УДК 004.3:004.9

Трёх-масштабность моделирования и Язык К-Систем: на примере датчика УФ-излучения на основе наностержней из оКсида цинка.

*Матюшкин Игорь Валерьевич, к.ф.-м.н., в.н.с.  
 imatyushkin@niime.ru*

*АО НИИМЭ, г.Москва-Зеленоград,*

Аннотация: Показана релевантность использования формализма К-систем в качестве инструмента реализации трех-масштабных моделей. Методические вопросы рассматриваются на примере матричной структуры на основе 1D наноматериала.

Ключевые слова: нано-структура, К-система, коннекционизм, методы моделирования.

Введение

Обычно нейронные сети и нейроморфные [1] системы рассматриваются как средство обработки данных, но не как прототип для цифрового двойника или имитационной модели нано-прибора. Хорошим, с методической точки зрения, примером такой структуры/прибора является сенсор на ультрафиолет [2], основанный на «лесе» нано-стержней, обладающем развитой поверхностью. Отдельная Технологическая операция создания нано-структуры также может моделироваться в рамках парадигмы коннекционизма [1], например, с помощью клеточного автомата. Сложные, и даже умеренно сложные ( двойной электрический слой [3] в водном растворе) объекты требуют много-масштабности [4] математической модели. Говоря о многомасштабности, имплицитно предполагают иерархию моделей. Актуальна задача свертки информации, полученной в ходе моделирования на определённом уровне. Для уровня квантовой механики и задач вычислительной химии эта избыточность показана в [5]. Поэтому цель работы методическая – связать концепты К-систем с проблемами много-масштабности.

Основные понятия формализма К-систем и их применение в задаче моделирования эффекта замороженной фотопроводимости сенсора.

Сенсор представляет собой поликристаллическую пленку ZnO ‘с электронной проводимостью, на которой выращен «лес» наностержней с кристаллографией вюрцита, облающий развитым кислородным обменом с газовой средой. Базовым модельным представлением является выделение пар «наностержень+ подстилающий микрообъем». К торцам пленки присоединены электроды, замеряющие фототок. Проводимость пленки, по нашему предположению зависит от числа кислородных дивакансий и дефектов на поверхности кристаллитов. Эти величины связаны с диффузией кислорода и его вакансий, от поверхности ноностержня и пленки в её микрообъем. Пул вакансий формируется на световой стадии и служит параметром элемента, как и его геометрические размеры.

Элементом К-системы является такая пара. Верхним уровнем моделирования MS выступает динамика состояния К-системы, где фототок задается интегралом микротоков торцевых элементов. Детальное описание электронно-ионных процессов внутри элемента с помощью функций распределения по пространству для фазовых переменных есть суть среднего уровня (уровень элемента) моделирования **MEl**. Диффузионно-кинетические параметры, прежде всего характерные длительности, определяются на уровне атомистического моделирования **MQh** с применением вычислительной химии, методов Хартри-Фока.

Взаимодействие трех масштабов моделирования отражает (1), где К-система задана кортежом а именно слева-направо: множества элементов; коннектома (тем или иным путем определяющим множество связей); множества (структурированного фазовыми переменными) потенциальных состояний элемента; множества возможных сигналов с семантикой диффузии и дрейфа; алгоритма действия, функции искажения (по умолчанию предполагается её идемпотентность).

(1)

Литерами X,Y для каждого уровня указана входная и выходная информация для модели. Переход от модели к макромодели ( более компактной) указан через процедуру агрегирования Agr. Отношение вхождения отображено знаком принадлежности подмножества. Для атомистического уровня вход есть семейство геометрических конфигураций, а сам уровень дается россыпью моделей (индекс i), нацеленных на получение параметров Pi.

Выводы

Для большинства нано-приборов достаточно трех масштабов моделирования: системы, элемента и атомистического. Алгоритм действия элемента К-системы формализует кинетику превращений внутри элемента и перенос ионов и электронов между объемами вещества, а функция искажения – процессы диссипации на связях. Числовые характеристики алгоритма действия определяются в ходе атомистического моделирования. Таким образом, язык К-систем находится в синергии с трех-масштабностью моделирования. Интервальный подход [4] перспективен при агрегировании статистики численного моделирования на нижестоящем уровне и формировании компактной модели вышестоящего уровня.

Исследование выполнено в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление № 9 «Искусственный интеллект и большие данные в технических, промышленных,природных и социальных системах»

Список использованных источников

1. Матюшкин И.В., Тельминов О.А. Формально-философские вопросы коннекционизма и актуальные проблемы разработки нейроморфных систем// Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2022. – № 2(185). – С. 49-59 DOI: 10.7868/S2410993222020099
2. / D. Roshchupkin, A. Redkin, E. Emelin, S. Sakharov. Ultraviolet radiation sensor based on zno nanorods/La3Ga5SiO14 microbalance // Sensors. – 2021. – Vol. 21, No. 12. – DOI 10.3390/s21124170.
3. M. Becker, Ph. Loche, M. Rezaei, et al. Multiscale Modeling of Aqueous Electric Double Layers // Chemical Reviews. – 2024. – Vol. 124, No. 1. – P. 1-26. – DOI 10.1021/acs.chemrev.3c00307.
4. A. Y. Morozov, K. K. Abgaryan, D. L. Reviznikov. Interval Model of a Memristor Crossbar Network // Physica Status Solidi (B): Basic Solid State Physics. – 2022. – Vol. 259, No. 11. – P. 2200150. – DOI 10.1002/pssb.202200150. – EDN QHFYCU.
5. Горохов С. А., Резванов А. А., Резник А. А. Энергетические барьеры миграции точечных дефектов в TiN из первых принципов // Электронная техника. Серия 3: Микроэлектроника. – 2023. – № 3(191). – С. 5-13. – DOI 10.7868/S2410993223030016.

THREE-SCALE MODELING AND THE TERMS OF C-SYSTEMS: THE EXAMPLE OF A UV RADIATION SENSOR BASED ON ZINC OXIDE NANORODS.

I.V. Matyushkin.

Abstract: The relevance of using the С-systems formalism as a tool for implementing three-scale models is shown. Methodological issues are considered on the example of a matrix structure based on a 1D-nanomaterial.

Key words: nanostructure, C-system, connectionism, methods of modeling.