

مدلسازی مقاومت حرارتی نانوسیمهای بیسموت به کمک روشهای داده کاوی

سوده عقلی مقدم^۱، شروان عطایی^۲

چکیده

آنجا که علوم و مهندسی پیشرفته، فاقد مدلی بنیادی برای توصیف سیستم فیزیکی، زیستی، و اجتماعی مورد نظر خود می‌گردد، داده کاوی می‌تواند به کمک داده های تجربی در دسترس و آماده، به استخراج مدلها و تخمین روابط مفید بین متغیرهای سیستم (مثل وابستگی های نامعلوم ورودی به خروجی) بپردازد. از آن سو، رشد سریع و چشمگیر دنیای فناوری نانو و قابلیت دیدن، طراحی، ساخت، و چینش دلخواه اتمها در ابعاد نانو، این امکان را فراهم آورده است که بتوان روابط و تئوری های فیزیک کوانتوم را تجربه و اندازه گیری نمود و یا با استفاده از قابلیت های جدید مواد، سیستمها و قطعات بدیعی خلق کرد. نانوسیم، سیمی با قطر کمتر از ۱۰۰ نانو است. عموماً در این ابعاد اثرات محدودیتهای کوانتومی بروز و اهمیت می‌یابد و رفتار انتقال الکترون در سیم تغییر می‌کند. نانوسیمهای بیسموت به دو دلیل اصلی بیشتر بودن مسیر آزاد میانگین الکترون و کمتر بودن جرم موثر آنها نسبت به سایر مواد نیمه هادی و فلزی، گزینه های مناسبی برای مشاهده، مطالعه، و مدل سازی این اثرات می‌باشند. این دو ویژگی اصلی، مطالعه اثرات ناشی از بروز محدودیتهای کوانتومی را در ابعاد بزرگتر و دمای بالاتر تسریع کرده و بیسموت را به یک سیستم مدل سازی، برای مطالعه اثرات یک بعدی در نانوسیمها تبدیل می‌نماید.

در این مقاله سعی شده است داده های تجربی مقاومت وابسته به حرارت و قطر نانوسیمهای تک کریستاله بیسموت، در قطرهای ۸، ۲۸، ۳۶، ۵۰، ۷۰، ۲۰۰، و ۱۰۰۰ نانومتر و دمای ۰ تا ۳۰۰ درجه کلون، مورد کاوش الگوریتم های داده کاوی قرار گرفته و رابطه بین آنها از طریق داده کاوی و نه فیزیک محض، تعیین شود. اگرچه پیشتر، مدل فیزیکی نسبتاً خوبی در این زمینه ارائه شده است. مقاومت حرارتی نانوسیم های بیسموت از نگاه بیرونی به دو عامل دما و قطر نانوسیم و از دیدگاه فیزیکی به دو عامل چگالی و موبیلیتی حاملها بستگی دارد. آنچه در اینجا حائز اهمیت است، یافتن مدلی است که بتواند رفتار چندگانه (رفتار مواد انبوه، نیمه هادی، و شبه فلزی) مقاومت نانوسیم های بیسموت را در دماها و قطرهای متفاوت توصیف نماید.

به منظور اعمال الگوریتم های مناسب داده کاوی روی داده های تجربی، از نرم افزار جامع داده کاوی Weka محصول دانشگاه Waikato استفاده شده است. این نرم افزار تحت لیسانس GNU، به طور رایگان از طریق شبکه اینترنت در دسترس همگان می‌باشد. نرم افزار Weka مجموعه متنوعی از الگوریتم‌های روز یادگیری ماشینی، ابزارهای پیش پردازش داده‌ها، و ابزارهای ارزیابی نتایج طرح های یادگیری می‌باشد و به گونه‌ای طراحی شده است که می‌توان به سرعت، روش‌های موجود را به صورت انعطاف‌پذیری روی مجموعه‌های داده، آزمایش نمود. از میان الگوریتم‌های متعدد یادگیری و کاوش داده که توسط نرم افزار Weka پیاده سازی شده و در دسترس است، آن دسته از الگوریتم‌هایی که قابلیت کار روی داده های عددی را داشته و نیز به یک رابطه یا دسته از روابط منتهی می‌شوند، برای کاوش داده های موجود انتخاب شدند. آنگاه مقادیر عددی موجود، در دو وضعیت یکپارچه و وضعیت مجزا شده بر اساس رفتارهای متفاوت مقاومت نانوسیمها (رفتار مواد انبوه، نیمه هادی، و شبه فلزی) به قالب arff (قالب ورودی Weka) در آمده و تحت کاوش الگوریتم‌های منتخب قرار گرفتند.

۱. دانشجوی دکتری برق و الکترونیک، دانشکده برق و کامپیوتر، دانشگاه تهران، s.aghli@ece.ut.ac.ir

۲. استادیار دانشکده مهندسی راه و آهن، دانشگاه علم و صنعت، ataee@iust.ac.ir

با ارزیابی نتایج الگوریتم‌های داده کاوی، در دو وضعیت اول و دوم مشاهده شد که روش های M5P و M5Rules در هر چهار دسته داده کاوی، علیرغم تفاوت بارز در رفتار و تغییرات مقادیر ویژگی های داده های چهار دسته، از نظر خطای کمینه جزو پنج روش برتر بوده اند. روش M5P از دسته الگوریتم های Trees و روش M5Rules از دسته الگوریتم های Rules است. وجه مشترک هر دو روش این است که تا حد امکان فضای ویژگی ها را به زیربخش های متعدد تقسیم کرده و برای هر قسمت با تغییرات اندک و یا یکنواخت، یک تابع رگرسیون خطی پیش بینی می کنند. در نتیجه، پیش بینی های این دو الگوریتم از کمترین خطا نسبت به سایر روشها برخوردار است. همچنین طبق انتظار، میانگین خطای مدلهای حاصل از یادگیری سه دسته داده در وضعیت دوم، از میانگین خطای مدلهای به دسته آمده از یک دسته داده در وضعیت اول، کمتر بوده است.

با بررسی نتایج از دیدگاه فیزیک انتقال حاملها (که به مقاومت منجر می شود) مشاهده می شود که بخش نسبتا خوبی از الگوریتم ها مرزهای دما و قطر را مطابق واقعیات فیزیکی تشخیص داده اند. این موضوع را می توان با دقت در مقادیر شروط قواعد متعدد حاصله دریافت. در واقع نتایج حاصله، در مجموع موید دانش پایه ای موجود بوده و البته چیز قابل توجهی بر آن نیفزوده است. اندک بودن تعداد نمونه های در دسترس و تحت کاوش (۱۴۷ نمونه)، اندک بودن تعداد ویژگی ها (سه ویژگی مقاومت، حرارت، و قطر)، و بسیط بودن مدل های یادگیرنده (خطی)، مانع اکتشاف مفاهیم جدید فیزیکی از داده های موجود است. در ادامه می توان با جمع آوری داده های بیشتر در زمینه مقاومت نانوسیم های بیسموت، امکان کاوش عمیقتر و کشف قواعد کوانتومی جدید را از آنها فراهم نمود.

کلمات کلیدی

کاوش داده، مدل سازی، مقاومت حرارتی، نانوسیم بیسموت، ابزار داده کاوی Weka