Проект в 2023 году успешно завершен. Основные результаты представлены в финальном отчете следующим образом.

По исследованиям, посвященным разработке новых стохастических алгоритмов для решения систем линейных алгебраических уравнений экстремально большой размерности, в 2023 году были получены наиболее важные результаты. Основной результат был получен по решению известной трудной задачи в стохастическом моделировании: ускорение итерационного метода решения уравнений с целью получения высокой точности вектора решений, в особенности для плотных матриц. Прямое распространение известного метода Холтона позволяет в некоторых случаях уточнять решение, однако трудоемкость этого подхода очень высока. Участниками проекта построен новый стохастический алгоритм итерационного уточнения, который позволяет эффективно вычислять решение с высокой точностью. Полученные результаты опубликованы в статье [1]. Эта работа базируется на статье [2], ранее выполненной в рамках данного проекта, где удалось построить эффективный алгоритм вычисления итераций плотных матриц, преобразовав их к стохастическим по столбцам (либо по строкам). Комбинация этого алгоритма со специальным стохастическим итерационным алгоритмом уточнения оказалась эффективным, устойчивым и надежным методом, с помощью которого вектор решения удается вычислять с очень высокой точностью, до сих пор недостижимой в рамках традиционных методов Монте-Карло. Построенный алгоритм допускает глубокое распараллеливание, что существенно при решении задач с экстремально высокой размерностью. Построение параллельного варианта алгоритма и его исследование проведено в статье [3]. Анализ устойчивости к флуктуациям проведен в работе [4].

Векторный рандомизированный алгоритм был применен к решению краевых задач, где необходимо вычислять не только решение, но и производные от решения. Участникам проекта удалось в рамках этого подхода построить стохастический итерационный алгоритм решения системы уравнений упругости (уравнения Ламе). Здесь важна была точность расчетов, поскольку приходилось вычислять не только первые, но и вторые производные, причем на каждом шаге итерационного процесса. Для сравнительного анализа эта задача решалась и двумя другими методами – глобальным алгоритмом блуждания по сферам и алгоритмом блуждания по сеткам. Полученные результаты представлены в [5].

Для исследования нестационарного транспорта экситонов в пикосекундном диапазоне построены алгоритмы по расчету интенсивности катодолюминесценции с учетом нерадиационной рекомбинации электронов на проникающих дислокациях. Основной целью была разработка алгоритма, позволяющего по одной кривой интенсивности фотолюминесценции в ее временной развертке определить плотность дислокаций и других наноразмерных включений в кристаллической решетке. Эта сложная задача может быть решена только при наличии точного описания механизма нерадиационной рекомбинации на дислокациях. Участникам проекта удалось это сделать в совместных исследованиях с группой физиков из Института твердотельной электроники им. П. Друде (Берлин). В предыдущий год работы была опубликована серия из трех статей: (1) U. Jahn, V. M. Kaganer, K. K. Sabelfeld, A. E. Kireeva et al. Phys. Rev. Applied, v.17 (2022), N2, artcle 024017, (2) Phys. Rev. Applied, v.17 (2022), N2, artcle 024018, (3) Phys Rev. Applied, v.17 (2022), N2, article 024019, где детально описана структура нерадиационной рекомбинации в окрестности дислокации. В 2023 г. на этой основе удалось решить задачу определения плотности дислокации по одной кривой интенсивности фотолюминесценции, развернутой во времени в пикосекундном диапазоне.

Созданы алгоритмы стохастического моделирования транспорта электронов в полупроводниковых гетероструктурах на основе решения интегрального уравнения Больцмана с учетом непараболического приближения закона дисперсии. На основе построенных в 2022 году алгоритмов квантово-механического моделирования, решающего систему уравнений Больцмана, Шредингера и Пуассона, проведена серия расчетов по описанию зонной структуры и базовых свойств гетеросистемы для полупроводниковых гетероструктур, разрабатываемых совместно с группой физиков из Института физики полупроводников СО РАН им. Ржанова. По данным исследованиям опубликована совместная статья [6]. Представлены результаты вычислительного эксперимента, включающего решение системы уравнений Пуассона-Шредингера-Больцмана для многослойной гетероструктуры AlGaAs/GaAs/InGaAs/GaAs/AlGaAs с учетом распределения электронов по уровням квантования энергии в основной и в боковых долинах. Вычислены полевые зависимости дрейфовой скорости электронов в каждой долине. Вычисленные усредненные полевые зависимости дрейфовой скорости сравниваются с экспериментом. Расчеты показали, что уменьшение рассеяния горячих электронов в гетероструктуре DA-pHEMT за счет эффекта квантования приводит к увеличению скорости дрейфа в высоких электрических полях. Это открывает новые возможности для совершенствования гетероструктур и повышения быстродействия СВЧ-транзисторов.

Разработан новый стохастический кинетический алгоритма для моделирования зарождения и агрегации нанокристаллов сульфида кадмия, синтезированных в матрице Ленгмюра-Блоджетт. На первом этапе работ по этой задаче в рамках данного проекта была построена базовая кинетическая модель, опубликованная в работе [7]. Численные расчеты и их сравнение с результатами натурных экспериментов позволили определить основные критические параметры и проблемные особенности алгоритма, над которыми участники проекта продолжили работу в 2023 году совместно с группой исследователей из Института физики полупроводников им. Ржанова СО РАН (Новосибирск). Удалось построить стохастическую модель, учитывающую особенность выращивания таких кристаллов, где существенную роль играет кинетика испарения молекул растворителя. Как показали расчеты, алгоритм воспроизводит статистически подобные паттерны из кристаллов сульфида кадмия, полученные в реальных экспериментах. По результатам этих исследований написана совместная статья [8], направленная в журнал Physica A: Statistical Mechanics and its Applications.

В целом, по проекту в 2023 году опубликовано 7 статей в журналах, цитируемых базами данных Web of Science и Scopus, еще три статьи поданы в печать в журналы Modelling and Simulation in Materials Science and Engineerinпg, Computational Materials Scienсe, и Physica A: Statistical Mechanics and its Applications.

Публикации по проекту и используемые источники

[1] Sabelfeld K. K., Kireeva A. E. Randomized iterative linear solvers with refinement for large dense matrices // Monte Carlo Methods and Applications, V. 29, No 4.

[2] Sabelfeld K. A new randomized vector algorithm for iterative solution of large linear systems // Applied Mathematics Letters, 2022, V. 126, article 107830

[3] Sabelfeld K. K., Kireev S., Kireeva A. Parallel implementations of randomized vector algorithm for solving large systems of linear equations // Journal of Supercomputing, 2023, V. 79, No 10, p. 10555–10569

[4] Sabelfeld K. K. Correlation structure of the solution to the reaction-diffusion equation in respond to random fluctuations of the boundary condition // Fluctuation and Noise Letters, 2023, V. 22, No 6.

[5] Аксюк И. А., Киреева А. Е., Сабельфельд К. К., Смирнов Д. Д. Алгоритмы стохастического моделирования для итерационного решения уравнения Ламе // Сибирский журнал вычислительной математики, 2023, т. 26, No 4, стр. 357–377.

[6] Kablukova E. G., Sabelfeld K. K., Protasov D., Zhuravlev K. Stochastic simulation of electron transport in a strong electrical field in low-dimensional heterostructures // Monte Carlo Methods Appl, 2023, V. 29, No 4, p. 307–322

[7] Svit K., Kireev S., Sabelfeld K. A stochastic model, simulation, and application to aggregation of cadmium sulfide nanocrystals upon evaporation of the Langmuir-Blodgett matrix // Monte Carlo Methods and Applications, 2012, V.27 , No 4, 289-299

[8] Svit K., Kireev S., Sabelfeld K. Stochastic simulation of aggregation of cadmium sulfide nanocrystals upon evaporation of the Langmuir-Blodgett matrix // Physics A, 2023, submitted 13.09.2023