МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

в материаловедении электронных компонентов

ММЭК-2026

Материалы VIII Международной конференции



19-20 октября 2026г. г.Москва Россия

ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР Информатика и Управление РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

МГУ ВМК

НИИМЭ НИИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ И ЭЛЕМЕНТНАЯ БАЗА ИНФОРМАЦИОННЫХ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Вычислительный центр Федерального исследовательского центра
«Информатика и управление» РАН
Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова
факультет вычислительной математики и кибернетики
Научный совет РАН «Фундаментальные проблемы элементной базы
информационно-вычислительных и управляющих систем и материалов для их создания»
Консорциум «Перспективные материалы и элементная база информационных
и вычислительных систем»

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
в материаловедении электронных компонентов
ММЭК–2026

Материалы VIII международной конференции

19–20 октября 2026 г., Москва

MATHEMATICAL MODELING
in materials science of electronic components
ICM3SEC–2026

Proceedings of the international conference

October 19–20, 2026 Moscow, Russia

МАКС ПРЕСС

МОСКВА – 2026

УДК 519.6.517.958.533.6
ББК 22.2.2218
М34

https://elibrary.ru/rbepqd

Ответственный редактор:

К. К. Абгарян – д-р.физ.-мат.наук, главный научный сотрудник,
руководитель отдела ФИЦ ИУ РАН

М34 **Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов**. ММЭК–2026. 19–20 октября 2026 г., Москва : Материалы VIII Международной конференции. – Москва : МАКС Пресс, 2026. – 116 с. : ил.

ISBN 978-5-317-07692-4

https://doi.org/10.29003/m5475.MMMSEC-2026

Сборник включает в себя научные работы, отражающие современные мировые достижения в области материаловедения электронных компонентов и представляет новые методы математического моделирования и программные решения для разработки прикладных программных систем.

Для специалистов в области вычислительного материаловедения, прикладной математики, математического моделирования, проектирования и автоматизации изделий наноэлектроники, разработчиков современных прикладных программных систем, аспирантов и студентов старших курсов университетов и технических вузов.

Ключевые слова: математическое моделирование, вычислительное материаловедение, прикладная математика, дизайн материалов, электронные компоненты, наноэлектроника, прикладные программные системы, нейроморфные системы.

УДК 519.6.517.958.533.6
ББК 22.2.2218

Mathematical modeling in materials science of electronic component. ICM3SEC–2026. October 19–20, 2026, Moscow : Proceedings of the international conference. – Moscow : MAKS Press, 2026. – 116 p.

ISBN 978-5-317-07692-4

https://doi.org/10.29003/m5475.MMMSEC-2026

The book includes scientific works reflecting modern achievements in the field of materials science of electronic components and presents new methods of mathematical modeling and software solutions for the development of applied software systems.

For specialists in the field of computational materials science, applied mathematics, mathematical modeling, design and automation of nanoelectronic products, developers of modern applied software systems, graduate and postgraduate students.

Key words: mathematical modeling, computational materials science, applied mathematics, materials design, , nanoelectronics, applied software systems, neuromorphic systems.

Статьи публикуются в авторской редакции.
Использованные изображения получены из открытых источников.

ISBN 978-5-317-07692-4

© Авторы, 2026
© Оформление. ООО «МАКС Пресс», 2026

ОГЛАВЛЕНИЕ

1. A. Современные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов с заданными свойствами, включая применение новых методов и средств анализа больших данных 5

Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Современные проблемы создания высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры для синтеза новых материалов в условиях современных вызовов 6

Абгарян К.К., Гаврилов Е.С., Кулешов И.А., Ерещенко А.В., Сеченых П.А. Аналитическая база данных в составе системы автоматизированного проектирования ЭКБ для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM, FeRAM, MRAM (ПО «CoBa») 15

Денисов С.А., Зацаринный А.А. Подход к оценке производительности гетерогенных высокопроизводительных вычислительных комплексов 20

Мочалова Ю.Д. Итеративная двунаправленная рекуррентная нейронная сеть для предсказания разрушения композитных материалов 26

Нехаев А.А. Распределённое хранение данных многомасштабного моделирования материалов с контролем погрешности 29

Сеченых П.А. Сервисы обработки данных для моделирования свойств энергонезависимой памяти 32

Щепетов Д.С. Библиотека для инференса современных нейросетей на аналоговой платформе 35

2. B. Квантовые технологии. Проблемы квантового моделирования 39

Корякова Е.Е., Ефремов А.М. Физико-химические свойства плазмы C_2F_6 в индуктивно-связанном разряде 40

Турин В.О., Андреев П.А., Скрипченко А.Н., Бурцев Е.И., Турина А.В., Щеглов И.В., Илюшина Ю.В. Длинноволновые колебания в модифицированной цепочке масса-в-массе 44

3. C. Математическое моделирование в структурном материаловедении (многоуровневые, многомасштабные модели, виртуальные модели и т.д.) 49

Абгарян К.К. Интеллектуальные системы на базе многомасштабных подходов для проектирования в микроэлектронике 50

Богачев И.С., Оксаниченко Ф.В. Применение методов машинного обучения для прогнозирования выходных характеристик плазмохимического травления поликремния в смеси $HBr/Cl_2/Ar$ 55

Бурцев Р.Е., Оксаниченко Ф.В. Исследование применения физически-информированных нейронных сетей для ускорения сеточных методов моделирования газовой динамики в плазменных реакторах 58

Генин Г.К., Кобелев В.А., Тельминов О.А. Реализация нейронных сетей на плис: обзор современных подходов и профилирование ускорителя 61

Журавлев А.А., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Задачи оптимизации в моделировании элементов FeRAM 64

Зубов Д.Н., Обыденнов ДВ., Осипов Н.Н., Порохов Н.В., Шибалов М.В., Ашарчук И.М., Вовк Н.А., Тархов М.А. Итерационный алгоритм дозовой коррекции для точной полутоновой литографии 67

Инь Фэй, Баринов А.А., Лю Шисян. Фононный теплоперенос в графеновых нанолентах со смешанным типом границ 69

Лю Шисян, Баринов А.А., Хвесюк В.И. От микроскопических свойств фононов к теплопереносу в микро- и наноструктурах 77

Простомолотов А.И., Верезуб Н.А. Моделирование течений на поверхности расплава в процессе Чохральского 81

Резник А.А., Бажанов Д.И. Квантово-химический расчет коэффициентов диффузии кислорода в оксиде гафния 84

Спирина А.А., *Шварц Н.Л.* Рельеф ступеней вицинальных поверхностей GaAs в зависимости от направления разориентации подложек 87

Фарисов Д.Р., Бажанов Д.И. Применение символьной регрессии для моделирования взаимодействия Казимира-Полдера 90

4. D. Моделирование размерных, радиационных, поверхностных и других дефектов в полупроводниковой наноэлектронике 95

Стрельцов Н.А., Кобелева С.П. Роль нейтральных дефектов в формировании области гомогенности CdTe 96

5. E. Моделирование работы многоуровневых элементов памяти для компьютеров следующего поколения 101

Морозов А.Ю., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Параметрическая идентификация стохастической модели элементов магниторезистивной памяти 102

Sobolev N.A. Material-related problems of neuromorphic technologies . 105

7. G. Проблемы обеспечения надежности ЭКБ микроэлектроники и систем на ее основе 107

Тельминов О.А. Динамический выбор траектории аппаратного исполнения поведенческих функций робота 108

8. H. Методы математического моделирования в фотонике 111

Кобелев В.А., Тельминов О.А. Коллапс признакового пространства при обучении сиамской сети контрастной функцией потерь в задаче локализации снимка 112

1. А

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ СОЗДАНИЯ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ ДЛЯ СИНТЕЗА НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ С ЗАДАННЫМИ СВОЙСТВАМИ, ВКЛЮЧАЯ ПРИМЕНЕНИЕ НОВЫХ МЕТОДОВ И СРЕДСТВ АНАЛИЗА БОЛЬШИХ ДАННЫХ

https://doi.org/10.29003/m5476.MMMSEC-2026/6-14

СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ СОЗДАНИЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНОЙ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ИНФРАСТРУКТУРЫ ДЛЯ СИНТЕЗА НОВЫХ МАТЕРИАЛОВ В УСЛОВИЯХ СОВРЕМЕННЫХ ВЫЗОВОВ

***Зацаринный Александр Алексеевич*[1],**
д.т.н., г.н.с., научный руководитель отделения ФИЦ ИУ РАН,
e-mail: alex250451@mail.ru

***Абгарян Каринэ Карленовна*[1],**
д.ф.-м.н., г.н.с., зав. отделом ФИЦ ИУ РАН,
e-mail: kristal83@mail.ru

[1] *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук, г. Москва, ул. Вавилова дом 44/2*

Аннотация. В работе показано, что в настоящее время разработка новых материалов с заданными свойствами в различных областях промышленности ведется ускоренными темпами. Важнейшим компонентом таких разработок является математическое моделирование. При этом применение современных методов моделирования предполагает использование высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры (ВВИ). Приведены общемировые тенденции в этой области и место России. Рассматриваются проблемы создания ВВИ для синтеза новых материалов в условиях современных вызовов. Сформулированы особенности и основные направления научных исследований моделирования.

Ключевые слова: математическое моделирование, синтез новых материалов, материалы с заданными свойствами, многомасштабное моделирование, высокопроизводительная исследовательская инфраструктура.

Введение

На пленарном заседании Форума «Микроэлектроника-2026» (Сочи, Федеральная территория «Сириус») первый заместитель Председателя Правительства Д.В. Мантуров заявил, что «…*за последние пять лет объём производства отечественной радиоэлектроники почти удвоился, а число позиций в реестре увеличилось в 10 раз. За этими цифрами стоит расширение российского предложения — от электронных компонентов до сложных модулей и программно-аппаратных комплексов. Важно, чтобы этот рост укреплял технологический суверенитет отрасли*» [1]. Д.В. Мантуров подчеркнул важность развития российской электронной

промышленности, как одной из ключевых отраслей современной экономики, а также особо отметил необходимость развития научных исследований в этой отрасли, включая область материалов и химических продуктов. Важно, что интенсивное развитие микроэлектроники осуществляется, несмотря на жесткое санкционное давление Запада.

В настоящее время Минпромторг, производители и разработчики электроники совместно готовят новую Стратегию развития микроэлектронной отрасли в России, т.к. существующая, принятая до 2030 г., по мнению экспертов, не соответствует реалиям российского рынка, на котором продолжает доминировать импорт [2]. Вместе с тем, отметим серьезное продвижение в области литографии, которая является одним из ключевых процессов микроэлектронного производства. Так, замглавы Минпромторга В.В. Шпак заявил о постановке в этом году на серийное производство российского литографа на 350 нанометров, а также завершении разработки литографа с топологией на 130 нанометров к концу года [3]. Интересно, что тем самым подтверждены ранее продекларированные результаты [4], которые демонстрировались на Форуме «Микроэлектроника-2025».

При этом важным компонентом в развитии электронной отрасли является научная составляющая, в рамках которой выполняются исследования по синтезу новых материалов на основе математического моделирования.

Приведенные выше факторы усиливают актуальность развития методов математического моделирования синтеза новых материалов [5,6]. При этом развитие актуальных методов в условиях современных вызовов не может осуществляться без использования высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры (ВВИ) [7,8].

В работе рассматриваются ключевые проблемные вопросы создания современной ВВИ для синтеза новых материалов на основе математического моделирования.

1. ВВИ — одно из ключевых условий развития инновационных технологий

16 марта 2026 года премьер-министр РФ М.В. Мишустин заявил об утверждении дорожной карты по развитию высокопроизводительных вычислений и суперкомпьютерной инфраструктуры

в России. Расширение сети суперкомпьютерных центров он назвал стратегическим направлением [9]. Другими словами, высокопроизводительная вычислительная инфраструктура (ВВИ) в последние годы превращается в один из ключевых компонентов обеспечения технологического лидерства и экономической конкурентоспособности государства на мировой арене, без которого невозможно развитие технологий обработки больших данных, искусственного интеллекта (ИИ), создания перспективных летательных аппаратов, а также синтеза новых материалов [10].

В настоящее время научное сообщество объективно переходит к стадии фундаментальных научных исследований, получившей определение четвертой парадигмы, суть которой в том, что прорывные научные результаты могут быть получены только на основе анализа накопленных данных в заданной предметной области [11,12]. В связи с этим, отметим факторы, которые обусловливают необходимость применения ВВИ для научных исследований [13]:

– рост сложности научных задач, включая усложнение математических моделей, проведение масштабного математического моделирования, анализ данных с крупных экспериментальных установок (например, Большого адронного коллайдера, геномных проектов);

– увеличение объёмов данных, обусловленное тем, что эксперименты и наблюдения в современной науке генерируют данные в пета- и экзабайтных масштабах (например, в геномных исследованиях, астрофизике или физике высоких энергий).

– развитие междисциплинарных исследований (физика, математика, биология, материаловедение, информатика и другие дисциплины), которое требует интеграции разнородных вычислительных ресурсов, программного обеспечения и данных с использованием гибкой и масштабируемой инфраструктуры;

– технологические тренды и современные гибридные архитектуры (CPU, GPU, TPU и др.), которые позволяют повысить эффективность решения задач в области ИИ, материаловедения, биомедицины и робототехники, однако требуют новых подходов к организации вычислительного процесса, управлению ресурсами и разработке программного обеспечения;

– ответ на «большие вызовы» (изменение климата, глобальные эпидемии, ресурсные ограничения, угрозы безопасности и др.), т.к. в их разрешении фундаментальная наука играет ключевую роль;

– международное сотрудничество и конкуренция, т.к. участие в глобальных научных проектах (например, в проектах класса «мегасайенс») требует инфраструктуры, соответствующей международным стандартам (отставание в развитии ВВИ может привести к исключению из таких проектов, снижению научного авторитета и престижа страны, а также ограничению доступа к передовым технологиям);

– ускорение научно-технологического развития, т.к. результаты фундаментальных исследований всё быстрее трансформируются в прикладные разработки и инновации, а ВВИ ускоряет процесс от внедрения новых научных результатов;

– обеспечение технологического суверенитета на основе развития собственной высокопроизводительной инфраструктуры становится одним из факторов обеспечения национальной безопасности;

– подготовка кадров и удержание талантов, т.к. наличие современной инфраструктуры привлекает и удерживает квалифицированных учёных и инженеров, прежде всего молодых.

При этом наиболее остро необходимость создания и развития ВВИ обусловливается интенсивным развитием технологий ИИ. Это определяется рядом факторов, приведенных в работе [14].

Отметим, что ВВИ часто не совсем корректно ассоциируется с совокупностью высокопроизводительных вычислительных средств: серверы, кластеры, хранилища и т.д. Современная ВВИ представляет собой интеграцию не только аппаратных и программных средств, но также мощных сетевых ресурсов, эффективных средств мониторинга и управления, средств жизнеобеспечения, а также высококвалифицированного кадрового потенциала. Именно в таком представлении ВВИ способна обеспечить исследователям и разработчикам доступ к вычислительным мощностям, данным и сервисам для решения широкого спектра вычислительных задач в различных областях, включая синтез новых материалов.

Таким образом, в настоящее время, ВВИ становится не просто инструментом, а необходимым условием для проведения прорывных фундаментальных исследований, решения глобальных задач и обеспечения научно-технологического прогресса.

2. Общемировые тренды в развитии ВВИ. Место России

Динамика развития мировых суперкомпьютеров и основные направления архитектурных изменений достаточно полно отражаются в рейтинге TOP500 [15]. С 2010-х годов на смену архитектурам на CPU лидирующие позиции стали занимать гибридные архитектуры с активным использованием графических процессоров (GPU), которые ориентированы на задачи параллельной обработки данных и обеспечивают существенно большую плотность вычислений на ватт. Анализ TOP500 за последние пять лет показал, что совокупная HPL-мощность TOP500 выросла примерно в пять раз (от 2,2 Эфлопс в 2020 году до 11 Эфлопс в 2026 году). Если первая «подтвержденная» экзасистема (1,102 Эфлопс) Frontier (США) появилась в июне 2022, то уже в 2026 году число «экзофлопов» выросло до пяти. Интересно, что в последнем рейтинге первое место занял китайский суперкомпьютер LineShine, запущенный Национальным суперкомпьютерным центром Китая в Шэньчжэне в мае 2026 г. Он обладает огромной производительностью в 2,2 EFLOPS (это 80% от его теоретической производительности). Этот суперкомпьютер — первый в истории TOP500 с производительностью более двух экзафлопс с использованием только центральных процессоров.

Важной тенденцией является повышение доли суперкомпьютерных систем, используемых для научных исследований (в академическом и университетском секторе, в частных и государственных структурах). Доля промышленного сегмента сократилась с 50% (2021 гг.) до 30% (2025 г.). Только за 2024-2026 годы в мире введено 76 суперкомпьютеров, основным предназначением которых является проведение научных исследований. Явно выделяются три мировых центра развития ВВИ: США, Европа и Китай [10].

В США ВВИ развивается в рамках программы Министерства энергетики, Министерства обороны, Национального научного фонда, а также за счет компаний-технологических лидеров, активно вкладывающих средства в развитие коммерческих платформ. По состоянию на середину 2025 года на территории США размещены 4 из 10 самых мощных суперкомпьютеров мира, причем 3 из них используются для научных исследований (El Capitan, 1,74 Эфлопс; Frontier, 1,3 Эфлопс; Aurora, 1,01 Эфлопс).

В десятку также входят суперкомпьютеры Германии (JUPITER Booster), Италии (два — HPC7 и HPC6), США (Eagle), Японии (Fugaku) и Швейцарии (Alps). Производительность этих суперкомпьютеров составляет от 435 до 570 PFLOPS.

Лидирующие позиции занимает Китай, в котором сделана ставка на централизованные государственные программы, в частности программу «Восточные данные, западные вычисления» (Eastern Data, Western Computing, EDWC) [16], которая предполагает создание сети региональных центров обработки данных, объединённых в единую инфраструктуру.

Несмотря на различия в стратегиях, все ведущие центры развития ВВИ движутся в направлении интеграции высокопроизводительных вычислений, ИИ и «больших данных» в единую производственную цепочку.

Современное состояние суперкомпьютерной отрасли России характеризуется противоречивыми тенденциями: с одной стороны, существует признанная научная школа и накопленный опыт эксплуатации высокопроизводительных систем, с другой — наблюдается нарастающее технологическое отставание на фоне интенсивно развивающихся мировых процессов. Это отставание усугубляется текущими геополитическими ограничениями, связанными с санкциями. По состоянию на июнь 2026 года в список Top500 входят всего пять российских суперкомпьютеров [20] с общей производительностью 71,457 Пфлопс (примерно 1,0 % от общемировой). Все суперкомпьютеры находятся в жесткой зависимости от зарубежных комплектующих, что в текущих условиях создает значительные риски для их модернизации и устойчивого развития.

В настоящее время Президентом России поставлена цель увеличения совокупной мощности отечественных суперкомпьютеров к 2030 году не менее, чем в десять раз [30]. Так, в рамках федерального проекта планируется достижение совокупной мощности супер-компьютеров для ИИ в 300 петафлопс к 2027 году и 1 экзафлопс к 2030 году. В 2025 году Президентом поручено Правительству рассмотреть создание национального суперкомпьютерного центра для обеспечения научных исследований в области машинного обучения и развития ИИ.

При этом развитие ВВИ требует подготовки нового поколения специалистов на стыке высокопроизводительных вычислений, компьютерных наук и прикладных научных дисциплин.

3. Актуальные области применения результатов моделирования синтеза новых материалов с использованием ВВИ

Большинство задач моделирования синтеза новых материалов с заданными свойствами являются ресурсоемкими и могут быть эффективно решены только с использованием ВВИ. Основные из них рассмотрены в [17,18]. Вместе с тем, в настоящее время значимость синтеза новых материалов с каждым годом возрастает и все больше приобретает характер стратегически важной сквозной технологии, определяющей прогресс в самых разных отраслях промышленности, в которых используемые материалы достигли физических пределов и необходимо применение материалов с принципиально новыми функциональными свойствами. Отметим наиболее значимые отрасли.

1. Энергетика и электротехника, в рамках которых осуществляется переход к возобновляемой энергетике и электротранспорту.
2. Электроника, фотоника и квантовые технологии.
3. Авиакосмос, транспорт, оборона и безопасность (материалы, работающие в экстремальных условиях).
4. Медицина и биотехнологии (персонализированные и «умные» системы).
5. Экология и устойчивое развитие (материалы для снижении антропогенной нагрузки).
6. Строительство и инфраструктура.
7. Промышленность и сенсорика.
8. Нефтегазохимия и катализ.

Таким образом, синтез новых материалов наиболее актуален в областях, в которых требуется междисциплинарность, мультифункциональность, экстремальные характеристики или принципиально новые физические эффекты. Это прежде всего энергетика, электроника, медицина, авиакосмос, экология и квантовые технологии. Именно эти области сегодня формируют спрос на высокопроизводительные платформы синтеза новых материалов.

Заключение

Таким образом, в работе показано, что:

– Создание новых материалов объективно выдвигается в одно из стратегических направлений развития отечественной промышленности. в условиях современных угроз и вызовов.

– Новые материалы являются важнейшим компонентом, по существу, — драйвером инновационного развития различных отраслей российской промышленности, включая оборонную сферу.

– Синтез новых материалов на основе методов математического моделирования — сложная наукоемкая задача, успешное решение которой возможно с использованием отечественной высокопроизводительной среда для научных исследований, обладающей комфортным интерфейсом для пользователей, гибкостью в настройке ресурсов, высокой производительностью и надежностью.

– Международные конференции ММЭК вносят достойный вклад в развитие научной составляющей проблемы синтеза новых материалов в России.

Литература

1. Денис Мантуров принял участие в работе форума «Микроэлектроника 2026» https://microelectronica.pro/news/government/manturov_20260928
2. Для микроэлектронной отрасли готовят новую стратегию https://www.kommersant.ru/doc/8955534
3. Василий Шпак, Минпромторг: российский литограф на 130 нанометров будет готов до конца года. https://dzen.ru/a/areps65MNHd0Deje?ysclid=mupgxfk2nf718443272
3. Первый отечественный литограф https://www.netall.ru/economy/news/1503062.html
4. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Факторы, определяющие актуальность создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках реализации приоритетов научно-технологического развития России // Материалы I Международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (ММЭК-2019). Москва: МАКС Пресс. С. 8–11.
5. Zatsarinny A.A., Abgaryan K.K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for synthesizing new materials in implementing the priorities of scientific and technological development of Russia// Russian Microelectronics. 2020. Т. 49. № 8. С. 600–602.
6. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Актуальные проблемы создания исследовательской инфраструктуры для синтеза новых материалов в рамках цифровой трансформации общества //Материалы 2-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (ММЭК-2020). Москва: МАКС Пресс. С. 3–13.
7. Об утверждении дорожной карты по развитию высокопроизводительных вычислений и суперкомпьютерной инфраструктуры в России. Распоряжение Правительства РФ от 12 марта 2026 № 482-р, https://ria.ru/20260316/rossija-2080942388.html
8. Зацаринный А.А., Иванов К.В. Актуальные вопросы создания высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры для научных исследований // Информационные технологии и вычислительные системы. 2026. № 2. С. 3–12.

9. Платонова С.И. Логика научного развития: парадигма Т. Куна и четвертая парадигма Дж. Грея // Контекст и рефлексия: философия о мире и человеке. 2020. Том 9. № 1А. С. 144–151.

10. Зацаринный А.А. Научно-практические аспекты представления науки как отрасли цифровой экономики // Радиолокация, навигация, связь: Сборник трудов XXIV Международной научно-технической конференции (17–19 апреля 2018 г.). Том 1. — Воронеж: ООО «Вэлберн». 2018г. С. 140–149.

11. Зацаринный А.А. Высокопроизводительная инфраструктура — как инструментальная основа фундаментальных научных исследований в области искусственного интеллекта // В сб.: Радиолокация, навигация, связь. Сборник трудов XXXII Международной научно-технической конференции, посвященной 65-летию ИППИ РАН им. А.А. Харкевича. В 5-ти томах. Воронеж, 2026. С. 1–14.

12. Зацаринный А.А. Об актуальности фундаментальных научных исследований в области искусственного интеллекта // В сб.: Информатика: проблемы, методы, технологии. Материалы XXVI Международной научно-практической конференции им. Э.К. Алгазинова. Воронеж, 2026. С. 4–18.

13. Рейтинг TOP500 за июнь 2026. https://serverflow.ru/blog/stati/reyting-top500-za-iyun-2026-chto-novogo-v-spiske-samykh-moshchnykh-superkompyuterov/

14. Zhang N., Duan H., Guan Y., Mao R., Song G., Yang J., Shan Y. The “Eastern Data and Western Computing” Initiative in China Contributes to Its Net-Zero Target [Текст, Электронный ресурс] // Engineering. — 2025. — Vol. 52. — P. 256–261.

15. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. О задачах и методах математического моделирования для решения задач синтеза новых материалов в условиях современных вызовов // Материалы 7-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (ММЭК-2025). Москва: МАКС Пресс. С. 8–22.

16. Зацаринный А.А., Абгарян К.К. Современные подходы к решению проблемы синтеза новых материалов с заданными свойствами// Материалы 6-й международной конференции «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (ММЭК-2024). Москва: МАКС Пресс. С. 8–22.

17. Zatsarinny A.A., Abgaryan K.K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for synthesizing new materials in implementing the priorities of scientific and technological development of Russia// Russian Microelectronics. 2020. Т. 49. № 8. С. 600–602.

18. www.top500.org

CONTEMPORARY CHALLENGES IN DEVELOPING HIGH-PERFORMANCE COMPUTING INFRASTRUCTURE FOR THE SYNTHESIS OF NEW MATERIALS IN THE CONTEXT OF MODERN-DAY DEMANDS

Zatsarinny A.A., Abgaryan K.K.

Keywords: mathematical modeling, synthesis of new materials, materials with tailored properties, multiscale modeling, high-performance research infrastructure.

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m5477.MMMSEC-2026/15-20

АНАЛИТИЧЕСКАЯ БАЗА ДАННЫХ В СОСТАВЕ СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ЭКБ ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЯЧЕЕК ЭНЕРГОНЕЗАВИСИМОЙ ПАМЯТИ НА ОСНОВЕ ТЕХНОЛОГИЙ ReRAM, FeRAM, MRAM (ПО «CoBa»)

Абгарян Каринэ Карленовна,
д.ф.-м.н., заведующая отделом[1], профессор[2],
kristal83@mail.ru
Гаврилов Евгений Сергеевич,
к.т.н., научный сотрудник[1],
eugavrilov@gmail.com
Кулешов Игорь Александрович,
инженер-исследователь[1], аспирант[2],
alpkuleshov@gmail.com
Ерещенко Алексей Владимирович,
м.н.с. [1], ereshchenko.alexey@yandex.com, аспирант[1]
Сеченых Полина Алексеевна, *м.н.с. [1],*
p-sechenyh@mail.ru

[1] ФИЦ ИУ РАН, г .Москва,
[2] ВМК МГУ, г. Москва

Аннотация. В работе рассмотрены основные компоненты системы автоматизированного проектирования ячеек энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM, MRAM, FeRAM (ПО «CoBa»), в которой реализована многомасштабная схема моделирования. Аналитическая база данных в составе данной системы служит для накопления характеристических признаков входных данных и результатов расчетов в составе наборов данных, используемых аналитиком-исследователем для обучения и верификации прогнозных моделей.

Ключевые слова: система многомасштабного моделирования, энергонезависимая память, ReRAM, FeRAM, MRAM, анализ данных.

Введение

Для разработки высокопроизводительной вычислительной техники нового поколения необходимо создать альтернативную энергонезависимую память способную хранить данные при отсутствии питания, с высокой плотностью записи, низкой потребляемой мощностью, высокой надежностью и высокой скоростью

переключения. К перспективным можно отнести элементы памяти, базирующиеся на технологиях ReRAM, FeRAM, MRAM. Каждая из данных технологий обладает своим набором особенностей, однако в целом, построенные на них элементы памяти обладают рядом преимуществ, по сравнению с традиционной памятью на архитектуре фон Неймана, в том числе энергоэффективностью, компактностью, долговечностью хранения и другими. Программные средства системы автоматизированного проектирования ЭКБ для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM, FeRAM, MRAM (ПО «CoBa») позволяют ускорить и удешевить процесс создания подобных устройств. В процессе выполнения квантово-механических и теоретических расчетов элементов памяти, накапливаются данные, которые могут быть использованы для обучения и верификации различных математических моделей более высокого уровня. Для этих целей предусмотрена возможность публикации расчетов в наборы данных (датасеты) аналитической базы данных.

Архитектура аналитической базы данных

ПО «CoBa» построена по принципу специализированного многоуровневого ПО, в котором реализована многомасштабная схема компьютерного моделирования [1–3]. В состав пользовательского интерфейса входят множество расчетных модулей для моделирования на квантово-механическом уровне (для материалов), наномасштабном уровне (для моделей устройств), расчетные модули для полуэмпирических моделей в режимах обучения на экспериментальных данных, а также решения обратных задач. Перечень расчетных модулей не может быть расширен пользователем без привлечения разработчиков, однако результаты серий расчетов (в основном, теоретических), могут быть использованы для определения зависимостей и даже разработки внешних, по отношению к ПО CoBa математических моделей. Для выполнения серий расчетов, доступен программный интерфейса (API), который может быть использован, например, в Python-программе для выполнения серий расчетов с варьированием необходимых параметров. Результаты расчетов могут быть опубликованы в датасет аналитической базы данных, который в дальнейшем используется как источник для построения внешних моделей.

На рисунке 1 представлена архитектура ПО «CoBa» с акцентом на аналитическую базу данных.

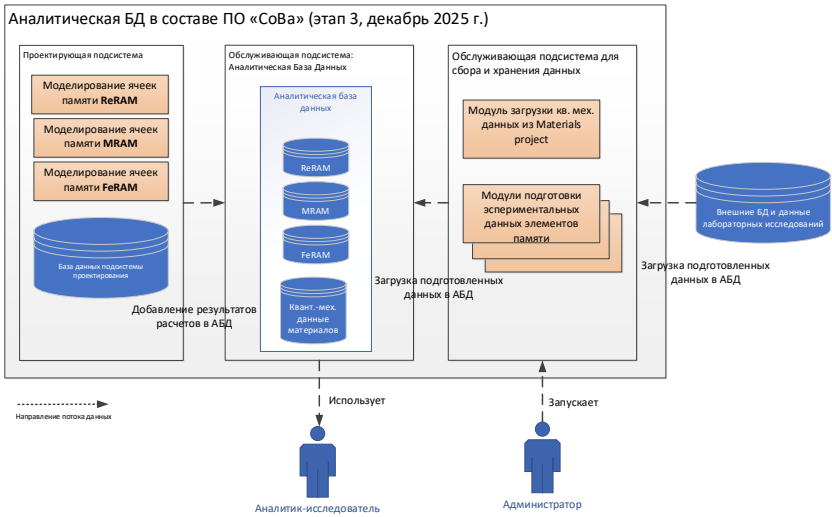


Рисунок 1 — Аналитическая база данных
в составе ПО «CoBa»

Аналитическая база данных в составе ПО «CoBa» предназначена для структурированного хранения результатов ключевых расчетов характеристик материалов и/или устройств FeRAM, MRAM, ReRAM, а также квантово-механических расчетов. Предполагается хранение множества наборов данных в табличном виде, в зависимости от типа устройства или расчета.

Наполнение конкретного набора данных (dataset) зависит от описываемого в нем расчета и предсказываемых данным расчетом свойств, а также должно содержать общие поля с метаданными.

Для хранения данных в аналитической БД используется документная модель (СУБД MongoDB). Ключевым коллекцией документов является dataset_metadata, в которой хранится список всех датасетов в аналитической БД, их описание и схема данных. Принадлежность датасета к типу памяти или свойствам материала определяется тегами (полем tags). В процессе загрузки данных в датасет, добавляется документ в коллекцию dataset_batch, где хранится метаинформация о загруженных данных (кто, когда, откуда загрузил). Сами данные хранятся построчно в коллекциях dataset_row_<код датасета>.

Интерфейс аналитической базы данных

Пользовательский интерфейс аналитической базы данных интегрируется в интерфейс ПО «CoBa» через пункт в верхнем меню и состоит из следующих экранов:

- экран списка датасетов;
- экран просмотра датасета;
- экран визуализации данных (рис. 2).



Рисунок 2 — Интерфейс экрана визуализации данных аналитической БД

Интерфейс позволяет отфильтровать данные по любому полю, просмотреть их в табличном или графическом виде, построив зависимость по проекциям любых численных полей на оси X и Y, а также импортировать данные из внешнего CSV файла (в случае, если расчеты были выполнены вне ПО «CoBa»). Основным пользовательским сценарием является экспорт данных для анализа данных во внешних инструментах (например, Python Jupiter Notebook).

Выводы

В работе представлены основные блоки ПО «СоВа» для проведения многомасштабного моделирования ячеек энергонезависимой памяти на технологиях ReRAM, FeRAM, MRAM, архитектура аналитической базы данных, а также пользовательский интерфейс с описанием основных функций. Разработанная система предназначена для ученого-исследователя, работающего в области моделирования свойств материалов и моделей ячеек энергонезависимой памяти ReRAM, MRAM, FeRAM, который, владея инструментами анализа данных, может использовать накопленные данные расчетов для определения зависимостей в данных или построения собственных моделей.

Работа выполнялась с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН (г. Москва).

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 23-91-01012.

Список использованных источников

1. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения. — М.: МАКС Пресс. 2017. 284 с.

2. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Интеграционная платформа для многомасштабного моделирования нейроморфных систем // Информатика и её применение, 2020. Том 14, выпуск 2. С. 104–110. DOI: 10.14357/19922264200215.

3. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л.., Журавлев А.А., Морозов А.Ю., Гаврилов Е.С. Многомасштабное моделирование нейроморфных систем — 128 стр., ав. Монография // Москва, 2022, издательство ООО «МАКС Пресс», ISBN 978-5-317-06886-8.

ANALYTICAL DATABASE AS A PART OF THE AUTOMATED DESIGN SYSTEM FOR ELECTRONIC COMPONENTS FOR CREATING NON-VOLATILE MEMORY CELLS BASED ON ReRAM, FeRAM, AND MRAM TECHNOLOGIES (SoVa software)

K.K. Abgaryan, E.S. Gavrilov, I.A. Kuleshov, A.V. Ereshchenko, P.A. Sechenykh

Abstract. This paper examines the main components of a system for the automated design of non-volatile memory cells based on ReRAM, MRAM, and FeRAM technologies (SoVa software), which implements a multiscale modeling scheme. Analytical database is a part of the software designed to

accumulate input features and calculation results to be used by researched for learning and verification of prognose models.

Key words: multiscale modeling system, non-volatile memory, ReRAM, FeRAM, MRAM, data analysis.

https://doi.org/10.29003/m5478.MMMSEC-2026/20-26

ПОДХОД К ОЦЕНКЕ ПРОИЗВОДИТЕЛЬНОСТИ ГЕТЕРОГЕННЫХ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ КОМПЛЕКСОВ

Денисов Сергей Анатольевич,
начальник ЦКП «Информатика»[1],
SDenisov@frccsc.ru
Зацаринный Александр Алексеевич,
д.т.н., профессор, главный научный сотрудник[1],
AZatsarinny@frccsc.ru

[1] Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН), г. Москва

Аннотация. В работе предлагается методический подход к комплексной оценке производительности гетерогенных гибридных высокопроизводительных вычислительных комплексов (ВВК), основанный на двухуровневой аналитической модели. На первом уровне выполняется оценка теоретической пиковой производительности, на втором — прогнозирование потенциально достижимой производительности. Модель оценки теоретической производительности (МОТП) иерархически определяет верхние границы вычислительного потенциала узла, подсистемы и ВВК в целом с учетом архитектуры CPU и GPU. Модель оценки потенциально достижимой производительности (МОДП) учитывает арифметическую интенсивность приложений, пропускную способность памяти и межсетевого взаимодействия и позволяет прогнозировать производительность без ресурсоемких натурных испытаний.

Работа выполнена с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН (г. Москва) [1, 2].

Ключевые слова: высокопроизводительный вычислительный комплекс, гибридная архитектура, графический ускоритель, производительность, тесты.

Современные ВВК развиваются в направлении гетерогенных и гибридных архитектур, объединяющих CPU, GPU и другие специализированные устройства [3]. Разнообразие компонентов

и уровней взаимодействия усложняет оценку вычислительного потенциала. Поэтому актуальна количественная оценка как теоретически возможной, так и прогнозируемой достижимой производительности с учетом архитектурных ограничений и характеристик целевой нагрузки. Существующие подходы различаются целями, показателями и степенью учета целевой нагрузки и преимущественно ориентированы на экспериментальную проверку уже существующих конфигураций [4–8]. Для предварительной оценки различных конфигураций могут применяться аналитические модели, в частности Roofline-модель [13]. Однако классическая Roofline-модель в основном описывает отдельную платформу или устройство и не предназначена для согласованной оценки сложной гетерогенной системы из разнородных компонентов.

В настоящей работе развивается идея Roofline-модели для расчетной оценки достижимой производительности гетерогенных гибридных ВВК. В предлагаемом подходе производительность рассматривается иерархически: на уровнях вычислительных компонентов, узлов, подсистем и системы в целом. Методика предназначена для предварительной оценки до натурных испытаний, сравнения конфигураций и выявления факторов, ограничивающих производительность целевой нагрузки.

Оценка теоретической пиковой производительности является первым и фундаментальным этапом в анализе производительности гетерогенных высокопроизводительных вычислительных систем. Модель оценки теоретической производительности (МОТП) позволяет без натурных испытаний определить максимальный потенциал компонентов и использовать его для сравнения аппаратных конфигураций.

Пиковая производительность вычислительного узла $P_{node}^{(p)}$ для заданного формата данных p (например, FP32, FP64, FP16, TF32, BF16) определяется путем суммирования пиковых показателей его процессорных компонентов: центрального $P_{cpu}^{(p)}$ и графического $P_{gpu}^{(p)}$ процессоров.

$$P_{node}^{(j,p)} = \sum_{c=1}^{N_{cpu}^{(j)}} P_{cpu}^{(c,p)} + \sum_{g=1}^{N_{gpu}^{(j)}} P_{gpu}^{(g,p)} \quad (1)$$

Пиковая производительность центрального процессора $P_{cpu}^{(c)}$ рассчитывается исходя из количества ядер $N_{cores}^{(c)}$, тактовой частоты $F_{clk}^{(c)}$ и числа операций с плавающей запятой $Fl_{cpu}^{(c,p)}$, выполняемых одним ядром за один такт.

$$P_{cpu}^{(c,p)} = N_{cores}^{(c)} * F_{clk}^{(c)} * Fl_{cpu}^{(c,p)} * K_{simd}^{(c,p)} * K_{ipc}^{(c)} \quad (2)$$

Для графических ускорителей применяется аналогичный принцип расчета пиковой производительности с учётом архитектуры потоковых мультипроцессоров (SM, Streaming Multiprocessors), содержащих множество вычислительных ядер (например, CUDA Cores) и специализированных блоков (например, Tensor Cores).

Пиковая производительность на более высоких уровнях абстракции: подсистемы $P_{sub}^{(k,p)}$ и всей вычислительной системы $P_{system}^{(p)}$ в целом рассчитывается по формулам:

$$P_{sub}^{(k,p)} = \sum_{j=1}^{N_{sub}^{(k)}} P_{node}^{(j,p)} \quad (4)$$

$$P_{system}^{(p)} = \sum_{k=1}^{M_{sub}} P_{sub}^{(k,p)} \quad (5)$$

Конечным результатом применения модели МОТП является вектор пиковых производительностей $\vec{P}_{system} = [P^{(FP64)}, P^{(FP32)}, P^{(FP16)}, P^{(TF32)}, P^{(BF16)}]$ для вычислительной системы, отражающий её многогранную природу и специализацию для различных типов вычислений.

Модель оценки потенциально достижимой производительности (МОДП) направлена на прогнозирование потенциально достижимой производительности при выполнении научных и инженерных задач. Вычислительная составляющая модели описывается арифметической интенсивностью $I^{(p)}$ — отношением числа операций с плавающей запятой к объему данных, перемещаемых между процессором и памятью, аналогично Roofline-модели [10, 11]. Для распределенных приложений вводится также коммуника-

ционная интенсивность $I_{net}^{(p)}$ — отношение числа операций к объему данных, передаваемых между вычислительными узлами.

Потенциально достижимая производительность вычислительного узла $R_{node}^{(p)}$ для заданного формата данных p рассчитывается с учетом пиковых производительностей его процессорных компонентов и ограничений пропускной способности подсистем памяти:

$$R_{node}^{(j,p)} = \sum_{c=1}^{N_{cpu}^{(j)}} \min(P_{cpu}^{(c,p)}, I^{(p)} * B_{mem}^{(c)} * K_{mem}^{(c)}) + \sum_{g=1}^{N_{gpu}^{(j)}} \min(P_{gpu}^{(g,p)}, I^{(p)} * B_{mem}^{(g)} * K_{mem}^{(g)}) \quad (6)$$

Значения пропускной способности памяти центральных $B_{mem}^{(c)}$ и графических $B_{mem}^{(g)}$ процессоров определяются на основе официальных спецификаций производителей, а также могут быть рассчитаны с учётом эффективной частоты памяти, количества каналов памяти и ширины одного канала памяти.

Потенциально достижимая производительность отдельно взятого вычислительного комплекса $R_{sub}^{(p)}$ рассчитывается с учётом ограничений, накладываемых пропускной способностью $B_{net}^{(k)}$ коммуникационной сети.

$$R_{sub}^{(k,p)} = \min(\sum_{j=1}^{N_{sub}^{(k)}} R_{node}^{(j,p)}, \begin{cases} I_{net}^{(p)} * B_{net}^{(k)} * K_{net}, & D_{net} > 0 \\ +\infty, & D_{net} = 0 \end{cases}) \quad (8)$$

где D_{net} — объём данных, передаваемых между вычислительными узлами комплекса по коммуникационной сети.

Производительность ВВК в целом определяется суммированием достижимых производительностей комплексов с последующим применением ограничения коммуникационной сети.

$$R_{system}^{(p)} = \min(\sum_{k=1}^{M_{sub}} \sum_{j=1}^{N_{sub}^{(k)}} R_{node}^{(j,p)}, \begin{cases} I_{net}^{(p)} * B_{net} * K_{net}, & D_{net} > 0 \\ +\infty, & D_{net} = 0 \end{cases}) \quad (9)$$

Если комплексы объединены общей сетью и участвуют в одной распределенной задаче, сетевые ограничения из (8) не следует повторно учитывать в (9). Если комплексы используют независимые сети, ограничения учитываются раздельно, а итоговая пропускная способность определяется топологией их взаимодействия.

Конечным результатом применения модели МОДП является вектор достижимой производительности $\vec{R}_{system} = \left[R^{(FP64)}, R^{(FP32)}, R^{(FP16)}, R^{(TF32)}, R^{(BF16)}\right]$ для вычислительной системы в целом, отражающий её вычислительный потенциал при выполнении научных и инженерных задач с учётом архитектурных ограничений по памяти и сети.

Выводы

Предложенный подход представляет собой двухуровневую аналитическую модель, объединяющую оценку теоретической пиковой и потенциально достижимой производительности в единый инструмент характеристики ВВК. Модель МОТП определяет верхнюю границу вычислительных возможностей посредством иерархической агрегации показателей на уровнях компонента, узла, подсистемы и системы и может использоваться для сравнения конфигураций. Модель МОДП переводит пиковую оценку в расчетную с учетом характеристик компонентов и системных ограничений, определяющих снижение производительности относительно теоретического уровня. Модель может быть расширена дополнительными ограничениями, например показателями энергоэффективности. Методика применима для предварительного анализа, проектирования и сравнения конфигураций ВВК. Ее универсальность как инструмента прогнозирования требует дополнительной экспериментальной проверки на различных системах и классах вычислительных нагрузок. Предложенная методика может использоваться на этапах предварительного анализа, проектирования и сравнения конфигураций высокопроизводительных вычислительных систем. Возможность ее применения в качестве универсального инструмента прогнозирования производительности требует дополнительной экспериментальной проверки на других вычислительных системах и для различных классов вычислительных нагрузок.

Список использованных источников

1. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] — http://www.frccsc.ru/ckp
2. Денисов С.А., Кондрашев В.А. Возможности ЦКП «Информатика» по предоставлению высокопроизводительных вычислительных ресурсов для решения задач материаловедения // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 22–25.
3. Виды процессоров: CPU, GPU, APU, NPU, FPGA и другие, https://serverflow.ru/blog/stati/vidy-protsessorov-cpu-gpu-apu-npu-fpga-i-drugie/, дата доступа 17.09.2026.
4. Зацаринный А.А., Волович К.И., Денисов С.А., Ионенков Ю.С., Кондрашев В.А. Методические подходы к оценке эффективности центра коллективного пользования «Информатика» // Системы высокой доступности. 2020г. Том 16. № 2. С. 44–51.
5. Зацаринный А.А., Волович К.И., Денисов С.А., Ионенков Ю.С., Кондрашев В.А. Вопросы выбора показателей эффективности функционирования высокопроизводительного вычислительного комплекса на примере ЦКП «Информатика» ФИЦ ИУ РАН // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2020 г. 23(3):241–247.
6. Сорокин С.А., Бененсон М.З., Сорокин А.П. // Методики оценки производительности гетерогенных вычислительных систем. Russian Technological Journal. 2017;5(6):11–19.
7. Volovich K., Zatsarinnyy A., Frenkel S., Denisov S. High performance computing in a shared virtual infrastructure // В сборнике: CEUR Workshop Proceedings. 6. Сер. "ITHPC 2021 — Short Paper Proceedings of the 6th International Conference on Information Technologies and High-Performance Computing" 2021. С. 38–46.
8. Денисов С.А. Об одном подходе к оценке производительности высокопроизводительных вычислительных комплексов в задачах материаловедения // В сборнике: Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы VII международной конференции, 2025, с. 8–12.
9. Dolbeau, R. Theoretical peak FLOPS per instruction set: a tutorial // J Supercomput 74, 1341–1377 (2018).
10. Wikipedia contributors. Roofline model // In Wikipedia, The Free Encyclopedia, https://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Roofline_model&oldid=1280397259, дата доступа 17.09.2026
11. Jain R. Understanding Application Performance with Roofline Modeling // Towards Data Science. 2025. June 20.
12. Williams S., Waterman A., Patterson D. «Roofline: an insightful visual performance model for multicore architectures» // Communications of the ACM, 52(4):65–76, 2009.

APPROACH TO PERFORMANCE EVALUATION OF HETEROGENEOUS HIGH-PERFORMANCE COMPUTING SYSTEMS

S.A. Denisov, A.A. Zatsarinny

Abstract. This paper proposes a methodological approach to the comprehensive performance assessment of heterogeneous hybrid high-performance computing (HPC) systems, based on a two-level analytical model. The first level evaluates theoretical peak performance, while the second predicts potentially achievable performance. The theoretical performance assessment model (TPAM) hierarchically defines the upper limits of the computational potential for a node, a subsystem, and the HPC system as a whole, considering CPU and GPU architectures. The potentially achievable performance assessment model (PAPAM) accounts for application arithmetic intensity as well as memory and interconnect bandwidth, enabling performance prediction without resource-intensive empirical testing.

Keywords: high-performance computing system, hybrid architecture, graphics accelerator, performance, benchmarks.

УДК 004.8:004.9
https://doi.org/10.29003/m5479.MMMSEC-2026/26-29

ИТЕРАТИВНАЯ ДВУНАПРАВЛЕННАЯ РЕКУРРЕНТНАЯ НЕЙРОННАЯ СЕТЬ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ РАЗРУШЕНИЯ КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Мочалова Юлия Дмитриевна,
математик[1],
juliamochalova96@gmail.com

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. Предложена новая архитектура итеративной двунаправленной рекуррентной нейронной сети (Bidirectional Iterative Recurrent Network, BIRN), снабженной обучаемым механизмом внимания Attention Pooling. Сеть предназначена для предсказания скалярного индекса критерия разрушения многослойных композитных пакетов по упорядоченной последовательности признаков, описывающих каждый из слоев. Ключевая особенность модели — итеративное уточнение скрытых представлений слоев с учетом контекста соседей слева и справа, а также адаптивное агрегирование информации всех слоев с помощью механизма внимания.

Ключевые слова: рекуррентная нейронная сеть, разрушение композитных материалов, суррогатные модели, механизм внимания.

Введение

Проектирование многослойных композитных конструкций требует оперативной оценки предельных состояний для множества вариантов укладки слоев. Инженерные критерии разрушения (Хоффмана, Хашина, Пака, Цая-Ву) позволяют вычислить скаляр-

ный индекс, характеризующий запас прочности всего пакета. Однако точное определение напряженно-деформированного состояния в каждом слое при варьировании углов, толщин и механических свойств требует ресурсоемких конечно-элементных расчетов.

Архитектура итеративной двунаправленной рекуррентной сети

Предлагаемая модель CompositeFailureBIRN обрабатывает последовательность слоев в три этапа: итеративное двунаправленное рекуррентное преобразование, пулинг с механизмом внимания и линейная проекция. Базовым блоком служит стандартная GRU-ячейка, отличие которой состоит в том, что на каждом шаге вход объединяет текущий вектор признаков слоя и скрытые состояния предыдущего и следующего слоев, взятые с предыдущей итерации. Для крайних слоев отсутствующий контекст заменяется нулевым вектором, а позиции, выходящие за фактическое число слоев в пакете, умножаются на маску. Такая схема позволяет каждому слою на каждой итерации видеть признаки и скрытые представления обоих непосредственных соседей, что моделирует механическое взаимодействие смежных слоев. Все скрытые состояния инициализируются нулями, процесс повторяется K раз; с каждым проходом информация о дальних слоях распространяется по цепочке, итеративно уточняя глобальное согласованное представление пакета.

После K итераций механизм Attention Pooling вычисляет оценки важности каждого слоя, маскирует несуществующие слои, применяет softmax и формирует взвешенную сумму, позволяя сети автоматически фокусироваться на слоях с наибольшим риском разрушения. Полученный вектор подается на линейный нейрон, формирующий скалярный прогноз $y = W h + b_out$.

Обучение и экспериментальная проверка

Сеть обучается минимизацией MSE с помощью оптимизатора Adam; применяются дропаут скрытого состояния перед Attention Pooling и ранняя остановка. Последовательности дополняются нулями до максимальной длины в батче, а для исключения холостых операций на паддинговых позициях внутри рекуррентного блока применяются упакованные последовательности. Эксперименты проведены на 2500 конечно-элементных расчетах многослойных

композитных материалов на базе углепластиков с числом слоев от 2 до 10; напряжения вычислялись в COMSOL Multiphysics, целевой индекс взят как максимум послойно вычисленных критериев Хоффмана. Модель BIRN имела H = 256, K = 4. Базовыми методами сравнения служили BiGRU с аналогичным механизмом внимания и модели LSTM/BiLSTM. Предложенная архитектура стабильно показывает наилучшие результаты, превосходя рекуррентные аналоги. Абляционное исследование влияния числа итераций K для реальных данных дало MAE: 0.2914 (K=1), 0.0939 (K=2), 0.0672 (K=3), 0.0595 (K=4), 0.0589 (K=5). Оптимальным выбрано K = 4.

Выводы

Эксперименты показали значительное превосходство BIRN над традиционными двунаправленными GRU и моделями LSTM: достигнутая точность (MAE менее 0.06, R2 = 0.984) делает модель пригодной для использования в системах автоматизированного проектирования, где требуется быстрый перебор множества вариантов укладок. Дальнейшие исследования могут включать расширение архитектуры на предсказание полей разрушения по каждому слою и учет нелинейных эффектов.

Список использованных источников

1. Hashin Z., Rotem A. A fatigue failure criterion for fiber reinforced materials // Journal of Composite Materials. 1973. Vol. 7, no. 4. pp. 448–464.

2. Puck A., Schürmann H. Failure analysis of FRP laminates by means of physically based phenomenological models // Composites Science and Technology. 2002. Vol. 62, no. 12–13. pp. 1633–1662.

3. Graves A., Schmidhuber J. Framewise phoneme classification with bidirectional LSTM and other neural network architectures // Neural Networks. 2005. Vol. 18, no. 5–6. pp. 602–610.

4. Bahdanau D., Cho K., Bengio Y. Neural machine translation by jointly learning to align and translate. Proc. ICLR, 2015.

5. Cho K., van Merriënboer B., Gulcehre C., et al. Learning phrase representations using RNN encoder-decoder for statistical machine translation. Proc. EMNLP, 2014. pp. 1724–1734.

ITERATIVE BIDIRECTIONAL RECURRENT NEURAL NETWORK FOR FAILURE PREDICTION OF COMPOSITE MATERIALS

Yu.D. Mochalova

Abstract. A novel architecture of an iterative bidirectional recurrent neural network (Bidirectional Iterative Recurrent Network, BIRN) equipped with a trainable Attention Pooling mechanism is proposed. The network is designed to predict a scalar failure criterion index for multilayered composite stacks based on an ordered sequence of features describing each layer. The key feature of the model is the iterative refinement of hidden layer representations by incorporating the context of left and right neighbors, along with adaptive aggregation of information from all layers via the attention mechanism.

Key words: recurrent neural network, failure of composite materials, surrogate models, attention mechanism.

УДК 004.6:519.6
https://doi.org/10.29003/m5480.MMMSEC-2026/29-31

РАСПРЕДЕЛЁННОЕ ХРАНЕНИЕ ДАННЫХ МНОГОМАСШТАБНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ МАТЕРИАЛОВ С КОНТРОЛЕМ ПОГРЕШНОСТИ

***Нехаев Александр Андреевич*[1],**
e-mail: ganzol177@gmail.com

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. Представлен проект контекстно-адаптивного многомасштабного хранилища (КАМХ) для результатов расчётов полимеров и композитов. Выбор считываемых порций связывается с допустимой погрешностью заданного научного показателя. Описаны интеграция с расчётной платформой и предварительная проверка на расчётном поле углепластика IM7/8552.

Ключевые слова: распределённое хранение, многомасштабное моделирование, композиты, погрешность, прогрессивное чтение.

Введение

При моделировании материалов формируются большие поля напряжений, деформаций и температуры, тогда как исследователю часто нужен лишь отдельный показатель. Сжатие с контролем производных величин и прогрессивное чтение уже исследуются [1, 2]. Цель работы — согласовать точность расчёта, объём чтения и организацию хранения в едином процессе исследования материалов.

Организация хранилища и контроль погрешности

Предложена схема: интерфейс пользователя → сервер → Camunda → модуль Python/C++ → адаптер результата → хранилище. В проекте MongoDB хранит версии материалов, параметры

запусков и краткие результаты; GridFS — крупные исходные файлы output.json.gz. Большие массивы из HDF5 преобразуются в многомасштабные порции KAMX. Их состав, размещение и характеристики описываются в манифесте. Идентификатор запуска связывает свойства материала, версию расчётного модуля и полученное поле.

Для линейного показателя, например среднего напряжения в фиксированной области, используется условие остановки чтения:

$$\left|F_q(u) - F_q(\tilde{u})\right| \le B_q = \sum_{i=1}^{N} \left|a_{q,i}\right| \delta_i \le \varepsilon_q^{\mathrm{s}}. \quad (1)$$

Здесь q — номер показателя; F_q — правило его вычисления; u и $\tilde{u}$ — полное расчётное и восстановленное поля; N — число коэффициентов представления; i — их индекс; $a_{q,i}$ — вес коэффициента в показателе; δ_i — верхняя граница ошибки коэффициента; B_q — граница ошибки ответа; $\varepsilon_q^{\mathrm{s}}$ — допуск хранения.

Неравенство следует из линейности показателя и неравенства треугольника. Следующая порция выбирается по снижению границы на единицу стоимости чтения; оптимальность для общего случая не утверждается.

При наличии обоснованных оценок других ошибок допуск хранения определяется остатком общего бюджета:

$$\varepsilon_q^{\mathrm{s}} = \varepsilon_q^{\mathrm{total}} - \left(E_q^{\mathrm{model}} + E_q^{\mathrm{disc}} + E_q^{\mathrm{solver}}\right). \quad (2)$$

Здесь $\varepsilon_q^{\mathrm{total}}$ — общий допуск; E_q^{model}, E_q^{disc}, E_q^{solver} — границы ошибок модели, дискретизации и решателя для того же показателя в одинаковых единицах. Формула получается из неравенства треугольника для последовательных этапов расчёта. При отрицательном остатке требуется пересмотреть расчёт или оценки его погрешности. Без оценки ошибки модели подтверждается только точность относительно полного расчётного поля.

Предварительная проверка

Локальный демонстратор использует опубликованные свойства и геометрию пластины IM7/8552 с отверстием [3]. Поле рассчитано конечно-элементным модулем, а не измерено в эксперименте, и приведено к массиву 2048×2048. Сопоставлены монолитный gzip, пространственные порции и два порядка чтения одного набора коэффициентов Хаара: по масштабам и по вкладу в показатель.

Для зарегистрированного локального усредняющего запроса при допуске 1% КАМХ прочитал 101,4 КиБ против 1583,5 КиБ при чтении по масштабам. Фактическая ошибка составила 0,666%, её граница — 0,837 %. Это объём порций без чтения метаданных; относительный допуск задан по заранее известному эталонному ответу. Результат не характеризует новые запросы и производительность распределённого кластера.

Выводы

Предлагаемый вклад состоит в согласовании остаточного допуска, выбора порций и воспроизводимой связи результата с расчётом материала. Известные оценки погрешности используются как математическая основа. Демонстратор подтверждает уменьшение объёма чтения в рассмотренном режиме; дальнейшая проверка должна учитывать подготовку данных, метаданные и затраты распределённого выполнения.

Список использованных источников

1. Ainsworth M., Tugluk O., Whitney B., Klasky S. Multilevel Techniques for Compression and Reduction of Scientific Data—Quantitative Control of Accuracy in Derived Quantities // SIAM Journal on Scientific Computing. 2019. Vol. 41, no. 4. P. A2146–A2171. DOI: 10.1137/18M1208885.

2. Wu X. et al. Error-controlled Progressive Retrieval of Scientific Data under Derivable Quantities of Interest. 2024. arXiv:2411.05333. DOI: 10.48550/arXiv.2411.05333.

3. Fong J. T. et al. Theoretical Failure Envelopes of Open Hole Composite Laminates With A- and B-basis Allowables Estimated from Smooth Specimen Properties // Proc. International Conference on Composites Design. Montreal, 2013. Paper CIM81453-ConfSys.

DISTRIBUTED STORAGE OF MULTISCALE MATERIALS SIMULATION DATA WITH ERROR CONTROL

A.A. Nekhaev

Abstract. A design of a context-adaptive multiscale storage system (KAMH) is presented for polymer and composite simulation results. Data retrieval is guided by an error tolerance for a specified quantity of interest. Integration with a computational platform and a preliminary test on a simulated IM7/8552 composite field are described.

Key words: distributed storage, multiscale simulation, composites, error control, progressive retrieval.

УДК 004.6
https://doi.org/10.29003/m5481.MMMSEC-2026/32-35

СЕРВИСЫ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ ЭНЕРГОНЕЗАВИСИМОЙ ПАМЯТИ

Сеченых Полина Алексеевна,
младший научный сотрудник[1],
p-sechenyh@mail.ru

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. В работе рассматривается описывается подход к начальной обработке информационных объектов для последующего использования в приложениях, особенно в наукоёмких областях. Основное внимание уделяется подготовке и анализу данных в материаловедении, в частности, для моделирования энергонезависимой памяти.

Ключевые слова: подготовка данных, ETL, pymatgen, Material Project

Существует множество подходов к начальной обработке информационных объектов и их характеристик [1] для последующего использования в различных приложениях. Однако вопросы подготовки и анализа данных в наукоёмких областях существенно отличаются от стандартного подхода, так как обладают важными специфическими свойствами, которые необходимо выявлять и учитывать в компьютерном моделировании сложных физических процессов.

Высокая чувствительность вычислительных алгоритмов и программ к загружаемым в них данных обуславливает необходимость их тщательного исследования, подбора, фильтрации и проверки, с последующей агрегацией в наборы, обеспечивающие их полноту и достоверность.

Большое количество разнообразных источников таких данных требует активного внедрения в архитектуру средств информационной поддержки развитой сервисной службы, включающей необходимый набор рабочих запросных инструментов и программных средств обработки полученных данных.

Для многомасштабных, ресурсоёмких задач материаловедения и, в частности, задач моделирования энергонезависимой памяти, од-

ним из важных и апробированных источников данных является система Materials Project — открытая база информационного контента со структурными, электронными и термодинамическими свойствами сотен тысяч кристаллических материалов и молекул [2].

Для задания критериев поиска в Materials Project и последующей конвертации найденных наборов данных в форматы информационной поддержки приложений был разработан специализированный сервисный модуль, последовательно реализующий два этапа рабочего цикла обработки данных (рис. 1).

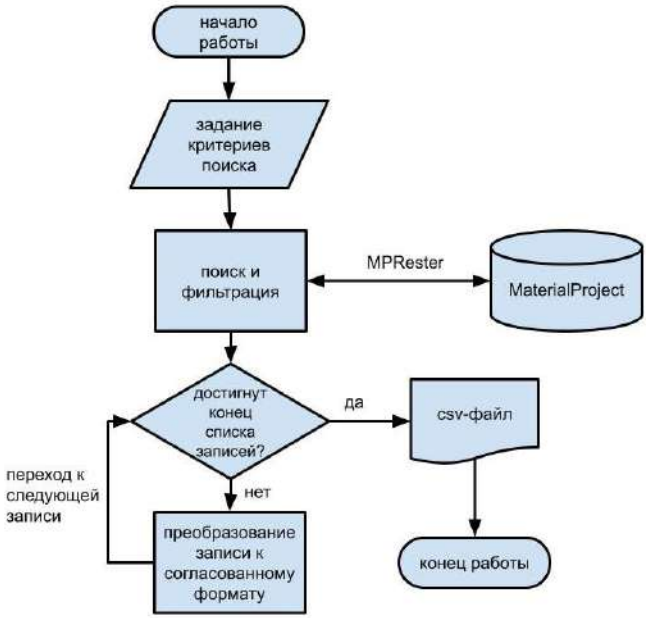


Рисунок 1 — Общая схема работы модуля загрузки из Materials Project

Первый этап — это *поиск и фильтрация.* На данном этапе по заданной химической формуле выгружаются данные о структуре (включая группу симметрии, параметры элементарной ячейки и входящих в неё атомов), а также метаданные. Для загрузки данных используется MPRester — основной Python-клиент для взаимодействия с API базы данных Material Project.

Второй этап — *агрегирование.* Все полученные на первом этапе записи необходимо преобразовать к согласованному формату хранения. Поскольку MPRester возвращает примитивную *(primitive)*

элементарную ячейку, требуется конвертация в *conventional*-представление, для этого используется SpacegroupAnalyzer — это класс в библиотеке pymatgen [3], предназначенный для поиска и анализа пространственной симметрии кристаллических структур. Сформированный файл в формате csv сохраняется для дальнейшего экспорта в приложения.

Сервисный модуль реализован на Python согласно логике алгоритмов Extract-Transform-Load (ETL), извлекая исходные данные из источника, преобразуя их в формат целевого набора данных и сохраняя структурированный информационный контент в файлах репозитория информационной поддержки.

Разработка и тестирование сервисного модуля проводились в рамках работ по сбору, накоплению и анализу наборов данных лабораторных исследований, вычислительных экспериментов и других источников, реализуемых в ходе разработки системы автоматизированного проектирования ЭКБ для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM, FeRAM, MRAM (ПО «CoBa») [4].

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда (проект № 23-91-01012).

Список использованных источников

1. Ralph Kimball, Joe Caserta The Data Warehouse ETL Toolkit: Practical Techniques for Extracting, Cleaning, Conforming, and Delivering Data. — John Wiley & Sons, 2004. — 528 p. — ISBN 978-0-764-56757-5

2. Materials Project [Электронный ресурс]. URL: https://next-gen.materialsproject.org (дата обращения 11.05.2026)

3. Python Materials Genomics [Электронный ресурс]. URL: https://pymatgen.org/ (дата обращения 11.05.2026)

4. Абгарян К.К. Интеграционные подходы для решения задач вычислительного материаловедения // Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. ММЭК–2025. 20–22 октября 2025 г., Москва : Материалы VII Международной конференции. — Москва : МАКС Пресс, 2025. — С. 56–61. DOI: https://doi.org/10.29003/m4771.MMMSEC-2025/56-51

DATA PROCESSING SERVICES FOR MODELING PROPERTIES OF NON-VOLATILE MEMORY

Sechenykh P.A.

Abstract. This paper describes an approach to initial processing of information objects for subsequent use in applications, especially in knowledge-

intensive fields. The main focus is on data preparation and analysis in materials science, particularly for modeling non-volatile memory.

Keywords: data preparation, ETL, pymatgen, Material Project

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m5482.MMMSEC-2026/35-37

БИБЛИОТЕКА ДЛЯ ИНФЕРЕНСА СОВРЕМЕННЫХ НЕЙРОСЕТЕЙ НА АНАЛОГОВОЙ ПЛАТФОРМЕ

Щепетов Д.С.

ФИЦ ИУ РАН, г. Москва

Аннотация. Рассматривается библиотека для вывода больших нейронных сетей на аналоговой платформе. На примере ячейки умножения с накоплением показаны необходимые этапы адаптации вычислений. При их выполнении метрики вывода практически сохраняются; оцененная удельная производительность умножения для технологического процесса 65 нм составляет 3,5 ТОПС/Вт.

Ключевые слова: аналоговые вычисления, нейронные сети, инференс, свертка, умножение с накоплением, энергоэффективность.

Введение

Аналоговые вычислительные платформы представляют интерес для инференса нейронных сетей благодаря высокой удельной производительности: для отдельных вычислительных блоков она может достигать нескольких триллионов операций в секунду на ватт [1, 3]. Однако результат аналогового вычисления зависит от погрешностей представления сигналов, ограниченного динамического диапазона и неидеальности схемы. Поэтому перенос сети с цифровой платформы требует согласования параметров модели с возможностями устройства и обоснованного выбора способа вычисления [2].

Адаптация больших нейронных сетей

Большинство демонстраций аналоговых нейронных сетей ограничено небольшими задачами и малым числом слоев. При увеличении глубины и размера модели локальные ошибки могут накапливаться, а затраты на преобразование данных и передачу промежуточных результатов — снижать выигрыш от быстрого умножения. Отсюда следуют два вывода. Во-первых, эффектив-

ность аналогового вывода для больших сетей поэтому нельзя выводить только из характеристик отдельной ячейки. Во-вторых, саму нейронную сеть требуется адаптировать для вычисления на подобных платформах. Цель исследования — показать последовательность шагов, позволяющую выполнять такие сети на аналоговой платформе и оценивать результат, в том числе эффективность вывода (инференса) на уровне всей модели.

В качестве расчетного элемента рассматривается ячейка умножения с накоплением, используемая при реализации свертки. Особенностью подобных ячеек является то, что для умножения используются свойства транзисторов, поэтому влияние нелинейных компонент на результат умножения значительно и зависит от внешних параметров и углов техпроцесса.

Библиотека содержит как схемотехнические элементы ячеек умножения с накоплением, так и алгоритмы по компенсации нелинейных искажений, а также средства связи с современными САПР. Это позволяет объединить этапы по подготовке нейросети для аналоговых платформ в воспроизводимый вычислительный маршрут. Что, в свою очередь, позволяет перейти от единичной свертки к сети с большим числом последовательно исполняемых слоев. Результаты работы подтверждаются экспериментами -- при инференсе двух современных нейросетей ResNet18 и SuperPoint на датасетах CIFAR-10 и Hpatches соответственно удается сохранить точность на сравнимом уровне (93% точности на CIFAR-10 и 91% на Hpatches) при эффективнсоти вывода порядка 3,5 триллионов операций в секунду на Ватт потребляемой мощности для технологического процесса 65 нм.

Список использованных источников

1. Sithamparanathan, K. A Low-Power Analog Spiking Neural Network with On-Chip Learning / K. Sithamparanathan, J. Dix // 2026 27th International Symposium on Quality Electronic Design (ISQED). — IEEE, 2026. — P. 1–7. — DOI: 10.1109/isqed69900.2026.11534703.

2. Xiao T. P. et al. On the Accuracy of Analog Neural Network Inference Accelerators // IEEE Circuits and Systems Magazine. 2023. Vol. 22, no. 4. P. 26–48.

3. Houshmand P. et al. DIANA: An End-to-End Hybrid Digital and Analog Neural Network SoC for the Edge // IEEE Journal of Solid-State Circuits. 2022. Vol. 58, no. 1. P. 203–215.

FRAMEWORK FOR INFERENCE OF MODERN NEURAL NETWORKS ON AN ANALOG PLATFORM

D.S. Shchepetov

Abstract. A framework for inference of large neural networks on an analog platform is presented. The required adaptation steps are illustrated using a multiply-accumulate cell for convolution. With these steps, inference metrics are nearly preserved relative to digital execution. The multiplication efficiency reaches 3.5 TOPS/W for a 65 nm PDK.

Key words: analog computing, neural networks, inference, convolution, multiply-accumulate, energy efficiency.

2. B
КВАНТОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ. ПРОБЛЕМЫ КВАНТОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

УДК 537.525
https://doi.org/10.29003/m5483.MMMSEC-2026/40-43

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛАЗМЫ C_2F_6 В ИНДУКТИВНО-СВЯЗАННОМ РАЗРЯДЕ

Корякова Екатерина Евгеньевна,
младший научный сотрудник[1, 2],
ekoryakova@niime.ru
Ефремов Александр Михайлович,
д.х.н., профессор, начальник лаборатории[1],
aefremov@niime.ru

[1] АО «НИИМЭ», г.Москва, г. Зеленоград
[2] МФТИ, г. Москва

Аннотация. Разработана 0D модель плазмы C_2F_6 с учетом гетерогенной рекомбинации на стенках реактора. В диапазоне давлений 5–35 мторр и мощностей 100–350 Вт расчеты хорошо согласуются с экспериментальными данными по концентрациям электронов, атомов F и радикалов CF_2.

Ключевые слова: плазмохимическое травление, C_2F_6, гексафторэтан, 0D модель, кинетика плазмы, гетерогенная рекомбинация.

Введение

Современное плазмохимическое травление (ПХТ) структур SiO_2/Si с проектными нормами менее 7 нм [1] основано на использовании фторуглеродной плазмы. Селективность процесса определяется конкуренцией между осаждением полимерной плёнки $(CF_x)_n$ и ионно-стимулированным травлением атомами F [2]. Гексафторэтан (C_2F_6, F/C = 3) занимает промежуточное положение между CF_4 и C_4F_8, что делает его перспективной средой для прецизионного регулирования баланса между скоростью и селективностью травления через соотношение потоков радикалов CF_x и атомов F.

При низких давлениях (5–35 мторр) длина свободного пробега частиц сопоставима с размерами реактора, и состав плазмы существенно зависит от гетерогенных процессов на стенках камеры. Существующие кинетические схемы для C_2F_6 [3] такие процессы не учитывали, что приводило к заметному расхождению расчётов с экспериментом. Целью настоящей работы являлось создание и экспериментальная верификация самосогласованной 0D модели

плазмы C_2F_6, включающей как объёмные, так и поверхностные реакции, а также установление связи между условиями возбуждения разряда и характеристиками плазмы.

Описание модели

Модель ИСР основана на совместном численном решении уравнений баланса частиц, энергии электронов и теплового баланса нейтрального газа в приближении параметров, усредненных по объему реактора V.

Уравнение непрерывности для частиц сорта *k*:

$$\frac{dN_k}{dt} = \sum_j R_{gen,kj} - \sum_j R_{loss,kj} + R_{surf,k} + \frac{Q_0}{V}\delta k - \frac{N_k}{\tau_g}, \qquad (1)$$

где $R_{gen,kj}$ и $R_{loss,kj}$ — скорости образования и гибели частиц в j-й объемной реакции; $R_{surf,k}$ — скорость гетерогенного образования/гибели на стенках; Q_0 — поток напуска; δk — символ Кронекера; τ_g — время пребывания газа.

Базовая схема объемных реакций заимствована из [3]. Схема дополнена тремя гетерогенными механизмами Или–Ридила, а константы скоростей определялись как

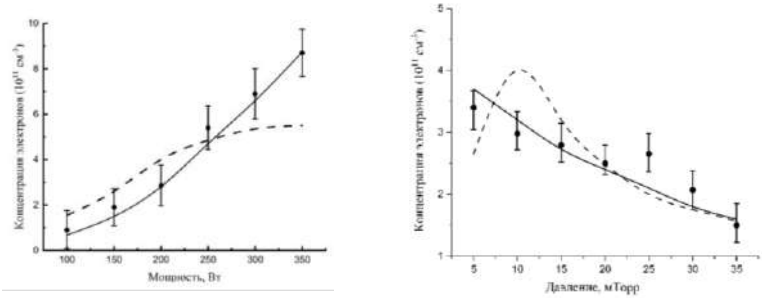
$$k_{wall,k} = \left(\frac{\Lambda^2}{D_k} + \frac{2V(2-\gamma_k)}{A v_{th,k}\gamma_k}\right)^{-1} \qquad (2)$$

где Λ — диффузионная длина реактора; D_k — коэффициент диффузии; A — площадь внутренней поверхности реактора; $v_{th,k} = \sqrt{8k_BT_g/(\pi m_k)}$ — тепловая скорость частиц; γ_k — вероятности рекомбинации.

Результаты и верификация

Верификация проводилась сопоставлением с данными зондовых и оптических измерений в ячейке GEC Reference Cell (V≈422 см^3, A≈368 см^2, расход C_2F_6 Q=10 см^3/мин) [3].

На рис. 1 показана зависимость концентрации электронов n_e от мощности и давления. Рост n_e с мощностью обусловлен интенсификацией объемной ионизации из-за роста температуры электронов T_e. Снижение n_e при росте давления — характерный признак электроотрицательной плазмы: падение T_e уменьшает скорость прямой ионизации, в то время как константы диссоциативного прилипания ($e^- + CF_x \rightarrow F^- + \ldots$) сохраняются высокими при растущей плотности нейтралов.



а) *б*)

Рисунок 1 — Зависимость концентрации электронов от вкладываемой мощности (*а*, при p = 10 мтор) и давления (*б*, при W = 200 Вт):
Точки — эксперимент из работы [3]; пунктирная линия — расчет из работы [3]; сплошная линия — наш расчет

Учет гетерогенных каналов рекомбинации позволил существенно приблизить расчетные плотности нейтральных компонент к экспериментальным (табл. 1).

Таблица 1

Сравнение расчетных и экспериментальных концентраций нейтральных частиц при P = 10 мтор и W = 300 Вт

Параметр	Модель [3]	Эксперимент [3]	Наша модель
Концентрация F, см$^{-3}$	$6{,}25 \cdot 10^{10}$	$10{,}75 \cdot 10^{10}$	$10{,}1 \cdot 10^{10}$
Концентрация CF_2, см$^{-3}$	$0{,}87 \cdot 10^{13}$	$1{,}76 \cdot 10^{13}$	$1{,}54 \cdot 10^{13}$

Выводы

Разработана самосогласованная 0D модель плазмы C_2F_6, дополненная блоком гетерогенной рекомбинации на стенках реактора, что позволило существенно улучшить согласие расчёта с экспериментом по концентрациям электронов, атомов F и радикалов CF_2. Показано, что при низких давлениях именно поверхностные процессы определяют состав нейтральной компоненты плазмы, а верифицированная кинетическая схема пригодна для использования в многомерных моделях ИСР-реакторов.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я., Возможности микроэлектронных технологий с топологическими размерами менее 5 нм, Наноиндустрия Т. 13. No. S5-1(102) (2020).

2. van Dijk, Jan & Kroesen, [et al.], Plasma modelling and numerical simulation. Journal of Physics D: Applied Physics. 2009. 42. 190301. 10.1088/0022-3727/42/19/190301.

3. Ho P. [et al.]. Modeling the plasma chemistry of C2F6 and CHF3 etching of silicon dioxide, with comparisons to etch rate and diagnostic data // J. Vac. Sci. Technol. A. 2001. V. 19(5). P. 2344–2357.

4. Lieberman M.A., Lichtenberg A.J. Principles of Plasma Discharges and Materials Processing. Wiley, 2005.

5. Kolasinski, Kurt. Surface science: foundations of catalysis and nanoscience. 2019.

PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF C_2F_6 PLASMA IN AN INDUCTIVELY COUPLED DISCHARGE

E.E. Koryakova, A.M. Efremov

Abstract. A 0D model of C_2f_6 plasma has been developed taking into account heterogeneous recombination on the reactor walls. In the pressure range 5-35 mtorr and power range 100-350 W, the calculations are in good agreement with experimental data on concentrations of electrons, F atoms, and Cf_2 radicals.

Key words: plasma chemical etching, C_2F_6, hexafluoroethane, 0D model, plasma kinetics, heterogeneous recombination

УДК 534.2+530.145.6
https://doi.org/10.29003/m5484.MMMSEC-2026/44-47

ДЛИННОВОЛНОВЫЕ КОЛЕБАНИЯ В МОДИФИЦИРОВАННОЙ ЦЕПОЧКЕ МАССА-В-МАССЕ

Турин Валентин Олегович,
к.ф.-м.н., доцент кафедры[1], voturin@mail.ru
Андреев Павел Андреевич,
аспирант[1], pavel.andreev.2000@yandex.ru
Скрипченко Артём Николаевич,
аспирант[1], super.art-skripa@yandex.ru
Бурцев Егор Игоревич,
студент магистратуры[1], burtzew.e@yandex.ru
Турина Ангелина Валентиновна,
школьница[2], angel_lina_0@mail.ru
Щеглов Илья Владимирович,
школьник[3], ilyaorel84@gmail.com,
Илюшина Юлия Викторовна,
ассистент[4], julie20096@mail.ru

[1] *ОГУ им. И.С. Тургенева, г. Орёл*
[2] *МБОУ — школа № 51, Орёл, Россия*
[3] *Гимназия № 1 ОГУ имени И.С. Тургенева*
[4] *МАИ, г. Москва*

Аннотация. В работе показано, что модифицированная (с дополнительным гармоническим взаимодействием между соседними внутренними массами) цепочка масса-в-массе в случае длинноволнового приближения (переход к сплошности) описывается системой из двух уравнений, являющейся обобщением вещественного уравнения Клейна–Гордона–Фока. Получены уравнения для акустической и оптической ветвей дисперсии. В случае равенства характеристических частот двух цепочек, составляющих модифицированную цепочку масса-в-массе, можно преобразовать в вещественное уравнение Клейна–Гордона–Фока и волновое уравнение.

Ключевые слова: цепочка масса-в-массе, акустическая и оптические ветви дисперсии, акустический метаматериал, волновое уравнение, уравнение Клейна–Гордона–Фока.

Введение

В [1] исследована цепочка масса-в-массе, которая интересна с точки зрения создания акустических метаматериалов. В работе [2] была рассмотрена модифицированная (с дополнительным

гармоническим взаимодействием между соседними внутренними массами) цепочка масса-в-массе. В [3] на основе анализа цепочки масса-в-массе в случае длинноволнового приближения и для случая равенства характерных частот двух составляющих её цепочек, получено обобщение уравнений релятивистской квантовой механики, которые имеют оптическую и акустическую ветви дисперсии. Оптической ветви дисперсии соответствуют две частицы с разной массой, предположительно, соответствующие массивной частице и массивному нейтрино. В [4] показано, что обобщённое уравнение Дирака можно преобразовать в три независимых уравнения: уравнение Дирака и уравнения Вейля для безмассового нейтрино и для безмассового антинейтрино; показано, что цепочка масса(-в-массе)^3 имеет одну акустическую и три оптические ветви дисперсии. Три оптические ветви дисперсии, предположительно, соответствуют трём поколениям лептонов.

Модифицированная цепочка масса-в-массе

С цепочкой из одинаковых масс m, расположенных с периодом a и связанных пружинами жёсткости I, связана частота $\omega_m = \sqrt{I/m}$ и скорость $s_m = a\omega_m$. В пределе длинноволновых колебаний она описывается волновым уравнением $\partial^2 u/\partial t^2 = s_m^2\,\partial^2 u/\partial z^2$ с акустической ветвью дисперсии $\omega = s_m k$. С цепочкой из связанных осцилляторов массой m, прикреплённых к положению равновесия пружиной жёсткости K связана ещё частота $\omega_{Om} = \sqrt{K/m}$. В пределе длинноволновых колебаний эта цепочка описывается вещественным уравнением КГФ $\partial^2 u/\partial t^2 = s_m^2\,\partial^2 u/\partial z^2 - \omega_{Om}^2 u$ с оптической ветвью дисперсии $\omega^2 = s_m^2 k^2 + \omega_{Om}^2$.

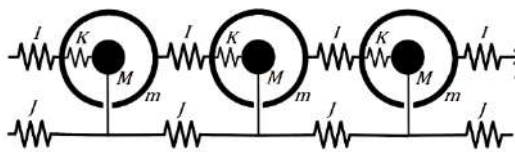


Рисунок 1 — модифицированная цепочка масса в массе

Модифицированную цепочку масса-в-массе [3, 4] (рисунок 1) можно рассматривать как две связанные цепочки: из масс m, соединённых пружинами жёсткости I, и из масс M, соединённых

пружинами жёсткости J. M расположена внутри и в центре полой массы m и они связаны пружиной жёсткости K. В пределе длинноволновых колебаний эта цепочка описывается системой, являющейся обобщением уравнения КГФ:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = s_m^2 \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \omega_{Om}^2 (u - U) \\ \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = s_M^2 \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} - \omega_{OM}^2 (U - u) \end{cases}. \quad (1)$$

Здесь $s_M = a\omega_M$ — характерная скорость и $\omega_{OM} = \sqrt{K/M}$ и $\omega_M = \sqrt{J/M}$ — характерные частоты. Закон дисперсии имеет акустическую (ω_-) и оптическую (ω_+) ветви дисперсии:

$$\omega_\pm^2(k) = \frac{\omega_{Om}^2 + \omega_{OM}^2 + (s_m^2 + s_M^2)k^2}{2} \pm$$

$$\pm\sqrt{\left(\frac{\omega_{Om}^2+\omega_{OM}^2+(s_m^2+s_M^2)k^2}{2}\right)^2 - (s_M^2\omega_{Om}^2 + s_m^2\omega_{OM}^2 + s_m^2 s_M^2 k^2)k^2}. \quad (2)$$

Рассмотрим случай равенства характерных частот $\omega_m = \omega_M = \omega_{ch}$. Получаем:

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = s^2 \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} - \omega_{Om}^2 (u - U) \\ \frac{\partial^2 U}{\partial t^2} = s^2 \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} - \omega_{OM}^2 (U - u) \end{cases}. \quad (3)$$

Здесь введены обозначения $s = a\omega_{ch}$, $\omega_{rd} = \sqrt{\omega_{Om}^2 + \omega_{OM}^2} = \sqrt{K/\mu}$ и $\mu = mM/(m + M)$ — приведённая (reduced) масса. Акустическая ветвь дисперсии: $\omega_- = s\,k$. Оптическая ветвь дисперсии: $\omega_+^2 = s^2k^2 + \omega_{rd}^2$. Систему уравнений (3) можно преобразовать в два независимых уравнения: в вещественное уравнение КГФ и волновое уравнение. Для этого делаем замену $w = u - U$. Получаем уравнение КГФ $\partial^2 w/\partial t^2 = s^2\,\partial^2 w/\partial z^2 - (\omega_{Om}^2 + \omega_{OM}^2)w$. Помножаем первое уравнение системы (3) на $\varepsilon^2 = (\omega_{OM}/\omega_{Om})^2 = m/M$ и делаем замену: $v = \varepsilon^2 u + U$. Получаем волновое уравнение: $\partial^2 v/\partial t^2 = s^2\,\partial^2 v/\partial z^2$.

Выводы

Модифицированная цепочка масса-в-массе в случае длинноволнового приближения описывается системой, являющейся обобщением уравнения КГФ с акустической и оптической ветвями

дисперсии. В случае равенства характерных частот двух цепочек, составляющих цепочку масса-в-массе, обобщение уравнения КГФ можно преобразовать в вещественное уравнение КГФ и волновое уравнение.

Список использованных источников

1. Vincent J.H. On the Construction of a Mechanical Model to Illustrate Helmholtz's Theory of Dispersion. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, 1898. Vol. 46, no. 283: pp. 557–563. https://doi.org/10.1080/14786449808621232

2. Модифицированная цепочка масса-в-массе / В.О. Турин, Назрицкий И.В., Киреев Д.Д. [и др.] // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. — 2024. — Т. 27, № 4. — С. 330–340. https://doi.org/10.17073/1609-3577j.met202411.627

3. Turin, V.O. A Mass-in-Mass Chain and the Generalization of the Dirac Equation with an Eight-Component Wave Function and with Optical and Acoustic Branches of the Dispersion Relation / V. O. Turin, Y. V. Ilyushina, P. A. Andreev [et al.] // Russian Microelectronics. — 2023. — Vol. 52, Suppl. 1. — P. S299–S305. — DOI: 10.1134/S1063739723600693.

4. Turin, V.O. Analysis of the Generalized Dirac Equation / V. O. Turin, D. D. Kireev, I. V. Nazritsky [et al.] // Russian Microelectronics. — 2025. — Vol. 54. — P. 1570–1582. — DOI: 10.1134/S1063739725602164.

LONG-WAVE OSCILLATIONS IN A MODIFIED MASS-TO-MASS CHAIN

V.O. Turin, P.A. Andreev, A.N. Skripchenko, E.I. Burtsev, A.V. Turina, I.V. Shcheglov, Y.V. Ilyushina

Abstract. The paper shows that the modified (with additional harmonic interaction between adjacent internal masses) mass-in-mass chain, in the case of a long-wave approximation (transition to continuum), is described by a system of two equations, which is a generalization of the real Klein–Gordon–Fock equation. Equations for the acoustic and optical branches of dispersion are obtained. If the characteristic frequencies of the two chains that make up the modified mass-in-mass chain are equal, the system can be transformed into the real Klein–Gordon–Fock equation and the wave equation.

Keywords: mass–in–mass chain, acoustic and optical branches of dispersion, acoustic metamaterial, wave equation, Klein–Gordon–Fock equation.

3. С
МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В СТРУКТУРНОМ МАТЕРИАЛОВЕДЕНИИ (МНОГОУРОВНЕВЫЕ, МНОГОМАСШТАБНЫЕ МОДЕЛИ, ВИРТУАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ И Т. Д.)

https://doi.org/10.29003/m5485.MMMSEC-2026/50-55

ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ НА БАЗЕ МНОГОМАСШТАБНЫХ ПОДХОДОВ ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ В МИКРОЭЛЕКТРОНИКЕ

***Абгарян Каринэ Карленовна*[1],**
д.ф.-м.н., г.н.с., зав. отделом ФИЦ ИУ РАН,
e-mail: kristal83@mail.ru

[1] *Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук г. Москва, ул. Вавилова дом 44/2*

Аннотация. В работе показано, что в настоящее время интеллектуальные системы активно применяются для проектирования в микроэлектронике. Разработка интеллектуальных систем на базе многомасштабных подходов, реализованных в системах автоматизированного проектирования, позволяет перевести проектирование микроэлектроники с эмпирического пути проб и ошибок на направление, в котором решения оптимизируются начиная с рассмотрения физических характеристик и свойств материалов до архитектуры системы и запуска в производство. Это ускоряет не только отдельные этапы разработки, но и меняет всю логику проектирования, делая ее непрерывной и основанной на данных.

Ключевые слова: интеллектуальные системы, многомасштабное моделирование, проектирование в микроэлектронике, системы автоматизированного проектирования (САПР).

Введение

В настоящее время интеллектуальные системы, имитирующие отдельные возможности человеческого интеллекта, а именно способность самостоятельно анализировать данные, выявлять закономерности, принимать решения и улучшать свою работу на основе опыта, активно применяются практически во всех сферах жизни человека. Развитый в работах академика К.В. Рудакова и его учеников алгебраический подход [1] и разработанный на его основе математический аппарат для работы с эвристическими алгоритмами и корректирующими операциями, дали возможность строить интеллектуальные аналитические программные системы для разных прикладных областей (медицина, финансы, маркетинг и т.д.). В таких системах были реализованы разработанные алгебраические методы, включая синтез мультиалгоритмических конструкций, что позволило получить более высокое качество при решении задач интеллектуального анализа данных. Применение интеллек-

туальных систем в области микроэлекроники на базе многомасштабных подходов, позволяющих с высокой степенью точности воспроизводить сложные физические процессы, является одним из основных трендов в цифровой трансформации общества и автоматизации его ключевых процессов. Их влияние на скорость получения новых технологических решений в данной отрасли постоянно усиливается и все больше сказывается на уровне и качестве жизни людей.

Проектирование ЭКБ микроэлектроники с применением интеллектуальных систем

Построение и применение интеллектуальных систем, базирующихся на разных технологиях, предоставляет новые возможности в различных областях жизнедеятельности человека, в том числе при решении задач, связанных с опережающим развитием в микроэлектронике.

Проектирование ЭКБ микроэлектроники, включая создание ячеек энергонезависимой памяти – сложная инженерная задача, которую в последнее время все активнее решают с применением интеллектуальных систем на основе современных САПР, в которых используются технологии искусственного интеллекта (ИИ) на всех этапах от физического моделирования до системной оптимизации. На сегодня лидером в области разработки систем автоматизированного проектирования в микроэлектронике является компания Synopsys. Пакеты решений Synopsys.ai [2] под управлением искусственного интеллекта на сегодня используются в 9 из 10 крупнейших полупроводниковых компаний, что делает Synopsys одним из первых лидеров в этой области. Необходимо отметить, входящую в состав программных разработок компании Synopsys платформу QuantumATK [3] — мощный инструмент для исследователей, в котором есть возможность связать электронные свойства материалов с макроскопическим поведением устройств на их основе. Однако, из-за санкционных ограничений и стоимости лицензии использование данного продукта в настоящее время затруднено.

Создание интеллектуальных систем на базе многомасштабных подходов [4,5] — это актуальное направление, которое требует отказа от поиска «единой идеальной модели» в пользу динамической архитектуры, способной переключаться между разными уровнями

детализации. Многомасштабное моделирование — это успешная стратегия интеграции мультимасштабных, многофизических данных, позволяющая раскрыть механизмы и объяснить функциональные зависимости при изучении физических явлений и процессов. При этом, в ходе моделирования оптимальный масштаб описания системы меняется в зависимости от фазы ее поведения и решаемой задачи.

В области проектирования в микроэлектронике принципы многомасштабности реализуются на разных уровнях: от уровня материалов, уровня архитектуры кристаллов и пластин до физики отдельных приборов. При этом, в ходе реализации проектных решений разные уровни моделирования могут быть выполнены на разной физической основе (аналоговые схемы для быстрых локальных взаимодействий и вычислений в памяти, цифровые — для управления и другое). Это требует гетерогенных вычислительных аппаратных решений, но при этом связанных едиными законами обмена информацией. Такой подход обеспечивает согласованность поведения системы в целом при разнородности входящих в нее частей.

Примеры, демонстрирующие использование многомасштабных подходов в области микроэлектроники:

- Проектирование нейроморфных систем, начиная с уровня квантово-механического моделирования электронных свойств материалов, входящих в состав элементов кроссбар архитектуры до проектирования аналоговых схем и процессов обучения таких систем.
- Гетерогенные вычисления в памяти (CIM). Многомасштабный подход применяется для разделения вычислений по разным типам памяти в зависимости от их точности и энергоэффективности. Например, гибридный процессор TSMC: Чип разделяет слои нейросети между аналоговой памятью на мемристорах, цифровой SRAM и небольшими цифровыми блоками. Деление происходит на уровне слоев или ядер в зависимости от чувствительности к ошибкам. Это позволяет достичь энергоэффективности 40,91 TFLOPS/Вт (для ResNet-20) при снижении точности менее чем на 0,45%.

В России активно развивается направление, связанное с разработкой интеллектуальных систем на базе многомасштабных подходов для проектирования в микроэлектронике. Действует госу-

дарственная программа для микроэлектроники (Минпромторг). Самый масштабный трек: к 2029 году планируется создать три платформы со встроенным искусственным интеллектом (ИИ) — «САПР Цифра-Про», «САПР Аналог-Про» и «САПР СВЧ-Про». ИИ здесь нужен для автоматизации рутинных этапов проектирования топологии и верификации, что критически важно для сложных схем памяти. Следует отметить пакет «Таумерикс» (Т1 Интеграция) — мультидисциплинарная CAE-платформа для инженерного анализа электроники, позиционирующаяся как замена импортным решениям. САПР СВЧ-интегральных схем: создаётся импортонезависимая система для проектирования гибридных и монолитных СВЧ-микросхем на Astra Linux, с внедрением ИИ-инструментов к 2030 году. Кроме того, в компании Альфачип разрабатываются методы проектирования интегральных схем с применением искусственного интеллекта и реализацией нейронных сетей в системах на кристалле.

Проект «СоВа» (АО НИИМЭ + ФИЦ ИУ РАН) органично вписывается в этот ландшафт. Пока Минпромторг создаёт общие ИИ-платформы для микроэлектроники, «СоВа» решает нишевую, но критически важную задачу: создание отечественного ПО для многомасштабного моделирования именно энергонезависимых ячеек памяти (ReRAM, FeRAM, MRAM).

ПО «СоВа» построена по принципу специализированного многоуровневого ПО.

Уровни ПО дифференцированы по временному и пространственному масштабу задач, начиная с атомарного и молекулярного уровня с переходом на уровень веществ, тел, структур с границами раздела, электрических и электрофизических характеристик приборных структур.

Для решения задач на каждом уровне в ПО «СоВа» подгружаются соответствующие вычислительные модули. Основные программные решения ПО «Сова»:

- Многомасштабные модели и компактные модели по трем элементам хранения (ReRAM, FeRAM, MRAM), позволяющие оперативно получать результаты вычислительных экспериментов с высокой степенью точности.
- Аналитическая БД, которая пополняется за счет использования внешних источников с применением программных решений для сбора информации и результатов расчетов по алгоритмам

оптимизации. Построенные программные решения позволяют обрабатывать информацию за минуты и формировать базы данных (по элементам хранения) для дальнейшего многофакторного анализа, с применением алгоритмов интеллектуального анализа данных.

- Блок решения обратных оптимизационных задач для создания ячеек энергонезависимой памяти на основе технологий ReRAM, FeRAM, MRAM. В основу блока положены макроскопические модели динамики переключения элементов памяти. Модели основаны на описании элементов памяти с помощью нелинейных динамических систем относительно переменных состояния. Модели построены на физических принципах и достаточно точно описывают переключательную динамику элементов энергонезависимой памяти. Реализован экспорт компактных моделей ячеек памяти на основе технологий ReRAM, FeRAM, MRAM в виде программных модулей на языке Verilog-A для интеграции ПО «CoBa» с внешними Spice системами. Построенные решения могут быть использованы при проектировании нейроморфных систем, для создания аналоговых решений в кроссбар-архитектуре.

На сегодня в систему внедрены элементы ИИ. Так LLM открытого доступа Owen 3.6 задействована в среде разработки и обучена на имеющихся данных. Выполняется запуск сценариев (заданий) на базе Promt для работы с ПО «CoBA», используется ИИ-ассистент, выполняющий запуск расчетных заданий и сохранение результатов в БД.

Заключение

Разработка интеллектуальных систем на базе многомасштабных подходов, реализованных в системах автоматизированного проектирования, позволяет перевести проектирование микроэлектроники с эмпирического пути проб и ошибок на направление, в котором решения оптимизируются начиная с рассмотрения физических характеристик и свойств материалов до архитектуры системы и запуска в производство. Это ускоряет не только отдельные этапы разработки, но и меняет всю логику проектирования, делая ее непрерывной и основанной на данных. Развитие таких систем позволит разрабатывать импортозамещающие программные решения на мировом уровне и создавать устройства, построенные на новых физических принципах для опережающего развития микроэлектроники в нашей стране.

Литература

1. Рудаков К.В., Чехович Ю.В. Алгебраический подход к проблеме синтеза обучаемых алгоритмов выделения трендов // Доклады РАН, 2003, том 388, № 1.
2. www.synopsys.com
3. https://www.synopsys.com/silicon/quantumatk.html
4. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л., Журавлев А.А., Морозов А.Ю., Гаврилов Е.С. Многомасштабное моделирование нейроморфных систем. – Москва: МАКС Пресс. – 2022. 128 С. DOI: 10.29003/m3139.978-5-317-06886-8
5. Абгарян К.К. Многомасштабное моделирование в задачах структурного материаловедения – Москва: МАКС Пресс. 2017 – 284 с. ISBN 978-5-317-05707-7

INTELLIGENT SYSTEMS BASED ON MULTISCALE APPROACHES FOR DESIGN IN MICROELECTRONICS

Abgaryan K.K.

Keywords: intelligent systems, multiscale modeling, microelectronics design, computer-aided design (CAD) systems.

УДК 533.922,533.924, 004.85
https://doi.org/10.29003/m5486.MMMSEC-2026/55-58

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ВЫХОДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛАЗМОХИМИЧЕСКОГО ТРАВЛЕНИЯ ПОЛИКРЕМНИЯ В СМЕСИ $HBr/Cl_2/Ar$

Богачев Иван Сергеевич,
техник[1,2]*,*
ibogachev@niime.ru
Оксаниченко Федор Владимирович,
научный сотрудник[1,2]
foksanichenko@niime.ru

[1] *Московский физико-технический институт, Москва, Россия*
[2] *АО «НИИМЭ», Зеленоград, Россия*

Аннотация. В работе предложен ансамбль моделей машинного обучения (ML) для предсказания выходных параметров результирующего профиля плазмохимического травления. На основе гибридной модели плазмохимического травления сгенерирован датасет профилей травления поликремния в смеси $HBr/Cl_2/Ar$, который был подвергнут предобработке. Реализованы модели для предсказания скорости травления, анизотропии, а также формы профиля травления на основе управляющих параметров: напряжения на подложке, мощности, доли Ar, доли Cl_2, а также времени травления.

Ключевые слова: плазмохимическое травление, моделирование ПХТ, машинное обучение, суррогатная модель.

Введение

В наше время основным методом производства сверхбольших интегральных схем (СБИС) является процесс сухого травления, который, в отличие от жидкостного и электрохимического, позволяет соответствовать современным топологическим нормам с субмикронными и нанометровыми размерами элементов [1].

Одним из факторов, обусловливающих большую сложность в процессах ПХТ, является набор управляющих параметров (давление, ВЧ-мощность, температура, загрязнения и др.), что не позволяет использовать чисто экспериментальный подход для поиска оптимального режима травления. Поэтому на сегодняшний день применяются комбинированные подходы моделирования с дополнительной диагностикой.

На данный момент классическое математическое моделирование процесса плазмохимического травления является вычислительно сложной задачей, что не позволяет получать предсказания результатов процесса по набору управляющих параметров в реальном времени. Особенно данная проблема актуализируется из-за общемирового тренда в микроэлектронике, связанного с внедрением Интернета вещей в микроэлектронное производство, для которого необходимы цифровые двойники технологических процессов, способные работать в режиме реального времени.

Использование методов машинного обучения позволяет устранить вышеописанную проблему из-за высокой скорости работы подобных алгоритмов. В предыдущей работе [2] уже был предложен подход к моделированию процесса ПХТ с использованием методов машинного обучения, показавший принципиальную возможность предсказания профиля травления. Однако данная модель не учитывала эволюцию профиля во времени, а также обладала недостаточной точностью предсказания отдельных выходных характеристик. Целью нашей работы является создание ансамбля моделей, которые позволят определять выходные характеристики процесса травления поликремния в смеси $HBr/Cl_2/Ar$, к которым относятся скорость травления и анизотропия, а также форма профиля травления.

Моделирование плазмохимического травления и генерация датасета

В рамках работы была использована физико-химическая модель RIEMANA, представляющая комбинацию двух взаимосвязанных

модулей — «плазма» и «поверхность». Для определения параметров и состава плазмы в работе [3] была использована 0-мерная самосогласованная модель. Второй модуль представляет собой двумерную модель клеточного автомата, основанную на алгоритме Монте-Карло, которая определяет профиль травления.

С помощью вышеописанной физической модели был сгенерирован датасет, состоящий из 14 000 экспериментов, в каждом из которых при фиксированных параметрах (величина отрицательного смещения (U), входной мощности плазмы (W) и состава плазмы) представлена эволюция профиля в течение 60 временных интервалов.

Обучение ML-моделей

Всего в данной работе было рассмотрено 4 вида моделей: предсказание скорости травления ($\boldsymbol{ER}$), предсказание горизонтальной скорости травления ($\boldsymbol{ER_h}$), предсказание формы профиля, нормированной на ширину и высоту, предсказание полной формы профиля. Перед обучением моделей была проведена предварительная обработка исходных данных в 5 этапов: удаление маски, представление профиля в виде ломаной линии, параметризация профиля, устранение шумов (фильтром Савицкого – Голея) и дискретизация. Далее полученные точки (по 200 точек для X и Y) преобразовывались в конкатенированный вектор XY.

С помощью классических методов машинного обучения — линейных моделей, случайных лесов, градиентного бустинга, ансамблей — были обучены модели: первые две предсказывают скалярные величины $\boldsymbol{ER}$ и $\boldsymbol{ER_h}$, третья — вектор XY, нормированный на глубину и ширину травления, а четвёртая — сам вектор XY. Выбор методов обусловлен их различными сильными сторонами: линейные модели обеспечивают высокую скорость обучения и интерпретируемость, случайный лес — устойчивость к выбросам и высокую точность, градиентный бустинг — максимальную точность за счёт последовательного уточнения. Было проведено сравнение точности различных ML алгоритмов, применительно к 4-м вышеописанным задачам. Кроме того было проведено сравнение точности предсказания выходных характеристик с использованием 4-й модели и напрямую с использованием 1 и 2 моделей.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я. Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП транзисторов – Москва: Техносфера, 2011.

2. Оксаниченко Ф.В. Моделирование и оптимизация плазмохимического травления поликремния в смеси HBr/Cl2/Ar с использованием методов машинного обучения // Математическое моделирование в материаловедении электрон. — 2025.

3. Oksanichenko, F.V., Efremov, A.M. Influence of Process Conditions of the Plasmochemical Etching of Polysilicon in a Cl_2/Ar Mixture on Plasma Characteristics and Profile Evolution. *High Energy Chem* 59 (Suppl 3), S268–S272 (2025).

APPLICATION OF MACHINE LEARNING METHODS FOR PREDICTING OUTPUT CHARACTERISTICS OF PLASMA-CHEMICAL ETCHING OF POLYSILICON IN AN HBr/Cl_2/Ar MIXTURE

I.S. Bogachev, F.V. Oksanichenko

Abstract. This work proposes an ensemble of machine learning (ML) models for predicting the output parameters of the resulting profile in plasma-chemical etching. Using a hybrid model of plasma-chemical etching, a dataset of polysilicon etch profiles in an HBr/Cl_2/Ar mixture was generated and pre-processed. Models were implemented to predict the etch rate, anisotropy, and etch profile shape based on the following control parameters: substrate bias voltage, power, Ar fraction, Cl_2 fraction, and etching time.

Key words: plasma-chemical etching, PCE modeling, machine learning, surrogate model.

УДК 533.932:004.896
https://doi.org/10.29003/m5487.MMMSEC-2026/58-61

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИМЕНЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИ-ИНФОРМИРОВАННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ ДЛЯ УСКОРЕНИЯ СЕТОЧНЫХ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ ГАЗОВОЙ ДИНАМИКИ В ПЛАЗМЕННЫХ РЕАКТОРАХ

Бурцев Роман Евгеньевич,
техник[1,2]*,*
burtsev.re@phystech.edu
Оксаниченко Федор Владимирович,
научный сотрудник[1, 2]*,*
foksanichenko@niime.ru

[1] *Московский физико-технический институт, Москва, Россия*
[2] *АО «НИИМЭ», Зеленоград, Россия*

Аннотация. Разработана физическая модель на основе физически-информированных нейронных сетей (PINN), позволяющая предсказывать поля давления и потока газа в осесимметричной двумерной модели

реактора плазмохимического травления для заданной конфигурации управляющих параметров. Определена оптимальная архитектура модели, обучение и валидация произведены на данных, полученных в COMSOL Multiphysics.

Ключевые слова: физически-информированные нейронные сети, PINN, газовая динамика, индуктивно-связанная плазма, плазмохимическое травление, CFD.

Введение

Плазмохимическое травление является одной из ключевых операций в технологическом цикле микроэлектроники: оно позволяет с высокой анизотропией переносить топологический рисунок в слои с нанометровыми размерами элементов [1]. Среди установок для плазмохимического травления особое место занимают реакторы с индуктивно-связанной плазмой (ICP): они обеспечивают высокую плотность плазмы при низком давлении и независимое управление потоком и энергией ионов. Выбор оптимального режима работы реактора путем экспериментального подбора осложнен тем, что прямое измерение параметров плазмы внутри реактора затруднено. Это обосновывает важность математического моделирования физических процессов (газодинамики, переноса и кинетики) в реакторе.

Для такого моделирования традиционно применяются сеточные методы, реализованные, например, в COMSOL Multiphysics. Они обеспечивают необходимую точность, однако требуют больших вычислительных затрат: переход от осесимметричной 2D-постановки к 3D заметно увеличивает время расчёта [2], что затрудняет параметрические исследования и оптимизацию. Это стимулирует поиск более быстрых подходов к моделированию, одним из которых может быть использование нейронных сетей. Классическое использование нейросетей подразумевает интерполяцию искомой функции по имеющимся данным — сгенерированным или экспериментальным. Часто эта интерполяция оказывается недостаточно точной, например слишком гладкой или не учитывающей физические особенности решения. Эти недостатки могут быть компенсированы использованием физически-информированных нейронных сетей.

Физически-информированные нейронные сети (PINN) включают в функцию потерь физические законы в виде дифференциальных уравнений [3]. PINN-модель не зависит от конкретного

вида сетки, а также может быть модифицирована для учета имеющихся данных без значительных изменений архитектуры. Это позволяет комбинировать результаты сеточных методов и нейронных сетей для ускорения процесса моделирования [4].

Целью данной работы является разработка физически-информированной нейронной сети для моделирования газовой динамики в реакторе плазмохимического травления индуктивно-связанной плазмы и оценка ее применимости и времени работы по сравнению с сеточными методами.

Генерация данных

Рассматривается осесимметричная двумерная модель реактора травления поликремния для 300 миллиметровых пластин из кластерной установки, разработанной в рамках ОКР «Кластер ПХТ-65». В качестве рабочего газа был выбран хлор. Управляющими параметрами, относящимися к газодинамике, являются рабочее давление и расход газа. Течение газа в реакторе описывается уравнениями Навье-Стокса и непрерывности, решение которых с использованием традиционных сеточных методов (например метода конечных элементов) уже реализовано в стандартных математических пакетах. Расчёты выполнены в COMSOL Multiphysics 6.4.

Архитектура и обучение модели

Физически-информированная нейронная сеть (в стандартной постановке) представляет собой функцию от координаты и управляющих параметров реактора, возвращающая поля давления и потока газа в заданных условиях. Функция здесь понимается как комбинация аффинных преобразований и функций активации между нейронами разных слоев модели с некоторыми весами и смещениями, определить которые — и есть задача обучения модели. Обучение сводится к минимизации функции потерь, которая включает невязки уравнений Навье-Стокса, непрерывности и граничных условий, а также отклонение от данных, сгенерированных в COMSOL в заданной геометрии. Валидация модели производилась на тестовой части выборки, не участвовавшей в обучении.

Список использованных источников

1. Красников Г.Я. Конструктивно-технологические особенности субмикронных МОП-транзисторов. — 2011.

2. Brcka J. Plasma Scaling Leads Transition from 2D to true 3D Models. — 2015.

3. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G. E. Physics-informed neural networks: A deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations //Journal of Computational Physics. — 2019. — Т. 378. — С. 686–707.

4. Aliakbari M. et al. Predicting high-fidelity multiphysics data from low-fidelity fluid flow and transport solvers using physics-informed neural networks //International Journal of Heat and Fluid Flow. — 2022. — Т. 96. — С. 109002.

INVESTIGATION OF PHYSICS-INFORMED NEURAL NETWORKS FOR ACCELERATING GRID-BASED GAS DYNAMICS SIMULATION IN PLASMA REACTORS

R.E. Burtsev, F.V. Oksanichenko

Abstract. A physics-based model built on physics-informed neural networks (PINNs) has been developed to predict the pressure and gas flow fields in a two-dimensional projection of a plasma-chemical etching reactor for a given configuration of control parameters. The optimal model architecture has been determined; training and validation were performed on data obtained in COMSOL Multiphysics.

Key words: physics-informed neural networks, PINN, gas dynamics, inductively coupled plasma, plasma-chemical etching, CFD.

https://doi.org/10.29003/m5488.MMMSEC-2026/61-64

РЕАЛИЗАЦИЯ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ НА ПЛИС: ОБЗОР СОВРЕМЕННЫХ ПОДХОДОВ И ПРОФИЛИРОВАНИЕ УСКОРИТЕЛЯ

Генин Георгий Константинович,
техник[1],
ggenin@niime.ru
Кобелев Виктор Антонович,
младший научный сотрудник[1]
vkobelev@niime.ru
Тельминов Олег Александрович,
к.т.н., начальник отдела[1]
otelminov@niime.ru

[1] АО «НИИМЭ», 124460, Россия, Москва, Зеленоград, ул. Академика Валиева, д. 6, стр. 1

Аннотация. Рассмотрены современные подходы к автоматизации реализации нейронных сетей на ПЛИС. Представлен программно-управляемый тракт выполнения ONNX-моделей на Zynq-7000 и результаты профилирования ResNet-18. Установлено, что 98,0% времени выполнения на плате приходится на программируемую логику; основные потери

связаны с последовательной работой управляющего автомата Conv/Gemm и ожиданием результатов MAC8.

Ключевые слова: ПЛИС, нейронные сети, ONNX, аппаратное ускорение, профилирование.

Введение

Современные средства автоматизации реализации нейронных сетей на ПЛИС развиваются в двух направлениях. В hls4ml [1], SAMO [2] и NN2FPGA [3] формируется специализированная потоковая архитектура, а параметры параллелизма и распределение ресурсов подбираются для конкретной модели. HARFLOW3D [4] дополняет потоковый подход параметризацией вычислительных блоков во время работы. QONNX [5] решает связанную задачу представления квантованных моделей в формате, совместимом с ONNX. Общей проблемой остается согласование вычислений, передачи данных и ограниченных ресурсов ПЛИС.

Постановка задачи

В проекте onnx2rtl исследуется программно-управляемая архитектура, в которой одна аппаратная конфигурация исполняет разные модели в пределах поддерживаемого набора операторов. Компилятор выполняет последовательность ONNX → промежуточное представление → план памяти → план команд → исполняемый пакет. Процессорная система Zynq интерпретирует команды и передает порции данных через AXI DMA в вычислитель ПЛИС. Цель работы — определить фактическое узкое место такого исполнения и сформулировать направление уменьшения задержки без изменения целочисленной семантики.

Эксперимент и результаты

Стенд построен на Zynq XC7Z020 с частотой программируемой логики 100 МГц. Диагностическая сборка использует 12 742 LUT, 8 591 триггер, 19 эквивалентных блоков BRAM36 и 11 DSP; временные ограничения выполнены с WNS +0,238 нс. В вычислителе используется один MAC8, выполняющий восемь знаковых умножений INT8 за одну операцию DOT8.

Для профилирования в программную и аппаратную части введены счетчики времени и состояний. После трех разогревочных запусков выполнено десять измеряемых запусков ResNet-18; во всех случаях итоговый вектор и четыре промежуточные контрольные точки побитно совпали с независимым целочисленным эталоном.

Медианная задержка выполнения на плате составила 38,450 с. Внутри программируемой логики проходит 37,683 с, или 98,005% полного времени. На группу состояний Conv/Gemm, связанных с управлением, адресацией, загрузкой и сохранением данных, приходится 55,184%, еще 24,370% занимает ожидание результата MAC8. Операции DOT8 выдаются в MAC8 только в 6,2165% тактов ПЛИС, то есть в среднем примерно один раз за 16 тактов. Производительность по логическим операциям Conv и Gemm составляет 47,18 MMAC/с при арифметическом потолке одного MAC8 800 MMAC/с. Вся часть выполнения вне ПЛИС занимает около 2%, поэтому предельная пропускная способность DDR/AXI и подготовка пакетов ARM не являются главным ограничением данного варианта.

Заключение

Профилирование локализовало основную потерю производительности внутри Conv/Gemm executor. Следующий этап исследования будет состоять в сравнении двух последовательных архитектурных изменений: конвейеризации выдачи DOT8 без ожидания каждого результата и изменения организации Conv/Gemm dataflow для сокращения управляющих состояний. Варианты будут сравниваться по полной задержке, частоте выдачи MAC8, ресурсам ПЛИС и побитной эквивалентности результатов. Такой порядок позволяет выбирать дальнейшее решение по измеряемому эффекту, а не по формальному увеличению числа вычислительных блоков.

Библиографический список

1. Aarrestad T. et al. Fast convolutional neural networks on FPGAs with hls4ml // Machine Learning: Science and Technology. — 2021. — Vol. 2. — 045015. DOI: 10.1088/2632-2153/ac0ea1.

2. Montgomerie-Corcoran A., Yu Z., Bouganis C.-S. SAMO: Optimised Mapping of Convolutional Neural Networks to Streaming Architectures // FPL. — 2022.

3. Bosio R. et al. NN2FPGA: Optimizing CNN Inference on FPGAs With Binary Integer Programming // IEEE TCAD. — 2025. — Vol. 44, No. 5. — P. 1807–1818. DOI: 10.1109/TCAD.2024.3507570.

4. Toupas P. et al. HARFLOW3D: A Latency-Oriented 3D-CNN Accelerator Toolflow for HAR on FPGA Devices // FCCM. — 2023. — P. 144–154. DOI: 10.1109/FCCM57271.2023.00024.

5. Pappalardo A. et al. QONNX: Representing Arbitrary-Precision Quantized Neural Networks // 4th Workshop on Accelerated Machine Learning (AccML), HiPEAC. — 2022. — arXiv:2206.07527.

NEURAL NETWORK IMPLEMENTATION ON FPGAS: REVIEW OF RECENT APPROACHES AND ACCELERATOR PROFILING

G.K. Genin, V.A. Kobelev, O.A. Telminov

Abstract. Recent approaches to automated neural-network implementation on FPGAs are reviewed. A software-controlled ONNX execution flow for Zynq-7000 is presented. ResNet-18 profiling shows that 98.0% of board-side execution time is spent inside programmable logic, mainly in Conv/Gemm control states and MAC8 result waiting.

Keywords: FPGA, neural networks, ONNX, hardware acceleration, profiling.

УДК 621.3
https://doi.org/10.29003/m5489.MMMSEC-2026/64-66

ЗАДАЧИ ОПТИМИЗАЦИИ В МОДЕЛИРОВАНИИ ЭЛЕМЕНТОВ FeRAM

Журавлев А.А.,
zhuravlyow.andrei@gmail.com
Абгарян К.К., д.ф.-м.н.,
abgaryankk@yandex.ru
Ревизников Д.Л., д.ф.-м.н.,
reviznikov@gmail.com

ФИЦ ИУ РАН. 119333, Москва, Вавилова, д. 44, кор. 2

Аннотация. Представлена модель динамики переключения в элементах энергонезависимой памяти FeRAM на основе HZO, совмещающая квантово-механический расчет на атомарном уровне и термодинамическое описание системы на уровне элемента памяти. Для данной модели сформулированы и решены задачи параметрической идентификации и оптимального управления.

Ключевые слова: FeRAM, HZO, математическое моделирование.

Согласно разработанной модели [1], сегнетоэлектрическая фаза элемента FeRAM разделена на домены, характеризующиеся своим состоянием поляризации. Каждый домен может находиться в одном из двух устойчивых состояний, соответствующих локальным минимумам потенциальной энергии. Переходы между состояниями происходят с интенсивностями, определяемыми энергетическими барьерами состояний. Энергетический профиль определяется из квантово-механического расчета [2]. Уравнения для вероятностей состояний доменов выглядят следующим образом:

$$\frac{dp_i^1}{dt} = -\beta_i p_i^1 + \gamma_i p_i^2$$

$$\frac{dp_i^2}{dt} = \beta_i p_i^1 - \gamma_i p_i^2$$

Здесь нижние индексы соответствуют номеру домена, а верхние индексы — состоянию домена, t — время, β_i — интенсивность перехода из состояния 1 в состояние 2, γ_i — интенсивность обратного перехода.

Интенсивности переходов определяются выражениями:

$$\beta_i = \nu \exp(-\frac{\Delta U^1}{\xi_i kT})$$

$$\gamma_i = \nu \exp(-\frac{\Delta U^2}{\xi_i kT})$$

где T — температура, k — константа Больцмана, ν — предэкспоненциальный множитель, выражающий частоту атомарных переходов с учетом столбцовой структуры доменов, ΔU^1, ΔU^2 — энергетические барьеры, определяемые по профилю потенциальной энергии. Так как эти барьеры получены для идеального кристалла сегнетоэлектрической фазы, введен в рассмотрение индивидуальный для каждого домена параметр ξ_i, учитывающий неидеальность кристаллической структуры. Используется Гамма-распределение.

Текущее значение поляризации «паразитной» (не сегнетоэлектрической) фазы определяется исходя из линейной зависимости.

Итоговое значение поляризации элемента в текущий момент времени вычисляется суммированием поляризаций доменов сегнетоэлектрической фазы с учетом плотности распределения $\rho(\xi)$ и поляризации «паразитной» фазы:

$$P(t) = f \sum \rho(\xi_i)\Delta\xi_i \left(P_i(U^1)p_i^1(t) + P_i(U^2)p_i^2(t)\right) + (1-f)P_m(t)$$

где f — доля сегнетоэлектрической фазы в элементе.

Тестирование модели проводилось на экспериментальных данных по динамике переключения элемента сегнетоэлектрической памяти на основе оксида гафния-циркония. Результаты моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными для всех рассмотренных режимов.

Применительно к описанной модели рассматриваются два класса задач оптимизации: задача параметрической идентификации модели и задача оптимального управления элементами памяти.

Для идентификации параметров модели используются методы оптимизации. Сначала по экспериментальным данным необходимо извлечь ряд ключевых показателей (дескрипторов), которые описывают динамику переключения элемента. В качестве ключевых дескрипторов выделим следующий набор: максимальное напряжение в процессе работы элемента, полный заряд, проходящий через элемент за цикл переключения, и заряд, прошедший через элемент при снятии напряжения, а также геометрические характеристики элемента.

В качестве идентифицируемых параметров выступают доля сегнетоэлектрической фазы и диэлектрическая проницаемость паразитной фазы.

Рассмотрена задача оптимального управления, которая заключается в поиске режимов, обеспечивающих минимизацию напряжений переключения при одновременной минимизации времени переключения. В качестве управляющего воздействия выступает эпюра напряжения. Для данной задачи двухкритериальной оптимизации построена область Парето.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-91-01012

Литература

1. Zhuravlev A.A., Abgaryan K.K., Ital'yantsev A.G., Reviznikov D.L. Multiscale Modeling of Nonvolatile Memory Elements (FeRAM) // Russian Microelectronics, 2026 — V. 55 — P. 114–122.

2. Zhuravlev, A.A., Abgaryan, K.K., Reviznikov, D.L. Quantum Mechanical Simulation of Polarization Switching in HfO2 Crystals. // Russian Microelectronics, 2023 — V. 52 — P. 805–809.

OPTIMIZATION PROBLEMS IN FeRAM ELEMENTS MODELING

Zhuravlev A.A., Abgaryan K.K., Reviznikov D.L.

Abstract. A model of switching dynamics in FeRAM non-volatile memory elements based on HZO is presented. It combines quantum mechanical calculations at the atomic level and a thermodynamic description of the system at the memory element level. Parametric identification and optimal control problems are formulated and solved for this model.

Keywords: FeRAM, HZO, numerical modelling.

УДК 004.02
https://doi.org/10.29003/m5490.MMMSEC-2026/67-69

ИТЕРАЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ ДОЗОВОЙ КОРРЕКЦИИ ДЛЯ ТОЧНОЙ ПОЛУТОНОВОЙ ЛИТОГРАФИИ

Зубов Д.Н.*, *Обыденнов Д.В.*, *Осипов Н. Н.*, *Порохов Н.В.*, *Шибалов М.В.*, *Ашарчук И.М.*, *Вовк Н.А.*, *Тархов М.А.
zubov_dn@mail.ru

ИНМЭ РАН, г. Москва

Аннотация. В данной работе разбираются некоторые вопросы полутоновой электронно-лучевой литографии для целей получения точных микроструктур. Предложен и апробирован на практике итеративный алгоритм дозовой коррекции в применении к прямой электронно-лучевой литографии на слоях SiO_2.

Ключевые слова: полутоновая литография, алгоритм дозовой коррекции.

Введение

Основная особенность метода полутоновой литографии состоит в использовании режимов не полной проявки резистивного материала, с целью формирования рельефа с использованием множества значений глубин или высот из некоторого диапазона, ограниченного выбранным технологическим процессом. Соответственно одной из основных задач в полутоновой литографии является тонкое управление глубиной проявки резиста в каждой точке области интереса. Основным доступным способом управления глубиной проявки является экспонирование материала с помощью специальной рассчитанных дозовых профилей (по сути — функций удельной экспозиции от координат соответствующей точки). Подобный подход технически проще всего реализуется для случая электронно-лучевой литографии. По этой причине в полутоновой литографии ключевую роль играют алгоритмы расчета и коррекции необходимых дозовых профилей.

Алгоритм дозовой коррекции для полутоновой литографии

При использовании полутоновой литографии с целью создания трехмерных микроструктур с аспектным отношением, приближающимся к единице, основные сложности расчета дозового профиля обусловлены двумя факторами. Первый из этих факторов

связан с существованием различных механизмов рассеяния электронов, при их прохождении через материалы. Итогом действия этого фактора оказывается экспозиционная модификация резиста, даже в тех областях, которые формально не были подвержены прямому воздействию первичных электронов луча. Второй фактор связан с влиянием геометрического окружения участков поверхности резиста, на ход процесса проявки материала на данных участках, даже при условии одинаковой истинно экспозиционной дозы. Существенное отличие данного фактора от эффекта близости состоит в том, что он может реализовываться даже в случае однородного по объему начального состояния резиста — например, в случае если в слое однородного материала уже есть предварительно сформированный рельеф, то этот рельеф будет влиять на результат частичного растворения материала.

В данной работе предлагается сравнительно простой итеративный алгоритм дозовой коррекции с использованием локальных кривых контраста. В основе данного алгоритма лежит идея расчета использования локальных характеристик контраста резиста для каждой точки структуры. Далее, путем интерполяции локальной зависимости глубина-доза, производится вычисление коррекции к дозовому профилю для следующей итерации алгоритма. В качестве входных данных алгоритм использует начальный вид дозовых профилей пробных структур для текущего шага и соответствующие им геометрические профили, получаемые после процедуры литографии. Таким образом, дозовые профили задаются либо как результат работы алгоритма из предыдущего шага, либо вначале относительно произвольно (в т. ч. возможно из другой модели). В свою очередь геометрические профили являются результатом эксперимента и могут быть получены, например, методом АСМ.

Выводы

Предложенный алгоритм был успешно применен для решения практической задачи формирования микрозеркал с параболическим профилем, диаметром 10 мкм в пленке оксида кремния начальной толщиной 4 мкм, при использовании излучения с энергиями электронов 30 и 50 кэВ. При этом выбор начального приближения может быть осуществлен достаточно произвольно (например в виде профиля линейной зависимости удельной дозы

от радиуса с максимумом в центре структуры), и сходится с высокой точностью в пределах 5 итераций процесса коррекции. Достоинством алгоритма также является отсутствие необходимости использования дополнительных параметров и предположений о поведении материала и рассеянии электронов в нем.

ITERATION ALGORITHM FOR PRECISE GREYSCALE LITHOGRAPHY

Zubov D.N., Obydennov D.V., Osipov N.N., Porokhov N.V., Shibalov M.V., Asharchuk I.M., Vovk N.A., Tarkhov M.A.

Abstract. In this work examines some aspects of grayscale electron-beam lithography aimed at producing precise microstructures. An iterative dose correction algorithm for direct electron-beam lithography on SiO_2 layers has been proposed and experimentally validated.

Keywords: greyscale lithography, dose correction algorithm.

УДК 536.2.01, 536.21
https://doi.org/10.29003/m5491.MMMSEC-2026/69-73

ФОНОННЫЙ ТЕПЛОПЕРЕНОС В ГРАФЕНОВЫХ НАНОЛЕНТАХ СО СМЕШАННЫМ ТИПОМ ГРАНИЦ

Инь Фэй, *аспирант,*
yinfei0426@outlook.com
Баринов Александр Алексеевич
barinov@bmstu.ru
Лю Шисян, *аспирант*
lyu@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Аннотация. Исследовано влияние смешанного типа границ на фононный теплоперенос в графеновых нанолентах. Расчёты выполнены с помощью метода молекулярной динамики, метода Монте-Карло для фононов и решения линеаризованного уравнения Больцмана с использованием специально обученного нейроэволюционного потенциала. Показано, что снижение теплопроводности определяется не только геометрическим граничным рассеянием, а также тем, что смешанный тип границ перестраивает колебательные состояния и изменяет соотношение между нормальными процессами и процессами переброса фононов. Для нанолент полное решение уравнения Больцмана для фононов показывают меньшую коллективную поправку в сравнении с приближением времени релаксации, что указывает на ослабление коллективной связи между модами.

Ключевые слова: графеновые наноленты, теплопроводность, молекулярная динамика, метод Монте-Карло, уравнение Больцмана, смешанный тип границ.

Введение

Теплоперенос в графеновых нанолентах (graphene nanoribbons, GNRs) существенно зависит от их поперечного размера (ширины) и атомной структуры границ. Граничная шероховатость и атомистическая перестройка границ (при релаксации) усиливают рассеяние фононов, а также могут изменять спектр и пространственный характер колебательных мод [1, 2]. В двумерных материалах нормальные трёхфононные процессы способны давать заметный коллективный вклад в перенос тепла, поэтому независимое релаксационное описание процессов взаимодействия не всегда является достаточным [3, 4].

В настоящей работе рассматриваются графеновые наноленты со смешанным типом границ (Cove-GNR). Цель работы состоит в определении того, насколько уменьшение теплопроводности связано с классическим отражением фононов на границе (чисто геометрическая интерпретация), а насколько — с перестройкой границ (на атомарном уровне), изменениями колебательных мод и внутренних процессов рассеяния.

Методика расчёта

Для согласованного описания межатомных взаимодействий разработан специализированный нейроэволюционный потенциал NEP-GNRs путём дообучения универсальной модели NEP89 [5, 6]. Обучающая выборка включала структуры типа «кресло», «зигзаг» и смешанного типа границ, и содержала 713 конфигураций. Моделируемый потенциал взаимодействия фононов в рамках теории функционала плотности (density functional theory, DFT) воспроизводил энергии со средней абсолютной ошибкой около 27 мэВ/атом и использовался как единая атомистическая модель в молекулярной динамике и при построении силовых констант [7].

Теплопроводность как функция длины графеновой наноленты определялась методом молекулярной динамики (molecular dynamics, MD) с учетом перестройки границы. Для независимой оценки геометрического граничного рассеяния выполнялись расчёты методом Монте-Карло (Monte-Carlo, MC). В MC для нанолент типа «кресло» и смешанным типом границ использовались

одинаковые спектральные свойства идеального графена, поэтому различие в результатах определялось формой границы. Вероятность зеркального отражения на границе задавалась в рамках модели Займана – Соффера при значении среднеквадратичной шероховатости 0,1 нм. Сопоставление MD и MC позволило отделить вклад рассеяния на границе в теплопроводность от вклада эффекта перестройки границ на атомарном уровне.

Коллективные эффекты исследовались сравнением теплопроводности в приближении времени релаксации (relaxation time approximation, RTA) и теплопроводности при прямом решении полного линеаризованного уравнения Больцмана (LBTE). При этом трехфононные процессы разделялись на нормальные (N) и процессы переброса (U). В исследовании также рассматривались фактор участия (participation factors) и собственные векторы колебательных мод.

Результаты и обсуждение

По результатам расчета теплопроводности нанолент различной длины, ширины и температуры (согласно рис. 1) установлено, что теплопроводность нанолент со смешанным типом границ ниже, чем у нанолент типа «кресла». Также при увеличении длины теплопроводность нанолент возрастает, однако для смешанного типа границ этот рост слабее. Как видно из рис. 1б, MD-модель предсказывает более сильное снижение теплопроводности, чем MC-модель, учитывающая только классическое отражение фононов на границе. В связи с этим можно сделать вывод, что граничное рассеяние описывает лишь часть эффекта, связанного с периодичностью границ.

Расчёты LBTE также выявляют ослабление коллективного переноса. Для нанолент типа «кресло» (AGNR) шириной 1 нм коллективная поправка уменьшается примерно с 0,70 при 100 К до 0,28 при 1000 К, тогда как для нанолент со смешанным типом границ (Cove-GNR) той же ширины она составляет около 0,19 и 0,16 соответственно (рис. 1в). Одновременно уменьшается отношение частот N- и U-рассеяния. Таким образом, периодическая граница у Cove-GNR влияет не только на взаимодействие фононов с границей, но и на трёхфононные процессы.

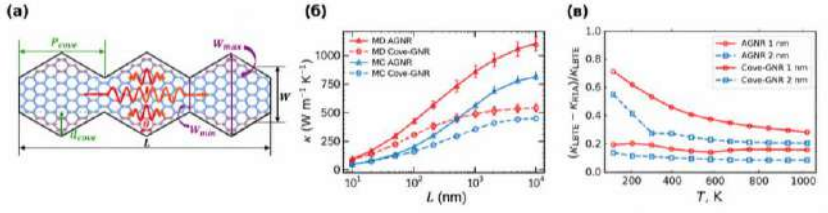


Рисунок 1 — Схема и результаты основных расчётных методов:
(а) структура Cove-GNR; (б) зависимость теплопроводности наноленты шириной W=20 нм от длины по данным MD- и MC-моделей; (в) коллективная поправка в теплопроводность, определяемая из полного решения LBTE и RTA для AGNR и Cove-GNR шириной 1 и 2 нм

Выводы

Периодические границы подавляют фононный теплоперенос в графеновых нанолентах за счёт сочетания граничного эффекта и механизма перестройки границы на атомарном уровне. Сравнение MD- и MC-моделей показывает, что классическое отражение фононов (геометрическое приближение) объясняет лишь часть эффекта снижения теплопроводности. Решение LBTE выявляет уменьшение коллективной поправки и относительной роли нормальных процессов, а анализ колебательных мод подтверждает перестройку спектра фононов вблизи границ. Совместное применение молекулярной динамики, метода Монте-Карло и уравнения Больцмана позволяет последовательно связать атомарную структуру моделируемых границ с изменением интенсивности теплопереноса (теплопроводностью).

Список использованных источников

1. Aksamija Z., Knezevic I. Lattice thermal conductivity of graphene nanoribbons: Anisotropy and edge roughness scattering // *Applied Physics Letters*, 2011. Vol. 98, 141919.

2. Wang Y., Qiu B., Ruan X. Edge effect on thermal transport in graphene nanoribbons: A phonon localization mechanism beyond edge roughness scattering // *Applied Physics Letters*, 2012. Vol. 101, 013101.

3. Liu S. et al. Quantifying particle and wave effects in phonon transport of pillared graphene nanoribbons. Int. J. Therm. Sci., 2025, vol. 217, art. 110067. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2025. 110067

4. Cepellotti A. et al. Phonon hydrodynamics in two-dimensional materials // *Nature Communications*, 2015. Vol. 6, 6400.

5. Fan Z. et al. Neuroevolution machine learning potentials: Combining high accuracy and low cost in atomistic simulations and application to heat transport // *Physical Review B*, 2021. Vol. 104, 104309.

6. Liang T. et al. NEP89: Universal neuroevolution potential for inorganic and organic materials across 89 elements. *arXiv:2504.21286*, 2025.

7. Yin F. et al. Accelerated phonon transport calculations for nanostructures: Combining neuroevolution potentials and compressed sensing // *Journal of Applied Physics*, 2026. Vol. 139, 135103.

PHONON HEAT TRANSPORT IN GRAPHENE NANORIBBONS WITH COVE-SHAPED EDGES

F. Yin, A.A. Barinov, S. Liu

Abstract. Phonon heat transport in graphene nanoribbons with periodically modulated edges is investigated using molecular dynamics, phonon Monte Carlo simulations, and the direct solution of the linearized phonon Boltzmann transport equation. A graphene-nanoribbon-specific neuroevolution potential is employed to provide a consistent atomistic description. The comparison between molecular dynamics and Monte Carlo results shows that geometric boundary scattering accounts for only part of the conductivity reduction. Edge modulation also modifies vibrational states and the balance between Normal and Umklapp scattering processes. Full-BTE calculations reveal a smaller collective correction beyond the relaxation-time approximation in modulated nanoribbons, indicating weakened collective mode-to-mode coupling.

Key words: graphene nanoribbons, thermal conductivity, molecular dynamics, Monte Carlo method, Boltzmann transport equation, periodic edge modulation.

УДК 004.6
https://doi.org/10.29003/m5492.MMMSEC-2026/73-77

НЕЙРОСЕТЕВЫЕ МЕТОДЫ В МНОГОМАСШТАБНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ НАНОРАЗМЕРНОГО ТЕПЛОПЕРЕНОСА В ЭЛЕКТРОННЫХ КОМПОНЕНТАХ

Колбин Илья Сергеевич,
к.ф.-м.н., научный сотрудник[1]
iskolbin@ya.ru

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. Проведен обзор применения нейронных сетей в задачах наноразмерного теплопереноса в электронных компонентах, были рассмотрены машинно-обученные межатомные потенциалы, физически-информированные нейронные сети и глубокие операторные сети для решения кинетического уравнения Больцмана для фононов, исследованы графовые суррогатные модели теплопроводности кристаллической решётки и теплопроводность на интерфейсах. Приведены ограничения и перспективы интеграции в многомасштабные цепочки моделирования.

Ключевые слова: с межатомные потенциалы, MLIP, физически-информированные нейронные сети, PINN, фононное уравнение Больцмана, BTE, наноразмерный теплоперенос, интерфейсная теплопроводность, многомасштабное моделирование.

Введение

Миниатюризация электронных компонентов создаёт локальные «горячие точки» с существенными тепловыми потоками, когда размер нагреваемой области становится сопоставимым со средним свободным пробегом фононов, закон Фурье перестаёт адекватно описывать перенос тепла: для получения хорошей точности в условиях разумной вычислительной сложности требуется многомасштабный подход [1, 2]. Мезоскопический режим хорошо описывается кинетическим уравнением Больцмана для фононов (BTE), которое позволяет учитывать размерные эффекты, рассеивание на интерфейсе, анизотропию материалов [2, 3]. Прямые атомистические методы, вычислительно затратны (теория функционала плотности, DFT) или неточны (классические потенциалы). Численное решение уравнения Больцмана в общем случае также требует трудоёмких вычислений. Для разрешения перечисленных сложностей в последнее время активно применяются нейросетевые методы: как ускорители микроскопических расчётов, в качестве суррогатов коэффициентов переноса в моделях теплопереноса, в роли прямых решателей кинетических уравнений.

Машинно-обученные межатомные потенциалы

Машинно-обученные межатомные потенциалы (MLIP) развиты в семействах SchNet, MTP, DeePMD-kit и эквивариантных графовых сетей (NequIP, MACE), обеспечивающих переносимость между фазами и температурами при точности, близкой к методам на основе теории функционала плотности [4], при этом их скорость расчёта на несколько порядков выше. Характерные работы: теплоперенос в нанокристаллическом Si [5], интерфейсная теплопроводность Ga_2O_3/SiC для силовой электроники [6]. Представляет интерес платформа kALDo 2.0, которая автоматизирует цепочку «перво-принципные расчёты → межатомный потенциал → расчёт теплопереноса» [7].

Физически-информированные сети (PINN) и глубокие операторы

Подход PINN [8] перенесён на кинетическое уравнение Больцмана для фононов: получены решения в условии сильной температурной неравновесности, недостижимых методами неравновесной молекулярной динамики [3]. Глубокие операторные сети (DeepONet) [9] служат параметрическими суррогатами операторов решения уравнений в частных производных, что открывает возможность быстрого решения обратных задач для подбора параметров наноструктрур с требуемыми тепловыми свойствами.

Суррогатные модели и многомасштабная интеграция

Для электронных компонентов важна связка суррогатных моделей с макромасштабным проектированием: стоит отметить унифицированный электро-тепловой фреймворк для оптимизации нейросетевых суррогатных моделей для 3D-сквозных контактов (TSV), который опубликован в IEEE TCAD [10].

Проблемы и перспективы

Ключевые ограничения: переносимость обученных межатомных потенциалов и суррогатных моделей за пределы обучающих данных, отсутствие количественных оценок погрешности, дефицит качественных данных, корректное сопряжение цепочки «электрон–фононный уровень → кинетическое уравнение Больцмана для фононов → континуум» в единую верифицируемую модель до сих пор является открытой задачей. Перспективы — фундаментальные модели материалов, активное обучение и «цифровые двойники» компонентов с нейросетевым уровнем, замещающим часть микроскопических расчётов.

Выводы

Нейросетевые методы перешли из роли вспомогательного «ускорителя» молекулярной динамики в полноценный класс многомасштабных моделей теплопереноса. Для задач теплопереноса в электронике в качестве приоритета представляется верифицируемая цепочка, связывающая электрон-фононный уровень, интерфейсную теплопроводность и континуальную модель теплопроводности с заменой вычислительно сложных звеньев на суррогатные нейросетевые модели.

Список использованных источников

1. Хвесюк В.И., Скрябин А.С. Теплопроводность наноструктур. Теплофизика высоких температур, том 55, н. 3, с. 446–471 (2017). 10.7868/S00403 64417030127.

2. Абгарян К.К., Колбин И.С. Вычисление эффективного коэффициента теплопроводности сверхрешетки на основе кинетического уравнения Больцмана с использованием первопринципных расчетов. Известия ВУЗов: материалы электронной техники, том 22, н. 3, с. 190-196 (2019). 10.17073/1609-3577-2019-3-190-196

3. Li R., Lee E., Luo T. Physics-informed neural networks for solving multiscale mode-resolved phonon Boltzmann transport equation // Materials Today Physics, 2021. Vol. 19, 100429. 10.1016/j.mtphys.2021.100429.

4. Batatia I., Benner D., Haber Y. et al. MACE: higher order equivariant message passing neural networks for accurate and scalable atomistic simulations // 36th Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2022). 10.48550/arXiv.2206.07697.

5. Rezgui H., Coll Benejam C., Sotomayor Torres C. et al. Phonon-mediated thermal transport in nanocrystalline silicon using machine-learning interatomic potentials // arXiv preprint arXiv:2607.06470, 2026. 10.48550/arXiv.2607.06470.

6 Liu N., Shen C., Cao Y. et al. Physics-grounded understanding of thermal boundary conductance between Ga_2O_3 and SiC from a feedforward neural network potential // arXiv preprint arXiv:2605.05620, 2026. 10.48550/arXiv.2605.05620.

7. Barbalinardo G., Chen Z., Folkner D. et al. kALDo 2.0: scalable thermal transport from first principles and machine learning potentials // arXiv preprint arXiv:2602.23728, 2026. 10.48550/arXiv.2602.23728.

8. Raissi M., Perdikaris P., Karniadakis G. Physics-informed neural networks: a deep learning framework for solving forward and inverse problems involving nonlinear partial differential equations // J. Comput. Phys., 2019. Vol. 378, pp. 686–707. 10.1016/j.jcp.2018.10.045.

9. Lu L., Jin P., Pang G. et al. Learning nonlinear operators via DeepONet based on the universal approximation theorem of operators // Nature Machine Intelligence, 2021. Vol. 3, pp. 218–229. 10.1038/s42256-021-00302-5.

10. Gharib M., Popryho L., Partin-Vaisband I. From Physics to Surrogate Intelligence: A Unified Electro-Thermo-Optimization Framework for TSV Networks // IEEE Trans. CAD, 2026. 10.48550/arXiv.2603.29268.

NEURAL NETWORK METHODS IN MULTISCALE MODELING OF NANOSCALE HEAT TRANSFER IN ELECTRONIC COMPONENTS

Kolbin I.S.

Abstract. This paper reviews neural networks for nanoscale heat transfer in electronic components: machine-learned interatomic potentials for molecular dynamics, physics-informed neural networks and deep operators for the phonon Boltzmann equation, graph surrogate models of lattice and interfacial thermal conductance.

Keywords: machine-learned interatomic potentials, physics-informed neural networks, PINN, phonon Boltzmann equation, nanoscale heat transfer, multiscale modeling.

УДК 536.2.01, 536.21
https://doi.org/10.29003/m5493.MMMSEC-2026/77-80

ОТ МИКРОСКОПИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФОНОНОВ К ТЕПЛОПЕРЕНОСУ В МИКРО- И НАНОСТРУКТУРАХ

Лю Шисян, аспирант,
lyu@bmstu.ru
Баринов Александр Алексеевич, к.т.н., доцент
barinov@bmstu.ru
Хвесюк Владимир Иванович, *д.т.н., профессор,*
khvesyuk@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва

Аннотация. В работе рассмотрено моделирование фононного теплопереноса в микро- и наноструктурах на различных пространственных масштабах. Исследовано влияние квантового ограничения на фононный спектр и теплоёмкость наноструктур. Для расчёта фононных свойств сложных систем используется подход NEP-kappa, объединяющий машинно-обученные межатомные потенциалы с решением фононного уравнения Больцмана. Неравновесный перенос в наноразмерных устройствах моделируется методом Монте-Карло (решатель PhonoMC). Также рассматривается избирательное по частоте возбуждение фононов как способ управления теплопереносом.

Ключевые слова: фононы, теплоёмкость, квантовое ограничение, уравнение Больцмана, метод Монте-Карло, машинно-обученные потенциалы.

Введение

При уменьшении характерного размера твёрдотельной структуры до нанометрового масштаба её теплофизические свойства могут существенно отличаться от свойств объёмного материала. Конечный размер влияет как на распространение фононов, так и на их колебательные состояния.

При размерах, сопоставимых с характерными длинами волн фононов, квантовое ограничение приводит к изменению фононного спектра и плотности состояний. Это отражается на теплоёмкости и характеристиках теплопереноса.

Для исследования этих эффектов на различных пространственных масштабах используются машинно-обученные межатомные потенциалы, фононное уравнение Больцмана и методы Монте-Карло. Эти подходы позволяют анализировать как собственные фононные свойства материалов, так и особенности переноса, связанные с рассеянием, геометрическим ограничением и размерными эффектами [1, 2].

Моделирование и результаты

В тонких плёнках, нанонитях и квантовых точках фононный спектр становится более дискретным по сравнению с объёмным материалом. С уменьшением размерности структуры изменяется плотность состояний, что непосредственно влияет на теплоёмкость. Для кремниевых наноструктур показано, что при низких температурах теплоёмкость существенно зависит от размера и размерности системы вследствие квантового ограничения и вклада поверхностных колебательных мод [3, 4].

Для сложных наноструктур прямые расчёты фононных свойств методами *ab initio* требуют значительных вычислительных ресурсов. Для решения этой задачи используется подход NEP-kappa, в котором машинно-обученный нейроэволюционный межатомный потенциал применяется для описания атомных взаимодействий с последующим расчётом фононного переноса.

На примере реконструированных кремниевых наноплёнок показано, что поверхностная реконструкция изменяет фононную дисперсию, плотность состояний, групповые скорости и времена релаксации, что приводит к снижению теплопроводности. Таким образом, подход NEP-kappa позволяет связать реальную атомную структуру наноматериала с его фононными характеристиками и теплопроводностью [4, 5].

Для моделирования теплопереноса на уровне наноразмерных устройств разработан программный код PhonoMC, основанный на решении фононного уравнения Больцмана методом Монте-Карло во всем спектре. В расчётах учитываются дрейф фононов, внутреннее рассеяние и взаимодействие с границами, что позволяет описывать переход от диффузионного к квазибаллистическому режиму переноса [1, 2].

В качестве входных данных используются спектральные характеристики фононов, а результатом расчёта являются темпера-

турное поле, тепловой поток и эффективные характеристики теплопереноса. Локальные фононные свойства могут обновляться в соответствии с температурой, что позволяет учитывать пространственную неоднородность переноса.

На примере моделирования саморазогревания транзисторов технологии FinFET показано, что учёт неравновесного фононного переноса может приводить к более высокой температуре горячей области по сравнению с расчётом по закону Фурье. Это связано с дополнительным тепловым сопротивлением, возникающим в квазибаллистическом режиме.

Таким образом полученные на уровне отдельного устройства характеристики могут использоваться в конечно-элементных моделях более крупных систем, обеспечивая связь между различными пространственными масштабами [6].

Дополнительно исследовано избирательное (селективное) по частоте возбуждение фононов. Показано, что изменение теплопроводности определяется как частотой возбуждаемых фононов, так и соотношением между длиной их свободного пробега и характерным размером структуры. Поэтому одинаковое спектральное возбуждение в объёмном материале и наноструктуре может приводить к различным и даже противоположным изменениям теплопроводности.

Полученные результаты показывают, что неравновесное распределение фононов может рассматриваться как дополнительный механизм активного управления теплопереносом.

Выводы

Проведённые исследования демонстрируют последовательный переход от микроскопических свойств фононов к теплопереносу в микро- и наноструктурах. Квантовое ограничение изменяет фононный спектр и теплоёмкость наноструктур, подход NEP-kappa позволяет рассчитывать фононные свойства сложных систем с реалистичной атомной структурой, а метод PhonoMC обеспечивает моделирование неравновесного переноса в наноразмерных устройствах. Частотно-селективное возбуждение фононов показывает возможность активного управления теплопереносом. Совместное использование этих подходов позволяет связать атомную структуру, модовые свойства фононов и теплоперенос на уровне микро- и наноразмерных устройств.

Список использованных источников

1. Liu S., Yin F., Khvesyuk V.I. Investigating anisotropic three-phonon interactions in graphene's thermal conductivity using Monte Carlo method. *Int. J. Thermophys.*, 2025, vol. 46, no. 2, art. 22. DOI: 10.1007/s10765-024-03498-x

2. Liu S. et al. Quantifying particle and wave effects in phonon transport of pillared graphene nanoribbons. *Int. J. Therm. Sci.*, 2025, vol. 217, art. 110067. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2025. 110067

3. Liu S., Khvesyuk V.I. Temperature fluctuations in quantum dots: Insights from a T3/2 heat capacity model. *Phys. Lett. A*, 2025, vol. 534, art. 130261. DOI: 10.1016/j.physleta.2025.130261

4. Liu S. et al. Temperature dependence of specific heat capacity of nanostructures via neuroevolution machine-learned potential. *J. Appl. Phys.*, 2025, vol. 138, no. 10, art. 104301. DOI: 10.1063/5.0284002

5. Yin F. et al. Accelerated phonon transport calculations for nanostructures: Combining neuroevolution potentials and compressed sensing. J. Appl. Phys., 2026, vol. 139, no. 13, art. 135103.

6. Zhou Z. et al. Effect of Non-Fourier Heat Transport on Temperature Distribution in High Bandwidth Memory. IEEE Trans. Electron Devices, 2026, vol. 73, no. 1, pp. 561–568.

FROM MICROSCOPIC PHONON PROPERTIES TO HEAT TRANSPORT IN MICRO- AND NANOSTRUCTURES

S. Liu, A.A. Barinov, V.I. Khvesyuk

Abstract. This work presents studies of phonon heat transport in micro- and nanostructures across different spatial scales. The effects of quantum confinement on the phonon spectrum and heat capacity of nanostructures are investigated. To calculate phonon properties of complex systems, the NEP-kappa approach is employed, combining machine-learned interatomic potentials with the solution of the phonon Boltzmann transport equation. Nonequilibrium heat transport in nanoscale devices is modeled using the PhonoMC Monte Carlo method. Frequency-selective phonon excitation is also considered as an approach for actively controlling heat transport.

Keywords: phonons, heat capacity, quantum confinement, Boltzmann transport equation, Monte Carlo method, machine-learned interatomic potentials.

УДК 548.55
https://doi.org/10.29003/m5494.MMMSEC-2026/81-84

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ НА ПОВЕРХНОСТИ РАСПЛАВА В ПРОЦЕССЕ ЧОХРАЛЬСКОГО

Простомолотов Анатолий Иванович,
д.т.н., доцент, ведущий научный сотрудник[1],
aprosto@inbox.ru
Верезуб Наталия Анатольевна,
к.ф.-м.н., старший научный сотрудник[1],
verezub@ipmnet.ru

[1] *ИПМех РАН, г. Москва*

Аннотация. В процессе выращивания ряда монокристаллов (GGG, YAG) на поверхности расплава наблюдаются конвективные ячейки в виде регулярно расположенных «спиц» от кромки кристалла до стенки тигля. В технологической практике известно, что длину этих «спиц» можно уменьшать, увеличивая скорость вращения кристалла. Причина появления «спиц» вызвана конвективной неустойчивостью тепловой конвекции. Для изучения этого явления проведено математическое и физическое моделирование процесса Чохральского, в результате подтверждено образование «спиц» и установлены количественные зависимости положения границы потоков тепловой и вынужденной конвекций на поверхности расплава.

Ключевые слова: рост кристалла, метод Чохральского, конвекция.

Введение

Качество кристаллов является наилучшим в случае плоской формы фронта кристаллизации (ФК). Модель процесса Чохральского следующая (рис. 1а): расплав находится в цилиндрическом тигле, причем ФК только частично закрывает его поверхность. Температура тигля выше, чем диска. Это создает течение расплава от действия тепловой конвекции. Кроме этого, действует вращение диска, которое создает течение вынужденной конвекции. На форму ФК влияет результирующая структура течения расплава, которая возникает при таком совместном действии тепловой и вынужденной конвекций. Получили распространение критериальные оценки, которые определяются параметром $\gamma = Gr/Re^2$, где Gr и Re — числа Грасгофа и Рейнольдса. Считается, что при $\gamma > 1$ преобладает тепловая от нагрева тигля, а при $\gamma < 1$ — вынужденная конвекция от вращения кристалла.

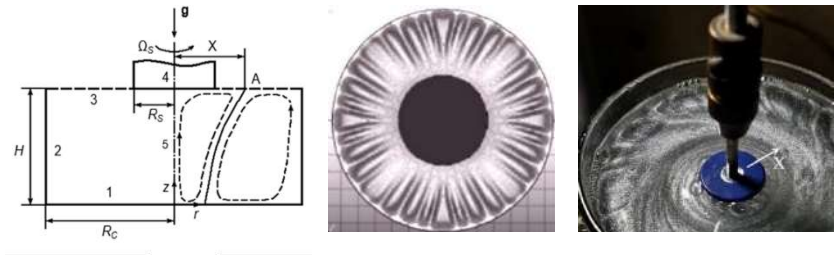
Из технологической практики известно, что граница потоков, обусловленных тепловой конвекцией и конвекцией от вращения кристалла, визуально проявляется на поверхности расплава при выращивании GGG и YAG монокристаллов и её положение можно варьировать, изменяя скорость вращения кристалла. Физическому моделированию этого явления посвящена работа [1], а численное параметрическое исследование положения границы потоков тепловой и вынужденной конвекций представлено в [2].

Результаты моделирования процесса Чохральского

Математическое моделирование процесса Чохральского (рис. 1а) осуществлялось путем численного решения уравнений Навье – Стокса в приближении Буссинеска совместно с уравнением переноса тепла [1]. Предполагается вращение кристалла радиуса R_S со скоростью Ω_S и гравитационная тепловая конвекция. Параметрически определяется положение А и координата X границы потоков тепловой и вынужденной конвекций на поверхности расплава, нормированная на R_S. Анализ расчетной зависимости $X(\gamma)$ показал, что диапазоны изменения числа Re (или изменения скорости вращения кристалла Ω_S) соответствуют трем характерным интервалам изменения положения «точки встречи» конвективных потоков. Режим плавного перемещения точки А под кристаллом: $0.70 \le X \le 1.00$ при $0.10 \le \lg(\gamma) \le 0.90$ (режим I). Режим резкого изменения положения точки А на свободной поверхности и боковой стенке тигля при небольшой вариации скорости вращения кристалла: $1.00 < X < 2.40$ при $-0.45 < \lg(\gamma) < 0.10$ (режим II). Режим плавного изменения положения А на боковой стенке тигля: $2.40 \le X \le 2.50$ при $-1.10 \le \lg(\gamma) \le -0.45$ (режим III). Верификация расчетной модели выполнена для отдельного действия тепловой конвекции, при которой на поверхности расплава образуются конвективные ячейки в виде «спиц» (рис. 1б), что соответствует опубликованным данным работы [2].

Физическое моделирование процесса Чохральского осуществлялось на настольной установке ТГ (Технологическая Гидромеханика). Геометрические и тепловые параметры зоны кристаллизации этой установки соответствовали параметрам рассмотренной выше математической модели. В ходе проведения процессов выращивания кристаллов нитрата натрия $NaNO_3$ осуществлялось визуальное наблюдение за границей потоков тепловой и вынужден-

ной конвекций на поверхности расплава. В частности, четко зафиксированы положение и X — координата границы потоков (рис. 1в). Экспериментально подтверждено, что при увеличении скорости вращения кристалла «спицы», вызванные тепловой конвекцией, оттесняются к стенке тигля вращающимся вблизи кристалла расплавом, делая визуально видимой границу потоков на поверхности расплава.



а б в

Рисунок 1:
а — модель процесса Чохральского (1, 2, 5 — стенки тигля и ось симметрии, 3 — открытая поверхность расплава, 4 — фронт кристаллизации, А и X — граница и координата раздела конвективных потоков); б — вид сверху на конвективные ячейки на поверхности расплава — «спицы» при тепловой конвекции (расчет); в — вид сверху на границу с координатой X потоков тепловой и вынужденной конвекций на поверхности расплава в эксперименте по выращиванию кристаллов нитрида натрия

Работа выполнена по теме госзадания
(№ госрегистрации 124013000674-0).

Список использованных источников

1. Miller D.C., T.L. Pernell T.L. Fluid flow patterns in a simulated garnet melt // Journal of Crystal Growth, vol. 58 (1982), pp. 253−260.

2. Prostomolotov A.I., Verezub N.A. Mechanics of crystalline materials production processes. 2025. Moscow: NUST MISiS publishing house, 528 p.

SIMULATION OF FLOWS ON MELT SURFACE IN CHOCHRALSKI PROCESS

N.A. Verezub, A.I. Prostomolotov

Abstract. During the growth of certain single crystals (GGG, YAG), convection cells in the form of regularly spaced "spokes" are observed on the melt surface, extending from the crystal edge to the crucible wall. It is known in technological practice that the length of these "spokes" can be reduced by

increasing the crystal rotation speed. The formation of these "spokes" is caused by the convective instability of thermal convection. To study this phenomenon, mathematical and physical modeling of the Czochralski process was conducted. This confirmed the formation of these "spokes" and established quantitative relationships between the position of the boundary between thermal and forced convection flows on the melt surface.

Keywords: crystal growth, Czochralski method, convection

УДК 539.182+539.186.3
https://doi.org/10.29003/m5495.MMMSEC-2026/84-86

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДИФФУЗИИ КИСЛОРОДА В ОКСИДЕ ГАФНИЯ

***Резник Александр Анатольевич*,**
аспирант[1], научный сотрудник[2]
reznik.aa@phystech.edu
***Бажанов Дмитрий Игоревич*,**
старший научный сотрудник[3]
dima@kintechlabs.com

[1] *МФТИ (НИУ), г. Долгопрудный*
[2] *АО «НИИМЭ», г. Зеленоград, г. Москва*
[3] *ФИЦ ИУ РАН, г. Москва*

Аннотация. Используя квантово-химический подход рассчитаны коэффициенты диффузии для кислорода в моноклинной и тетрагональной сингонии оксида гафния в зависимости от заряда кислородных вакансий и координационного числа элементарного перехода атома кислорода.

Ключевые слова: теория функционала плотности, диффузия, фононы, оксид гафния.

Введение

Оксиды переходных металлов в настоящее время используются в качестве диэлектрика с высокой диэлектрической проницаемостью (high-к) в современной КМОП технологии: для формирования подзатворного диэлектрика, функционального слоя конденсаторов высокой ёмкости или перспективных видов энергонезависимой памяти. Наряду с преимуществом более высокой диэлектрической проницаемости и меньших токов утечки, использование HfO_2 привело к возникновению проблем, связанных с контролем порогового напряжения и генерацией электронно-дырочных ловушек [1]. Многие из этих проблем связаны с диффузией

кислорода в оксиде, что приводит к появлению дефектов, связанных с кислородом, таких как кислородные вакансии (V_O), которые могут отрицательно сказываться на надежности устройств. В резистивной энергонезависимой памяти V_O играют ключевую роль в механизме переключения логических состояний, а значит исследование основ диффузии на атомном уровне способствует построению более совершенных моделей деградации материала, что позволит более точно оценить надежность устройств.

Детали расчета

Квантово-механические расчеты выполнялись в программном комплексе Quantum ESPRESSO [2]. Элементарные ячейки *m*-HfO_2 и *t*-HfO_2 (пространственная группа $P2_1/c$, № 14 и $P4_2/nmc$, № 137, соответственно) были прецизионно отрелаксированы для достижения минимальных межатомных сил (менее $1 \cdot 10^{-5}$ Ry/Bohr = $2.57 \cdot 10^{-4}$ эВ/Å) и минимального внутреннего давления (менее 0.002 ГПа). Использование псевдопотециала типа PAW (англ. *Projector Augmented Wave*) с видом обменно-корреляционной энергии PBE (англ. *Perdew-BurkeErnzerhof*) позволило получить параметры решетки наиболее близкие к экспериментальным синхротронным данным [4]. Энергия отсечки составляла 100 Ry (1360 эВ), размерность сетки Монкхорста-Пака выбрана 3×3×3 для суперячеек *m*-HfO_2 (96 атомов) или 1×1×1 для суперячеек *t*-HfO_2 (162 атома). Фононный расчет структур с кислородной вакансией выполнялся в программе Phonopy [3]. Размерность точек волновых векторов выбрана 15×15×15 (*m*-HfO_2) или 15×15×10 (*t*-HfO_2). Предэкспоненциальный множитель в уравнении Аррениуса рассчитан для статического случая по формуле Виньярда:

$$A = \frac{\prod_{i=1}^{3N-3} \nu_i}{\prod_{i=1}^{3N-4} \nu_i'}$$

где ν_i— собственные частоты колебаний в состоянии, отвечающем минимуму потенциальной энергии, а ν_i' — частоты колебаний в седловой точке.

Результаты

Анализ фононных дисперсий структур одиночным дефектом показал, что V_O у *m*-HfO_2 не вызывает появления мнимых фононных мод (за исключением одной отрицательной моды в седловой

точке) вне зависимости от координационного числа вакансии или её заряда. Напротив, наличие V_O у *t*-HfO_2 привело к появлению множества мнимых частот на всем протяжении фононной дисперсии, как в стабильной конфигурации, так и в седловой точке вне зависимости от заряда V_O. Однако с увеличением давления вплоть до 12 ГПа происходит значительное уменьшение кол-ва мнимых мод или же их полное исчезновение. В таблице 1 представлены значения рассчитанного предэкспоненциального множителя A и коэффициентов диффузии D для *m*-HfO_2 и *t*-HfO_2.

Таблица 1

Рассчитанные значения A и D при температуре 300 K

Структура, тип миграции	**A, $с^{-1}$**	**D, $м^2/с$**
m-HfO_2, 3C-3C(+0)	$2.051 \cdot 10^{14}$	$1 \cdot 10^{-28}$
m-HfO_2, 3C-3C(+2)	$1.990 \cdot 10^{12}$	$2 \cdot 10^{-14}$
t-HfO_2, 4C-4C(+0)	$2.791 \cdot 10^{14}$	$5 \cdot 10^{-27}$
t-HfO_2, 4C-4C(+2)	$8.891 \cdot 10^{13}$	$4 \cdot 10^{-12}$

Работа выполнялась с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН (г. Москва).

Работа выполнена при поддержке гранта РНФ № 23-91-01012.

Список использованных источников

1. Yang J., Youssef M., Yildiz B. Oxygen self-diffusion mechanisms in monoclinic ZrO_2 revealed and quantified by density functional theory, random walk analysis, and kinetic Monte Carlo calculations // Physical Review B. 2018. Vol. 97, no. 2, p. 024114.

2. Giannozzi P. et al. Quantum ESPRESSO toward the exascale // The Journal of Chemical Physics, 2020. Vol. 152, no. 15.

3. Togo A. First-principles phonon calculations with phonopy and phono3py // Journal of the Physical Society of Japan. 2023. Vol. 92, no. 1, p. 012001.

QUANTUM CHEMICAL CALCULATION OF OXYGEN DIFFUSION COEFFICIENTS IN HAFNIUM OXIDE

A.A. Reznik, D.I. Bazhanov

Abstract. Using a quantum chemical approach, the diffusion coefficients for oxygen in monoclinic and tetragonal hafnium oxide phase are calculated depending on the charge of oxygen vacancies and the coordination number of the elementary transition of the oxygen atom.

Keywords: density functional theory, diffusion, phonons, hafnium oxide.

УДК 51-73: 538.971: 519.245
https://doi.org/10.29003/m5496.MMMSEC-2026/87-90

РЕЛЬЕФ СТУПЕНЕЙ ВИЦИНАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ GaAs В ЗАВИСИМОСТИ ОТ НАПРАВЛЕНИЯ РАЗОРИЕНТАЦИИ ПОДЛОЖЕК

Спирина Анна Александровна,
к.ф.-м.н., младший научный сотрудник[1],
an.spirits@isp.nsc.ru
Шварц Наталия Львовна,
к.ф.-м.н., старший научный сотрудник[1, 2],
nataly.shwartz@gmail.com

[1] *ИФП СО РАН, г. Новосибирск*
[2] *НГТУ, г. Новосибирск*

Аннотация. С помощью моделирования методом Монте-Карло показана зависимость рельефа ступеней поверхностей GaAs{111} от направления разориентации подложек.

Ключевые слова: GaAs, вицинальная поверхность, моделирование, Монте-Карло.

Введение

Ступени вицинальных подложек играют важную роль в развитии рельефа поверхности в процессе роста и отжига кристалла. Поэтому вопрос развития рельефа вицинальных поверхностей при температурном воздействии требует тщательного рассмотрения. Для GaAs морфология поверхности осложняется возможным появлением капель галлия в процессе отжига из-за разной скорости испарения галлия и мышьяка [1]. В зависимости от направления отклонения поверхности может меняется форма ступеней. Только в нескольких работах уделяется внимание форме ступеней на подложках GaAs{111} [2, 3]. Вопрос о том, как будет меняться рельеф поверхности GaAs{111} в процессе отжига в зависимости от направления разориентации подложки до сих пор остается открытым. В данной работе с помощью моделирования методом Монте-Карло исследуется развитие рельефа вицинальных поверхностей GaAs{111} с разным направлением разориентации в условиях высокотемпературных отжигов этих подложек.

Монте-Карло модель высокотемпературных отжигов GaAs

Моделирование высокотемпературных отжигов GaAs проводилось с использованием программного комплекса SilSim3D на

базе кинетической 3D решеточной модели [4]. Для моделирования использовались вицинальные подложки GaAs(111)A и (111)B разориентированные вокруг трех направлений: $[1\bar{1}0]$, $[\bar{1}\bar{1}2]$ и $[0\bar{1}1]$. Схематичные изображения таких поверхностей на примере GaAs(111)A до отжига и фрагменты модельных подложек после отжига представлены на рис. 1. При изменении направления разориентации меняется сорт атомов, ограняющих ступень (Ga или As) и количество оборванных связей у этих атомов. На модельных вицинальных поверхностях до начала отжигов структура ступеней повторяется каждую третью ступень, что является следствием периодичности кристаллической решетки. С началом отжига атомы в ступенях перестраиваются с формированием наиболее энергетически выгодных фасеток {111}. Стоит отметить, что в модели не заложены сверхструктурные перестройки поверхности. На поверхности GaAs(111)A, отклоненной вокруг $[1\bar{1}0]$, до отжига две из трех ступеней декорированы мышьяком с одной оборванной связью, и каждая третья ступень ограняется галлием с тремя оборванными связями (рис. 1а). В процессе отжига форма ступеней на этой поверхности слабо меняется — все ступени остаются практически прямыми, ограняясь фасетками {111}B (рис. 1а), что согласуется с экспериментальными данными [2]. На поверхности GaAs(111)A отклоненной вокруг направления $[\bar{1}\bar{1}2]$ до отжигов присутствуют три разновидности ступеней: ступень, декорированная галлием с поочередно двумя и тремя оборванными связями, ступень, декорированная мышьяком с поочередно одной и двумя оборванными связями, и ступень, в состав которой входят и галлий с двумя оборванными связями, и мышьяк с одной оборванной связью (рис. 1б). После начала отжига ступени на этой поверхности приобретают пилообразную форму (рис. 1б). Эта форма ступеней похожа на ту, что экспериментально наблюдали на вицинальной поверхности GaAs(111)A после травления в серной кислоте [3]. На поверхности GaAs(111)A, отклоненной вокруг $[0\bar{1}1]$, все атомы в ступенях до начала отжига имеют две оборванные связи. Две из трех ступеней на этой поверхности ограняются галлием и каждая третья ступень — мышьяком (рис. 1в). После начала отжига ступени перестраиваются с образованием зигзагообразного профиля (рис. 1в), который наблюдался и экспериментально при росте слоев GaAs на отклоненных поверхностях GaAs(111)A [2]. Моделирование показало, что наиболее термически стабильными являются поверхности GaAs(111)A, отклоненные в направле-

нии $[1\bar{1}0]$. Формирование капель на таких поверхностях происходит при более высоких температурах. Самое интенсивное разрушение поверхности зафиксировано на подложках GaAs(111)A с направлением разориентации $[0\bar{1}1]$. На этих поверхностях температура формирования капель заметно ниже (разница достигает 100º) и плотность капель выше в ~1.5 раза.

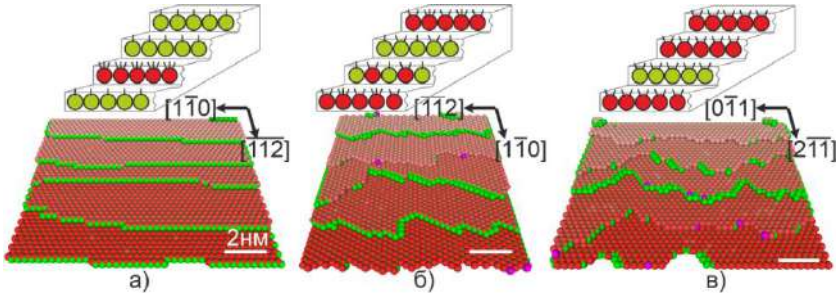


Рисунок 1 — Схематичные изображения поверхностей GaAs(111)A, отклоненных вокруг направлений $[1\bar{1}0]$ (а), $[\bar{1}\bar{1}2]$ (б) и $[0\bar{1}1]$ (в), до отжига (верхняя строчка) и фрагменты модельных подложек после отжига (нижняя строчка) в течение 10 с при 800 К. Красным показан галлий, зеленым — мышьяк

Выводы

В зависимости от направления разориентации поверхности получен разный рельеф ступеней на подложках GaAs(111)A. Наиболее стабильные ступени соответствуют поверхностям с направлением отклонения $[1\bar{1}0]$.

Работа выполнена при поддержке программы Минобрнауки РФ.

Список использованных источников

1. Kanjanachuchai S., Euaruksakul C. Self-Running Ga Droplets on GaAs (111)A and (111)B Surfaces // ACS Appl. Mater. Interfaces, 2013. Vol.5, P.7709.

2. Lee J.-S. et al. Surface structure control of GaAs (111)A vicinal substrates by metal-organic vapor-phase epitaxy // J. Cryst. Growth, 1998. Vol.183, P.43.

3. Yao H. et al. In situ scanning tunneling microscopy of GaAs(001), (111)A, and (111)B surfaces in sulfuric acid solution // Appl. Phys. Lett., 1996. Vol.68, P.1473.

4. Spirina A. A. et al. Langmuir evaporation of GaAs(111)A and GaAs(111)B: Monte Carlo simulation // Appl. Surf. Sci., 2021. Vol.540, P.148281.

STEP STRUCTURE OF VICINAL GaAs SURFACES AS A FUNCTION OF SUBSTRATE MISORIENTATION DIRECTION

A.A. Spirina, N.L. Shwartz

Abstract. This study uses Monte Carlo simulation to demonstrate the dependence of the step morphology of vicinal GaAs(111)A surfaces on the substrate misorientation direction.

Keywords: GaAs, Langmuir evaporation, simulation, Monte Carlo.

https://doi.org/10.29003/m5497.MMMSEC-2026/90-94

ПРИМЕНЕНИЕ СИМВОЛЬНОЙ РЕГРЕССИИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КАЗИМИРА-ПОЛДЕРА

Фарисов Денис Рисунович[1],
студент,
farisovdr@my.msu.ru
Бажанов Дмитрий Игоревич,
к.ф.-м.н., доцент[1], старший научный сотрудник[2],
dima@kintechlabs.com

[1]МГУ имени М.В. Ломоносова, г. Москва
[2] ФИЦ ИУ РАН, г.Москва

Аннотация. В данной работе исследовалась возможность применения символьной регрессии для получения функции дисперсионной энергии взаимодействия Казимира-Полдера. Были получены аналитические формулы, позволяющие описывать данное взаимодействие.

Ключевые слова: символьная регрессия.

Введение

Многие физические взаимодействия не имеют точного аналитического описания. Для их исследования приходится использовать численные методы решения дифференциальных уравнений и вычисления интегралов. Однако такие расчёты требуют значительных вычислительных ресурсов, особенно при рассмотрении систем большого числа частиц.

Одним из примеров является взаимодействие Казимира-Полдера между электрически нейтральными поляризуемыми частицами [1]. В модели квантовых осцилляторов Друде дисперсионная энергия двух одинаковых частиц выражается через интеграл [2]:

$$\Delta E = \frac{-\hbar c q^4}{\pi(4\pi\epsilon_0)^2\mu^2} F(\omega; R), \text{ где } F(\omega; R) = \int_0^\infty \frac{u^6 e^{-2uR}}{(\omega^2 + c^2u^2)^2}\left[\frac{1}{u^2R^2} + \frac{2}{u^3R^3} + \frac{5}{u^4R^4} + \right.$$
$$\left. + \frac{3}{u^6R^6}\right] du \qquad (1)$$

ω — собственная частота колебания частицы, R — расстояние между частицами.

Для $F(\omega, R)$ существуют асимптотические оценки [3]:

$$F_L(\omega, R) = \frac{(3\pi/4)}{c\omega^3R^6} \text{ при } R \ll \frac{c}{\omega} \text{ и } F_{CP}(\omega, R) = \frac{(23/4)}{\omega^4R^7} \text{ при } R \gg \frac{c}{\omega} \qquad (2)$$

Этот интеграл можно вычислить численно, однако для многочастичных систем его приходится рассчитывать многократно. Поэтому возникает задача поиска простого аналитического выражения, которое с высокой точностью приближает интеграл во всей области значений аргументов.

Символьная регрессия

Одним из подходов к решению этой задачи является *символьная регрессия* [4]. Этот метод позволяет находить аналитические зависимости по заданным данным. В его основе лежит генетическое программирование. На каждой итерации создаётся набор функций, которые затем изменяются с помощью мутаций и скрещивания (рис. 1). Из полученных выражений отбираются *N* наиболее точных, после чего процесс повторяется.

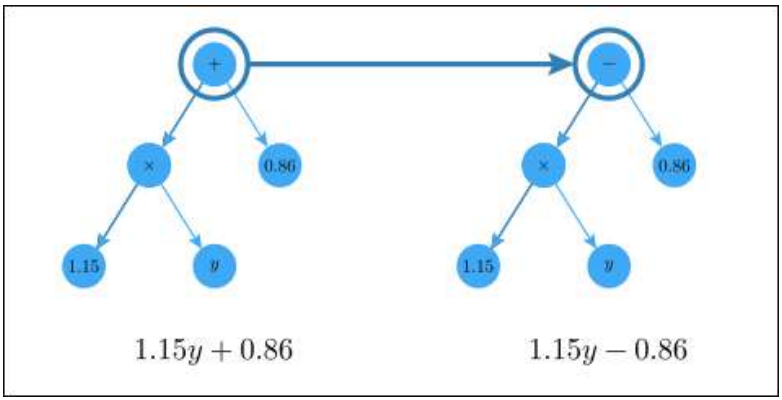


Рисунок 1 — Пример функций и их возможного преобразования (мутация) [4]

Цель данной работы — построить аналитическую аппроксимацию функции $F(\omega, R)$. С помощью математических преобразований её удалось привести к виду:

$$F(\omega, R) = \frac{1}{\omega^4 R^7} f\left(\frac{R\omega}{c}\right),$$

где $f(x) = \int_0^\infty \frac{e^{-2p}}{\left(1+\left(\frac{p}{x}\right)^2\right)^2}(p^4 + 2p^3 + 5p^2 + 6p + 3)dp,$ (3)

где $x = \frac{R\omega}{c}$

Таким образом, исходная задача сводится к аппроксимации функции одной переменной $f(x)$, для которой и применялась символьная регрессия.

В результате многократных запусков алгоритма было получено несколько аналитических выражений. Среди них выбрана наиболее простая и точная формула, имеющая вид цепной дроби:

$$f(x) \approx \frac{23/4}{\frac{x_0}{x}+\frac{1}{1+\frac{x_0}{x}}} = \frac{23}{4}\frac{\left(\frac{x}{x_0}\right)^2+\frac{x}{x_0}}{\left(\frac{x}{x_0}\right)^2+\frac{x}{x_0}+1}, \text{ где } x_0 = \frac{23}{3\pi} \quad (4)$$

Полученную цепную дробь удалось преобразовать в рациональную функцию. Это позволило использовать её структуру для построения более точных аппроксимаций аналитическими методами. Для этого функция была разложена в ряды в окрестностях точек $x = 0$ и $x = \infty$, после чего с помощью метода аппроксимации Паде [5] была построена рациональная дробь:

$$f(x) \approx \frac{1.31x^3+5.11x^2+2.36x}{0.23x^3+0.89x^2+2.17x+1} \quad (5)$$

На рис. 2 приведены результаты численного вычисления интеграла $f(x)$ и значений аппроксимаций (4) и (5). Из графика видно, что рациональная функция (5), построенная аналитически, обеспечивает более высокую точность, чем выражение (4), найденное символьной регрессией.

Дополнительно рассмотрен случай гетеродимера — системы двух различных электрически нейтральных частиц A и B. Дисперсионная энергия их взаимодействия имеет вид:

$$\Delta E = \frac{-\hbar c q^4}{\pi(4\pi\epsilon_0)^2\mu_A\mu_B} F_{AB}(\omega_A, \omega_B; R),$$

где $F_{AB}(\omega_A, \omega_B; R) = \int_0^\infty \frac{u^6 e^{-2uR}}{(\omega^2+c^2u^2)^2}\left[\frac{1}{u^2R^2}+\frac{2}{u^3R^3}+\frac{5}{u^4R^4}+\frac{3}{u^6R^6}\right]du$ (7)

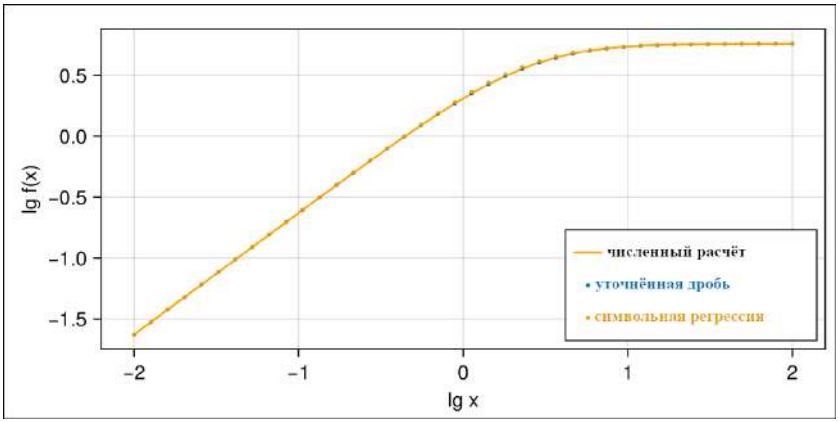


Рисунок 2 — Сравнение численных значений интеграла $f(x)$ с аппроксимациями, полученными методом символьной регрессии и аппроксимации Паде

С помощью математических преобразований размерность этой задачи также удалось уменьшить. Были получены два представления, сводящие исходную задачу к аппроксимации функций одной и двух переменных.

Выводы

В работе получены аналитические аппроксимации интеграла, входящего в выражение для дисперсионной энергии взаимодействия Казимира-Полдера в случаях гомо- и гетеродимера. Для этого использовались символьная регрессия и математические методы, основанные на её результатах.

Показано, что символьная регрессия позволяет не только находить достаточно точные приближения, но и подсказывает форму выражений для дальнейшего аналитического исследования. Это делает её полезным инструментом для построения простых и эффективных аппроксимаций сложных физических зависимостей.

Список использованных источников

1. Akbar Salam, Molecular Quantum Electrodynamics: Long-Range Intermolecular Interactions (Wiley, 2010).

2. A. Khabibrakhmanov, D.V. Fedorov, A. Ambrosetti, J. Crain, K.L. C. Hunt, E.R. Johnson, K.D. Jordan, S. Góger, M. Gori, M.R. Karimpour, R.J. Maurer, M. Sadhukhan, M. Stöhr, and A. Tkatchenko, Accurate noncovalent interactions in atomistic systems via quantum Drude oscillators, J. Chem. Phys. 163, 151001 (2025).

3. M.R. Karimpour, D. V. Fedorov, and A. Tkatchenko, Quantum framework for describing retarded and nonretarded molecular interactions in external electric fields, Phys. Rev. Research 4, 013011 (2022).

4. M. Cranmer. Interpretable machine learning for science with PySR and SymbolicRegression.jl. Instrum. Methods Astrophys., 1–24 (2023).

5. G.A. Baker, Jr., P. Graves-Morris. Padé Approximants. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, 1996. 746 p. (Encyclopedia of Mathematics and its Applications; vol. 59).

THE USE OF SYMBOLIC REGRESSION TO MODEL THE INTERACTION OF CASIMIR-POLDER

D.R. Farisov, D.I. Bazhanov

Abstract. This paper explores the possibility of using symbolic regression to obtain the dispersion energy function for the Casimir–Polder interaction. Analytical formulas were obtained that make it possible to describe this interaction.

Keywords: Symbolic Regression.

4. D
МОДЕЛИРОВАНИЕ РАЗМЕРНЫХ, РАДИАЦИОННЫХ, ПОВЕРХНОСТНЫХ И ДРУГИХ ДЕФЕКТОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВОЙ НАНОЭЛЕКТРОНИКЕ

УДК 004.3:004.9
https://doi.org/10.29003/m5498.MMMSEC-2026/96-99

РОЛЬ НЕЙТРАЛЬНЫХ ДЕФЕКТОВ В ФОРМИРОВАНИИ ОБЛАСТИ ГОМОГЕННОСТИ CdTe

Стрельцов Никита Алексеевич,
аспирант,
streltzov.nikita@gmail.com
Кобелева Светлана Петровна,
к.ф.-м.н., доцент,
kob@misis.ru

Университет науки и технологий МИСИС, Москва

Аннотация. В работе уточняются константы образования СТД в CdTe на основе анализа экспериментальных температурных зависимостей состава равновесной паровой фазы конгруэнтно испаряющегося состава. Показано, что даже внутри области гомогенности нейтральные дефекты типа Te_{Cd} (или дивакансия Cd) играют существенную роль в формировании области гомогенности.

Ключевые слова: A2B6, область гомогенности, равновесная паровая фаза, антиструктурные дефекты, дивакансия кадмия.

Введение

Отношения равновесных парциальных давлений паров металла и халькогена в халькогенидах кадмия и цинка изменяются в пределах области гомогенности на 6–18 порядков в зависимости от температуры испарения и соединения, что позволяет определять величину отклонения от стехиометрии δ_0 по составу равновесной паровой фазы [1]. Для расчета состава используется численный метод, основанный на решении системы двух уравнений — уравнения электронейтральности и уравнения материального баланса, в каждом из которых присутствуют величины концентраций собственных точечных дефектов (СТД) при температуре испарения, выраженные с помощью метода квазихимических реакций.

Оценка отклонения от стехиометрии и модели дефектообразования

Формально говоря, если бы значения констант образования квазихимических реакций образования СТД были известны, для расчета δ_0 было бы достаточно измерить состав равновесной

паровой фазы при одной температуре. Однако ни для одного из соединений A2B6 нет надежной информации по этим параметрам. Наиболее чувствительны к изменению набора СТД и их термодинамических характеристик являются номограммы зависимости δ_0 от обратной температуры [2].

В работе для построения номограмм использовалась модель дефектообразования и экспериментальные данные [3], где важную роль играет нейтральный антиструктурный дефект Te_{Cd}^0. Как видно из рисунка 1 (изн), получено сильное расхождение с экспериментальными данными. Для уточнения параметров модели варьировали параметрами констант образования V_{Cd}^- и Te_{Cd}^0 как основных дефектов при наблюдаемых отклонениях от стехиометрии. Нулевым номером указаны изначально имеющиеся значения констант, под номером один — константы, при которых экспериментальные данные максимально согласуются с рассчитанными. Результаты построения номограммы на стороне избытка Te по уточненной модели (уточн) приведены на рисунке 1.

Таблица 1

Вариации констант квазихимических реакций образования дефектов V_{Cd}^- и Te_{Cd}^0 в модели [3]

№	T при P_{Cdmin}, K	δ при P_{Cdmin}, $см^{-3}$ (изб Te)	Константы дефектообразования				Концентрации дефектов при P_{Cdmin}, $см^{-3}$	
			V'_{Cd}		Te^0_{Cd}		V'_{Cd}	Te^0_{Cd}
			K_0, Па, $см^{-3}$	ΔH^0, эВ	K_0, Па, $см^{-3}$	ΔH^0, эВ		
0	870–880	$(2,4–2,6)\cdot10^{16}$	$1,6\cdot10^{10}$	1,54	$1,6\cdot10^{47}$	5,56	$(6,8–7,7)\cdot10^{15}$	$(4,6–5,8)\cdot10^{14}$
1	870–880	$(5,5–6,0)\cdot10^{16}$	$3,0\cdot10^{10}$	1,38	$6,0\cdot10^{47}$	5,60	$(5,1–5,6)\cdot10^{16}$	$(0,9–1,2)\cdot10^{15}$

Логарифм отклонения от стехиометрии, полученный по значениям по уточненной модели, имеет вид: $lg_{10}(\delta, см^{-3}) = -0,064\cdot1000/T+16,88$. По изначальной модели функция логарифма отклонения от стехиометрии имеет сильную зависимость от T: $lg_{10}(\delta, см^{-3}) = 6,72\cdot1000/T+8,993$. В уточненной модели состав $\delta_0 = (5,5–6,0)\cdot10^{16}$ $см^{-3}$ испаряется конгруэнтно при (870–880) K, что соответствует технологическому режиму получения соединения методом многократной возгонки-перекристаллизации [3].

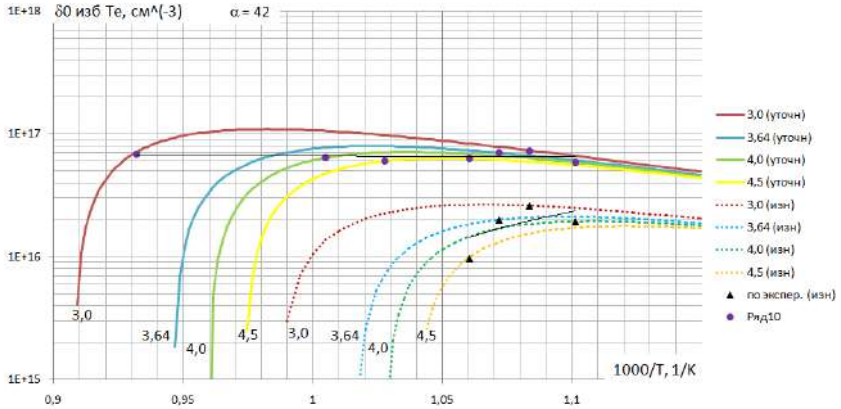


Рисунок 1 — Номограмма для определения отклонения от стехиометрии материала CdTe на стороне избытка Te:
Цифры на кривых — значения отношения давления кадмия к давлению двухатомных молекул теллура в паровой фазе

Концентрации основных типов дефектов при температуре конгруэнтного испарения порядка $5{,}5\cdot10^{16}$ см$^{-3}$ для V_{Cd}^{-} и $1{,}0\cdot10^{15}$ см$^{-3}$ для Te_{Cd}^{0}. Следует отметить, что в методе КХР невозможно различить Te_{Cd}^{0} и дивакансию кадмия, т. к. они одинаково зависят от давления паров кадмия. На границе области гомогенности концентрация Te_{Cd}^{0} при T=875 К превысит концентрацию примерно в 200 раз, что соответствует известным соотношениям нейтральных и заряженных дефектов при этой температуре.

Выводы

В работе показано, что доминирующим дефектом в CdTe с избытком халькогена являются нейтральные дефекты типа $Te_{Cd}(2V_{Cd})$. Приведены уточненные значения констант образования нейтрального и однократно заряженного дефекта акцепторного типа (предположительно V_{Cd}^{-}).

Список использованных источников

1. Кобелева С.П. Определение отклонения от стехиометрии в широкозонных полупроводниковых соединений A2B6 по составу равновесной паровой фазы Изв. ВУЗов. МЭТ,2022 т. 25 № 2. С. 107–114.

2. Кобелева С.П. О возможности уточнения моделей дефектообразования в CdTe по изменению состава равновесной паровой фазы, Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов ММЭК-2025, 2025 г., г. Москва, с. 114–116.

3. Кобелева С.П. Влияние собственных точечных дефектов на процессы испарения халькогенидов кадмия и цинка: дисс. канд. физ.-мат. наук, МИСИС, Москва, 1982 г., 185 с.

4. Аветисов И.Х. Фазовые равновесия в системах A(II)B(VI) // Высокочистые вещества. — Научный мир. Москва, 2018.

THE ROLE OF NEUTRAL DEFECTS IN THE FORMATION OF THE CDTE HOMOGENEITY REGION

N.A. Streltsov, S.P. Kobeleva

Abstract. This study refines the formation constants of intrinsic point defects in CdTe based on an analysis of the experimental temperature dependencies of the equilibrium vapor phase composition for congruently evaporating material. It is shown that, even in the homogeneity range, neutral defects of the TeCd type (Cd divacancy) play a significant role in the formation of the homogeneity region.

Keywords: A2B6, homogeneity region, equilibrium vapor phase, untisite defects, cadmium divacancy.

5. E

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАБОТЫ МНОГОУРОВНЕВЫХ ЭЛЕМЕНТОВ ПАМЯТИ ДЛЯ КОМПЬЮТЕРОВ СЛЕДУЮЩЕГО ПОКОЛЕНИЯ

УДК 621.3:004.032.26
https://doi.org/10.29003/m5499.MMMSEC-2026/102-105

ПАРАМЕТРИЧЕСКАЯ ИДЕНТИФИКАЦИЯ СТОХАСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ЭЛЕМЕНТОВ МАГНИТОРЕЗИСТИВНОЙ ПАМЯТИ

Морозов Александр Юрьевич,
д.ф.-м.н., старший научный сотрудник[1],
morozov@infway.ru
Абгарян Каринэ Карленовна,
д.ф.-м.н., доцент, главный научный сотрудник[1],
руководитель отдела[1],
kristal83@mail.ru
Ревизников Дмитрий Леонидович,
д.ф.-м.н., профессор, ведущий научный сотрудник[1],
reviznikov@gmail.com

[1] *ФИЦ ИУ РАН, г.Москва*

Аннотация. Моделирование динамики переключения элементов магниторезистивной памяти при реальных температурах связано с необходимостью учета тепловых флуктуаций вектора намагниченности. Этот эффект описывается в рамках модели Ландау – Лифшица – Гилберта – Слончевского (LLGS) путем введения стохастического слагаемого в выражение для эффективного магнитного поля. Параметрическая идентификация стохастического дифференциального уравнения напрямую неэффективна в силу высоких вычислительных затрат. В настоящей работе предлагается экономичный подход к параметрической идентификации, основанный на итерационной последовательности решения детерминированных задач. С помощью разработанного подхода для ряда экспериментальных данных успешно выполнена параметрическая идентификация стохастической модели.

Ключевые слова: MRAM, BAX, LLGS, параметрическая идентификация, напряжения переключения.

Разработка и интеграция энергонезависимой магниторезистивной памяти (MRAM) — одно из ключевых направлений развития современной микроэлектроники. В отличие от традиционной flash-памяти, функционирующей на основе электрических зарядов, MRAM использует для хранения данных магнитные состояния. MRAM обладает более высокой скоростью, надежностью и низким энергопотреблением, что является важным для современной вычислительной техники, например, для нейроморфных

систем [1–4]. В данной работе исследуется вариант MRAM, основанный на переносе спинового момента (spin-transfer torque) STT-MRAM.

Используемая математическая модель основана на представлении элемента MRAM как нелинейной динамической системы относительно осредненного по объему вектора намагниченности свободного слоя и задается макроскопическим уравнением Ландау – Лифшица – Гилберта – Слончевского (LLGS). Правая часть уравнения учитывает вклады магнитной анизотропии, внешнего магнитного поля, переносимого спинового момента и тепловых эффектов (в виде нормального распределенного случайного вектора с коэффициентом пропорциональным квадратному корню из температуры). Таким образом, данная модель описывается с помощью системы стохастических дифференциальных уравнений.

Параметрическая идентификация выполняется в два этапа. На первом этапе выполняется экстракция целевых показателей из экспериментальной вольтамперной характеристики (ВАХ). Определяются пороговые напряжения переключения, формирующие целевую функцию. Кроме того, из вольтамперной характеристики напрямую извлекаются такие параметры модели, как значения сопротивления элемента в низкопроводящем и высокопроводящем состояниях, а также коэффициенты в выражении для тока. На втором этапе минимизируется целевая функция и находятся оставшиеся параметры модели: гиромагнитное отношение, демпфирующий коэффициент, намагниченность насыщения, плотность энергии анизотропии, спиновая поляризация, параметр Слончевского и параметр вторичного спин-крутящего момента.

Так как математическая модель является стохастической, то целевая функция, включающая отклонения напряжений переключения элемента от целевых показателей, является случайной. Для решения оптимизационной задачи осуществляется переход от случайных величин к их математическим ожиданиям.

Численное оценивание математического ожидания требует большого количества симуляций и с учетом того, что в процессе минимизации целевой функции необходимо многократно решать прямую задачу, это приводит к чрезмерно большим вычислительным затратам. С целью повышения эффективности вычислительного процесса предлагается алгоритм, основанный на идее определения масштабного коэффициента плотности тока, такого, что

напряжения переключения элемента при нулевой температуре, будут такими же, как и при заданной температуре. Здесь учитывается, что с увеличением температуры происходит уменьшение критического тока, при котором происходит переключение элемента [5].

Предлагаемый подход позволяет решать задачу параметрической идентификации для детерминированной модели. Сначала выполняется решение задачи при нулевой температуре. Далее, с использованием найденных параметров, решается прямая задача при заданной температуре. Если напряжения переключения совпадают, то алгоритм завершается, а если нет, то решается задача определения масштабного коэффициента тока, и вычислительный процесс повторяется с использованием найденного значения масштабного коэффициента. Как правило, до достижения сходимости достаточно нескольких итераций.

С помощью данного алгоритма для ряда экспериментальных данных были успешно решены задачи параметрической идентификации стохастической модели.

Работа выполнялась с использованием инфраструктуры Центра коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») ФИЦ ИУ РАН (г. Москва).

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 23-91-01012).

Список использованных источников

1. Абгарян К.К., Ревизников Д.Л., Журавлев А.А., Морозов А.Ю., Гаврилов Е.С. Многомасштабное моделирование нейроморфных систем. 2022. МАКС Пресс. — 128 стр.

2. Морозов А.Ю., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Имитационное моделирование аналоговой импульсной нейронной сети на основе мемристорного кроссбара с использованием параллельных вычислительных технологий // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2022. Т. 25. № 4. С. 288–297. DOI: 10.17073/1609-3577-2022-4-288-297.

3. Морозов А.Ю., Абгарян К.К., Ревизников Д.Л. Математическое моделирование самообучающейся нейроморфной сети, основанной на наноразмерных мемристивных элементах с 1T1R-кроссбар-архитектурой // Известия высших учебных заведений. Материалы электронной техники. 2020. Т. 23. № 3. С. 186–195. DOI: 10.17073/1609-3577-2020-3-186-195.

4. Morozov A.Yu., Abgaryan K.K., Reviznikov D.L., Mathematical model of a neuromorphic network based on memristive elements // Chaos, Solitons & Fractals, 2021, Vol. 143, 110548. DOI:10.1016/j.chaos.2020.110548.

5. Diao Z., Li Zh., Wang Sh., Ding Y., Panchula A., Chen E., Wang L.-Ch., Huai Y. Spin-transfer torque switching in magnetic tunnel junctions and spin-transfer torque random access memory. // J. Phys.: Condens. Matter. 2007, Vol. 19, No. 16, 165209-13. DOI:10.1088/0953-8984/19/16/165209.

PARAMETRIC IDENTIFICATION OF A STOCHASTIC MODEL OF MAGNETORESISTIVE MEMORY ELEMENTS

A.Yu. Morozov, K.K. Abgaryan, D.L. Reviznikov

Abstract. Modeling the switching dynamics of magnetoresistive memory elements at real temperatures requires accounting for thermal fluctuations in the magnetization vector. This effect is described within the Landau-Lifshitz-Gilbert-Slonczewski (LLGS) model by introducing a stochastic term into the expression for the effective magnetic field. Direct parametric identification of the stochastic differential equation is ineffective due to high computational costs. This paper proposes a cost-effective approach to parametric identification based on an iterative sequence of solving deterministic problems. Using the developed approach, parametric identification of the stochastic model was successfully performed for a range of experimental data.

Keywords: MRAM, VAC, LLGS, parametric identification, switching voltages.

https://doi.org/10.29003/m5500.MMMSEC-2026/105-105

MATERIAL-RELATED PROBLEMS OF NEUROMORPHIC TECHNOLOGIES

Nikolai A. Sobolev

Departamento de Física & i3N, Universidade de Aveiro, 3810-193 Aveiro, Portugal, e-mail: sobolev@ua.pt

Abstract. Machine learning tends, in the limit, to consume all the power produced in the world, and this development model is costly, inefficient and unsustainable. Neuromorphic computing presents a promising alternative by enabling real-time, low-power processing. Advancements in materials science have been instrumental in the progression of neuromorphic technologies. However, existing neuromorphic hardware often relies on rigid and energy-intensive fabrication processes. Crucial for its development are materials able to implement bio-inspired functions. There is an urgent need for innovative materials and device architectures that can bridge the gap while ensuring scalability and eco-friendliness.

Keywords: Machine learning, neuromorphic computing, neuromorphic technologies, bio-inspired functions, innovative materials

7. G
ПРОБЛЕМЫ ОБЕСПЕЧЕНИЯ НАДЕЖНОСТИ ЭКБ МИКРОЭЛЕКТРОНИКИ И СИСТЕМ НА ЕЕ ОСНОВЕ

https://doi.org/10.29003/m5501.MMMSEC-2026/108-110

ДИНАМИЧЕСКИЙ ВЫБОР ТРАЕКТОРИИ АППАРАТНОГО ИСПОЛНЕНИЯ ПОВЕДЕНЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ РОБОТА

Тельминов Олег Александрович,
к.т.н., начальник отдела[1]

АО «НИИ молекулярной электроники»[1], otelminov@niime.ru
[1] АО «НИИМЭ», 124460, Россия, Москва, Зеленоград, ул. Академика Валиева, д. 6, стр. 1

Аннотация. Предложен способ динамического выбора траектории аппаратного исполнения функций SLAM роботом на гетерогенных вычислителях: сценарии переключаются с учётом совместимости алгоритмов, состояния вычислений и характеристик элементной базы.

Ключевые слова: гетерогенные вычисления, локализация и картографирование, планировщик задач.

Введение

Ставится задача выполнения функций одновременной локализации и картографирования роботом на стеке гетерогенных вычислителей под управлением одной или нескольких операционных систем. Аппаратные решения от уровня нейропроцессоров до электронной компонентной базы [1] для их создания рассмотрены в [2], подход сквозного проектирования вычислительной системы от гибридной элементной базы до поведения робота изложен в [3]. Для каждой вычислительной задачи разрабатывается набор сценариев выполнения, различающихся используемыми аппаратными ресурсами — процессорами, вычислительными блоками, элементной базой, и оптимизированных по быстродействию, потребляемой мощности и другим параметрам. Предлагается способ динамического выбора траектории аппаратного исполнения, при котором определяется подходящий сценарий и режим его выполнения на уровне операционной системы, классического, нейросетевого и/или нейроморфного (со)процессора, вычислительного блока в составе (со)процессора и элементной базы. Новизной способа является согласованный выбор и переключение заранее подготовленных реализаций поведенческих функций, связывающий требования к конечному результату с совместимостью алгоритмов, состоянием вычислений, планированием исполнения и текущими характеристиками гетерогенной элементной базы.

Анализ существующих решений

В [4] предложен менеджер, который во время работы изменяет параметры визуально-инерциального алгоритма HybVIO в зависимости от текущего состояния одновременной локализации и картографирования. Он выявляет избыточно выделенные вычислительные ресурсы и сокращает объём обработки, сохраняя точность оценки положения. В [5] разработан метод распределения взаимосвязанных задач между CPU, GPU и нейросетевыми ускорителями с учетом физических условий работы системы. Во время работы выбирается расписание, подходящее по скорости движения, расстоянию до препятствий и температуре. В [6] предложена среда совместного исполнения нескольких нейросетей, разделенных на функциональные блоки. Среда выявляет блоки, вызывающие увеличение задержки при параллельной работе, и согласует порядок их исполнения, позволяя уменьшать задержки обработки при контролируемом снижении точности. В [7] предложено совместное проектирование алгоритма, среды исполнения и аппаратуры позволяет выполнять крупномасштабный функционал одновременной локализации и картографирования на устройствах с ограниченными ресурсами. В [8] предложена совместная аппаратно-программная реализация динамической нейросети на мемристорах с семантической памятью, изменяющая глубину обработки в зависимости от сложности входных данных.

Предлагаемый способ динамического выбора траектории аппаратного исполнения

Основные особенности предлагаемого способа выбора заключаются в следующем. Сценарии реализации вычислительной задачи, реализующей поведенческую функцию, описываются через общий формат: входы, выходы, область применимости, допустимая ошибка, срок выполнения и возраст результата, внутреннее состояние, формат данных, ресурсы и аппаратные ограничения. Сценарии реализации выбираются с учетом их аппаратного размещения и ограничений. Определяются возможности переключения между сценариями реализации с определением точки переключения, согласованием вычислительного состояния, удовлетворением ограничений по времени, энергии и качеству результата. При переключении учитывается эксплуатационное состояние элемент-

ной базы с ограниченными характеристиками в части ошибки вычисления, ресурсу перепрограммирования и др.

Заключение

Предложен способ динамического выбора траектории аппаратного исполнения поведенческих функций робота, выполнено сравнение с современными работами по реализации функций одновременной локализации и картографирования, планированию гетерогенных вычислений, использованию цифровой и мемристорной элементной базы. Выявлена новизна предлагаемого способа. В дальнейшем планируется практическая реализация способа.

Библиографический список

1. Красников Г.Я., Горнев Е.С., Матюшкин И.В. Общая теория технологий и микроэлектроника. М.: ТЕХНОСФЕРА, 2020.

2. Тельминов О.А. Гетерогенная элементная база — основа построения нейроморфных процессоров с новыми архитектурами // Тезисы докладов XVI Конференции по актуальным проблемам физики, материаловедения, технологии и диагностики кремния, нанометровых структур и приборов на его основе «Кремний-2026» (Владивосток, 13–17 июля 2026 г.). — Владивосток : Дальнаука, 2026. — С. 26. — 122 с.

3. Тельминов, О. А. подход сквозного проектирования вычислительной системы от гибридной элементной базы до поведения робота / О. А. Тельминов // Российский форум «Микроэлектроника 2026». 12-я Научная конференция «ЭКБ и микроэлектронные модули»: Сборник тезисов, Москва, 27 сентября — 3 октября 2026 года. — Москва: Рекламно-издательский центр «Техносфера», 2026 (в печати).

4. Behroozi A. [и др.]. SlimSLAM: An Adaptive Runtime for Visual-Inertial Simultaneous Localization and Mapping La Jolla CA USA: ACM, 2024.С. 900–915.

5. McGowen J. [и др.]. Scheduling for Cyber-Physical Systems with Heterogeneous Processing Units under Real-World Constraints Kyoto Japan: ACM, 2024.С. 298–311.

6. Kim H., Kim H., Kim M. LAG-Guided Runtime Framework: Block-Level Scheduling and Dynamic Compression for Multi-DNN Environments // ACM Transactions on Design Automation of Electronic Systems. 2026. № 6 (31). С. 1–37.

7. Kim S. [и др.]. SuperNoVA: Algorithm-Hardware Co-Design for Resource-Aware SLAM Rotterdam Netherlands: ACM, 2025.С. 1035–1051.

8. Zhang Y. [и др.]. Semantic memory-based dynamic neural network using memristive ternary CIM and CAM for 2D and 3D vision // Science Advances. 2024. № 33 (10). С. eado1058.

8. Н
МЕТОДЫ
МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
В ФОТОНИКЕ

УДК 004.032.26:004.932
https://doi.org/10.29003/m5502.MMMSEC-2026/112-115

КОЛЛАПС ПРИЗНАКОВОГО ПРОСТРАНСТВА ПРИ ОБУЧЕНИИ СИАМСКОЙ СЕТИ КОНТРАСТНОЙ ФУНКЦИЕЙ ПОТЕРЬ В ЗАДАЧЕ ЛОКАЛИЗАЦИИ СНИМКА

Кобелев Виктор Антонович,
студент, младший научный сотрудник [1,2]*,*
vkobelev@niime.ru
Тельминов Олег Александрович,
начальник отдела[2]*,*
otelminov@niime.ru

[1] *НИУ «МИЭТ», г. Москва*
[2] *АО «НИИМЭ», г. Москва*

Аннотация. Показано, что при обучении сиамской нейронной сети контрастной функцией потерь для задачи локализации аэрофотоснимка на эталонной карте значение функции потерь перестаёт отражать качество решения задачи. При снижении потерь с 0,94 до 0,0056 доля корректно локализованных фрагментов составила 4 из 45, что ниже результата необученного энкодера с весами ImageNet — 26 из 45. Замена целевой функции на внутрибатчевую softmax-функцию при неизменных данных и числе эпох повысила этот показатель до 32 из 45.

Ключевые слова: сиамские нейронные сети, контрастная функция потерь, коллапс признакового пространства, обучение представлений, визуальная навигация, локализация по аэрофотоснимкам.

Введение

Автономная навигация мобильных объектов при отсутствии сигналов глобальных навигационных спутниковых систем опирается на сопоставление текущего аэрофотоснимка с предварительно загруженной эталонной картой. Распространённым решением этой задачи является сиамская нейронная сеть, в которой снимок и участок карты кодируются общим энкодером, а мера сходства вычисляется в пространстве признаков. Для обучения таких сетей традиционно применяется контрастная функция потерь [1], штрафующая большое расстояние между векторами позитивной пары и малое расстояние между векторами негативной. Значение этой функции при этом обычно принимается за единственный критерий сходимости обучения. В настоящей работе показано, что

для задачи локализации фрагмента на карте такой критерий вводит в заблуждение: снижение потерь сопровождается деградацией фактического качества поиска.

Постановка эксперимента

Эталонная карта размером 4352×4352 пикселя сформирована из спутниковых снимков. Из неё получены 600 фрагментов размером 192×192 пикселя для 120 точек: точный вырез, зашумлённый, размытый, повёрнутый на угол до ±45° и снятый с большей высоты с покрытием до трёх размеров окна. Применённое преобразование фиксировалось в разметке, что позволяет отделить результат работы сети от результата обычной кросс-корреляции, которой точный вырез находится тривиально.

В качестве энкодера применялась свёрточная сеть EfficientNetB0 [2] с предобученными на ImageNet весами, первые 80 слоёв заморожены. Сравнивались три конфигурации: энкодер без дообучения, дообучение контрастной функцией потерь и дообучение внутрибатчевой softmax-функцией [3], в которой каждый запрос сопоставляется со всеми участками карты в батче. Обучение — 30 эпох при размере батча 32. Качество оценивалось долей фрагментов, для которых максимум карты сходства многомасштабного поиска пришёлся на истинный участок карты, на выборке из 45 фрагментов, а также медианой максимума карты сходства для фрагментов данной карты и для фрагментов другого города.

Результаты

Обучение контрастной функцией потерь снизило значение потерь с 0,94 до 0,0056, что соответствует практически полному разделению обучающих пар. Однако доля корректно локализованных фрагментов при этом составила 4 из 45 против 26 из 45 у энкодера без дообучения. Причина установлена по распределению меры сходства: у обученной сети медиана максимума карты сходства для фрагмента данной карты и для фрагмента другого города составила 0,963 и 0,954 соответственно, тогда как до дообучения — 0,879 и 0,805. Признаковое пространство схлопывается в узкий конус, в котором произвольные участки местности становятся неразличимы.

Механизм эффекта объясняется устройством целевой функции: попарная контрастная функция отталкивает лишь один сэмплированный негативный пример, и это требование выполнимо без сохранения различимости остальных участков карты. Внутрибатчевая softmax-функция сопоставляет каждый запрос со всеми участками в батче, что делает коллапс невыгодным. При тех же данных и числе эпох она дала 32 корректные локализации из 45 при медианах максимума карты сходства 0,586 и 0,416, то есть с сохранением различимости.

Выводы

Показано, что при обучении сиамской сети для локализации аэрофотоснимка на эталонной карте значение контрастной функции потерь не является индикатором качества решения прикладной задачи: снижение потерь на два порядка сопровождалось падением доли корректных локализаций ниже уровня необученного энкодера. Рекомендуется контролировать обучение метрикой поиска, вычисляемой непосредственно на карте сходства, а в качестве целевой функции применять внутрибатчевую softmax-функцию. Предстоит проверить эффект на нескольких эталонных картах, соответствующих различным типам застройки, и оценить его устойчивость к размеру батча. В дальнейшем планируется аппаратная реализация на инференс-устройствах, основанных на традиционных нейропроцессорах (КМОП-технология [4]), или с применением элементной базы на новых физических принципах.

Список использованных источников

1. Hadsell R., Chopra S., LeCun Y. Dimensionality Reduction by Learning an Invariant Mapping // IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 2006.

2. Tan M., Le Q. EfficientNet: Rethinking Model Scaling for Convolutional Neural Networks // International Conference on Machine Learning (ICML), 2019.

3. Oord A. van den, Li Y., Vinyals O. Representation Learning with Contrastive Predictive Coding // arXiv:1807.03748, 2018.

4. Красников Г.Я., Горнев Е.С., Матюшкин И.В. Общая теория технологий и микроэлектроника. — М.: Техносфера, 2020. — 434 с. ISBN 978-5-94836-611-1.

FEATURE SPACE COLLAPSE WHEN TRAINING A SIAMESE NETWORK WITH CONTRASTIVE LOSS FOR AERIAL IMAGE LOCALISATION

V.A. Kobelev, O.A. Telminov

Abstract. This paper shows that when a siamese neural network is trained with a contrastive loss for localising an aerial image on a reference map, the loss value stops reflecting the quality of the solution. As the loss fell from 0.94 to 0.0056, the share of correctly localised fragments was 4 out of 45, below the untrained ImageNet encoder at 26 out of 45. Replacing the objective with an in-batch softmax loss, with the same data and number of epochs, raised this figure to 32 out of 45.

Keywords: siamese neural networks, contrastive loss, feature space collapse, representation learning, visual navigation, aerial image localisation.

Научное издание

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

в материаловедении электронных компонентов

ММЭК–2026

19–20 октября 2026 г., Москва

Материалы VIII Международной конференции

Подготовка оригинал-макета
Издательство «МАКС Пресс»
Главный редактор: *Е. М. Бугачева*
Компьютерная верстка: *Н. С. Давыдова*
Обложка: *А. В. Кононова*

Подписано в печать 18.10.2026 г.
Формат 60x901/16. Усл.печ.л. 7,25.
Тираж 300 (1–20) экз. Изд. № 178.

Издательство ООО «МАКС Пресс»
Лицензия ИД N00510 от 01.12.99 г.

119992, ГСП-2, Москва, Ленинские горы,
МГУ им. М. В. Ломоносова, 2-й учебный корпус, 527 к.
Тел. 8(495) 939–3890/91. Тел./Факс 8(495) 939–3891.

Отпечатано в полном соответствии с качеством
предоставленных материалов в ООО «Фотоэксперт»
109316, г. Москва, Волгоградский проспект, д. 42,
корп. 5, эт. 1, пом. I, ком. 6.3-23Н