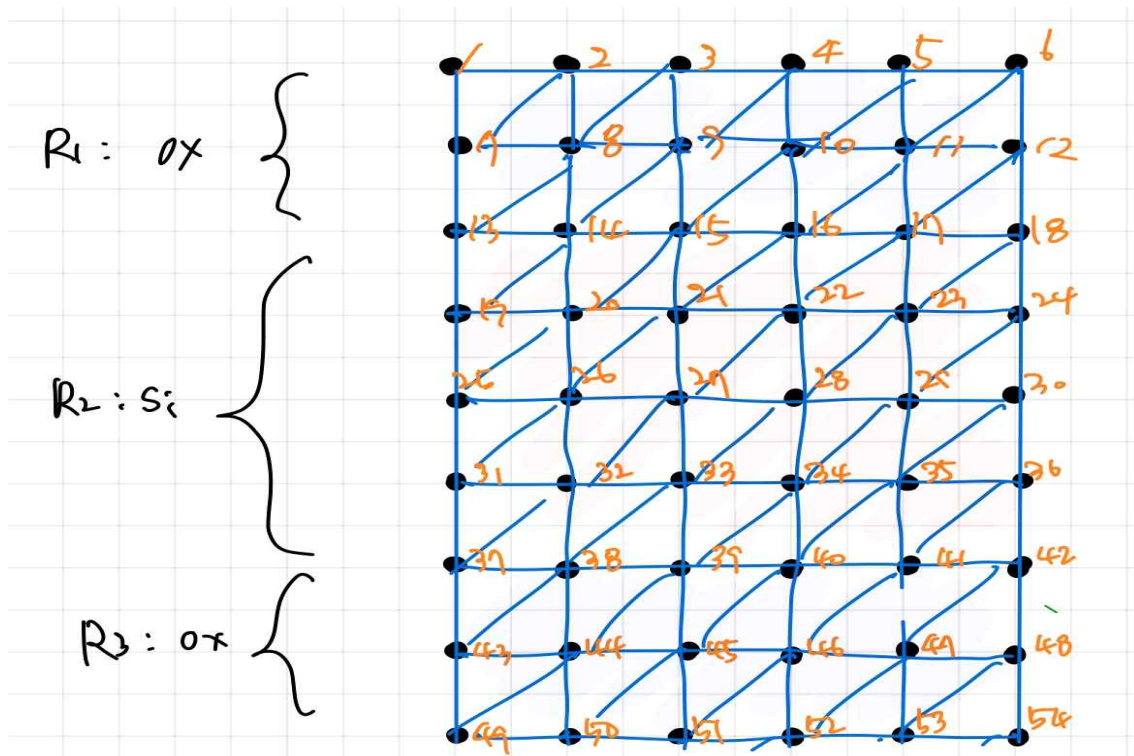


HW10 REPORT_EDIT

20221060 한성민

Design

이번 과제는 potential뿐만 아니라 electron과 hole을 고려하여 jacobian matrix를 재구성하는 것이었다. 해당 variable은 region 별로 다르게 고려되어야한다. 3개의 variable ϕ , n , p 에 대해 fully-coupled 한 matrix를 구성하기 위해 각 상관관계를 파악하여 jacobian matrix를 구성하는 것이 중요하였으며, 이 상관관계를 정확히 정의하는 것이 fully-coupled matrix의 핵심이다.



구조의 경우 계산전자공학의 2.11.1 예제를 2D로 확장하여 새로 design 했다.

먼저 initial value를 구해주기 위해 전체 vertex를 re-indexing 하였다. 54개의 vertex는 interface의 중복 vertex를 고려하여 66개의 vertex로 재구성된다. 재구성하기 위해 만든 vertex table은 총 54개의 행을 가지고 있지만, 중복 vertex의 경우에는 열을 다르게 하여 구성했다. region이 3개이므로 54X3 배열이 만들어진다.

Ex) total vertex의 re-indexing example

vertex	region 1	region 2	region 3
13	13	19	
14	14	20	
...
37		43	49
38		44	50

jacobian matrix의 경우 region 별로 stack 하였으며 insulator region은 potential만 고려하고, semiconductor region은 potential, electron, hole을 고려해야 하므로 insulator region은 N개의 값, semiconductor region의 경우 3N의 값을 가지도록 indexing 했다.

위 구조에서는 region 1, 3은 insulator region이기에 해당 region의 vertex 개수인 18[N]개를 가지고, region 2는 semiconductor region이기에 해당 region의 vertex 개수의 3배인 (30X3=90) [3N]개를 가진다.

region	variable	vertex 개수
region 1	potential	18
region 2	potential	30
	electron	30
	hole	30
region 3	potential	18
		126

- Jacobian & residue matrix re-indexing

potential(phi)		electron(n)	hole(p)
region 1	index 1 ~ 18	index 19 ~ 108 3i-1번째 index	index 19 ~ 108 3i번째 index
region 2	index 19 ~ 108 3i-2 번째 index		
region 3	index 109 ~ 126		

Solve

1. solve non-linear poisson equation

먼저, non-linear poisson equation을 풀어 initial value를 구해야 한다.

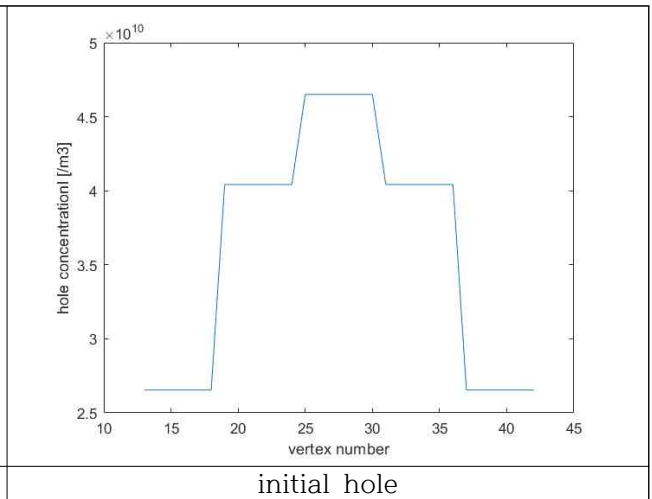
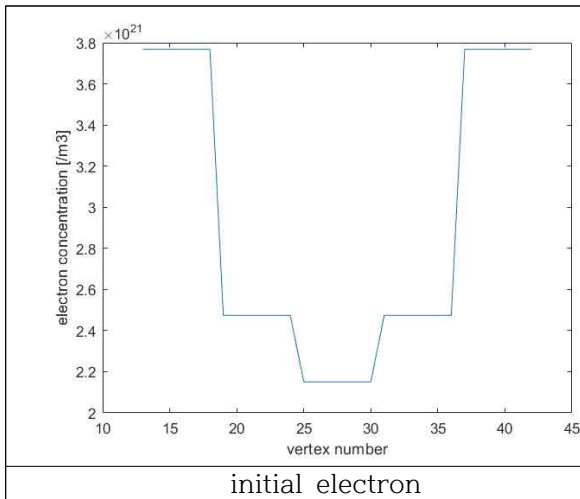
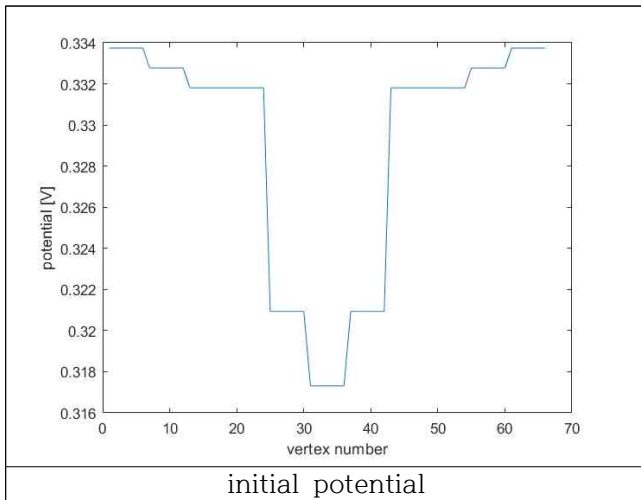
계산전자공학 교재를 참고하여 edge contact = 0.33374V, electron Ndop = 1E24[/m3]로 설정했다.

$$(1) \nabla \cdot (-\nabla \epsilon \phi) = -qn + qp + qNdop^+$$

$$(2) n = n_i \exp(\phi / Vt)$$

$$(3) p = n_i \exp(-\phi / Vt)$$

N_{dop} 와 contact을 이용하여 initial potential을 구할 수 있다. 구한 initial potential 식을 이용하여 식 (2), (3)에 대입하면 initial electron, initial hole 값을 구할 수 있다.



2. Jacobian & residual matrix

initial value를 구하고 나서 total jacobian matrix를 위 3개의 식의 상관관계를 파악해 coupled 한 matrix로 구성했다.

(1) 식을 양변에 적분을 취하고, 이항하면 다음의 res를 얻을 수 있다.

$$res = \iint \nabla \cdot (-\nabla \epsilon \phi) + \iint qn - \iint qp - \iint qNdop^+$$

이 residue를 이용하여 jacobian matrix의 index 1~66까지의 행, 열 값을 정의할 수 있다.

기존의 CVM을 이용하여 edge/length로 각 node에서의 flow를 계산하고 n , p , N_{dop} 는 control volume을 계산해 곱해주어야 한다. 작은 삼각형 control volume은 $edge \cdot len/4$ 을 나타내며, 작은 삼각형 control volume을 더해 각 node에서의 control volume을 계산하여 곱해준다. 그렇다면 index 1~66의 행에 대한 열의 값은 각 node에서의 flow, 그리고 charge들을 index에 맞게 고려해주면 된다.

(2) 식을 이항하면 다음의 res를 얻을 수 있다.

$$res = n - n_i \exp(\phi / V_t)$$

$$jac1 = 1$$

$$jac2 = -n_i / V_t \exp(\phi / V_t)$$

위 res를 통해 jacobian matrix를 구성하면, 각 node에 해당하는 electron density와 해당 node에서의 potential 값을 고려해주면 된다.

(3) 식을 이항하면 다음의 res를 얻을 수 있다.

$$res = p - n_i \exp(-\phi / V_t)$$

$$jac1 = 1$$

$$jac2 = n_i / V_t \exp(-\phi / V_t)$$

위 res를 통해 jacobian matrix를 구성하면, 각 node에 해당하는 hole charge와 해당 node에서의 potential 값을 고려해주면 된다.

3. scaled problem

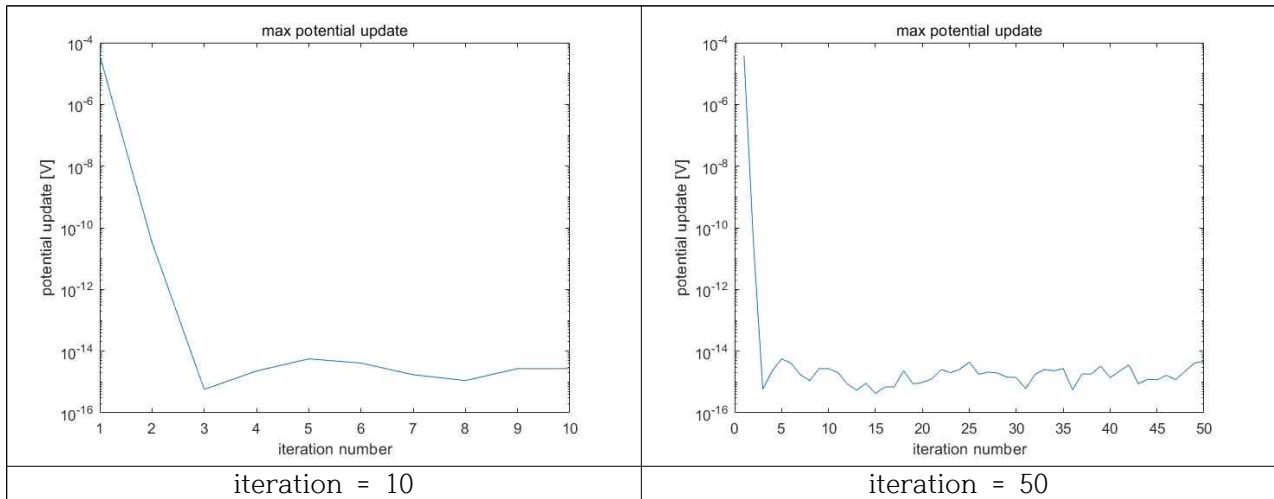
제작한 jacobian matrix와 residue matrix를 통해 update vector matrix를 만들었지만 jacobian matrix 내 값들의 scale 차이로 인해 특이행렬이 생성되는 문제가 발생했다. 이를 위해 scaled problem의 문제를 해결하는 code를 추가하여 scaled problem을 해결했다.

```
%%% scaled
Cvector = zeros(size(jac2,1),1);
for i=1:size(jac2,1)
    if rem(X2_sorted(i),3) == 1
        Cvector(i) = Vt;
    elseif rem(X2_sorted(i),3) == 2
        Cvector(i) = Ndop;
    elseif rem(X2_sorted(i),3) == 0
        Cvector(i) = Ndop;
    end
end

Cmatrix = spdiags(Cvector,0,size(X2_sorted,1),size(X2_sorted,1));
jac2_scaled = jac2 * Cmatrix;
Rvector = 1./sum(abs(jac2_scaled),2);
Rmatrix = spdiags(Rvector,0,size(X2_sorted,1),size(X2_sorted,1));
jac2_scaled = Rmatrix * jac2_scaled;
res2_scaled = Rmatrix * res2;
update_scaled = jac2_scaled \ (-res2_scaled);
update = Cmatrix * update_scaled;
```

Result

potential의 update vector가 잘 수렴하는지 판단하기 위해 potential의 update vector의 max 값을 비교하여 iteration마다 update vector가 어떻게 변하는지 알아보았다. update vector의 scale을 고려해, 그래프의 경우 log scale로 나타내었다.



iteration = 10 안에 max update vector가 허용오차 미만으로 수렴하는 것을 확인할 수 있었다.