

Prof. dr hab. inż. Waldemar Rachowicz
Politechnika Krakowska im. Tadeusza Kościuszki
w Krakowie
Instytut Informatyki

Kraków, 14 lipca 2017

RECENZJA

pracy doktorskiej mgr Konrada Sakowskiego p.t.

„Determination of the properties of the nitride laser diodes and light-emitting diodes by simulation based on the drift-diffusion model with the Discontinuous Galerkin Method”

(„Wyznaczanie własności azotkowych diod laserowych oraz diod elektroluminescencyjnych przez symulacje oparte o model dryfowo-dyfuzyjny przy wykorzystaniu Nieciągłej Metody Galerkin”)

Podstawą formalną opracowania recenzji jest pismo Pana prof. dr hab. Pawła Strzeleckiego, Dziekana Wydziału Matematyki, Informatyki i Mechaniki Uniwersytetu Warszawskiego z dnia 28 kwietnia 2017 o wyznaczeniu mnie na recenzenta pracy doktorskiej mgr Konrada Sakowskiego zatytułowanej jak wyżej.

Recenzowana rozprawa podejmuje problem numerycznej symulacji zjawisk fizycznych zachodzących w złożonych strukturach półprzewodnikowych składających się na diody elektroluminescencyjne (LED) i diody laserowe (LD) modelowanych za pomocą równań różniczkowych cząstkowych znanych jako równania van Roosbroecka. Stanowią one układ trzech stacjonarnych równań różniczkowych drugiego rzędu typu eliptycznego charakteryzujących się silną nieliniowością. Zagadnienie różniczkowe opisuje tzw. model dryfowo-dyfuzyjny półprzewodników, który otrzymuje się przez odpowiednie statystyczne uśrednianie mikroskopowego zachowania się nośników ładunku – elektronów i dziur i innych zjawisk mikroskopowych. Poszukiwane zmienne to rozkład potencjału elektrycznego oraz wartości quasi-poziomów Fermiego dziur i elektronów lub koncentracje tych cząstek (z możliwością jeszcze i innych opcji). Pierwsze z równań van Roosbroecka, określane też jako równanie Poissona, ma liniowy wyraz wiodący z dywergencją zaś nieliniowy wyraz obciążenia. Pozostałe dwa równania, określane jako równania ciągłości, mają także nieliniowy wyraz dywergencji. Warunki brzegowe stosowane w postawieniu problemu są dwojakiego rodzaju. Pierwszy to jednorodny warunek brzegowy typu Neumanna dla wszystkich zmiennych zakładany na granicy urządzenia półprzewodnikowego z otaczającym powietrzem (lub innym izolatorem). Drugi to warunek typu Dirichleta na wartość potencjału na metalowych elek-

trodach przyłożonych do części brzegu urządzenia. W sytuacji neutralnej, gdy nie ma różnicy potencjałów między elektrodami, mamy do czynienia z rozwiązaniem równowagowym odpowiadającym naturalnemu rozkładowi nośników ładunku i brakowi prądów. Wówczas rozwiązanie problemu ogranicza się do równania Poissona rozsprężonego od pozostałych. W sytuacji przeciwnej, gdy przyłożono różnicę potencjałów, należy rozwiązać pełny układ z wynikiem wskazującym przepływ prądu, możliwą emisję światła i ciepła.

Jako metodę dyskretyzacji równań van Roosbroecka zaproponowano wersję metody elementów skończonych (MES) określaną jako złożona Nieciągła Metoda Galekina. MES jest najpopularniejszą metodą znajdowania przybliżonych rozwiązań równań różniczkowych cząstkowych. Poszukiwane rozwiązanie aproksymuje się w niej za pomocą wielomianów na niewielkich podobszarach całego obszaru problemu zwanych elementami skończonymi. Rozwiązanie otrzymuje się zakładając, że tak zdefiniowana aproksymacja zależna od skończonej liczby współczynników wielomianów powinna spełniać sformułowanie wariacyjne problemu. Najbardziej podstawowa wersja MES zakłada, że rozwiązanie wyrażone wielomianami jest kawałkami ciągłe, natomiast Nieciągła Metoda Galerkina relaksuje to wymaganie dopuszczając nieciągłość. Argumentem za nieciągłym podejściem jest duża swoboda w kształtowaniu siatek elementowych w odniesieniu do ich zagęszczenia lub stopnia aproksymacji w sąsiednich regionach obszaru obliczeniowego, gdyż elementy sąsiednie nie muszą przylegać wg schematu jeden do jednego wzdłuż wspólnego boku (ani mieć wspólnego stopnia aproksymacji), lecz proporcja rozmiarów elementów sąsiednich może być dowolna. Ta elastyczność doboru gęstości aproksymacji jest bardzo użyteczna w modelowaniu półprzewodników ze względu na zmienną regularność rozwiązania w poszczególnych składnikach struktury.

Najważniejsze osiągnięcia rozprawy.

Praca ma charakter multidyscyplinarny, jednak najistotniejszą jej część stanowi opracowanie i analiza matematyczna metody przybliżonego rozwiązywania równań van Roosbroecka. Jak już wspomniałem, metodą tą jest wersja MES określaną jako Nieciągła Metoda Galerkina, znana pod skrótem DG od jej angielskiego określenia *Discontinuous Galerkin*. Ze względu na to, że w podejściu tym zarówno rozwiązania przybliżone jak i odpowiadające im strumienie nie są ciągłe między elementami, metoda DG wykorzystuje uogólnione sformułowania wariacyjne, które wymuszają zarówno ciągłość jak i warunki brzegowe typu Dirichleta w sposób słaby. Sformułowania te otrzymuje się z wersji podstawowej dla ciągłej MES poprzez dodanie odpowiednich wyrazów funkcji kary. Ich postać nie jest jednoznaczna, co pozwala na konstrukcję kilku wersji metody DG.

Doktorant opracował dwa znane algorytmy DG określane angielskimi skrótami SIPG (*Symmetric Interior Penalty Galerkin method*), tj. Nieciągła Metoda Galerkina z symetrycznymi wyrazami kary oraz WOPSIP (*Weakly Over-Penalized Symmetric Interior Penalty method*), tj. Nieciągła Metoda Galerkina z podwyższonymi wyrazami kary, w variancie

z dodatkowym przymiotnikiem „złożone”. Wersja złożona metody DG polega na tym, że nieciągłość rozwiązania i związane z nią wyrazy kary stosuje się nie między wszystkimi elementami siatki lecz tylko na granicach większych podobszarów siatki zgrubnej, z których każdy jest wypełniony faktycznymi drobnymi elementami skończonymi z ciągłą aproksymacją między nimi. Daje to możliwość istotnych oszczędności w liczbie stopni swobody określającej rozmiar dyskretyzacji zmniejszając czas obliczeń i potrzebną pamięć komputera, przy zachowaniu swobody gęstości siatek w podobszarach.

Kandydat opracował algorytmy SIPG i WOPSIP w wersji złożonej dla przypadku jedno- i dwuwymiarowego (1D i 2D) z aproksymacją liniową, będąc dla metody WOPSIP prekursorem takiej wersji. Dla obydwu algorytmów przedstawił pełną analizę teoretyczną ograniczoną do pierwszego z równań van Roosbroecka, tj. równania Poissona. Uwzględnił w niej weryfikację dobrego postawienia zagadnienia dyskretnego, tj. istnienie i jednoznaczność rozwiązań oraz analizę zbieżności obydwu podejść na siatkach quasi-równomiernych. W tym drugim zadaniu musiał opracować oszacowania błędu interpolacji mierzonego w nietypowych tzw. normach łamanych przestrzeni Sobolewa dla funkcji z nieciągłą aproksymacją a także znaleźć związek między błędem interpolacji i błędem aproksymacji rozwiązania.

Wśród mniej wymagających zadań teoretycznych, które jednak miały bardzo istotne znaczenie dla powodzenia projektu, należy wymienić jeszcze trzy inne:

i) Algorytm Newtona-Raphsona do iteracyjnego rozwiązywania układu równań nieliniowych odpowiadających zdyskretyzowanemu problemowi, z odpowiednią kontrolą kroku obciążenia gwarantującą zbieżność iteracji. Algorytm rozwiązania zadania silnie nieliniowego, który niezawodnie zbiega się, jest nie do przecenienia w analizie tej klasy zadań.

ii) Metoda post-processingu do obliczania gęstości prądu w urządzeniu półprzewodnikowym oparta na wykorzystaniu zasady zachowania ładunku. Bez tego algorytmu bezpośrednio obliczane natężenie prądu jest bardzo niedokładne lub przyjmuje wręcz niefizyczne wartości.

iii) Modyfikacja algorytmu DG pozwalająca na wymuszanie zadanych niezerowych nieciągłości rozwiązania i jego strumieni między danymi podobszarami. Modyfikacja ta posłużyła do możliwości uwzględniania polaryzacji elektrycznej w modelu.

Obydwie złożone wersje metody DG dla jednego i dwu wymiarów zostały zaimplementowane w postaci programów komputerowych. Ich część logiczna została napisana w języku skryptowym znanych programów analizy numerycznej OCTAVE/MATLAB, zaś część numeryczna w językach C i C++. Zapewnia to łatwość modyfikacji z jednoczesną efektywnością numeryczną.

Osobną częścią dysertacji są eksperymenty numeryczne. Pierwsza ich część dotyczy symulacji wielowarstwowych struktur półprzewodnikowych za pomocą 1D algorytmu DG. W części tych testów dokonano weryfikacji programu poprzez porównanie jego wyników

z rezultatami otrzymanymi za pomocą dwu innych alternatywnych programów dostępnych na rynku, a także przez porównanie symulacji numerycznych z wynikiem eksperymentalnym. Obydwa sprawdzenia dały wynik pozytywny. Program 1D wykorzystano też do analizy szeregu faktycznych struktur półprzewodnikowych badając złącze p-n z różnym kierunkiem i wartością napięcia oraz z uwzględnieniem dodatkowych zjawisk jak obecność studni kwantowej, rekombinacji Shockleya-Reada-Halla czy tunelowania na poziom pałpkowy.

Symulowano też diody LED i LD. Tu badania dotyczyły takich zjawisk jak obecność ładunków polaryzacyjnych, wpływ zawartości glinu w warstwie blokującej elektrony na wydajność urządzenia, wpływ zawartości magnezu w warstwie typu p czy liczby studni kwantowych na działanie diody, zjawisko pobudzenia optycznego nośników itp.

W końcu zarówno program 1D jak i 2D przetestowano pod względem zbieżności. Z powodu nieosiągalności rozwiązań ścisłych porównywano serie rozwiązań na coraz drobniejszych siatkach z rozwiązaniem na siatce bardzo drobnej. Testy te pozytywnie zweryfikowały przewidywania teoretyczne.

Podsumowanie i ocena osiągnięć.

Analizy matematyczne rozpatrywanych w pracy problemów zostały przedstawione przez Kandydata bardzo szczegółowo, z wymaganą precyzją i elegancją a nawet z pewnym pietyzmem. Nie można mieć do nich zarzutów a wypada cieszyć się z uniknięcia przez Autora stwierdzeń w rodzaju „można pokazać”. Stanowią one wartościowy i oryginalny wkład w dziedzinę analizy numerycznej łącząc w sobie problemy analizy funkcjonalnej i procedur aproksymacji nieliniowych zagadnień równań różniczkowych cząstkowych. Należy podkreślić dużą trudność podjętej problematyki wynikającą z silnej nieliniowości i ogromnego zakresu zmienności parametrów rozwiązań.

Opracowane teoretycznie algorytmy zostały zaimplementowane, przetestowane przez porównanie wyników z innymi wiarygodnymi symulacjami oraz wynikami eksperymentalnymi a także pod względem zbieżności. Programy zostały też zastosowane do praktycznych symulacji reprezentatywnej klasy problemów.

Tematyka pracy jest multidyscyplinarna, prócz głównej części matematycznej obejmuje metody numeryczne i fizykę półprzewodników. Już w obecnej wersji opracowane techniki mają praktyczne zastosowanie i można sobie wyobrazić jego poszerzenia np. do układów scalonych.

Uwagi krytyczne.

W pracy zauważyłem kilka mankamentów, które przytaczam poniżej:

W rysie historycznym metody DG należałoby wspomnieć dodatkowo inicjatora metod nieciągłych w latach '60 T.H.H. Piana ze współpracownikami, a także wkład M. Wheeler

(obok wymienionego D. Arnolda), L.M. Delvesa i C.A. Halla, twórców GEM (*Global Element Method*) oraz J.T. Odena, I. Babuškę i C.E. Baumanna, którzy zaproponowali metodę DG bez funkcji kary skalowalnej dodatkowymi parametrami i z aproksymacją *hp*.

Zastosowanie metody DG zamiast tradycyjnej ciągłej MES jest uzasadnione chęcią stosowania siatek o bardzo różnej gęstości w sąsiednich podobszarach. W tym kontekście pewnym niedociągnięciem bibliograficznym jest pominięcie całego „przemysłu” tzw. adaptacyjnej MES, która pozwala także wprowadzać gwałtownie zmieniające się siatki na podstawie oszacowań *a posteriori* błędu, tj. dokonywanych po rozwiązaniu na aktualnej siatce. Promotorami tych technik byli szczególnie I. Babuška, J.T. Oden i O.C. Zienkiewicz, nieżyjący już polskiego pochodzenia współtwórca MES. Pierwszy z wymienionych został wprowadzić wspomniany we wstępie lecz bez nawiązania do adaptacji.

Autor pominął w swej prezentacji sposób wprowadzenia aproksymacji DG w dwu równaniach ciągłości (z nieliniowymi wyrazami dywergencji), przez co można domniemywać, że zostało to zrobione jak dla równania Poissona. Aproksymację typu DG dla zadań eliptycznych z nieliniowym wyrazem dywergencji zaprojektowano w pracy Gaudi, T., Nataraj, N., Pani, A.K. „*hp*-Discontinuous Galerkin methods for strongly nonlinear elliptic boundary value problems”, *Numerische Mathematik*, 109 (2008) 233-268. Autorzy stosują w niej dodatkowe wyrazy funkcji kary wyrażone przez pochodne nieliniowych współczynników równania. Dodatkowo uwzględniona jest możliwość aproksymacji *hp*, czyli z nierównomiernym rozmiarem elementów i ich stopni aproksymacji. Dla tego sformułowania zaprojektowano też oszacowanie błędu *a posteriori* w artykule Bi, Ch., Wang, Ch., Lin, Y. „*A posteriori* error estimates of *hp*-discontinuous Galerkin method for strongly nonlinear elliptic problems”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 297 (2015) 140-166, co umożliwia adaptacyjną wersję metody. Myślę, że prace te powinny być wymienione w bibliografii.

W części eksperymentów numerycznych dotyczącej zbieżności wyniki są przedstawione za pomocą tabel. Utartym i bardziej intuicyjnym sposobem są tzw. wykresy zbieżności, w których na osi poziomej odkłada się liczbę stopni swobody (lub rozmiar siatki quasi-równomiernej) a na pionowej błąd, obie wielkości w skali logarytmicznej. Przy najczęstszej zbieżności algebraicznej wykresy te zbliżają się do linii prostych, których kąt nachylenia odzwierciedla stopień zbieżności.

W licznych przykładach z rozdziału 2. brak jest informacji dotyczącej stosowanej siatki oraz wskazania wzorów użytych sformułowań. Ciekawa byłaby też informacja o czasach obliczeń w symulacjach.

W dwuwymiarowych testach zbieżności nie da się zaobserwować jej spowolnienia wywołanego spodziewaną utratą regularności przy skokowo zmiennym typie warunku brzegowego lub skokowo zmiennych stałych materiałowych w obszarze z narożem. Wskazana byłaby dyskusja tego nieoczekiwanego zachowania.

Podsumowanie.

Wspomniane powyżej niedociągnięcia pracy mogą w dużej mierze być usunięte w ostatecznej redakcji rozprawy. Niektóre inne ze względu na dużą pracowitość mogą być widziane jako tematy przyszłej działalności badawczej Kandydata.

Moje uwagi krytyczne nie powinny zamazywać ogólnego obrazu pracy, która podejmuje problemy bardzo trudne i znajduje dla nich satysfakcjonujące i oryginalne rozwiązania. Rozprawa zawiera obszerną analizę teoretyczną metody DG, która wymagała od Kandydata szerokiej i dogłębnej znajomości metodologii analizy funkcjonalnej i metod numerycznych. Dodatkowym walorem rozprawy jest interdyscyplinarność, łączenie dziedzin matematyki, fizyki, analizy numerycznej i informatyki. Dlatego uważam, że wypełnia ona ustawowe warunki pracy doktorskiej i wnioskuję o dopuszczenie Pana mgr Konrada Sakowskiego do jej publicznej obrony.

Waldemar Rachwił