

ОТЗЫВ

руководителя ВКР на работу обучающегося гр.5040103/00301

Ершова Александра Дмитриевича

над выпускной квалификационной работой магистра

«Моделирование тепловых процессов методом молекулярной динамики на основе потенциалов межчастичных взаимодействий, построенных с помощью машинного обучения»

В выпускной квалификационной работе исследуется вопрос о применимости молекулярной динамики на основе потенциалов, полученных с помощью машинного обучения, к моделированию тепловых процессов. Актуальность работы обусловлена необходимостью решения проблем, связанных с теплоотводом в вычислительных устройствах. Для решения этих проблем необходимо изучение тепловых процессов на микроуровне для лучшего понимания механизмов и особенностей таких процессов. Тема была выбрана студентом на основании научных интересов и желания проводить исследования по данному направлению.

В ходе работы Ершовым А.Д. была проведена проработка имеющихся по данной проблеме научных источников, был освоен пакет для квантово-механических вычислений Quantum Espresso и пакет для молекулярно-динамического моделирования Atomic Simulation Environment. Ершовым А.Д. проявил высокую степень заинтересованности к теме своего исследования, основной объем работы выполнен самостоятельно.

Выпускная квалификационная работа Ершова А.Д. по теме «Моделирование тепловых процессов методом молекулярной динамики на основе потенциалов межчастичных взаимодействий, построенных с помощью машинного обучения» отвечает основным требованиям, предъявляемым к квалификационным работам выпускника университета по направлению

01.04.03 «Механика и математическое моделирование» и может быть рекомендована к защите.

Работу Ершова А.Д. оцениваю на «отлично». При успешной защите выпускной квалификационной работы ему может быть присвоена квалификация магистра.

Следует отметить склонность Ершова А.Д. к научной работе, в связи с чем студент может быть рекомендован для продолжения обучения в аспирантуре.

Руководитель ВКР:

профессор ВШТМиМФ, доктор физ.-мат. наук



Кузькин В.А.

«08» июля 2022г.