

## **ОТЗЫВ**

**официального оппонента, доктора физико-математических наук  
Талиса Александра Леонидовича на диссертацию Захаровой Алены  
Александровны на тему: «Математическое моделирование минеральных  
агрегатов: теория и геологическое приложение», представленную на  
соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук по  
специальности 25.00.05 – Минералогия, кристаллография**

### **1. Актуальность темы диссертации**

Структурно-текстурный анализ минеральных агрегатов (в том числе горных пород и руд) – неотъемлемая часть геологических исследований. Большое значение эти характеристики имеют для решения задач технологической минералогии, поскольку оказывают непосредственное влияние на извлечение полезного минерала. Несмотря на большое количество существующих подходов к определению структур и текстур, сегодня для этих понятий отсутствуют единые и строгие терминология и классификация, основанные на количественных параметрах. Существующая классификация основана на словесном (т. е. субъективно–интуитивном) описании. Подобная проблема является актуальной и для гораздо более формализованной кристаллографии, в которой, например, структурный мотив определяется «взаимным расположением структурных единиц и их конфигурацией в кристалле». При этом в рамках математических конструкций структурные единицы и их конфигурации не определяются.

Диссертация Захаровой А.А. посвящена решению актуальной задачи – разработке математической модели минеральных агрегатов, позволяющей создать их строгую классификацию для решения различных геологических, в том числе минералого–технологических, задач.

### **2. Степень обоснованности и достоверности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации, их новизна**

Обоснованность научных положений, выводов и рекомендаций обеспечена детальным анализом работ российских и зарубежных авторов по теме исследования, грамотным использованием математического аппарата и корректной статистической обработкой результатов, а также применением современных компьютерных технологий для визуализации теоретических моделей.

Достоверность результатов исследования подтверждена апробацией теоретических моделей на реальных геологических объектах (результаты моделирования не противоречат геологическим и технологическим данным), а также апробацией работы на международных и всероссийских конференциях.

### **3. Научные результаты, их ценность**

В диссертации Захаровой А.А. разработана математическая модель минерального агрегата и дано определение его структуры. Это позволило построить полную классификацию структур, возможных для минеральных агрегатов, а также однозначно и воспроизводимо диагностировать их в природных минеральных агрегатах при решении геологических задач.

#### **Научная новизна работы:**

1. Для бинарных и тернарных контактов в биминеральных агрегатах предложены модельные тренды, выявляющие закономерности в расположении типовых структур и текстур на барицентрических диаграммах вероятностей межзерновых контактов. Впервые предложена классификационная диаграмма для тернарных контактов, визуализированы структурные индикатрисы.

2. Для бинарных контактов в триминеральных агрегатах впервые получена классификационная диаграмма – барицентрический 6–вершинный симплекс 5-мерного пространства, в тетраэдрических гранях которого построены поля структурных типов.

3. Модель опробована на амфиболитах Керетского архипелага, апатитовых рудах Хибин и железных рудах Костомукши. Для последних установлена корреляция структурных типов и степени извлечения полезного минерала.

**Результаты диссертационной работы в достаточной степени освещены в 13 печатных работах, в том числе в 3 статьях – в изданиях из перечня рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук (далее – Перечень ВАК), в 2 статьях – в изданиях, входящих в международную базу данных и систему цитирования Scopus; получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ.**

### **4. Теоретическая и практическая значимость работы**

Теоретическая методологическая значимость работы заключается в разработке математической модели минеральных агрегатов, позволяющей количественно, однозначно и воспроизводимо характеризовать их структуры. Связь разработанной в диссертации математической модели с описываемыми ею минеральными агрегатами позволяет провести аналогию с федоровскими группами, которые были выведены без предположения о существовании атомов, но строго и однозначно определяют строение любых кристаллов. В этом

отношении диссертация наследует традиции кафедры кристаллографии Горного университета, первым заведующим которой был сам Евграф Степанович Федоров.

Представление о минеральном агрегате как автоморфизме минеральных видов, реализованном через контакты минеральных индивидов, впервые вводит в описание структур и текстур строгое математическое основание. В частности, формализация контактов минеральных индивидов привела к построению атласа искусственных шлифов на основе гексагональной сетки. Эту часть диссертации можно определить, как перевод комбинаторной предгеометрии, определяемой барицентрической диаграммой вероятностей межзерновых контактов, в геометрию гексагональной сетки из черных и белых гексагонов.

На практике разработанные автором модельные тренды можно использовать для выявления тонких различий между агрегатами близкого минерального и химического состава на разных стадиях геологоразведочных работ. Установленная при исследовании апатитовых и железных руд зависимость между структурными типами руд и степенью извлечения полезного минерала может применяться для минералого-технологического картирования.

## **5. Замечания и вопросы по работе**

1) На стр.16 диссертации: «Границы минеральных зерен трехмерны (толщина обычно составляет 0,1–20 мкм) и представляют собой места сочленения и взаимодействия различно ориентированных кристаллических решеток (Жабин, 1979). Граница отличается от минеральных зерен структурой и представляет собой краевую дислокацию решеток, это переходная область между одним и другим минеральным зерном. (Горная порода: опыты постижения, 2005)».

На стр.17: «Краевая дислокация одного зерна превращается в дислокацию соседних кристаллических решеток, а на границе кристаллов...»

Кристалл, в общем случае, не сводится к решетке. Поэтому следовало сказать точнее – кристаллические структуры вместо кристаллических решеток. Современное структурное определение границы двух кристаллов требует формализма системы Делоне, для которой расстояние от любой точки системы до ближайшей к ней точки системы не меньше некоторого фиксированного отрезка длины  $r$ , а расстояние от любой точки пространства до ближайшей к ней точки системы не больше некоторого фиксированного отрезка длины  $R$ . Например, если для двух объединяемых кристаллов  $r_1 < r_2$  и  $R_1 < R_2$ , то строение границы определяется требованием:  $r_1 < r$  и  $R < R_2$ .

2) На стр. 29 уместно было бы упомянуть, что случайные разбиения плоскости (т. е. случайные мозаики), для которых имеют место статистические

законы, рассматривались, например, в работе Weaire, D. & Rivier, N. Soap, cells and statistics – random patterns in two dimensions. *Contemp. Phys.* 25 (1984) 59–99.

3) На рис.14, 16-18 изображены черно-белые раскраски гексагонов правильной гексагональной сетки, для которых могут быть построены группы позиционной цветной симметрии (W-симметрии), изоморфные группе  $P6mm$ . Согласно первому защищаемому положению: «Моделирование минеральных агрегатов как автоморфизмов минеральных видов позволяет построить классификацию структур на основе статистик бинарных и тернарных межзерновых контактов и предложить для них барицентрические диаграммы нового типа, выявляющие закономерности в расположении классических структур и текстур». Т. о., было бы уместно указать, что для определенных структур автоморфизмы минеральных видов могут быть формализованы в форме групп цветной симметрии.

4) На стр. 66: «Поскольку представить 5-мерный симплекс целиком невозможно, предложено использовать трехмерные грани этого симплекса – тетраэдры. Для их построения каждый раз исключаются два типа контактов, что позволяет найти проекцию исходной поверхности на трехмерные грани. Число сочетаний из 6 по 2 находится с помощью биномиального коэффициента:  $C_6^2=15$ . В табл. 11 показаны все возможные варианты пар контактов. Некоторые типы контактов взаимозаменяемы путем мысленного превращения одного минерала в другой, поэтому желтым цветом выделены 15 сочетаний, которые послужили основой для построения поверхностей».

По определению, 5-мерный симплекс – гексатерон содержит 15 тетраэдров и 15 ребер. Т. о., число тетраэдров и 15 сочетаний (ребер гексатерона), выделенных желтым цветом в табл. 11, можно было просто определить из литературных данных. Также, возможно, свойства гексатерона могут быть полезными и для классификации рассматриваемых в диссертации поверхностей в тетраэдрах гексатерона.

5) На стр.67: «...с помощью векторного умножения соответствующие точки ставятся внутри тетраэдра». Более точно – с помощью векторного умножения соответствующие векторы ставятся внутри тетраэдра.

6) Там же в табл. 12 исходные и приведенные вероятности контактирования минеральных зерен обозначены одинаковыми символами:  $p_{12}$ ,  $p_{13}$ ,  $p_{23}$ ,  $p_{33}$ .

7) На стр. 68–70: «Рис. 32, 33, 34 – Трехмерные грани (тетраэдры) с проекциями...». Точнее было сказать – «...Трехмерные грани (тетраэдры) гексатерона с проекциями...».

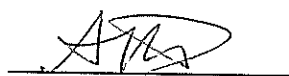
Приведенные замечания носят информационный и технический характер, обусловленный фундаментальным математическим базисом работы. Они не снижают общей высокой оценки диссертации.

## Заключение по диссертации

Диссертация представляет собой завершённую научно–квалификационную работу. Она написана грамотным языком, четко структурирована, сопровождается иллюстрациями, формулами и таблицами, удачно дополняющими текст. Автореферат соответствует основному содержанию диссертации.

Диссертация «Математическое моделирование минеральных агрегатов: теория и геологическое приложение», представленная на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук по специальности 25.00.05 – Минералогия, кристаллография полностью отвечает требованиям раздела 2 «Положения о присуждении ученых степеней» федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт–Петербургский горный университет», утвержденного приказом ректора Горного университета от 20.05.2021 № 953 адм, а ее автор – Захарова Алена Александровна – заслуживает присуждения ученой степени кандидата геолого–минералогических наук по специальности 25.00.05 – Минералогия, кристаллография.

Официальный оппонент, ведущий научный сотрудник лаборатории физической химии полимеров ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук»  
доктор физ.–мат. наук



Талис Александр Леонидович  
«\_6\_»\_сентября\_2022 г.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова  
Российской академии наук  
Почтовый адрес: 119334, Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1  
Официальный сайт в сети Интернет: <https://ineos.ac.ru/>  
e-mail: [larina@ineos.ac.ru](mailto:larina@ineos.ac.ru)  
Телефон: (499) 135-92-02

Подпись Талиса А.Л. заверяю  
ученый секретарь ИНЭОС РАН



к.х.н. Е. Н. Гулакова