

**УТВЕРЖДАЮ**



Директор ИСП РАН,

\_\_\_\_\_ академик А.И.Аветисян

08 сентября 2022 г.

### **Отзыв ведущей организации**

на диссертационную работу Гаврилова Евгения Сергеевича  
«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»

#### **Актуальность темы исследования.**

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. Их использование 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, делающее возможным применять их к новым типам задач, является актуальной.

### **Структура и содержание диссертации.**

Диссертация Гаврилова Е.С. состоит из введения, четырех глав, заключения, приложения и библиографического списка, состоящего из 56 наименований. Объем текста 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 работе модельно-ориентированного подхода. 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** описываются 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.

С учетом изложенного выше можно считать, что **научно-техническая новизна диссертационной работы** состоит в следующем.

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 результатов и выводов,** представленных в диссертации, подтверждается следующими фактами.

Достоверность результатов подтверждается сопоставление 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.

#### **Рекомендации по использованию результатов работы.**

Разработанные методы и интеграционная платформа, представленные в диссертации, могут заинтересовать группы исследователей, занимающихся автоматизацией научных расчетов в областях, отличных от моделирования материалов, в которых либо востребовано многомасштабное моделирование, либо необходимо автоматизировать расчеты с использованием большого количества разнородных вычислительных модулей.

## **Соответствие диссертации и автореферата требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней».**

Диссертация Гаврилова Е.С. обладает внутренним единством. Автореферат диссертации адекватно отражает ее содержание. Диссертация и автореферат удовлетворяют требованиям «Положения о присуждении ученых степеней».

### **По тексту диссертации есть следующие замечания.**

- В главе 1 говорится о существующих подходах к построению систем автоматизации научных расчетов для многомасштабного моделирования, включая существующие программные решения. Здесь было бы целесообразно более подробно обсудить известные российские разработки, включая платформы для обработки данных, а также общесистемные средства для развертывания и конфигурирования распределенных систем.
- В тексте диссертации недостаточно обосновано использование документной базы данных для хранения данных вычислительных экспериментов. Было бы полезно рассмотреть вопрос построения и использования документов, в частности, описаний требований и семантики интерфейсов функций и сервисов с различным уровнем детализации и формализации.
- Сейчас важен вопрос технологической независимости, по этой причине в работе следовало бы исследовать вопрос обеспечения технологической независимости предлагаемого подхода - описанный подход во многом опирается на зарубежные технологии.

### **Заключение.**

Отмеченные выше замечания не меняют общего положительного впечатления о диссертационной работе. В ней излагаются методы и

результаты реализации востребованной практикой, важной задачи повышения эффективности многомасштабных расчетов для создания новых материалов.

Диссертация Гаврилова Е.С. обладает внутренним единством, представляет завершённые результаты на актуальную тему и является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны методы и подходы, вносящие значительный вклад в разработку математического и программного обеспечения вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей. Автореферат диссертации адекватно отражает ее содержание.

Диссертационная работа Гаврилова Е.С. удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям по специальности 05.13.11 – «Математическое и программное обеспечение вычислительных машин, комплексов и компьютерных сетей», а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата технических наук по этой специальности.

Отзыв составлен кандидатом технических наук научным сотрудником ИСП РАН Маркиным Юрием Витальевичем.

Отзыв на диссертацию обсужден и одобрен на совместном семинаре отделов 11 и 12.

Кандидат технических наук, специальность 05.13.11

Научный сотрудник ИСП РАН         *Юрий*         Маркин Юрий Витальевич

Сведения об организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт системного программирования им. В.П. Иванникова Российской академии наук» (ИСП РАН); 109004, г. Москва, ул. А. Солженицына, дом 25; +7(495) 912-44-25; электронная почта: info-isp@ispras.ru; адрес в сети Интернет: <https://www.ispras.ru>