

РЕЦЕНЗИЯ

на выпускную квалификационную работу
«Моделирование тепловых процессов методом молекулярной динамики на
основе потенциалов межчастичных взаимодействий, построенных с
помощью машинного обучения»
выполненную обучающимся гр.5040103/00301
Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого
Ершовым Александром Дмитриевичем

Рецензируемая выпускная квалификационная работа посвящена молекулярно-динамическому моделированию тепловых процессов, происходящих на микроуровне в углеродной нити. Тема работы представляется достаточно актуальной в связи с развитием технологических процессов производства вычислительных устройств и уменьшением размера используемых в них микротранзисторов.

Во введении автор обозначил актуальность работы и кратко указал текущие подходы к моделированию атомных структур. Сформулированы цели и задачи работы.

В первой главе проведен анализ современных методов, использующихся при моделировании микроскопических систем на атомарном уровне. Указаны преимущества и недостатки рассмотренных методов.

Вторая глава посвящена сравнению феноменологических потенциалов для углерода и выбору наиболее подходящего для дальнейшего моделирования. Помимо этого, произведено сравнение полученных результатов с аналитическими результатами для различных моделей одномерного гармонического кристалла. На основе проведенного анализа выбран потенциал межчастичного взаимодействия, полученный с помощью машинного обучения и позволяющий получить результаты, наиболее приближенные к результатам квантово-механических расчетов.

В третьей главе произведено моделирование тепловых явлений: теплового эха и баллистического резонанса. Полученные результаты качественно совпадают с аналитическими решениями для более простых моделей.

В заключении работы сделаны выводы о применимости потенциала межчастичного взаимодействия, полученного с использованием машинного обучения, к моделированию тепловых процессов на микроуровне методом молекулярной динамики. Предложены объяснения расхождений с аналитическими результатами, а также дальнейшие направления исследований.

Можно утверждать, что в рецензируемой выпускной квалификационной работе ее тема раскрыта достаточно, а также, что были решены поставленные

задачи. Уровень исследований и представления результатов достаточно высокий. Полученные результаты могут быть использованы при дальнейшем исследовании тепловых процессов в кристаллах на микроуровне.

Не лишена работы и недостатков. Так, зачастую присутствуют небрежности в формулировках, в качестве примера которых можно привести фразу «...по сравнению с эмпирическими потенциалами, новый подход занимает в несколько раз больше вычислительных ресурсов», которая не совсем верна, так как GAP-потенциал углерода тоже по сути является эмпирическим. Стоит отметить также, что в разделе «Методы исследования» указаны названия использованных программных пакетов, но не приведены ссылки на них и развернутые комментарии. Нет в тексте и пояснений, почему выбран использованный в работе пакет для молекулярно-динамических расчетов, а не, например, гораздо более распространенный пакет LAMMPS. Присутствуют небрежности и в оформлении: надписи к графикам набраны шрифтом меньшего размера, чем основной текст; заголовок Gaussian approximation potentials (GAP) следовало бы перевести на русский язык. Также на графиках с дисперсионными соотношениями размерность волнового числа указана то как $1/m$, то как $1/A$, то и вовсе без размерности. В каких единицах все-таки измерялось волновое число?

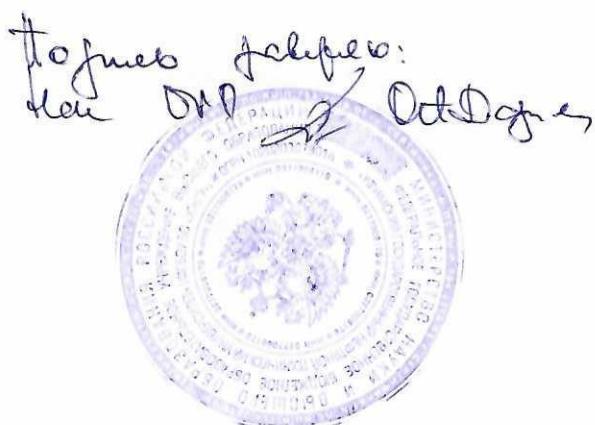
Указанные замечания не снижают общую положительную оценку работы и не ставят под сомнение корректность полученных результатов.

Выпускная квалификационная работа Ершова А.Д. по теме «Моделирование тепловых процессов методом молекулярной динамики на основе потенциалов межчастичных взаимодействий, построенных с помощью машинного обучения», соответствует требованиям, предъявляемым к выпускным квалификационным работам, и автор заслуживает оценки «отлично».

Рецензент

Старший преподаватель кафедры «Физика»
ФГБОУ ВО УГНТУ (г. Уфа), научный
сотрудник ИФМК УНЦ РАН, к. ф.-м. н

О.В. Бачурина



«8» июня 2022