

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ

GENERAL QUESTIONS

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. Т. 22, № 4. С. 298—301.
DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-298-301

УДК 621

Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно–технологического развития России*

© 2019 г. А. А. Зацаринный¹, К. К. Абгарян^{1,2,§}

¹ *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление»
Российской академии наук,
ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, Москва, 119333, Россия*

² *Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Волоколамское шоссе, д. 4, Москва, 125993, Россия*

Аннотация. В современном мире знания и высокие технологии определяют эффективность экономики, позволяют кардинально повысить качество жизни людей, модернизировать инфраструктуру и государственное управление, обеспечить правопорядок и безопасность. Создание исследовательской инфраструктуры, базирующейся на высокопроизводительном гибридном кластере, позволило проводить детальные расчеты сложных явлений и процессов без натуральных экспериментов. Стало возможным наиболее результативно применять современные методы многомасштабного компьютерного моделирования при разработке прототипов новых материалов с заданными свойствами для их дальнейшего синтеза. Такие подходы позволяют существенно удешевить и ускорить процессы разработки современных технологий получения новых полупроводниковых материалов для нанoeлектроники, композитных материалов для авиационно–космической отрасли и других. Так использование методов многомасштабного моделирования в сочетании с применением высокопроизводительных программных средств позволило создать компьютерную модель наноразмерной гетероструктуры, разработать средства для предсказательного компьютерного моделирования физической структуры приборов нанoeлектроники, нейроморфной архитектуры многоуровневых устройств памяти и изучать процессы дефектообразования в композитных материалах.

Ключевые слова: исследовательская инфраструктура, синтез новых материалов, гибридная вычислительная архитектура, высокопроизводительный кластер, многомасштабное моделирование, нанoeлектроника, гетероструктура

Введение

В современном мире знания и высокие технологии определяют эффективность экономики, позволяют кардинально повысить качество жизни людей, модернизировать инфраструктуру и государственное управление, обеспечить правопорядок и безопасность [1]. В условиях, когда процессы обще-

мировой глобализации очевидно затормозились, в сфере науки и технологий они продолжают активно развиваться. Эти тенденции подтверждены итогами работы 49–го Всемирного экономического форума в Давосе, который прошел под знаком деглобализации экономики [2].

При этом, ключевой национальной целью России в настоящее время становится цифровая транс-

Зацаринный Александр Алексеевич¹ — доктор техн. наук, главный научный сотрудник, заместитель директора, e-mail: alex250451@mail.ru; **Абгарян Каринэ Карленовна**^{1,2,§} — доктор физ.–мат. наук, главный научный сотрудник, зав. отделом (1), зав. кафедрой (2), e-mail: kristal83@mail.ru

§ Автор для переписки

* Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на I–й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 2019 г.

формация общества, определяемая приоритетами Стратегии научно–технологического развития. Особую стратегическую значимость при этом приобретает первый приоритет, в рамках которого на основе цифровых интеллектуальных производственных технологий, роботизированных систем, методов получения новых материалов, обработки больших объемов данных, машинного обучения и искусственного интеллекта, по существу будет создаваться технологическая база современной цифровой исследовательской инфраструктуры [3].

Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры

Актуальность создания такой инфраструктуры определяется целым комплексом взаимоувязанных факторов. Остановимся на основных из них, имеющих непосредственное отношение к задачам синтеза новых материалов.

1. Синтез новых материалов с заданными свойствами является стратегически важным направлением инновационного развития России в рамках программы цифровой экономики, учитывая низкую инновационную активность на фоне развитых государств. Так, в Германии инновации внедряют около 60 % предприятий, во Франции, Великобритании – 45—50%, а в России — менее 10% [4].

2. Успешное продвижение в области синтеза новых материалов может стать основой для развития прорывных технологий, необходимых для создания отечественной электронной компонентной базы, и, как следствие, фундаментом для решения актуальных задач импортозамещения и технологической независимости [5].

3. Кардинальное решение проблемы обеспечения информационной безопасности компьютерных систем различного назначения, прежде всего в интересах государственного управления, обороны, безопасности и правопорядка, является важнейшей составляющей национальной безопасности.

4. Требования создания комплексов вооружения и военной техники на отечественной электронной компонентной базе (снижение массогабаритных показателей при возрастающих тактико–технических характеристиках, повышение устойчивости функционирования в различных температурных диапазонах и др.) могут быть выполнены только за счет создания новых комплектующих элементов и материалов, а также технологий их получения.

5. Разработанный научно–методический аппарат требует адекватной поддержки в виде высокопроизводительной гибкой исследовательской инфраструктуры.

6. Создание современной исследовательской инфраструктуры должно стать мощным толчком для развития различных отраслей российской нау-

ки, которая находится в условиях концептуального перехода к новой парадигме в научных исследованиях, основанной на анализе накопленных больших данных в конкретных предметных областях [3].

Успешное решение задачи создания современной цифровой исследовательской инфраструктуры в условиях обозначенных факторов может быть достигнуто только при активном участии российских ученых. В связи с этим, особую актуальность в рамках данного направления приобретают научные исследования, проводимые в Федеральном Исследовательском центре «Информатика и управление» РАН (ФИЦ ИУ РАН), который согласно результатам мирового рейтинга Европейской научно–промышленной палаты (*World Research Institutions Ranking — WRIR*) является лидером среди российских научных организаций за 2018 г. [6]. При этом основной принцип в подходах к решению перечисленных проблем заключается в синергетике теории и практики, которая предполагает практическую направленность каждого результата фундаментальных исследований.

Так, в настоящее время в ФИЦ ИУ РАН создана современная исследовательская цифровая платформа с гибридной вычислительной архитектурой. Ресурсы исследователям предоставляются как в виде традиционных облачных сервисов, так и с помощью разработанных специфических технологий применения, называемых научным сервисом (в виде предметно–ориентированных программ [7,8]). Кроме того, разработаны:

- актуальные методы организации индивидуальной среды исполнения задач предсказательного моделирования, на основе технологий виртуализации;
- методы управления вычислительным процессом с целью обеспечения параллельности исполнения разнотипных задач, требующих выделения различных вычислительных ресурсов из состава гибридного высокопроизводительного кластера.

Появление высокопроизводительных вычислительных комплексов открыло новый этап в развитии компьютерных наук и компьютерного моделирования и позволило проводить детальные расчеты сложных явлений и процессов без натуральных экспериментов. Это в свою очередь дало возможность существенно удешевить и ускорить процессы разработки современных технологий получения новых материалов. Кроме того, многие сложные физические процессы стали более доступными для детального научного исследования.

Применение и развитие новых методов многомасштабного математического моделирования является одним из основных инструментов для проведения исследований в современной науке о материалах. В настоящее время на базе цифровой платформы ФИЦ ИУ РАН решается ряд практических

задач, связанных с синтезом новых композиционных материалов с заданными свойствами. Обоснованы и сформулированы системные решения для проведения исследований с использованием ресурсов цифровой платформы, включая разработку средств предсказательного компьютерного моделирования физической структуры приборов наноэлектроники, нейроморфной архитектуры многоуровневых устройств памяти, дефектообразования в композитных материалах и другие [9—11].

На базе созданной цифровой платформы стало возможным размещать высокопроизводительные программные системы иерархической архитектуры. Использование методов многомасштабного компьютерного моделирования в сочетании с применением высокопроизводительных программных средств позволило создать компьютерную модель наноразмерной гетероструктуры с заданными параметрами и прогнозируемыми свойствами. Сложность задачи состоит в том, что при моделировании всей многослойной гетероструктуры и расчете ее свойств необходимо воспроизвести каждый из составляющих ее основных слоев (*bulk*, приповерхностный, надповерхностный слой) и интерфейсные слои, находящиеся на границе соседствующих основных слоев.

В работе [9] представлен многомасштабный подход к решению данной задачи. Он основан на последовательном иерархическом рассмотрении и хранении данных во взаимосвязи «структура–свойство» на различных уровнях структурной иерархии. Для решения конкретных задач используются созданные расчетные модули по разноразмерным математическим моделям, базы данных по материалам, пакетные приложения, а также методы многомасштабного моделирования, в которых на каждом уровне применяются соответствующие подходы и приближения (квантово–механические, квантово–химические, молекулярно–динамические, дискретно–элементные, сплошнородные, статистические и т.д.). Кроме того, в ходе моделирования задействуются различные вычислительные средства включая центральные (**CPU**) и графические процессоры (**GPU**).

В настоящее время искусственные нейронные сети стали мощным инструментом интеллектуального анализа данных, построения аппроксимационных моделей сложных технических систем и процессов, распознавания образов, классификации и кластеризации. Сдерживающим фактором развития в данном направлении является высокие вычислительные затраты, что приводит к необходимости компьютерной реализации таких систем на высокопроизводительных вычислительных комплексах. Весомой альтернативой в этом плане являются аналоговые реализации, элементная база которых строится на использовании матриц энергонезависимой резистивной памяти. Продви-

жение по данному перспективному направлению, диктует необходимость применения методов многомасштабного моделирования на высокопроизводительных гибридных кластерах для создания нового поколения мемристоров (двухполюсных устройств, электрическое сопротивление которых меняется в зависимости от протекшего через них заряда) на базе оксидов металлов. Данные устройства лежат в основе матриц энергонезависимой резистивной памяти. Актуальной является задача подбора состава и структуры оксидов металлов, лежащих в основе мемристоров таким образом, чтобы достижение стабильного эффекта резистивного переключения обеспечивалось в течении длительного промежутка времени в реальной жизни.

Заключение

В настоящее время в ФИЦ ИУ РАН разработана оригинальная архитектура высокопроизводительного программного комплекса, которая позволит осуществить решение существующих проблем, возникающих при проектировании элементов мемристора на основе магнитных туннельных переходов (**МТП**) при их последовательной миниатюризации. Такой подход дает возможность спроектировать и создать системы с механизмом параллельных вычислений, которые необходимы для построения основы новых аналоговых нейроморфных сетей.

Библиографический список

1. Из выступления Президента России Владимира Путина на VI Международном форуме технологического развития «Технопром–2018» (27 августа 2018 г.). URL: <http://www.kremlin.ru/events/president/news/58391>
2. О Давосе. URL: <https://www.gazeta.ru/business/2019/01/25/12143185.shtml>
3. Зацаринный А. А., Колин К. К. Теория и практика цифровой трансформации общества в рамках приоритетов научно-технологического развития России // В сб.: Проектирование будущего. Проблемы цифровой реальности. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2019. С. 29—40.
4. Малинецкий Г. Г. Цифровая реальность в точке бифуркации и стратегические задачи Союзного государства в контексте гуманитарно–технологической революции // В сб.: Проектирование будущего. Проблемы цифровой реальности. М.: ИПМ им. М.В. Келдыша, 2019. С. 12—27.
5. Зацаринный А. А., Киселев Э. В., Козлов С. В., Колин К. К. Информационное пространство цифровой экономики России. Концептуальные основы и проблемы формирования. М.: ФИЦ ИУ РАН, 2018. 236 с.
6. Рейтинг World Research Institutions Ranking (WRIR). URL: <http://eurochambres.org/wrir/wrir-2018/informationstechnologii/>
7. Зацаринный А. А. Цифровая платформа для научных исследований // Математическое моделирование и информационные технологии в инженерных и бизнес–приложениях: сборник материалов междунауч. конф. Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2018. С. 104—113.
8. Zatsarinny A. A., Gorshenin A. K., Kondrashev V. A., Volovich K. I., Denisov S. A. Ward high performance solutions as services of research digital platform // XIIIth International Symposium «Intelligent Systems», INTELS'18. St. Petersburg, 2018.
9. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. М.: МАКС Пресс, 2017. 284 с.

10. Abgaryan K. K. Optimization problems of nanosized semiconductor heterostructures // *Russian Microelectronics*. 2018. V. 47, N 8. P. 561—566.

11. Абгарян К. К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения // *Системы высокой доступности*. 2018. Т. 15, № 2. С. 9—15.

12. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование работы многоуровневых элементов памяти, применяемых для создания нейроморфных сетей // *Материалы I Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК-2019)*. М.: МАКС Пресс, 2019. С. 53—55. DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (проекты 18–29–03091, 19–29–03051 мк).

Статья поступила в редакцию 26 декабря 2019 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoi tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 298—301. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-298-301

Factors determining the relevance of creation research infrastructure for the synthesis of new materials in the framework of the implementation of the priorities of scientific and technological development of Russia

A. A. Zatsarinny¹, K. K. Abgaryan^{1,2,§}

¹ *Federal Research Centre «Information and Control» of the Russian Academy of Sciences, 44 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

² *Moscow Aviation Institute (National Research University), 4 Volokolamskoe shosse, 4, Moscow, 125993, Russia*

Abstract. In the modern world, knowledge and high technologies determine the effectiveness of the economy, can radically improve the quality of life of people, modernize infrastructure and public administration, and ensure law and order and security. The creation of a research infrastructure based on a high-performance hybrid cluster enabled detailed calculations of complex phenomena and processes without full-scale experiments. It has become possible to most efficiently apply modern methods of multiscale computer modeling when developing prototypes of new materials with desired properties for their further synthesis. Such approaches can significantly reduce the cost and speed up the development of modern technologies for producing new semiconductor materials for nanoelectronics, composite materials for the aerospace industry and others. Thus, the use of multiscale modeling methods in combination with the use of high-performance software tools made it possible to create a computer model of a nanoscale heterostructure, develop tools for predictive computer modeling of the physical structure of nanoelectronic devices, the neuromorphic architecture of multilevel memory devices, defect formation in composite materials, and others.

Keywords: research infrastructure, synthesis of new materials, hybrid computing architecture, high-performance cluster, multiscale modeling, nanoelectronics, heterostructure

References

1. From the speech of Russian President Vladimir Putin at the VI International Forum for Technological Development “Technoprom-2018” (August 27, 2018). URL: <http://www.kremlin.ru/events/president/news/58391>

2. About Davos. URL: <https://www.gazeta.ru/business/2019/01/25/12143185.shtml>

3. Zatsarinny A. A., Kolin K. K. Theory and practice of digital transformation of society in the framework of the priorities of scientific and technological development of Russia // In collection: *Designing the future. Problems of digital reality*. Moscow: IPM im. M.V. Keldysh, 2019, pp. 29—40.

4. Malinetskiy G. G. Digital reality at the point of bifurcation and strategic objectives of the Union State in the context of the humanitarian and technological revolution // In collection: *Designing the future. Problems of digital reality*. Moscow: IPM im. M.V. Keldysh, 2019, pp. 12—27.

5. Zatsarinny A. A., Kiselev E. V., Kozlov S. V., Kolin K. K. Information space of the digital economy of Russia. Conceptual foundations and problems of formation. Moscow: FITs IU RAN, 2018. 236 p.

6. World Research Institutions Ranking (WRIR). URL: <http://eurochambres.org/wrir/wrir-2018/informatsionnye-tekhnologii/>

7. Zatsarinny A. A. Digital platform for scientific research // *Mathematical modeling and information technology in engineering and business applications: collection of materials Int. scientific. conf. Voronezh: Voronezh State University Publishing House, 2018, pp. 104—113.*

8. Zatsarinny A. A., Gorshenin A. K., Kondrashev V. A., Volovich K. I., Denisov S. A. Ward high performance solutions as services of research digital platform. *XIIIth International Symposium «Intelligent Systems», INTELS'18*. St. Petersburg, 2018.

9. Abgaryan K. K. Multiscale modeling in problems of structural materials science. Moscow: MAKS Press, 2017, 284 p.

10. Abgaryan K. K. Optimization problems of nanosized semiconductor heterostructures. *Russian Microelectronics*, 2018, vol. 47, no. 8, pp. 561—566.

11. Abgaryan K. K. Information technology for constructing multiscale models in problems of computational materials science. *High availability systems*. 2018. Vol. 15, No. 2. P. 9–15.

12. Abgaryan K. K. Multiscale modeling of the work of multilevel memory elements used to create neuromorphic networks // *Proceedings of the I International Conference «Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Components» (MMMEC-2019)*. Moscow: MAKS Press, 2019, pp. 53—55. DOI: 10.29003 / m682.MMMSEC-2019

Information about authors:

Aleksandr A. Zatsarinny¹: Dr. Sci. (Eng.), Chief Researcher, Deputy Director (azatsarinny@frcsc.ru); **Karine K. Abgaryan^{1,2,§}**: Dr. Sci. (Phys.–Math.), Chief Researcher, Head of the Department (1), Head of the Department (2) (kristal83@mail.ru)

§ Corresponding author