Высокоточные алгоритмы оптимизации потенциала Китинга для квантовых точек "кремний-германий"

Аникин Антон Сергеевич
Институт динамики систем и теории управления СО РАН (Иркутск), Россия
e-mail: anton.anikin@gmail.com

В настоящее время при проектировании новых оптоэлектронных устройств исследуются гетероструктуры типа «германий-кремний» [1, 2]. Моделирование взаимодействия между атомами в подобных комбинированных материалах осуществляется с помощью потенциальной функции Китинга [3], имеющей следующий вид:

$$E = \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{3}{16} \sum_{j=1}^{4} \frac{\alpha_{ij}}{d_{ij}^2} \left\{ (r_i - r_j)^2 - d_{ij}^2 \right\}^2 + \right.$$
$$\left. + \frac{3}{8} \sum_{j=1}^{4} \sum_{k=j+1}^{4} \frac{\beta_{ijk}}{d_{ij} \cdot d_{ik}} \left\{ (r_i - r_j) \cdot (r_i - r_k) + \frac{d_{ij} \cdot d_{ik}}{3} \right\}^2 \right]$$

Здесь n – число атомов кристаллической решетки; d_{ij}, d_{ik}, α_{ij}, β_{ijk} – заданные константы; $r_i = (x_{1i}, x_{2i}, x_{3i})$, $r_j = (x_{1j}, x_{2j}, x_{3j})$, $r_k = (x_{1k}, x_{2k}, x_{3k})$ – оптимизируемые переменные. Таким образом, данная задача может быть сведена к стандартной форме $f(x) \to min$.

Для решения задач минимизации функций разработано множество методов и подходов, однако высокие требования, предъявляемые к решениям задач оптимизации потенциала Китинга, к сожалению, не позволяют напрямую применять известные методы. Рассматриваемые задачи имеют высокие размерности, кроме того, решение необходимо получать с точностью, сопоставимой с машинными .

Для решения поставленной задачи были созданы специализированные реализации ряда методов – метода Коши, метода сопряженных градиентов и метода Ньютона. Метод Коши при решении исследуемых задач имеет низкую, линейную скорость сходимости, но может быть с успехом применен в конце решения в качестве «уточняющего». Метод сопряженных градиентов реализован в варианте Флетчер-Ривз со специальным высокоточным одномерным поиском, основанным на комбинации методов сплайн-поиска [4] и надежного, но медленного классического метода Стронгина [5]. Описанная реализация метода сопряженных градиентов позволила решить задачи с размерностью порядка переменных. Метод Ньютона представлен модификацией, основанной на учете особенностей структуры матрицы Гессе минимизируемой функции и применении технологии разреженных матриц. Данный подход позволил получить высокоточное решение ряда задач с размерностями порядка переменных.

Для повышения быстродействия реализованных алгоритмов была применена технология OpenMP[6], расчеты производились на вычислительной системе, имеющей 12 ядер Intel Xeon X5670, тестирование показало достаточно высокую эффективность полученной реализации. Несмотря на высокую чувствительность некоторых алгоритмов к качеству настройки алгоритмических параметров, с их помощью удалось решить ряд актуальных задач минимизации потенциала Китинга с размерностями, превышающими переменных.

Работа частично поддержана грантом РФФИ № 12-07-31118.

Список литературы

[1] *Yakimov A. I., Stepina N. P., Dvurechenskii A. V., Nikiforov A. I., Nenashev A. V.* Excitons in charged Ge/Si type-II quantum dots. // Semiconductor Science and Technology v. 15, № 12. / 2000. p. 1125–1130.

[2] *Якимов А. И., Двуреченский А. В., Блошкин А. А., Ненашев А. В.* Связывание электронных состояний в многослойных напряженных гетероструктурах Ge/Si с квантовыми точками 2- го типа // Письма в ЖЭТФ, т.83, вып. 4. / С. 189–194.

[3] *Keating P.N.* Effect of Invariance Requirements on the Elastic Strain Energy of Crystals with Application to the Diamond Structure. // Phys. Rev. v. 145 / 1966. p. 637–645.

[4] *Горнов А.Ю.* Применение сплайн-аппроксимации для конструирования алгоритмов оптимизации с новыми вычислительными свойствами // Труды всеросс. конф. "Дискретная оптимизация и исследование операций". Владивосток, 2007. – С. 99.

[5] *Стронгин Р.Г.* Численные методы многоэкстремальной оптимизации. Москва: «Наука», 1978. 238 с.

[6] *OpenMP* project Page: http://www.openmp.org/wp/.