

学位論文審査結果の要旨

専攻主任



博士（工学） 鈴木 卓真

審査委員

主査 教授 丸山 晃市
副査 教授 北守 一隆
副査 教授 澤田 孝幸
副査 教授 棚橋 研二

モンテカルロ法によるシミュレーションの 高効率並列計算に関する研究

本論文は、半導体薄膜製造におけるプラズマ・プロセスを対象として、電磁界を考慮したモンテカルロ法によるモデルを用いてプラズマ構造の解明に有用となる制御パラメータを導くと共に、モンテカルロ法によるシミュレーションの高効率並列計算の手法を提案し、高効率性についての検証を行ったものである。

プラズマ・プロセスの分野では、半導体メモリやマイクロプロセッサが急速に高密度、高速化しており、これらの実装化技術のために精密な制御構造の把握を目的とした流体モデルや粒子モデルの数値シミュレーションモデルが提案されている。流体モデルの数値解析法として、粒子を位置・速度の6次元空間中での流れとして扱うボルツマン方程式法およびマクロパラメータとしての移動、電離および拡散係数より構成される連続の式を用いる方法がある。粒子モデルには、個々の粒子の運動方程式を解き乱数により衝突判定を行うモンテカルロ法があり、他のシミュレーション技法と比べて数値的に安定しており、物理現象を粒子の運動として直接反映できるため境界条件の取り扱いに優れ、厳密な解を得ることができる。しかし、2次元での解析では、高精度の解を得るためには一桁の精度向上に対して100倍の試行粒子数が必要となり、膨大な計算時間を要する。また、極小領域で高密度のプラズマを発生させるために用いられる磁界を加えたシミュレーションでは、高磁界になるほど収束解を得るまでの時間を必要とする。これらの問題解決のための数値計算の高速化技術として、シミュレーション工程やシミュレーション領域を共有する並列計算環境が整備されつつある。従来型の大規模なスーパーコンピュータを用いる方法に対し、低コストのネットワーク上のパーソナル・コンピュータ（PC）を仮想的に一つの計算機として構成する方法があり、クラスタ化技術、分散環境における大域的シミュレーション技術およびグリッド・コンピューティング技術が注目されている。並列計算方法として位置空間を分割し並列化を行う手法が提案されているが、PCやプロセッシング・エレメント（PE）の増加に伴い、割り当てられる位置空間が狭くなり隣接領域との計算に伴う通信が頻繁に起こり、高速計算を妨げる要因となっている。線形的な台数効果を図るため様々なシミュレーション方法、スケジューリング方法あるいは通信方法について研究がなされている。

本論文は、以上の背景に基づき全5章の構成により論考している。

第1章は序論であり、スーパーコンピュータおよび分散環境上に配置した並列計算および同期実行制御に関し従来の研究について紹介し、その並列計算性能について論じている。また、種々のシミュレーション技法およびデポジション、エッチングガスによる電磁界を考慮したプラズマ・プロセス・シミュレーションに関する従来の研究についても述べている。

第2章は、モンテカルロ法によるプラズマ・プロセス・シミュレーションの方法について述べている。プラズマ化学反応により生じた活性化中性粒子（ラジカル）を固体表面に堆積させ薄膜を形成するデポジションや、イオンにより固体表面の原子を削り取るエッチングによる半導体薄膜の加工技術では、電子、イオン密度、エネルギーおよびイオンの入射角がプラズマ構造を決める指標となる。本シミュレーションモデルの説明、粒子エネルギーや粒子密度のサンプリング方法、電子の飛行時間の決定方法、Null Collision法を用いた衝突判定方法および電子の散乱に関する軌道の計算方法について述べている。

第3章は、並列計算手法について述べている。従来の粒子シミュレーションにおいて、位置空間を分割しPCやPEに分配する並列計算が行われているが、本論文では、モンテカルロ法によるプラズマ・プロセスのシミュレーションが、個々の粒子の挙動を独立事象として扱うことが可能であることに着目し、一連の粒子の挙動に関する計算を分散環境上のPCに分配し、その計算結果を集計することにより並列化を行うモデルとしている。具体的な方法として、Java言語によるマルチスレッドおよびRMIを用いた分散環境の構築方法、および、分散環境に配置された各PCの同時実行制御および同期制御方法について述べ、アムダールの法則に従う一般的な並列計算効率および本手法による高効率な並列計算を実現する理論について論じている。シミュレーションの開発において、オブジェクト指向設計としてUMLを用いたモデリングからJava言語による開発を行っている。RMIを利用することにより、通信処理に関するデータ伝送の仕組み、ネットワークを越えた処理の呼び出しに関する手続きを隠蔽し、マルチスレッドの機能により同時実行制御、同期制御を容易に行うことを可能としている。

第4章は、本手法による並列計算の信頼性を検証するために、電磁界での荷電粒子の運動を取り上げている。磁界を考慮したプラズマ現象を明らかにするために必要とされる電界と磁界が任意の角度で交差する場でのシミュレーションをAr、SiH₄、Cl₂ガスについて行い、シミュレーション結果となる荷電粒子の輸送パラメータとして、0°から90°に至るまでのx, y, z軸方向の平均速度、平均エネルギー、平均衝突周波数およびエネルギー分布について考察している。また、より現実的なシミュレーションとして、位置により電磁界が複雑に交差するカusp磁場でのシミュレーションを行い、その結果について論じている。最後に、本論文の主目的である並列計算結果および高効率並列計算の理論値との比較を行っている。各PCに対し試行回数2,000程度でも計算時間に大きく依存する粒子の衝突回数が平均値に近づくことを示し、理論的根拠を数値的に確認している。

第5章は、前章までに得られた知見を整理し、本論文の結論を述べている。

以上を要するに、本論文は、モンテカルロ法によるシミュレーションの有効性を阻害する計算時間の問題に対して、モンテカルロ法の独立事象に着目して、従来の計算領域分割による協調計算ではなし得ない、高いスケーラビリティを有する高効率並列計算の手法を提案するとともに、プラズマ・プロセス・シミュレーションによりプラズマ構造の解明に有用となる制御パラメータを導き、独自の考察を進めている。これらの新規性は計算工学分野に資するところ大であると考えられる。

よって、著者は、博士（工学）の学位を授与される資格があるものと認める。