

東京大学情報基盤センター

トライアルユース利用成果報告書

提出日：平成 24 年 10 月 26 日

研究題目 (申込課題名)	大規模計算による次世代デバイス材料開発		
フリガナ 氏 名 (※1)		印	利用者番号 (プロジェクトコード)
所 属 (※2)	株式会社富士通研究所		職 名
利用計算機 システム	FX10 スーパーコンピュータシステム		
申込区分	1. 無償トライアルユース		2. 有償トライアルユース
コース	1. パーソナルコース (※3 コース1 ・ コース2)		2. グループコース 3. グループコース (企業利用)
利用期間	平成 24 年 7 月 ～ 平成 24 年 9 月		

- ※1 グループコースの場合は、利用申込書に記載した代表者名を記入してください。
- ※2 企業の方の場合は、企業名および部署名を記入してください。
- ※3 どちらかに○をつけてください。
- ※4 本報告書は、利用状況調査等に活用し、センター広報・Web ページには利用件数を公開いたします（グループコース（企業利用）を除く）。
- ※5 グループコース（企業利用）については、利用終了後に申込課題名および企業名をセンター広報・Web ページに公開いたします。

- 本報告書は、利用期間終了後 1 ヶ月以内に東京大学 情報システム部 情報戦略課 研究支援チームまでご提出ください。
- 本様式の変更はできません。

受付日	平成 年 月 日	受付印	
-----	----------	-----	--

※記入の際は各項目の枠内に収まるように記入してください。補足資料を付加することは可能です。

1. 利用の概略

1) 利用目的・内容

【大規模電子伝導計算】数千原子からなる現実のデバイス構造に近い構造モデルの電子伝導特性を第一原理計算により予測する。【高速スクリーニング】1000 程度の同種の計算を自動かつ効率的に、また有機的に制御するしくみを開発し、材料開発に適用する。

2) 利用意義

次世代デバイスが直面するナノスケールの世界では、局所構造や界面が全体に大きく影響するため、経験的パラメータが不要な第一原理計算を用いて、大きな領域を丸ごとかつ高速に計算することが重要である。また、希少金属・環境問題などから材料選択はこれまで以上に困難になっている。元素種などを変えて大量の同種の計算を効率よく実施する大規模並列計算の高速スクリーニングへの適用の期待が高まっている。

3) スーパーコンピュータを利用する必要性

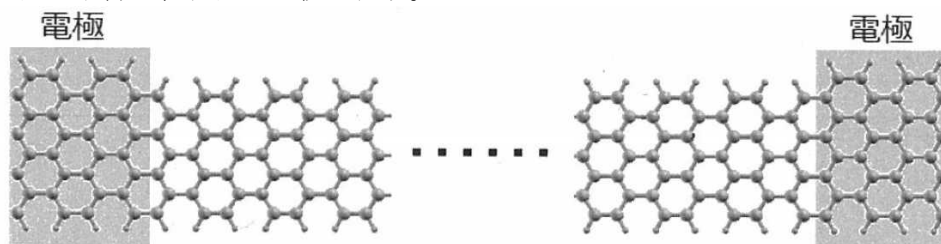
第一原理伝導計算には膨大な計算量を必要とするため、高並列計算を利用しプログラムのチューニングや改良を進めることで計算速度を向上し、1000 原子の計算規模を数千原子まで拡大することが必要である。高速スクリーニングでは、それぞれの計算は独立であり通信を必要としないため、大量の独立な計算を自動かつ効率的に有機的に制御するしくみを開発していくことで、大きな並列効率が期待される。

2. 成果の概要

1) 今後得られるであろう成果の見通し

【大規模電子伝導計算】

本利用において 1000 原子を越える規模の第一原理伝導計算を実施し、計算時間を計測することにより、スレッド数とノード数の最適な組み合わせを検証し、3086 原子から成るグラフェンナノリボンをチャンネルとするデバイス構造について、今後の通常利用の 20% (約 2 万カートン) でひとつのモデルの電流電圧特性が取得可能であるという目途を得た。今後は、数種の化学修飾されたグラフェンナノリボンのデバイス構造モデルについて電流電圧特性を取得し、特性の比較を行う。



図：計算可能であることを確認した 3086 原子からなるグラフェンナノリボンをチャンネルとするデバイス構造モデル。

【高速スクリーニング】

本利用において、弊社開発のマルチジョブシステムを実装、FX10 向けに改良することで、システムの動作を確認した。また、1000 ケースまでのマルチジョブについてテスト実証を行い、パラメータを自動的に変えた 1000 ケースのジョブの自動投入、自動終了までを確認した。今後は、さらにジョブのモニタリングや可視化また統計処理により、個々の計算により有機的にまた効率的に制御するしくみを検討する。このしくみを大量のケースの計算が必要になると考えられる Li 電池の電極材料に適用し、材料開発研究を実施する。

2) 社会・経済への波及効果の見通し

※パーソナルコースを利用された企業の方およびグループコース（企業利用）の場合のみ記入

グラフェンデバイスなどの新規低消費電力デバイスや低環境負荷材料の開発推進による低環境負荷社会への貢献、また、シミュレーションによる実験の代替えによる研究開発の加速およびコスト・環境負荷低減、さらには、産業界におけるシミュレーションおよび大規模並列計算利用の有用性を実証することによる、コンピュータビジネスの牽引効果を期待する。

3) その他の成果