

II Международная конференция
Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов
19-20 октября, 2020

ПОСТРОЕНИЕ МОДЕЛИ ЭФФЕКТИВНОГО
КОЭФФИЦИЕНТА
ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ ДЛЯ НАНОРАЗМЕРНЫХ
ГЕТЕРОСТРУКТУР С
ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Абгарян К.К., **Колбин И.С.**

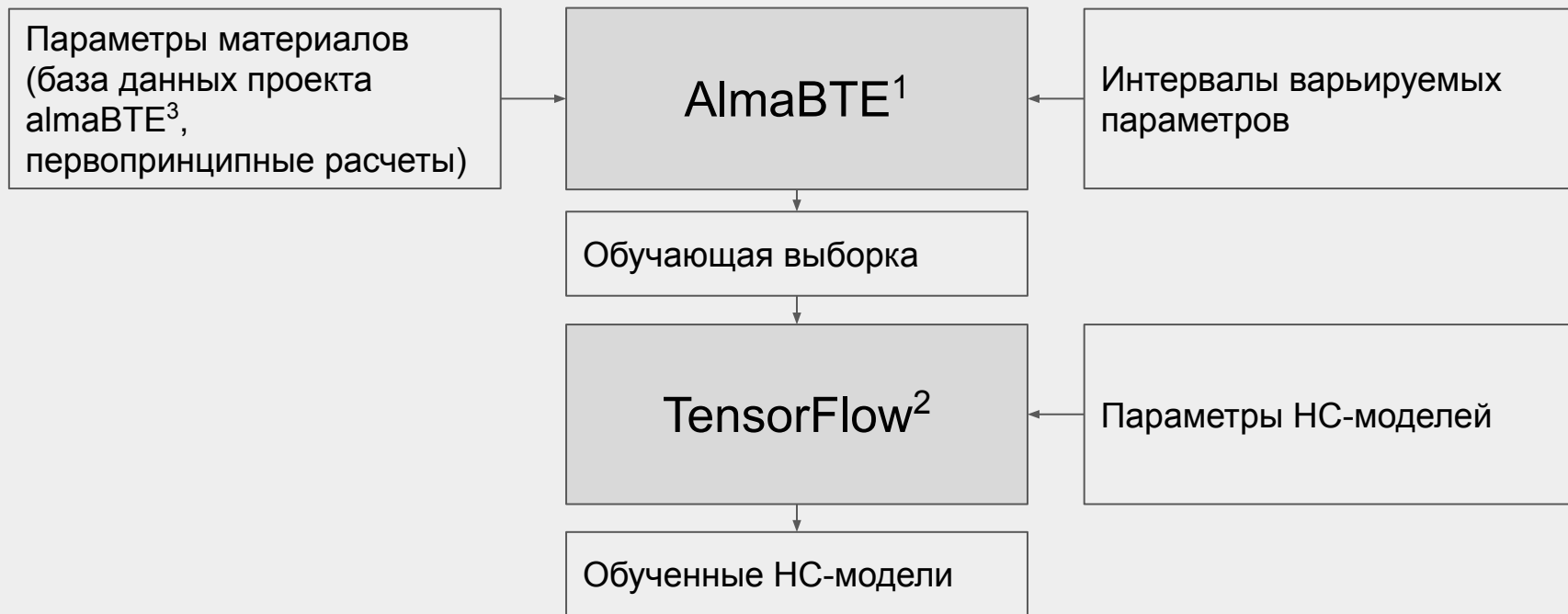
ФИЦ ИУ РАН

Постановка задачи

Исследование применимости подходов машинного обучения для построения моделей эффективного коэффициента теплопроводности наноразмерных гетероструктур, в частности сверхрешеток.

Для этого предполагается генерация выборки на основе модели модального подавления и обучения нейронных сетей на ней.

Схема расчета



1. Jesús Carrete et al. *almaBTE : A solver of the space–time dependent Boltzmann transport equation for phonons in structured materials.*
2. Martín Abadi et al. *TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Distributed Systems.*
3. <https://almabte.bitbucket.io/database/>

Кинетическое уравнение Больцмана

Основными переносчиками тепла в полупроводниках и диэлектриках являются фононы: квазичастицы, описывающие колебания кристаллической решетки. При наличии теплового градиента распределение фононов может быть описано кинетическим уравнением Больцмана:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{diffusion} + \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{scattering} = 0$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{diffusion} = -\nabla T \mathbf{v} \frac{\partial f}{\partial T}$$

Приближение времени релаксации

Кинетическое уравнение Больцмана является сложным интегро-дифференциальным уравнением. Для достаточно небольшого температурного градиента распределение фононов может быть выражено в приближении времени релаксации:

$$\frac{f - f_0}{\tau^0} = -\nabla T \mathbf{v} \frac{df_0}{dT}$$

$$f_0(\omega, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1}$$

Получение параметров релаксации

Эффективным способом получения коэффициентов релаксации является применение первопринципных расчетов, что позволяет минимизировать количество эмпирических данных для вычислений.

Получаемые данные из первопринципных расчетов:

- Координаты атомов
- Межатомные силовые константы 2-го порядка для моделирования 2-х фононных взаимодействий
- Межатомные силовые константы 3-го порядка для моделирования 3-х фононных взаимодействий
- Диэлектрический тензор и эффективные заряды Борна для неаналитического поправочного члена

Коэффициенты релаксации для сверхрешеток

Расчет ведется в приближении виртуального кристалла¹.

$$\frac{1}{\tau_{\lambda}^0} = \frac{1}{\tau_{\lambda}^{3ph+}} + \frac{1}{\tau_{\lambda}^{3ph-}} + \frac{1}{\tau_{\lambda}^a} + \frac{1}{\tau_{\lambda}^b} \quad \lambda \sim p, \mathbf{q}$$

τ^{3ph+} - процессы абсорбции, один фонон из двух падающих^{1,2};

τ^{3ph-} - процессы эмиссии, один падающий фонон разделяется на два^{1,2};

τ^a - сплавной член, зависит от послойного распределения компонентов³;

τ^b - барьерный член³.

1. Wu Li, L. Lindsay, D. A. Broido, Derek A. Stewart, and Natalio Mingo. *Thermal conductivity of bulk and nanowire Mg₂Si_xSn_{1-x} alloys from first principles.*
2. Wu Li, Jesús Carrete, 1, Nebil A. Katcho, Natalio Mingo. *ShengBTE: A solver of the Boltzmann transport equation for phonons.*
3. J. Carrete, B. Vermeersch, L. Thumfart, R. R. Kakodkar, G. Trevisi, P. Frigeri, L. Seravalli, J. P. Feser, A. Rastelli, N. Mingo. *Predictive design and experimental realization of InAs/GaAs superlattices with tailored thermal conductivity.*

Послойное распределение материалов

Для моделирования распределения материалов при росте сверхрешетки использовалась модель Мураки*:

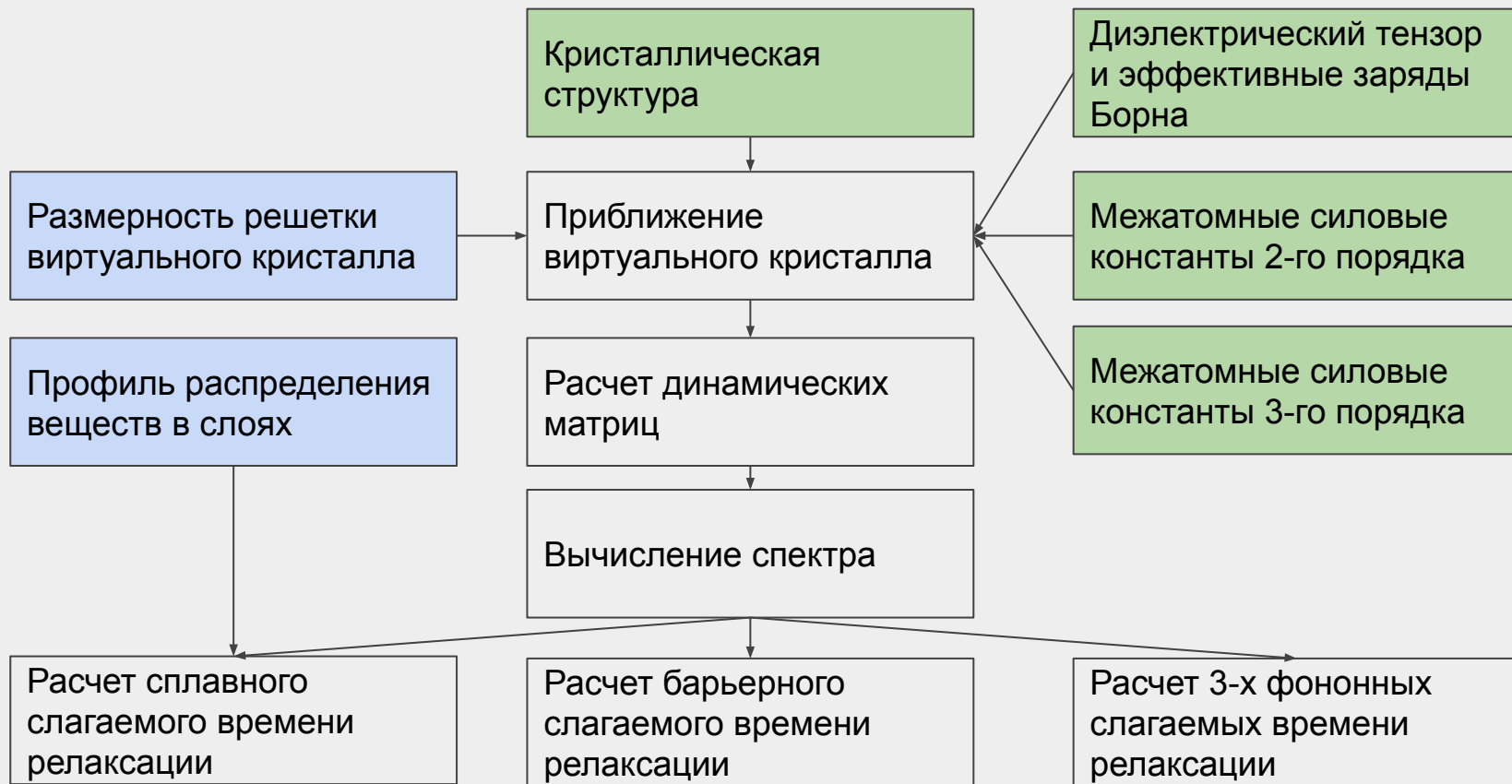
$$\bar{X}(i) = \begin{cases} 1, & \text{for } i < 1 \\ 1 - \phi(1 - R^i), & \text{for } 1 \leq i < n_{\text{ML}} \\ 1 - \phi(1 - R^{n_{\text{ML}}}) R^{i-n_{\text{ML}}}, & \text{for } i \geq n_{\text{ML}} \end{cases}$$

R - варьируемый параметр модели;

n_{ML} - число монослоев первого материала в периоде сверхрешетки.

* Muraki, K.; Fukatsu, S.; Shiraki, Y.; Ito, R. Surface Segregation of In Atoms During Molecular Beam Epitaxy and Its Influence on the Energy Levels in InGaAs/GaAs Quantum Wells.

Схема расчета параметров релаксации сверхрешетки



Вычисление эффективного коэффициента теплопроводности

Для расчета эффективного коэффициента теплопроводности использовалась модель модального подавления:

$$\kappa(L) = \sum_{\lambda} S_{\lambda} C_{\lambda} \|\mathbf{v}_k\| \Lambda_{\lambda} \cos^2(\theta_{\lambda})$$

$$S_{\lambda} = \frac{1}{1+2K_{\lambda}}^*$$

$$\Lambda_{\lambda} = \|\mathbf{v}_{\lambda}\| \tau_{\lambda}^0$$

$$K_{\lambda} = \frac{\Lambda_{\lambda} |\cos\theta_{\lambda}|}{L}$$

$$C_{\lambda} = \frac{k_B}{N\Omega} \left(\frac{\hbar\omega_{\lambda}}{k_B T} \right) f_0 (f_0 + 1)$$

$$f_0 = f_0(\omega_{\lambda}, T)$$

где θ - угол между \mathbf{v} и направлением теплопереноса

* B. Vermeersch, J. Carrete, N. Mingo. *Cross-plane heat conduction in thin films with ab-initio phonon dispersions and scattering rates*

Формирование обучающей выборки

Обучающая выборка сформирована из результатов расчетов эффективного коэффициента теплопроводности в AlmaVTE с варьированием параметров:

- R – параметр модели Мураки, отвечающий за послойное распределение материалов в периоде сверхрешетки, варьировался от 0 до 0.9;
- x – число монослоев первого материала (GaAs), варьировался от 1 до 20;
- y – число монослоев второго материала (AlAs), варьировался от 1 до 20;
- T – температура окружающей среды, варьировалась от 100K до 500K;
- L – толщина сверхрешетки, варьировалась от 1нм до 100мкм.

Нейросетевые модели

Использовались многослойные сети прямого распространения с различными активационными функциями:

- **relu**, линейный выпрямитель: $f(x) = 0$, для $x < 0$, и $f(x) = x$, для $x \geq 0$;
- **tanh**, гиперболический тангенс: $f(x) = \tanh(x)$;
- **sig**, логистическая функция: $f(x) = (1 + e^{-x})^{-1}$.

Обучение НС-моделей велось с контролем переобучения методом **RMSProp** с шагом **0.0001**. Использование обучающей выборки:

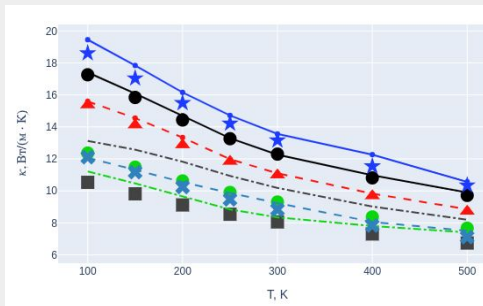
- **60%** непосредственно для обучения;
- **20%** для контроля переобучения;
- **20%** для верификации полученных НС-моделей (тестовая выборка).

Результаты. СКО НС моделей на тестовой выборке

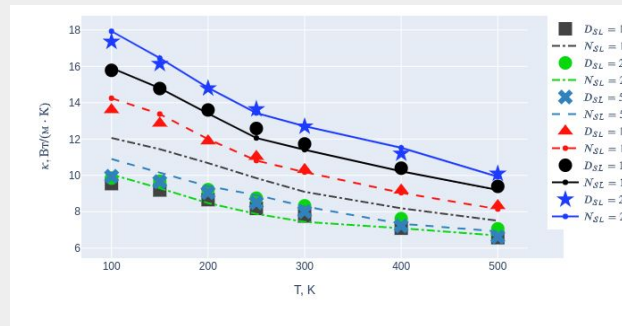
		n_n	6	8	10	12	14	16	18	20
n_l	f									
2	<i>relu</i>		2.673	1.335	1.473	0.808	0.681	0.679	0.691	0.551
	<i>tanh</i>		2.067	1.564	1.428	1.293	1.326	1.565	1.174	1.022
	<i>sig</i>		2.049	1.922	1.784	1.677	2.014	1.245	1.598	1.625
3	<i>relu</i>		1.32	1.087	1.385	1.131	0.938	0.544	0.711	0.716
	<i>tanh</i>		2.057	1.833	1.649	1.131	1.413	1.308	1.305	1.222
	<i>sig</i>		4.899	1.862	1.611	1.969	1.375	1.521	1.694	1.29
4	<i>relu</i>		1.411	0.809	1.004	0.896	1.191	0.646	0.693	0.952
	<i>tanh</i>		2.552	1.589	1.614	1.643	1.591	1.329	1.704	1.936
	<i>sig</i>		4.737	4.891	1.968	4.997	4.981	4.915	4.962	1.639
5	<i>relu</i>		2.296	1.207	1.444	1.63	0.764	0.949	1.28	1.401
	<i>tanh</i>		2.11	1.918	1.895	2.625	2.579	2.354	2.555	1.96
	<i>sig</i>		4.86	5.01	4.907	11.74	11.897	2.314	1.639	11.609

График 3-х слойной НС с ReLU и тестовой выборки

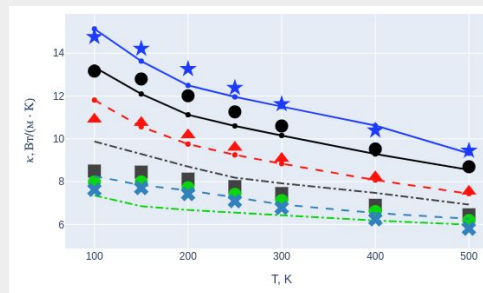
R=0



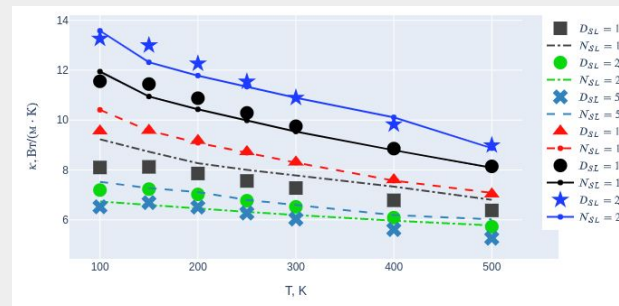
R=0.01



R=0.05



R=0.1



Спасибо за внимание

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 19-29-03051 мк и 18-29-03100 мк).

При проведении расчетов использовался вычислительный кластер ФИЦ ИУ РАН.