

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Гаврилова Евгения Сергеевича на тему «Методы разработки интеграционной платформы для многомасштабного моделирования (в задачах материаловедения)», представленную на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.11 «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей»

Предметом диссертационной работы Гаврилова Е.С. является разработка методов создания интеграционной платформы для автоматизации многомасштабного моделирования на примере задач материаловедения. **Практическая значимость и актуальность** темы диссертации определяется высоким уровнем востребованности программного обеспечения (ПО) отечественной разработки в области высоких технологий создания новых материалов и междисциплинарных исследований. Такое ПО выгодно отличается от зарубежных аналогов, как минимум тем, что может иметь открытый код и архитектуру, что позволяет пользователям расширить круг решаемых задач и более гибко осуществлять настройки. **Актуальность темы с научной точки зрения** обусловлена выбором современной многообещающей платформы многомасштабного моделирования, позволяющего в системе причинно-следственных связей увязывать решения материаловедческих задач на различных пространственных и временных масштабах их рассмотрения, начиная с уровня атомов и заканчивая телами.

**Содержание диссертации** Гаврилова Е.С. включает введение, четыре главы описания результатов работы, заключение, приложения и библиографический список, включающий 56 наименований. Объем диссертации составляет 123 страницы.

Во введении обоснована актуальность работы, дан обзор области и описан предмет научной работы, представлена 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.

Во второй главе приводится описание подходов и методов построения программной инфраструктуры интеграционной платформы многомасштабного моделирования в задачах материаловедения. Подробно рассматривается архитектура и пример программной реализации интеграционной платформы и реализации расчетных сценариев.

В третьей главе описаны результаты применения разработанных методов 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 интеграционной платформы программный комплекс позволяет автоматизировать отдельные этапы моделирования и помогает сформировать на основе анализа полученных результатов более глубокое понимание физических процессов.

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.

В заключении сформулированы основные научные и практические результаты, представленные в диссертации.

**Научная новизна и практическая значимость результатов** 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. В рамках данной платформы предложен и продемонстрирован 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 реконфигурации множества входных данных сценария, например, различных вариантов структурных характеристик, с целью автоматизации процесса вычисления физических свойств заданного спектра моделируемых материалов. Это, в свою очередь, приводит к существенной экономии трудозатрат ученых-исследователей и позволяет накапливать массив данных для дальнейшего анализа.

Практическая значимость диссертационной работы подтверждается рядом выполненных проектов, в которых была использована интеграционная платформа.

**Достоверность результатов** подтверждается сопоставлением результатов моделирования, полученных с использованием разработанных программных средств и расчетных сценариев, с данными, известными из литературы и баз данных свойств материалов.

Результаты диссертации получены автором лично, представлены в 12 работах, 7 из которых опубликованы в научных изданиях, рекомендованных ВАК РФ. Результаты обсуждались на пяти конференциях и научных

семинарах. В опубликованных автором трудах отражены основные положения его диссертации. Диссертационная работа оформлена в соответствии с требованиями, установленными Министерством образования и науки Российской Федерации.

Автореферат достоверно и полно отражает содержание диссертационной работы.

**В качестве недостатков** оппонируемой работы можно указать на следующее. Во-первых, в четвертой главе, где демонстрируется применимость построенной интеграционной платформы в условиях создания сценариев для проведения многомасштабного моделирования и имитации работы нейроморфных сетей, программная реализация выполнена лишь для части схемы. Не указано, какие методы и средства планируется задействовать при дополнительной интеграции и синхронизации работы сервисов специализированных расчетных модулей до полного работоспособного состояния всей схемы многомасштабного моделирования. Во-вторых, в той же главе, при рассмотрении существующего ПО в области микроэлектроники, указывается лишь малая часть используемых программ из серии TCAD и программ для проведения квантово-механических расчетов. Ничего не сказано о существующих российских разработках.

Указанные недостатки не снижают значимости полученных автором результатов. Представленная диссертационная работа свидетельствует о высокой научной квалификации автора. Показана возможность практического приложения разработанных автором методов для многомасштабного моделирования в задачах материаловедения. Новые научные результаты, полученные диссертантом, имеют существенное значение для развития отечественного материаловедения в целом и материалов микро- и нанoeлектроники, в частности.

На основании анализа содержания диссертации и опубликованных автором работ следует заключить, что диссертация Гаврилова Евгения Сергеевича является законченной научно-квалификационной работой и


соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата технических наук, а ее автор – Гаврилов Евгений Сергеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.11 – «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей».

Официальный оппонент

Доктор физико-математических наук

(специальность 05.27.01 – твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах),

Начальник отдела функциональной электроники АО «НИИМЭ»



Итальянцев Александр Георгиевич

«\_07\_» сентября 2022 г.

Подпись Итальянцева А.Г. заверяю.

Начальник ОМП



М.В. Лизавенко

Сведения об организации:

акционерное общество «Научно-исследовательский институт молекулярной электроники» (АО НИИМЭ); 124460, Россия, Москва, Зеленоград, улица Академика Валиева, 6/1; +7 (495) 2297299, +7 (495) 2297000; электронная почта: niime@niime.ru; адрес в сети Интернет: <https://www.niime.ru>