

直接法による半導体シミュレータ向け 連立方程式解法の高度化

大阪大学 サイバーメディアセンター 招聘准教授 鈴木 厚

目的: 半導体問題を記述するDrift-Diffusion方程式は静電場と電子, 正孔密度分布を記述するが, 拡散係数の指数関数依存性により拡散方程式を離散化した際の行列の条件数が極めて大きい. 倍精度演算では計算精度が不足する場合に, 連立方程式ソルバーの直接法コードがベクトルCPUのSX-ACEで4倍精度演算を実行できるよう拡張する.

内容: DissectionコードはC++テンプレートを用いるため浮動小数点データに柔軟性がある. 上位と下位の二つの倍精度実数で表現するdouble-doubleデータを4倍精度とする. Fortran90にはNEC製のALSQUADを, C++にはQDライブラリーを用いる. 行列演算のBLASライブラリーはFortran90のインライン展開を用いてベクトル化を行う.

結果: 表は自由度数 568,455, 非零要素数 8,330,429 の疎行列での演算結果である.

SX-ACE標準のreal(kind=16)/long double型はベクトル化できない. ALSQUAD/QDライブラリーのtype(quad)/dd_real型はベクトル化が可能であり, 倍精度演算では同等の速度を実現するIntel製CPUに対して4倍精度演算では3倍程度高速である.

利用した計算機	CPU	data type	経過時間 (秒)	CPU 時間 (秒)	並列効率
SX-ACE	i7-6770HQ	double	7.693	27.397	×3.55
使用メモリ 13GB	i7-6770HQ	dd_real	1,203.2	4,709.9	×3.9
ベクトル化率 95%	SX-ACE	long-double	10,599.0	41,369.0	×3.9
並列化 4並列	ベクトル化無	dd_real	35,151.0	137,740.0	×3.9
	ベクトル化有	aslquad/dd_real	342.66	1,329.6	×3.88