

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

Методы квантовой химии и молекулярной механики предоставляют широкие возможности для моделирования структуры и устойчивости веществ и композитов, расчета их свойств, симуляции фазовых переходов, химических реакций. Получаемые расчетными методами результаты позволяют предсказывать новые перспективные соединения и объяснять наблюдаемые в эксперименте процессы. Однако, эти методы имеют ряд ограничений. Одно из главных ограничений квантовой химии – это стремительный и зачастую нелинейный рост вычислительных затрат с ростом размера моделируемой системы. Проблемой классической молекулярной механики является плохая переносимость межатомных потенциалов, приводящая к существенным погрешностям в расчете или ошибочным результатам. Компромиссным вариантом, совмещающим возможность моделирования больших систем за счет высокой скорости расчетов и хорошую переносимость от одной системы к другой, являются потенциалы на основе машинного обучения. Потенциалы на основе машинного обучения начали активно применять в расчетах лишь в последнее десятилетие. До сих пор сохраняется ряд актуальных вопросов об оптимальных методиках создания тренировочного набора, о наиболее эффективных методах машинного обучения для генерации потенциалов, а также о границах применимости такого потенциала. Диссертационное исследование И.А. Балякина дает ответы на часть этих вопросов, что обеспечивает актуальность и значимость исследования.

В работе И.А. Балякина при помощи потенциалов на основе искусственных нейронных сетей (ИНС-потенциалов) исследованы 3 системы: бинарная система Bi-Ga , система SiO_2 и высокоэнтропийный сплав TiZrHfNbTa с адсорбированным H . Для каждой системы создана тренировочная выборка на основе DFT-расчетов и сгенерирован ИНС-потенциал, проведено МД моделирование. К наиболее важным результатам отнесу следующие: 1) Продемонстрирована возможность предсказания расслоения в расплавах системы Bi-Ga с использованием ИНС-потенциалов, исходный тренировочный набор конфигураций которых не включал

конфигурации, соответствующие расслоенному состоянию. 2) Продемонстрировано, что ИНС-потенциал для SiO_2 , обученный только на неупорядоченных конфигурациях, соответствующих жидкости, способен корректно описывать твердые фазы SiO_2 с точностью, близкой к DFT-расчетам. 3) На примере системы TiZrHfNbTa-H показана возможность создания ИНС-потенциалов для сложных систем, содержащих большое количество разных типов атомов.

Достоверность исследования подтверждается использованием апробированных программных пакетов и сопоставлением части полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными и расчетными значениями.

Результаты исследований, полученные в рамках диссертационной работы, обсуждены на 12 российских и международных конференциях. Содержание исследования отражено публикациях, включающих 11 тезисов и 10 статей в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК. Автореферат написан ясным научным языком.

В ходе ознакомления с текстом автореферата возникли следующие вопросы и замечания:

1) В тексте автореферата имеется ряд опечаток. Например, на стр. 5 вместо «возможность ИНС-потенциалов натренированных на жидкости, воспроизводить» должно быть «возможность ИНС-потенциалов, натренированных на жидкости, воспроизводить», на стр. 7 вместо «в кристаллической решетке» должно быть «в кристаллической решетке», на стр. 13 в предложении «В качестве примера на рисунке эволюция сверхъядейки из 13500 атомов состава $\text{Ga}_{70}\text{V}_{30}$ при охлаждении от 800 К до 300 К.» отсутствует номер рисунка.

2) Существует целый ряд методов машинного обучения для генерации межатомных потенциалов (SNAP, GAP, ANN, MTP, ...), получающих различные программные реализации. Чем обусловлен выбор программы DeepMD, использующей искусственные нейронные сети (artificial neural network – ANN)? Проводились ли сравнения качества получаемых потенциалов и размер требуемой для их обучения тренировочной выборки с результатами работы других программ для генерации подобных потенциалов?

3) В диссертации продемонстрирована применимость ИНС-потенциалов, обученных на соответствующих расплаву неупорядоченных конфигурациях, для изучения упорядоченных кристаллических фаз того же вещества. Оценивалась ли переносимость потенциалов, обучаемых на основе

конфигураций расплавов или кристаллов, на задачи моделирования поверхностей или наночастиц?

Отмеченные замечания и вопросы не влияют на общую положительную оценку работы. Считаю, что диссертационная работа представляет собой законченное научное исследование, соответствует паспорту специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния и удовлетворяет требованиям п.9 Положения о присуждении учёных степеней в Уральском федеральном университете имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, а ее автор Балякин Илья Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Попов Илья Сергеевич
к.х.н. (специальность 1.4.4. Физическая химия)
научный сотрудник
лаборатории квантовой химии и спектроскопии
Института химии твердого тела УрО РАН
Адрес: 620108, г. Екатеринбург, ул. Первомайская, 91
Телефон: +79091478563
E-mail: popov@ihim.uran.ru

И.С.

Подпись Попова И.С. заверяю.
Ученый секретарь
Института химии твердого тела УрО РАН
к.х.н. Богданова Екатерина Анатольевна



25.09.2023