

# 課題②：次世代半導体集積素子における

# カーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発



## ● 課題の目的・目標

次世代半導体デバイスにおけるチャンネル材料、配線材料等に適用可能な**非シリコン系ナノ材料**、特に、**カーボン系ナノ材料**の特性・プロセスの共通要素的な部分に関する知的基盤を構築し、“次世代ものづくり”における研究開発の高度化・高速化に貢献する。

具体的な目標は、

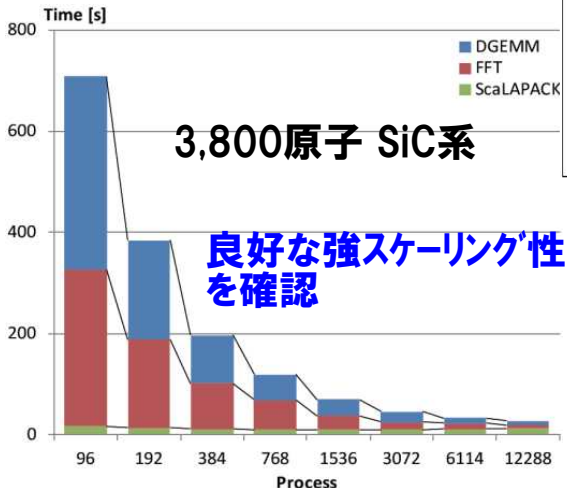
- ・カーボン系ナノ構造材料及びその周辺材料の次世代半導体デバイス応用への計算科学的評価と最適化指針の構築
- ・次世代ナノ材料探索に関する知的基盤の構築と産業界への提供

## ● ソフトウェアの高度化とプロファイリング

PHASE最適化:  
BLAS Level3適用  
多次元並列化  
FFT高速化、等

全体:20%以上の実行効率  
BLAS箇所:40%以上の効率

Kernel	Time [sec]	Efficiency of theoretical Peak
SCF	39.78	20.11%
DGEMM	13.19	49.73%
FFT	14.46	7.86%
ScaLAPACK	12.31	3.88%



(12,288ノードまで)

20,440原子 SiC系で  
2.1 PFLOPSを達成

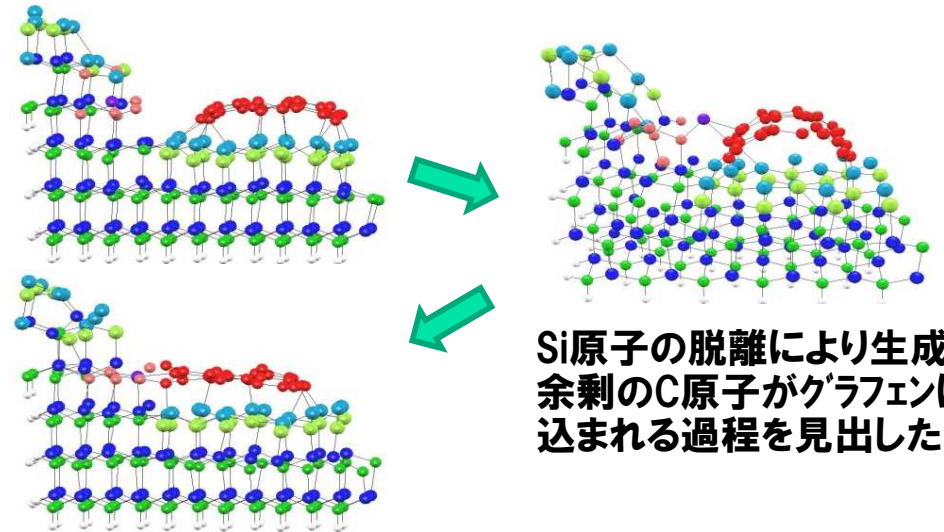
- ・73,728並列 21.7%
- ・82,944並列 20.2% (2.1 PFLOPS)

## ● リソースの割り当ての使用状況

京計算機の利用統計を取得できなかったが、順調に計算を進めている。

## ● 最近の研究開発成果

- ・SiC熱分解によるグラフェン成長過程のMD解析

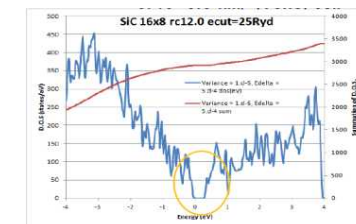
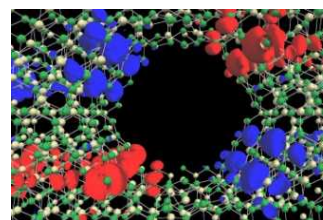


Si原子の脱離により生成した余剰のC原子がグラフェンに取り込まれる過程を見出した

- ・ワイドギャップ半導体中の螺旋欠陥の大規模解析

SiC: パワーデバイス、グラフェン生成基板等で重要  
螺旋転位は電子デバイス特性に大きく影響

SiC螺旋転位



螺旋転位の最適構造と電子状態を評価

# 課題③ー3 次世代燃焼・ガス化装置設計システム の研究開発



## 1. 課題の目的・目標

エンジンやボイラをはじめとして様々なエネルギー・輸送機器に利用されている燃焼・ガス化装置の高効率化および低エミッション化が強く求められている。そこで、特に、現象が複雑な噴霧燃焼や微粉炭燃焼等の混相燃焼・ガス化を対象に、

- ① 乱流の直接数値シミュレーション(DNS)によりメカニズムを解明し、計算精度検証やモデリングのためのデータベースを構築する。
- ② 装置の設計や最適操作条件の選定を支援するラージ・エディ・シミュレーション(LES)をベースとする数値シミュレータの超大規模・超並列計算に対する適用性および信頼性を検証し、迅速かつ正確に結果を取得する技術を確立する。

## 2. 参加機関

京都大学、大阪大学、電力中央研究所、三菱重工、川崎重工、IHI、日立製作所、東芝

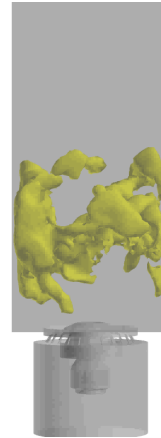
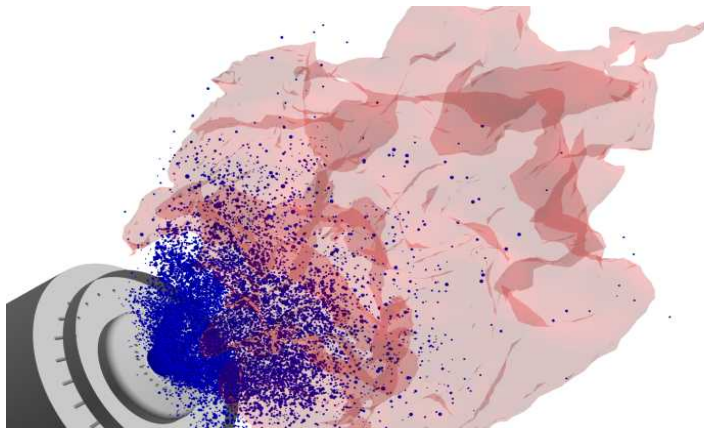
## 3. リソースの割り当ての使用状況

H25年1-3月期から「京」コンピュータを使用予定

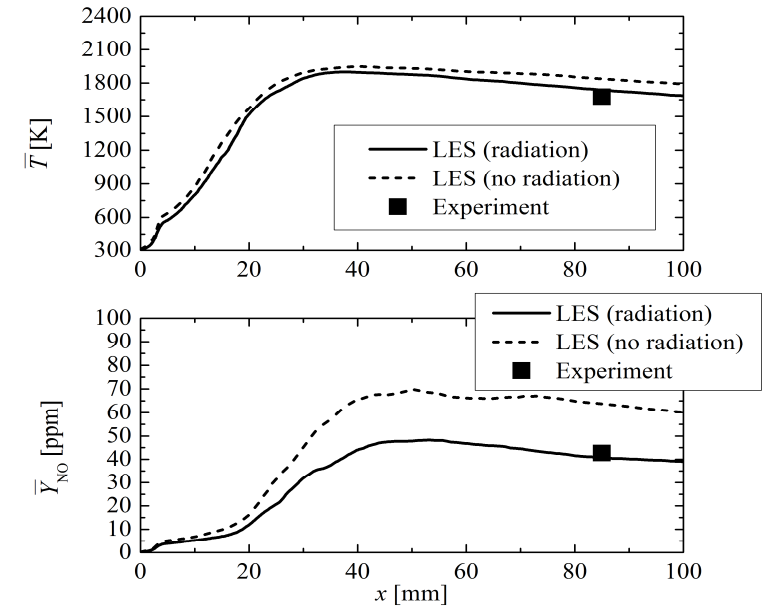
# 課題③ー3次世代燃焼・ガス化装置設計システム の研究開発



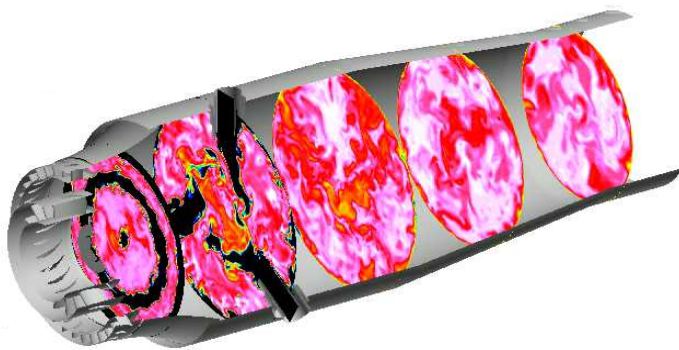
## 4. 進捗状況



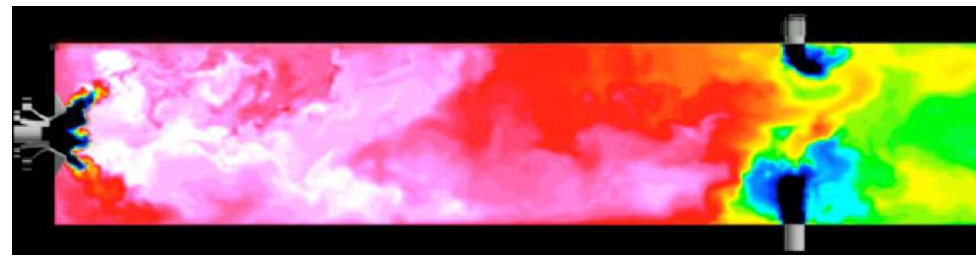
Soot formation



LES of spray combustion in a 1/2 scale aircraft engine combustor (7.5 M cells)



LES of gaseous combustion in a 1700 degC class gas turbine combustor (6.0 M cells)



LES of pulverized coal combustion in a test furnace (12 M cells)



# 課題④多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発



## ● 研究開発の概要

大規模多目的設計最適化問題に利用可能な新しい多目的設計探査技術を開発し、研究機関や企業との共同研究によりその有効性を実証する。これにより京クラスの計算機資源が企業でも利用可能になってくる2020年代に日本のものづくりを革新することを目指す。以下の4項目を柱に研究開発を行なっている。

- 【大規模多目的設計最適化問題の解法】
- 【大規模多目的設計最適化問題の最適解群からの知見抽出】
- 【大規模多目的設計最適化問題のための応答曲面近似法】
- 【多目的設計探査技術の実問題での有効性の実証】

## ● 京におけるソフトウェアの準備状況

-EAMAP(LANS3Dを用いたSPAWN型多目的進化計算)

スケーラビリティ: **4081ノード**でウィークスケーリング**97.5%**

\* LANS3D単体の並列効率は課題①で検証済

## ● リソース割り当ての使用状況

FX10 :40万ノード時間中, 4.7万ノード時間

京 :350万ノード時間中, 10万ノード時間

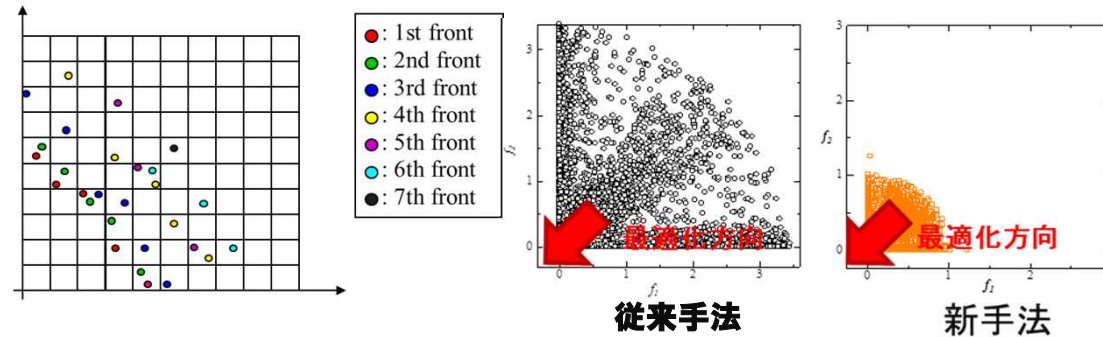
京の計算は準備が完了しつつあり, 11月より本格的な計算を行う予定。

● Workshop on multi-objective design exploration for real-world design optimization problems 2012 を12月に開催予定

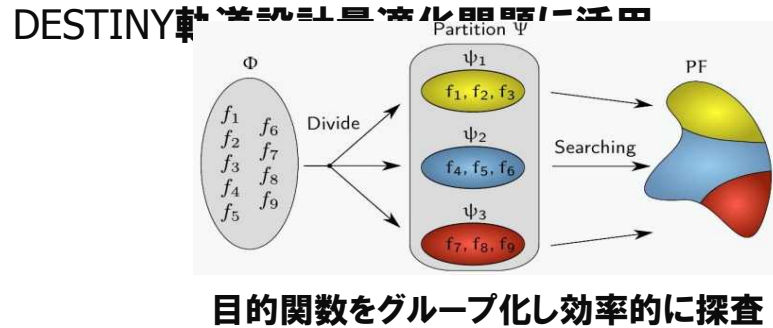
## ● 平成24年度の研究開発成果

### 【大規模多目的設計最適化問題の解法】

- 適応εボックス支配に基づいた多数目的設計最適化手法の開発。6目的のテスト問題に適用し、従来手法(NSGA-II)と比較して優れた解を発見



- パーティショニング法に基づく多数目的設計最適化手法の開発。



- PSOに基づく2段階探索法の開発

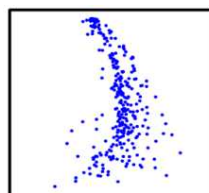


# 課題4: 多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発

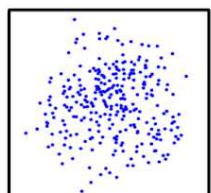


## 【大規模多目的設計最適化問題の最適解群からの知見抽出】

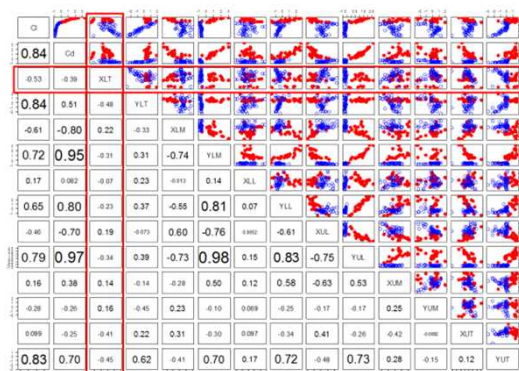
- 測地距離の概念を用いた最適解群からの知見抽出方を開発中。ハイブリッドロケットの概念設計最適化問題に適用し、実問題の最適解群の解析に有効であることを確認。
- インタラクティブな散布図行列表示ソフトウェアを開発中
- SOMを利用した新しい設計知見抽出法を開発中



評価値空間(MDS)



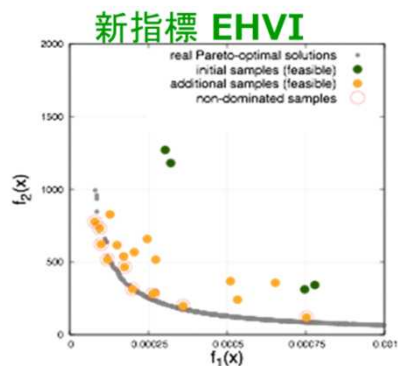
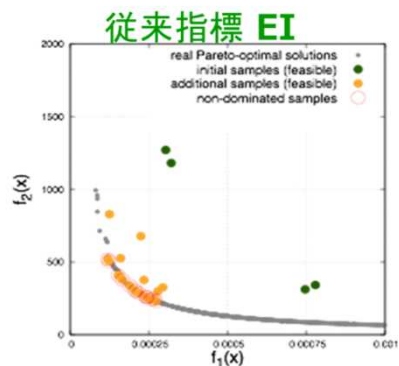
設計変数空間(MDS)



可視化結果

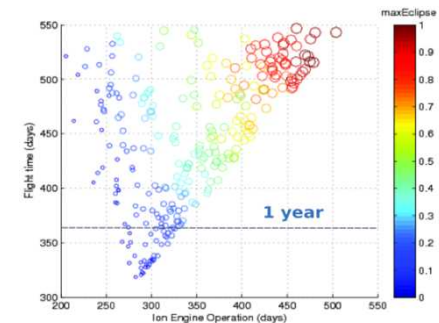
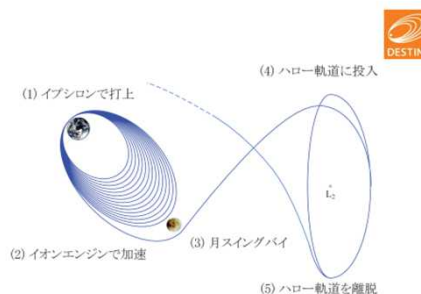
## 【大規模多目的設計最適化問題のための応答曲面近似法】

- 応答曲面生成のための新しいサンプル追加指標を考案し、精度、均一性、多様性についてバランスのとれた性能を発揮することをテスト問題を用いて確認

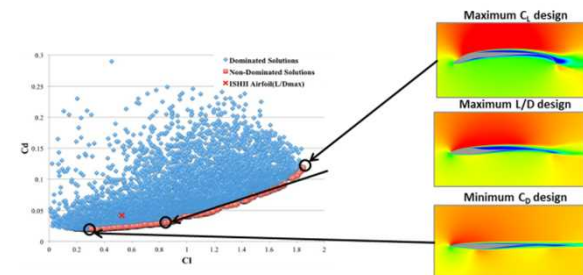


## 【多目的設計探査技術の実問題での有効性の実証】

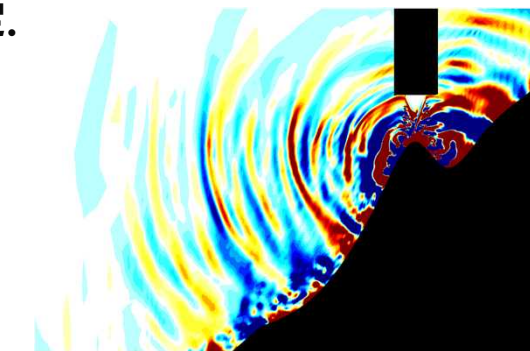
- 深宇宙探査ミッションDESTINYの多目的軌道設計最適化問題（6目的問題）に取り組み、優れた軌道を多数発見



- 火星探査飛行機の翼型の多目的空力設計最適化問題に取り組み、現状の設計よりも揚抗比が約2倍の解を含む多数の解を発見



- ロケット射点形状の多目的空力音響最適化問題に取り組んでおり、10月中にツールが完成し、11月から1月にかけて京コンピュータで本格的な計算を実施予定。



- 企業の方との共同研究に向けた打ち合わせも開始



# 課題⑤：原子力施設等の大型プラントの 次世代耐震シミュレーションに関する研究開発

## ● 研究開発の概要

原子力施設等の大型プラントにおいて設計仕様を上回る地震時における耐震裕度を把握すると共に、一層合理的な耐震設計を行う方法の確立に貢献し、安全性と経済性の大幅な向上に資するため、強固な産学官連携体制の下、大型プラントのものづくりで必要とされる、実験では不可能な詳細かつ一体的な耐震シミュレーション技術を研究開発し、開発したシステムの機能の検証及び有用性の例証を行う。

## ● ソフトウェア整備の進捗状況

プロダクトランに向けピーク比14%の実行効率を達成

### (先端要素技術の研究開発)

- ・ローカルSchurコンプリメントベースの新規実装手法を開発、4096ノードでピーク比40%を達成しスケールテスト(4月初め)をパス
- ・ボトルネックとなっているコースグリッド修正部分の高速化のため、4倍精度演算を用いた逆行列アプローチに関する研究を開始
- ・要素剛性行列や非線形材料構成式評価部分の高速化のため、理研および富士通コンパイラチームとの共同研究を開始

## ● 供用開始後の「京」リソース使用状況

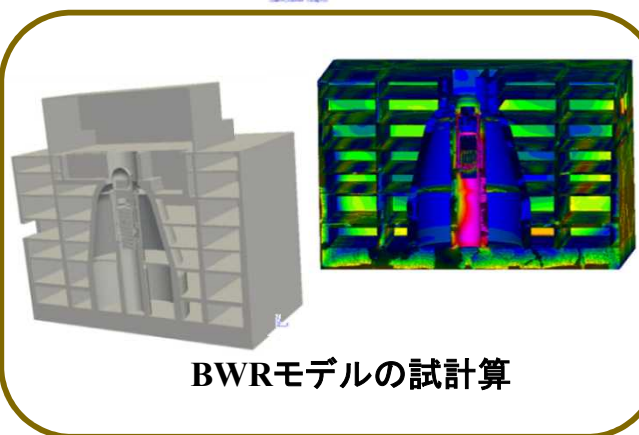
課題参加者のローカル端末からのネットワーク利用が可能となり、現在、京でのプロダクトラン実施環境を整備中。

## ● モデルデータ整備の進捗状況

原子力プラント(BWR、HTTR)のモデルについて試計算、既存解析(バネマス等)との比較を行いモデルの妥当性を検証中。

- BWRモデルについては建屋・機器組み合わせ状態での試計算を実施し、解析結果の検証中。
- HTTRモデルについては機器単位レベルで固有値解析等を実施し、設計時のバネマスモデルと比較検証中。

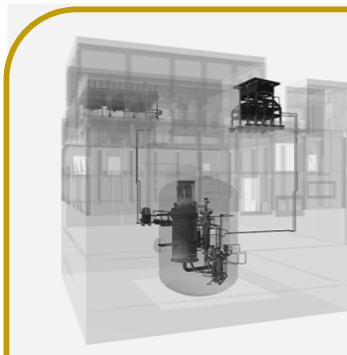
化学プラントモデルでの実証シミュレーションを検討開始。現在、企業と調整中。



BWRモデルの試計算



化学プラントモデル(調整中)



(例)原子炉(圧力容器内)1030部品中、8部品で歪んだ要素(negative element volume)があり修正を実施

HTTRモデルの検証