

0.1. Ревун А.Л., Рудин С.А., Павский К.В. Алгоритм термического отжига без блокировок в атомистическом моделировании гетероэпитаксии методом Монте-Карло на вычислительных системах

Основной проблемой при моделировании эпитаксиального роста квантовых точек является учет деформации, возникающей из-за несовпадения постоянных решеток осаждаемого материала и материала подложки, требующий значительных временных затрат на ее расчет. Разработанная ранее атомистическая трехмерная Монте-Карло (МК) модель гетероэпитаксиального роста [1] учитывает распределение деформации в моделируемой системе и подходит для распараллеливания вычислений.

Моделирование процесса гетероэпитаксии состоит из двух блоков: Шаг МК и Термический отжиг. Блок “Термический отжиг“, занимает примерно 50 % общего времени моделирования [2]. При реализации параллельной версии “Термический отжиг“ возникла классическая проблема “гонки данных“: если два потока одновременно модифицируют смещения атомов, локальная энергия вычисляется на основе несогласованного состояния системы. Подобное поведение приводит к физически некорректным результатам моделирования.

Для решения подобной проблемы, обычно, применяют примитивы синхронизации: критических секций, мьютексов или атомарных операций. Был проведен сравнительный анализ этих подходов, который показал, что примитивы синхронизации гарантируют корректность, их накладные расходы (особенно из-за частых конфликтов при работе с плотно связанными данными) сводят на нет преимущества распараллеливания.

В работе представлен параллельный алгоритм блока “Термический отжиг“ без блокировок. Такой подход позволил избежать накладных расходов, связанных с синхронизацией при этом, обеспечил физическую корректность результата и сократил время моделирования.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (ГЗ № FWGW-2025-0023).

Список литературы

- [1] Novikov P. L. Simulating the nucleation and growth of Ge quantum dots on Si using high-efficiency algorithms // Nanotechnologies Russ. 2015. Vol. 10. N. 3-4. P. 192–204.
- [2] Рудин С. А., Павский К. В., Ревун А. Л., Двуреченский А. В. Моделирование гетероэпитаксиального роста Ge на структурированной подложке Si(100) методом Монте-Карло и распараллеливание вычислений // Вестник СибГУТИ. 2024. Т. 18. № 1 (60). С. 16–28.