

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Балякина Ильи Александровича на тему «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.

Актуальность темы диссертации обусловлена большой востребованностью в разработке методов компьютерного моделирования, способных с достаточной надежностью предсказывать структуру и свойства новых материалов или оптимизировать параметры технологических процессов. Существующие потребности стимулировали активное развитие этого направления, которое получило название «Вычислительное материаловедение». В традиционно развиваемых подходах Вычислительное материаловедение включает методы моделирования различного масштабного уровня, использование которых дает возможность установить фундаментальные закономерности, определяющие свойств материалов. Однако в последние годы особую популярность приобрёл другой подход, использующий большие массивы данных и методы искусственного интеллекта, реализованные в схемах машинного обучения. Использование этих методов позволяет дать надёжное предсказание свойств сложных реальных объектов и является весьма востребованным в современном материаловедении. Именно развитию такого направления и его применению к исследованию конкретных сплавов и соединений посвящена диссертация И. А. Балякина, тема которой является, несомненно, новой и актуальной.

Диссертационная работа состоит из пяти глав, введения и заключения. Во введении обоснована актуальность исследования, сформулированы задачи работы и положения, выносимые на защиту, обсуждаются новизна и значимость. **В первой главе** дается обзор известных межатомных

потенциалов, проводится сравнение классических (парных, многочастичных) потенциалов и современных потенциалов машинного обучения.

Во второй главе дано описание методов, использованных в данной работе для получения баз данных, необходимых для построения и тренировки DeePMD потенциалов машинного обучения, а также их использования для МД моделирования рассматриваемых систем.

В третьей главе представлены результаты исследования бинарной системы Bi-Ga в жидком состоянии. Описана процедура активного машинного обучения DeePMD-потенциала для Bi-Ga и его верификации по структурным и кинетическим характеристикам. С использованием построенного DeePMD-потенциала впервые проведен статистически значимый расчет температурной зависимости вязкости для жидких металлов Bi и Ga. Следует отметить, что использование DeePMD-потенциала также впервые позволило получить расслоение в системе Bi-Ga в жидком состоянии. Предложена модель, позволяющая параметризовать энергию расплавов системы Bi-Ga в виде разложения по вкладам с различной топологией связей.

В четвертой главе приведены результаты исследования стеклообразующей системы SiO₂. Описана процедура обучения DeePMD-потенциала рассматриваемой системы и его верификации для по структурным и кинетическим свойствам. На примере SiO₂ продемонстрирована «жидкость – кристалл» переносимость построенного DeePMD-потенциала. Рассчитаны уравнения состояния, автокорреляционные функции скорости и колебательные спектры для 9 тетраэдрических и 2 октаэдрических кристаллических фаз SiO₂. Продемонстрирована возможность прогнозирования устойчивых кристаллических фаз SiO₂ путем комбинации эволюционного алгоритма USPEX и DeePMD-модели, обученной только на жидкости. В частности показано, что при давлении 10 ГПа самой стабильной фазой является стишовит, что соответствует эксперименту.

В пятой главе рассмотрено применение развиваемого подхода к рассмотрению систем с высокой размерностью конфигурационного пространства, а именно – к исследованию высокоэнтропийного сплава (ВЭС) TiZrHfNbTa. Методом активного обучения построен потенциал для сплава TiZrHfNbTa-H, содержащего водород. Показано, что потенциал дает значения постоянной решетки TiZrHfNbTa, парциальных коэффициентов самодиффузии и модуля всестороннего сжатия близкие к известным литературным данным. Новые интересные результаты получены при моделировании диффузии водорода: коэффициент диффузии водорода следует Аррениусовской зависимости с необычно большим значением энергии активации 0.27 эВ, что обусловлено высокой энергией связи водорода в междоузлии, содержащем Ti.

В заключении приведены основные результаты и выводы работы, предложены рекомендации по дальнейшей разработке темы.

Научная новизна полученных результатов. Привлекательной особенностью диссертационной работы И. А. Балякина является комплексное исследование, включающее построение межатомных потенциалов глубокого машинного обучения (DeePMD), их верификацию и использование для моделирования структуры и свойств сложных реальных систем. В качестве объектов рассмотрены сплавы и соединения, моделирование которых не может быть с достаточной надежностью проведено традиционными методами, а использование развиваемого подхода позволило получить ряд новых интересных результатов. Среди них следует особо отметить (i) расслоение в бинарных металлических расплавах Bi-Ga, (ii) построение и параметризацию координационной и топологической моделей сплава Bi-Ga, (iii) прогнозирование устойчивых кристаллических фаз в система SiO₂ путем комбинации эволюционного алгоритма USPEX и DeePMD-модели и (iv) роль локальной координации в диффузии водорода в высокоэнтропийном сплаве TiZrHfNbTa.

Достоверность и обоснованность результатов обеспечена использованием апробированных программных пакетов (VASP, DP-GEN, DeePMD, LAMMPS, LiquidLib, USPEX), методик численного моделирования (активное машинное обучение, теория функционала плотности, DeePMD-модель, молекулярная динамика), надежной верификацией построенных DeePMD-потенциалов и хорошим согласием результатов моделирования с имеющимися экспериментальными данными и расчетами других авторов.

Практическая значимость результатов работы заключается, в первую очередь в построении межчастичных нейросетевых потенциалов для ряда практически важных систем: Bi-Ga, SiO₂, TiZrHfNbTa-H. Эти потенциалы описывают как свойства расплава, так и кристаллических фаз и могут быть востребованы в других исследовательских группах, занимающихся атомистическим моделированием. Их использование открывает возможность изучения ряда явлений (расслоение в расплаве, диффузия в высокоэнтропийных сплавах), моделирование которых недоступно в рамках традиционных подходов. В частности, возможность предсказывать новые кристаллические структуры обладая информацией только о жидком состоянии является важным методологическим результатом, имеющим важное практическое значение.

Замечания и вопросы:

1. Для построения и тренировки потенциалов использовались *ab initio* расчеты. Из текста диссертации не ясно, как строилась расчетная ячейка, каков ее размер и расположение в ней атомов.
2. Результаты для SiO₂ приведены для двух потенциалов LP-DeePMD и HP-DeePMD, отличающихся учетом (в случае HP-DeePMD) конфигураций высокого давления. Как выбирались такие конфигурации и что они из себя представляют?
3. Представленные в работе результаты по исследованию распада в системе Bi-Ga получены при довольно быстром охлаждении. Изменяются ли выводы

если рассматривать распад в процессе изотермической выдержки (отжига)?
Чем обусловлено расхождение рассчитанной кривой расслоения (Рис 3.12) с экспериментом?

Данные замечания не снижают общий высокий уровень диссертационной работы и не ставят под сомнение полученные в ней результаты и выводы. В целом, диссертация написана хорошим языком, что свидетельствует о высокой квалификации автора. Автореферат в полной мере отражает содержание диссертационной работы. Результаты опубликованы в ведущих российских и зарубежных журналах, а также многократно докладывались И.А. Балякиным на международных и российских конференциях.

Заключение по работе. Диссертационная работа Балякина Илья Александровича «Потенциалы глубокого машинного обучения для неупорядоченных систем: применимость, переносимость, предсказательная способность» является завершённым научным трудом, который полностью удовлетворяет требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор Балякин Илья Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидат физико-математических наук по специальности 1.3.8. - Физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник,
лаборатория цветных сплавов

ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского
отделения Российской академии наук

Тел.: 378-35-21, +7-922-141-51-47

e-mail: yug@imp.uran.ru

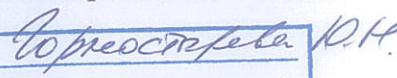
Адрес: 620137, г. Екатеринбург, ул. С.Ковалевской, 18


(Подпись)

18.09.23
(дата)

Горностырёв Юрий Николаевич

Подпись
заведующего



Заведующий ИФМ УрО РАН
И.Ю. Арапова
2023 г.