

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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

Диссертация Балякина И. А. посвящена исследованию применимости, предсказательной способности и переносимости потенциалов молекулярной динамики на основе искусственных нейронных сетей для систем с топологическим и химическим беспорядком на примере Bi-Ga, SiO₂ и TiZrHfNbTa-H. Показано, что параметризованные с помощью полученных автором тренировочных наборов потенциалы позволяют моделировать атомную динамику и воспроизводить свойства систем с *ab-initio* точностью. При этом, допустимые длины траекторий позволяют найти вязкость в чистых Bi и Ga, описать расслоение в монотектическом сплаве Bi-Ga. Выполнена верификация потенциала для SiO₂, натренированного на жидкости, и с помощью связки с алгоритмом поиска устойчивых фаз с высокой точностью определены параметры найденных кристаллических фаз. Получено значительное количество методических данных для применения новой технологии получения потенциалов для высокоэнтропийных сплавов со значительной химической неоднородностью на примере TiZrHfNbTa. Найдена температурная зависимость коэффициента диффузии водорода в ОЦК решетке данного сплава. Высокая актуальность работы обусловлена интенсивным развитием имеющихся инструментов и подходов, связанных с искусственными нейронными сетями, а также детальной методической проработкой подходов к новым, весьма непростым системам. Полученные результаты имеют как методическую, так и научную ценность.

Среди представленных результатов стоит отметить важный результат, полученный при моделировании SiO₂ системы и отсылающий к принципу структурного наследования свойств жидкости в ряде возможных твердых фаз. Показано, что, для предсказания свойств конкретных кристаллических структур и их существования может быть достаточно структурных данных и информации о силах взаимодействия, полученных при исследовании жидкой фазы. Этот результат может позволить расширить применение нейросетевых потенциалов в молекулярной динамике на кристаллизацию неравновесных систем и может позволить значительно повысить точность и предсказательную способность молекулярной динамики.

В части, посвященной расслоению в монотектическом сплаве Bi₃₀Ga₇₀, при охлаждении до 300 К, значительный интерес представляет скорость охлаждения в расчетном домене, тем не менее, данного параметра в автореферате не приведено. Создаваемые при данном переохлаждении колоссальные движущие силы действительно могли привести к сепарации L2 фазы Галлия, однако, короткие времена расчета могли также привести к преждевременному замораживанию капли в смешанном состоянии и не окончательному разделению фаз. При этом, представляется, что, раз удалось статистически значимо определить вязкость, расчет был произведен на временах, сопоставимых со временем диффузии.

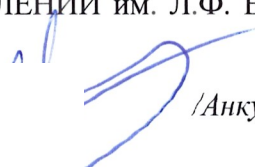
Результаты исследований опубликованы автором в 10 научных статьях в рецензируемых российских и зарубежных изданиях, индексируемых Web of Science/Scopus, определенных ВАК РФ.

Автореферат диссертации позволяет получить достаточное представление о теме исследования, актуальности работы и полученных автором результатах.

По совокупности полученных результатов, объему выполненных исследований и представленных публикаций по тематике работы, можно сделать вывод о том, что диссертационная работа Балякина Ильи Александровича соответствует паспорту специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния, соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в Уральском федеральном университете имени первого Президента России Б. Н. Ельцина, а её автор Балякин Илья Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния.

Старший научный сотрудник теоретического отдела, к. ф.-м. н.,
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ДАВЛЕНИЙ им. Л.Ф. ВЕРЕЩАГИНА РОССИЙСКОЙ
АКАДЕМИИ НАУК (ИФВД РАН)

Анкудинов Владимир Евгеньевич

 /Анкудинов В. Е./

11 сентября 2023 г.

Адрес: 108840, Россия, г. Москва (г. Троицк), Калужское шоссе, д. 14, тел.: +7 (495) 851-05-82;
E-mail: vladimir@ankudinov.org

*Вернуть Анкудинову В.Е. заверенное
заверяющим экспертом письмо
ИФВД РАН
15.09.2023.*

