



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Инженерная школа ядерных технологий  
Направление подготовки 03.03.02 Физика  
ООП/ОПОП Физика  
Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА**

Тема работы
Ускорение работы CALYPSO для прогнозирования структуры материалов с применением алгоритмов Deep Potential

УДК 539.124.6:669.295

Обучающийся

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Чжэн Юйхань		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Склярова Елена Александровна	к.п.н.		

**КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП	Верховская.М.В	к.э.н, доцент		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Сечин А. И.	д.т.н., профессор		

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

Руководитель ООП/ОПОП, должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заведующий кафедрой - руководитель отделения на правах кафедры	Лидер А.М.	д.т.н., профессор		

Томск – 2023 г.

## ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП/ОПОП

Код компетенции	Наименование компетенции
<b>Универсальные компетенции</b>	
<b>УК(У)-1</b>	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач.
<b>УК(У)-2</b>	Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений.
<b>УК(У)-3</b>	Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовать свою роль в команде.
<b>УК(У)-4</b>	Способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном и иностранном (-ых) языке.
<b>УК(У)-5</b>	Способен воспринимать межкультурное разнообразие общества в социально-историческом, этическом и философском контекстах.
<b>УК(У)-6</b>	Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни.
<b>УК(У)-7</b>	Способен поддерживать должный уровень физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности.
<b>УК(У)-8</b>	Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций.
<b>УК(У)-9</b>	Способен проявлять предприимчивость в профессиональной деятельности, в т.ч. в рамках разработки коммерчески перспективного продукта на основе научно-технической идеи.
<b>Общепрофессиональные компетенции</b>	
<b>ОПК(У)-1</b>	Способен применять естественно-научные и общинженерные знания, методы математического анализа и моделирования в инженерной деятельности, связанной с проектированием и конструированием, технологиями производства оптоэлектроники, оптических и оптико-электронных приборов и комплексов
<b>ОПК(У)-2</b>	Способен осуществлять профессиональную деятельность с учетом экономических, экологических, интеллектуально правовых, социальных и других ограничений на всех этапах жизненного цикла технических объектов и процессов
<b>ОПК(У)-3</b>	Способен использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач.
<b>ОПК(У)-4</b>	Способен понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, осознавать опасность и угрозу, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности.
<b>ОПК(У)-5</b>	Способен использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией.
<b>ОПК(У)-6</b>	Способен решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности.

<b>ОПК(У)-7</b>	Способен использовать в своей профессиональной деятельности знание иностранного языка.
<b>ОПК(У)-8</b>	Способен критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости направление своей деятельности.
<b>ОПК(У)-9</b>	Способен получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах и других малых коллективах исполнителей.
<b>Профессиональные компетенции</b>	
<b>ПК(У)-1</b>	Способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин
<b>ПК(У)-2</b>	Способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта
<b>ПК(У)-3</b>	Готовность применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований
<b>ПК(У)-4</b>	Способность применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин
<b>ПК(У)-5</b>	Способность пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований
<b>ПК(У)-6</b>	Способность понимать и использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований
<b>ПК(У)-7</b>	Способность участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме
<b>ПК(У)-8</b>	Способность понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа ядерных технологий  
Направление подготовки (ООП/ОПОП) 03.03.02 Физика  
Отделение школы (НОЦ) отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:  
Руководитель ООП/ОПОП  
Лидер А.М.  
(Подпись) (Дата)

### ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
150Б91	Чжэн Юйхань

Тема работы:

Ускорение работы CALYPSO для прогнозирования структуры материалов с применением алгоритмов Deep Potential
<i>Утверждена приказом директора (дата, номер)</i>

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:

--	--

#### ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p><b>Исходные данные к работе</b> (наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к функционированию (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.)</p>	<p><i>Объект исследования:</i> программа, написанная с использованием методов машинного обучения. <i>Рабочая зона:</i> компьютерный зал (Цилинский университет, КНР). <i>Размеры помещения:</i> 4 м x 3,5 м x 3 м. <i>Количество и наименование оборудования рабочей зоны:</i> разработка процедуры прогнозирования свойств новых материалов, проверка правильности на сплавах Mg-Al-Cu с помощью программного пакета CALYPSO.</p>
<p><b>Перечень разделов пояснительной записки подлежащих исследованию, проектированию и разработке</b> (аналитический обзор литературных источников с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе)</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>– Обзор литературных источников;</li> <li>– Построить набор обучающих данных</li> <li>– Обучение потенциальной функции</li> <li>– Прогнозирование структуры</li> <li>– Расчет плотности состояний</li> <li>– Анализ результатов</li> <li>– Заключение</li> </ul>
<p><b>Перечень графического материала</b> (с точным указанием обязательных чертежей)</p>	<p>Рисунок 1 - Схематическая диаграмма программы DP-GEN</p> <p>Рисунок 2 - Обучение и структура (слева), структу</p>

	<p>ра случайного тестового набора (справа)</p> <p>Рисунок 3 - Результаты итеративного поиска</p> <p>Рисунок 4 - Результаты модели длительного обучения</p> <p>Рисунок 5 - Воспроизведение структуры на трехфазной диаграмме</p> <p>Рисунок 6 - Фононный спектр искомой структуры</p>
--	--

**Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы**

*(с указанием разделов)*

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Верховская Марина Витальевна
Социальная ответственность	Сечин Александр Иванович

<b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал руководитель:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Склярова Елена Александровна	к.п.н.		

**Задание принял к исполнению обучающийся:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Чжэн Юйхань		



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки (ООП/ОПОП) 03.03.02 Физика

Уровень образования бакалавриат

Отделение школы (НОЦ) отделение экспериментальной физики

Период выполнения \_\_\_\_\_ (осенний / весенний семестр 2022/2023 учебного года)

### КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН выполнения выпускной квалификационной работы

Обучающийся:

Группа	ФИО
150Б91	Чжэн Юйхань

Тема работы:

Ускорение работы CALYPSO для прогнозирования структуры материалов с применением алгоритмов Deep Potential
---

Срок сдачи обучающимся выполненной работы:

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.11.2022	Литературный обзор по теме ВКР	15
30.04.2023	Методы исследования	5
01.06.2023	Результаты экспериментальных исследований. Обработка результатов.	50
01.06.2023	Финансовый менеджмент, ресурс эффективность и ресурсосбережение	15
01.06.2023	Социальная ответственность	15

**СОСТАВИЛ:**

**Руководитель ВКР**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Склярова Елена Александровна	к.п.н.		

**СОГЛАСОВАНО:**

**Руководитель ООП/ОПОП**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Заведующий кафедрой - руководитель отделения на правах кафедры	Лидер А.М.	д.т.н., профессор		

**Обучающийся**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Чжэн Юйхань		

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 79 с., 7 рис., 16 табл., 36 источников литературы.

Ключевые слова: Предсказание структуры; DP-GEN; потенциал машинного обучения; Расчеты из первых принципов; CALYPSO, системы Mg-Al-Cu.

Объектом исследования является программа, написанная с использованием методов машинного обучения.

Цель работы – Разработать новые программы для предсказания неизвестных материалов и свойств и проверить их правильность на примере системы Mg-Al-Cu.

Для достижения цели были поставлены следующие задачи:

1. Освоение метода расчета DFT, метода предсказания структуры CALYPSO и методов, связанных с потенциалом машинного обучения DPGEN;

2. Использование CALYPSO в качестве нового семплера для DPGEN;

3. Тестирование уточненного метода предсказания структуры CALYPSO с применением DPGEN, на системе Mg-Al-Cu.

В результате исследования установлено, что новая структура неизвестного Mg-Al-Cu успешно предсказана в итеративно сгенерированных структурах в данной работе, а ее стабильность продемонстрирована с помощью фононной спектроскопии. Результаты тестирования демонстрируют надежность CALYPSO в сочетании с подходом глубинного потенциала и успех в снижении вычислительных затрат.

Основные конструктивные, технические и эксплуатационные характеристики: потенциал машинного обучения для ускоренного прогнозирования структуры может быть реализован с целью повышения точности прогнозирования структуры, а также снижения временных затрат.

Область применения: результаты исследований могут быть использованы для сверхпроводящих катушек, батарей и т.д.

Экономическая эффективность/значимость работы заключается в экономии вычислительных затрат по сравнению с теорией функционала плотности.



## ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ .....	12
Глава 1 Предпосылки исследования и приложения .....	14
1.1 Предпосылки для исследования .....	14
1.1.1 Структурное прогнозирование .....	15
1.1.2 Трудности, возникающие при структурном прогнозировании	16
1.1.3 Потенциал машинного обучения .....	17
1.2 Значение исследования .....	18
1.3 Организация статьи .....	20
Глава 2 Теоретический подход .....	21
2.1 Обзор .....	21
2.2 Теория функционала плотности .....	21
2.3 Приближение Борна-Оппенгеймера .....	23
2.4 Теорема Хоэнберга-Кона .....	25
2.5 Уравнение Кона-Шама .....	26
Глава 3 Потенциалы машинного обучения .....	28
3.1 Машинное обучение .....	28
3.2 Глубокое обучение .....	29
3.3 DP-GEN .....	30
3.4 Методы предсказания структуры CALYPSO и программное обеспечение .....	32
3.4.1 Методы прогнозирования структуры CALYPSO .....	32
3.4.2 Программное обеспечение для прогнозирования структуры CALYPSO .....	33
Глава 4 Моделирование CALYPSO на основе потенциала машинного обучения .....	34
4.1 Общие сведения о моделировании .....	34
4.2 Процесс поиска структуры .....	36
4.3 Результаты и выводы .....	38
Глава 5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение .....	41

5.1	Потенциальные потребители результатов исследования .....	41
5.2	Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научного исследования с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения .....	42
5.2.1	SWOT – анализ .....	42
5.3	Планирование научно-технического исследования .....	44
5.3.1	Определение трудоемкости выполнения работ .....	46
5.4	Бюджет научного исследования .....	52
5.4.1	Расчет материальных затрат НТИ .....	52
5.4.2	Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ .....	52
5.4.3	Основная заработная плата исполнителей темы .....	53
5.4.4	Структура работ в рамках научного исследования .....	54
5.4.5	Структура работ в рамках научного исследования .....	55
5.4.6	Расчет затрат на электроэнергию .....	55
5.4.7	Расчет затрат на научные и производственные командировки и накладные расходы .....	56
5.4.8	Формирование бюджета затрат НТИ .....	56
5.5	Ресурсоэффективность .....	57
	Выводы по главе «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение» .....	59
Глава 6	Социальная ответственность .....	63
6.1	Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности .....	63
6.2	Производственная безопасность .....	64
6.2.1	Микроклимат .....	65
6.2.2	Электромагнитное излучение .....	67
6.2.3	Недостаточная освещенность .....	68
6.2.4	Шум от компьютерного оборудования .....	69
6.2.5	Опасность поражения электрическим током .....	70
6.2.6	Анализ опасных и вредных производственных факторов .....	71
6.3	Экологическая безопасность .....	72

6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях .....	73
Выводы по главе «Социальная ответственность» .....	74
Заключение .....	75
<b>СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ .....</b>	<b>76</b>

## ВВЕДЕНИЕ

Предсказание структуры осуществляется с помощью теории функционала плотности (density functional theory, DFT) для оценки энергии большого числа точек на поверхности потенциальной энергии и, таким образом, поиска стабильных структур на поверхности потенциальной энергии, которые находятся в точках с минимальными значениями. Однако с увеличением числа атомов вычислительная сложность DFT для оценки энергии возрастает экспоненциально, что значительно ограничивает эффективность поиска структуры. В последние годы, с быстрым развитием методов машинного обучения, постепенно появляются потенциальные функции машинного обучения, которые учитывают точность DFT и эффективность эмпирических потенциалов. Глубинная потенциальная функция - это разновидность потенциала машинного обучения, основанного на глубоких нейронных сетях, который обладает высокой точностью в различных системах. Сочетание внедрения глубинных потенциальных функций с программным обеспечением для предсказания структур может значительно повысить эффективность поиска структур.

DP-GEN - это адаптивная система, которая итеративно обновляет потенциальную функцию для генерации новых наборов данных и циклического обучения моделей для крупномасштабного моделирования. Однако она страдает от проблем малого покрытия потенциальной поверхности и структурной неприменимости, и не подходит для предсказания структур. С этой целью в данной работе мы используем программное обеспечение для предсказания структуры CALYPSO в качестве семплера для DP-GEN и строим адаптивную стратегию генерации потенциальной функции, применимую для предсказания структуры, которую впоследствии применяем к системе Mg-Al-Cu для проверки эффективности схемы.

Исходя из этого, целью данной работы является разработать новые программы для предсказания неизвестных материалов и свойств и проверить их правильность на примере системы Mg-Al-Cu.

Для достижения поставленной цели были разработаны следующие задачи:

1. Освоение метода расчета DFT, метода предсказания структуры CALYPSO и методов, связанных с потенциалом машинного обучения DPGEN;
2. Использование CALYPSO в качестве нового семплера для DPGEN;
3. Тестирование уточненного метода предсказания структуры CALYPSO с применением DPGEN, на системе Mg-Al-Cu.

Также в данной работе рассматривается применение эмпирических потенциальных методов в качестве вспомогательного средства, но с ограниченной точностью по сравнению с расчетами из первых принципов. С другой стороны, потенциалы машинного обучения широко используются в моделировании молекулярной динамики с помощью глубокого обучения для получения высокоточных и эффективных вычислительных результатов. Модель DP-GEN, как модель поверхности атомного потенциала, основанная на глубоком обучении, позволяет адаптивно собирать и прогнозировать набор данных, тем самым сокращая вмешательство человека и вычислительные затраты на генерацию данных и обучение модели.

## **Глава 1 Предпосылки исследования и приложения**

### **1.1 Предпосылки для исследования**

Прогнозирование структуры является важной областью исследований в области материаловедения и физической химии. Оно важно для открытия новых материалов путем предсказания структуры, свойств и поведения материалов или кристаллов с помощью расчетов и моделирования.

Квантовая механика играет важную роль в предсказании структуры, и в начале 20 века ученые начали использовать уравнение Шредингера для описания кинетического поведения и схем взаимодействия кристаллов. Однако из-за ограничений компьютерных технологий и сложности математических моделей того времени эта работа так и не достигла существенного прогресса. Только в 1960-х годах развитие компьютерных технологий и разработка таких методов, как теория кристаллических орбиталей и теория функционала плотности, позволили ученым более точно предсказывать структуры кристаллов и открыли возможности для синтеза материалов.

В последние годы применение предсказания структуры в физике получило дальнейшее развитие благодаря разработке методов машинного обучения. Модели машинного обучения могут предсказывать, как кристаллы взаимодействуют друг с другом, изучая большое количество данных о кристаллических структурах, что делает предсказание структуры более эффективным и точным. По сравнению с традиционными методами физической химии, машинное обучение имеет преимущество в высокой скорости вычислений и высокой точности. Оно также может обеспечить тонкое описание сложных химических реакций и кристаллических систем. Поэтому предсказание структуры на основе квантовой механики и методов машинного обучения будет одним из важных направлений будущих исследований.

Помимо квантовой механики и методов машинного обучения, существует ряд других методов, которые широко используются в области

предсказания структуры. Например, моделирование молекулярной динамики может использоваться для изучения структуры и свойств молекул с помощью численных методов, а обучение с подкреплением может применяться при исследовании и открытии материалов. Все вместе эти подходы способствуют постоянному развитию и совершенствованию области предсказания структуры.

### **1.1.1 Структурное прогнозирование**

Предсказание структуры - это метод, с помощью которого неизвестные кристаллические структуры могут быть предсказаны с помощью компьютерного моделирования. Он имеет не только теоретическое значение, но и широкое практическое применение. Предсказание структуры привело к замечательным достижениям в лабораторном выращивании кристаллов и теоретических расчетах. Это не только расширило наше понимание материаловедения и химии, но и позволило решить множество практических проблем.

В лабораторном выращивании кристаллов исследователи смогли успешно синтезировать ряд новых материалов, а благодаря изучению этих материалов были изучены закономерности их роста в конкретных ситуациях, что послужило образцом для предсказания кристаллических структур других материалов. Кроме того, было изучено множество различных методов роста кристаллов, таких как электростатическое осаждение, инфильтрация раствора, кристаллизация раствора и осаждение из паровой фазы, что позволило предсказать неизвестные кристаллические структуры.

Что касается теоретических расчетов, ученые использовали различные методы, такие как молекулярная механика и теории функционала плотности (DFT), чтобы попытаться предсказать молекулярные структуры и получить физические принципы, лежащие в основе кристаллических структур, чтобы расширить свои приложения для предсказания кристаллических структур. Эти вычислительные методы оказались очень успешными, и с их помощью можно предсказать большое количество

кристаллических структур; например, эти методы используются для изучения разработки новых материалов для таких применений, как материалы для литий-ионных батарей, фотоэлектрические материалы и т.д. Основываясь на результатах предсказания кристаллических структур, мы можем далее исследовать физические эффекты материалов и, таким образом, лучше понять их поведение на практике.

### **1.1.2 Трудности, возникающие при структурном прогнозировании**

Предсказание структуры очень важно в физике, поскольку оно помогает исследователям получить представление о кристаллических структурах. Однако такое предсказание структуры сталкивается с рядом трудностей.

Во-первых, предсказание структуры требует обработки большого количества данных. Обычно предсказание структуры требует использования компьютерного моделирования для расчета структуры молекул, что предполагает работу с миллионами атомов и выполнением над ними различных операций, таких как вращение, отражение, масштабирование и т. д. Это делает предсказание структуры сложной вычислительной задачей из-за огромного количества необходимых данных. Кроме того, поскольку между частицами существует множество взаимодействий, эти взаимодействия должны быть точно описаны для получения достоверных результатов.

Во-вторых, точность вычислительных моделей также является одной из проблем при прогнозировании структуры. Было разработано большое количество вычислительных моделей для предсказания структуры молекул, но эти модели обычно дают относительно грубые предсказания. Это связано с тем, что на структуру молекулы влияет множество факторов, включая температуру, давление и т.д., и все они оказывают влияние на точность вычислительных моделей. Поэтому разработка более точных и надежных методов остается важным направлением исследований.

В-третьих, структурные прогнозы также должны преодолевать ограничения экспериментальных методов. Хотя вычислительные модели



могут предоставить ценную информацию, их окончательное подтверждение требует экспериментальной проверки. Например, рентгеновская кристаллография в настоящее время является наиболее часто используемым методом определения структуры молекул, но тот факт, что обрабатывать можно только кристаллизованные образцы, означает, что при использовании этого метода многие молекулы не могут быть изучены на предмет их структуры. Кроме того, некоторые крупные молекулы слишком сложны для измерения существующими экспериментальными методами, что ограничивает наше понимание этих молекул.

В целом, предсказание структуры сталкивается со многими трудностями в области физики, включая проблемы обработки данных, точность вычислительных моделей и ограничения экспериментальных методов. Тем не менее, предполагается, что по мере дальнейшего развития технологий эти трудности будут постепенно преодолеваются, что даст нам больше возможностей и средств для более глубокого изучения молекул и живых систем.

### **1.1.3 Потенциал машинного обучения**

Машинное обучение стало популярным направлением в материаловедении и представляет собой метод искусственного интеллекта, основанный на статистике и распознавании образов, который позволяет предсказывать и классифицировать неизвестные данные путем изучения и анализа больших объемов данных; прогнозы или решения могут быть приняты на основе данных автоматизированным способом. Машинное обучение широко используется в таких областях, как разработка и открытие новых материалов, прогнозирование и оптимизация свойств материалов. В данных областях потенциал машинного обучения в предсказании кристаллической структуры является важным направлением. С помощью методов машинного обучения можно более эффективно предсказывать структуру и свойства новых кристаллов, что важно для повышения эффективности преобразования структур, для снижения затрат и минимизации воздействия на окружающую среду.

Традиционные методы требуют ручной разработки потенциальной функции, подходящей для конкретной материальной системы, нуждаются в большом количестве экспериментальных данных для обучения и зачастую дают неточные результаты прогнозирования. Методы машинного обучения, с другой стороны, могут автоматизировать прогнозы или решения на основе данных для более эффективного и точного решения проблемы. Обучаясь и анализируя большие объемы данных, методы машинного обучения позволяют предсказывать и классифицировать неизвестные данные.

В настоящее время потенциал машинного обучения привел к некоторым важным результатам в предсказании кристаллической структуры. Например, новые неорганические материалы с высокой электропроводностью, высокой стабильностью и низкой стоимостью могут быть предсказаны с помощью методов машинного обучения. Кроме того, в области обнаружения и проектирования материалов методы машинного обучения могут значительно сократить цикл разработки и помочь разработчикам обнаружить больше неизвестных материалов [2].

Потенциал машинного обучения имеет перспективное применение в прогнозировании кристаллической структуры. Считается, что с непрерывным развитием технологий и накоплением данных машинное обучение принесет больше прорывов и инноваций в материаловедение. В будущем технология машинного обучения будет продолжать играть важную роль в области материаловедения и предоставлять более эффективные и точные решения для людей.

## **1.2 Значение исследования**

Программное обеспечение для поиска структуры стало актуальной областью исследований в материаловедении. Часто основанные на таких методах, как расчеты из первых принципов, моделирование молекулярной динамики и машинное обучение, эти программы могут помочь исследовать структуру и свойства неизвестных соединений с помощью расчетов и направлять эксперименты для подготовки и тестирования этих соединений.

Современные программы для предсказания структуры включают следующие: VASP – программа поиска структуры, основанная на расчетах DFT, которая может использоваться для предсказания стабильных структур и путей реакции в твердых материалах; USPEX – эволюционный алгоритм, который может использоваться для предсказания структуры и обнаружения веществ; Atomeye – инструмент поиска структуры, основанный на моделировании молекулярной динамики, который может использоваться для изучения структурных изменений в материалах при различных температурах, давлениях, и т. д. Каждая из этих распространенных программ для структурного поиска имеет свои характеристики и область применения и выбирается в зависимости от целей исследования [1].

Программное обеспечение для структурного поиска само по себе не является совершенным. Для него характерны такие проблемы, как обработка данных высокой размерности и баланс между вычислительной сложностью и точностью прогнозирования. Поэтому необходимы дальнейшие инновации, чтобы усовершенствовать эти инструменты в практических приложениях.

Адаптивное ускоренное прогнозирование структуры (Adaptive Accelerated Structure Prediction) - это метод прогнозирования 3D-структуры молекул. Он использует методы машинного обучения и искусственного интеллекта для построения эффективной модели путем глубокого обучения на основе большого количества известных данных о молекулярной структуре и может предсказывать структуру молекул за короткое время. Этот подход может помочь исследователям гораздо быстрее понять структуру и свойства молекул и, таким образом, сыграть важную роль в таких областях, как разработка лекарств и материаловедение. Одним из преимуществ метода является то, что он может адаптивно регулировать параметры в процессе расчета для повышения точности и скорости предсказания.

Как видно из приведенного выше обсуждения, адаптивная конструкция применима к потенциалу машинного обучения при поиске структур. Его роль заключается в заполнении областей на потенциальной поверхности, которые не исследуются при каждой выборке, и быстром построении потенциальной функции, а также в ускорении процесса предсказания структуры. В данной работе рассматриваются вышеуказанные вопросы путем написания программы машинного обучения потенциальной функции CALYPSO-DPGEN на основе глубокого потенциала и использования известной системы Mg-Al-Cu для ускоренного предсказания структуры.

### **1.3 Организация статьи**

Работа построена следующим образом: в главе 2 дается краткое введение в теорию функционала плотности, адиабатического приближения, теоремы Хоэнберга-Кона и уравнения Кона-Шема. Глава 3 знакомит с методами машинного обучения и теорией глубокого обучения. В главе 4 рассматривается построение набора данных, полученных путем объединения потенциала машинного обучения с методом предсказания структуры для поиска, а также тестируется точность потенциала машинного обучения, вычислительная эффективность и сравнение результатов моделирования с известными данными на примере системы Mg-Al-Cu.

## **Глава 2 Теоретический подход**

### **2.1 Обзор**

Основной принцип предсказания структуры заключается в нахождении кристаллической структуры с наименьшей энергией (устойчивое состояние системы). Предсказание структуры направлено на поиск наиболее вероятного кристаллического состояния системы, т. е. кристаллической структуры с наименьшей энергией, с помощью расчетов. Этот метод поиска кристаллической структуры с наименьшей энергией известен как минимизация энергии, оптимизация энергии или поиск кристаллической структуры.

Принцип минимума энергии является первым принципом исследовательского прогнозирования кристаллических структур путем расчета набора кристаллических структур и нахождения с помощью сравнения стабильности этих структур. Данный процесс включает в себя выполнение энергетического расчета для каждой структуры-кандидата, вычисление общей энергии каждой структуры, чтобы можно было сравнить их относительную стабильность. Энергетические расчеты обычно выполняются с использованием методов расчета из первых принципов, таких как теория функционала плотности (DFT).

Исходя из принципа минимума энергии, методы предсказания структуры можно разделить на две основные фазы: поиск структуры и предсказание структуры. Фаза поиска структуры включает в себя различные методы, такие как стохастический поиск, моделированный отжиг, генетические алгоритмы и др. Цель этих методов - перебрать все структуры в пространстве, насколько это возможно, чтобы найти возможные структуры-кандидаты. На этапе предсказания структуры необходимо сравнить относительную стабильность этих структур-кандидатов, чтобы найти кристаллическую структуру с наименьшей энергией.

### **2.2 Теория функционала плотности**

В 1964 году два физика, Хорнбергер и Коэн, завершили создание основ современной теории функционала функций плотности, основанной на модели неоднородного электронного газа, обеспечив строгую теоретическую основу для одноэлектронного приближения, основная идея которого может быть обобщена в двух теоремах. Во-первых, энергия основного состояния полностью однородной фермионной системы без учета спина является единственной общей функцией плотности числа вневещных частиц. Во-вторых, общая функция энергии принимает минимальное значение для правильной функции плотности числа частиц и равна энергии основного состояния системы при условии, что число частиц постоянно.

Теория функционала плотности является важным методом для работы с многоэлектронными системами. Наиболее показательным является расчет из первых принципов, используемый для изучения ферромагнитных металлов и сверхпроводников. На основе теории функционала плотности можно изучать электронные системы с нулевым спином, а также рассматривать многоэлектронные системы со сложной структурой. Ее применение включает поиск новых материалов, таких как ферромагнитные полупроводники и ферроэлектрические полупроводники; поиск новых физических явлений, таких как сверхпроводимость и квантовый эффект Холла, а также изучение новых энергетических материалов. В квантовой механике теория функционала плотности значительно отличается от теории электронной структуры. Она имеет дело не с квантовыми эффектами, а с волновыми функциями в квантовой механике; однако она не является простым суммированием волновых функций, а рассматривает волновые функции как непрерывные. Данную теорию можно рассматривать как теоретический подход к изучению электронных систем в рамках квантовой механики. Поэтому она более соответствует существенным особенностям квантовой механики, согласуется с экспериментальными наблюдениями и в некоторой степени является более реалистичной и надежной, чем квантовая механика [6].

Гамильтоновы величины многоэлектронной системы описываются следующим образом:

$$H_e = - \sum_i^M \frac{\nabla_{r_i}^2}{2} + \sum_i^M \sum_l^N \frac{Z_l}{|R_l - r_i|} + \sum_i^M \sum_{j \neq i}^M \frac{1}{|r_i - r_j|} \quad (2.1)$$

с учетом поправки:

$$H_e = - \sum_i^M \frac{\nabla_{r_i}^2}{2} + \sum_i^M \sum_{j \neq i}^M \frac{1}{|r_i - r_j|} + \sum_i^M V_{ext}(r_i) = T + U + V \quad (2.2)$$

где  $V_{ext}(r)$  - внешнее потенциальное поле. Если основное состояние системы не является сложным и волновая функция основного состояния связана только с пространственными координатами электрона (без учета спинового состояния) как  $\varphi(r_1, \dots, r_M)$ , то волновая функция основного состояния удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$H_e \varphi = E \varphi \quad (2.3)$$

### 2.3 Приближение Борна-Оппенгеймера

Приближение Борна-Оппенгеймера также известно как адиабатическое приближение. Это приближенный способ разделения движения ядра и электронов в рассматриваемой молекуле. Оно было предложено Борном и Оппенгеймером в 1927 году<sup>[7]</sup>.

Основным элементом этого приближения является представление волновой функции молекулы как произведения волновой функции электрона и функции координат ядра<sup>[8]</sup>. При таком предположении поведение электрона и ядра рассматривается отдельно, утверждая, что движение ядра может быстро сходиться к равновесному положению, в то время как движение электрона более гибкое и сложное. Таким образом, ядро можно рассматривать как неподвижное и сосредоточиться только на движении электронов, сведя проблему только к движению электронов. Физические величины, такие как энергия, структура и кинетика реакции

всей молекулы, могут быть затем рассчитаны с помощью метода, касающегося волновой функции электрона [8].

Основное значение этого приближения заключается в том, что оно делает более реальным расчет задач молекулярной физики в квантовой механике. На его основе такие центральные проблемы, как дипольные моменты, колебательные спектры, энергетические поверхности и механизмы реакций молекул, были широко изучены и применены.

В квантовой механике определенное уравнение Шредингера для многоэлектронной системы:

$$H\Psi(R_i, r_n) = E\Psi(R_i, r_n) \quad (2.4)$$

где  $R$  - ионные реальные координаты, а  $r$  - электронные координаты.

Согласно адиабатическому приближению:

$$H_{BO}(\vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E_{BO}(\vec{R})\Psi(\vec{r}, \vec{R}) \quad (2.5)$$

$$\left[ -\sum_J \frac{\nabla_J^2}{2m} + E_{BO}(\vec{R}) \right] \Psi(\vec{r}, \vec{R}) = E_{tot} \Psi(\vec{r}, \vec{R})$$

$$\begin{aligned} H_{BO}(\vec{R}) &= -\sum_i \frac{\nabla_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_{i'}|} - \sum_{ij} V_{e-N}(\vec{r}_i - \vec{R}_j) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'} \frac{e^2}{|\vec{R}_i - \vec{R}_{i'}|} \\ &= -\sum_i \frac{\nabla_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_{i'}|} - \sum_{ij} V_{e-N}(\vec{r}_i - \vec{R}_j) + E_N(\vec{R}) \end{aligned}$$

где  $H_{BO}(\vec{R})$  - гамильтониан Борна-Оппенгеймера.

Основная идея приближения Борна-Оппенгеймера, распространенного метода в физике, заключается в том, что при определенных обстоятельствах, когда система изменяется, относительные положения и взаимодействия внутренних частей системы не меняются со временем, то есть состояние системы всегда находится в мгновенном собственном состоянии в данном процессе. Таким образом, адиабатическое приближение предполагает, что энергия системы имеет фиксированное



значение в процессе и что внутренняя структура системы не меняется со временем.

Адиабатическое приближение позволяет развязать движения электрона и ядра, т.е. движения электронов и ядер изучаются отдельно, а затем их движения связываются. Этот подход очень эффективен при решении некоторых химических реакций и проблем внутренней структуры молекул и может повысить точность и эффективность расчетов [9].

#### **2.4 Теорема Хоэнберга-Кона**

В 1964 году Хоэнберг и Кон предложили теорию неоднородных электронных газов, т.е. теорию обобщенной функции плотности. Определенное уравнение Шредингера решалось путем замены волновой функции системы на плотность электронов, чтобы эффективно уменьшить количество степеней свободы системы [6].

Теорема Гогенберга-Кона обеспечивает основу теории обобщенных функций плотности. Она состоит из двух частей: первая часть касается внешней потенциальной энергии произвольной электронной системы, утверждая, что существует соответствие один-к-одному между плотностью основного состояния системы и внешней потенциальной энергией, которой она подвергается; вторая часть касается фундаментальных физических принципов, таких как формула природы, правило числа частиц и закон сохранения импульса, утверждая, что энергия основного состояния электронной системы может быть выражена как некоторая обобщенная форма плотности основного состояния этой системы.

Важность теоремы Гогенберга-Кона заключается в том, что мы можем определить энергию основного состояния многоэлектронной системы путем решения плотности электронов основного состояния, что позволяет избежать огромных вычислительных усилий, необходимых для решения уравнения Шредингера для всех электронов напрямую. На основе этой теоремы теория обобщения плотности создает практическую основу, которая позволяет точно вычислять свойства основного состояния

сложных многоэлектронных систем с небольшими вычислительными затратами.

Согласно теореме Гогенберга-Кона, мы распознаем систему как уникальную общую функцию распределения плотности электронов основного состояния:

$$\begin{aligned} E[\rho] &= \langle \Psi[\rho] | T + V_{ee} + V_{ext} | \Psi[\rho] \rangle \\ &= T[\rho] + V_{ee}[\rho] + \int dr^3 V(r) \rho(r) \\ &= F[\rho] + \int dr^3 V(r) \rho(r) \end{aligned} \quad (2.6)$$

где  $F$  обозначает обобщенную функцию для изменения электронной плотности основного состояния  $\rho$ .

Следует отметить, что теорема применима только к основному состоянию, а не к возбужденному, и рассматривает только случай, когда между орбиталями нет взаимодействий.

## 2.5 Уравнение Кона-Шама

Уравнение Кона-Шама является одним из центральных уравнений общей теории плотности и используется для описания свойств основного состояния многоэлектронных систем. Оно было сформулировано физиками Вальтером Коном и Луиджи Шамом, отсюда и его название.

В этом уравнении каждый электрон в многоэлектронной системе рассматривается как одноэлектронная задача, а не учитывается взаимодействие всех электронов. Это приближение известно как приближение самосогласованного поля.

В частности, уравнение Кон-Шема выражает многоэлектронную волновую функцию как суперпозицию одноэлектронных волновых функций, где каждая одноэлектронная волновая функция удовлетворяет независимому уравнению Шредингера:

$$\left[ -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{eff}(r) \right] \Psi_i(r) = \epsilon_i \Psi_i(r) \quad (2.7)$$

где  $\Psi_i$  обозначает волновую функцию  $i$ -го электрона;  $\epsilon_i$  обозначает соответствующее собственное значение энергии; и  $V_{eff}$  обозначает эффективный локальный потенциал, который учитывает взаимодействие электрона с другими электронами и ядрами ионов.

$V_{eff}$  определяется как скорость изменения плотности числа электронов  $\rho(r)$ :

$$V_{eff}(r) = \frac{\delta E_{xc}}{\delta \rho(r)} + V_{ext}(r) \quad (2.8)$$

где  $E_{xc}$  обозначает обменно-корреляционную энергию, которая описывает квантовомеханические эффекты взаимодействия электронов, а  $V_{ext}$  обозначает внешнюю потенциальную энергию, которая включает кулоновский потенциал притяжения ядра и другие внешние поля [10].

Уравнение Кон-Шема решается методом самосогласованной итерации для получения волновой функции и энергии каждого электрона. Эти одноэлектронные волновые функции затем объединяются, чтобы сформировать многоэлектронную волновую функцию.

В целом, уравнение Кон-Шема представляет собой эффективный метод обобщения плотности для работы с многоэлектронными системами. Его можно использовать для расчета структуры и свойств молекул, свойств основных состояний в таких областях, как физика материалов.

## Глава 3 Потенциалы машинного обучения

### 3.1 Машинное обучение

Машинное обучение ("Machine Learning", ML) - это отрасль искусственного интеллекта, которая включает в себя автоматическое изучение закономерностей и законов из данных для достижения целей искусственного интеллекта. Машинное обучение позволяет выявлять потенциальные корреляции и закономерности из больших объемов данных, а затем использовать эту информацию для прогнозирования и принятия решений<sup>[14]</sup>.

Основная идея машинного обучения заключается в том, чтобы позволить компьютерам автоматически обнаруживать закономерности и законы, лежащие в основе данных, и делать прогнозы или принимать решения по неизвестным данным с помощью ряда математических моделей и алгоритмов, основанных на большом количестве известных данных. Машинное обучение имеет широкий спектр применения, например, в рекомендательных системах, распознавании речи, обработке изображений, обработке естественного языка, биомедицине и других областях.

Машинное обучение состоит из трех основных частей: предварительная обработка данных, построение модели и оценка модели<sup>[11]</sup>. Предварительная обработка данных - очень важный этап, поскольку для необработанных данных обычно требуются такие операции, как очистка, денуазирование и преобразование, чтобы сделать данные более точными, надежными, полными и пригодными для анализа. Построение модели - это выбор и реализация алгоритмических моделей для классификации, регрессии, кластеризации и других задач на основе результатов предварительной обработки данных. Оценка моделей, с другой стороны, - это оценка и корректировка построенных моделей для обеспечения их точности, обобщенности и интерпретируемости.

Алгоритмы машинного обучения делятся на три основных типа: контролируемое обучение, неконтролируемое обучение и обучение с подкреплением [12]. Контролируемое обучение - это обучение на наборах данных с известными метками, например, проблемы классификации и регрессии; неконтролируемое обучение - это обучение на наборах данных без меток, например, проблемы кластеризации и уменьшения размерности; и обучение с подкреплением - это обучение на основе сигналов вознаграждения, например, сценарии типа игрового ИИ.

С наступлением эры Больших Данных методы машинного обучения стали движущей силой инноваций и роста. Все больше предприятий и организаций уделяют внимание исследованию и применению технологий машинного обучения, надеясь с помощью технологий машинного обучения анализировать и обрабатывать огромные объемы данных, чтобы получить более глубокое понимание бизнеса и конкурентные преимущества.

### **3.2 Глубокое обучение**

Глубокое обучение - это алгоритм машинного обучения на основе искусственных нейронных сетей, который позволяет обрабатывать данные и извлекать информацию, имитируя способ связи нейронов в человеческом мозге [14]. В отличие от традиционных алгоритмов машинного обучения, глубокое обучение продемонстрировало выдающуюся способность обрабатывать большие объемы данных, автоматически обнаруживая в них особенности и выполняя такие задачи, как классификация и распознавание.

В основе глубокого обучения лежит нейронная сеть, структура которой состоит из нескольких слоев нейронов. Каждый слой нейронов обрабатывает входные данные и передает выходные данные следующему слою нейронов. В процессе обучения алгоритмы глубокого обучения постоянно корректируют веса и смещения в нейронной сети, чтобы она могла более точно предсказывать результаты.

Глубокое обучение дало замечательные результаты в таких областях, как распознавание изображений, распознавание речи и обработка

естественного языка. Например, в области распознавания изображений глубокое обучение может автоматически распознавать объекты, лица и т.д., классифицировать и маркировать их; в области распознавания речи глубокое обучение может преобразовывать звуки в слова, чтобы помочь людям легче общаться; в области обработки естественного языка глубокое обучение может выполнять такие задачи, как классификация текста и анализ настроения.

Кроме того, глубокое обучение имеет ряд преимуществ. Во-первых, поскольку алгоритмы глубокого обучения могут автоматически извлекать признаки, нет необходимости в ручной разработке признаков, что значительно снижает рабочую нагрузку на людей; во-вторых, глубокое обучение может обрабатывать нелинейные и высокоразмерные данные, что позволяет лучше адаптироваться к сложным сценариям реального мира; наконец, глубокое обучение - это сквозной метод обучения, который может учиться непосредственно на входных данных и выдавать результаты без вмешательства человека в промежуточный процесс.

По мере модернизации аппаратных устройств и совершенствования алгоритмов глубокое обучение будет приобретать все большее значение в будущем. Оно расширит границы технологии искусственного интеллекта и поможет нам лучше понять и применить сложность больших данных.

### **3.3 DP-GEN**

DP-GEN (Deep Potential Generated) - это модель атомной поверхности потенциальной энергии на основе глубокого обучения, в которой используются методы, связанные с теорией машинного обучения. Это метод оптимизации функций потенциальной энергии в моделировании молекулярной динамики. Процесс включает в себя несколько этапов <sup>[13][14]</sup>.

На Рисунке 1 показан основной рабочий процесс DP-GEN.

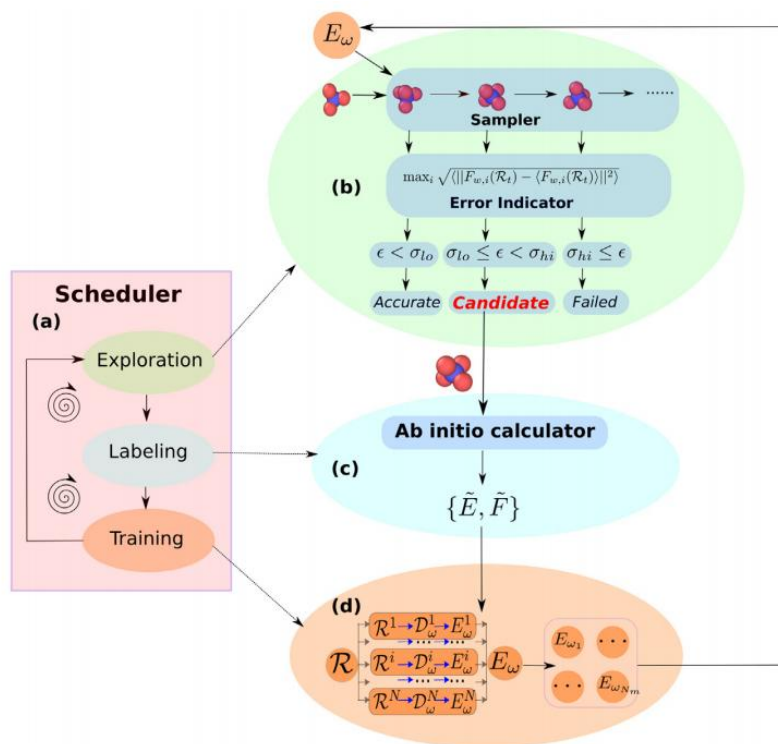


Рисунок 1 - Схематическая диаграмма программы DP-GEN<sup>[14]</sup>

Сначала используется небольшой набор данных для построения обучающего набора, а затем в результате обучения получается потенциальная функция. Эта потенциальная функция может быть использована для запуска DP-GEN с целью проведения моделирования молекулярной динамики и получения структур траекторий молекулярной динамики для заданного интервала температуры-давления и известных структур.

Затем плохо описанные части потенциальной функции удаляются и переделываются с помощью расчетов DFT и маркировки, после чего эти данные добавляются к исходному обучающему набору и переобучаются для получения новой потенциальной функции. Наконец, процесс повторяется до получения удовлетворительных результатов.

Важно отметить, что потенциальная поверхность, исследуемая этим методом, обычно довольно локализована, и поэтому точное предсказание структуры может оказаться невозможным. Это означает, что на практике его применимость должна быть оценена для конкретной проблемы и выбран соответствующий метод для моделирования.

DP-GEN - это типичная модель поверхности атомной потенциальной энергии, основанная на методах машинного обучения. Основным процессом включает такие этапы, как сбор данных, предварительная обработка данных, построение модели, проверка модели и применение модели. Модель может эффективно повысить эффективность вычислений и точность моделирования, обеспечивая новое решение таких проблем, как моделирование молекул и предсказание структуры в области физики.

### **3.4 Методы предсказания структуры CALYPSO и программное обеспечение**

Метод прогнозирования структуры CALYPSO (Crystal structure AnaLYsis by Particle Swarm Optimization) основан на оптимизации роя частиц (Particle Swarm Optimization, PSO) <sup>[3]</sup> группой профессора Ма Янмина в университете Цзилинь, который используется для решения трудностей, возникающих в процессе прогнозирования структуры, и автоматического поиска оптимального решения. Метод основан на оптимизации роя частиц (PSO) <sup>[3]</sup>, которая используется для решения трудностей, возникающих в процессе прогнозирования структуры, и автоматического поиска оптимального решения, с преимуществами снижения затрат, оптимизации производительности и повышения эффективности.

#### **3.4.1 Методы прогнозирования структуры CALYPSO**

Механические, тепловые и оптические свойства материала определяются его структурой. Поэтому при изучении физики конденсированных сред важно определить структуру материала при различных условиях, чтобы изучить различные свойства материала.

Метод CALYPSO - это эффективный метод глобального прогнозирования структуры, разработанный на основе алгоритмов оптимизации роя частиц и объединенный с другими методами расчета полной энергии<sup>[4][5]</sup>. Метод требует только химическую структуру вещества и внешние условия (например, давление и т.д.) для предсказания глобальных наиболее стабильных и субстабильных структур без



экспериментальных данных. Метод CALYPSO был успешно применен к системам, содержащим различные связи с известными структурами, такими как мономеры, бинарные и тернарные соединения. Чрезвычайно высокий процент успеха доказывает, что метод CALYPSO является эффективным и надежным методом предсказания структуры.

### **3.4.2 Программное обеспечение для прогнозирования структуры CALYPSO**

CALYPSO - это программное обеспечение для прогнозирования кристаллической структуры на основе алгоритма роя частиц. CALYPSO широко используется в материаловедении, особенно в поиске новых материалов, поскольку предоставляет важную информацию о структуре, стабильности и термодинамических свойствах материалов.

Главной особенностью программы CALYPSO является использование алгоритма оптимизации роя частиц для поиска кристаллических структур с наименьшей энергией. Алгоритм делит многомерное пространство поиска на множество локальных областей и шаг за шагом приближает оптимальное решение. Алгоритм CALYPSO эффективно избегает проблемы попадания в локальные минимумы в традиционных методах и повышает точность и эффективность прогнозирования структуры материалов.

CALYPSO обладает множеством преимуществ с точки зрения высокой точности, скорости и надежности. CALYPSO использует передовые алгоритмы и методы для повышения точности измерений до субмикронного уровня; CALYPSO имеет возможности быстрой обработки данных для быстрых и точных измерений и возможность импорта данных непосредственно в системы CAD; CALYPSO обладает стабильностью и надежностью для поддержания высокого уровня производительности в течение длительных периодов непрерывной работы.

## **Глава 4 Моделирование CALYPSO на основе потенциала машинного обучения**

### **4.1 Общие сведения о моделировании**

Данная работа представляет собой исследование наследования алгоритма CALYPSO в DP-GEN и проверку его эффективности. Для проведения тестов мы использовали опубликованный обучающий набор Mg-Al-Cu, который содержит данные о 140 000 различных структур. Используя этот набор данных для создания начальной потенциальной функции и начала итераций, мы можем постоянно повышать точность модели. Каждая итерация представляет собой процесс поиска структуры, и полученные в ходе поиска структуры оцениваются. Если описание потенциальной функции неточно, мы собираем эти структуры, выполняем расчет одной точки DFT и повторно добавляем их в обучающий набор для генерации новой потенциальной функции. Это продолжается итеративно до тех пор, пока модель не сойдется. В результате этого процесса мы получаем новую потенциальную функцию, которая лучше описывает вновь добавленные данные.

Преимущество этого метода заключается в том, что он позволяет автоматически и эффективно генерировать потенциальные функции, которые описывают новую структуру. Кроме того, поскольку метод основан на сочетании машинного обучения и первых принципов, результаты в некоторой степени поддаются интерпретации и могут помочь в дальнейшем понимании физических явлений.

Целью данной работы является создание новых материалов, имеющих применение, с помощью метода поиска структуры. Метод основан на относительно полном наборе данных, включающем более 140 000 различных видов данных, также было создано случайное тестовое множество, включающее в общей сложности 7 176 образцов моно-, бинарных и тернарных структур (см. рисунок 2). Для обучающего набора и

тестовой машины. Эти образцы были разделены на обучающее множество и тестовое множество для оценки точности предсказания модели.

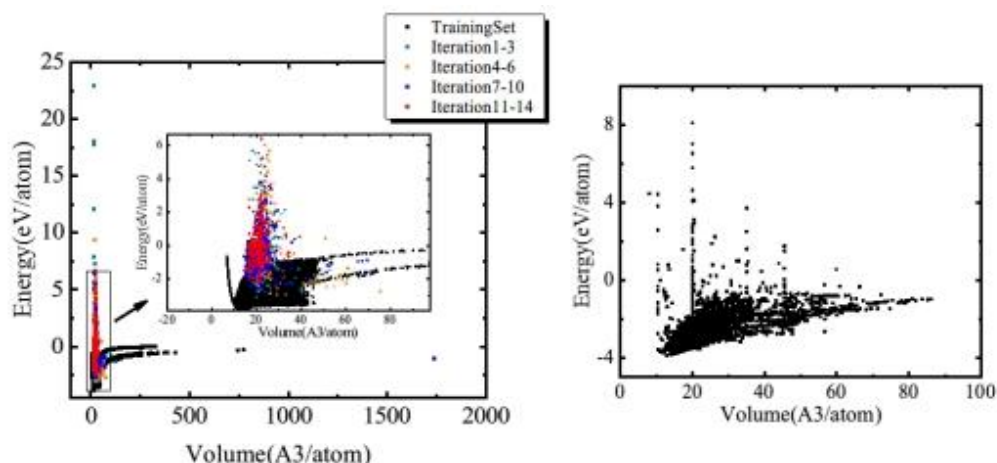


Рисунок 2 - Обучение и структура (слева), структура случайного тестового набора (справа)

В данной работе мы используем итерационный метод поиска структур, используя модель нейронной сети, обученную в течение длительного периода времени, чтобы выполнить в общей сложности 15 итераций, генерируя новые структуры-кандидаты в каждом раунде. С первой по шестую итерации мы проводим поиск по трем категориям: синглтоны, бинарные структуры и тернарные структуры, с размером выборки 300 на кластер, генерируя 2100 структур за раунд. Начиная с седьмого раунда, внимание уделяется только троичным структурам, генерируя 500 структур за раунд в течение пяти поколений. Их состав также варьировался путем случайного выбора элементов из пула, состоящего из десяти элементов. Увеличение разнообразия генерируемых структур может привести к открытию ранее неисследованных областей материального пространства.

На протяжении всего итерационного процесса мы использовали различные метрики для отслеживания эффективности модели как показано на рисунке 3. В данном случае метрикой является " $\times$ ", которая показывает производительность поверхности потенциальной энергии, построенной нашей моделью на каждой итерации, оцениваемой по случайному тестовому набору данных; синее распределение показывает распределение структур, сгенерированных в различных интервалах отклонения модели, а

числа показывают долю структур, сгенерированных в каждом интервале; по мере развития итерационного процесса мы ожидаем и получаем, что построение потенциальной функции будет сходиться, что позволит нам выполнять крупномасштабный поиск структур более эффективно. Как только мы достигнем определенного уровня сходимости, мы считаем, что можно проводить крупномасштабный поиск структур.

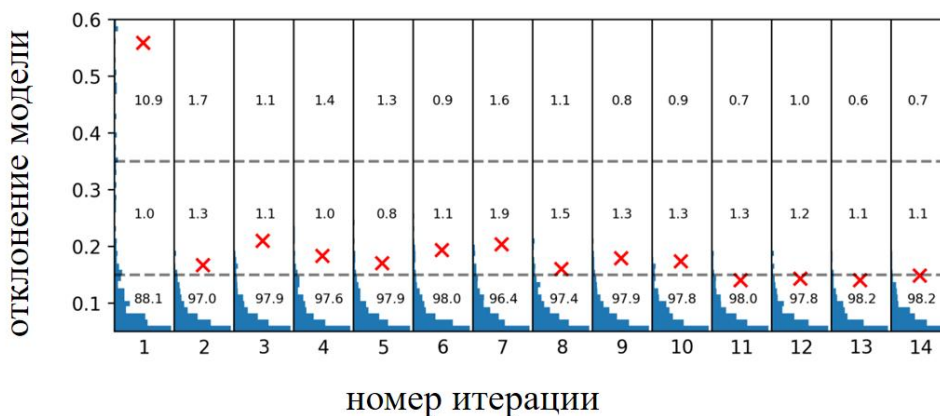


Рисунок 3 - Результаты итерационного поиска

На протяжении всего итерационного процесса мы будем искать огромное количество структур и оценивать их потенциальную полезность в различных областях знаний. Это может привести к открытию новых материалов с ранее неизученными свойствами. По мере итераций мы будем отслеживать различные показатели для оценки эффективности модели. Конечной целью является открытие новых материалов, которые найдут значительное применение в различных областях.

#### 4.2 Процесс поиска структуры

После длительного процесса обучения в CALYPSO, полученная модель была оценена. Как показано на рисунке 4, график на диагональной линии отражает предсказательный эффект модели. Чем ближе эта кривая к изображению функции  $y=x$ , тем лучше предсказание модели. В данной симуляции полученная нами модель работала очень хорошо.

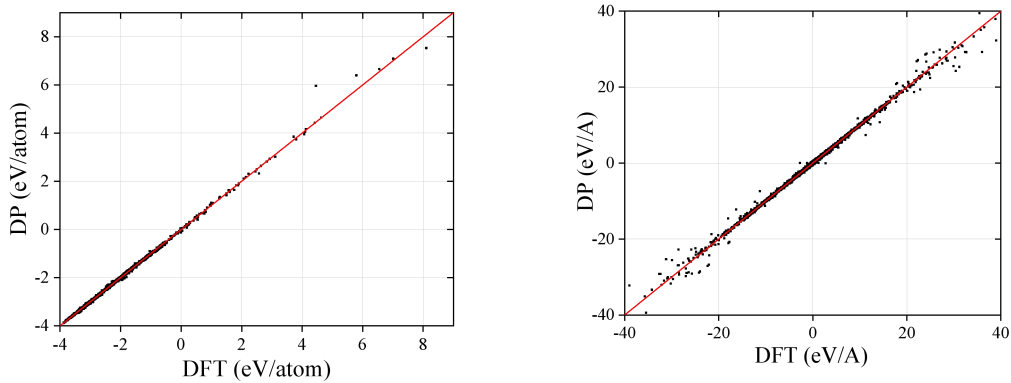


Рисунок 4 - Результаты модели длительного обучения

После длительного обучения мы провели масштабный поиск структур и получили трехфазную диаграмму. Известные структуры были воспроизведены с новыми структурами на трехфазной диаграмме, как показано на рисунке 5. где зеленые точки на корпусе - структуры, полученные из базы данных OQMD; цветовая полоса слева представляет энергию над корпусом. где чем ближе цвет к синему, тем ниже энергия, тем стабильнее структура и тем больше вероятность ее экспериментального синтеза; зеленый - стабильная структура.

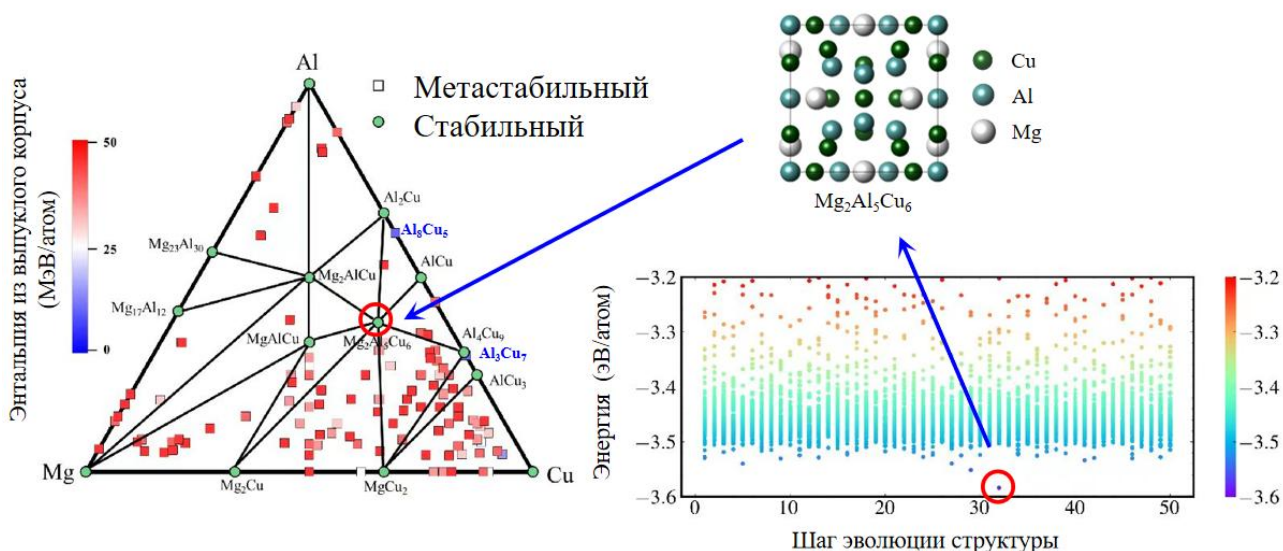


Рисунок 5 - Воспроизведение структуры на трехфазной диаграмме

Фононный спектр - это график, описывающий энергию и частоту колебаний решетки в твердом веществе, показывающий частоту и амплитуду всех колебаний решетки, и широко используется для описания

структур решетки, физических свойств и свойств материалов. В данной работе фононные спектры используются для прогнозирования возможных новых структур материалов, а также для исследования их стабильности, термодинамических свойств и механических характеристик.

Монолитные, бинарные или тернарные структуры, существующие в природе, соответствуют принципу энергетического минимума, т.е. чем ниже энергия, тем больше вероятность существования структуры. Мы демонстрируем термодинамическую стабильность структур и предсказываем их существование. Для проверки существования этих структур мы используем фононные спектры как основу кинетической стабильности, ожидая обнаружить потенциальные, потенциально синтетические структуры.

В данной работе в симуляциях CALYPSO был найден ряд структур, которые могут быть синтезированы для получения структурного поиска для модели длительного обучения. Которая обрабатывается с помощью VASP и рассчитывается фононный спектр для структур с  $e\_above\_hull$  ниже 20 мэВ/атом. Это показано на рисунке 6.

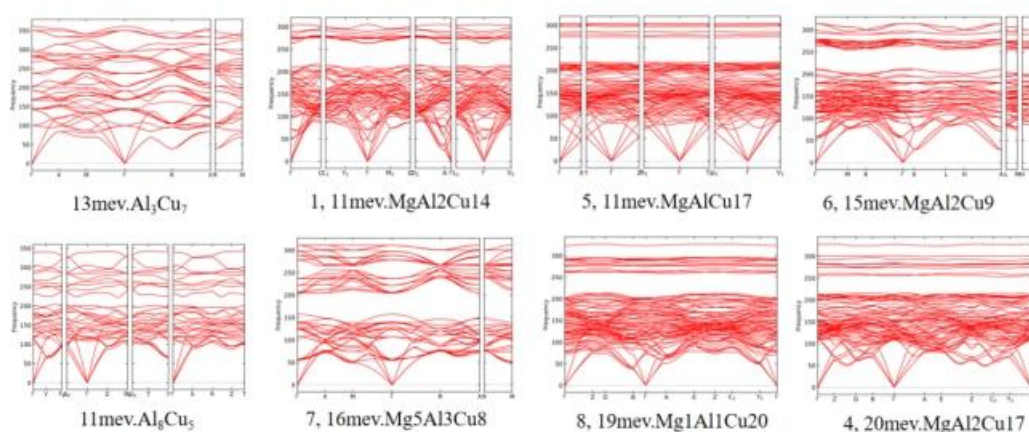


Рисунок 6 - Фононный спектр искомой структуры

Все вышеперечисленные структуры являются стабильными с точки зрения кинетической устойчивости, и мы идентифицируем их как стабильные структуры, которые могут быть найдены.

### 4.3 Результаты и выводы

Основываясь на вычислительных методах расчета из первых принципов и алгоритмах оптимизации роя частиц, мы расширили методы тестирования структуры CALYPSO для предсказания структуры синглетных, бинарных и тернарных соединений. Чтобы повысить эффективность и точность предсказания CALYPSO, мы объединили CALYPSO с DP-GEN. В данной работе новая структура неизвестного Mg-Al-Cu успешно предсказана в итеративно сгенерированной структуре, а ее стабильность продемонстрирована фононной спектроскопией. Тесты показывают, что этот метод надежен и может успешно снизить вычислительные затраты. Этот вывод обеспечивает новый подход к предсказанию структуры.

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА  
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И  
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
150Б91	Чжэн Юйхань

<b>Школа</b>	<b>Отделение школы (НОЦ)</b>
Уровень образования Бакалавриат	Направление/специальность 03.03.02 «Физика»

**Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:**

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Затраты на сырьё, размер окладов, затраты на электроэнергию, амортизационные расходы
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	– Согласно проектной документации. Районный коэффициент 1.3
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	– Отчисления во внебюджетные фонды 30%

**Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:**

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	– Потенциальные потребители результатов исследования; – проведение анализа конкурентоспособности.
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	– цели и результаты проекта; – организационная структура проекта.
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	– структура работ в рамках научного исследования; – разработка графика проведения научного исследования; – бюджет научно-технического исследования.

**Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):**

1. Оценка конкурентоспособности НИ;
2. SWOT- анализ;
3. Диаграмма Ганта;
4. Бюджет затрат научно-технического исследования
5. Основные показатели эффективности НИ

**Дата выдачи задания для раздела по линейному графику**

**Задание выдал консультант:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Доцент ОСГН ШБИП	Верховская.М.В	к.э.н, доцент		

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
150Б91	Чжэн Юйхань		



## **Глава 5 Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение**

Целью выполнения финансово-экономической части выпускной квалификационной работы является формирование навыков оценки результата научной работы и поиск источников финансирования для проведения научного исследования. Данный раздел, предусматривает рассмотрение следующих задач:

- Оценка коммерческого потенциала разработки;
- Планирование научно-исследовательской работы;
- Расчет бюджета научно-исследовательской работы;
- Определение ресурсной, финансовой, бюджетной эффективности исследования.

### **5.1 Потенциальные потребители результатов исследования**

Потенциальными потребителями результатов исследования являются организации в области промышленной автоматизации, интеллектуальных приборов, электроники и вооружения. В каждой области микроконтроллеры должны быть разработаны с низкой стоимостью и небольшим размером для получения сильных функций управления, низкого энергопотребления, высокой приспособляемости к окружающей среде, гибкости масштабирования и удобства использования.

Конкуренция внутри отрасли. Возросшая конкуренция в отрасли может быть вызвана несколькими причинами:

1) Медленный рост отрасли и ожесточенная борьба за долю рынка, во-вторых, большое количество конкурентов, конкурентные силы, как правило, равны, в-третьих, продукты или услуги, предлагаемые конкурентами, примерно одинаковы или, по меньшей мере, не отличаются друг от друга, в-четвертых, некоторые предприятия в интересах экономии масштаба, расширяют масштабы производства, рыночный баланс сил был нарушен, большое количество избытка продукции, предприятия начали прибегать к снижению цен на продажу.

2) Переговорная способность потребителей в отрасли моноконтроллеров. Клиент может быть потребителем или пользователем промышленной продукции или покупателем товара. Способность покупателя заключается в том, побуждает продавца снизить цену, улучшить качество продукта или предложить лучшее обслуживание.

3) Переговорочная способность поставщиков в отрасли микроконтроллера проявляется в том, могут ли поставщики эффективно побуждать покупателей принять более высокую цену, более раннее время оплаты или более надежный способ оплаты.

4) Угроза потенциальных конкурентов в отрасли микросхем, потенциальные конкуренты относятся к тем предприятиям, которые могут войти в отрасль для участия в конкуренции, они принесут новые производственные мощности, разделяют существующие ресурсы и рыночную долю, в результате чего затраты на производство в отрасли увеличиваются, рыночная конкуренция усиливается, цены на продукты снижаются, промышленная прибыль снижается.

5) Давление на альтернативные продукты в отрасли микросхем означает конкурентное давление на продукты, которые имеют одинаковые функции или могут удовлетворять одинаковые потребности и поэтому могут быть заменены друг с другом.

## **5.2 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научного исследования с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения**

### **5.2.1 SWOT – анализ**

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта.

Сильные стороны – это факторы, которые характеризуют конкурентоспособную сторону научно-исследовательского проекта. Указывают на отличительное преимущество проекта или ресурсы, являющиеся особенными с точки зрения конкуренции.

Слабые стороны – это недостаток, упущение или ограниченность научно-исследовательского проекта, которые препятствуют достижению его целей.

Возможности включают в себя предпочтительную ситуацию в настоящем или будущем, возникающую в условиях окружающей среды проекта, например, тенденцию, изменение или предполагаемую потребность, которая поддерживает спрос на результаты проекта и позволяет руководству проекта улучшить свою конкурентную позицию.

Угроза – это любая нежелательная ситуация, тенденция или изменение в условиях окружающей среды проекта, которая имеет разрушительный или угрожающий характер для его конкурентоспособности в настоящем или будущем.

SWOT-анализ можно осуществить и представить в виде интерактивной матрицы работы, таблица 1, а также результирующих таблиц возможностей и угроз НИР, таблицы 2.

Каждый фактор таблицы 1 помечается либо знаком «+» (означает сильное соответствие сильных сторон возможностям), либо знаком «-» (что означает слабое соответствие); «0» – если есть сомнения в том, что поставить «+» / «-».

Таблица 1. Интерактивная матрица проекта

Сильные стороны проекта					
Возможност и проекта		C1	C2	C3	C4
	B1	+	+	+	0
	B2	+	+	+	-
	B3	-	-	-	0

Таблица 2. SWOT-анализ

	Сильные стороны проекта: C1. Низкая стоимость. C2. низкая мощность. C3. высокая программируемость. C4. скорость обработки	Слабые стороны проекта: Сл1. Медленная скорость Сл2. плохая самозащита Сл3. ограниченная функциональность
Возможности: B1. Появление дополнительного спроса на новый продукт.	Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и возможности»:	Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и возможности»:

<p>В2. Снижение таможенных пошлин на сырье и материалы, используемые при научных исследованиях.</p> <p>В3. Повышение стоимости конкурентных разработок.</p>	<p>1. Обеспечение условий для создания кадров в области создания пористых структур для медицинского применения.</p> <p>2. Появление дополнительного спроса и финансирования, обеспеченных актуальностью тематики.</p>	<p>1. Необходимо финансирование на модернизацию, что возможно реализовать в условиях вуза.</p> <p>2. Расширение круга потребителей путем модернизации системы.</p>
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Отсутствие спроса на новые технологии производства.</p> <p>У2. Развитая конкуренция технологий производства.</p> <p>У3. Введение дополнительных государственных требований к сертификации продукции.</p>	<p>Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и угрозы»:</p> <p>1. Благодаря возможностям системы своевременному финансированию продвижение на рынок может стать успешным.</p> <p>2. Повышение конкурентоспособности после модернизации разработки.</p>	<p>Результаты анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и угрозы»:</p> <p>1. Наращивать рост производства и снижать стоимость оборудования.</p>

Результаты SWOT-анализа учитываются при разработке структуры работ, выполняемых в рамках научно-исследовательского проекта. Приведённый анализ показал, что технология, находясь на этапе разработки, имеет хорошие шансы на коммерциализацию, с учетом проявляемого интереса партнеров и удачных исследований. При этом если переход разработки в стадию коммерциализации затянется, то возможна потеря спроса на готовую технологию.

### 5.3 Планирование научно-технического исследования

В данном разделе составлен перечень этапов и работ в рамках проведения научного исследования и проведено распределение исполнителей по видам работ. Планирование комплекса предполагаемых работ осуществлялось в следующем порядке:

- разработка задания;
- теоретические исследования;
- составление порядка эксперимента, выбор технических режимов;
- изготовление исследуемых образцов;

- изготовление подготовка исследуемых образцов к исследованиям;
- экспериментальные исследования;
- оценка результатов экспериментов;
- оформление отчёта по ВКР;
- подготовка к защите ВКР.

Порядок составления этапов и работ, распределение исполнителей по данным видам работ приведен в таблице 3.

Таблица 3. Распределение исполнителей и этапы выполняемых работ

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель
Выбор направления исследований	2	Подбор и изучение материалов по теме	Руководитель, инженер
	3	Проведение патентных исследований	Руководитель, инженер
	4	Выбор направления исследований	Руководитель, инженер
	5	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, инженер
Теоретические и экспериментальные исследования	6	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Руководитель, инженер
	7	Составление порядка эксперимента, выбор технических режимов	Руководитель, инженер, сотрудник-техник
	8	Изготовление исследуемых образцов	Инженер
	9	Подготовка исследуемых образцов к проведению экспериментов	Инженер
	10	Проведение экспериментов	Руководитель, инженер, сотрудник-техник
	11	Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями и подготовка к участию в конференции	Руководитель, инженер

Обобщение и оценка результатов	12	Оценка эффективности полученных результатов и участие в конференции	Руководитель, инженер
	13	Определение целесообразности проведения ОКР	Руководитель, инженер

Данная таблица отображает вклад каждого участника исследовательской работы. Наибольшая часть работы приходится на инженера.

### 5.3.1 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудовые затраты в большинстве случаев образуют основную часть стоимости разработки, поэтому важным моментом является определение трудоемкости работ каждого из участников научного исследования.

С целью определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости используем следующую формулу:

$$t_{ож} = \frac{3t_{min} + 2t_{max}}{5}, \quad (5.3.1)$$

где  $t_{ож}$  – ожидаемая трудоёмкость выполнения работы, чел.дн.;  $t_{min}$  – минимально возможная трудоёмкость выполнения работы, чел.дн.;  $t_{max}$  – максимально возможная трудоёмкость выполнения работы, чел.-дн. Оценка трудоёмкости выполнения научного исследования для научного руководителя:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot 43 + 2 \cdot 91}{5} = 62.2 \text{ чел.} - \text{дн.}$$

Трудоёмкость выполнения научного исследования для сотрудника – техника:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot 6 + 2 \cdot 18}{5} = 10.8 \text{ чел.} - \text{дн.}$$

Трудоёмкость выполнения научного исследования для лаборанта:

$$t_{ож} = \frac{3 \cdot 61 + 2 \cdot 129}{5} = 88.2 \text{ чел.} - \text{дн.}$$

Далее определим продолжительность каждой работы в рабочих днях  $T_p$ , учитывая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями, по следующей формуле:

$$T_{pi} = \frac{t_{ожi}}{Ч_i}, \quad (5.3.2)$$

где  $T_{ди}$  – продолжительность одного этапа работы, раб.дн.;  $t_{ожi}$  – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн.;  $Ч_i$  – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Произведем длительно работ в рабочих днях.

Расчёт продолжительности работы выполнения научного исследования для научного руководителя:

$$T_{рд} = \frac{t_{ожс}}{K_{вн}} \cdot K_{д} = \frac{62.2 \text{ чел.-дн.}}{1} \cdot 1 = 62.2 \text{ раб.дни}$$

Продолжительность работы выполнения научного исследования для сотрудника-техника:

$$T_{рд} = \frac{10.8 \text{ чел.-дн.}}{1} \cdot 1 = 10.8 \text{ раб.дни}$$

Продолжительность работы выполнения научного исследования для лаборанта:

$$T_{рд} = \frac{88.2 \text{ чел.-дн.}}{1} \cdot 1 = 88.2 \text{ раб.дни}$$

Ленточный график проведения научных работ изображается в форме диаграммы Ганта. Для построения диаграммы необходимо перевести рабочие дни в календарные дни, для чего воспользуемся следующим соотношением:

$$T_{кд} = T_{рд} \cdot T_{к} \quad (5.3.3)$$

где  $T_{кд}$  – продолжительность выполнения этапа в календарных днях;  $T_{к}$  – коэффициент календарности, определяющийся выражением .

$$T_{к} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вд} - T_{пд}}, \quad (5.3.4)$$

где  $T_{кал}$  – количество календарных дней в году;  $T_{вд}$  – количество выходных дней в году;  $T_{пд}$  – количество праздничных дней.

Рассчитаем коэффициент календарности по формуле :

$$T_k = \frac{365}{365 - 66} = 1.22$$

Построим таблицу по результатам расчётов, в которой укажем трудоёмкости работ, название работы, а также укажем длительность работ в рабочих и календарных днях, таблица 4.



Таблица 4. Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоемкость работ									Длит. работ в раб. дни Трд			Длит. работ в кален. дни Ткд		
	t <sub>min</sub> , чел.-дн			t <sub>max</sub> , чел.-дн			t <sub>ож</sub> , чел.-дн			НР	СТ	ЛАБ	НР	СТ	ЛАБ
	НР	СТ	ЛАБ	НР	СТ	ЛАБ	НР	СТ	ЛАБ						
Составление и утверждение технического задания	2	-	-	4	-	-	2.8	-	-	2.8	-	-	3.4	-	-
Подбор и изучение материалов по теме	10	-	10	21	-	30	14.4	-	18	14.4	-	18	17.6	-	21.96
Проведение патентных исследований	5	-	7	8	-	15	6.2	-	10.2	6.2	-	10.2	7.6	-	12.4
Выбор направления исследований	3	-	5	4	-	7	3.4	-	5.8	3.4	-	5.8	4.2	-	7.1
Календарное планирование работ по теме	2	-	3	3	-	4	2.4	-	3.4	2.4	-	3.4	2.9	-	4.2
Проведение теоретических расчетов и обоснований	4	-	7	6	-	10	4.8	-	8.2	4.8	-	8.2	5.9	-	10
Составление порядка эксперимента, выбор технических режимов	1	1	2	3	3	4	1.8	1.8	2.8	1.8	1.8	2.8	2.2	2.2	3.4
Изготовление исследуемых образцов	-	-	2	-	-	3	-	-	2.4	-	-	2.4	-	-	2.9
Подготовка образцов к проведению экспериментов	-	-	7	-	-	12	-	-	9	-	-	9	-	-	11
Проведение экспериментов	5	5	5	15	15	15	9	9	9	9	9	9	11	11	11
Сопоставление результатов экспериментов с теоретическими исследованиями; подготовка к конференции*	5	-	7	10	-	12	7	-	9	7	-	9	8.5	-	11
Оценка эффективности полученных результатов; участие в конференции**	3	-	3	10	-	10	5.8	-	5.8	5.8	-	5.8	7.1	-	7.1
Определение целесообразности проведения ОКР	3	-	3	7	-	7	4.6	-	4.6	4.6	-	4.6	5.6	-	5.6
Итого	43	6	61	91	18	129	62.2	10.8	88.2	62.2	10.8	88.2	75.9	13.2	107.6

На основе таблицы 4, построим календарный план-график. График построим для максимального по длительности исполнения работ в рамках научно-исследовательского проекта, с разбивкой по месяцам и декадам за период времени дипломирования. Отметим области в зависимости от исполнителей, ответственных за конкретную работу, таблица 5.

Таблица 5 – Календарный план-график (график Ганта) проведения НИОКР

№ работ	Вид работ	Исполнители	Т <sub>кi</sub> , кал. дн.	Продолжительность выполнения работ																
				январь			февраль			март			апрель			май			июнь	
				3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2		
1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель	4.88																	
2	Подбор и изучение материалов по теме	Руководитель	25.6																	
		Инженер	36.6																	
3	Проведение патентных исследований	Руководитель	9.8																	
		Инженер	18.3																	
4	Выбор направления исследований	Руководитель	4.9																	
		Инженер	8.5																	
5	Календарное планирование работ по теме	Руководитель	3.7																	
		Инженер	4.9																	
6	Проведение теоретических расчетов и обоснований	Руководитель	7.3																	
		Инженер	12.2																	
7	Составление порядка эксперимента, выбор	Руководитель	3.7																	
		Инженер	4.9																	
		Сотрудник-техник	3.7																	



Таким образом, в ходе данного этапа работы были определены длительности и обозначены сроки выполнения всех запланированных видов работ. Была построена диаграмма Ганта, наглядно демонстрирующая этапы выполнения проекта участниками.

В результате выполнения подраздела был разработан план-график выполнения этапов работ для руководителя и инженера, позволяющий оценить и спланировать рабочее время исполнителей, а также рассчитано количество дней, в течение которых работал каждый из исполнителей.

## **5.4 Бюджет научного исследования**

### **5.4.1 Расчет материальных затрат НТИ**

В данном разделе составлен полный бюджет научных исследований. Расходы научных исследований состоят из материальных затрат, расходов на специальные оборудования, основной и дополнительной заработной платы, социальные отчисления и накладные расходы.

В статью расходов входят затраты на приобретение материалов, комплектующих изделий, необходимых для выполнения работ по данному научному исследованию. В таблице 6 приведены расходы по данной статье.

Таблица 6. Сырье, материалы, комплектующие изделия

Наименование	Марка, размер	Кол-во	Цена за единицу, руб.	Сумма, руб.
Одиночный чип	SIM7600	2	1542	3084
Компьютер		1	50000	50000
Линия данных		2	130	260
Всего за материалы				53344
Транспортно-заготовительные расходы (3-5%)				120
Итого по статье				53464

### **5.4.2 Расчет затрат на специальное оборудование для научных работ**

В рамках выполнения исследования использовалось имеющееся в собственности ИФПМ СО РАН оборудование, и закупка дополнительного специального оборудования не производилась. В таком случае затраты на специальное оборудование отсутствуют. Однако в ходе эксплуатации оборудования средства были затрачены в соответствии с амортизационными отчислениями. Расчет амортизации производится на

находящееся в использовании оборудование. В итоговую стоимость проекта входят отчисления на амортизацию за время использования оборудования в статье накладных расходов.

$$H_A = \frac{1}{n} = 0,1, \quad (5.4.1)$$

где  $n$  – срок полезного использования в количестве лет.

Амортизация, с учетом полезного использования 10 лет:

$$A = \frac{H_A I}{12} \cdot m,$$

где  $I$  – итоговая сумма, тыс. руб.;  $m$  – время использования, мес.

$$A = \frac{H_A I}{12} \cdot m$$

Амортизация, с учетом полезного использования 10 лет:

$$A = 0,1 \cdot 50000 \cdot \frac{4}{12} = 1666,6 \text{руб}$$

### 5.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Статья включает основную заработную плату работников, непосредственно занятых выполнением проекта, (включая премии, доплаты) и дополнительную заработную плату.

Основная заработная плата работников вычисляется по формуле:

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп}, \quad (5.4.2)$$

где  $Z_{осн}$  – основная заработная плата;  $Z_{доп}$  – дополнительная заработная плата (12-20% от  $Z_{осн}$ ).

Основная заработная плата одного работника:

$$Z_{осн} = Z_{дн} \cdot T_p, \quad (5.4.3)$$

где  $T_p$  – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником, раб. дн.;  $Z_{дн}$  – среднедневная заработная плата работника, руб.

Среднедневная заработная плата рассчитывалась по формуле:

$$Z_{дн} = \frac{Z_m \cdot M}{F_d}, \quad (5.4.4)$$

где  $Z_m$  – месячный должностной оклад работника, руб;  $M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года;  $F_d$  – действительный годовой

фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дн.

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_M = Z_{TC} \cdot k_p, \quad (5.4.5)$$

здесь  $Z_{TC}$  – заработная плата по тарифной ставке, руб.

В таблице 7 представлен годовой баланс рабочего времени для 6-дневной рабочей недели, в таблице 8 представлен расчет основной заработной платы.

Таблица 7. Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	52	104
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	48	24
- невыходы по болезни	5	10
Действительный годовой фонд рабочего времени	246	213

Таблица 8. Расчёт основной заработной платы

Исполнители	Оклад, руб/мес	Среднедневная ставка, руб/раб. день	Затраты времени, раб. дни	Основная заработная плата, руб
Научный руководитель	39000	1695.65	62.2	105469.43
Сотрудник-техник	13000	772.73	10.8	8345.48
Инженер	13000	772.73	88.2	68154.79
Итого				181970

По данным таблицы 8 получены данные по затратам на заработную плату сотрудников за весь период ВКР.

#### 5.4.4 Структура работ в рамках научного исследования

Расчет дополнительной заработной платы ведется по следующей формуле:

$$Z_{доп} = k_{доп} \cdot Z_{осн} \quad (5.4.6)$$

где,  $k_{доп}$  – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимается равным 0.12-0.15).

Дополнительная заработная плата руководителя:

$$Z_{\text{доп}} = 0.13 \cdot 105469.43 = 13711.02 \text{ руб}$$

Дополнительная заработная плата сотрудника-техника:

$$Z_{\text{доп}} = 0.13 \cdot 8345.48 = 1084.91 \text{ руб}$$

Дополнительная заработная плата инженера:

$$Z_{\text{доп}} = 0.13 \cdot 68154.79 = 8860.12 \text{ руб}$$

Суммарная дополнительная заработная плата равна 23656.05 рубль.

#### 5.4.5 Структура работ в рамках научного исследования

Данные расходы включают обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников. Ставка отчислений во внебюджетные фонды для учреждений, осуществляющих научную и образовательную деятельность, на 2021 год составляет 30% (ПФ – 22%, ФФОМС – 5.1%, ФСС – 2.9%)

Отчисления во внебюджетные фонды:

$$Z_{\text{внеб}} = k_{\text{внеб}} \cdot Z_{\text{осн}} = 181969.7 \cdot 0.3 \approx 54590.91 \text{ руб} \quad (5.4.7)$$

где  $k_{\text{внеб}}$  – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды ( $k_{\text{внеб}} = 0,3$ ).

#### 5.4.6 Расчет затрат на электроэнергию

Потребляемая мощность анализатора составляет 7 кВт/час. Длительность еженедельной работы на комплексной технологической установке составляет 2 часа. Стоимость электроэнергии в Томске составляет 5.748 рубля за 1 кВт/час. Стоимость электропотребления за 5 месяцев рассчитывается по формуле:

$$C_{\text{эл.об.}} = P_{\text{об}} \cdot Ц_{\text{э}} \cdot t_{\text{об}}, \quad (5.4.8)$$

где  $P_{\text{об}}$  – мощность, потребляемая оборудованием, кВт;  $Ц_{\text{э}}$  – тариф на 1 кВт·час;  $t_{\text{об}}$  – время работы оборудования, час.

Затраты на электроэнергию для технологических целей приведены в таблице 9.

Таблица 9. Затраты на электроэнергию

Наименование оборудования	Время работы оборудования	Потребляемая мощность $P_{об}$ , кВт	Затраты $C_{эл.об.}$ , руб.
Персональный компьютер	646	0.3	1113,96
Комплексная технологическая установка	40	7	1609,44
Итого			2723,4

#### 5.4.7 Расчет затрат на научные и производственные командировки и накладные расходы

Затраты на научные и производственные командировки исполнителей определяются в соответствии с планом выполнения темы и с учетом действующих норм командировочных расходов различного вида и транспортных тарифов, а также организационных взносов на конференции. Расчеты по данному пункту представлены в таблице 10.

Таблица 10. Расчета на научные и производственные командировки

Наименование мероприятия	Оплата, руб
Конференция «Перспективы развития фундаментальных наук XVIII)	1500
Итого: 1500 руб.	

Величина накладных расходов определяется по следующей формуле:

$$Z_{накл} = k_{нр} \cdot (Z_{осн} + Z_{дан} + Z_{внеб}) \quad (5.4.9)$$

$$Z_{накл} = 0.16 \cdot (54590.91 + 23656.05 + 181969.7) = 41634.66 \text{ руб}$$

#### 5.4.8 Формирование бюджета затрат НТИ

Расчет бюджета затрат в результате проведения НТИ представлен в таблице 11.

Таблица 11. Бюджет затрат

Наименование статьи	Сумма, руб
Материальные затраты	53464



Амортизация	1666.6
Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	181969.7
Затраты по доп. заработной плате исполнителей темы	23656.05
Отчисления во внебюджетные фонды	54590.91
Затраты на электроэнергию	2723.4
Затраты на научные производственные командировки	1500
Накладные расходы	41634.66
Бюджет затрат	361205.32

### 5.5 Ресурсоэффективность

Определение эффективности происходит на основе расчёта интегрального показателя эффективности научного исследования. Его нахождение связано с определением двух величин: финансовой эффективности и ресурсоэффективности.

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получают в ходе оценки бюджета затрат трёх вариантов исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принимается за базу расчёта, с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется по следующей формуле:

$$I_{\text{ФИНр}}^{\text{ИСПи}} = \frac{\Phi_{Pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (5.5.1)$$

где  $\Phi_{Pi}$  – стоимость  $i$ -го варианта исполнения;  $\Phi_{\text{max}}$  – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта.

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов исполнения объекта исследования можно определить по формуле:

$$I_{pi} = \sum a_i \cdot b_i, \quad (5.5.2)$$

В таблице 12 представлена сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта. Данный проект сравнивается с методикой качественного анализа материалов, заложенной в программе как базовая.

Таблица 12. Сравнительная оценка характеристик

Критерии	Весовой коэффициент параметра	Данный проект	Базовая методика качественного анализа материалов
Способствует росту производительности труда	0.25	5	5
Соответствует требованиям потребителей	0.15	4	4
Энергосбережение	0.2	4	3
Надежность	0.2	4	4
Материалоемкость	0.2	5	4
Интегральный показатель ресурсоэффективности		4.45	4.25

Характеристики имеют схожие критерии, так как методики реализованы для одного прибора. Каждая из представленных методик реализована для определённой задачи.

Пример расчёта интегрального показателя ресурсоэффективности:

$$I_p = 0.25 \cdot 5 + 0.15 \cdot 4 + 0.2 \cdot 4 + 0.2 \cdot 4 + 0.2 \cdot 5 = 4.45$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки определяется на основании интегрального показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по следующей формуле:

$$I_{ИСП} = \frac{I_{РЭ}}{I_{ФИН\rho}}, \quad (5.5.3)$$

Сравнительная эффективность проекта определяется по следующей формуле:

$$\mathcal{E}_{CP} = \frac{I_{Д.П.}}{I_{ИСП}}, \quad (5.5.4)$$

В таблице 13 представлена сравнительная эффективность данного проекта с базовой методикой качественного анализа материалов.

Таблица 13. Сравнительная эффективность

Показатели	Данный проект	Базовая методика качественного анализа материалов
Интегральный финансовый показатель	1	1
Интегральный показатель ресурсоэффективности	4.45	4.25
Интегральный показатель эффективности	4.45	4.25
Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1.05	0.95

Анализируя данные таблицы 13, разработанная методика эффективнее стандартной. Традиционная оценка экономической эффективности полученных результатов невозможны, т.к. они носят чисто научный характер.

### **Выводы по главе «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»**

В ходе выполнения раздела «Финансовый менеджмент» был выполнен анализ конкурентоспособности. Проведён SWOT-анализ проекта, в ходе которого были выявлены потенциальные внутренние и внешние сильные и слабые стороны, возможности и угрозы. Из анализа выяснили, что потенциальных сильных сторон у проекта больше, чем слабостей, что свидетельствует о перспективности исследования. Сильными сторонами можно назвать то, что технология является экономичной, энергоэффективной и экологичной, имеет маленький срок готовых результатов при проведении научного исследования и имеет квалифицированный персонал. К слабым сторонам можно отнести отсутствие прототипа научной разработки, Недостаток финансовых средств, большой срок поставок материалов и комплектующих, используемых при проведении научного исследования.

При планировании научно-исследовательской работы был произведен подсчет бюджета исследования по материальным затратам (69550 руб.),

затратам на специальное оборудование для научной работы (19507 руб.), затратам по дополнительной заработной плате (9471,71 руб.), затратам на научные и производственные командировки (1500 руб.), отчислениям во внебюджетные фонды (20974,5 руб), затратам на электроэнергию ( 1232 руб.) и накладным расходам (3143,45 руб.). Всего бюджет составил 125378, 66 руб.

Проведена оценка результатов ресурсоэффективности, которая составила 4,45 из 5, что говорит о хорошей эффективности реализации технического проекта.

Проведение такого рода оценки коммерческой ценности необходимо, чтобы оценить состояние и перспективы проводимых научных исследований.

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА  
«СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»**

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
150Б91	Чжэн Юйхань

<b>ШКОЛА</b>	Инженерная школа ядерных технологий	<b>Отделение</b>	Отделение экспериментальной физики
<b>Уровень образования</b>	Бакалавр	<b>Направление/специальность</b>	03.03.02 Физика

**Тема дипломной работы: «Прогнозирование на основе данных тернарных соединений Li-La-N при высоких давлениях»**

<b>Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:</b>	
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения)</li> </ul> <p><b>Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>• организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</li> </ul>	<p><i>Объект исследования:</i> программа, написанная с использованием методов машинного обучения.</p> <p><i>Рабочая зона:</i> компьютерный зал (Цзилиньский университет, КНР).</p> <p><i>Размеры помещения:</i> 4 м x 3,5 м x 3 м.</p> <p><i>Количество и наименование оборудования рабочей зоны:</i> Чжэн Юйхань разработка процедуры прогнозирования свойств новых материалов, проверка правильности на сплавах Mg-Al-Cu с помощью программного пакета CALYPSO.</p>
<b>Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:</b>	
<p><b>1. Производственная безопасность</b></p> <p><b>Анализ показателей шума и вибрации</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• установление соответствие показателей нормативному требованию;</li> </ul> <p><b>Анализ показателей микроклимата</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• показатели температурные, скорости движения воздуха, запыленности.</li> </ul> <p><b>Анализ освещенности рабочей зоны</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• типы ламп, их количество, соответствие нормативному требованию освещенности;</li> </ul> <p><b>Анализ электробезопасности</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• наличие электроисточников, характер их опасности;</li> <li>• установление класса электроопасности помещения, а также безопасные номиналы тока, напряжения, сопротивления заземления.</li> </ul> <p><b>Анализ пожарной безопасности</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• присутствие горючих материалов, тем самым,</li> </ul>	<p style="text-align: center;"><b>Для всех случаев вредных и опасных факторов</b> на рабочем месте указать ПДУ, ПДД, допустимые диапазоны существования, в случае превышения этих значений:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• перечислить средства коллективной и индивидуальной защиты;</li> <li>• привести классы электроопасности помещений, а также безопасные номиналы тока, напряжения, сопротивления заземления,</li> <li>• категорию пожароопасности помещения,</li> <li>• марки огнетушителей, их назначение.</li> </ul> <p style="text-align: center;">При отклонении показателя предложить мероприятия.</p>

<p>присутствие повышенной степени пожароопасности.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• категории пожароопасности помещения, марки огнетушителей, их назначение.</li> <li>• Разработать схему эвакуации при пожаре.</li> </ul>	
<p><b>2. Экологическая безопасность:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• защита селитебной зоны</li> <li>• анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы);</li> <li>• анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы);</li> <li>• анализ воздействия объекта на литосферу (отходы);</li> <li>• разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.</li> </ul>	<p>Наличие отходов (металлическая стружка, абразивная пыль, черновики бумаги, отработанные картриджи принтера, обрезки электромонтажных проводов) потребовали разработки методов (способов) утилизации перечисленных отходов.</p> <p>Наличие радиоактивных отходов также требует разработки их утилизации.</p>
<p><b>3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения;</li> <li>• выбор наиболее типичной ЧС;</li> <li>• разработка превентивных мер по предупреждению ЧС;</li> <li>• разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.</li> </ul>	<p>Рассматриваются 2 ситуации ЧС:</p> <p>1) природная – сильные морозы зимой;</p> <p>2) техногенная – исключить несанкционированное проникновение посторонних на рабочее место (большая вероятность проведения диверсии).</p> <p>Необходимо предусмотреть мероприятия по обеспечению устойчивой работы производства в том и другом случае.</p>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	27.02.2023 г.
--	---------------

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ТПУ	Сечин Александр Иванович	д.т.н.		27.02.2023 г.

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б91	Чжэн Юйхань		27.02.2023г.

## **Глава 6 Социальная ответственность**

Объектом исследования является программа, написанная с использованием методов машинного обучения.

Исследование выполнялось в компьютерный зал (Цзилиньский университет, КНР). Размеры помещения: высота 4 м, ширина 3.5 м, длина 3 м, площадь 42 м<sup>3</sup>. Рабочее оборудование представляет собой персональный компьютер.

В процессе проведения исследования выполняли следующее: Разработка процедур прогнозирования структуры новых материалов и валидация системы Mg-Al-Cu с использованием программного пакета CALYPSO.

С целью оценки степени безопасности исследования структурного прогнозирования на системах Mg-Al-Cu ,в данном разделе ВКР необходимо рассмотреть правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности; потенциальные вредные и опасные факторы и способы снижения их воздействия; экологическую безопасность научного проекта, а также вопросы безопасности в чрезвычайных ситуациях.

### **6.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности**

Социальная ответственность или Корпоративная социальная ответственность (как морально-этический принцип) — это ответственность и приверженность людям, когда организации берут на себя ответственность за влияние своей деятельности на клиентов, поставщиков, сотрудников, при учете интересов коллектива и общества, Акционеры (IS CSR 26000:2011).

Эта исследовательская работа проводится в комнате 212 Международного центра вычислительных методов и программного обеспечения, зона В, здание Tang Aoqing, Цзилиньский университет. Помещение оборудовано видеотерминалом (ВДТ), персональным компьютером (ПК), компьютерным столом, стулом, центральным кондиционером, диспенсером для воды, кофеваркой и пожарной сигнализацией.

Помещение относится к категории помещений без повышенной опасности, потому что не существует условий, которые могли бы увеличить или специально увеличить опасность.

В целях обеспечения промышленной безопасности необходимо проводить анализ воздействия вредных и опасных производственных факторов, которые могут возникать при разработке или эксплуатации объекта, на организм человека.

Производственный фактор считается вредным, если его воздействие на рабочего может вызвать у него заболевание. Фактор производства считается опасным, если его воздействие на работника может причинить ему вред.

Все факторы производства классифицируются как факторы: физические, химические, биологические и психофизические. Для данной работы целесообразно учитывать физические и психофизические вредности и опасности на производстве, которые относятся как к рабочей зоне программиста, как разработчика систем, рассматриваемых в данной работе, так и к пользователю готовой продукции в рабочей зоне. оператор ПК.

## **6.2 Производственная безопасность**

В данном пункте анализируются вредные и опасные факторы, которые могут возникнуть при проведении исследований, проектных решений или эксплуатации.

Для выявления потенциальных факторов необходимо использовать ГОСТ 12.0.003-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Опасные и вредные производственные факторы. Классификация

Таблица 14 - Возможные опасные и вредные производственные факторы на рабочем месте *Аудитория 212, Международный центр вычислительных методов и программного обеспечения*

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Нормативные документы
---------------------------------	-----------------------



<p>Опасные и вредные производственные факторы, связанные с аномальными микроклиматическими параметрами воздушной среды на местонахождении работающего</p>	<p>СанПин 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений</p>
<p>Электромагнитное излучение</p>	<p>СанПин 2.2.2/2.4.1340-03. Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы</p>
<p>Недостаточная освещенность</p>	<p>Требования к освещению устанавливаются СП 52.13330.2016 Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*</p>
<p>Шум от компьютерного оборудования</p>	<p>ГОСТ 12.1.003–83* регламентирует требования к шуму на рабочих местах.</p>
<p>Опасность поражения электрическим током</p>	<p>ГОСТ 12.1.038-82 определяет максимально допустимое напряжение прикосновения и частоту переменного тока через тело человека в нормальном режиме эксплуатации.</p>

### 6.2.1 Микроклимат

К параметрам микроклимата относятся температура, относительная влажность и скорость движения воздуха, которые в значительной степени влияют на работу, самочувствие и здоровье человека, а также на достоверность компьютерных расчетов.

Микроклимат рабочего места зависит от многих факторов, в том числе от теплофизических свойств рабочего процесса и типа используемого оборудования, климата, сезона или времени года, количества работающих и условий отопления и вентиляции, размеров и состояния производственного помещения, и т. д. Микроклимат, особенно температура воздуха и тепловое излучение, могут меняться в течение рабочего дня и различаться в разных зонах одного и того же помещения. В дополнение к этим основным параметрам существует также атмосферное давление, которое влияет на парциальное давление основных компонентов воздуха (кислорода и азота) и, следовательно, на дыхание человека.

В таблице 15 приведены оптимальные и допустимые значения параметров микроклимата.

Таблица 15 Оптимальные и допустимые нормы микроклимата

Период года	Температура, °С					Относительная влажность, %		Скорость движения воздуха, м/с	
	Оптимальная	Допустимая на рабочих местах				Оптимальная	Допустимая	Оптимальная, не более	Допустимая, не более
		Верхняя		Нижняя					
		Пост.	Не пост.	Пост.	Не пост.				
Холодный	22-24	25	26	21	18	40-60	75	0,1	0,1
Теплый	23-25	28	30	22	20	40-60	70	0,1	0,1

При высокой температуре в помещении кровеносные сосуды в коже расширяются, увеличивается приток крови к поверхности тела, значительно увеличивается тепловыделение в окружающую среду. При более низких температурах окружающей среды кровеносные сосуды кожи

сужаются, кровоток к поверхности тела замедляется, а теплопередача за счет конвекции и излучения уменьшается. Поэтому сочетание температуры, относительной влажности и скорости воздуха в рабочей зоне важно для теплового здоровья человека.

Высокая влажность воздуха ( $\phi > 85\%$ ) затрудняет терморегуляцию организма из-за снижения испарения пота, а низкая влажность ( $\phi < 20\%$ ) приводит к пересыханию слизистых оболочек дыхательных путей.

Для обеспечения оптимальных и приемлемых показателей микроклимата в холодное время года необходимо принять меры по защите рабочего места со стеклянными поверхностями открывающихся окон от остывания, а также установить систему обогрева. В теплое время года необходима защита от прямых солнечных лучей, а к средствам защиты относятся кондиционеры, основной задачей которых является удержание параметров воздуха в установленных пределах для обеспечения надежной работы компьютеров и комфортных условий труда для работающих.

### **6.2.2 Электромагнитное излучение**

Основным фактором опасности при использовании компьютера является электромагнитное излучение. Вредно-допустимые уровни (ВДУ) электромагнитных излучений ПЭВМ указаны в документе СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03, как показано в таблице 16.

Распространение электромагнитных полей происходит с помощью электромагнитных волн, которые в свою очередь испускают заряженные частицы, молекулы, атомы и другие компоненты. Опасность электромагнитного излучения подтверждена соответствующими исследованиями ученых, поэтому его влияние на организм человека следует максимально ограничивать.

Таблица 16 – Предварительно допустимые уровни ЭМП от ПК

Наименование параметров		ВДУ
Напряжённость электрического поля	В диапазоне частот 5 Гц-2 кГц	25 В/м

	В диапазоне частот 2 кГц-400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока	В диапазоне частот 5 Гц-2 кГц	250 нТл
	В диапазоне частот 2 кГц-400 кГц	25 нТл
Электростатический потенциал экрана видеомонитора		500 В

Обеспечение радиационной безопасности требует принятия различных мер в зависимости от конкретных условий эксплуатации источников излучения и типа источника излучения.

Для предотвращения внешнего облучения, возникающего при использовании закрытых источников излучения, необходимо принять следующие меры:

- увеличить расстояние между источником излучения и работающим (дистанционная защита);
- Сократить время работы источников излучения (время защиты);
- Свести к минимуму мощность источников излучения (количественная защита);
- Экранирование источника излучения (защита экрана).

### **6.2.3 Недостаточная освещенность**

Согласно ГОСТ 12.0.003.-86 недостаточное освещение рабочей зоны является вредным производственным фактором, способным привести к слепоте или вызвать быстрое утомление. Свет влияет на физиологическое состояние человека, а правильно организованное освещение стимулирует процессы высшей нервной деятельности и повышает их эффективность. При недостаточном освещении человек менее продуктивен, быстро устает, у него повышена вероятность совершения ошибок, которые могут привести к травмам. В зависимости от длины волны свет может быть стимулирующим (оранжево-красный) или

успокаивающим (желто-зеленый).

Таблица 17 Требования к освещению для операторов ПК на  
промышленных площадках

Характеристика зрительной работы	Наименьший или эквивалентный размер объекта различения, мм	Разряд зрительной работы	Подразряд зрительной работы	Контраст объекта с фоном	Характеристика фона	Искусственное освещение		
						Освещённость, лк		
						При системе комбинированного освещения	В том числе от общего	При системе общего освещения
Высокой точности	От 0,3 до 0,5	III	г	Средний, большой	Светлый, средний	400		

#### 6.2.4 Шум от компьютерного оборудования

Уровень звука измеряется в дБА. Это метрика для оценки постоянного и непостоянного шума. В нормативных документах указывается максимально допустимый уровень звука для постоянного шума и эквивалентный уровень звука для нестационарного шума.

ГОСТ 12.1.003–83\* устанавливает классификацию шума, допустимые уровни шума на рабочих местах, общие требования к

шумовым характеристикам машин, учреждений, транспортных средств и другого оборудования и защите от шума. Например, уровни звука и эквивалентные уровни звука не должны превышать:

- В помещениях конструкторских бюро, лабораторий теоретических работ и программирования - 50 дБА;
- В аппаратных, студиях – 60 дБА;
- В помещениях наблюдения и дистанционного управления:
  - а) без телефонной голосовой связи – 70 дБА;
  - б) голосовая связь по телефону – 65 дБА;
- В точно смонтированных, набранных офисных помещениях - 65 дБА;
- Экспериментальная работа в лаборатории – 75 дБА;
- На постоянных рабочих местах и в рабочих зонах производственных помещений - 80 дБА.

В целях снижения шума компьютерной техники принимаются следующие основные меры:

1. Звукоизоляция – звуковая энергия отражается от забора и лишь частично проходит через него (установка звукоизоляционных ограждений, звукоизоляционных экранов).
2. Установить глушитель – устройство, снижающее аэродинамический шум (преобразование энергии газовой струи в аэродинамическую энергию) на пути ее распространения, содержащее звукопоглощающий материал или отражающее шум обратно к источнику.
3. Оборудование размещено разумно.
4. Используйте средства индивидуальной защиты (противошумные наушники, беруши).

### **6.2.5 Опасность поражения электрическим током**

Электрический ток протекает через тело человека, вызывая тепловые, электролитические, биологические и механические эффекты.

- Термические воздействия характеризуются нагреванием кожи, тканей до ожогов.

- Электролиз предполагает расщепление жидкостей, в том числе крови, изменение их состава и свойств.

- Биологические эффекты проявляются нарушениями биологических процессов, происходящих в организме, сопровождающимися раздражением и возбуждением тканей и судорожными сокращениями мышц, нарушением функций дыхания и сердца.

- Переломы вследствие электрокинетического воздействия, ушибы, вывихи, резкие судорожные движения тела, разрыв тканей при механическом воздействии.

Согласно ГОСТ 12.1.038-82 «ССБТ предельно допустимыми уровнями напряжения и тока прикосновения считаются три основных параметра: сила тока, протекающего через тело человека, напряжение прикосновения и продолжительность действия тока. Среди возможных режимы протекания тока через тело человека (Голова-рука, голова-нога, рука-рука, нога-рука, нога-нога и др.), наиболее опасны пути, при которых поражаются головной мозг, сердце, легкие.

Документ ГОСТ 12.1.038-82 определяет максимально допустимое напряжение прикосновения к телу человека (рука-рука, нога-нога) в нормальном (неаварийном) режиме работы и частоте переменного тока для производственных и бытовых нужд 50В и 400 Гц.

Во избежание поражения работников электрическим током должны быть приняты следующие меры: защитное заземление, использование низкого напряжения, защитное отключение питания, размещение знаков безопасности.

#### **6.2.6 Анализ опасных и вредных производственных факторов**

С целью выявления вредных и вредных производственных факторов были определены работы и операции, связанные с выполнением ВКР. Основная работа выполняется на рабочем месте с использованием ПК и периферийных устройств. Работа на ПК относится к категории работ, связанных с опасными и вредными условиями труда. На основании

вышеизложенной работы выделяем опасные и вредные производственные факторы.

Для вышеперечисленных работ пагубными являются следующие факторы:

- 1) Шум, создаваемый работой оборудования на рабочем месте;
- 2) Электромагнитное излучение от дисплея;
- 3) Опасность поражения электрическим током.

### **6.3 Экологическая безопасность**

При написании ВКР вредных выбросов в атмосферу, почву и водные источники не производилось, радиационного заражения не произошло, чрезвычайные ситуации не наблюдались, поэтому не оказывались существенные воздействия на окружающую среду, и никакого ущерба окружающей среде не было нанесено.

Объект исследования является теоретическим, но разрабатывается в компьютере. Поэтому с точки зрения влияния на окружающую среду рассмотрим влияние компьютерной техники, использованной при его разработке.

Компьютерная техника потребляет сравнительно небольшое количество электроэнергии, поэтому по затратам на электроэнергию оно не оказывает существенной опасности для окружающего мира.

Компьютеры, утратившие потребительские свойства относятся к IV классу опасности (малоопасные отходы). Обезвреживание и размещение отходов I–IV классов опасности проводятся организациями, имеющими лицензию на осуществление этой деятельности. При неправильной утилизации компьютера может значительно пострадать экология, поэтому предлагается следующий порядок утилизации:

- 1) Удаление всех опасных компонентов;
- 2) удаление всех крупных пластиковых частей. Оставшиеся после разборки части отправляют в большой измельчитель, и все дальнейшие операции автоматизированы.



3) измельченные в гранулы остатки компьютеров подвергаются сортировке. Сначала с помощью магнитов извлекаются все железные части. Затем приступают к выделению цветных металлов, которых в ПК значительно больше.

Все полученные в ходе переработки материалы могут вторично использоваться в различных производственных процессах.

#### **6.4 Безопасность в чрезвычайных ситуациях**

При обнаружении отказа суперкомпьютера необходимо остановить работу, выйти из программы, выключить компьютер, выключить суперкомпьютер и уведомить об этом руководство.

В случае возникновения пожара необходимо немедленно прекратить работу, отключить электрооборудование, вызвать пожарную сигнализацию по номеру 119, сообщить о сложившейся ситуации ответственному лицу подразделения и приступить к тушению пожара с применением первичных средств пожаротушения.

Во избежание опасности возгорания и взрыва примите следующие меры:

- 1) планирование на уровне предприятия защиты работников и помещений от пожаровзрывоопасности;
- 2) Эвакуация рабочих;
- 3) сформировать запас СИЗ и подготовить его;
- 4) проектирование, размещение, строительство и эксплуатация инфраструктуры, в том числе потенциально опасных объектов;
- 5) Инженерное обеспечение защиты работающих - строительство защитных сооружений (средств коллективной защиты).



Рисунок 7 – План эвакуации людей

Лаборатории должны составить план эвакуации: план (схему), составленный с указанием путей эвакуации и эвакуационных выходов, устанавливающий правила и последовательность передвижения работников в аварийных ситуациях.

#### **Выводы по главе «Социальная ответственность»**

В документе рассматриваются вопросы охраны труда и здоровья. Изучена промышленная безопасность рабочей зоны и воздействующие факторы на окружающую среду, определены меры и средства защиты, рассмотрена аварийная ситуация и ее поведение, ознакомлен с регламентом работы устройства. Для обеспечения безопасности жизни работа должна выполняться по мере необходимости.

## Заключение

Данная работа посвящена повышению точности и эффективности поиска структур на основе метода предсказания CALYPSO в сочетании с инструментом DP-GEN. Была установлена связь между CALYPSO и DP-GEN и проведен поиск структур с использованием материала Mg-Al-Cu для тестирования. В результате проделанной работы были получены следующие результаты.

Во-первых, построена связь между CALYPSO и DP-GEN, что сделало процесс предсказания структуры одновременно высокоточным и эффективным.

Во-вторых, осуществлен поиск структуры на основании Mg-Al-Cu. В ходе поиска была использована комбинация CALYPSO и DP-GEN для итераций и обучения чтобы найти структуры с энергией ниже 20 мэВ/атом по сравнению со структурами на известных выпуклых оболочках. После проведения фоновых спектральных расчетов была выявлена стабильная структура, соответствующая предъявленным критериям. Таким образом была продемонстрирована целесообразность поиска структур путем объединения CALYPSO с DP-GEN.

В конечном итоге было показано, что предложенный в данной работе метод позволяет достичь как высокой точности, так и высокой эффективности при поиске кристаллических структур. В то же время, была продемонстрирована возможность предсказания новых структур на основе данных, полученных в этой работе.

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1]. [1] Glass C W, Oganov A R, Hansen N. USPEX—Evolutionary crystal structure prediction[J]. *Computer Physics Communications*, 2006, 175: 713–720.
- [2]. Blank T B, Brown S D, Calhoun A W, et al. Neural network models of potential energy surfaces[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1995, 103: 4129–4137.
- [3]. 许笑然. "基于机器学习方法探索硼团簇的基态结构."
- [4]. Eberhart R, Kennedy J. New optimizer using particle swarm theory[C]*Proceedings of the International Symposium on Micro Machine and Human Science*. IEEE, 1995: 39–43.
- [5]. Su C, Lv J, Li Q, et al. Construction of crystal structure prototype database: methods and applications[J]. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2017, 29: 165901.
- [6]. Hohenberg P, Kohn W. Inhomogeneous electron gas[J]. *Physical Review*, 1964, 136(3B): B864.
- [7]. BORN M, HUANG K, BORN M, et al. *Dynamical theory of crystal lattices* [M]. Clarendon Press Oxford, 1956.
- [8]. 谢希德, 陆栋. *固体能带理论* [M]. 复旦大学出版社, 1998.
- [9]. 高博等. "CALYPSO 界面结构预测方法及应用." 第九届计算纳米科学与新能源材料国际研讨会 0.
- [10]. KOHN W, SHAM L J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects [M]. APS, 1965.
- [11]. Tong, Q. et al. Accelerating CALYPSO structure prediction by data-driven learning of a potential energy surface. *Faraday discussions* 211 (2018).
- [12]. Jiang, W. et al. Accurate Deep Potential model for the Al–Cu–Mg alloy in the full concentration space. *Chin. Phys. B* 30, 050706 (2021).

- [13]. BORN M, HUANG K, BORN M, et al. Dynamical theory of crystal lattices [M]. Clarendon Press Oxford, 1956.
- [14]. Zhang, Y. et al. DP-GEN: A concurrent learning platform for the generation of reliable deep learning based potential energy models. Comput. Phys. Commun. 253, 107206 (2020).
- [15]. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 № 197-ФЗ (ред. от 02.12.2019).
- [16]. ГОСТ 12.2.032-78. ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).
- [17]. ГОСТ 12.2.033-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ стоя. Общие эргономические требования (дата введения: 01.01.1979).
- [18]. ГОСТ 12.0.003-2015. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация (дата введения: 01.03.2017).
- [19]. ГОСТ 12.1.003-2014. ССБТ. Шум. Общие требования безопасности (дата введения: 01.11.2015).
- [20]. СН 2.2.4/2.1.8.562-96. Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки (утв. Постановлением Госкомсанэпиднадзора РФ от 31 октября 1996 г.).
- [21]. ГОСТ 12.1.029-80. ССБТ. Средства и методы защиты от шума. Классификация (дата введения: 01.07.1981).
- [22]. ГОСТ 12.1.005-88. ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны (дата введения: 01.01.1989).
- [23]. ГОСТ 12.1.007-76. ССБТ. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности (дата введения: 01.01.1977).
- [24]. СанПиН 1.2.3685-21 «Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания» (утв. Постановлением № 2 от 28 января 2021 г.).

- [25]. ГОСТ 12.4.011-89. ССБТ. Средства защиты работающих. Общие требования и классификация (дата введения: 01.07.1990).
- [26]. ГОСТ 12.1.038-82 ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов (дата введения: 01.07.1983).
- [27]. ГОСТ Р 12.1.019-2009 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты (дата введения: 01.01.2011).
- [28]. Влияние шума на организм человека [Электронный ресурс] // Управление Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека по Карачаево-Черкесской республике. – 2011. – URL: <http://09.rospotrebnadzor.ru/content/vliyanie-shuma-na-organizm-cheloveka> (дата обращения: 20.03.2023).
- [29]. Микроклимат на рабочем месте [Электронный ресурс] // Управление Федеральной службы по надзору в сфере защиты прав потребителей и благополучия человека по Кемеровской области – Кузбассу. – 2016. – URL: <http://42.rospotrebnadzor.ru/content/874/54136/> (дата обращения: 20.03.2023).
- [30]. Мушников, В. С. Условия труда работающих: влияние нагревающего микроклимата промышленных помещений на организм человека: Методическая разработка / В. С. Мушников, В. В. Вьюхин, В. И. Лихтенштейн, Л. Г. Турчанинов. – Екатеринбург: УрФУ, 2019. – 22 с.
- [31]. Назаренко, О. Б. Безопасность жизнедеятельности: учебное пособие / О. Б. Назаренко. – Томск: Изд-во ТПУ, 2010. – 144 с.
- [32]. Куликов, Г. Б. Безопасность жизнедеятельности: учебник / Г. Б. Куликов. – М.: МГУП, 2010. – 408 с.
- [33]. Михалёва, К. А. Влияние параметров световой среды на здоровье человека / К. А. Михалёва [Электронный ресурс] // Городской округ Верхотурский. – 2017. – URL:

[verhotury.ru/social/helth/media/2017/10/16/vliyanie-parametrov-svetovoj-sredyi-na-zdorove-cheloveka/](https://verhotury.ru/social/helth/media/2017/10/16/vliyanie-parametrov-svetovoj-sredyi-na-zdorove-cheloveka/) (дата обращения: 20.03.2023).

[34]. СанПиН 2.1.3684-21 «Санитарно-эпидемиологические требования к содержанию территорий городских и сельских поселений, к водным объектам, питьевой воде и питьевому водоснабжению, атмосферному воздуху, почвам, жилым помещениям, эксплуатации производственных, общественных помещений, организации и проведению санитарно-противоэпидемических (профилактических) мероприятий (с изменениями на 14 февраля 2022 года).

[35]. ФЗ «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» от 22.07.2008 № 123-ФЗ (с изменениями от 30 апреля 2021 года).

[36]. ВНЭ 5-79. Правила пожарной безопасности при эксплуатации предприятий химической промышленности (утв. Министерством химической промышленности 25 июля 1979 г.).