

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н. Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра дискретной математики и информационных технологий

**РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНОГО РЕШЕНИЯ ДЛЯ АНАЛИЗА
РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ВОЗБУЖДЕНИЙ В ДВУХЗОННОЙ
КВАНТОВОЙ СИСТЕМЕ**

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

Студентки 2 курса 271 группы
направления 09.04.01 — Информатика и вычислительная техника
факультета КНиИТ
Посновой Наталии Владимировны

Научный руководитель
доцент, к. ф.-м. н.

А. Д. Панферов

Заведующий кафедрой
доцент, к. ф.-м. н.

Л. Б. Тяпаев

Саратов 2023

ВВЕДЕНИЕ

Целью представляемой работы является развитие программного комплекса, реализующего моделирование поведения двухзонной квантовой системы с использованием подхода на основе кинетического уравнения. Такие модели позволяют воспроизводить поведение перспективных с точки зрения развития электроники материалов в процессе их взаимодействия с высокочастотными электрическими полями. В работе параметры модели соответствуют двумерному графену, обладающему необычными характеристиками электронной подсистемы.

Для минимизации вычислительных ресурсов, необходимых для работы с моделями данного типа, была разработана поэтапная процедура построения регулярной сетки с изменяющимся масштабом. Реализация процедуры предусматривает решение ряда задач. В рамках выполненной работы в качестве одной из таких задач было необходимо реализовать этап генерации стартовой сетки, полностью покрывающей примитивную ячейку обратной решетки графена и узлы которой могли бы служить основой для дальнейшего введения подрешеток более высокой плотности. Плотность (шаг) стартовой сетки должна определяться в конфигурационном наборе параметров модели.

Для выполнения локализации областей с высоким уровнем заселенности возбужденных состояний необходимо анализировать значение этого параметра на протяжении всего процесса эволюции модели. Следующей задачей, которую было необходимо решить, является определение максимального значения вероятности заселения для каждого рассматриваемого состояния и сохранение полученных результатов для последующего анализа.

На конечном этапе построения сетки необходимо обеспечить воспроизведение распределения возбужденных состояний в области их максимальных значений с точностью, достаточной для правильного вычисления наблюдаемых интегральных характеристик. Это требование можно интерпретировать как построение сетки, обеспечивающей приемлемый уровень точности при линейной интерполяции функции распределения по имеющимся значениям. Это определило еще одну задачу: определить и программно реализовать критерий оценки качества сформированной сетки.

Выпускная квалификационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованных источников.

Главы выпускной квалификационной работы:

- Описание модели.
- Используемые средства для реализации программных модулей системы.
- Программное решение для генерации стартовой равномерной сетки.
- Анализ распределения возбуждений в двухзонной квантовой системе.

Общий объем работы – 62 страницы, включая 45 рисунков, список использованных источников информации – 28 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Первая глава «Описание модели» посвящена описанию рассматриваемой модели, её физических параметров и особенностей при разработке функционала программного комплекса, реализующего моделирование.

Графен является наиболее известным примером, который позволил разработать и экспериментально верифицировать уже ставшую классической модель безмассовых фермионов [1, 2]. Интерес к этому материалу, в настоящее время, обусловлен особенностями его отклика на действие внешних электрических полей [3–8].

Для описания процессов образования и эволюции носителей заряда в двумерном монослое графена в условиях действия внешнего классического электрического поля в работах [9–11] был предложен и развит подход, основанный на использовании квантового кинетического уравнения.

При моделировании с целью воспроизведения наблюдаемых параметров многочастичной системы удобнее работать с функцией распределения $f(\bar{p}, t)$ электронов по одночастичным состояниям $\epsilon(\bar{p})$. Кинетическое уравнение для функции распределения будет вида:

$$\begin{cases} \dot{f}(\bar{p}, t) = \frac{1}{2}\lambda(\bar{p}, t)u(\bar{p}, t), \\ \dot{u}(\bar{p}, t) = \lambda(\bar{p}, t)(1 - 2f(\bar{p}, t)) - \frac{2\epsilon(\bar{p}, t)}{\hbar}v(\bar{p}, t), \\ \dot{v}(\bar{p}, t) = \frac{2\epsilon(\bar{p}, t)}{\hbar}u(\bar{p}, t), \end{cases} \quad (1)$$

где $u(\bar{p}, t)$ и $v(\bar{p}, t)$ вспомогательные функции. Поведение моделируемой системы фактически определяется коэффициентами $\epsilon(\bar{p}, t)$ и $\lambda(\bar{p}, t)$.

Математическая модель физического процесса предоставляет возможность получить данные о распределении возбужденных состояний электронов в рассматриваемом материале (функцию распределения $0 < f(p_1, p_2, t) < 1$, определяющую вероятность обнаружить электрон с определенным импульсом в определенный момент времени на единичной площади поверхности материала) и вспомогательные функции $u(p_1, p_2, t)$, $v(p_1, p_2, t)$. В силу того, что материал двумерен, вектор импульса электрона определяется двумя его компонентами. В итоге результатом моделирования будет являться набор из трех функций трех переменных.

Для воспроизведения поведения модели необходимо использовать аппроксимацию искомых функций в импульсном пространстве по конечному

числу точек, в силу ограниченности вычислительных ресурсов. Качество такой аппроксимации будет зависеть от количества и расположения выбранных точек, будем использовать термин расчетная сетка. Простейшим вариантом выбора является однородная регулярная сетка с постоянным расстоянием между узлами. Попытка точно воспроизвести $f(p_1, p_2)$ для любого из рассматриваемых моментов времени с использованием однородной сетки, покрывающей всю область её определения в импульсном пространстве выводит требования к доступным вычислительным ресурсам за рамки разумных [12,13].

Решение проблемы ищется введением сеток переменного шага и разработке итерационной процедуры поэтапного их построения. Было предложено в качестве начального нулевого шага использовать квадратную сетку с постоянным шагом. На этой сетке выполняется вычислительная процедура, которая не является предметом рассмотрения в представляемой работе. В результате на конечном множестве точек (p_i, p_k) определяются $f_{ik}(t) = f(p_i, p_k, t)$. Поскольку эта процедура реализуема только в числовой форме, рассматриваемый конечный временной интервал тоже дискретизируется и мы получаем в наше распоряжение 3-х мерный массив $f_{ikl} = f(p_i, p_k, t_l)$.

На основании этих данных необходимо выбрать ячейки сетки (p_i, p_k) , подлежащие дальнейшему разбиению. Было показано [13], что такой выбор можно сделать по результатам оценки $f_{ik\max}$ – максимального значения функции распределения за все время моделируемого процесса в точке (p_i, p_k) . Следовательно, возникает задача определения таких максимальных значений. Это необходимо делать по результатам вычислений на стартовой сетке и на всех последующих этапах. Количество узлов сетки быстро растет по мере её совершенствования. Кроме того, имеющиеся в нашем распоряжении данные дискретны во времени. Общее количество элементов обрабатываемого трехмерного массива на конечных этапах построения составляет десятки миллионов и более. Данное обстоятельство ставит вопрос о корректном выборе инструментов для работы с такими большими массивами данных.

По мере выполнения локальных адаптаций сетки, качество её растет, и она позволяет все более точно аппроксимировать искомую функцию распределения и вспомогательные функции $u(p_1, p_2, t), v(p_1, p_2, t)$. Качественно результаты можно оценивать по результатам визуализации $f_{ik\max}$ и f_{ikl} , но

такие оценки субъективны и трудно воспроизводимы. По этой причине передо мной была поставлена задача разработки критерия объективной оценки качества построенной сетки, и программной реализации соответствующей процедуры.

Во второй главе «Используемые средства для реализации программных модулей системы» представлены средства, которые использовались для реализации программных модулей системы. Такие как Python и библиотеки данного языка программирования для работы с «Big Data», языки C/C++, так как являются инструментами для реализации рабочей версии комплекса, а также, высокоуровневая система компьютерной алгебры Mathematica, которая была задействована для создания первого этапа функционала разрабатываемых решений.

Структура данных, используемая при разработке программных модулей системы, моделирующей отклик графена на воздействие высокочастотных импульсов электрического поля, предполагает работу с текстовыми файлами, содержащими достаточно большое количество строк.

Например, результирующий файл с данными о построенной сетке имеет число строк, соответствующее числу узлов в ней. В рассматриваемых в данной работе примерах это число лежит в диапазоне от нескольких десятков до примерно двухсот тысяч. В процессе построения сетки, при анализе поведения функции распределения во времени, и при дальнейшем моделировании поведения системы по построенной сетке, количество вычисляемых и обрабатываемых значений увеличивается еще на два – три порядка. Это делает необходимым использовать специализированные инструменты, способные работать с очень большими данными. В качестве таковых далее рассматриваются Python и библиотеки для этого языка для работы с «Big Data».

Вычислительные модули программного комплекса, выполняющие наиболее ресурсоемкие вычислительные операции по решению системы ОДУ, реализованы с использованием языков C/C++ и высокоуровневых специализированных библиотек для них. Это позволяет запускать их на кластерных системах и эффективно использовать аппаратный параллелизм. Поэтому C/C++ рассматривается как инструмент реализации рабочей версии комплекса и часть кода сразу оформлялась с использованием инструментов этого языка.

Большое количество алгоритмических версий разрабатываемых решений требовало оперативной проверки с возможностью быстрого внесения корректив и контроля промежуточных результатов. Поэтому для первого этапа формирования функционала разрабатываемых решений было решено использовать возможности высокоуровневой системы компьютерной алгебры Mathematica компании Wolfram Research. При этом масштабирование вычислительных возможностей ограничивается лицензионными условиями, но для полноценного использования рабочей станции с многоядерным процессором имеющихся в распоряжении СГУ лицензий достаточно.

В третьей главе «Программное решение для генерации стартовой равномерной сетки» рассматривается построение начальной расчетной сетки для каждого конкретного набора физических параметров моделируемого процесса. А также упрощенная вычислительная процедура, оптимизированная для вычисления только максимального значения вероятности заселения для каждого рассматриваемого состояния и данного значения в конечный момент времени по результатам расчетов вычислительной процедуры.

Одной из основных особенностей разрабатываемого программного решения является построение индивидуальной версии расчетной сетки для каждого конкретного набора физических параметров моделируемого процесса. Поэтому, после формирования этого набора параметров, начинается итерационная процедура построения сетки покрывающей всю элементарную ячейку обратной решетки. На первом этапе построения расчетной сетки необходимо найти эту область (области). Параметры для генерации базовой регулярной сетки и последующей её адаптации задаются в файле `grid_options.txt`. В нем построчно с текстовой расшифровкой фиксируются необходимые параметры.

Все параметры в файле `grid_options.txt` могут настраиваться под конкретные физические условия моделируемого процесса. Основным критерий такой настройки (оптимизации) – минимизация числа узлов расчетной сетки, обеспечивающей качественное и количественное воспроизведение моделируемого процесса.

Для начала работы процедуры формирования сетки необходимо наличие файлов `task.txt` и `grid_options.txt`. Промежуточные результаты построения сетки заносятся в файл `grid.txt`. В итоге в нем формируется её конечный вид, адаптированный под параметры модели, и содержится информация

о промежуточных этапах. Если файл `grid.txt` не обнаружен, то формируется начальная сплошная сетка процедурой `Grid_start`, описанной ниже. Если файл `grid.txt` уже существует, реализуется итерационная процедура его дополнения до достижения критериев, определенных в `grid_options.txt`.

На начальном этапе модулем `Grid_start` выполняется построение базовой регулярной сетки с квадратными ячейками.

Она строится разбиением области $-2\pi \leq p_1 \leq 2\pi$, $-2\pi \leq p_2 \leq 2\pi$ на $2^{k_1} \times 2^{k_1}$ квадратных ячеек. Узлами сетки являются центры этих ячеек, координаты которых вычисляются и заносятся в файл `grid.txt` с отбрасыванием не принадлежащих элементарной ячейке обратной решетки графена.

Процедура отбрасывания «лишних» узлов реализуется проверкой условий для их координат:

$$\sqrt{3}p_1 - p_2 > -2\pi \ \&\& \ \sqrt{3}p_1 - p_2 < 2\pi \ \&\& \ \sqrt{3}p_1 + p_2 > -2\pi \ \&\& \ \sqrt{3}p_1 + p_2 < 2\pi$$

Промежуточные и итоговые результаты работы процедуры заносятся в файл `grid.txt`. В этом файле каждому узлу сетки соответствует одна строка, в которую с разделением пробелами заносятся следующие значения:

1. Значение p_1 .
2. Значение p_2 .
3. Номер поколения.
4. Значение f_{max} / точка не посчитана.
5. Значение f_{end} / точка не посчитана.
6. Требуется разбиения.

После формирования стартовой сетки она передаётся вычислительной процедуре, реализующей решение задачи Коши для системы уравнений (1) в каждом узле. Параметры задач, кроме определенных в файле `grid.txt` значений p_1 и p_2 , берутся из файла `task.txt`. Аналогичные вычисления выполняются после каждого этапа последующей модификации сетки для новых её узлов. Результаты расчетов сохраняются в массив `results`. Для последующей обработки массив записывается в файл `results.txt`.

Каждому набору параметров (p_{1k}, p_{2l}, t_i) в нем соответствует строка:

1. Значение p_1 .
2. Значение p_2 .
3. Значение $deltaP$.

4. Значение t .
5. Значение f_1 .
6. Значение f_2 .
7. Значение f_3 .

Далее необходимо по полученному файлу results.txt для каждого нового узла выполнить упрощенную вычислительную процедуру, оптимизированную для вычисления только f_{max} и f_{end} . Данный модуль осуществляет поиск максимального значения функции распределения f_{1max} и значение функции распределения в конечный момент времени f_{1end} для каждого нового узла и результаты заносятся в файл grid.

В дальнейшем было принято решение осуществлять вычислительную процедуру без выгрузки результатов в отдельный файл, используя для этого ресурсы оперативной памяти компьютера.

В четвертой главе «Анализ распределения возбуждений в двухзонной квантовой системе» решается проблема оценки качества построенной адаптивной сетки. На первом этапе для этого используется визуальный анализ в области абсолютных максимумов функции распределения. Для объективной количественной оценки качества сетки предложен и реализован метод, основанный на анализе полученных данных.

Одним из способов оценки качества построенной сетки является визуальный анализ полученных результатов, поэтому важно на каждой итерации построения сетки после завершения вычислительной процедуры с занесением результатов в файл grid.txt обеспечить возможность визуального представления тех областей, где функция распределения ведет себя наиболее показательно. Такими областями являются области абсолютных максимумов в плоскости (p_1, p_2) как самой функции $f_{1max}(p_1, p_2)$, так и $f_1(p_1, p_2, t_{end})$.

Также, на каждом этапе адаптации расчетной сетки для её анализа необходимо предусмотреть визуализацию расчетной сетки в плоскости (p_1, p_2) с выделением цветом каждого из поколений узлов сетки.

Визуальный контроль качества формируемой сетки универсален, но субъективен. Поэтому передо мной была поставлена задача разработать метод объективного определения качества сформированной сетки на конечном этапе её адаптации.

В качестве наиболее простого метода оценки было решено определять

относительную частоту изменения знака первой производной для $f(p_{1i}, p_{2j}, t)$ по p_1 и p_2 . Поскольку диапазон значений функции распределения ограничен интервалом $[0, 1]$ и она гладкая, изменение знака производной будет иметь место только в точках экстремумов. Следовательно, если между точками экстремумов располагается несколько узлов расчетной сетки, можно рассчитывать на достаточно точную интерполяцию искомой функции.

Для оценки качества формируемой адаптивной сетки на завершающем этапе её построения был разработан программный модуль, в котором:

1. На первом шаге выбирается область поверхности, в которой выполняется анализ. В базовом варианте данная область включает в себя все точки последнего поколения.

2. Затем выполняется сортировка по одной из координат. Это обеспечивает последовательное расположение групп точек с разными значениями выбранной координаты.

3. После чего запоминается координата группы и все последовательности извлекаются в отдельный массив массивов.

4. В каждом элементе этого массива остается только значение меняющейся координаты и значение функции для каждой группы.

Для формализации процедуры оценки качества поверхности был введен «коэффициент воспроизведения качества поверхности». Он вычисляется для сформированной последовательности по следующему алгоритму: выполняется просмотр пар соседних интервалов сформированной последовательности узлов сетки. Если знак производной на двух последовательных интервалах сетки совпадает, оценка этого параметра инкрементируется на единицу. В противном случае оно уменьшается на единицу.

5. «Коэффициент воспроизведения качества поверхности» вычисляется для каждой сформированной последовательности.

6. Полученные результаты суммируются и данное число нормируется на количество групп.

Представленная процедура была реализована программно и протестирована на нескольких экземплярах модели с разными физическими параметрами. Было продемонстрировано, что предложенный подход работоспособен и обеспечивает возможность количественной оценки качества построенной сетки.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе решался ряд задач развития программного комплекса, реализующего моделирование с использованием подхода на основе квантового кинетического уравнения. Для минимизации необходимых вычислительных ресурсов была разработана поэтапная процедура построения регулярной сетки с изменяющимся масштабом. В рамках выполненной работы был реализован первый этап этой процедуры – генерация стартовой сетки. Модуль может генерировать стартовые сетки различной плотности в соответствии с конфигурационным набором параметров модели. В ходе выполнения работы реализован модуль, обеспечивающий определение максимального значения вероятности заселения для каждого рассматриваемого состояния и сохранение полученных результатов для последующего анализа. Предложен и программно реализован критерий оценки качества сформированной сетки. Проведено его тестирование на контрольных примерах. Тем самым поставленные задачи были полностью выполнены и цель работы успешно достигнута.

Основные источники информации:

- 1 K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene // Nature.– 2005.– Vol. 438.– 197.
- 2 A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, and A.K. Geim The electronic properties of graphene // Rev. Mod. Phys.– 2009.– Vol. 81. – 109.
- 3 M.M.Glazov, S.D.Ganichev High frequency electric field induced nonlinear effects in graphene // Physics Reports.– 2014.– Vol. 535.– 101.
- 4 P.Bowlan, E. Martinez-Moreno, K.Reimann, T. Elsaesser, and M.Woerner Ultrafast terahertz response of multilayer graphene in the nonperturbative regime // Phys. Rev. B.– 2014.– Vol. 89.– 041408.
- 5 M. Baudisch, A. Marini, J.D. Cox, T. Zhu, F. Silva, S. Teichmann, M. Massicotte, F. Koppens, L.S. Levitov, F.J. Garcia de Abajo, J. Biegert Ultrafast nonlinear optical response of Dirac fermions in graphene // Nature Communications – 2018. – Vol. 9. – 1018.
- 6 Zi-Yu Chen, Rui Gin Circularly polarized extreme ultraviolet high harmonic generation in graphene // Optics Express.– 2019.– Vol. 27.– 3761.

- 7 Wenwen Mao, Angel Rubio, and Shunsuke A. Sato Terahertz-induced high-order harmonic generation and nonlinear charge transport in graphene // Phys. Rev. B.– 2022.– Vol. 106.– 024313.
- 8 Soonyoung Cha, Minjeong Kim, Youngjae Kim, Shinyoung Choi, Sejong Kang, Hoon Kim, Sangho Yoon, Gunho Moon, Taeho Kim, Ye Won Lee, Gil Young Cho, Moon Jeong Park, Cheol-Joo Kim, B. J. Kim, JaeDong Lee, Moon-Ho Jo, and Jonghwan Kim Gate-tunable quantum pathways of high harmonic generation in graphene // Nature Communications.– 2022.– Vol. 13.– 6630.
- 9 S.A.Smolyansky, D.V.Churochkin, V.V.Dmitriev, A.D.Panferov, B.K'ampfer Residual currents generated from vacuum by an electric field pulse in 2+1 dimensional QED models // EPJ Web of Conferences.– 2017.– Vol. 138.– pp. 06004.
- 10 A.D. Panferov, S.A. Smolyansky, D.B. Blaschke, N.T. Gevorgyan Comparing two different descriptions of the I-V characteristic of graphene: theory and experiment // EPJ Web of Conferences.– 2019.– Vol. 204.– pp. 06008.
- 11 S.A. Smolyansky, A.D. Panferov, D.B. Blaschke, N.T. Gevorgyan Non-perturbative Kinetic Description of Electron-Hole Excitations in Graphene in a Time Dependent Electric Field of Arbitrary Polarization // Particles.– 2019.– Vol. 2.– pp. 208.
- 12 А.Д.Панферов, А.В.Маханьков, А.А.Трунов Использование адаптивной сетки на основе квадродерева для моделирования конечного состояния квантово-полевой системы при импульсном внешнем воздействии // Программные системы: теория и приложения.– 2020.– Vol. 11.– pp. 79.
- 13 А.Д. Панферов, Н.А. Новиков, А.А. Трунов Моделирование поведения графена во внешних электрических полях // Программные системы: теория и приложения.– 2021.– Vol. 12.– pp. 3.