

基于 PHG 平台的半导体器件模拟研究与结构力学有限元软件研制

成杰

摘要

本文基于三维并行自适应有限元软件平台 PHG 开展了半导体器件模拟算法的研究以及固体力学有限元软件 PHG-Solid 的研发。

器件模拟方面，我们研究了漂移扩散模型方程的数值求解方法，包括求解变量的选择、微分方程的离散、非线性迭代策略和线性方程组的求解。我们着重研究了离散连续性方程的 FVSG 方法和有限元方法，以及适合于大规模并行计算的线性方程组求解方法。我们通过对具有实际应用背景的三维半导体器件的数值模拟，展示了使用高性能计算机进行大规模并行器件模拟的可行性与高效性。我们最大的器件模拟规模达到了近 3 亿自由度，使用 1024 个 MPI 进程。

固体力学有限元软件方面，我们基于面向对象的思想，设计了 PHG-Solid 的软件框架，并在 PHG 平台的基础上使用 C++ 语言进行了软件开发。PHG-Solid 能够对固体结构进行静力学分析、动力学分析和模态分析，能够进行无穷小应变分析和有限变形分析。基于现有的框架，将来还能进一步拓展至热力学分析、电磁场计算甚至是多物理耦合计算。PHG-Solid 的主要特点是：一、支持完全自动化且高度并行的自适应有限元计算；二、能稳健高效地求解大规模问题，具有很好的并行可扩展性。PHG-Solid 的最大计算规模超过 5 亿自由度，使用 1024 个 MPI 进程。

关键词：并行计算，器件模拟，漂移扩散模型，固体力学，有限元软件