

# コンピュータ実験科学研究部門

## Computer Assisted Science Research Division

### 1 部門スタッフ

#### 教授 小田中紳二

略歴:1978年3月京都大学工学部数理工学科卒業、1980年3月京都大学大学院工学研究科博士前期課程数理工学専攻修了。2000年4月より、大阪大学サイバーメディアセンターコンピュータ実験科学研究部門教授。大阪大学大学院情報科学研究科、理学部及び理学研究科兼任。IEEE(Fellow)、電子情報通信学会、日本応用物理学会、日本数学会各会員。工学博士(京都大学)。

#### 准教授 降籬大介

略歴:1990年3月東京大学工学部物理工学科卒業、1992年3月東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻修士課程修了。同年4月東京大学工学部物理工学科助手を経て、1997年4月より京都大学数理解析研究所助手、2001年4月より大阪大学サイバーメディアセンターコンピュータ実験科学部門講師。2002年4月より同部門助教授。大阪大学大学院情報科学研究科、理学研究科兼任。日本数学会、日本応用数理学会(理事)、日本計算数理工学会各会員。博士(工学)(東京大学)。

#### 特任研究員 鍾菁廣

略歴:2014年3月大阪大学情報科学研究科情報基礎数学専攻博士課程修了。2014年4月より、大阪大学サイバーメディアセンターコンピュータ実験科学研究部門特任研究員。日本応用数理学会。博士(情報)(大阪大学)。

#### 招へい教員・研究員

招へい教授 石川清志 (ルネサスエレクトロニクス(株))

招へい教授 今村俊幸 (独立行政法人理化学研

究所計算科学研究機構)

招へい准教授 国清辰也 (ルネサスエレクトロニクス(株))

### 2 教育・研究の概要

#### 2.1 教育の概要

サイバーメディアセンターにおける教育及び教育支援活動として、授業支援システム CLE や計算機を利用した科学技術計算教育を進めている。共通教育においては、センターが提供する情報処理教育科目(サイバーサイエンスの世界)に協力している。理学部共通科目においては、サイバーメディアセンターと理学部とが協力して、理学部共通科目として数値計算法基礎を開講している。また、理学部数学科における計算機教育を支援している。

2014年度は、以下の学内講義を担当した。

1. 共通教育・情報処理教育科目  
解析学 A, 数学演習 A (小田中, 降籬)  
サイバーサイエンスの世界 (降籬)
2. 理学部専門科目  
数値計算法基礎 (理学部共通, 小田中)  
応用数理学 7, 実験数学 1(数学科, 降籬)  
課題研究 a,b(数学科, 降籬)
3. 大学院理学研究科科目  
数理工学概論 (数学専攻, 降籬)
4. 大学院情報科学研究科科目  
コンピュータ実験数学(情報基礎数学専攻, 降籬), 情報基礎数学研究 Ia,Ib(情報基礎数学専攻, 小田中, 降籬), IIa,IIb(情報基礎数学専攻 降籬)

#### 2.2 研究の概要

地球環境、情報、生命、ナノテクノロジーなどの

科学技術分野において、様々な数理モデルが展開し、コンピュータシミュレーションを通して、その理解を深め、新たな知見を得る試みが大きく進展している。このため、数学的に基礎付けられた計算モデルの構築や数学的手法によるモデル階層を明らかにすることが益々重要になっている。また、このような過程は、新たな数学モデルを構成し、数学・数値解析と共に数値計算手法やアルゴリズムを構築する機会でもあり、いわゆる“応用数学”を発展させる機会でもある。

コンピュータ実験科学研究部門は、非線形偏微分方程式に基づく数理モデルや計算モデルの構成を中心にして、コンピュータシミュレーションの理論的基礎を築く計算数学・数値解析の研究、その応用として大規模コンピュータシミュレーション技術に関する研究を体系的に進めている研究部門である。

2014年度の主な研究テーマは、半導体輸送の数理モデルに関する研究、量子流体方程式や反応移流拡散方程式の数値解析・数値スキームに関する研究、半導体シミュレーション手法とその応用に関する研究、偏微分方程式の保存・散逸則を再現する数値計算法に関する研究、変分原理に基づく数理モデルに関する研究、数値計算法の安定性を生かした数理アルゴリズムの開発である。また、並列計算に関するアルゴリズムの開発や評価も進めている。

### 3 教育・研究等に係る全学支援

当部門は、全学支援業務としてスーパーコンピュータ利用支援を行っている。支援活動の強化のために2013年度に立ち上げたスーパーコンピュータ利用者支援WGの活動を、2014年度も引き続き行っている。この活動の中で、当部門はスーパーコンピュータの企業利用推進を含む利用者支援、講習会の開催企画及び講習会の実施（担当：スパコンに通じる並列プログラミングの基礎、2014年6月3日、並列計算入門、2014年11月11日）、スーパーコンピュータ事業ホームページの全面改修、高校生のスパコンコンテスト開催、問題作成に関する支援を行った。

さらに、CMC 共通業務として以下の委員会に参画した。

- ・高性能計算機委員会（小田中）
- ・財務委員会（小田中）
- ・計画・評価委員会（小田中）
- ・広報委員会（降旗）

また、今年度は当センターにおける「計算科学」分野を支援することによって、新規利用の推進活動を本格化させている。ネットワーク型拠点活動である学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）活動を支援し、神戸大学協定講座「大規模数値シミュレーション特論」に協力している。

JHPCN 活動支援を推進することによって、当部門と企業との共同研究テーマ：大規模・大領域半導体デバイスシミュレーションの研究を基に平成26年度 JHPCN 研究課題（次世代パワーデバイス実現に向けた大規模・大領域半導体デバイスシミュレーションの研究：代表 小田中）を実施した。また、新規利用推進活動の一つとして、今年度から、文部科学省ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発”重点課題7“次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成（代表：東京大学 常行教授）”に参画し、新材料からの半導体デバイス創製シミュレータの開発を分担している。その中のテーマのひとつである次世代トランジスタの量子輸送シミュレーションに関する研究（代表：大阪大学工学研究科 森教授）が平成27年度 JHPCN 採択課題となった。

## 4 2014 年度研究業績

### 4.1 量子エネルギー輸送モデルによる先端 MOSFET シミュレーションの研究

Wigner-Boltzmann 方程式のモーメント展開から量子流体モデルが導出され、古典的流体モデルとの対応をもったマクロモデルの階層が形成される。この中で、上位の階層にある量子流体(QHD)モデルの

拡散近似から量子エネルギー輸送(QET)モデルを開発し、近年開発が進む薄膜 MOSFET 構造に対応するため、4-モメントモデルを基礎にした QET モデルを新たに提案した。本年度は、このモデルを Boltzmann 統計から Fermi-Dirac 統計に拡張し、数値計算手法を新たに開発した。これによって、縮退した材料による半導体デバイスの解析も可能となった。

これによって、Si MOSFET だけでなく、17nm 世代以降の次世代デバイスとして期待されている高移動度材料のチャネルを有する Ge や InGaAs MOSFET 内のホットキャリア効果を伴った量子閉じ込め輸送を解析し、そのデバイス特性の予測として、短チャネル効果の解析を進めた。さらに、マルチゲート MOSFET 構造において、Si チャネルと高移動度材料チャネルの短チャネル効果を比較解析し、デバイス特性から材料評価の予測を行った。

#### 4.2 非線形 Black-Scholes 方程式の数値解法に関する研究

近年、ボラティリティーモデルを含んだ非線形 Black-Scholes 方程式の数値解法の研究が進められている。アメリカンオプションの場合、このモデルを基にしてオプション価格を求めるためには、移動境界値問題を解かなければならない。Sevicovic は変数変換によって、この問題を固定領域の初期値境界値問題に変換した。この場合、変換後の方程式には強い移流項が存在する。このため、数値計算にあたっては、移流項に対して Hyperbolic scheme を適用する split-step 法が適用された。しかしながら、このスキームは、時間に対して陽的スキームであるため、スキームの安定性を確保するためには、CFL (Courant-Friedrichs-Lewy) 条件を満たす必要があり、空間メッシュ、時間メッシュの大きさに強い制約が加わっていた。これに対して、単調な保存スキームを構成し、そのスキームが時間に対して無条件に安定であることを証明した。また、数値実験によってその性質を検証した。

#### 4.3 走化性モデルの数値解法に関する研究

反応移流拡散方程式系によって、生物系におけるパターン形成現象や細胞内のイオンチャネル現象などを記述することができる。近年、走化性バクテリアのパターン形成が実験的に見出され、細胞分裂による増殖効果を組み入れた走化性モデルの初期境界値問題から走化性バクテリアのパターン形成が数学的に及び数値解析的に研究されている。

その中で、Mimura-Tsujikawa モデルも反応移流拡散方程式系によって記述され、このモデルから走化性バクテリアの様々なパターン形成が導き出されることが知られている。観応関数に対しては、様々なモデルが提案されている。

我々は、一般的な観応関数をもつ走化性現象をモデル化する移流・拡散・反応方程式に対する離散化手法を提案した。また、数値実験によって検証し、開発した数値スキームの優位性を示した。

#### 4.4 大領域半導体デバイスシミュレーションの研究

Poisson 方程式と電流連続式(移流拡散方程式になる。)からなる半導体ドリフト-拡散モデル (DD モデル) に対して、領域分割法と高速行列解法による並列化手法を開発した。

近年、マルチコアプロセッサと主メモリーを1ノードとし、ノード間を様々なネットワークポロジで結ぶ大規模スーパーコンピュータシステムの開発が進んでいる。さらに、ポスト「京」世代では、メニコアプロセッサによって1ノードを構成する時代が到来すると考えられている。一般に、ノード内のメモリーバンド幅は、ノード間のメモリーバンド幅に比べて格段に大きく、コア間の転送時間に大きく影響している。このため、メニコア時代では、このようなアーキテクチャーまで考慮した計算モデル、すなわち、“並列計算モデル”の構築が重要である。

半導体ドリフト-拡散 (DD) モデルに対して、overlapping Schwartz 法による領域分割法を適用し、各部分領域を各ノードに割り当て、MPI によって並

列化した。また、各部分領域における DD モデルを不完全分解を伴った CG 法、BiCGSTAB 法によって高速解法した。このとき、通常用いられる不完全 LU 分解を用いるためには、並列化するためにはなんらかの変数の re-ordering が必要である。このため、不完全分解の並列性に着目し、野木らが提案した不完全 HV 分解、すなわち、分割作用素法を用いた。この手法は、自然な ordering のままで OpenMP によって容易に並列化が可能である。

これらによって、DD モデルに対して、MPI/OpenMP ハイブリッド並列化手法を構成した。まだ、十分な最適化はなされていないが、NEC SX-ACE 上で 91% の実効並列化率を達成した。

#### 4.5 偏微分方程式の保存・散逸則を再現する数値計算法に関する研究

本研究では非線形性が系の挙動に本質的な影響を与える偏微分方程式の数値解法の構成アルゴリズムの開発を進めてきた。非線形問題には多くの保存問題、散逸問題が含まれるが、これらの保存則、散逸則が数学的には変分を介して表されることに着目し、変分計算を離散化することで離散変分導関数法というスキーム構成法を提案した。

この適用範囲を広げる研究の進展により、Hamilton 系を含むエネルギー保存系や Fujita-type 爆発問題系、粘菌の挙動を記述する Keller-Segel 系などの連立偏微分方程式系、非線形 Schroedinger 問題などの複素問題等をはじめ、非線形長波長近似方程式として近年提唱された Bao-Feng Feng 方程式、regularized long wave 方程式や Camassa-Holm 方程式、パターン形成問題のモデル方程式として知られる Swift-Hohenberg 方程式や非線形 Klein-Gordon 方程式、拡張型 Fisher-Kolmogorov 方程式、エルゴード性を調べるために用いられた Fermi-Pasta-Ulam 方程式、ソリトンの存在性が問題となっている modified Camassa-Holm 方程式など、多岐に渡る問題が本方法論の対象となっている。

さらに、非線形性による数値計算量の増大を抑えるため数値スキームにおける非線形性を弱める(緩

和)手法の研究を進めた。具体的には、linearization とよばれる時間方向の多段階化による手法の拡張・緩和であるが、これを離散変分導関数法に導入するため、離散変分の数学的な定義自身を拡張・緩和した。

これにより、これまでより広範囲の問題形式に対して構造を保存しつつ高速な計算を可能とした。また、変形した Cahn-Hilliard 方程式などで検証し、予測に沿った結果を示した。さらにこの緩和の多次元化について理論的な拡張も行った。検証については準備中である。

#### 4.6 最適制御問題での Hamilton-Jacobi 方程式に対する、変数変換に基づく数値解法の研究

制御パラメータを含む系の時間発展に対し、適切にこのパラメータを設定して系全体の挙動を最適にする問題を最適制御問題とよぶ。この問題の解法としては、最適パラメータ関数を一度に求める全体的な方法と、各時間でのパラメータの関係式を導出しその局所関係性からパラメータを順次求めていく局所的な方法の二つになる。そしてその後者の方法で一定の条件下で導出される偏微分方程式が Hamilton-Jacobi-Bellman 方程式で、この解がわかれば最適パラメータ関数を得られる。しかし、この方程式は、解の定義域が無限領域であったり定義域境界へ近づくと解の値が大変に大きくなることなどから適切な数値算を行うことが難しいことが知られている。

これに対し、解の変数と値との両方に変数変換を施すことで、数学的にも適切な数値計算を行うことを可能とした。具体的には、まず値を指数逆変換して境界条件を無限遠でのゼロディリクレ境界条件へ変換する。そして、変数を数値積分の変数変換で優れた性質を持つことが知られている二重指数型変数変換で変換し、定義域を有界領域に変換した。つまり、この二回の変数変換により問題を有界領域でのゼロディリクレ境界値問題に変換することができる。これは数値計算にも大変適した問題で、かつ、二重指数型変換により最適パラメータ付近での数値誤差

を減らすことまで期待できる形となっている。そして実際に複数の問題に対してこの研究を適用し、変数変換を用いない場合に比較してより優れた数値解を得られることを検証した。

## 5 社会貢献に関する業績

### 5.1. 教育面における社会貢献

#### 5.1.1 学内活動

- 大阪大学いちょう祭部門公開(2014.5.3)

#### 5.1.2 他大学非常勤講師等

### 5.2. 研究面における社会貢献

#### 5.2.1 学会活動

- IEEE SISPAD, Chair, Steering Committee
- 応用物理学会シリコンテクノロジー分科会, 幹事

(以上 小田中)

- Journal of Computational and Applied Mathematics, Advisory Editor

- 日本応用数理学会代表会員, ネットワーク委員
- (以上 降籙)

### 5.3 産学連携

#### 5.3.1 企業との共同研究

- (1) “大規模・大領域半導体デバイスシミュレーションの研究”, 半導体理工学研究センター, 大阪大学サイバーメディアセンター(小田中、鍾)

### 5.4 研究プロジェクト活動

現在、以下の研究プロジェクトに参画している。

- (1) 文部科学省 ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発 “次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成” (平成 26～31 年度) 分担
- (2) 文部科学省 科学研究費補助金 基盤研究(B) “エネルギー散逸的非線形保存則の解の時間大域構造”(平成 23～26 年度) 連携協力
- (3) 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点

(JHPCN)課題 “次世代パワーデバイス実現に向けた大規模・大領域半導体デバイスシミュレーションの研究” 平成 26 年度 代表

(以上 小田中)

- (4) 文部科学省 科学研究費補助金挑戦的萌芽 “多次元ボロノイ非構造格子を用いた偏微分方程式の構造保存数値解法” (平成 26～28 年度) 代表
  - (5) 文部科学省 科学研究費補助金 基盤研究(B) “有限体積法の数学的基盤理論の確立” (平成 23～27 年度) 分担
  - (6) 文部科学省 科学研究費補助金 挑戦的萌芽 “ベクトル値発展方程式に対する幾何構造型数値解法” (平成 24～26 年度) 分担
  - (7) 日本学術振興会 科学研究費補助金及び学術研究助成基金助成金 基盤研究(B) “離散関数解析と変分理論からなる差分法の基礎理論構築” (平成 25～29 年度) 代表
- (以上 降籙)

### 5.5 その他の活動

#### 5.5.1 会議運営

- (1) 国際会議 Kyoto Conference on Numerical Analysis and Differential Equations (KCNADE), 京都大学, 2014 年 9 月 16 日-20 日
- (2) The Fifth Workshop on Computer-Assisted Science (第 5 回コンピュータ実験科学研究会), 大阪大学, 2015 年 1 月 30 日.

### 2014 年度研究発表論文一覧

#### 学術論文誌

- (1) T. Matsuo, and D. Furihata, "A stabilization of multistep linearly implicit schemes for dissipative systems," J. Comput. Appl. Math., 264(2014), pp.38-48.

#### 国際会議会議録

- (1) S. Sho, S. Odanaka, and A. Hiroki, "A Simulation study of short channel effects with a QET model based on Fermi-Dirac statistics for Si, Ge and III-V MSFETs", Proceedings of First joint international

EUROSOI and ULIS Conference, pp.229-232,  
Bologna, 2015.

博士論文

無し

#### 口頭発表 (国際会議)

- (1) Daisuke Furihata, A predictor corrector iteration method based on the discrete variational derivative method, Kyoto Conference on Numerical Analysis and Differential Equations, Kyoto, 2014年9月.

#### 口頭発表 (国内研究会など)

- (1) 鍾 菁廣, 小田中紳二, 廣木彰 “量子エネルギー輸送モデルを用いた Si, Ge, III-V n-MOSFET の短チャネル化効果の解析,” 応用物理学会シリコンテクノロジー分科会「新材料系デバイスのモデリング技術」, pp.20-25, 2014年7月.
- (2) Daisuke Furihata, Fast computation for nonlinear PDEs via a predictor-corrector iteration based on a structure preserving method, Numerical Analysis for Partial Differential Equations, Tohoku University, 2014年6月.
- (3) Kazufumi Nomura, An iterative method to obtain better stopping rules for an optimal stopping problem,, The Fifth Workshop on Computer-Assisted Science, Osaka University, 2015年1月.
- (4) Daisuke Furihata, Discrete variational derivative method: A structure-preserving method for partial differential equations, The Fifth Workshop on Computer-Assisted Science, Osaka University, 2015年1月.

#### 解説その他

- (1) 離散変分導関数法 – 偏微分方程式の構造保存解法 –, 降籟 大介, 松尾 宇泰, 数学, 66(2) 135–156, 2014年04月.

#### 修士論文

- (1) 折田 大祐, 双曲型保存則に対する Godunov 法と Nessyahu-Tadmor 中心スキームの比較研究, Feb. 2015.
- (2) 相沢 大樹, アメリカン・コールオプションの非線形ブラック・ショールズ方程式に対する数値スキームの構成, Feb. 2015.
- (3) 田中 宏幸, 一般化された感応性関数を伴う走化性方程式に対する2次元保存スキームの構成, Feb. 2015.
- (4) 秋山 千之輔, 最適制御における Hamilton-Jacobi 方程式の変数変換に基づく数値解法, Feb. 2015.