

Научный совет РАН «Фундаментальные проблемы элементной базы информационно-вычислительных и управляющих систем и материалов для ее создания»

Проблемы моделирования многомасштабных систем

Абгарян Каринэ Карленовна

д.ф.-м.н., зав.отделом «Математическое моделирование гетерогенных систем» Вычислительный центр

ФИЦ «Информатика и Управление» РАН

kristal83@mail.ru

Основная часть математических моделей, применяемых для изучения физических процессов и явлений предназначена для их описания в одном пространственно -временном масштабе. Исследования 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.

Математическая технология многомасштабного моделирования позволяет объяснить многие явления и процессы в нанoeлектронике, включая исследование структурных особенностей и свойств существующих материалов, а также получать качественно новые результаты в области предсказательного моделирования

Содержание

1. Новые подходы к моделированию сложных многомасштабных систем:

Интеграция:

- Методы многомасштабного моделирования;
- Machine Learning;
- Знания в предметной области (базы знаний);

Реализация моделей на Высокопроизводительных программных комплексах.

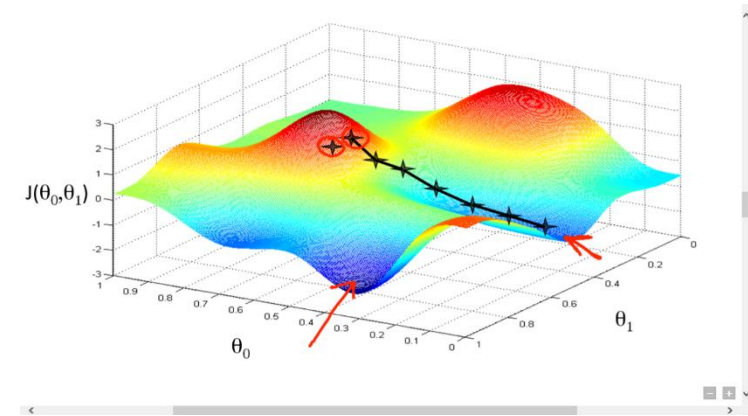
2. Применение новых подходов к решению проблем в области моделирования элементной базы информационно-вычислительных и управляющих систем и материалов.

3. Наука, образовательная среда

Заключение

Интеграция многомасштабного моделирования и методов анализа больших данных

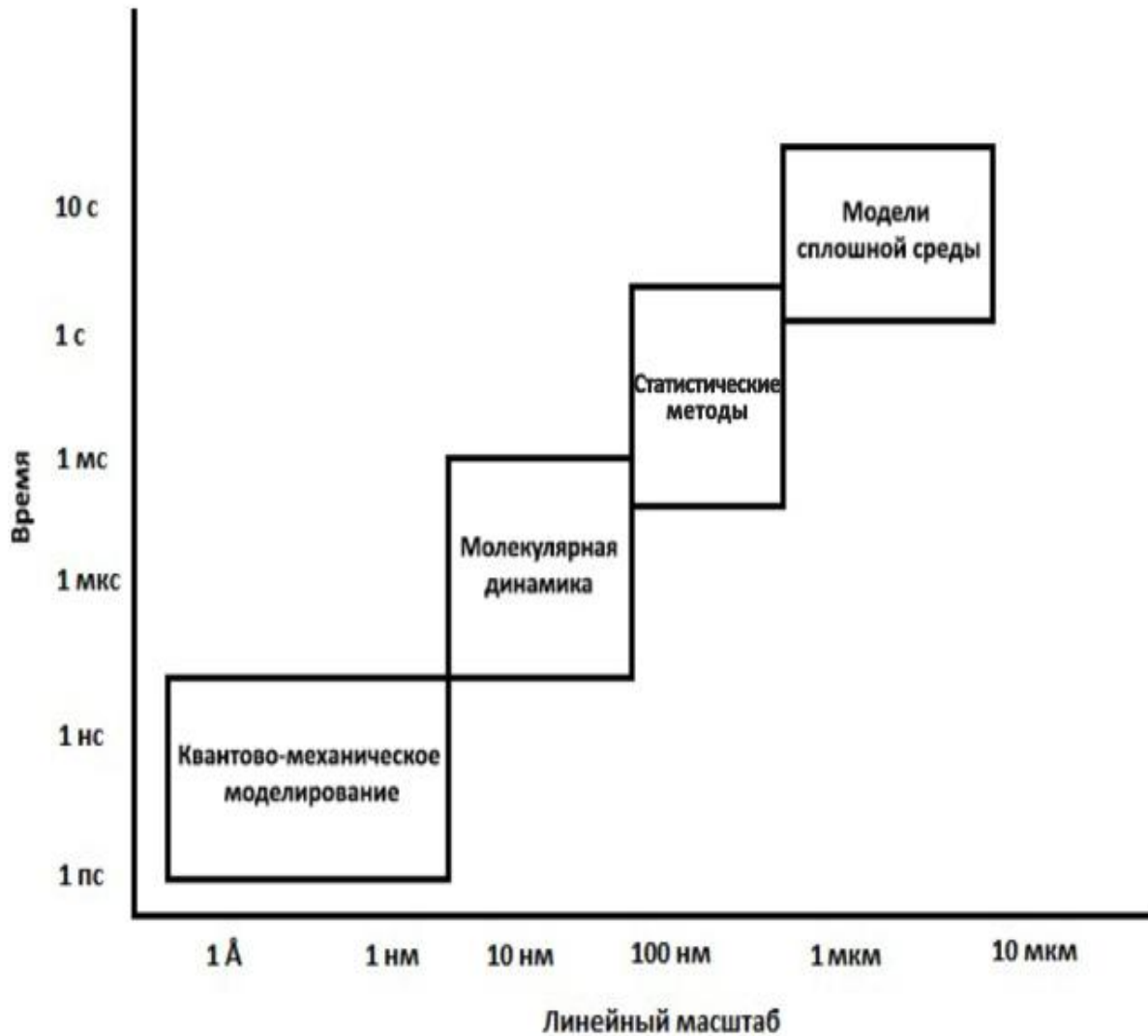
- Стремительное развитие машинного обучения в качестве мощного метода интеграции данных с множественной точностью и выявление корреляций между взаимосвязанными явлениями дает возможность за ограниченное время находить решение сложных задач в разных предметных областях.
- Технологии машинного обучения получили существенный импульс в развитии за последнее десятилетие. 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.



- Сегодня можно говорить о том, что многомасштабное моделирование – это успешная стратегия интеграции мультимасштабных, многофизических данных, которая позволяет раскрыть механизмы, объясняющие появление функциональных зависимостей при изучении физических явлений и процессов

*Mark A., Tepole A. B., Cannon W. R. et al. Integrating machine learning and multiscale modeling-perspectives, challenges, and opportunities in the biological, biomedical, and behavioral sciences // NPJ Digit Med., 2019. Vol. 2. Art. No. 115. P. 1–11. doi: 10.1038/s41746-019-0193-y

Абгарян К.К., Колбин И.С. Применение многомасштабного подхода и методов анализа данных для моделирования теплопроводности в слоистых структурах // Информатика и ее применение, -- 2020. -- №.4.



Применение технологии математического многомасштабного моделирования [*,**], согласно которой расчеты на каждом уровне проводятся с использованием соответствующих математических моделей и вычислительных алгоритмов, позволяет:

- объяснить многие явления и свойства объектов, включая исследование структурных особенностей 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

*Абгарян К.К. Информационная технология построения многомасштабных моделей в задачах вычислительного материаловедения.// «Издательство «Радиотехника», «Системы высокой доступности». 2018. т. 15. № 2. С.9-15.

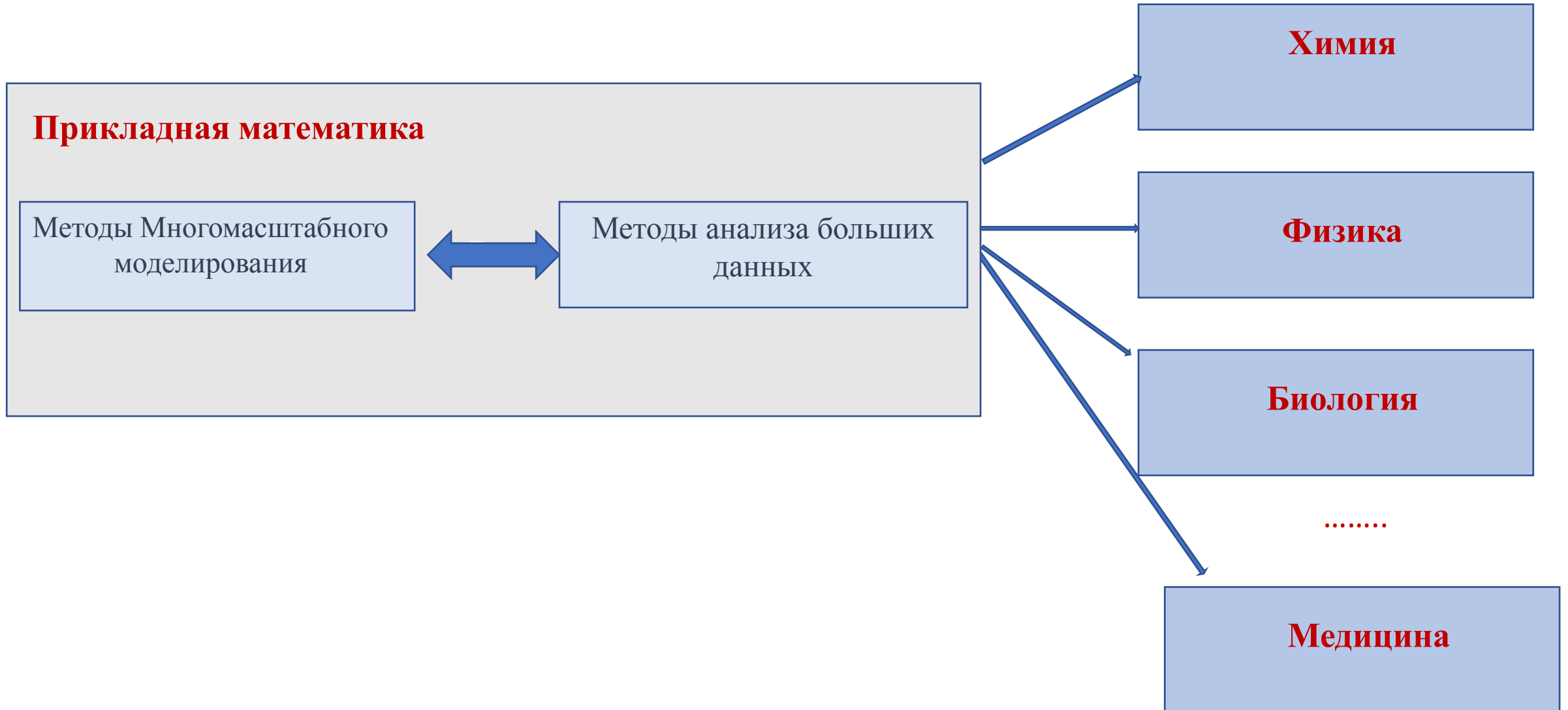
**Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. - М.: МАКС Пресс. 2017. 284 С. *Монография*

Интеграция многомасштабного моделирования и методов анализа больших данных.

- Одно многомасштабное моделирование часто не дает возможности эффективно комбинировать большие наборы данных из разных источников и с разных масштабных уровней.
- Машинное обучение и многомасштабное моделирование могут дополнять друг друга, создавая надежные прогностические модели, базирующиеся на подходах, основанных на теоретическом физико-математическом моделировании с применением математического аппарата:
 - обыкновенных дифференциальных уравнений;
 - уравнений в частных производных;
 - на методах анализа данных;
 - ...
- Для достижения поставленных целей используется опыт в предметных областях, в прикладной математике, информатике, вычислительном материаловедении, квантовой химии и другое.
- Междисциплинарный подход предполагает, что интеграция машинного обучения и многомасштабного моделирования может дать новое представление о механизмах создания новых материалов, процессов разработки новых лекарств, о причинах заболеваний, помочь в определении новых целей и стратегий лечения, а также в принятии решений на благо здоровья человека.

*Alber, Mark, Buganza Tepole, Adrian, Cannon, William R., De, Suvaranu, Dura-Bernal, Salvador, Garikipati, Krishna, Karniadakis, George E., Lytton, William W., Kuhl, Ellen, and Petzold, Linda. *Integrating machine learning and multiscale modeling—perspectives, challenges, and opportunities in the biological, biomedical, and behavioral sciences*. United States: N. p., 2019. Web. doi:10.1038/s41746-019-0193-y.

Интеграция многомасштабного моделирования, методов анализа больших данных. Проблемы, перспективы, возможности



Концепция многомасштабного моделирования

Модельно-ориентированный подход к разработке программных систем

-Физико-математическим моделям, отнесенным к соответствующим масштабным уровням, поставлены в соответствие информационные структуры - базовые модели-композиции (композиционные объекты).

-Для описания базовых моделей-композиций и технологии построения многомасштабных композиций используется теоретико-множественный аппарат [1-3], позволяющий передать вычислительную сущность соответствующих математических моделей (объединяет данные и методы их обработки).

-Базовые модели-композиции, классифицированные с учетом масштабной иерархии, применяются для построения композиций и многомасштабных композиций – вычислительных аналогов многомасштабных моделей.

[1]Бродский Ю.И. Модельный синтез и модельно-ориентированное программирование М.: ВЦ РАН, 2013, 142 с.

[2]Павловский Ю.Н., Смирнова Т.Г. Введение в геометрическую теорию декомпозиции. М.: Фазис, ВЦ РАН, 2006. 169 с

[3]Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения//Монография. М.:Изд-во Макс Пресс, 2017.250 с.

Базовая модель-композиция

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.

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

p - число элементарных процессов

$VX_{ij} = \{V_{ij}, X_{ij}\}$ - 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 базовой модели-композиции процессов;

$\{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p$ - множество реализаций моделей и алгоритмов в зависимости от процесса p .

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

Базовая модель-композиция

Представление в виде таблиц полностью описывает структуру модели-композиции и задает шаблон, который заполняется конкретными данными, моделями и алгоритмами при создании реальных экземпляров базовых моделей-композиций

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 $MA_{ij}^k = \{MA_{ij}^k\}_{k=1}^p$			

Атомарный масштаб

Кристаллографический
расчет



Первопринципное квантово-
механическое моделирование

Передаются координаты базисных атомов, соотношения метрических параметров, плотность упаковки

Теория функционала электронной плотности.
Самосогласованные уравнения Кона-Шэма.

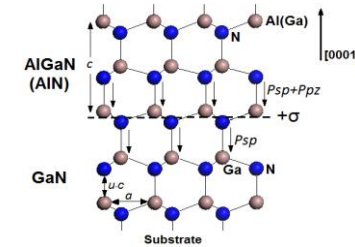
$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + V_{eff}(\mathbf{r}) - \varepsilon_i\right)\psi_i(\mathbf{r}) = 0$$

$$V_{eff} = \phi(\mathbf{r}) + v_{xc}(\mathbf{r}) \quad v_{xc}(\mathbf{r}) \equiv \frac{\delta E_{xc}[\tilde{n}(\mathbf{r})]}{\delta \tilde{n}(\mathbf{r})} \Big|_{\tilde{n}(\mathbf{r})=n(\mathbf{r})}$$

$$\phi(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r}) + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2$$

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



Расчет электронной
плотности при
заданной
конфигурации атомов

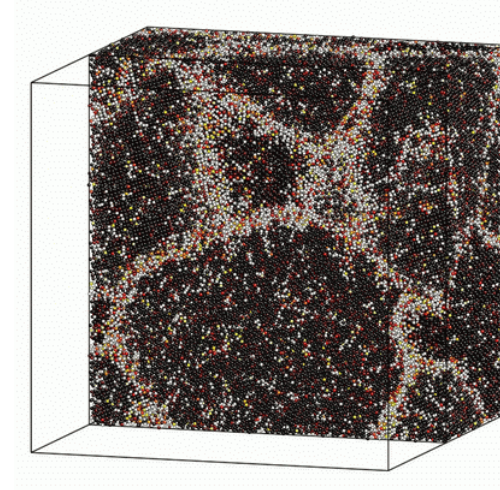
Поиск атомной
конфигурации,
минимизирующей энергию
системы

Методы молекулярной динамики

(методы, в которых временная эволюция системы взаимодействующих атомов или частиц отслеживается интегрированием их уравнений движения)

Движение частицы описывается системой уравнений:

$$\begin{cases} m_n \frac{du_n}{dt} = -\frac{\partial U_n^{(x)}}{\partial x_n}, \\ m_n \frac{dq_n}{dt} = -\frac{\partial U_n^{(y)}}{\partial y_n}, \\ m_n \frac{dw_n}{dt} = -\frac{\partial U_n^{(z)}}{\partial z_n}, \\ \frac{dx_n}{dt} = u_n, \frac{dy_n}{dt} = v_n, \frac{dz_n}{dt} = w_n \end{cases}$$



В векторном виде:

$$m_n \frac{d\mathbf{v}_n}{dt} = \mathbf{F}_n, \text{ где } \mathbf{F}_n = \left(-\frac{\partial U^{(x)}}{\partial x_n}, -\frac{\partial U^{(y)}}{\partial y_n}, -\frac{\partial U^{(z)}}{\partial z_n} \right) \text{ — сила, действующая на частицу с номером } n.$$
$$\frac{d\mathbf{r}_n}{dt} = \mathbf{v}_n$$

Для интегрирования уравнений движения взаимодействующих частиц используется метод скоростей

Верле второго порядка точности :

$$r_n^{k+1} = r_n^k + \tau_k v_n^k - \frac{\tau_k^2}{2} \frac{\partial U_n^k}{\partial r_n^k}$$
$$v_n^{k+1} = v_n^k + \frac{\tau_k}{2} \left(\frac{\partial U_n^{k+1}}{\partial r_n^{k+1}} + \frac{\partial U_n^k}{\partial r_n^k} \right)$$

Расчёт производится для количества частиц $\sim 10^3 - 10^6$

Базовые модели-композиции

№ уровня в работе	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»

Информационная поддержка интеграционной платформы многомасштабного моделирования

Основные принципы построения:

- Доменное представление взаимосвязанных вычислительных, информационных и управляющих программных компонент;
- Формализация и унификация сценариев всех стадий вычислительных экспериментов.;
- Гибридная технология, сочетающая разные типы баз данных – документную и реляционную.

Банк данных по
материалам



- Справочные данные
- Расчетные данные
- Экспериментальные данные

Расчетные модули:

1. Моделирование кристаллических структур (модель ионно-атомных радиусов, Полинга);
2. Первопринципное моделирование VASP;
3. Молекулярно-динамического моделирования;
4. Параметрическая идентификация потенциалов межатомного взаимодействия;
5. Расчет свойств полупроводниковой гетероструктуры;
6. Дискретно-элементное моделирование высокоскоростного взаимодействия твердых тел

....

Схема хранения данных в документной БД

Схема хранения данных в документной БД

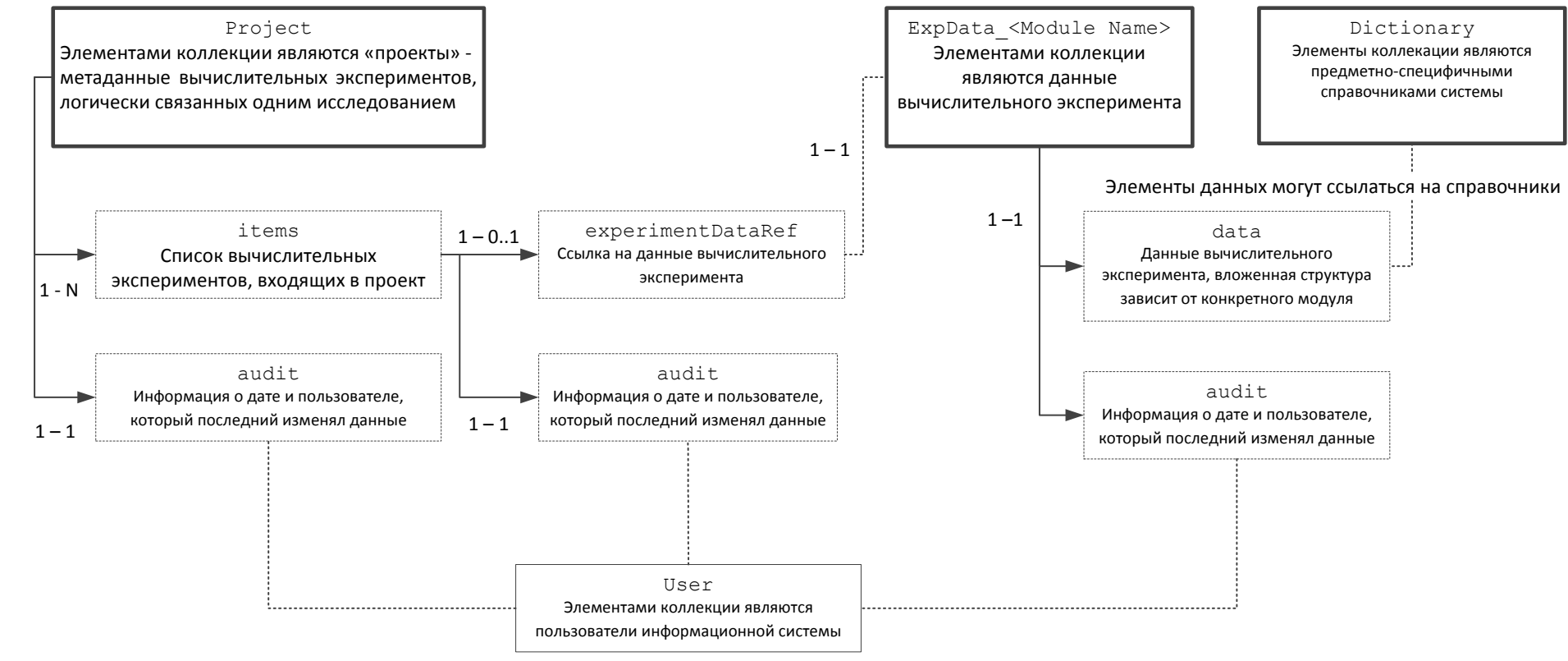
условные обозначения:

Коллекция с оперативными данными

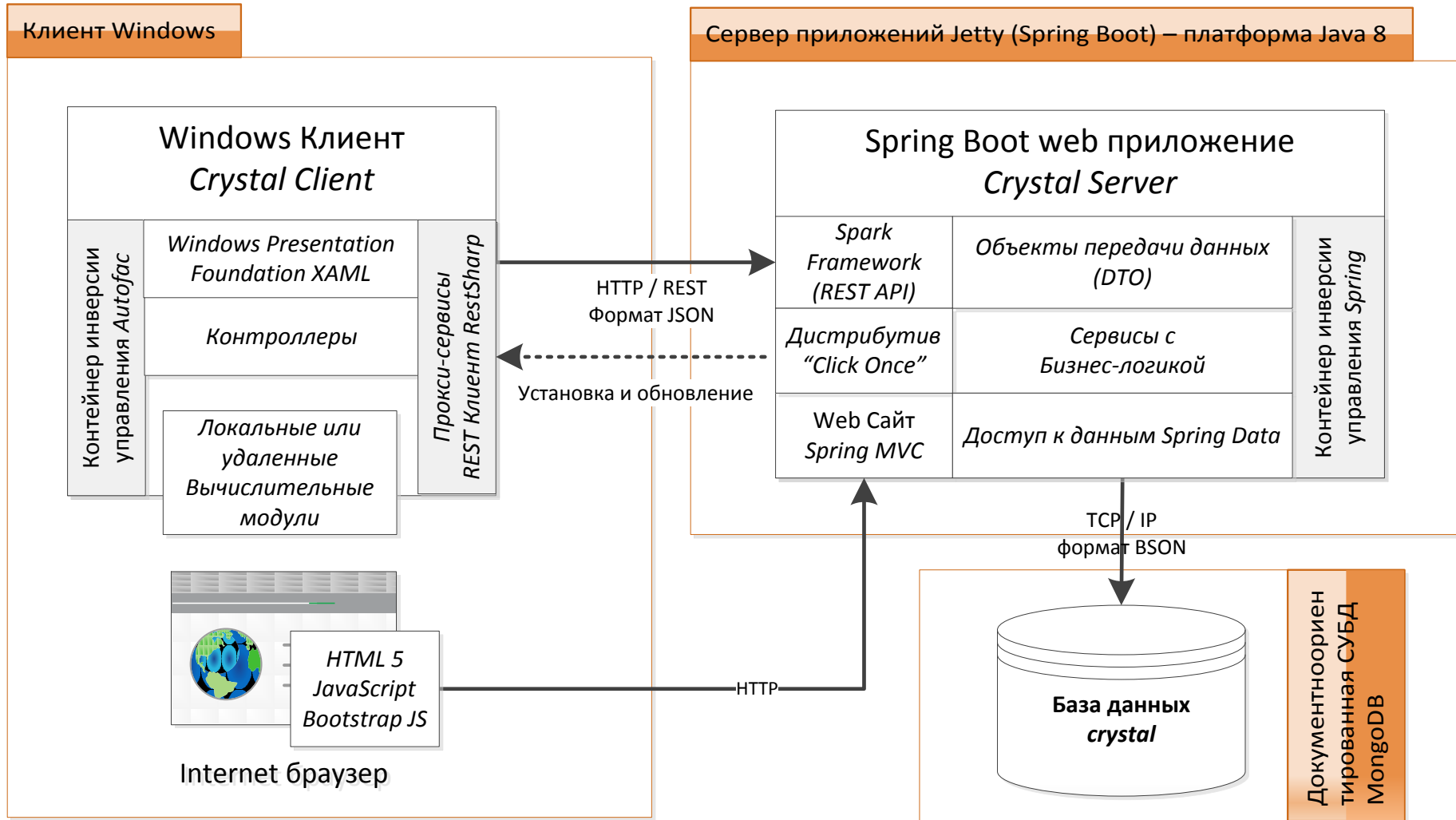
Коллекция со справочными данными

Объект, вложенный в документ коллекции

База данных Crystal (MongoDB)



Архитектура интеграционной платформы



Кроссплатформенная, расширяемая интеграционная система, предназначенная для решения задач многомасштабного моделирования на высокопроизводительных программных комплексах

Содержание

1. Новые подходы к моделированию сложных многомасштабных систем:

2. Применение новых подходов к решению проблем в области моделирования элементной базы информационно-вычислительных и управляющих систем и материалов.

- Применение многомасштабного подхода и методов анализа данных для моделирования теплопроводности в слоистых структурах
- Многомасштабное моделирование нейроморфных систем

3. Наука, образовательная среда

Заключение

Моделирование теплопереноса в слоистых структурах

Для построения моделей теплопереноса в слоистых структурах свою эффективность показали методы на основе решения кинетического уравнения Больцмана для фононов. При наличии теплового градиента распределение фононов может быть описано с помощью кинетического уравнения Больцмана:

$$\frac{df}{dt} = \frac{df}{dt}(\text{diffusion}) + \frac{df}{dt}(\text{scattering}) = 0,$$

$$\frac{df}{dt}(\text{diffusion}) = \nabla T v \frac{df}{dT}.$$

Моделирование теплопереноса в слоистых структурах

Кинетическое уравнение Больцмана относится к сложным интегро-дифференциальным уравнениям. Для достаточно небольшого температурного градиента распределение фононов может быть выражено в приближении времени релаксации:

$$\frac{f - f_0}{\tau^0} = -\nabla T v \frac{df_0}{dT},$$
$$f_0(\omega, T) = \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}} - 1.$$

При этом одна из проблем при построении вычислительных алгоритмов связана с учетом рассеяния фононов. Однако во многих случаях при решении данного уравнения достаточно учитывать лишь приближения времени релаксации, что существенно упрощает задачу [*].

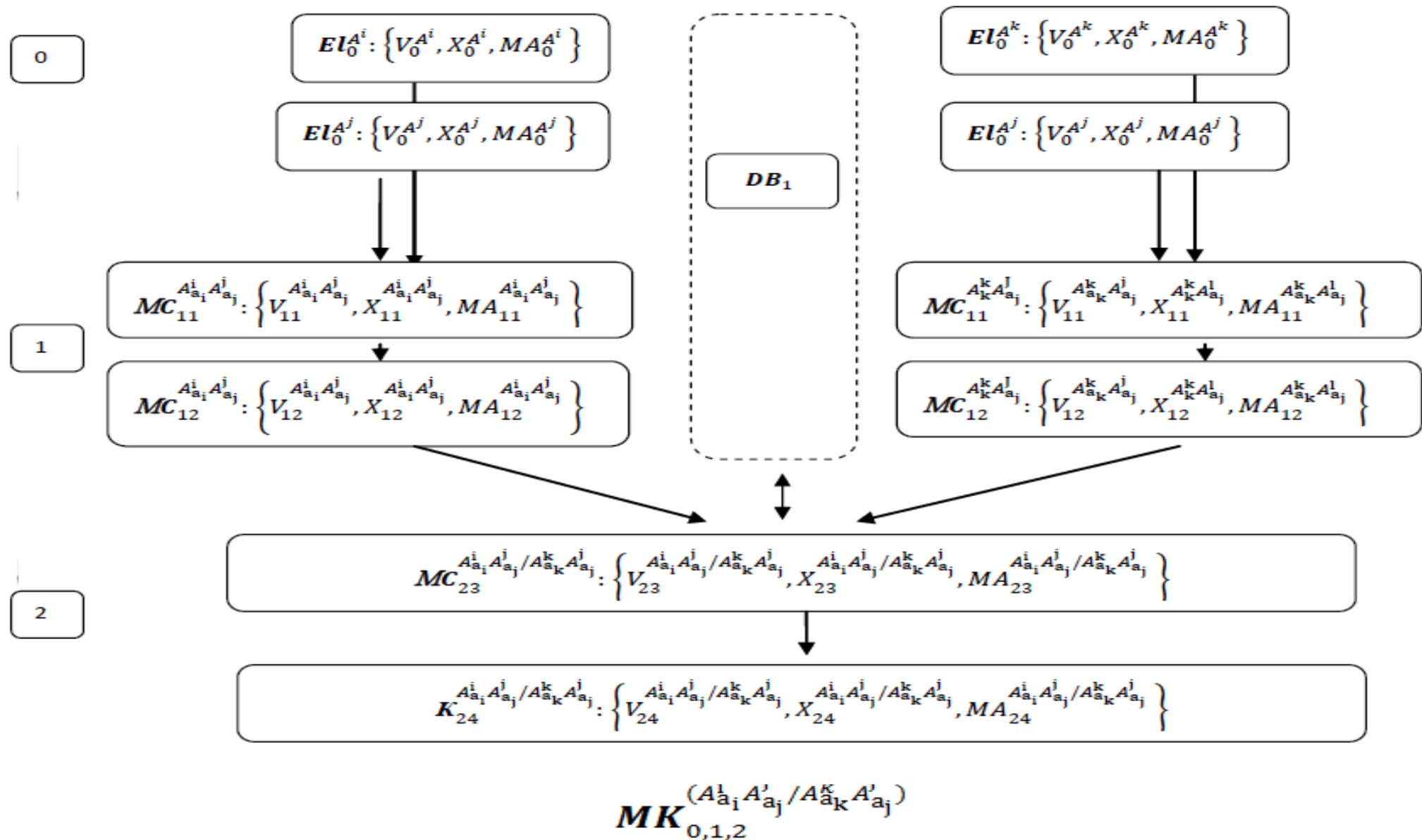
*Carrete J., Vermeersch B., Katre A., Roekeghem A., Wang T., Madsen G., Mingo N. AlmaBTE: a solver of the space-time dependent Boltzmann transport equation for phonons in structured materials // Comp. Phys. Commun., 2017. Vol. 220C. P. 351–362. doi: 10.1016/j.cpc.2017.06.023.

Моделирование теплопереноса в слоистых структурах

В такой постановке необходимо решить вопрос, связанный с расчетом данных по параметрам релаксации. Ранее они вычислялись полуэмпирически с учетом согласования модельных расчетов с результатами экспериментов. В связи с большой трудоемкостью подход в основном применялся для моделирования однокомпонентных структур (кремний, германий, ..). Значительный прорыв в данном вопросе произошел при комбинировании методов с использованием кинетического уравнения и первопринципных квантово-механических расчетов (*). При таком двухуровневом подходе, требуемые характеристики фононов получают не из аппроксимации экспериментальных данных, а из первопринципных расчетов, что значительно повышает точность вычислений и открывает возможности эффективного предсказания свойств моделируемых материалов, минимизируя при этом различные допущения.

*W.Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133, 1965. G. Kresse, J.Furthmuller. Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996). G. Kresse, D. Joubert. Phys. Rev. B **59**, 1758 (1999)

Многомасштабная композиция для расчета эффективного коэффициента теплопроводности наногетероструктуры



Для расчета эффективного коэффициента теплопроводности использовалась модель модального подавления [*]:

$$\kappa(L) = \sum_{\lambda} S_{\lambda} C_{\lambda} \|v_{\lambda}\| L_{\lambda} \cos^2(\theta_{\lambda}).$$

Здесь $S_{\lambda} = \frac{1}{1+2K_{\lambda}}$, $L_{\lambda} = \|v_{\lambda}\| \tau_{\lambda}^0$, $K_{\lambda} = \frac{L_{\lambda} |\cos(\theta_{\lambda})|}{L}$, $C_{\lambda} = \frac{k_B}{N\Omega} \left(\frac{\hbar\omega_{\lambda}}{k_B T} \right) f_0 (f_0 + 1)$, $f_0 = f_0(\omega_{\lambda}, T)$, а θ_{λ}

– угол между групповой скоростью v_{λ} фононной моды λ и осью теплопереноса.

В отсутствие температурного градиента и иных термодинамических сил система находится в тепловом равновесии и распределение фононов подчинено закону Бозе–Эйнштейна.

*Muraki K., Fukatsu S., Shiraki Y., Ito R. Surface segregation of In atoms during molecular beam epitaxy and its influence on the energy levels in InGaAs/GaAs quantum wells // Applied Physics Letters, 1992. Vol. 61. Iss. 5. P. 557–559. doi: 10.1063/1.107835.

Формирование обучающей выборки

Обучающая выборка сформирована из результатов расчетов эффективного коэффициента теплопроводности в пакете Alma VTE с варьированием параметров.

R-параметр модели Мураки, отвечающий за послойное распределение материалов в периоде сверхрешетки варьировался от 0 до 0.9;

x-число монослоев первого материала (GaAs), варьировался от 1 до 20;

y- число монослоев второго материала (AlAs), варьировался от 1 до 20;

T- температура окружающей среды, варьировалась от 100К до 500К;

L- толщина сверхрешетки от 1 нм до 100 мкм.

Моделирование теплопереноса в слоистых структурах

Были построены нейросетевые модели для расчета эффективного коэффициента теплопроводности для слоистых структур – сверхрешеток GaAs/AlAs с разными периодами слоев. Данные для обучения были сгенерированы в программном пакете AlmaBTE 1.3.2, параметры материалов получены из открытой базы данных проекта. Выборка формировалась для различных комбинаций содержания GaAs и AlAs, толщин пленок, периодов сверхрешетки. Полученный массив данных был разделен на 3 части: 60% для обучения нейросетей, 20% для валидации (во избежание переобучения) и 20% как тестовая выборка для оценки результирующей точности обученных моделей. Оптимизация нейросетей велась с использованием алгоритма RMSprop с шагом 0,0001 в среде Tensorflow 2.3.

**Многомасштабное моделирование работы
многоуровневых элементов памяти и разработка
программного обеспечения для создания
нейроморфных сетей**

Актуальность проблемы

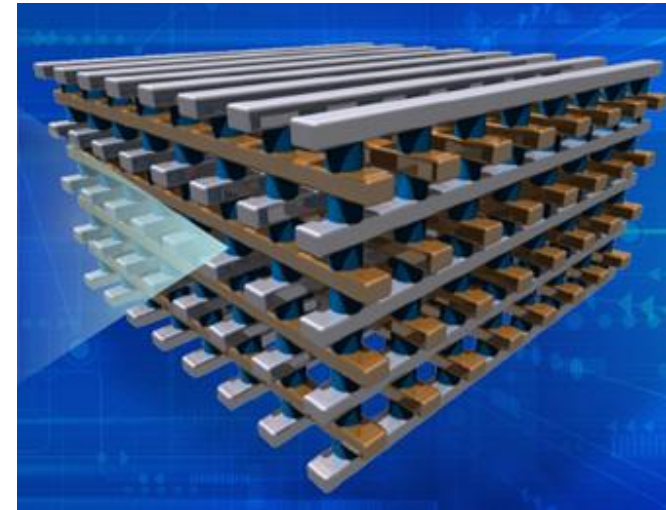
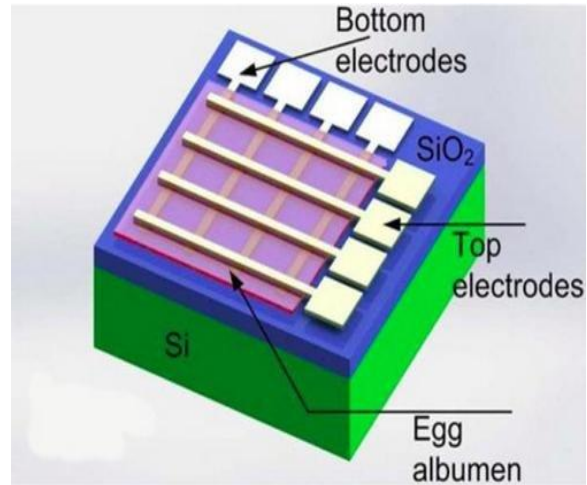
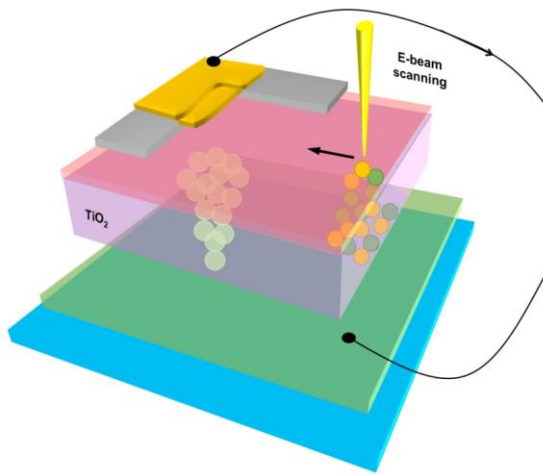
Нейроморфная компьютерная платформа:

- основана на новых физических принципах,
- позволяет перейти к универсальной процессорной среде с:
 - интеграцией оперативной и долговременной памяти
 - достижением многоуровневых логических состояний

Для ее разработки необходимо создать альтернативную энергонезависимую память обладающую:

- высокой плотностью записи данных,
- низкой потребляемой мощностью,
- высокой надежностью,
- высокой скоростью переключения

Задача - разработка и создание элементной базы нового поколения вычислительной техники на основе структур типа металл-диэлектрик-металл (МДМ) с резистивным переключением, включая быструю энергонезависимую память и искусственные синапсы для осуществления нейроморфных вычислений.



Необходимо:

- ▶ Подобрать оптимальные материалы для изготовления мемристоров
- ▶ Оценить функциональные характеристики его работы, не прибегая к экспериментам
- ▶ Оценить проблемы проектирования нейроморфных систем

Многомасштабная модель мемристора

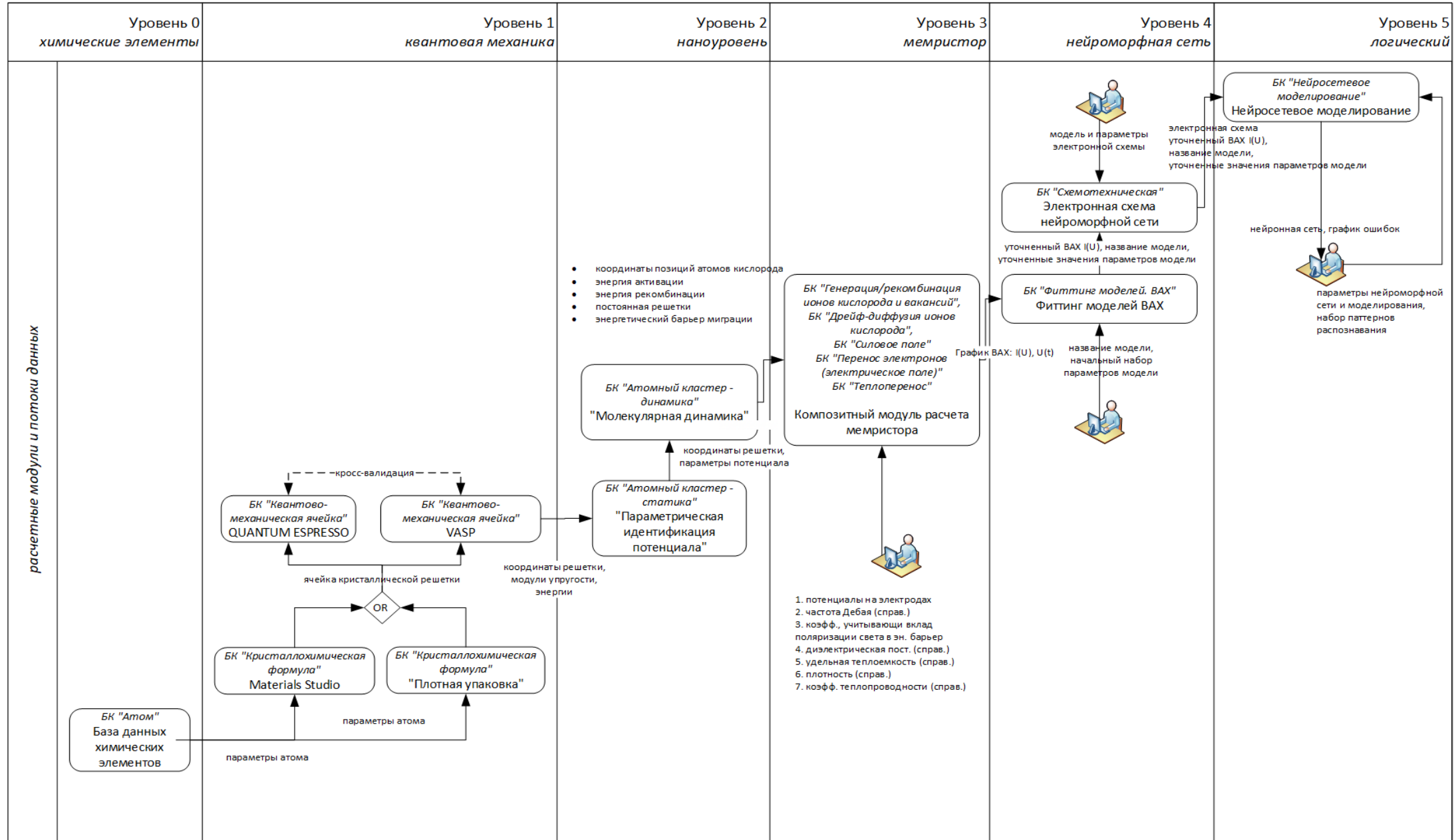
Распределение базовых моделей-композиций по масштабным уровням

No масш. уровня	Обозначение и название базовой модели- композиции	Название масштабного уровня
0	МС ₁ «АТОМ A_i » 00	Уровень химич.элементов
1	МС ₁ «КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА» МС ₂ «КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКАЯ ЯЧЕЙКА» 1 1	Квантово- механический уровень
2	МС ₁ «АТОМНЫЙ КЛАСТЕР-СТАТИКА» 2 МС ₂ «АТОМНЫЙ КЛАСТЕР-ДИНАМИКА» 2	наноуровень
3	МС ₁ «Модель генерации/рекомбинации ионов 3 кислорода и кислородных вакансий (GR-model)» МС ₂ «Модель дрейфа-диффузии ионов кислорода (DD-model)» МС ₃ «Модель силового поля (E-model)» МС ₄ «Модель переноса электронов 3 (электрического тока) (J-model)» МС ₅ «Модель теплопереноса (HT-model)» 3 3 3	Уровень элемента резистивной памяти (мемристора)
4	МС- «Фитинг моделей ВАХ» 24 МС ₄ «схемотехническое представление»	Уровень формирования нейроморфной сети
5	МС- «Нейросетевое моделирование». Обучение по прецедентам 5	Логический уровень

Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфной сети (ИПММ)

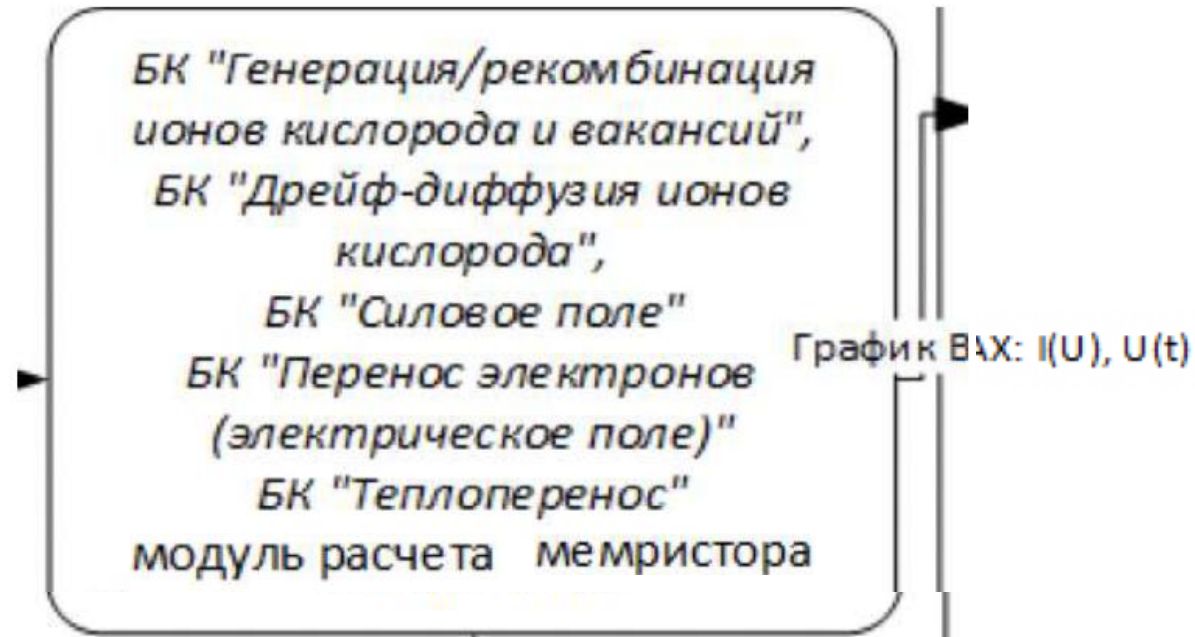
- ИПММ объединяет информационные потоки на различных масштабных уровнях :
 - квантово-механическом,
 - наноуровне,
 - элементов резистивной памяти,
 - нейроморфной сети,
 - имитации обучения нейроморфной сети по прецедентам.

Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфных систем

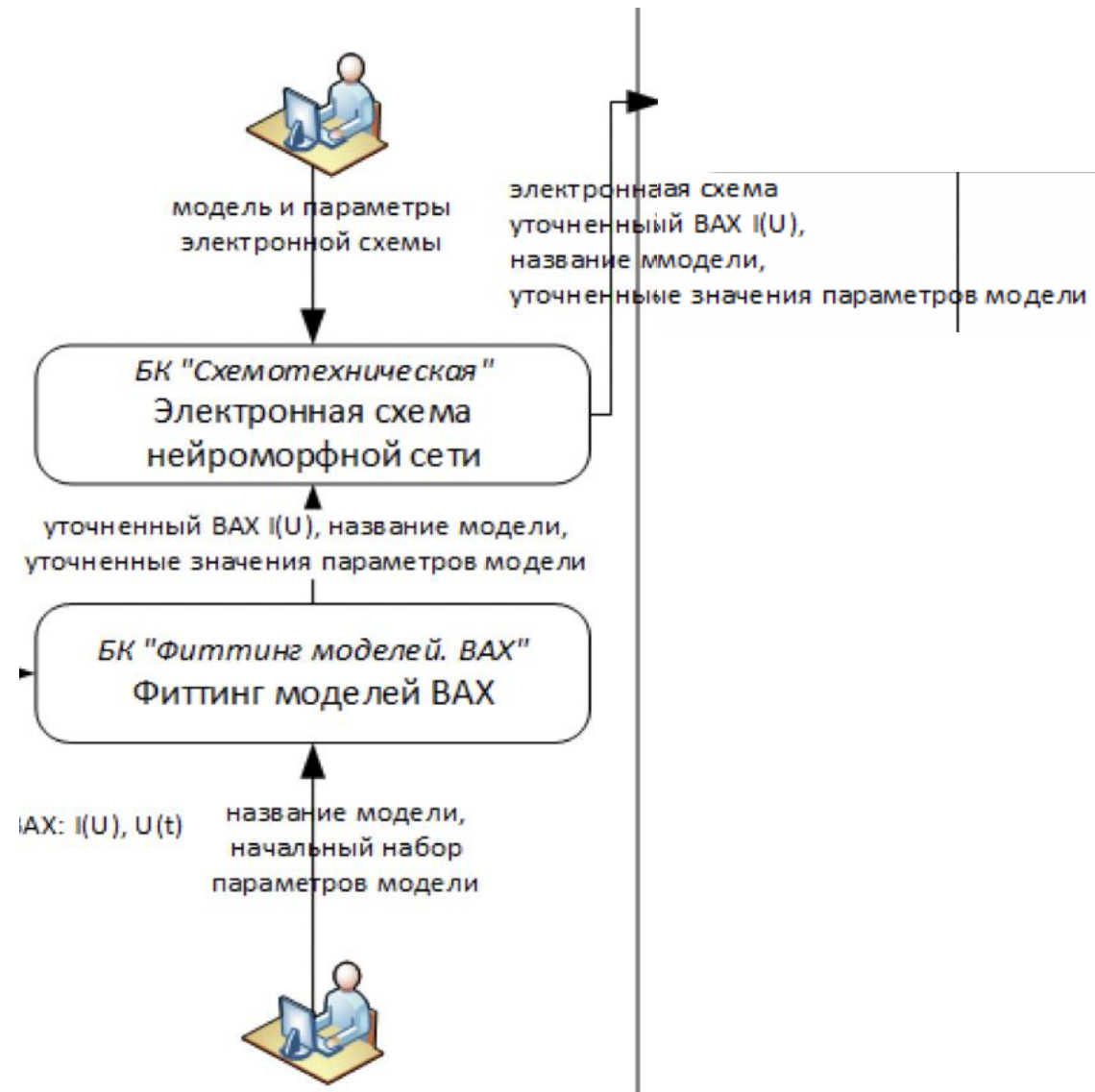


Уровень 3. Композиция для расчета свойств мемристора

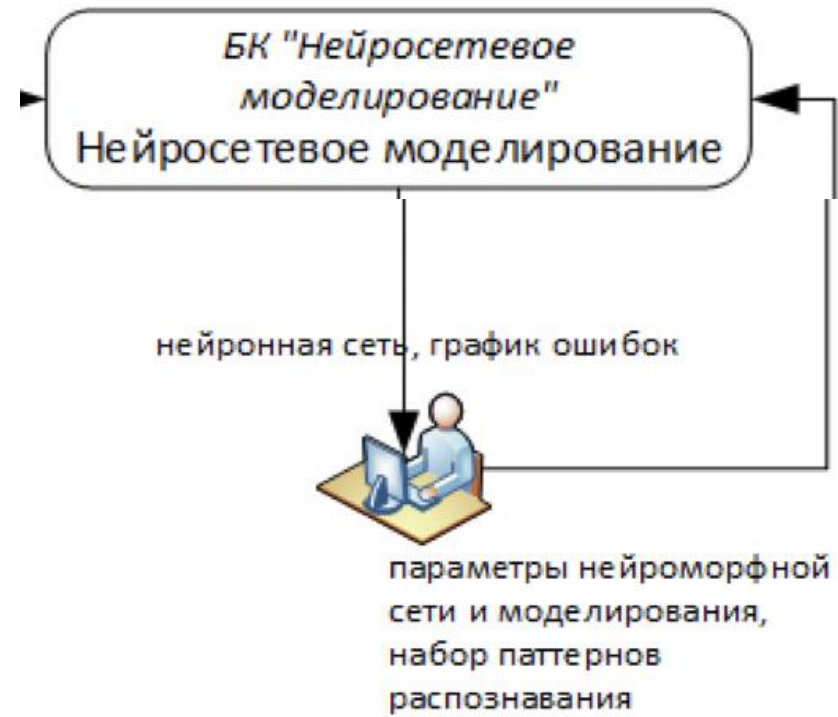
$K_2^{3,1;3,2;3,3;3,4;3,5}$



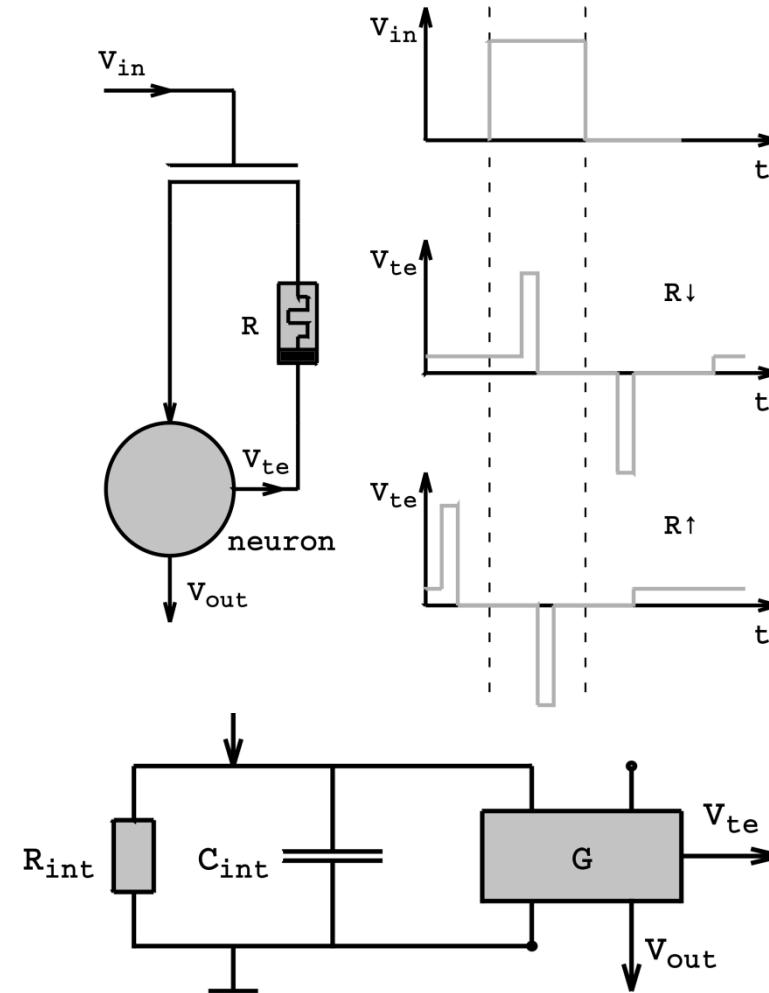
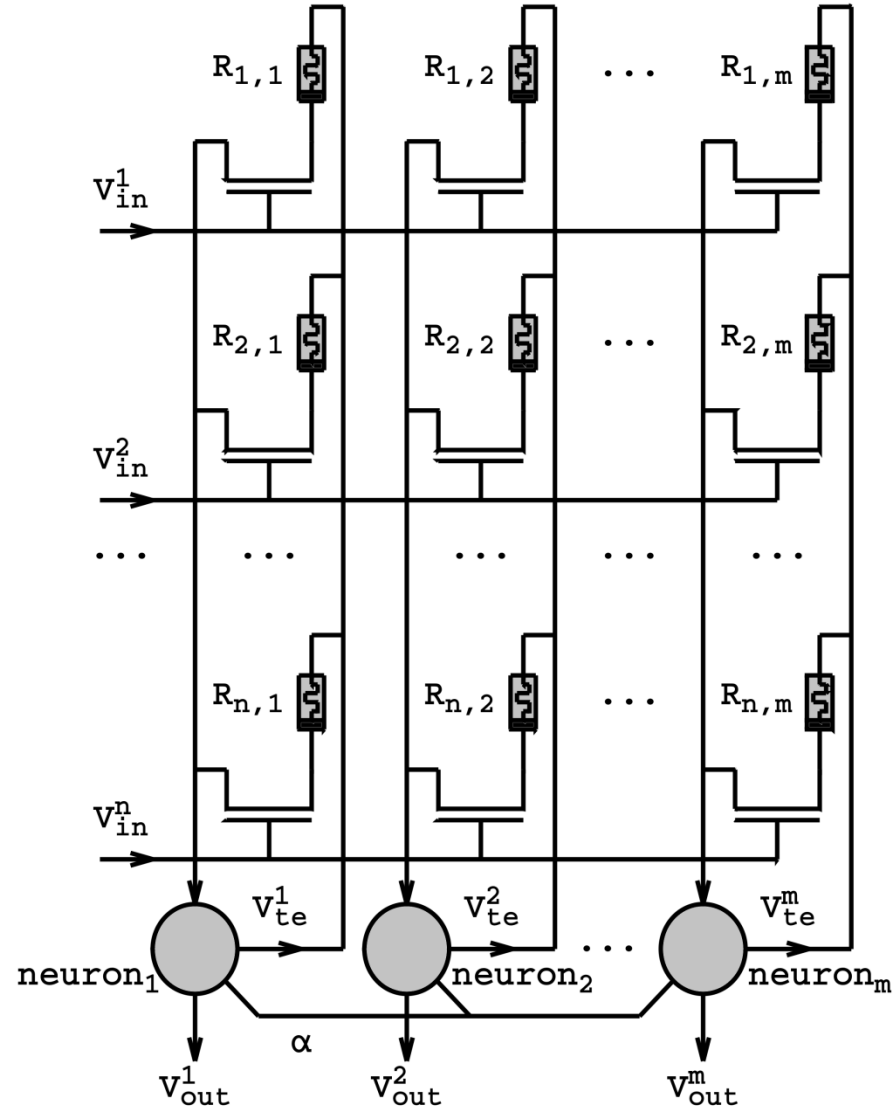
Уровень 4. Формирование нейроморфной сети



Уровень 5. Логический

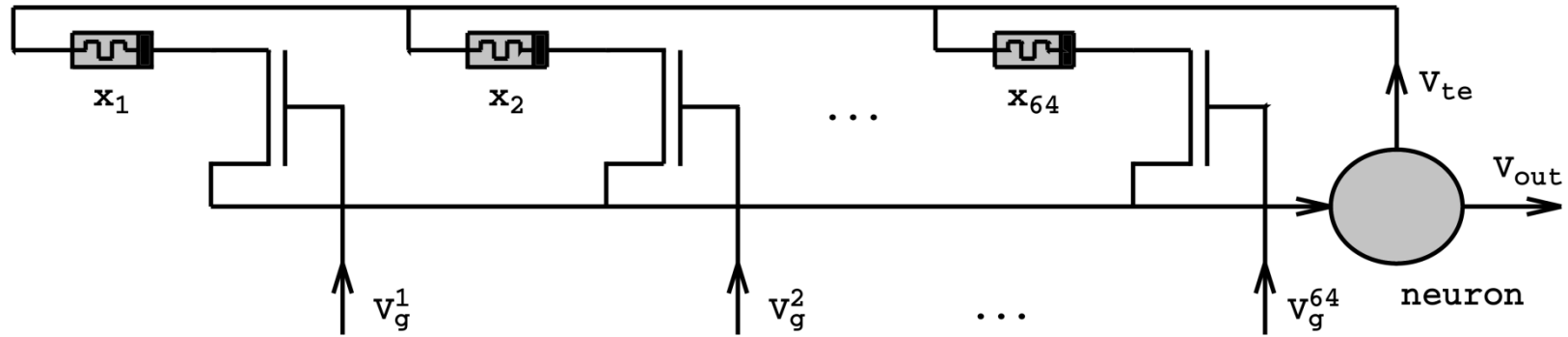


Схемотехническая реализация. Функционирование и обучение

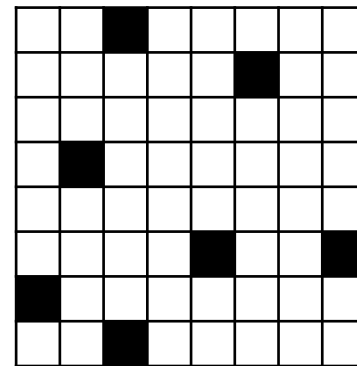
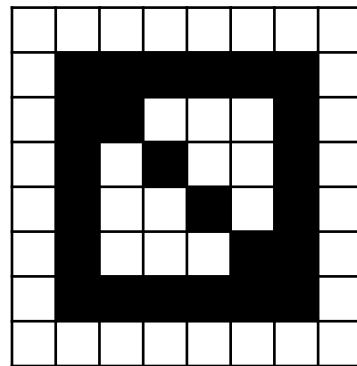


Результаты моделирования

Один нейрон

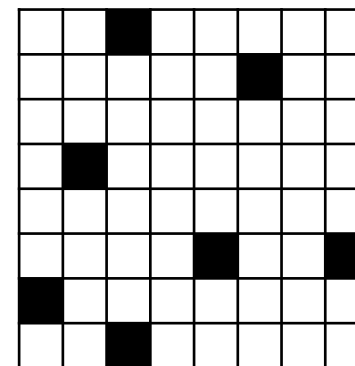
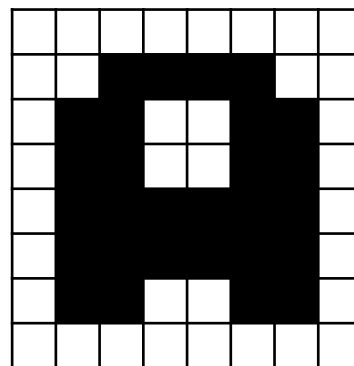
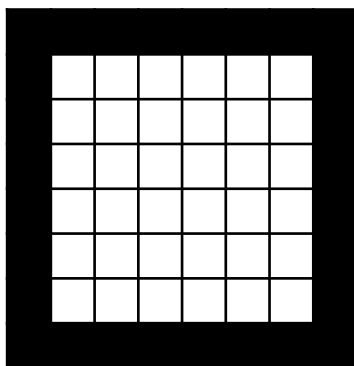
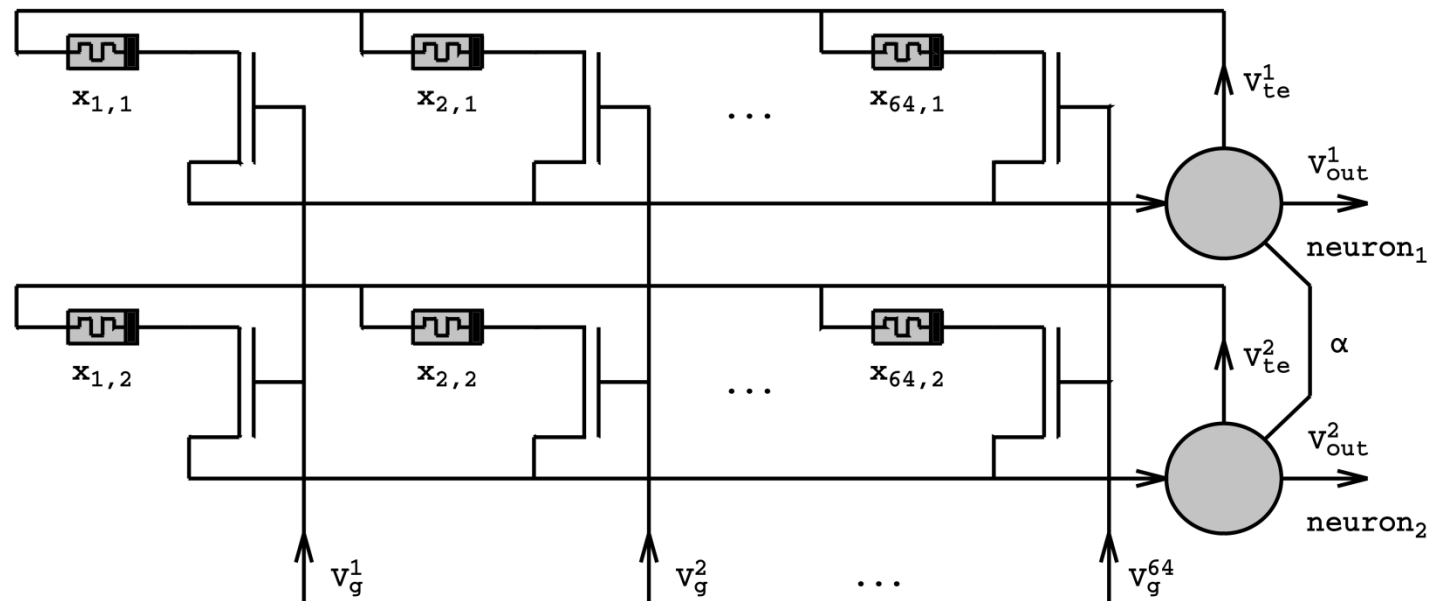


На вход подается с равной вероятностью паттерн или произвольный шум:



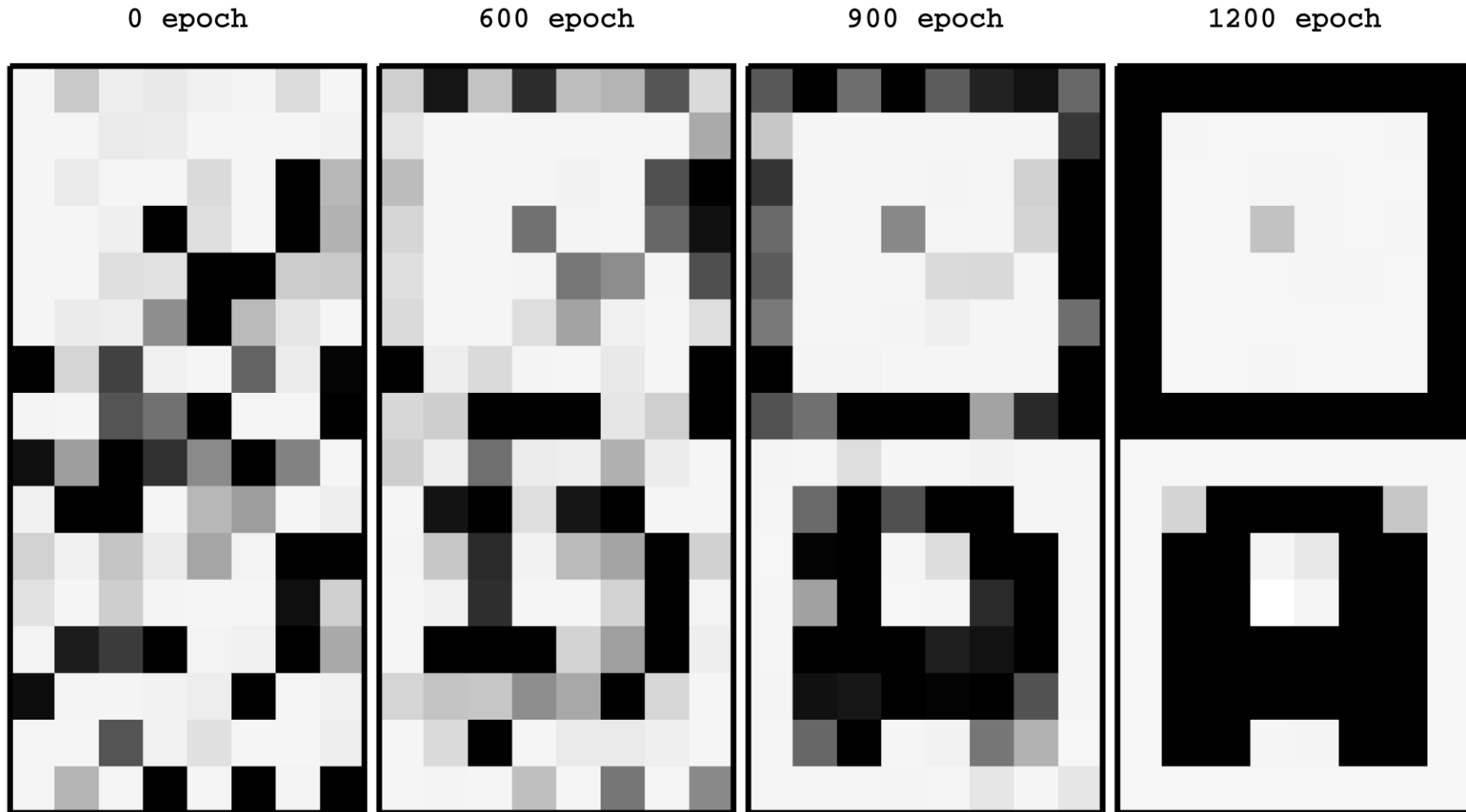
Результаты моделирования

Два нейрона



Результаты моделирования

Изменение весов



Содержание

1. Новые подходы к моделированию сложных многомасштабных систем:

2. Применение новых подходов к решению проблем в области моделирования элементной базы информационно-вычислительных и управляющих систем и материалов.

- Применение многомасштабного подхода и методов анализа данных для моделирования теплопроводности в слоистых структурах
- Многомасштабное моделирование нейроморфных систем

3. Наука, образовательная среда

Заключение

Вычислительный центр имени А.А.Дородницына в составе ФИЦ «Информатика и управление» РАН, отдел «Математическое моделирование гетерогенных систем».

<http://www.ccas.ru>

Базовая кафедра ФИЦ ИУ РАН в МАИ «Информационные технологии в моделировании и управлении». <https://810b.mai.moscow>

Магистерская программа ВМК МГУ «Многомасштабное моделирование и методы анализа данных в естественнонаучных исследованиях».

<http://master.cmc.msu.ru/files/data%20analysis.pdf>

II Международная конференция «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (МММЭК 2020).

<https://mmhs.frccsc.ru/conferences/mmmsec2020/index.html>

Заключение

Переход к цифровому моделированию многомасштабных систем, за счет интеграции, методов многомасштабного моделирования, Machine Learning, знаний в предметной области (создание баз знаний) и использования высокопроизводительных вычислительных ресурсов гибридной архитектуры

даст возможность квалифицированным специалистам в дальнейшем перейти от разработки человеко-машинных систем к созданию Интеллектуальных систем.

Спасибо за внимание !