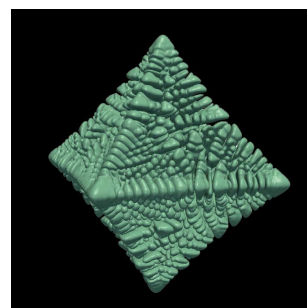
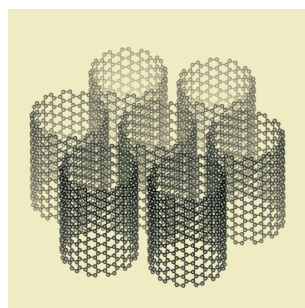


# TSUBAME ESJ.



## TSUBAME 2.0の全貌

GPUによる樹枝状凝固成長の  
フェーズフィールド計算

TSUBAMEを用いた  
フラーレン・ナノチューブ・グラフェンの  
構造変化と新物質研究



# TSUBAME 2.0の全貌

松岡 聡\* 遠藤 敏夫\*\* 丸山 直也\* 佐藤 仁\* 滝澤 真一朗\*

\*東京工業大学 学術国際情報センター、 \*\*東京工業大学 情報理工学研究所

2010年11月に東京工業大学は新しいスーパーコンピュータTSUBAME 2.0を稼働開始する。TSUBAME 2.0は2.4ペタフロップスの計算性能、7.1ペタバイトのストレージ容量を持つ、世界トップクラスかつ日本初のペタスケールのスパコンとなる。

## はじめに

2006年に東工大学術国際情報センターは、「みんなのスパコン」を合言葉に、使いやすさと高性能を両立することを目的としたスーパーコンピュータTSUBAME 1.0を導入した。TSUBAME 1.0は当時のアジアNo.1スパコンとなり、また学内外に渡る2000名近くのユーザーの利用実績を達成した。それから4年半たった2010年11月に本センターは、世界トップクラスでありTSUBAME 1.0の約30倍となる2.4ペタフロップスの性能（一秒あたり2400兆回の演算性能・理論値）を持つスパコンTSUBAME 2.0の稼働を開始する。これは本センターのTSUBAME 1.0/1.2の数多くの知見・研究開発をベースに設計され、かつ日本電気・Hewlett-Packard・NVIDIA・Microsoftをはじめとする企業連合の協力のもとに導入されるものである。TSUBAME 2.0は、日本ではじめてペタフロップス以上の性能を達成するだけでなく、省エネルギー・クラウド運用を推し進める。

## ペタフロップス実現の秘訣

TSUBAME 1.0/1.2/2.0の特徴の一つは、Intel互換CPUという「普通の」プロセッサを多数結合したクラスタ型のスパコンであることであり、さらにアクセラレータと呼ばれる比較的特殊なプロセッサを導入することにより、それらに向けた科学技術計算を大幅に高速化することである。これまでにTSUBAME 1.0ではClearSpeed社アクセラレータを、1.2ではNVIDIA社のGPU 680基をアクセラレータとして導入して運用経験を重ねてきたが、プロセッサ数としては依然CPUが主であった。我々は今後スパコンの消費電力の増加を抑えつつ性能を向上させるためには、アクセラレータによるさらなるベクトル演算性能の加速が必須であるという知見を得た。TSUBAME 2.0ではノードあたり2基のCPUと3基のGPUアクセラレータを搭載し、GPUによる性能のみならず電力効率の大幅な向上を達成する。

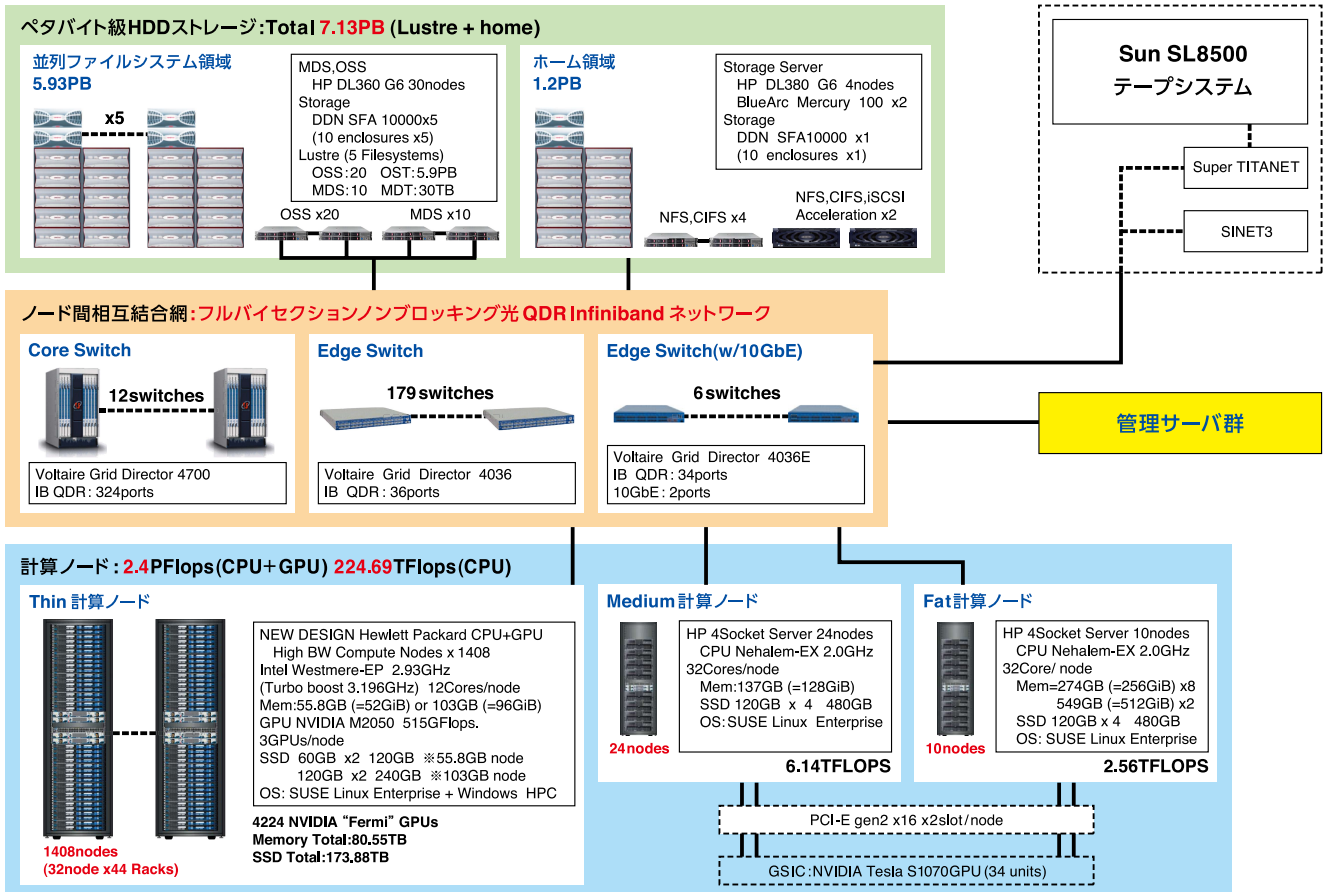
具体的には、その主要部は最新マルチコアCPU2基、最新世代GPU3基およびメモリ約50GBを搭載したHewlett-Packard社の計算ノードから成り立つ。計算ノードは一台で約1.7テラフロップス（TFLOPS）の性能を持ち、これは普通のノートパソコン一台の約100倍である。システムの主要部はこの計算ノード1408台から構成され、システム全体の性能は2.4ペタフロップス（PFLOPS）に達する。これは国内の他のすべてのスパコンの合算性能にも勝る非常に高性能な構成である。

CPUとしてはIntel社製Westmere-EP 2.93GHzを用い、ノードあたり同CPUを2基搭載する。同CPUは1基あたり6個の物理コアから構成され、ハイパースレッディングにより12ハードウェアスレッドをサポートするマルチコアCPUであり、その理論ピーク性能は76ギガフロップスに達する。GPUとしてはNVIDIA社製GPUであるTesla M2050をノードあたり3基搭載する。M2050は448個のコア、および3GBのメモリが搭載され、その理論ピーク性能は515GFLOPSに達する。一般的にGPUを効率的に利用するには普通のCPUと異なるプログラミングが必要であるが、TSUBAME 1.2と同様にCUDAおよびOpenCLなどによりプログラミング可能であり、既存のGPUプログラムもそのまま動作可能である。さらに、今回採用するTesla M2050 GPUは性能だけでなく使いやすさも改善されている。特にハードウェアキャッシュの搭載により前世代のGPUよりもより容易にプログラムの高速化が可能と期待される。

また、上記の高速CPUおよびGPUを効率良く動作させるためには、計算ノード内・ノード間の両方において、多数のデータを高速に転送可能な高バンド幅のハードウェアを採用している。ノード内のデータ転送のためには、CPUメモリのバンド幅は1CPUあたり32GB/sに到達し、GPUメモリにおいては150GB/sと大幅なバンド幅の向上がはかられている。また、CPUとGPU間のデータ通信オーバーヘッド削減のために、現状で最速の通信路である8GB/sのPCI Express 2.0 x16を採用する。

また多数の計算ノード間および後述のストレージを結合する高速ネットワークとして、QDR InfiniBand (IB) を採用している。各計算ノードは40Gbpsの通信路を2本持ち、高速に通信を行うことができる。この通信速度は通常のLAN (1Gbps) の約80倍である。さらにスパコンで大規模計算を行う際には、システム全体のネットワークボトルネックが大きな影響を与える。TSUBAME 2.0は、フルバイセクション・

TSUBAME 2.0 システム概念図



ファットツリーと呼ばれるトポロジを用いており、トーラスやメッシュトポロジよりも広範囲なアプリケーションに対応可能である。特にスペクトル法などの陰解法において大幅に有利と期待される。

TSUBAME 2.0は、上に挙げた大幅な性能向上および規模の拡大が実現しているが、それらはすべて徹底した省電力化により現行のTSUBAMEと同程度の消費電力のもとに実現されている。さらに最新の水冷技術等による冷却効率の大幅な向上を達成している。PUE (power usage effectiveness、計算システムの省電力性の指標の一つ。1に近いほど良い)は概算で1.2程度になると期待されている。

## e-Scienceを支援する大規模ストレージ

e-Scienceを支えるシステムとしては、巨大なデータを蓄え、高速にアクセスできるストレージが必要である。TSUBAME 2.0は、TSUBAME 1.0の6倍となる、7.1ペタバイト (PB) の容量のストレージを持つ (raw capacityどうしの比較)。このストレージを用いて、アプリケーションが用いる大規模データを蓄えることができる。それだけでなく、学内ユーザにWebなどを介した簡便なストレージサー

ビスを提供する基盤としても利用される。

TSUBAME 2.0のストレージの主要部分は、1.2PBのホーム領域と5.9PBの並列ファイルシステム領域からなる。

ホーム領域は冗長構成をとることによって、高い信頼性、可用性、性能を達成するべく設計されている。性能面においては、上述のQDR IBネットワークなどを介して1100MB/sの高速なNFS性能が実現される予定である。この領域はNFSに加えCIFS、iSCSIなどの複数プロトコルに対応しているため、Linux/Windows双方のOSのノードから容易にアクセスできる。さらに教育・事務などの学内の様々なストレージサービスを提供するためにも用いられる。ホーム領域の物理的構成は以下になる。データそのものを蓄えるためにDDN社SFA 10000ストレージシステムを用い、それは4台のHP DL380 G6サーバと2台のBlueArc Mercury 100サーバに接続される。これらのサーバは計算ノードやユーザPCからのアクセス要求を受け付けるために用いられる。

もう一方の、超大規模データ向けの並列ファイルシステム領域は、多数計算ノードからのデータアクセス要求をこなす、スケーラビリティを焦点に設計されている。これまでのTSUBAME 1.0/1.2の運用経験を基にLustreファイルシステムを採用し、5.9PBの領域を5つの部分ファイルシステム (以下、単にファイルシステム) に分割している。性能面では、ファイルシステムあたりの合算読み込みI/Oス

ループットは、200GB/s超となる見込みである。各ファイルシステムはホーム領域の構成に似ており、DDN SFA 10000と6台のHP DL 360G6サーバから成る。

これらのTSUBAME 2.0のストレージ領域上のデータは、計4PB(非圧縮)の既存のSun 8500テープライブラリに適時バックアップされる。2010年度中に、階層型ファイルシステムの導入が予定されており、大規模データを用いるアプリケーションユーザに対して、並列ファイルシステムとテープライブラリ間で、透過的でオンデマンドなデータアクセスを提供する。また将来のテープライブラリの増強によりさらなる大容量データへの対応を予定している。

上記の大規模なシステムレベルのストレージ構成だけでなく、TSUBAME 2.0では計算ノード毎のストレージも特徴的である。TSUBAME 2.0では各計算ノードはハードディスクの代わりに120-240GBの容量の高速solid state drive (SSD)を持つ。これらのSSDは、アプリケーションの一時ファイル生成やチェックポイントのために使用される。世界トップクラスのスーパーコンピュータへのSSD導入は世界的に例がなく、先進的な利用法や信頼性向上手法に関して国際会議やジャーナルを通じて発表していく予定である。

### TSUBAME 2.0のクラウド運用

TSUBAME 1.0/1.2では、これまでパソコンや小規模クラスターで計算をしていたユーザも、気軽にスパコンを利用できる可用性を実現してきた。TSUBAME 2.0においてはこれまでの運用を継承しつつ、さらに裾野を広げるために以下のようなサービスを提供する予定である。

- TSUBAME 2.0の計算機能の主要な利用方法は従来同様にバッチキューシステムであるが、Linux (SUSE Linux Enterprise 11を採用)だけでなく、Windows HPC Server 2008用のプログラムも動作可能である。この運用を支えるために仮想計算機 (VM) 技術を用いる。
- VM技術を用いた学内ホスティングサービスは継続する。それだけでなくVM技術を用いて、一部ジョブの一時停止を行ったり、計算ノードを論理的に分割したりすることにより、計算資源の利用効率の向上が期待される。
- これまでもTSUBAME 1.2の大規模計算サービス (HPCキュー)として、ユーザグループによる約1000CPUコアと120GPUの独占利用を可能とし、capability jobへの対応をしてきた。さらにTSUBAME 2.0では約10,000CPUコアと1000以上のGPUの大規模並列環境を、ピアレビューにより選抜されたユーザグループに提供する。
- TSUBAMEが提供するポータルwebページ(以下TSUBAMEポータル)を東工大ポータルと連携させ、ペーパーレスのアカウント申請などを可能にし、利用しやすくする。学内ユーザについてはTSUBAMEアカウントと東工大ポータルのアカウントを統一する。さらに、国内の代表的な9つの大学計算機センターの一つとして、大学を縦断したアカウントサービスを提供する。

- TSUBAME 2.0の大規模ストレージを利用したネットワークストレージサービスを提供予定である(学内ユーザ向け)。ユーザのパソコンから気軽に、TSUBAMEの存在を意識せずとも、ストレージが利用できる。
- 高度なストレージ資源を用いて、従来の国内のスーパーコンピュータセンターではサポートが困難であったデータ指向のe-Scienceを促進するために、国内の種々のスパコンとTSUBAME 2.0を10Gbps級の高速な広域ネットワークであるSINETにて密に結合する。このネットワークを用い、我々が開発したRENKEI-PoPマシンを様々なセンターに配置することにより、GfarmやGridFTPなどによるグリッドデータ共有・高速転送機能の提供も予定している。

### おわりに

本記事執筆の時点では、新運用方針の最終検討や機材搬入などを並行して行っている段階である。11月の稼働後には、世界トップクラスのスパコンTSUBAME 2.0をぜひ科学技術の発展のために活用していただきたい。

TSUBAME 2.0最新ニュース:

<http://www.gsic.titech.ac.jp/tsubame2>

TSUBAME 2.0公式Twitterアカウント:

Tsubame20

# GPUによる樹枝状凝固成長のフェーズフィールド計算

青木 尊之\* 小川 慧\*\* 山中 晃徳\*\*

\*東京工業大学 学術国際情報センター, \*\*東京工業大学 理工学研究科

溶融金属の冷却過程において形成される凝固組織の形態によって材料の機械的特性が決定することは良く知られている。このようなミクロな組織の形態形成を解明するために、近年強力な組織形成シミュレーション法として注目されているフェーズフィールド・モデルを用いて界面の動的な変化と温度変化を解き、凝固過程を計算する。これまで、フェーズフィールド・モデルは計算負荷が大きいと3次元計算が殆ど行われてこなかったが、TSUBAME 1.2のGPUを使うことで非常に高速に計算を行うことができ、60 GPUで10TFlopsという実行性能が得られた。

## はじめに

# 1

金属材料の機械的強度や特性はミクロの組織的構造に基づくため、より高性能な材料を得るためにはミクロなダイナミクスの解明が必要である。近年、材料の相転移や相分離などの解明に非平衡統計力学から導出されるフェーズフィールド・モデル<sup>[1]</sup>が注目されている。導出される方程式は時間空間の偏微分方程式になっていて、有限差分法や有限要素法などで解かれることが多い。しかしフェーズフィールド・モデルは計算負荷が大きいと、HPC分野において最近注目されているアクセラレータ技術<sup>[2]</sup>、特にGPGPU (General-Purpose Graphics Processing Unit)<sup>[3]</sup>を使うことを考える。

GPUはパソコンにも普通に使われる画像表示専用のプロセッサであるが、グラフィクス処理の高度化に伴い機能が急速に進化し、画像処理以外の一般的な計算も行えるようになってきた。浮動小数点演算の性能が高く、ビデオメモリへのバンド幅が大きいと、従来のアクセラレータと違いさまざまなアプリケーションへの適用が可能である。さらに2006年にNVIDIAがGPGPU用の統合開発環境であるCUDA<sup>[3]</sup>をリリースしたことにより、標準C言語でGPGPUのアプリケーションを開発できるようになり、一気に利用が広がっている。

本稿では、フェーズフィールド・モデルに基づいて純金属の過冷却凝固における樹枝状(デンドライト)組織の成長を計算する。CUDAを用いて有限差分法で離散化された時間発展方程式をプログラミングし、TSUBAME 1.2のGPU上で計算することにより、CPUと比較して圧倒的に高速に計算できることを示す。従来のGPU計算が単一GPUを利用することが多かったのに対し、本研究では1つのGPU上のメモリには載らないような大規模の計算に対し、領域分割法で並列化すると共に、複数ノードに搭載されたGPUを使う計算のスケラビリティを調べた。

## フェーズフィールド・モデル

# 2

フェーズフィールド・モデルは、非平衡統計物理学から導出され、分子スケールとマクロなスケールの中間のメソスケールの現象を記述できる。秩序変数 $\phi$ を導入し、固相部分 $\phi=1$ に、液相部分に $\phi=0$ と設定する。界面を含む領域では $\phi$ が0から1へと急峻かつ滑らかに変化する拡散界面として扱い、 $\phi=0.5$ を界面として扱う。フェーズフィールド・モデルでは従来使われていた界面追跡法等の手法が不要となり、領域全体で同一の計算を行うことができる。

本研究で対象とする純金属のデンドライト凝固成長ではフェーズフィールド・モデルから導出されるAllen-Cahn方程式と熱伝導方程式を解く<sup>[4]</sup>。界面エネルギーの異质性を考慮した $\phi$ に対する方程式として式(1)を用いる。

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = M \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \left( \varepsilon^2 \frac{\partial \phi}{\partial x} + \varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial \phi_x} |\nabla \phi|^2 \right) \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left( \varepsilon^2 \frac{\partial \phi}{\partial y} + \varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial \phi_y} |\nabla \phi|^2 \right) \\ + \frac{\partial}{\partial z} \left( \varepsilon^2 \frac{\partial \phi}{\partial z} + \varepsilon \frac{\partial \varepsilon}{\partial \phi_z} |\nabla \phi|^2 \right) \\ + 4W\phi(1-\phi) \left\{ \phi - \frac{1}{2} + \beta + \alpha\chi \right\} \end{bmatrix} \quad (1)$$

また、式(1)中、 $\beta$ は式(2)、 $\varepsilon$ は式(3)である。

$$\beta = -\frac{15L}{2W} \frac{T - T_m}{T_m} \phi(1-\phi) \quad (2)$$

$$\varepsilon = \sqrt{\frac{3\delta\sigma}{b}} \left( 1 - 3\gamma + 4\gamma \frac{\phi_x^4 + \phi_y^4 + \phi_z^4}{|\nabla \phi|^4} \right) \quad (3)$$

ただし、 $L$ は潜熱、 $X$ は $[-1.0, 1.0]$ の乱数、 $\alpha$ は乱数の振幅、 $\gamma$ は異质性強度、 $T_m$ は融点、 $\delta$ は界面厚さ、 $\sigma$ は界面エネルギー、 $\lambda$ は界面幅制

御パラメータ、他定数は $b=\tanh^{-1}(1-2\lambda)$ 、 $W=\sigma b/\delta$ 、 $M=bT_m\mu/3\delta L$ である。

一方、凝固過程に最も関係する温度 $T$ について、界面からの潜熱の発生を考慮した熱伝導方程式(4)を用いる。

$$\begin{aligned}\frac{\partial T}{\partial t} &= \kappa \nabla^2 T + \frac{L}{C} \frac{\partial h(\phi)}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T + \frac{L}{C} \frac{\partial h(\phi)}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} \\ &= \kappa \nabla^2 T + 30\phi^2(1-\phi)^2 \frac{L}{C} \frac{\partial \phi}{\partial t}\end{aligned}\quad (4)$$

## GPUコンピューティング

# 3

本研究では東京工業大学学術国際情報センタースーパーコンピュータTSUBAME 1.2を利用する。各ノードはSun Fire X4600 (AMD Opteron 2.4 GHz 16 コア, 32 GByte) であり、ノード間は2本の10 GbpsのSDR Infinibandで接続されている。GPU計算のために使用するノードには、NVIDIA Tesla S1070 (動作周波数: 1.44GHz。VRAM 4GByte、最大1036GFLOPS、メモリバンド幅102GByte/s)のうち2機のGPUがPCI-Express Gen1.0×8で接続されているが、本研究では1ノードにおいて1機のGPUのみを用いる。一方、各ノードのOpteron CPUは、1コア当たり4.8GFLOPS、メモリバンド幅6.4GByte/sec (DDR-400) である。実行環境はCUDA 2.2対応Runtime、NVIDIA Kernel Module 185.18.14、OSはSUSE Enterprise Linux 10である。

### 3-1 高速化技術

CUDAを用いてGPUのプログラミングを行った。(1)式と(4)式を2次精度有限差分法で離散化し、1次精度の時間積分(オイラー法)を行っている。従属変数である秩序変数 $\phi$ の時間発展に必要な $n$ ステップと $n+1$ ステップの配列をビデオメモリ(CUDAではグローバルメモリと呼ばれる)上に確保する。時間発展の過程で、必要な時だけデータをCPU側に転送するようにし、PCI-Express Busを介したデータ通信は可能な限り頻度を減らしている。

1つのGPUが担当する計算領域の格子点数を $n_x \times n_y \times n_z$ とする。それらを $x$ 方向に $L$ 分割、 $y$ 方向に $M$ 分割、 $z$ 方向に $N$ 分割すると、分割された小領域の格子点数は $MX \times MY \times MZ$ となる。ただし、 $MX=n_x/L$ 、 $MY=n_y/M$ 、 $MZ=n_z/N$ である。各々の小領域に対してCUDAのブロック内のスレッドを $(MX, MY, 1)$ として割り当てる。各スレッドでは、 $z$ 方向に $MZ$ 個の格子点をループで計算する。高い実行性能を得るためには、問題サイズに合わせ適切な分割数を選ぶ必要があり、 $MX=64$ 、 $MY=4$ が最適であった。

$\phi$ に対する式(1)の離散化式は隣接の18個の格子点にアクセスする。グローバルメモリへのアクセス回数を低減させるために、シェアードメモリをSoftware Managed Cacheとして用いる。さらにシェアードメモリの使用量を節約するためにブロック内に $(MX+2) \times (MY+2)$ の大きさの3つの配列をシェアードメモリ上に確保し、サイクリック

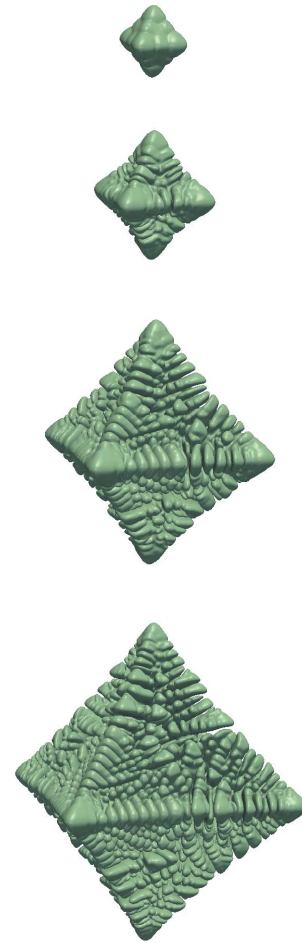


図1 純金属の樹枝状凝固成長の過程

に使い廻している。

温度 $T^n$ に関する計算でも同じようにシェアードメモリを使い計算を行う。ただし、式(2)の右辺に $\phi^n$ の時間微分 $\partial\phi/\partial t|_{i,j,k}^n$ が表れるため、 $\phi_{i,j,k}^n \rightarrow \phi_{i,j,k}^{n+1}$ の時間発展と $T_{i,j,k}^n \rightarrow T_{i,j,k}^{n+1}$ の時間発展のカーネル関数をフューズさせ、スレッド内で $\partial\phi/\partial t|_{i,j,k}^n$ を保持することにより、グローバルメモリへのアクセスを減らしている。

### 3-2 単一GPU計算の実行性能

GPU計算の計算結果の検証と実効性の比較のためにCPUのコードも作成している。CPUコードを用いて1格子点あたりの浮動小数点演算数をPAPI (Performance API)<sup>[5]</sup>を用いハードウェア・カウンターで測定する。GPUでは整数演算もSPが処理を行うため、CPUコードで数えた浮動小数点演算数を基に経過時間を測定して実行性能を評価する。Tesla S1070の1GPUからアクセスできるメモリサイズが4GByteであるため、計算できる最大の問題サイズが格子数 $640 \times 640$ 程度までに制限される。

1GPUによる計算において格子点数を変えながら、実行性能を測定すると、 $64 \times 64 \times 64$ 格子で116.8 GFLOPS、 $128 \times 128 \times 128$ 格

子にて161.6 GFLOPS、 $256 \times 256 \times 256$  格子にて169.8 GFLOPS、 $512 \times 512 \times 512$  格子にて168.5 GFLOPS、 $640 \times 640 \times 640$  格子にて171.4 GFLOPSとなる。CPU (Opteron 1 コア) での実行性能が0.898 GFLOPSであるのに対し、 $640 \times 640 \times 640$  格子の計算では171 GFLOPSの性能が得られ、TSUBAME1.2のCPU Opteron 2.4GHzの1CPU計算と比較すると約190倍の高速化が達成された。

本計算では、1格子点当たりの浮動小数点演算が373回である。一方、シェアードメモリを使わないと26回のグローバルメモリへの読み込みと2回の書き込みの計28 wordのメモリアクセスがある。本研究では単精度計算を行っている、全ての格子点で同じ計算を行うので、3.33 FLOP/Byteの演算密度がある。これに対し、シェアードメモリを用いることで、袖領域を含まない格子点においては読み込みを2回に減らすことができ、メモリアクセスを4回に低減することができる。その結果、演算密度を23.31 FLOP/Byteにまで高めることができる。この値は一般的な流体計算などと比較すると非常に大きく、計算インテンシブになっているため、GPUの高い演算性能を引き出すことができた。

## マルチGPUコンピューティング

# 4

### 4-1 複数ノードに搭載されたGPU計算

複数のGPUを用いて計算する目的は次の2つである。①単一GPUのカードに搭載されているメモリに入りきらないような大規模計算を行う。②決められた格子点数の問題に対して1GPUよりさらに高速化を図る。複数個のGPUを用いるには、GPU単位での並列化が必要となる。3章で述べたようにGPU計算では、単一GPU内でもスレッドのブロックがあるので並列化の階層がさらに1つ増えた多階層の並列化になる。GPU間の並列計算にはMPIライブラリの通信を行い、GPU数とMPIのプロセス数は等しくなる。領域間のデータ転送量を減らすためには、計算全体の格子に対して3次元的な領域分割(サイの目型の分割)をする方が有利であるが、ここではz軸方向に沿って1次元的な領域分割(短冊型分割)を行い、計算とのバランスを明らかにすることを優先する。

### 4-2 通信と計算のオーバーラップ

複数ノードのCPUを用いた計算では、各プロセスに割り当てられた領域内のすべての格子の計算(時間発展)を行ってから、袖領域のデータ通信を行うことが多い。本方法を「非オーバーラップ計算(Non-Overlapping)」と呼ぶことにする。一方、「計算とデータ通信のオーバーラップ」により、通信時間を隠ぺいすることができる。オーバーラップ手法を導入したGPU計算では、まず袖領域のデータとして交換される格子を先に計算する。計算後、非同期に2つのstreamを生成し同時に実行する。stream 0では袖領域を除いた中心部分の格子点に対する計算を行い、stream 1は袖領域の通信を行う。

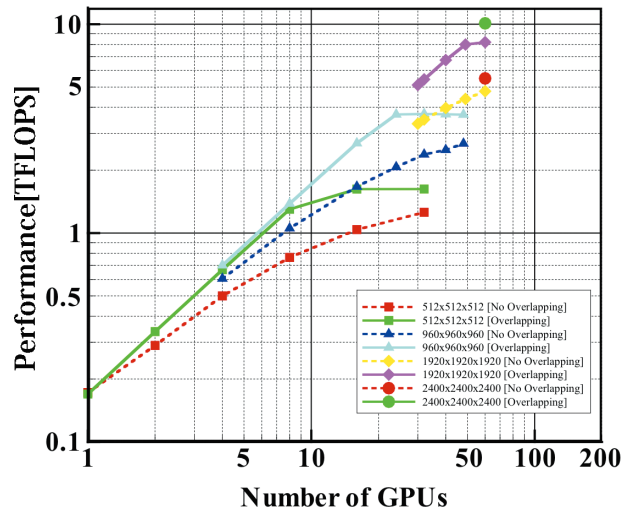


図2 マルチGPUによるオーバーラップ/非オーバーラップ計算の実行性能

### 4.3 マルチGPU計算の実行性能

4つの解像度での計算(512×512×512格子、960×960×960格子、1920×1920×1920格子、2400×2400×2400)の各々についてGPU間通信とGPU計算をオーバーラップさせる計算と、非オーバーラップ計算に対して、GPU数を変えて得られた実行性能の強スケーラビリティを図2に示す。

いずれの解像度においてもオーバーラップ計算は非オーバーラップ計算に対して性能が大幅に改善されていることが分かる。オーバーラップ計算では512×512×512格子について1～8GPUまでの範囲、960×960×960格子について4～24GPUまで範囲、1920×1920×1920格子において30～48GPUまでの範囲で理想的な強スケーリングを示していることが分かる。また、問題サイズを大きくすることによる弱スケーラビリティについては、試した計算の範囲内で理想的な性能が示されている。

オーバーラップ計算の特徴として、強スケーラビリティはGPU数が少ないときに理想的な直線に近づくが、GPU数が増えて計算時間より通信時間の方が長くなり、もはや通信を隠ぺいできなくなると急激に性能が頭打ちになる。

本稿で特筆すべき点は、格子数2400×2400×2400の計算に対して、60GPUを用いたオーバーラップ計算の実行性能が10TFLOPSに達したことである。世界トップクラスのスパコンで実現されるアプリケーションの性能である。

TSUBAME 1.2のCPU計算との実行性能の比較を行うために、全く同じ960×960×960格子の計算をCPUとGPUの両者で行った。GPU計算の最大性能は、オーバーラップ計算を行った場合に24GPUで3.7TFLOPSである。CPUとGPUの実行性能の比較を図3に示す。検証可能な範囲のCPU計算は128コアまでほぼ理想的な強スケーリングを示しているが、GPUの最高性能である3.7TFLOPSに達するには理想的な強スケーリングを仮定しても4000CPUコア強が必要

となる。同じ計算を同じ時間で得ようとする、CPU計算ではGPU数の150倍のコア数が必要になることが分かる。

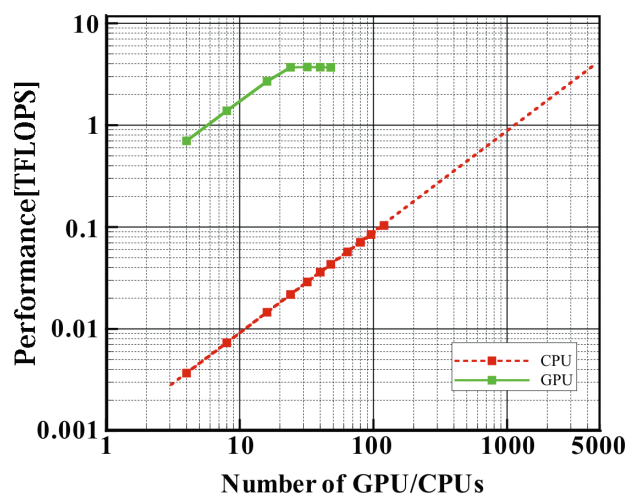


図3 TSUBAME1.2において、 $960 \times 960 \times 960$ 格子のCPU計算とGPU計算の比較

#### 参考文献

- [1] Tomohiro Takaki, Toshimichi Fukuoka and Yoshihiro Tomita, Phase-field simulation during directional solidification of a binary alloy using adaptive finite element method, J. Crystal Growth 283 (2005) pp.263-278.
- [2] 遠藤敏夫、松岡聡、橋爪信明、長坂真路、ヘテロ型スーパーコンピュータTSUBAMEのLinpackによる性能評価、情報処理学会論文誌コンピューティングシステム、48 (SIG 8 (ACS 18)) :62-70、2007.
- [3] NVIDIA Corporation, NVIDIA CUDA Compute Unified Device Architecture Programming Guide Version 2.0, NVIDIA Corporation, California, 2008.
- [4] Ryo Kobayashi, "Modeling and numerical simulations of dendritic crystal growth", Physica D, 63, 3-4, pp.410-423, 1993.
- [5] PAPI, <http://icl.cs.utk.edu/papi/>

## おわりに

# 5

純金属の樹枝状凝固成長に対して、フェーズフィールド・モデルに基づいたAllen-Cahn方程式と熱伝導方程式を連立させた計算をNVIDIAのTesla GPUを搭載したTSUBAME 1.2を用いて実行した。CUDAによりプログラミングを行い、単一GPUで171 GFLOPS (単精度計算) を達成した。さらにマルチGPUに対して領域分割に基づく並列化を行い、強スケーラビリティと弱スケーラビリティを示した。CPU計算に対して100倍以上の高速化を行うことができ、これは消費電力を大きく下げることでもある。60GPUを用いることで10 TFLOPSの実行性能を達成することができ、GPUが次世代スパコンの中心的な役割を担う可能性が高いことを示すことができた。

#### 謝辞

本研究の一部は日本学術振興会 (JSPS) グローバルCOE プログラム「計算世界観の深化と展開」(Comp View)、科学研究費補助金・基盤研究 (B) 課題番号 19360043「多モーメント手法による多目的CFD コアの開発」および科学技術振興機構 (JST) CREST「次世代テクノロジーのモデル化・最適化による低消費電力ハイパフォーマンスコンピューティング」(ULP-HPC) から支援を受けている。本研究を遂行するにあたり、スーパーコンピュータTSUBAME Grid Cluster での大規模並列計算キューの利用に対して東京工業大学学術国際情報センターよりご協力を頂いた。記して謝意を表す。



# TSUBAMEを用いた フラーレン・ナノチューブ・グラフェンの 構造変化と新物質研究

齋藤 晋\*

\* 大学院理工学研究科 物性物理学専攻/量子ナノ物理学研究センター

今世紀の基盤的な研究領域とされるナノサイエンス・ナノテクノロジー領域において、原子配置に依存して金属、半導体、そして絶縁体とその電子物性を大きく変化させるフラーレン、ナノチューブ、グラフェンなどのナノカーボン系は、最重要物質群と位置づけられ、国内外で集中的な研究展開がなされている。密度汎関数法の登場により予言力ある理論体系となった量子物理学の手法を駆使し、TSUBAMEを用いて解明された、原子スケールでのフラーレン成長過程、新しいダイヤモンド結晶構造の存在、そしてグラフェンの半導体化について紹介する。

## はじめに

# 1

20世紀初頭に誕生した「量子物理学」は、電子という素粒子のミクロな運動を記述する理論として認められ、その後、原子核・原子・分子から固体まで、広く物質全般の性質を理解する基礎理論として、現代文明社会の発展と維持に大きな役割を果たしてきた。20世紀後半からの情報社会を支えてきたコンピュータと半導体テクノロジーの発展も、シリコン(Si)を始めとする固体結晶中での電子状態に関する量子物理学による理解があって初めて達成されてきたものである。

現在では、コンピュータは科学・技術分野のみならず、人間のほとんど全ての社会的な活動に用いられている。コンピュータ産業自体においても、新しいCPUの設計、そしてCPU作製のための半導体製造プロセスのさらなる微細化の達成に、コンピュータは必須である。コンピュータの進化・改良は無論、人間の営みであるが、既存のコンピュータが次代のコンピュータを生み出してきた、とさえ見ることができる。しかし、Si固体結晶としての性質を保ちながらその微細化を進めていくことには、当然ながら限界がある。ナノメートル( $10^{-9}$ m)スケールの物質は、系の形状とサイズに依存して、通常の固体結晶の持つ性質から大きく変化した性質を示すことが多い。そのため、単なる微細化による半導体素子の改良は、近未来に終焉を迎える状況にある。「マイクロエレクトロニクス」の世界から「ナノエレクトロニクス」の世界へのブレークスルーを達成するには、ナノメートルスケールの物質の性質(物性)を予測し、利用することが必要となる。

そのような半導体素子に限らず、ナノメートルスケールで原子配置が制御された系が示す新たな物性を解明し利用するナノサイエンス・ナノテクノロジーは、今世紀の最重要研究領域の一つとされている。そして、ナノメートルスケールの世界での物性を記述し予測するための基本理論である量子物理学は、ナノサイエンス・ナノテクノロジーを支える学問分野として、さらにその重要性を増しており、20世紀において果たした以上の役割を期待され、かつ、担いつつある。無論、量子物理学を駆使したナノサイエン

ス研究においても、コンピュータの活用は必須である。本稿では、TSUBAMEを用いた量子物理学に基づくナノサイエンス研究と、関連する新物質の探索・予測研究の例として、ナノカーボン系と総称される、フラーレン・ナノチューブ・グラフェンに関するいくつかの研究について紹介する。

## 密度汎関数法

# 2

系を構成する原子(原子核)の配置が $\{R_i\}$ で与えられた系の物性を求める、という量子物理学問題を考える場合、まず、その配置により定まるクーロン引力ポテンシャル場の中の電子系の振る舞いを求めることが必要となる。それは、量子力学における基本方程式であるシュレディンガー方程式の解としての固有エネルギーと波動関数を求める作業に他ならない。その際、系を構成する各電子を個別に扱うことができれば、シュレディンガー方程式は3変数(3次元の座標変数)の偏微分方程式となり、固有値問題の解としての波動関数 $\psi(r)$ は、正にTSUBAMEを駆使して数値的に求めることが可能である。即ち、ガウス関数、あるいは平面波関数など、扱いやすい基底関数で波動関数を展開した際の係数を得ることができる。しかし、実際の系は多数の電子から構成されており、それら電子間には、クーロン斥力が働いている。そして、 $N$ 電子からなる系の波動関数 $\Psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$ は3N変数の偏微分方程式の解であり、三体問題( $N=3$ )以上ではTSUBAMEを含む最速クラスのスーパーコンピュータを駆使しても、シュレディンガー方程式に対して数値的に精密な解を得ることは非常に困難となる。

このような「多体系」の量子力学問題を解く場合、物理的考察によって近似解法を導入し、数値的にも「解ける」方程式で系を表すことが必要になる。そして、用いられる近似手法は、人間の思考と直感を用いて類似した他の系にも適用できる「物理的な概念」そのものに深く結びついており、むしろ、厳密解よりも有用となる。そのような近似手法の一群として、ハートリー近似、ハートリー・フォック近似、あるいは、配置間相互作用法(CI法= Configuration Interaction法)など、量子力学の発展とともに標準

## TSUBAMEを用いたフラーレン・ナノチューブ・グラフェンの構造変化と新物質研究

的に用いられてきた手法がある。例えばハートリー・フォック近似を用いる電子構造計算手法（ハートリー・フォック法）では、各粒子を個別に扱っており、方程式自身は3変数の微積分方程式となっている。そのため、解（一粒子波動関数 $\psi_i(r)$ ）は数値的に良い精度で求められるはずである。ただし、 $N$ 本の連立微積分方程式となっており、それらの方程式を同時に満たす一組の解 $\{\psi_i(r)\}$  ( $i=1\sim N$ )を求めるためには、数値的に反復法で解く必要がある。

しかし、周期的に配列している多数の原子系から構成されている固体結晶系の場合、ハートリー・フォック法による電子構造計算は非常に複雑であり、また、CI法に至っては適用不可能である。そのため、固体物理学の分野では、1960年代に提唱された密度汎関数法に基づく電子構造計算が、1970年代より、いわゆる「バンド構造」を議論・研究するために用いられるようになった。ここで、「密度」とは、基底状態の粒子密度 $n(r)$ （あるいは、スピン密度 $n_\uparrow(r)$ および $n_\downarrow(r)$ ）のことで、系の全エネルギー $E$ を含む全ての物理量が関数 $n(r)$ の汎関数として与えられる、という理論体系となっている[1]。解くべき方程式は、やはり3変数の微積分方程式を $N$ 本連立させたものであるが、ハートリー・フォック法の方程式よりも解きやすい。実は、後年、固体結晶に対してハートリー・フォック法による計算が実行できるようになり、ハートリー・フォック法によるバンド構造の計算結果と密度汎関数法によるバンド構造、さらには実験結果との比較がなされた。その比較から、より簡便なはずの密度汎関数法によるバンド構造の方が、ハートリー・フォック法によるものよりはるかに高精度であることが確認されている。

1980年代に入り、各原子において価電子とコア電子とを分離して扱う擬ポテンシャルの手法[2]が開発されたことから、密度汎関数法は原子・分子・クラスター等の有限系から固体まで、多様な系に対して電子構造とともに全エネルギー $E$ を高精度で与える理論体系として用いられるようになった。そして、1990年代に入ると、 $E$ の計算に直結する、量子力学的な電子間相互作用エネルギーを表す汎関数として、一段と高精度のものが開発されたことから、密度汎関数法は物理学から化学分野まで広範な量子力学問題で用いられる標準的な手法となり、今日に至っている。

### 分子動力学法と タイトバインディング法

## 3

原子系がある空間配置 $\{R_i\}$ をとるときの全エネルギー $E$ を求めることができる、ということは、各原子に働く力

$$F_i = -\partial E / \partial R_i$$

さらには、各原子の加速度も求められることになり、系の構造変化などの時間発展を議論できることになる。より具体的には、時間変数に関する微分方程式であるニュートンの運動方程式を差分方程式化して、各時間ステップにおいて電子構造計算を行いながら

加速度を求め、系の時間発展を追っていくことになる。さらに、運動方程式を与えるラグランジアンに温度または圧力の時間変化に関するフィードバック項を加えた、温度一定[3]、あるいは圧力一定の分子動力学手法[4]も考案されており、系の温度処理、あるいは加圧下での振る舞いを研究する手法として知られている。

他方、系の大域的な構造変化を各種の分子動力学法でシミュレーションするには、数千ステップから数十万ステップに渡って力（加速度）の計算、すなわち電子構造計算を行う必要がある。そして、本稿で紹介するフラーレン、カーボンナノチューブなどのナノカーボン系の場合、単位胞に数十原子から数百原子が含まれており、場合によっては単位胞が1000原子以上からなることもある。結局、ナノカーボン系では、各時間ステップにおいて密度汎関数法による電子構造計算を行うにも膨大な計算量が必要となり、分子動力学法と組み合わせて系の時間発展や構造相転移を議論することは、現実上は不可能である。

そのため、量子物理学に基づいてナノカーボン系の構造変化・構造相転移を予測あるいは解明するためには、密度汎関数法計算の「簡略化」は、非常に有用な試みとなる。そのような簡略化手法の一つとして、現代的なタイトバインディング法が炭素系に対して開発された[5]。これは、元々は固体のバンド構造を簡便に与えるための手法であるタイトバインディング法では反復計算が不要であることに着目したもので、タイトバインディング法による各電子のエネルギーの総和に、原子間に働くポテンシャル項を付け加えて系の全エネルギーを表現している。そして、様々な原子配置の炭素系に対する密度汎関数法の全エネルギー値を高精度で再現できるように種々のパラメーター値が定められている[5,6]。このタイトバインディング法を、温度一定の分子動力学手法、あるいは、圧力一定の分子動力学手法と組み合わせて用いることにより、温度処理や加圧によるカーボン系の構造変化の研究等が展開されている。

ナノカーボン系は、ナノサイエンス・ナノテクノロジー研究における中心的物質として着目されており、同系に関する研究課題も多岐に渡っている。当研究室においても、TSUBAMEを駆使して多様な研究展開を行ってきたが、ここでは、(1)フラーレンにおける $C_{60}$ の選択的成長機構の解明研究、(2)カーボンナノチューブ固体が圧力下で示す構造相転移のシミュレーションにより発見された「新ダイヤモンド相」と捉えられる新しい $sp^3$ 固体結晶相、そして、(3)近年、実験的に作製され注目を集めている単原子層物質「グラフェン」に周期的な構造修飾を施すことにより究極の「半導体ウェハー」とするための電子物性予言研究について、以下で紹介する。

## ナノカーボン系の発見と $C_{60}$ の成長機構

# 4

炭素には、3配位の $sp^2$ 混成軌道原子からなるグラファイト（黒鉛）と、4配位の $sp^3$ 混成軌道原子からなるダイヤモンドという同素体結晶があることは古くから知られていた。1原子あたりの全エネルギーの値はグラファイトの方が低いと考えられているが、両者の全エネルギーの差はわずかで、常温常圧ではどちらの相も半永久的に安定と考えられている。グラファイトは固体潤滑剤にも用いられる柔らかい物質であるのに対し、ダイヤモンドは、最高硬度を持つ物質として知られており、両者の機械的性質は驚くほど異なっている。さらに電子輸送特性からみても、グラファイトとダイヤモンドは、それぞれ金属と絶縁体であり、対極にある性質を持っている。そして、1990年代に入り、図1に示すように、 $C_{60}$ に代表されるフラレンと総称される籠状炭素クラスターとカーボンナノチューブという、それぞれ、0次元と1次元の $sp^2$ ネットワークを持つ新たな炭素同素体とその結晶系が発見・合成され、炭素の同素体結晶群は、無限とも言えるバリエーションを持つことが明らかとなった[7,8]。電子輸送特性から見ても、固体 $C_{60}$ は半導体であること[9]、また、ナノチューブは、その直径と螺旋度に依存して金属から半導体まで多様な性質を示す新奇なナノメートルスケールの「細さ」を持つ（半）導体線であること[10]が、それぞれ理論的に予言され、かつ、実験的にも確認されてきた。

この様に、ほぼ同時期に発見され、大量合成がなされた $C_{60}$ とカーボンナノチューブであるが、それらの「基本構造単位」を考えた場合、実は、両者で全く異なる状況にある。即ち、一見、どちらも $C_6$ リングを基本構造単位としたネットワークに見えるが、 $C_6$ リングを10個貼り合わせても、サッカーボール構造（切頭正20面体構造＝truncated icosahedron構造）の籠状クラスターである $C_{60}$ を構築することはできない。他方、 $C_5$ リングを12個貼り合わせることで、籠状クラスター $C_{60}$ を構築することができる。結局、固体 $C_{60}$ 結晶は、 $C_5$ リングを無限個与えられたときに構築できる、最も素直な結晶構造ということになる。他方、カーボンナノチューブは、グラファイト、あるいは、その一層のみを取り出した系であるグラフェンと同様、 $C_6$ リングを無限個集めることで構築できる構造体である。

この様に、 $C_{60}$ は、通常の炭素原子の凝集体とは異なる構造単位からできており、そのエネルギーも、実は、最安定構造であるグラファイトのエネルギー、あるいは、それに近い値を持つナノチューブ系のエネルギーと比較して、多少、高くなっている。グラファイトとの差は、一原子当たり約0.4 eVである。しかも、 $C_{70}$ 、 $C_{84}$ といった大きなフラレンになれば、より平面的なグラフェン系に構造上近づいていくため、よりエネルギー的に安定となる。これまでに、マクロな量が単離された種々の籠状クラスター（フラレン）群の中で、 $C_{60}$ はエネルギー的に最も不安定な系、ということになる。そのように「最も不安定な」 $C_{60}$ が、他のフラレンを圧倒してなぜ

大量に合成されるのかについては、実はまだ明確な説明はなされていない。即ち、 $C_{60}$ の成長機構について、まだ明確なコンセンサスは得られていない状況である。そこで、当研究室では、7Åまでの長距離の原子間引力をきちんと取り込んだタイトバインディング法[6]を用いて、TSUBAMEを駆使したフラレン成長機構の解明研究に取り組んできた[11]。そして、炭素クラスターは、構成原子数を増して成長していく中で、これまで予想されていたよりも非常に早い段階で、籠状フラレン構造をとることを見いだした（図2）。我々が新たに考慮した長距離の引力は弱いものであるが、数十原子が集まった系では、原子間の引力が働く「ペアの数」が非常に多くなり、総和として、弱い長距離の引力部分の寄与が無視できないものとなる。そして、平面あるいはリングといった開いた構造よりも、籠状のコンパクトなフラレン構造をとった方が、エネルギー的に安定となることが判明した。さらに、ある温度条件の下で、炭素クラスターは成長するのみならず、 $C_{60}$ より大きくなった場合、 $C_2$ を放出して収縮するプロセスも活発になることも判明した。これらは、籠状の $C_{60}$ フラレンが最終生成物として大量に合成されるメカニズムの解明に直結する成果として位置づけられる。

## ナノカーボン固体の圧力誘起構造 相転移と新ダイヤモンド構造

# 5

常温常圧下で、多種多様な安定同素体が存在することから予測される様に、炭素系は、ある温度と圧力を与えても、系がとる構造は、その系のそれまでの「歴史」に強く依存し、一意に定まらない。逆に言えば、種々の出発物質から温度および圧力制御によって、既知の様々な系、さらには、未知の炭素新構造を合成することが可能と期待される。実際、固体 $C_{60}$ を出発物質として、圧力処理によりフラレン間に化学結合を持つポリマー結晶の合成が報告されている。興味深いことに、炭素などの軽元素はX線の散乱能が弱いこと、さらに、単位胞に少なくとも60個もの原子を含むことから、X線構造解析実験のみではポリマー結晶の構造同定には至らず、理論予測との共同作業により1次元ポリマー1種と2次元ポリマー2種の合計3種の結晶構造が決定されている[12,13]。その後、3次元的に $C_{60}$ がポリマー化した系「3次元 $C_{60}$ ポリマー」の合成実験、あるいは理論予測研究がなされ、最近までに幾つかの興味深い3次元ポリマー結晶の存在が明らかとなりつつある。図3に示した3次元 $C_{60}$ ポリマー構造は、TSUBAMEを用いて理論的にその存在が予測されているものである[14]。即ち、既知の2次元 $C_{60}$ ポリマーを加压して得られる新構造を、圧力一定の分子動力学手法と密度汎関数法に基づく構造最適化によって予測した結果、得られたポリマー構造である。大変興味深いことに、4配位の $sp^3$ 混成軌道原子がほぼ半数を占めるまで「ポリマー化」が進んだ系である一方、固体としてのバンド構造から、この3次元ポリマー構造は「金属」となることが判明している。

このように、ナノカーボン的一种である $C_{60}$ は、それ自体が新奇な物質であるのみならず、温度および圧力処理によるさらなる新物質合成のための「前駆体」としても魅力的な系であることが明確となった。そこで、カーボンナノチューブ固体相を温度・圧力処理することによっても、 $C_{60}$ の場合と同様、多様な新物質を得ることができると期待される。しかし、合成されるフラーレンの大部分を $C_{60}$ が占めることから純度99.9%以上の「固体 $C_{60}$ 」を出発物質として実験研究を行うことができるフラーレン系に対し、カーボンナノチューブ系では、合成段階での直径と螺旋度の完全制御が未だ困難である。そのため、単一構造のナノチューブのみからなる高純度試料が入手できず、高純度試料が示すはずの圧力誘起構造相転移の実験研究は、今後の課題として残されている。他方、理論研究においては、さまざまなナノチューブ固体相に対して、圧力一定の分子動力学手法により、圧力誘起構造相転移の予測研究が展開されている。その中で、「アームチェア型」と分類される一連のナノチューブ系の固体相(図4(a))が、加圧により多様な新炭素固体相へと相転移することが明確となってきた[15]。

例えば、比較的直径の細いアームチェアナノチューブの固体相からは、最近、ナノチューブとともに注目されている「グラフェンナノリボン」の固体相が合成されると期待されている。また、実験的によく合成される直径範囲に入るアームチェアナノチューブの固体相からは、SiC(炭化珪素=シリコンカーバイド)結晶が示す多形の一つである、4H型の六方晶新ダイヤモンド構造、さらには、既知の物質が持つ構造とは全く異なる、全原子が4配位の $sp^3$ 原子である体心正方晶新ダイヤモンド構造( $bct C_4$ 、図4(b))の合成が期待されている。2つの新ダイヤモンド相は、従来の立方晶ダイヤモンドよりもバンドギャップの幅が広い系と狭い系となると予測されており、極端条件下で稼働する半導体素子の素材としても着目されているダイヤモンドにバリエーションを与える点でも、これら新ダイヤモンド系は、大変興味深い系と位置づけられる[16]。

### 周期的構造修飾による グラフェンの半導体化

## 6

グラファイトは、蜂の巣格子状に結合した $sp^2$ 炭素原子からなる原子層が、規則的に積層した結晶構造をとっている。その原子層1枚のみからなる2次元物質「グラフェン」が、グラファイト結晶から粘着テープで単原子層をはがすことで作製できることが報告されると、一躍、ナノサイエンス研究において最も注目される物質となった[17]。これは、グラフェンの非常に特徴的な電子構造に起因する、特異な物性に大きな興味を持たれているためである。即ち、グラフェンでは、電子系のエネルギーは、分散のない、直線的な波数依存性をフェルミ準位において示すことから、電子は「質量のない粒子」として振る舞うことが期待されている。しかも、波数空間において、フェルミエネルギーを固有エネルギーに持つ量子状態の

波数ベクトルの集合として構成される、いわゆる「フェルミ面」は、通常の金属的な2次元物質では「フェルミ線」として存在するはずであるが、グラフェンでは、2次元物質であるにもかかわらず、一つのブリルアンゾーンにたった2点ずつ、「フェルミ点」として存在している。このことも、グラフェンの電子物性を非常に特異なものとしている。

そして、グラフェン研究が注目される大きな要因は、単原子層物質という、その構造にある。即ち、デバイス素子を構築する基盤である「半導体ウェハー」として、究極の系となると期待されているからである。そのためには、元々は金属的なグラフェンの電子構造を変化させ、いわゆるエネルギーギャップを持つ、半導体的な電子構造を持つ系とすることが重要とされている。実は、当研究室では、グラフェンの合成実験報告以前より、ナノメートルスケールで周期的に構造修飾することによってグラフェンを半導体化できることを指摘してきた[18]。図5に示すのは、その例の一つで、グラフェン2層を重ねた系において、短いナノチューブ構造体を用いて上下層を周期的に連結した構造体である。そして、この系は、直接ギャップ型の半導体となると予測している。現在、周期的に構造修飾したグラフェン系については、バンドギャップの周期長依存性など、系統的に研究を展開しつつあるが、その詳細については、また別の機会に報告したい。

### おわりに

## 7

物理学は、理論研究と実験研究が車の両輪となって発展してきた学問領域である。その中で、計算機を用いる物理学研究を、理論研究、実験研究と並ぶ、第3の柱に位置づけることが、20世紀後半の一時期になされたことがある。しかし、20世紀末からの計算機資源の急速な普及により、むしろ、理論研究活動および実験研究活動の全般に渡って、計算機が深く組み込まれた状況に現在は至っている。密度汎関数法の出現、さらには、計算機の広範な普及と活用により、量子物理学は、物質の性質を理解するのみならず、新物性を予測し、さらに、新物質を予言するための手法として、新たな重要性を持つに至っている。本稿で紹介したように、計算機を駆使した量子物理学研究により、現在、国内外でナノカーボン系の物性研究が集中的に展開され、ナノエレクトロニクス応用に向けた基礎物性データが蓄積されつつある。将来、Siデバイスにかわるカーボンデバイスをを用いた計算機が出現するとすれば、Siデバイス素子がCデバイス素子を生み出した、とも位置づけられることになる。

## 謝辞

本稿で紹介した研究の一部は、文部科学省グローバルCOEプログラムによる拠点形成活動として東京工業大学が推進している「ナノサイエンスを拓く量子物理学拠点」によるサポートにより展開したものである。また、フラーレンに関する研究の一部は、文部科学省・元素戦略プロジェクト「材料ユビキタス元素協同戦略」、カーボンナノチューブに関する研究の一部は、文部科学省科学研究費補助金・特定領域研究「カーボンナノチューブナノエレクトロニクス」による補助を、それぞれ受けている。本稿で紹介した図は、赤井吉郎氏、上野裕亮氏、山上雄一郎氏、櫻井誠大氏によるものである。

## 参考文献

- [1] P. Hohenberg and W. Kohn, "Inhomogeneous electron gas", *Physical Review* 136 (1964) B864; W. Kohn and L. J. Sham, "Self-consistent equations including exchange and correlation effects", *Physical Review* 140 (1965) A1133.
- [2] M. T. Yin and Marvin L. Cohen, "Theory of static structural properties, crystal stability, and phase transformations: Application to Si and Ge", *Physical Review B* 26 (1982) 5668.
- [3] S. Nose, "A molecular-dynamics method for simulations in the canonical ensemble", *Molecular Physics* 52 (1984) 255.
- [4] M. Parrinello and A. Rahman, "Crystal structure and pair potentials: A molecular-dynamics study", *Physical Review Letters* 45 (1980) 1196.
- [5] C. H. Xu, C. Z. Wang, C. T. Chan, and K. M. Ho, "A transferable tight-binding potential for carbon", *Journal of Physics: Condensed Matter* 4 (1992) 6047.
- [6] Yasuaki Omata, Yuichiro Yamagami, Kotaro Tadano, Takashi Miyake, and Susumu Saito, "Nanotube nanoscience: A molecular-dynamics study" *Physica E* 29 (2005) 454.
- [7] W. Krätschmer, Lowell D. Lamb, K. Fostiropoulos, and Donald R. Huffman, "Solid C<sub>60</sub>: a new form of carbon", *Nature* 347 (1990) 354.
- [8] Sumio Iijima, "Helical microtubules of graphitic carbon", *Nature* 354 (1991) 56.
- [9] Susumu Saito and Atsushi Oshiyama, "Cohesive mechanism and energy bands of Solid C<sub>60</sub>", *Physical Review Letters* 66 (1991) 2637.
- [10] Noriaki Hamada, Shin-Ichi Sawada, and Atsushi Oshiyama, "New one-dimensional conductors: Graphitic microtubules", *Physical Review Letters* 68 (1992) 1579.
- [11] Yusuke Ueno and Susumu Saito, "Geometries, stabilities, and reactions of carbon clusters: Towards a microscopic theory of fullerene formation", *Physical Review B* 77 (2008) 085403.
- [12] Chun Hui Xu and Gustavo E. Scuseria, "Theoretical predictions for a two-dimensional rhombohedral phase of Solid C<sub>60</sub>", *Physical Review Letters* 74 (1995) 274.
- [13] M. Núñez-Regueiro, L. Marques, J.-L. Hodeau, O. Béthoux, and M. Perroux, "Polymerized fullerite structures", *Physical Review Letters* 74 (1995) 278.
- [14] Yuichiro Yamagami and Susumu Saito, "Polymerized  $sp^2$ - $sp^3$  hybrid metallic phase of C<sub>60</sub> as obtained via constant-pressure molecular dynamics", *Physical Review B* 79 (2008) 045425.
- [15] Masahiro Sakurai and Susumu Saito, "Constant-pressure molecular-dynamics study of carbon nanotubes and electronic structure of new phases", *Japanese Journal of Applied Physics* 49 (2010) 02BB05.
- [16] Koichiro Umemoto, Renata M. Wentzcovitch, Susumu Saito, and Takashi Miyake, "Body-Centered Tetragonal C<sub>4</sub>: A Viable  $sp^3$  Carbon Allotrope", *Physical Review Letters* 104 (2010) 125504.
- [17] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films", *Science* 306 (2004) 666.
- [18] Takanori Matsumoto and Susumu Saito, "Geometric and electronic structure of new carbon-network materials: Nanotube array on graphite sheet", *Journal of the Physical Society of Japan* 71 (2002) 2765.

# TSUBAMEを用いたフラーレン・ナノチューブ・グラフェンの 構造変化と新物質研究

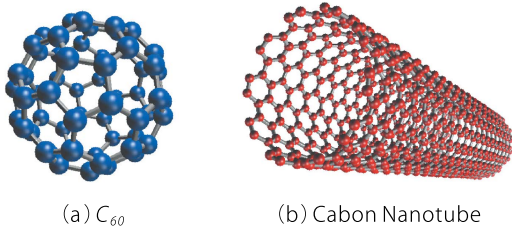


図1 (a) フラーレン $C_{60}$ と(b) カーボンナノチューブ

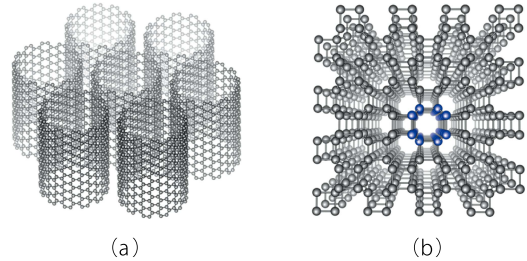


図4 (a) アームチェアナノチューブ固体と(b) その加圧により得られると期待される新ダイヤモンド結晶「体心正方晶 $C_4$  ( $bct C_4$ )」。この $bct C_4$ も、実は、青色で示した細いアームチェアナノチューブの集合体が、4員環でポリマー化した相と捉えることができる。

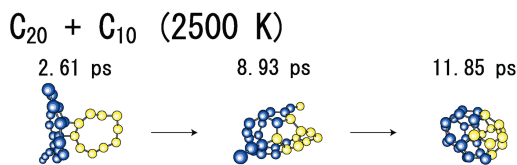


図2 平面状構造まで成長した $C_{20}$ クラスター(青い原子群)と、リング構造まで成長した $C_{10}$ クラスター(黄色の原子群)とが反応した際の構造変化のシミュレーション。温度一定(2500K)の分子動力学手法を用いている。 $C_{30}$ という比較的小さい系であるが、最終的に籠状のフラーレン構造を取ることが判明した。

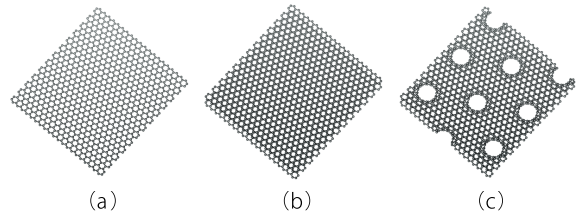


図5 (a) グラフェン、(b) 2層グラフェン、そして、(c) 2層グラフェンを、周期的に短いカーボンナノチューブで連結した系。

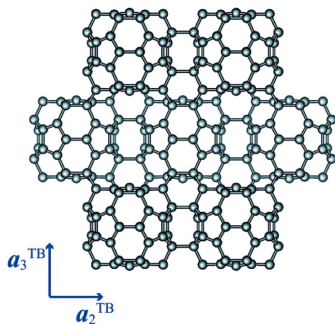


図3 体心正方晶3次元 $C_{60}$ ポリマー結晶。紙面と垂直な $a_i^{TB}$ 方向にも、 $C_{60}$ 同士は4員環を構成して化学結合でポリマー化している。各 $C_{60}$ は、隣接する12個の $C_{60}$ 全てと化学結合を形成しており、系のほぼ半数の原子が4配位の $sp^3$ 混成軌道を取った、高度にポリマー化が進んだ新炭素結晶である

● **TSUBAME e-Science Journal No.1 (創刊号)**

2010年9月18日 東京工業大学 学術国際情報センター発行 ©

デザイン・レイアウト：海馬 & キックアンドパンチ

編集： TSUBAME e-Science Journal 編集室

青木尊之 渡邊寿雄 関嶋政和 ピパットポンサー・ティラポン 深山史子

住所： 〒 152-8550 東京都目黒区大岡山 2-12-1-E2-1

電話： 03-5734-2087 FAX：03-5734-3198

E-mail： [tsubame\\_j@sim.gsic.titech.ac.jp](mailto:tsubame_j@sim.gsic.titech.ac.jp)

URL： <http://www.gsic.titech.ac.jp/>



# TSUBAME

## TSUBAME 共同利用サービス

『みんなのスパコン』TSUBAMEは、当初は主に東工大学内の研究・教育のために利用されておりましたが、平成21年7月よりTSUBAME 共同利用サービスを開始し、学術・産業・社会へと広く貢献しております。

### 課題公募する利用区分とカテゴリー

共同利用サービスには、「学術利用」、「産業利用」、「社会貢献利用」の3つの利用区分があり、さらに「成果公開」と「成果非公開」のカテゴリーがあります。現在は随時申請を受け付けており、申請課題は厳正な審査の下、採択の可否を決定します。採択課題の利用期間は当該年度末までです。

#### TSUBAME 共同利用とは…

- 東工大学内のみならず、より多くの方にTSUBAMEサービスを提供
- 他大学や公的研究機関の研究者の **学術利用** [有償利用]
- 民間企業の方の **産業利用** [有償・無償利用]
- その他の組織による社会的貢献のための **社会貢献利用** [有償利用]

### 共同利用にて提供する計算資源

共同利用サービスでは、口数を単位としたTSUBAMEの計算機資源の割振りを行っております。利用区分・カテゴリー別の利用課金表を下に示しました。TSUBAME 2.0における1口相当の計算機資源量などの詳細については、お問い合わせください。

利用区分	利用者	制度や利用規定等	カテゴリー	利用課金
学術利用	他大学または研究機関等	共同利用の利用規定に基づく	成果公開	1口:100,000円
産業利用	民間企業を中心としたグループ	「先端研究施設共用促進事業」に基づく	成果公開	トライアルユース(無償利用) 1口:100,000円
			成果非公開	1口:400,000円
社会貢献利用	非営利団体、公共団体等	共同利用の利用規定に基づく	成果公開	1口:100,000円
			成果非公開	1口:400,000円

### 産業利用トライアルユース制度 (先端研究施設共用促進事業)

共同利用サービスの「産業利用」は、東京工業大学学術国際情報センターが実施する文部科学省先端研究施設共用促進補助事業を兼ねております。その中のトライアルユース制度では、初めてTSUBAMEを利用する民間企業の方に限り、無償での利用(1利用期間は最長1年間、2回まで)が可能です。この制度でスパコンTSUBAMEの敷居を下げることで、より多くの方にスパコンの魅力を体験していただいております。

## お問い合わせ

- 東京工業大学 学術国際情報センター 共同利用推進室 Tel. & Fax. 03-5734-2085
  - e-mail / [tsubame@gsic.titech.ac.jp](mailto:tsubame@gsic.titech.ac.jp)
- 詳しくは / <http://www.gsic.titech.ac.jp/tsubame/> をご覧ください。