

## ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Балякина Ильи Александровича

«Потенциалы глубокого машинного обучения для неупорядоченных систем: применимость, переносимость, предсказательная способность», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния»

Предсказание свойств материалов на основе фундаментальных физико-химических законов является проблемой, привлекающей внимание ученых всего мира. Несмотря на ограниченную точность современных вычислительных методов, их результаты позволяют значительно ускорить процесс поиска новых материалов, обладающих требуемыми свойствами. Это достигается посредством выявления механизмов, действующих на молекулярном уровне, и влияющих на свойства материалов, а с другой стороны, охватом более широкого круга веществ за счет автоматизации процесса перебора вариантов. Разработка методов и подходов, позволяющих прогнозировать свойства материалов исходя из их химического состава, является стратегическим направлением развития современного материаловедения.

Работа Балякина И.А. безусловно актуальна, т.к. связана с решением одной из ключевых задач, затрудняющей прогресс в данной области, – использование точных результатов, полученных для системы, электронов и атомных ядер (модели 1-го уровня), в моделях для которых наименьшими частицами являются атомы или молекулы (модели 2-го уровня). Модели 1-го уровня обладают высокой точностью и универсальностью, т.к. непосредственно описывают химические связи, а модели 2-го уровня за счет больших размеров позволяют перейти к нахождению свойств материалов. До недавнего времени осуществить качественный перенос данных между моделями разных уровней не удавалось из-за чрезвычайной сложности возникающих зависимостей. Решение этой проблемы оказалось возможным только с применением методов машинного обучения и использовании глубоких нейронных сетей. В данной работе систематически изучается надежность процесса переноса данных между указанными моделями. Нужно отметить, полноту проведенного исследования, включающего абсолютно разные классы веществ, разные агрегатные состояния, в том числе и фазовые переходы.

В первой главе диссертант приводит краткое описание методик моделирования 1-го и 2-го уровней. Большое внимание уделено аналитическим моделям, описывающим электронную плотность, показана их ограниченность, ненадежность

для многокомпонентных систем. В последнем разделе описан современный подход, который заключается в построении нейронной сети, которая тренируется на моделях 1-го уровня, а затем используется как единый вычислительный блок в моделях 2-го уровня.

Во второй главе более подробно описана методика переноса данных между моделями и методика верификации результатов. Вначале описан процесс тренировки нейронной сети, надлежащего выбора параметров и контроля качества результата обучения. Приведена методика использования потенциала машинного обучения в моделях 2-го уровня и способы сопоставления данных между моделями разных уровней. Также в этой главе приведены методики получения структурных и кинетических характеристик в моделях 2-го уровня, которые допускают сравнение с результатами экспериментов.

В третьей главе проведено построение потенциала и изучение свойств системы Bi-Ga. Показано, что потенциалы машинного обучения, полученные для этой системы, позволяют проводить успешное моделирование структурных, реологических и термодинамических свойств, включая расслоение системы в жидкой фазе. Данная методика показывает высокую предсказательную способность для систем из широкого диапазона температур, плотностей, и концентраций.

В четвертой главе изучаются сеткообразующие системы на примере  $\text{SiO}_2$ . Трудности классических подходов для таких систем связаны с изменением направленности и насыщенности химических связей при изменении термодинамических условий. В данной работе показано, что потенциалы машинного обучения, натренированные на моделях расплава, успешно справляются с задачей описания различных фаз и одинаково хорошо воспроизводят структуру как жидкости так и различных кристаллических модификаций  $\text{SiO}_2$ .

В пятой главе построен потенциал машинного обучения для высокоэнтропийного сплава  $\text{TiZrHfNbTa}$  и изучена диффузия водорода в этом материале. Показано, что многокомпонентные системы также можно успешно рассматривать в рамках данного подхода. При этом статические и динамические характеристики моделей 1 и 2 уровней практически совпадают. Модель второго уровня, содержащая больше атомов, позволяет находить практически важные параметры, такие как коэффициенты диффузии водорода и отдельных компонентов, модуль всестороннего сжатия.

В заключении сформулированы выводы по диссертации. Список литературы содержит 179 наименований и охватывает ключевые работы по выбранному

направлению. Автореферат включает необходимые сведения о диссертации и соответствует её содержанию. Сама диссертационная работа структурирована, содержит требуемые формальные разделы, в достаточной степени иллюстрирована и дает полное представление о проведенных исследованиях и их результатах.

Результаты, представленные И.А. Балякиным в своей работе, обладают научной новизной. Впервые проведено систематическое исследование качества потенциалов машинного обучения для систем различной природы, находящихся в различных термодинамических условиях. Это позволяет увидеть универсальность подхода и оценить его надежность. Представляют интерес и результаты, полученные для конкретных систем: диаграмма расслоения жидкой фазы в системе  $\text{Bi-Ga}$ , вязкость расплава  $\text{Bi-Ga}$  для разных температур и составов, коэффициенты диффузии водорода в высокоэнтропийном сплаве  $\text{TiZrHfNbTa}$ . Достоверность полученных результатов обоснована использованием проверенных методик моделирования, обработкой достаточного количества статистической информации, и непротиворечивостью их данным различных источников. Следует отметить, что личный вклад автора диссертации в проделанную работу не вызывает сомнения.

В качестве замечания к работе могу отметить лишь небольшое количество информации для оценки производительности предложенного подхода. Для более полного использования материала диссертации хотелось бы видеть сводную информацию по времени расчета и компьютерным ресурсам, необходимым для проведения каждого этапа моделирования в системах с различной природой химической связи. Сложно понять, какого ускорения удастся достичь при использовании потенциалов машинного обучения в сравнении с первопринципными методами, и каких накладных расходов, в виде времени, затрачиваемого на построение потенциала, это требует.

Так же есть ряд опечаток и неточностей.


1. Стр. 14. В формуле 1.1 не должно быть знака «минус».
2. Стр. 15. Последнее слагаемое в формуле 1.3 определяет взаимодействие ионов, которое обычно не относят к «N-электронной подсистеме».
3. Стр. 16. В формуле 1.4. применены обозначения, требующие пояснений.
4. Стр. 73. Для рисунка 4.1 (фазовой диаграммы системы  $\text{SiO}_2$ ) нужно указать ссылку на источник.

Представленные материалы исследований имеют достаточно хороший уровень верификации и апробации. Труды Балякина И.А. представлены в виде статей в рецензируемых научных журналах, имеющих высокий импакт-фактор и включенных в

реферативные базы данных и системы цитирования Web of Science и Scopus (10 работ), материалы докладывались на международных и российских конференциях самого высокого уровня.

Заключение: Балякин Илья Александрович представил к защите законченную научно-квалификационную работу, в которой решена важная задача проверки надежности и универсальности потенциалов машинного обучения, полученных для систем разной химической природы, находящихся в различных термодинамических условиях. На основании изложенного можно заключить, что диссертационная работа «Потенциалы глубокого машинного обучения для неупорядоченных систем: применимость, переносимость, предсказательная способность» соответствует научной специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния» и удовлетворяет требованиям к кандидатским диссертациям, установленным в п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, а её автор, Балякин Илья Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния».

Заведующий кафедрой "Физика наноразмерных систем"  
ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет  
(национальный исследовательский университет)»,  
доктор физико-математических наук, доцент

  
Воронцов  
Александр Геннадьевич  
11.09.2023

454080, Россия, г. Челябинск, проспект Ленина 76  
e-mail: vorontsovag@susu.ru

Подпись Воронцова А.Г. заве



ВЕРНО  
Начальник службы  
делопро  
водства

