

計算科学の世界



京がつくる時代

K computer Newsletter
August 2012 No.3



Research Teams

研究チーム紹介

粒子系生物物理研究チーム
量子系物質科学研究チーム



K computer



K computer

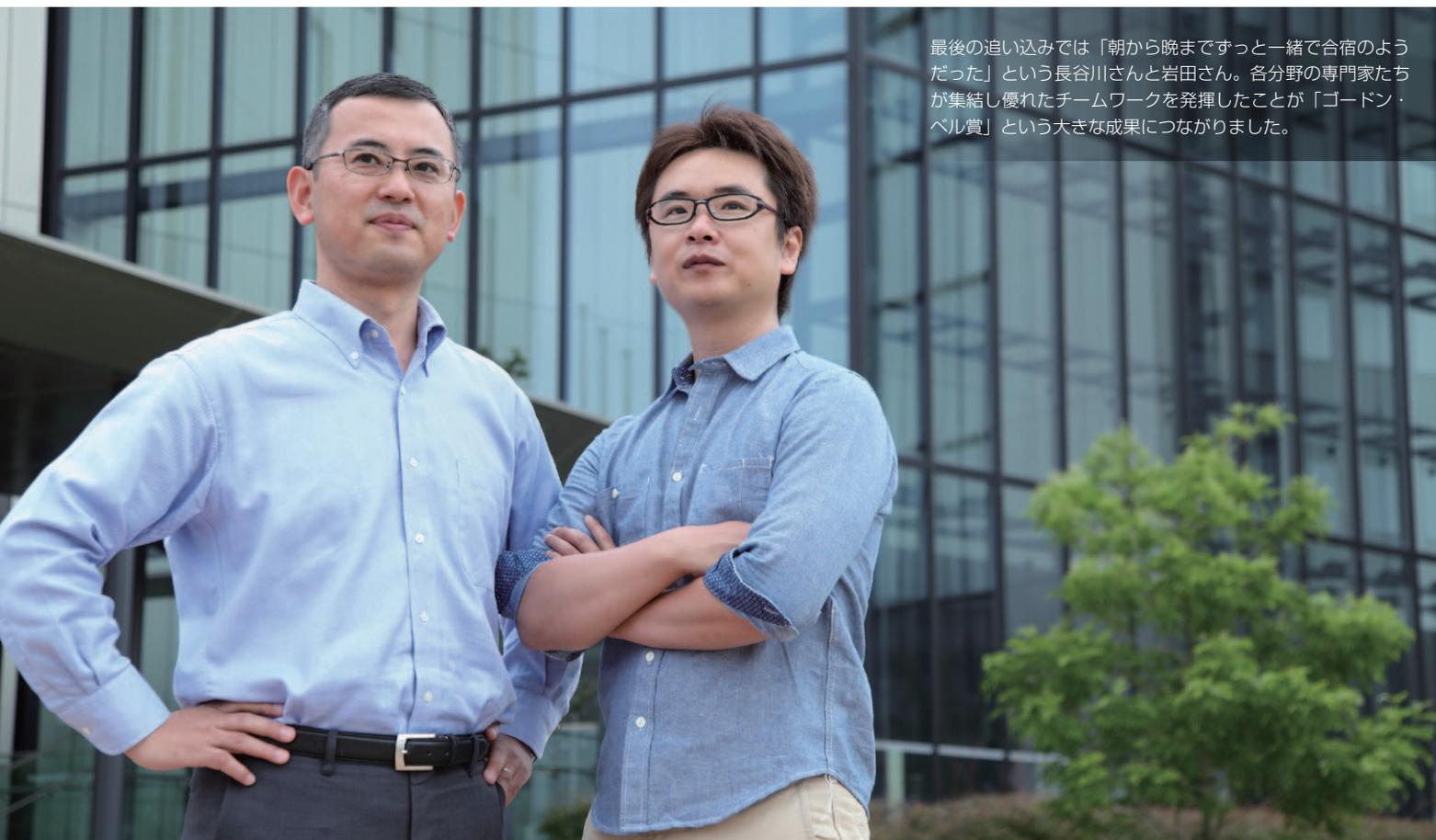
Interview

ナノ世界の電気特性を
「京」でシミュレーション。

シリコン
ナノワイヤの
設計実用化に道を拓く。



独立行政法人理化学研究所
計算科学研究機構

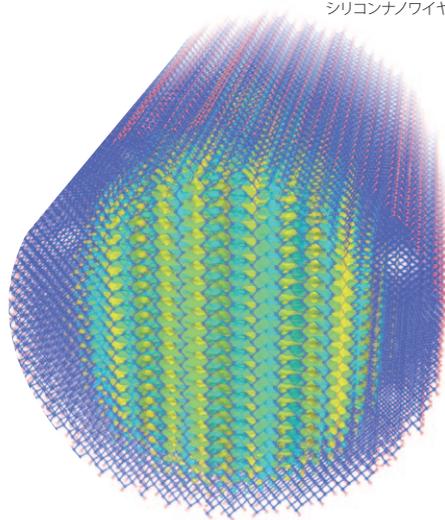


最後の追い込みでは「朝から晩までずっと一緒に合宿のようだった」という長谷川さんと岩田さん。各分野の専門家たちが集結し優れたチームワークを発揮したことが「ゴードン・ベル賞」という大きな成果につながりました。

ナノ世界の電気特性を 「京」でシミュレーション。 シリコン ナノワイヤの 設計実用化に道を拓く。

コンピュータの進化は、集積回路の高度化によって支えられてきました。しかし、これまでのやり方だけでさらなる高度化を目指すのは限界にきていると言われています。限界を乗り越える一つの方法は「シリコンナノワイヤ」など、新しい構造のトランジスタを用いた集積回路を作ることです。これを実用化するためには、ナノ世界における半導体材料の電気特性を知る必要があります。それを、「京」のコンピュータシミュレーションによって導き出そうという研究が進んでいます。

シリコンナノワイヤのシミュレーション結果



進化するコンピュータ

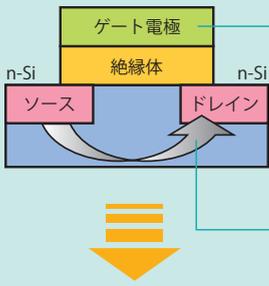
私たちの身の回りには、携帯電話、家電など半導体を使った製品があふれています。コンピュータの心臓部を構成するCPUという部品もその一つです。

CPUはプログラムを実行する主要な部品のことで、中央演算装置とも呼ばれます。CPUの実体は「集積回路」(ICまたはLSI)と呼ばれるもので、非常に小さな「トランジスタ」や「コンデンサ」「電気抵抗」などの素子(エレメント)が無数に組み込まれた電気回路です。

わたしたちの身近な存在となったパーソナルコンピュータの最先端CPUには、驚くことに、1個のCPUあたり約10億個の

図1 「シリコンナノワイヤ」への期待

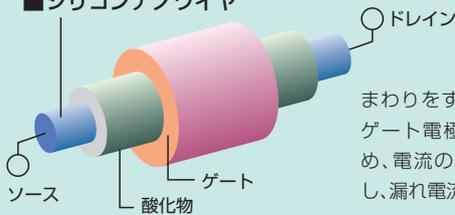
■従来型（プレーナー型）FET（電界効果トランジスタ）



電界効果トランジスタはゲート・ソース・ドレインの3つの端子で構成されています。ゲートに電圧(+)をかけると、ソースとドレインの間に電流が流れ(1)、切ると電流を止めること(0)ができます。これをスイッチング素子といいます。

ソース・ドレイン間の間隔が狭すぎると「漏れ電流」が発生しやすくなります。

■シリコンナノワイヤ



まわりをすべて(360度)囲うようにゲート電極が取り付けられているため、電流のオン・オフの制御性が向上し、漏れ電流が発生しにくくなります。

トランジスタ素子が組み込まれているそうです。

「シリコンナノワイヤ」への期待

これまでは素子を微細化することにより、集積回路の高性能化、高集積化、そして省電力化が同時に達成できていました。しかし、微細化がどんどん進み、素子のサイズがナノメートルの領域に入ると様々な問題が顔を出すようになり、その結果、消費電力の増大を抑えることが非常に難しくなってきました。とくに、CPUが仕事をしていないときにも電流が漏れてしまう現象（漏れ電流）による電力の消費は、CPU動作時の消費電力に匹敵するほどになっており、大きな問題となっています。

高集積化の限界をいかに突破するか。それはコンピュータの進化を維持するためには避けて通れない課題となっているのです。

そのため、現在主流の「プレーナー型」トランジスタによる微細化はあきらめて、新しい構造のトランジスタを導入することが検討されています。「シリコンナノワイヤ」もそうした構想のひとつです【図1】。

シリコンナノワイヤは、プレーナー型と違って、ソース・ドレイン間をシリコンのワイヤで構成し、そのまわりをすべて覆うようにゲート電極が取り付けられています。これによって電



理化学研究所
計算科学研究機構 ソフトウェア技術チーム
開発研究員

長谷川幸弘

Yukihiko Hasegawa

学生時代は数学を学ぶ。
現在はプログラムの高速化が専門。

流のオン・オフを制御しやすくなり、漏れ電流を大幅に減らせるようになるのです。

こうした新構造トランジスタを用いた集積回路を設計・製造するためには、素子の電圧・電流特性など、物性に関する情報が不可欠となります。しかし、こうしたナノ世界の物性を知るためには、量子力学の原理^{※7}に基づくコンピュータシミュレーション（第一原理計算）^{※8}が不可欠となるのです。

ナノ世界の電気特性をシミュレーション

さて、ちょっと前置きが長くなってしまいましたが、いよいよスーパーコンピュータ「京」の出番です。

東京大学の岩田潤一さんと、理化学研究所の長谷川幸弘さんたちは、プロジェクトを組んで「シリコンナノワイヤの電気特性（つまり電子状態）を解析するプログラム」開発を目指しました。

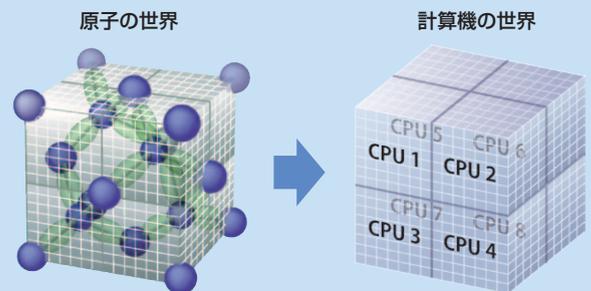
実は岩田さんは、このプロジェクトの前から、筑波大学に導入された2560個のCPUを持つスーパーコンピュータ「PACS-CS」を使って同じ目的のプログラムを開発していました。

「そこでは最終的に1万を超える原子が集まってできた物質の電子状態を計算しました」と岩田さん。

どんな方法で計算したのですか？

「トランジスタもその他の物質も、3次元空間の中で原子が寄り集まってできています。コンピュータで計算しやすいように、その3次元空間を格子状に表し、さらにその格子状の3次元空間をCPUと同じ数だけの領域に分けて、電流の担い手である電子の運動をそれぞれの領域で並列に計算します。電子の運動は、量子力学の第一原理に基づく方程式（コーン・シャム方

図2 RSDFT（実空間密度汎関数理論）によるマッピングの概念図

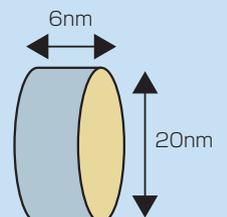


空間中に配置されたシリコンの原子核(青色)の周りに、連続的に分布する電子(緑色)が存在します。実空間法では、本来連続的な電子の分布密度を格子状の空間上に表します。

格子状の空間は、実際にはCPUの数に合わせて大きなブロックに分けられます。異なるCPUがそれぞれのブロックの計算を担当し、CPU同士で互いに通信しながら協調して計算を実行します。

【10万原子の大きさ】

10万原子（実際には原子数：107,292）のシリコンナノワイヤの大きさは、右図のとおり。実際のシリコンナノワイヤトランジスタには直径10nm～20nm、長さ10nm以下のものが使われます。



東京大学 大学院 工学系研究科
特任講師

岩田 潤一

Junichi Iwata

大学で電子工学を専攻し、
大学院では物理学を学ぶ。
専門は計算物性物理。



※9
程式)を解いて求めます【図2】。その方法の基礎となる理論は、
密度汎関数理論と呼ばれるものです。我々はそれを3次元の実
空間で計算するので、RSDFT(実空間密度汎関数理論)と呼ん
でいます※10

なるほど、それでプログラムの名前も「RSDFT」になっている
のですね。では、なぜそのRSDFTを「京」で動かそうとした
のですか？

「京コンピュータは、PACS-CSの約1000倍の性能を持って
います。RSDFTを京コンピュータに移植すれば、原子数にして
約10倍(10万原子)の電子状態を計算することができるから
です」

10万原子は、実際のシリコンナノワイヤトランジスタを構成
する原子数とほぼ同じです。したがって、「京」を使えば実際のナ
ノワイヤの電気特性を予測することができるというわけです。

岩田さんのプログラムを「京」で動かすにあたっては、長谷川
さんが大きな役割を發揮しました。「プログラムを京コンピュ
ータに最適な形に作り変えて最高の性能が引き出せるようにしま
した」と長谷川さん。

こうして、「京」のアプリケーションとなったRSDFTプログ
ラムは、きわめて高い処理能力を發揮。2011年の「ゴードン
・ベル賞/最高性能賞」(米国計算機学会)を受賞して、「京」の性
能が実際のアプリケーションの処理能力についても、世界最高
レベルにあることを証明しました。まさに、計算科学(岩田さん
)と計算機科学(長谷川さん)のコラボレーションによる成果

と言えます。

次世代集積回路実用化への道

さて、こうした「京」でのアプリケーションの開発は、シリコ
ンナノワイヤの実用化にどのように結びついていくのでしょうか。
岩田さんは最近の研究成果をひとつ紹介してくれました。
「シリコンナノワイヤトランジスタの特性を決める要因は、断
面の形状、断面での原子の並び方、長さ、界面、欠陥、など多数
あります。それらのうち、断面形状と長さの違いが、シリコンナ
ノワイヤの電子状態(電圧・電流特性に関係する)がどう変化
するかを計算で求めたのです」

その結果、楕円断面の場合に電圧・電流特性が良いというこ
とが判明しました【図3】。また、これまでの小規模な計算から
は見えなかった現象が、「京」での計算によって見られるよう
になってきました。こうした知見は、シリコンナノワイヤトラン
ジスタを実際に設計しようとするときの重要な情報になるので
す。

今までは、PACS-CSのCPUをすべて使っても1週間かかっ
ていた計算が、「京」の一部のCPUを使うだけでも1日ででき
るようになります。これによってシリコンナノワイヤの研究が
大きく進むことになるでしょう。

「京コンピュータのアプリケーションとしてのRSDFTは次世
代トランジスタの設計開発に重要な指針を与える物になる」と
岩田さんは言います。長谷川さんも「京コンピュータとRSDFT
を使って素晴らしい成果を次々と生み出して欲しい」と期待を
寄せています。

※1 CPU: Central Processing Unit; 中央演算装置

※2 IC: Integrated Circuit; 集積回路

※3 LSI: Large Scale Integration; 大規模集積回路

※4 トランジスタ: 増幅またはスイッチング機能を持つ半導体素子

※5 コンデンサ: 電気・電子回路における蓄電機能を持つ電子部品(素子)

※6 電気抵抗: 電気・電子回路における電気抵抗を持つ電子部品(素子)

※7 量子力学の原理: 電子のエネルギー状態を記述したシュレーディンガー方程式のこと。

※8 第一原理計算: 基礎方程式だけに依存して物性を予測する方法論。

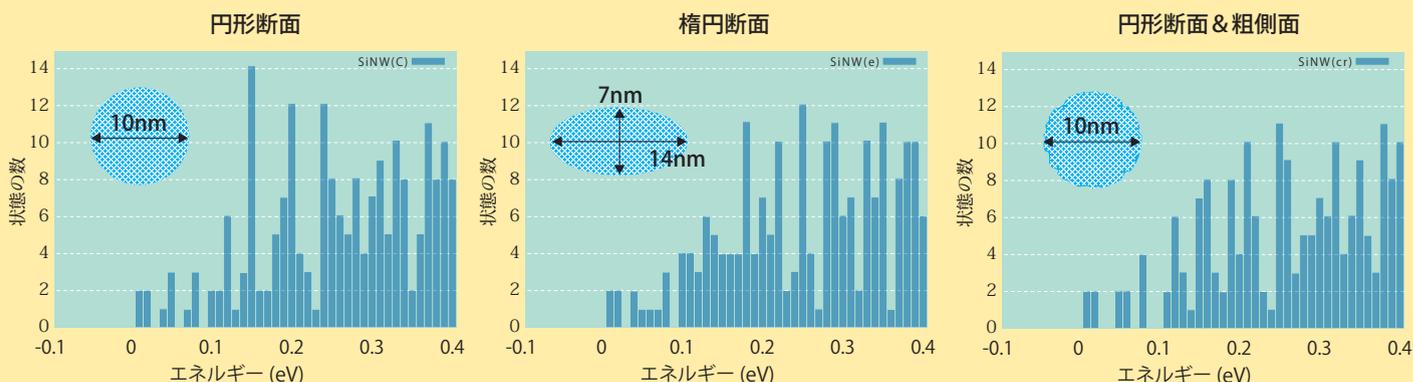
※9 コーン・シャム方程式: コーンとシャムが開発した第一原理計算の方法論。

※10 RSDFT: Real-Space Density-Functional Theory; 実空間密度汎関数理論

図3 シリコンナノワイヤの断面形状と電気特性の関係

グラフは、シリコンナノワイヤの断面形状を変えた時の、電子状態密度(電気特性に関係する物理量)の違いを表わします。

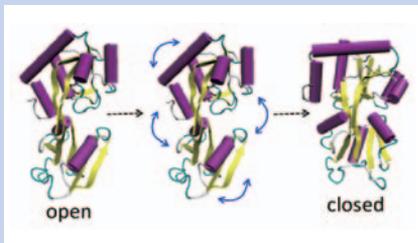
グラフの横軸は電圧に相当し、より小さい電圧(エネルギー(eV))の範囲に、より多くの電子状態が入ってくると、電圧・電流特性が良いということに対応します。



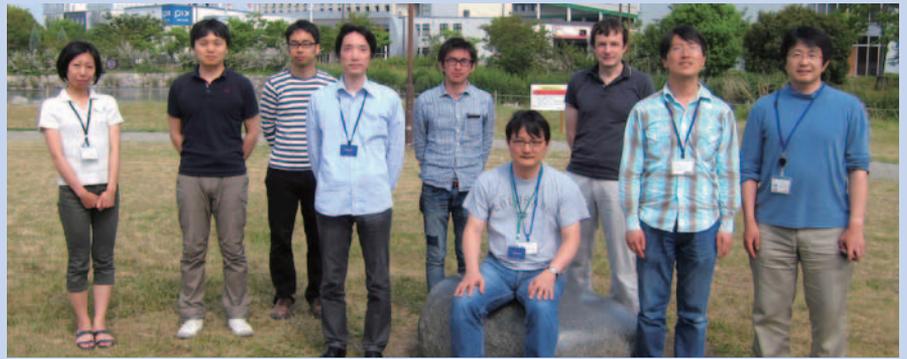
● 粒子系 ● 生物物理 ● 研究チーム

当研究チームでは、細胞を構成する生体分子がどのように機能しているのかを研究するために必要な、生体分子シミュレーションの計算手法やソフトウェアを開発しています。

細胞内では、タンパク質や核酸をはじめとする様々な生体分子が複雑に絡み合いながら機能しています。では、細胞内において生体分子がどのように機能しているのかを知りたいければ、どうしたらよいでしょうか？ 1つの答えとして、“細胞を構成する1つ1つの生体分子の動きを追跡してみ



原子レベルでタンパク質の動きを追跡



杉田 有治チームリーダー（前列右から3人目）とチームのメンバー

る”ということが考えられます。このためには、生体分子の動きを支配しているニュートンの運動方程式を解かなければなりません。コンピュータを使って運動方程式を解くことにより、生体分子の動きを原子レベルの詳しさで、時々刻々追跡することができます。つまり、コンピュータは見えない生命現象を見せる“顕微鏡”です。しかしながら、細胞内における生体分子の振る舞いを調べるためには、生体分子単体

ではなく、細胞を構成している生体分子をまるごと考える必要があり、取り扱う原子数は膨大になります。したがって、細胞をまるごとシミュレートするためには、高速に運動方程式を解くことができるソフトウェアが必要です。

私たちの夢は、開発したソフトウェアを使って、これまで到達することが出来なかった細胞スケールの生命現象を解明していくことです。将来的に、細胞を構成する生体分子の振る舞いを知ることが、細胞全体の振る舞いや、病気・疾患のメカニズム解明などにつながっていくと期待しています。

（原田 隆平）

Research Teams 研究チーム紹介

メンバーからのメッセージムービーをホームページ版『計算科学の世界』で公開中！
<http://www.aics.riken.jp/newsletter/>

● 量子系 ● 物質科学 ● 研究チーム

当研究チームでは、スーパーコンピュータ「京」をはじめとした高速な計算機環境を利用して、物質の性質（物性）をミクロなレベル（原子・電子）から明らかにすることを目的として研究を行っています。また、そのために、「京」に最適なシミュレーション方法の研究開発も行っています。

私たちの周りには様々な物質が存在し、多様な物性が見られます。これは物質のバリエーションが豊富ということに加え、ある一つの物質でも環境によって異なる性質を示すことを意味しています。例えば、水は冷やすと氷（固体状態）になりますし、多くの金属は冷やすと電気抵抗が0の「超伝導」状態となります。このように、同じ物質が温度や圧力といった環境によって異なる状態に変化することを「相転移」と呼びます。通常物質中にはおよそ10の23

乗個という途方もない多数の原子が含まれていますが、このまさに「多数」であることで初めて相転移という現象は起こります。ある著名な物理学者はこれを“More is different.”と表現しました。これはつまり、数が多い事で質的に異なる状態が生じうることです。

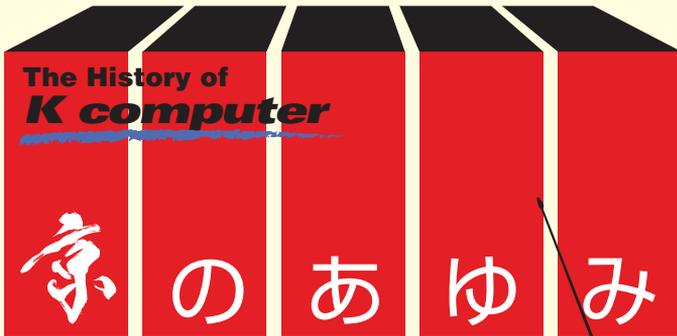
多数の原子が集団として見せる性質を理

解することは、たとえそこを支配する物理法則が既知であったとしても、そう単純ではありません。特に原子がお互いに強く影響を与え合っているような場合を調べるためには、高速な計算機を用いたシミュレーションが不可欠な研究手段となります。今はまだ物性を理解することが目的ですが、それを通じて将来的には、望みの物性を持つ物質を計算機の中で「設計」することがこの分野の研究者の夢です。

（大塚 雄一）



柚木 清司チームリーダー（右から2人目）とチームのメンバー



「京」の開発はどのようにして始まり、
どのように進められたのか？
今号からは、そのおいたちを紹介します。



プロジェクト前

スパコンは、自動車に例えるとF1マシンです。その圧倒的な性能をもって、今まで成し得なかった計算を初めて現実のものとし、その成果によって、我々の生活を豊かにしてくれる可能性を秘めています。多くの研究分野でスパコンが重要となっている今、日本が世界をリードできるような科学・技術力の復権を目指すためにも高い計算能力を持ったスパコンが必要なのです。2006年、「次世代スーパーコンピュータ」が第3期科学技術基本計画によって国家基幹技術に指定され、「京」のプロジェクトが始まりました。

「京」の設計

スパコンはシステムが大規模であるため、設計から製造、稼働まで長い開発期間が必要です。そのため、まずは完成時にどのような性能のスパコンが必要なのかを検討することが重要でした。スパコンの性能は過去10年で1000倍速くなってきています。「京」ではこの過去の性能上昇の分析と、「京」を利用する多くの研究者からの声をもとに、「2012年の完成時にLINPACK性能^{*}で10ペタフロップスの演算性能^{*}をもつ」ことを目標に据えました。しかし、これは多くのCPUをつなげれば達成できるような単純なものではありません。設置面積、消費電力など多くの問題をクリアしつつ、性能を高め

る必要がありました。

研究者の意見に基づいたシステム設計

どんなに速いスパコンでも、実際に研究で使うアプリケーションが高速で動かなければ、ただの箱です。「京」では、日本で開発中の様々な分野のアプリケーションが、高速で動くようなシステム設計が求められました。一方、「京」を最大限に活用できるアプリケーションの開発と普及も必要です。「グランドチャレンジ・アプリケーション」と題し、「京」の開発と並行してナノテクノロジーと生命科学の分野でアプリケーションの開発と普及が進められました。



プロジェクト開始当時の次世代スーパーコンピュータ開発実施本部メンバー（2006年10月丸の内にて）

ベクトル部とスカラ部

「京」は様々なアプリケーションを動かすことができるよう、汎用性を重視しました。一般的に、汎用のスパコンは流体計算を得意とするベクトル方式と粒子計算を得意とするスカラ方式に大別できます。当初、「京」では両方の特性を併せ持つ複合型システムを目指していました。

神戸への設置が決定

大規模なスパコンは、冷却施設等の大型設備を必要とするため、設置する建物も並行して設計・建設する必要があります。このため、設計段階からどこに設置するか決める必要がありました。日本全国の候補地の中から、地震や雷などの自然条件、利用者の利便性、電力・ガス・水の供給状況など多角的に点数化した結果、2007年に神戸に設置することが決まりました。

これで、お膳立ては揃いました。次回は、製造から設置についてお話しします。

（運用技術部門 ソフトウェア技術チーム 黒田 明義）

※LINPACK性能：LINPACKという連立一次方程式を解くプログラムの計算速度

※10ペタフロップス：1秒間に10の16乗回（1京回）の演算性能

