. Также Porous 3D включает в себя не имеющие аналогов алгоритмы сглаживания, трансляции и наращивания толщины. Результаты работы программы можно использовать в 3D печати и в стандартных комплексах программ по расчету физических свойств материалов.
6. Вычислительные и натурные эксперименты по исследованию механических свойств новых пористых материалов позволили установить неявную зависимость между их тополого-геометрическими признаками и механическими свойствами. Полученные значения механических характеристик новых пористых материалов позволяют выбрать наиболее подходящую пористую структуру с оптимальной плотностью и механическими свойствами для решения различных инженерных задач.

## Публикации автора по теме диссертации

### В изданиях из списка ВАК РФ

1. *Смольков, М. И.* Описание трижды периодических поверхностей с помощью оператора Лапласа–Бельтрами и статистической модели машинного обучения [Текст] / М. И. Смольков // Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. — 2025. — Т. 29, № 1. — С. 1–16.

В изданиях, входящих в международную базу цитирования Scopus и Web of Science

2. *Smolkov, M. I.* Mining knowledge from crystal structures: oxidation states of oxygen-coordinated metal atoms in ionic and coordination compounds [Текст] / М. И. Smolkov, А. Р. Shevchenko, [и др.] // Journal of Chemical Information and Modeling. — 2022. — Т. 62, № 10. — С. 2332–2340. — (Scopus, WoS).
3. *Smolkov, M. I.* Knowledge Acquisition from Crystalline Structures of Homoleptic Complexes: Oxidation States of Metal Atoms [Текст] / М. И. Smolkov, А. Р. Shevchenko, [и др.] // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2024. — С. 1–15. — (Scopus, WoS).
4. *Smolkov, M. I.* Generating triply periodic surfaces from crystal structures: the tiling approach and its application to zeolites [Текст] / М. И. Smolkov, А. Ф. Krutov, [и др.] // Acta Crystallographica Section A: Foundations and Advances. — 2022. — Т. 78, № 4. — С. 327–336. — (Scopus, WoS).
5. *Smolkov, M. I.* Mechanical properties of porous materials based on new triply periodic and minimal surfaces [Текст] / М. И. Smolkov, М. А. Frolov, [и др.] // Mechanics of Advanced Materials and Structures. — 2024. — С. 1–17. — (Scopus, WoS).

### **Зарегистрированные программы для ЭВМ**

6. *Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ.* OxidationStatePredictor [Текст] / М. И. Смольков [и др.] ; СамГТУ. — № 2023611096 ; заявл. 17.01.2020 ; опубли. 17.01.2023, 1234567890 (Россия).
7. *Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ.* Porous 3D [Текст] / М. И. Смольков, С. С. Пашин ; М. И. Смольков, С. С. Пашин. — № 2022617817 ; заявл. 26.04.2022 ; опубли. 29.03.2022, 2022616023 (Россия).
8. *Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ.* Surface Extractor [Текст] / М. И. Смольков, А. Ф. Крутов, В. А. Блатов ; СамГТУ. — № 2021611315 ; заявл. 11.01.2021 ; опубли. 26.01.2021, 2021610065 (Россия).

### **В сборниках трудов конференций**

9. *Смольков, М. И.* Методика прогнозирования свойств химических соединений с помощью машинного обучения [Текст] / М. И. Смольков, А. П. Шевченко // Тезисы X Национальной кристаллохимической конференции. — 2021. — С. 338–339.
10. *Смольков, М. И.* Определение степени окисления атомов металлов в кристаллических структурах координационных соединений [Текст] / М. И. Смольков, А. П. Шевченко, В. А. Блатов // Тезисы X Национальной кристаллохимической конференции. — 2021. — С. 394–395.

11. *Смольников, М. И.* Добыча знаний из кристаллических структур: определение степени окисления атомов металлов [Текст] / М. И. Смольников, А. Ф. Крутов // XLIX Samara Regional Student Scientific Conference. Т. 1. — 2023. — С. 218–220.
12. *Смольников, М. И.* Исследование механических свойств новых пористых материалов [Текст] / М. И. Смольников, А. Ф. Крутов, М. А. Фролов // XXXI Российская научно-техническая конференция «Актуальные Проблемы Информатики, Радиотехники И Связи». Материалы конференции. Т. 1. — 2024. — С. 373–375.
13. *Смольников, М. И.* Новые методы генерации трех-периодических поверхностей [Текст] / М. И. Смольников, А. Ф. Крутов, М. А. Фролов // Современные проблемы прикладной математики, информатики и механики. Сборник трудов Международной научной конференции. Т. 1. — 2023. — С. 218–220.

### **В прочих изданиях**

14. *Смольников, М. И.* Разработка программного обеспечения для реализации модели пористых структур на основе трехпериодических поверхностей [Текст] / М. И. Смольников, А. Ф. Крутов // Физика волновых процессов и радиотехнические системы. — 2022. — Т. 25, № 1. — 71–79. (Входит в список ВАК по другой специальности).
15. *Smolkov, M. I.* Experimental and numerical study of thermal and mechanical properties of porous materials based on triply periodic surfaces [Текст] / M. I. Smolkov, A. F. Krutov, [и др.] // Materials and Solidification. — 2025. — Т. 1, № 1. — С. 1–14.
16. *Smolkov, M. I.* Method for generation of new porous materials based on triply periodic surfaces [Текст] / M. I. Smolkov // ISJ Theoretical & Applied Science. — 2023. — Т. 11, № 127. — С. 242–248.

*Смольников Михаил Игоревич*

Методы вычислительной геометрии и топологии в задачах моделирования  
новых материалов и прогнозирования их свойств

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать \_\_\_\_\_.\_\_\_\_\_.\_\_\_\_\_. Заказ № \_\_\_\_\_

Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

Типография \_\_\_\_\_