

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТОВ

MATHEMATICAL MODELING IN MATERIALS SCIENCE OF ELECTRONIC COMPONENTS

Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2020. Т. 23, № 4. С. 270—276.
DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-270-276

УДК 621.365

Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества

© 2020 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 статье рассмотрены основные аспекты значимости развития высокопроизводительной среды для научных исследований в условиях цифровой трансформации, применяемых при решении задач синтеза новых материалов с заданными свойствами. Приведены некоторые исторические факты, свидетельствующие об огромной роли, которую сыграли советские ученые в создании вычислительной техники для научных исследований. Дан анализ опыта Федерального исследовательского центра «Информатика и управление» РАН в создании современной высокопроизводительной платформы и ее использовании для научных исследований. Обоснована необходимость ее применения для решения прикладных задач, связанных с подбором новых материалов в области микроэлектроники.

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

Факторы, определяющие значимость высокопроизводительных вычислений в цифровой трансформации

Сегодня справедливо полагается, что именно цифровая трансформация дает возможность России войти в состав пяти ведущих экономик мира. При этом ключевым звеном успешного решения этой задачи в условиях нарастающих крупномасштабных угроз национальной безопасности России является повышение качества управленческих решений на всех уровнях государственного управления, т. к. большая часть проблем в развитии страны обусловлена именно неэффективным управлением [1]. Очевидно, что решение назревшего клубка проблем напрямую связано с процессами цифровой трансформации общества. Уже в этом году правительством принят ряд важных решений: предложен «Общенациональный план действий, ...», включая создание

системы управления, основанной на эффективном использовании данных и межведомственную интеграцию различных цифровых платформ; утверждена концепция развития регулирования отношений в сфере технологий искусственного интеллекта и робототехники до 2024 года; выделено финанси-

Зацаринный Александр Алексеевич¹ — доктор техн. наук, главный научный сотрудник, заместитель директора, <https://orcid.org/0000-0002-8872-2774>, e-mail: azatsarinny@frccsc.ru; **Абгарян Каринэ Карленовна**^{1,2,§} — доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник, зав. отделом (1), зав. кафедрой (2), <https://orcid.org/0000-0002-0059-0712>, e-mail: kristal83@mail.ru

§ Автор для переписки

Статья подготовлена по материалам доклада, представленного на II-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов», Москва, 19—21 октября 2020 г. (Зацаринный А.А., Абгарян К.К.). Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества. М.: МАКС Пресс, 2020. С. 8—13. DOI: 10.29003/m1507.MMMSEC-2020/8-13)

рование на поддержку стартапов в сфере высоких технологий; принято постановление об информационном моделировании в строительстве (в России внедряется новый градостроительный подход с использованием информационной модели — *Building Information Model (BIM)*) [2—4].

Вместе с тем, по данным Организации экономического содействия и развития (Organisation for Economic Co-operation and Development, OECD) по уровню цифровизации Россия находится только в третьей группе стран, которые относят к потенциально лидирующим [5]. Невысокое 32-е место и в рейтинге ООН. При этом важно отметить, что в рейтинге ООН для крупных мегаполисов первое место в мире занимает Москва за счет высокого уровня онлайн сервисов мобильного банкинга Сбер, Яндекс и Тиньков [6].

Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН) выполняет фундаментальные и прикладные исследования в интересах цифровой трансформации по ряду направлений, относящихся к первому приоритету Стратегии научно-технологического развития России, утвержденной Президентом 1 декабря 2016 г.¹ [7]. Среди них и высокопроизводительная платформа для научных исследований. Заметим, что ФИЦ ИУ РАН в мировом рейтинге Европейской научно-промышленной Палаты среди российских научных организаций в соответствии с результатами по десяти предметным спискам *World Research Institutions Ranking (WRIR)*, сохранил высшую категорию «А» [8].

Ведущие ученые ФИЦ ИУ РАН осуществляют активную преподавательскую деятельность в ведущих вузах по подготовке специалистов для цифровой трансформации (МГУ им. М.В. Ломоносова, МФТИ, МГТУ им. Баумана, МАИ, МИРЭА, РУДН и др.). Так, в работе [9] показана востребованность трех групп специалистов в условиях цифровой трансформации: математиков, программистов и специалистов по анализу больших данных.

Реализация Стратегии, в соответствии с определенными приоритетами, требует развития высокопроизводительной инфраструктуры, представляющей условия для проведения эффективных научных исследований, как научным коллективам, так и отдельным исследователям. Одной из важнейших задач, решаемых в рамках первого приоритета, является синтез новых материалов с заданными свойствами.

К факторам, определяющим значимость высокопроизводительных вычислений для решения такой задачи, следует отнести [10, 11]:

1. Синтез новых материалов с заданными свойствами является стратегически важным на-

правлением инновационного развития в рамках программы цифровой экономики, учитывая низкую инновационную активность России на фоне развитых государств.

2. Успешное решение задач синтеза новых материалов является основой прорывных технологий, необходимых для создания отечественной импорто-независимой электронной компонентной базы.

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

4. Требования создания перспективных комплексов вооружения и военной техники на отечественной электронной компонентной базе 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 науки, которая находится в условиях концептуального перехода к новой парадигме в научных исследованиях, основанной на анализе накопленных больших данных в конкретных предметных областях [1].

7. Необходимость создания высокопроизводительной исследовательской инфраструктуры является стимулом кардинального реформирования системы подготовки специалистов. Так, факультет вычислительной математики и кибернетики МГУ имени М. В. Ломоносова, ориентирует программы обучения на подготовку специалистов в областях математического моделирования, систем программирования и методов анализа больших данных [9].

Последний фактор приобретает сегодня особое значение, так как постановки задач синтеза новых материалов вызывают необходимость применения современных методов математического моделирования, позволяющих адекватно отразить процессы исследуемой системы, применение которых принципиально требует высокопроизводительную вычислительную среду. Речь идет о методах комплексного моделирования, представляющих из себя синтез аналитического, имитационного и натурного моделирования исследуемых процессов. Такие постановки формулировались и ранее, однако условия для их реализации в виде высокопроизводительной вычислительной платформы появились только в последнее время.

При этом следует подчеркнуть, что все виды моделей в рамках комплексного моделирования играют свою роль на различных этапах исследований.

¹ Указ Президента Российской Федерации от 01.12.2016 г. № 642 «О Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации». URL: <http://www.kremlin.ru/acts/bank/41449>

Реализация современных методов моделирования предъявляет повышенные требования не только к количественным характеристикам используемой вычислительной среды (производительность, надежность, емкость хранилища данных, процедуры доступа), но и к качественным показателям, характеризующим гибкость организации вычислительного процесса и эффективность использования вычислительных ресурсов.

Другими словами, современные факторы, определяемые потребностями цифровой трансформации общества, определяют актуальность представления вычислительных систем для научных исследований в виде высокопроизводительной цифровой платформы.

Некоторые исторические факты

Отечественная история развития вычислительной техники для научных исследований богата положительными примерами. Отметим некоторые из них.

В марте 2018 г. в Москве в здании РАН на пленарном заседании очередной (XXIV) годичной научной конференции Института истории естествознания и техники имени С. И. Вавилова (ИИЕТ РАН) было предложено 2018 г. считать годом 70-летия российской информатики [12]. Для этого были весомые основания: 70 лет назад, в 1948 г., постановлением Совета министров СССР (в ответ на известие о компьютерах США MARK и ENIAC) для разработки отечественной ЭВМ были образованы Институт точной механики и вычислительной техники (ИТМиВТ) и Специальное конструкторское бюро № 245 при Московском заводе счетно-аналитических машин.

ИТМиВТ возглавил выдающийся ученый академик С.А. Лебедев, который ранее в Институте электротехники АН Украинской ССР разработал МЭСМ-1 («малая электронно-счетная машина»). Эта был первый компьютер в континентальной Европе (и третьим в мире, после разработок США и Великобритании) [13, 14]. Будучи уже директором ИТМиВТ, С. А. Лебедев разработал большую электронную счетную машину — БЭСМ, которая на протяжении длительного времени использовалась в интересах научных исследований. Интересно, что автор изобретения «Автоматическая цифровая вычислительная машина» (авторское свидетельство от 04.12.1948) член-корреспондент АН СССР И. С. Брук продолжал работу над созданием ЭВМ в Энергетическом институте АН СССР (его не пригласили в ИТМиВТ). Машина, названная М-1, была разработана под его руководством уже декабре 1950 г. (практически одновременно с МЭСМ-1) небольшим коллективом совсем молодых людей (м.н.с. Т. Александриди, А. Залкинд, М. Карцев, Н. Матюхин, техники Л. Журкин, Ю. Рогачёв, Р. Шидловский).

Уже в октябре 1951 г. М-1 выполняла научные расчеты по прогнозированию нагрузки на электросеть по заданию Мосэнерго [14].

На упомянутой выше конференции в 2018 г. памятными дипломами и знаками IEEE (*Institute of Electrical and Electronics Engineers*) чествовали двух сотрудников из той команды И. С. Брука — Т. М. Александриди и Ю. А. Рогачёва [12].

Еще ряд исторических фактов связан с именем А. И. Китова, основавшего в 1954 г. первый в стране вычислительный центр. В 1956 г. была издана его монография «Электронные цифровые машины» по программированию, ЭВМ и различным их применениям. Более того, автор предложил использование ЭВМ для управления производством и решения задач экономики и, по существу, во многом предвосхищал ряд аспектов развития цифровой экономики. О непростой судьбе этого ученого и его выдающихся достижениях в сфере информатики подробно рассказано в двух монографиях, изданных к 100-летию А. И. Китова [15].

Огромный вклад в создание и развитие отечественной вычислительной техники внесли ученые Института кибернетики АН Украинской ССР под руководством академика В. М. Глушкова. В частности, следует отметить разработанный в этом институте вычислительный комплекс «Днепр-2», обеспечивающий работу в режиме разделения времени [16]. Одним из разработчиков этой ЭВМ был В. П. Семик, который в 80-е XX в. успешно работал в ИПИ АН СССР.

Об опыте ФИЦ ИУ РАН

Для повышения эффективности проведения экспериментальных исследований в интересах цифровой трансформации в ФИЦ ИУ РАН создана современная цифровая платформа для научных исследований [17]. Она представляет собой совокупность центра компетенций, высокопроизводительного вычислительного комплекса (**ГВБК**) и совокупности научных сервисов (аналитических, образовательных, библиотечных, вычислительных, аналитических и др.), которые предоставляют услуги различным сферам деятельности (образование, наука, бизнес, промышленность, государственные структуры).

ГВБК ФИЦ ИУ РАН имеет гибридную вычислительную архитектуру, в которой вычислительные ресурсы предоставляются исследователям в виде традиционных облачных услуг, а также с помощью специфических технологий научного сервиса как услуги (*RaaS, Research as a Service*) в виде предметно-ориентированных программ [18—20].

На базе ГВБК создан и зарегистрирован Центр коллективного пользования «Информатика», который предоставляет научным коллективам вычисли-

тельные ресурсы для проведения научных расчетов в виде облачных сервисов (SaaS, PaaS, RaaS). Реализуемые технологии обеспечивают развертывание всех видов программных комплексов (Frameworks) в индивидуальной виртуальной среде Docker, on-line доступ пользователей к инструментальным средствам ГВБК, интерактивную и пакетную обработку вычислительных заданий научных расчетов, создание личных кабинетов пользователей, а также единую точку входа и вспомогательные сервисы цифровой платформы.

Особенности решения задач для синтеза новых материалов

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 [21—23].

На сегодня можно выделить следующие перспективные направления исследований, в области математического моделирования в материаловедении электронных компонентов:

- современные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов с заданными свойствами, включая применение новых методов и средств анализа больших данных;
- проблемы развития материаловедения квантоворазмерных электронных гетероструктур;
- математическое моделирование в структурном материаловедении (многоуровневые, многомасштабные модели, имитационные модели и т.д.);
- моделирование размерных, радиационных, поверхностных и других дефектов в полупроводниковой наноэлектронике;
- моделирование работы многоуровневых элементов памяти для компьютеров следующего поколения;
- моделирование структур и свойств композиционных материалов с нанокристаллами, нанокластерами, наноаморфными включениями и т. д.

Остановимся на некоторых из перечисленных направлений. Как известно, проведение исследований в области материаловедения вычислительно весьма затратны и решение широкого класса задач, в том числе связанных с предсказанием с заданной точностью структурных особенностей и свойств новых материалов, в частности в микроэлектронике, невозможно без применения высокопроизводительных вычислительных средств. В большинстве случаев, вопросы, связанные с синтезом новых материалов можно отнести к многомасштабным научным

проблемам, то есть включающим в себя явления несопоставимых пространственных и/или временных масштабов, изучение которых невозможно без учета всех факторов, играющих ключевые роли в таких задачах.

В настоящее время, развитие методов многомасштабного компьютерного моделирования с размещением программного обеспечения на вычислительных кластерах гибридной архитектуры дает возможность решать задачи по созданию новых материалов в области микроэлектроники. Широко используются методы предсказательного компьютерного моделирования, основанные на применении многомасштабных подходов, которые непосредственно связаны с проведением расчетов на разных масштабных уровнях, зачастую в параллельных режимах и требующих все больших вычислительных затрат. В расчетах на каждом масштабном уровне задействуются программные модули, соответствующие физико-математическим моделям. Так результаты квантово-механических исследований в рамках теории функционала электронной плотности (DFT), реализованные в таких пакетах прикладных программ как Vasp (<https://www.vasp.at>), Siesta (<https://departments.icmab.es/leem/siesta/>), Quantum Espresso (<http://www.quantum-espresso.org>) и других, развернутых на высокопроизводительных кластерах, на сегодня являются одними из наиболее востребованными и по точности решений сравнимыми с экспериментальными данными. Данные пакеты позволяют рассчитать атомно-кристаллическую структуру, а также электронные, фоновые свойства материалов с заданной химической формулой. Кроме того, применение пакетных приложений, таких как, например, программный комплекс Abinit (<https://www.abinit.org>) и другие существенно расширяет возможности изучения различных наблюдаемых свойств материалов, включая оптические, механические, вибрационные и другие. Оригинальные программные разработки, в которых реализованы новые подходы к моделированию в области вычислительного материаловедения, такие например как методы многомасштабного дискретно-элементного моделирования [24], Разработка программных решений, включающих как оригинальные авторские разработки, так и пакетные приложения дает возможность существенно расширить класс решаемых задач.

Построение многомасштабных математических моделей для решения конкретной задачи вычислительно весьма затратно и требуют применения высокопроизводительных ресурсов. Особое значение имеет разработка новых интеграционных платформ, размещенных на высокопроизводительных вычислительных комплексах, которые позволяют решать такие задачи. Так в ФИЦ ИУ РАН на сегодня разработана интеграционная платформа для много-

масштабного моделирования нейроморфных систем [25], которая позволяет изучить влияние различных факторов на процесс обучения нейроморфной сети, и представит возможность формировать информацию для обоснованного выбора новых материалов, строения и топологии ячеек памяти компьютеров следующего поколения.

Стремительное развитие машинного обучения в качестве мощного метода интеграции данных дает возможность за ограниченное время находить решение сложных задач в разных предметных областях. В настоящее время ведутся активные исследования в области применения алгоритмов машинного обучения в задачах материаловедения.

Однако, классические методы машинного обучения часто игнорируют фундаментальные законы физики, что приводит к некорректным задачам или нефизичным решениям.

Многомасштабное моделирование — это успешная стратегия интеграции мультимасштабных, многофизических данных, позволяющая раскрыть механизмы и объяснить функциональные зависимости при изучении физических явлений и процессов.

Интеграция многомасштабного моделирования и методов анализа данных позволяет разрабатывать новые эффективные методы и технологии для проведения комплексных исследований в области естественных и технических наук.

Например, при решении задач, связанных с:

- моделированием технологических процессов, физических структур и устройств микроэлектроники с применением технологий многомасштабного моделирования;
- многомасштабным моделированием многоуровневых элементов памяти для компьютеров нового поколения;
- созданием виртуальных моделей микроэлектронных устройств, в том числе транзисторов, сенсоров, датчиков внешних воздействий;
- развитием методов многомасштабного моделирования, анализа данных и программных средств для разработки виртуальной модели и создания на ее основе нового поколения высокочувствительных, радиационностойких датчиков внешних воздействий с расширенным спектром функциональных свойств в интересах оборонной отрасли.

Использовался интеграционный подход включающий применение методов многомасштабного моделирования и анализа данных с размещением соответствующего программного комплекса на высокопроизводительном программном кластере гибридной архитектуры ФИЦ ИУ РАН.

В расчетах было задействовано до 50 млн чистец, что дало возможность с высокой степенью точности воспроизвести результаты натурных экспериментов и получить качественное пространственно-временное воспроизведение процесса.

В настоящее время компьютерное моделирование стало стандартным инструментом практически во всех областях химии, физики конденсированного состояния и материаловедения. Чтобы идти в ногу с современными экспериментами и постоянно растущей сложностью исследуемых проблем, постоянно возрастает потребность в моделировании более реалистичных, то есть более крупных модельных систем с повышенной точностью. Во многих случаях наличие достаточно эффективных межатомных потенциалов, обеспечивающих надежные энергии и силы, стало серьезным препятствием для выполнения этих симуляций. Для решения этой проблемы в настоящее время происходит смена парадигмы в развитии межатомных потенциалов.

Заключение

Развитие высокопроизводительной среды для научных исследований в условиях цифровой трансформации является актуальной задачей. Исторические факты свидетельствуют о огромном внимании руководства СССР к этому направлению, что обеспечивало ведущие позиции страны в развитии вычислительной техники для научных исследований. Большую роль в развитии этого направления сыграли советские ученые (С. А. Лебедев, И. С. Брук, А. И. Берг, А. И. Китов и др.).

В настоящее время ФИЦ ИУ РАН проводит активные исследования и разработки по развитию современной высокопроизводительной платформы для научных исследований в сфере синтеза новых материалов с заданными свойствами на основе многомасштабного математического моделирования.

Библиографический список

1. Зацаринный А. А., Киселев Э. В., Козлов С. В., Колин К. К. Информационное пространство цифровой экономики России. Концептуальные основы и проблемы формирования / под общ. ред. А. А. Зацаринного. М.: ФИЦ ИУ РАН; ООО «НИПКЦ Восход-А», 2018. 236 с.
2. Михаил Мишустин провел совещание по подготовке плана восстановления экономики, занятости и доходов населения. URL: <http://government.ru/news/39777/>
3. Концепция развития регулирования отношений в сфере технологий искусственного интеллекта и робототехники до 2024 года. Утверждена Распоряжением Правительства Российской Федерации от 19 августа 2020 г. № 2129-р. URL: <http://government.ru/docs/all/129505/>
4. Постановление Правительства Российской Федерации от 15 сентября 2020 года № 1431 «Об утверждении Правил формирования и ведения информационной модели объекта капитального строительства, состава сведений, документов и материалов, включаемых в информационную модель объекта капитального строительства и представляемых в форме электронных документов, и требований к форматам указанных электронных документов, а также о внесении изменения в пункт 6 Положения о выполнении инженерных изысканий для подготовки проектной документации, строительства, реконструкции объектов капитального строительства». URL: <http://government.ru/docs/40424/>
5. Организация экономического сотрудничества и развития. URL: <https://www.oecd.org/>
6. Швецов А. Н., Рысина В. Н. Цифровые технологии в государственном управлении. Российские устремления на фоне зарубежного опыта: Коллективная монография. М.: ПолиПринт-Сервис, 2019. 60 с.

7. Зацаринный А. А. О роли научных исследований в рамках цифровой трансформации общества // Социальные науки и социальные науки. 2020. Т. 1, № 1. С. 47—59. DOI: 10.31249/snsn/2020.01.04
8. Рейтинг World Research Institutions Ranking (WRIR). URL: <http://eurochambres.org/wrir/>
9. Академик РАН И. Соколов: «БМК МГУ — это безусловная востребованность» // Портал «Научная Россия». 12.08.2020. URL: <https://scientificrussia.ru/articles/akademik-ran-i-sokolov-vmkgu-eto-bezuslovnaya-vostrebovannost>
10. Зацаринный А. А., Абгарян К. К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов: материалы I международной конференции, Москва, 21–23 октября 2019 г. М.: МАКС Пресс, 2019. С. 8—11. DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019
11. Зацаринный А. А., Абгарян К. К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2019. Т. 22, № 4. С. 298—301. DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-298-301
12. Программа XXIV Годиной научной международной конференции Института истории естествознания и техники им. С.И. Вавилова РАН. 19–23 марта 2018 г. М.: ИИЕТ РАН, 2018. 36 с. URL: <http://ihst.ru/publications/iiet-annual-conference/>
13. Кауфман Б. История, которую стоит переписать: где на самом деле сделали первый советский компьютер. Истоки первых ЭВМ в СССР // Indicator.Ru. 17.04.2018. URL: <https://indicator.ru/mathematics/pervyj-sovetskij-kompyuter.htm>
14. Малиновский Б. Н. История вычислительной техники в лицах. К.: фирма «КИТ»; ПТОО «А.С.К.», 1995. 384 с.
15. Анатолий Иванович Китов / под ред. В. В. Шиловой и В. А. Китова. М.: МАКС Пресс, 2020. 688 с. DOI: 10.29003/m871.kitov
16. Глушков В. М., Семик В. П. Управляющая система «Днепр-2». Математическое обеспечение. К.: РИО Ин-та кибернетики АН УССР, 1968.
17. Зацаринный А. А., Кондрашев В. А., Сорокин А. А. Алгоритмы управления сервис-ориентированными процессами де-
- терминированных научных сервисов в гибридных вычислительных средах цифровых платформ // Системы высокой доступности. 2020. Т. 16, № 3. С. 5—17. DOI: 10.18127/j20729472-202003-01
18. Зацаринный А. А., Волович К. И., Кондрашев В. А. Методологические вопросы управления научными сервисами научных и образовательных организаций Российской Федерации // Сб. трудов XXIII Международной научно-технической конференции «Радиолокация, навигация, связь». В 3-х томах, Воронеж, 18–20 апреля 2017 года. Т. 1. Воронеж: ООО «Вэлборн», 2017. С. 7—14.
19. Кондрашев В. А. Архитектура системы предоставления сервисов цифровой платформы для научных исследований // Системы и средства информатики. 2018. Т. 28, № 3. С. 131—140. DOI: 10.14357/08696527180310
20. Zatsarinny A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A. Approaches to the organization of the computing process of a hybrid high-performance computing cluster in the digital platform environment // CEUR Workshop Proceedings: ITHPC 2019 – Short Paper Proc. 5th International Conference on Information Technologies and High-Performance Computing, Khabarovsk, 16–19 September 2019. V. 2426. Khabarovsk, 2019. P. 12—16.
21. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. М.: МАКС Пресс, 2017. 284 с.
22. Абгарян К. К. Задачи оптимизации наноразмерных полупроводниковых гетероструктур // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2016. Т. 19, № 2. С. 108—114. DOI: 10.17073/1609-3577-2016-2-108-114
23. Абгарян К. К. Многомасштабное моделирование работы многоуровневых элементов памяти, применяемых для создания нейроморфных сетей // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов: материалы I международной конференции, Москва, 21–23 октября 2019 г. М.: МАКС Пресс, 2019. С. 53—55. DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019
24. Zhuravlev A. A., Abgaryan K. K., Reviznikov D. L. Discrete element method adopting microstructure information // In: Jain L., Favorskaya M., Nikitin I., Reviznikov D. (Eds) Advances in Theory and Practice of Computational Mechanics. Smart Innovation, Systems and Technologies. V. 173. Singapore: Springer, 2020. P. 225—237. DOI: 10.1007/978-981-15-2600-8_17
25. Абгарян К. К., Гаврилов Е. С. Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфных систем // Информатика и ее применения. 2020. Т. 14, № 2. С. 104—110. DOI: 10.14357/19922264200215

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках проектов № 18–29–0391 и № 19–29–03051.

Статья поступила в редакцию 11 февраля 2021 г.

Izvestiya vuzov. Materialy elektronnoy tekhniki = Materials of Electronics Engineering. 2020, vol. 23, no. 4, pp. 270—276. DOI: 10.17073/1609-3577-2020-4-270-276

Current problems of creation of research infrastructure for synthesis of new materials in the framework of the digital transformation of society

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

¹ *Federal Research Centre “Information and Control” of the Russian Academy of Sciences,
44–2 Vavilov Str., Moscow 119333, Russia*

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

Abstract. The article discusses the main aspects of the significance of the development of a high-performance environment for scientific research in the conditions of digital transformation, used in solving the problems of synthesis of new materials with desired properties. Some historical facts are given that testify to the enormous role played by Soviet scientists in the

Information about authors:

Alexander A. Zatsarinny¹ — Dr. Sci. (Eng.), Chief Researcher, Deputy Director, <https://orcid.org/0000-0002-8872-2774>, e-mail: azatsarinny@frccsc.ru; **Karine K. Abgaryan**^{1,2,§} — Dr. Sci. (Phys.-Math.), Chief Researcher, Head of the Department (1), Head of the Department (2), <https://orcid.org/0000-0002-0059-0712>, e-mail: kristal83@mail.ru

§ Corresponding author

creation of computer technology for scientific research. The analysis of the experience of the Federal Research Centre "Information and Control", RAS in the creation of a modern high-performance platform and its use for scientific research is given. The necessity of its application for solving applied problems related to the selection of new materials in the field of microelectronics is substantiated.

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

References

1. Zatsarinnyy 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: OOO "NIPKT's Voskhod-A", 2018. 236 p. (In Russ.)
2. Mikhail Mishustin held a meeting on the preparation of a plan for the recovery of the economy, employment and incomes of the population. (In Russ.). URL: <http://government.ru/news/39777/>
3. Concept for the development of regulation of relations in the field of artificial intelligence technologies and robotics until 2024. Approved by Order of the Government of the Russian Federation of August 19, 2020 No. 2129-r. (In Russ.). URL: <http://government.ru/docs/all/129505/>
4. Decree of the Government of the Russian Federation of September 15, 2020 No. 1431 "On approval of the Rules for the formation and maintenance of an information model of a capital construction object, the composition of information, documents and materials included in the information model of a capital construction object and submitted in the form of electronic documents, and requirements for formats of these electronic documents, as well as on amending paragraph 6 of the Regulations on the implementation of engineering surveys for the preparation of project documentation, construction, reconstruction of capital construction objects. (In Russ.). URL: <http://government.ru/docs/40424/>
5. Organisation for Economic Co-operation and Development. URL: <https://www.oecd.org/>
6. Shvetsov A. N., Rysina V. N. Digital technologies in public administration. Russian aspirations against the background of foreign experience: Collective monograph. Moscow: PolyPrintService, 2019. 60 p. (In Russ.)
7. Zatsarinnyy A. A. About the role of scientific research as part of the digital transformation of society. *Social Novelties and Social Sciences*. 2020, vol. 1, no. 1, pp. 47–59. (In Russ.). DOI: 10.31249/snsn/2020.01.04
8. World Research Institutions Ranking (WRIR). URL: <http://eurochambres.org/wrir/>
9. Academician of the Russian Academy of Sciences I. Sokolov: "Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics of the Moscow State University is an unconditional demand". *Portal "Scientific Russia"*. 08.12.2020. (In Russ.). URL: <https://scientificrussia.ru/articles/akademik-ran-i-sokolov-vmk-mgu-eto-bezuslovnaya-vostrebovanost>
10. Zatsarinnyy A. A., Abgaryan K. K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for the synthesis of new materials in the framework of the implementation of the priorities of the scientific and technological development of Russia. *Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Component: Proc. I International Conference. Moscow, October 21–23, 2019*. Moscow: MAKSPress, 2019. Pp. 8–11. (In Russ.). DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019
11. Zatsarinnyy A. A., Abgaryan K. K. 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. *Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedenii. Materialy Elektronnoi Tekhniki = Materials of Electronics Engineering*. 2019, vol. 22, no. 4, pp. 298–301. (In Russ.). DOI: 10.17073/1609-3577-2019-4-298-301
12. Program of the XXIV Annual Scientific International Conference of the S.I. Vavilov Institute for the History of Science and Technology, RAS. March 19–23, 2018. Moscow: IHST RAS, 2018. 36 p. (In Russ.). URL: <http://ihst.ru/publications/iiet-annual-conference/>
13. Kaufman B. A story worth rewriting: where the first Soviet computer was actually made. The origins of the first computers in the USSR. *Indicator.Ru*. 04.17.2018. (In Russ.). URL: <https://indicator.ru/mathematics/pervyj-sovetskij-kompyuter.htm>
14. Malinovsky B. N. The history of computer technology in faces. Kyiv: firma "KIT"; PTOO "A.S.K.", 1995. 384 p. (In Russ.)
15. Anatoly Ivanovich Kitov / Ed. V. V. Shilov and V. A. Kitov. Moscow: MAKSPress, 2020. 688 p. (In Russ.). DOI: 10.29003/m871.kitov
16. Glushkov V. M., Semik V. P. Control system "Dnepr-2". Mathematical support. Kyiv: RIO In-ta kibernetiki AN USSR, 1968. (In Russ.)
17. Zatsarinnyy A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A. Algorithms for managing service-oriented processes of determinate research services in hybrid computing environments of digital platforms. *Highly Available Systems*. 2020, vol. 16, no. 3, pp. 5–17. (In Russ.). DOI: 10.18127/j20729472-202003-01
18. Zatsarinnyy A. A., Volovich K. I., Kondrashev V. A. Methodological problems of management of Russian Federation scientific and educational organizations science services. In: *Proc. XXIII International Scientific and Technical Conference "Radar, navigation, communication"*. In 3 vols. Voronezh: OOO "Velborn", 2017. Pp. 7–14. (In Russ.)
19. Kondrashev V. A. Architecture of the service delivery system for the research services digital platform. *Systems and Means of Informatics*. 2018, vol. 28, iss. 3, pp. 131–140. (In Russ.). DOI: 10.14357/08696527180310
20. Zatsarinnyy A. A., Kondrashev V. A., Sorokin A. A. Approaches to the organization of the computing process of a hybrid high-performance computing cluster in the digital platform environment. *CEUR Workshop Proc.: 5th International Conference on Information Technologies and High-Performance Computing, ITHPC 2019; Computing Center of Far East Branch of the Russian Academy of Science, Khabarovsk, 16–19 September 2019, vol. 2426*. Khabarovsk, 2019. Pp. 12–16.
21. Abgaryan K. K. *Multiscale modeling in problems of structural materials science*. Moscow: MAKSPress, 2017. 284 p. (In Russ.)
22. Abgaryan K. K. Optimization problems of nanosized semiconductor heterostructures. *Russian Microelectronics*. 2018, vol. 47, no. 8, pp. 583–588. DOI: 10.1134/S1063739718080024
23. Abgaryan K. K. Multiscale modeling of the operation of multilevel memory elements used to create neuromorphic networks. *Mathematical Modeling in Materials Science of Electronic Component: Proc. I International Conference. Moscow, October 21–23, 2019*. Moscow: MAKSPress, 2019. Pp. 53–55. (In Russ.). DOI: 10.29003/m682.MMMSEC-2019
24. Zhuravlev A. A., Abgaryan K. K., Reviznikov D. L. Discrete element method adopting microstructure information. In: Jain L., Favorskaya M., Nikitin I., Reviznikov D. (Eds) *Advances in Theory and Practice of Computational Mechanics. Smart Innovation, Systems and Technologies, vol. 173*. Singapore: Springer, 2020. Pp. 225–237. DOI: 10.1007/978-981-15-2600-8_17
25. Abgaryan K. K., Gavrilov E. S. Integration platform for multiscale modeling of neuromorphic systems. *Informatics and Applications*. 2020, vol. 14, iss. 2, pp. 104–110. (In Russ.). DOI: 10.14357/19922264200215

Acknowledgments

The study was carried out with the financial support of the Russian Foundation for Basic Research within the framework of projects No. 18–29–0391 and No. 19–29–03051.

Received February 11, 2021