**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.

Дякуємо рецензенту за важливе питання. У нашій моделі пора формується штучно – як сферична область всередині кристалічної решітки кремнію, з якої видалено всі атоми. Такий підхід є типовим для молекулярно-динамічних досліджень поруватих матеріалів, оскільки він дозволяє контрольовано змінювати розміри пори та ступінь пористості й оцінювати їхній вплив на теплопровідність. Розміщення пори в центрі моделі здійснюється для забезпечення максимальної симетрії та уникнення впливу меж періодичних граничних умов, що могло б спотворювати результати. Таким чином, «пора завжди посередині» є технічною умовою симуляції, яка гарантує коректність порівняння систем з різною пористістю.

Звісно, у реальних матеріалах пори можуть мати різні розміри та розташовуватись хаотично, залежно від технології синтезу та складу. Однак зазначимо, що сучасні методики дозволяють створювати й матеріали з періодичним розміщенням пор (наприклад, Journal of Power Sources Vol. 507, 2021, 230298; NPG Asia Materials Vol. 11, 2019, Article number: 12). В цій роботі ми зосереджуємося саме на фундаментальному впливі наявності пористості на теплопровідність, оскільки моделювання випадкового розташування та розподілу пор вимагає значно більших обчислювальних ресурсів і виходить за межі нашої статті, але є перспективним напрямком подальших досліджень. Відповідне доповнення додано в текст роботи у розділі Methods («*The pore was introduced as a spherical cavity by removing atoms…*»).

* **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.

Ми погоджуємося, що у реальних зразках залежність теплопровідності від розміру та форми пор є більш складною й нелінійною. Геометрія пори відіграє суттєву роль, оскільки впливає на спектр і темп розсіяння фононів. У даній роботі ми свідомо розглядаємо спрощену модель із сферичною порою в центрі кристалу, змінюючи її радіус. Такий підхід дозволяє виокремити базовий тренд зниження теплопровідності зі збільшенням пористості та кількісно оцінити силу цього ефекту в умовах максимальної симетрії. Дійсно, нелінійність проявляється навіть у такій ідеалізованій системі, однак у нашій моделі ми отримали монотонне зменшення теплопровідності зі зростанням радіуса пори.

**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.

Щиро вдячні рецензенту за увагу до цього аспекту роботи. Справді, метою є отримання граничного значення інтегралу, яке відповідає плато коефіцієнта теплопровідності при великих значеннях часу кореляції *tc*. Зауважимо, що у методі Ґріна–Кубо побудова повної інтегральної кривої є загальноприйнятою процедурою, оскільки вона дозволяє не лише визначити асимптотичне значення *k*, але й перевірити стабільність результату, а також наявність шуму чи коливань на довших часових масштабах. Вказаний підхід забезпечує контроль якості розрахунків і дозволяє уникнути систематичних похибок, які могли б виникати при прямому екстраполюванні плато без аналізу поведінки всієї функції.

**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.