真の強さを学ぶ。
新潟大學
NIIGATA UNIVERSITY

２０２３年２月２１日

新　潟　大　学

ポアソン方程式の有限要素解に対する定量的な誤差評価手法の開発

－　高精度で信頼性のある数値解析に向けて　－

半導体分野での製造技術が進歩するとともに、高精度で信頼性のある抵抗率測定法へのニーズが高まっています。このニーズに応えるために、抵抗率測定法を記述している微分方程式（注 1）で表される数理モデルへの高精度で信頼性のある数値計算手法が求められています。

新潟大学理学部の劉雪峰准教授と同大学大学院自然科学研究科博士後期課程の中野泰河（大学院生）は、微分方程式の数値計算手法のひとつである有限要素法（注 2）に対して世界初となる定量的な局所誤差評価を提案して、高精度で信頼性のある数値計算手法を開発しました。

【本研究成果のポイント】

- **半導体分野の抵抗率測定分野における高精度で信頼性のある測定結果へのニーズに応えるため、局所誤差評価の数理モデルを提案しました。**
- **抵抗率測定法を記述する数理モデルであるポアソン方程式の境界値問題（注 3）への有限要素法による近似解への定量的な局所誤差評価法を開発しました。**
- **局所誤差評価の研究に対して、従来の定性的な誤差評価の理論より、具体的な誤差評価を提供できる新たな誤差評価理論を発展させました。**

Ⅰ．研究の背景

抵抗率測定法のひとつである四探針法は、試料表面に探針を接触させて抵抗率を測定する方法です（図 1 参照）。四探針法は 100 年以上の歴史のある測定法で、日本産業規格（JIS）で規定される標準的な抵抗率測定法として広く用いられています。特に近年、半導体分野では高精度で信頼性のある抵抗率測定法へのニーズが高まっており、歩留まり率を向上させるために試料の縁に近い部分での高精度な抵抗率測定法が

求められています。しかしながら、日本産業規格（JIS）で規定される測定法では直方体や円柱といったシンプルな形状の試料のみが考えられているため、試料の縁に近い部分での測定結果の信頼性が疑問視されています（図 2 参照）。そこで、測定法を記述している微分方程式で表される数理モデルに対してシミュレーションを行って、高精度な測定結果を算出することが考えられます。

微分方程式の汎用的なシミュレーション手法である有限要素法は、電磁場解析、流体解析、構造解析などに応用され、広く利用されています。しかしながら、抵抗率測定法を記述する数理モデルについて有限要素法によってシミュレーションを行う場合、数値計算の誤差があるため、「得られた結果がどこまで信頼できるか」ということについて疑問が持たれます。本研究では、シミュレーション結果の品質を保証するため、探針の周囲などの関心が持たれている領域での数値計算の誤差範囲を示す「定量的局所誤差評価」という新しい数学の研究課題を提起しています。

有限要素解への従来の誤差評価の理論として Babuška 氏が 1970 年代に開発した方法がよく知られていますが、これは全領域での大域的な誤差評価であるため、抵抗率測定法のシミュレーションにおける探針の周囲などの関心が持たれている領域における誤差に対しては過大評価となっていました。また、1974 年に Nitsche 氏らの研究によってスタートした局所的誤差評価の研究では、誤差の評価式の中に具体的な値が分からない定数が現れて定量的な評価は困難でした。

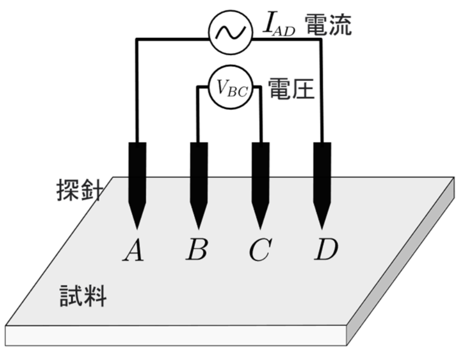


図 1． 四探針法

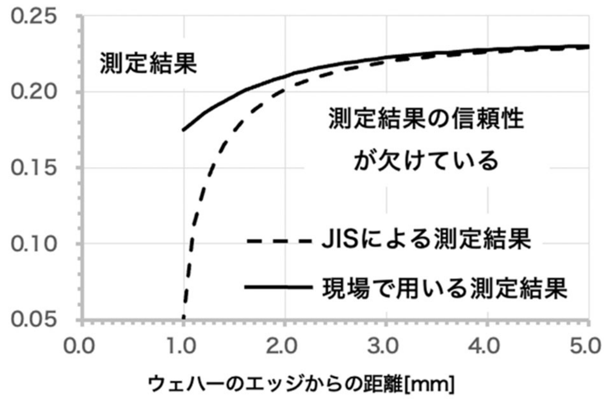
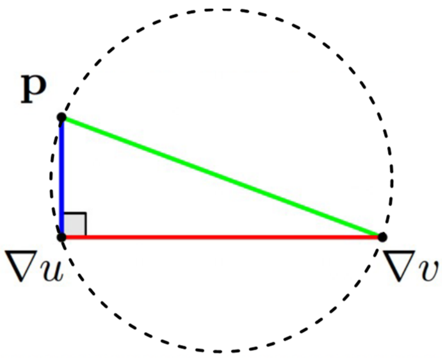


図 2．試料の縁の近くでの測定結果

II．研究の概要と成果

本研究ではポアソン方程式の境界値問題への有限要素解の誤差評価において、「Hypercircle 法」を用いて「定量的局所誤差評価」という新たな誤差評価法を提案しました。

1947 年に、W. Prager、J. L. Synge の両氏は、弾性力学の解析の中で Hypercircle 法を提案しました。Hypercircle 法はある関数空間の上で、図 3 に示されるピタゴラスの定理のような綺麗な構造を持っています。また、同じ時期に、加藤敏夫、藤田宏の両氏も Hypercircle 法と本質的に同じ手法を提案して、偏微分方程式の近似解の誤差評価に適用しています。近年、Hypercircle 法は多くの数学者からも高い評価を受け、その方式の有用性が広く検討されています。2000 年代、菊地文雄氏も Hypercircle 法を利用して、有限要素法を用いた偏微分方程式の近似解の事後誤差評価（注 4）を提案しました。また、劉准教授は菊地氏の手法を発展させたポアソン方程式や、流れに関わるナビエ・ストークス方程式の有限要素解の事前誤差評価（注 5）を提案して高い評価を得ています。



$$\|\nabla u - \nabla v\|^2 + \|\nabla u - \mathbf{p}\|^2 = \|\nabla v - \mathbf{p}\|^2$$

図 3：Hypercircle 法の構造

本研究では、これらの Hypercircle 法に基づく誤差評価手法の発展として、厳密解の局所的な情報を取り出すためのカットオフ関数（注 6）によって拡張された Hypercircle 法を用いることによって、ポアソン方程式の境界値問題の有限要素解への定量的な局所誤差評価を提案しました。

本研究で提案する「定量的局所誤差評価」によって、抵抗率測定法での探針の周囲などの関心が持たれている領域の上のシミュレーション誤差を定量化でき、誤差を抑えた信頼性のあるシミュレーションが可能です。

III. 今後の展開

本研究では、「定量的局所誤差評価」という数値解析分野の新しい誤差評価法を提案し、抵抗率測定法に関わる数値解析の可用性を広げる新しい手法を開発しました。今後の展開として、「定量的局所誤差評価」を応用した数学的に信頼性のある高精度な測定法の開発が考えられ、将来的には既存の方法に変わる新しい抵抗率測定法の標準化が期待できます。

Ⅳ. 研究成果の公表

本研究成果は、2023 年 1 月 16 日、科学誌「Journal of Computational and Applied Mathematics」に掲載されました。

論文タイトル：Guaranteed local error estimation for finite element solutions of boundary value problems

著者：中野泰河、劉雪峰

doi: 10.1016/j.cam.2023.115061

Ⅴ. 謝辞

本研究は、JST 次世代研究者挑戦的研究プログラム JPMJSP2121、科学研究費補助事業（20KK0306、20H01820、21H00998）の支援とナプソン株式会社からの共同研究経費を受けて行われました。

【用語解説】

（注 1）微分方程式：変数とその関数との関係を、導関数を含む形で表した方程式。

（注 2）有限要素法：方程式が定義された領域を小領域（要素）に分割し、各小領域における方程式を比較的シンプルな関数で近似する手法である。 構造力学分野で発達し、偏微分方程式の数値計算の手法として広く使われている。

（注 3）境界値問題：微分方程式の解を、それが定義される領域の境界上の値に制限（境界条件）を付けて求める問題のこと。

（注 4）事後誤差評価：数値計算手法を利用して方程式を解析するとき、実際に得られた近似解を用いて誤差を評価すること。

（注 5）事前誤差評価：数値計算手法を利用して方程式を解析するとき、近似解を求める前に数理的考察により誤差を評価・推定すること。

（注 6）カットオフ関数：注目する部分領域のみで零でない値を持っている関数。関数の局所的な情報を抽出するために利用される。

本件に関するお問い合わせ先
新潟大学理学部
准教授　劉　雪峰（リュウ　シュウフォン）
E-mail：xfliu@math.sc.niigata-u.ac.jp