A084

物性計算のためのフェルミ・ディラック積分計算アルゴリズムに関する検討

Research on numerical calculation algorithm of the Fermi-Dirac integral for calculations in solid-state physics

AC01 石井翔平
指導教員 大杉功, 加藤雅彦

1. はじめに.

現在, 縮退半導体の電気伝導現象を解析するためにキャリア密度, 比抵抗, 熱電能などの数値計算を行う場合, 多くは古典分布を用いたMaxwell-Boltzmann 分布関数(式 1)の近似計算で済ませている. これを正確に計算する場合はフェルミ・ディラック積分(式2)を数値計算しなければならない. しかし, 多くの計算アルゴリズムでは変数のビット長の制限により相対誤差で 10^{-16} 程度しか求められていない. 実用的数値計算において誤差が累積することによって精度が低下するため, 今後の研究にはさらなる精度の向上が求められている. そこで本研究では, フェルミ・ディラック積分の十分な精度を保った, 効率的なアルゴリズムの開発を目指した.

$$f(x) \propto \exp(-x) \qquad \text{(式 1)}$$

$$Fr(\eta) = \int_0^\infty \frac{x^r}{exp(x-\eta)+1} dx \qquad \text{(式2)}$$

ただし, $x=E/k_BT$, $\eta=E_F/k_BT$, k_B:ボルツマン定数, T:絶対温度, E:キャリアのエネルギー, E_F:フェルミ準位, s:散乱の種類に対応するパラメータである.

2. フェルミ・ディラック積分に対する効率の良いアルゴリズムの検討.

フェルミ・ディラック積分の数値積分アルゴリズムとしてシンプソン則を使用した場合, 数値積分の精度を向上させるために多くとられる方法として積分の上限値, 積分分割数を増加させる手法がある. この手法は積分の上限値や分割数を増加させることによって, 積分が収束するまでにかかる計算コストが増大するデメリットがある. そのため計算コストをできるだけ抑えるために被積分関数を導出するアルゴリズムの選定や積分上限値や積分分割数を適切に設定することが必要となる. 積分上限値や積分分割数の適切な値については, 積分上限値はフェルミ・ディラック積分の打ち切り誤差の値から求められ, 積分分割数は分割数を段階的に増加させることによって求められる.

3. 被積分関数を導出するアルゴリズムの選定.

被積分関数を導出する方法が違うアルゴリズム①(級数展開と数値積分を組み合わせ導出する方法[1]), アルゴリズム②(フェルミ・ディラック積分を連分数に変え数値積分する手法[2])の実行時間を比較し効率よくフェルミ・ディラック積分を解くことができるアルゴリズムを比較, 検討した結果アルゴリズム①をフェルミ・ディラック積分アルゴリズムに採用した.

4. 使用変数型の検討

現在多くの数値計算アルゴリズムで使用されている浮動小数点型の変数型は double 型である. 本研究では従来の精度を上回る精度を求めているので浮動小数点型の 64bit 以上である 128bit のビット長を持つ変数である_float128 を実装した.

5. 積分上限値・分割数の検討

フェルミ・ディラック積分を数値積分するためには有限の値を上限値とする. 精度に応じた有限の積分範囲を求め. 定めた有限の積分範囲から打切り誤差を考慮した上限(式 3)を設定する.

$$L = a + bs + \eta \qquad \text{(式3)}$$

ただし, L:上限値, $a \fallingdotseq -ln|Ea|$, Ea:誤差の許容値 $b=ln[a+\eta+s\,ln(a+\eta)]$,である.

積分分割数を従来の精度において収束する 10^4 から 10^9 まで 10 倍ずつ変化させた値を出力させた. 出力された値において,変数による桁あふれが観測されなかった最大の分割数 10^9 を適切な分割数と決定した.

6.まとめ

被積分関数を導出するアルゴリズムはアルゴリズム①, 使用変数型は_float128, 積分分割数は 10^9, 上限値は精度 10^{-34} に最適な $79+5s+\eta$ が適切であることがわかった. また、上記の条件を設定しプログラムを実行した結果, 従来のフェルミ・ディラック積分アルゴリズムの場合の精度 10^{-16} に比べて 10 桁以上の高い精度が得られた.

文 献

[1] 坂田亮 編: “熱電半導体工学−基礎とその応用−”, リアライズ社, 第3章, (2001)

[2] T. Ozaki : “Continued fraction representation of the Fermi-Dirac function for large-scale electronic structure calculations”, Phys. Rev. B 75, 035123 (2007).