

## ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о диссертационной работе Балякина Ильи Александровича

### ПОТЕНЦИАЛЫ ГЛУБОКОГО МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ НЕУПОРЯДОЧЕННЫХ СИСТЕМ: ПРИМЕНИМОСТЬ, ПЕРЕНОСИМОСТЬ, ПРЕДСКАЗАТЕЛЬНАЯ СПОСОБНОСТЬ

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности

#### 1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Балякин Илья Александрович в 2016 г. с отличием закончил бакалавриат ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по направлению 11.03.04 Электроника и наноэлектроника, в 2018 г. с отличием закончил магистратуру ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по направлению 11.04.04 Электроника и наноэлектроника, в ходе учебы неоднократно награждался знаком «Отличник учебы».

После окончания магистратуры Балякин И.А. продолжил обучение в очной аспирантуре ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина». В период обучения в аспирантуре Балякин И.А. был удостоен ряда стипендий за свою научно-исследовательскую деятельность: стипендии Губернатора Свердловской области, стипендии Правительства Российской Федерации, стипендии Президента Российской Федерации, стипендии Правительства Российской Федерации по приоритетным направлениям, стипендии Президента Российской Федерации по приоритетным направлениям. Диплом об окончании аспирантуры с приложением к нему выдан в 2022 году, Балякин И.А. включен в список 100 лучших выпускников УрФУ 2022 года.

Параллельно с обучением в магистратуре и аспирантуре Балякин И.А. осуществлял научно-исследовательскую деятельность в лаборатории нестехиометрических соединений ФГБУН ИХТТ УрО РАН (инженер 2016 – 2018 г., младший научный сотрудник 2018 – 2020 г.), НОЦ НАНОТЕХ УрФУ (инженер 2017 г., инженер-исследователь 2018 – 2019 г. и 2020 г. – 2022 г., младший научный сотрудник 2022 г. – н.в.), на кафедре ФМПК УрФУ (программист 2019 – 2020 г.), в лаборатории высокоэнтропийных сплавов ФГБУН ИМЕТ УрО РАН (младший научный сотрудник 2018 г. – н.в.).

Тематика научно-исследовательской работы Балякина И.А. тесно связана с атомистическим моделированием неупорядоченных систем: жидкостей, стёкол, неупорядоченных твердых растворов. При атомистическом моделировании такого рода систем зачастую возникает проблема соотношения «точность/производительность». Решение данной проблемы, то есть возможность проводить высокоточные и высокоскоростные атомистические расчеты, кроется в использовании межчастичных потенциалов машинного обучения – нового и активно развивающегося подхода в вычислительном материаловедении и физике конденсированного состояния. Тем не менее, ряд важных вопросов применимости, переносимости и предсказательной способности данных потенциалов не был раскрыт в литературе. В своей диссертационной работе Балякин И.А. исследует данные вопросы для потенциалов глубокого машинного обучения на примере трёх практически важных систем: бинарная система  $\text{Vi-Ga}$ , стеклообразующая система  $\text{SiO}_2$ , высокоэнтропийная система  $\text{TiZrHfNbTa-H}$ .

Для всех рассмотренных систем на основе DFT расчетов были созданы межчастичные потенциалы глубокого машинного обучения (модель DeePMD). Данные



потенциалы были тщательно верифицированы по DFT расчетам и известным литературным экспериментальным и теоретическим данным.

В ходе диссертационного исследования впервые методом молекулярно-динамического моделирования с потенциалом глубокого машинного обучения исследовано расслоение в бинарном расплаве Bi-Ga. Предложена модель, основанная на топологии многогранников Вороного, позволившая адекватно описать энергию расплавов системы Bi-Ga при различных температурах и составах.

Также, в ходе работы удалось установить, что структура расплава диоксида кремния содержит фрагменты всех известных кристаллических тетраэдрических фаз SiO<sub>2</sub> при низком давлении и кристаллических октаэдрических фаз SiO<sub>2</sub> при высоком давлении. Это проявилось в том, что с использованием полученного в работе межчастичного нейросетевого потенциала, обученного только на конфигурациях, соответствующих жидкости, удалось воспроизвести с DFT точностью уравнения состояния и плотности колебательных состояний для всех рассмотренных в работе кристаллических фаз SiO<sub>2</sub> (9 тетраэдрических и 2 октаэдрических).

Помимо этого, в работе продемонстрирована применимость потенциалов глубокого машинного обучения к системам с высокой размерностью конфигурационного пространства, в частности, к высокоэнтропийным сплавам. Полученный в работе потенциал был применен к задаче описания поведения атомарного водорода в решетке ОЦК TiZrHfNbTa. Так, например, было обнаружено, что наиболее энергетически выгодное положение атомов водорода в такой решетке – тетраэдрические междоузлия, обогащенные титаном.

За время работы над диссертационной работой Балякин И.А. проявил себя активным и грамотным исследователем, способным успешно и эффективно решать поставленные задачи. Им были освоены широкий ряд методик и профессиональных программных пакетов, необходимых для проведения высококачественных атомистических расчетов.

По теме диссертации опубликовано 10 работ в научных изданиях, входящих в международные реферативные базы данных и системы цитирования, и 11 тезисов материалов докладов на международных и всероссийских конференциях.

Считаю, что диссертационная работа соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор Балякин Илья Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния.

02.06.2023

Научный руководитель:  
Ремпель Андрей Андреевич  
академик РАН, профессор,  
доктор физико-математических наук,  
директор ФГБУН Институт металлургии  
Уральского отделения Российской  
академии наук  
620016, Екатеринбург, ул. Амундсена 101,  
Тел: +7(343)232 91 09  
e-mail: [rempel.imet@mail.ru](mailto:rempel.imet@mail.ru)

Подпись Ремпеля Андрея Андреевича  
заверяю:  
Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН,  
кандидат химических наук  
Котенков Павел Валерьевич

