

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы

**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

Одно из новых направлений в моделировании свойств сложных композиционных материалов связано с использованием потенциалов машинного обучения на основе искусственных нейронных сетей. Большое количество настраиваемых параметров позволяет детально описать рельеф поверхности потенциальной энергии и надеяться на адекватное воспроизведение в таких моделях статических и динамических параметров многочастичных систем в различных агрегатных состояниях.

В диссертационной работе Балякина И.А. эффективность данного подхода анализируется на моделях трех систем с топологическим и химическим беспорядком, достаточно подробно изученных экспериментально. Это бинарная система  $\text{Bi-Ga}$  в жидком состоянии, система  $\text{SiO}_2$  и высокоэнтропийный сплав  $\text{TiZrHfNbTa}$ .

В модели расплава  $\text{Bi-Ga}$  продемонстрировано наличие регистрируемого на опыте расслоения, с использованием многогранников Вороного исследована структура расплава, установлена связь геометрических характеристик многогранников и параметров расслоения.

Показано, что DeePMD-потенциалы, обученные на конфигурациях, отвечающих расплаву, способны воспроизводить стеклообразное состояние, а также колебательные спектры всех кристаллических фаз  $\text{SiO}_2$ . Совместно с алгоритмом USPEX такие потенциалы позволяют прогнозировать устойчивые кристаллические фазы диоксида кремния.

На примере шестикомпонентной системы  $\text{TiZrHfNbTa+H}$  продемонстрирована применимость DeePMD-потенциалов к описанию систем с высокой размерностью композиционного пространства. Установлено, что наиболее низкой энергией система обладает, когда атомы водорода находятся в междоузлиях, обогащенных титаном.


По работе имеются следующие вопросы и замечания:

1. В системе  $\text{SiO}_2$  получен ряд кристаллических фаз, которые идентифицированы как стабильные. Как и по какому признаку такая идентификация проведена?
2. Среди стабильных фаз выявлена «самая стабильная» фаза. По какому критерию выполнена такая классификация?


Диссертация Балякина И.А. является завершенной научно-квалификационной работой, представляет собой цельное, фундаментальное исследование и соответствует специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Считаем, что диссертация по своему объему, уровню, новизне, научной и практической значимости полученных результатов полностью соответствует требованиям п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней в УрФУ, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук. Диссертант Балякин Илья Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук, профессор,  
научный руководитель ФГБУН Институт теплофизики УрО РАН

Байдаков Владимир Георгиевич /  /20.09.2023

Кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник,  
старший научный сотрудник лаборатории криогеники и энергетики  
ФГБУН Институт теплофизики УрО РАН

Проценко Сергей Павлович /  /20.09.2023

Контактная информация: 620016, Россия, Екатеринбург, ул. Амундсена, 107а.  
Телефоны: +7(912)2467550, +7(922)1618373.

Эл. почта: [baidakov@itpuran.ru](mailto:baidakov@itpuran.ru), [sp@itpuran.ru](mailto:sp@itpuran.ru)

Подписи Байдакова В.Г. и Проценко С.П. заверяю

*Дело № 19/2023*



*С.П. Проценко*

