

半導体デバイスシミュレータの高速化：高速行列解放法B.C.G法の応用

中村, 光利 / Nakamura, Mitsutoshi / 和田, 哲典 / 檀, 良
/ Dang, Ryo / Wada, Tetsunori

(出版者 / Publisher)

法政大学工学部

(雑誌名 / Journal or Publication Title)

法政大学工学部研究集報 / 法政大学工学部研究集報

(巻 / Volume)

22

(開始ページ / Start Page)

37

(終了ページ / End Page)

53

(発行年 / Year)

1986-03

(URL)

<https://doi.org/10.15002/00004054>

半導体デバイスシミュレータの高速化

——高速行列解放法 B.C.G 法の応用——

中 村 光 利・和 田 哲 典・檀 良

A Fast Matrix Solver and its Use in a 2-Dimensional Device Simulator

Mitsutoshi NAKAMURA*, Tetsunori WADA** and Ryo DANG*

Abstract

A matrix solver for a linear system of equations, $Ax=b$, is developed base on the following relation

$$L^{-1} A U^{-1} (Ux) = L^{-1} b$$

which essentially is a modification of the ILUBCG method.

The solver is implemented in a 2-dimensional MOS-device simulator and proves to boost its computing speed up 70%.

§1. 序 論

デバイスシミュレータ¹⁾について変数を電位と擬フェルミレベルにとると解くべき連立方程式は対称行列になり高速な行列解放法 ICCG²⁾法などがあるが、指数部分の小さい計算機では、指数項自体を変数としているので簡単にオーバーフローを起こしてしまう。

このオーバーフローを起こさないためには変数を電位とキャリア密度に取れば良いが、図1のマトリックスは非対称なものになってしまう。この非対称行列を解く解法には修正 ICCG法³⁾などがあるが、安定性などの問題がある。

今回、二次元2キャリアデバイスシミュレータの変数を電位とキャリア密度に変換する際に生ずる非対称行列の解法問題を、比較的高速で十分安定であると言われている Bi-conjugate Gradient Method (以下では B.C.G 法⁴⁾とする)を改良した TOPBCG 法を用いた。実際の使用条件においてシミュレータの約2倍の高速化を達成したので報告する。

* 電気工学科

** 佛東芝 LSI 超研究所

§2. B.C.G 法の改良 —TOPBCG 法—

マトリックスの数値解法には大きく分けて直接法と反復法がある。デバイスシミュレータで生ずるマトリックスでは次元が大きいためメモリを多く必要とする直接法よりは反復法の方が望ましく、一般的に反復法の方が多く採用されている。

非対称行列の反復解法には MFICCG 法, CR 法, BCG 法, CGS 法⁶⁾などがある。

それらの中で比較的性能が良いとされているのは BCG 法である。そこで、一般的に評価の高い解法 B.C.G を採用した。

非対称行列用の解法 B.C.G 法にはオリジナルな解法の他に、前処理を行った解法がある。これは元のマトリックスを不完全 LU 分解した行列 L と U を用いる方法で、一つはその行列の逆行列を方程式の両辺に左から掛けたもの

$$(LU)^{-1} Ax = (LU)^{-1} b \quad (1)$$

を解く解法 (ILUBCG) である。

また、これらは不完全 LU 分解した時に生ずる fill-in をどこまで考慮するかで分類され fill-in を考慮しない (1, 1), fill-in を内側に一本考慮する (1, 2) というように示される。したがって (1, 1) と (1, 2) では (1, 2) の方が不完全 LU 分解した行列は元のマトリックスに近い。

ところで、解くべきマトリックスを単位行列に近づける方法には元のマトリックスに不完全 LU 分解した行列 L と U を掛ける

$$L^{-1} AU^{-1} (Ux) = L^{-1} b \quad (2)$$

という方法が考えられる。しかし、この方法では解くべき行列 $L^{-1} AU^{-1}$ が単位行列に近く、さらに UX を解としているのでデバイスシミュレータのように解の値が桁以上のレンジに広がるような場合に有効であると考えられる。われわれは式 (2) に基づく計算方法を開発した。ただし、 LU 分解は (1, 2) を用いた。以下これを便宜上 TOPBCG 法と呼ぶことにする。なお、とが入れ変わった場合、収束性が悪いという指摘がある⁷⁾。

今回はこの TOPBCG 法を同系統のオリジナル BCG 法, (1) の方程式システムを用いた ILUBCG (1, 1), ILUBCG (1, 2) と比較した。

一般に CG 系行列解法では解くべきマトリックスが単位行列に近い方が収束が早い。

したがって ILUBCG (1, 2) と TOPBCG 法が早いのではないかと予想される。くわしい B.C.G 法アルゴリズムは付録に示した。

次に、テストマトリックスにおける各 BCG 法の性能比較を示す。テスト内容は、

1. 100%非対称の時の性能
2. 非対称度に対する強さ
3. 対角優位性

の3つである。

Composition of solved matrix

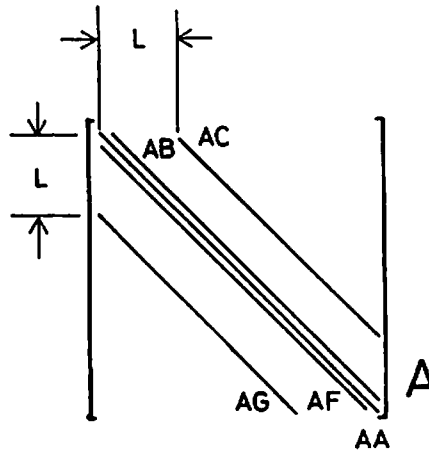


図1 性能比較に用いたテストマトリックスデバイスシミュレータ内のマトリックス想定し、それと同様なマトリックスを乱数を用いて作りだした。

§3. テストマトリックスに対する種々な BCG 法の性能比較

図1は性能比較に用いたテストマトリックスである。これは五点差分することによって生ずる

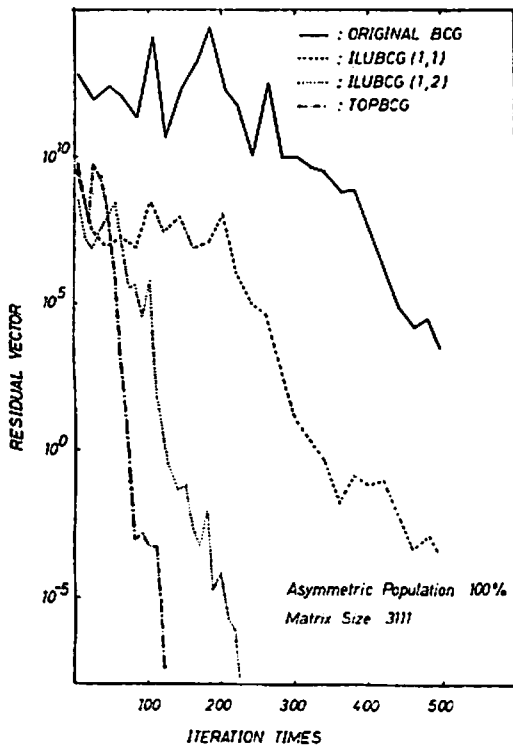


図2 非対称度100%でマトリックスサイズ3111*3111のテストマトリックスを解いた時の収束状況

デバイスシミュレータ内のマトリックスを想定したもので、マトリックスコンディションはほとんどシミュレータ内のものと等価である。

定数ベクトルは乱数による解ベクトルをそのマトリックスに掛けることによって作りだした。

図2は非対称度100%、マトリックスサイズ3111*3111のテストマトリックスを解いた時の各BCG法の収束状況を示したものである。オリジナルBCG法は500回反復しても十分収束しておらず、実用上十分なスピードを持っていないことがわかる。

ILUBCG (1, 1) と ILUBCG (1, 2) を比べると、ILUBCG (1, 2) の方が早く収束している。これよりやはり fill-in を考慮した方が早く収束する事がわかる。また ILUBCG (1, 2) と TOPBCG を比較すると TOPBCG の方が

早く収束している。

したがって、今後は比較的早く収束した ILUBCG (1, 2) と TOPBCG について述べる。

非対称度による ILUBCG (1, 2) と TOPBCG の比較

図3は、マトリックスサイズ 3111 * 3111 で、非対称度100%の場合(a)と50%の場合(b)のマトリックスにおける ILUBCG (1, 2) と TOPBCG の収束状況を示したものである。

非対称度50%, 100%のどちらの場合でも、TOPBCG の方が残差ベクトルの初期値 r_0 が大きい
が停滞期が短く、その後急速に収束している。これよりマトリックスの非対称度によらず TOP-
BCG の方が早く収束する事がわかる。

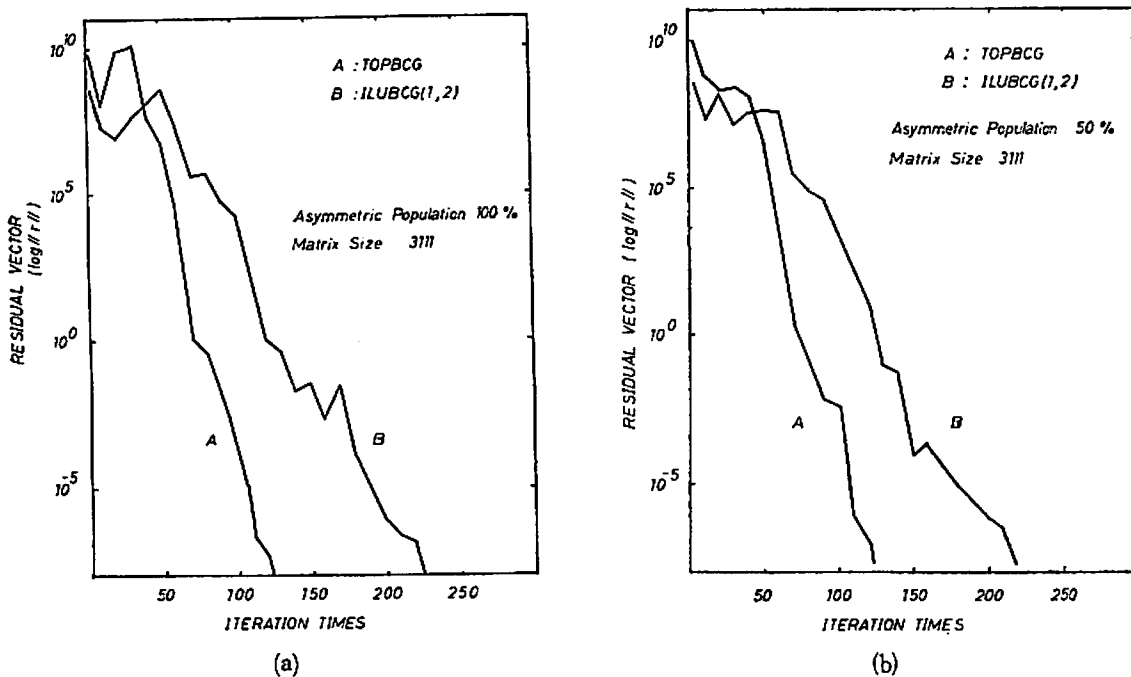


図3 非対称度による ILUBCG (1, 2) と TOPBCG の収束状況
(a)が100%非対称, (b)が50%非対称の場合である。

対角要素が強い場合

図4はマトリックスサイズ 3111 * 3111 の非対称度100%で対角要素を約三倍強くした時 n_0 収束状況を示したものである。ILUBCG (1, 2), TOPBCG 共に、log スケールに対して線形に残差ベクトルが減り安定に収束している。TOPBCG は勾配が大きく、僅か9回の反復回数で収束している。

したがって、デバイスシミュレータで何らかの方法でマトリックスの対角要素を強くすることができれば計算時間が短縮できると考えられる。

対角要素が弱い場合

図5は逆に対角要素を三倍弱くした時の収束状況を示したものである。この場合、ILUBCG (1, 2), TOPBCG とともに振動してしまい収束しないが、振動する領域のオーダーがかなり違っている。

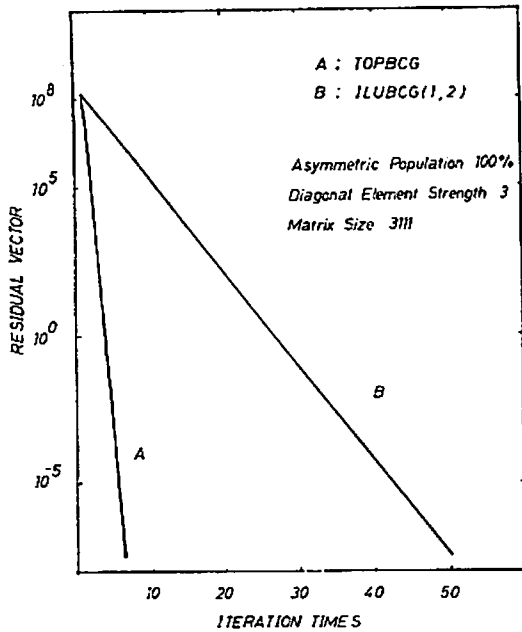


図4 対角要素が非対角要素に対して強い場合の収束状況

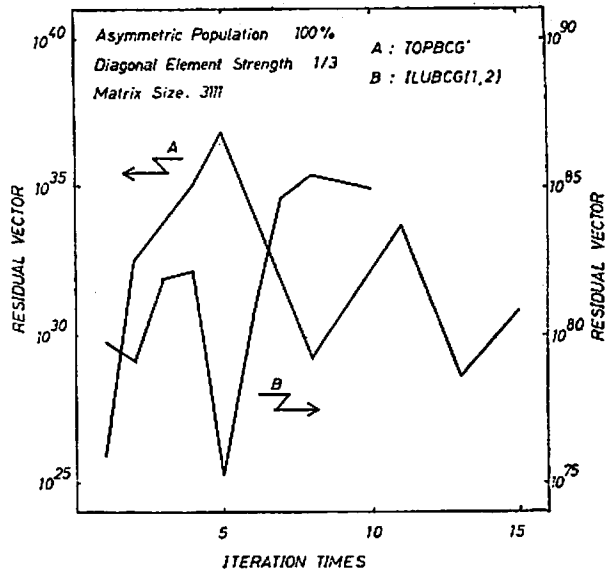
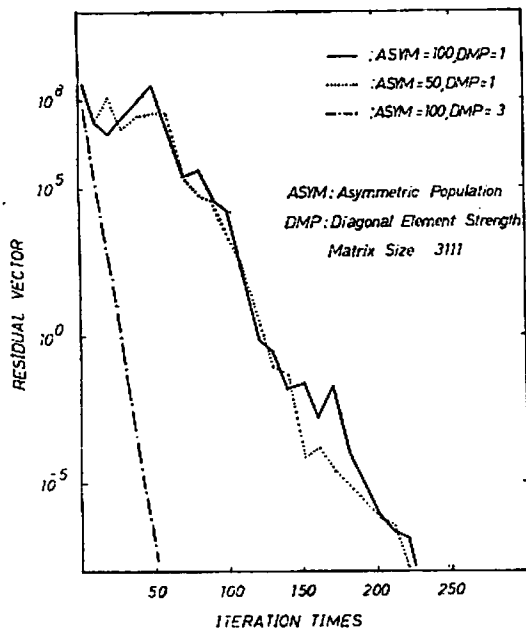


図5 対角要素が非対角要素に対して弱い場合の収束状況

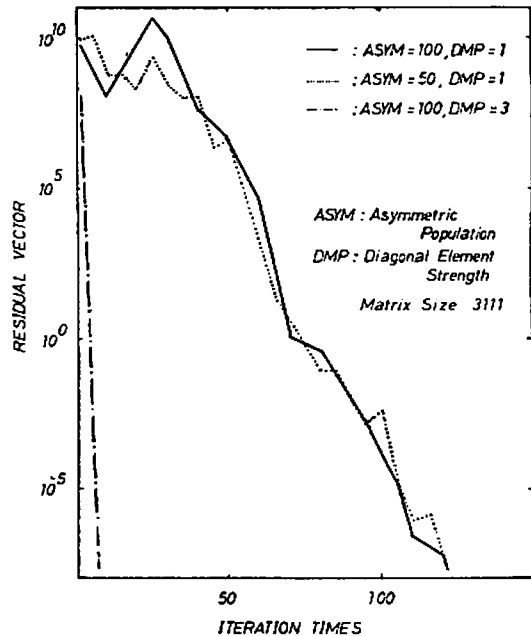
一般に、変数 ψ, n, p にした場合、空乏層内では対角要素が弱くなる。したがって素子内の空乏層が広範囲に広がっている動作点をシミュレーションする場合は、解を求めずらいであろうと考えられる。

種々なマトリクス条件における TOPBCG と ILUBCG (1, 2) の比較

今までのマトリクスコンデションについて、TOPBCG と ILUBCG (1, 2) の各々の手法についてまとめたのが図6である。ここで、対角要素が弱い場合は収束しなかったもので示していな



(a)



(b)

図6 各マトリクス条件における ILUBCG (1, 2) の収束状況 TOPBCG との収束状況(b)

い。

TOPBCG と ILUBCG (1, 2) の両方ともマトリックスの非対称度にはよらずほとんど同様に収束している。また対角要素を非対角要素より強くすると TOPBCG 方法では約12倍, ILUBCG (1, 2) では約4倍早く収束する。

以上のことをまとめると、テストマトリックスにおいて BCG 法は

- 1) 収束の速さは、非対称度には無関係である。
- 2) 対角要素を強くすると高速かつ安定に収束する。
- 3) 対角要素が弱くなると収束しない。
- 4) TOPBCG 法と ILUBCG (1, 2) では TOPBCG 法の方が約二倍早く収束する。

とすることが言える。

次に、この TOPBCG と ILUBCG (1, 2) を実際にデバイスシミュレータに組みこんだ時の収束状態を示す。

デバイスシミュレータにおける TOPBCG と ILUBCG (1, 2) の比較

図7は(a)が動作点 $V_D=3.0\text{ V}$, $V_G=1.5\text{ V}$, (b)が $V_D=3.0\text{ V}$, $V_G=3.0\text{ V}$ での ILUBCG (1, 2) と TOPBCG の収束状況を示したものであり、差分格子点数(マトリックスサイズ)は 2009×2009 である。

両動作点で ILUBCG (1, 2) は緩やかに残差ベクトルが減ってゆく。一方、TOPBCG 法では一度残差ベクトルが増加するが、その後急速に減ってゆく。

またどちらの解法も飽和領域と線形領域における収束性の変化は見られない。

ILUBCG (1, 2), TOPBCG を比較すると、デバイスシミュレータで生ずるマトリックスにお

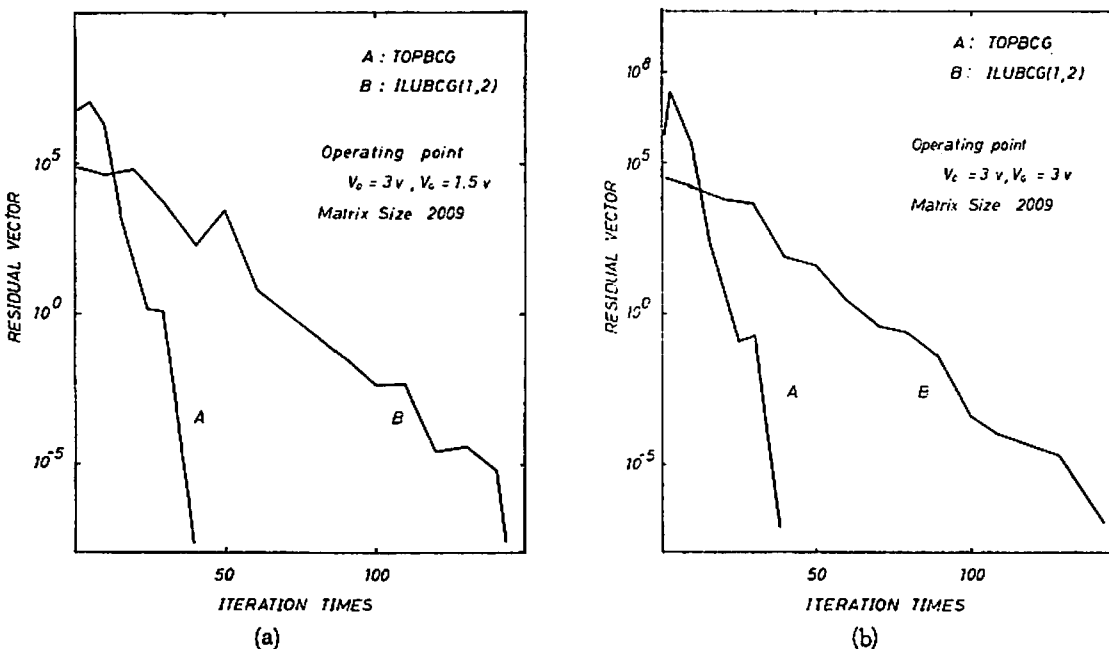


図7 デバイスシミュレータにおける ILUBCG (1, 2) と TOPBCG の収束状況

いてもやはり TOPBCG の方が約3倍早い。したがって、実用上十分なスピードを持っているのは TOPBCG 法であると言える。

§4. 変数を電位と擬フェルミレベルにした時と電位とキャリア密度にした場合での電流電圧特性の比較

(1)節で述べた ILUBCG (1, 2) と TOPBCG の二つの行列解法で変数を電位とキャリア密度としたデバイスシミュレータによる電流電圧特性と、変数を電位と擬フェルミレベルにしたデバイスシミュレータの電流電圧特性を比較した。ここで、変数が電位と擬フェルミレベルのデバイスシミュレータは実測値に fitting してある。

電流電圧特性の比較

表1は、一般的な MOSFET でドレイン電圧3Vの場合を変数 {電位 ψ , 擬フェルミレベル $\xi_n = \exp(-q\phi_n/kT)$, $\xi_p = \exp(-q\phi_p/kT)$ } と、変数 {電位 ψ , キャリア密度 n, p } で基本方程式を解いた時の電流電圧特性を示したものである。

また、表2はそれらの変数での電流電圧特性の誤差と電流保存性を示したものである。両表ともに(a)が ILUBCG (1, 2), (b)が TOPBCG である。

ILUBCG (1, 2) は、誤差がソース電流で $V_G=0.0V$ の時に約24%, $V_G=0.5V$ の時に約56%ありあとはどの端子においても6%以内である。

また、電流保存性では $V_G=0.0V$ の時に約38%の誤差があり、その他の動作点では約1%の誤差がある。

一方、TOPBCG は動作点 $V_G=0.0V$ の時にソース電流が約0.2%の誤差があるだけで、それ以上の動作点では、まったく一致している。また、電流電圧保存性の誤差も最大0.08%である。

したがって、ILUBCG (1, 2) と TOPBCG では、TOPBCG を用いて解いた方が精度よく電流を求めることができる。

打ち切り残差ベクトルに対する電流精度と計算時間

表3は、行列解法の打ち切り残差ベクトルを変えた時のドレイン電流の変化を示したものである。また、表4は打ち切り残差ベクトル ($1.0E-6$) に対する各打ち切り残差ベクトルにおけるドレイン電流の誤差を示したもので、両表とも (a) が ILUBCG (1, 2), (b) が TOPBCG である。印加電圧は $V_G=5.0V$ である。

ILUBCG (1, 2) では $V_G=0.0V$ の時最大2.3%程度の誤差があるだけで、ほとんどの動作点で、各打ち切り残差ベクトルでの電流値が ($1.0E-6$) の場合に一致しているが、打ち切り残差ベクトルを ($1.0E-1$) にすると収束しなかった。

一方 TOPBCG 法では、打ち切り残差ベクトルが、 $1.0E-2$, $1.0E-4$ では V_G の値が高くなるにつれて $1.0E-6$ との誤差がなくなっている。

表1 変数 $\zeta n, \zeta p, \zeta \psi$ の場合の電流電圧特性と、変数 n, p, ψ の場合の電流電圧特性

(a) ILUBCG (1, 2) で解いた場合

(b) TOPBCG で解いた場合

(b) Comparison between Variable $\zeta n, \zeta p, \zeta \psi$ and n, p, ψ on Id-Vg Characteristics (TOPBCG)

VG	Drain Current		Source Current		Substrate Current	
	n, p, ψ	$\zeta n, \zeta p, \zeta \psi$	n, p, ψ	$\zeta n, \zeta p, \zeta \psi$	n, p, ψ	$\zeta n, \zeta p, \zeta \psi$
0.00	-2.4311E-12	-2.4261E-12	2.4260E-12	2.4299E-12	3.1478E-15	3.1460E-15
0.25	-2.0428E- 9	-2.0428E- 9	2.0405E- 9	2.0405E- 9	2.3264E-12	2.3264E-12
0.50	-7.1780E- 7	-7.1780E- 7	7.1730E- 7	7.1730E- 7	4.9904E-10	4.9904E-10
0.75	-6.6690E- 6	-6.6690E- 6	6.6661E- 6	6.6661E- 6	2.8930E- 9	2.8930E- 9
1.00	-1.8051E- 5	-1.8051E- 5	1.8046E- 5	1.8041E- 5	5.0418E- 9	5.0418E- 9
1.25	-3.3307E- 5	-3.3307E- 5	3.3301E- 5	3.3301E- 5	5.9944E- 9	5.9944E- 9
1.50	-5.1237E- 5	-5.1237E- 5	5.1231E- 5	5.1231E- 5	5.7165E- 9	5.7165E- 9
1.75	-7.1174E- 5	-7.1174E- 5	7.1169E- 5	7.1169E- 5	4.6446E- 9	4.6446E- 9
2.00	-9.2687E- 5	-9.2687E- 5	9.2684E- 5	9.2684E- 5	3.2706E- 9	3.2706E- 9
2.25	-1.1542E- 4	-1.1542E- 4	1.1542E- 4	1.1542E- 4	1.9962E- 9	1.9962E- 9
2.50	-1.3915E- 4	-1.3915E- 4	1.3915E- 4	1.3915E- 4	1.0436E- 9	1.0436E- 9
2.75	-1.6374E- 4	-1.6374E- 4	1.6374E- 4	1.6374E- 4	4.5929E-10	4.5929E-10
3.00	-1.8903E- 4	-1.8903E- 4	1.8903E- 4	1.8903E- 4	1.6778E-10	1.6778E-10
3.25	-2.1486E- 4	-2.1486E- 4	2.1486E- 4	2.1486E- 4	5.1571E-11	5.1571E-11
3.50	-2.4097E- 4	-2.4097E- 4	2.4097E- 4	2.4097E- 4	1.4013E-11	1.4013E-11

(a) Comparison between Variable $\zeta n, \zeta p, \zeta \psi$ and n, p, ψ on Id-Vg Characteristics (ILUBCG(1,2))

VG	Drain Current		Source Current		Substrate Current	
	n, p, ψ	$\zeta n, \zeta p, \zeta \psi$	n, p, ψ	$\zeta n, \zeta p, \zeta \psi$	n, p, ψ	$\zeta n, \zeta p, \zeta \psi$
0.00	-6.6769E-14	-6.5564E-14	6.0453E-14	8.1147E-14	1.5350E-14	1.5232E-14
0.25	-1.2892E-11	-1.2807E-11	1.0772E-11	1.0698E-11	2.5222E-12	2.5000E-12
0.50	-3.2832E- 9	-3.2478E- 9	1.7513E- 9	2.7277E- 9	5.7306E-10	5.6607E-10
0.75	-5.6198E- 7	-5.6532E- 7	4.8459E- 7	4.8459E- 7	8.7164E- 8	8.7340E- 8
1.00	-6.8400E- 6	-6.8535E- 6	5.9760E- 6	5.9921E- 6	9.2786E- 7	9.2497E- 7
1.25	-2.2893E- 5	-2.2889E- 5	2.0447E- 5	2.0461E- 5	2.6850E- 6	2.6676E- 6
1.50	-4.8373E- 5	-4.8297E- 5	4.3911E- 5	4.3900E- 5	4.8327E- 6	4.7879E- 6
1.75	-8.1300E- 5	-8.0988E- 5	7.5018E- 5	7.4779E- 5	6.8230E- 6	6.7217E- 6
2.00	-1.2257E- 4	-1.2285E- 4	1.1477E- 4	1.1513E- 4	8.4931E- 6	8.3905E- 6
2.25	-1.7298E- 4	-1.7384E- 4	1.6396E- 4	1.6490E- 4	9.7665E- 6	9.6442E- 6
2.50	-2.2301E- 4	-2.2209E- 4	2.1371E- 4	2.1304E- 4	1.0045E- 5	9.7615E- 6
2.75	-2.7245E- 4	-2.7260E- 4	2.6369E- 4	2.6415E- 4	9.4923E- 6	9.1734E- 6
3.00	-3.2851E- 4	-3.3253E- 4	3.2067E- 4	3.2494E- 4	8.5357E- 6	8.2596E- 6
3.25	-4.0254E- 4	-4.0881E- 4	3.9551E- 4	4.0881E- 4	7.6592E- 6	7.4727E- 6
3.50	-4.7208E- 4	-4.7138E- 4	4.6607E- 4	4.7138E- 4	6.4905E- 6	6.0920E- 6

表2 変数 ζ_n, ζ_p, ϕ による電流値と変数 n, p, ϕ による電流値の誤差と電流保存性

(a) ILUBCG (1, 2) で解いた場合

(b) TOPBCG で解いた場合

(b) Error and Current Conservation (TOPBCG)

VG	Drain	Error (%)		Substrate	Conservation (%)
		Source			
0.00	-0.160	-0.206		-0.057	0.080
0.25	0.000	0.000		0.000	0.001
0.50	0.000	0.000		0.000	0.000
0.75	0.000	0.000		0.000	0.000
1.00	0.000	0.000		0.000	0.000
1.25	0.000	0.000		0.000	0.000
1.50	0.000	0.000		0.000	0.001
1.75	0.000	0.000		0.000	0.000
2.00	0.000	0.000		0.000	0.000
2.25	0.000	0.000		0.000	0.002
2.50	0.000	0.000		0.000	0.001
2.75	0.000	0.000		0.000	0.000
3.00	0.000	0.000		0.000	0.001
3.25	0.000	0.000		0.000	0.000
3.50	0.000	0.000		0.000	0.000

(a) Error and Current Conservation (ILUBCG(1,2))

VG	Drain	Error (%)		Substrate	Conservation (%)
		Source			
0.00	1.804	-34.232		0.769	37.974
0.25	0.659	0.687		0.880	3.655
0.50	1.078	-55.750		1.220	1.685
0.75	-0.594	-0.602		-0.202	1.364
1.00	-0.197	-0.269		0.311	1.061
1.25	0.017	-0.068		0.648	1.171
1.50	0.157	0.025		0.927	0.890
1.75	0.384	0.323		1.485	0.682
2.00	-0.228	-0.314		1.207	0.583
2.25	-0.497	-0.573		1.252	0.427
2.50	0.413	0.314		2.822	0.333
2.75	-0.055	-0.174		3.360	0.274
3.00	-1.224	-1.332		3.237	0.206
3.25	-1.558	-3.363		2.435	1.828
3.50	0.148	-1.139		6.139	1.292

表3 行列解法の打ち切り残差ベクトルをパラメータとした時のドレイン電流値

(a) ILUBCG(1, 2) で解いた場合

(b) TOPBCG で解いた場合

(b) Comparison between Ceasing Error and Drain Current on Id-Vg Characteristics (TOPBCG)

EPS	1.0E-6	1.0E-4	1.0E-2	1.0E0	1.0E2
VG					
0.00	-2.4311E-12	-2.4348E-12	-2.4338E-12	-2.4322E-12	-2.4315E-12
0.25	-2.0428E-9	-2.0428E-9	-2.0405E-9	-2.0404E-9	-2.0405E-9
0.50	-7.1780E-7	-7.1780E-7	-7.1805E-7	-7.1761E-7	-7.1735E-7
0.75	-6.6690E-6	-6.6690E-6	-6.6920E-6	-6.7031E-6	-6.6956E-6
1.00	-1.8051E-5	-1.8051E-5	-1.8044E-5	-1.8151E-5	-1.8202E-5
1.25	-3.3307E-5	-3.3307E-5	-3.3307E-5	-3.3457E-5	-3.3486E-5
1.50	-5.1237E-5	-5.1237E-5	-5.1238E-5	-5.1605E-5	-5.1561E-5
1.75	-7.1174E-5	-7.1174E-5	-7.1199E-5	-7.1273E-5	-7.1397E-5
2.00	-9.2687E-5	-9.2687E-5	-9.2679E-5	-9.3444E-5	-9.3430E-5
2.25	-1.1542E-4	-1.1542E-4	-1.1542E-4	-1.1634E-4	-1.1563E-4
2.50	-1.3915E-4	-1.3915E-4	-1.3916E-4	-1.3974E-4	-1.3886E-4
2.75	-1.6374E-4	-1.6374E-4	-1.6374E-4	-1.6393E-4	-1.6347E-4
3.00	-1.8903E-4	-1.8903E-4	-1.8903E-4	-1.8796E-4	-1.9055E-4
3.25	-2.1486E-4	-2.1486E-4	-2.1486E-4	-2.1398E-4	-2.1641E-4
3.50	-2.4097E-4	-2.4097E-4	-2.4097E-4	-2.4037E-4	-2.4223E-4
Calculation times (sec)	186.0	173.8	159.3	123.6	103.6

cf. Calculation time of Variable $\exp(-\phi n), \exp(\phi p), \phi$ 182.0 (sec)

(a) Comparison between Ceasing Error and Drain Current on Id-Vg Characteristics (ILUBCG(1,2))

EPS	1.0E-6	1.0E-5	1.0E-4	1.0E-3	1.0E-2
VG					
0.00	-2.4359E-12	-2.4319E-12	-2.4384E-12	-2.4940E-12	-2.4248E-12
0.25	-2.0432E-9	-2.0432E-9	-2.0432E-9	-2.0430E-9	-2.0427E-9
0.50	-7.1822E-7	-7.1822E-7	-7.1822E-7	-7.1753E-7	-7.1753E-7
0.75	-6.6618E-6	-6.6618E-6	-6.6618E-6	-6.6618E-6	-6.6618E-6
1.00	-1.8067E-5	-1.8067E-5	-1.8067E-5	-1.8067E-5	-1.8067E-5
1.25	-3.3232E-5	-3.3232E-5	-3.3232E-5	-3.3232E-5	-3.3232E-5
1.50	-5.1088E-5	-5.1088E-5	-5.1088E-5	-5.1088E-5	-5.1088E-5
1.75	-7.0936E-5	-7.0936E-5	-7.0936E-5	-7.0936E-5	-7.0936E-5
2.00			-9.2317E-5	-9.2317E-5	-9.2317E-5
2.25					-1.1491E-4

Calculation time = 300.0 (sec)

表4 打ち切り残差ベクトル ($1.0E-6$) に対する各打ち切り残差ベクトル
 における電流値の誤差

(a) ILUBCG (1, 2) で解いた場合

(b) TOPBCG で解いた場合

(a)

eps				
VG	1E-5	1E-4	1E-3	1E-2
0.00	0.164	-0.103	-2.385	0.456
0.25	0.000	0.000	0.010	0.024
0.50	0.000	0.000	0.096	0.096
0.75	0.000	0.000	0.000	0.000
1.00	0.000	0.000	0.000	0.000
1.25	0.000	0.000	0.000	0.000
1.50	0.000	0.000	0.000	0.000
1.75	0.000	0.000	0.000	0.000

(b)

eps				
VG	1E-4	1E-2	1E0	1E2
0.00	0.321	-0.049	0.264	0.297
0.25	-0.001	-0.002	5.231	-0.174
0.50	-0.004	-0.019	-0.087	-0.167
0.75	0.000	-0.051	0.015	0.022
1.00	0.000	0.174	0.044	0.044
1.25	-0.090	-0.029	-0.174	-0.177
1.50	0.048	0.025	0.016	0.016
1.75	0.004	0.082	0.049	0.051
2.00	0.003	0.005	0.015	0.014
2.25	0.014	-0.220	0.017	0.015
2.50	0.024	0.024	0.030	0.032
2.75	1.263	1.346	1.266	1.269
3.00	0.000	-0.104	-0.001	-0.001
3.25	0.004	0.004	0.004	0.006
3.50	0.000	0.060	0.001	0.001
3.75	0.000	-0.077	-0.001	0.001
4.00	0.000	0.029	0.000	0.000
4.25	0.000	0.037	0.000	0.000
4.50	0.000	-0.054	0.000	0.000
4.75	0.000	0.017	0.000	0.000
5.00	0.000	0.025	0.025	0.000

eps				
VG	1E-4	1E-2	1E0	1E2

また、全体的に誤差が小少なく、打ち切り残差ベクトルが $1.0 E-2$ であっても誤差が1%以下である。

次に、デバイスシミュレータ全体での計算時間を比較する。ILUBCG (1, 2) では、300秒計算しても表3(a)のような動作点までしか計算できなかった。

一方 TOPBCG では、 $V_D=5.0 V$, $V_G=3.5 V$ まで計算した場合、表3(b)のようであった。打ち切り残差ベクトルを緩めると当然のことながら計算時間は減少していく。従来の変数・電位、擬フェルミレベルによる対称行列を ICCG 法で解いた場合の計算時間と比較すると、 $1.0 E-6$ ではほぼ同程度の計算時間であり、 $1.0 E-4$ 以上ではそれより早くなっている。とくに、打ち切り残差ベクトルが $1.0 E-2$ では約1.75倍早くなっている。

以上のことにより、十分実用の精度を持ち、高速である計算法は、マトリックスを不完全 LU 分解した行列の L と U の逆行列で挟んだ TOPBCG 法であることがわかったが、打ち切り残差ベクトルを緩めた場合、どのような条件においても解が求まるか? という問題がある。そこで、条件を変えた時の各打ち切り残差ベクトルでのドレイン電流値を比較した。以後は TOPBCG 法のみについて示す。

表5(a)は $V_D=0.05 V$ にした時のドレイン電流を各ゲート電圧について示したもので、(b)は

表5 TOPBCG を用いて $V_D=0.05 V$ の時を求めた場合の各打ち切り残差ベクトル対にするドレイン電流 (a)と打ち切り残差ベクトル $1.5E-6$ に対する誤差(b)

Comparison between Ceasing Error and Drain Current on I_d-V_g Characteristics

VG	eps				
	1E-6	1E-4	1E-2	1E0	1E2
0.00	-1.2138E-12	-1.2099E-12	-1.2144E-12	-1.2106E-12	-1.2102E-12
0.25	-8.6638E-10	-8.6639E-10	-8.6640E-10	-8.2106E-10	-8.6789E-10
0.50	-2.6309E-7	-2.6310E-7	-2.6314E-7	-2.6332E-7	-2.6353E-7
0.75	-1.3754E-6	-1.3754E-6	-1.3761E-6	-1.3752E-6	-1.3751E-6
1.00	-2.4738E-6	-2.4738E-6	-2.4695E-6	-2.4727E-6	-2.4727E-6
1.25	-3.4547E-6	-3.4578E-6	-3.4557E-6	-3.4607E-6	-3.4608E-6
1.50	-4.3440E-6	-4.3419E-6	-4.3429E-6	-4.3433E-6	-4.3433E-6
1.75	-5.1486E-6	-5.1484E-6	-5.1444E-6	-5.1461E-6	-5.1460E-6
2.00	-5.8876E-6	5.8874E-6	-5.8873E-6	-5.8867E-6	-5.8868E-6
2.25	-6.5565E-6	-6.5556E-6	-6.5709E-6	-6.5554E-6	-6.5555E-6
2.50	-7.2145E-6	-7.2128E-6	-7.2132E-6	-7.2123E-6	-7.2122E-6
2.75	-7.9041E-6	-7.8043E-6	-7.7977E-6	-7.8040E-6	-7.8038E-6
3.00	-8.3582E-6	-8.3582E-6	-8.3669E-6	-8.3583E-6	-8.3583E-6
3.25	-8.8989E-6	-8.8985E-6	-8.8985E-6	-8.8985E-6	-8.8983E-6
3.50	-9.3934E-6	-9.3934E-6	-9.3878E-6	-9.3933E-6	-9.3933E-6
3.75	-9.8621E-6	-9.8621E-6	-9.8697E-6	-9.8622E-6	-9.8620E-6
4.00	-1.0321E-5	-1.0321E-5	-1.0318E-5	-1.0321E-5	-1.0322E-5
4.25	-1.0748E-5	-1.0748E-5	-1.0744E-5	-1.0748E-5	-1.0748E-5
4.50	-1.1155E-5	-1.1155E-5	-1.1161E-5	-1.1155E-5	-1.1155E-5
4.75	-1.1555E-5	-1.1555E-5	-1.1553E-5	-1.1555E-5	-1.1555E-5
5.00	-1.1930E-5	-1.1930E-5	-1.1927E-5	-1.1927E-5	-1.1930E-5
time	65.5	60.6	59.3	55.8	54.9

表6 TOPBCG を用いてインパクトイオン化が多量に発生している時を求めた場合の各打ち切り残差ベクトルに対するドレイン電流値 (a)と、打ち切り残差ベクトル $1.0E-6$ に対する誤差(b)

Comparison between Ceasing Error and Drain Current on Id-Vg Characteristics

VG	eps		
	1E-6	1E-4	1E-0
0.00	-3.3069E- 7	-3.3066E- 7	-3.3066E- 7
0.25	-1.2411E- 5	-1.2301E- 5	-1.2359E- 5
0.50	-4.2141E- 5	-4.2180E- 5	-4.2145E- 5
0.75	-8.3166E- 5	-8.3170E- 5	-8.3257E- 5
1.00	-1.3157E- 4	-1.3157E- 4	-1.3235E- 4
1.25	-1.8461E- 4	-1.8461E- 4	-1.8466E- 4
1.50	-2.4042E- 4	-2.4042E- 4	-2.4159E- 4
1.75	-2.9777E- 4	-2.9777E- 4	-2.9823E- 4
2.00	-3.5496E- 4	-3.5496E- 4	-3.5462E- 4
2.25	-4.1132E- 4	-4.1132E- 4	-4.1200E- 4
2.50	-4.6727E- 4	-4.6727E- 4	-4.6685E- 4
2.75	-5.2198E- 4	-5.2198E- 4	-5.2167E- 4
3.00	-5.7573E- 4	-5.7573E- 4	-5.7540E- 4
3.25	-6.2872E- 4	-6.2872E- 4	-6.2882E- 4
3.50		-6.7990E- 4	-6.7923E- 4
3.75			-7.2920E- 4
4.00			-7.7792E- 4

Calculation time 300.0 (sec)

それを打ち切り残差ベクトル $1.0E-6$ に対する誤差を示したものである。

打ち切り残差ベクトル $1.0E0$ で $V_G=0.25$ Vの時に5%の誤差があるだけで、他は1%程度またはそれ以下である。表6はインパクトイオン化現象を多量に発生させた場合を示したもので(a)は電流値、(b)は打ち切り残差ベクトル $1.0E-6$ に対する誤差を示したものである。

ここで、インパクトイオン化が多量に発生しているので解が求められにくくなるために計算時間300秒でも表6のような動作点までしか計算していない。

この場合においても誤差は各打ち切り残差ベクトルで1%以下であった。したがって、どのような条件でも緩い打ち切り残差ベクトルで十分精度の高い解が得られると言える。

§5. 結 論

デバイスシミュレータの変数を電位とキャリア密度にした場合に生ずる非対称行列用の高速な反復法である TOPBCG 法を開発した。この解法は

- (1) 従来の BCG 系統の反復解法の中で最も高速である。
- (2) TOPBCG 法は他の BCG 系統の反復解法と同様に、非対称度によらず安定に収束し対角要素が弱くなると解が得られなくなる。

TOPBCG 法をデバイスシミュレータに組みこんだ結果

- (3) デバイスシミュレータは平均1.7倍高速化された。

以上のようなことが言える。

今後のテーマとしては、何故 TOPBCG 法が他の BCG 系統の反復解法よりも高速であるのか?という問題がある。また、デバイスシミュレータのマトリックスの様な疎行列ではなく、一般的なマトリックスではどうであるか?という問題も考えられる。

謝 辞

この研究を進めるにあたり、種々の便宜をはかって頂いた御東芝超 LSI 研究所谷口氏に感謝いたします。

また貴重なサジェッションを頂いた(株)東芝総合情報システム部福井氏に感謝します。

参 考 文 献

- 1) T.Wada. and R. Dang, NASECODE-W 1985 (DUBLIN), pp 108-119
半導体トランジスタ研究資料, SSD-8393, (1983).
- 2) 中村・和田・檀・谷口: 数値モデリングによる高信頼性 MOSFET 構造の研究. 本誌 pp.00~00.
- 3) Meijerink, J.A. and Vander Vorst, H.A.: An Iterative Solution Method for Linear Systems of which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-Matrix, *Math., Comput.*, Vol.31, No.137, (1977).
- 4) T. Wada, R.L.M. Dang: "Modification of ICCG Method for Application to Semiconductor Device", *ELCTRONICS LETTERS*, March, Vol. 18, No. 6, pp.265~266, (1982).
- 5) R. Fletcher: Numerical Analysis Dundee 1975 (in Lecture Note in Mathematics), Spring-Verlag Berling-Heidelberg・New York (Edited by A. Dold and B. Eckmann).
- 6) 村田・小国・唐木: スーパーコンピュータ科学技術計算への適用. 一, 丸善(株), pp.136~153, (1985).
- 7) 羽根邦夫: CG 法および CG-like な方法を用いた半導体デバイスシミュレータ. 大型行列計算シンポジウム (共役勾配法とその応用), (1985).

付録 A.1 B.C.G 法アルゴリズムと不完全 LDU 分解について

BCG 法は CG 法 (共役勾配法: Conjugate Gradient Method) 系の反復解法で, 係数行列が正定値でない (行列 A の固有値に正と負が混在する) 場合の固有値の計算を CG 法に応用したものである。BCG 法から CGS (Conjugate Gradient Squared) 法などが導かれ, BCG 法は非対称行列の反復法としては基本と言える。

BCG 法そのものは本文に示したようにそれほど高速ではないが, 与えられた方程式を解く前に, 方程式の左右から適当な行列を掛けて係数行列をできるだけ単位行列に近いものにしてから BCG 法を適用すると僅かな反復回数で高精度な解が得られる。左右から掛ける行列として係数行列を不完全 LU (または LDU) 分解して作った行列が多く用いられる。この操作を前処理と呼ぶ。

A.1 BCG (Bi-Conjugate Gradient) 法のアルゴリズム

解くべき連立一次方程式をマトリックスとベクトルを使って

$$Ax=b \quad (A.1)$$

とする。BCG 法は, 初期解 x_0 を用いて, 残差ベクトル r_0 , 修正方向ベクトル p_0 , さらにこれらの双対ベクトル r_0^* , p_0^* を

$$r_0=r_0^*=p_0=p_0^*=b-A \cdot x \quad (A.2)(A.3)$$

と設定してから, 残差ベクトルの大きさが十分小さくなるまで, 以下の手順を繰り返す。

$$a_k=(r_k \cdot r_k^*)/(Ap_k \cdot p_k^*) \quad (A.4)$$

$$x_{k+1}=x_k+a_k p_k \quad (A.5)$$

$$r_{k+1}=r_k-a_k A p_k, \quad r_{k+1}^*=r_k^*-a_k A^t p_k^* \quad (A.6)$$

$$b_k=(r_{k+1} \cdot r_{k+1}^*)/(r_k \cdot r_k^*) \quad (A.7)$$

$$p_{k+1}=r_{k+1}+b_k p_k, \quad p_{k+1}^*=r_{k+1}^*+b_k p_k^* \quad (A.8)$$

こうして作られたベクトル p_k, p_k^* の間には双対共役直交関係

$$Ap_k \cdot p_j^* = 0 \quad (j \neq k) \quad (\text{A.9})$$

がなりたつ。

式 (A.9) は反復の手続き (A.4)-(A.8) を、最悪でも n 回 (n は元の方程式の元数) 繰り返すことにより解に到達することを意味している。というのは、式 (A.9) を満たすベクトル列 p_1, p_2, \dots は n 次元空間の基底ベクトルになる。即ちベクトル列 p_1, p_2, \dots は n 番目までしかありえないからである。

A.2 前処理付 BCG 法

一般に、行列の反復解法では元の方程式の係数行列が単位行列に近いほど高速に収束する。そこで係数行列 A を不完全 LU 分解して得られた下三角行列 L と上三角行列 U の逆行列を式 (A.1) の左辺から掛けて、式 (A.1) と等価な

$$(L \cdot U)^{-1} A \cdot x = (L \cdot U)^{-1} b \quad (\text{A.1}')$$

に直し、これを BCG 法で解けば、より高速な解法になる。これが ILUBCG (Incomplete LU -decomposition BCG) 法である。

さて、行列 L と U を用いて式 (A.1) と等価な、係数行列が単位行列に近い方程式を作る方法として、

$$L^{-1} A \cdot U^{-1} (UX) = L^{-1} b \quad (\text{A.2}')$$

でも良い。これは、Meijerink らが ICCG 法を導く際に用いた類推である。この方法では、未知ベクトルを X ではなく UX として解を求め、それからを計算する。

この方法をわれわれは TOPBCG 法と名付けた。

ILUBCG 法と TOPBCG 法のアルゴリズムを図A-1, 図A-2に示した。

A.3 不完全 LDU 分解について

二次元空間の偏微分方程式を五点差分して得られる連立一次方程式の係数行列は、図A-3に示すように五本の非零要素をもつ。この係数行列の LDU 分解をできるだけ高精度に、少ないメモリーで、かつ短時間に行って前節で述べた行列 L, U (および対角行 D : この場合は積 LDU を元の係数行列 A に近いものとする) を求めるのがこの節の目的である。

一番簡単なのは、図A-4の上段に示すような形をした L, D, U を想定して、これらの積が A に等しくなるように L, D, U の各要素を定めればよい。しかし、簡単な計算でわかるように、この L, D, U の積は A では零であった要素の所に零でない要素が現れ、この意味で積 LDU は A の高精度な近似にはなっていない。

次に、上で述べた余分な非零要素を取り除くため、図A-4の下段に示すように、最も外側の非零要素の内側に一本の非零要素を付け加えた形の L, D, U を想定し、これらの積が A に等しくなるように L, D, U の各要素をさだめる。実はこの LDU を用いると、さらに内側の要素が

Incomplete LU Biconjugate Gradient (TOPBCG)
Consider the system of equation

$$L^{-1}AU^T(UX) = L^{-1}b$$

$$B = L^{-1}AU^T, Y = UX, b' = Lb$$

Matrix **A** is asymmetric
Choose $Y_0 = UX_0; r_0 = b' - BY_0; p_0 = r_0 = p_0^* = r_0^*$
While $\|b' - BY_0\| > \epsilon$

Incomplete LU Biconjugate Gradient (ILUBCG)
Consider the system of equation

$$(LU)^{-1}AX = (LU)^{-1}b$$

Matrix **A** is asymmetric
Choose $X_0; r_0 = (LU)^{-1}(b - AX_0); p_0 = r_0 = p_0^* = r_0^*$
While $\|(LU)(b - AX)\| > \epsilon$

$$\alpha_k = (r_k, r_k^*) / ((LU)^T A p_k, p_k^*)$$

$$X_{k+1} = X_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k (LU)^T A p_k$$

$$r_{k+1}^* = r_k^* - \alpha_k ((LU)^T A)^T p_k^*$$

$$\beta_k = (r_{k+1}, r_{k+1}^*) / (r_k, r_k^*)$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$$

$$p_{k+1}^* = r_{k+1}^* + \beta_k p_k^*$$

$$k = k + 1$$

$$\alpha_k = (r_k, r_k^*) / (B p_k, p_k^*)$$

$$X_{k+1} = X_k + \alpha_k p_k$$

$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k B p_k$$

$$r_{k+1}^* = r_k^* - \alpha_k B^T p_k^*$$

$$\beta_k = (r_{k+1}, r_{k+1}^*) / (r_k, r_k^*)$$

$$p_{k+1} = r_{k+1} + \beta_k p_k$$

$$p_{k+1}^* = r_{k+1}^* + \beta_k p_k^*$$

$$k = k + 1$$

図 A-1 ILUBCG 法のアルゴリズム

図 A-2 TOPBCG 法のアルゴリズム

ILDU(1,1)

(a) $LDU_{incomp.(1,1)} =$

ILDU(1,2)

(b) $LDU_{incomp.(1,2)} =$

図 A-3 偏微分方程式を点差分して得られる連立一次方程式の係数行列

Composition of solved matrix

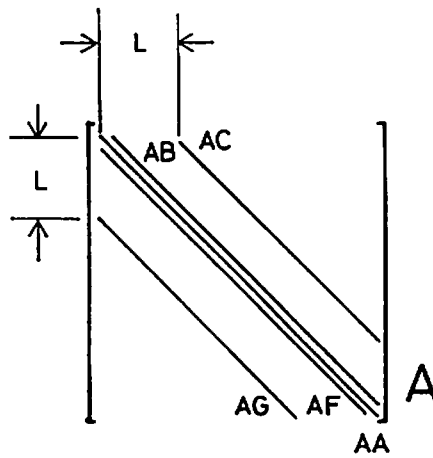


図 A-4 不完全 LU 分解の各係数行列
 (a) Fill-in を考慮しない場合
 (b) Fill-in を考慮した場合

A と異なってしまいが、全体として先ほどよりも A に近い結果が得られる。

下三角行列と上三角行列の非零要素をこのように増して行けば、 LDU と A は限りなく近づくが、 L, D, U を求めるための計算量が増し、また L, U を記憶しておくためのメモリー容量が非常に大きくなって実用的で無くなる。適当な近似で妥協しておかねばならない。