

# ИСКУССТВЕННЫЙ ИНТЕЛЛЕКТ В ТЕОРЕТИЧЕСКОМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ

*В. В. Дремов*

ФГУП «РФЯЦ – ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина», Снежинск, Россия

В теоретическом материаловедении, задача которого создание новых материалов и прогноз изменения свойств уже существующих в условиях эксплуатации, в настоящее время существуют два больших направления: многомасштабное моделирование и информатика материалов. У каждого есть свои достоинства и недостатки. Первое – медленное, но точное, второе – быстрое, но точность невелика. Первое опирается на теорию, которая может быть несовершенна, второе – на анализ с помощью искусственного интеллекта баз данных по свойствам, которые, как правило неполны и разнородны, а для новых еще несуществующих материалов их нет вообще. В многомасштабном моделировании также есть место для искусственного интеллекта. Например, для ускорения расчетов методами квантовой теории конденсированного состояния используются машинно-обученные модели взаимодействия, которые применяются на более высоком масштабном уровне атомистического моделирования. Будущее несомненно должно объединить эти два подхода, когда базы данных для работы искусственного интеллекта создаются или дополняются с помощью цифровых инструментов, созданных на базе многомасштабного моделирования. Здесь открываются перспективы в создании материалов: электроды для аккумуляторов нового поколения, низкоразмерные магнетики для спинтроники, Китаевские магнетики со спин-жидкостным состоянием для квантовых компьютеров, радиационно-стойкие материалы с рекордными показателями для новых поколений ядерных реакторов, не останется в стороне и оружейная тематика.

---