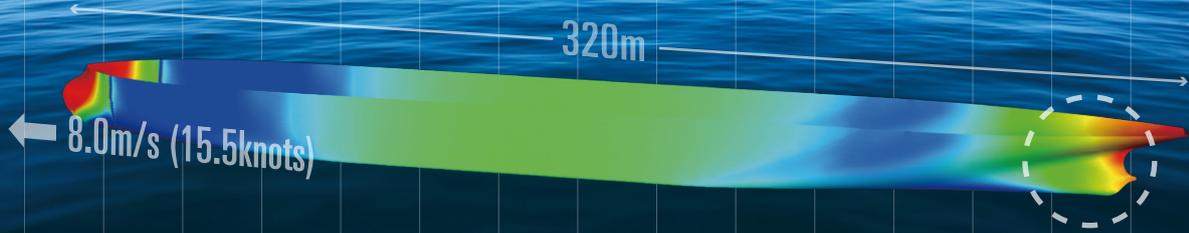


# 計 算 互 学 ナ ビ

Quarterly News Letter Winter 2014



Supercomputing Conference 2013 Best Poster Award

## 強スケーリング・プラズマ乱流シミュレーション

日本原子力研究開発機構

シミュレーションの現場から

ソニー 先端マテリアル研究所

ソフトウェアライブラリ

**PHASE**

# 核融合炉の閉じ込め性能を解明する プラズマ乱流シミュレーション

去る2013年11月にデンバーで開催されたSupercomputing Conference 2013 (SC13)で、日本原子力研究開発機構のプロジェクトが高い評価を受け、ベストポスター賞を獲得しました。このプロジェクトはHPCI戦略プログラム分野4「次世代ものづくり」で開発された共通基盤技術の一部です。

重水素と三重水素をプラズマ化し、原子核を融合させることで発生する膨大なエネルギーを利用する核融合。2020年頃の実験炉稼働に向けて国際的な開発が進められている。

核融合のためには、原子核同士の衝突頻度を上げるため、磁場中に約1億度の超高温プラズマを閉じ込める必要がある。いかに効率よく熱を閉じ込めるかが重要だが、プラズマの温度と密度が高くなると乱流が発生する。乱流は中心部の高温プラズマを外側へと拡散させてしまうため、高温状態を維持するには乱流の効率的な制御・抑制が重要な課題である。これは現在フランスで建設中の国際熱核融合実験炉「ITER」の炉心性能やその先の原型炉、そして実用炉の経済性を左右する課題でもある。核融合プラズマのマルチスケール乱流輸送のシミュレーション解析が重要な理由はここにある。

核融合プラズマの計算には他の乱流とは異なる問題がある。まずひとつ目は、イオンと電子のスケールの違いだ。

燃料粒子はプラズマ状態なのでイオンと電子に電離している。これらの荷電粒子は磁力線の周りを旋回運動するが、イオンと電子の質量は3桁も異なるため、その旋回半径はイオンが5mm程度となるのに対し、電子は0.1mmとなる。この旋回半

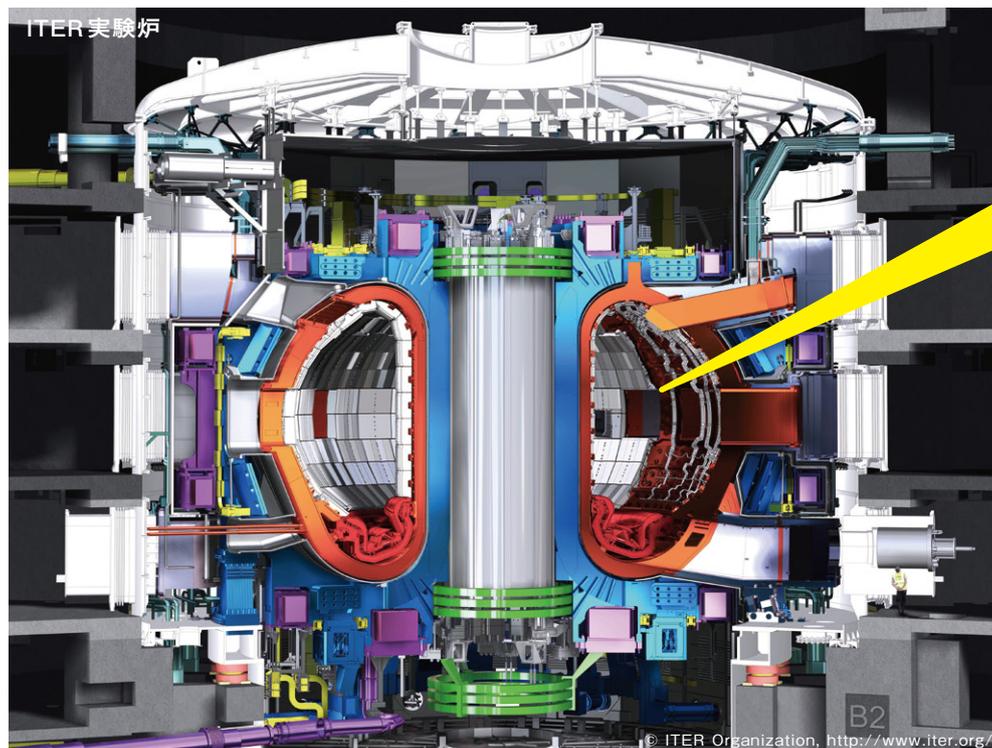
径が乱流の最小スケールや駆動源のスペクトル分布を決めるため、イオンスケールと電子スケールが大きく乖離したマルチスケール乱流が存在する。

これまではイオンスケールの乱流と電子スケールの乱流は同時に計算することができず、別々に扱われていた。両方を同時に解くためには数十万コア以上の並列化が必要だったからだ。そのため両者の影響を含んだマルチスケール乱流が支配する電子熱輸送の特性は良く分かっていなかった。

日本原子力研究開発機構の前山伸也氏、同井戸村泰宏氏は、通信コストを最小にして、約70万コアの「京」をフル活用する手法を新規に開発し、電子スケールからイオンスケールまでを同時に解析することを可能にした。並列化率99.9999%（シックスナイン）以上を達成したこの成果はSC13で高評価を獲得する。解析コードの開発者である自然科学研究機構核融合科学研究所の渡邊智彦氏を交え、その詳細を聞いた。

## 並列化率99.9999%を達成

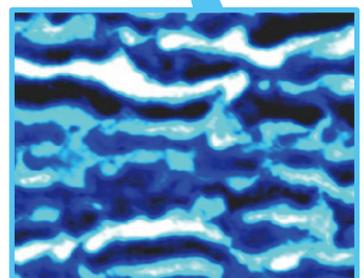
核融合プラズマの計算が通常の流体の乱流とは異なるもう



イオン系乱流



電子系乱流



ITER（イーター、国際熱核融合実験炉）は日本、EU、ロシア、米国、韓国、中国、インドの七極によって進められている超大型国際プロジェクト。2020年頃の運転開始を目指して現在、フランスのカダラッシュに建設中。「ITERが成功すれば核融合は実現できる」と関係者たちは語る。



日本原子力研究開発機構  
システム計算科学センター  
研究主幹  
井戸村泰宏氏

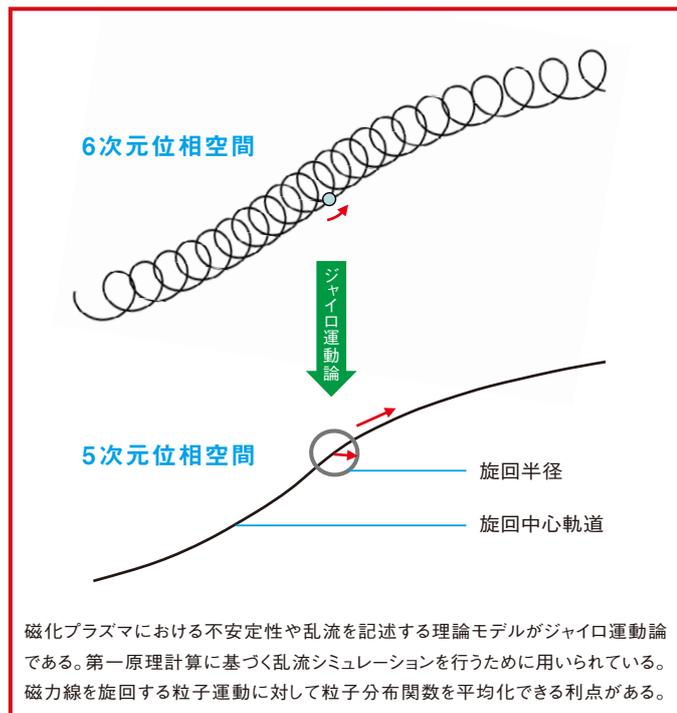


自然科学研究機構  
核融合科学研究所 教授  
渡邊智彦氏



日本原子力研究開発機構  
核融合研究開発部門  
博士研究員  
前山伸也氏

## ■ ジャイロ運動論



ひとつの点は、空間3次元に加えて速度2次元の、5次元の位相空間上の問題を解かなければならないところだ。そのうちの2次元を100×100のメッシュで表すとすると、3次元だけのモデルに比べて1万倍の計算量が必要になる。「京」クラスのコンピュータが登場するまで、このような約1兆格子のマルチスケール乱流を計算することはできなかったのだ。

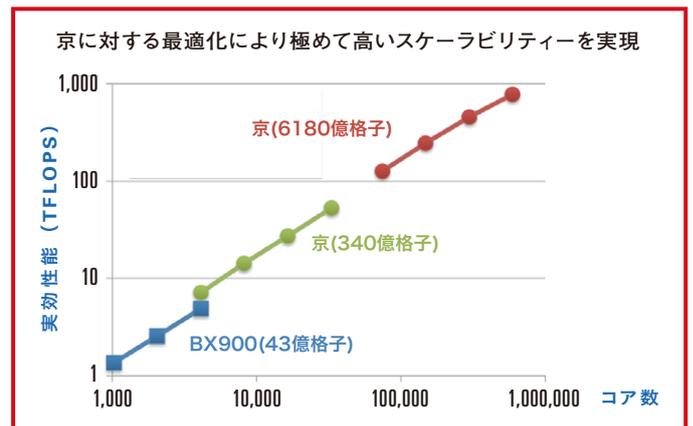
ではなぜ速度次元が必要なのか。通常の流体の場合は粒子間衝突が大きく、各粒子は熱力学的平衡状態にあると仮定されている。そのため速度分布を解く必要はない。だが核融合プラズマのような超高温状態では粒子間衝突が小さく熱平衡状態からずれる。だから粒子の速度分布関数の時間発展を解かなければならなくなるのだ。

本来は速度も3次元なのだが、プラズマを記述するために用いられる理論モデル「ジャイロ運動論」では回転は平均化できるため速度次元をひとつ減らせる。この特徴によりジャイロ運動論は核融合プラズマのほか、宇宙プラズマ乱流解析等にも使われている。

SC13での受賞は、スケールが異なる2つの駆動源があるマルチスケール乱流の問題を解いており、物理学的にも興味深いという点と、京の3次元トラスネットワークで5次元の問題を解くために通信最適化を行うという数値計算上の成果の2点が高く評価されたからではないかと、実際に発表を行った前山氏は語る。では、5次元の問題をどう3次元トラスで効率化したのだろうか。

「通信コストが高いものが最小距離で通信を行うように、並列化に用いているMPIのプロセス配置の最適化を行いました。さらに削減された通信をマスクするように、通信と演算の同時処理を行って、通信中にCPUがさぼらないようにしています。これで京をフル活用して、数十万コアでシミュレーションができるようになりました」(前山氏)

## ■ 99.9999%の強スケーリング



### ベストポスター賞

SC13でベストポスター賞を受賞した前山氏。「通信のオーバーヘッドを減らし、計算配分を工夫して極限まで計算の部分を高めて性能を引き出したことに価値がある」と井戸村氏はコメントした。コア数が増加するエクサスケールコンピュータでは「エイトナイン」を達成する必要がある。



「いろいろなタイプの通信があるわけです。隣接するノードとの通信や、縦方向でガサッと集めるタイプ、ブロック（部分領域）内の通信とか。それらをトラスのなかで配置するにあたっては様々なトレードオフがある。その最適化を70万コアに対してフルに行ったのが彼のやり方の新しいところですよ」(井戸村氏)

### エクサスケールと実験炉

これまでの研究で、磁場構造や駆動源のスケール、プラズマの圧力などによって異なる乱れのパターンが現れることが分かっている。また乱流からは乱れだけではなく「帯状流」と呼ばれる層流も非線形効果によって生まれてくること、さらに乱流輸送は帯状流によって抑えられることも分かっている。

「流れの非線形性ダイナミクスをうまく活かして、最適な閉じ込め条件をシミュレーションで見つけていく。それが私たちの大事な役割です」(渡邊氏)

これまでの装置では、実際の核融合反応が起こらない状態でプラズマ閉じ込め実験を行ってきた。だがITERでは核融合反応が起こる。核融合による高エネルギー粒子は主に電子へエネルギーを与えながらプラズマを加熱するため、電子の熱輸送が炉心性能を決める重要な要因となる。今回の前山氏らの研究は、ITERの稼働に先駆けて電子熱輸送の特性を検証し、炉心性能を予測することに繋がるだろう。

ITERの運転開始は2020年頃と考えられている。次世代のエクサスケールスーパーコンピュータの実用化と時期が重なる。

「エクサスケールでITERの解析をすることになるだろうと期待しています」(井戸村氏)

ITERの実用化にシミュレーションが果たす役割は大きく、今後も井戸村氏らの研究は続けられていく。

# シミュレーションがもたらす新知見が 柔らかいエレクトロニクスを実現する

ソニー  
先端マテリアル  
研究所

ソニーの先端マテリアル研究所は製品開発の基礎となる新材料の研究開発を行う部門です。柔らかいディスプレイの実現に不可欠な有機半導体の研究におけるシミュレーションの役割について取材しました。

2013年7月、ソニーからある論文が発表された。『第一原理計算によるペンタセン、ルブレン、C<sub>8</sub>-BTBTのホッピング伝導とバンド伝導の解析<sup>\*1</sup>』という題名から、有機材料に関するものだと分かる。その結論は、フレキシブル有機ELディスプレイの実現につながる重要な知見を示している。

執筆者の小林一氏はソニー先端マテリアル研究所で有機材料の解析を担当する研究者だ。

「美しい動画を映すことができるフレキシブル有機ELディスプレイを実現するためには、動作の速い有機半導体が必要です。別の言い方をすると、高いキャリア移動度を持つ有機材料を作り出すことが製品開発の第1歩となります」

これまで有機材料におけるキャリア（電子と正孔）の伝わり方は「ホッピング伝導」が支配的であると考えられてきた。熱励起されたキャリアが分子から分子へとランダムに飛び移る現象であるホッピング伝導は遅い反応である。つまり、この原理を元に高速な半導体を作ることはできない。もうひとつの伝わり方「バンド伝導」は高速で、シリコンに代表される無機系の半導体はこの性質を利用している。

遅い有機と速い無機を組み合わせることでデバイスを作ることは可能だ。従来の有機ELディスプレイはそうなっている。ではなぜ、ソニーは有機半導体だけからなるディスプレイの実現を目指しているのだろうか？

## 印刷で作る柔らかいディスプレイ

無機半導体の製造には大規模な設備が必要となる。一方、

有機物の多くは「インク」に加工して、印刷という単純な工程で回路化することが可能だ。大面積の柔軟な基板にも対応しやすい。また、印刷の原料使用効率は、最適化することで90%以上となる。無機半導体の場合は数%とされるので、環境資源問題の観点でも有利な製造方法と言える。

さらに、有機材料だけで構成されたディスプレイによって、まったく新しい体験が生じると小林氏は語る。

「オール有機ならば、印刷によってデバイスを製造できます。そうすると、大きな面積のものでも非常に安くなるでしょう。さらに、今、私たちが重視しているのは、フレキシブルという性質です。駆動回路も含めて全体を有機材料だけで作れば、フィルム状の柔らかい素材に印刷することができ、腕時計のように手首に巻きつけたり、鉛筆にくるくると巻き取るといった使い方が可能になります。これは、目に見える、新しい市場価値です」

ソニーからは、ウェアラブルスマートフォン、インテリジェントペーパー、ロールスクリーンディスプレイといった製品イメージが有機トランジスタのアプリケーションとして提案されている。巻き取り可能な有機TFT駆動・有機ELフレキシブルディスプレイについては、すでに試作品が公開されている。「柔らかいエレクトロニクス」は将来のソニーを形作るキーテクノロジーのひとつだ。

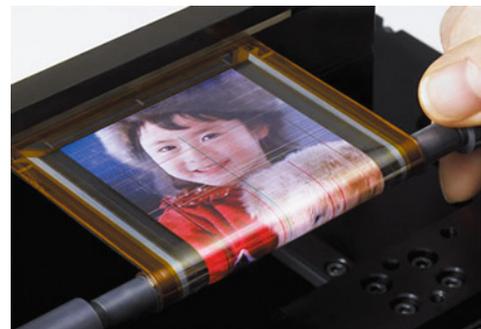
## ファンデルワールス相互作用

従来の「固い」ディスプレイに匹敵する表示能力を持つ「柔

今後は  
電機メーカーでも  
物性シミュレーションが  
ものづくりに活用  
されます



ソニー 先端マテリアル研究所  
材料解析センター  
シニアリサーチャー  
小林一氏

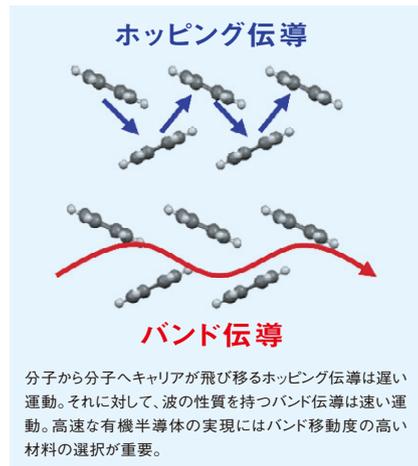


巻きとれる有機トランジスタ駆動フレキシブル有機ELディスプレイ

2010年に発表された試作機。小さく巻き取れるほど柔らかくでありながら、動画を滑らかに再生することができる。

[http://www.sony.co.jp/SonyInfo/technology/technology/theme/organictransistor\\_01.html](http://www.sony.co.jp/SonyInfo/technology/technology/theme/organictransistor_01.html)

ホッピング伝導とバンド伝導



有機EL素子と有機TFT駆動素子を  
組み合わせたフレキシブルディスプレイの模式図

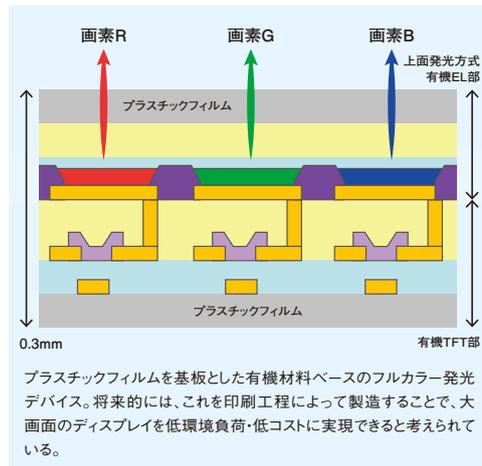


表1▶ 有機半導体のバンド移動度

有機材料	ペンタセン*	ルブレン*	C8-BTBT*
実験値	35	40	31
計算/ vdWなし	0.55	0.21	0.15
計算/ vdWあり	58	51	36

vdW: ファンデルワールス相互作用 単位: cm<sup>2</sup>/Vs

らかい] ディスプレイを実現するためには、先述のキャリア移動度の問題を片付ける必要がある。具体的には移動度10cm<sup>2</sup>/Vs以上という性能を持つ、速い有機材料の開発が必要だ。

「有機半導体ではホッピング伝導が主と言われていました。その移動度は5cm<sup>2</sup>/Vs以下で、半導体にしたときの動作が遅く高精細の動画は映せません。一方のバンド伝導なら、もっと高い値が望めるのですが、理論限界がよく分かっていなかったのです。有機材料でバンド伝導は起こらないという人も多かった。そんななか、実験によって35や40といった移動度を示す例が出てきました。でも、それを理論に基づいた計算で説明することはできませんでした」

従来の手法で計算すると、バンド伝導が過小評価され、材料の実力を測ることができない状況だった。その原因は分子間の相互作用にある。

「なかなかバンド伝導の計算ができなかった原因は、電子とフォノンの相互作用、それからファンデルワールス力という分子間相互作用の取り扱いが難しいことにありました。とくにファンデルワールス力は遠くまで影響が及び、裾野のほうまでキレイに計算しないと正しい結果が出ないのです。複雑な計算ですが、これを省略すると、分子がフワフワ動きまわってキャリアがすぐに散乱し、その結果移動度が下がってしまう。従来の計算手法でバンド伝導の値が過小評価された原因は、ここにありました」

PHASEから得られた新たな知見

この状況を解決したのが、物質・材料研究機構の大野隆央氏を中心に開発が進められている第一原理バンド計算ソフトウェア“PHASE”である。PHASEがファンデルワールス相互作用に対応したことで、実験値に近いバンド移動度が計算で求められるようになった。

「ファンデルワールス力を実際に計算できるようになったのは、計算機の進歩と大野さんたちの開発の成果でしょう。新しいPHASEを使って、3種類の有機材料についてバンド移動度を計算すると、どれも従来の結果より100倍程度大きな値を示

しました。つまり、ファンデルワールス力のおかげで分子は思ったほど振動していないこと、その結果、バンド移動度は36-58 cm<sup>2</sup>/Vsという実験値に近い高い値となることがわかりました」表1▶

有機半導体の開発者を勇気づける知見がシミュレーションによって得られた瞬間である。

今後、電機メーカーの研究開発の現場でも、シミュレーションが活用される場面は増えるはずと小林氏は語る。

「第一原理計算の利用はまず化学メーカーで立ち上がり、次いで製薬の分野で普及しました。電機メーカーはどちらかというが遅かったのです。その理由は、デバイスの開発には化学メーカーや製薬会社が求めるものよりも大きい系が必要だからでしょう。計算機の性能が上がり、PHASEのようなソフトウェアが登場したことで、これから電機業界からのアウトプットが増えてくると思います」

今後、電機メーカーにおいてシミュレーションはどんな役割を果たすのだろうか？

「計算によってムダな試作を省くことができれば、開発のスピードがあがるはずで。デバイスの試作にはたいへんなコストがかかりますが、材料をスクリーニングする際、明らかにダメなものをはねるだけでも、ずいぶん喜ばれるでしょう。また、材料だけでなく、デバイスや、それを組み立てたセットのレベルまで通してシミュレーションできる、一種のマルチスケールシミュレーションが実現すると、製品開発の様相は変わると思います。10年後くらいには、計算機の性能もそれが可能なレベルに達するのではないのでしょうか」

★用語解説

**ペンタセン、ルブレン、C8-BTBT**

有機半導体の材料となる化学物質の名称。このなかで最も新しいC8-BTBTは印刷プロセスとの親和性が高く、インクジェットで塗布し半導体薄膜を形成する例が産業技術総合研究所から発表されている。

[http://www.aist.go.jp/aist\\_j/press\\_release/pr2011/pr20110714/pr20110714.html](http://www.aist.go.jp/aist_j/press_release/pr2011/pr20110714/pr20110714.html)

## 第一原理電子状態計算ソフトウェア

## PHASE

## PHASEのシステム構成



第一原理計算とは、分子の構造を経験的データを用いずに基本的な方程式だけを使って求めることを意味する。PHASEは密度汎関数理論という計算手法を基に、金属・絶縁体・半導体といったあらゆる材料に対して第一原理電子状態計算を適用し、高精度かつ大規模にその性質を分析することができるプログラムだ。

同じ分野の他のプログラムと比較してPHASEがとくに優れている点は、その強力なスケーラビリティである。

「世界的に見ると同様の機能を持つソフトはいくつかあります。しかし、パソコンから京クラスのスパコンにまで対応している無償ソフトはPHASEだけでしょう。スケーラビリティに関しては十分時間をかけてやってきたので、かなり先を行っている」と自負しています」と語るのは物質・材料研究機構（NIMS）の大野隆央氏。

数万原子規模の系に対応可能な高並列性能と強スケーリング性能を持つPHASEは、革新的な特性を持つ次世代ナノデバイスの実現につながる研究開発に活用されている。

## 次世代半導体ナノデバイス

2025年にIT機器の消費電力は全消費電力の約25%に達すると言われ、半導体の消費電力低減が社会的に求められている。また、プロセスの微細化が限界に近づくなか、新しい半導体素子の構造と材料の開発は急務だ。こうした課題に対して、

すでにPHASEが知見を提供した事例を2つ挙げる。

ひとつは、立体的な構造によってリーク電流を低減するトランジスタ「FinFET」、もうひとつは原子1個分の厚さしかない炭素シート＝グラフェンからなる低消費電力デバイス「グラフェン・トランジスタ」の例である。

FinFETの事例では、走査型トンネル顕微鏡を用いても正確には見ることができないシリコンの表面構造をPHASEによって可視化した。表面構造モデルを探索的に計算して（1,000原子の系に対して約1,000のモデルを適用）、最も安定なモデルを見つけることで、実際の原子配置を解明した。

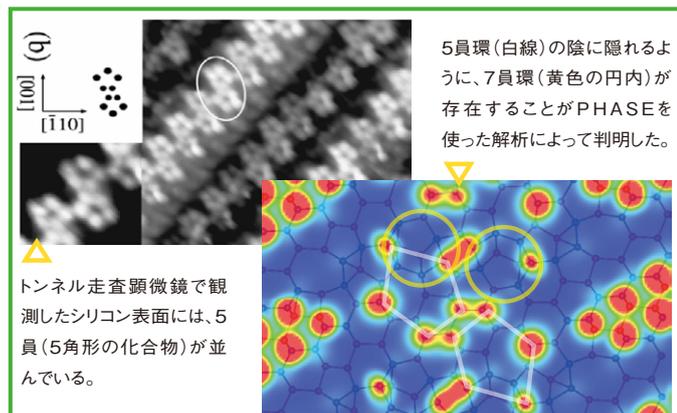
グラフェン・トランジスタの事例では、静的解析では妥当性に疑問が生じる薄膜成長過程の解析を第一原理計算によって行い、大面積で厚さが均一な高品質グラフェンの製造につながる新たな知見を提供した。

こうしたシミュレーションによって得られた知見がデバイス開発を助けると大野氏は語る。

物質・材料研究機構（NIMS）  
大野隆央氏



## ■ シリコン表面構造の大規模構造探索



(g)

5員環(白線)の陰に隠れるように、7員環(黄色の円内)が存在することがPHASEを使った解析によって判明した。

トンネル走査顕微鏡で観測したシリコン表面には、5員(五角形の化合物)が並んでいる。

フィン電界効果トランジスタ素子(FinFET)で重要な110面と呼ばれる表面の構造を、探索的に解析した例。走査型トンネル顕微鏡による観測では分からなかった詳細な構造が明らかになった。

「デバイスのなかで何が起きているかを把握したいときにPHASEは有効です。デバイスの生成過程だけでなく、劣化する原因を計算で確かめるためにも使えます。そうした解析の結果をもとに技術者はアイデアを生み出し、プロセスや機能を良くすることができるでしょう」

## ■ 次世代エネルギーデバイス

次世代半導体の研究開発と並んでPHASEの使用事例が増えているのが、次世代エネルギーデバイスの分野である。

「第一原理計算が半導体産業とともに発展したこともあって、従来はシリコンを対象とする計算が主流でした。しかし、近年は電池や触媒材料といったエネルギー関連の取り組みが増えています。また、半導体だとしても、もっとソフトなもの、たとえば有機材料やバイオ的なものに適用する例が多くなってきました。日本のお家芸である材料の分野にPHASEを導入する効果は大きいと見ています」

エネルギー分野の研究は、新材料の研究と表裏一体で進められていることが多い。特性がまだよく分かっていない材料を扱うとき、シミュレーションは欠かせない手段だ。様々な材料に対応するため、PHASEの開発は、スケラビリティだけでなく機能面の拡張も継続的に進められている。

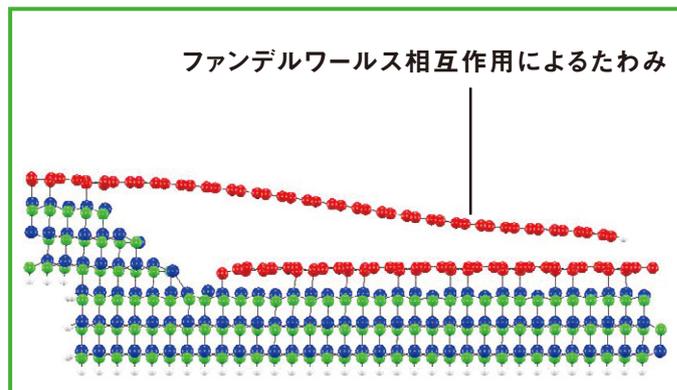
「シリコン系というのは非常にきれいな系で、欠陥といっても1万個から数万個に1個をコントロールする話です。一方、有機やエネルギー材料というのはシリコンよりもずっとごちゃごちゃしているんですね。計算規模が大きいだけでなく、電子の相互作用が複雑です。ものづくりに役立てるためには、そうした複雑さをハンドリングしなくてはいけない。数年前までは第一原

### ★用語解説

## || CISS ライセンス ||

非営利目的の使用は自由です。営利目的の利用については商用ライセンスの申請が必要です(許諾に3ヶ月程度の時間がかかります)。問い合わせ先:東京大学生産技術研究所 革新的シミュレーション研究センター software@ciiss.iis.u-tokyo.ac.jp

## ■ 高精度電子状態解析



ファンデルワールス相互作用によるたわみ

シリコンカーバイド・グラフィン系(446原子)における、ファンデルワールス相互作用の影響を計算した例。従来の計算手法(Dion法)に対して2100倍の高速化を実現している。これにより、有機デバイスへの適用が可能となった。

理でできるとは思われていなかったファンデルワールス力のような相互作用も、最新のPHASEでは記述することができます。それによって2桁から3桁増えた計算量には、新しいアルゴリズムを導入することで対応しました」

PHASEで解決可能な問題は着実に増えているという大野氏。続いて今後の開発の方向性について聞いた。

## ■ ピコ秒からナノ秒へ

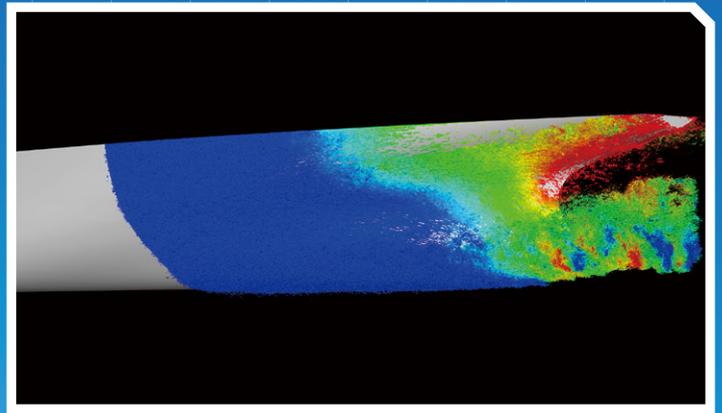
「今後はプロセスのシミュレーションが求められると考えています。いま我々が京を使ってやっているのは、1,000原子程度で数ピコ秒のシミュレーションです。これでもイニシャルなプロセスは分かりますが、トータルで何ができてくるかまでは分からない。時間をもっと長くして、ナノ秒まで行きたいんです。エクサスケールコンピュータでは1万原子に対してナノ秒単位の計算をすることが目標です。ただし、そのためにはさらに並列性能をあげて、1ステップあたりの処理時間を1/100から1/1000に短縮する必要があります。それができれば、次世代半導体デバイスや高効率二次電池のようなエネルギーデバイスの開発において、材料スクリーニング、デバイス界面設計、プロセス制御設計にPHASEを活用することが可能となるでしょう」

現在、PHASEはCISSライセンス\*で公開されており、誰でもダウンロードして無償で試用することができます。

「Windows版とLinux版を提供していますので、興味を持った方はまず使い慣れている手元のPCで試してください。ダウンロードしたファイルには、比較的小規模なサンプルデータがいくつも入っていて、すぐに動かしてみることができます」

今後の開発方針としては、並列性能の強化だけでなく、ユーザビリティの向上も重視しているという。

「これまでもワークショップやユーザーの集まりを通じて、使い勝手や計算の安定性に関するフィードバックを集め、プログラムの改善につなげてきました。PHASEは誰でも安心して使えるようにしたいと考えています。ユーザビリティを良くすることは口で言うほど簡単ではありませんが、今後も力を入れてやっていきます」



## ■ 今号の表紙

### 京を用いた船体まわりの流れ解析

この画は船が進むときに生じる非常に小さな渦を忠実に再現したものです。この計算では計算領域全体で320億点の計算格子が必要でした。従来のシミュレーション技術を船舶設計に用いるには精度、信頼性が低すぎましたが、FrontFlow/blueと京コンピュータを使う事により、飛躍的に精度を向上させることができ、巨大な水槽に大型模型船を浮かべて行う曳航水槽試験と同等の精度が確保できるため、設計コストの削減が期待されています。(一般財団法人 日本造船技術センター 西川達雄)

## ■ 編集後記

SC13でベストポスターアワードの受賞式に参加した前山さんは28歳の新鋭研究者。そのときの写真を拝見すると、しっかりガッツポーズ。それを見てこちらまで嬉しくなりました。日本のHPCソフトウェア技術が世界的な発表の場で評価されたと考えると、重要な1シーンです。(F)



## 計算工学ナビ オフィシャルサイト

本誌のダウンロードや、ソフトウェアライブラリ、その他の読み物を提供しているオフィシャルWebサイト

<http://www.cenav.org/>

計算工学ナビ Vol.2  
発行日: 2014年1月31日  
発行: 東京大学生産技術研究所  
革新的シミュレーション研究センター  
〒153-8505 東京都目黒区駒場4-6-1  
office@ciss.iis.u-tokyo.ac.jp