

УТВЕРЖДАЮ



Зам. директора ИПМ имени Келдыша РАН,
доктор физико-математических наук,
профессор,
чл.-корреспондент РАН

М.В.Якобовский

«02» октября 2018 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации Федерального государственного учреждения "Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук" на диссертацию Абгарян Каринэ Карленовны «Теоретические основы построения многомасштабных моделей и информационных систем для анализа физических явлений и процессов», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 05.13.17-Теоретические основы информатики

Диссертационная работа Абгарян К.К. посвящена новым методам построения математических моделей и информационных систем для анализа многомасштабных научных проблем, включающих в себя явления несопоставимых пространственных и/или временных масштабов. Рассматриваются случаи, когда в рамках одной модели необходимо провести исследование многомасштабного физического процесса или явления. Возникает проблема взаимосогласования имеющихся моделей, что требует разработки теоретических основ их объединения и построения информационных систем, учитывающих особенности предметной области. Решение данной задачи с применением методов компьютерного моделирования имеет большое практическое значение во многих областях, связанных с прогнозированием и синтезом новых композиционных структур, обладающих заданным набором характеристик, включая создание новых материалов с особыми физико-химическими свойствами, что обуславливает **актуальность** диссертационной работы.

Научную новизну работы определяет предложенный в диссертации модельно-ориентированный подход к построению программных систем многомасштабного моделирования, применяя который можно строить многомасштабные композиции используя базовые модели. Новыми являются также предложенные в диссертации подходы к интеграции информационного обеспечения, которое играет важную роль при построении многомасштабных

моделей. Используемая в диссертации технология позволяет эффективно использовать различные типы баз данных для обеспечения моделирования прикладных задач.

Научную новизну также представляют конкретные реализации, такие как методы обработки кристаллографической информации, моделирование наноразмерных гетероструктур в полупроводниках, моделирование высокоскоростного соударения. В ходе решения этих задач обнаружен ряд новых эффектов, таких как зависимость энергии межчастичной связи от динамической твердости и эффект пластического расклинивания преграды.

Практическая ценность работы заключается в том, что разработанный подход может применяться для решения широкого класса прикладных задач, требующих применения многомасштабных моделей и использования многоуровневых информационных систем.

Достоверность и обоснованность результатов диссертационной работы основана на использовании фундаментальных законов при построении математических моделей и подтверждена хорошим согласованием результатов тестовых расчетов с известными аналитическими и экспериментальными данными.

Диссертационная работа состоит из введения, шести глав, заключения списка литературы, списка основных публикаций автора по теме исследования и приложения. Диссертация изложена на 337 страницах, включая 75 рисунков и 29 таблиц.

Во **введении** обосновывается актуальность работы, ставятся задачи разработки теоретических основ, общих принципов формирования и реализации новой математической технологии построения многомасштабных моделей и интеграционных систем для информационной поддержки многомасштабного моделирования физических явлений и процессов.

В **первой главе** представлен новый математический аппарат, который используется для описания технологии построения многомасштабных моделей, позволяющий существенно расширить класс решаемых в работе ресурсоемких задач вычислительного материаловедения. Приводится концептуальное описание основных положений разработанной информационной технологии многомасштабного моделирования, в которой использовался модельно-ориентированный подход, развитый в работах Ю.И. Бродского. Отмечается, что особенностью применения модельно-

ориентированного подхода в данной работе является использование информационных структур, объединяющих данные и методы их обработки. Дается определение таких структур, названных базовыми моделями - композиции (**БК**). Они являются композиционными элементами, из которых согласно представленной в работе технологии строятся многомасштабные композиции (**МК**) - информационные аналоги многомасштабных моделей. Приводятся примеры компьютерной реализации данной технологии. Вводятся некоторые понятия и сведения по решению обратных задач, связанных с определением объектов с заданными свойствами.

Во **второй** главе диссертации представлены статические модели, отнесенные согласно принятой в работе классификации к моделям первого масштабного уровня и дано теоретико-множественное описание соответствующих базовых моделей-композиций. Это модель ионно-атомных радиусов, или, как ее называют, модель «плотной упаковки», и квантово-механическая модель твердого тела, в основе которой лежит теория функционала электронной плотности (DFT), базирующаяся на уравнениях Кона-Шэма. 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. При моделировании атомно-кристаллической структуры материалов в данной работе применяется сочетание оригинальных математических моделей и оптимизационных алгоритмов для расчета метрических параметров кристаллической структуры и квантово-механических подходов. Первые позволяют по заданной химической формуле определять кристаллоструктурные характеристики (в том числе определять координаты базисных атомов, постоянные решетки и т.д.). Квантово-механические методы, основанные на теории функционала электронной плотности, дают возможность уточнить полученные метрические параметры для заданной кристаллической структуры и рассчитать ее энергетические характеристики, в том числе электронную плотность, полную энергию системы и другие важнейшие свойства кристалла. Далее представлены примеры решенных задач, для которых с применением разработанной технологии были построены композиции из соответствующих базовых моделей-композиций. Приводятся результаты расчетов однокомпонентных, двухкомпонентных, трехкомпонентных кристаллических структур и их энергетических характеристик, энергии адгезии в нитридных нанопленках.

В третьей главе рассматриваются модели уровня молекулярно-динамического моделирования и мезоуровня, которые позволяют решать широкий класс задач, связанных с моделированием нестационарных процессов, протекающих в твердом теле. При этом в качестве входных данных используются результаты расчетов, полученные с помощью статических моделей с нулевого и первого масштабных уровней. В частности, передаются параметры, которые участвуют в моделировании одновременно на нескольких масштабных уровнях. Таким образом, осуществляется переход с нулевого масштабного уровня на первый, и далее на следующие масштабные уровни к молекулярно-динамическим, дискретно-элементным и макроскопическим моделям. При этом результаты моделирования гетерогенных материалов на более мелком масштабном уровне используются как предварительный шаг обработки данных для моделей следующего масштабного уровня. Приводятся примеры многомасштабных математических моделей, примененных для моделирования кластеров точечных дефектов в кремнии, для изучения начальных этапов нитридации поверхности полупроводниковых наноструктур.

В четвертой главе представлена дискретно-элементная модель для многомасштабного моделирования высокоскоростного внедрения ударника в преграду. Модель основана на представлении ударника и преграды совокупностью плотно упакованных взаимодействующих частиц. Представлена многомасштабная композиция, передающая вычислительную сущность математической модели, описывающей рассматриваемые процессы. На основе сравнения результатов компьютерного моделирования с экспериментальными данными идентифицирована зависимость энергии межчастичной связи от динамической твердости материалов. Показано, что эта зависимость носит линейный характер. Использование построенной таким образом дискретно - элементной модели позволяет достаточно точно описать процесс внедрения ударника в преграду в диапазоне скоростей взаимодействия 500 – 2500 м/с. Использование технологий распараллеливания вычислений на графических процессорах в сочетании со средствами трехмерной визуализации и анимации результатов позволило получить детальные пространственно-временные картины процесса внедрения. Сравнительный анализ показал достаточно высокую точность дискретно-элементного моделирования для различных вариантов - для тонких преград, пробиваемых с сохранением цельности деформируемого ударника, для преград средней толщины, пробиваемых с практически полной фрагментацией ударника на выходе из преграды, а также для непробиваемых

насквозь преград. В ходе вычислительных экспериментов обнаружен эффект «пластического» расклинивания, что открывает перспективы оптимизации состава и структуры композиционных материалов, используемых для изготовления ударника.

В **пятой главе** представлена трехуровневая схема моделирования наноразмерных полупроводниковых гетероструктур с учетом эффектов спонтанной и пьезоэлектрической поляризации. Представлена многомасштабная композиция, передающая вычислительную сущность математической модели, описывающей электронную плотность и подвижность носителей заряда в полупроводниковой гетероструктуре. Схема объединяет 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. 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. Разработан 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 **шестой главе** показано как на базе многомасштабных композиций строятся сложные иерархические программные системы, применяемые для решения задач многомасштабного моделирования физических явлений и процессов. Представлены основные принципы создания интеграционных систем для информационной поддержки многомасштабного моделирования, включая доменное представление взаимосвязанных вычислительных, информационных и управляющих программных компонент, гибридную технологию, сочетающую разные типы представления данных (документно-ориентированное и реляционное), формализацию и унификацию сценариев всех стадий вычислительных экспериментов. Перечислены основные достоинства разработанной системы информационной поддержки интеграционных систем, включая экономичность предлагаемых решений, кроссплатформенность серверной части платформы, универсальность

серверной логики и протокола взаимодействия клиента с сервером приложений, расширяемость возможностей интеграционной платформы за счет интеграции и модификации расчетных модулей под конкретную задачу.

В **Заключении** приводятся основные результаты работы, которые показывают, что разработанная и реализованная информационная технология построения многомасштабных моделей и интеграционных систем компьютерного моделирования на их основе позволяет эффективно решать широкий класс прикладных задач. Приведены основные результаты решенных задач из области вычислительного материаловедения, полученные с применением высокопроизводительных программных комплексов

В **Приложении** в виде таблиц приводятся информационные данные по конкретным базовым моделям-композициям, применяемым при создании многомасштабных моделей, которые используются в работе для решения актуальных задач материаловедения.

Имеется замечание по форме представления результатов. Вторая и третья главы слишком перегружены материалом и имеют объем превышающий остальные. При более кратком изложении содержания в этих главах работа была бы лучше структурирована и все ее главы были бы примерно одинаковы по объему и важности представленных результатов.

В качестве направления дальнейших исследований хочется также пожелать развития представленных в диссертационной работе подходов для автоматизации процесса построения многомасштабных математических моделей и программных комплексов их базе, что даст возможность существенно расширить область применения разработанной информационной технологии на широкий класс прикладных задач.

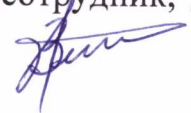
Сделанные замечания не влияют на общую оценку работы. В целом диссертация Абгарян К.К. является завершенным научно-квалификационным исследованием в области разработки и анализа моделей информационных процессов и структур, а также в разработке теоретических основ создания программных систем для новых информационных технологий с ориентацией на высокопроизводительные вычисления и содержит решение важной проблемы – создания технологии построения многомасштабных моделей. Основные результаты опубликованы в 22 изданиях, рекомендованных ВАК, в двух монографиях, 2 учебных пособиях, в одном свидетельстве о государственной регистрации программ для ЭВМ. Полученные результаты используются при чтении учебного курса по многомасштабному моделированию для студентов ВУЗов, обучающихся по специальности «Прикладная математика». Результаты диссертации могут быть использованы в ФИЦ ИУ РАН, ФИЦ ИПМ им.М.В.Келдыша РАН, МГУ им.

М.В.Ломоносова, МФТИ, ВНИИЭФ и других организациях, занимающихся разработкой и использованием многомасштабных научных проблем.

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.

Диссертация и отзыв обсуждены и одобрены на заседании научного семинара отдела № 15 "Федерального исследовательского центра Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша Российской академии наук".
Протокол № 1 от 2 октября 2018 года.

Зав. отделом №15,  Тишкин Владимир Федорович
член-корреспондент РАН, Тел. +7 (499)9721791
доктор физико-математических наук, e-mail: v.f.tishkin@mail.ru
профессор

Главный научный сотрудник, доктор  Змитренко Николай Васильевич
физ-мат наук Тел. +7(499)2507887
e-mail: zmitrenko@imamod.ru

Федеральное государственное учреждение "Федеральный исследовательский центр
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук"

Почтовый адрес: 125047, Москва, Миусская пл., д.4, ИПМ им. М.В.Келдыша РАН

Тел. : 7 499 978-13-14

E-mail: office@keldysh.ru

Сайт: <http://keldysh.ru/>