

ОТЗЫВ

официального оппонента 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

Развитие современного материаловедения неразрывно связано с совершенствованием методов теоретического исследования и компьютерного моделирования. При этом практика выдвигает все более жесткие требования к адекватности математических моделей реальным процессам. Важным шагом в данном направлении являются комплексные математические модели, учитывающие сложный взаимосвязанный характер протекающих в исследуемой системе процессов. Сложность решения подобных задач зачастую обусловлена необходимостью рассмотрения процессов на различных масштабных уровнях. Многомасштабные проблемы характеризуются сложностью постановок задач и подходов к их решению, многообразием методов и средств моделирования, большими объемами данных и неоднородностью их типов и свойств, особенностями подготовки информационного контента и разнообразием методик обработки полученных результатов. В свете этого, диссертационная работа К. К. Абгарян, посвященная вопросам построения информационного обеспечения многомасштабного моделирования, представляется **актуальной**. Ряд исследований проведен автором в рамках проектов РФФИ.

В диссертационной работе получены **новые научные результаты**, соответствующие специальности 05.13.17. Разработана информационная технология для описания, разработки и реализации многомасштабных моделей сложных физических явлений и процессов, базирующаяся на концепции синтеза многоуровневых моделей и применении модельно-ориентированного подхода к построению многокомпонентных программных систем. В работе впервые введены понятия и дано формализованное теоретико-множественное описание базовой модели-композиции и многомасштабной композиции - математических объектов, объединяющих основные множества разного структурного типа, включая множества данных и методов их обработки, задействованных в едином информационно-вычислительном процессе. Новым является представление многомасштабных композиций в рамках логики модельно-ориентированного подхода как коллекции, состоящей из сгруппированных документов с иерархической структурой, отражающей последовательность присоединения экземпляров базовых композиций, что позволяет интегрировать многомасштабную композицию в универсальную платформу системы информационного обеспечения компьютерного моделирования физических процессов. Новой является разработанная и реализованная архитектура интеграционной платформы для информационного обеспечения многомасштабного моделирования, в которой используется доменное представление взаимосвязанных вычислительных, информационных и управляющих программных компонент, гибридная технология, сочетающая документно-ориентированное и реляционное представление данных.

Практическая значимость диссертационной работы заключается в создании кроссплатформенной, расширяемой интеграционной системы для решения задач многомасштабного моделирования на высокопроизводительных программных комплексах. Эффективность разработанных в диссертации подходов продемонстрирована на актуальном классе задач о новых материалах в ходе проведения вычислительных экспериментов.

Достоверность методов, алгоритмов и проведенных исследований базируется на хорошем согласовании полученных результатов с экспериментальными данными, аналитическими решениями, а также известными численными решениями.

Диссертационная работа состоит из шести глав.

В главе 1 сформулированы основные принципы применения модельно-ориентированного подхода к построению программных систем многомасштабного моделирования. Физико-математическим моделям, отнесенным к соответствующим масштабным уровням, поставлены в соответствие информационные структуры - базовые модели-композиции (композиционные объекты), служащие основой для построения композиций и многомасштабных композиций - вычислительных аналогов многомасштабных моделей сложных систем. Для описания базовых моделей-композиций и технологии построения многомасштабных композиций применен теоретико-множественный аппарат, позволяющий передать вычислительную сущность соответствующих математических моделей.

В работе предложены оригинальные подходы к компьютерной реализации концепции моделей-композиций, позволяющие автоматизировать построение многомасштабных вычислительных моделей для решения задач определения свойств конкретных объектов. В дальнейшем эти модели используются для решения обратной задачи поиска объектов с заданными свойствами.

В главе 2 разработаны методы обработки кристаллографической информации в задаче поиска устойчивых кристаллических структур, совместных с заданной химической формулой. Представлены модели, отнесенные согласно принятой в работе классификации к моделям первого масштабного уровня. Это модель ионно-атомных радиусов, известная также как модель плотной упаковки, и квантово-механическая модель. Дано теоретико-множественное описание соответствующих базовых моделей-композиций и композиций. На примерах показано, что применяя данные модели в комплексе, можно достаточно точно воспроизводить атомно-кристаллическую структуру и изучать энергетические свойства материалов, рассчитывать энергию адгезии, диффузионные барьеры и другие важнейшие свойства кристаллических структур.

Сформулированы экстремальные постановки задач, построены эффективные вычислительные алгоритмы, учитывающие свойства симметрии и периодичности кристаллов. Разработана процедура информационного обмена между системами кристаллографического и квантово-механического моделирования.

В главе 3 получены следующие основные результаты:

Разработаны методы и средства информационной поддержки решения задач молекулярно-динамического моделирования и параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия.

Разработана оригинальная схема построения «гибких потенциалов», 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.

Разработана многомасштабная композиция и решена задача моделирования кристаллической структуры *кремния* с точечными и отдельными протяженными дефектами, включая расчет упорядоченных кластерных конфигураций вакансий и межузельных атомов в *кремнии*. Представлены результаты расчетов конфигураций.

Разработана многомасштабная композиция и на ее основе решена задача МД-моделирования начальных этапов процесса нитридации поверхности *кремния* (111) в атмосфере NH_3 . Представлены результаты параметрического анализа потенциала Леннарда-Джонса молекулы аммиака, потенциала Терсоффа применительно к однокомпонентным кристаллам с ковалентным типом химической связи, для поверхности Si и структур SiN.

Разработана многомасштабная композиция и на ее основе решена задача для МД-моделирования устойчивой системы A/B(001) с помощью потенциала RGL.

В главе 4. исследована задача высокоскоростного внедрения ударника в преграду. Разработана многомасштабная композиция, в основе которой лежит дискретно-элементная вычислительная модель. Представлены результаты широкомасштабных вычислительных экспериментов, направленных на валидацию и совершенствование дискретно - элементной модели. В расчетах варьировались плотность и твердость ударника и преграды, характерный размер и удлинение ударника, толщина преграды, угол соударения ударника и преграды, скорость ударника. На основе сравнения результатов компьютерного моделирования с экспериментальными данными идентифицирована зависимость энергии межчастичной связи от динамической твердости материалов. Использование технологий распараллеливания вычислений на графических процессорах в сочетании со средствами трехмерной визуализации и анимации результатов позволило получить детальные пространственно-временные картины процессов внедрения. Как результат, в ходе вычислительных экспериментов впервые обнаружен эффект «пластического» расклинивания преграды, который дал возможность представить и объяснить некоторые ранее не объяснимые результаты, получаемые в натурных экспериментах.

В главе 5 представлена многомасштабная схема моделирования наноразмерных полупроводниковых гетероструктур, в которой учтены эффекты спонтанной и пьезоэлектрической поляризации. Предложенная схема объединяет 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. С целью ускорения вычислительного процесса при расчете электронной плотности в гетероструктуре применен подход, основанный на аппроксимации нелинейной зависимости электронной плотности от потенциала в сочетании с линеаризацией уравнения Пуассона. Показана эффективность данного подхода в задачах рассматриваемого класса. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показало достаточно высокую точность моделирования как в плане расчета концентрации носителей в двумерном электронном газе, так и касательно подвижности электронов.

В главе изложен эффективный вычислительный алгоритм решения задачи оптимального легирования полупроводниковых гетероструктур, основанный на построении сопряженной задачи для вычисления градиента целевого функционала. Полученные в ходе вычислительных экспериментов результаты согласуются с современной тенденцией к переходу от однородного профиля легирования к планарному δ -легированию в технологиях изготовления полевых транзисторов.

В главе 6 отмечено, что архитектура системы информационной поддержки многомасштабного моделирования в ресурсоемких приложениях компьютерного моделирования физических процессов должна соответствовать функциональным требованиям предметной области и во многом базироваться на представлениях, исходящих от постановки задачи, ее физического смысла и математического подхода к ее решению.

Необходимо отметить, что в настоящее время достаточно часто встречаются исследования, в которых формальная спецификация информационных объектов предметной области формулируется в терминах конечно-множественных представлений. Они могут быть реализованы посредством доменных моделей-конечных множеств данных с поддержкой операций по их обработке. Особенностью представленной в диссертации информационной технологии является то, что многомасштабные композиции-информационные аналоги многомасштабных моделей, собираются из экземпляров базовых композиций, которые описываются с помощью таблиц, состоящих из данных, проиндексированных согласно масштабной иерархии и номеру базовой композиции на

соответствующем уровне. При этом экземпляры базовых композиций представляются объектами классов-наследников в объектно-ориентированном языке программирования и хранятся в виде документов в документно-ориентированной базе данных. Следуя такой логике, многомасштабная композиция представляется коллекцией, состоящей из сгруппированных документов, с иерархической структурой, отражающей последовательность присоединения документов (экземпляров базовых композиций). Посредством этих классов осуществляется взаимодействие моделей с конкретной реализацией алгоритма в вычислительном модуле. Такой подход является новым и весьма перспективным, так как позволяет формализовать процесс построения многоуровневых информационных систем для решения многомасштабных задач, используя современные программные средства и документно-ориентированные базы данных.

Далее в главе представлена кроссплатформенная, расширяемая интеграционная система, предназначенная для решения задач многомасштабного моделирования на высокопроизводительных программных комплексах. Для представления данных в разработанной системе применена гибридная технология, основанная на сочетании различных типов баз данных - документных и реляционных. Такое представление данных наилучшим образом отражает логику модельно-ориентированного подхода к многомасштабному моделированию.

Основные базовые принципы, на которых строится архитектура системы многомасштабного моделирования, представленная в данной работе следующая: доменное представление взаимосвязанных вычислительных, информационных и управляющих программных компонент; формализации и унификации 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, обеспечивая тем самым многоуровневый подход в компьютерном моделировании сложных физических процессов предметной области. Показано, что применение представленных в диссертационной работе подходов дает возможность автоматизировать процесс построения многомасштабных математических моделей и создавать на их базе современные программные комплексы, позволяющие решать широкий класс прикладных задач.

В целом, результаты диссертации следует расценить как существенный вклад в области создания математического аппарата для построения многомасштабных моделей и информационных систем на их основе для анализа физических явлений.

Представленные в диссертации исследования соответствуют паспорту специальности 05.13.17 «Теоретические основы информатики». Автореферат соответствует диссертации и в полной мере отражает ее содержание.

Можно сделать следующие замечания:

1. В главе 1 предлагается использование модельно-ориентированного подхода к построению систем многомасштабного моделирования. Приведены модели-композиции для фиксированных масштабных уровней. Стоило бы указать пути модификации данного подхода в случае расширения базового пространства уровней.
2. Круг потенциалов межатомного взаимодействия, приведенных в главе 3, довольно ограничен. Следовало бы указать, чем обусловлен выбор именно этих потенциалов.
3. В главе 3 не представлены примеры реализации разработанной схемы построения «гибких потенциалов», которая по оценке автора может применяться при создании новых гибридных типов потенциалов межатомного взаимодействия, необходимых при МД-моделировании материалов с неоднородной структурой.

В заключение следует отметить, что данные замечания не снижают общего положительного впечатления о работе. 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.

Официальный оппонент

Куравский Лев Семёнович,
доктор технических наук профессор, лауреат премии Правительства Российской Федерации в области образования, Почетный работник науки и техники Российской Федерации, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный психолого-педагогический университет» (ФГБОУ ВО МГППУ), декан факультета информационных технологий.

Докторская диссертация защищена по специальности: 05.13.18 (2003).

Почтовый адрес: 140182 г. Жуковский Московской области, ул. Гризодубовой, 18, кв. 157
Тел.: 7 916 400-57-81
E-mail: l.s.kuravsky@gmail.com

*МГП Верно
Спец. по кадрам ОКиД
ГМЗ (Руденко О.В.)*

« 25 » сентября 2018 г.