

# Matrix Exponential 法を用いた過渡解析の時間刻み制御と ニュートン反復回数の削減

## Time Step Control of Transient Analysis and Reduction of Newton Iteration Number by the Matrix Exponential Method

亀井 達也† 熊代 成孝 小林 和淑 廣木 彰 古田 潤

†京都工芸繊維大学

Tatsuya KAMEI† Shigetaka KUMASHIRO Kazutoshi KOBAYASHI Akira HIROKI

Jun FURUTA

†Kyoto Institute of Technology

### 1 はじめに

東日本大震災以降、従来にも増して消費電力の削減が求められている。自動車や家庭用の電化製品などに用いられるパワーデバイスの性能向上は、省エネルギー化には必須である。

半導体デバイスの設計・開発において、開発コストの低減と迅速な市場投入を実現するために、シミュレーション技術が重要である。デバイスシミュレーションは電流特性だけでなく、デバイス内部のキャリア分布やポテンシャル分布なども解析できる。そのため、複雑なデバイス構造が提案されているパワーデバイスの設計において、デバイスシミュレーションが多用される。

パワーデバイスのシミュレーションにおいて、計算時間が問題となっている。特に過渡解析では、比較的遅めの応答をするため多くの時間刻みを費やすことが原因である。解析の精度を保ちつつ、時間刻み幅を効率よく制御することが計算時間を短縮するために重要である。本研究の目的は、時定数を制御することでデバイスの主要な時間応答を近似し、効率良い時間刻み制御とニュートン法の反復回数の削減を行うことである。

### 2 主要応答時定数の計算

デバイス構造全体の主要な応答を再現する時定数をここでは主要応答時定数と呼ぶ。主要応答時定数を計算するために、図 1 に示すようにポアソン方程式と電流連続方程式の形式解を導出する。行列指数( $\exp(-C^{-1}G(x_0)t)$ )を用いることで、状

態方程式の形式解を得る。

行列  $C^{-1}G(x_0)t$  は状態変数を含むため、行列指数を実際に計算することは困難である。行列指数関数を近似的に扱う方法として、Matrix Exponential (Matex)法[1]がある。Matex 法は大規模線形回路の解を高速に求める手法として提案された。行列指数関数を主要応答時定数で近似することで任意の時刻の近似解が求まる。本研究では、Matex 法をデバイスシミュレーションに適用し、 $C^{-1}G$  をスカラー近似する。デバイス構造全体の主要応答時定数は  $C^{-1}G$  の最小固有値に対応し、逆行列である  $G^{-1}C$  の最大固有値に等しい。 $G^{-1}C$  に Arnoldi 法[1]を適用し、得られた Hessenberg 行列の最大固有値を求め、その逆数をとることでデバイス構造全体の主要応答時定数を求める。

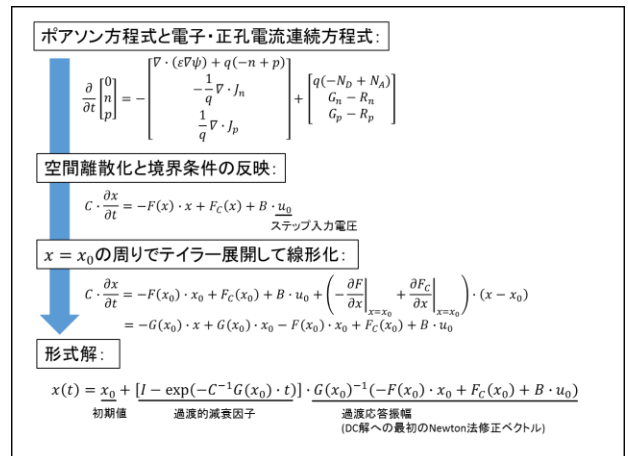


図 1. 線形化されたポアソン方程式と電流連続方程式の形式解の導出

### 3 主要応答時定数を用いた計算時間短縮の手法

#### 3.1 時間刻み幅の制御

従来の過渡解析の局所打ち切り誤差(LTE:Local Truncation Error)の指標を示す。微分方程式

$$\frac{\partial x(t)}{\partial t} = f(x(t)) \quad (1)$$

を後退オイラー法により離散化し、次式を得る。

$$\frac{x_{BE}(t_0 + \Delta t) - x_{BE}(t_0)}{\Delta t} = f(x_{BE}(t_0 + \Delta t)) \quad (2)$$

正確な解を  $t = t_0 + \Delta t$  でのテイラー展開とし、式(2)との差から LTE を計算する。

$$\begin{aligned} LTE &= |x_{BE}(t_0) - x(t_0)| \\ &= \left| -\frac{1}{2!} \ddot{x}(t_0 + \Delta t) \cdot (\Delta t)^2 + O((\Delta t)^3) \right| \end{aligned} \quad (3)$$

2 次の項が主な誤差成分であるとして高次項を省略し、式(4)に示す2次微係数型誤差指標が得られる。

$$LTE_{2nd\ order} = \left| \frac{1}{2!} \ddot{x}(t_0) \cdot (\Delta t)^2 \right| \quad (4)$$

この値が設定した LTE 値を超えないように時間刻み幅を決定する[2]。しかし、3次以上の高次項を省略しているため、誤差を過大評価している。過大評価した誤差以内に収めるために、時間刻み幅は必要以上に小さくとして計算される。

提案手法では、主要応答時定数を求めているため解を指数関数で近似することができる。主要応答時定数( $\tau_c$ )を用いて式(3)を指数関数でまとめると、

$$\begin{aligned} x(t) &= x(t_0) + \\ & f(x(t_0)) \cdot \tau_c \cdot \left[ 1 - \exp\left(-\frac{t - t_0}{\tau_c}\right) \right] \end{aligned} \quad (5)$$

と表すことができる。式(5)を式(3)に代入することで、次式の指数関数型局所打ち切り誤差指標が得られる[3][4]。

$$\begin{aligned} LTE_{exp} &= \left| \dot{x}(t_0) \cdot \tau_c \right. \\ & \left. \cdot \left[ 1 - \left( 1 + \frac{\Delta t}{\tau_c} \right) \exp\left(\frac{\Delta t}{\tau_c}\right) \right] \right| \end{aligned} \quad (6)$$

高次項を省略していないため、従来よりも正確な指標であり、時間刻み幅を大きくとることができる。

#### 3.2 ニュートン法の初期値

本研究で使用するデバイスシミュレータは、ポアソン方程式、電子電流連続方程式、正孔電流連続方程式を解く数値計算法としてニュートン法を用いる。ニュートン法は方程式の求解に用いられる反復法であり、解に近い値を初期値とすることで、少ない反復回数で解を得られることが知られている。過渡解析において次の時刻での解を求める際に、従来の手法ではニュートン法の初期値に前の時刻での解が与えられる。本研究では、主要応答時定数により任意の時刻での近似解

$$\begin{aligned} x(t) &\cong x_0 + \left[ 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_c}\right) \right] \\ & \cdot G(x_0)^{-1}(-F(x_0) \cdot x_0 + F_C(x_0) + B \cdot u_0) \end{aligned} \quad (7)$$

が得られるため、解に近い初期値を与えることができる。過渡応答振幅部分は Arnoldi 法の初期ベクトルとして計算しているため、計算のオーバーヘッドは $[1 - \exp(-t/\tau_c)]$ の部分のみである。

### 4 2次元パワーMOSFETの解析による提案する誤差指標の性能評価

#### 4.1 ターンオン動作

提案した指数関数型局所打ち切り誤差指標についての性能を評価するため、図2に示すパワーDMOSFET[5]を用いてゲートにステップ電圧5Vを印加したあとの過渡解析を行った。メッシュ数を400、LTEの許容値を1~50%としてドレイン電流と計算時間を解析した。プログラムはExcel VBAで実装し、Timer関数を用いて計算時間を測定した。

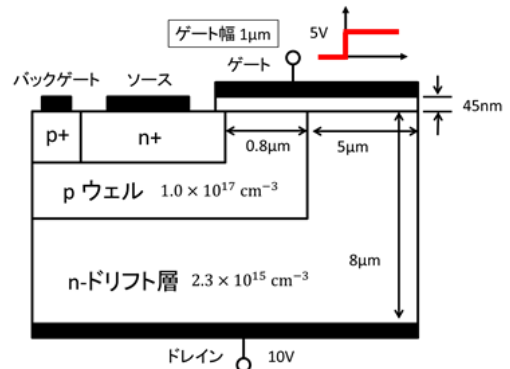


図2. 解析した2次元パワーDMOSFET構造

縦軸を過渡解析時刻、横軸を時間刻み数とした過渡解析時刻の推移を図3に示す。指数関数型局所打ち切り誤差指標を用いた場合（提案手法）と2次微係数型誤差指標を用いた場合（従来手法）のどちらの方法においても、LTEが小さくなるにつれて時間刻み数は多くなる。LTEが小さい場合は高精度に解析するため、時間刻み幅が小さく設定されるためである。提案手法は、従来手法に比べて少ない時間刻み数で解析できている。従来手法はテイラー展開の高次項を無視しており、テイラー展開項同士の打ち消しあいの効果が考慮されておらず、LTEを過大評価している。そのため、時間刻みを細かくとって計算する必要がある。しかし、提案手法は主要応答時定数で近似されるデバイスの主要応答部分に着目しているため、それより短い時間の応答はフィルタリングされる。時間刻み数が時定数を超えると時間刻み幅を桁違いに大きくとって解析できる。

LTEを1~50%に設定した場合の従来手法と提案手法での計算時間の局所打ち切り誤差依存性を図4に示す。提案手法は各時間刻みあたりの計算時間は39%増加する。しかし、提案手法における全計算時間は、従来手法における全計算時間の33%に低減する。提案手法は時間刻み数が従来の24%に減少したためである。

提案手法による過渡解析の精度を調べるため、提案手法を用いて解析したドレイン電流値を厳密解と比較した。厳密解は、従来手法を用いてLTEを0.1%として高精度に解析したものである。提案手法と厳密解のドレイン電流値の比較を図5に示す。5ps以下でドレイン電流の差が大きいが、ステップ関数的にゲート電圧を変化させるといふ非現実的な状況を解析しているためである。このような短い応答時間の精度は重要ではない。5ps以降の時間刻み幅を細かく刻んで解析している部分は、電流が立ち上がる時間に対応している。解析時刻が主要応答時定数の1/5程度(20ps)に到達すると、ドレイン電流の誤差は数%以下になる。

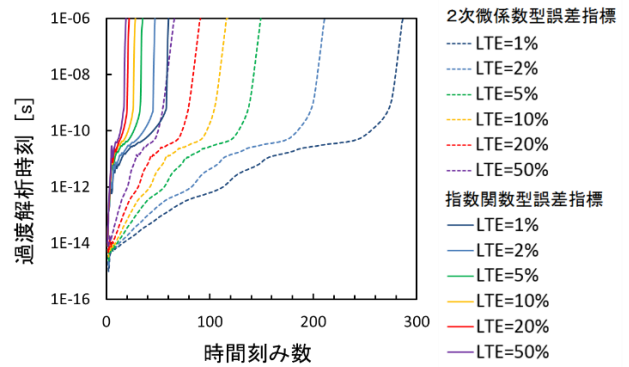


図3. 従来手法と提案手法における時間刻み数に対する過渡解析時刻

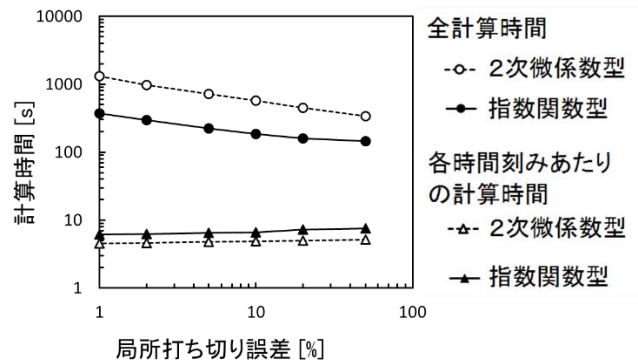


図4.2 次微係数型と指数関数型の誤差指標における計算時間の局所打ち切り誤差(LTE)依存性

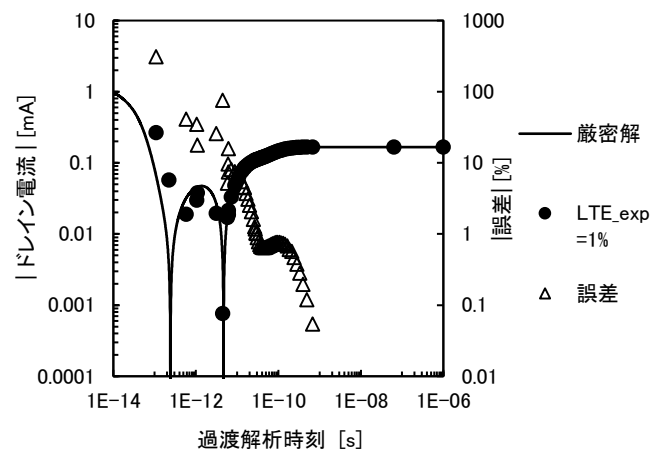


図5. 指数関数型の局所打ち切り誤差指標と厳密解のドレイン電流比較

## 4.2 ターンオフ動作

図 2 に示す縦型の Si-DMOSFET のターンオフ動作の解析を行った。ドレイン電圧を 10V とし、ゲート電圧をステップ関数的に 5V から 0V に変化させた後の過渡解析をした。メッシュ数を 400、LTE の許容値を 1~50% としてドレイン電流と計算時間を解析した。プログラムは Visual Basic で実装し、Windows リソースキットの `timeit` コマンドを用いて計算時間を測定した。

縦軸を過渡解析時刻、横軸を時間刻み数とした過渡解析時刻の推移を図 6 に示す。ターンオン動作の場合と同様に、指数関数型の局所打ち切り誤差指標（提案手法）を用いた場合は、2 次微係数型の局所打ち切り誤差指標（従来手法）を用いた場合に比べて、初期時間刻みを大きくとることができる。提案手法では主要応答時定数より短い時間の応答はフィルタリングされるためである。100ps 以降では、提案手法は従来手法に比べて時間刻み数に対する過渡解析時間の傾きが大きい。提案手法では、電流が収束している 100ps 以降で桁違いに時間刻み幅を大きくとることができるためである。

LTE を 1~50% に設定した場合の従来手法と提案手法での計算時間の比較を図 7 に示す。提案手法は各時間刻みあたりの計算時間が 42% 増加する。しかし、時間刻み数が従来手法の 21% に減少しているため、全計算時間は従来手法の 30% に短縮できる。

提案手法による過渡解析の精度を調べるため、ドレイン電流値を厳密解と比較した。厳密解は、従来手法を用いて LTE を 0.1% として高精度に解析したものである。提案手法と厳密解のドレイン電流値の比較を図 8 に、ドレイン電流の差を図 9 に示す。1ps 以下でドレイン電流の差が大きいが、ステップ関数的にゲート電圧を変化させるといふ非現実的な状況を解析しているためである。1ps 以降では、ゲート電圧が 0V になり、溜まっていた電荷が放出されて電流が 0A に収束していく様子が再現できている。主要応答時定数の 1/5 以降の過渡解析時刻におけるドレイン電流の差は平均して  $0.4\mu\text{A}$  であり、高精度に解析できている。Si-DMOSFET のターンオフ動作についても、提案する指数関数型の誤差指標が有効である。

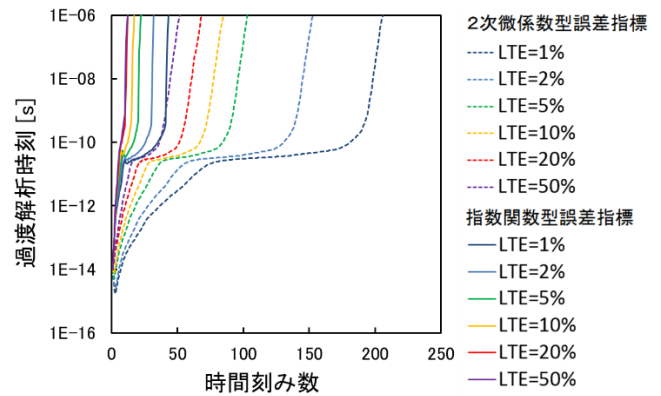


図 6. 従来手法と提案手法における時間刻み数に対する過渡解析時刻

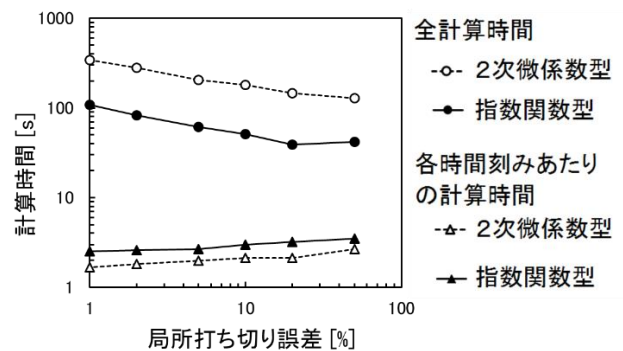


図 7.2 次微係数型と指数関数型の誤差指標における計算時間の局所打ち切り誤差 (LTE) 依存性

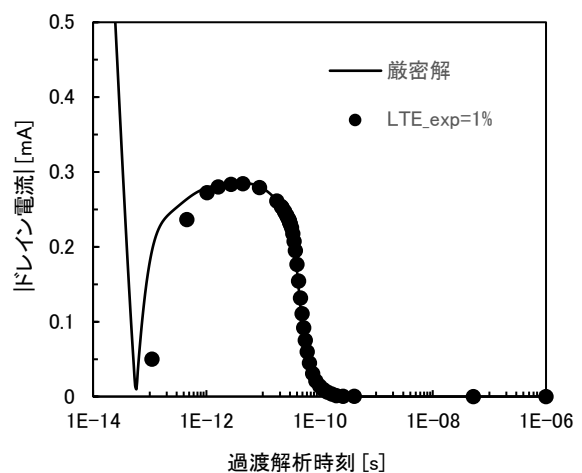


図 8. 指数関数型の局所打ち切り誤差指標と厳密解のドレイン電流比較

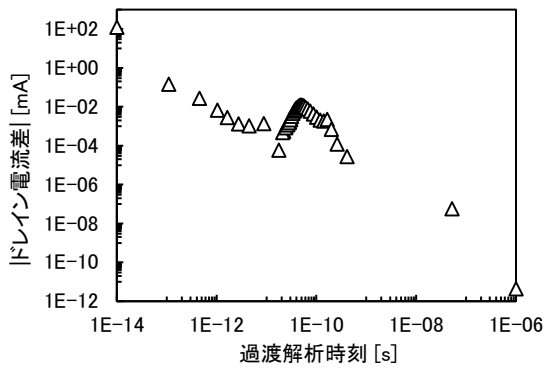


図 9. 指数関数型の局所打ち切り誤差指標と厳密解のドレイン電流差

### 5 ニュートン法の初期値に近似解を与えた場合の反復回数

図 2 に示す Si-DMOSFET のターンオン動作において、各時間刻みの計算に要する反復回数を解析した。指数関数型の誤差指標による解析において、ニュートン法の初期値として式(7)の近似解を与える場合と近似解を与えない場合を比較した。LTE の許容値を 1%とした場合の電流と時定数の時間変化を図 10 に示す。電流と時定数は絶対値を取っており、白抜きのプロットは時定数が負であることを表す。図 11 の(a)に各時間刻みの反復回数を、(b)に近似解を用いない場合と用いた場合の反復回数の差を示す。10fs では、近似解を用いた場合が用いない場合と比べて反復回数が増えている。主要応答時定数では、高速な応答部分の特性を精度良く近似できないためである。1~300ps の範囲では、近似解を用いた場合が用いない場合と比べて反復回数が減少している。電流が立ち上がる部分に対応しており、主要応答時定数を用いて近似することで主要な応答部分での適切な初期値が与えられたためである。

反復回数をもっとも減少した 33ps での解の計算における、反復回数と相対誤差の関係を図 12 に示す。この相対誤差はニュートン反復における解の候補と次の解の候補との相対誤差であり、本研究のデバイスシミュレータでは相対誤差が  $10^{-10}$  以下になれば収束したと判断する。近似解を与えた場合の反復回数 1 回目の相対誤差は、近似解を与えない場合と比べて 1/300 程度であり、反復回数を重ねるごとに指数関数的に減少する。主要応答時定数を用いた近似により、適切な初期値が与

えられていることが確認できた。

ニュートン法の初期値に近似解を用いることで、近似解を用いない場合の解析に比べて反復回数を 25%削減することができ、計算時間は 21%減少した。

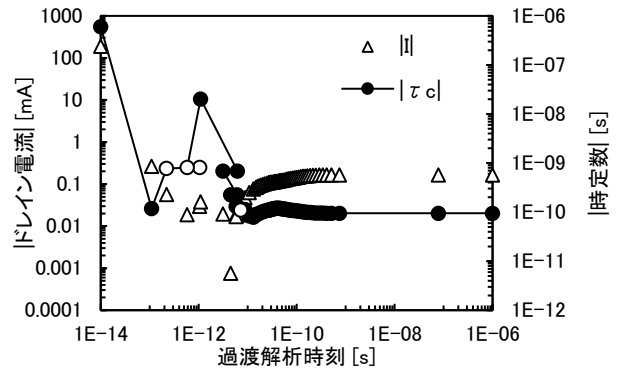
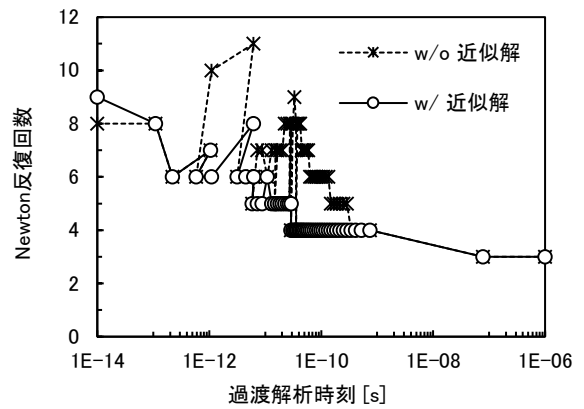
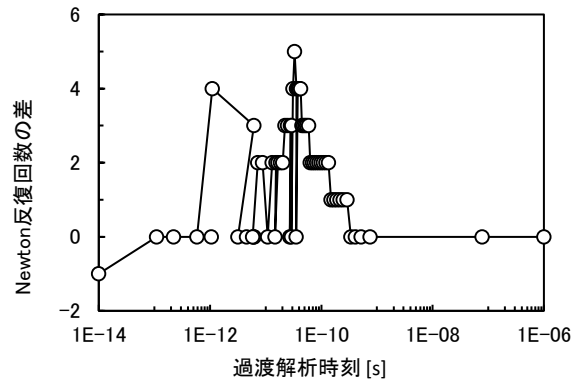


図 10. ドレイン電流の絶対値と時定数の絶対値の時間変化



(a)



(b)

図 11. 初期値に近似解を用いない場合と用いた場合の各時間刻みの計算に要する(a)反復回数 (b)反復回数の差

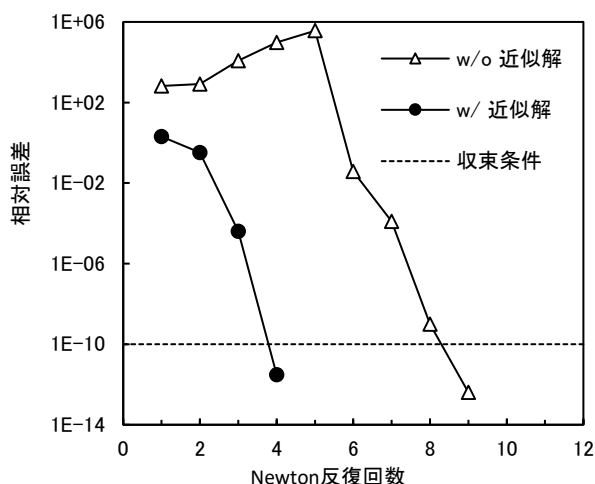


図 12. 33ps の計算における近似解を用いない場合と用いた場合の反復回数ごとの相対誤差

## 6 結論

Matrix Exponential 法を用いてデバイス構造全体の主要応答時定数を求めることで、過渡解析の時間刻み制御のための正確な誤差指標を導出した。提案する指数関数型の誤差指標を 2 次元 DMOSFET に適用した。ターンオン動作において、ドレイン電流の誤差は数%以下で、計算時間を従来の 33%に短縮できる。ターンオフ動作においては、ドレイン電流の差の平均は  $0.4\mu\text{A}$  であり、計算時間を従来の 30%に短縮できる。ニュートン法の初期値に次時刻の近似解を与えることで、指数関数型誤差指標で近似解を用いない場合と比較して反復回数を 25%削減でき、計算時間は 21%減少した。

## 参考文献

- [1] H. Zhuang, et al., "MATEX: A Distributed Framework for Transient Simulation of Power Distribution Networks," 51st ACM/EDAC/IEEE Design Automation Conference, pp.1-6, June 2014
- [2] 戸川隼人, "微分方程式の数値計算," 4 章及び 11 章, オーム社, 東京, 1981.
- [3] S. Kumashiro, et al., "An Accurate Metric to Control Time Step of Transient Device Simulation by Matrix Exponential Method," International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, pp. 37-40, September 2017, Kamakura, Japan.

- [4] 熊代成孝, 亀井達也, 廣木彰, 小林和淑, "行列指数法によるデバイス過渡シミュレーションの正確な時間刻み指標," シリコン材料・デバイス(SDM)研究会, vol. 117, no. SDM2017-70, pp. 47-52, 2017/11, 東京.
- [5] D. Fuoss, et al., "Vertical DMOS power field-effect transistors optimized for high speed operation," IEDM, vol.28, pp.250-253, 13-15 December 1982