Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки. 2025. Т. 29, № 1. С. 158–173
ISSN: 2310-7081 (online), 1991-8615 (print) https://doi.org/10.14498/vsgtu2105
EDN: ENXAZE

УДК 517.9+514.7+519.6

Описание трижды периодических поверхностей с помощью оператора Лапласа–Бельтрами и статистической модели машинного обучения

М. И. Смольков

Самарский государственный технический университет,
Россия, 443100, Самара, ул. Молодогвардейская, 244.

Аннотация

Трижды периодические поверхности (ТПП) и их минимальные аналоги (ТПМП) в настоящее время активно применяются в различных областях, таких как механика, биомеханика, аэродинамика, гидродинамика и радиофизика. В связи с этим возникает задача установления корреляций между тополого-геометрическими свойствами поверхностей и их физическими характеристиками. Для решения данной задачи необходимо ввести меру сходства между поверхностями, обладающими различными тополого-геометрическими свойствами. Настоящая работа посвящена описанию ТПП и ТПМП в терминах метрического пространства дескрипторов. Решение задачи осуществляется с использованием математического аппарата теории распознавания изображений. Построен дескриптор на основе совокупности собственных векторов и собственных значений оператора Бельтрами–Лапласа, а также совместной байесовской модели. В пространстве дескрипторов введена метрика, основанная на вероятностной мере сходства поверхностей. Работоспособность разработанного метода проверена на 51 поверхности класса P. Точность предсказания типа поверхности составила 92.8 %. Разработанная модель машинного обучения позволяет определить принадлежность произвольной поверхности к классу P-поверхностей.

Ключевые слова: топологическая структура, дискретный аналог уравнения Лапласа–Бельтрами, собственные векторы, собственные значения, байесовские вероятности, вероятностная мера сходства.

Получение: 24 июля 2024 г. / Исправление: 19 февраля 2025 г. / Принятие: 21 февраля 2025 г. / Публикация онлайн: 10 марта 2025 г.

Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ
Научная статья

Образец для цитирования
Смольков М. И. Описание трижды периодических поверхностей с помощью оператора Лапласа–Бельтрами и статистической модели машинного обучения // *Вестн. Сам. гос. техн. ун-та. Сер. Физ.-мат. науки*, 2025. Т. 29, № 1. С. 158–173. EDN: ENXAZE. DOI: 10.14498/vsgtu2105.

Сведения об авторе
Михаил Игоревич Смольков https://orcid.org/0000-0001-5573-662X
аспирант; младший научный сотрудник; международный научно-исследовательский центр по теоретическому материаловедению; e-mail: m.smolkov97@gmail.com

Введение. В последнее десятилетие трижды периодические поверхности (ТПП) и их минимальные аналоги (ТПМП) стали объектом интенсивных исследований в различных областях науки и техники. ТПП разбивают трехмерное пространство на системы непересекающихся пор, а ТПМП помимо этого обладают в каждой точке нулевой средней кривизной, то есть характеризуются минимальной энергией поверхностного натяжения. Благодаря этому на основе ТПП и ТПМП, например, методами аддитивных технологий могут быть изготовлены пористые структуры, которые находят широкое применение благодаря своим нетривиальным физическим свойствам: механическим [1–4], виброакустическим [5], теплопроводным [4]. Такие структуры могут служить основой для создания композиционных материалов [6, 7], а также метаматериалов [4, 8]. Особый интерес представляют процессы дифракции электромагнитных волн на подобных структурах, изготовленных из различных материалов [9, 10].

В предыдущей работе [11] с участием автора была предложена программная реализация нового способа генерации ТПП на основе анализа топологии и геометрии атомных каркасов природных соединений — цеолитов [12]. В работе [13] были построены новые ТПМП, а также численно и экспериментально исследованы механические свойства образцов новых пористых структур, основанных на этих ТПМП. Образцы для экспериментального изучения изготавливались методами 3D-печати. В работе показана сильная зависимость механических свойств структур от тополого-геометрических характеристик поверхностей. Таким образом, в работе [13] была подтверждена необходимость установления корреляций между тополого-геометрическими и физическими свойствами пористых структур.

При построении поверхностей в работах [11, 12] они характеризовались следующим набором признаков: тип тайлинга, то есть разбиение сеточного пространства, построенного на кристаллической решетке цеолита, на элементарные строительные единицы; род поверхности (genus); типы колец — все несимметричные кольца периодической сетки (фасеты натурального тайлинга) в ТПП; пространственная группа — группа симметрии повторяющегося тайлинга в пространстве, совпадающая с пространственной группой кристаллической решетки; топология HRN — топология сетки Хопфа [14]; топология лабиринтных сеток согласно общепринятым номенклатурам [15]; сбалансированность — свойство изоморфности системы двух пор, на которые тайлинг разбивает пространство. В ходе исследования было выявлено, что набор перечисленных признаков пористых структур не является независимым и полным, а физические, в частности механические, свойства пористых структур зависят от неочевидных комбинаций указанных выше признаков. Отметим, что эти признаки влияют на механические свойства (модуль Юнга, модуль сдвига, коэффициент Пуассона и др.) неявным образом с некоторым неизвестным весом. Таким образом, возникает задача введения более тонких дескрипторов, которые бы более полно интегрировали тополого-геометрические признаки поверхностей и позволяли отличать поверхности друг от друга по некоторому расстоянию в пространстве этих дескрипторов.

Заметим, что аналогичная задача возникает при обработке изображений, например, при идентификации фотографии некоторого лица среди большого числа фотографий [16]. Одним из развитых методов обработки изображений в задачах такого рода является метод вычисления собственных функций и собственных значений оператора Лапласа—Бельтрами (ОЛБ). Данный подход использовался также на двумерном многообразии в трехмерном пространстве [16] с привлечением совместной байесовской модели машинного обучения [16, 17], что позволило ввести вероятностную метрику в пространстве дескрипторов и определять близость поверхностей по расстоянию в этом пространстве. В настоящей работе этот подход развивается для распознавания (сравнения) поверхностей на множестве так называемых P-поверхностей по А. Шоену [18]: MAPO-39 (ATN), Mg-BCCT (BCT), Brewsterite (BRE), Cobalt-Gallium-Phosphate-5 (CGF), Edingtonite (EDI), Heulandite (HEU), ITQ-12 (ITW), CoAPO-CJ62 (JSW), Laumontite (LAU), Linde Type A (LTA), Merlinoite (MER), Rhodenite (RHO), STA-6 (SAS), Sodalite (SOD), Mu-18 (UEI). Эти поверхности характеризуются различным набором колец и различными пространственными группами, но все являются сбалансированными поверхностями 3-го рода (genus 3) с топологией лабиринтовых сеток — pcu и топологией колец Хопфа — nbo.

В качестве примера работы развитого метода был произведен расчет расстояния для всех перечисленных выше поверхностей и двух D-поверхностей по отношению к поверхности LTA.

1. Создание дескриптора ТПП на основе оператора Лапласа—Бельтрами. Предложенный в работе [16] метод расчета собственных векторов и собственных значений оператора ОЛБ позволяет создать дескриптор поверхности. Метод включает в себя следующие шаги:

1) построение ОЛБ для каждой поверхности;
2) расчет собственных векторов и собственных значений ОЛБ для каждой поверхности;
3) уменьшение размерности пространства дескрипторов при помощи разложения по некоторой системе мульти-вейвлетов.

Рассмотрим каждый шаг более подробно на примере используемых в нашем исследовании моделей ТПМП. Для любой действительной функции $f \in C^2$, заданной на римановом многообразии M, ОЛБ Δ_M определяется следующим образом:

$$\Delta_M f = -\frac{1}{\sqrt{|g|}} \sum_{i,j} \partial_i(\sqrt{|g|} g^{ij} \partial_j f), \tag{1}$$

где g — метрический тензор M [19].

Одной из сложностей для решения задачи на собственные функции и собственные значения для оператора ОЛБ (1) является отсутствие аналитического представления рассматриваемых поверхностей. Например, в разработанном нами подходе [11–13] ТПП и ТПМП задаются набором точек в трехмерном пространстве (рис. 1). Функция f определяется в узлах сетки поверхности, то есть на несвязном многообразии L. Соответствующий дискретный аналог ОЛБ выражается следующей формулой [19]:

$$\Delta f(p_i) = \frac{1}{s_i} \sum_{p_j \in N(i)} w_{ij}\big(f(p_i) - f(p_j)\big), \tag{2}$$

где $N(i)$ — однокольцевая окрестность точки $p_i \in L$; w_{ij} — весовые коэффициенты; s_i — коэффициенты нормализации, равные площади полиэдра Вороного, построенного в окрестности точки p_i. Весовые коэффициенты определяются следующей формулой:

$$w_{ij} = \frac{\operatorname{ctg} \alpha_{ij} + \operatorname{ctg} \beta_{ij}}{2},$$

где α_{ij} и β_{ij} — два угла, противоположные ребру между вершинами p_i и p_j, $i \neq j$.

В матричной записи формула (2)

$$\Delta f = S^{-1} W f, \tag{3}$$

где $S = \operatorname{diag}(s_j)$, $W = \operatorname{diag}(t_i) - (w_{ij})$, $t_i = \sum_k w_{ik}$.

В терминах (3) расчет собственных значений, соответствующих дискретному набору собственных векторов ОЛБ, эквивалентен следующей матричной задаче:

$$W\phi = \lambda S \phi,$$

где λ — собственное значение ОЛБ, а ϕ — собственный вектор ОЛБ.

Для расчета матриц W и S мы использовали алгоритм, представленный в [20]. Идея данного алгоритма заключается в преобразовании несвязного многообразия в связное путем создания двух логических копий каждого входного треугольника и склеивания их по ребрам, чтобы сформировать замкнутую реберно-связную сетку. Полученную сетку называют «опушенным покрытием», поскольку дублированные треугольники все еще разделяют те же самые вершины, подобно двум слоям обитой мебели, соединенным пуговицами (рис. 2).

Процедура решения задачи расчета собственных векторов и собственных значений реализована в пакете `SciPy` [21]. Для полученных W и S рассчитываются наборы λ и ϕ. По данным наборам может быть построена частотная гистограмма поверхности. Собственные векторы и собственные значения оператора Лапласа—Бельтрами наследуют его внутреннюю природу, поэтому они улавливают геометрические и топологические свойства поверхностей [22] и остаются инвариантными относительно изометрических деформаций.

Опишем процедуру построения частотной гистограммы. Для обеспечения инвариантности собственных векторов к размеру поверхности [23] необходимо

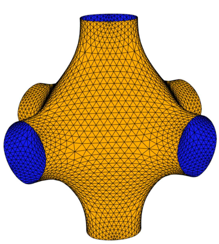


Рис. 1. Пример элементарной ячейки ТПП P-типа на основе цеолита Linde Type A (LTA)

[Figure 1. Example of P-type TPS unit cell based on Linde Type A (LTA) zeolite]

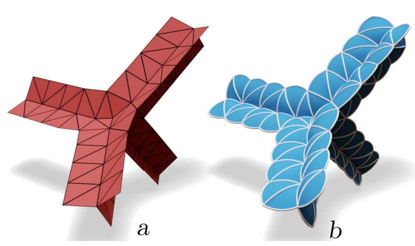


Рис. 2. Пример «опушенного покрытия»: *a*) поверхность несвязного многообразия; *b*) «опушенная» поверхность

[Figure 2. Example of "tufted cover": *a*) non-manifold surface; *b*) "tufted" surface] нормировать каждый вектор на его собственное значение:

$$\tilde{\phi}_i = \frac{\phi_i}{\sqrt{\lambda_i}},$$

где $\tilde{\phi}_i$ — i-й масштабно-инвариантный собственный вектор, $\dim \tilde{\phi}_i = \dim L$.

Векторы $\tilde{\phi}_i$ являются ключевыми для установления схожестей между ТПП, поэтому гистограмма каждой поверхности должна быть рассчитана на фиксированном для всех поверхностей интервале $[r^i_{\min}, r^i_{\max}]$:

$$r^i_{\min} = \min_{p,l}\{\tilde{\phi}^i_l(p)\}, \quad r^i_{\max} = \max_{p,l}\{\tilde{\phi}^i_l(p)\},$$

где $\tilde{\phi}^i_l(p)$ — значение i-го масштабно-инвариантного собственного вектора поверхности номера l.

В таком случае форму поверхности описывает гистограмма (рис. 3) размерности $N \times N_E$, где N_E — количество собственных векторов ОЛБ, а N — количество интервалов для гистограммы каждого $\tilde{\phi}_i$, $i \in [1, \ldots, N_E]$. Значения N, N_E выбираются из соображений оптимизации точности вычислений и затрат машинного времени, в данной работе $N = N_E = 64$. Далее будем называть данное представление изображением гистограммы Γ. Фактически Γ является матрицей, элементы которой задаются количеством собственных

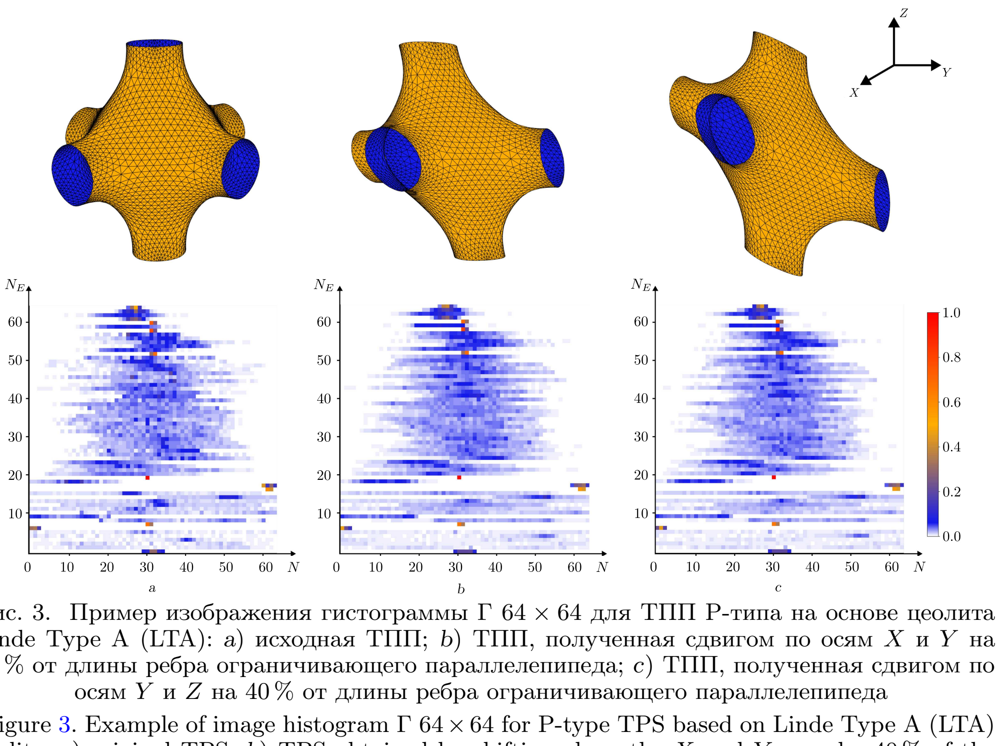


Рис. 3. Пример изображения гистограммы Γ 64 × 64 для ТПП P-типа на основе цеолита Linde Type A (LTA): a) исходная ТПП; b) ТПП, полученная сдвигом по осям X и Y на 40 % от длины ребра ограничивающего параллелепипеда; c) ТПП, полученная сдвигом по осям Y и Z на 40 % от длины ребра ограничивающего параллелепипеда

[Figure 3. Example of image histogram Γ 64 × 64 for P-type TPS based on Linde Type A (LTA) zeolite: a) original TPS; b) TPS obtained by shifting along the X and Y axes by 40 % of the length of the edge of the bounding box; c) TPS obtained by shifting along the Y and Z axes by 40 % of the length of the edge of the bounding box] векторов, попадающих в данный элемент гистограммы, нормированным на $[0, 1]$. Изображение гистограммы позволяет учитывать глобальную структуру объекта при сохранении его формы относительно различных преобразований, например, изометрических трансформаций.

Изображение гистограммы может рассматриваться как дескриптор поверхности, однако оно описывается большим объемом данных, представляющим затруднение при сравнении. Для уменьшения размерности дескриптора произведем разложение Γ по некоторому мульти-вейвлетному базису, так называемой V-системе [24]. V-система представляет собой набор ортогональных базисных функций. В данной работе, по аналогии с работой [16], используется V-система третьего порядка. V-система определена на интервале $[0, 1]$ и упорядочена по группам и классам следующим образом:

– первая группа ($n = 1$):

$$\begin{aligned}
&V^1_{3,1}(x) = 1,\\
&V^2_{3,1}(x) = \sqrt{3}(1 - 2x),\\
&V^3_{3,1}(x) = \sqrt{5}(6x^2 - 6x + 1),\\
&V^4_{3,1}(x) = \sqrt{7}(-20x^3 + 30x^2 - 12x + 1);
\end{aligned}$$

– вторая группа ($n = 2$):

$$V^1_{3,2}(x) = \begin{cases} \sqrt{7}(-64x^3 + 66x^2 - 18x + 1), & 0 \leqslant x < 1/2,\\ \sqrt{7}[-64(1 - x)^3 + 66(1 - x)^2 - 18(1 - x) + 1], & 1/2 < x \leqslant 1; \end{cases}$$

$$V^2_{3,2}(x) = \begin{cases} \sqrt{5}(-140x^3 + 114x^2 - 24x + 1), & 0 \leqslant x < 1/2,\\ \sqrt{5}[140(1 - x)^3 - 114(1 - x)^2 + 24(1 - x) - 1], & 1/2 < x \leqslant 1; \end{cases}$$

$$V^3_{3,2}(x) = \begin{cases} \sqrt{3}(-224x^3 + 156x^2 - 28x + 1), & 0 \leqslant x < 1/2,\\ \sqrt{3}[-224(1 - x)^3 + 156(1 - x)^2 - 28(1 - x) + 1], & 1/2 < x \leqslant 1; \end{cases}$$

$$V^4_{3,2}(x) = \begin{cases} -280x^3 + 180x^2 - 30x + 1, & 0 \leqslant x < 1/2,\\ 280(1 - x)^3 - 180(1 - x)^2 + 30(1 - x) - 1, & 1/2 < x \leqslant 1. \end{cases}$$

– остальные группы рассчитываются по формуле ($n > 2$):

$$V^{i,j}_{3,n}(x) = \begin{cases} \sqrt{2^{n-2}}V^i_{3,2}[2^{n-2}(x - \frac{j-1}{2^{n-2}})], & x \in (\frac{j-1}{2^{n-2}}, \frac{j}{2^{n-2}}),\\ 0, & x \notin (\frac{j-1}{2^{n-2}}, \frac{j}{2^{n-2}}), \end{cases}$$

где x — аргумент ортогональных базисных функций, $x \in \mathbb{R}^1$, $j = i$.

Согласно [25–27], V-система обладает свойством воспроизводимости, которое означает, что как непрерывные, так и дискретные сигналы могут быть достаточно точно восстановлены с использованием конечного числа базисных функций. Используя соотношение ортогональности V-системы, коэффициенты разложения Γ по первым 16 функциям V-базиса (т.е. по четырем группам функций V-системы, $V^1_{3,1}(x) = V_1, \ldots, V^4_{3,4} = V_{16}$) можно вычислить по формулам

$$a_{ij} = \sum_{m=1}^{N} \sum_{k=1}^{N_E} \Gamma_{mk} \tilde{V}^m_i \tilde{V}^k_j, \tag{4}$$

$$\Lambda = (a_{11}, \ldots, a_{n1}, a_{12}, \ldots, a_{nn}), \tag{5}$$

где a_{ij} — коэффициенты разложения Γ по V-базису; Γ_{mk} — элемент Γ; $\tilde{V}_i^m = \{V_i(\Gamma_{m1}), \ldots, V_i(\Gamma_{mN})\}$; $\tilde{V}_j^k = \{V_j(\Gamma_{1k}), \ldots, V_j(\Gamma_{N_E k})\}$; n — квадратный корень от числа функций, использованных для разложения Γ, в нашем случае $n = 4$; Λ — вектор дескрипторов, построенный из коэффициентов a_{ij} разложения Γ.

Именно набор коэффициентов разложения (4), (5) будем рассматривать как дескриптор поверхности. Полученный дескриптор будем называть V-спектром Лапласа—Бельтрами Λ. Полученный вектор является многомерной случайной величиной, вероятностный характер которой определяется изоморфизмом поверхности, триангуляцией поверхности, процедурой сглаживания [12] и т.д. Будем считать, что Λ имеет нормальный закон распределения, максимум этого распределения соответствует набору дескрипторов, описывающих ТПП без изометрических преобразований, то есть в исходном виде. Поэтому естественным представляется введение расстояния как логарифма отношения правдоподобия построенных моделей поверхностей, описываемых байесовскими вероятностями V-спектра.

2. Метод максимального правдоподобия и совместная байесовская модель машинного обучения. Для получения метрики схожести в пространстве дескриптора Λ воспользуемся результатами работы [17]. Для этого перейдем от случайного вектора Λ к вектору с нулевым математическим ожиданием. Для i-й и j-й поверхностей S_i и S_j и соответствующих им дескрипторов D_i и D_j совместная байесовская модель описывает совместное распределение вероятностей D_i и D_j при двух различных гипотезах, а именно, что D_i и D_j принадлежат одному классу или разным классам. Логарифм отношения соответствующих условных вероятностей можно рассматривать как вероятностную меру сходства S_i и S_j в пространстве дескрипторов (5):

$$r(D_i, D_j) = \log \frac{P(D_i, D_j|H_I)}{P(D_i, D_j|H_E)}, \tag{6}$$

где H_I — гипотеза, согласно которой S_i и S_j являются поверхностями одного и того же класса; H_E — гипотеза, согласно которой две поверхности принадлежат к разным классам; $P(D_i, D_j|H_I)$ и $P(D_i, D_j|H_E)$ — условные вероятности.

Расстояние в пространстве дескрипторов определяется как

$$d(D_i, D_j) = -r(D_i, D_j). \tag{7}$$

Далее будем следовать работе [17], в которой дескриптор представлен как сумма двух независимых случайных переменных с нормальным распределением:

$$D = \mu + \varepsilon, \tag{8}$$

где D — дескриптор с нулевым математическим ожиданием; μ представляет собой случайную величину, характеризующую поверхность; ε — величина, отражающая случайные деформации, неизометрические преобразования и шумы триангуляции поверхности. Величины μ и ε подчиняются нормальным распределениям $N(0, S_\mu)$ и $N(0, S_\varepsilon)$, где S_μ и S_ε — две неизвестные матрицы ковариации.

Из изложенного следует, что совместные вероятности $P(D_i, D_j|H_I)$ и $P(D_i, D_j|H_E)$ имеют нормальное распределение с нулевым математическим ожиданием. При гипотезе H_I $\mu_i = \mu_j$, а ε_i и ε_j независимы. При гипотезе H_E как μ_i и μ_j, так и ε_i и ε_j являются независимыми. Тогда их матрицы ковариации выражаются следующим образом:

$$\Sigma_I = \begin{bmatrix} S_\mu + S_\varepsilon & S_\mu \\ S_\mu & S_\mu + S_\varepsilon \end{bmatrix}, \qquad \Sigma_E = \begin{bmatrix} S_\mu + S_\varepsilon & 0 \\ 0 & S_\mu + S_\varepsilon \end{bmatrix}.$$

Исходя из (6)–(8) логарифм отношения вероятностей может быть записан как

$$r(D_i, D_j) = \log \frac{P(D_i, D_j|H_I)}{P(D_i, D_j|H_E)} = D_i^\top A D_i + D_j^\top A D_j - 2D_i^\top G D_i,$$

где $A = (S_\mu + S_\varepsilon)^{-1} - (F + G)$, $F = S_\varepsilon^{-1}$, $G = -(2S_\mu + S_\varepsilon)^{-1} S_\mu S_\varepsilon^{-1}$, $^\top$ — символ транспонирования матрицы.

Для нахождения матриц ковариации S_μ и S_ε введем совокупность матриц $\Theta = \{S_\mu, S_\varepsilon\}$ и воспользуемся наиболее распространенным статистическим методом оценки параметров моделей — методом максимального правдоподобия (ММП). В его основе лежит идея выбора параметров модели таким образом, чтобы вероятность описания данных, наблюдаемых с их помощью, была максимальной:

$$\max_{S_\mu, S_\varepsilon} \sum_i \log P(\bar{D}_i|S_\mu, S_\varepsilon), \tag{9}$$

где $\bar{D}_i = [D_{i1}; \ldots; D_{im_i}] = [\mu_i + \varepsilon_{i1}; \ldots; \mu_i + \varepsilon_{im_i}]$, m_i — количество дескрипторов поверхности i-го класса.

Цель ММП заключается в нахождении наиболее вероятной совокупности матриц Θ такой, чтобы дескрипторы соответствовали рассчитанным значениям Λ поверхностей. Для этого воспользуемся так называемым EM-алгоритмом (Expectation–Maximization) [17] оптимизации целевой функции. Этот алгоритм позволяет находить оптимальные параметры модели из условия максимума ожидаемого значения логарифма функции правдоподобия.

На первом шаге (Expectation) для каждой поверхности возьмем случайную переменную $h_i = [\mu_i; \varepsilon_{i1}, \ldots, \varepsilon_{im_i}]$. Пусть Θ_t — совокупность матриц Θ, на которых целевая функция достигает максимума при распределении h_i, удовлетворяющем данным параметрам $Q(h_i) = P(h_i \mid \bar{D}_i, \Theta_t)$:

$$\sum_i E_{P(h_i, \bar{D}_i|\Theta_t)} \log P(h_i, \bar{D}_i \mid \Theta). \tag{10}$$

На втором шаге (Maximization) оцениваем h_i как его математическое ожидание согласно апостериорной вероятности, поскольку h_i и D_i — случайные переменные, подчиняющиеся нормальному закону распределения:

$$E(h_i \mid \bar{D}_i) = \Sigma_h M^\top \Sigma_{\bar{D}_i}^{-1} \bar{D}_i, \tag{11}$$

где $M^\top$ — матрица, согласовывающая размерность Λ и h_i [10]:

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}.$$

Из (9)–(11) получаем:

$$\mu_i = S_\mu\big((n+1)G + F\big)\sum_{t=1}^{n}\lambda_{it}, \quad \varepsilon_i = S_\varepsilon G\sum_{t=1}^{n}\lambda_{it} + \lambda_{ij},$$

где n — квадратный корень от числа функций, использованных для разложения Γ, в нашем случае $n = 4$.

Таким образом, мы можем для следующей итерации при возвращении к первому шагу (Expectation) рассчитать Θ следующим образом:

$$\Theta = \{S_\mu = \mathrm{cov}(\mu); S_\varepsilon = \mathrm{cov}(\varepsilon)\}.$$

Алгоритм EM итеративно сходится к наилучшим значениям S_μ и S_ε. Итерационный процесс прекращается на i-м шаге, когда выполняется условие

$$\frac{\|S_{\varepsilon(i)} - S_{\varepsilon(i-1)}\|}{\|S_{\varepsilon(i)}\|} < \epsilon,$$

где ϵ — заданное малое число, которое в данной работе выбиралось равным 10^{-5}, $\|\cdot\|$ обозначает норму матрицы [21].

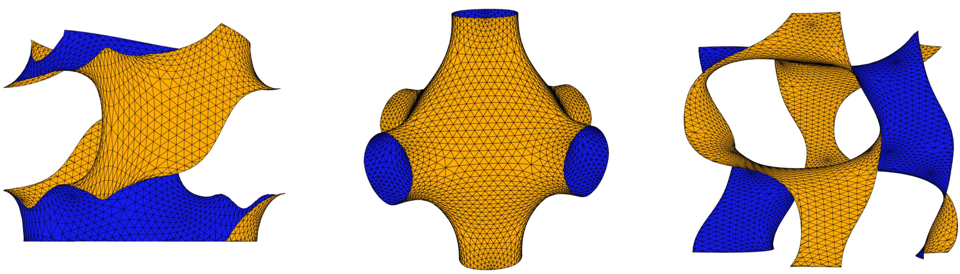
3. Результаты расчета подобия ТПМП типа P. Математические алгоритмы, описанные в разделах 1 и 2, реализованы в настоящей работе с помощью языка программирования `Python` и применены к описанному в разделе 1 набору поверхностей. Набор данных для обучения составил 51 экземпляр ТПМП типа P; 15 поверхностей из этого числа являются оригиналами поверхностей, полученных в работе [12]; 30 поверхностей представляют собой трансформированные версии этих оригиналов с помощью сдвига по осям X и Y, Y и Z на 40 % длины ребра, ограничивающего их объемы (рис. 3). В набор входят также построенные аналогичным образом две и четыре поверхности класса D соответственно. В табл. 1 указаны расстояния всех перечисленных поверхностей по отношению к поверхности LTA (или мера сходства с поверхностью LTA).

Стандартное отклонение для поверхностей класса P составляет 0.622. Из табл. 1 видно, что нулевое расстояние для всех P-поверхностей содержится в интервале, определяемом одним стандартным отклонением, за исключением поверхностей BRE и UEI. В доверительный интервал с 99 % вероятностью попало 13 из 14 поверхностей, в таком случае точность обучения составляет 92.8 %. Расстояние между UEI и LTA отклоняется от нулевого фактически на два стандартных отклонения. Поверхность BRE (рис. 4) геометрически сильно отличается от поверхности LTA и в пространстве дескрипторов лежит ближе к PON, то есть является близкой к D-классу. Использованные в работе

Таблица 1

Мера сходства $d(D_{LTA}, D_S)$ поверхности LTA и поверхностей классов P и D
[A measure of the similarity $d(D_{LTA}, D_S)$ of the LTA surface and P-, D-type surfaces]

Surface name, S	Surface type	$d(D_{LTA}, D_S)$
AWO	D	23.0039
PON	D	2.0651
ATN	P	0.3505
BCT	P	0.2301
BRE	P	2.0758
CGF	P	0.2069
EDI	P	0.3584
HEU	P	0.5163
ITW	P	0.5561
JSW	P	0.0541
LAU	P	0.5518
MER	P	0.1645
RHO	P	0.3159
SAS	P	0.1029
SOD	P	0.0779
UEI	P	1.2686



BRE LTA PON

Рис. 4. Визуальное сравнение поверхности LTA с поверхностями BRE и PON
[Figure 4. Visual comparison of the LTA surface with the BRE and PON surfaces]

поверхности представлены на сайте Porous 3D (`https://p3d.topcryst.com/software/`).

Заключение. В работе для описания ТПП построен дескриптор на основе собственных векторов и собственных значений оператора Бельтрами—Лапласа и совместной байесовской модели. В пространстве дескрипторов введена метрика на основе вероятностной меры сходства поверхностей. Построенная метрика позволяет математически сформулировать понятие близости поверхности. Работоспособность данной метрики была проверена на 51 поверхности класса P. Точность предсказания типа поверхности составила 92.8 %. Созданная модель машинного обучения позволяет определить принадлежность изучаемой поверхности неизвестного класса к классу P-поверхностей. Полученные результаты в совокупности с ранее введенными признаками дают возможность создания системы автоматического определения класса поверхности.

В данной работе на языке программирования `Python` были реализованы: алгоритм расчета собственных векторов и собственных значений оператора Лапласа—Бельтрами, алгоритм расчета изображения гистограммы поверхности, расчета дескриптора, основанного на мультивейвлетном разложении изображения гистограммы поверхности по базису V-системы; модель машинного обучения, основанная на принципе максимального правдоподобия в совместной байесовской модели.

Построенные и разработанные математические модели позволяют расширить список классов поверхностей для нахождения корреляций между тополого-геометрическими и некоторыми физическими свойствами поверхностей, в частности по отношению к рассеянию электромагнитных волн.

Конкурирующие интересы. Конкурирующих интересов не имею.

Авторская ответственность. Я несу полную ответственность за предоставление окончательной версии рукописи в печать. Окончательная версия рукописи мною одобрена.

Финансирование. Работа выполнена без финансирования.

Благодарность. Автор благодарит своего научного руководителя А. Ф. Крутова за неоценимую помощь в ходе выполнения данного исследования.

Библиографический список

1. Abueidda D. W., Al-Rub R. K. A., Dalaq A. S., et al. Effective conductivities and elastic moduli of novel foams with triply periodic minimal surfaces // *Mech. Mater.*, 2016. vol. 95. pp. 102–115. DOI: https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2016.01.004.
2. Maskery I., Sturm L., Aremu A. O., et al. Insights into the mechanical properties of several triply periodic minimal surface lattice structures made by polymer additive manufacturing // *Polymer*, 2018. vol. 152. pp. 62–71. DOI: https://doi.org/10.1016/j.polymer.2017.11.049.
3. Montazerian H., Davoodi E., Asadi-Eydivand M., et al. Porous scaffold internal architecture design based on minimal surfaces: a compromise between permeability and elastic properties // *Materials & Design*, 2017. vol. 126. pp. 98–114. DOI: https://doi.org/10.1016/j.matdes.2017.04.009.
4. Sadeghi F., Baniassadi M., Shahidi A., Baghani M. TPMS metamaterial structures based on shape memory polymers: Mechanical, thermal and thermomechanical assessment // *J. Mater. Res. Techn.*, 2023. vol. 23. pp. 3726–3743. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.02.014.
5. Yang W., An J., Kai Chua C., Zhou K. Acoustic absorptions of multifunctional polymeric cellular structures based on triply periodic minimal surfaces fabricated by stereolithography // *Virt. Phys. Prot.*, 2020. vol. 15, no. 2. pp. 242–249. DOI: https://doi.org/10.1080/17452759.2020.1740747.
6. Wang H., Tan D., Liu Z., et al. On crashworthiness of novel porous structure based on composite TPMS structures // *Eng. Struct.*, 2022. vol. 252, 113640. DOI: https://doi.org/10.1016/j.engstruct.2021.113640.
7. Saleh M., Anwar S., Al-Ahmari A. M., Alfaify A. Compression performance and failure analysis of 3D-printed carbon fiber/PLA composite TPMS lattice structures // *Polymers*, 2022. vol. 14, no. 21, 4595. DOI: https://doi.org/10.3390/polym14214595.
8. Al-Ketan O., Abu Al-Rub R. K. Multifunctional mechanical metamaterials based on triply periodic minimal surface lattices // *Adv. Eng. Mater.*, 2019. vol. 21, no. 10, 1900524. DOI: https://doi.org/10.1002/adem.201900524.
9. Мальцев В. П., Шатров А. Д. О трехкратном вырождении поверхностных волн в пластине из метаматериала // *Радиотехника и электроника*, 2012. Т. 57, № 2. С. 187–191. EDN: OPTDVH.

10. Mias C., Webb J. P., El-Esber L., Ferrari R. Finite element modelling of electromagnetic waves in doubly and triply periodic structures // *IEE Proc. Optoelectron.*, 2005. vol. 152, no. 5. DOI: https://doi.org/10.1049/ip-opt:20050007.
11. Смольков М. И., Крутов А. Ф. Разработка программного обеспечения для реализации модели пористых структур на основе трехпериодических поверхностей // *Физ. волн. проц. радиотехн. сист.*, 2022. Т. 25, № 1. С. 71–79. EDN: NMHCYK. DOI: https://doi.org/10.18469/1810-3189.2022.25.1.71-79.
12. Smolkov M. I., Blatova O. A., Krutov A. F., Blatov V. A. Generating triply periodic surfaces from crystal structures: the tiling approach and its application to zeolites // *Acta Crystal., Sect. A*, 2022. vol. 78, no. 4. pp. 327–336. EDN: DLGEKT. DOI: https://doi.org/10.1107/S2053273322004545.
13. Eremin A. V., Frolov M. A., Krutov A. F., et. al. Mechanical properties of porous materials based on new triply periodic and minimal surfaces // *Mech. Adv. Mater. Struct.*, 2024. vol. 31, no. 29. pp. 11320–11336. DOI: https://doi.org/10.1080/15376494.2024.2303724.
14. Alexandrov E. V., Blatov V. A., Proserpio D. M. A topological method for the classification of entanglements in crystal networks // *Acta Crystal., Sect. A*, 2012. vol. 68, no. 4. pp. 484–493. EDN: PDSSYB. DOI: https://doi.org/10.1107/S0108767312019034.
15. Blatov V. A., Alexandrov E. V., Shevchenko A. P. Topology: ToposPro / *Comprehensive Coordination Chemistry III.* vol. 2, Fundamentals: Characterization Methods, Theoretical Analysis, and Case Studies, 2021. pp. 389–412. EDN: FDMWRS. DOI: https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409547-2.14576-7.
16. Wang Z., Lin H. 3D shape retrieval based on Laplace operator and joint Bayesian model // *Visual Informatics*, 2020. vol. 4, no. 3. pp. 69–76. DOI: https://doi.org/10.1016/j.visinf.2020.08.002.
17. Chen D., Cao X., Wang L., et al. Bayesian face revisited: A joint formulation / *Computer Vision–ECCV 2012* / Lecture Notes in Computer Science, 7574. Springer: Berlin, Heidelberg, 2012. pp. 566–579. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-642-33712-3_41.
18. Schoen A. H. *Infinite Periodic Minimal Surfaces Without Self-Intersections*: NASA Technical Note (TN) D-5541, C-98. Cambridge, MA: NASA Electronics Research Center, 1970. https://ntrs.nasa.gov/citations/19700020472.
19. Reuter M., Wolter F. E., Peinecke N. Laplace–Beltrami spectra as 'Shape-DNA' of surfaces and solids // *Computer–Aided Design*, 2006. vol. 38, no. 4. pp. 342–366. DOI: https://doi.org/10.1016/j.cad.2005.10.011.
20. Sharp N., Crane K. A laplacian for nonmanifold triangle meshes // *Computer Graphics Forum*, 2020. vol. 39, no. 5. pp. 69–80. DOI: https://doi.org/10.1111/cgf.14069.
21. Virtanen P.,Gommers R., Oliphant T. E., et al. SciPy 1.0: Fundamental algorithms for scientific computing in Python // *Nature Methods*, 2020. vol. 17, no. 3. pp. 261–272. DOI: https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2.
22. Lévy B. Laplace–Beltrami eigenfunctions towards an algorithm that "understands" geometry / *IEEE International Conference on Shape Modeling and Applications 2006 (SMI'06).* Matsushima, Japan, 2006. pp. 13–13. DOI: https://doi.org/10.1109/SMI.2006.21.
23. Rustamov R. M. Laplace–Beltrami eigenfunctions for deformation invariant shape representation / *SGP07: Eurographics Symposium on Geometry Processing*, 257, 2007. pp. 225–233. DOI: https://doi.org/10.2312/SGP/SGP07/225-233.
24. Song R., Zhao Z., Wang X. The application of V-system in visualization of multidimensional data / *11th IEEE International Conference on Computer-Aided Design and Computer Graphics*. Huangshan, China, 2009. pp. 170–173. DOI: https://doi.org/10.1109/CADCG.2009.5246911.
25. Ma H., Qi D., Song R., Wang T. The complete orthogonal V-system and its applications // *Commun. Pure Appl. Anal.*, 2007. vol. 6, no. 3. pp. 853–871. DOI: https://doi.org/10.3934/cpaa.2007.6.853.
26. Song R., Wang X., Ou M., Li J. The structure of V-system over triangulated domains / *Advances in Geometric Modeling and Processing* / Lecture Notes in Computer

Science, 4975. Berlin, Heidelberg: Springer, 2008. pp. 563–569. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-540-79246-8_48.

27. Huang C., Yang L. H., Qi D. X. A new class of multi-wavelet bases: V-system // *Acta. Math. Sin., English Ser.*, 2012. vol. 28, no. 1. pp. 105–120. DOI: https://doi.org/10.1007/s10114-012-9424-8.

Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki
[J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2025, vol. 29, no. 1, pp. 158–173
ISSN: 2310-7081 (online), 1991-8615 (print) https://doi.org/10.14498/vsgtu2105

MSC: 68T05, 58J50, 53A10

Triply periodic surface description using Laplace–Beltrami operator and a statistical machine learning model

M. I. Smolkov

Samara State Technical University,
244, Molodogvardeyskaya st., Samara, 443100, Russian Federation.

Abstract

Triply periodic surfaces (TPS) and their minimal analogs (TPMS) are currently widely used in various fields, including mechanics, biomechanics, aerodynamics, hydrodynamics, and radiophysics. In this context, the problem of establishing correlations between the topological and geometric properties of surfaces and their physical characteristics arises. To address this problem, it is necessary to introduce a measure of similarity between surfaces with different topological and geometric features. This work focuses on describing TPS and TPMS in terms of a specific metric space of descriptors. The problem is solved using the mathematical framework of image recognition theory. A descriptor is constructed based on a set of eigenvectors and eigenvalues of the Beltrami–Laplace operator and a joint Bayesian model. A metric based on a probabilistic measure of surface similarity is introduced in the descriptor space. The effectiveness of the method developed in this work has been tested on 51 surfaces of class P. The accuracy of predicting the surface type is 92.8 %. The developed machine learning model enables the determination of whether a given surface belongs to the class of P-surfaces.

Keywords: topological structure, discrete analog of the Laplace–Beltrami equation, eigenvectors, eigenvalues, Bayesian probabilities, probabilistic similarity measure.

Received: 24th July, 2024 / Revised: 19th February, 2025 /
Accepted: 21st February, 2025 / First online: 10th March, 2025

Mathematical Modeling, Numerical Methods and Software Complexes
Research Article

Please cite this article in press as:
Smolkov M. I. Triply periodic surface description using Laplace–Beltrami operator and a statistical machine learning model, *Vestn. Samar. Gos. Tekhn. Univ., Ser. Fiz.-Mat. Nauki* [J. Samara State Tech. Univ., Ser. Phys. Math. Sci.], 2025, vol. 29, no. 1, pp. 158–173. EDN: ENXAZE. DOI: 10.14498/vsgtu2105 (In Russian).

Author's Details:
Mikhail I. Smolkov https://orcid.org/0000-0001-5573-662X
Postgraduate Research Student; Junior Researcher; International Research Center for Theoretical Materials Science; e-mail: m.smolkov97@gmail.com

Competing Interests. The author declares no competing interests.

Author's Responsibility. The author takes full responsibility for submitting the final version of the manuscript for publication. The final version of the manuscript has been approved by the author.

Funding. This work was conducted without any funding.

Acknowledgments. The author expresses gratitude to their scientific advisor, A. F. Krutov, for invaluable assistance during the course of this research.

References

1. Abueidda D. W., Al-Rub R. K. A., Dalaq A. S., et al. Effective conductivities and elastic moduli of novel foams with triply periodic minimal surfaces, *Mech. Mater.*, 2016, vol. 95, pp. 102–115. DOI: https://doi.org/10.1016/j.mechmat.2016.01.004.
2. Maskery I., Sturm L., Aremu A. O., et al. Insights into the mechanical properties of several triply periodic minimal surface lattice structures made by polymer additive manufacturing, *Polymer*, 2018, vol. 152, pp. 62–71. DOI: https://doi.org/10.1016/j.polymer.2017.11.049.
3. Montazerian H., Davoodi E., Asadi-Eydivand M., et al. Porous scaffold internal architecture design based on minimal surfaces: a compromise between permeability and elastic properties, *Materials & Design*, 2017, vol. 126, pp. 98–114. DOI: https://doi.org/10.1016/j.matdes.2017.04.009.
4. Sadeghi F., Baniassadi M., Shahidi A., Baghani M. TPMS metamaterial structures based on shape memory polymers: Mechanical, thermal and thermomechanical assessment, *J. Mater. Res. Techn.*, 2023, vol. 23, pp. 3726–3743. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2023.02.014.
5. Yang W., An J., Kai Chua C., Zhou K. Acoustic absorptions of multifunctional polymeric cellular structures based on triply periodic minimal surfaces fabricated by stereolithography, *Virt. Phys. Prot.*, 2020, vol. 15, no. 2, pp. 242–249. DOI: https://doi.org/10.1080/17452759.2020.1740747.
6. Wang H., Tan D., Liu Z., et al. On crashworthiness of novel porous structure based on composite TPMS structures, *Eng. Struct.*, 2022, vol. 252, 113640. DOI: https://doi.org/10.1016/j.engstruct.2021.113640.
7. Saleh M., Anwar S., Al-Ahmari A. M., Alfaify A. Compression performance and failure analysis of 3D-printed carbon fiber/PLA composite TPMS lattice structures, *Polymers*, 2022, vol. 14, no. 21, 4595. DOI: https://doi.org/10.3390/polym14214595.
8. Al-Ketan O., Abu Al-Rub R. K. Multifunctional mechanical metamaterials based on triply periodic minimal surface lattices, *Adv. Eng. Mater.*, 2019, vol. 21, no. 10, 1900524. DOI: https://doi.org/10.1002/adem.201900524.
9. Mal'tsev V. P., Shatrov A. D. Triply degenerate surface waves in the metamaterial plate, *J. Commun. Technol. Electron.*, 2012, vol. 57, no. 2, pp. 170–173. DOI: https://doi.org/10.1134/S1064226912010111.
10. Mias C., Webb J. P., El-Esber L., Ferrari R. Finite element modelling of electromagnetic waves in doubly and triply periodic structures, *IEE Proc. Optoelectron.*, 2005, vol. 152, no. 5. DOI: https://doi.org/10.1049/ip-opt:20050007.
11. Smolkov M. I., Krutov A. F. Software development for implementing a model of porous structures based on three periodic surfaces, *Phys. Wave Proces. Radio Systems*, 2022, vol. 25, no. 1, pp. 71–79 (In Russian). EDN: NMHCYK. DOI: https://doi.org/10.18469/1810-3189.2022.25.1.71-79.
12. Smolkov M. I., Blatova O. A., Krutov A. F., Blatov V. A. Generating triply periodic surfaces from crystal structures: the tiling approach and its application to zeolites, *Acta Crystal., Sect. A*, 2022, vol. 78, no. 4, pp. 327–336. EDN: DLGEKT. DOI: https://doi.org/10.1107/S2053273322004545.

13. Eremin A. V., Frolov M. A., Krutov A. F., et. al. Mechanical properties of porous materials based on new triply periodic and minimal surfaces, *Mech. Adv. Mater. Struct.*, 2024, vol. 31, no. 29, pp. 11320–11336. DOI: https://doi.org/10.1080/15376494.2024.2303724.
14. Alexandrov E. V., Blatov V. A., Proserpio D. M. A topological method for the classification of entanglements in crystal networks, *Acta Crystal., Sect. A*, 2012, vol. 68, no. 4, pp. 484–493. EDN: PDSSYB. DOI: https://doi.org/10.1107/S0108767312019034.
15. Blatov V. A., Alexandrov E. V., Shevchenko A. P. Topology: ToposPro, In: *Comprehensive Coordination Chemistry III*, vol. 2, Fundamentals: Characterization Methods, Theoretical Analysis, and Case Studies, 2021, pp. 389–412. EDN: FDMWRS. DOI: https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409547-2.14576-7.
16. Wang Z., Lin H. 3D shape retrieval based on Laplace operator and joint Bayesian model, *Visual Informatics*, 2020, vol. 4, no. 3, pp. 69–76. DOI: https://doi.org/10.1016/j.visinf.2020.08.002.
17. Chen D., Cao X., Wang L., et al. Bayesian face revisited: A joint formulation, In: *Computer Vision–ECCV 2012*, Lecture Notes in Computer Science, 7574. Springer, Berlin, Heidelberg, 2012, pp. 566–579. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-642-33712-3_41.
18. Schoen A. H. *Infinite Periodic Minimal Surfaces Without Self-Intersections*, NASA Technical Note (TN) D-5541, C-98. Cambridge, MA, NASA Electronics Research Center, 1970. https://ntrs.nasa.gov/citations/19700020472.
19. Reuter M., Wolter F. E., Peinecke N. Laplace–Beltrami spectra as 'Shape-DNA' of surfaces and solids, *Computer–Aided Design*, 2006, vol. 38, no. 4, pp. 342–366. DOI: https://doi.org/10.1016/j.cad.2005.10.011.
20. Sharp N., Crane K. A laplacian for nonmanifold triangle meshes, *Computer Graphics Forum*, 2020, vol. 39, no. 5, pp. 69–80. DOI: https://doi.org/10.1111/cgf.14069.
21. Virtanen P.,Gommers R., Oliphant T. E., et al. SciPy 1.0: Fundamental algorithms for scientific computing in Python, *Nature Methods*, 2020, vol. 17, no. 3, pp. 261–272. DOI: https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2.
22. Lévy B. Laplace–Beltrami eigenfunctions towards an algorithm that "understands" geometry, In: *IEEE International Conference on Shape Modeling and Applications 2006 (SMI'06)*. Matsushima, Japan, 2006, pp. 13–13. DOI: https://doi.org/10.1109/SMI.2006.21.
23. Rustamov R. M. Laplace–Beltrami eigenfunctions for deformation invariant shape representation, In: *SGP07: Eurographics Symposium on Geometry Processing*, 257, 2007, pp. 225–233. DOI: https://doi.org/10.2312/SGP/SGP07/225-233.
24. Song R., Zhao Z., Wang X. The application of V-system in visualization of multidimensional data, In: *11th IEEE International Conference on Computer-Aided Design and Computer Graphics*. Huangshan, China, 2009, pp. 170–173. DOI: https://doi.org/10.1109/CADCG.2009.5246911.
25. Ma H., Qi D., Song R., Wang T. The complete orthogonal V-system and its applications, *Commun. Pure Appl. Anal.*, 2007, vol. 6, no. 3, pp. 853–871. DOI: https://doi.org/10.3934/cpaa.2007.6.853.
26. Song R., Wang X., Ou M., Li J. The structure of V-system over triangulated domains, In: *Advances in Geometric Modeling and Processing*, Lecture Notes in Computer Science, 4975. Berlin, Heidelberg, Springer, 2008, pp. 563–569. DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-540-79246-8_48.
27. Huang C., Yang L. H., Qi D. X. A new class of multi-wavelet bases: V-system, *Acta. Math. Sin., English Ser.*, 2012, vol. 28, no. 1, pp. 105–120. DOI: https://doi.org/10.1007/s10114-012-9424-8.