

На правах рукописи



АБГАРЯН Каринэ Карленовна

**Теоретические основы построения многомасштабных
моделей и информационных систем для анализа
физических явлений и процессов**

Специальность 05.13.17 - Теоретические основы информатики

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Москва – 2018

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

Официальные оппоненты:

Алексеев Алексей Кириллович

доктор физико-математических наук, доцент,
публичное акционерное общество "Ракетно -
космическая корпорация "Энергия" имени
С.П. Королёва", главный научный сотрудник.

Итальянцев Александр Георгиевич

доктор физико-математических наук,
акционерное общество «Научно-исследовательский
институт молекулярной электроники» (АО НИИМЭ),
начальник отдела.

Куравский Лев Семенович

доктор технических наук, профессор,
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Московский государственный психолого-
педагогический университет» (ФГБОУ ВО МГППУ)
декан факультета информационных технологий.

Ведущая организация:

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

Защита диссертации состоится 18 октября 2018 г. в 13-00 на заседании
Диссертационного совета Д 002.073.05 при ФИЦ ИУ РАН по адресу:
119333, г. Москва, ул. Вавилова, д. 40, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ВЦ ФИЦ ИУ РАН по адресу

119333, г. Москва, ул. Вавилова, д. 42, а также на сайте:
http://www.frcsc.ru/diss-council/00207305/diss/list/abgaryan_kk

Автореферат разослан «____ » 2018 г.

Ученый секретарь
Диссертационного совета Д 002.073.05
доктор физико-математических наук
профессор

В.В.Рязанов

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Основная часть математических моделей, применяемых для изучения физических явлений и процессов, предназначена для их описания в единственном пространственно-временном масштабе. Исследование многомасштабных научных проблем, включающих в себя явления несопоставимых пространственных и/или временных масштабов, невозможно без учета всех факторов, играющих ключевые роли в таких задачах. При построении схемы моделирования необходимо выстроить иерархию с учетом разномасштабности рассматриваемых явлений и процессов. В случаях, когда в рамках одной модели нужно провести исследование многомасштабного физического процесса или явления, возникает проблема взаимосогласовать имеющиеся модели, что требует разработки теоретических основ их объединения. Применение технологии многомасштабного моделирования, согласно которой расчеты на каждом уровне масштаба проводятся с использованием соответствующих математических моделей и вычислительных алгоритмов, позволяет

- объяснить многие явления и свойства объектов, исследовать структурные особенности физических явлений и процессов на нескольких масштабах;
- получать качественно новые результаты в области прогнозирования свойств новых объектов;
- решать задачи оптимизации состава и структуры многомасштабных объектов, выстраивать взаимосвязи между структурой и свойствами, что дает возможность синтезировать композиционные структуры, обладающие заданным набором свойств.

Применение предсказательного компьютерного моделирования с использованием высокопроизводительных программных комплексов в настоящее время позволяет проводить детальные расчеты сложных явлений и процессов, что в значительной мере ослабляет требования к проведению натурных экспериментов. Это, в свою очередь, дает возможность существенно удешевить и ускорить процессы разработки и применения современных технологий получения новых объектов с требуемыми свойствами.

Цели и задачи диссертационной работы

Основными целями диссертации были разработка математического аппарата (методов, моделей, алгоритмов) и технологии построения многомасштабных моделей и многоуровневых информационных систем с демонстрацией работоспособности полученных результатов на актуальном классе задач о новых материалах.

Для достижения поставленных целей в диссертационной работе были поставлены задачи:

- Разработка и реализация новой математической технологии построения многомасштабных моделей физических явлений и процессов;

- Разработка теоретических основ и общих принципов формирования интеграционных систем для информационной поддержки многомасштабного моделирования;
- Создание кроссплатформенной, расширяемой интеграционной системы, предназначенной для решения задач многомасштабного моделирования на высокопроизводительных программных комплексах;
- Применение созданной технологии к решению актуальных прикладных задач структурного материаловедения.

Научная новизна.

Предложено применение модельно-ориентированного подхода к построению программных систем многомасштабного моделирования. Впервые вводится понятие «базовая модель-композиция» - информационная структура, объединяющая данные и методы их обработки в единой информационно-вычислительной среде. Базовые модели-композиции (*БК*), отнесенные к разным масштабным уровням, являются композиционными элементами, из которых строятся многомасштабные композиции (*МК*) - информационные аналоги многомасштабных моделей. Для описания разработанной технологии используется теоретико-множественный аппарат, который позволяет передать вычислительную сущность многомасштабных вычислительных процессов.

Предложены и реализованы новые подходы к построению интеграционной платформы для информационного обеспечения многомасштабного моделирования. С целью эффективного представления данных применена гибридная технология, основанная на сочетании различных типов баз данных – документно-ориентированных и реляционных. Следуя логике модельно-ориентированного подхода к многомасштабному моделированию, *МК* представляется как коллекция, состоящая из сгруппированных документов с иерархической структурой, отражающей последовательность присоединения экземпляров *БК*. Таким образом, *МК* интегрируется в универсальную платформу системы информационного обеспечения компьютерного моделирования физических процессов.

Разработаны методы обработки кристаллографической информации в задаче поиска устойчивых кристаллических структур, совместных с заданной химической формулой. Сформулированы экстремальные постановки задач, построены эффективные вычислительные алгоритмы, учитывающие свойства симметрии и периодичности кристаллов. Разработана процедура информационного обмена между системами кристаллографического и квантово-механического моделирования.

Разработана схема многомасштабного моделирования наноразмерных полупроводниковых гетероструктур с учетом эффектов спонтанной и пьезоэлектрической поляризации, объединяющая квантово-механические расчеты на атомарном уровне для получения плотности зарядов на гетероинтерфейсах, расчет электронной плотности в гетероструктуре на основе самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона, а также расчет подвижности

электронов в двумерном электронном газе с учетом различных механизмов рассеяния. Построены эффективные вычислительные алгоритмы решения задач моделирования и оптимизации полупроводниковых гетероструктур.

Разработана дискретно-элементная вычислительная модель высокоскоростного внедрения. На основе сравнения результатов компьютерного моделирования с экспериментальными данными идентифицирована зависимость энергии межчастичной связи от динамической твердости материалов. Использование технологий распаралеливания вычислений на графических процессорах в сочетании со средствами трехмерной визуализации и анимации результатов позволило получить детальные пространственно-временные картины процессов внедрения. Как результат, в ходе вычислительных экспериментов впервые обнаружен эффект «пластического» расклинивания преграды.

Методология и методы исследования. Предлагаемая в данной работе информационная технология построения многомасштабных моделей опирается на модельно-ориентированный подход, особенностью которого в данной работе является использование информационных структур (базовых моделей-композиций), объединяющих данные и методы их обработки. Для их описания используется теоретико-множественный аппарат (см. работы ^{1,2}), который позволяет передать вычислительную сущность исходных математических моделей. Базовые композиции являются композиционными элементами, из которых согласно представленной в работе технологии строятся многомасштабные композиции (*МК*) - информационные аналоги многомасштабных моделей, при помощи которых передается содержание вычислительных процессов. Структура базовой модели-композиции представлена в виде таблиц, в которых данные (входные, выходные, модели и алгоритмы) с помощью двойной индексации упорядочены по масштабным уровням и по номеру модели на соответствующем уровне масштаба. Далее на базе *МК* строятся сложные иерархические программные системы, применяемые для решения задач материаловедения.

При построении интеграционных систем для информационной поддержки многомасштабного моделирования используется доменное представление взаимосвязанных вычислительных, информационных и управляющих программных компонент. Кроме того, используется гибридная технология, сочетающая применение документно-ориентированного и реляционного представления данных, а также методика формализации и унификации сценариев всех стадий вычислительных экспериментов. Эффективность разработанных в диссертации подходов продемонстрирована в ходе проведения вычислительных экспериментов на актуальном классе задач о новых материалах.

Теоретическая ценность. В настоящее время в области развития теоретических подходов к анализу проблемы многомасштабного моделирования не

¹Бродский Ю.И. Модельный синтез и модельно-ориентированное программирование. - М.: ВЦ РАН. 2013. 142 С.

²Куратовский К., Мостовский А. Теория множеств. - М.: Мир. 1970. 416 С.

выработано общих стандартов. В основном при построении схем многомасштабного моделирования используются либо теоретические построения, основанные на применении теории графов, либо применяется описательный, неформализованный подход к представлению многомасштабных моделей. В настоящей работе предлагается технология построения многомасштабных моделей и многоуровневых информационных систем, основанная на теоретико-множественных представлениях. Предложенный подход позволяет формализовать и в будущем автоматизировать процесс построения многомасштабных моделей и информационных систем на их основе. Это в свою очередь может послужить основой для создания человеко-машинных интеллектуальных систем нового поколения.

Практическая значимость. Разработанный математический аппарат (методы, модели, алгоритмы) и технологии построения многомасштабных моделей и многоуровневых информационных систем могут найти широкое применение в практике компьютерного моделирования сложных систем и процессов.

Разработанные методы и средства многомасштабного моделирования позволяют оперативно проводить многовариантный анализ многослойных наноразмерных полупроводниковых структур, что создает основу для решения ряда оптимизационных задач, актуальных для современной СВЧ-электроники.

Задача высокоскоростного внедрения, решенная в диссертации, была поставлена в рамках хоздоговорной работы с государственной организацией. В ходе вычислительных экспериментов обнаружен эффект «пластического» расклинивания преграды, что открывает перспективы оптимизации состава и структуры композиционных материалов, используемых для изготовления ударника.

Положения и результаты, выносимые на защиту.

- технология разработки систем многомасштабного моделирования, базирующаяся на концепции синтеза многоуровневых моделей из базовых моделей-композиций и применении модельно-ориентированного подхода к построению многокомпонентных программных систем;
- методология построения интеграционной платформы для многомасштабного моделирования, основанная на доменном представлении взаимосвязанных вычислительных, информационных и управляющих программных компонент, формализации и унификации сценариев всех стадий вычислительных экспериментов, гибридном подходе, сочетающем документно-ориентированное и реляционное представление данных.
- архитектура кроссплатформенной, расширяемой интеграционной системы, предназначеннной для решения задач многомасштабного моделирования на высокопроизводительных вычислительных комплексах;
- алгоритмы обработки данных и интеграции информационных потоков в комплексных задачах кристаллографического анализа, квантово-механического и молекулярно-динамического моделирования;

- алгоритмы многомасштабного моделирования и оптимизации наноразмерных полупроводниковых гетероструктур, объединяющие квантово-механические расчеты на атомарном уровне, расчет электронной плотности в гетероструктуре на основе самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона, а также расчет подвижности электронов в двумерном электронном газе с учетом различных механизмов рассеяния;
- метод дискретно-элементного моделирования высокоскоростного внедрения ударника в преграду, результаты идентификации зависимости энергии межчастичной связи от динамической твердости материалов, обнаруженный в вычислительных экспериментах эффект пластического расклинивания преграды.

Достоверность результатов. 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 численными решениями, экспериментальными данными.

Личный вклад. В диссертацию включены положения и результаты, полученные либо лично автором, либо при его определяющем участии. Автор лично является разработчиком теоретических основ создания многомасштабных моделей, методологии построения интеграционной платформы многомасштабного моделирования, информационно-вычислительных моделей и алгоритмов, исполнителем теоретических исследований, результаты которых изложены в диссертации.

Реализация и внедрение результатов работы. Работа выполнялась в рамках научных планов Вычислительного центра имени А.А.Дородницына ФИЦ ИУ РАН. Также работа поддерживалась грантами Российского фонда фундаментальных исследований: 10-08-01263-а, 13-08-01335, 16-08-01178. В рамках хоздоговорных работ с АО НИМИ проводились исследования по теме «Теоретическое исследование процесса высокоскоростного взаимодействия ударника с металлической преградой». Результаты диссертации внедрены в практику работы предприятия.

Соответствие паспорту специальности. Содержание диссертационной работы соответствует следующим пунктам паспорта специальности 05.13.17 - «Теоретические основы информатики»:

- Исследование информационных структур, разработка и анализ моделей информационных процессов и структур (п.2);
- Исследование и разработка средств представления знаний. Принципы создания языков представления знаний, в том числе для плохо структурированных предметных областей и слабоструктурированных задач; разработка интегрированных средств представления знаний, средств представления знаний, отражающих динамику процессов, концептуальных и семиотических моделей предметных областей (п.4);
- Моделирование формирования эмпирического знания (п.7);

- Разработка математических, логических, семиотических и лингвистических моделей и методов взаимодействия информационных процессов, в том числе на базе специализированных вычислительных систем (п.12);
- Разработка теоретических основ создания программных систем для новых информационных технологий (п.14).

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы были представлены и обсуждались на семинарах ВЦ РАН и на конференциях:

- Международная конференция “Взаимодействие ионов с поверхностью”, г. Москва, г.Звенигород, г.Ярославль 1997, 2007, 2009, 2011, 2013 гг.
- Международная конференция по вычислительной механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС), г.Алушта, 2007, 2009, 2011, 2013, 2015, 2017 гг.
- Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях (NPNJ), г. Алушта, 2008, 2010, 2012, 2014, 2016 гг.
- Научно-практический семинар по проблеме «Математическое моделирование в материаловедении электронных наноструктур» ВЦ РАН, г. Москва, 2013 - 2017 гг.
- International conference «Optimization and applications» (Optima), Petrovac, Montenegro. 2009, 2011, 2013, 2015 гг.
- VII(VIII, IX, X, XI) Международная конференция по неравновесным процессам в соплах и струях «NPNJ'2008»(«NPNJ 2010», «NPNJ 2012», «NPNJ 2014», «NPNJ 2016») г. Алушта, 25-31 мая 2008 (2010, 2012, 2014, 2016) г.
- Российское совещание по актуальным проблемам полупроводниковой фотоэлектроники «Фотоника-2008», г. Новосибирск, 28 мая 2008 г.
- Международная научно-техническая конференция «Нанотехнологии функциональных материалов» (НФМ'10), г. Санкт-Петербург. 2010 г.
- VI Международная конференция. Фазовые превращения и прочность кристаллов, г. Черноголовка. 16-19 ноября 2010 г.
- 8-я Всероссийская конференция «Нитриды галлия, индия и алюминия: структуры и приборы», г. Санкт-Петербург, 26-28 мая 2011 г.
- Российская конференция и школа по актуальным проблемам полупроводниковой нанофотоэлектроники. Фотоника-2011, г. Новосибирск, 22-26 августа 2011 г.
- VIII Национальная Конференция «Рентгеновское, синхротронное излучения, нейтроны и электроны для исследования наносистем и материалов. Нано-Био-Инфо-Когнитивные технологии»(РСНЭ-НБИК), г. Москва, 14-18 ноября 2011 г.
- Международная конференция «Кремний-2012», г. С.-Петербург 9-13 июля 2012 г.
- 16-я международная конференция «Авиация и космонавтика - 2017». Москва, МАИ, 20-24 ноября 2017 г.
- Научный семинар отдела «Имитационные системы и исследование операций» ФИЦ ИУ РАН, г. Москва, 17 апреля 2018 г.
- Национальный суперкомпьютерный форум НСКФ-2014. г. Переславль-Залесский. 25-27 ноября 2014 г.

- Международная научная конференция «Современные проблемы вычислительной математики и математической физики», г. Москва, МГУ, ВМиК, памяти А.А.Самарского, 16-17 июня 2014 г.
- Национальный суперкомпьютерный форум НСКФ-2015, г. Переславль-Залесский, 24-27 ноября 2015 г.
- Международная научная конференция по информатике и прикладной математике, посвященная 60-летию Вычислительного центра им.А.А.Дородницына РАН. Г. Москва, ВЦ РАН, 9-10 декабря 2015 г.
- E-MRS (European Materials Research Society) Spring Meeting, France, 2013 (Strasbourg), 2014, 2015, 2016 (Lille), 2017 (Strasbourg) гг.

Публикации по теме диссертации. По материалам диссертации опубликовано 2 монографии, 22 работы в журналах, входящих в Перечень рецензируемых научных изданий, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией для опубликования основных научных результатов диссертаций, или входящих в одну из международных баз данных и систем цитирования Scopus, Web of Science, оформлено свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ. Кроме того, результаты опубликованы в ряде других изданий, сборниках статей и трудах конференций, общее число всех научных публикаций — 94.

Структура и объем работы. Работа состоит из оглавления, введения, шести глав, списка литературы по главам, списка основных публикаций автора, приложения. Полный объем диссертации составляет 337 страниц текста с 75 иллюстрациями и 29 таблицами.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении диссертационной работы дан обзор основных работ по тематике диссертационного исследования, приведены обоснование актуальности темы диссертационной работы, сформулированы цели и задачи, научная новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, их достоверность, представлены основные положения защищаемые автором, приведены данные о структуре диссертационной работы, перечислены авторские публикации по теме.

Предметом исследования диссертационной работы является проблема многомасштабного моделирования физических явлений и процессов. Данной проблематике посвящены многие работы российских и зарубежных исследователей. В настоящее время в области развития теоретических подходов к ее анализу не выработано общих стандартов. В основном при создании схем многомасштабного моделирования в ходе решения широкого класса задач, включая многомасштабное моделирование в области материаловедения и сложных газодинамических процессов, используются либо теоретические построения, основанные на применении методов теории графов, либо описательные, неформализованные подходы к созданию многомасштабных моделей. В работах член.-корр. АН СССР Н.П. Бусленко, посвященных имитационному

моделированию сложных процессов и систем, высказывалась идея о том, что сложная система состоит из составных частей, которые сами являются системами, объединенными или связанными между собой. В работах представителя ВЦ РАН ФИЦ ИУ РАН Ю.И. Бродского эти идеи нашли свое развитие и был предложен формализованный подход к построению и компьютерной реализации имитационных моделей сложных систем, состоящих из разных компонент, использующий теоретико-множественное представление. Однако, напрямую известные теоретические подходы не могут быть применены к моделированию многомасштабных систем и процессов, так как в них помимо иерархической структуры необходимо учитывать пространственно-временную иерархию масштабов. Данная диссертационная работа посвящена созданию формализованной технологии построения многомасштабных вычислительных моделей и многоуровневых информационных систем для исследования процессов и явлений, характеризующихся широким спектром пространственных и/или временных масштабов.

В *первой главе* сформулированы основные принципы применения модельно-ориентированного подхода к построению программных систем многомасштабного моделирования. В п.1.1 дается введение в проблематику многомасштабного моделирования, представлены различные подходы к изучению и анализу физических процессов и явлений. В п.1.2 описываются особенности применения модельно-ориентированного подхода к многомасштабному моделированию. Отмечено, что при исследовании многомасштабных проблем (процессов или явлений) в конкретной предметной области необходимо определить, сколько масштабных уровней должно быть задействовано. В диссертационной работе базовыми названы математические модели, применяемые для изучения физических процессов и явлений, предназначенные для их описания на одном пространственно-временном масштабе. Базовым математическим моделям поставлены в соответствие математические объекты, названные базовыми композициями (*БК*). Для их описания используется теоретико-множественный аппарат, который позволяет передать вычислительную сущность исходных математических моделей. Базовые композиции являются композиционными элементами, из которых согласно представленной в работе технологии строятся многомасштабные композиции (*МК*) – информационные аналоги многомасштабных моделей, и передается содержание многомасштабных вычислительных процессов. Далее на базе *МК* строятся сложные иерархические программные системы, применяемые для решения задач материаловедения. В п.1.3 приводится концептуальное описание основных положений информационной технологии многомасштабного моделирования. Особенностью применения модельно-ориентированного подхода к разработке программных систем является использование информационных структур, объединяющих данные и методы их обработки. Выделим три группы данных, задействованных в *БК*:

-входные данные (не меняются в ходе обработки), фазовые переменные или координаты (меняются в ходе обработки и определяют основные свойства (характеристики) объекта, данные-свойства (меняются в ходе обработки, но полностью определяются входными данными и фазовыми переменными). При этом на основе данных-свойств могут формироваться правила изменения фазовых переменных. Далее фазовые переменные и данные свойства мы обозначаем как выходные данные. Среди методов обработки данных выделяются статические - те, что вычисляют определенные свойства объекта (вычисляют данные-свойства по фазовым переменным и входным данным модели-компоненты) и динамические, которые изменяют фазовые переменные в соответствии с определенными правилами.

Пусть i - номер масштабного уровня, $i = \overline{0, L}$, где L -число рассматриваемых уровней, j - номер базовой модели-композиции на текущем масштабном уровне, $j = \overline{0, N_i}$, N_i - число моделей на i -ом уровне, k - номер элементарного процесса $БК$.

Опишем основные множества, из которых состоит базовая модель-композиция:
 $VX_{ij} = \{V_{ij}, X_{ij}\}$ - множество данных, где:

V_{ij} -множество входных данных (внешние характеристики модели);

X_{ij} - множество выходных данных (фазовых переменных и данных-свойств модели);

MA_{ij} - множество методов обработки данных (модели и алгоритмы);

E_{ij} - множество событий, отнесенных к описанию выполняемых в рамках $БК$ элементарных процессов;

$\{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p$ -множество реализаций моделей и алгоритмов в зависимости от элементарного процесса количества p элементарных процессов;

$\{E_{ij}^k\}_{k=1}^p$ - множество реализаций событий по элементарным процессам.

Множество методов обработки данных опишем подробнее.

$$MA_{ij} = \{M_{ij}, A_{ij}\} = \{s_{ij}, f_{ij}, a_{ij}, a_{i..i^*,j}\}.$$

Множество моделей M_{ij} , входящих в множество MA_{ij} , состоит из статических (s_{ij}) и динамических (f_{ij}) методов обработки данных. Алгоритмические модели (алгоритмы) a_{ij} , $i = \overline{0, L}$, $j = \overline{1, N}$ могут быть специализированными, то есть используемыми только в данной конкретной модели с определенного масштабного уровня, или универсальными, применяемыми в различных моделях с разных масштабных уровнях $a_{i..i^*,j}$.

Определение 1. Под базовой моделью-композицией MC_i^j будем понимать однопараметрическое семейство основных множеств, задействованных в общем вычислительном процессе, разного структурного типа, включая данные и методы их обработки.

$$MC_i^j = < \{VX_{ij}, MA_{ij}, E_{ij}, \{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p, \{E_{ij}^k\}_{k=1}^p\} >.$$

Параметром семейства основных множеств является количество p элементарных процессов в базовой модели-композиции. Индексы i и j позволяют идентифицировать MC_i^j на пространственном уровне i по ее номеру j .

Структуру модели-композиции удобно представить в виде табл.1.

Таблица 1

Базовая модель-композиция «НАЗВАНИЕ» (MC_i^j)			
№	Название и обозначение множеств структурных элементов, подмножеств		
1	Множество данных VX_{ij}	V_{ij} - множество входных данных	
		$X_{ij} = \{p_v, d_p\}$ – множество выходных данных(внутренние характеристики)	Фазовые переменные p_v
			Данные свойства d_p
2	$MA_{ij} = \{M_{ij}, A_{ij}\}$ $= \{s_{ij}, f_{ij}, a_{ij}, a_{i,..,i^*,j}\}$	M_{ij} – множество моделей	s_{ij} - статические
			f_{ij} - динамические
		A_{ij} -множество алгоритмов	a_{ij} - подмножество алгоритмов исп. только на i -м уровне масштаба (локальные)
			$a_{i,..,i^*,j}$ - подмножество алгоритмов исп. на нескольких уровнях $i,..,i^*$ (универсальные)
3	Множество событий и реализаций событий по процессам $E_{ij}, \{E_{ij}^k\}_{k=1}^p$		
4	Множество реализаций методов обработки данных $MA_{ij}^k = \{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p$		

Такое представление полностью описывает структуру модели-композиции и задает шаблон, который будет заполняться конкретными данными, моделями и алгоритмами при создании реальных экземпляров модели-композиции.

Далее приводятся определения понятий композиция и многомасштабная композиция, локальные и глобальные параметры.

Определение 2. Под композицией $K_i^{j^*}$ будем понимать однопараметрическое семейство, полученное из экземпляров BK с одного масштабного уровня за счет объединения их основных множеств разного структурного типа в общем вычислительном процессе.

Здесь i принимает одно из значений от 0 до L в зависимости от масштабного уровня к которому отнесена данная композиция (K), а j^* обозначает совокупность номеров j_1, j_2, \dots, j_n базовых моделей-композиций на соответствующем масштабном уровне. В качестве параметра выступает $p = p_{j_1} + p_{j_2} + \dots + p_{j_n} = \sum_{k=1}^n p_{j_k}$, указывающий на количество процессов в K и зависящий от числа процессов во всех задействованных BK , входящих в нее ($p \geq 2$).

Таким образом, композиция может быть описана следующим образом:

$$K_i^j = < \{VX_{ij}, MA_{ij}, E_{ij}, \{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p, \{E_{ij}^k\}_{k=1}^p \} >.$$

Здесь j обозначает подмножество $\{j_1, j_2, \dots, j_n\}$ номеров BK , входящих в состав $K_i^j = K_i^{j_1, j_2, \dots, j_n}$, i - номер масштабного уровня, на котором создается композиция. В определенном смысле K_i^j схожа с базовой моделью-композицией, так как представляет собой совокупность основных множеств разных структурных типов, связанных общим вычислительным процессом. Однако, ее структуру можно представить набором таблиц, соответствующих экземплярам входящих в нее BK , расположенных в определенном порядке.

Пусть на i -м масштабном уровне у нас имеется $MC_i^{j_1}$ и $MC_i^{j_2}$. Здесь j_1, j_2 - номера соответствующих BK на масштабном уровне i , а p_{j_1} и p_{j_2} обозначения числа элементарных процессов в базовых композициях. Составим композицию $K_i^j = K_i^{j_1, j_2}$ из $MC_i^{j_1}$ и $MC_i^{j_2}$. Основными множествами K_i^j , с процессом p , объединяющим процессы p_{j_1} и p_{j_2} , будут:

$$V_{ij} = V_{ij_1} \cup V_{ij_2}, X_{ij} = X_{ij_1} \cup X_{ij_2}, MA_{ij} = MA_{ij_1} \cup MA_{ij_2}, E_{ij} = E_{ij_1} \cup E_{ij_2}, \{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p = \{MA_{ij_1}^k\}_{k=1}^{p_{j_1}} \cup \{MA_{ij_2}^k\}_{k=1}^{p_{j_2}}, \{E_{ij}^k\}_{k=1}^p = \{E_{ij_1}^k\}_{k=1}^{p_{j_1}} \cup \{E_{ij_2}^k\}_{k=1}^{p_{j_2}}.$$

Создание K из двух различных экземпляров BK осуществляется за счет того, что происходит объединение их основных множеств, соответственно структурному типу, в одном вычислительном процессе.

Определение 3. Под многомасштабной композицией (MK) будем понимать однопараметрическое семейство, полученное из экземпляров BK с разных масштабных уровней за счет объединения в общем вычислительном процессе их основных множеств разного структурного типа, включая данные и методы их обработки. Многомасштабная композиция обозначается через $MK_{i, i_*, \dots, i_{***}}^{i, j; i_*, j_*, \dots, i_{***}, j_{***}}$.

Здесь i, i_*, \dots, i_{***} - номера масштабных уровней, задействованных в данной MK , а j, j_*, \dots, j_{***} - номера BK на конкретном масштабном уровне. В определенном смысле $MK_{i, i_*, \dots, i_{***}}^{i, j; i_*, j_*, \dots, i_{***}, j_{***}}$ схожа с BK , так как представляет собой объединение основных множеств разных структурных типов, связанных общим вычислительным процессом. Ее структуру, так же как и структуру K , можно представить набором таблиц, соответствующих экземплярам входящих в нее BK , расположенных в определенном порядке, соответствующем иерархии масштабов, задействованных в ней.

Пусть на i -м масштабном уровне у нас имеется экземпляр MC_i^j и на i_* -масштабном уровне экземпляр $MC_{i_*}^{j_*}$. Здесь j, j_* - номера базовых моделей-композиций на масштабных уровнях i и i_* соответственно. Составим многомасштабную композицию $MK_{i, i_*}^{i, j; i_*, j_*}$ из двух экземпляров базовых композиций MC_i^j и $MC_{i_*}^{j_*}$. Основными множествами, как и в случае создания MK , будут:

$$V_{ij} \cup V_{i_*j_*}, X_{ij} \cup X_{i_*j_*}, MA_{ij} \cup MA_{i_*j_*}, E_{ij} \cup E_{i_*j_*}, \{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p \cup \{MA_{i_*j_*}^k\}_{k=1}^{p_*}, \{E_{ij}^k\}_{k=1}^p \cup \{E_{i_*j_*}^k\}_{k=1}^{p_*}$$

Здесь p и p_* - обозначают число процессов в базовых композициях \mathbf{MC}_i^j и $\mathbf{MC}_{i_*}^{j_*}$ соответственно.

Многомасштабную Композицию можно описать следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{MK}_{i,i_*}^{i,j;i_*,j_*} = & \\ & < \left\{ V_{ij} \cup V_{i_*j_*}, X_{ij} \cup X_{i_*j_*}, MA_{ij} \cup MA_{i_*j_*}, E_{ij} \cup E_{i_*j_*}, \{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p \right. \\ & \left. \cup \{MA_{i_*j_*}^k\}_{k=1}^{p_*}, \{E_{ij}^k\}_{k=1}^p \cup \{E_{i_*j_*}^k\}_{k=1}^{p_*} \right>. \end{aligned}$$

Число процессов в \mathbf{MK} равно сумме $p + p_*$.

Связующими элементами между вычислительными моделями с разных масштабных уровней, входящими в \mathbf{MK} являются глобальные параметры, которые играют основную роль при передаче информации между масштабными уровнями.

Пусть необходимо составить $\mathbf{MK}_{i,i_*}^{i,j;i_*,j_*}$ из $\mathbf{MC}_{i_*}^{j_*}$ и \mathbf{MC}_{i**}^{j**} . В этом случае под глобальными параметрами $\check{v} \in VX = \{V_{i_*j_*} \cup V_{i**j**}, X_{i_*j_*} \cup X_{i**j**}\}$ будем понимать элементы (параметры), относящиеся к множеству $X_{i_*j_*} \cap V_{i**j**}$, образованному в результате пересечения двух множеств выходных данных $X_{i_*j_*}$ с нижнего масштабного уровня и выходных данных V_{i**j**} с верхнего масштабного уровня.

$$X_{i_*j_*} \cap V_{i**j**} = \{\check{v}: (\check{v} \in X_{i_*j_*}) \cap (\check{v} \in V_{i**j**}), \check{v} \in VX\}$$

Кроме того, при построении многомасштабной композиции используются базовые модели-композиции специального вида, обозначенные \mathbf{DB}_i , i -номер масштабного уровня, $i = \overline{0, L}$, где L -число рассматриваемых уровней. Они требуются для хранения и передачи дополнительной информации, необходимой для работы \mathbf{BK} соответствующего уровня.

В [п.1.4](#) излагаются основные подходы к применению многомасштабного моделирования для решения задач структурного материаловедения. На сегодня общепринятой является следующая иерархия проведения твердотельных расчетов (Рис 1).

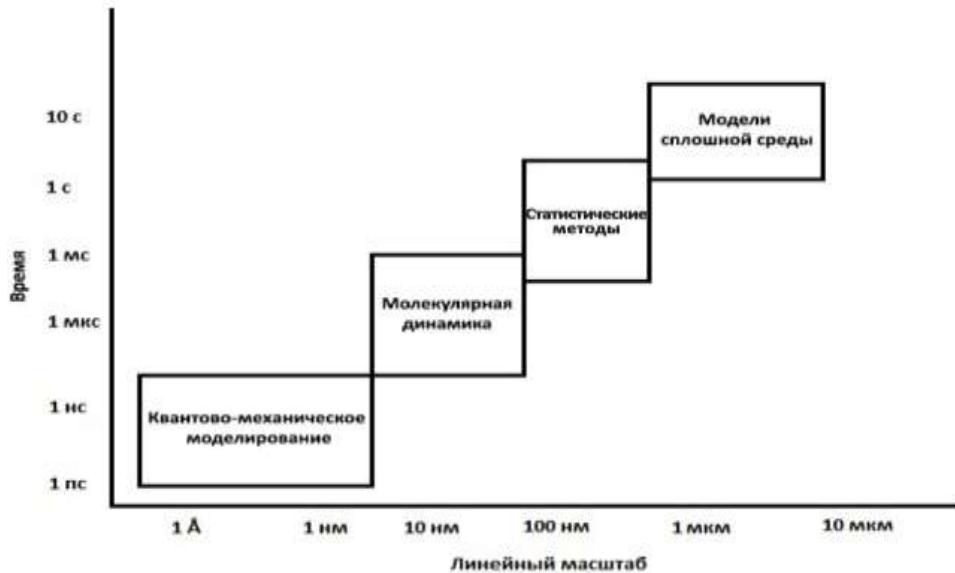


Рис. 1 Иерархия твердотельных расчетов

Согласно такому представлению, на первом масштабном уровне (атомно-кристаллическом) применяется квантово-механическое описание твердого тела, в основе которого лежит теория функционала электронной плотности, на втором масштабном уровне молекулярно-динамическое представление, на третьем уровне применяются статистические методы, на четвертом - континуальные подходы, в основе которых лежит теория сплошных сред. В данной работе рассмотрен расширенный диапазон пространственных и временных шкал, имеющих отношение к моделированию материалов.

Представлены обобщенные масштабные уровни - микроскопический (I), мезомасштабный (II) и макроскопический (III). К микроскопическому отнесены уровни: атомно-кристаллический (выделены подуровни с номерами 0 и 1); молекулярно-динамического моделирования (выделены подуровни с номерами 2 и 3). На уровне мезомасштаба, соединяющем I и III масштабные уровни, выделены подуровни с номерами 4, 5 и 6. На макроскопическом уровне применяется континуальное описание, выделен уровень 7. Таким образом, для решения прикладных задач материаловедения в данной работе выделено восемь подуровней (далее будем говорить «уровень»), с номерами $i = \overline{0,7}$, где i - номер уровня. Каждому из них поставлены в соответствие физико-математические модели, область применения которых соотносится с пространственно-временным разрешением соответствующего масштаба. Условные названия, используемые в качестве базовых для построения многомасштабных моделей – модель ионно-атомных радиусов, квантово-механическая модель, молекулярно-динамическая модель, дискретно-элементная модель. Описание математического аппарата, который задействован на различных уровнях, представлено во второй и третьей главах. Физико-математическим моделям, отнесенными к восьми масштабным уровням, поставлены в соответствие информационные структуры - базовые модели-композиции.

На атомно-кристаллическом уровне (микроскопический масштаб) выделены два подуровня - нулевой и первый. К нулевому (атомарному) уровню отнесены модели, содержащие информацию об элементах из Таблицы Менделеева (ТМ), описывающие совокупность информационных данных-характеристик отдельных элементов ТМ. Для их теоретико-множественного описания используется базовая композиция «АТОМ El_0^1 » (MC_0^1). К первому уровню (уровень кристаллической решетки) отнесены базовые композиции двух типов: «КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА» (MC_1^1), соответствующая модели ионно-атомных радиусов, и «КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА» (MC_1^2), соответствующая квантово-механическому описанию электронной структуры и свойств кристаллической решетки. Применяемые на атомно-кристаллическом масштабном уровне математические модели позволяют добиться пространственного разрешения от нескольких ангстрем до 10 нм, в расчетах обычно используются от нескольких до 1000 атомов. На уровне молекулярно-динамического моделирования (микроскопический

масштаб) выделены два подуровня, обозначенные как второй и третий. Ко второму уровню отнесены математические модели, использующиеся при молекулярно-динамическом моделировании. Для их теоретико-множественного описания используется базовая композиция «АТОМНЫЙ КЛАСТЕР-СТАТИКА» (MC_2^1) и БК «АТОМНЫЙ КЛАСТЕР-ДИНАМИКА» (MC_2^2). К третьему уровню отнесены математические модели, применяющиеся при моделировании наноразмерных объектов. Для их теоретико-множественного описания используются базовые композиции «НАНОРАЗМЕРНЫЙ СЛОЙ» (MC_3^1), «ГЕТЕРОИНТЕРФЕЙС» (MC_3^2), и «ПРИПОВЕРХНОСТНЫЙ СЛОЙ» (MC_3^3), которые позволяют определять свойства наноразмерных слоев и межслоевых интерфейсов. Вычислительные модели, применяемые на молекулярно-динамическом масштабном уровне, работают в диапазоне пространственно-временных параметров от 15 нм до 100 нм, и от сотен наносекунд до нескольких микросекунд. В расчетах могут участвовать до нескольких миллионов атомов.

На уровне мезомасштаба (II) выделены три подуровня (четвертый, пятый и шестой). К четвертому отнесены модели, которые основаны на применении статистических методов, таких как, например, кинетический метод Монте-Карло (*KMK*), что позволяет существенно расширить границы моделирования. В данных методах в качестве входной информации обычно используются наборы различных элементарных атомных процессов и их скорости. В тех случаях, когда исходная информация достаточно точна и полна, становится возможным с большой степенью точности воспроизводить результаты реальных экспериментов, достигая макроскопических пространственно-временных масштабов. Для теоретико-множественного описания используется базовая модель-композиция MC_4^1 «СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНСАМБЛЬ». К пятому уровню отнесены модели, позволяющие оценить отдельные физические свойства наносистем и процессов с ними связанных. Здесь представлена базовая модель-композиция «ГЕТЕРОСТРУКТУРА» (MC_5^1). К шестому уровню отнесены модели, в которых применяются дискретно-элементные подходы. Здесь используется БК «ДИСКРЕТНО-ЭЛЕМЕНТНЫЙ КЛАСТЕР» (MC_6^1) (аналог дискретно-элементной модели).

На макроскопическом масштабном уровне (III) для описания систем и процессов выделены модели сплошных сред, основанные на континуальных теориях. Одна из соответствующих базовых моделей-композиций обозначена MC_7^1 «КОНТИНУАЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ».

Очевидно, что наполнение масштабных уровней соответствующими базовыми моделями-композициями зависит от поставленных задач. В данной работе представлены лишь те БК, которые используются при построении многомасштабных композиций, применяемых для решения рассмотренных задач из области материаловедения. Классификация соответствующих БК приведена в таб.2. Подробное описание базовых моделей-композиций в виде таблиц представлено в Приложении 1.

Таблица 2.

Классификация базовых моделей-композиций

№ уровня	Обозначение и название базовой модели-композиции
0	MC_0^1 «АТОМ A_0^i »
1	MC_1^1 «КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА» MC_1^2 «КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА»
2	MC_2^1 «АТОМНЫЙ КЛАСТЕР-СТАТИКА» MC_2^2 «АТОМНЫЙ КЛАСТЕР-ДИНАМИКА»
3	MC_3^1 «НАНОРАЗМЕРНЫЙ СЛОЙ» MC_3^2 «ГЕТЕРОИНТЕРФЕЙС» MC_3^3 «ПРИПОВЕРХНОСТНЫЙ СЛОЙ»
4	MC_4^1 «СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНСАМБЛЬ»
5	MC_5^1 «ГЕТЕРОСТРУКТУРА»
6	MC_6^1 «ДИСКРЕТНО-ЭЛЕМЕНТНЫЙ КЛАСТЕР»
7	MC_7^1 «КОНТИНУАЛЬНОЕ ОПИСАНИЕ»

В п.1.5 описываются подходы к компьютерной реализации разработанной концепции многомасштабного моделирования, позволяющие осуществлять построение вычислительных моделей для решения задач определения свойств конкретных объектов. Общая схема построения программной реализации - двухэтапная. На первом этапе (этап декомпозиции объекта) осуществляется многомасштабная декомпозиция исследуемого объекта, в результате получается иерархическая структура, задающая логику построения программной реализации многомасштабной вычислительной модели. Такое построение осуществляется на втором этапе (этап композиции) путем восхождения по масштабным уровням. Опишем алгоритм более подробно.

Этап 1. Декомпозиция. Пусть дан объект q_l , соответствующий масштабному уровню l , для которого необходимо определить ряд свойств.

Проведем многомасштабную декомпозицию объекта, выделяя составляющие его объекты (элементы композиции или элементы композиционного объекта), относящиеся к разным уровням. Обозначим $q_l^1 = q_l$. Декомпозицию будем проводить пошагово, спускаясь по масштабным уровням. На i -м шаге декомпозиции, соответствующем i -му масштабному уровню, определим элементы нижележащего уровня, составляющие объекты i -го уровня: $q_i^m \rightarrow \{q_{i-1}^{1m}, q_{i-1}^{2m}, \dots, q_{i-1}^{M_{i-1}}\}$, $m = 1, \dots, M_i$, где M_i - число элементов композиции на i -м масштабном уровне. В результате получаем иерархическую структуру, отражающую композиционное строение объекта (рис. 2). Отметим, что здесь используется относительная нумерация масштабных уровней, т.е. последовательно сверху вниз нумеруются уровни, участвующие в декомпозиции. При этом относительная нумерация может не совпадать с глобальной нумерацией масштабов, приведенной в концептуальном описании.

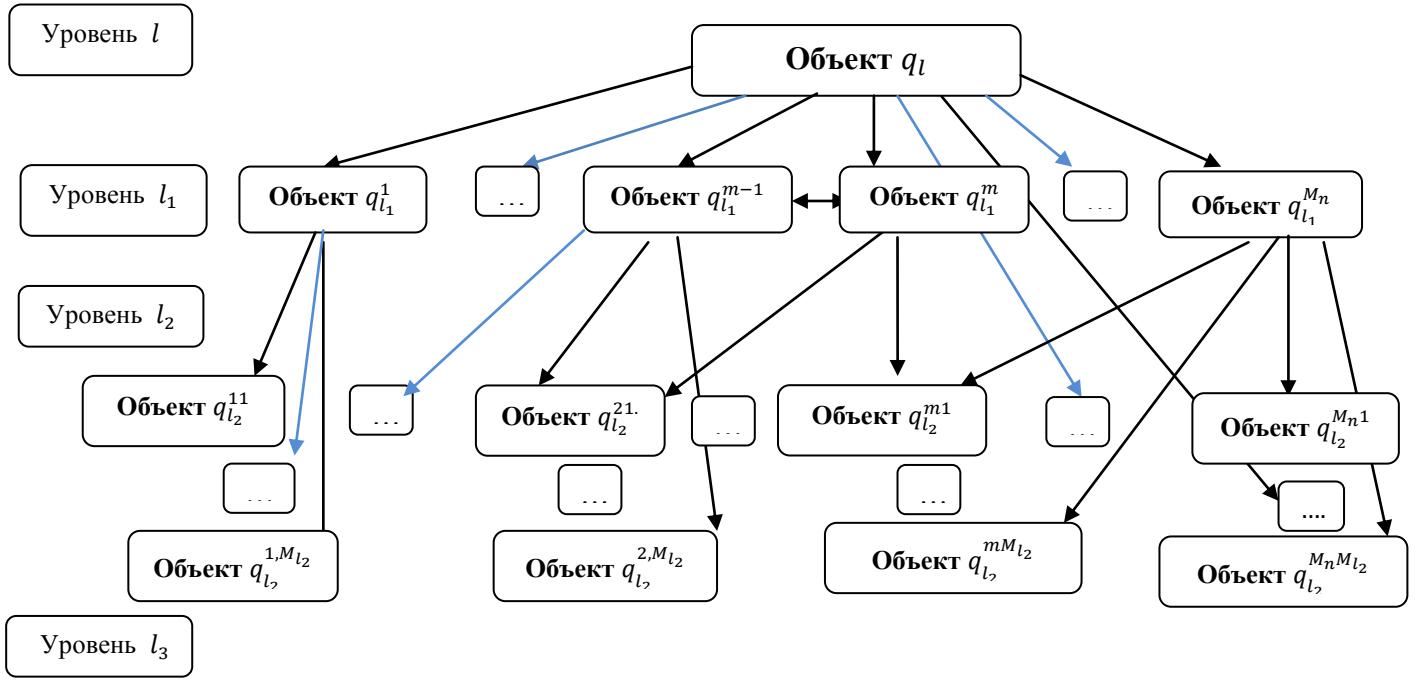


Рис. 2. Схема декомпозиции

Этап 2. Композиция. Полученная иерархическая структура задает логику построения программной реализации *МК*. Построение осуществляется путем восхождения по масштабным уровням. Для нижнего масштабного уровня l_b создадим M_{l_b} экземпляров базовой модели-композиции. При этом экземпляры могут быть как вновь созданными, так и взятыми из имеющейся базы данных. Для вновь созданных экземпляров из библиотеки программных модулей выбираются соответствующие реализации методов обработки данных. В ходе выполнения обработки данных формируется информация для построения экземпляров базовых композиций следующего уровня. Процесс продолжается до достижения высшего масштабного уровня l , соответствующего исследуемому объекту.

Как отмечалось ранее в п.1.3. при построении *МК* важным моментом является передача данных между моделями различного уровня. Для более подробного описания данного процесса множество входных данных многомасштабной композиции \mathbf{MK}_i^j (i обозначает i, i_*, \dots, i_{***} , а j обозначает $i, j; i_*, j_*; \dots; i_{***}, j_{***}$) разделим на три группы:

$$V_{ij} = B_{ij} \cup C_{ij} \cup D_{ij},$$

здесь B_{ij} - множество данных, поступающих с нижележащего уровня $B_{ij} \subset \bigcup_m X_{i-1m} = V_{ij} \cup \bigcap_m X_{i-1m}$, C_{ij} - множество данных, поступающих из моделей текущего уровня $C_{ij} \subset \bigcup_{k < j} X_{ik} = V_{ij} \cup \bigcap_{k < j} X_{ik}$, D_{ij} - множество данных, специфичных для текущего уровня и для данной модели-композиции.

Отметим, что передача данных осуществляется между моделями соседних уровней (возможно пропускать один или несколько) или моделями одного уровня. При этом множества входных и выходных данных модели могут пересекаться, т.е. базовая модель-композиция, получая некоторые данные в качестве исходных,

передает их без изменения в качестве выходных данных. С учетом построенной иерархии такой подход обеспечивает однозначность и полноту передачи данных.

Сформированные в процессе синтеза *МК* экземпляры моделей-композиций могут сохраняться в базе данных, что позволяет многократно использовать их в последующих исследованиях. Таким образом, основной информационной единицей базы данных является *экземпляр БК*, соответствующий определенному объекту. При этом разбиение моделей-композиций по масштабным уровням соответствует реляционному принципу построения информационной системы.

Отметим, что размещение в базе данных *экземпляров БК* позволяет наряду с характеристиками объекта хранить информацию о методах (и их реализациях), с помощью которых получены эти характеристики. Такое протоколирование процесса получения информации особенно актуально, когда речь идет об исследовании новых материалов и новых свойств, для расчета которых нет надежных устоявшихся моделей. В этих условиях важным становится сопоставление результатов, получаемых различными путями.

В п.1.6 обсуждаются методы решения обратных задач, а также некоторые подходы к определению объектов с заданными свойствами. Рассмотрен метод структурирования материаловедческой информации, базирующийся на работе В.Р.Хачатурова³. Показано, как можно его перенести на описание процесса нахождения решения обратных задач и определения многомасштабных моделей, с помощью которых оно может быть найдено. С использованием представленного подхода материаловедческая информация организуется с учетом требований, предъявляемых к свойствам объектов. К достоинствам данного подхода следует отнести возможность эффективной адаптации к расширению критериальной базы. Алгоритм рекурсивного построения топологического пространства по мере расширения критериальной базы позволяет использовать и последовательно наращивать уже имеющиеся структуры данных. Классификация объектов по принципу соответствия различным критериям открывает возможность применения аппарата теории принятия решений с учетом отношений предпочтения на множестве критериев⁴.

Во *второй главе* диссертации представлены модели, отнесенные согласно принятой в работе классификации к моделям первого масштабного уровня. Это модель ионно-атомных радиусов, известная также как модель плотной упаковки, и квантово-механическая модель. Дано теоретико-множественное описание соответствующих базовых моделей-композиций и композиций. На примерах показано, что применяя данные модели в комплексе, можно достаточно точно воспроизводить атомно-кристаллическую структуру и изучать энергетические свойства материалов, рассчитывать энергию адгезии, диффузионные барьеры и

³ Хачатуров В.Р. Методы математического моделирования композиционных объектов. // Сборник статей «Математическое моделирование композиционных объектов». ВЦ РАН. Москва. 1994. С.9-31.

⁴ Айзерман М.А. Выбор вариантов: основы теории/М.А. Айзерман, Ф.Т. Александров.-М.:Наука, 1990.

другие важнейшие свойства кристаллических структур.

В разделе 2.1 представлена модель ионно-атомных радиусов[1]. Приведена математическая постановка оптимизационной задачи поиска устойчивых кристаллических структур для заданной химической формулы и описывается общая схема и алгоритмы ее для решения. Кристаллическая структура описывается с помощью следующих характеристик: Федоровская группа симметрии, метрические параметры элементарной ячейки, к которым относятся постоянные решетки и углы между ее направляющими, позиции Уайкова центров базисных атомов, составляющих эту структуру, включая их индексы, обозначающие кратность позиции и числовые значения свободных координат этих позиций в элементарной ячейке. Используется понятие базиса кристаллической структуры (конфигурации базисных атомов), представляющего собой полную совокупность координат центров атомов в ее симметрично независимой области, с помощью которого, с применением операций симметрии заданной группы симметрии, строится элементарная ячейка исследуемого кристаллического материала. Далее элементарная ячейка размножается с учетом симметрии и периодичности кристаллов. Формулируется замкнутая математическая задача поиска всех возможных устойчивых кристаллических структур, совместных с заданной химической формулой, на основе модели ионно-атомных радиусов. Представлены постановки различных вариантов оптимизационных задач для моделирования кристаллов с ненаправленными связями, в том числе, металлов и их оксидов.

Рассмотрим одну из таких постановок. Пусть для рассматриваемой химической формулы с заданной Федоровской группой симметрии необходимо определить устойчивую кристаллическую структуру с ионным типом химической связи. Воспользуемся таблицами ионных радиусов. Обозначим через M множество всех шаров, размещенных в заданных позициях Уайкова (w_i , $i = \overline{1, h}$), входящих в начальную конфигурацию X_h . Разобъем множество M на подмножества M^+ и M^- положительно и отрицательно заряженных шаров. Необходимо найти минимум целевой функции:

$$V(\{X_h\}) \rightarrow \min_{\{X_h\} \in W}$$

$\{X_h\} = \{X(i, s)\} = \{(x_{1i}(s), x_{2i}(s), x_{3i}(s))\} \in W = \bigcup_{s=0}^{N_{so}} W_s(w_i)$, $i = \overline{1, h}$. Здесь $\{X_h\}$ - координаты базисных атомов, N_{so} - число операций симметрии в заданной Федоровской группе, W - область, задаваемая позициями Уайкова, соответствующими Федоровской группе симметрии, в которых могут размещаться центры шаров рассматриваемой системы, $V(\{X_h\})$ - объем элементарной ячейки, который в общем случае определяется по формуле:

$$\begin{aligned} V(\{X_h\}) = \mu \eta & \left(\max_{i,j} \frac{R(i) + R(j)}{\rho(r_i, r_j)} \right)^3 (1 - \cos^2 \alpha - \cos^2 \beta - \cos^2 \gamma \\ & + 2 \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma)^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

где R - радиус шара, μ, η - отношения длин трансляций, α, β, γ - углы между направляющими решетки.

При этом должны выполняться условия:

- 1) для \forall пары шаров $(i, j) \in M^+(M^-)$ $\exists \varepsilon > 0$, такое, что расстояние между центрами шаров i и j

$$\rho(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) > R(i) + R(j) + \varepsilon$$

- 2) для \forall шара $i \in M^+$ \exists такой шар $j \in M^-$, что

$$\rho(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = R(i) + R(j)$$

Для решения поставленной задачи необходимо найти все возможные конфигурации $\{X_h^k\} \in W$, где $k = 0, 1, 2, \dots$ на которых достигаются локальные минимумы целевой функции и выполняются сформулированные выше условия.

Приводится общая схема решения задачи плотной упаковки шаров разного радиуса с заданными ограничениями. Суть разработанного подхода заключается в дискретных перемещениях атомов в рамках заданных позиций Уайкова с целью минимизации целевой функции. В основе алгоритмов лежит сочетание метода покоординатного спуска и метода Монте-Карло. Разработанные алгоритмы учитывают свойства симметрии и периодичности кристаллов, что позволяет уменьшить размерность задачи и время расчета кристаллических структур.

Важной составной частью разработанного подхода является кристаллографическая база данных по Федоровским группам симметрии. С ее помощью осуществляется выбор начальной конфигурации базисных атомов и производятся их дискретные перемещения в рамках заданных позиций Уайкова.

В заключении раздела 2.1 приводится подробное описание вычислительных алгоритмов, показано использование в вычислительном процессе информации из кристаллографической базы данных, дается теоретико-множественное описание базовой модели-композиции «КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА» (MC_1^1), Табличное представление MC_1^1 приводится в Приложении к диссертации.

В п.2.2 представлена квантово-механическая модель твердого тела, основанная на теории функционала электронной плотности. Приведены уравнения Кона - Шэма, на основе которых производится расчет электронной плотности при заданной конфигурации базисных атомов:

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + V_{eff}(\mathbf{r}) - \varepsilon_i \right) \psi_i(\mathbf{r}) = 0, \\ & V_{eff} = \phi(\mathbf{r}) + v_{xc}(\mathbf{r}), \\ & \phi(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r}) + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \\ & n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2. \\ & v_{xc}(\mathbf{r}) \equiv \frac{\delta E_{xc}[\tilde{n}(\mathbf{r})]}{\delta \tilde{n}(\mathbf{r})} \Big|_{\tilde{n}(\mathbf{r})=n(\mathbf{r})} \end{aligned}$$

где ε_i - значения энергии электронов в соответствующих состояниях (собственные значения одночастичного оператора Гамильтона), $\phi(\mathbf{r})$ - полный потенциал,

состоящий из потенциала электростатического взаимодействия электронов и из электростатического потенциала $\nu(\mathbf{r})$ «неподвижных» ионов, $v_{xc}(\mathbf{r})$ – обменно-корреляционный потенциал. Решение уравнений Кона-Шэма дает минимум функционала для энергии основного состояния по отношению к зарядовой плотности $n(\mathbf{r})$. Энергия основного состояния определяется как

$$E = \sum_i \varepsilon_i + E_{xc}[n(\mathbf{r})] - \int v_{xc}(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \frac{1}{2} \iint \frac{n(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'.$$

Здесь $E_{xc}[n(\mathbf{r})]$ – обменно-корреляционный функционал. Задача состоит в определении конфигурации базисных атомов, минимизирующей энергию основного состояния системы. Далее приводится теоретико-множественное описание базовой модели-композиции «КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА» (\mathbf{MC}_1^2), в котором даны элементы основных множеств, входящих в БК. Табличное представление \mathbf{MC}_1^2 приводится в Приложении к диссертации.

В разделе 2.3 представлены примеры решенных задач, для которых с применением разработанной информационной технологии были построены композиции из соответствующих базовых моделей-композиций. Приводятся результаты расчетов одно-, двух-, трехкомпонентных кристаллических структур и их энергетических характеристик, энергии адгезии в нитридных нанопленках. Построены многомасштабные композиции для исследования на устойчивость кристаллических структур кубической симметрии с помощью модели ионно-атомных радиусов и квантово-механического моделирования. Изучены электронные и структурные свойства тонких пленок InN и GaN на кремниевых подложках. Результаты расчетов верифицированы по экспериментальным данным.

На рис. 3 представлена структура $\mathbf{MK}_{0,1,3}^{(A_{a_i}^i A_{a_j}^j / A_{a_k}^k)}$, построенной для изучения особенностей адгезии монокристаллического нитрида индия в структуре вюрцита с ориентацией (0001) на кремниевой подложке с ориентацией (111).

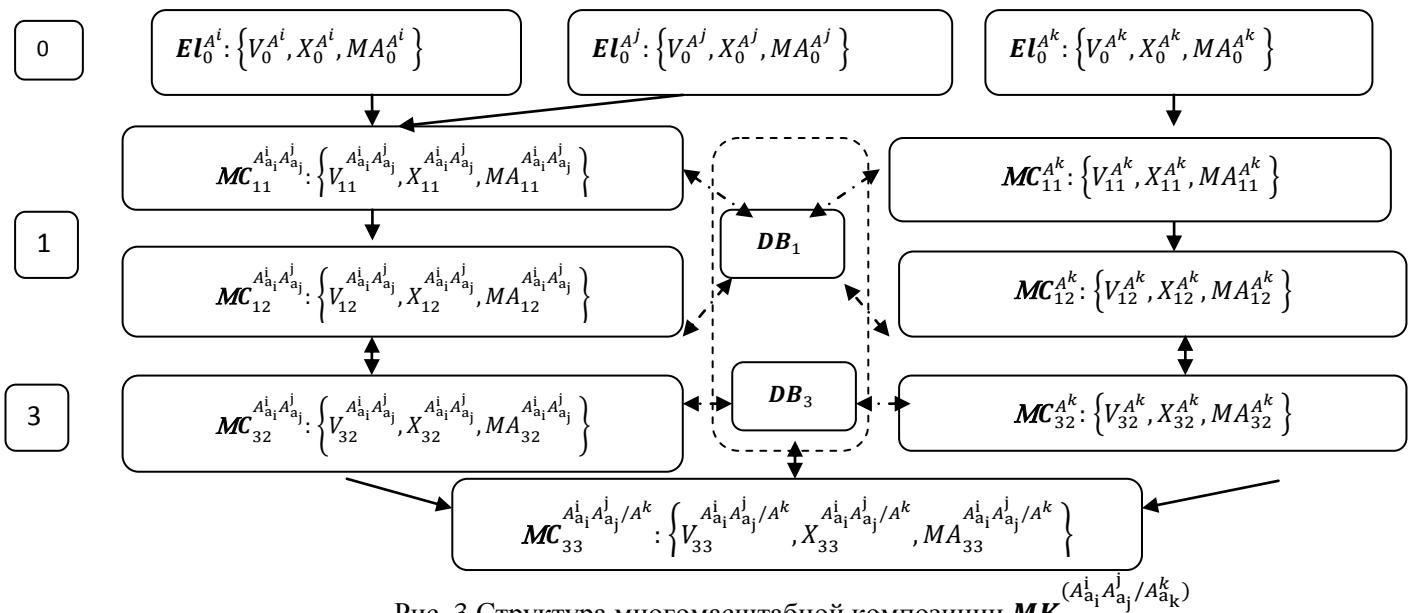


Рис. 3 Структура многомасштабной композиции $\mathbf{MK}_{0,1,3}^{(A_{a_i}^i A_{a_j}^j / A_{a_k}^k)}$

На схеме указаны экземпляры базовых композиций и последовательность их использования в вычислительном процессе. Далее приведены результаты расчетов выполненных с использованием программного комплекса VASP.

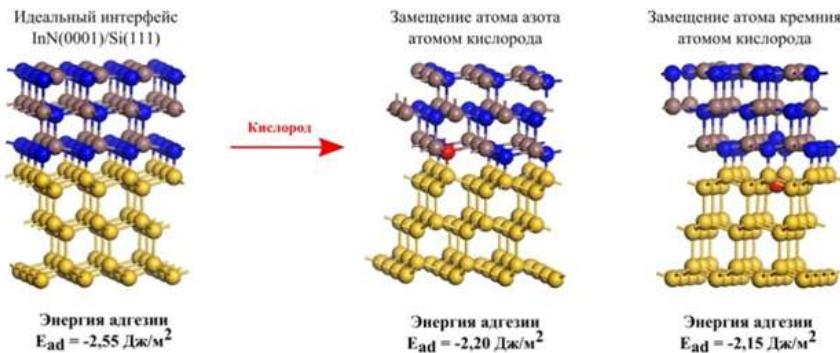


Рис. 4 Схематическое изображение интерфейса InN(0001)/Si(111): а) атом кислорода замещает атом азота; б) атом кислорода замещает атом кремния. Желтым изображены атомы кремния, серым – алюминия, синим – азота, красным – кислорода.

Схематическое изображение интерфейса InN/GaN представлено на рис. 4. Для оценки влияния одиночного атома кислорода на адгезию интерфейса InN/Si была использована суперячейка большего размера - 3×3 в плоскости XY. В одном из вариантов один атом кислорода замещал атом азота на границе раздела (рис. 4а). При этом была получена величина энергии адгезии - $2,20 \text{ Дж/м}^{-2}$. Во втором варианте была рассмотрена ситуация, когда атом кислорода замещал атом кремния на границе раздела (рис. 4б). Полученная энергия адгезии оказалась равной - $2,15 \text{ Дж/м}^{-2}$. Таким образом, показано, что наличие кислорода в структуре InN ухудшает связь выращенной пленки с кремниевой подложкой. Результаты моделирования хорошо согласуются с результатами экспериментов по выращиванию данных структур. Проведенное теоретическое исследование продемонстрировало возможность с помощью суперкомпьютерных вычислений оценивать не только атомно-кристаллическую структуру и электронные свойства полупроводниковых наноструктур, но и изучать влияние примесных дефектов на величину энергии адгезии полупроводниковых пленок на подложке кремния. Полученный теоретический результат может быть использован на практике при выращивании стабильных N-полярных нитридов на кремнии.

В третьей главе рассматриваются модели уровня молекулярно-динамического моделирования и мезоуровня, которые позволяют решать широкий класс задач, связанных с моделированием различных процессов, протекающих в твердом теле. При этом, в данной работе в качестве входных данных для этих моделей используются результаты расчетов, включая значение полной энергии системы E_{tot} , полученные с помощью моделей с нулевого и первого масштабных уровней. Так осуществляется переход с нулевого масштабного уровня на первый, и далее на следующие масштабные уровни к молекулярно-динамическим, дискретно-элементным и макроскопическим моделям. Таким образом, 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 [8,18], для изучения начальных этапов нитридизации поверхности полупроводниковых наноструктур [21] и др.

В п.3.1 представлены основные уравнения, применяемые при МД-моделировании системы взаимодействующих частиц (ионов, атомов, кластеров, и т.д.). В рамках такого подхода, их поведение описывается в рамках классической динамики, а местоположение и скорости определяются путем интегрирования системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$m_i \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i(\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i, t)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i$$

здесь $i = \overline{1, N}$, где N - число атомов системы, m_i – масса i -того атома t - время \mathbf{r}_i , \mathbf{v}_i - радиус-вектор и скорость атома, \mathbf{F}_i - сила действующая на i -ый атом со стороны других атомов. В начальный момент времени $t^0 = 0$ задаются координаты $\mathbf{r}_i(0)$ и скорости $\mathbf{v}_i(0)$ атомов рассматриваемой системы. При этом, действующие на них силы, определяются межатомным взаимодействием. Такой подход применим, когда расстояние между атомами r_a системы намного превышает длину волны де Броиля λ_B : $r_a \gg \lambda_B$, $\lambda_B = \frac{\hbar}{\sqrt{3mk_B T}}$, здесь \hbar – постоянная Планка, m – масса атома, k_B – постоянная Больцмана, T – температура.

В п.3.2 приводится классификация и описание потенциалов, применяющихся при МД-моделировании материалов с различным типом химической связи и отдельных процессов, связанных с ними. Это потенциалы Леннарда-Джонса, Морзе, потенциалы, отражающие ковалентное взаимодействие в кристалле типа Терсоффа и другие.

В п.3.3 описывается математическая постановка задачи параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия, которая состоит в определении параметров потенциала $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_k) \in Y$, $Y \subseteq R^k$, в зависимости от химического состава моделируемого материала таким образом, чтобы при МД-моделировании воспроизводились его основные свойства. Это осуществляется путем минимизации целевой функции $G(\xi)$ при фиксированной конфигурации базисных атомов, определяемой матрицей $X^* = (x_{j1}^*, \dots, x_{jh}^*)$, $j = \overline{1, 3}$:

$$G(\xi) = \sum_{m=1}^l \omega_m \frac{(f_m(\xi) - \hat{f}_m)^2}{{\hat{f}_m}^2} \rightarrow \min, \xi \in Y$$

$$\xi = \underset{\xi \in Y}{\operatorname{argmin}} F(\xi)$$

здесь \hat{f}_m - эталонное значение m -ой характеристики, $f_m(\xi)$ - значение характеристики, полученное в результате расчетов для заданного набора базисных

атомов, $\xi \in Y$ - вектор подбираемых параметров, l - число характеристик, ω_m - весовой коэффициент, $m = \overline{1, l}$.

Таким образом, требуется найти набор параметров $\xi \in R^k$, минимизирующих значение функции $G(\xi)$. Такой набор будет обеспечивать минимальное отклонение рассчитанных характеристик материала от эталонных значений, полученных с помощью эксперимента или квантово-механических расчетов в рамках теории функционала электронной плотности. В работе приводится пример постановки задачи идентификации параметров потенциала Терсоффа [3] для материала со структурой типа флюорита $CaF_2 ((Sr, Ba, Cu)F_2)$. Описываются методы решения такого класса задач и приводится расчетная схема, в которой задействованы как методы глобальной оптимизации, такие как статистические методы, так и методы локальной оптимизации нулевого порядка, такие как алгоритм методы GRS (granular radial search), Нелдера-Мида и другие. Отмечено, что в связи с большой трудоемкостью задачи определения глобального минимума функционала при ее решении применяются параллельные расчеты как для получения эталонных значений \hat{E}_{tot} , связанных с квантово-механическими расчетами на супер-ЭВМ, так и при генерации начальных приближений и при реализации локальных оптимизационных алгоритмов. Применение современных технологий распараллеливания вычислений, в том числе расширений языка C++ для многопоточного программирования, библиотеки MPI, специальных технологий программирования, а также технологий грид-систем позволяет существенно ускорить процесс определения наборов параметров потенциала межатомного взаимодействия, минимизирующих целевую функцию.

Далее приводится теоретико-множественное описание базовой модели-композиции «АТОМНЫЙ КЛАСТЕР СТАТИКА» (MC_2^1) в котором определены элементы основных множеств, входящих в БК. Табличное представление MC_2^1 приводится в Приложении к диссертации.

В п.3.4 описываются численные методы решения задачи МД-моделирования. Как правило, в молекулярной динамике применяются методы решения, учитывающие специфику динамической системы и особенности структуры правой части дифференциальных уравнений, входящих в систему. В качестве базового метода в настоящей работе используется метод скоростей Верле второго порядка, обеспечивающий компромисс между точностью и скоростью вычислений. Приводится теоретико-множественное описание базовой модели-композиции «АТОМНЫЙ КЛАСТЕР-ДИНАМИКА» (MC_2^2), которая отражает информационную сущность процесса МД-моделирования и в которой определяются элементы основных множеств, входящих в БК. Табличное представление MC_2^2 дано в Приложении к диссертации.

В п.3.5 представлены основные положения дискретно-элементного моделирования применительно к большим системам, которое осуществляется путем обобщения классического варианта МД-моделирования на случай использования в качестве дискретных элементов укрупненных частиц, состоящих

из кластеров, объединения кластеров и так далее. Отмечено, что применение метода дискретных элементов возможно на различных масштабных уровнях. Характерный для данного семейства методов потенциал распараллеливания вычислений предоставляет возможность высокого пространственно-временного разрешения за счет наращивания количества дискретных элементов до и сотен миллионов. Пример решения прикладной задачи с применением дискретно-элементного подхода приведен в *главе 4*. Далее приводится теоретико-множественное описание базовой модели-композиции «**ДИСКРЕТНО-ЭЛЕМЕНТНЫЙ КЛАСТЕР**» (MC_6^1), которая отражает информационную сущность процесса дискретно-элементного моделирования, применяемого в данной работе и описываются элементы основных множеств, входящих в *БК*. Табличное представление MC_6^1 дано в Приложении к диссертации.

В *п.3.6* приводятся методы статистического моделирования, включая кинетические методы Монте-Карло, отнесенные согласно классификации, принятой в данной работе, к четвертому масштабному уровню (мезомасштаб).

В *п.3.7* представлены результаты применения разработанной информационной технологии для решения задач МД-моделирования эволюционных процессов. Приведем один из примеров. Для МД-моделирования процесса взаимодействия кластера аммиака NH_3 с поверхностью Si применялся многомасштабный подход. Было выделено два масштабных уровня (не считая нулевого уровня) – атомно-кристаллический и молекулярно-динамический. На рис. 5 представлена структура многомасштабной композиции $MK_{0,1,2}^{(0,14;1,1;1,2;2,1;2,2)} = MK_{0,1,2}^{(NH_3/Si)}$ для МД-моделирования начальных этапов процесса нитридизации поверхности $Si(111)$ в атмосфере NH_3 . Указаны экземпляры базовых композиций и последовательность их использования в вычислительном процессе.

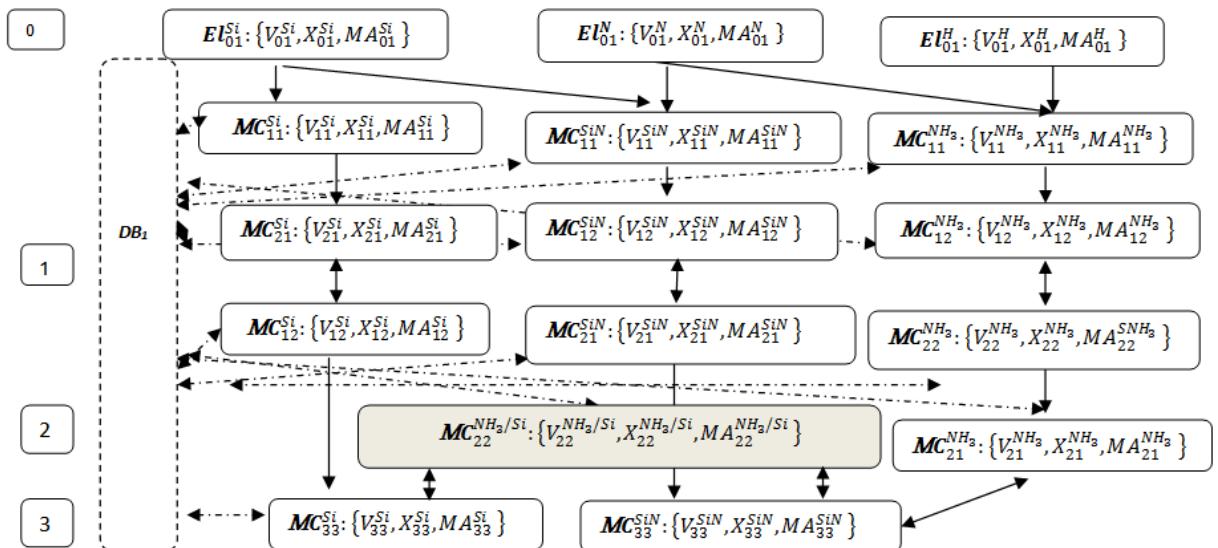


Рис. 5 Многомасштабная композиция для МД-моделирования начальных этапов процесса нитридизации поверхности $Si(111)$ в атмосфере NH_3

Представлены результаты молекулярно-динамического моделирования процесса осаждения одиночной молекулы аммиака на поверхность (111) кремния (рис.6). Для решения поставленной задачи применялась процедура параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия в описываемой системе атомов. Было разработано программное обеспечение, позволяющее осуществлять оптимизацию геометрии исследуемых структур, а также визуализировать получаемые результаты.

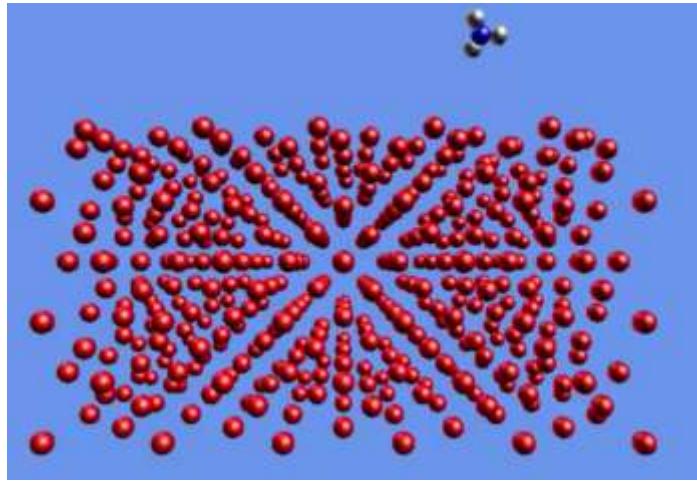


Рис.6 Изображение исследуемой ячейки. Молекула аммиака расположена над поверхностью кремния (111)(рис. из статьи [21])

Глава 4 посвящена вопросам построения многомасштабной вычислительной модели для исследования процессов высокоскоростного внедрения тел в различные преграды. Компьютерное моделирование высокоскоростного внедрения представляет большой интерес в силу сложности непосредственного наблюдения разномасштабных процессов, происходящих при столкновении. На данный момент основными методами моделирования подобных процессов являются континуальные, дискретно-элементные и гибридные. Континуальные модели опираются на уравнения механики сплошных сред. Для их использования в задачах высокоскоростного внедрения требуется знание значительного количества свойств материалов, которые могут сложным образом изменяться при высокоскоростных деформациях и разрушении, что делает подобные модели, хотя и довольно точными, но сложными в применении к материалам, для которых нет существенного массива данных. Дискретно-элементные модели являются более простыми в отношении используемых уравнений и необходимых исходных данных и, в то же время, позволяют учитывать композиционный состав и микроструктуру материалов. В диссертационной работе строится многомасштабная композиция, позволяющая осуществить компьютерную реализацию дискретно-элементного подхода. Вычислительная модель основана на представлении ударника и преграды совокупностью плотно упакованных взаимодействующих частиц. Уравнения динамики дискретных элементов в целом аналогичны уравнениям молекулярной динамики, описанным в предыдущем разделе.

Рассмотрение ведется в рамках модели парного взаимодействия, которое описывается с помощью потенциала $\Phi(r)$, где r – расстояние между дискретными элементами (частицами). Используется потенциал Леннарда-Джонса

$$\Phi(r) = D \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{a}{r} \right)^6 \right], \text{ где } D \text{ – энергия связи, } a \text{ - длина связи. Для описания}$$

взаимодействия между разнородными элементами реализован алгоритм, в котором используются комбинаторные правила: $D_{AB} = \sqrt{D_A D_B}$; $a_{AB} = \frac{a_A + a_B}{2}$. Для интегрирования системы уравнений движения взаимодействующих частиц используется метод скоростей Верле второго порядка точности.

Многомасштабная композиция, соответствующая вычислительной модели записывается в следующем виде:

$$\mathbf{MK}_{0,1,2,6}^{(0,A^i;..;0,A^j;0,A^k;..;0,A^l;1,1;1,2;2,1;5,1)} = \mathbf{MK}_{0,1,2,6}^{(A_{a_1}^i \dots A_{a_j}^j / A_{a_k}^k \dots A_{a_l}^l)}$$

где A^i, A^j, A^k, A^l – обозначают химические элементы, $A_{a_1}^i \dots A_{a_j}^j$ и $A_{a_k}^k \dots A_{a_l}^l$ – химические формулы материалов ударника и преграды.

На рис. 7 представлена структура многомасштабной композиции $\mathbf{MK}_{0,1,2,6}^{(A_{a_1}^i \dots A_{a_j}^j / A_{a_k}^k \dots A_{a_l}^l)}$, передающая вычислительную сущность математической модели, описывающей процессы высокоскоростного взаимодействия ударника и преграды. Указаны экземпляры базовых композиций и последовательность их использования в вычислительном процессе.

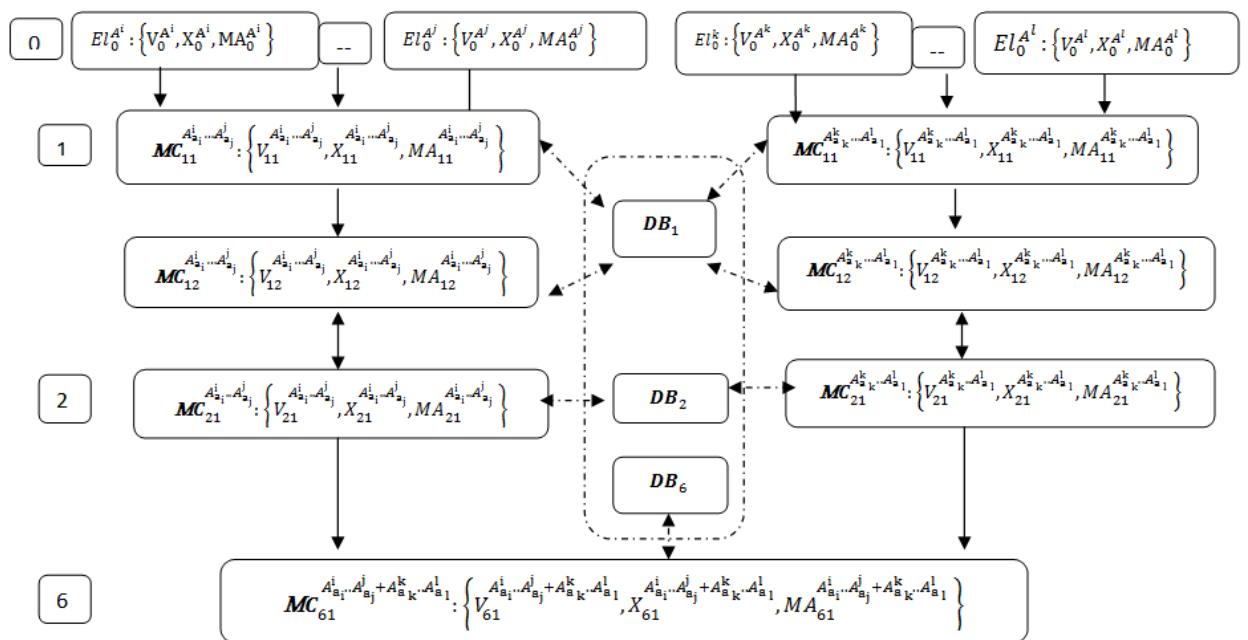


Рис. 7 Многомасштабная композиция для дискретно-элементного моделирования процесса внедрения ударника в преграду.

В работе [32] на основе сравнения результатов компьютерного моделирования с экспериментальными данными идентифицирована зависимость энергии межэлементной связи от динамической твердости материалов. Показано, что эта зависимость носит линейный характер. Использование технологий распараллеливания вычислений на графических процессорах в сочетании со средствами трехмерной визуализации и анимации результатов позволило получить детальные пространственно-временные картины процесса внедрения.

Валидация разработанной вычислительной модели проводилась путем сравнительного анализа расчетных и экспериментальных данных в широком диапазоне определяющих параметров [33]. В экспериментах варьировались плотность и твердость ударника и преграды, форма и характерные размеры ударника, толщина преграды, угол соударения, скорость ударника.

Некоторые результаты сравнительного анализа представлены на рис. 8 - рис. 10. Здесь показаны экспериментальные рентгенограммы (слева, монохромные изображения) и полученные численно разрезы (справа, цветные изображения) в соответствующие моменты времени. Условия экспериментов подробно описаны в [33]. На рис. 8 представлен вариант относительно тонкой преграды. Показаны картины, наблюдаемые в моменты подлета ударника к преграде и сразу после пробития. Видно хорошее согласование расчетных и экспериментальных данных как в плане разлета выбитого из преграды материала, так и касательно формы ударника после прохождения преграды. Отметим, что некоторые визуальные различия обусловлены различным характером изображения - объемным для экспериментальных рентгенограмм и плоскостным для численных разрезов. Это, однако, не снижает наглядности приводимых иллюстраций. Рис. 9 соответствуют варианту преграды средней толщины. Видно, что остаточная после пробития форма ударника, полученная в численном моделировании хорошо согласуется с наблюдаемой на рентгенограмме (кадр 3). Это относится и к эволюции формы преграды в области прохождения ударника. При увеличении толщины преграды ударник по-прежнему пробивает преграду, однако при этом практически утрачивает цельность, распадаясь на относительно мелкие частицы. Этот эффект также хорошо воспроизводится в вычислительном эксперименте.

Рис. 10 соответствуют варианту толстой преграды, которая не пробивается насеквоздь ударником. Показан вид сверху. Здесь слева, как и ранее, представлена экспериментальная картина, а справа – аналогичное изображение, полученное с помощью численного моделирования (монохромное изображение с градиентным разрешением). Видно как качественное, так и количественное (поперечный размер кратера, см. линейку на рисунке), согласование экспериментальной и вычислительной «картин».

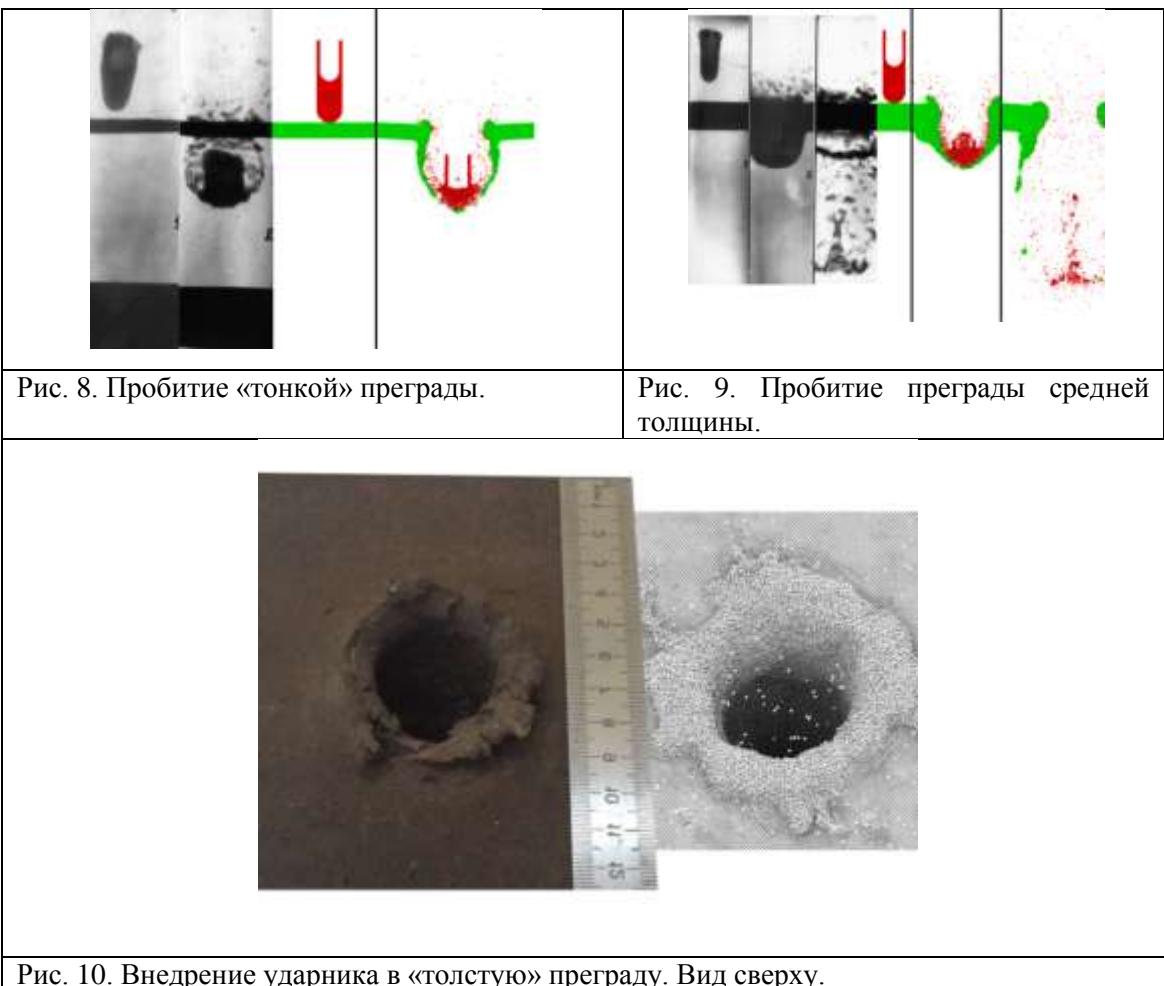


Рис. 10. Внедрение ударника в «толстую» препятствия. Вид сверху.

Глава 5 посвящена применению разработанной технологии построения многомасштабных вычислительных моделей к задачам современной микроэлектроники. Основной тенденцией развития высокочастотной полупроводниковой техники в настоящее время является стремление к миниатюризации и достижению максимальных концентраций носителей заряда при максимально возможной подвижности. С этой целью используются многослойные наноразмерные гетероструктуры, в которых, благодаря наличию потенциальных барьеров, ограничивается движение носителей заряда в одном или более направлениях. Для проектирования и оптимизации таких структур большое значение имеет разработка вычислительных моделей, отражающих квантово-механический характер поведения носителей заряда.

В настоящей работе реализована следующая схема многомасштабного моделирования наноразмерных полупроводниковых гетероструктур [4-7]. Описание системы начинается с атомарного уровня, на котором осуществляется кристаллографический расчет и квантово-механическое моделирование на основе теории функционала электронной плотности. Это позволяет определить зонную структуру и базовые свойства гетеросистемы, выявить поляризационные эффекты и рассчитать плотности зарядов на интерфейсах между слоями. Особенности работы на этом уровне описаны в **главе 2**. Полученная информация передается в модель наномасштабного уровня, где используется для расчета распределения

носителей заряда в гетероструктуре. На данном уровне также используется квантово-механическое описание, математическая модель представляет собой систему уравнений Шрёдингера и Пуассона:

$$\begin{aligned} -\frac{\eta^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m^*} \nabla \psi \right) + (-e\varphi + \Delta E_c) \psi &= E\psi \\ \nabla \cdot (\varepsilon \nabla \varphi) &= -e(N_D(z) - N_A(z) - n(\mathbf{r})) + \sum_l \sigma_l \delta(z - z_l) \\ n(\mathbf{r}) &= \sum_i (\psi_i(\mathbf{r}))^2 n_i \\ n_i &= k_B T \frac{m^*}{\pi \eta^2} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right) \end{aligned}$$

Здесь E_i и $\psi_i(\mathbf{r})$ - энергетические уровни и соответствующие им волновые функции, $n(\mathbf{r})$ - электронная плотность, η - постоянная Планка, e – заряд электрона, m^* - эффективная масса электрона, E_F - положение уровня Ферми, $\varphi(\mathbf{r})$ - электростатический потенциал, N_d, N_A - концентрации донорной и акцепторной примесей, σ_l - плотности зарядов на интерфейсах, δ - дельта функция, z_l - местоположения интерфейсов, ε - диэлектрическая постоянная материала, ΔE_c - сдвиг зоны проводимости материала, k_B - постоянная Больцмана, T - температура. В модели отражен тот факт, что значения m^* , ε и ΔE_c могут меняться от слоя к слою. При записи уравнений выделено направление поперек слоев (координата z), что отражает послойный рост структуры и зависимость ряда характеристик только этой координаты.

С алгоритмической точки зрения вычислительные процедуры, служащие для решения уравнений Шрёдингера и Пуассона, объединены глобальным итерационным процессом, направленным на согласование решений. Принципиальным моментом является сильная взаимосвязь уравнений, характерная для рассматриваемого класса задач, что приводит к проблеме сходимости глобальных итераций. В особой мере эта проблема проявляется для вюрцитных структур, когда на гетериоинтерфейсах появляется мощный локализованный источник заряда. С целью ускорения вычислительного процесса при расчете электронной плотности в гетероструктуре реализован подход, основанный на аппроксимации нелинейной зависимости электронной плотности от потенциала в сочетании с линеаризацией уравнения Пуассона. Показана эффективность данного подхода в задачах рассматриваемого класса.

Полученные в результате решения этих уравнений данные о волновых функциях и распределении плотности носителей заряда поперек слоистой структуры поступают в модель следующего масштабного уровня, где осуществляется расчет подвижности носителей заряда в продольном направлении. При этом учитывается широкий спектр механизмов рассеяния электронов –

рассеяние на оптических и акустических фононах, шероховатостях гетерограницы, на заряженных центрах и дислокациях, пьезоэлектрическое рассеяние [4].

На рис. 11 представлена многомасштабная композиция, построенная применительно к задаче двухслойной полупроводниковой гетероструктуры $\text{Al}_v\text{Ga}_{1-v}\text{N}/\text{GaN}$, где v - мольная доля алюминия в сплаве.

На рис. 12 представлены результаты моделирования электронной плотности в гетероструктуре $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{N}/\text{GaN}$. Валидация многомасштабной вычислительной модели проводилась путем сравнения результатов моделирования с известными экспериментальными данными. Некоторые результаты сравнительного анализа приведены на рис. 13. Видна достаточно высокая точность многомасштабного моделирования как в плане расчета концентрации носителей в двумерном электронном газе, так и касательно подвижности электронов.

Разработанные методы и средства многомасштабного моделирования открывают перспективы решения оптимизационных задач, актуальных для развития микроэлектроники. В диссертации рассмотрен класс задач, связанный с определением оптимального легирования барьера слоя [4-7]. Построены эффективные алгоритмы оптимизации, основанные на градиентных методах. Приведены результаты решения задач оптимального легирования барьера слоя, обеспечивающего заданную концентрацию электронов в канале проводимости в полупроводниковых гетероструктурах. Полученные в ходе вычислительного эксперимента результаты согласуются с современной тенденцией к переходу от однородного профиля легирования к планарному δ -легированию в технологиях изготовления полевых транзисторов.

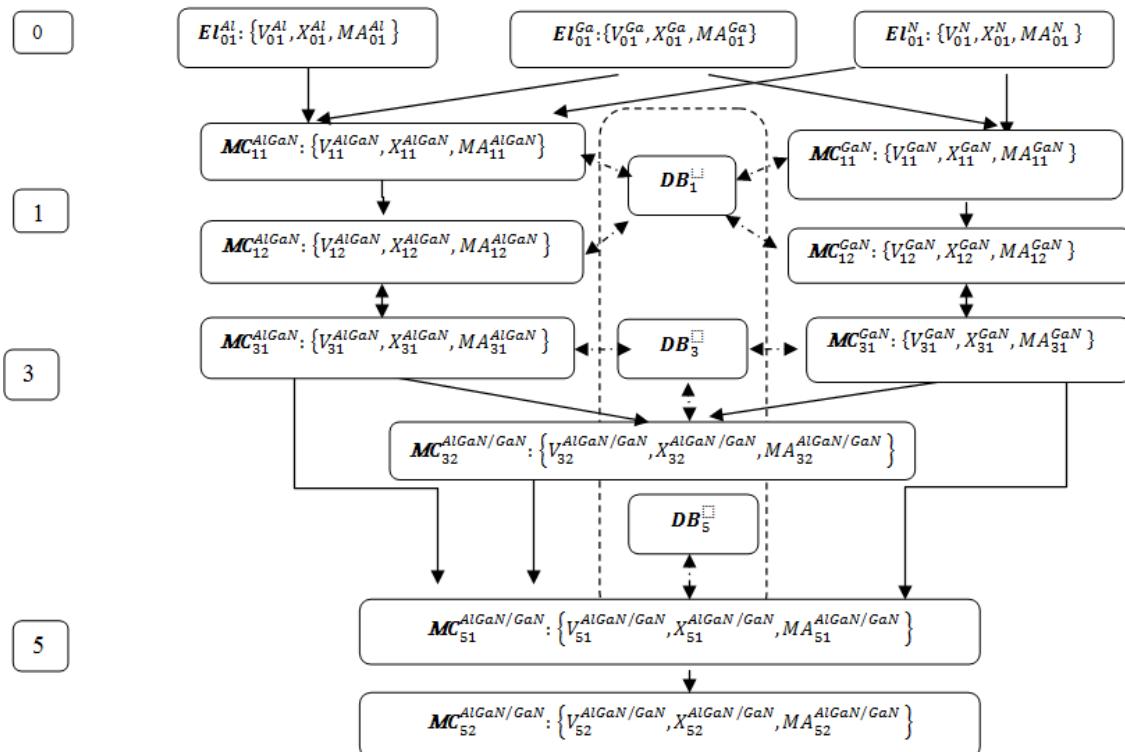
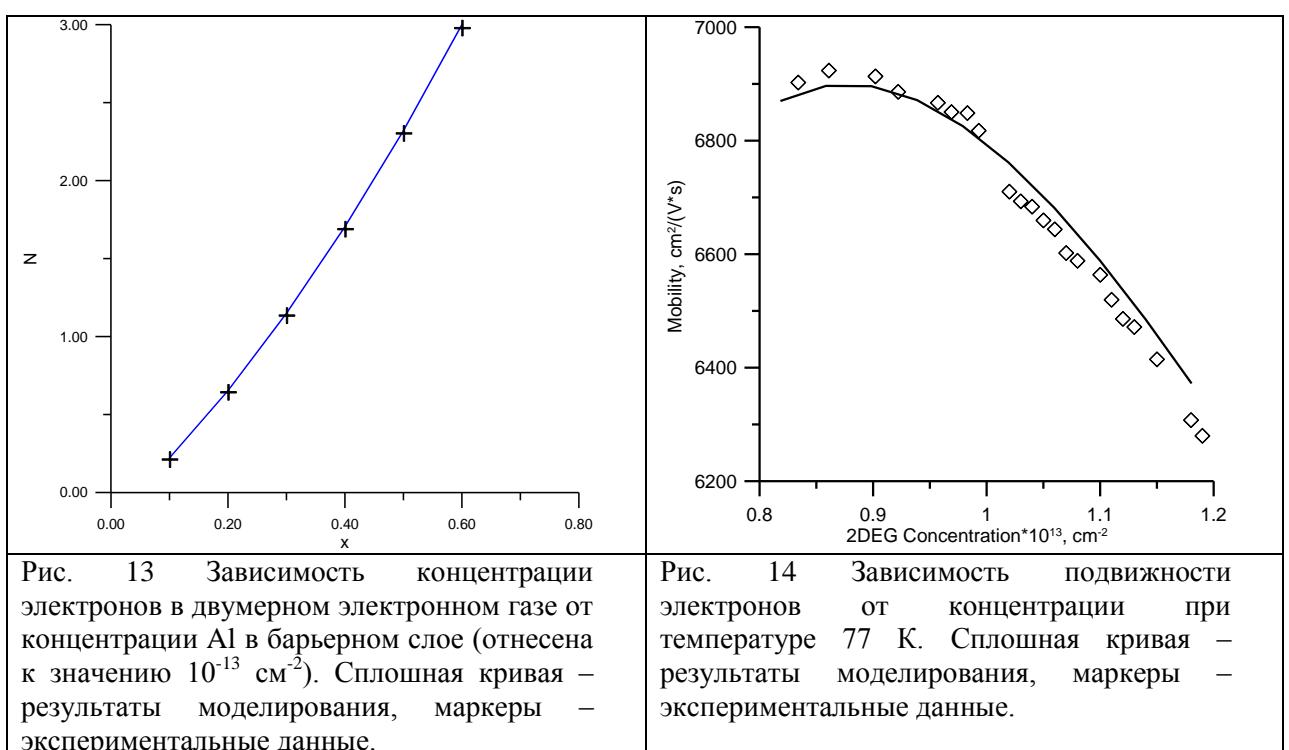
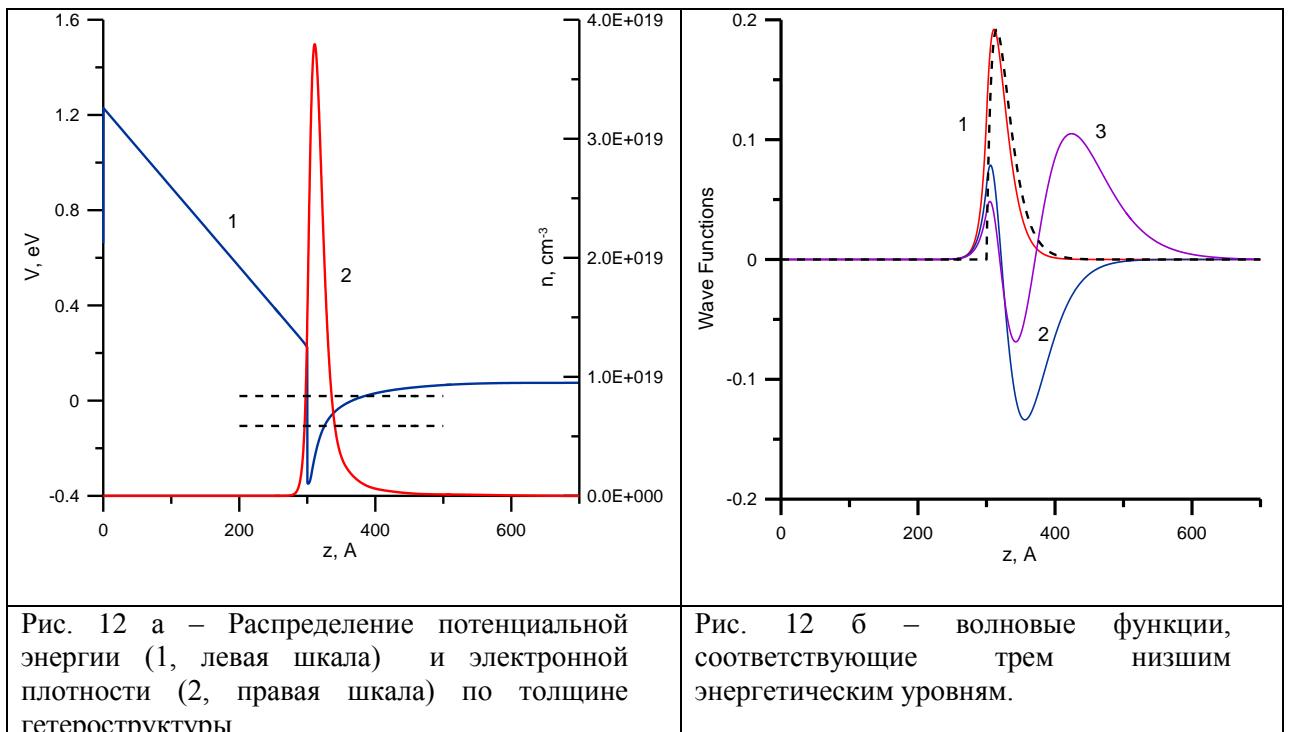


Рис.11 Схема многомасштабной композиции для расчета свойств гетероструктуры $\text{Al}_v\text{Ga}_{1-v}\text{N}/\text{GaN}$.



В главе 6 рассматриваются вопросы построения на базе многомасштабных композиций сложных иерархических программных систем, применяемых для решения задач многомасштабного моделирования физических явлений и процессов.

В п.6.1 изложены основные принципы создания интеграционных систем для информационной поддержки многомасштабного моделирования [15,34], 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.

Отмечается, что в настоящее время достаточно часто встречаются исследования, в которых формальная спецификация информационных объектов предметной области формулируется в терминах конечно-множественных представлений. Они могут быть реализованы посредством доменных моделей-конечных множеств данных с поддержкой операций по их обработке. Особенностью представленной в диссертации информационной технологии является то, что многомасштабные композиции (*МК*) – информационные аналоги многомасштабных моделей, собираются из экземпляров *БК*, которые описываются с помощью таблиц, состоящих из данных, проиндексированных согласно масштабной иерархии и номеру *БК* на соответствующем уровне. При этом экземпляры *БК* представляются объектами классов-наследников *БК* в объектно-ориентированном языке программирования и хранятся в виде документов (см. *Глава 1* табл.1) в документно-ориентированной базе данных [15]. Следуя такой логике *МК* представляется коллекцией, состоящей из сгруппированных документов, с иерархической структурой, отражающей последовательность присоединения документов (экземпляров *БК*).

Посредством этих классов осуществляется взаимодействие моделей с конкретной реализацией алгоритма в вычислительном модуле. Они состоят из типизированной и нетипизированной частей. Типизированная часть отвечает застыковку экземпляра *БК* в многомасштабной композиции. Стыковка реализуется посредством сценариев. Нетипизированная часть содержит специфичные для реализации алгоритма и вычислительного модуля параметры и данные, которые не используются другими *БК* в сценарии многомасштабной композиции.

Еще одной особенностью представленной технологии является применение гибридного подхода к манипулированию данными. При таком подходе справочные данные, необходимые для выполнения вычислительных экспериментов хранятся в реляционной базе данных, а *БК* и *МК* хранятся в виде документов в документно-ориентированной базе данных [8,9], при этом документы (*БК*), относящиеся к *МК* вложены друг в друга (отношение типа «Агрегация» в объектно-ориентированном программировании). С помощью таких подходов система информационной поддержки задачи компьютерного моделирования физических процессов интегрирует в универсальную платформу соответствующую *МК*.

В п.6.2 описана архитектура системы информационной поддержки многомасштабного моделирования. Отмечено, что применяемые в данной работе базовые принципы, такие как доменное представление взаимосвязанных программных компонент и формализация и унификация сценариев всех стадий вычислительных экспериментов позволяют строить вариативные цепочки для решения поставленных задач, обеспечивая многоуровневый подход в компьютерном моделировании многомасштабных процессов. При описании архитектурных решений системы используется абстрактная форма взаимодействующих слоев, передающая основные положения реализованного подхода.

Архитектура интеграционной платформы для конкретной предметной области соответствует классической 3-х звенной, основными элементами которой

являются сервера *БД*, сервер (кластер) приложений и клиентская часть. Абстрактная форма взаимодействующих слоев представлений от общего к частному, показана на рис. 15. В основе архитектуры лежит абстрактный слой концептуальных представлений вычислительных модулей системы. В данном подходе, вычислительный модуль состоит из типизированной части – таблицы *БК* (хранится в документной форме, определяемом атрибутным составом базовой композиции) и не типизированной части, содержащей специфичные параметры и данные, которые не используются другими *БК* в сценарии многомасштабной композиции.

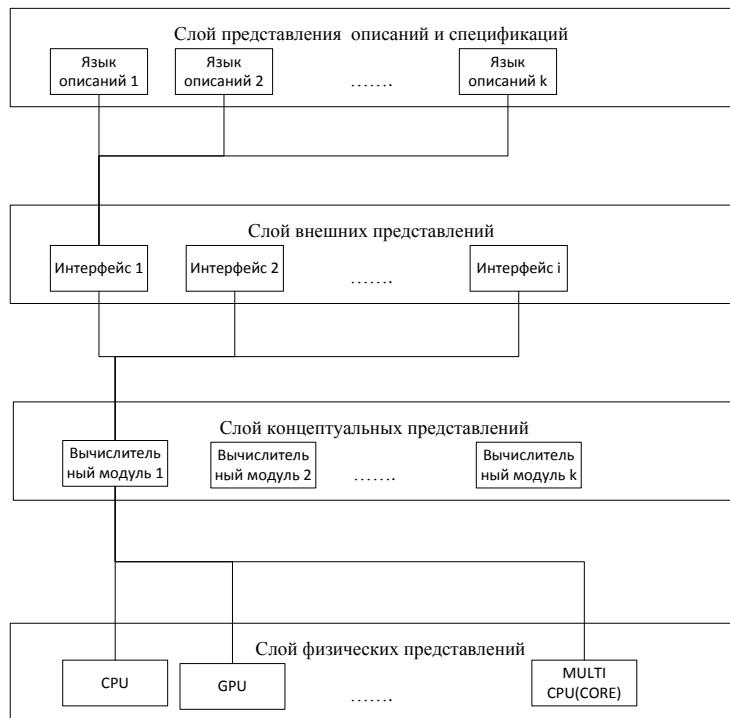


Рис. 15 Уровни абстракции

Данное требование определяет как стратегию интеграции приложений, так и расширение круга решаемых задач, т.е. спектра исследований. Основной задачей концептуального представления является описание отдельно взятого вычислительного модуля в контексте его последующего использования как элемента архитектуры системы для реализации многомасштабной вычислительной модели инструментальными средствами интеграционной платформы. Одному вычислительному модулю может быть поставлено в соответствие несколько различных интерфейсов его использования и технологических настроек на тот или иной аппаратный вычислитель. Стыковка программных модулей проходит непосредственно через типизированные части, при этом задействуются сценарии (рис. 16).

Таким образом, информационная поддержка задачи многомасштабного компьютерного моделирования физических явлений и процессов интегрирует в универсальную платформу соответствующую *МК*.

В контексте формализации представлений доменной модели, описаний вычислительного модуля и общей архитектуры системы информационной поддержки

многомасштабного моделирования разработана и реализована соответствующая программно-компонентная оболочка рис. 16.



Рис. 16 Интеграционная оболочка информационно- вычислительной системы

На верхнем уровне (рис. 16) показана реализация абстрактных слоев внешних и физических представлений (интерфейсов и профилей запуска см. рис. 15), в центре архитектуры адаптер вычислительного модуля, соответствующий концептуальному представлению (источнику концептуальных требований рис.15), дополненный семантикой сценариев и моделями данных.

Интеграционная оболочка универсальна, т.е. предназначена для обслуживания всех доступных модулей информационной системы со своими адаптерами. Она обеспечивает общий пользовательский интерфейс, поддерживает специфичные для окружения настройки запуска, сервисы работы с базой данных и метаданными, а также позволяет моделировать сценарии запуска нескольких модулей последовательно или параллельно.

Абстракции внешнего представления определяются множеством интерфейсов максимально приближенных к понятийному базису исследователей. В силу различной специфики могут быть выбраны варианты пакетного, диалогового, ручного или полуавтоматического взаимодействия пользователей системы с различными приложениями в рамках платформенной стратегии интеграции. Языковый абстрактный слой (рис.15) соответствует представлениям, выражающим тот или иной интерфейс. С одним интерфейсом могут быть связаны несколько языковых представлений. Они подразделяются на внутренние и внешние.

К внутренним относятся, прежде всего, наборы шаблонов интеграции(таблицы БК) согласно правилам платформы. Такой подход позволяет обеспечить возможность включения в контур системы новых вычислительных модулей и реализовать связь

вычислительных модулей по управлению и данным в процессе многоуровневого моделирования. Внутренними являются также и стили пользовательского интерфейса и шаблоны описания локальных параметров ввода/вывода. В качестве базового языка разметки экранных форм используется XAML, поддерживаемый технологией WPF. Единого стиля или языка графической визуализации в системе нет, поддерживаются различные пользовательские предпочтения (HTML 5, Microsoft XNA, OpenGL и др.).

К внешним спецификациям относятся форматы импортируемых в систему файлов с данными из сторонних программных средств. Например, таких как Material Design, Material Studio, пакет Digimat, программный комплекс конечно-элементных расчётов Femap с NX.Nastran, российский комплекс для проведения прочностных расчетов FydeSys и другие. Также распространенные в предметной области стандарты типа cif или форматы пакета VASP(<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>). Для распознавания, разбора и загрузки данных из файлов стандартных внешних спецификаций в рамках платформы используются парсеры.

Слой физических представлений (рис.15) тесно связан с вычислительными ресурсами локального или удаленного позиционирования, а также с разнообразием современных вычислительных архитектур. Так простые задачи исследователь может решать на локальном вычислителе (ПК или ноутбук) с ограниченными объемами оперативной памяти и производительности CPU. Реализован вариант CUDA-локализации отдельных вычислительных модулей, хорошо распараллеливаемых на матричных операциях, в вычислительную среду графических процессоров (GPU). Предусмотрен также запуск вычислительного процесса на удаленных высокопроизводительных серверах, включая кластерные или GRID-архитектуры, а также с использованием вычислительных возможностей пакета VASP.

В п.6.3 описано информационное наполнение интеграционной платформы. Это фундамент системы, который содержит входные данные для вычислительных модулей, описания моделей (метаданные), промежуточные параметры расчетов и результаты вычислительных экспериментов. В схеме базы данных системы выделяются три основные группы информационных объектов - справочники, дескрипторы моделей данных, числовые массивы.

В п.6.4 показано как применяются гибридные технологии хранения данных при создании интеграционных систем информационного обеспечения многомасштабного моделирования. К достоинствам такого подхода относится возможность совмещать хранение и манипулирование относительно небольшими объемами данных в рамках реляционной свободно распространяемой СУБД с использованием свободно лицензируемых программных систем, поддерживающих агрегированное хранение и манипулирование большими объемами массивов данных. Далее дан сравнительный анализ реляционного и документного подхода к хранению данных, описаны преимущества и недостатки. Показано, что в зависимости от типовых операций с данными, в одних случаях выгоднее применять реляционную СУБД, а в других - документную. Таким образом, сделан вывод об оптимальности выбора

варианта гибридного решения для хранения данных в информационных системах многомасштабного моделирования физических процессов.

На рис. 17 изображена действующая система информационной поддержки интеграционной платформы многомасштабного моделирования физических процессов и систем. Архитектура интеграционной платформы включает:

1. Сервер приложений - кроссплатформенная Java Virtual Machine версии 8 с встроенным легковесным сервером приложений Jetty;
2. Язык программирования серверной платформы на Java 8/Kotlin;
3. Фреймворк инверсии управления Spring Framework (как часть платформы Spring Boot);
4. Для REST-сервисов используется библиотека Spark. Применяется формат данных и протокол REST сервисов. Незначительные изменения протокола связаны с его унификацией;

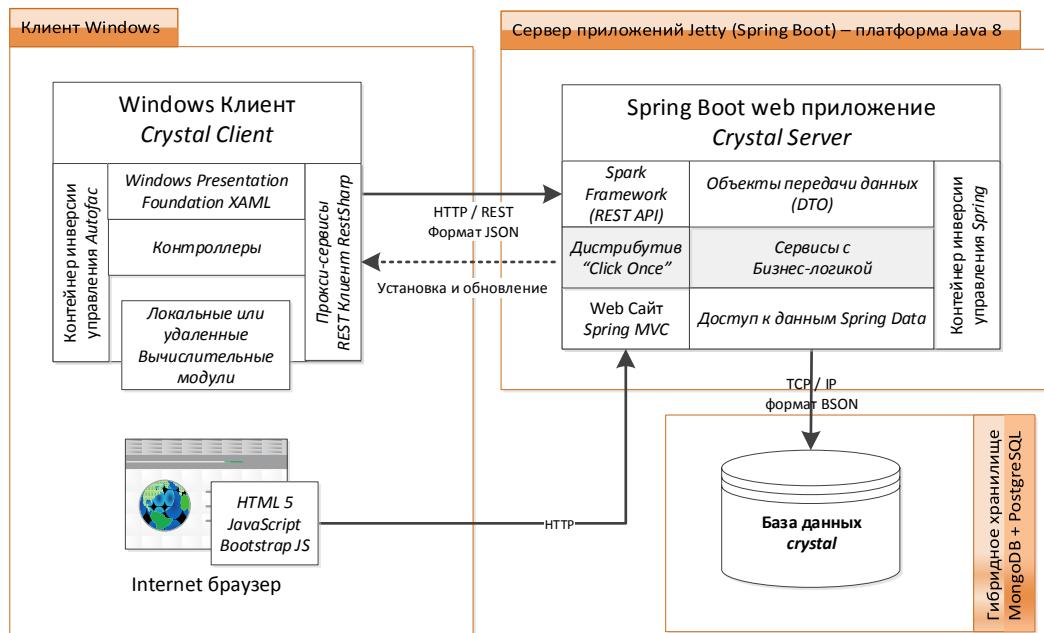


Рис. 17 Архитектура интеграционной платформы

В заключение 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. Отмечено, что применение представленных в диссертационной работе подходов дает возможность автоматизировать процесс построения многомасштабных математических моделей и создавать на их базе современные программные комплексы, позволяющие решать широкий класс прикладных задач.

В заключении приводятся основные результаты работы.

Сформулированы основные принципы применения модельно-ориентированного подхода к построению программных систем многомасштабного моделирования.

Физико-математическим моделям, отнесенными к соответствующим масштабным уровням, поставлены в соответствие информационные структуры - базовые модели-композиции (композиционные объекты), служащие основой для построения композиций и многомасштабных композиций – вычислительных аналогов многомасштабных моделей сложных систем. Для описания базовых моделей-композиций и технологии построения многомасштабных композиций применен теоретико-множественный аппарат, позволяющий передать вычислительную сущность соответствующих математических моделей.

Разработаны теоретические основы формирования интеграционных систем для информационной поддержки многомасштабного моделирования, сформулированы базовые принципы построения архитектуры системы, включающие доменное представление взаимосвязанных вычислительных, информационных и управляющих программных компонент, формализацию и унификацию сценариев всех стадий вычислительных экспериментов. Такой подход позволяет не только интегрировать различные приложения предметной области в единую канву вычислительного процесса, но и обеспечивает возможности для построения вариативных цепочек решения поставленных задач.

Создана кроссплатформенная, расширяемая интеграционная система, предназначенная для решения задач многомасштабного моделирования на высокопроизводительных программных комплексах. Для представления данных в разработанной системе применена гибридная технология, основанная на сочетании различных типов баз данных - документных и реляционных. Такое представление данных наилучшим образом отражает логику модельно-ориентированного подхода к многомасштабному моделированию.

Разработаны методы и средства информационной поддержки решения задачи поиска устойчивых кристаллических структур, совместных с заданной химической формулой. Даны оптимационные формулировки для моделей ионно-атомных радиусов, атомных радиусов и модели с перекрывающимися радиусами. Построены и реализованы эффективные вычислительные алгоритмы, учитывающие свойства симметрии и периодичности кристаллов. Создана база данных по Федоровским группам симметрии. Разработана процедура обмена данными между системами кристаллографического и квантово-механического моделирования.

Разработаны методы и средства информационной поддержки решения задачи молекулярно-динамического моделирования и параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия.

Разработана схема многомасштабного моделирования наноразмерных полупроводниковых гетероструктур, объединяющая квантово-механические расчеты на атомарном уровне, расчет электронной плотности в гетероструктуре на основе самосогласованного решения уравнений Шрёдингера и Пуассона, а также расчет подвижности электронов в двумерном электронном газе с учетом различных механизмов рассеяния. Сравнение результатов расчетов с экспериментальными данными показало достаточно высокую точность моделирования как в плане расчета

концентрации носителей в двумерном электронном газе, так и касательно подвижности электронов.

Разработана многомасштабная дискретно-элементная вычислительная модель высокоскоростного внедрения. Осуществлена идентификация зависимости энергии межчастичной связи от динамической твердости материалов. Сравнительный анализ экспериментальных и расчетных данных в широком диапазоне определяющих параметров показал достаточно высокую точность дискретно-элементного моделирования.

В *приложении* приведены таблицы с описанием базовых композиций, задействованных в диссертации.

Список основных публикаций по теме диссертации

Публикации в изданиях, рекомендованных ВАК

1. Абгарян К.К., Хачатуров В.Р. Компьютерное моделирование устойчивых структур кристаллических материалов. // ЖВМ и МФ. 2009. Т. 49. № 8. С. 1517-1530 .
2. Абгарян К.К. Применение оптимизационных методов для моделирования многослойных полупроводниковых наносистем. // Труды Института системного анализа Российской академии наук. Динамика неоднородных систем. 2010. Т.53(3). С. 6-9.
3. Абгарян К.К., Посыпкин М.А. Применение оптимизационных методов для решения задач параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия. // ЖВМ и МФ. 2014. Т. 54. № 12. С.1994-2001.
4. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Численное моделирование распределения носителей заряда в наноразмерных полупроводниковых гетероструктурах с учетом поляризационных эффектов. // ЖВМ и МФ. Т.56. №1.2016. С. 155-166.
5. Abgaryan K.K., Mutigullin I.V., Reviznikov D.L. Computational model of 2DEG mobility in the AlGaN/GaN heterostructures. // Phys.Status Solidi (Wiley). Berlin. 2015. C12. No.2. P.460-465.
6. Abgaryan K.K., Bazhanov D.I, Mutigullin I.V. AB initio study of macroscopic polarization of AlN, GaN and AlGaN. // Phys.Status Solidi. 2014. C11. No.2. 307-311.
7. Abgaryan K.K., Mutigullin I. V., Reviznikov D.L. Theoretical investigation of 2DEG concentration and mobility in the AlGaN/GaN heterostructures with various Al concentrations. // Physica Status Solidi (Wiley). Berlin. 2015. C12. No.12. P.1376-1382.
8. Abgaryan K. K., Mutigullin I. V. Theoretical investigation of the stability of defect complexes in silicon. // Phys.Status Solidi. 2016. C.13. №4. P.156-158.
9. Абгарян К.К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения. // «Издательство «Радиотехника», «Системы высокой доступности». 2018. т. 15. № 2. С.9-15.
10. Коробова Ю.Г., Бажанов Д.И., Камынина И.А., Абгарян К.К., Илюшин А.С., Исследование влияния кислорода на свойства магнитной анизотропии нанопроводов Со на поверхности Cu(210):ab initio подход. // Физика твердого тела. 2015. Т. 57. Вып. 7. С.1343-1348.

11. Супрядкина И.А., Абгарян К.К., Бажанов Д.И., Мутигуллин И.В. Исследование поляризаций нитридных соединений $(Al,Ga,AlGa)N$ и зарядовой плотности различных интерфейсов на их основе. // Физика и техника полупроводников. 2013. Т. 47. Вып. 12. С.1647-1652.
12. Журавлев К.С, Малин Т.В., Мансуров В.Г, Терещенко О.Е., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. и др. AlN/GaN гетероструктуры для нормально-закрытых транзисторов. // Физика и техника полупроводников. 2017. Т.51. Вып. 3. С. 395-402.
13. Абгарян К.К., Сеченых П.А., Гаврилов Е.С. Объектно-реляционный подход к разработке системы компьютерного моделирования многомасштабной схемы расчета многослойных полупроводниковых наноструктур. // М.: «Программная инженерия». «Новые технологии». №8. 2015. С. 9-17.
14. Абгарян К.К., Бажанов Д.И., Мутигуллин И.В. Исследование адсорбции атомарного азота на поверхности Al_2O_3 (0001). // Изд-во. Наука. Поверхность: Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2013. № 1. С.1-5.
15. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С., Марасанов А.М. Информационная поддержка задач многомасштабного моделирования композиционных материалов. // International Journal of Open Information Technologies. 2017. № 12. С. 24 – 29.
16. Абгарян К.К. Задачи оптимизации наноразмерных полупроводниковых гетероструктур. // Известия вузов. Материалы электронной техники. 2016. Т. 19. № 2. С.112-118.
17. Абгарян К.К., Сеченых П.А., Супрядкина И.А. Объектно-реляционная архитектура информационной поддержки многомасштабной схемы расчёта многослойной полупроводниковой наноструктур. // Известия вузов. Материалы электронной техники. 2014. Т. 17. № 3. С.189-192.
18. Абгарян К.К., Володина О.В., Уваров С. Математическое моделирование процессов формирования кластеров точечных дефектов в кремнии на базе молекулярно-динамического подхода. // Известия вузов. Материалы электронной техники. 2015. №1. С.31-42.
19. Абгарян К.К., Бажанов Д.И., Мутигуллин И.В. Теоретическое исследование электронных и геометрических характеристик тонких пленок AlN. // Известия вузов. Материалы электронной техники. 2015. №1. С. 48-51.
20. Ганченкова М.Г., Супрядкина И.А., Абгарян К.К., Бажанов Д.И., Мутигуллин И.В., Бородин В.А. Влияние выбора параметров первопринципных расчетов на предсказания энергетики точечных дефектов. // Известия вузов. Материалы электронной техники. 2015. №1. С. 23-9.
21. Абгарян К.К., Евтушенко Ю.Г., Мутигуллин И.В., Уваров С.И. Молекулярно-динамическое моделирование начальных этапов процесса нитридизации поверхности Si(111) в атмосфере NH₃. // Известия вузов. Материалы электронной техники. 2015. Т. 18. № 4. С.267-272.
22. Абгарян К.К., Харченко В.А. Типовая модель гетероструктуры для СВЧ-устройств. // Известия вузов. Материалы электронной техники. 2016. Т. 19, № 1. С. 51-57.

Публикации в прочих изданиях

- 23.Абгарян К.К., Бажанов Д.И., Михеев С.Ю., Мутигуллин И.В., Рыжов Ю.А. Компьютерное моделирование и экспериментальное исследование кристаллического строения и электронных свойств нанопленок InN/Si, GaN/Si. // Изд-во: Наука. Известия Российской академии наук. Серия физическая. Т.76 (6). 2012. С.696-698.
- 24.Абгарян К.К. «Программа плотной упаковки кристаллических структур с заданной химической формулой». Свидетельство о государственной регистрации программ для ЭВМ №2018610753 от 17 января 2018 г.
- 25.Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Вычислительные алгоритмы в задачах моделирования и оптимизации полупроводниковых гетероструктур. - М.: МАКС Пресс. 2016. 120 С.
- 26.Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. - М.: МАКС Пресс. 2017. 284 С.
- 27.Abgaryan K. and Kharchenko V. The Standard Model of the Heterostructure for Microwave Devices. Russian Microelectronics, 2017, Vol. 46, No. 8, pp. 564-570.
- 28.Абгарян В.К, Рыжов Ю.А., Абгарян К.К. Численное моделирование изменения рельефа поверхностей поликристаллов при облучении ионно-плазменными потоками. // Вестник Московского авиационного института. 2009. Т.16. №2. С.79-84.
- 29.Абгарян К.К., Бажанов Д.И., Холомеева А.А. Прогнозирование плотности электронных состояний некоторых перовскитоподобных структур на примере CaTiO₃. // Вестник Московского авиационного института. 2009. Т.16. № 6. С.199-203.
- 30.Абгарян К.К., Бажанов Д.И., Мутигуллин И.В. Применение высокопроизводительных вычислений для исследования электронных и структурных свойств тонких пленок InN и GaN на подложке кремния (111). // Вестник Московского авиационного института. 2010. Т. 19. № 6. С. 163-166.
- 31.Abgaryan K., Mutigullin I., Bazhanov D. Multiscale computational model of nitride semiconductor nanostructures. // Materials Science & Technology. Advanced Materials Research. Elsevier. 2012. V. 560-561. P.1133-1137.
- 32.Абгарян К.К., Журавлев А.А., Загордан Н.Л., Ревизников Д.Л. Дискретно-элементное моделирование внедрения шара в массивную преграду. // Компьютерные исследования и моделирование. 2015. Т.7. №1. С. 66-75.
- 33.Абгарян К.К., Елисеев С.В., Журавлев А.А., Ревизников Д.Л. Высокоскоростное внедрение. Дискретно-элементное моделирование и эксперимент. // Компьютерные исследования и моделирование. 2017. Т.8. №12. С. 935-942.
- 34.Абгарян К.К., Посыпкин М.А. Программный комплекс для решения задач параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия. // International Journal of Open Information Technologies. 2014. № 11. С.14-20.
- 35.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. Т.2. № 12.