

$g > 20$  в рассмотренном выше примере коэффициенты  $a, b, r$  становятся отрицательными и итерационный процесс расходится.

При  $g < -n$  схема с  $\tau = 0$  сходится лучше, чем схема с  $\tau = 1$ . Поэтому в практических задачах параметр  $\tau$  следует задавать равным 0 при  $g < -n$  и равным 1 при  $g \geq -n$ .

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гинкин В. П. Метод параболических прогонок для решения двумерных уравнений эллиптического типа. — Обнинск, 1981. — (Препр. ФЭИ-1153).
2. Гадияк Г. В., Гинкин В. П., Обрехт М. С., Шварц Н. Л. Программа расчета стационарных характеристик МДП-транзистора MOS-1 // Автометрия. — 1987. — № 1.
3. Гинкин В. П., Будникова Г. Г. ВОЛГА — программа трехмерного расчета реактора в малогрупповом диффузионном приближении. — Обнинск, 1984. — (Препр. ФЭИ-1583).

А. А. Андросенко, П. А. Андросенко, С. Г. Розин, А. А. Ярошевич

(Москва — Минск)

#### ВОЗМОЖНОСТИ КОМПЛЕКСА ПРОГРАММ BRAND ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ПРОЦЕССА ПЕРЕНОСА ИОНОВ

Описаны структура и возможности комплекса программ для моделирования методом Монте-Карло процесса переноса ионов. Приведены результаты расчетов, подтверждающие работоспособность программного комплекса.

**Введение.** Оптимальное решение многих вопросов, связанных с проблемами переноса ионизирующих излучений, невозможно без знания подробных дифференциальных характеристик радиационных полей, порождаемых этими излучениями. Обеспечение же необходимой точности при решении уравнения переноса возможно, как правило, лишь при подробном описании реальной трехмерной геометрии исследуемого объекта и при детальном учете информации о взаимодействии излучения с веществом, что наиболее корректно может быть выполнено в рамках метода Монте-Карло.

К настоящему моменту в СНГ на базе метода Монте-Карло разработано несколько машинезависимых программных комплексов, обладающих широкими возможностями для решения задач переноса излучений практически без упрощений реальной физической задачи. Существующие программные средства ориентированы, как правило, лишь на решение задач переноса нейтронов и (или) фотонов. Однако использование метода Монте-Карло для моделирования процесса переноса ионов обладает рядом достоинств, присущих только этому методу. Главное из них — возможность учитывать физические явления непосредственно. Кроме того, можно рассматривать многокомпонентные и многослойные мишени, в том числе сложной трехмерной геометрии, что позволяет точно моделировать реальные ситуации.

Предполагая справедливым для заряженных частиц приближение линейной теории переноса, авторы расширили возможности программного комплекса (ПК) BRAND, ориентированного на возможно точное решение (не)стационарного уравнения переноса нейтронов и фотонов в условиях реальной трехмерной геометрии. Представляемая версия является дальнейшим развитием версии [1], и новое в ней — физический модуль, описывающий в предположении парных взаимодействий процесс распространения ионов в веществе. Наличие в комплексе универсального геометрического модуля позволяет практически без упрощений представлять геометрию исследуемого объекта,

описывая ее формализмом поверхностей второго порядка. Широкий набор локальных и нелокальных оценок дает возможность вычислять совокупность линейных функционалов, обычно представляющих интерес при математическом моделировании процессов переноса излучения в различных геометрических композициях. Скомпилированная для комплекса BRAND библиотека констант [2] ориентирована на использование индивидуальной информации об элементах для описания взаимодействия частиц с каждым изотопом композиции в негрупповом подходе (подробное описание анизотропии и энергетических спектров вторичных частиц, непрерывное слежение за изменением энергии при взаимодействиях и т. д.), поэтому аналогичные принципы были выдержаны и при создании «ионной» константной библиотеки. Модульная организация комплекса позволяет осуществлять быстрый переход к различным геометриям, типам источников и детекторов, неаналоговым алгоритмам моделирования процесса переноса, типам частиц.

Использование метода Монте-Карло. Моделирование процесса переноса частиц проводится в фазовом пространстве координат  $r = (x, y, z)$ , направлений  $\Omega = (u, v, w)$ , энергий  $E$  и времени  $t$  (обозначим  $x = (r, \Omega, E)$ ). Решаемое уравнение переноса первичных частиц в операторной форме имеет вид

$$\psi_r = K_r \psi_r + f_r, \quad (1)$$

где  $\psi_r(x, t)$  — плотность столкновений частиц;  $f_r(x, t)$  — плотность первых столкновений, определяемая транспортной частью ядра  $K_r$  и источником первичных частиц  $Q_r(r, \Omega, E, t)$ . Здесь индексу  $r$  придается смысл, отражающий тип первичных частиц:  $n$  — нейтронов,  $\gamma$  — фотонов и  $z$  — заряженных частиц. Аналогичный операторный вид имеет и уравнение переноса вторичных частиц:

$$\psi_r^{(2)} = K_r \psi_r^{(2)} + f_r^{(2)}, \quad (2)$$

в котором смысл  $\psi_r^{(2)}, f_r^{(2)}$  такой же, как и  $\psi_r, f_r$ , но индекс  $r$  равен лишь  $\gamma$  или  $z$ ;  $f_r^{(2)}$  определяется транспортной частью ядра  $K_r$  и источником вторичных частиц, который, в свою очередь, является линейным функционалом от решения (1) с весовой функцией  $h_r = (r, E)$ , описывающей появление вторичных частиц при взаимодействии первичных частиц.

Предполагается, что в точках столкновения нейтронов и фотонов могут образовываться заряженные частицы, характеристики которых описываются соответственно функционалами  $Q_z = (\psi_n, z_n)$  и  $Q_\gamma = (\psi_\gamma, z_\gamma)$ . Здесь  $z_p = z_p(r, E_p, E_z, A, Z)$ ,  $E_z, A$  и  $Z$  — кинетическая энергия, масса и атомный заряд иона;  $E_p$  — энергия частицы, претерпевающей столкновение в точке  $r$ ; индекс  $p$  равен  $n$  либо  $\gamma$ . Угловое распределение порожденных заряженных частиц считается изотропным.

В настоящий момент в ПК BRAND для заряженных частиц реализованы две функциональные возможности.

Во-первых, возможность вычислять функционалы вида

$$\psi_z = (K_z Q_z), \quad (3)$$

где  $\psi_z(r, \Omega, E_z, t)$  — фазовая плотность распределения заряженных частиц; плотность перехода  $K_z$  представима в виде произведения пространственно-энергетической и временной частей  $L_z$  и  $T_z$ , причем  $L_z$  имеет смысл понятия удельной тормозной способности среды (данные по тормозным характеристикам берутся из [3, 4]). Подробное описание реализованной для вычисления (3) монте-карловской методики дано в [5].

Во-вторых, возможность решения уравнения (1) для заряженных частиц в предположении аморфности среды и с использованием физической модели, во многом основанной на работах [6—8].

Представленная версия ПК BRAND позволяет оценивать широкий спектр линейных функционалов в виде  $(\psi_p, \varphi_p)$ , где  $\varphi_p$  — заданные весовые функции аргументов  $r, \Omega, E_p$  и  $t$ , а индекс  $p$  может равняться  $n, \gamma$  или  $z$ . Кроме того, в

роли  $\varphi_p$  может выступать и соответствующая часть ядра  $K_p$ , что позволяет оценивать локальные характеристики полей излучения.

**Программные средства.** Комплекс программ BRAND составлен по модульному принципу и реализован на ЭВМ БЭСМ-6, ЭВМ ЕС и персональных компьютерах типа IBM PC/AT на алгоритмическом языке Фортран-4. Весь ввод исходной информации осуществляется с помощью именованных списков оператора Фортран NAMELIST.

Модульная организация комплекса позволяет осуществлять быстрый переход к различным геометриям, типам источников и детекторов, неаналоговым алгоритмам моделирования процесса переноса излучения. Взаимозаменяемость различных модулей обеспечивается стандартизацией их входов и выходов, а также функций, выполняемых каждой подпрограммой модуля.

Под рабочей программой комплекса будем понимать конкретный набор модулей из следующих основных частей комплекса, объединяемых на уровне модулей загрузки или текстов:

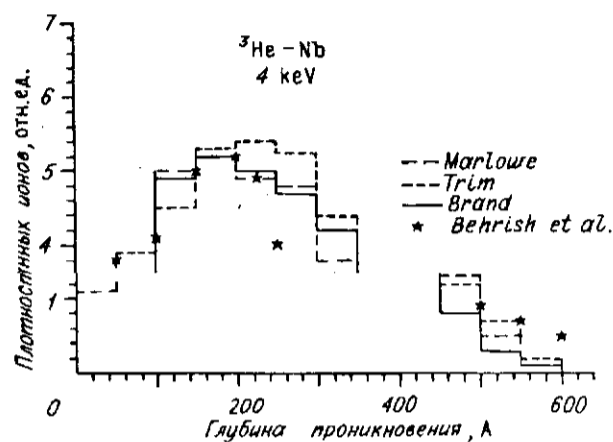
1. Модуль загрузки (З).
2. Управляющий модуль данной версии (У).
3. Модуль источника (И). Предполагается, что плотность распределения частиц, порождаемых источником  $Q_p(r, \Omega, E_p, t)$  в фазовом пространстве координат, направлений, энергий и времени, задается в виде  $Q(r, \Omega, E, t) = Q_k(r)q(\Omega, E, t)$ , причем для функции  $q$  допустимы различные представления через условные плотности (индекс  $p$ , равный здесь  $n, y$  или  $z$ , выше опущен, причем при  $p = z$   $q = q(\Omega, A, E, Z, t)$ ).
4. Геометрический модуль (Г). Каждый из геометрических модулей ПК BRAND служит для решения одной и той же задачи: построение участка траектории частицы между точкой столкновения (либо точкой рождения частицы) и точкой вылета частицы из рассматриваемой геометрической области в заданном направлении  $\Omega$ , а именно, совместно решается уравнение луча, по которому движется частица, и уравнение каждой  $k$ -й поверхности, ограничивающей  $j$ -ю геометрическую область системы:

$$\begin{cases} r = r_0 + l\Omega; \\ g'_k(r) = 0. \end{cases}$$

Результатом работы геометрического модуля является массив значений  $l_j$ , представляющий собой длины отрезков луча  $\Omega$  по пересекаемым геометрическим областям начиная от точки  $r_0$  и до вылета из системы. Для расчетов в геометриях специального вида предназначены быстродействующие специализированные геометрические модули, а универсальный геометрический модуль позволяет собирать практически неограниченную по сложности трехмерную геометрию, получаемую в результате операций пересечения, объединения и дополнения трехмерных тел произвольного размера из широкого набора некоторых «стандартных» тел. Набор стандартных тел включает в себя полупространство, ограниченное плоскостью или поверхностью второго порядка, сферу, цилиндр, конус, параллелепипед, призму, тор и ряд других тел.

5. Модуль регистрации частиц или детектор (Д). Принципы построения геометрических модулей BRAND позволяют в модуле регистрации использовать самые различные виды весовых функций  $\varphi_p$ , например весовые функции, соответствующие оценке утечки из системы, локальной оценке в точку, по поверхности дискового или объемного детектора, двойной локальной оценке, оценке по методу математических ожиданий и другие.

6. Модуль моделирования вектора направления движения частицы после взаимодействия или физический модуль, или модуль столкновений (Ф). Библиотека констант ПК BRAND для нейтронов и фотонов достаточно подробно описана в [2]. Поэтому кратко остановимся лишь на физическом модуле для ионов. Расчет основан на модели парных взаимодействий, и поведение иона определяется рядом последовательных столкновений с атомами аморфной мишени; между столкновениями свободный пробег иона предполагается прямолинейным. На пути каждого свободного пробега энергия частицы уменьша-



ется на величину электронных потерь энергии, а затем после столкновения на так называемые ядерные, или упругие, потери энергии, т. е. на энергию, переданную атому мишени при столкновении. Для сокращения времени счета применена аналитическая схема вычисления угла рассеяния по Бирзаку — Хагмарку. Соотношения для моделирования рассматриваемых процессов подробно описаны в [8] и здесь опускаются.

7. Модуль неаналогового моделирования переноса излучения (Н).

8. Модуль постобработки результатов расчета (О).

Кроме основных частей комплекса BRAND, существуют еще дополнительные возможности: подключение к комплексу программ, позволяющих осуществлять корректировку константной информации; вывод расчетной информации на графопостроитель (плоттер); обработка полученной расчетной информации с учетом экспериментальных данных и другие.

Таким образом, рабочая программа (РП) комплекса BRAND есть

$$\text{РП} = \text{З} + \text{У} + \text{И} + \text{Г} + \text{Д} + \text{Ф} + \text{Н} + \text{О}.$$

В среднем объем скомпилированной версии комплекса для моделирования конкретной физической задачи составляет от 3000 до 8000 фортранных операторов. В BRAND предусмотрена возможность автоматической консервации результатов в процессе расчета с последующим продолжением с момента планового или аварийного останова счета.

Результаты сравнений. Поскольку представляемая версия ПК BRAND отличается от уже существующих версий лишь физическим модулем, то есть уверенность, что описание процесса переноса ионов будет корректным для тех классов задач, в которых приемлемы физические алгоритмы работ [6—8]. Изложенное хорошо иллюстрирует рисунок, на котором для примера приведены сравнения результатов расчетов по BRAND с данными эксперимента и с расчетными данными по программам TRIM и MARLOWE (данные других авторов заимствованы из [6]). Из анализа представленных на рисунке данных можно сделать вывод о работоспособности новой версии ПК BRAND.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Андросенко А. А., Андросенко П. А. Комплекс программ BRAND для расчетов характеристик переноса излучения методом Монте-Карло // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Физика и техника ядерных реакторов.—1985.—Вып. 7.
2. Андросенко П. А. Константный модуль для моделирования методом Монте-Карло переноса нейтронного, первичного и вторичного гамма-излучений // Там же.

3. Andersen H. H., Ziegler J. F. Hydrogen Stopping Powers and Ranges in All Elements.—N.Y.: Pergamon Press, 1977.
4. Ziegler J. F. et al. The Stopping and Range of Ions in Solids.—N.Y.: Pergamon Press, 1985.
5. Андросенко А. А., Андросенко П. А., Полетаев Е. Д. Применение метода Монте-Карло для оценки пространственно-временного распределения энерговклада осколков деления.—Обнинск, 1989.—(Препр. ФЭИ; 1968).
6. Biersack J. P., Haggmark L. G. A Monte-Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets // Nucl. Instrum. & Meth.—1980.—174.—P. 257.
7. Biersack J. P. et al. Rapid computable formulas for the classical binary collision parameters  $\tau$  and  $\theta$  // Radiat. Eff. Lett.—1985.—85.—P. 193.
8. Ziegler J. F., Biersack J. P., Littmark U. Stopping Powers and Ranges of Ions in Matter /Ed. J. F. Ziegler.—N.Y.: Pergamon Press, 1985.—Vol. 1.

Поступила в редакцию 11 ноября 1991 г.

УДК 621.382.323 : 519

П. П. Люмаров

(Новосибирск)

### МОНОТОННЫЕ СПЛАЙНЫ НА АДАПТИВНЫХ СЕТКАХ ТРЕХ ПЕРЕМЕННЫХ ДЛЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ МОП-МОДЕЛЕЙ

Типичными недостатками табличных моделей являются значительные относительные погрешности токов в окрестности пороговых напряжений и трудности в обеспечении монотонной интерполяции. Применение сглаживающих алгоритмов, обеспечивающих монотонность, часто обостряет проблему точности моделей. Построением оригинальных адаптивных сеток и комбинированием монотонной бикубической интерполяции со сглаживающей параболической аппроксимацией обеспечивается значительный прогресс в решении этих двух проблем одновременно.

**Введение.** При переходе к субмикронным размерам элементов МОП СБИС поддержание требуемой точности аналитических моделей становится все более трудной задачей. Поэтому перспективной является разработка моделей, основанных на алгоритмах многомерной интерполяции «экспериментальных» токовых значений, полученных с помощью тестовых транзисторов или программ приборного моделирования. Аргументы модели для программы схемного моделирования делятся на управляющие переменные  $U_D$ ,  $U_B$ ,  $U_G$  (меняются в процессе расчета схемы) и конструктивно-электрофизические параметры, сохраняющиеся в процессе моделирования. Напряжение  $U_D$  (сток — исток) обозначим через  $x$ , напряжение  $U_B$  (подложка — исток) — через  $y$ , напряжение  $U_G$  (затвор — исток) — через  $z$ .  $U_D$  всегда  $> 0$ , поэтому ниже под всей областью управляющих переменных  $R^3$  будет пониматься только ее верхняя половина  $x > 0$ .

Основные проблемы интерполяционных моделей МОП-транзистора — обеспечение монотонности и неотрицательности токового интерполянта и его продолжения на всей области  $R^3$  для сходимости ньютоновских итераций при расчете схем и снижение относительной точности интерполяции при малых токах, т. е. в окрестности границы носителя токовой функции.

Продолжение токового интерполянта, удовлетворяющее условиям неотрицательности, гладкости класса  $C^1$  и монотонности во всей  $R^3$ , в дальнейшем будем называть допустимым.

В [1] использовались сглаживающие параболические сплайны, обеспечивающие монотонность интерполянта при монотонности исходных данных. Основным недостатком этого подхода связан с нарушением условия неотрицательности продолжения токовой функции и неточностью ее аппроксимации в припороговой области затворных напряжений. Вызвано это использованием прямоугольных токовых сеток, не совпадающих с границей носителя функ-