

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»

Практическая значимость и актуальность работы

В представленной диссертационной работе Гаврилова Е.С. рассмотрена актуальная задача разработки методов создания интеграционной платформы для автоматизации многомасштабного моделирования на примере задач материаловедения. Развитие перспективных высоких технологий создания новых материалов и междисциплинарных исследований включены в задачи научно-технологического развития и имеют существенное значение для развития страны. Одним из наиболее эффективных решений 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. Использование данных методов дает возможность существенно удешевить и ускорить процессы разработки и применения современных технологий получения новых материалов с требуемыми свойствами. Основными недостатками существующих зарубежных и отечественных решений является высокая стоимость лицензий и закрытая архитектура, не позволяющая оперативно подключать расчетные модули сторонних производителей или собственные разработки. В связи с этим, разработка и автоматизация методов и средств информационной поддержки многомасштабного моделирования с открытой расширяемой

архитектурой, позволяющих быстро адаптировать их для решения широкого круга задач, является актуальной.

Характеристика содержания диссертационной работы

Диссертация Гаврилова Е.С. состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения и библиографического списка, включающего 56 наименований. Объем диссертации составляет 123 страницы.

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, необходимой 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

Научная новизна диссертационного исследования определяется следующими результатами:

1. 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;

2. 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;

3. 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.

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

Достоверность основных положений и результатов работы

Достоверность результатов подтверждается сопоставлением результатов моделирования с использованием разработанных программных средств и расчетных сценариев с данными, опубликованными в научных статьях и базах 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 полностью отражает содержание диссертационной работы.

Необходимо отметить следующие недостатки представленной работы:

1. При выборе инструментария для создания средств информационной поддержки многомасштабного моделирования (раздел 1.4) не были рассмотрены такие релевантные решения, как open source платформа HUBzero (лежит в основе известного научного портала nanoHUB), научные workflow-системы (например, Pegasus и Kepler) и отечественный продукт pSeven компании DATADVANCE.
2. Автором был выбран подход моделирования сценариев как бизнес-процессов и его реализация в виде Camunda BPM. Имело бы смысл

дать более четкое обоснование выбранного решения и привести примеры, показывающие эффективность разработанного подхода в сравнении с существующими решениями.

3. Недостаточно подробно освещены вопросы организации высокопроизводительных вычислений, часто требуемых для задач материаловедения, на базе разработанной платформы и интеграции её с соответствующими вычислительными ресурсами. Например, неясно, поддерживается ли интеграция с системами управления заданиями на кластерах, можно ли в рамках расчёта использовать ресурсы сразу нескольких кластеров и что для этого требуется.
4. Также мало внимания уделено отказоустойчивости полученного решения, что актуально при проведении длительных расчётов. В разделе 2.2 на стр. 35 утверждается, что микросервисная архитектура “достаточно просто обеспечивает ключевые нефункциональные свойства”, в том числе отказоустойчивость. Однако обоснование этого тезиса не приведено, а далее в работе вопрос обработки отказов больше не поднимается.
5. По диссертации имеется также ряд замечаний редакционного характера (например, отсутствуют точки в конце предложений, не пронумерованы все заголовки, встречаются опечатки, на стр. 22 ациклический направленный граф назван “асинхронный направленный граф”), на которые указано автору.

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. Поставленная цель диссертационного исследования достигнута и, несмотря на замечания, заслуживает положительной оценки.

Автореферат соответствует основному содержанию диссертации и отвечает требованиям ВАК РФ.

На основании анализа содержания диссертации и опубликованных автором работ можно сделать заключение, что диссертация Гаврилова Евгения Сергеевича является законченной научно-квалификационной работой и соответствует требованиям ВАК РФ, предъявляемых к диссертациям на соискание кандидата технических наук. Новые научные результаты, полученные диссертантом, имеют существенное значение для российской науки и практики для автоматизации исследований в области вычислительного материаловедения.

Автор диссертации, Гаврилов Е.С., заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 05.13.11 – «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей».

Официальный оппонент

Кандидат технических наук (05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ), научный сотрудник

ИППИ РАН



Сухорослов Олег Викторович

« 7 » 09 2022 г.

Подпись Сухорослова О.В. заверяю.



Сведения об организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича РАН» (ИППИ РАН);
127051, Россия, Москва, Большой Каретный переулок, д.19, стр. 1;
+7 (495) 6504225; электронная почта: director@iitp.ru; адрес в сети Интернет:
<https://iitp.ru>