28p-G7-7

デバイスシミュレーションの非線形収束における線形解法の影響[†1]

Dependence of the Nonlinear Convergence on Linear Solvers in Device Simulations

産業技術総合研究所 [1], 半導体理工学研究センター [2]

○越本 浩央 [1], 池上 努 [1], 福田 浩一 [1], 伊藤 智 [1],

松澤 一也 [2], 大倉 康幸 [2], 石川 清志 [2]

AIST[1], STARC[2] ○Hiroo Koshimoto[1], Tsutomu Ikegami[1], Koichi Fukuda[1], Satoshi Itoh[1],

Kazuya Matsuzawa[2], Yasuyuki Ohkura[2], Kiyoshi Ishikawa[2]

Drift-Diffusion モデルとして知られるデバイスシミュレーションでは、電界ポテンシャルに関する Poisson 方程式と電子・正孔の電流連続式を連立させて解くカップル解法が用いられる。これらの方程式には移動度や発生再結合などの非線形な項が含まれるため、その解法には Newton 法が用いられるが、耐圧の解析などではその収束性が問題になることが多い。我々はこの Newton 法の収束性を改善するために、各ステップに含まれる線形解法の精度が収束性に及ぼす影響について調べた。

図 1 に検討に用いたデバイスシミュレーションの概要を示す。左上は解析対象である N^+/P 接合の三次元デバイス構造、グラフは解析によって得られた耐圧カーブである。今回の検証では図 1 で印を付けたブレークダウン手前の点に着目し、線形解法の選択に対する Newton 法の反復回数の変化を調べた。線形解法には、反復法 (BiCGStab 法) と直接法 (閾値付き部分ピボット選択を行なう Multifrontal 法) を採用した。結果を表 1 に示す。

表 1 より、Newton 法の収束が線形解法の選択に大きく影響されることがわかる。まずデバイスシミュレーションに現われる係数行列は非常に悪条件であるため、反復法では高精度な前処理を用いないと、線形解法そのものが収束しない。また係数行列やその線形解は値のダイナミックレンジが非常に広いため、一般に安定して解が求められる直接法でも、その精度に注意する必要があることが分かった。解析対象となるデバイス構造が複雑化するにつれ、現われる係数行列は更に大規模かつ悪条件となり、こうした精度の問題はより顕著となる。パワーデバイスで必要と言われる四倍精度演算においては、こうした線形解法の選択が重要になると考えられる。

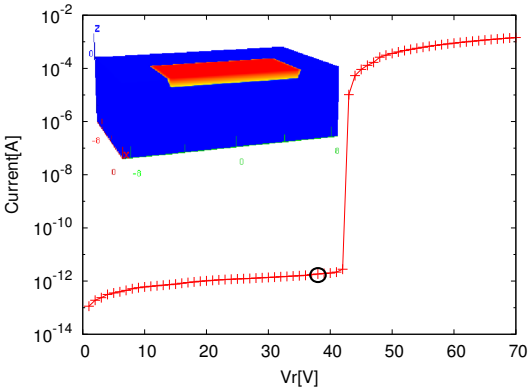

図 1: 検討に用いたデバイスシミュレーションの概要

表 1: 線形解法の手法と Newton 法の反復回数

線形解法の手法	反復回数
反復法	unconverged
前処理付き反復法[a]	unconverged
直接法 (ピボット閾値=0e00)[b]	78
直接法 (ピボット閾値=1e-02)[c]	76
直接法 (ピボット閾値=1e00)[d]	unconverged

[a]不完全 LU 前処理を使用。
[b]部分ピボット選択を行なわない。
[c]閾値倍以上の要素を対角とする。
[d]対角を必ず最大とする。

[†1]本発表 (の一部) は産業技術総合研究所と半導体理工学研究センターとの共同研究で実施した成果に基づくものです。

© 2013 年　応用物理学会