МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧ НАНОЭЛЕКТРОНИКИ С ПОМОЩЬЮ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ

С.В. Поляков

В последнее время в связи с бурным развитием и широким применением нанотехнологий в электронике появились новые классы задач математического моделирования, объектом изучения которых являются процессы в наноструктурах. Одним из подходов к исследованию таких задач стало одновременное использование описания квантовой механики и механики сплошной среды и проведение на их основе мультимасштабного моделирования. Такое объединение привело к существенному повышению качества научных результатов. Однако при этом возросла трудоемкость их получения. Среди основных трудностей, которые отличают данные задачи, отметим многомерность, сильную нелокальную нелинейность, сложную реальную геометрию, большое число неизвестных величин и функций. В результате, исследование таких моделей требует применения высокоточных численных алгоритмов, ориентированных на использование высокопроизводительных многопроцессорных вычислительных систем (МВС). Однако применение последних в данном контексте тормозится наличием целого ряда нерешенных вычислительных проблем.

В настоящей работе рассматриваются некоторые классы задач наноэлектроники и обсуждаются проблемы и методы их решения с помощью высокопроизводительных МВС. И, несмотря на то, что каждая из обсуждаемых задач требует разработки специальных численных алгоритмов, имеются общие узкие места, которые представляют самостоятельный интерес. На наш взгляд заслуживают всеобщего внимания и обсуждения проблемы, связанные со сложностью геометрии и состава микро- и наноструктур, и вытекающей отсюда сильной неоднородностью математических моделей, необходимостью построения адаптивных сеток различного типа и объема, аппроксимациями высокого порядка точности уравнений различных типов на сетках различных типов, а также в рамках безсеточного подхода, нелинейностью используемых моделей и некорректностью отдельных задач, сверхбольшими объемами вычислений и использованием суперкомпьютеров с большим числом процессоров и ядер. По ряду из названных проблем в докладе предлагаются следующие пути их преодоления.

1. Сложность реальной двух- и трехмерной геометрии, а также сильно неоднородный состав микро- и наноструктур в рамках моделей механики сплошной среды предполагает использование нерегулярных адаптивных сеток, а также различного набора уравнений и параметров в каждой подобласти. Применение блочных ортогональных локально сгущающихся сеток или нерегулярных адаптивных треугольных (тетраэдральных) сеток помогает описать самую сложную геометрию задачи. Алгоритмы построения таких сеток, в том числе параллельные, обсуждались в работах [1-2]. Проблема использования различных наборов уравнений в различных подобластях обычно решается с помощью условий сшивки решений по границам и применения теории параметров порядка (примером может служить работа [3]).

2. Использование сеток произвольной структуры требует разработки аппроксимаций дифференциальных операторов на таких сетках. При этом необходимо руководствоваться принципами консервативности получаемых схем и монотонности дискретных решений, чтобы проводить расчеты с высокой точностью. В [4-5] было предложено использование метода конечных объемов для построения аппроксимаций основных уравнений со вторым порядком точности по пространству на сетках практически произвольного качества. При этом гарантируется выполнение основных законов сохранения (заряда, массы частиц, энергии систем) и слабая монотонность решения.

3. Для реализации конечно-объемных схем требуется применение итерационных алгоритмов, обладающих высокой скоростью сходимости. При этом речь идет как о симметричных, так и несимметричных матрицах, а также эрмитовых и косоэрмитовых. Для решения данной проблемы предлагается использовать методы сопряженных и бисопряженных градиентов с предобуславливателями специального вида. В последнее время применяется их комбинация с многосеточными методами. Однако параллельная многосеточная технология для сеток произвольной структуры реализована пока лишь в рамках метода конечных элементов и имеет некоторые ограничения по точности и эффективности распараллеливания. В рамках метода конечных объемов здесь остается пока много нерешенных проблем, связанных, прежде всего, с построением нерегулярных вложенных сеток и соответствующих вложенных контрольных объемов.

4. Преодоление проблемы сильной нелинейности и возможной некорректности задач связано с разработкой устойчивых быстрых алгоритмов поиска нормальных решений, выделения и численного анализа отдельных их ветвей. В работе [6] для решения подобных проблем предложено использовать специальные внешние итерационные процессы по нелинейности, сходящиеся к одной из выбранных ветвей решения. Предложенный подход применим к одномерным и квазиодномерным системам частиц. В пространствах большей размерности более эффективны алго-

ритмы поиска граничных решений, минимизирующих некоторый функционал. Среди параллельных алгоритмов поиска минимума функционала наиболее эффективны на наш взгляд метод кривых Пеано и обобщенный метод бисекции Евтушенко.

5. При реализации многих численных алгоритмов на МВС предлагается использовать принципы геометрического параллелизма и метода разделения областей Шварца. В случае прямоугольных областей при использовании ортогональных сеток удается применять параллельные локально одномерные схемы по времени [7] или итерационные методы переменных направлений [8]. Однако в большинстве случаев применяются параллельные блочные итерационные методы на базе схемы сопряженных градиентов. Например, большой популярностью пользуются методы на базе разложения Шура [9]. Однако в случае большой размерности систем эти алгоритмы оказываются неэффективны. Большой проблемой является также рациональное разбиение нерегулярных сеток по процессорам. Особенно при сильной неоднородности вычислений. Решением проблемы является применение алгоритмов разбиения нагруженных графов. Повышение эффективности параллельных вычислений осуществляется с помощью динамической балансировки загрузки процессоров МВС.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты No. 06-01-00097, Грант Президента РФ НШ-3886.2008.1).

ЛИТЕРАТУРА:

1. И.В. Попов, С.В. Поляков. Построение адаптивных нерегулярных треугольных сеток для двумерных многосвязных невыпуклых областей. Математическое моделирование. 2002, 14(6), 25-35.
2. Ю.Н. Карамзин, И.В. Попов, С.В. Поляков. Разностные методы решения задач механики сплошной среды на неструктурированных треугольных и тетраэдральных сетках. Математическое моделирование. 2003, 15(11), с. 3-12.
3. *J.A. Sethian.* Level Set Methods and Fast Marching Methods: Evolving Interfaces in Computational Geometry, Fluid Me. Cambridge University Press, 1999, 400p.
4. Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков, И.В. Попов. Разностные схемы для параболических уравнений на треугольных сетках. Известия высших учебных заведений. Серия Математика, 2003, 1(488), с. 53-59.
5. С.В. Поляков. Экспоненциальные схемы для решения эволюционных уравнений на нерегулярных сетках. // Ученые записки казанского государственного университета. Серия "Физико-математические науки", 2007, т. 149, кн. 4, с. 1-11.
6. С.В. Поляков. Численные методы для моделирования электронных процессов в квантовых структурах. Вестник ННГУ, Серия "Математическое моделирование и оптимальное управление", 2005, вып. 1(28), с. 200-207.
7. Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков. Параллельные алгоритмы решения многомерных краевых задач для параболических уравнений. В сб. "Фундаментальные физико-математические проблемы и моделирование технико-технологических систем", вып. 6, с. 212-226. М., Изд-во "Janus-K", 2003.
8. А.А. Самарский, Е.С. Николаев. Методы решения сеточных уравнений. – М., Наука, 1978.
9. Yu. Saad. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. - Second edition. Cambridge University, 2000.