

3次元モンテカルロデバイスシミュレーションにおける 電界分布数値計算の機械学習による高速化

Acceleration of Numerical Calculation of Electric Field Distribution in 3D Monte Carlo Device Simulation by Machine Learning



阪大院工 ^{○(M1C)}倉元 俊亮, 森 伸也

Osaka Univ. ^{○(M1C)} Shunsuke Kuramoto, Nobuya Mori

E-mail: kuramoto@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

◆研究背景および目的 3次元モンテカルロ(MC)デバイスシミュレーションでは、デバイス内のポテンシャル分布を得るために、与えられた電子密度分布のもとでポアソン方程式をタイムステップごとに解く必要があり、これが計算のボトルネックとなる。そこで、本研究では機械学習を用いることで、ポアソン方程式の数値計算を高速化することを目的とした。

◆機械学習の概要 本研究では、機械学習の手法として Convolution Neural Network (CNN)を用いた。図1に示したように、本研究では、ポアソン方程式を、境界条件のみよるラプラス方程式とキャリア密度分布のみよるゼロ境界条件のポアソン方程式とに分離した。そして、境界条件は時間変化しないことから、ゼロ境界条件のポアソン方程式のみに関して機械学習を行った。また、MCシミュレーションには電界分布のみが必要なことから、ポテンシャル分布ではなく、電界分布を学習対象とした。すなわち、CNNの入力データを電子密度分布、出力データを電界分布として学習を行った。学習するデータセットは、ランダムに生成した電子密度分布と、その電子密度分布から有限差分法(FDM)で求めた電界分布のセットから作成した。電子密度分布は、電子をデバイス内のランダムな位置に生成し、セル内粒子法を用いてメッシュ化を行うことで作成した。

◆計算結果と考察 MOSトランジスタを模した構造において、ある電子密度分布に関して、学習を行ったCNNモデルが出力した電界分布を図2に示す。比較のため、有限差分法で求めた電界分布を図3に示す。電界が大きく変化している分布を再現できることがわかる。

$$\nabla^2 u = -\frac{\rho}{\epsilon} + \text{BC}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{PE } \nabla^2 u_p = -\frac{\rho}{\epsilon} + \text{zero BC} \\ \text{LE } \nabla^2 u_l = 0 + \text{BC} \end{array} \right.$$

Figure 1: Poisson equation is split into a term that depends only on the boundary conditions and a term that depends only on the carrier density distribution.

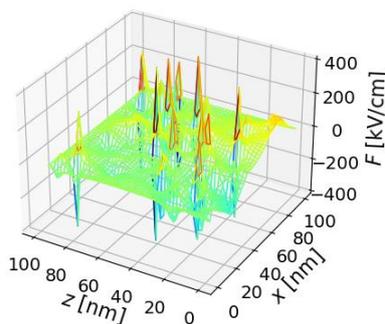


Figure 2: Distribution of electric field in a xz plane estimated with a CNN model.

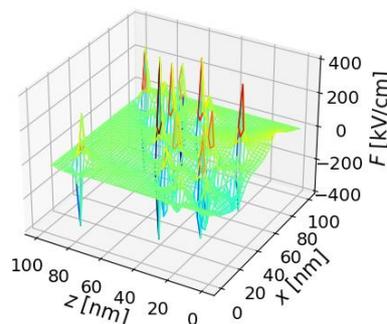


Figure 3 Distribution of electric field in a xz plane calculated with a FDM method.