

Table 2-1 Obtained total energy difference for C-face 4H-SiC.

	ideal	ideal, spin	π -bonded chain
ΔE (eV/1x1)	+0.345	Ref.	-0.033

Table 2-2 Obtained total energy difference for Si-face 4H-SiC.

	ideal	ideal, spin	π -bonded chain	buckling	buckling, spin
ΔE (eV/1x1)	+0.248	Ref.	-0.026	+0.131	+0.121

Fig. 2-17 (c)-(h) に得られたバンド構造を示す。バルクのバンドを青で示した。理想表面では C 面、Si 面ともに 1eV 以上もスピン分裂を起こし大きく安定化しているのが分かる。これに比べ、Buckling 模型では表面状態のバンドの局在性が小さくスピンの分裂が小さい。Fig. 2-17 (e), Fig.2-17 (g) は π -結合鎖模型のバンド構造である。バンドギャップは C 面で 1.63 eV、Si 面で 0.68 eV であった。これらの値は金属的になった C(111) や Si(111) 0.19~0.31eV と比べて大きな値と言える。これは C と Si の π 電子のエネルギー差に起因している。

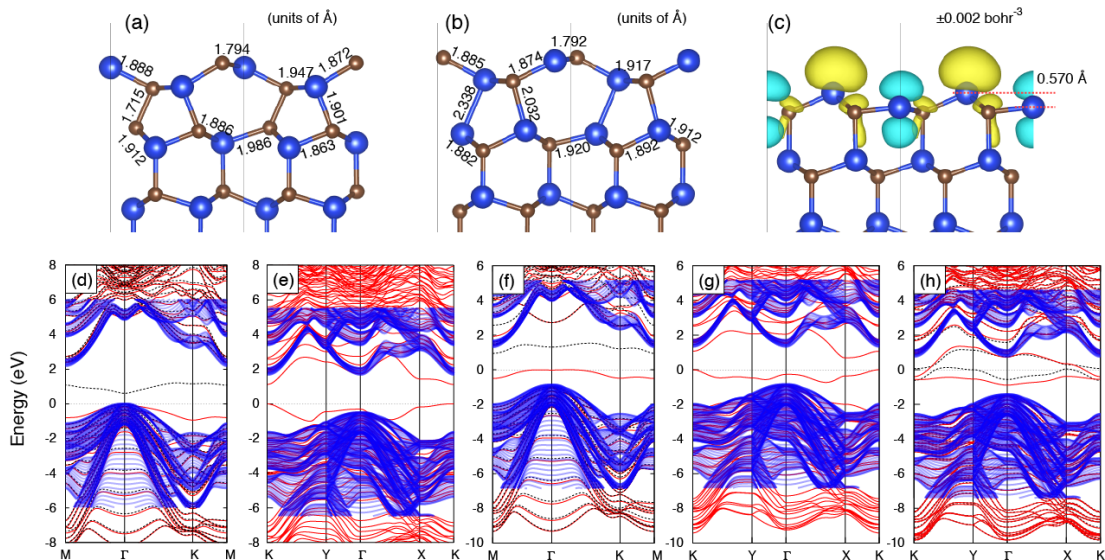


Fig.2-17 The structure model of π -bonded chain model for C-face (a) and Si-face (b), and the buckling model for Si face (c). The band structures of ideal surface for C-face (d), π -bonded chain model for C-face (e), ideal surface for Si-face (f), π -bonded chain model for Si-face (g), and the buckling model for Si-face (h).

(2-3-2) SiC 酸化膜形成プロセスに関する研究

パワーデバイスの開発普及は、持続可能(低消費電力)な社会の発展のために大きな役割を果たす。特に SiC 基板を使ったパワーデバイスは高電圧・高電流耐性が高く、低消費電力化への寄与が大きい。SiC 基板のパワーMOSFET 構造における界面特性に関する技術課題としては、①高チャネル移動度化、②高信頼性化(閾値変動抑制)、③面方位依存性の理解などがある。①に関しては、現在の SiC デバイスのキャリア移動度は理想的な値よりもかなり低く、このため消費電力が大きくなってしまいう問題がある。移動度が低い理由を突き止める必要がある。②に関しては、スイッチが ON する電圧(閾値 5V 程度)がずれると安定した動作ができない。閾値変動の原因を突き止め、変動幅を 0.1 V 程度に抑える必要がある。③に関しては、面方位に依存して特性(酸化速度、移動度特性など)が大きく異なるなどの現象があるが、これらの原因説明が特性改善につながる。

いずれの課題に関しても、酸化過程の深い理解が鍵である。酸化に伴って発生し得る種々の欠陥種の特性を評価し、デバイス特性劣化を引き起こすものを特定し、それを抑制する酸化手順(プロセス)の構築することが必要である。我々は計算科学的アプローチを試みた。

a)理想的界面構造モデルの検討

SiCの酸化反応を検討するに先立って、SiO₂層との理想的界面構造を検討した。(2-3-1)で述べたπ結合鎖モデルからなるSiC表面構造にtridymite型結晶相のSiO₂を重ね、第一原理計算による構造緩和及び1000Kでの短時間のMDを行ったところFig.2-18に示すように、SiC表面の五員環構造+七員環構造が全て六員環構造のみの構造(Fig.2-18の右側の構造)に変化し、SiO₂層の界面側の酸素は全てSiCのSiと結合した。これにより、界面直下のSiC層側にC-C結合が大量に生成した。これは、SiC(000-1)C面上のCに直接SiO₂のO原子が結合している場合に比べて、1.25 eV/(1x1)surface-cellエネルギー的に安定である。この界面構造のバンドギャップはバルクSiCより若干狭まるが、未結合手がなくバンドギャップ中に局在準位を持たない。SiC(0001)Si面の場合は、π結合鎖構造(五員環構造+七員環構造)を持つ表面に、SiO₂層を重ねると、SiO₂層の界面側のO原子はやはり全てSi原子と結合し界面が安定化する。この時、界面直下にあったSi-Si結合は全てSi-C結合にもどる。得られた構造は理想Si劈開面にSiO₂層を乗せた構造である。

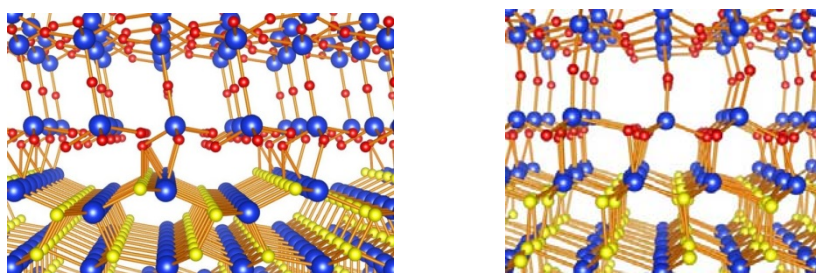


Fig.2-18 SiC(000-1)C/tridymite-SiO₂ and (right) the optimized (right) interfacial structures. Blue, yellow, and red balls represent Si, C, and O atoms, respectively.

b)酸化反応機構の検討

このように得た理想界面構造の界面近傍に、一定時間間隔で酸素分子を導入して、温度を2500Kに設定した第一原理MD計算を行った。導入した最初の酸素分子は、界面にあるSi原子で解離して、Si-C結合中に入ったのち、周りの配位状態を変えながら、Si-O-Si結合状態を作る状態に変化する。この時、界面にあったSi原子はC原子との結合を離れ、7ps後には、SiO₂膜中に移動している(Fig.2-19)。界面のSiは最初全て酸素原子ひとつと結合した(1+)状態であったのが、2つのSiは2+に1つのSiは3+状態に変化している。このような酸素分子導入手順を4回繰り返し、最初から25ps経過したときの界面構造をFig.2-20に示す。導入した酸素分子は全て界面近傍のSi原子により解離し、一度はSiC結合中に入って(Si-O-C結合を作っても、時間が経過するに従いSiとの結合をとる(Si-O-Si結合をとる)ように変化していった。界面にあったSiの一部は、次第にSiO₂膜中側に移動していった。これに伴い界面直下のC-C結合の一部が外れ、外れた炭素原子が横方向に拡散し小規模な炭素クラスターを形成している。この段階では、炭素原子が酸素原子とCO分子を形成したり、上下方向に拡散するといった現象は観察されなかった。界面の一部には空隙(Fig.2-20に赤い楕円で示す部分)が生じている。ここでは、あたかも新しい表面が露出したかのようにになっている。この領域では、新たな酸素侵入が、六員環から五員環+七員環構造への変化により、Si原子の浮上とその下のC-C結合生成を誘起する可能性がある。

このような変化が大域的に生じた場合、界面位置は SiC-1層 (bilayer) 分移動するとともに最初と同じ安定な界面構造を再現し (Layer by layer 酸化)、良質の酸化膜が形成される可能性がある。酸化プロセスの制御因子としては、成長温度、酸素分圧、導入分子種の選択などがあり、最適な制御条件の導出は今後のシミュレーション課題である。一方、SiC(0001)Si/SiO₂ 界面構造の界面近傍に導入した酸素分子は、同じ条件の第一原理 MDシミュレーションを行ったところ、解離して Si 原子に結合はしたが、界面構造を変えることなく、酸化反応は進まなかった。

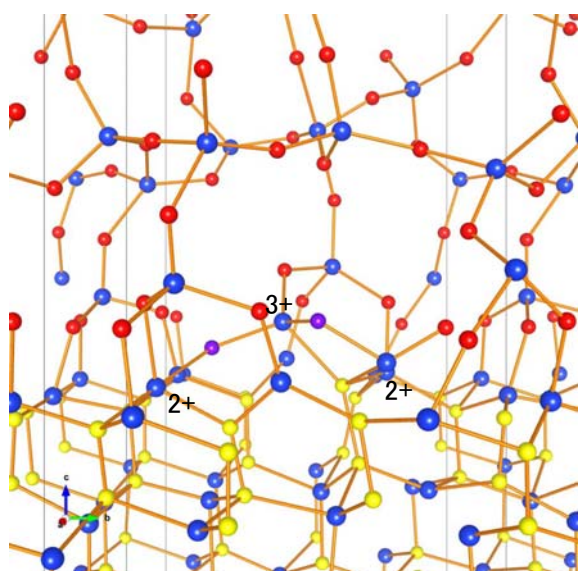


Fig. 2-19 A snapshot of the MD steps in an oxidation process of SiC(000-1)C/SiO₂ interface with an O₂ molecule at 2500 K. Purple balls are the introduced O atoms.

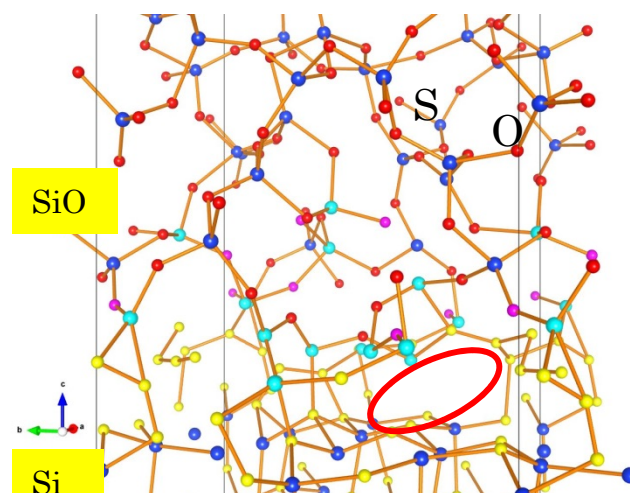


Fig.2-20 An SiC(000-1)C/SiO₂ interfacial structure at 25 ps of the 2500K MD simulation. Four O₂ molecules have been introduced at the interfacial region. The interfacial Si atoms at 0 ps and O atoms of the introduced O₂ are represented with light blue and light red balls, respectively. We can observe an empty space (a red ellipse) at the interface.

c)界面の化学的構造に関する検討

界面欠陥の具体的な起源を特定することは重要であり、ここでは SiC の酸化プロセスにおいて生成される化学的構造について知見を得るために、第一原理分子動力学計算に基づく検討を行った。4H-SiC(000-1)面(C 面)および(0001)面(Si 面)の上に tridymite 構造の SiO₂ を乗せて SiO₂/SiC 界面の初期モデル構造を作成した (Fig.2-21)。C 面のモデル構造は、SiC 最上部のバイレイヤーの Si 原子と C 原子が入れ替わった構造である。C 面モデルと Si 面モデルのそれぞれの界面付近に O 原子を逐次的に供給し、系を分子動力学(MD)的に緩和した(各 ~ 2-10 ps 程度, T = 1273 K, dt = 1 fs)。ここで、MD 法を用いた構造緩和は、反応過程を調べるのが目的ではなく単なるアニーリングである。計算は常磁性状態で行った。即ち、実験系は酸素分子供給系であるため、スピン分局した状態を経由して反応すると考えられるが、最終的には常磁性基底状態に緩和することを仮定して、その安定構造を探索する。

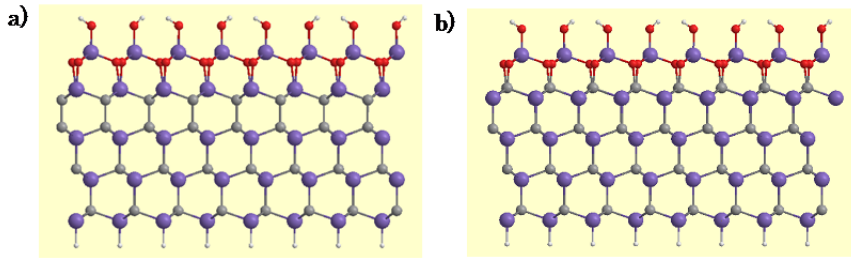


Fig.2-21 Side views of models of SiC/SiO₂ interface (laterally duplicated), a) C-face model having C-C bonds and b) Si-face model. The SiC part of these models consists of four SiC bi-layers (12 Si(C) atoms/layer), with hydrogen atoms for the bottom layer termination; the SiO₂ part consists of a layer of SiO₄ groups with hydrogen atoms for the oxygen dangling bond termination. Silicon, carbon, oxygen, and hydrogen atoms are depicted in purple, gray, red and white, respectively.

C面モデル、Si面モデルそれぞれに30個まで酸素原子を投入した。一連のMD計算のスナップショットを Fig.2-22 に示した。Fig.2-23 には酸素原子投入による主要な構造変化を模式的に示した。Fig.2-23 に示した様に、系に投入された酸素原子は基本的には SiC 部最表層のシリコン原子をブリッジするように反応する。中間的には、酸素原子が Si-C や Si-O などの結合の間に挿入されて Si-O-C や Si-O-O の部位を形成する場合もあるが、~2ps のシミュレーション中に結合が頻繁に組み替わるため、結果的に酸素原子の多くは親和性の高いシリコン原子をブリッジする格好に落ち着いてゆく。投入された酸素原子が少ないうちは(20 個程度まで、因みに界面モデル最表層のシリコン原子は 12 個)、上記の Si-O-Si ブリッジの形成に伴い Si-C の結合が解離することになるが、シリコン原子との結合を失った炭素原子は互いに結合して炭素クラスターを生成する(Fig.2-23 上段)。あるいは、既に C-C 結合を有する炭素原子がシリコン原子と結合を失う場合は C=C 二重結合が形成される。投入された酸素原子が多くなると、Si-C の結合が残り少なくなっているため、新たな C-C 結合や C-C 二重結合が生成されなくなり、C-O 結合や C=O 二重結合が生成されるようになる(Fig.2-23 下段)。

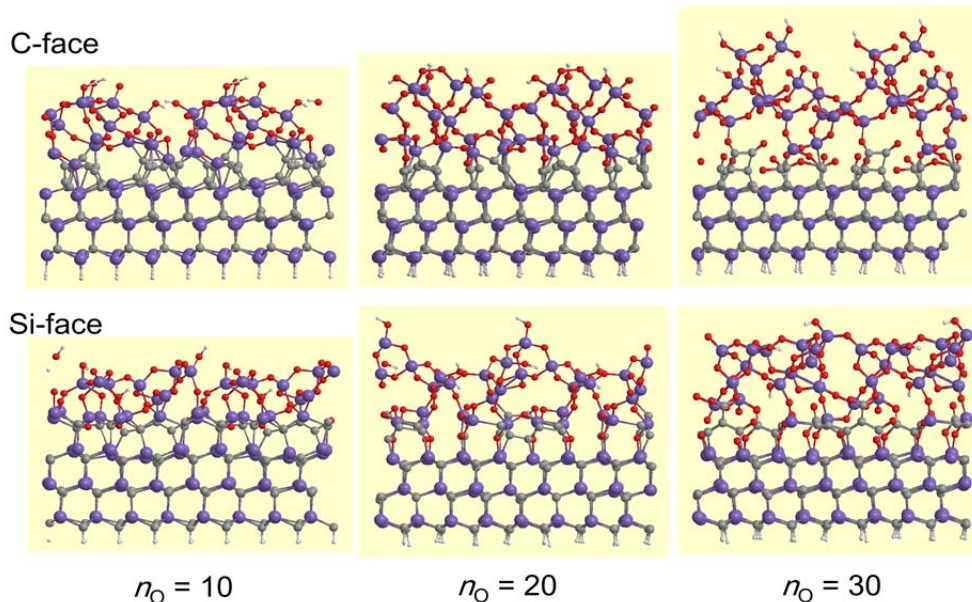


Fig.2-22 MD snapshots of the SiO₂/SiC interface models (laterally duplicated) after being supplied with 10, 20, and 30 oxygen atoms.

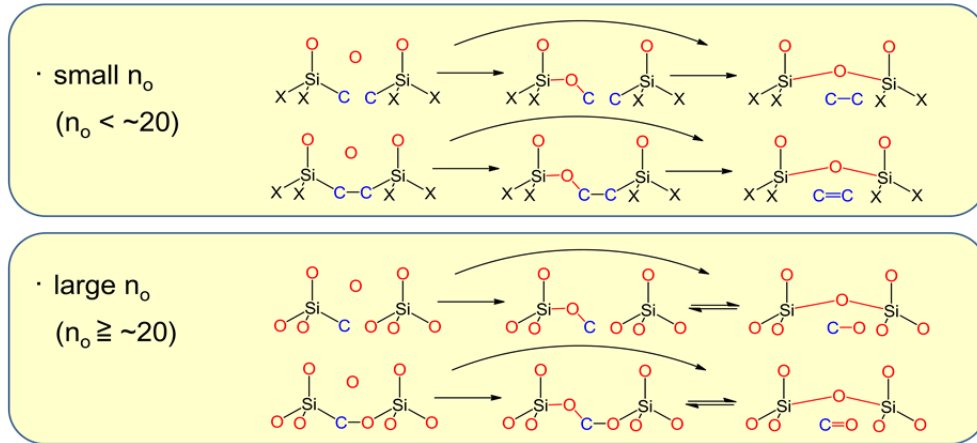


Fig. 2-23 Schematic representations of the typical chemical reactions at the SiO_2/SiC interface region with the lower and the higher level of oxygen atom supply.

このような構造変化により、系の結合の本数は Fig.2-24 に示したような変化をたどる。Fig.2-25 に酸素原子投入により生成された界面に特徴的な化学構造 (SiC と SiO_2 のバルク部分にはない原子団で初期構造にはないもの) を示した。大まかにまとめると、大小様々な炭素クラスターとその酸化物が生成するということになる。酸化物原子団の多くはカルボニル ($>\text{C}=\text{O}$), カルボン酸エステル (COO) の形であり、単純エーテル (Si-O-C) の形のものも存在する。また供給酸素が多くなると sp^2 炭素が多くなることも読み取れる。界面欠陥に対応する化学種としては、これらの原子団を候補として挙げるができる。

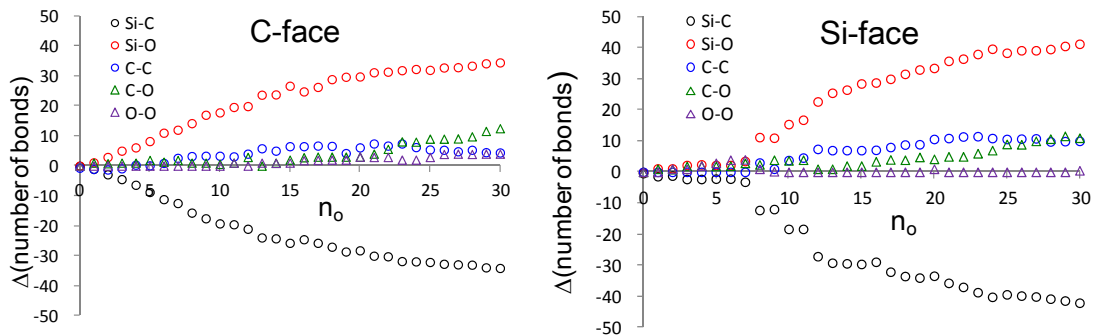


Fig. 2-24 Change in the number of bonds as a function of the number of O atoms supplied.

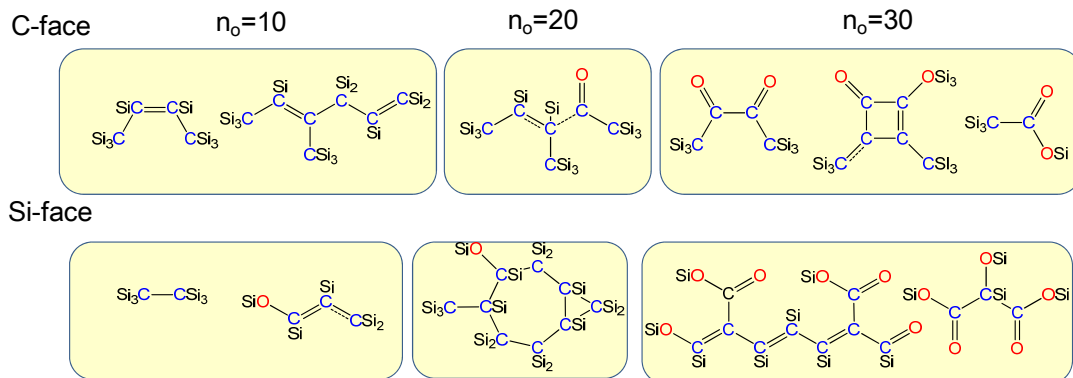


Fig. 2-25 Chemical structures produced at the SiO_2/SiC interface region.

d) 古典 MD による SiC(000-1)C 面の酸化機構

古典 MD を使った酸化機構反応のシミュレーションは様々なものを行ったが、ここでは表面が部分的に酸化されている状態からの酸化シミュレーションを行った結果を示す。SiC(000-1)C 表面の一部に極薄酸化膜構造を重ね、ほかには清浄表面を露出した構造をつくり、真空から酸素分子を供給し、有限温度の古典 MD 計算を行った (Fig.2-26)。酸化膜直下の SiC には C-C 結合を作り、清浄表面側は理想表面構造とした。酸化膜を重ねた領域と清浄表面の境界には SiC の五員環構造と七員環構造ができていく。時間の経過とともに酸素分子の解離吸着がすすむ。解離した酸素原子は、最表面の炭素原子より深い位置にある Si を引き出し、逆に露出していた炭素原子は下がってさらに下方にある炭素と C-C 結合を作る。C-C 結合の存在する領域が時間の経過とともに拡大していく様子が観察された。これは、上に報告した SiC/SiO₂ 界面構造モデルの正当性を補強する。

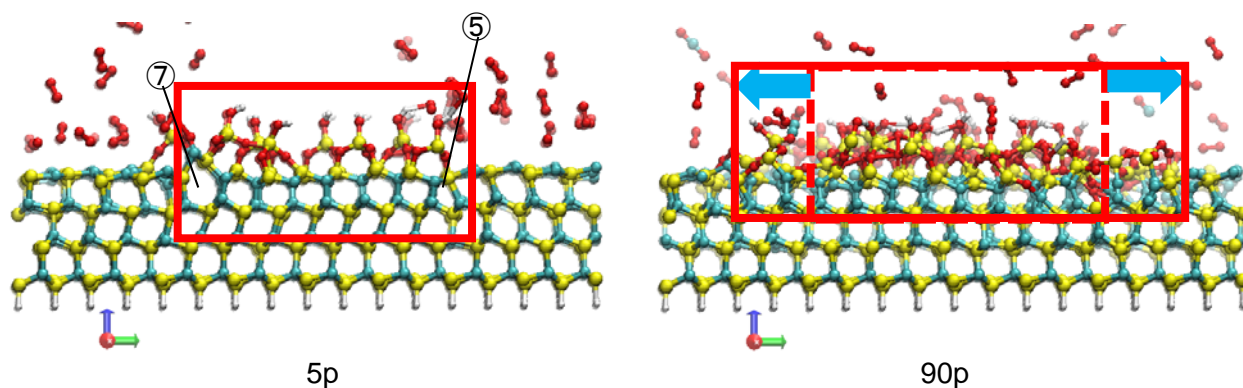


Fig.2-26 Snapshots in a MD simulation of SiC(000-1) surface oxidation by O₂ molecules. Light green, yellow, red and white balls represent Si, C, O and H atoms, respectively. Initially, a part of the surface is capped with a thin SiO₂ layer and the remaining surface area is clean. At 90 ps, the C-C bond region beneath the oxide layer is enlarged.

e) 古典力場の開発

古典 MD 法は、現在恣意的モデルの採用を避けることを第一の目的として使用しているが、酸化機構や欠陥生成機構の予測にも使いたい。現在使っている ReaxFF 力場には、酸素分子の解離が起こり易すぎる、SiC 基板が柔らかすぎるなどの問題がある。われわれは、SiC の酸化に関して第一原理 MD シミュレーションをよく再現する古典力場を作ることを目指している。SiC の酸化を模擬するには、酸化反応に伴う原子に配当される電荷分布変化を再現可能な可変電荷型のポテンシャルが必要である。われわれは、今年度このような古典力場のパラメータを最適化する手法

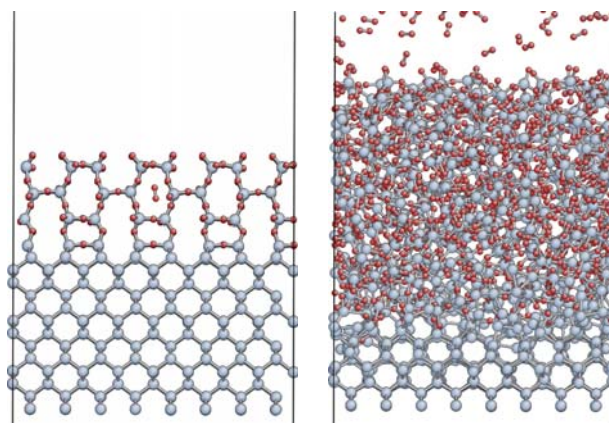


Fig. 2-27 Snapshots for Si oxidation simulation: Initial (left) and 0.5 ns after (right)

を確立し、SiC 酸化をシミュレートできる力場作成のための一里塚として Si 基板の酸化を再現可能な可変電荷型ポテンシャル力場を作成した。ポテンシャル関数形は Tersoff 型の共有結合ポテンシャルに電荷によるイオン結合項を追加したものであり、パラメータ最適化には遺伝的アルゴリズムに基づくソフトウェア kPot を改良したものを使用した。PHASE/0 を使った第一原理 MD 計算から合わせ込み

に使用する物性値(Si-O系では、総計約400,000個)を採取した。最適化した力場を用い、Si(001)/SiO₂(tridymite構造)界面構造の酸化シミュレーションを実施した。酸素分子は一定時間(1ps)ごとにSiO₂中に追加した。Si基板の下端部を固定し、NVTアンサンブルMD(T=1400K)を行った。酸素分子が界面近傍で解離し、Si-Si結合に取り込まれ、SiO₂層が厚膜化する様子が再現された(Fig.2-27)。界面近傍からSi原子が放出される様子、酸化されきっていないSi-Si結合がSiO₂側に残される様子も観測した。これらは、従来の力場を使ったMDシミュレーションでは再現できなかったことである。従来の力場が主に安定構造を合わせ込みに使っているのに対し、我々の手法は不安定な構造や遷移状態の構造も含めて桁違いに多くの参照構造を採取して使っている点に特徴がある。今後、この手法をSiCの酸化機構を再現できるように拡張していく予定である。

f)まとめ

4H-SiCの酸化機構を解明するため、古典的分子動力学(MD)法および第一原理MD法によるシミュレーションを行った。適当な4H-SiC/SiO₂界面構造モデルを作成し、界面近傍に酸素分子あるいは酸素原子を逐次的に導入し、反応過程を観察した。第一原理MDシミュレーションでは、酸素原子は界面近傍のSi原子に優先的に結合しようとする傾向が強いため、Siとの結合が解けた炭素原子が拡散して炭素クラスターを形成することが分かった。また、C面に関してはLayer by layer酸化により良質な酸化膜が形成される可能性があることが示唆された。さらに、理想的酸化条件の絞り込みのためのより長時間のMDシミュレーションを可能にするために、信頼性の高い古典力場の開発を目指して、第一原理手法と古典的手法を連携した遺伝的アルゴリズムに基づく力場最適化手法を開発し、Siの酸化を再現できる力場パラメータを導出することに成功した。

(2-3-3) SiC酸化膜欠陥準位に関する研究

上記のように、SiC/SiO₂界面においては炭素原子がCOやCO₂などにならずに蓄積される傾向にあり、これらがどのような欠陥準位を生じるか理解することは重要な問題である。Si面でのSiC/SiO₂界面ではFig. 2-28(a)のように格子間C不純物がカルボニル基を形成したC欠陥、Fig.2-28(b)のように2つのO原子を置換したC原子が2重結合を持つC₀=C₀欠陥などがSiC伝導帯下端に欠陥準位を生じ、問題視されている[5]。しかし、欠陥の局所的構造が欠陥準位に及ぼす影響などに関する知見は未だ不明である。

ここでは、先行研究[6]で用いられた界面構造を再現し、4SiC bilayerを追加し333原子の界面構造を作成し、局所的構造の影響を解析した。この構造のなかで、Fig. 2-28(c)の上図1-10に示すO原子にCを追加したCi欠陥を、Fig. 2-28(d)の上図1-8に示す2つのO-O距離が3 Angstrom程度かそれ以下の場所8カ所にC₀=C₀欠陥を導入し、局所状態密度(LDOS)を計算した。Ci欠陥、C₀=C₀欠陥の全エネルギー差(ΔE)や欠陥構造の特徴について、それぞれTable 2-3、Table 2-4にまとめる。

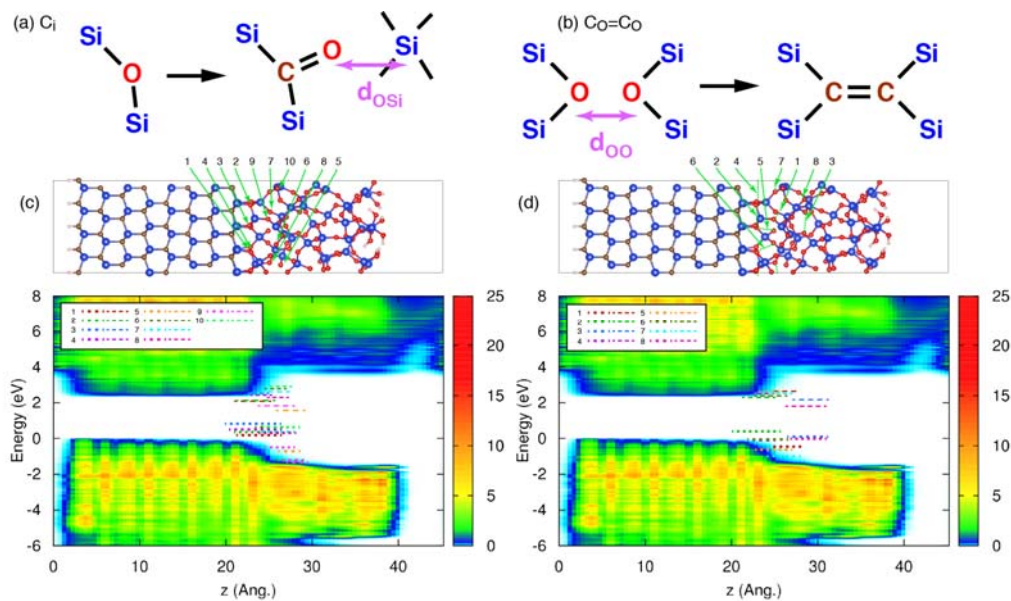


Fig. 2-28 (a) Schematics of C_i defect. (d) Schematics of $C_o=C_o$ defect. (c) Calculated defect level distribution for C_i defect at Si-face SiC/SiO₂ interface. (d) Calculated defect level distribution for $C_o=C_o$ defect.

Table 2-3. Calculated results of the total energy difference (ΔE), and O-Si distance (d_{O-Si}).

Label	ΔE (eV)	d_{O-Si} (Å)
1	0.000	2.264
2	-0.456	2.379
3	-0.553	3.191
4	-1.196	2.847
5	+0.121	1.911
6	+0.018	2.886
7	-0.351	2.761
8	-0.720	3.135
9	+1.182	1.983
10	-0.830	3.183

Table 2-4. Calculated results of the total energy difference (ΔE), O-O distance (d_{O-O}), and dihedral angles along C=C (θ_1 and θ_2).

Label	ΔE (eV)	d_{O-O} (Å)	θ_1 (deg.)	θ_2 (deg.)
1	0.000	2.649	14.32	34.72
2	+1.157	2.958	19.31	82.39
3	+0.639	2.680	39.31	76.35
4	+0.847	2.997	2.54	22.42
5	-0.326	2.617	1.77	3.55
6	+0.622	2.698	16.50	39.18
7	+0.568	3.035	4.52	19.21
8	+1.036	2.923	57.26	62.33

得られた欠陥準位の分布を Fig. 2-28(b)、(d)の下図に示す。LDOS は理想界面のもので、欠陥準位のみを図に書き入れてある。この図において白で示されている部分がバンドギャップである。 C_i 欠陥の場合は、SiC 伝導帯の底付近とバンドギャップ中の価電子帯側に欠陥準位を生じているが、ラベルが 5、9 のように O-Si 距離が 2 Å 以下と小さくなるにつれて欠陥準位が下方に移動している事が分かる。このとき、Si は五配位になり、O-Si の静電相互作用により下方に移動していることが分かった。一方、 $C_o=C_o$ 欠陥の場合はラベルが 2、3、8 のような大きな二面角を持つ構造において SiC のギャップ中に欠陥準位を生じ得ることが分かった。また、界面からの距離が離れると SiO₂ バンドの変化に応じて欠陥準位もなだらかに変化しているのが分かる。

我々は、この他に、Si を C=C で置換したもの構造、カルボン酸エステル、ペルオキシや酸素空孔など C 面も含めて 100 通り以上の欠陥構造に対して計算を行った。これらの計算結果より、SiC/SiO₂ 界面の欠陥準位は、欠陥の(1)化学的構造、(2)その局所的構造、(3)界面からの距離に依存して分布

を持ち得ることが分かった。また、異種原子の導入により欠陥準位を制御することが可能であることも示した。

(2-4) 解析ソフトウェアに関する研究

デバイス材料の解析に必要な第一原理手法、半経験的手法等の解析プログラムの超並列計算に対応した最適化と性能評価、非シリコン系ナノ構造への適用可能性の確認等を実施した。

(2-4-1) 第一原理分子動力学プログラム PHASE/0

a) 達成効率

第一原理分子動力学プログラム PHAS/0E の京計算機の 6 次元メッシュ/トーラスネットワーク構造を利用した超並列最適化を実施し、プログラムの強スケーリング性能 (Fig.2-29: 3,848 原子数の系で部分空間対角化処理を含まないときに 82,944 ノード並列まで性能向上)を確認し、また、京計算機 82,944 ノードを用いた 25,200 原子系の計算でピーク性能の 21.17%(2.25PFLOPS)の実効性能を達成した。

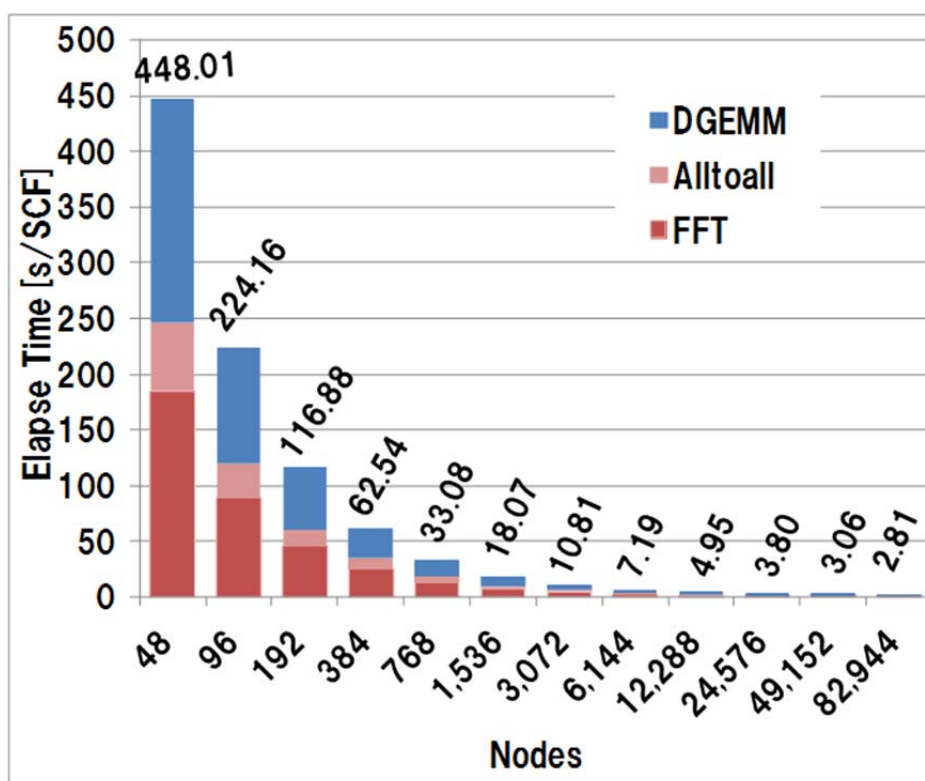


Fig.2-29 Elapsed CPU times with various process numbers measured on the K computer for the SiC system of 3,848 atoms. Heaviest arithmetic operation parts, i.e., matrix-matrix products (DGEMM), fast fourier transformations (FFT), and all-to-all MPI communications accompanied to the FFTs, are extracted and shown here. In this measurement, the procedures for subspace-rotation of eigen wave functions are not executed.

b) 強スケーリング特性

PHASE/0 は、密度汎関数理論に則った平面波基底の擬ポテンシャル法であり、ハミルトニアン行列を対角化して電子の固有状態を求める伝統的な方法ではなく、波動関数 $\{\Psi_i (i = 1, B)\}$ (B はバンドの数) を逐次近似法により更新するのを電荷密度分布 ρ と波動関数 $\{\Psi_i\}$ が無矛盾性を満たすまで繰り返す手法を実装している。高負荷部分は、a)イオン芯による非局所ポテンシャルと $\{\Psi_i\}$ の積演算、b)

{ Ψ_i }の規格直交化、c) 平面波基底のハミルトニアン行列の副空間行列 $H_{ij}=\langle\Psi_i|H|\Psi_j\rangle$ の非対角成分を消すための行列対角化および d) { Ψ_i }のユニタリー変換演算である。また { Ψ_i }と ρ を実空間と逆格子空間の両方で扱うため e) 高速フーリエ変換 (FFT) を頻繁に行う。扱う原子数がせいぜい万の桁であるのに対しコア数が数十万であるため、 $\Psi_i(\mathbf{G})$ (\mathbf{G} は逆格子ベクトル)のバンド i と \mathbf{G} の両方を並列化軸とした。また、MPIとスレッドのハイブリッド並列を実装した。上の a)、b)、d)に関して、可能な部分は行列行列積の形式に書き換えた後 Blas level3 関数を使うことで実行効率を上げることができた。さらに e)の3次元FFT演算の核心部のバタフライ演算がコア間にまたがらない様に、2次元分に関してMPI分割している。軸変換に伴う全体全通信が発生するが、これも \mathbf{G} に関する副MPI空間内のみに局所化することによって、並列性能の劣化を抑えている。3次元FFTのx、y、z軸の順に並んでいるxyz配列の順を変換しzxyの順に並び替えるところでMPI通信が発生する。1軸方向のFFTはノード内あるいはコア内に閉じて行うために、2回の軸変換を行う。この軸変換が京計算機のように大規模並列計算を行う場合には並列効率を劣化させる大きな要因である。京計算機では6次元のメッシュ/トラスネットワーク構造が実装されているが、これを冗長性確保に使うのではなく、バルキーな(立体的な)直交する2つのMPI空間を切り出し、軸変換に伴う通信を効率化するのに用いた。Fig.2-30にネットワーク空間を分割する例を示す。3,072ノード(MPIプロセス)を使う場合、バンド分割数を8、平面波分割数を384ととることにする。さらに $384=16\times 24$ から、FFTの2軸を16および24分割することにする。バンドに関してはブロックサイクリック分割を行い、6次元の6つの軸(X,Y,Z,a,b,c)から適切に3つの分割軸を選択することにより、バルキーな16および24分割MPI空間を設定することが可能となる。このように適切な3軸選択を行うことによりFig. 2-29に示す並列効率結果が得られた。3,845原子規模に対して京計算機の全ノードを使っても強スケーリング性が保たれることが確認できた。

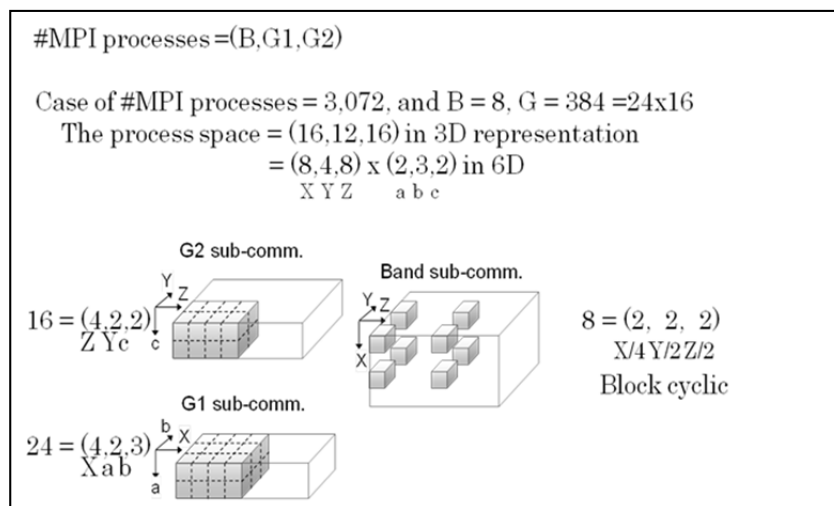


Fig.2-30 A way of division of MPI communication space into three spaces.

c)の行列対角化に関しては、Eigen および ScaLAPACK の対角化ライブラリを実装し試したが、対象行列サイズが比較的小さいため並列効果が低く、これを含めたシミュレーションを行うと 3,845 原子規模の系では 12,288 ノードで強スケーリング性が飽和した。また、25,200 原子規模の SiC/SiO₂ 界面構造モデルの計算では、82,944 ノードを用いて 2.25 PFLOPS (ピーク性能の 21.17%)を達成した。c)の行列対角化処理に対しては、超並列化可能な別のソルバーの開発をすすめると同時に収束が進むに従い対角化対象の行列が対角要素の疎な行列に変化するという特性を利用するなどにより並列効率を向上させ得ることも確認した。

c)産業応用上の重要性

半導体デバイス、電池材料、その他各種材料の開発には第一原理計算によるシミュレーションが求められており、大規模な系のシミュレーションを効率的に実行することで大きな寄与が可能である。特に、静的な(構造を固定した)電子状態計算よりも、動的な(分子動力学法による)電子状態計算の需要がますます高くなると予想される。そのような計算で考慮している計算規模は上で示したような数千規模までの原子数の系が大部分であろう。原子数(=～バンド数×0.1)よりも遙かに多いコア数で並列効率を向上させる必要がある。ここで示したように PHASE/0 は産業的要請に応えることが可能な強スケーリング性を持った第一原理プログラムである。

(2-4-2) 量子伝導解析プログラム

量子伝導解析プログラム ASCOT に対して並列化・分散化によるメモリ削減等の超並列計算に対応した最適化を実施し、数千原子規模の解析を可能とした。チャネル長 5nm のグラフェン・電極接合系(1,528 原子)に適用しその有効性を確認した(Fig.2-31)。

(2-4-3) 半経験的解析プログラム

古典力場法、強結合近似法等の半経験的解析手法の京計算機での性能評価(Fig.2-32)、非シリコン系ナノ構造への適用可能性を検討し、Ni 表面でのグラフェン CVD 成長(Fig.2-33)、SiC 酸化膜形成等への適用の有効性を確認した。

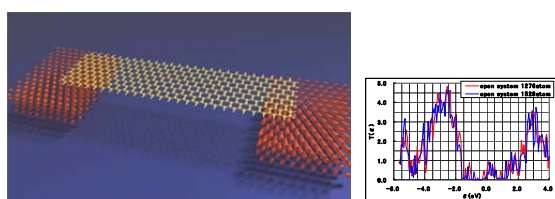


Fig.2-31 Transport analysis for grapheme-metal junction systems.

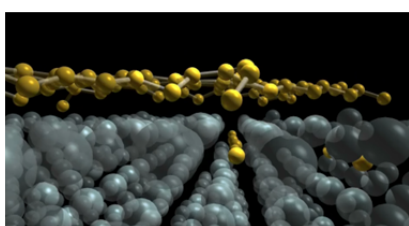


Fig2-33 A snapshot of classical MD simulations for graphene growth on Ni surface.

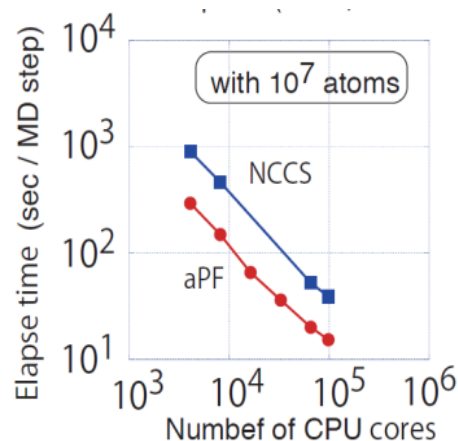


Fig. 2-32 Elapsed CPU times with various process numbers measured on the K computer for the tight-binding calculations for systems of 10^7 atoms.

(2-4-4) ソフトウェアの普及

ソフトウェアの普及活動として主に以下のような活動を行っている:i)ソフトウェアの公開、ii)ポータルサイト上での情報提供・フォーラム機能、iii)ワークショップ開催、iv)講習会開催。i)ソフトウェアは年に1~3回程度の頻度でバージョンアップを続けている。2015年度は2015.01を公開した。実験解析に重要なEELS計算機能などを追加した他に安定性を更に向上させた。ii)についてポータルサイト登録者は500名を超えており、ユーザーは着実に増えてきている。iii)講習会は年2~3回開催している。主に東京開催が多いが、西日本各地からの講習会への参加要望も多いことから一部については神

戸でも行っている。毎回定員を超える申し込みがあり、今後は開催数を増やすことを検討する必要があるかもしれない。iv) ワークショップは年 1 回開催している。2015 年については 11/27 に竹橋の一橋会館で開催した。企業からの材料開発実例の紹介や大学における物質研究の紹介がされた。多くの参加者が活発に議論を行い、非常に盛況であった。

以上(2-1)、(2-2)、(2-3)の成果により、ナノ構造の表面・界面プロセス解析に対する京計算機を活用した計算科学手法の有効性が確認された。次世代半導体デバイス開発のキーとなるグラフェン、SiC 等の非シリコン系材料のナノ界面構造・形成プロセスに関する大規模・長時間 MD シミュレーションを実施し、グラフェン成長過程における新規な成長モードや SiC 酸化膜の新規な界面構造と酸化過程など、半導体プロセスに関する重要な幾つかの知見を獲得しものづくり現場に提供した。このような大規模・長時間 MD シミュレーションが半導体プロセスの最適化指針を得るために有効であることを示した。

[1] K. C. Pandey, Phys. Rev. Lett., 47, 1913 (1981).

[2] U. Starke, M. Tallarida, A. Kumer, K. Horn, O. Seifarth, and L. Kipp, Materials Sci. Forum, 457-460, 391 (2004).

[3] J. Olander and K. Larsson, J. Phys. Chem. B, 105, 7619 (2001).

[4] T. Kaneko, T. Yamasaki, N. Tajima, and T. Ohno, Surf. Sci. 647, 45 (2016).

[5] F. Devynck, et al., Phys. Rev. B, 83, 195319 (2011).

[6] F. Devynck, et al., Phys. Rev. B, 76, 075351 (2007)

(3) 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発

(3-1) 自動車用次世代空力設計システム

自動車用の次世代空力設計システムを、産学連携(2016年1月現在、自動車会社10社、サプライヤー4社、大学研究機関7で構成する自動車コンソーシアム)で開発している。現在までにシステムの詳細仕様の決定を終了し、プロトタイプシステムの構築と実証シミュレーションを「京」を中心とするHPCIを活用して実施してきた。現在までの研究開発成果は以下の通りである。

(3-1-1) 階層的な手法による超大規模複雑形状メッシュデータの作成

構造格子にFFV-Cシステムについて、24,000ノードでの性能チューニングを実施。24,000ノード時の並列化率81%を達成。実設計利用可能な熱流体シミュレータとしては、世界最高性能のレベルを達成した。

大規模計算に必要な構造格子生成の自動化を達成し、300億レベルの格子を用いた計算に着手して24時間以内に結果を得ることができることを示した。この大規模計算の実証は京以外の計算機では実現不可能であった。この格子作成システムを用いて解析を行った結果を以下に示す。解像度を16mm(5億格子)にしたFig.3-1左では車体屋根面で、風洞実験では観察されない流れの剥離が発生しているが、解像度を8mm(36億格子)にしたFig.3-1右では、物理的に理にかなった流れ性状が得られている。

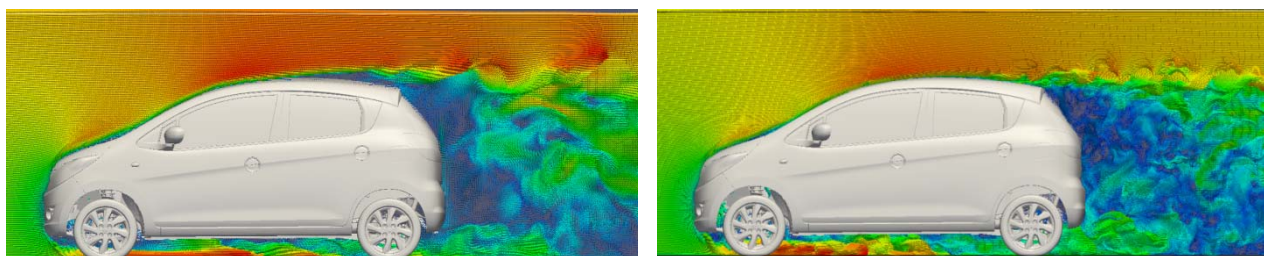


Fig.3-1 Fully structured unsteady simulation for vehicle aerodynamics: left, 500 million; right, 3.6 billion.

実際の設計に用いられるCADデータから、表面形状の修正なしに格子を作成できる階層型直交格子(BCM)を用いて、数百億格子、解像度1mmレベルの空力計算が実施できる前処理アプリFXgenプロトタイプを開発した。Fig.3-2左は新規BCMドメインを作成した様子であり、計算空間全体のBBoxを設定し、ルートグリッドを(4×2×1)で分割している。このドメイン分割に基づき、実際にOctreeで格子生成した結果を右に示す。外部境界条件の管理機能として、BBoxの6面に設定する境界条件リストをGUIによりユーザーが管理できるようになっており、設定状況はouter BC Tableとしてファイルに保存される。同様にポリゴンに設定する内部境界条件の管理機能も有しており、3Dビュー上で確認するためのカラー設定等も境界ごとに可能である。具体的な内部境界条件設定に際しては、GUI上でポリゴンの選択をマウスピックやマウスドラッグによる矩形選択で行い、プルダウンメニューからの指定が可能である。

開発した階層格子生成システムは、非構造格子ソルバーへのインターフェイスを整備し、FrontFlow/blue, FrontFlow/redでの計算が行えるようになった。Fig.3-2に示すように、形状データに基づきFXgenにて階層格子を生成し、そこから変換プログラムBCM2GF(FFB), BCM2UNS(FFR)を用いてデータ構造を変換する。計算結果は、各ソルバーのデータ構造から汎用ファイルフォーマットであるcgns形式で出力し、並列可視化システムHIVEで可視化を行うフローを構築した。

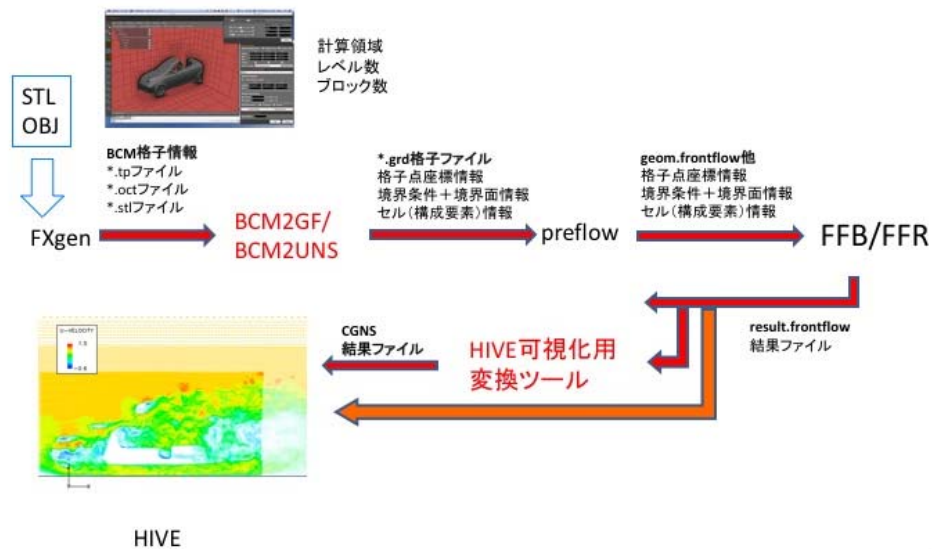
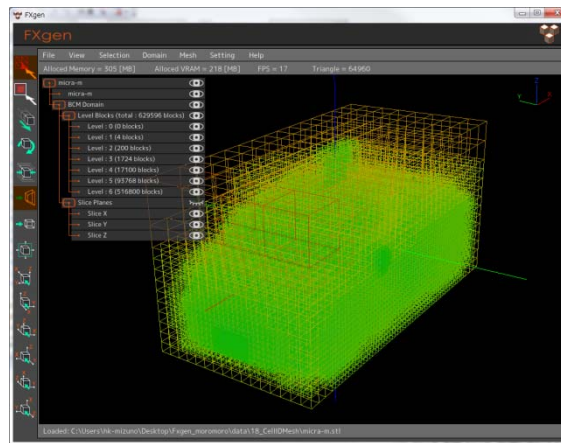
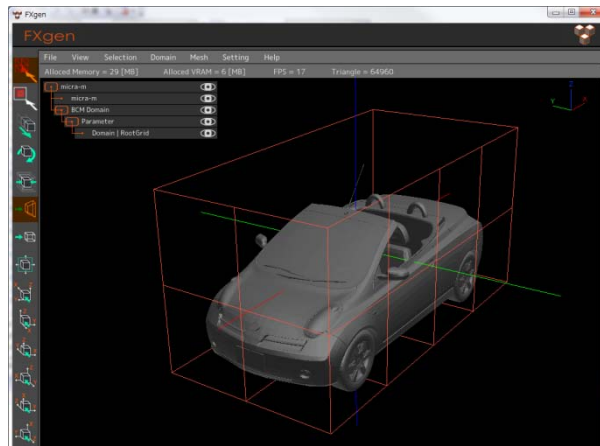


Fig. 3-2 Top, domain generation for BCM(left) and domain decomposition by the Octree method; bottom, Schematic of grid generation process from hierarchical structured data to unstructured grid data.

階層型直交格子に基づいた流体解析システム FrontFlow/violet-Hierarchical Cartesian (FFV-HC)を開発した。まず、開発したコードを京に向けてチューニングし、性能を評価した。その結果、単体性能は10.2%、並列性能は72.8% (32,678ノード)に達することを確認した。次に、格子生成に要する時間コストを評価した。具体的には、自動車車体回りの空力解析を対象として、約32億点の格子を生成する際に各処理過程に要した時間の内訳を調べた。なお、解析領域(32.7m x 16.3m x 8.19m)は、

最大レベル6、最小レベル2の八分木で、12,230個のブロックに分割した。そして、各ブロックに64 x 64 x 64個の計算セルを割り当てることで、総数約32億点の格子を作成した。一方、車体形状を表すポリゴンデータは、ポリゴン数が約1240万個で、ファイルサイズは約3.3GBであった。「京」12,230ノードを用いてこの格子を作成した際の結果をTable3-1に示す。この結果からは、ポリゴンデータの読込と八分木構造による領域分割の両過程がボトルネックになっていることが分かる。しかしながら、それらの時間はせいぜい数分のオーダーであり、流体解析全体の時間に比べれば十分に短いことも分かる。一方で、4と5の過程に要する時間は一見短く見えるが、車体が運動する状況(つまり移動境界問題)では、これらの処理が毎時間ステップに発生することから、潜在的なボトルネックであると言える。したがって、より効率的なアルゴリズムの開発が期待される。

Table3-1 Breakdown of the elapsed time for completing grid generation for 3.2 billion computational cells.

Sub-process	Time [sec.]
1. Loading geometry files	85.14
2. Creating the octree for domain decomposition	85.61
3. Distributing polygons	14.03
4. Detecting intersections between polygons and grid lines	14.04
5. Classifying computational cells	14.16

FFV-HCの解析精度を検証するために、Fig.3-3(a)に示す風洞試験に対応した数値シミュレーションを実施した。風洞入口における流速を100km/hとして、車体に作用する抗力と揚力、および、計測面における総圧を実験結果と比較した。また、直交格子による車体形状の再現性を特に詳しく評価するために、フロントグリルにカバーを設置した場合について対照実験を実施した(Fig.3-3(b),(c)参照)。計算格子としては、前述のとおり、階層型の直交格子を用いた。車体周辺に最も細かい格子が配置されるように、車体からの距離に応じて5段階で格子の大きさを調整した。その結果、ブロック数は20,924個となった。また、それぞれのブロックに32x32x32個の計算セルを割り当てたので、全計算セル数は約6.8億点となった。このとき、最も細かい計算セルの大きさは4mmで、最も粗い計算セルの大きさは64mmであった。なお、本研究で実施した全てのシミュレーションで、同じ計算格子を用いた。また、シミュレーションの実行には、「京」の1308ノードを使用した。Fig.3-4には、計測面における総圧分布を、数値シミュレーションと実験で比較した結果を示す。総圧分布の定性的な様子は概ね再現できていることが分かる。このことは、タイヤハウスから流出する空気量や、エンジンルームに流入する空気量が正しく評価できることを示している。このことを更に詳しく調べるために、フロントグリルカバーの有無による流れ場の変化について調査した。結果をFig.3-5に示す。Fig.3-5からは、フロントグリルカバーの有無によって、床下および車体後流に大きな変化が生じていることが分かる。なお、一般的に、フロントグリルを閉じると車体に作用する揚力が低下することが知られている。本研究による数値シミュレーションによって得られた流速分布および揚力は、この事実と整合することを確認している。また、車体に作用する抗力は約4%の範囲で実験と一致することも確認している。

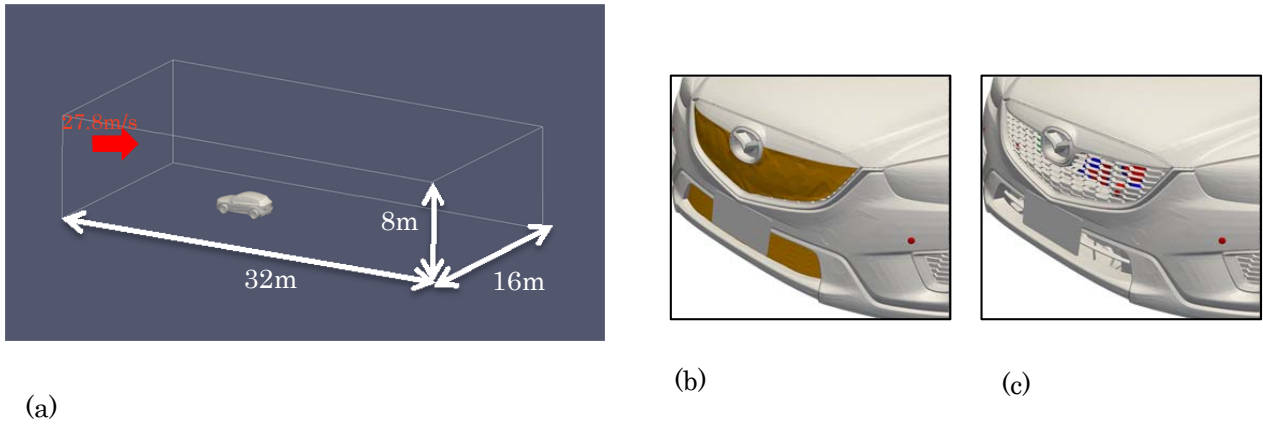


Fig. 3-3 (a) Overview of the wind tunnel simulation simulated in the present study. Close-up view of the front grill (b) w/ cover and (c) w/o cover.

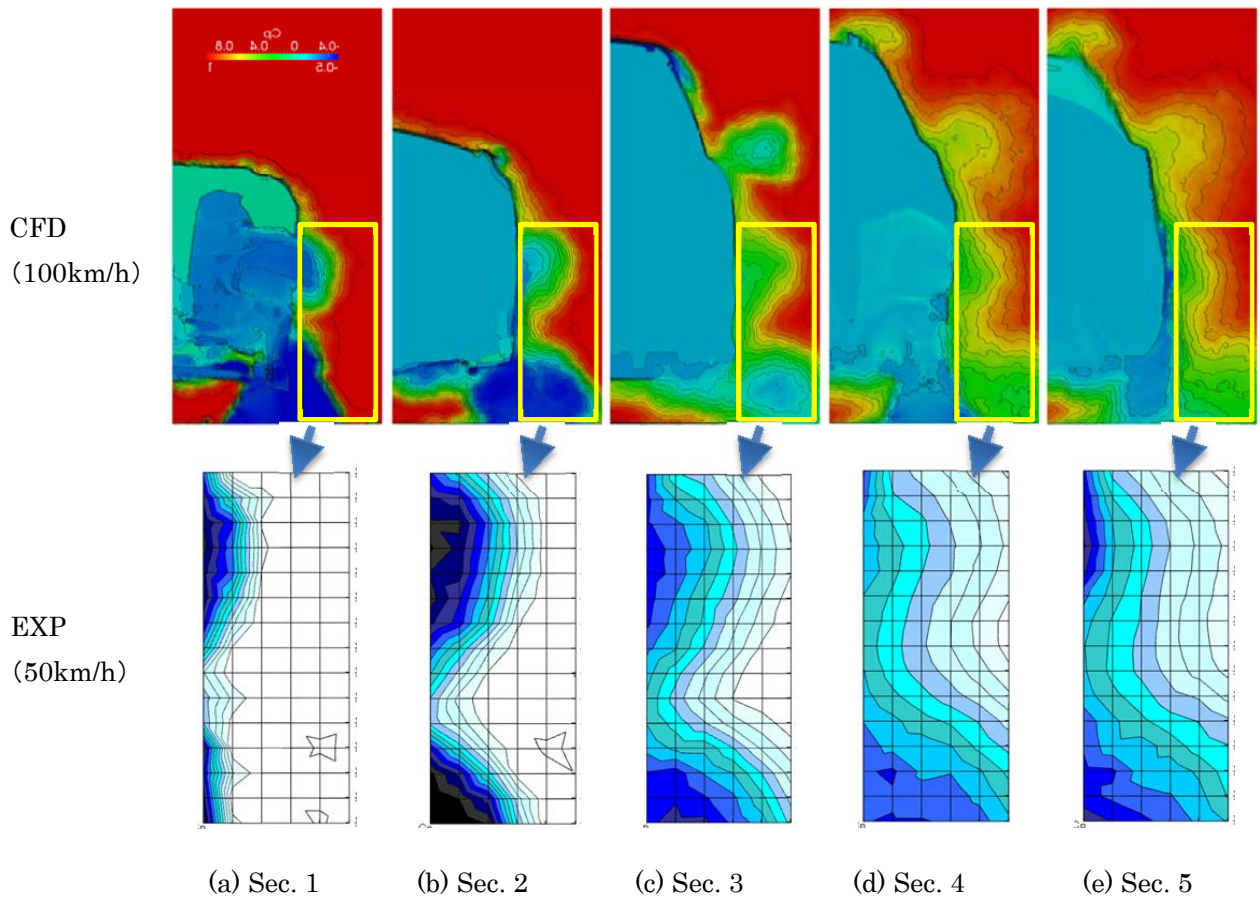
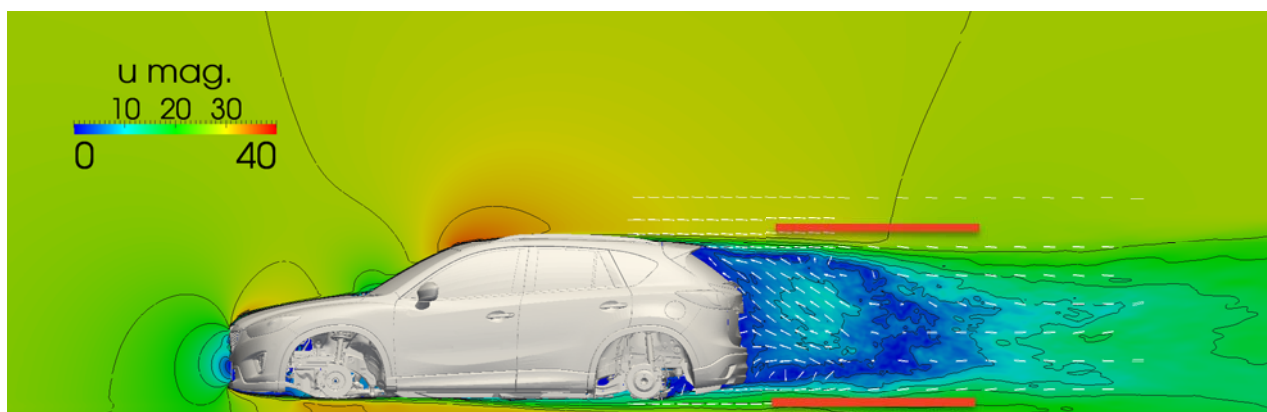
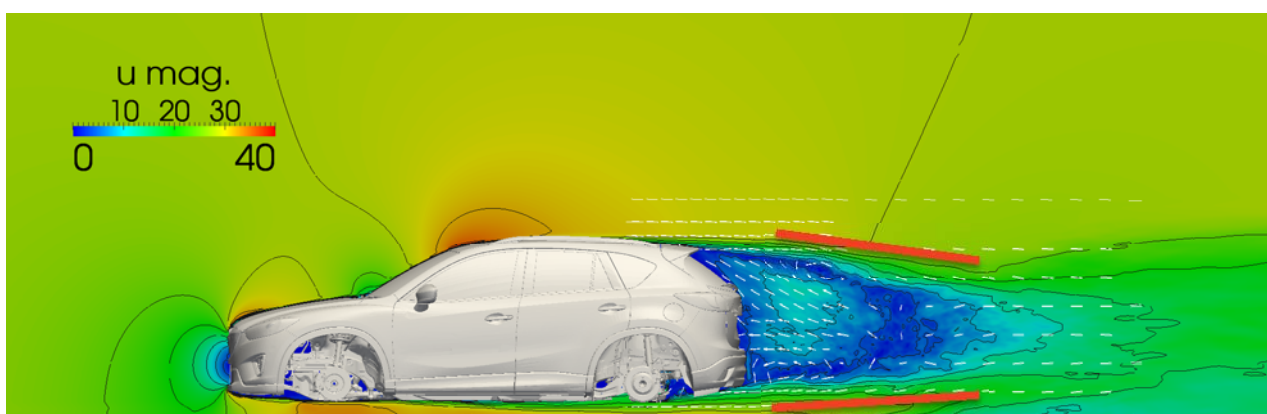


Fig. 3-4 Comparison of the total pressure at five test sections between CFD (upper column) and EXP (lower column).



(a) CFD w/o front grill cover



(b) CFD w/ front grill cover

Fig.3-5 Effects of the front grill cover on the flow field around the car body.

Significant difference is observed in particular around the under-floor region and the wake behind the car body”

設計・開発現場での実用化を想定し、特にプリ処理での工数削減を目的として、格子作成の自動化に優れたテトラ格子による非構造有限体積法による計算手法の構築を行い、FrontFlow/red-HPCに実装した。テトラ格子を用いた場合、車両近傍プリズム層とのハイブリッド等の特別な配慮をすることなしに、表面格子さえ作成すればほぼ自動で空間格子の作成が可能である。この場合、車体表面の境界層を再現するために必要な壁面近傍格子解像度を 1 ミリ程度に抑えるためには、総要素数は数十億に達するため、一般の市販ソフトによる格子作成は不可能である。そこで本課題では、解析のプリ処理に際して新たに自動格子細分化機能を導入した。

自動格子細分化では、オリジナルの非構造格子(親要素)に対して、新たに中間節点を作成し、親格子のトポロジーを崩すことなくアルゴリズムを用いて細分化格子(子要素)を自動作成する。この際、本課題で注力したのは(1)平滑化機能と、(2)形状マッピング機能である。

Fig.3-6 に本研究で採用した細分化手法をテトラ格子を例にとり示す。点 1, 2, 3, 4 で結ばれる四面体が親要素であり、点 5, 6, 7, 8, 9, 10 が中間節点である。親要素のトポロジーを維持するために、まず親要素の頂点とこの中間節点を用いて四つの四面体が切り離される。この際残された 5-6-7-8-9-10 で結ばれる八面体は新たに四つの四面体に分割され、最終的に親要素から 8 つの子要素が分割される。この際、要素の分割方法は点 6, 10 を対角線とする分割と点 7, 9 もしくは点 5,

8を対角線とする分割の3通りが考えられるが、いずれの場合も八面体から分割された子要素は親要素に対してアスペクト比が大きくなる。つまり細分化を繰り返す間は必ず要素品質が悪化した格子が存在することになる。そこで本研究では作成後の要素に対して平滑化を行うことにより、この品質悪化を緩和している。

一方、車体壁面に接する要素の分割に際しては、中間節点の作成に注意が必要である。例えば Fig.3-6 の四面体要素において点 1, 2, 3 がある程度曲率を持った車体壁面に接する場合、新たに作成した中間節点 5, 6, 7 は車体壁面には接しない。この結果、車体表面の形状再現性の観点からは、格子細分化を行っても、車体表面の解像度は親格子の解像度から向上しないことになる。最終的に1ミリメートル程度の形状再現性を目指す本課題では、この問題を回避するために、中間節点をオリジナルの車体形状にマッピングする機能を有している。Fig.3-7 にこの機能による細分化例(4mmから2mm)を示す。中間節点を1mm表面形状にマッピングすることで、細分化後の形状再現性が向上しているのがわかる。

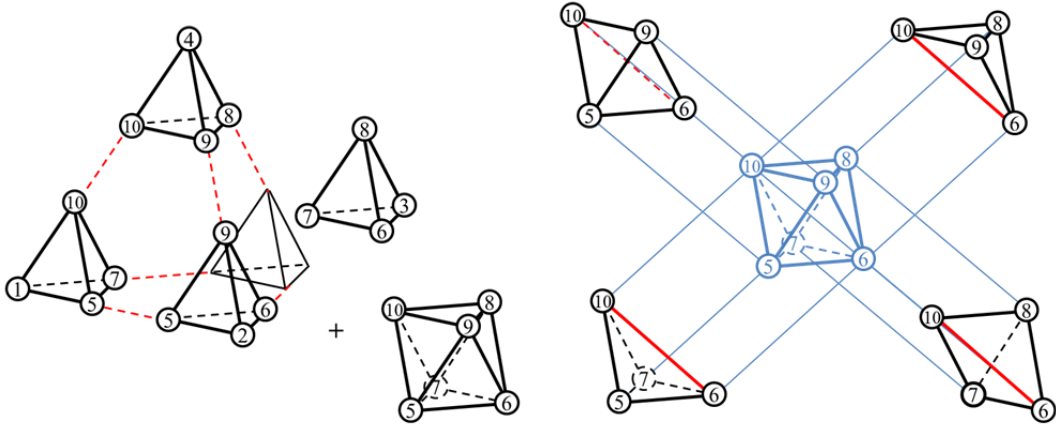


Fig.3-6 Mesh refining technique in the case of the tetrahedron element: intermediate nodes are labeled as 5, 6, 7, 8, 9, 10.

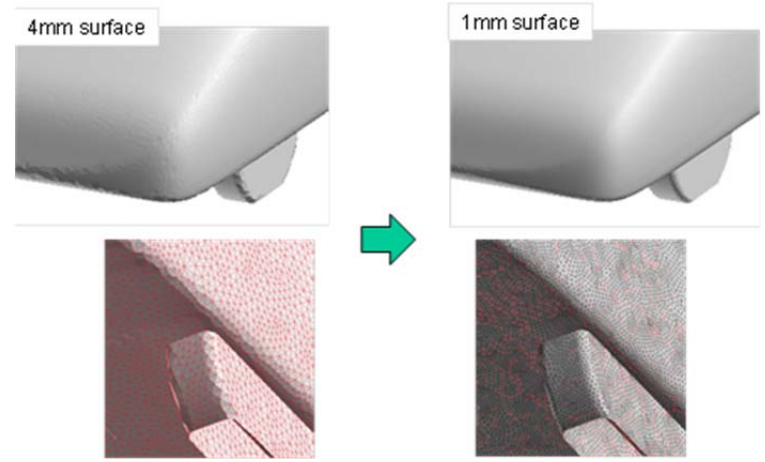


Fig.3-7 Intermediate node mapping on the original shape data

FrontFlow/red-HPCにおいて、演算にかかる負荷の約7割を占める疎行列ソルバのチューニング作業を実施した。FrontFlow/redの行列解法部は、不完全コレスキー分解に基づく前処理行列解法(ICCG法)を採用しており、大規模疎行列に対応できる汎用ソルバとして実装されている。オリジナル・コードの行列解法部はB/F値が約16.4程度であり、メモリアクセスが支配的な処理内容であっ

た。これをアルゴリズムそのものの改善により約 10.5 まで改善し、さらに行列のリオーダーリング手法を採用することで性能向上を図ることができた。その結果、行列解法部の繰り返し演算部分では、単体コア性能で 2.08%から 8.36%まで実行効率が向上している。それに伴い、ソルバ全体の実行効率も 7.64%まで向上させることができた。同時に、OpenMP によるスレッド並列化作業を実施した。スレッド化は行列解法部だけでなく、ソルバ全体に対して実装が完了している。スレッド化を行った時点では単体ノード性能で 1.12%程度の実効効率であったが、行列のメモリ保持様式に各行非零要素を 2 つの 1D 配列として格納する ELL 様式を適用したり、ループ分割アルゴリズムを採用したり、さらにはループのブロック化によるデータ局所化を行いキャッシュ利用効率を改善することで、最終的に単体ノード性能を 9.52%まで改善することができた。Table 3-2 に、各チューニング内容に対する実行性能向上の履歴を示す。

Table 3-2 Summary of peak performance due to code tuning of FFR

チューニング内容	実効性能	実行時間
オリジナル	2.08% (単体コア, 333MFLOPS)	50.44[s]
アルゴリズム改善+リオーダーリング	8.36% (単体コア, 1338MFLOPS)	21.05[s]
OpenMP 並列化	1.12% (単体ノード, 1434MFLOPS)	39.3[s]
スレッド分割チューニング	3.92% (単体ノード, 5018MFLOPS)	10.3[s]
行列 ELL 形式	4.42% (単体ノード, 5658MFLOPS)	10.8[s]
ループ分割・ブロック化, その他	9.52% (単体ノード, 1218GFLOPS)	-

コアあたりの問題サイズを一定とした weak scale ベンチマークテストを実施した。コアあたりに割り当てる要素数は 10 万としているが、20 万要素でも同等な実効効率となることを確認している。最大で 16,384 コアを使用し、16 億グリッド規模の計算を実施した。Fig.3-8 に、ベンチマークテストの結果を示す。比較のため、FOCUS スパコンを用いて測定した結果も合わせて示す。

チューニング前のコードでは、京で MPI のみで実行した(Flat MPI)際の実行効率は FOCUS と同程度であったが、OpenMP と MPI のハイブリッド並列(Hybrid)では実行効率が半分以下にまで落ち込む結果だった。最終的にはチューニング作業を進めたことにより(Hybrid w/cpu_tuning)、実効性能は FOCUS 以上に、ハイブリッドの実効性能で比べると約 5 倍程度向上することができた。

16 億要素を用いたベンチマーク時には Refiner 機能を使用している。これは初期に 2,500 万要素規模のグリッドを用意しておき、各要素を局所的に細分化(2 段階)することで、計算解像度を向上させる手法である。この Refiner 機能のコアソルバへの組み込み作業に関しては後述する。その結果、Refiner を使用した 16 億要素規模の問題において、実効性能は WeakScale で 16,384 コアまで問題なく向上することを確認。実効性能絶対値ともに当初目標が達成できた。

ただし、実行するたびに、計算時間が大きく遅くなる場合があり、これは I/O 待ち及びキャッシュラッシングによる影響ということが判明した。2013 年末現在では大きな問題とはなっていないが、今後 I/O 律速の計算を行いたい場合などでは注意が必要である。

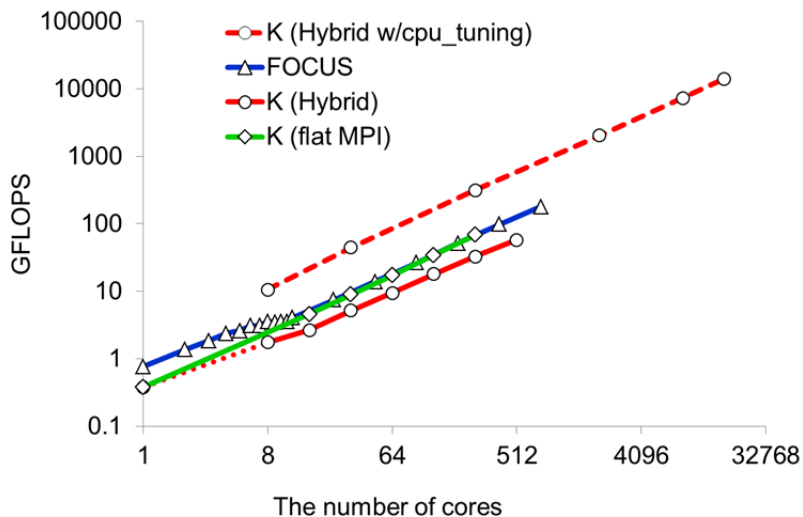


Fig.3-8 Sustained performance of FFR (weak scale benchmark test.)

複雑な自動車の形状再現性に優れた非構造格子をもちいて大規模計算を実現すべく、格子自動細密化機能を開発・実装することで、完全非構造格子では世界最大規模の 23 億要素を用いた空力計算を実現した(FrontFlow/red-HPC)。Fig.3-9にその結果を示す。左の 3,500 万要素数レベルでは格子解像度が 2~10mm 程度であり、空気抵抗の予測精度は、風洞実験値に対して 10%程度の誤差が見られたが、右図の通り、京コンピュータを用いて 23 億要素解析(格子解像度 0.5~2.5mm)をすることで、実験値に対して 2%程度の誤差で予測を可能にした。

