

К.К. Абгарян

## Применение высокопроизводительных вычислений для решения задач оптимизации при многоуровневом моделировании полупроводниковых наноструктур

**АННОТАЦИЯ.** Применение предсказательного компьютерного моделирования с использованием высокопроизводительных вычислений в настоящее время позволило детально исследовать сложные явления и процессы без натуральных экспериментов. Это в свою очередь дало возможность существенно удешевить и ускорить процессы разработки современных технологий получения новых материалов. Расчет структуры и свойств многослойных полупроводниковых наноструктур в настоящее время возможен с применением многоуровневого моделирования. Такой подход основан на последовательном иерархическом рассмотрении и хранении данных во взаимосвязи «структура-свойство» на различных уровнях структурной иерархии. При этом результаты первопринципного моделирования атомной структуры и электронных свойств наборов, состоящих из 5-100(1000) атомов используются в качестве входных данных для моделирования более сложных структур, состоящих из 1000-1000000 атомов. На каждом уровне масштаба формулируется задача в экстремальной постановке и для ее решения применяются соответствующие методы оптимизации. При этом расчеты на каждом уровне масштаба являются вычислительно-затратными и требуют применения методов параллельных и распределенных вычислений.

*Ключевые слова и фразы:* высокопроизводительные вычисления, многоуровневое моделирование, оптимизация, распределенные и параллельные вычисления.

*Об авторе:*

**Абгарян Каринэ Карленовна**

Заведующая сектором «Математического моделирования инновационных прикладных систем», к.ф.-м.н., ВЦ РАН. Работа выполнена в ВЦ РАН

*e-mail:*([kristal83@mail.ru](mailto:kristal83@mail.ru))

**(фото автора!)**