

## УТВЕРЖДАЮ

Директор Федерального государственного  
бюджетного учреждения науки Института  
металлургии и материаловедения  
им. А.А. Байкова Российской академии наук  
член-корреспондент РАН

В. С. Комлев

« 29 » 10 2019 г.

## ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу Стародуба Константина Федоровича «Моделирование вязкости высокотемпературных силикатных расплавов», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.16.09 «Материаловедение (Металлургия)»

Вязкость силикатных расплавов играет важную роль в технологических процессах металлургической и энергетической отраслей, оказывая непосредственное влияние на качество получаемого металла, затраты энергоносителей и срок службы используемого оборудования. По этой причине возможность моделирования вязкости представляет собой важную с научной и технологической точки зрения задачу. Существующие модели способны рассчитывать вязкость в ограниченных диапазонах химических составов и температур. В связи с этим диссертационная работа К.Ф. Стародуба, в которой для разработки модели, применимой в интервале температур от полностью жидких до переохлажденных силикатных расплавов, использован комплексный подход, включающий модифицированную диссертантом физическую модель Аврамова и методы машинного обучения, обладает несомненной актуальностью для металловедения и металлургии.

Диссертация состоит из введения, 6 глав, двух приложений и библиографии из 152 наименований (дополнительно в приложении содержатся ссылки на 267 публикаций, из которых извлечены экспериментальные данные о вязкости исследуемых силикатных расплавов). Общий объем диссертации — 160 страниц, из них 120 страниц текста, включая 76 рисунков и 15 таблиц.

В первой главе диссертант, проведя аналитический обзор литературы, рассмотрел основные представления о структуре силикатных расплавов и существующие подходы к моделированию вязкости.

Во второй главе описываются использованные в работе методики, среди которых выделяются экспериментальные методы (приготовление шлифов, световая микроскопия и микроструктурный анализ) и вычислительные методы (моделирование на языке программирования Python с использованием соответствующих программных библиотек, а также расчеты с помощью термодинамического программного обеспечения FactSage)

В третьей главе приведены результаты анализа химического состава шлаков медеплавильного производства, а также рассмотрены экспериментальные данные измерений вязкости из литературных источников.

В четвертой главе описана разработанная диссертантом модификация модели Аврамова. Для лучшего описания структурной зависимости вязкости и для выражения изменения подвижности структурных единиц при изменении концентрации структурообразующих компонентов К.Ф. Стародубом вводятся два изменения в модель, которые учитывают более сильную структурную зависимость частоты перескока, чем предлагается предыдущей моделью, и увеличение числа связей ассоциатов с ростом содержания структурообразователей в расплаве. Показано, что модель способна описывать экспериментальные данные вязкости рассматриваемых систем в широких интервалах химических составов и температур.

В пятой главе для моделирования вязкости силикатных расплавов К.Ф. Стародубом применяются методы машинного обучения —

множественная линейная регрессия и искусственная нейронная сеть. Приводится описание процесса выбора независимых переменных для формирования выборки для анализа с использованием программ машинного обучения, подбора гиперпараметров, обсуждаются и сравниваются результаты моделирования.

В шестой главе рассмотрено применение коллективов моделей, позволяющих увеличить точность расчетов, также проводится анализ и сравнение представленных моделей.

К числу наиболее интересных новых и практически значимых результатов, полученных в диссертации К.Ф. Стародуба, относятся следующие:

1. Разработана модификация модели Аврамова для физико-химического моделирования вязкости силикатных расплавов в системе  $\text{SiO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{Na}_2\text{O} - \text{K}_2\text{O}$ , которая позволила более точно прогнозировать вязкость в полном диапазоне составов и широком интервале температур. Разработанная модификация модели Аврамова может быть рекомендована для включения в состав пакетов программ для термодинамических расчетов.
2. С использованием методов машинного обучения разработаны модели, описывающие вязкость шлаков в более сложной многокомпонентной системе  $\text{SiO}_2 - \text{Al}_2\text{O}_3 - \text{CaO} - \text{Na}_2\text{O} - \text{K}_2\text{O}$  в полном интервале составов и диапазоне температур от переохлажденных до полностью жидких расплавов. Технология разработки таких моделей более универсальна и требует меньше времени, при этом точность прогнозирования с их использованием близка или превосходит точность разработанной модификации модели Аврамова. Гибкость и простота получения моделей с использованием свободно распространяемых пакетов программ машинного обучения позволяют рекомендовать их для применения на предприятиях металлургической, стекольной и энергетической промышленности.

Достоверность полученных экспериментальных результатов работы обеспечивается использованием аттестованных измерительных установок и приборов и соответствием результатам проводившихся ранее исследований.

Точность прогнозирования с использованием расчетных моделей определена с помощью вычисления средней абсолютной ошибки экзаменационного распознавания независимой выборки.

Результаты работы доложены и обсуждены на трех международных конференциях, а также опубликованы в международных рецензируемых журналах.

К диссертационной работе предъявляются следующие замечания:

1. При классификации методов машинного обучения не совсем ясно, почему диссертант выделил в отдельную группу обучение с подкреплением, в котором в процессе обучения определяются действия, наиболее выгодные для максимизации вознаграждения. Дело в том, что практически все алгоритмы машинного обучения (с учителем или без учителя) основаны на экстремизации некоторого функционала качества (минимума ошибок распознавания, максимального расстояния между классами и т. п.).

2. При анализе причин недообучения следует учесть, что чаще всего оно является следствием малой репрезентативности обучающей выборки.

3. Необходимо сделать обоснование выбора средней абсолютной ошибки для оценки эффективности машинного обучения.

В целом можно заключить, что научное исследование, проведенное Стародубом Константином Федоровичем, заслуживает высокой оценки. Замечания не ставят под сомнение основные выводы диссертации. Результаты работы имеют значительную научную и практическую ценность. Автореферат полностью отражает содержание представленной диссертации. Основные результаты опубликованы в печати в ведущих научных изданиях, входящих в базы цитирования Web of Science и Scopus.

Диссертация Стародуба Константина Федоровича представляет собой законченную научную работу. По тематике, актуальности, научной новизне, практической значимости и достоверности сформулированных выводов диссертация соответствует специальности 05.16.09 «Материаловедение (Металлургия)», а ее автор Стародуб Константин Федорович заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук.

Заключение принято на коллоквиуме Лаборатории полупроводниковых материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова Российской академии наук. Присутствовало на заседании 9 чел. Результаты голосования: «за» – 9 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел., протокол № 1/10-19 от 07.10.2019 г.

Руководитель группы применения информационных технологий в материаловедении, главный научный сотрудник, заведующая лабораторией полупроводниковых материалов, доктор химических наук



Н. Н. Киселева

Надежда Николаевна Киселева

Доктор химических наук (02.00.21 - химия твердого тела), руководитель группы применения информационных технологий в материаловедении, главный научный сотрудник, заведующая лабораторией полупроводниковых материалов.

Адрес электронной почты: [kis@imet.ac.ru](mailto:kis@imet.ac.ru)

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт металлургии и материаловедения им. А. А. Байкова Российской академии наук (ИМЕТ РАН)

Россия, Москва, 119334, Ленинский пр-т., 49

тел.: +7 (499) 135-2060, +7 (499) 135-2591

факс: +7 (499) 135-8680.