

# Poisson-Schrodinger Cellular Automaton 法の並列化の検討

## On the Parallelization of the Poisson-Schrodinger Cellular Automaton Method

産総研<sup>1</sup>, 富士通<sup>2</sup> °福田 浩一<sup>1</sup>, 服部 淳一<sup>1</sup>, 浅井 栄大<sup>1</sup>, 矢板 潤也<sup>2</sup>, 小谷 淳二<sup>2</sup>

AIST<sup>1</sup>, Fujitsu<sup>2</sup>, °Koichi Fukuda<sup>1</sup>, Junichi Hattori<sup>1</sup>, Hidehiro Asai<sup>1</sup>,

Junya Yaita<sup>2</sup>, and Junji Kotani<sup>2</sup>

HEMT 等の二次元電子ガスの電子輸送解析において、Poisson-Schrodinger 法とフラックス補間型 Cellular Automaton 法の組合せが有効である[1]。Monte Carlo 粒子法に比較すると安定した計算が可能であるが、目的によって計算量が増加する。本手法の高速化の検討を行ったので報告する。

Fig. 1 は本手法の概念図、Fig. 2 は概略フローチャートである。Poisson-Schrodinger 法によりサブバンドエネルギーと電子濃度分布を求め、加速方向の電界による電子の加速走行と散乱を Cellular Automaton 法によって求める。計算量は時間ステップの回数に比例するが、中でも散乱の計算量が最も多い。特にサブバンド間散乱には波動関数のオーバーラップ積分、特に極性光学フォノンの場合は二重積分となるため最も計算負荷が高い。波動関数の変化は遅いためオーバーラップ積分の計算は間引いて行う。

計算量は (サブバンド数)×(二次元電子ガスの二次元 k 空間メッシュ数)それぞれに対し、散乱の計算で(閉じ込め方向の一次元実空間メッシュ数の二乗)×(サブバンドの組合せ)の計算量となる。サブバンド数を 10 とすると k 空間メッシュは 1000×10、実空間メッシュは膜厚 400nm を 0.25nm で切った場合の計算で 1600 メッシュ、10 サブバンドの組合せは 45、1000×10×1600×1600×45≒10<sup>12</sup> の計算量となる。Cellular Automaton 法の散乱フラックス計算は、時間ステップ内では k 空間メッシュに対して完全に独立に計算できるため、並列化効率が高い。Fig. 3 に OpenMP を用いた並列化における、計算時間のコア数依存を示す。上で試算した条件を用い、0.5 fs 刻みで 2 ps までの計算を行った。コア数に対し順調にスケールしており、並列化に向けた手法と言える。

This work was partially supported by the Innovative Science and Technology Initiative for Security Grant Number JPJ004596.

[1] K. Fukuda, J. Hattori, H. Asai, J. Yaita, and J. Kotani., JJAP (2020).

DOI: <https://doi.org/10.35848/1347-4065/abd70b>

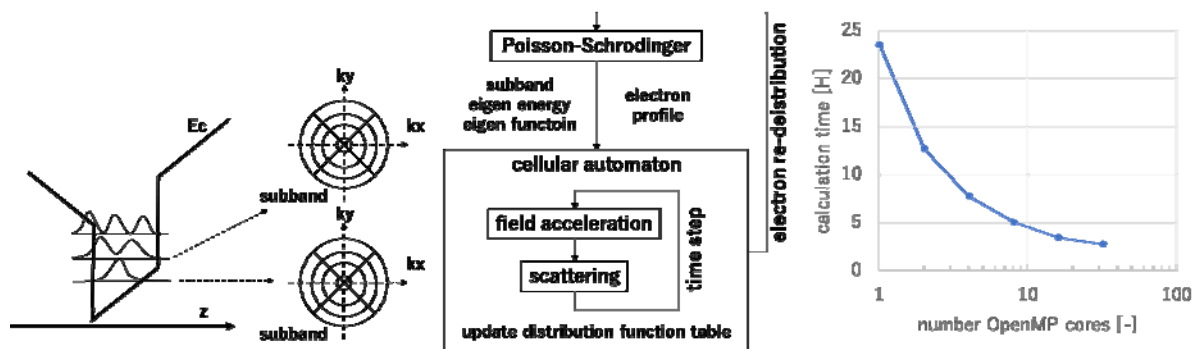


Fig. 1 Concept of the method

Fig. 2 Flow chart of the method

Fig. 3 CPU time for OpenMP