

## ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ

Балякина Ильи Александровича на тему «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»

Создание потенциалов межатомного взаимодействия, позволяющих обеспечить высокую точность и значительную скорость расчетов, является необходимым условием реализации моделирования процессов на атомарном уровне. Одним из наиболее перспективных на данный момент подходов является использование потенциалов межатомного взаимодействия на основе искусственных нейронных сетей (ИНС-потенциалы). При этом существует ряд вопросов, касающихся разработки и применения ИНС-потенциалов, например, при моделировании топологически-неупорядоченных (жидкостей, стёкол) и химически неупорядоченных систем (например, высокоэнтропийных сплавов). Таким образом, диссертационная работа Ильи Александровича, посвященная исследованию применимости, предсказательной способности и переносимости ИНС-потенциалов для систем с топологическим и химическим беспорядком на примере систем Bi-Ga, SiO<sub>2</sub>, TiZrHfNbTa-H, является весьма актуальной.

Значительное внимание в диссертации Балякина И.А. уделено вопросам оптимизации разработки и оценке применимости, предсказательной способности и переносимости ИНС-потенциалов для интересных с точки зрения физики конденсированного состояния систем Bi-Ga, SiO<sub>2</sub> и TiZrHfNbTa-H. За счет использования ИНС-потенциалов на примере системы Bi-Ga в работе показана возможность расчета вязкости расплавов в широком интервале температур с недоступной ранее точностью, что подтверждается сравнением с приведенными в работе экспериментальными данными. На примере высокоэнтропийной системы TiZrHfNbTa-H авторами показана высокая точность ИНС-потенциалов при моделировании сложных для традиционных многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия многокомпонентных систем.

Положения, выносимые на защиту, четко сформулированы, содержат важные теоретические данные.

Материалы диссертации опубликованы в 10 изданиях, входящих в базы данных Web of Science и Scopus. Полученные результаты были доложены на всероссийских и международных научных конференциях.

К диссертационной работе имеются следующие вопросы:

- 1) В автореферате указано, что для системы  $\text{SiO}_2$  исследовался вопрос влияния размеров тренировочной ячейки. Оценивалось ли влияние размера тренировочной ячейки и для других систем?
- 2) При моделировании диффузии в системе  $\text{TiZrHfNbTa-H}$  вносились ли в модельные образцы точечные дефекты (вакансии, межузельные атомы) или использовались идеальные (бездефектные) модельные образцы?

В целом диссертация представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, характеризующуюся актуальностью, существенной научной новизной и практической значимостью. Работа соответствует паспорту специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния и требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней УрФУ, а ее автор, Балякин Илья Александрович, достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 - «Физика конденсированного состояния».

Я, Жеребцов Сергей Валерьевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Жеребцов Сергей Валерьевич

Профессор кафедры материаловедения и нанотехнологий НИУ БелГУ,  
доктор технических наук (05.16.01 – Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов), доцент

С.В. Жеребцов

Почтовый адрес: 308015, г. Белгород, ул. Победы 85; тел.: +7(4722)585416; Эл. почта: zherebtsov@bsu.edu.ru

