**Рецензія на статтю**

У роботі автори досліджують теплопровідність пористого кремнію за допомогою двох підходів:

1. Молекулярна динаміка (MD) для обчислення кривих k(tc)— залежності теплопровідності від часу інтегрування у формулі Гріна–Кубо.
2. Машинне навчання (ML) — для відновлення та екстраполяції цих кривих у діапазонах температур і пористостей, які не були покриті MD.

**Суть методики**

По суті, відбувається **екстраполяція/інтерполяція кривої k(tc)** за допомогою ML на основі обмеженого набору MD-точок.Тобто вони отримують криву не з усієї фізичної симуляції, а “доповнюють” її даними з ML, щоб зекономити обчислювальний час. Вхідні ознаки (features) для ML виглядають як:

kpred=f(porosity,temperature,tc)

Це досить проста але цікава модель, яка не має ніяких мікроскопічних параметрів. Тобто автори мають на меті опис поведінки кристалу лише з макроскопічних параметрів.

**Некритичні питання але потребує пояснення:**

**1. Питання до фізичної постановки**

* **Як виникає пора?** У статті немає пояснення, чи це фізичне утворення (як результат термодинамічних процесів) чи штучно вирізана порожнина в моделі. Якщо її задають вручну, то закономірність “пора завжди посередині” — це просто умова симуляції, а не фізичний ефект. У реальних матеріалах пори розташовуються хаотично, розміри можуть варіюватися, і це залежить від температури, технології та хімічного складу.
* **Вплив радіуса пори** (тобто відношення пустих атомів до заповнених у комірці) на теплопровідність очевидний: чим більша пора — тим сильніше розсіюються фонони, тим нижча теплопровідність. Але ця залежність у реальності нелінійна та залежить від геометрії, а не тільки від об’єму порожнини.

**2. Чому передбачати всю криву k(tc)**

* Фінальна мета — отримати граничне значення інтегралу (плато k при великому tc ​). Можна було б будувати модель, яка одразу передбачає це плато, без реконструкції всієї кривої. Поточний підхід виглядає як зайвий обхідний шлях, хоча, можливо, вони так робили для кращого контролю форми кривої.

**Критичні питання:**

**3. Питання до вибору метрик**

* Автори використали MWSE (mean weighted squared error) замість стандартного MSE. Якщо ваги підібрані так, щоб приділяти більше уваги певним ділянкам кривої (наприклад, плато), то це може бути способом “підтягнути” модель під бажану форму кривої. Такий вибір треба пояснювати чітко, інакше є ризик штучного покращення метрик.

**4. Перевірка фізичної адекватності на простих моделях**

* Для простих випадків (наприклад, монокристал без пор) теплопровідність можна оцінити аналітично (Boltzmann Transport Equation, Debye model). При пористості → 0 модель має відтворювати теплопровідність монокристалу в межах допустимої похибки. При дуже великій пористості — теплопровідність повинна прямувати до нуля.
* Запустити навчання кілька разів із різними початковими умовами. Якщо форма кривих суттєво змінюється — модель нестабільна.
* Додати невеликий випадковий шум до входів (p, T) і перевірити, чи змінюються передбачення сильно.
* Побудувати learning curves (похибка від розміру навчальної вибірки), щоб перевірити деградацію при видаленні частини даних.

**5. Валідація**

* Для діапазонів T,pT, де немає MD-результатів, вони порівнюють RF/GB/SVR не з реальними даними, а з рівнянням (7) із Symbolic Regression (SR). Тобто, по суті, оцінюють, наскільки ML-моделі згодні з іншою моделлю, а не з фізичною “істиною”.
* Якщо SR помиляється в якійсь області, то всі метрики фактично вимірюють “згоду моделей між собою”, а не правильність результату.
* Використання 10 000 точок для одного набору (T, p) у тесті може штучно занижувати похибку через сильну кореляцію даних.

**Висновок:**

Робота цікава і сучасна за підходом, але є кілька критичних моментів:

* Валідація на “згоді моделей”, а не на перевірці з незалежними фізичними симуляціями чи експериментами.
* Є ризик, що модель добре працює лише на штучно обмежених умовах і може давати некоректні прогнози поза областю, де була навчена.

Рекомендую авторам додати перевірки фізичної узгодженості, незалежну валідацію на контрольних простих випадках і пояснити логіку вибору метрик.