

Моделирование динамики безмассовых носителей заряда в двумерной системе

- Левенец С. А * ,
- Верёвин Т. Т* ,
- Маханьков А. В * ,
- Панферов А. Д * ,
- Пирогов С. О* ,

* - СГУ им. Н. Г. Чернышевского, Россия

Введение

В связи с потребностью радиоэлектроники в новых материалах с перспективными характеристиками одним из направлений поиска является исследование (псевдо) двумерных систем, реализуемых в виде моноатомных или мономолекулярных слоёв на подложках или в свободном состоянии.

Одним из представителей таких перспективных материалов является графен.

Для него характерна очень высокая эффективная скорость носителей заряда и специфический (фотоно-подобный) закон дисперсии, устанавливающий связь энергии и импульса носителей.

Введение

Для оценки практических аспектов использования новых материалов необходимо уметь определять их отклик на действие внешних электромагнитных полей.

Настоящая работа представляет первые результаты разработки вычислительной процедуры определения функциональной связи параметров внешнего воздействия и отклика материала на максимально достоверной физической основе.

В данной работе:

представлена физическая модель, описывающая процесс генерации носителей с фотоноподобным законом дисперсии во внешнем электрическом поле для двумерных сред.

разработана программа, обеспечивающая эффективное использование ресурсов параллельных высокопроизводительных вычислительных систем.

Представлены результаты оптимизации этой программы и её тестирования на контрольных примерах.

Проведены оценки эффективности, производительности, точности результатов, масштабируемости.

Кинетические уравнения

Модель кинетики носителей

Базой для решения задачи является система кинетических уравнений для функции распределения носителей $f(\vec{p}, t)$

$$\begin{aligned} \dot{f}(\mathbf{p}, t) &= \frac{1}{2} \lambda(\mathbf{p}, t) u(\mathbf{p}, t) \\ \dot{u}(\mathbf{p}, t) &= \lambda(\mathbf{p}, t) [1 - 2f(\mathbf{p}, t)] - 2\varepsilon(\mathbf{p}, t) v(\mathbf{p}, t) \\ \dot{v}(\mathbf{p}, t) &= 2\varepsilon(\mathbf{p}, t) u(\mathbf{p}, t) \end{aligned}$$

- $f(\mathbf{p}, t)$ – функция распределения по импульсам квазичастичных возбуждений ЭПП
- $v(\mathbf{p}, t)$ и $u(\mathbf{p}, t)$ описывают эволюцию поляризации вакуума

Модель кинетики носителей

Эта система уравнений в рамках двумерной адаптации квантовой электродинамики является строгим следствием закона дисперсии

$$\varepsilon(\vec{p}, t) = v_F \sqrt{P_1^2 + P_2^2},$$

(v_F - скорость Ферми, $P_i = p_i - eA_i$ - кинематический импульс, A_i - векторный потенциал действующего поля, e - электрический заряд квазичастиц)

Модель кинетики носителей

Коэффициент:

$$\lambda(\mathbf{p}, t) = ev_F^2 \frac{E_1 P_1 - E_2 P_2}{2\varepsilon^2(\mathbf{p}, t)}$$

Определяется через параметры электрического поля и координаты в импульсном пространстве.

Программная реализация модели

Основная трудность в использовании связана с вычислительной сложностью задачи, решаемой только численно.

При этом каждую точку двумерного импульсного пространства характеризует уникальное поведение коэффициентов уравнения во времени.

Программная реализация модели

Положительным моментом является возможность решать систему уравнений в каждой исследуемой точке импульсного пространства независимо.

В этом смысле задача хорошо распараллеливается.

По многим причинам представляется удобным задавать параметры моделируемой системы, выполнять промежуточные вычисления и хранить полученные данные с использованием специальной, «естественной» для рассматриваемой проблемы, системы единиц измерения физических величин.

Программная реализация модели

В качестве базы для такой системы будем использовать:

- постоянную решетки графена, обычно обозначаемую a и имеющую значение $0.246 \text{ nm} = 2.46 \times 10^{-10} \text{ m}$ (единица длины);
- скорость Ферми $v_F = 10^6 \text{ m/s}$;
- постоянную Планка (приведенную) $\hbar = 1.0546 \times 10^{-34} \text{ kg m}^2/\text{s}$;
- элементарный заряд $e = 1.602 \times 10^{-19} \text{ C}$.

В используемой системе все эти величины имеют единичные значения.

В частности, это обеспечит близость (по порядку значений) используемых в промежуточных вычислениях величин.

Программная реализация модели

На первом этапе решение системы для набора контрольных точек было реализовано средствами системы Mathematica.

Это позволило быстро получить оценки ресурсоёмкости задачи в идеальных условиях автоматической оптимизации процедуры решения системы ОДУ средствами этого пакета и набор эталонных значений искомой функции распределения для последующего использования.

На втором этапе разработана программа для вычислительного кластера, обеспечивающая параллельное решение системы кинетических уравнений для произвольного количества наборов параметров.

Программная реализация модели

Программа реализована на C с использованием интерфейса передачи сообщений MPI и функционала свободной библиотеки GSL .

Выбор GSL обусловлен наличием в ней объектов различного уровня для удобной организации процедуры решения задачи Коши для системы ОДУ и поддержкой разнообразных методов численного решения такой задачи.

В библиотеке реализованы пять модификаций явного и три модификации неявного методов Рунге-Кутты, специальные возможности предлагаются для решения жестких систем.

Оптимизация программы и результаты

Моделирующая программа позволяет воспроизводить отклик исследуемой системы на действие суперпозиции ортогональных однополярных импульсов электрического поля вида

$$E_1(t) = \frac{E_{10}}{\text{Cosh}^2((t - t_{01})/T_1)}$$
$$E_2(t) = \frac{E_{20}}{\text{Cosh}^2((t - t_{02})/T_2)}$$

Здесь E_1, E_2 - максимальные значения напряженности компонент электрического поля, t_{01}, t_{02} - времена достижения максимального значения каждой из компонент, T_1, T_2 - характерные времена действия каждой из компонент поля.

Оптимизация программы и результаты

Оценка работоспособности программы и оптимизация её настроек проводились для максимально упрощенной версии

$$E_1(t) = \frac{E_{10}}{\cosh^2\left(\frac{t}{T_1}\right)}, \quad E_1(t) = 0$$

После первоначальной отладки и верификации результатов счета было исследовано влияние выбора метода интегрирования на скорость работы программы.

Оптимизация программы и результаты

Сравнение проводилось по времени вычисления остаточных значений функции распределения $f(\bar{p}, t \rightarrow \infty)$ для матрицы 10×10 точек импульсного пространства.

Использовались следующие значения параметров поля: $E_{10} = 10^5 V/m$, $T_1 = 2.46 \times 10^{-14} s$

Для минимизации влияния затрат времени на обмены данными вычисления выполнялись на десяти ядрах одного узла.

Функции библиотеки GSL используют формат с плавающей запятой двойной точности и позволяют задавать относительную и абсолютную погрешность вычислений.

Приведенные в таблице значения времени решения задачи получены при значении последних параметров 1.0×10^{-14}

Зависимость времени

Таблица 1. ЗАВИСИМОСТЬ ВРЕМЕНИ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ОТ ВЫБОРА МЕТОДА ИНТЕГРИРОВАНИЯ

| N | Метод интегрирования (по документации GSL) | Время решения задачи (ms) |
|-----|--|---------------------------|
| 1 | Explicit embedded Runge-Kutta (2, 3) | 5815 |
| 2 | Explicit 4th order (classical) Runge-Kutta | 290 |
| 3 | Explicit embedded Runge-Kutta-Fehlberg (4, 5) | 135 |
| 4 | Explicit embedded Runge-Kutta Cash-Karp (4, 5) | 136 |
| 5 | Explicit embedded Runge-Kutta Prince-Dormand (8, 9) | 57 |
| 6 | Implicit Gaussian second order Runge-Kutta | 23853 |
| 7 | Implicit Gaussian 4th order Runge-Kutta | 647 |
| 8 | A variable-coefficient linear multistep Adams method in Nordsieck form | 84 |
| 9 | A variable-coefficient linear multistep backward differentiation formula (BDF) | 177 |

Погрешность

Таблица 2. ЗАВИСИМОСТЬ ВРЕМЕНИ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ И РЕЗУЛЬТАТОВ ОТ ПОГРЕШНОСТЕЙ ИНТЕГРИРОВАНИЯ ДЛЯ МЕТОДОВ 5 И 8 ИЗ ТАБЛИЦЫ 1

| Задаваемые погрешности (абс. и отн.) | Время решения задачи (μs) метод 5 | Значение метод 5 | Время решения задачи (μs) метод 8 | Значение метод 8 |
|--------------------------------------|--|------------------|--|------------------|
| 10e-6 | 15378 | 0.94855704072 | 16679 | 0.97524534512 |
| 10e-8 | 20718 | 0.97525691165 | 28074 | 0.97525695955 |
| 10e-10 | 27296 | 0.97525691167 | 40725 | 0.97525690930 |
| 10e-12 | 45247 | 0.97525691167 | 53919 | 0.97525691167 |
| 10e-14 | 58625 | 0.97525691167 | 80339 | 0.97525691167 |
| 10e-16 | 94744 | 0.97525691167 | 110887 | 0.97525691167 |
| 10e-18 | 481768 | 0.97525691167 | 154258 | 0.97525691167 |

Масштабируемость

Таблица 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ТЕСТИРОВАНИЯ МАСШТАБИРУЕМОСТИ ЗАДАЧИ

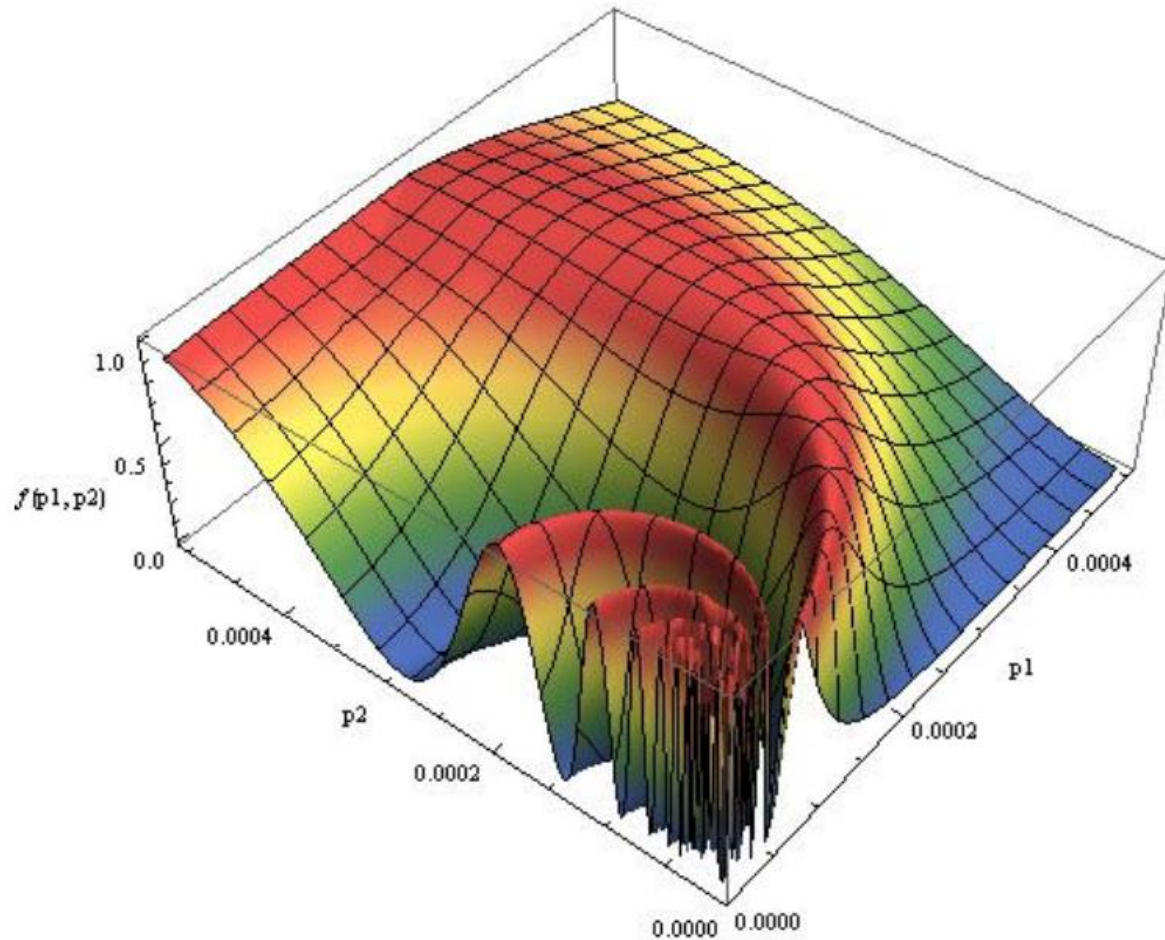
| Задаваемые погрешности (абс. и отн.) | Время для сетки 10×100 (μs) одна нода | Время для сетки 10×100 (μs) две ноды | Время для сетки 100×100 (μs) одна нода | Время для сетки 100×100 (μs) две ноды |
|--------------------------------------|--|---|---|--|
| 10e-6 | 126184 | 162657 | 1164969 | 1202761 |
| 10e-8 | 175180 | 195095 | 1517363 | 1669305 |
| 10e-10 | 250783 | 260707 | 2129171 | 2619711 |
| 10e-12 | 344800 | 396212 | 3158579 | 3459483 |
| 10e-14 | 580914 | 608269 | 4764188 | 5345023 |
| 10e-16 | 906610 | 970593 | 7621487 | 8342612 |
| 10e-18 | 4433375 | 4863168 | 42357249 | 46519604 |

Оптимизация программы и результаты

Из их анализа и сравнения с данными, представленными в Таблице 2, можно сделать вывод о практически линейной зависимости времени счета от количества точек сетки, на которой выполняется моделирование.

Переход к многонодовым конфигурациям сказывается на времени моделирования. Но увеличение времени сета незначительно.

Оптимизация программы и результаты



На рисунке представлена квадратная область импульсного пространства в диапазоне значений:

$$1.0 \times 10^{-5} \leq p_1 \leq 5.0 \times 10^{-4}, \\ 1.0 \times 10^{-5} \leq p_2 \leq 5.0 \times 10^{-4}$$

Значения приведены в единицах:

$$\frac{\hbar}{a} = 4.289 \times 10^{-25} \text{ kg} \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

Потребовалась матрица значений размером 250 на 250

Рис. 1. Вид функции распределения носителей $f(p_1, p_2, t \rightarrow \infty)$ при тестовых параметрах поля.

Литература

[1] <https://www.gnu.org/software/gsl/> GSL - GNU Scientific Library

[2] Blaschke D.B., Ilyine S.V., Panferov A.D., Smolyansky S.A., Ropke G. Optical properties of the e-e+ plasma generated in the focal spot of a high-intensity laser // Contributions to Plasma Physics. 2009. Ò. 49. №7. Ñ. 602-608.

[3] Blaschke D., Juchnowski L., Panferov A., Smolyansky S. Dynamical Schwinger effect: properties of the e-e+ plasma created from vacuum in strong laser fields // Physics of Particles and Nuclei. 2015. Ò. 46. №5. Ñ. 797-800.

[4] Колеконов С.В., Панферов А.Д., Смолянский С.А. Исследование тонкой структуры функции распределения электрон-позитронных пар при динамическом эффекте Швингера. в сб. Компьютерные науки и информационные технологии Материалы международной научной конференции Изд. СГУ, Саратов, 2014, с.157-160.

Спасибо за внимание

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект 18-07-00778.

Доклад подготовил: Левенец С. А.