

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации

Абгарян Каринэ Карленовны

«Теоретические основы построения многомасштабных моделей и информационных систем для анализа физических явлений и процессов», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.17-Теоретические основы информатики

Диссертационная работа Абгарян Каринэ Карленовны посвящена теоретическому исследованию проблемы многомасштабного моделирования сложных физических явлений и процессов. Изучаются многомасштабные фундаментальные проблемы, в которых явления несовместимых пространственных и/или временных масштабов, играют ключевые роли.

На современном этапе развития материаловедения и электронного приборостроения к особенностям применения методов математического моделирования следует отнести необходимость учета широкого спектра пространственно-временных масштабов. В такой ситуации актуальным является применение комплекса взаимосвязанных математических моделей и вычислительных алгоритмов, описывающих исследуемые процессы на разных уровнях – квантовом, атомно-молекулярном, нанокластерном, мезоскопическом, макроскопическом (континуальные модели). Во многих случаях необходимо сопряжение разномасштабных моделей в рамках единой вычислительной схемы. При этом важную роль играют методы представления данных и алгоритмы обмена информацией между разными масштабными уровнями. Решение современных многомасштабных проблем в связи со своей огромной ресурсоемкостью требует постоянного увеличения вычислительных возможностей аппаратных средств и обновления высокоэффективных программных решений. Все вышесказанное свидетельствует об актуальности тематики диссертационной работы.

Разработана формализованная технология формирования систем многомасштабного моделирования, базирующаяся на концепции синтеза многоуровневых моделей из базовых моделей-композиций и применении модельно-ориентированного подхода к построению многокомпонентных программных систем.

Создана методология построения интеграционной платформы для многомасштабного моделирования сложных физических явлений и процессов. Разработана кроссплатформенная, расширяемая интеграционная система, предназначенная для решения задач многомасштабного моделирования на высокопроизводительных вычислительных комплексах.

Данные подходы применялись для решения представительного класса задач вычислительного материаловедения. Работоспособность полученных результатов была продемонстрирована на актуальном классе задач о новых материалах.

В настоящее время представляется весьма актуальным и перспективным применение методов многомасштабного компьютерного моделирования для оптимизации структурных свойств новых наноразмерных гетероструктур, исходя из детального понимания их строения на атомистическом уровне. В работе представлена трехуровневая схема моделирования наноразмерных полупроводниковых гетероструктур с учетом эффектов спонтанной и пьезоэлектрической поляризации. Построена многомасштабная композиция, передающая вычислительную сущность математической модели, описывающей электронную плотность и подвижность носителей заряда в полупроводниковой гетероструктуре. Представлена многоуровневая схема моделирования, объединяющая квантово-механические расчеты на атомарном уровне для получения плотности зарядов на гетероинтерфейсах, расчет распределения носителей в

гетероструктуре на основе решения сопряженных уравнений Шрёдингера и Пуассона, а также расчет подвижности электронов в двумерном электронном газе с учетом различных механизмов рассеяния. Для ускорения сходимости применяемых вычислительных алгоритмов используются новые подходы и решения. Разработанные оригинальные методы многомасштабного моделирования имеют большое практическое значение и применение в области предсказательного моделирования нового поколения наноразмерных полупроводниковых гетероструктур, лежащих в основе ряда микроэлектронных приборов, таких как полевые транзисторы, датчики магнитных и температурных полей, мемристоры и другие. Такой подход позволит существенно ускорить и удешевить процесс создания нового поколения приборов на их основе.

В диссертационной работе также была рассмотрена задача о высокоскоростном внедрении ударника в преграду. В результате проведенных исследований, верифицированных по экспериментальным данным, удалось получить детальные пространственно-временные картины процесса и объяснить ранее до конца не изученные эффекты, наблюдаемые в ходе такого взаимодействия. Полученные результаты используются на практике для оптимизации состава ударника и усиления его пробивной способности.

По теме диссертации опубликовано 22 работы из списка ВАК, две монографии, два учебных пособия. Результаты работы докладывались на международных конференциях и междисциплинарных семинарах.

В целом, результаты диссертации следует расценивать как существенный вклад в области создания новых информационных технологий многомасштабного моделирования сложных физических явлений и процессов.

Диссертационная работа «Теоретические основы построения многомасштабных моделей и информационных систем для анализа физических явлений и процессов» полностью удовлетворяет критериям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением № 842 Правительства РФ от 24 сентября 2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.17 «Теоретические основы информатики», а ее автор Абгарян Каринэ Карленовна, заслуживает присуждения ей ученой степени доктора физико-математических наук по этой специальности.

Академик

Генеральный директор АО НИИМЭ

Красников Е.Я.

доктор технических наук

заместитель руководителя

приоритетного технологического направления

по электронным технологиям

АО НИИМЭ



Горнев Е.С.

21.09.2018 г.

Подпись удостоверяю



Подпись Горнев Е.С. заверено
Негашкина О.М. [подпись] Журавлева Н.В.