

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ Н. Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра дискретной математики и информационных технологий

**ВИЗУАЛИЗАЦИЯ И АНАЛИЗ МАССИВОВ ДАННЫХ ПРИ
МОДЕЛИРОВАНИИ ПОВЕДЕНИЯ ГРАФЕНА ВО ВНЕШНЕМ
ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

студента 4 курса 421 группы
направления 09.03.01 — Информатика и вычислительная техника
факультета КНиИТ
Новикова Николая Андреевича

Научный руководитель
ассистент

А. А. Трунов

Заведующий кафедрой
к. ф.-м. н.

Л. Б. Тяпаев

Саратов 2019

ВВЕДЕНИЕ

Быстрый прогресс в технике и технологиях во многом обусловлен эффективным использованием современных вычислительных систем как при проектировании новых устройств, приборов и оборудования, так и при изучении и освоении новых принципов для их функционирования. Использование имитационного моделирования позволяет принципиально сократить потребности в натурных испытаниях или экспериментах, рассматривать процессы, воспроизведение которых в лабораторных условиях затруднительно или вообще невозможно.

Одним из приоритетных направлений современных прикладных исследований является поиск новых материалов и технологий их применения для достижения более высоких параметров электронных компонентов и устройств. Определенные надежды в этой связи возлагаются на псевдо двумерные структуры, в качестве наиболее известного представителя которых можно отметить графен (монослой углерода).

Моделирование отклика этого материала на воздействие внешних электромагнитных полей с различными характеристиками на основе различных физических моделей сейчас является быстро развивающимся конкурентным направлением. В том числе моделирование на основе подхода, основанного на использовании квантового кинетического уравнения.

В рамках работ по этому направлению, особенно при исследовании динамических характеристик протекающих процессов, генерируются очень большие объёмы данных, нуждающихся в обработке, анализе и интерпретации.

Была поставлена задача разработать программное решение для предварительной обработки, анализа по заданным критериям и визуализации массивов данных такой природы. Осложняющим обстоятельством является многомерный характер подлежащих обработке данных, поскольку при прочих равных условиях объём данных определяется степенной функцией в которой показателем степени является размерность задачи. Многомерность предполагает и наличие внутренней структуры, параметра расстояния между рассматриваемыми точками и другие особенности, которые необходимо учитывать.

Основным подходом при анализе и визуализации многомерных массивов данных является редукция их размерности по тем или иным алгоритмам.

В случае используемых результатов моделирования такая редукция выполнялась с использованием перехода от исходных параметров к интегральным наблюдаемым характеристикам. Эти параметры являются элементами модели процесса и имеют непосредственную физическую интерпретацию.

Цель бакалаврской работы – создание программного комплекса по обработке и анализу данных, полученных при имитационном моделировании поведения графена во внешнем электрическом поле.

Поставленная цель определила следующие задачи:

- Ознакомление с теоретическими аспектами хранения многомерных массивов данных.
- Выбор инструментов для создания приложения.
- Создание приложения по обработке и анализу множества точек.
- Визуализация результатов работы программы.

Методологические основы поведения графена во внешнем электрическом поле представлены в работах Боулана, Смолянского и Уолеса.

Бакалаврская работа состоит из введения, 4 разделов, заключения и списка использованных источников. Общий объем работы – 47 страниц, из них 39 страниц – основное содержание, включая 26 рисунков, список использованных источников информации – 20 наименований.

1 КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Первый раздел «Многомерные массивы данных» посвящен обзору различных методов хранения данных.

В представляемой выпускной квалификационной работе входные данные представляют из себя упорядоченный массив заданной размерности, поэтому на первом этапе рассматриваются определения массивов и особенности работы с ними.

Массивом при программировании обычно называется упорядоченная совокупность однотипных данных, обозначенных одним именем. Каждый элемент массива хранит одно значение, идентифицируемое с помощью индексов, количество которых может быть различным.

Массивы находят применение в различных практических задачах и отраслях научной деятельности. Одним из стандартных примеров использования массивов данных является линейная алгебра. Например, полином степени n , можно представить в виде одномерного массива длины n , содержащего коэффициенты при степени, соответствующей текущему индексу массива. Кроме того, большое значение в линейной алгебре играют матрицы, математические объекты, записываемые в виде прямоугольной таблицы элементов и представляющие собой совокупность строк и столбцов. Матрицу можно представить как двумерный массив размерности n на m .

Современные средства хранения информации позволяют хранить практически неограниченные объемы данных в течение длительного времени, и это не вызывает принципиальных проблем. Однако обработка данных требует более внимательного отношения к способу хранения информации, поскольку в этом случае важными аспектами является скорость доступа к данным и способы размещения их в оперативной памяти.

В языках программирования существуют различные решения для этих случаев. Например, в языке C++ реализованы статическое и динамическое выделение памяти [4]. При статическом (фиксированном) выделении памяти она выделяется только один раз во время компиляции. Размер выделенной памяти остается фиксированным и неизменным до конца выполнения программы. При динамическом распределении памяти имя создаваемой переменной указывает на определенный участок памяти. Этот указатель может быть перемещен в процессе работы программы для увеличения или умень-

шения размера памяти, отводимого под переменную.

Кроме того, в C++ используется библиотека контейнеров – универсальная коллекция шаблонов, классов и алгоритмов, позволяющих программистам легко реализовывать общие структуры данных, такие как очереди, списки и стеки. Существует три вида контейнеров: последовательные, ассоциативные и неупорядоченные ассоциативные контейнеры, каждый из которых предназначен для поддержки различных наборов операций.

Для решения поставленной задачи необходим последовательный контейнер, потому как происходит последовательное чтение данных из файла в текстовом формате. В нем параметры для большого числа точек сгруппированы с использованием специальной разметки. Описание каждой точки содержит и её координаты, и характеристики.

Для реализации была выбрана библиотека Vector [5].

Второй раздел «Модель поведения графена во внешнем электрическом поле» посвящен описанию моделирования процессов, происходящих в графене под действием электрического поля.

Для анализа и визуализации использовались результаты вычислительного моделирования поведения носителей электрического заряда в графене под действием внешнего электрического поля. Важной особенностью этого процесса является его существенно квантовая природа. Графен – одна из форм существования обычного углерода.

В этом материале свободные электроны, способные перемещаться под действием внешнего электрического поля, ведут себя как безмассовые частицы. В этом смысле они являются квазичастицами, т.е. не настоящими электронами, а результатом сложного квантовомеханического взаимодействия с окружающими их атомами углерода. Впервые эти свойства для графена были предсказаны в работе [3].

Для построения модели процессов, происходящих в графене под действием внешнего электрического поля, используется квантовая кинетическая теория [1]. Такой подход обеспечивает получение уравнения, описывающего процесс возникновения свободных носителей заряда и их эволюции, перехода множества частиц из одного состояния в другое. Простейший вид кинетическое уравнение (КУ) имеет в том случае, если электрическое поле постоянно по направлению. В этом случае КУ представимо в форме системы обыкно-

венных дифференциальных уравнений (ОДУ).

В данной работе не ставилось задачи решения системы ОДУ, поскольку для этого существуют проверенные программные комплексы, способные получить точное решение с минимальными затратами.

Целью работы является обработка уже полученных данных, включая их визуализацию и вычисление интегральных характеристик. Кроме того, необходимо было визуализировать интегральные характеристики и выбрать первичные данные по результатам визуализации интегральных характеристик.

Третий раздел «Визуализация и анализ» посвящен созданию программного продукта для обработки и анализа результатов моделирования.

В качестве предмета для визуализации и анализа были предоставлены данные вычислительного моделирования описанных во второй главе процессов. Данные представляют собой текстовый файл, в котором в определенном формате представлено множество точек, каждая из которых представлена пятью параметрами: 2 ассоциированные с пространством координаты p_1 и p_2 , значение которых лежит в интервале от 0.001 до 1, время в промежутке от -10000 до 10000 и 2 значения функции $f(p_1, p_2, t)$. При этом значения первой функции положительны по определению и лежат в интервале от 0 до 1, а значения второй функции – от -1 до 1. Вычисление значений функций производится на предыдущем этапе обработки и использует значения с плавающей точкой двойной точности, вплоть до 10^{-16} . Поэтому при написании программы использовались соответствующие типы данных с плавающей точкой.

В качестве языка для программной реализации был выбран C++.

Первым этапом написания программного кода было чтение входного файла, сформированного на предыдущем этапе обработки. Для этого использовалось посимвольное чтение входного файла, описывающего множество точек в заданном формате. Для хранения точек использовался одномерный вектор, хранящий в себе элемент структуры с 4 полями: две координаты p_1 и p_2 , время и значение первой функции.

Одним из этапов анализа множества точек является подсчет интегральных характеристик, в качестве которых будут использоваться плотность количества носителей и плотность тока. Для этого использовался простейший

алгоритм интегрирования: подсчет объема под графиком функции методом его деления на прямоугольные параллелепипеды. Среди полученных значений программа находит максимальное и выводит множество точек, описывающее сечение четырехмерной функции по времени, соответствующему максимуму интеграла.

Четвертый раздел «Представление результатов» посвящен демонстрации работы программы и визуализации результатов.

Разработанная программа использована для анализа результатов, полученных при моделировании процессов, происходящих в графене при воздействии очень коротких радиоимпульсов терагерцового диапазона [2].

Для заключительной проверки и анализа результатов было выбрано 3 входных файла, которые представляют собой результаты численных экспериментов, проводимых на одной модели и с одинаковыми параметрами. Однако для всех трех файлов бралась разная степень визуализации, то есть результирующее количество точек и их плотность. Поэтому для обработки этих файлов программе потребовалось 14 секунд, 41 минута и 8 часов соответственно.

Для каждого множества точек было построено сечение и график зависимости интеграла от времени.

Результаты показывают влияние детализации исходных данных на полноту представления временных сечений функции распределения. Но даже при не высоком разрешении они позволяют подтвердить правильность выбора области импульсного пространства, в которой выполнялось моделирование процесса.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения работы все поставленные задачи были выполнены. Было разработано приложение по чтению и обработке больших массивов данных, полученных в результате имитационного моделирования процессов, происходящих в графене под воздействием внешнего электрического поля. Результаты моделирования предоставляются в текстовом файле специального формата. В зависимости от детализации модели объём подлежащих обработке данных может достигать нескольких гигабайт. В практической части работы представлены результаты работы с данными для трех вариантов моделирования, воспроизводящих условия реального эксперимента. Для обработки предоставлялись данные для 61500, 1750112 и 12264612 точек, отражающих поведение системы в двумерном импульсном пространстве в течении некоторого интервала времени.

Для каждого входного файла была выполнена полная программа анализа и визуализации, проведено сопоставление получающихся результатов. Наиболее интересные из них представлены в работе.

Разработанная программа продемонстрировала соответствие реализованного функционала исходным требованиям.

Использувавшиеся инструменты и концепции подтвердили свою работоспособность, хотя при работе с большими объёмами данных время работы программы практически достигло разумных пределов и для увеличения эффективности работы с реалистическими моделями будет необходимо совершенствовать возможности программного решения.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Smolyansky S.A., Panferov A.D., Blaschke B.D., and Gevorgyan N.T. Nonperturbative Kinetic Description of Electron-Hole Excitations in Graphene in a Time Dependent Electric Field of Arbitrary Polarization // Particles 2019, 2, 208-230.
- 2 Bowlan P., Martinez-Moreno E., Reimann K., Elsaesser T., and Woerner M. Ultrafast terahertz response of multilayer graphene in the nonperturbative regime // Phys.Rev. B 89, 041408(R) (2014).
- 3 P.R. Wallace, Phys. Rev. 71, p. 622-634 (1947)
- 4 Программирование С и С++ [Электронный ресурс] // <https://prog-cpp.ru> – Динамическое выделение памяти в Си URL: <https://prog-cpp.ru/c-alloc/> (дата обращения: 11.05.2019) Загл. с экрана. Яз. рус.
- 5 CppReference [Электронный ресурс] // <https://ru.cppreference.com/w/> – std::vector URL: <https://ru.cppreference.com/w/cpp/container/vector> (дата обращения: 14.05.2019) Загл. с экрана. Яз. рус.