

## GPU 並列計算によるキャリア輸送シミュレーションの高速化 Accelerated parallel computing of carrier transport simulation utilizing graphics processing units

早大理工<sup>1</sup>, 阪大院工<sup>2</sup>, JST-CREST<sup>3</sup> ○鈴木 晃人<sup>1</sup>, 今井 裕也<sup>1</sup>,  
神岡 武文<sup>1,3</sup>, 鎌倉 良成<sup>2,3</sup>, 渡邊 孝信<sup>1,3</sup>

Waseda Univ.<sup>1</sup>, Osaka Univ.<sup>2</sup>, JST-CREST<sup>3</sup>, ○Akito Suzuki<sup>1</sup>, Hiroya Imai<sup>1</sup>,  
Takefumi Kamioka<sup>1,3</sup>, Yoshinari Kamakura<sup>2,3</sup>, and Takanobu Watanabe<sup>1,3</sup>

E-mail: suzuki@watanabe.nano.waseda.ac.jp

【はじめに】Si CMOS の微細化に伴い、デバイス特性の揺らぎやノイズの要因として不純物イオンやキャリアの離散性が無視できなくなり、Molecular Dynamics(MD)法や Monte-Carlo(MC)などの粒子シミュレーションの重要性が高まっている[1,2]。しかし、ソース・ドレインを含むデバイス全体のシミュレーションには、数千から数万粒子からなる大規模系を扱う必要があり、粒子間相互作用の計算負荷が大きくなることから、計算の更なる高速化が必須である。近年、Graphics Processing Unit(GPU)による並列計算を分子シミュレーションに適用し、計算の高速化に成功した例が報告されている[3,4]。そこで本研究では、粒子ベースのキャリア輸送シミュレーションである Ensemble Monte-Carlo/Molecular Dynamics(EMC/MD)法[5,6]を、GPU 並列計算により高速化することを試みた。

【シミュレーション手法】EMC/MD 法では、キャリアおよび不純物イオンを古典的な質点として表現する。キャリア間およびキャリア-不純物イオン間の Coulomb 相互作用を計算してキャリアに働く力を求め、分子動力学計算を実行することにより Coulomb 散乱を表現する。フォノン散乱の効果は、モンテカルロ法により確率的に運動量ベクトルを更新することで再現する。本研究では、Coulomb 力の計算部、分子動力学計算部およびモンテカルロシミュレーション部の全てを並列化した。テスト計算に用いたモデルを図 1 に示した。このモデルは、3 次元周期境界条件を課した立方体の Si バルクである。キャリアとして伝導電子のみ用意し、電荷中性条件を満たすよう同数の不純物イオンをランダムに配置した。一様電界を印加してキャリア輸送過程のシミュレーションを行い、1 ステップ  $10^{-17}$ s の計算を  $10^5$  ステップ完遂するまでの実行時間を評価した。CPU 1 コアと GPU 並列計算とで実行時間を電子数を変化させながら計測し、GPU 並列計算による実行時間の高速化率を算出した。なお 1 つの電子の計算に対し GPU1 スレッドを与え、電子数と同数のスレッドを設定した。使用した CPU は Intel core i7 3930k、GPU は Nvidia GeForce 560Ti である。

【結果と考察】図 2 は、CPU1 コアおよび GPU による計算時間の電子数依存性を示したものである。電子数が多い場合では、GPU の方が高速であることが分かる。この結果は、電子数が増え並列度が高まるにつれ GPU 並列計算の効果が高まったためと考えられる。一方、電子数が少ない場合では、GPU の計算速度が CPU のそれを下回る。これは、GPU の 1 スレッド自体の計算処理能力が CPU より低いことと、並列化処理のオーバーヘッドが並列化により短縮される効果より大きいことが原因と考えられる。数千から数万粒子の大規模な系では、GPU 並列計算を用いることで 10 倍以上の高速化を実現できることを示している。以上の結果から、GPU 並列計算はソースやドレインを含むデバイス全体の大規模シミュレーションを実現する上で有効であることが判明した。

【謝辞】なお、本研究は科学研究費補助金・基盤研究(B)の支援を受けて行われた。【参考文献】 [1] T. Kamioka et al.: IEDM Extd. Abs. (2012)17.2.4 [2] S. Nobuyuki et al.: IEDM Tech. Digest, (2000) 275. [3] J. A. Anderson et al.: J. Comp. Phys., 227, (2008) 5342. [4] E. Alerstam et al.: J Biomed Opt. (2008); 13:060504. [5] Y. Kamakura et al.: IEICE Trans. Electron. E86-C (2003) 357. [6] C. Jacoboni et al.: Rev. Modern Phys., 55 (1983) 645.

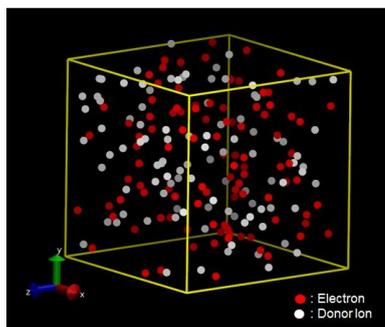


図 1. シミュレーションモデル.

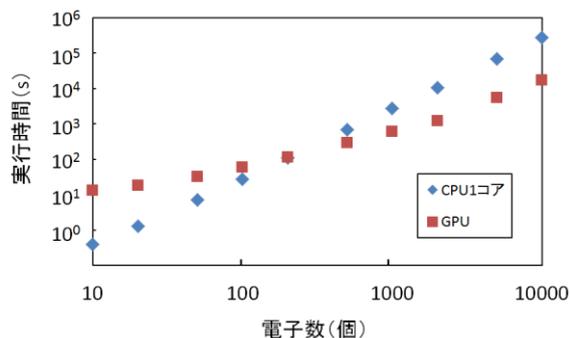


図 2. 各電子数における CPU と GPU 実行時間の比較.