

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертации Абгарян Каринэ Карленовны
«Теоретические основы построения многомасштабных моделей и информационных систем для анализа физических явлений и процессов», представленной к защите на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.17-Теоретические основы информатики

Диссертационная работа К.К. Абгарян посвящена созданию технологии построения многомасштабных вычислительных моделей и соответствующих информационных систем для исследования явлений, характеризующихся широким спектром пространственных и/или временных масштабов. Тема диссертации Абгарян К.К. весьма актуальна, так как многомасштабное моделирование сложных физических процессов и явлений - важный и зачастую единственный способ их исследования. Интерес к многомасштабному моделированию обусловлен, с одной стороны, стремлением к более глубокому пониманию особенностей протекающих процессов, экспериментальное исследование которых затруднительно даже при использовании измерительной аппаратуры высокого разрешения, а с другой, - стремительным развитием вычислительной техники и возможностью получения в компьютерном эксперименте детальных пространственно-временных картин изучаемых явлений. Решение многомасштабных задач предполагает проведение вычислительных экспериментов, для которых характерна высокая ресурсоемкость как в плане хранения и представления данных, так и в плане вычислительных затрат. Это обуславливает необходимость эффективного управления ресурсами, что, в свою очередь, диктует повышенные требования к информационному обеспечению. В свете вышесказанного диссертационная работа К.К. Абгарян представляется очень своевременной.

Научная новизна работы состоит в следующих научных результатах:

Разработана новая математическая технология построения многомасштабных моделей физических явлений и процессов;
введено понятие «базовая модель-композиция» как информационная структура, объединяющая данные и методы их обработки в единой информационно-вычислительной среде;
разработаны теоретические основы и общие принципы формирования интеграционных систем для информационного обеспечения многомасштабного моделирования;
создана кроссплатформенная, расширяемая интеграционной системой, предназначенная для решения задач многомасштабного моделирования на высокопроизводительных программных комплексах;

Практическая значимость работы заключается в том, что применение представленных подходов дает возможность автоматизировать процесс построения многомасштабных математических моделей и создавать на их базе современные программные комплексы, позволяющие решать широкий класс прикладных задач. Предложенная технология применена к решению актуальных прикладных задач структурного материаловедения, разработаны эффективные вычислительных алгоритмы квантово-механического, молекулярно-динамического и дискретно-элементного моделирования.

Достоверность полученных результатов подтверждается с помощью верификации численных результатов и валидации моделей на основе сравнения с существующими экспериментальными данными, а также сравнением с результатами, полученными с использованием известных программных комплексов.

Работа состоит из введения, шести глав, заключения и приложения.

Во *введении* обосновывается актуальность работы, ставится задача разработки новой математической технологии построения многомасштабных моделей физических явлений и ее программной реализации, описываются методология и методы исследования.

В *первой главе* предложено применение модельно-ориентированного подхода к построению программных систем многомасштабного моделирования. Впервые вводится понятие «базовая модель-композиция» - информационная структура, объединяющая данные и методы их обработки в единой информационно-вычислительной среде. Базовые модели-композиции, отнесенные к разным масштабным уровням, являются композиционными элементами, из которых строятся многомасштабные композиции - информационные аналоги многомасштабных моделей. Для описания разработанной технологии используется теоретико-множественный аппарат, который позволяет передать вычислительную сущность многомасштабных вычислительных процессов. В заключительном разделе первой главы обсуждаются методы решения обратных задач, а также некоторые подходы к конструированию объектов с заданными свойствами. Представлен метод структурирования материаловедческой информации, удобный при решении обратных задач синтеза объектов с заданными свойствами. К достоинствам данного подхода следует отнести возможность эффективной адаптации к расширению критериальной базы. Алгоритм рекурсивного построения топологического пространства по мере расширения критериальной базы позволяет использовать и последовательно наращивать уже имеющиеся структуры данных.

Во *второй главе* разработаны методы и средства информационной поддержки решения задачи поиска устойчивых кристаллических структур, совместных с заданной химической формулой. Даны оптимизационные формулировки для моделей ионно-

атомных радиусов, атомных радиусов и модели с перекрывающимися радиусами. Построены и реализованы эффективные вычислительные алгоритмы, учитывающие свойства симметрии и периодичности кристаллов. Создана база данных по Федоровским группам симметрии. Разработана процедура обмена данными между системами кристаллографического и квантово-механического моделирования. В п.2.2 представлена квантово-механическая модель твердого тела, основанная на теории функционала электронной плотности. Расчет электронной плотности при заданной конфигурации базисных атомов проводится на основе уравнений Кона – Шэма. В п. 2.3 представлены примеры решенных задач, для которых с применением разработанной информационной технологии были построены композиции из соответствующих базовых моделей-композиций. Приводятся результаты расчетов одно, двух и трехкомпонентных кристаллических структур и их энергетических характеристик, энергии адгезии в нитридных нанопленках. Построены многомасштабные композиции для исследования на устойчивость кристаллических структур кубической симметрии с помощью модели ионно-атомных радиусов и квантово-механического моделирования и для изучения электронных и структурных свойств тонких пленок InN и GaN на кремниевых подложках. Результаты расчетов подтверждаются сравнением с экспериментальными данными.

В *третьей главе* рассматривается наиболее мощный инструмент исследования нанокластеров и наносистем – метод дискретных элементов, согласно которому осуществляется расчет динамики структурных элементов системы (атомы, молекулы, кластеры и т.д.) с учетом их взаимодействия. Представлены широко распространенные потенциалы взаимодействия и рассмотрены некоторые аспекты их практического применения. Предложена оригинальная схема, позволяющая создавать новые гибридные типы потенциалов межатомного взаимодействия, необходимые для МД-моделировании сложных слоистых структур, многослойных полупроводниковых гетероструктур и процессов их роста в случаях, когда применение известных потенциалов межатомного взаимодействия не дает адекватных результатов. Приведены алгоритмы интегрирования системы уравнений динамики дискретных элементов (молекулярной динамики). Особое внимание уделено вопросам параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия по информации, получаемой с уровня квантово-механического моделирования. Применительно к ряду актуальных задач разработаны многомасштабные композиции и представлены результаты многомасштабного моделирования.

В *четвертой главе* разработанные в диссертационной работе подходы применены к задаче о внедрении металлических шаров в массивные преграды. Разработана

многомасштабная композиция, в основе которой лежит дискретно-элементная модель, основанная на представлении ударника и преграды совокупностью плотно упакованных частиц. Для описания взаимодействия между частицами использовался двухпараметрический потенциал Леннарда-Джонса. Компьютерная реализация модели осуществлена с использованием распараллеливания на графических процессорах. На основе сравнения результатов компьютерного моделирования с экспериментальными данными идентифицирована зависимость энергии межчастичной связи от динамической твердости материалов. Показано, что использование данного подхода позволяет достаточно точно описать процесс внедрения ударника в преграду в диапазоне скоростей взаимодействия 500 – 2500 м/с. Как результат, в ходе вычислительных экспериментов впервые обнаружен эффект «пластического» расклинивания преграды, позволивший объяснить данные, согласно которым ударники из материалов, с большей пластичностью обладают лучшей пробивной способностью.

В *пятой главе* разработана схема многомасштабного моделирования наноразмерных полупроводниковых гетероструктур с учетом эффектов спонтанной и пьезоэлектрической поляризации, объединяющая квантово-механические расчеты на атомарном уровне для получения плотности зарядов на гетероинтерфейсах, расчет электронной плотности в гетероструктуре на основе самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона, а также расчет подвижности электронов в двумерном электронном газе с учетом различных механизмов рассеяния. Построены эффективные вычислительные алгоритмы решения задач моделирования и оптимизации полупроводниковых гетероструктур.

В *шестой главе* разработаны теоретические основы формирования интеграционных систем для информационной поддержки многомасштабного моделирования, сформулированы базовые принципы построения архитектуры системы, включающие доменное представление взаимосвязанных вычислительных, информационных и управляющих программных компонент, формализацию и унификацию сценариев всех стадий вычислительных экспериментов. Такой подход позволяет не только интегрировать различные приложения предметной области в единую канву вычислительного процесса, но и обеспечивает возможности для построения вариативных цепочек решения поставленных задач.

По работе можно сделать следующие замечания редакционного и рекомендационного типа:

Используемые в работе термины “верификация” и “валидация” отличаются от устоявшейся на данное время терминологии (AIAA G-077-1998), в соответствии с

которой “верификация” соответствует оценкам точности вычислительной реализации модели, сравнение же с экспериментальными данными применяется для “валидации” модели, а именно, проверки соответствия используемой модели исследуемой физике

Предлагаемый автором модельно-ориентированный подход предполагает хранение совместно с данными о примененной вычислительной модели и информации о результатах расчета. Это позволяет определять расстояния, как между наборами исходных данных, так и между результатами расчетов. В этой связи можно рекомендовать дальнейшее использование методов локализации истинного решения на ансамбле расчетов для верификации численных результатов и валидации моделей.

Работы автора широко обсуждались на конференциях и достаточно подробно освещены в публикациях автора, двадцать две из которых в изданиях из “Перечня российских рецензируемых научных журналов” (ВАК). Автореферат правильно отражает содержание работы. Выводы в работе вполне отражают ее основные результаты.

Таким образом, 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.

Официальный оппонент

доктор физико-математических наук Алексеев Алексей Кириллович, ПАО «Ракетно-космическая корпорация «Энергия» имени С.П.Королева», главный научный сотрудник, зам заведующего кафедрой Аэрофизической механики и управления движением, профессор (по совместительству) МФТИ.

Почтовый адрес: 141070, Московская обл., г. Королёв, ул. Ленина, д. 4А

Тел. : 7 495 513-68-19

E-mail: aleksey.k.alekseev@gmail.com

Подпись официального оппонента главного научного сотрудника, доктора физико-математических наук Алексеева А.К. достоверно

Ученый секретарь, к.ф.-м.н.

«28» сентября 2018 г.



О.Н. Хатунцева