

# 学位論文内容の要旨

北海道工業大学大学院工学研究科

機械システム工学専攻

博士後期課程

機械システム制御部門

申請者氏名 鈴木 卓真

## 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

近年、nm 単位の半導体素子を作るナノテクノロジーの研究開発が進み、半導体メモリやマイクロプロセッサは急速に高密度、高速化しており、半導体薄膜製造におけるプラズマ・プロセスの分野において、さらに高精度な微細加工技術および、低気圧で高密度な弱電離プラズマの要求が高まっている。プラズマ構造を把握するためにはプラズマ中の粒子エネルギーや粒子密度が指標となり、流体モデル、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。流体モデルでは、位置空間三次元および速度空間三次元の六次元を扱うボルツマン方程式を用いるモデルによる解析法、プラズマ現象をマクロ的に捉え、係数として速度、電離および拡散から構成される連続の方程式を用いるモデルによるシミュレーションがある。粒子モデルのシミュレーションとして、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によるモデルがあり、他のシミュレーション技法に比較し、数値的に安定しており、仮定が少なくより詳細に物理現象を取り扱うことができる。しかし、精度の高い解を得るためには試行粒子数を増加させる必要があり、さらにガス分子と電子との電離衝突による粒子数の指数関数的増加現象が起こるため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できる磁界を用いたシミュレーションにおいては、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。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1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粒子の移動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おり、線形的な台数効果が期待できず、様々なシミュレーション方法やスケジューリング方法および通信方法について研究がなされている。

本論文は、モンテカルロ法のシミュレーションに対し、高効率な並列計算を行うためのシミュレーション環境および計算手法を提案するものであり、電磁界を考慮したプラズマ・プロセスの分野に適用し、プラズマ構造の解明に有用となるパラメータを算出し考察を行うと共に、高効率並列計算の理論およびアムダールの法則より、高効率性について検証を行うことを目的とする。

本論文の第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

行制御に関する従来の研究について述べると共に、その並列計算性能について述べている。また、種々のシミュレーション技法およびガス分子を用いた、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述べている。

第2章においては、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においては、電子、イオン密度、エネルギーおよびイオンの入射角が指標となる。極小領域において低温度で高密度のプラズマを生成することが可能なカスプ磁場中においては、プラズマの精緻な制御が必要とされ、プラズマの構造を決定づける粒子レベルの運動、反応過程を理解することが重要となり、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計算として軌道の計算方法について述べている。

第3章においては、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た。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た。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述べている。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た。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て考えることが可能となった。また、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が可能となった。

第4章においては、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た。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、SiH<sub>4</sub>、Cl<sub>2</sub> ガスについて解いており、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、0~90度に至るまでの  $x, y, z$  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 LPWS法を用い、エネルギー分布について考察した。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スプ磁場でのシミュレーションを行いその結果について報告を行った。最後に、本論文の目的とな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た。最大 30 台の PC にて、粒子数 60,000 では約 26 倍かつ並列化率 99.5%に到達し、粒子数 30,000 では約 23 倍かつ並列化率 99.0%の結果を得た。各 PC に対し試行回数 2000 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、また、ネットワーク上での通信時間も無視できるほどであることから、高効率な並列計算が実現できたことを示した。

最後の5章においては、前章までに得られた知見を整理し、それらに基づき本論文の結論を述べた。本論文の重要な知見は、プラズマ・プロセスのモンテカルロ・シミュレーションにおいて、より信頼性の高い解を得るためには多くの試行回数を必要とするが、独立事象をみいだし、分散環境上の PC に的確な粒子数を分配し並列計算を行うことにより、粒子の衝突回数を均一化させることが可能となり、また、従来方法に比較し通信回数を削減でき高効率に多くの試行が行え、短時間でも信頼性の高い結果を得ることが可能となったことである。