

Параллельное программное обеспечение для моделирования нелинейных процессов в технических микросистемах*

С.В. Поляков^{1,2}, В.О. Подрыга¹, Д.В. Пузырьков¹, Т.А. Кудряшова¹

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН¹, НИЯУ МИФИ²

Современный этап развития индустрии характеризуется внедрением нанотехнологий в производство. В связи с этим стали актуальны научные исследования технологических процессов и сложных технических объектов на различных уровнях детализации. Одним из подходов стало многомасштабное моделирование технических микросистем, сочетающее методы механики сплошных сред и молекулярной динамики. Однако последнее требует развития устойчивых параллельных алгоритмов и разработки специальных программных средств для вычислителей сверхвысокой производительности. В настоящей работе представляются элементы суперкомпьютерной технологии и программное обеспечение, позволяющие решать в рамках выбранного подхода некоторые актуальные задачи нанотехнологии.

Ключевые слова: математическое моделирование, многомасштабные модели, механика сплошных сред, сеточные методы, молекулярная динамика, параллельные алгоритмы и программы, суперкомпьютерные вычисления.

1. Введение

В настоящее время мировая и отечественная промышленность развивают свое производство путем внедрения перспективных нанотехнологий. В связи с этим стали особенно актуальны научные исследования технологических процессов и сложных технических систем на различных масштабных уровнях вплоть до атомных. Одним из широко используемых математических подходов стало многомасштабное моделирование микросистем, сочетающее методы механики сплошных сред и молекулярной динамики. Однако реализация многомасштабных компьютерных исследований требует развития новых устойчивых численных методов, параллельных алгоритмов и комплексов программ для вычислителей сверхвысокой производительности.

В настоящей работе представляются элементы суперкомпьютерной технологии и программное обеспечение, позволяющие решать в рамках выбранного подхода некоторые актуальные задачи нанотехнологий. Основным объектом исследования являются микро- и наносистемы, используемые при решении практически важных задач, связанных с приложениями в современной микро- и нанoeлектронике. В качестве последних были выбраны: создание новых нанопокровов и наноматериалов методами газодинамического напыления наночастиц на подложку [1,2], а также анализ жизненного цикла чипов, в том числе, проблемы деградации межсоединений электронных схем [3-6]. В этой несколько разнородной прикладной тематике была выделена общая фундаментальная компонента, которая связана с моделированием нелинейных процессов в микросистемах металл-металл, металл-газ, газ-газ, а также металл-полупроводник, металл-диэлектрик.

Выбранные микросистемы отличаются тем, что при относительно малых размерах их активных элементов или слоев (порядка десятков или нескольких сотен нанометров) сами системы могут иметь в одном или нескольких измерениях довольно внушительные размеры (от нескольких микрон до нескольких сантиметров). Поэтому моделирование в таких системах необходимо производить по крайней мере на двух масштабных уровнях. Первый из них относится к системе в целом (будем называть его макроуровнем), второй – к отдельным малым фрагментам системы вплоть до молекул и атомов (будем его называть микроуровнем).

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проекты №№ 14-01-00663-а, 15-07-06082-а, 15-29-07090-офи_м, 16-07-00206-а, 16-37-00417-мол-а).

В качестве базовых моделей на макроуровне были выбраны различные варианты гидродинамической системы уравнений, в том числе квазигазодинамическая (КГД) система уравнений [7,8], дополняемая уравнениями электродинамики. В качестве базовой модели на микроуровне используется система уравнений динамики Ньютона. Постановки конкретных математических задач представляют собой краевые или начально-краевые задачи для указанных уравнений, дополняемые материальными условиями, в том числе уравнениями состояния и связей. Численные методы решения задач на макроуровне являются сеточными и основаны на методе контрольных объемов [9]. Численные методы решения уравнений Ньютона базируются на схеме Верле [10]. Общая численная процедура представляет собой метод расщепления по физическим процессам [11]. При параллельной реализации указанных численных алгоритмов используются принципы геометрического и функционального параллелизма [12] и техника разделения областей [13]. Программная реализация подхода выполнена по гибридной технологии [14] и ориентирована на применение программных средств MPI [15], OpenMP [16] и CUDA Toolkit [17]. Компьютерные расчеты проводились на системах с центральными, векторными и графическими процессорами (ЦПУ, ВПУ и ГПУ).

2. Постановки математических задач

В данном разделе приведем примеры конкретных задач актуальных для указанных выше предметных областей.

2.1 Математическая модель в задачах газодинамического напыления

При моделировании задач, связанных с газодинамическим напылением, центральной проблемой является расчет течения смеси газов вблизи твердых поверхностей установки. Как указывалось выше, нами предложено для этих целей использовать многомасштабный подход, когда исследование проводится как минимум на двух масштабных уровнях – основном (макромасштаб, составляющий от нескольких десятков микрон до десятков миллиметров) и дополнительном (микромасштаб, имеющий порядок микрона и менее). На основном уровне рассчитывается среднее течение газа в канале. На дополнительном уровне рассчитываются взаимодействия: 1) молекул газа между собой (определяющие характеристики потока); 2) молекул газа и атомов твердых поверхностей (описывающие явления в погранслоях). Реализация основана на расщеплении по физическим процессам.

На макромасштабах предлагается использовать квазигазодинамическую систему уравнений в релаксационном приближении [7]. Мотивацией к этому является тот факт, что КГД система принадлежит к классу кинетически-согласованных подходов и существенно расширяет возможности модели Навье-Стокса. Главным отличием КГД от уравнений Навье-Стокса является использование процедуры пространственно-временного осреднения для определения основных газодинамических величин (плотность, импульс, энергия). Также в КГД уравнениях присутствуют слагаемые, реализующие дополнительное сглаживание по времени и являющиеся эффективными регуляторами. Влияние этих слагаемых проявляется в случае сильно нестационарных течений, при числах Кнудсена близких к единице. Еще одним фактором в пользу выбора КГД уравнений является величина параметра обезразмеривания по пространству, совпадающая со средней длиной свободного пробега молекул газов. Последняя в диапазоне температур 100 - 1200 К (характерном для задач напыления) составляет от десятков и сотен нанометров до десятков микрон. Наконец, явные варианты дискретизированных КГД уравнений позволяют использовать как структурированные, так и неструктурированные сетки, и строить эффективные параллельные алгоритмы, легко реализуемые на современных высокопроизводительных вычислительных системах.

В качестве примера приведем задачу о течении газовой смеси в микроканале установки напыления, длина и диаметр которого могут варьироваться в широком диапазоне, что приводит к числам Кнудсена от 0.001 до 1. В случае смеси газов КГД система записывается для каждого газа отдельно, но включает в уравнения для импульсов и энергий обменные слагаемые, которые отвечают за согласование параметров смеси в целом.

Запишем систему КГД уравнений для случая бинарной газовой смеси в инвариантном относительно системы координат виде вместе с уравнениями состояния:

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho)} = 0, \quad l = a, b, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_l u_{l,k} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho u_k)} = S_l^{(\rho u_k)}, \quad l = a, b, \quad k = x, y, z, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} E_l + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(E)} = S_l^{(E)}, \quad l = a, b, \quad (3)$$

$$E_l = \frac{1}{2} \rho_l |\mathbf{u}_l|^2 + \rho_l \varepsilon_l, \quad p_l = Z_l \rho_l \mathfrak{R}_l T_l, \quad \varepsilon_l = c_{v,l} T_l, \quad l = a, b, \quad (4)$$

где a и b – газы, из которых состоит смесь. У каждого газа своя массовая плотность $\rho_l = m_l n_l$, масса m_l , концентрация n_l , температура T_l и макроскопическая скорость \mathbf{u}_l . Другие параметры: p_l – парциальные давления, E_l – плотности полной энергии, ε_l – внутренние энергии, Z_l – коэффициенты сжимаемости, $c_{v,l}$ – удельные теплоемкости при постоянном объеме, $\mathfrak{R}_l = k_B / m_l$ – газовые постоянные (k_B – постоянная Больцмана). Векторы $\mathbf{W}_l^{(\rho)}$, $\mathbf{W}_l^{(\rho u_k)}$, $\mathbf{W}_l^{(E)}$ с точностью до знака совпадают с потоками плотности, потоками соответствующих компонент плотности импульса и плотности энергии, они включают КГД поправки, пропорциональные максвелловскому времени релаксации, и зависят от коэффициентов вязкости μ_l и теплопроводности χ_l . Обменные члены $S_l^{(\rho u_k)}$ и $S_l^{(E)}$ учитывают перераспределения импульса и энергии между компонентами смеси, зависящие от частот взаимных столкновений между молекулами.

На микромасштабах используется метод молекулярной динамики (МД) [18-21]. В данном случае на микроуровне вдали от стенок канала рассматриваются частицы двух сортов (молекул двух газов), вблизи стенок добавляются частицы, составляющие материал стенок (обычно металл). Поведение частиц описывается следующими уравнениями Ньютона:

$$m_{l,i} \frac{d\mathbf{v}_{l,i}}{dt} = \mathbf{F}_{l,i}, \quad \mathbf{v}_{l,i} = \frac{d\mathbf{r}_{l,i}}{dt}, \quad i = 1, \dots, N_l, \quad l = a, b, c, \quad (5)$$

где i – номер частицы, l – тип частиц (a и b – молекулы первого и второго газов, c – атомы металла), N_l – полное число частиц типа l . Частица типа l с номером i имеет свои массу $m_{l,i}$, радиус-вектор $\mathbf{r}_{l,i}$, вектор скорости $\mathbf{v}_{l,i}$ и суммарную силу $\mathbf{F}_{l,i}$, действующую на эту частицу. Взаимодействие частиц описывается с помощью потенциалов, зависящих от координат частиц. Выбор потенциала взаимодействия основывается на сравнении механических свойств компьютерной модели потенциала и реального материала (подробнее см. [18-21]).

Начальные условия на микроуровне определяются равновесным или квазиравновесным термодинамическим состоянием системы частиц при заданных температуре, давлении и среднем импульсе. Граничные условия на молекулярном уровне зависят от моделируемой ситуации. Для определения общих свойств среды достаточно рассмотреть выделенный трехмерный ее объем с периодическими граничными условиями по всем координатам. При исследовании микросистем реальной геометрии, таких как микроканал, одно или несколько направлений имеют конечный размер, и сохранение формы объекта достигается подбором потенциала либо фиксацией системы. Контроль над температурой системы и над ее полным импульсом осуществляется с помощью алгоритмов термостатирования.

Система КГД уравнений замыкается начальными и граничными условиями. Начальные условия соответствуют равновесному состоянию газовой среды в отсутствие взаимодействия с внешними факторами. Можно рассмотреть случай покоящейся газовой среды по всей расчетной области. На входе в канал задаются плотности, скорости и полные энергии компонент газа. На свободных поверхностях задаются "мягкие" граничные условия [7]. Вблизи стенок канала вводится специальная микросистема, состоящая из молекул газа и атомов металла. Граничные условия на стенке определяются как условия 3-го рода, описывающие обмен массой, компонентами импульса и энергией между газовой смесью в потоке и в пристеночном слое. В эти условия вводятся коэффициенты аккомодации, определяющиеся либо из таблиц физических величин (что возможно для ограниченного диапазона температур и давлений), либо рассчитываемые методами МД. Другим способом постановки граничных условий является прямой МД расчет потоков плотности, импульса и энергии через границу пристеночного слоя.

В заключение пункта заметим, что для металлических поверхностей канала следовало бы записать на макроуровне уравнения теплопроводности и/или уравнения термоупругости. Однако в данном случае их можно заменить условиями термостатирования и сброса импульса, которые легко включаются в систему уравнений (5) путем введения термо- и баростатов, корректирующих скорости частиц [19].

2.2 Математическая модель деградации межсоединений

Проблема деградации межсоединений в электрических схемах чипов является одной из причин замедления темпов развития современной электроники. Сам физический процесс деградации межсоединений связан с образованием структурных дефектов, а затем пор и разломов в питающих чип электрических линиях [3-6]. Образование структурных дефектов в металле связано в свою очередь с явлением электронного ветра, когда при пропускании тока свободно движущиеся электроны зоны проводимости начинают вырывать ионы металла из его кристаллической решетки. Этот процесс заметно усиливается при уменьшении поперечного сечения проводников. Во многих предыдущих исследованиях было показано, что процесс порообразования является не обычным диффузионным процессом. Его движущей силой является свободная энергия разупорядочения атомов решетки металла, порождаемая как минимум четырьмя факторами: электромагнитным полем, теплом, механическими напряжениями и химическими взаимодействиями на границе среды. К этому следует также добавить капиллярные явления.

Описание указанных физических процессов порообразования при современных размерах межсоединений в сотни и даже десятки нанометров невозможно проводить лишь на основе уравнений гидро- и электродинамики. Здесь также необходимо использовать многомасштабный подход. В настоящей работе в дополнение к макромоделю, используемой в [3], предложено учитывать зерновую структуру материалов проводников и их окружения, рассчитываемую на молекулярном уровне. В результате, кинетические коэффициенты в макроуравнениях и граничные эффекты будут рассчитываться непосредственно методами молекулярной динамики, что сделает расчет максимально реалистичным.

Приведем пример такой комплексной модели. Сначала запишем уравнения гидро- и электродинамики в квазистационарном квазинейтральном случае:

$$\begin{cases} \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, & \mathbf{j} = \sigma_e \mathbf{E}, & \mathbf{r} = (x_1, x_2, x_3)^T \in \Omega_1; \\ \operatorname{div} \mathbf{D} = 0, & \mathbf{D} = \varepsilon_e \mathbf{E}, & \mathbf{r} \in \Omega_2; \end{cases} \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad \mathbf{r} \in \Omega = \Omega_1 \cup \Omega_2; \quad (6)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{q} = \gamma_0 (\mathbf{E} \cdot \mathbf{j}), \quad \mathbf{q} = -\mathbf{k}_T \nabla T, \quad \mathbf{r} \in \Omega, \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_1 = 0, \quad \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_2 = 0, \quad \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma}_3 = 0, \quad \mathbf{r} \in \Omega, \\ \boldsymbol{\sigma}_k = (\sigma_{k1}, \sigma_{k2}, \sigma_{k3})^T \quad (k=1,2,3), \quad \mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)^T, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\sigma_{ij} = 2\mu\varepsilon_{ij} + \delta_{ij} \left(\lambda \operatorname{div} \mathbf{u} - \left(\lambda + \frac{2}{3}\mu \right) \alpha(T, C) \right), \quad \varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad (9)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\operatorname{div} \mathbf{W}, \quad \mathbf{W} = -D\nabla C + \bar{D}\nabla\Phi, \quad \mathbf{r} \in \Omega_1, \quad t > 0. \quad (10)$$

Здесь \mathbf{j} , \mathbf{D} , σ_e , ε_e , \mathbf{E} и φ – вектор плотности электрического тока, вектор электрической индукции, нелинейная проводимость проводников, диэлектрическая проницаемость окружения проводников, напряженность и потенциал электрического поля соответственно, div и ∇ – операторы дивергенции и градиента в декартовых координатах с радиус-вектором \mathbf{r} , Ω – расчетная область, включающая проводники Ω_1 и диэлектрики (изоляторы) Ω_2 ; \mathbf{q} , \mathbf{k}_T , T – вектор теплового потока, нелинейный тензор температуропроводности, температура, γ_0 – безразмерный параметр; σ_k – вектор-столбцы, составляющие тензор термоупругих напряжений, \mathbf{u} – вектор смещений, μ , λ – безразмерные нелинейные коэффициенты Ламэ, α – нелинейная функция нагрузки, возникающей при тепловом расширении металла и изменении его массового состава; C – массовая доля (нормированная концентрация) металла в проводниках, t – время, \mathbf{W} – полный диффузионный поток, D и \bar{D} – нелинейные коэффициенты диффузии, зависящие от C и T , $\Phi = \Phi(\varphi, C, T, H)$ – обобщенный термодинамический потенциал (H – след тензора термоупругих напряжений).

Граничные и начальные условия имеют следующий вид:

$$\mathbf{j} \cdot \mathbf{n} = \begin{cases} j_{in}, & \mathbf{r} \in \partial\Omega_1^{(1)}, \\ j_{out}, & \mathbf{r} \in \partial\Omega_1^{(2)}, \quad \mathbf{D} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_2, \quad \partial\Omega_1 = \partial\Omega_1^{(1)} \cup \partial\Omega_1^{(2)} \cup \partial\Omega_1^{(3)}; \\ 0, & \mathbf{r} \in \partial\Omega_1^{(3)}, \end{cases} \quad (11)$$

$$T = T_0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega; \quad (12)$$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0, \quad \mathbf{u} = \mathbf{u}_0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega^{(1)}; \quad \sigma_i \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega^{(2)}; \quad \partial\Omega = \partial\Omega^{(1)} \cup \partial\Omega^{(2)}; \quad (13)$$

$$\begin{aligned} C|_{t=0} &= C_{i1}, \quad \mathbf{r} \in \Omega_1; \\ C &= C_{i1}, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_1^{(1)}, \quad \nabla C \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_1^{(2)}, \quad \mathbf{W} \cdot \mathbf{n} = 0, \quad \mathbf{r} \in \partial\Omega_1^{(3)}. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь $\partial\Omega_1^{(1)}$, $\partial\Omega_1^{(2)}$, $\partial\Omega_1^{(3)}$ – граничные области контакта проводника с питающими элементами (на них заданы входные токи с плотностями j_{in}), граничные области отводящих ток контактов (на них заданы выходные токи с плотностями j_{out}), граничные области, соприкасающиеся с изоляторами, $\partial\Omega$ – граница расчетной области, $\partial\Omega^{(1)}$, $\partial\Omega^{(2)}$ – две части общей границы, где заданы различные условия на термомеханические напряжения (на первой заданы смещения, на второй условия свободной границы), T_0 – температура чипа, C_{i1} – равновесная массовая доля металла в проводнике. Заметим, что на внутренних границах между проводниками и диэлектриками задаются стандартные условия сопряжения.

Отметим далее, что коэффициенты уравнений (6)–(10) разрывны и нелинейным образом зависят от температуры и массовой доли металла. Конкретный вид используемых зависимостей весьма разнообразен и определяется условиями моделируемого физического эксперимента и параметрами электрической схемы. Одним из способов определения данных зависимостей состоит в применении методов молекулярной динамики. Поэтому вторая часть задачи состоит в решении уравнений Ньютона во всей расчетной области или только на границах раздела различных материалов (поскольку менее всего информации имеется о свойствах материалов на этих границах). Фактически система уравнений Ньютона в этом случае имеет тот же вид, что и система (5) и дополняется различными начальными и граничными условиями, зависящими от физических условий. Количество сортов частиц зависит от состава используемых материалов. Для современных типов чипов в качестве проводников используются соединения меди (основной состав проводника) и тантала (упрочняющая оболочка проводника). В качестве изоляторов используются оксиды и карбиды кремния.

3. Численные методы, параллельные алгоритмы и программы

Предлагаемый многомасштабный подход можно использовать двумя способами:

1) с помощью МД моделирования можно создать базу данных по свойствам веществ и использовать ее в макромоделях для определения кинетических коэффициентов и параметров уравнений состояния и граничных условий;

2) можно проводить МД вычисления во время макроскопических расчетов в рамках метода расщепления по физическим процессам и использовать их как подсеточный алгоритм, корректирующий макропараметры среды.

Первый вариант расчетов приводит к большим вычислительным затратам на этапе подготовки расчетов и к большим объемам дисковой памяти, необходимой для хранения рассчитанных исходных данных. Второй вариант расчетов (прямое макроскопическое и микроскопическое моделирование) более оправдан в том случае, если база данных по свойствам веществ неполна или вовсе отсутствует. В этой ситуации второй вариант обеспечивает всеми необходимыми данными полный цикл моделирования и позволяет согласовывать процессы на микро- и макроуровнях, а также производить расчеты для определенного конкретного набора условий и одновременно накапливать базу данных на случай повторных вычислительных экспериментов.

Рассмотрим теперь некоторые детали разработанного подхода применительно к рассмотренным выше задачам в случае использования полного варианта вычислений.

3.1 Численный алгоритм решения задач напыления

При решении задач газодинамического напыления в полном варианте (КГД+МД), система КГД уравнений дискретизируется методом конечных объемов [9] на подходящих структурированных или неструктурированных сетках и решается на основе явных или неявных схем по времени (в последнем случае применяется подходящий итерационный процесс). Система уравнений МД используется в качестве подсеточного алгоритма и решается с помощью схемы Верле [10]. Все расчеты на микроуровне производятся независимо в каждом контрольном объеме пространственной сетки, за исключением граничных ячеек. В граничных ячейках может использоваться нелокальная схема МД вычислений. Особенно это актуально при больших числах Кнудсена (~ 1 и более), когда КГД система теряет точность вследствие нарушения гипотезы сплошности газовой среды.

В итоге, общий алгоритм состоит из четырех основных этапов:

1) расчет макропараметров компонент газа по сеточным аналогам КГД уравнений без учета обменных членов в ячейках сетки, где справедливо приближение сплошной среды;

2) МД вычисление кинетических коэффициентов, параметров уравнений состояния и обменных членов в среднем поле течения на основе локальных алгоритмов;

3) МД вычисление кинетических коэффициентов, параметров уравнений состояния, обменных членов и параметров граничных условий вблизи границ расчетной области и границ разделов сред на основе нелокальных алгоритмов;

4) возврат к макроуровню и коррекция плотностей импульсов и полной энергии газов, а также состояния металлической поверхности каналов.

Критерием останова МД расчетов является либо достижение характерного времени эволюции молекулярной системы (времени максвеллизации), либо малое изменение (на 1-2%) одного или нескольких макропараметров молекулярной системы (средний импульс, средние кинетическая и/или потенциальная энергии). Подробно изложенный алгоритм рассматривается в [21].

Еще раз подчеркнем, что отличием представленного подхода от встречающихся в литературе является возможность моделирования сложных течений газов, что обеспечивается с помощью методов МД, определяющих кинетические коэффициенты и обменные члены, необходимые для вычисления системы КГД уравнений, коэффициенты сжимаемости и удельные теплотемкости, лежащие в основе уравнений состояния, а также граничные условия.

3.2 Численный алгоритм решения задач деградации межсоединений

Общий численный подход для решения задач, связанных с моделированием процессов деградации межсоединений электронных схем подобен рассмотренному в п. 3.1. Отличием является то, что в данном случае на макроуровне рассматривается более сложная система уравнений электрогидродинамики (ЭГД). Также в данном случае можно рассмотреть усеченный (ЭГД + база данных молекулярного моделирования) и полный (ЭГД+МД) варианты расчета. Количество компонент расчета здесь возрастает как в связи с большим количеством макроуравнений, так и с большим количеством рассматриваемых материалов. Кроме того, на макро- и на микроуровнях приходится учитывать образование дефектов, пор и вакуумных слоев, появляющихся в объемных материалах, а также явления проникновения атомов и молекул одного материала в толщу другого. В целом же методика расчетов остается неизменной:

- 1) расчет макропараметров по сеточным аналогам ЭГД уравнений в ячейках сетки, где справедливо приближение сплошной среды;
- 2) МД вычисление макропараметров отдельных и смешанных материалов вдали от границ раздела на основе локальных алгоритмов;
- 3) МД вычисление макропараметров материалов вблизи границ расчетной области и границ разделов сред на основе нелокальных алгоритмов;
- 4) возврат к макроуровню и коррекция макропараметров во всех точках сетки.

3.3 Параллельная реализация предложенного подхода

Параллельная реализация изложенного многомасштабного подхода предполагает использование кластера (или суперкомпьютера) с центральной или гибридной архитектурой, имеющего на каждом узле несколько многоядерных центральных процессоров (ЦПУ), а также несколько векторных или графических процессоров (ВПУ или ГПУ). Распараллеливание алгоритма производится на принципах геометрического параллелизма и деления областей. Основной расчет на макроуровне производится по дискретным КГД или ЭГД уравнениям на сетке, распределенной между узлами кластера с помощью техники "domain decomposition". Внутри узла вычисления на макроуровне распределяются между потоками ЦПУ. Подсеточные МД вычисления возлагаются на ВПУ или ГПУ при их наличии. Распараллеливание вычислений на макроуровне между потоками ЦПУ также производится геометрическим способом. Распараллеливание МД вычислений производится путем разбиения всего множества частиц, относящихся к одной ячейке сетки, на группы одинаковой мощности. Каждый блок тредов ВПУ или ГПУ обрабатывает одну или несколько молекулярных групп, относящихся к одному или нескольким узлам сетки. Подробно элементы распараллеливания обсуждались в работах [19-22].

3.4 Программная реализация

Как указывалось выше, программная реализация предложенного подхода выполнена по гибридной технологии [14], использующей MPI [15], OpenMP [16] и CUDA [17]. Разработка проводилась на языках ANSI C/C++ с помощью шаблонов гибридных параллельных приложений, разработанных для программного комплекса GIMM_NANO [23], созданного в рамках гос-

контракта № 07.524.12.4019 Минобрнауки РФ. В результате были созданы и зарегистрированы в РосПатенте следующие варианты программ:

- GIMM_APP_QGD_CPU - программа расчета на ЦПУ двумерных и трехмерных течений смеси газов в микроканалах;
- GIMM_APP_MD_CPU_Gas_Metal - программа расчета на ЦПУ микросистем газ-металл;
- GIMM_APP_MD_GPU_Gas_Metal - программа расчета на ГПУ микросистем газ-металл;
- GIMM_APP_QGD_MD_CPU - программа расчета на ЦПУ двумерных и трехмерных течений смеси газов в микроканалах на основе подхода КГД + МД.

На стадии тестирования и регистрации находятся программы GIMM_APP_QGD_GPU, GIMM_APP_QGD_MD_GPU, ориентированные на более интенсивное использование возможностей графических ускорителей.

На стадии разработки находятся программы расчета процессов деградации межсоединений электронных схем GIMM_APP_VOID_EGD_HYB, GIMM_APP_VOID_MD_HYB и GIMM_APP_VOID_EGD_MD_HYB, ориентированные на совместное использование ЦПУ и ГПУ. Также разрабатывается редактор микроструктур GIMM_MICRO_STRUCT_EDITOR, позволяющий создавать модельные микроструктуры неограниченного по объему данных размера.

Для обработки и визуализации распределенных результатов молекулярного моделирования дополнительно разработано специализированное программное обеспечение [24, 25], которое будет основой системы визуализации в облачной версии программного комплекса GIMM_NANO.

4. Результаты

В данном разделе обсудим некоторые результаты, полученные с помощью разработанного численного подхода и указанного выше программного обеспечения.

4.1 Моделирование течений газа в микроканалах

Параллельно с разработкой окончательных вариантов численной методики и комплексов программ проводилось моделирование отдельных модельных подзадач. В частности, численно анализировались дозвуковые, транзвуковые и сверхзвуковые течения чистых газов и бинарной газовой смеси на примере водорода и азота. Полученные в предварительных расчетах результаты хорошо согласуются с известными табличными данными и результатами экспериментов. В [26] рассчитывалось течение смеси азота и водорода на выходе из микросопла в полукрытый микроканал и далее в свободное пространство. Результаты расчетов оказались близки к данным экспериментов. В [26] также предложено объединение микро- и макромоделей газовой среды в единый объект исследования. В [27] рассмотрено взаимодействие газового потока со стенками микроканала на примере системы азот-никель. Данный расчет представляет собой методику получения граничных условий прямым МД вычислением. В [19-21, 28, 29] развивались методы расчета термодинамических равновесий в системах металл-металл, газ-газ и газ-металл. В частности, были рассмотрены системы никель-никель, алюминий-алюминий, аргон-аргон, азот-азот, азот-никель. В [20] на примере азота рассмотрена методика уточнения уравнений состояний. Не приводя здесь конкретные результаты расчетов, хотелось бы подчеркнуть, что разработанная многомасштабная численная процедура подтвердила свою эффективность на данном классе задач и обещает большие перспективы при использовании вычислительных систем петафлопсного и эксафлопсного диапазона производительности.

4.2 Моделирование процессов образования пор

Моделирование процессов деградации межсоединений можно наблюдать в натурном эксперименте с помощью анализа рентгенограммы, где хорошо видны области образования пустот (пор) в материале электрической линии. Однако рентгенограмма снимается достаточно редко и после того, как произошел обрыв линии. Динамику обрыва отследить при этом довольно сложно. Эти обстоятельства побуждают использовать в качестве инструмента анализа математическое моделирование.

С помощью методики, представленной нами ранее в работе [3], был получен эффект порообразования (см. Рис. 1, 2) и проведено исследование его динамики. Однако расчеты проводились в двумерной постановке и не учитывали множество физических факторов. В данной работе удалось с помощью нового подхода повторить полученный результат в трехмерном случае. Еще более точный расчет должен учитывать зерновую структуру металлов и изолирующих их диэлектриков и явления взаимопроникновения материалов друг в друга. Учитывая это обстоятельство, отметим, что в целом разработанный подход и его программные реализации позволяют проводить такого рода исследования. Открытым пока остается вопрос о необходимых для этого вычислительных ресурсах. Тем не менее, максимальное использование гибридных вычислительных систем является в этой ситуации магистральным направлением при проведении численных экспериментов.

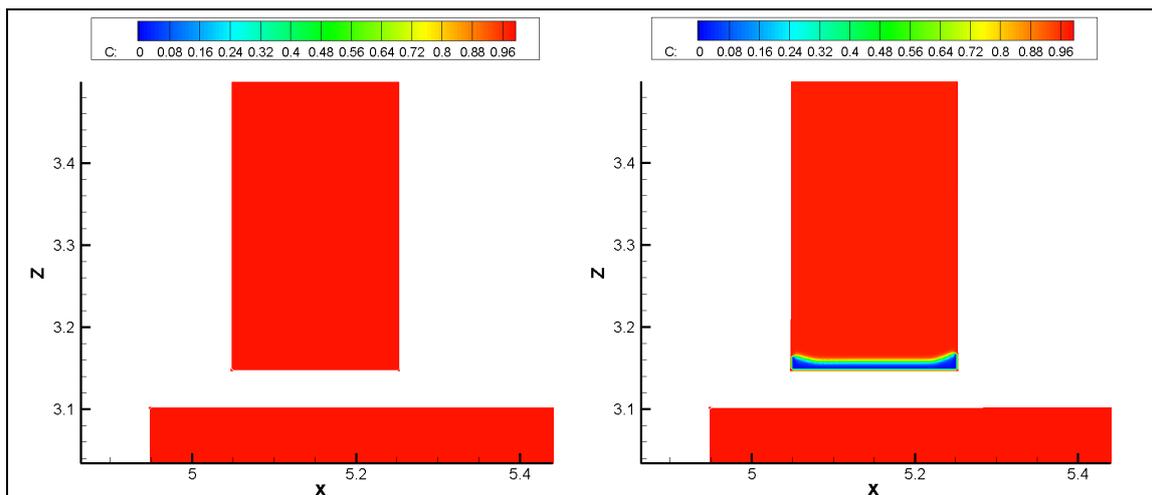


Рис. 1. Распределение массовой доли меди в межсоединении до рождения поры (слева) и в финале ее эволюции (справа).

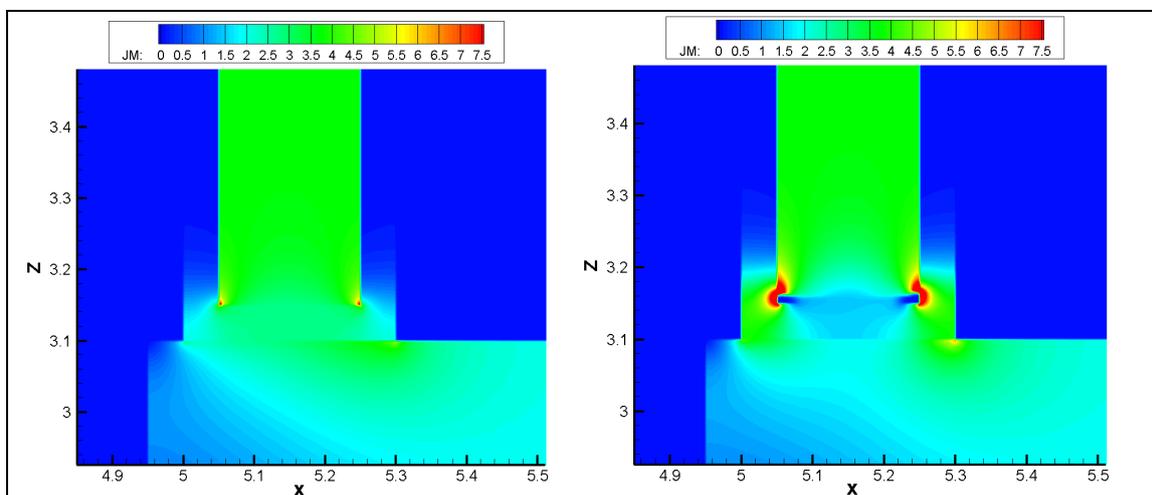


Рис. 2. Распределение модуля тока в межсоединении до рождения поры (слева) и в финале ее эволюции (справа).

Литература

1. Алхимов А.П., Клинков С.В., Косарев В.Ф., Фомин В.М. Холодное газодинамическое напыление. Теория и практика. М.: Физматлит, 2010. 536 с.
2. Resnick D. Nanoimprint lithography / In "Nanolithography. The art of fabricating nanoelectronic and nanophotonic devices and systems" (Edited by Martin Feldman). Woodhead Publishing Limited, 2014. 600 p.

3. Карамзин Ю.Н., Поляков С.В., Попов И.В., Кобельков Г.М., Кобельков С.Г., Chou J.H. Моделирование процессов образования и миграции пор в межсоединениях электрических схем // Математическое моделирование. 2007. Т. 19. № 10. С. 29-43.
4. Zhu X., Kotadia H., Xu S., Lu H., Mannan S.H., Chan Y.-C., Bailey C. Multi-Physics Computer Simulation of the Electromigration Phenomenon. 12th International Conference on Electronic Packaging Technology and High Density Packaging (ICEPT-HDP 2011), August 2011, Shanghai, China. P. 448-452.
5. Zhu X., Kotadia H., Xu S., Lu H., Mannan S.H., Bailey C., Chan Y.-C. Modeling Electromigration for Microelectronics Design // Journal of Computational Science and Technology. 2013. Vol. 7, No. 2. P.1-14.
6. Zhu X., Kotadia H., Xu S., Mannan S., Lu H., Bailey C., Chan Y.-C. Electromigration in Sn-Ag Solder Thin Films under High Current Density // Thin Solid Films. 2014. Vol. 565. P.193-201.
7. Elizarova T.G. Quasi-gas dynamic equations. Springer, 2009. 286 p.
8. Елизарова Т.Г., Злотник А.А., Четверушкин Б.Н. О квазигазо- и гидродинамических уравнениях бинарных смесей газов // Доклады академии наук. 2014. Т. 459, № 4. С. 395-399.
9. Eymard R., Gallouet T.R., Herbin R. The finite volume method. Handbook of Numerical Analysis (Editors: P.G. Ciarlet and J.L. Lions). 2000. Vol. VII. P. 713-1020.
10. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. 1967. Vol. 159. P. 98-103.
11. Марчук Г.И. Методы расщепления. М: Наука, 1988. 263 с.
12. Воеводин В.В., Воеводин Вл.В. Параллельные вычисления. СПб.: БХВ-Петербург, 2002. 608 с.
13. Quarteroni A., Valli A. Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. Oxford Science Publications, 1999. 376 p.
14. Поляков С.В., Карамзин Ю.Н., Косолапов О.А., Кудряшова Т.А., Суков С.А. Гибридная суперкомпьютерная платформа и разработка приложений для решения задач механики сплошной среды сеточными методами // Известия ЮФУ. Технические науки. 2012. № 6 (131). С. 105–115.
15. Официальная документация и учебные пособия по MPI: <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/>
16. Официальная документация и учебные пособия по OpenMP. URL: <http://www.openmp.org>, <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP>
17. CUDA Toolkit Documentation v. 7.5. Santa Clara (CA, USA): NVIDIA Corporation, September 2015. URL: <http://docs.nvidia.com/cuda/index.html#axzz3tx7h9bwP>.
18. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation. From Algorithm to Applications. New-York: Academic Press, 2002. 638 p.
19. Подрыга В.О., Поляков С.В. Молекулярно-динамическое моделирование установления термодинамического равновесия в никеле // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, № 3. С. 3-19.
20. Подрыга В.О. Определение макропараметров реального газа методами молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, № 7. С. 80-90.
21. Подрыга В.О., Поляков С.В., Пузырьков Д.В. Суперкомпьютерное молекулярное моделирование термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл // Вычислительные методы и программирование. 2015. Т. 16, № 1. С. 123-138.

22. Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная реализация многомасштабного подхода для расчета микротечений газа // Вычислительные методы и программирование. 2016. Т. 17. Вып. 3. С. 147-165.
23. Бондаренко А.А., Поляков С.В., Якобовский М.В., Косолапов О.А., Кононов Э.М. Программный комплекс GIMM_NANO. Международная суперкомпьютерная конференция "Научный сервис в сети Интернет: все грани параллелизма", 23 - 28 сентября 2013 г., г. Новосибирск, CD-proceedings. С. 1-5.
24. Поляков С.В., Выродов А.В., Пузырьков Д.В., Якобовский М.В. Облачный сервис для решения многомасштабных задач нанотехнологии на суперкомпьютерных системах // Труды Института системного программирования РАН. 2015. Т. 27. Вып. 6. С. 409-420.
25. Пузырьков Д.В., Подрыга В.О., Поляков С.В. Распределенная обработка данных в задачах моделирования термодинамического равновесия в микросистемах газ-металл методами молекулярной динамики. // Вестник УГАТУ. 2016. Т. 20, № 1 (71). С. 175-186.
26. Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В. Моделирование течений газовых смесей в микроканалах // Вестник РУДН, серия «Математика. Информатика. Физика». 2014. № 3. С. 154-163.
27. Подрыга В.О., Поляков С.В., Жаховский В.В. Атомистический расчет перехода в термодинамическое равновесие азота над поверхностью никеля // Математическое моделирование. 2015. Т. 27, № 7. С. 91-96.
28. Подрыга В.О. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия методом молекулярной динамики. // Математическое моделирование. 2010. Т. 22, № 11. С. 39-48.
29. Подрыга В.О. Моделирование процесса установления термодинамического равновесия нагретого металла. // Математическое моделирование. 2011. Т. 23, № 9. С. 105-119.

Parallel Software for Simulation of Nonlinear Processes in Technical Microsystems

S.V. Polyakov^{1,2}, V.O. Podryga¹, D.V. Puzyrkov¹, T.A. Kudryashova¹,
KIAM RAS¹, NRNU MEPhI²

The modern stage of the industry evolution is characterized by introduction of nanotechnologies in production. Therefore, scientific researches of various technological processes and facilities at different levels of detailing up to atomic are become actual. Multiscale modeling of microsystems, which combines the methods of continuum mechanics and molecular dynamics, has become one of the possible approaches. This report presents elements of supercomputer technology and software, which enable us to solve some problems of nanotechnologies within the chosen approach.

Keywords: mathematical simulation, multiscale approaches, continuum mechanics, mesh methods, molecular dynamics, parallel algorithms and programs, supercomputer computations.

References

1. Alkhimov A.P., Klinkov S.V., Kosarev V.F., Fomin V.M. Kholodnoe gazodinamicheskoe napylenie. Teoriya i praktika [Cold gasdynamic spray. Theory and practice]. Moscow: Fizmatlit, 2010. 536 p.
2. Resnick D. Nanoimprint lithography / In "Nanolithography. The art of fabricating nanoelectronic and nanophotonic devices and systems" (Edited by Martin Feldman). Woodhead Publishing Limited, 2014. 600 p.
3. Karamzin Yu.N., Polyakov S.V., Popov I.V., Kobel'kov G.M., Kobel'kov S.G., Choy J.H. Modelirovanie protsessov obrazovaniya i migratsii por v mezhsoedineniyakh elektricheskikh skhem [Numerical simulation of nucleation and migration voids in interconnects of electrical circuits] // Matematicheskoe modelirovanie [Mathematical Simulation]. 2007. Vol. 19, No. 10. P. 29-43.
4. Zhu X., Kotadia H., Xu S., Lu H., Mannan S.H., Chan Y.-C., Bailey C. Multi-Physics Computer Simulation of the Electromigration Phenomenon. 12th International Conference on Electronic Packaging Technology and High Density Packaging (ICEPT-HDP 2011), August 2011, Shanghai, China. P. 448-452.
5. Zhu X., Kotadia H., Xu S., Lu H., Mannan S.H., Bailey C., Chan Y.-C. Modeling Electromigration for Microelectronics Design // Journal of Computational Science and Technology. 2013. Vol. 7, No. 2. P.1-14.
6. Zhu X., Kotadia H., Xu S., Mannan S., Lu H., Bailey C., Chan Y.-C. Electromigration in Sn-Ag Solder Thin Films under High Current Density // Thin Solid Films. 2014. Vol. 565. P.193-201.
7. Elizarova T.G. Quasi-gas dynamic equations. Springer, 2009. 286 p.
8. Elizarova T.G., Zlotnik A.A., Chetverushkin B.N. On quasi-gasdynamic and quasi-hydrodynamic equations for binary mixtures of gases // Doklady Mathematics. 2014. Vol. 90, No. 3. P. 1-5.
9. Eymard R., Gallouet T.R., Herbin R. The finite volume method. Handbook of Numerical Analysis (Editors: P.G. Ciarlet and J.L. Lions). 2000. Vol. VII. P. 713-1020.
10. Verlet L. Computer «experiments» on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. 1967. Vol. 159. P. 98-103.
11. Marchuk G.I. Metody rasshchepleniya [Splitting-up methods]. M.: Science, 1988. 263 p.

12. Voevodin V. V., Voevodin V.I. Parallel'nye vychisleniya [Parallel Computing]. Saint-Petersburg, BHV-Petersburg Publ., 2002. 608 p.
13. Quarteroni A., Valli A. Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations. Oxford Science Publications, 1999. 376 p.
14. Polyakov S.V., Karamzin Yu.N., Kosolapov O.A., Kudryashova T.A., Sukov S.A. Gibriddnaya superkomp'yuternaya platforma i razrabotka prilozheniy dlya resheniya zadach mekhaniki sploshnoy sredy setochnymi metodami [Hybrid supercomputer platform and applications programming for the solution of continuous mechanics problems by grid methods] // Izvestiya YuFU. Tekhnicheskie nauki [IZVESTIYA SFedU. ENGINEERING SCIENCES]. 2012. No. 6 (131). P. 105-115.
15. Official documentation and manuals on MPI. URL: <http://www.mcs.anl.gov/research/projects/mpi/> (accessed: 15.06.2016).
16. Official documentation and manuals on OpenMP. URL: <http://www.openmp.org>, <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP> (accessed: 15.06.2016).
17. CUDA Toolkit Documentation v. 7.5. Santa Clara (CA, USA): NVIDIA Corporation, September 2015. URL: <http://docs.nvidia.com/cuda/index.html> (accessed: 15.06.2016).
18. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation. From Algorithm to Applications. New-York: Academic Press, 2002. 638 p.
19. Podryga V.O., Polyakov S.V. Molecular Dynamics Simulation of Thermodynamic Equilibrium Establishment in Nickel // Mathematical Models and Computer Simulations. 2015. Vol. 7, No. 5. P. 456-466.
20. Podryga V.O. Opredelenie makroparametrov real'nogo gaza metodami molekulyarnoy dinamiki [Determination of real gas macroparameters by molecular dynamics] // Matematicheskoe modelirovanie [Mathematical Simulation]. 2015. Vol. 27, No. 7. P. 80-90.
21. Podryga V.O., Polyakov S.V., Puzyr'kov D.V. Superkomp'yuternoe molekulyarnoe modelirovanie termodinamicheskogo ravnovesiya v mikrosistemakh gaz-metall [Supercomputer molecular modeling of thermodynamic equilibrium in gas-metal microsystems] // Vychislitel'nye metody i programmirovaniye [Numerical methods and programming]. 2015. Vol. 16, No. 1. P. 123-138.
22. Podryga V.O., Polyakov S.V. Parallelnaya realizatsiya mnogomasshtabnogo podkhoda dlya rascheta mikrotecheniy gaza [Parallel Implementation of Multiscale Approach to the Numerical Study of Gas Microflows] // Vychislitel'nye metody i programmirovaniye [Numerical methods and programming]. 2016. Vol. 17, No. 3. P. 147-138.
23. Bondarenko A.A., Polyakov S.V., Yakobovskiy M.V., Kosolapov O.A., Kononov E.M. Programmnyy kompleks GIMM_NANO [Software package GIMM_NANO]. Mezhdunarodnaya superkomp'yuternaya konferentsiya "Nauchnyy servis v seti Internet: vse grani parallelizma" (Novorossiysk, 23 - 28 sentyabrya 2013) [International Supercomputer Conference "Scientific service on the Internet: all facets of parallelism" (Novorossiysk, Russia, September, 23-28, 2013)] CD-proceedings. P. 1-5.
24. Polyakov S.V., Vyrodov A.V., Puzyr'kov D.V., Yakobovskiy M.V. Oblachnyy servis dlya resheniya mnogomasshtabnykh zadach nanotekhnologii na superkomp'yuternykh sistemakh [Cloud service for decision of multiscale nanotechnology problems on supercomputer systems] // Trudy Instituta sistemnogo programmirovaniya RAN [Proceedings of the Institute for System Programming RAS]. 2015. Vol. 27. No. 6. P. 409-420.
25. Puzyr'kov D.V., Podryga V.O., Polyakov S.V. Raspredelennaya obrabotka dannykh v zadachakh modelirovaniya termodinamicheskogo ravnovesiya v mikrosistemakh gaz-metall metodami molekulyarnoy dinamiki [Distributed data processing in application to the molecular dynamics simulation of equilibrium state in the gas-metal microsystems] // Vestnik UGATU [Scientific journal of USATU]. 2016. Vol. 20. No. 1(71). P. 175-186.
26. Kudryashova T.A., Podryga V.O., Polyakov S.V. Modelirovanie techeniy gazovykh smesey v mikrokanalakh [Simulation of gas mixture flows in microchannels] // Vestnik RUDN. Seriya:

- Matematika. Informatika. Fizika [Bulletin of People's Friendship University of Russia. Series: Mathematics. Computer science. Physics]. 2014. No. 3. P. 154-163.
27. Podryga V.O., Polyakov S.V., Zhakhovskii V.V. Atomisticheskiy raschet perekhoda v termodinamicheskoe ravnovesie azota nad poverkhnost'yu nikelya [Atomistic calculation of the nitrogen transitions in thermodynamic equilibrium over the nickel surface] // Matematicheskoe modelirovanie [Mathematical Simulation]. 2015. Vol. 27, No. 7. P. 91-96.
 28. Podryga V.O. Molecular Dynamics Method for Simulation of Thermodynamic Equilibrium // Mathematical Models and Computer Simulations. 2011. Vol. 3, No. 3. P. 381-388.
 29. Podryga V.O. Modelirovanie protsessa ustanovleniya termodinamicheskogo ravnovesiya nagretogo metalla [Molecular dynamics method for heated metal's simulation of thermodynamic equilibrium] // Matematicheskoe modelirovanie [Mathematical Simulation]. 2011. Vol. 23, No. 9. P. 105-119.