

## Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения

© Автор, 2018

© ООО «Издательство «Радиотехника», 2018

**К.К. Абгарян** – к.ф.-м.н., зав. отделом ФИЦ «Информатика и управление» РАН (Москва),  
зав. кафедрой МАИ (Москва)

E-mail: kristal83@mail.ru

Сформулирована постановка многомасштабных научных проблем, включающих в себя явления несопоставимых пространственных и/или временных масштабов, решение которых невозможно без учета всех факторов, играющих ключевые роли в таких задачах. Представлены основные положения разработанной информационной технологии построения многомасштабных моделей с использованием таких новых понятий, как «базовая модель-композиция» и «Многомасштабная Композиция». Для их описания используется теоретико-множественный аппарат. На актуальном классе задач о новых полупроводниковых материалах показано, что такой подход может использоваться при исследовании многомасштабных физических процессов или явлений, когда возникает задача объединения имеющихся моделей отнесенных к разным пространственно-временным уровням в едином вычислительном процессе.

**Ключевые слова:** информационная технология, многомасштабная модель, Многомасштабная Композиция, теоретико-множественный аппарат, новые полупроводниковые материалы.

The multiscale scientific problems are formulated including modeling the phenomena of incomparable spatial and / or temporal scales when solution cannot be achieved without taking into account all the factors that play key roles. The basic principles of the developed information technology for constructing multiscale models with the use of such new concepts as "basic model-composition" and "multiscale composition" are presented. For their description a set theory techniques are used. On the actual class of problems for new semiconductor materials it is shown that such an approach can be used in the study of multiscale physical processes or phenomena when the problem arises of combining existing models related to different space/time levels in a computational process.

**Keywords:** information technology, multiscale model, multiscale composition, set theory techniques, new semiconductor materials.

Основная часть математических моделей, применяемых для изучения физических процессов и явлений, предназначена для их описания в одном 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. В случаях, когда необходимо в рамках одной модели провести исследование многомасштабного физического процесса или явления возникает проблема соединить имеющиеся модели, что требует разработки теоретических основ их объединения. На практике возникает много задач такого типа.

Целью работы является проведение теоретического исследования проблемы многомасштабного моделирования и разработка новой математической технологии построения многомасштабных моделей в проблемно-ориентированной области.

В данной работе рассмотрены проблемы материаловедения. Для решения задач, возникающих в области создания новых материалов с заданными свойствами, сегодня широко применяются новые подходы к построению математических моделей и информационных систем на их основе [1]. Применение технологий многомасштабного моделирования позволяет:

- объяснить многие явления и процессы, включая исследование структурных особенностей материалов на нескольких масштабах и изучение их трансформаций при различных внешних воздействиях;

- получать качественно новые результаты в области прогнозирования свойств материалов;

- выстраивать взаимосвязи между структурой и свойствами, что в свою очередь дает возможность синтезировать композиционные структуры, включая полупроводниковые гетероструктуры, обладающие заданным набором свойств;

- решать задачи оптимизации состава и структуры композиционных материалов;

- изучать проблемы, для которых применение известных методов математического моделирования не дало адекватных результатов.

Использование методов многомасштабного моделирования как последовательных, так и параллельных предоставляет широкие возможности для исследования многокомпонентных и гетерогенных структур, структур с дефектами, позволяет прогнозировать магнитные, транспортные и другие свойства материалов.

Для разработки программных систем применяется модельно-ориентированный подход, который был развит в работах Ю.И. Бродского [2]. Особенностью модельно-ориентированного подхода в данной работе является использование информационных структур, объединяющих данные и методы их обработки. Поскольку в задачах вычислительного материаловедения, как правило, имеют дело с композиционными объектами, такие информационные структуры названы моделями-композициями. Базовым математическим моделям поставлены в соответствие математические объекты, названные базовыми композициями (*БК*). Для их описания используется теоретико-множественный аппарат [2,3], 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 многомасштабных вычислительных процессов. Далее на базе *МК* строятся сложные иерархические программные системы, применяемые для решения задач материаловедения, в том числе полупроводникового.

В данной работе рассмотрены базовые композиции со структурой одного вида (состоят из данных и методов их обработки). В нашем описании в базовой композиции может использоваться один или несколько процессов, в которых задействованы внутренние характеристики модели (фазовые переменные и данные-свойства).

Базовую модель-композицию можно представить как объединение основных множеств разного структурного типа:

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

Здесь *i*-номер масштабного уровня,  $i = \overline{0, L}$ , где *L*-число рассматриваемых уровней, *j*-номер базовой модели-композиции на текущем масштабном уровне,  $j = \overline{0, N}$ , *N* – число моделей на *i*-ом уровне, *k*- номер элементарного процесса *БК*. Опишем основные множества:

$VX_{ij} = \{V_{ij}, X_{ij}\}$  - множество данных, включая:

- $V_{ij}$  - 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  $p$ .

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

Множество методов обработки данных опишем подробнее.

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

Множество моделей  $M_{ij}$ , входящих в множество  $MA_{ij}$ , состоит из статических ( $s_{ij}$ ) и динамических ( $f_{ij}$ ) методов обработки. 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 уровней  $a_{i,\dots,i^*,j}$ .

**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 (входные и выходные) и методы их обработки.

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

Здесь

$$VX_{ij} = \{V_{ij}, X_{ij}\}, MA_{ij} = \{M_{ij}, A_{ij}\}, \\ \{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p = \{MA_{ij}^1, MA_{ij}^2, \dots, MA_{ij}^p\}, \{E_{ij}^k\}_{k=1}^p = \{E_{ij}^1, E_{ij}^2, \dots, E_{ij}^p\}.$$

Параметром семейства основных множеств является количество элементарных процессов в базовой модели-композиции  $p$ . 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	Состав	
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.	Множество методов обработки данных (модели и алгоритмы): $MA_{ij} = \{M_{ij}, A_{ij}\} = \{s_{ij}, f_{ij}, a_{ij}, a_{i,\dots,i^*,j}\}$	$M_{ij}$ –множество моделей	$s_{ij}$ - статические	
			$f_{ij}$ - динамические	
		$A_{ij}$ -множество алгоритмов	$\tilde{a}_{ij}$ - подмножество алгоритмов исп. только на $i$ -м уровне масштаба (локальные)	
			$\tilde{a}_{i,\dots,i^*,j}$ - подмножество алгоритмов исп. на нескольких уровнях $i, \dots, i^*$ (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 базовой модели-композиции и задает шаблон, который будет заполняться конкретными данными при создании реальных экземпляров  $BK$  для решения практических задач математического моделирования.

Под Композицией ( $K$ ) будем понимать объединение экземпляров  $BK$  в более сложные математические объекты, состоящие из двух и более элементов. Композиция в некотором смысле является аналогом понятия модель-комплекс, введенного в работе [2].

**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  $k$  к которому отнесена  $K$ , 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:

$$K_i^j = \langle \{VX_{ij}, MA_{ij}, E_{ij}, \{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p, \{E_{ij}^k\}_{k=1}^p\} \rangle$$

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:

$$V_{ij} = V_{ij_1} \cup V_{ij_2}, X_{ij} = X_{ij_1} \cup X_{ij_2}, MA_{ij} = MA_{ij_1} \cup MA_{ij_2}, E_{ij} = E_{ij_1} \cup E_{ij_2}$$

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

Объединение основных множеств  $VX_{ij} = VX_{ij_1} \cup VX_{ij_2}$  означает:

$$V_{ij_1} \cup V_{ij_2} = \{v : (v \in V_{ij_1}) \cup (v \in V_{ij_2})\};$$

$$X_{ij_1} \cup X_{ij_2} = \{x : (x \in X_{ij_1}) \cup (x \in X_{ij_2})\};$$

$$MA_{ij_1} \cup MA_{ij_2} = \{m : (m \in MA_{ij_1}) \cup (m \in MA_{ij_2})\};$$

$$E_{ij_1} \cup E_{ij_2} = \{e : (e \in E_{ij_1}) \cup (e \in E_{ij_2})\}.$$

Объединение множеств  $\{MA_{ij_1}^k\}_{k=1}^{p_{j_1}}$  и  $\{MA_{ij_2}^k\}_{k=1}^{p_{j_2}}$  означает соответственно:

$$\{MA_{ij_1}^1, \dots, MA_{ij_1}^{p_{j_1}}, MA_{ij_2}^1, \dots, MA_{ij_2}^{p_{j_2}}\}.$$

Аналогично

$$\{E_{ij_1}^k\}_{k=1}^{p_{j_1}} \cup \{E_{ij_2}^k\}_{k=1}^{p_{j_2}} = \{E_{ij_1}^1, \dots, E_{ij_1}^{p_{j_1}}, E_{ij_2}^1, \dots, E_{ij_2}^{p_{j_2}}\}$$

Создание  $K$  из двух различных экземпляров  $BK$  осуществляется за счет того, что происходит объединение их основных множеств, соответственно структурному типу, в одном вычислительном процессе. Важным элементом такого объединения является выделение параметров, которые передаются после окончания работы из одной  $BK$  в другую, в качестве входных данных.

При создании Композиций, состоящих из двух  $BK$  одного уровня, например  $MC_i^j$  и  $MC_i^{j^*}$  выделим локальные параметры.

Локальными, будем называть параметры  $v \in X_{ij} \cap V_{ij^*}$ , где  $X_{ij} \in MC_i^j$  - множество выходных данных  $MC_i^j$  и  $V_{ij^*} \in MC_i^{j^*}$  - входных данных  $MC_i^{j^*}$ ,

$$X_{ij} \cap V_{ij^*} = \{v : (v \in X_{ij}) \cap (v \in V_{ij^*}), v \in VX_{ij^*}\}.$$

Далее приведем описание Многомасштабной Композиции ( $MK$ ), позволяющее представить информацию, из каких именно моделей-композиций, с каких масштабных уровней она состоит, сколько и какие процессы задействованы в ее работе, каким образом происходит обмен данными между моделями – композициями с разных уровней.

**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 (входные и выходные) и методы их обработки.

Многомасштабную Композицию будем обозначать через  $MK_{i, j, i^*, j^*, \dots, i^{***}, j^{***}}$ . 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

$MK_{i,i^*}^{i,j;i^*,j^*,\dots,i^{**},j^{***}}$  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 Композиции 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  $MC_i^j$  и  $MC_{i^*}^{j^*}$  соответственно.

Многомасштабную Композицию можно описать следующим образом:

$$MK_{i,i^*}^{i,j;i^*,j^*} = \{ \{ V_{ij} \cup V_{i^*j^*}, X_{ij} \cup X_{i^*j^*}, MA_{ij} \cup MA_{i^*j^*}, E_{ij} \cup E_{i^*j^*}, \{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p \cup \{MA_{i^*j^*}^k\}_{k=1}^{p^*} \} \cup \{ E_{i^*j^*}^k \}_{k=1}^{p^*} \}$$

Число процессов в  $MK$  равно сумме  $p + p^*$ .

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

Пусть необходимо составить  $MK_i^j = MK_{i^*,i^{**}}^{i^*,j^*;i^{**},j^{**}}$  из  $MC_{i^*}^{j^*}$  и  $MC_{i^{**}}^{j^{**}}$ . В этом случае под глобальными параметрами  $\check{v} \in VX_{ij} = \{V_{i^*j^*} \cup V_{i^{**}j^{**}}, X_{i^*j^*} \cup X_{i^{**}j^{**}}\}$  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 входных данных  $V_{i^{**}j^{**}}$  с верхнего масштабного уровня.

$$X_{i^*j^*} \cap V_{i^{**}j^{**}} = \{ \check{v}: (\check{v} \in X_{i^*j^*}) \cap (\check{v} \in V_{i^{**}j^{**}}), \check{v} \in VX_{ij} \}$$

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

Такой подход может использоваться для описания многомасштабной технологии, применяемой в ходе предсказательного моделирования структурных особенностей и различных свойств полупроводниковых наносистем [4-6]. Покажем, как он работает на примере актуальной задачи в данной области.

Одной из современных тенденций развития высокочастотной полупроводниковой техники является стремление к достижению максимальных концентраций носителей заряда при максимально возможной их подвижности. Особенности электронных свойств

новых полупроводниковых наноматериалов во многом связаны с их характерными размерами. Проведение натуральных экспериментов по выращиванию новых полупроводниковых гетероструктур, широко применяемых в полупроводниковой электронике, с заданными свойствами сопряжено с большими временными и финансовыми затратами. В связи с этим весьма актуальным является применение методов многомасштабного моделирования для решения задач такого класса.

Рассмотрим следующий Пример. Для расчета проводящих свойств новых многослойных гетероструктур была построена Многомасштабная Композиция «РАСЧЕТ КОНЦЕНТРАЦИИ И ПОДВИЖНОСТИ НОСИТЕЛЕЙ В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ»  $МК_{0,1,3,4}^{1,1;1,2;3,1;3,2;4,1}$ , которая состоит из 6 базовых моделей-композиций с четырех масштабных уровней:

- с 0-го уровня используется базовая модель-композиция «АТОМ  $A_0^i$ » ( $МС_0^1$ );
- с 1-го уровня – БК «КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА» ( $МС_1^1$ ) и БК «КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА» ( $МС_1^2$ );
- с 3-го уровня БК «НАНОРАЗМЕРНЫЙ СЛОЙ» ( $МС_3^1$ ) и БК «ГЕТЕРОИНТЕРФЕЙС» ( $МС_3^2$ );
- с четвертого уровня - БК «ГЕТЕРОСТРУКТУРА» ( $МС_4^1$ )).

На рис.1 представлена структура многомасштабной композиции для расчета концентрации и подвижности носителей заряда в двухслойной полупроводниковой гетероструктуре  $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ . Выделено 4 четыре пространственно-временных масштабных уровня. Указаны экземпляры базовых композиций и последовательность их использования в вычислительном процессе. По данной Многомасштабной Композиции была построена информационная система, в которой каждой из используемых БК соответствует программный модуль, в котором реализована конкретная математическая модель. Так, например, базовой модели-композиции «КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА» ( $МС_1^1$ ) соответствует программный модуль, в котором реализована модель ионно-атомных радиусов, позволяющая по заданной химической формуле рассчитывать метрические параметры кристаллических структур. Для уточнения полученных параметров и расчета энергетических характеристик заданной структуры, применяются квантово-механические расчеты в рамках теории функционала электронной плотности [7], реализованные в пакете VASP ( <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>), которому соответствует базовая модель-композиция «КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА» ( $МС_1^2$ ). Далее на уровне гетероструктуры используется математическая модель, основанная на системе уравнений Шредингера-Пуассона, позволяющая рассчитать распределение электронов в системе с учетом квантовых эффектов. Расчет подвижности носителей осуществляется с учетом основных механизмов рассеяния.

Вычисления проводились с применением высокопроизводительных программных средств МСЦ РАН и ЦКП ФИЦ ИУ РАН. Результаты тестовых расчетов верифицировались по экспериментальным данным, собранным в ходе выращивания аналогичных структур методом молекулярно-лучевой эпитаксии в Институте физики полупроводников СО РАН. Было получено хорошее согласование экспериментальных и расчетных данных [5,6].

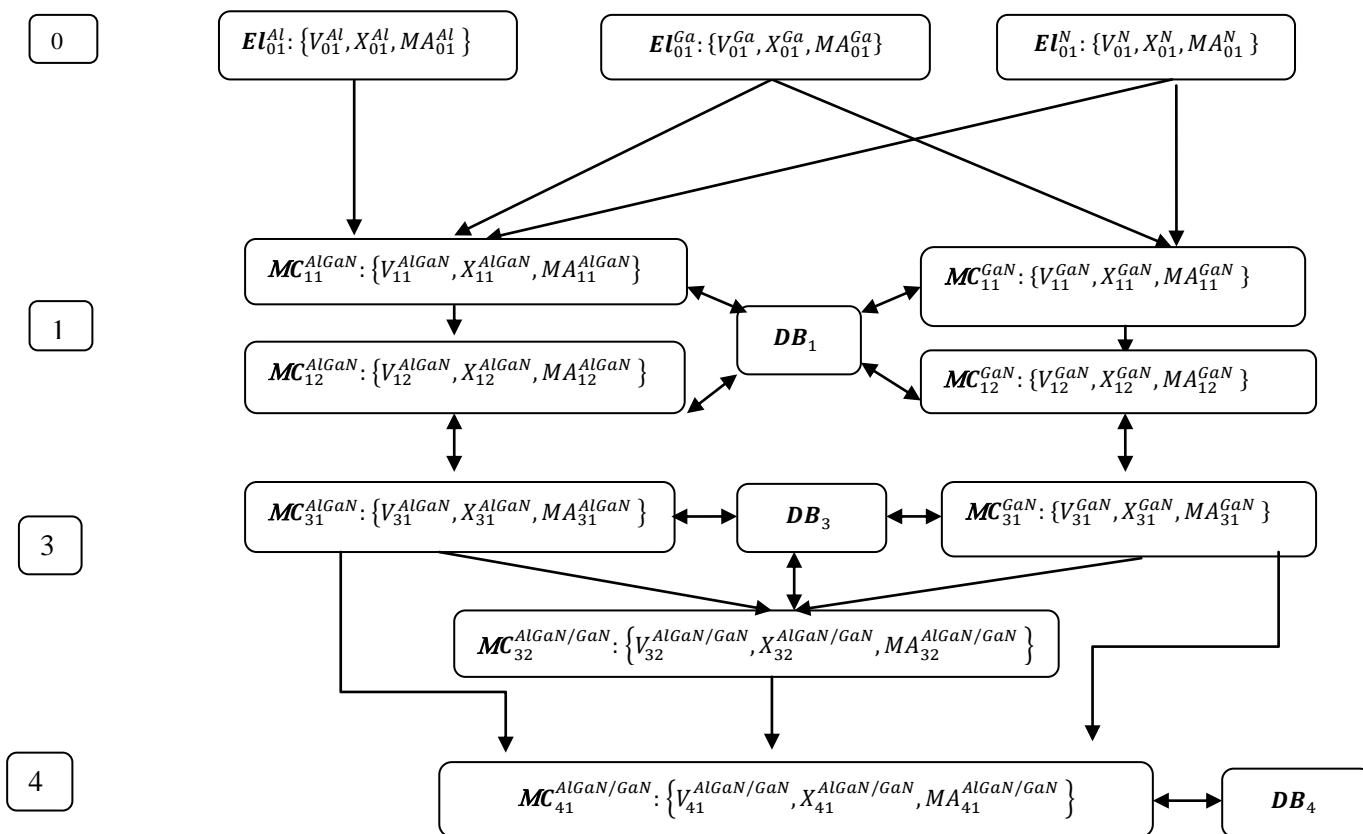


Рис.1. Структура Многомасштабной Композиции для расчета свойств гетероструктуры  $\text{Al}_v\text{Ga}_{1-v}\text{N}/\text{GaN}$ .

Как видно на рис.1. при таком подходе вычислительный процесс естественно распараллеливается, что существенно ускоряет скорость расчета значений концентрации и подвижности носителей в рассматриваемом типе гетероструктур и позволяет собирать и накапливать для дальнейшей обработки информацию по схеме структура - свойства. Данная Многомасштабная Композиция может применяться для аналогичных расчетов полупроводниковых гетероструктур с другим химическим составом, что существенно расширяет возможности по сбору и анализу материаловедческих данных. Разработанная информационная технология многомасштабного моделирования может применяться для решения обратных задач по определению химического состава и структурных характеристик полупроводниковых гетероструктур, обладающих заданным набором свойств, что создает основу для решения ряда оптимизационных задач, актуальных для современной СВЧ-электроники.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 16-08-01178*

## Литература

1. Lesard. Introduction to Computational Materials Science. Fundamentals to Applications // Cambridge University Press. 2013. С.414
2. Бродский Ю.И. Модельный синтез и модельно-ориентированное программирование М.: ВЦ РАН, 2013, 142 с.
3. Куратовский К., Мостовский А. Теория множеств. Издательство Мир, М: 1970, 416 с.



4. 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.
5. Абгарян К.К. Задачи оптимизации наноразмерных полупроводниковых гетероструктур // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2016. Т. 19, № 2. С. 112-118.
6. 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. 155-1667.
7. W.Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133, 1965.

Поступила 20 апреля 2018 г.

### **Information technology is the construction of multi-scale models in problems of computational materials science**

© Author, 2018,

© Radiotekhnika, 2018

**К.К. Abgaryan** – Ph.D., head of department FRC "Computer Science and Control" RAS (Moscow),  
head of department of MAI (Moscow)

E-mail: kristal83@mail.ru

The multiscale scientific problems are formulated including modeling the phenomena of incomparable spatial and / or temporal scales when solution cannot be achieved without taking into account all the factors that play key roles. The basic principles of the developed information technology for constructing multiscale models with the use of such new concepts as "basic model-composition" and "Multiscale Composition" are presented. For their description a set theory techniques are used. On the actual class of problems for new semiconductor materials it is shown that such an approach can be used in the study of multiscale physical processes or phenomena when the problem arises of combining existing models related to different space/time levels in a computational process.

#### **References:**

1. Lesard. Introduction to Computational Materials Science. Fundamentals to Applications // Cambridge University Press. 2013. С.414.
2. Brodsky Yury I. Model'nyj sintez i model'no-orientirovannoe programmirovaniye M.: VC RAN, 2013, 142 s.
3. Kuratovskij K., Mostovskij A. Teoriya mnozhestv. Izdatel'stvo Mir, M: 1970, 416 s.
4. Abgaryan K.K. Primenenie optimizacionnyh metodov dlya modelirovaniya mnogoslojnyh poluprovodnikovyh nanosistem // Trudy Instituta sistemnogo analiza Rossijskoj akademii nauk. Dinamika neodnorodnyh sistem. 2010. Т.53(3). S.6-9.
5. Abgaryan K.K. Zadachi optimizacii nanorazmernih poluprovodnikovyh geterostruktur // Izvestiya vysshih uchebnyh zavedenij. Materialy ehlektronnoj tekhniki. 2016. Т. 19, № 2. С. 112-118.
6. Abgaryan K.K., Reviznikov D.L. Numerical simulation of the distribution of charge carrier in nanosized semiconductor heterostructures with account for polarization effects // Computational Mathematics and Mathematical Physics. 2016. Т. 56. №1. С. 161-172.
7. W.Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133, 1965.