

一种时域无条件稳定的计算瞬态热场的显式算法——步内建模法*

张鸿欣

(西安电子科技大学 CAD 所 西安 710071)

摘要 步内建模法(MPWT, Modelling the diffusion Process Within the Timestep),与有限差分法的区别是对时间步内的扩散过程进行了建模,从而达到对任意大时间步长的(时域无条件)稳定性;对小时间步长,该法退化为通常的有限差分法,因而有自检性;与传输线矩阵法的区别是直接建模于扩散过程,从而使模型大为简化只含阻、容参数. 对大时间步长时的长程热交换建模是该法的又一特征. 该法结果与其他数值方法、解析方法的结果符合相当一致.

EEACC: 0290

1 引言

微电子的发展使器件的工作热场分布成了影响器件和整机的短期和长期可靠性的共性因素.

器件的复杂结构、器件材料(Si, GaAs)的导热率与金属的导热率是同一量级,使瞬态热场是复杂的四维(第四维是时间)场计算. 自 P. B. Johns^[1]提出把传输线矩阵法(TLM, Transmission Line Matrix, 方法)用于扩散场,TLM 吸引了大量工作^[2]以提高速度, 克服传统的有限元法和有限差分法(FD)速度太慢的缺点. TLM 模型中有实际上不存在的热感,使解出现虚假振荡^[3], 提高计算速度的时间步长的自动控制发生困难^[4,5]. 与基于麦克斯威尔方程的解的 TLM 方法不同, 步内建模方法(MPWT)^[6]是建模于扩散过程本身, 在考虑大时间步长时一个体积元与场的其余部分的交换热流不是常数、交换热量不是步长的线性函数, 以及实际存在非近邻体积元间的热交换等这些时间步内效应, 是其特点也是其简单有效的原因.

2 模型

MPWT 计算在与 FD, TLM 类似的网格上进行. 不同的是对节点(或称体积元) m 除节

* 电子部电子科学基金、陕西省自然科学基金资助项目

张鸿欣 男, 1938 年 12 月生, 教授, 目前从事半导体器件的热场及相关效应研究

1996 年 4 月 4 日收到初稿, 1996 年 7 月 17 日收到修改稿

点温度 T_m 外, 还定义了对应的网络温度 T_{ntw}

$$T_{ntw} = \sum g_k T_k + P_m / Y_t \quad (1)$$

其中

$$Y_t = \sum Y_k \quad (2)$$

$$g_k = Y_k / Y_t \quad (3)$$

P_m 为体积元 m 的功耗, Y_k 为节点 m 到其近邻节点 k ($k=$ 上、下、左、右、后或前) 的热导. 不同之二是对节点 m , 除了节点热容 C_m 外, 还有相应的网络热容 C_{ntw} (初步近似为六个近邻节点热容之和). 这样节点 m 与热场其余部分的热交换可以模型化为图 1. 图 1 中 C_m 与有限差法中的意义一致, 即节点 m 对应的体积元的热容, 这一体积元与热场的其余部分进行热交换, 网络热容 C_{ntw} 即表示其余部分的有效热容, 由于扩散某一距离所需时间是距离的平方函数, 因此主要是近邻节点起作用, 这是将网络热容近似为六个近邻节点热容之和的物理基础. 显然网络热容的更准确表达是 MPWT 算法的一个重要内容. 图 1 模型的结果为:

$$T_m^{(i)} = T_m^{(i-1)} f_{\text{散}} + T_{int} f_{\text{汇}} \quad (4)$$

$$f_{\text{散}} = \exp(-\Delta t / \tau) \quad (5)$$

$$f_{\text{汇}} = 1 - f_{\text{散}} \quad (6)$$

$$\tau = \frac{1}{Y_t} \frac{C_m C_{ntw}}{C_m + C_{ntw}} \quad (7)$$

$$T_{int} = \frac{T_m^{(i-1)} C_m + T_{ntw} C_{ntw}}{C_m + C_{ntw}} \quad (8)$$

$f_{\text{散}}, f_{\text{汇}}$ 分别表示由节点向热场其余部分(或相反)的热交换. 不难证明式(1)至式(8)表示的计算对 $\Delta t / \tau \ll 1$ 相当于

$$T_m^{(i)} = T_m^{(i-1)} + \frac{\Delta t}{C_m} [P_m + \sum (T_k^{(i-1)} - T_m^{(i-1)}) Y_k] \quad (9)$$

即通常的 FD 方法, 因此 MPWT 方法具有自检性. 在以上各式中, 上标 i 为迭代次数.

图 1 节点 m 与热场其余部分的热交换模型

对其尺寸远小于时间步长对应的扩散距离的那些节点, 非近邻节点间的热交换, 即长程效应, 是客观存在的.

为了包括长程效应, 在对节点 m 进行计算之后, 随即进行如下更新

$$T_m^{(i-1)} + f_L (T_m^{(i)} - T_m^{(i-1)}) \Rightarrow T_m^{(i-1)} \quad (10)$$

$$f_L = \begin{cases} f_n f_{\text{汇}} & \\ 1.999 & \text{当 } f_n f_{\text{汇}} \geq 1.999 \end{cases} \quad (11)$$

计算在整个热场完成后, 进行 $T_m^{(i-1)} \Rightarrow T_m^{(i)}$ 的操作, 然后开始下一轮迭代. 在本文计算中, 一般取 $f_n = 2.25$.

3 计算实例

实例 1 一个长 10m、导热率 = 1W/(°C · m)、热容 = 1J/(°C · m³) 的截面均匀棒. 棒的

初始温度处处为零,上表面有均匀分布的阶跃加热功率 $1\text{W}/\text{m}^2$,下表面固定于零度,其余侧面,即前、后、左、右按绝热面边界条件处理。由无限长棒的解析解^[7]通过镜象法得到的上表面的温度变化由式(12)计算。

$$T_{o,t} = \frac{P_0}{\sqrt{\pi Dt}} \left[1 - 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \exp\left(-\frac{(nl)^2}{Dt}\right) \right] \quad (12)$$

式(12)中扩散系数 $D=1$,棒长 $l=10$, $P_0=1$,求和至 1000 项(与至 100 项实际无区别)。

计算中,初始时间步长为最小节点时间常数(大约等于其热容与到近邻节点的热阻之乘积)的 0.2 倍,然后每次迭代时间步长以因子 1.0005 增长直到达到最大节点时间常数的 0.1 倍。棒分层厚度自下而上为 2.9, 2.2, 1.6, 1.05, 0.73, 0.5, 0.35, 0.25, 0.18, 0.14, 0.1 m。MPWT 的、FD 的和按式(12)计算的结果示于图 2, MPWT 的结果与其他方法的差别小于 2% 最高温升。

实例 2 是一个简化了的 MESFET 的一个胞(长 \times 宽 \times 高 $= 43.5 \times 320 \times 60\mu\text{m}$), 0.1W 功率耗散区均匀分布位于上部中心的长方体(长 \times 宽 \times 高 $= 1.5 \times 200 \times 0.5\mu\text{m}$), 如图 3 所示, 计算节点数为 $13 \times 15 \times 12$ (沿长、宽、高) = 2340。节点最大最小尺寸比为 30。起始时间步长和步长增长因子同例 1。MPWT、FD 和 TLM 三种方法计算结果示于图 4, 差别小于最高温升的 2%, 速度是 FD 的百倍, 与 TLM 基本相当。

在以上算例中, f_n 在 2.25~3.25 变化, 引起结果变化不大, 时间步长增加因子的增加会减少计算所需迭代次数, 即提高速度。(虽然对任意步长 MPWT 都是稳定的), 但步长增加过快会使结果偏小。因此, 如在 TLM 方法中一样, 在 MPWT 方法中步长增加的自动控制是一个重要课题。

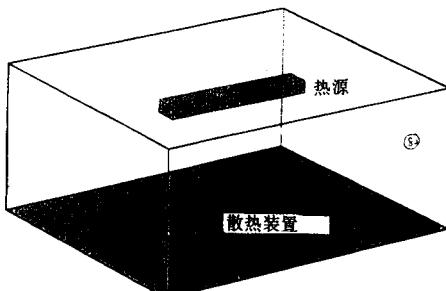


图 3 所分析的简化的 MESFET 器件的一个胞

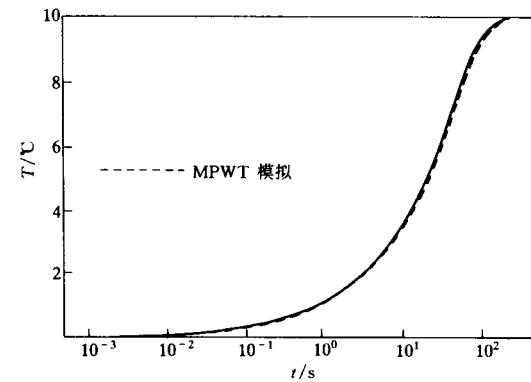


图 2 MPWT 分析实例 1, 有限长度棒

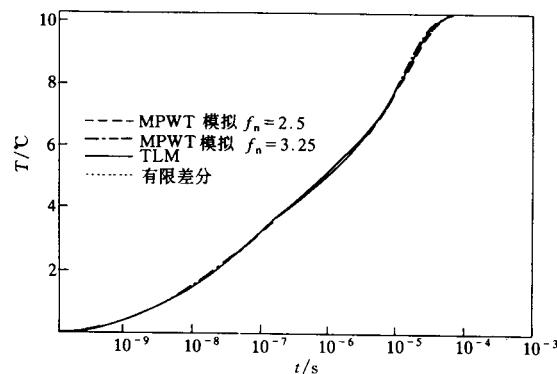


图 4 MPWT 分析实例 2 结果

4 讨论

以上算例达到的精度(好于 2%, 已能满足许多器件可靠性热设计的要求)和速度(已与 TLM 相当, 二个数量级快于 FD)说明 MPWT 方法所用的时间步内扩散过程建模反映了瞬态热场本质, 需要指出比较用的 TLM 方法有步长自动调正措施, 因而能较充分地发挥其时域无条件稳定特点来加速计算, MPWT 虽然也具有时域无条件稳定的特点, 但还没有建立步长自动调正方法. 由于在 TLM 中计算的变量为: 7 个特征阻抗, 6 个入射波、一个节点温度、6 个反射波, 6 个散射波, 共 26 个, 在 MPWT 中为网络温度, 汇散函数, 节点温度, 长程因子共 4 个, 因此 MPWT 可望达到更快的速度. 但重要的还不在于此. 使方程呈非线性的导热率随温度下降和双极电路的电流随温度迅速上升的热电偶合使微电子热场成为非线性场源耦合问题, MPWT 根本特点是如实考虑了时间步内的效应, 也是其简单而有效原因, 它优于 TLM 不在于快几倍或更多而在于由于解无虚假振荡, 能更客观地模拟热电偶合; 在于模型简明, 每个变量都有明确物理意义, 因而便于编程和方法发展. 它与传统的 FD 的区别是对步内过程进行了建模, 这是它时域无条件稳定的原因. 它与有限元法的区别是, 它是一种显式算法, 不需解联立方程, 容易处理复杂结构.

沿着时间步内建模方向还有不少问题有待研究, 这些问题包括: 步长增加的自动控制, 长程效应的并行算法(目前计算长程效应的式(10)、式(11)不适用于并行算法), 在非各向同性材料(对应热传导系数是张量)中的应用, 汇散函数计算公式的优化, 及在非直角坐标系中的应用等. 这些问题的解决无疑会大幅度提高 MPWT 方法的速度和拓展它在微电子可靠性中的应用范围:

致谢 感谢在伯明翰大学访问期间与 Webb 博士的讨论及其 TLM 计算结果.

参 考 文 献

- [1] P. B. Johns, International Journal for Numerical Methods in Engineering, 1977, 17: 1307~1328.
- [2] X. Gui and P. W. Webb, Int. J. Numer. Model., Electron. Netw., Devices Fields, 1993, 3: 161~164.
- [3] R. Ait-Sadi and P. Naylor, Int. J. Numer. Model., Electron. Netw., Devices Fields, 1993, 6: 253~268.
- [4] S. H. Pulko, A. Mallik and P. B. Johns, Int. J. Numer. Model., Electron. Netw., Devices Fields, 1990, 3: 127~136.
- [5] P. W. Webb and X. Gui, Int. J. Numer. Model., Electron. Netw., Devices Fields, 1992, 5: 251~257.
- [6] 张鸿欣, ‘瞬态热场的步内过程建模(MPWT)算法简介’, 第九届半导体集成电路硅材料学术会论文集, 541 页, 1995 年 11 月, 西安.
- [7] J. Crank, The Mathematics of Diffusion, Charendon Press, Oxford.

Time Domain Unconditionally Stable and Explicit Routine MPWT for Transient Heat Flow

Zhang Hongxin

(CAD Institute, Xidian University, Xi'an 710071)

Received 4 April 1996, revised manuscript received 17 July 1996

Abstract This routine differs from the finite difference routine in Modelling the diffusion Process Within the Time step (MPWT), resulting in the time domain unconditional stability, differs from Transmission Line Matrix (TLM) method in direct modelling the diffusion process, resulting in a much simple resistive-capacitive circuit model. Another feature of MPWT is modelling the long-range heat exchange for large time step. A good agreement between MPWT and other routines and analytical method has been obtained.

EEACC: 0290