

Гаврилов Евгений Сергеевич

**МЕТОДЫ РАЗРАБОТКИ
ИНТЕГРАЦИОННОЙ ПЛАТФОРМЫ ДЛЯ
МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
(В ЗАДАЧАХ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ)**

05.13.11 - Математическое и программное обеспечение
вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Работа выполнена в Федеральном государственном учреждении «Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук» (ФИЦ ИУ РАН)

Научный руководитель: **Абгарян Каринэ Карленовна**
доктор физико-математических наук, доцент,
главный научный сотрудник ФИЦ ИУ РАН

Официальные оппоненты: **Итальянцев Александр Георгиевич**
доктор физико-математических наук,
Акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники» (АО «НИИМЭ»), начальник отдела

Сухорослов Олег Викторович
кандидат технических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича Российской академии наук (ИППИ РАН), старший научный сотрудник

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт системного программирования им. В.П. Иванникова Российской академии наук (ИСП РАН)

Защита состоится «28» сентября 2022 года в 14:00 на заседании диссертационного совета Д 002.073.02 при Федеральном исследовательском центре «Информатика и управление» Российской академии наук по адресу 119333, Москва, ул. Вавилова, д. 44, к. 2.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» Российской академии наук по адресу г. Москва, ул. Вавилова, д.44, к. 2 и на сайте www.frccsc.ru.

Автореферат разослан «__» _____ 2022 г.

Ученый секретарь диссертационного совета



Р. В. Разумчик

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Диссертация посвящена методам разработки интеграционной платформы для информационной поддержки многомасштабного моделирования и ее применению в задачах вычислительного материаловедения.

Актуальность работы. Развитие методов проектирования программных систем в ресурсоемкой области получения современных материалов весьма актуально и востребовано. В настоящее время, во всем мире ускоренными темпами ведется разработка и внедрение современных материалов с заданными свойствами. Так, например, согласно прогнозам экспертов, мировой рынок композиционных материалов ежегодно будет увеличиваться в диапазоне от 4 до 7,7 процентов вплоть до 2024 г. и его стоимость возрастет до 103-131,6 млрд. долларов¹. По причине нарастающей конкуренции в данной области, важным фактором опережающего развития является использование предсказательного компьютерного моделирования с применением высокопроизводительных вычислительных комплексов. Тематика развития высокопроизводительной среды для научных исследований в условиях цифровой трансформации применительно к решению задач синтеза новых материалов с заданными свойствами рассматривалась в работах Зацаринного А.А.² и Абгарян К.К.³. Дан анализ опыта ФИЦ ИУ РАН в создании современной высокопроизводительной платформы для научных исследований. Обоснована необходимость ее применения для решения прикладных задач, связанных с подбором новых материалов в области микроэлектроники и других областях.

¹ Дориомедов М.С. Российский и мировой рынок полимерных композитов (обзор) // Труды ВИАМ. 2020. № 6-7 (89). С. 29-37.

² Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. № 22(4). С. 298-301.

³ Абгарян К.К., Зацаринный А.А. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2020. № 23(4). С. 270-276.

Развитие перспективных высоких технологий создания новых материалов и междисциплинарных исследований включены в задачи научно-технологического развития и имеют существенное значение для развития страны. Проблемам научного обоснования и применения информационных систем в различных областях деятельности общества, в том числе научных исследованиях, их автоматизации и построения информационной инфраструктуры научных сервисов посвящен ряд работ отечественных ученых: Глушкова В.М.⁴, Моисеева Н.Н.⁵, Велихова Е.П.⁶, Соколова И.А.⁷, Зацаринного А.А.⁸. Имитационному моделированию сложных процессов и систем, посвящен ряд работ Бусленко Н.П.⁹, Павловского Ю.Н.¹⁰, идеи которых нашли свое применение в работах Бродского Ю.И.¹¹, предложившего формализованный модельно-ориентированный подход к построению и реализации имитационных моделей. В работах Абгарян К.К.^{12,13} данный подход был развит и применен к созданию формализованной технологии построения многомасштабных вычислительных моделей и многоуровневых информационных систем для исследования процессов и явлений, характеризующихся широким спектром пространственных и/или временных масштабов. Было показано, что одним из наиболее эффективных решений

⁴ Глушков В.М. Основы безбумажной информатики. Издание 2-е исправленное, М., Наука, Гл. ред. физ.-мат. литературы, 1987. 552 с.

⁵ Моисеев Н. Н. Методы информатики в управлении народным хозяйством. Учеб. Пособие. М., АНХ СССР. 1988. 118 с.

⁶ Велихов Е. П., Выставкин А.Н. Проблемы развития работ по автоматизации научных исследований // УС и М. 1984. № 4. С. 3-12

⁷ Илюшин Г. Я., Соколов И. А. Организация управляемого доступа пользователей к разнородным ведомственным информационным ресурсам // Информатика и ее применения. 2010. Т. 4. № 1. С. 24-40.

⁸ Зацаринный А. А., Кондрашев В. А., Сучков А. П. Система научных сервисов как актуальный компонент научных исследований // Системы и средства информатики. 2019. Т. 29. № 1. С. 25-40.

⁹ Бусленко Н.П. Моделирование сложных систем. М., Наука. 1978. 400 с.

¹⁰ Павловский Ю.Н. Имитационные модели и системы. М., Фазис. 2000. 134 с.

¹¹ Бродский Ю.И. Модельный синтез и модельно-ориентированное программирование. М., ВЦ РАН. 2013. 142 с.

¹² Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. М., МАКС Пресс. 2017. 284 с.

¹³ Абгарян К.К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // Системы высокой доступности. 2018. Т. 15. № 2. С. 9-15.

в области вычислительного материаловедения является разработка методов многомасштабного моделирования, позволяющих в рамках одной модели проводить исследования современных материалов с учетом основных факторов с разных пространственно-временных масштабов, играющих ключевые роли в таких задачах. Их использование дает возможность существенно удешевить и ускорить процессы разработки и применения современных технологий получения новых материалов с требуемыми свойствами. На данный момент, многомасштабный подход реализуется во множестве зарубежных программных CAD/CAE/TCAD пакетов и некоторых отечественных разработках. Основными недостатками зарубежных пакетов являются высокая стоимость и проблемы с получением лицензий, в большинстве случаев закрытая архитектура платформы, ограничивающая расширение сторонними или собственными разработками, и узкая специализация для конкретной индустрии. В связи с этим, разработка и автоматизация методов и средств информационной поддержки многомасштабного моделирования с открытой расширяемой архитектурой, делающее возможным применять их к новым типам задач, является актуальной.

Целями работы являются:

1. Расширение области приложений, глубины и точности исследований в прикладных задачах многомасштабного моделирования в области материаловедения.
2. Сокращение затрат на выполнение ресурсоемких расчетных задач вычислительного материаловедения.
3. Предоставление возможности системного решения задач анализа и синтеза новых материалов с заданными свойствами для различных прикладных областей.

Научная задача заключается в разработке методов создания интеграционной платформы для автоматизированной реализации формализованной технологии построения многомасштабных вычислительных моделей, характеризующихся широким спектром пространственных и/или временных масштабов, с демонстрацией работоспособности полученных результатов на актуальном классе задач о современных материалах.

Для достижения поставленных целей в диссертационной работе решаются задачи:

1. разработать методы создания интеграционной платформы для автоматизированной реализации формализованной технологии построения многомасштабных вычислительных моделей, характеризующихся широким спектром пространственных и/или временных масштабов;
2. разработать архитектуру и программную реализацию расширяемой, кроссплатформенной интеграционной платформы, предназначенной для многомасштабного моделирования на высокопроизводительных вычислительных комплексах;
3. сформировать универсальный подход к созданию сервисов вычислительных модулей, на основе которого проводится интеграция новых расчетных модулей в программную среду многомасштабных расчетов в возможно короткие сроки;
4. разработать программный комплекс для моделирования структурных свойств композиционных материалов с использованием современного высокопроизводительного вычислительного кластера ФИЦ ИУ РАН;
5. применить разработанные методы и подходы для решения актуальных прикладных задач из области вычислительного материаловедения с демонстрацией работоспособности полученных результатов на конкретных примерах.

Объектом исследования диссертации являются многомасштабные модели физических явлений и систем.

Предметом исследования являются методы построения интеграционной платформы многомасштабного моделирования, подходы и алгоритмы проектирования для программной реализации многомасштабных моделей физических явлений и систем.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Разработанные методы и модели создания программных систем для многомасштабного моделирования в задачах материаловедения позволяют

сократить трудозатраты на выполнение серий типовых параметризованных вычислительных экспериментов, либо расширить область исследования в рамках фиксированных ресурсов.

2. Обоснованная архитектура интеграционной платформы многомасштабного моделирования на высокопроизводительных программных комплексах позволяет эффективно выполнять экспериментальные исследования по расчету структурных характеристик различных классов материалов.
3. Разработанные методы и программный инструментарий для создания сервисов вычислительных модулей и организации их взаимодействия с сервисом сценариев для интеграции в платформу позволяют унифицировать интерфейс взаимодействия сервисов и сократить трудозатраты на интеграцию нового расчетного модуля в платформу.
4. Реализованные прототипы интеграционной платформы обеспечивают моделирование структурных свойств композиционных материалов с верификацией результатов расчетов по экспериментальным данным и нейроморфных сетей на базе мемристоров с верификацией проведенных вычислений на отдельных масштабных уровнях.

Научная новизна диссертационного исследования определяется следующими результатами:

- разработаны оригинальные методы создания интеграционной платформы для информационного обеспечения многомасштабного моделирования в материаловедении, позволяющие динамически расширять и конфигурировать платформу для адаптации к решению новых видов многомасштабных проблем, сокращая сроки и трудозатраты при выполнении проектов;
- предложен и применен оригинальный метод унифицированного хранения и передачи данных вычислительных экспериментов на основе документной модели, словаря данных и пространств имен, обеспечивающий обмен данными для многомасштабного моделирования;
- реализована возможность конфигурировать множество входных данных сценария, например различных вариантов структурных характеристик, с целью

автоматизации процесса вычисления физических свойств заданного спектра моделируемых материалов, что в свою очередь приводит к существенной экономии трудозатрат ученых-исследователей и позволяет накапливать массив данных для дальнейшего анализа.

Методы исследования. Для решения поставленных задач в диссертации использовались современные методы проектирования программных систем. В качестве основного применяется модельно-ориентированный подход в рамках многомасштабной парадигмы моделирования. Также в работе используются методы объектно-ориентированного программирования и анализа, принципы построения сервисно-ориентированной архитектуры, методы синтаксического анализа формальных языков. В вычислительных модулях на отдельных масштабных уровнях используются методы квантовой механики, молекулярной динамики, теории оптимизации и другие.

Практическая значимость полученных результатов подтверждается рядом выполненных проектов – внедрением программных систем, в которых была использована созданная интеграционная платформа, в частности:

- в программном комплексе для моделирования структурных свойств композиционных материалов, созданном в рамках научного проекта 075-15-2020-799 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации «Методы построения и моделирования сложных систем на основе интеллектуальных и суперкомпьютерных технологий, направленные на преодоление больших вызовов» (2020-2022 гг);
- в гранте РФФИ МК 19-29-03051 «Многомасштабное моделирование работы многоуровневых элементов памяти в качестве синапсов и разработка программного обеспечения для систем с механизмом параллельных вычислений, необходимых для создания нейроморфных сетей» (2019-2022 гг).

Разработанное программное обеспечение имеет самостоятельное практическое значение и было использовано при создании программных решений в разных областях вычислительного материаловедения.

Достоверность представленных в работе результатов подтверждается сопоставлением результатов моделирования с использованием разработанных программных средств и примеров сценариев с существующими опубликованными данными в научных статьях и базах данных свойств материалов.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались на следующих международных конференциях и семинарах:

- XIX Международная конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2015), 24–31 мая 2015;
- Национальный суперкомпьютерный форум НСКФ-2015. Переславль-Залесский, 24-27 ноября 2015;
- XX Международная конференция по механике и прикладным программным системам (ВМСППС'2017), г. Алушта 24-31 мая 2017;
- III Международная конференция «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» г. Москва, 25-27 октября, 2021 г;
- Тематический семинар Курчатовского комплекса НБИКС-природоподобных технологий НИЦ «Курчатовский институт» 19 ноября 2021.

Кроме того, научные разработки и программные решения неоднократно докладывались на научных семинарах в ФИЦ ИУ РАН, Московском авиационном институте (национальном исследовательском университете), Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт».

Диссертационная работа соответствует паспорту специальности 05.13.11 в части пунктов:

3. Модели, методы, алгоритмы, языки и программные инструменты для организации взаимодействия программ и программных систем.

8. Модели и методы создания программ и программных систем для параллельной и распределенной обработки данных, языки и инструментальные средства параллельного программирования.

9. Модели, методы, алгоритмы и программная инфраструктура для организации глобально распределенной обработки данных.

Публикации. По теме диссертации автором опубликовано 12 работ; 7 из них опубликованы в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК [1, 4, 6, 7, 8, 9, 12], 3 работы включены в Scopus [8, 9, 12]. Получено 4 свидетельства о регистрации программ для ЭВМ [13-16].

Личный вклад. В диссертацию включены положения и результаты, полученные либо лично автором, либо при его определяющем участии. Автором лично были созданы методы разработки интеграционной платформы многомасштабного моделирования, ее архитектура и программная реализации. Автором лично построены программные решения и реализованы сценарии моделирования многоуровневых элементов памяти для создания нейроморфных систем и моделирования структурных свойств композиционных материалов.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованных источников (56 наименований). Работа изложена на 123 страницах, содержит 32 рисунка и 8 таблиц.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обоснована актуальность работы, дан обзор предметной области и описана общая структура диссертации.

В первой главе диссертации приводится описание используемого в данной работе модельно-ориентированного подхода, в основе которого лежат информационные структуры, названные моделями-композициями. Они ставятся в соответствие физико-математическим моделям, применяемым в ходе моделирования, и описываются с помощью теоретико-множественного аппарата. Представлен обзор проблем, возникающих при автоматизации научных расчетов в многомасштабном моделировании. Определены роли пользователей для реализации сценариев многомасштабного моделирования на практике. Сделан обзор функциональности, необходимый для сервиса сценариев, а также произведен

сравнительный анализ инструментария для реализации данного сервиса, сделан выбор в пользу нотации моделирования бизнес-процессов BPMN и ее реализации с открытыми исходными кодами Camunda BPM.

Во второй главе приводится описание подходов и методов построения программной инфраструктуры интеграционной платформы многомасштабного моделирования в задачах материаловедения. Предлагается унифицированный протокол REST сервиса для типового расчетного модуля и схема его работы (Рисунок 1). Предлагаемый метод позволяет достаточно быстро создавать сервисы для новых расчетных модулей, удовлетворяющие требованиям интеграции в платформу.

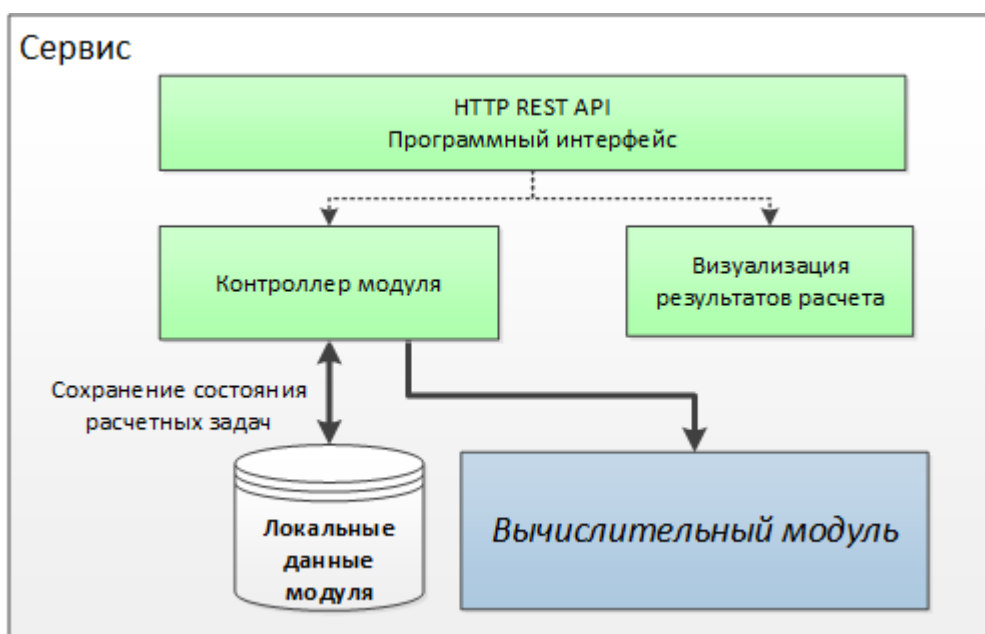


Рисунок 1. Архитектура типового расчетного модуля

Автоматизация выполнения задач на базе нотации BPM наиболее широко распространена и является стандартом де-факто при построении бизнес-процессов. Показано, что некоторые элементы нотации могут быть использованы для создания и исполнения сценариев в научных исследованиях. В ресурсоемких задачах вычислительного материаловедения, когда наиболее точные характеристики материала и процесса, с ним связанного, можно получить при учете

особенностей его строения, начиная с атомно-кристаллического и до макроуровня, вопросы использования актуальных, целостных и точных данных зачастую имеют решающее значение. Помимо этого, данные многомасштабных расчетов могут быть получены с применением разных программных средств (собственного программного кода, пакетов прикладных программ и другое), а также возможно хранятся на разных распределенных ресурсах, включая интернет-ресурсы, файлы в локальной сети, базы данных, а также в различных форматах (текстовые табличные файлы, JSON, XML, электронные таблицы). В рамках интеграционной платформы обеспечивается не только интеграция всех необходимых для многомасштабных расчетов данных на базе единого словаря, но также обеспечивается их качественный обмен, автоматизированный, но при этом гибко настраиваемый автором сценария. В связи с вышеизложенным для информационной поддержки задач многомасштабного моделирования была предложена архитектура интеграционной платформы (рисунок 2), позволяющая использовать все вышеперечисленные преимущества и предоставляющая возможность вариативного использования имеющихся программных решений для разного класса задач из области материаловедения.

Интеграционная платформа состоит из компонент модуля сценариев и множества сервисов вычислительных модулей, которые подбираются под конкретную задачу. Каждая подсистема содержит собственную базу данных и программный интерфейс, доступный по протоколу REST и описанный в спецификации OpenAPI, в соответствии с принципами сервисно-ориентированной архитектуры.

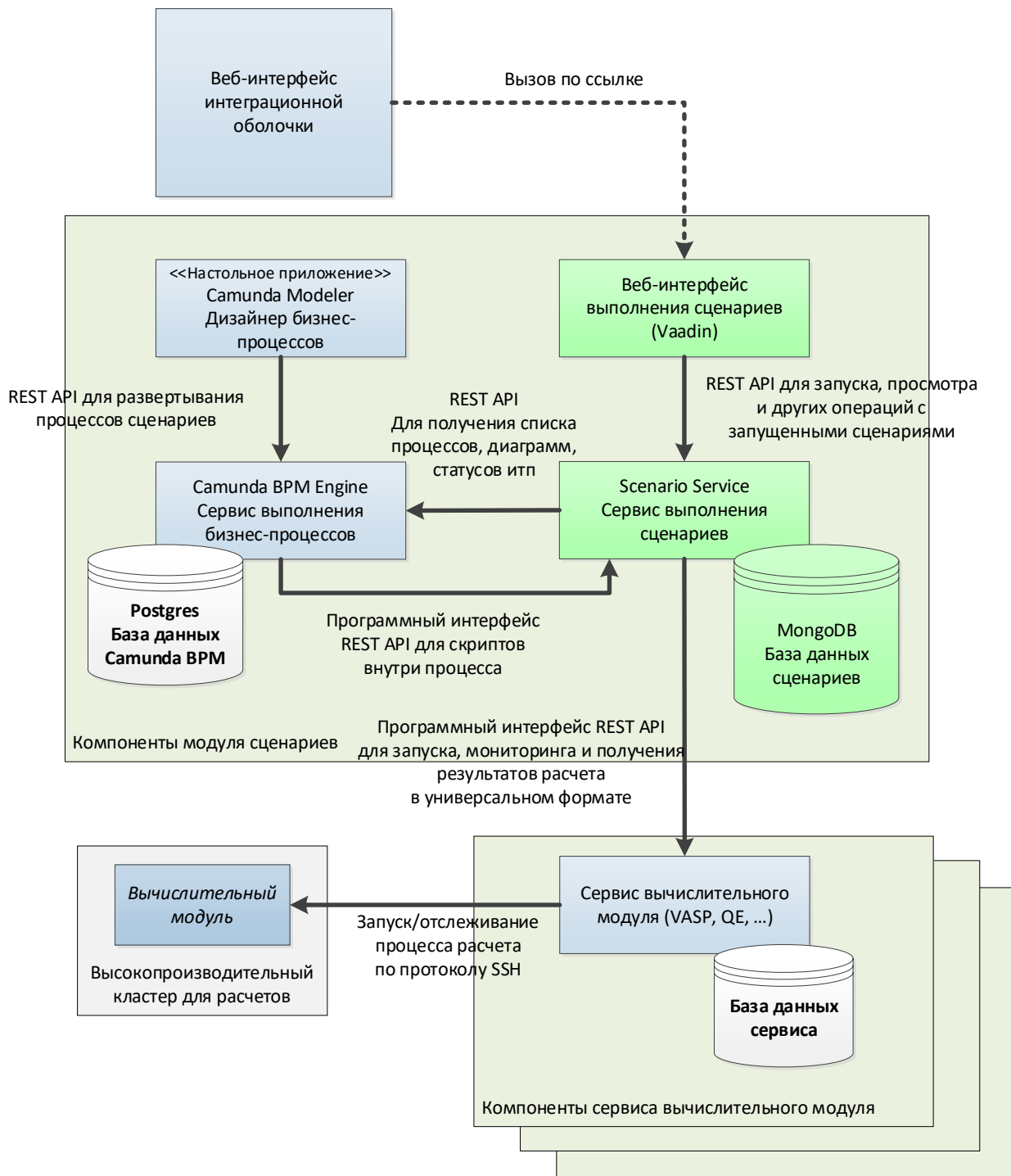


Рисунок 2. Общая схема интеграционной платформы

Функциональность подсистемы сценариев обеспечивается связкой готового продукта Camunda BPM, отвечающего за моделирование сценариев и исполнение их в рамках спецификации BPMN. Разработанный сервис выполнения сценариев отвечает за управление потоками данных между сценарием, скриптами и сервисами вычислительных модулей, управление процессом запуска и

остановки сценария, а также запуск вычислений в процессе работы отдельных задач сценария.

Также, во второй главе был представлен расчет экономического эффекта от использования интеграционной платформы в проектах. При ручном выполнении серии экспериментов, трудозатраты представляются в виде суммы:

$$E_{total} = M \cdot \left(\sum_{i=0}^N (W_i^{in} + W_i^{calc} + W_i^{out}) + (N - 1)W_{comm} \right),$$

где N – количество расчетных модулей на масштабных уровнях, M – количество экспериментов в серии, W_i – трудозатраты на выполнение одного расчета (подготовку входных данных, выполнение вычислений и обработку результатов), W_{comm} – трудозатраты на коммуникацию и передачу данных между расчетами. Экономия по сравнению с ручным запуском вычислений (E_{total}) достигается за счет уменьшения трудозатрат на коммуникацию между экспертами и подготовку данных/анализ результатов при автоматизации выполнения серий вычислительных экспериментов. На типовом многомасштабном расчете, состоящем из 5 модулей и серии из 10 экспериментов экономия составляет примерно 2 человеко-месяца.

Также, во второй главе предложены критерии (K_j) для выбора оптимального сценария: универсальность, ресурсоемкость, степень параллелизма, соотношение собственного или открытого программного обеспечения и лицензионного, вычислительная точность. Нормировав оценки x_j критериев K_j и задав функции ценности критериев f_j , весовые коэффициенты α_j под конкретные проектные цели, можно произвести формальное сравнение и выбор оптимального сценария по простой аддитивной целевой функции:

$$f(x_1, \dots, x_n) = \sum_{j=1}^n \alpha_j \cdot f_j(x_j),$$

В третьей главе описаны результаты применения разработанных методов при создании распределенной информационной системы для проведения многоуровневых исследований в области моделирования композиционных

материалов. В зависимости от типа моделируемого композиционного материала были разработаны подходы к созданию различных сценариев расчета его структурных характеристик и отдельных свойств. Созданный на базе разработанной интеграционной платформы программный комплекс позволяет автоматизировать отдельные этапы моделирования и помогает сформировать на основе анализа полученных результатов более глубокое понимание физических процессов. Разработка такого средства информационной поддержки дает возможность обеспечить формирование информации для многопараметрического анализа структуры и физических свойств различных классов существующих композиционных материалов, рассмотреть большое число вариантов в направлении поиска новых материалов и таким образом, ускорить и удешевить процесс подбора параметров их получения. Его использование позволяет за ограниченное время строить гибридные модели (состоящие из множества взаимосогласованных подмоделей) на базе многомасштабного подхода и применять алгоритмы машинного обучения и анализа данных для обоснованного выбора композиционных материалов с заданными свойствами для промышленного производства, включая авиационно-космическую и другие области промышленности. Пример сценария представляет собой исполняемый процесс в нотации BPMN (рисунок 3) и состоит из начальной формы запуска, набора вычислительных задач и пользовательских скриптов. В данном случае, процесс состоит из блоков расчета констант упругости методами квантовой механики, молекулярной динамики и, в итоге, запуска пакета ANSYS для расчета прочностных характеристик материала методами механики сплошных сред.

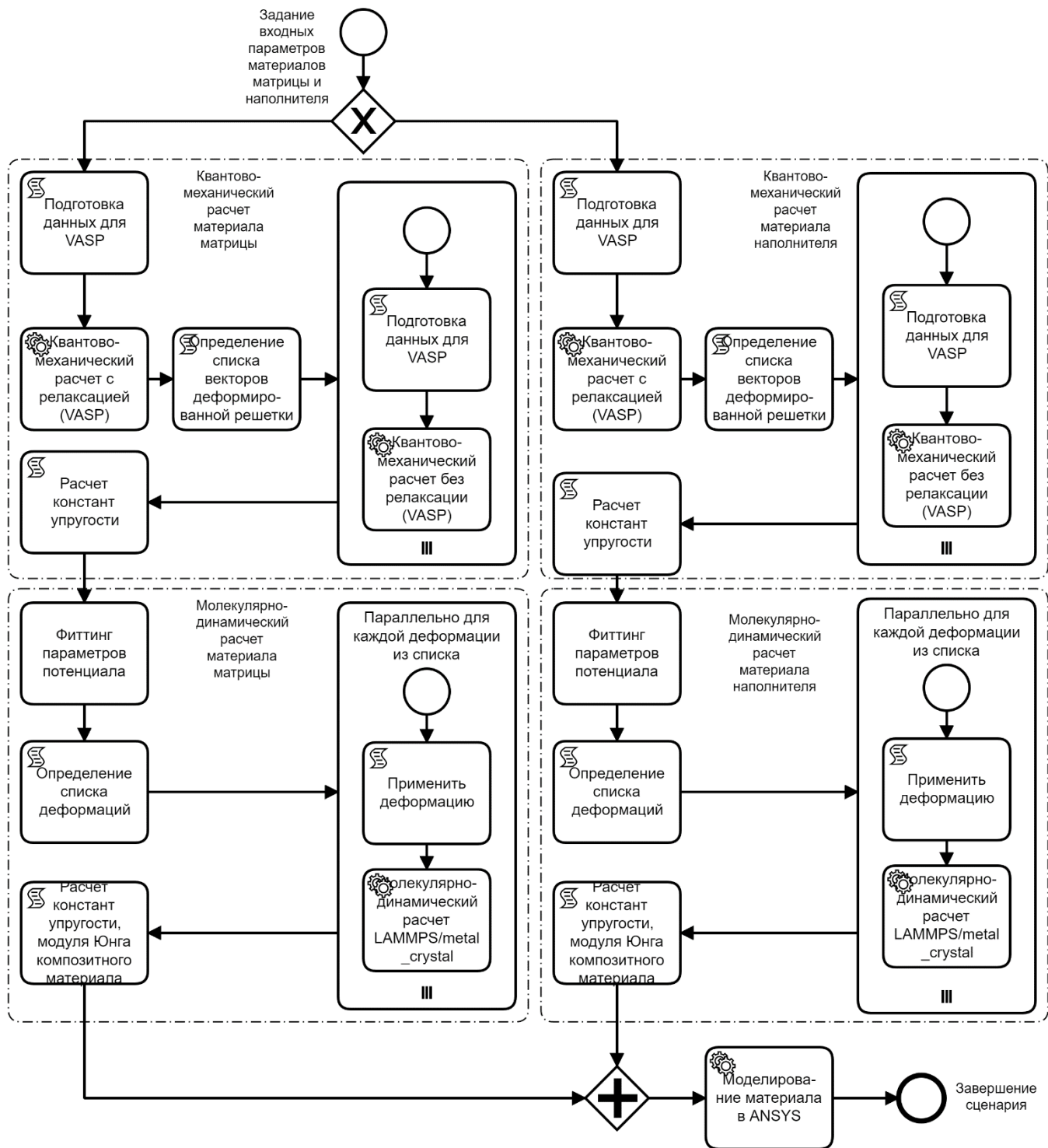


Рисунок 3. Сценарий для расчета композитного композиционного материала с металлической матрицей

Для апробации сценария были произведены расчеты прочностных свойств композитного материала полифениленсульфид с волокнами кевлара, результаты которых соответствуют известным опубликованным данным.

В четвертой главе представлено программное решение задачи применения интеграционной платформы для моделирования многоуровневых элементов памяти, используемых для создания нейроморфных систем с помощью реализации сценариев. Представлен сценарий для моделирования нейроморфных систем (Рисунок 4), состоящий из следующих масштабных уровней:

- квантово-механический уровень содержит модули для расчета когезионной энергии, констант эластичности и других свойств, используемых для последующей идентификации параметров межатомного потенциала;
- молекулярно-динамический уровень дает информацию для определения миграционных барьеров;
- на уровне мемристора используется «композитный модуль расчета мемристора», состоящий из пяти взаимосвязанных подмоделей, конечной целью которых является вычисление вольтамперной характеристики мемристора;
- на масштабном уровне нейроморфной сети для имитации её работы представлены модули «Фитинг моделей. ВАХ» «Схемотехнический». На основе вольтамперной характеристики (ВАХ) и заданной электронной схемы настраиваются параметры аналоговой нейросети и производится имитационное моделирование функционирования сети в режиме распознавания образов;

Для апробации работы сценария были рассчитаны структурные данные по диоксиду циркония в нескольких вариантах кристаллической решетки, используемого в мемристивных элементах.

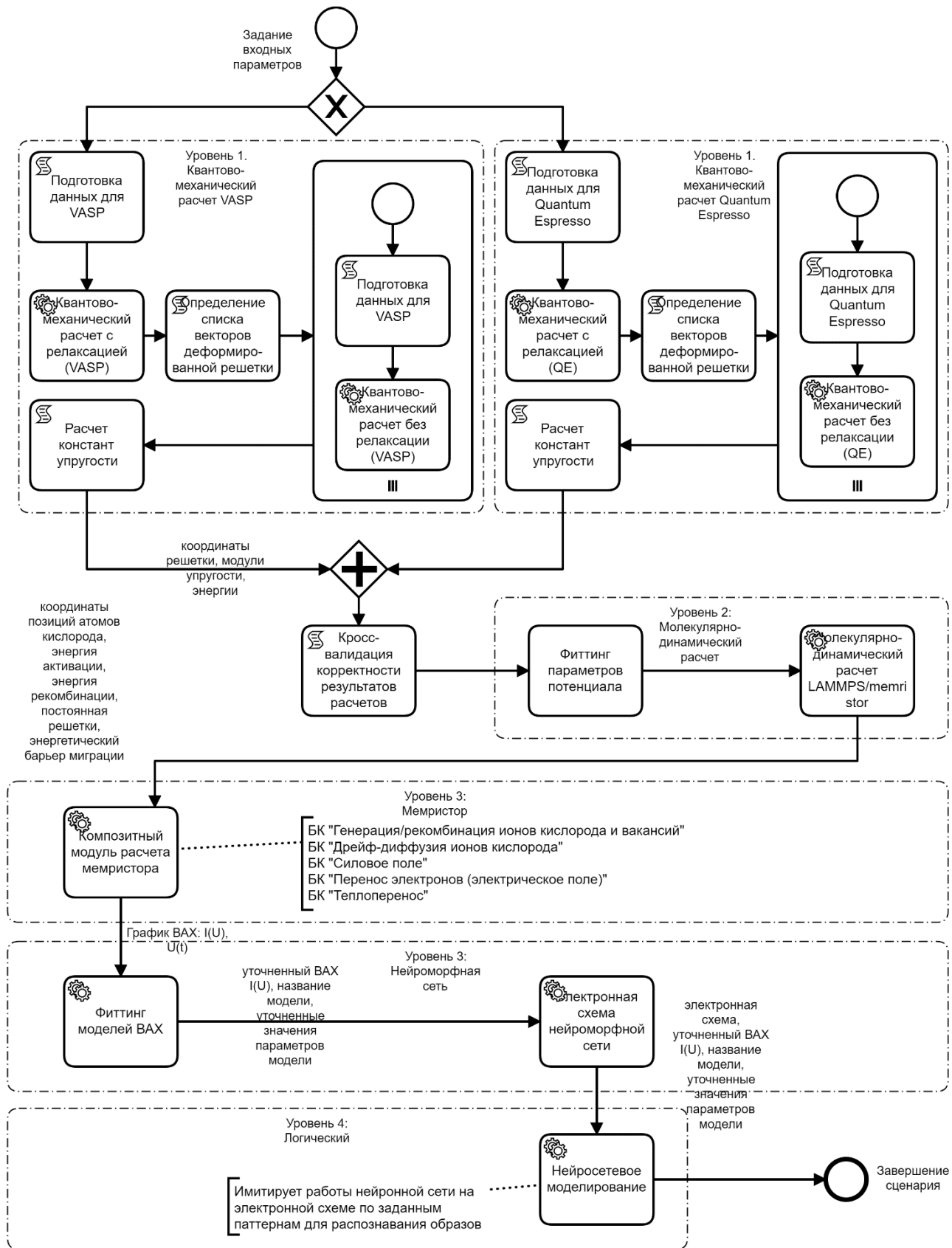


Рисунок 4. Сценарий для моделирования нейроморфных систем

В заключении приводятся основные выводы и результаты диссертационной работы, состоящие в следующем:

1. Разработаны модели и методы создания интеграционной платформы для автоматизированной реализации формализованной технологии построения многомасштабных вычислительных моделей в задачах материаловедения, в том числе:
 - методы построения и прототип архитектуры интеграционной платформы и модуля сценариев;
 - методы реализации сервиса типового расчетного модуля;
 - унифицированный протокол управления сервисами расчетных модулей;
 - методы адаптации инструментария моделирования бизнес-процессов для создания расчетных сценариев с помощью нотации BPMN.
2. Реализована модель данных и программная инфраструктура для организации распределенной обработки данных вычислительных экспериментов, в том числе:
 - схема хранения данных сценариев;
 - схема хранения данных сервисов вычислительных модулей;
 - логика обмена данными в модуле сценариев.
3. Создана архитектура и программная реализация расширяемой, кроссплатформенной интеграционной платформы, предназначенной для многомасштабного моделирования на высокопроизводительных вычислительных комплексах.
4. Сформирован универсальный подход к созданию сервисов вычислительных модулей, на основе которого за короткие сроки проводится интеграция новых расчетных модулей в программную среду многомасштабных расчетов.
5. Разработанные методы и подходы реализованные на современном высокопроизводительной вычислительном кластере ФИЦ ИУ РАН, позволяют расширить области приложений и глубину исследований в прикладных задачах

многомасштабного моделирования, дают возможность сократить затраты на выполнение расчетных задач.

6. Разработан программный комплекс для моделирования структурных свойств композиционных материалов.
7. Созданные методы и подходы применены для решения актуальных прикладных задач из области вычислительного материаловедения с демонстрацией работоспособности полученных результатов на конкретных примерах.

Одним из направлений для дальнейшего исследования является применение разработанных подходов для широкого класса прикладных задач в области анализа и синтеза новых композиционных материалов с заданными свойствами для авиационно-космической и других областей промышленности.

ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С., Марасанов А.М. Информационная поддержка задач компьютерного моделирования высокоскоростного взаимодействия твердых тел // International Journal of Open Information Technologies. 2014. том 2, №12. С. 12-16.
2. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С., Сеченых П.А. Архитектура платформы интеграции приложений для задач материаловедения // Материалы XIX Международной конференции по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2015), 24–31 мая 2015 г. 2015. С. 126-128.
3. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Реализация компонент системы компьютерного моделирования высокоскоростного взаимодействия твердых тел // Сборник тезисов докладов Национального суперкомпьютерного форума НСКФ-2015, г. Переславль-Залесский, 24-27 ноября 2015 г.
4. Абгарян К.К., Сеченых П.А., Гаврилов Е.С. Объектно-реляционный подход к разработке системы компьютерного моделирования многомасштабной схемы расчета многослойных полупроводниковых наноструктур // Программная инженерия. 2015. №8. С. 9-17.

5. Абгарян К.К., Сеченых П.А., Гаврилов Е.С. Применение документно-ориентированной СУБД для хранения данных вычислительных экспериментов // Материалы XX Международной конференции по механике и прикладным программным системам (ВМСППС'2017), 24-31 мая 2017 г., Алушта. С. 125-127.
6. Абгарян К.К., Марасанов А.М., Гаврилов Е.С. Информационная поддержка задач многомасштабного моделирования композиционных материалов // International Journal of Open Information Technologies ISSN: 2307-8162. 2017. Том 5, №12. С. 24-29.
7. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Информационная поддержка интеграционной платформы многомасштабного моделирования // Системы и средства информатики. 2019. Том 29, №1. С. 53-62.
8. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфных систем // Информатика и ее применения. 2020. Том 14, №2. С. 104-110.
9. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Распределенная информационная система для расчета свойств композиционных материалов // Информатика и ее применения. 2021. Том 15, №4. С. 50-58.
10. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Информационная поддержка для многомасштабного моделирования нейроморфных систем // Российский форум "Микроэлектроника-2021" 7-я Научная конференция "Электронная компонентная база и микроэлектронные модули". Сборник тезисов. Наноиндустрия. 2021. Том 14, №S7(107). С. 643-645.
11. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Программный комплекс для проведения мультифизических и многоуровневых расчетов // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов, материалы III международной конференции. М., «МАКС Пресс». 2021. С. 38-42.
12. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Программный комплекс для моделирования структурных свойств композиционных материалов // Информатика и ее применения. 2022. Том 16, №1. С. 88-97.

13. Гаврилов Е.С. Программные средства для хранения и обмена данными в задачах моделирования композитных материалов. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2021681762.
14. Гаврилов Е.С., Абгарян К.К. Интегрированный интерфейс к модулю параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2021681234.
15. Гаврилов Е.С. Интегрированный интерфейс к модулю сплошнородного взаимодействия. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2021681058.
16. Гаврилов Е.С., Абгарян К.К. Программа плотной упаковки периодических структур. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2022612188.