

Relatório Pré-Final de Iniciação Científica II - F690

Aplicação do método global de otimização estrutural – exame de partículas – em difração de fotoelétrons

Aluno: Wellington Dias Pereira - RA:188621

Orientador: Prof. Abner de Siervo

Co-Orientador: Dr. Luis Henrique de Lima

Departamento de Física Aplicada, Instituto de Física “Gleb Wataghin” - UNICAMP

”Meu orientador concorda com o expressado neste relatório pré-final: Está muito bom”

Resumo

Difração de fotoelétrons (PED) é uma técnica elemento e química específica utilizada na determinação estrutural de superfícies. Devido à complexidade do fenômeno de espalhamento de elétrons de baixa energia, não é possível obter a estrutura por métodos de inversão holográfica dos dados experimentais. Para determinarmos a estrutura utiliza-se um método de comparação entre os dados experimentais e os simulados a partir de uma estrutura proposta em um processo de tentativa e erro. Neste trabalho propomos desenvolver um algoritmo global de otimização estrutural baseado no método conhecido como exame de partículas, que será aplicado em experimentos de difração de fotoelétrons.

1 Introdução

As propriedades físico-químicas de um material são determinadas globalmente pela sua estrutura eletrônica e atômica. A estrutura atômica resume-se a posição espacial ocupada pelos diferentes átomos, por exemplo, em um sólido. Por outro lado, a estrutura eletrônica é mais complexa e depende da própria estrutura atômica, composição elementar, densidade eletrônica de estados, tipo de ligações químicas formadas na estrutura, ordem de curto e longo alcance, etc.

Conhecer a estrutura atômica é fundamental para melhor compreender e desenvolver materiais com as propriedades adequadas para uma determinada aplicação. A difração de raios X é, sem sombra de dúvidas, uma das técnicas mais bem sucedidas para determinar a estrutura atômica do volume dos materiais. Igualmente importante é conhecer a identidade química, tipo de ligações formadas e as posições dos átomos nas primeiras camadas da superfície dos materiais. Um aspecto particularmente interessante de PED é o fato de envolver a emissão de elétrons, de níveis internos dos átomos, que são localizados energeticamente na parte interna do potencial atômico, e por isto mesmo apresentam especificidade elementar. Além disto, como a energia de níveis internos pode ser altamente influenciada pelas ligações químicas formadas por elétrons de valência, esta técnica apresenta a característica única de seletividade química, podendo ser utilizada para distinguir a estrutura de ambientes químicos diferentes para um mesmo elemento.

Um experimento básico de PED envolve a emissão de fotoelétrons que se propagam desde o átomo emissor, atravessando o sólido até serem detectados em um analisador de elétrons,

os fotoelétrons correspondem às ondas eletrônicas monocromáticas que se propagam a partir do centro de um potencial localizado. Estes elétrons podem ser considerados como ondas que ao propagarem até o detector contêm um termo direto que não sofreu espalhamento e várias outras ondas que sofreram espalhamentos (simples ou múltiplos) pelo potencial eletrônico dos átomos vizinhos. Tais ondas interferem de forma construtiva ou destrutiva produzindo um padrão de difração. A informação referente ao arranjo local dos centros espalhadores em torno do átomo emissor está contida na energia e na distribuição angular dos elétrons espalhados.

A física do espalhamento de elétrons de baixa energia envolve espalhamentos múltiplos, e outras complicações que dificultam obter uma inversão holográfica do padrão de difração para determinar precisamente a posição dos centros espalhadores. Desta forma, a dificuldade nesta técnica está em determinar a estrutura que gerou o padrão de espalhamento. A maneira encontrada é a simulação do padrão de difração utilizando códigos para calcular o espalhamento múltiplo de elétrons. Este cálculo complexo, computacionalmente demandante em tempo, capacidade de processamento e memória é feito a partir de uma estrutura previamente proposta; ou seja, propõe-se uma estrutura para a superfície em estudo, calcula-se o padrão teórico e se compara com o padrão experimental.

Dessa forma, se faz necessário a utilização de códigos de otimização na busca dos parâmetros estruturais, com o intuito de diminuir o trabalho e o tempo computacional. Existe na literatura vários métodos de busca, entre eles podemos citar o simulated annealing (SA)[1] e fast simulated annealing (FSA)[2], algoritmo genético (GA)[3][4], e enxame de partículas (PSO – particle swarm optimisation)[5][6].

2 Metodologia e Resultados

2.1 Otimização por enxame de partículas

O método PSO é inspirado em padrões comportamentais empregado por grupos de animais e insetos como as manadas, cardumes, e enxames. Os indivíduos do grupo compartilham informações para guiar a coletividade na direção da melhor “área”, por exemplo, no caso das abelhas, na região com mais flores. Existem muitas variações do PSO, mas sem dúvidas as mais difundidas são as de topologia local e global. O projeto aqui proposto se deteve no início na implementação destes dois métodos já amplamente difundidos na literatura, no entanto após a realização de alguns testes e verificando toda a literatura disponível, o mesmo se deteve na implementação e desenvolvimento do método de topologia híbrida[8].

O método de topologia híbrida apresenta algumas características impostantes, mas a parte mais importante de todo o processo esta na atualização da velocidade e da posição de cada partícula que se dá pelas seguintes equações:

$$v_{ij} = c_1 \cdot r_{1j} \cdot v_{ij} + c_2 \cdot r_{2j} \cdot (pbest_{ij} - x_{ij}) + c_3 \cdot r_{3j} \cdot (pgbest_{ij} - x_{ij}) + c_4 \cdot r_{4j} \cdot (plbest_{ij} - x_{ij}) \quad (1)$$

$$x_{ij} = x_{ij} + v_{ij} \quad (2)$$

Em que r_{1j}, r_{2j}, r_{3j} e r_{4j} são coeficientes gerados aleatoriamente a cada nova iteração e estão entre 0 e 1, $pbest$ é a melhor posição encontrada pela partícula até o momento, $pgbest$ é a melhor posição encontrada pelo grupo e $plbest$ é melhor posição encontrada pelas partículas vizinhas com a qual a partícula já se comunicou.

Além disso, se notou que o método de topologia híbrida poderia sofrer algumas alterações que aumentavam a convergência do mesmo, a principal mudança se deu na forma como os coeficientes topológicos se alternavam, pois da forma proposta na literatura a mudança era instantânea, saindo de um método para outro sempre que o valor encontrado era menor que o valor estipulado pelo usuário, a nova abordagem propõe uma mudança gradual dos coeficientes, seguindo a seguinte formula:

$$c_4 = \frac{-c_{4max}}{min} \cdot (gbest - min) \quad (3)$$

$$c_3 = \frac{c_{3max}}{min} \cdot gbest \quad (4)$$

Onde c_3 corresponde a constante responsável pela topologia local, c_4 corresponde a topologia global, $gbest$ é o melhor valor do fator R encontrado até o momento e min é um valor escolhido pelo usuário que determina quando as equações (1) e (2) começam a ser utilizadas. Dessa forma, os resultados obtidos foram significativamente superiores nos casos estudados.

Foi realizado um comparativo entre os métodos de enxame de partículas implementados até o momento, sendo eles de topologia local, global e híbrida. Foi escolhida para a análise da convergência a função Rastrigin(Figura 1 [9]), pois é uma função amplamente utilizada na área de otimização computacional por ser de difícil otimização. Para mecanismo de comparação foi armazenado o melhor valor encontrada por todo o grupo a cada iteração que se era necessário fazer da função, e obtido o seguinte gráfico:

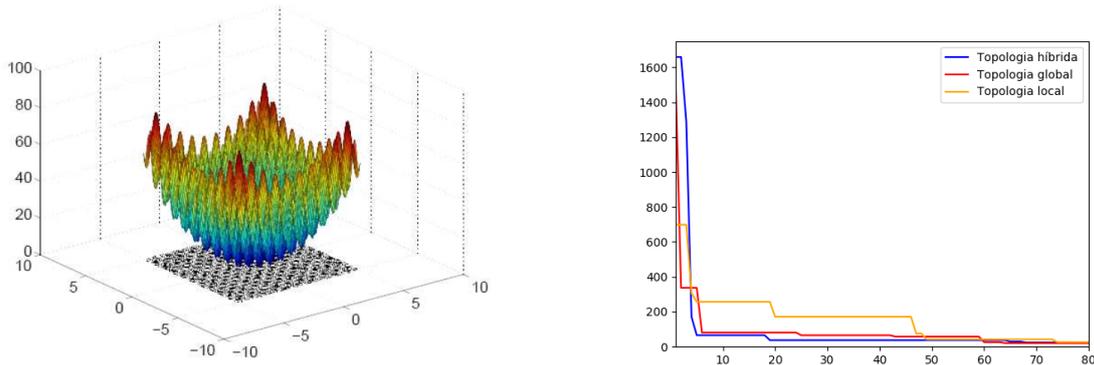


Figura 1: A função Rastrigin a esquerda e o comparativo de convergência a esquerda.

Deste modo, é possível notar no comparativo o tempo maior gasto na topologia local em relação aos dois outros métodos. Ressaltasse neste ponto que o caso mostrado acima se refere apenas ao caso em que todos os métodos convergiram satisfatoriamente a solução desejada, que era um valor menor a 10^{-6} , no entanto a convergência não ocorre sempre desta forma, mas sim apresenta sempre resultados diferentes.

Portanto, como mecanismo comparativo ambos os métodos foram executados 1000 vezes, para essa mesma função e mesmos parâmetros para ambos, e foi tomada a média de alguns valores que são importantes no estudo da convergência, os dados obtidos estão na tabela que segue:

	% de sucesso	Nº de Iterações	Valor médio
Topologia global	0.642	2083	0.371
Topologia local	0.776	2506	0.031
Topologia híbrida	0.907	4044	0.034

Tabela 1: Comparativo entre os métodos de topologia.

O resultado referente ao número de iterações feitas pelo método de topologia híbrida(em vermelho) é um dado falso, pois o código havia sido limitado a fazer 3030 iterações, dessa forma essa média não condiz com o que foi realizado, a falha ainda precisa ser identificada e corrigida. O restante dos dados são bem significativos, e mostram a ótima taxa de sucesso do método de topologia híbrida em relação as duas outras formas de topologia. Foi considerado novamente como sendo uma busca de sucesso apenas quando o método encontrada valores menores que 10^{-6} .

Além destes métodos foi implementado recentemente um novo método baseado na topologia híbrida para interfacear melhor com o MSCD, mas que atualiza as posições e velocidades de forma diferente, os resultados obtidos são bem positivos, no entanto ainda não foram obtidos dados suficientes para uma análise mais completa do método.

2.2 Interface do MSCD

Como já mencionado o projeto aqui proposto se dedica no desenvolvimento da otimização por enxame de partículas para aplicação na busca estrutural de superfícies, dessa forma é parte essencial do processo adaptar o método de otimização para utilização junto ao MSCD[10], dessa forma foi parte também do projeto o desenvolvimento de uma interface para integralização dos dois métodos, que estão implementados em linguagens computacionais diferentes.

Nas primeiras etapas do projeto o código aqui desenvolvido usava o terminal(SHELL) para dar início ao MSCD e utilizava o mesmo para paralelizar o processo em todos os processadores disponíveis no servidor, seguindo sempre o mesmo processo sempre que uma nova estrutura iria ser calculada. Mas tomando como base o que se percebeu ao executar o código do MSCD foi desenvolvido uma nova técnica que permitia fazer a paralelização do código, de forma que não fosse mais usada a paralelização do MSCD e fosse possível executar mais de um cálculo ao mesmo tempo.

Essa modificação se deu necessária, pois se notou que o código perdia tempo enviando os dados de cálculo para os processadores sempre que uma nova estrutura seria analisada pelo MSCD, e lembrando que em média isso ocorre 1000 vezes em cada busca. Portanto fazendo a paralelização já no código base esse tempo continuaria a ser perdido, no entanto ele é perdido apenas uma vez a cada leva de cálculos. Por exemplo, o usuário define que possui 10 processadores, dessa forma todos os processadores irão perder esse tempo ao mesmo tempo, pois irão calcular estruturas diferentes, na forma implementada anteriormente esse tempo seria gasto com uma frequência muito superior.

Além disso, nos testes realizados notou-se que ao determinar a estrutura do MoTe2 obtínhamos mínimos estruturais diferentes quando se usava o Telúrio como átomo emissor invés do Molibdênio como átomo emissor, isso provavelmente ocorre pois a estrutura que minimizava o Molibdênio não satisfazia completamente as melhores condições do Telúrio. Desse modo, foi implementado no código a possibilidade de analisar e buscar a estrutura do MoTe2 usando os dois átomos emissores em dois cálculos diferentes e tomando o fator R(que compara a estrutura teórica da estrutura real) dos dois cálculos. Os resultados obtidos foram bem superiores e serão mostrados na seção a seguir.

2.3 Estruturas analisadas

Após as alterações implementadas e já mencionadas a cima, o código foi testado novamente para a estrutura do MoTe₂, e foi obtido os seguintes padrões:

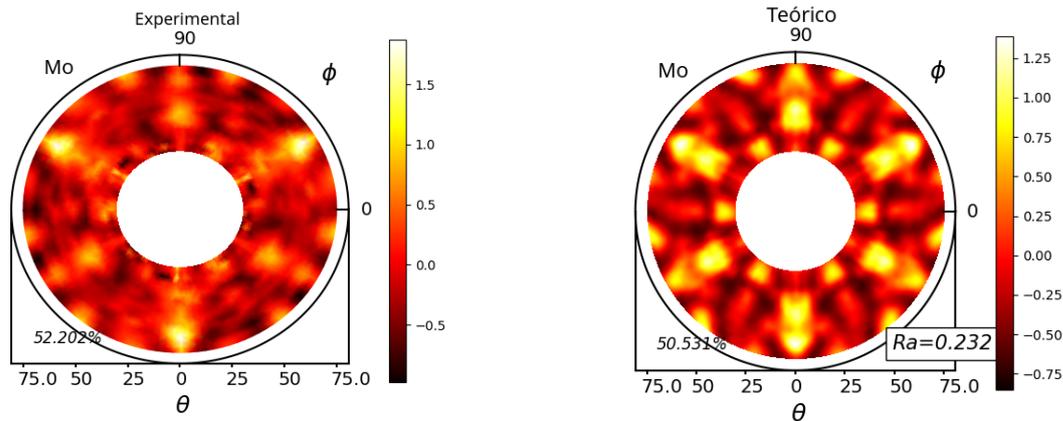


Figura 2 : Padrões obtidos de MoTe₂ com Molibdênio sendo átomo emissor.

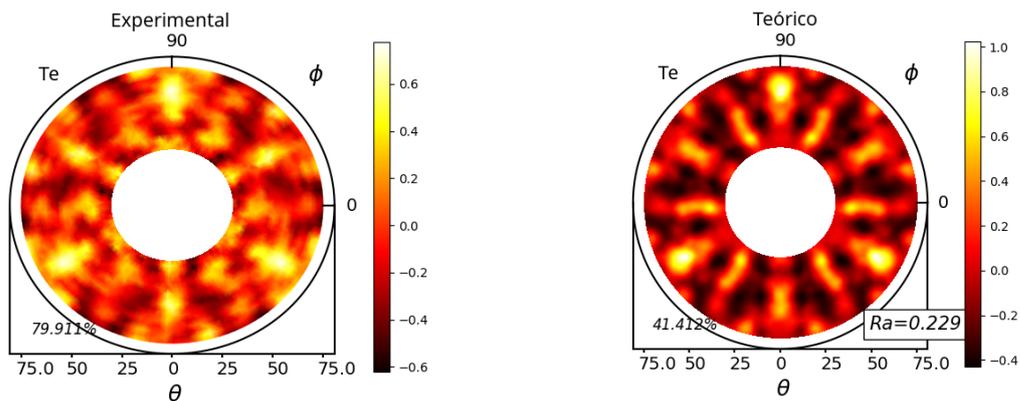


Figura 3 : Padrões obtidos de MoTe₂ com Telúrio sendo átomo emissor.

A concordância entre os padrões e os fatores R obtidos mostra que as alterações no projeto foram bem sucedidas e aumentaram a qualidade do mesmo.

3 Conclusão

O método de busca por enxame de partículas apresenta bons resultados, de forma que é capaz de determinar os parâmetros estruturais que melhor se aproximam dos valores do material em um curto período de tempo, sendo, portanto, uma boa alternativa de busca estrutural. Mas servindo também para minimização de problemas mais gerais, não apenas para o caso estudado neste projeto.

Além disso, a técnica híbrida de exame de partículas apresentou resultados superiores ao métodos tradicionais de PSO, pois foi capaz de apresentar uma taxa de sucesso superior ao mesmo tempo que é capaz de convergir de forma mais rápida e satisfatória.

Referências

- [1] V.B. Nascimento, V.E. de Carvalho, C.M.C. de Castilho, E.A. Soares, C. Bittencourt, D.P. Woodruff, Surf. Rev. Lett. 6 (1991) 651.
- [2] V.B. Nascimento, V.E. de Carvalho, C.M.C. de Castilho, B.V. Costa, E.A. Soares, Surf. Sci. 487 (2001) 15.
- [3] M.L. Viana, R. Díez Muiño, E.A. Soares, M.A. Van Hove, V.E. de Carvalho, J. Phys. Condens. Matter 19 (2007) 446002.
- [4] M. Affenzeller, S. Winkler, S. Wagner, A. Beham, J. Phys. Condens. Matter Genetic Algorithms and Genetic Programming, CRC Press, Boca Rotan, Florida, 2009.
- [5] M. Clerc, Particle Swarm Optimisation, ISTE Ltd., London, 2006.
- [6] J. Kennedy, R. Eberhart, Proc. IEEE Int. Conf. Neural Netw. 4 (1995) 1942.
- [7] Luis Henrique de Lima, Lucas Barreto, Richard Landers, and Abner de Siervo, Phys. Rev. B 93, 035448 (2016).
- [8] Y. Marinakis. “A hybrid Particle Swarm Optimization –Variable Neighborhood Search algorithm for Constrained Shortest Path problems”. Em: European Journal of Operational Research 261 (2017), pp. 819–834.
- [9] J. Viot. Otimização por enxame de partículas com congregação passiva seletiva. Tese de Doutorado. COPPE,UFRJ, 2010.
- [10] http://www.ap.cityu.edu.hk/SurfStrucInfo/SurfStrucInfo_files/mscd/mscdover.html