

***Бендес Юрій,**
доктор педагогічних наук, доцент,
професор кафедри фізики та методики її навчання,
Зіновчук Андрій,
кандидат фізико-математичних наук, доцент,
завідувач кафедри фізики та методики її навчання,
Житомирський державний університет імені Івана Франка,
м. Житомир, Україна*

АЛГОРИТМИ ОПТИМІЗАЦІЇ У ФІЗИЦІ ТВЕРДОГО ТІЛА

З точки зору теоретичної фізики тверде тіло може бути розділене на електронну та фононну підсистеми. Особливості електронної підсистеми описуються рівнянням Шредінгера, а фононна підсистема описується

динамічною матрицею. Як в першому та і в другому випадку задача є настільки складною, що аналітичне рішення може бути знайдене тільки у “ідеалізованих” випадках, які лише якісно відповідають об’єктивній реальності. Отримання адекватних теоретичних оцінок вимагає використання чисельних методів розв’язку та відповідних алгоритмічних структур. На сьогодні, моделювання фізичних процесів в електронній та фононній підсистемах твердих тіл є не що інше ніж комп’ютерне моделювання. Тому, важливе значення у фізиці мають чисельні методи, які можна відносно просто “перекласти” на мову алгоритмів.

Одним із найбільш потужних методів, що може бути використаний для дослідження як електронної, так і фононної підсистем є метод функціоналу густини [1]. Його ще навивають розрахунком із перших принципів, так як вхідними параметрами для нього є лише типи атомів та їхні електричні потенціали в елементарній комірці твердого тіла. Це метод є досить загальним, але водночас дуже складним і вимагає великих комп’ютерних потужностей для розрахунку навіть в простих твердих тілах. Якщо мова іде про отримання, наприклад енергій електронів чи фононів, то метод функціоналу густини є найкращим вибором. Однак є ряд задач, які вимагають знання енергетичної структури електронів чи фононів в багатьох станах, далеко за межами основного стану. В такій ситуації метод функціоналу густини стає занадто неефективним, так як час комп’ютерного розрахунку, навіть при паралельній роботі процесорів, може вимірюватися сотнями годин.

З другої сторони, є група феноменологічних методів, які основані на декількох допущеннях про електронну і фононну структуру твердого тіла. В порівнянні з методом функціоналу густини вони є набагато швидші. В цих методах вводять в розгляд набір параметрів, що мають бути визначені із співпадіння розрахованих даних з наперед відомими експериментальними даними. Тобто, ключовим завданням впровадження феноменологічних методів є знаходження такого набору параметрів, щоб результати моделювання найбільш тісніше відповідали цільовим значенням. Підбір параметрів може бути виконаний за допомогою чисельних алгоритмів оптимізації. Тому метою цієї роботи було оцінка алгоритмів оптимізації параметрів феноменологічної моделі для фононної підсистеми. Ми зосередилися лише на фононній підсистемі, хоча узагальнення отриманих в цій роботі результатів на електронну систему не викликає труднощів.

Однією з феноменологічних моделей для фононної підсистеми є модель валентних силових полів [2]. Енергії фононів для кожного значення хвильового вектора \vec{k} є власними значеннями динамічної матриці

$$D_{mm'}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{M_m M_{m'}}} \sum_n \frac{\partial^2 U}{\partial \vec{r}_m \partial \vec{r}_{m'}} \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}_n)$$

де M_m – маса m -того атома в елементарній комірці; \vec{R}_n – вектор трансляції кристалічної ґратки твердого тіла; $U(\vec{r}_m)$ – потенціальна енергія m -того атома, положення якого визначається радіус-вектором \vec{r}_m . В цій моделі потенціальна

енергія міжатомної взаємодії U записується як

$$U = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{8} \sum_{i,j} \alpha \cdot (dr_{ij})^2 + \sum_s (\beta \cdot (d\theta_{ijs})^2 + \gamma \cdot (dr_{ij} d\theta_{ijs}) + \delta \cdot (dr_{ij} dr_{is})) \right)$$

dr_{ij} - зміна міжатомної відстані; $d\theta_{jis}$ - зміна кута між напрямками атомних зв'язків.

Ця залежність містить чотири константи $(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$, що є феноменологічними силовими параметрами, значення яких будуть визначатися алгоритмами оптимізації. Оптимізація заключається в підборі силових параметрів так, щоб розрахована енергетична структура фононів співпадала з відомими експериментальними даними, або, на мові математики, треба забезпечити глобальний мінімум цільового функціоналу F , який по суті являє собою суму квадратів відхилень розрахованих значень енергій фононів ε від “цільових” експериментальних значень енергій фотонів ε_i^{exp}

$$\sum_i (\varepsilon - \varepsilon_i^{exp})^2 = F$$

i – число цільових значень, прийнятих в моделі.

Завдання про відшукування глобального мінімуму функціоналу F частинним випадком багатовимірної задачі нелінійної мінімізації. Для розв'язання цієї задачі необхідно використовувати чисельні підходи так як внаслідок сильної нелінійності задачі і наявності великого числа побічних мінімумів, стандартні методи не приводять до необхідного результату. Ми використали і порівняли між собою ефективність двох чисельних ітераційних алгоритмів: метод спряжених градієнтів [3] і політопний метод [4]. На рис.1 показана загальна блок-схема за якою працюють такі алгоритми.

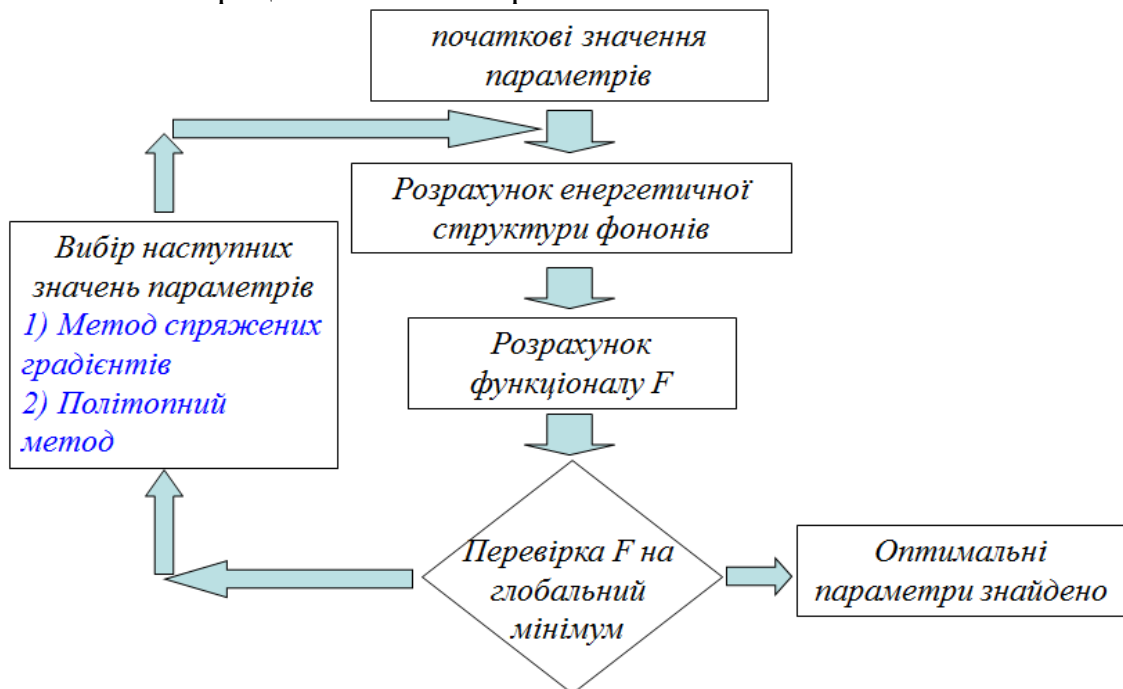


Рис.1 Схема роботи ітераційних алгоритмів пошуку глобального мінімуму цільової функції або функціоналу F .

Для оцінки і порівняння роботи цих двох алгоритмів ми провели оптимізацію параметрів моделі валентних силових полів для арсеніду галію (GaAs) - типового бінарного напівпровідникового матеріалу. Цільовими параметрами ε_i^{exp} були вибрані енергії фононів для характеристичних хвильових векторів \vec{k} гранецентрованої кубічної ґратки, які відомі з експериментальних вимірювань [5]. Число цільових параметрів в нашому випадку було рівне десяти. Алгоритми були запуснені на виконання за допомогою C компілятора на 2.2 ГГц процесорі. Результати розрахунку представлені в таблиці 1. Як видно, обидва алгоритми дають схожий набір силових параметрів з приблизно однаковим відхиленням від експериментальних даних. Однак час розрахунку для політопного підходу значно менший. Причина цього полягає у тому, що політопний алгоритм не вимагає чисельного розрахунку градієнтів оптимізаційного функціоналу, що пришвидшує процедуру відшукування глобального оптимального значення, ефективно відкидаючи локальні оптимуми. Однак, стабільність роботи політопного алгоритму залежить від того, як сильно початкові значення параметрів-змінних відрізняються від оптимальних. Якщо різниця є великою, то є ймовірність в результаті отримати значення силових параметрів, які не узгоджуються із фізичним змістом, наприклад занадто велике значення (більше 100 Н/м) для силової константи розтягу-стиску α .

Таблиця 1

	GaN	InN
<i>Оптимальні параметри</i>	$\alpha = 45.556841$ Н/м	48.400569 Н/м
	$\beta = 5.3217905$ Н/м	1.9568213 Н/м
	$\gamma = 0.3012541$ Н/м	0.0945625 Н/м
	$\delta = -2.3012541$ Н/м	1.4568761 Н/м
<i>Час процесу оптимізації</i>	138 хв	46 хв
<i>Відхилення від експериментальних даних</i>	16 %	19 %

Підсумовуючи отримані результати, можна стверджувати, що алгоритми оптимізації займають особливе місце в моделюванні фізичних властивостей твердих тіл. Основна їх значимість полягає в оптимальному налаштуванні феноменологічних моделей, що описують фундаментальні властивості твердих тіл і найбільш точно відтворюють відомі на сьогодні експериментальні дані. В цій роботі ми виконали тестування алгоритмів оптимізації параметрів моделі валентних силових полів для фононої підсистеми типового бінарного напівпровідникового матеріалу. Результати розрахунків показали, що найбільш вигідним, з точки зору обмежених комп'ютерних потужностей, є оптимізаційний алгоритм політопного типу.

Список використаних джерел та літератури

1. C. Trindle, D. Shillady. *Electronic Structure Modeling*. CRC Press Taylor & Francis Group, 2008.
2. S. Steiger, M. Salmani-Jelodar, D. Areshkin, A. Paul, T. Kubis, M. Povolotskyi, H.-H. Park, G. Klimeck. Enhanced valence force field model for the lattice properties of gallium arsenide. *Physical review B*. 2011 v.84, p.155204.
3. J.A. Snyman. *Practical Mathematical Optimization*. Springer Science Media Inc, 2005.
4. Ph. E. Gill, W. Murray, M. H. Wright. *Practical Optimization*. Academic press limited, 2011.
5. D. Strauch, B. Dorner. Phonon dispersion in GaAs. *J. Phys: Condens. Matter* 1990, v.2, p.1457.