

Министерство образования и науки Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра дискретной математики и
информационных технологий

**Разработка программы для моделирования поведения графена во внешнем
электрическом поле**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента 5 курса 521 группы

Направления

(специальности)

09.03.01 – Информатика и вычислительная техника

код и наименование направления (специальности)

Компьютерных наук и информационных технологий

наименование факультета, института, колледжа

Усачева Павла Александровича

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

к. ф.-м. н., доцент

подпись, дата

А.Д. Панферов

Зав. кафедрой

к. ф.-м. н., доцент

подпись, дата

Л.Б. Тяпаев

Саратов 2016 год

ВВЕДЕНИЕ

Современная электроника для своего дальнейшего развития нуждается в новых материалах с высокими характеристиками, не доступными в обычных полупроводниках. В качестве одной из возможных перспектив рассматривается графен. Это модификация углерода, представляющая из себя гексагональную двумерную кристаллическую решётку толщиной всего в один атом. Ультратонкий, очень прочный механически, прозрачный, гибкий и электропроводящий материал. Его поверхностная плотность составляет всего 0.77 мг/м^2 . Графен является первым известным истинно двумерным кристаллом.

К сожалению, до сих пор промышленных технологий его производства не существует. Получение экспериментальных образцов и сборка на их основе прецизионных устройств пока реализуются только в пределах лабораторий.

По этой причине разработка методов теоретического исследования не только базовых характеристик материала, но и его поведения в достаточно реалистических экспериментальных или эксплуатационных условиях имеет большое значение.

Считается, что на основе графена можно конструировать транзисторы, работающие в недоступном сейчас терагерцовом диапазоне частот. Для оценки возможных характеристик таких устройств необходимо уметь моделировать процессы изменения концентрации носителей заряда и определять изменение во времени их параметров при действии на пленку графена высокочастотного электрического поля.

Была поставлена задача разработать прототип программы для численного моделирования поведения этого материала в переменных внешних электрических полях на основе кинетического формализма, предоставляющего базовую математическую модель в форме системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Работа состоит из четырёх глав:

- Система кинетических уравнений для описания поведения носителей заряда в графене
- Понятие ОДУ. Методы решения ОДУ
- Обзор инструментов для решения задачи
- Программная реализация расчёта математической модели

В **первой главе** описана математическая модель поведения носителей заряда в графене, описана модель переменного внешнего электрического поля. Определены способы которыми будет решаться задача.

Во **второй главе** даны определения обыкновенных дифференциальных уравнений, описаны основные методы их решения.

В **третьей главе** были изучены возможности библиотек с открытым исходным кодом для решения задач численного моделирования.

И в **четвёртой главе** описан процесс разработки программы и произведён анализ полученных результатов.

Завершается данная работа заключением, списком использованных источников и приложением «А», в котором приведен листинг программы.

Программа для решения создавалась на языке программирования C с использованием библиотеки для математических вычислений GSL, а так же для ускорения вычислений использовался подход на основе механизма передачи сообщений MPI, для этого использовалась библиотека, имплементирующая этот механизм – OpenMPI. Для вычислений использовался кластер СГУ с использованием менеджера распределённых ресурсов TORQUE.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате работы была разработана программа для решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений. В работе использовался набор базовых технологий для решения систем ОДУ, а именно библиотека GSL.

Проблема большой вычислительной сложности решавшейся задачи в качестве обязательного условия диктовала необходимость использования параллельной вычислительной среды. Эта проблема была решена путем декомпозиции области моделирования и распределения подзадач по нескольким вычислительным узлам средствами MPI. Выбранный способ распараллеливания обеспечил универсальность программы по отношению к архитектуре параллельной вычислительной системы и её высокую масштабируемость.

Полученные массивы данных позволяют получить представление о характеристиках планируемых реальных экспериментов.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Графен — Википедия [Электронный ресурс] // Википедия - свободная энциклопедия: [сайт]. [2013]. URL: <https://ru.wikipedia.org/wiki/Графен> (дата обращения: 25.02.2016).
- 2 Дифференциальное_уравнение [Электронный ресурс] // Википедия: [сайт]. [2016]. URL: http://ru.wikipedia.org/w/index.php?title=Дифференциальное_уравнение (дата обращения: 10.04.2016).
- 3 Кирьянов Д.В. Вычислительная математика [Электронный ресурс] // Сайт Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН: [сайт]. [2006]. URL: <http://www.keldysh.ru/comma> (дата обращения: 10.03.2016).
- 4 Явный метод Эйлера [Электронный ресурс] // учебные материалы кафедры компьютерных технологий РХТУ им. Д.И. Менделеева: [сайт]. URL: http://ikt.muctr.ru/html2/12/lek12_1.html (дата обращения: 10.03.2016).
- 5 Скворцов Л.М. Простые явные методы численного решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений [Электронный ресурс] // научный электронный журнал Научно-исследовательского вычислительного центра Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.: [сайт]. [2014]. URL: http://num-meth.srcc.msu.ru/zhurnal/tom_2008/v9r119.html (дата обращения: 16.03.2016).
- 6 Runge-Kutta-Fehlberg Method [Электронный ресурс] // учебные материалы факультета математики университета Фуллертон: [сайт]. URL: <http://math.fullerton.edu/mathews/n2003/rungekuttafehlbergmod.html> (дата обращения: 10.04.2016).
- 7 Dormand–Prince_method [Электронный ресурс] // Википедия - свободная энциклопедия: [сайт]. URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Dormand–Prince_method (дата обращения: 11.03.2016).

- 8 Ordinary differential equations - Initial value problems [Электронный ресурс] // University of Alberta: [сайт]. URL: <http://www.ualberta.ca/~kumar/handouts/char6.pdf> (дата обращения: 20.04.2016).
- 9 Методы Адамса. Качественная теория дифференциальных и разностных уравнений. [Электронный ресурс] // Материалы кафедры математической физики математико-механического факультета Уральского федерального университета.: [сайт]. URL: http://detc.ls.urfu.ru/assets/amath0031/lectures/adams_ru.html (дата обращения: 14.03.2016).
- 10 Message Passing Interface [Электронный ресурс] // Википедия - свободная энциклопедия: [сайт]. [2015]. URL: https://ru.wikipedia.org/wiki/Message_Passing_Interface (дата обращения: 24.02.2016).
- 11 Open MPI v1.10.1 documentation [Электронный ресурс] // OpenMPI Official Website: [сайт]. [2015]. URL: <https://www.open-mpi.org/doc/v1.10/> (дата обращения: 25.02.2016).
- 12 Stepping Functions [Электронный ресурс] // GNU Scientific Library – Reference Manual: [сайт]. [2015]. URL: https://www.gnu.org/software/gsl/manual/html_node/Stepping-Functions.html (дата обращения: 12.05.2016).
- 13 TORQUE Resource Manager [Электронный ресурс] // Wikipedia - Free encyclopedia: [сайт]. [2015]. URL: <https://en.wikipedia.org/wiki/TORQUE> (дата обращения: 15.03.2016).
- 14 Краткое руководство пользователя вычислительного кластера СГУ [Электронный ресурс] // Сайт вычислительного кластера Саратовского Государственного Университета им. Н.И. Чернышевского: [сайт]. [2010]. URL: http://mpi-m1.sgu.ru/cluster_guide.pdf (дата обращения: 16.03.2016).