

# 4 N-5 プリポスト処理を自動化するシミュレーションシステムの開発

森本 亜澄香<sup>†</sup> 佐藤 裕輔<sup>‡</sup>

<sup>†</sup>(株)東芝 情報・社会システム社 <sup>‡</sup>(株)東芝 研究開発センター

## 1. はじめに

近年のコンピュータとソフトウェアの進歩により、大量のシミュレーションが行えるようになった。しかし、そのためには煩雑な入力データ作成やシミュレーション結果の整理も大量に行う必要がある。また、従来は専門家だけがシミュレーションを行っていたが、現在ではそれ以外の人でもシミュレーションを行いたいというニーズが出てきた。我々は、これらの問題を解決するために、プリポスト処理を自動化するシステム(分子計算支援システム)を開発した。

## 2. 分子計算支援システム

半導体デバイス製造プロセスでのプロセス条件の最適化や開発期間短縮のためには、反応過程の理解が重要である。我々は、シミュレーションによる反応過程の理解を容易にするため、反応過程を網羅的に計算する入力データの生成、結果の検証を容易にするデータの整理などプリポスト処理を自動化したシステムを開発した。反応解析等を計算する分子計算ソフトはMOPACを使用している。種々のOSで利用可能にするためOSに依存しない互換性の高いJavaでシステムを開発した。

### 2.1. システム概要

本システムでは次のような処理を行う。

- ① ユーザは、システムが表示するGUIに従って分子データの選択、目的の温度、回転・振動

自由度、分子の発生確率、計算回数などを入力する。

- ② 与えられた条件を満たす分子を生成する。
- ③ 反応解析を行う。
- ④ 結果は反応タイプ別に振り分けて保存され、反応した初期構造と最終構造のリストや、どういう反応生成物がいくつ出来たかのリストを作成する。

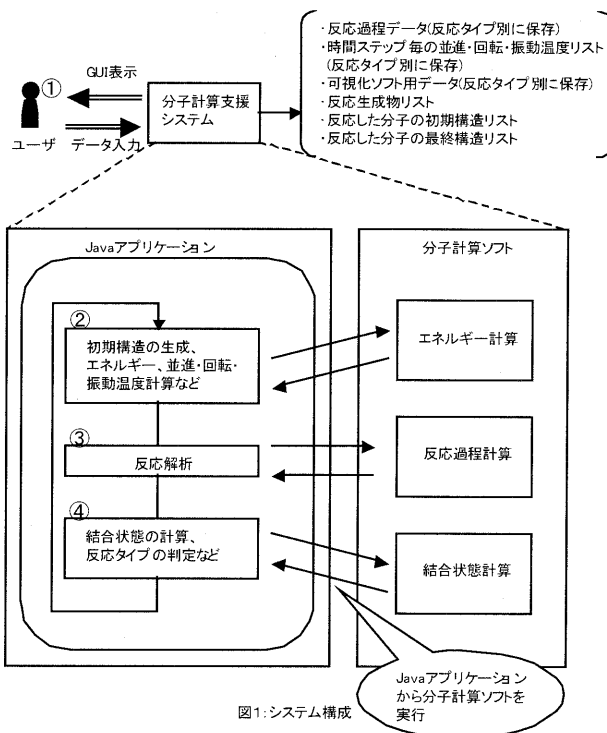


図1: システム構成

本システムでは、プリポスト処理、分子計算ソフトの実行を行うJavaアプリケーションを起動しているマシン上に分子計算ソフトがある必要はない。リモートマシンをユーザが指定した時は、rsh コマンドを使って分子計算ソフトで実行する。

Development of the simulation system which automate pre- and post-processing

<sup>†</sup>Asuka Morimoto, Information and Industrial Systems & Services Company, Toshiba Corp.

<sup>‡</sup>Yuusuke Sato, R&D Center, Toshiba Corp.

```
Runtime.getRuntime().exec("rsh host command");
```

また、ユーザが指定したCPU数だけ②③の処理を1つの単位としたスレッドを並列で実行する

ようにしている。スレッドの実行順序は問題にならないのでスケジューリングは行っていない。ただし、④の処理で共有ファイルへの書き込み処理が競合しないようにしている。このシステムはパラレルコンピュータ、クラスタシステムを使用すると効率よくシミュレーションが行える。

## 2.2. 分子生成

分子内の原子の変位、振動・回転速度は条件を満たす範囲でランダムに与えている。様々なタイプの分子で多数回反応解析を行うことにより、勘と経験によって解析を行う場合と違い、生じる反応経路を網羅的に計算できる。

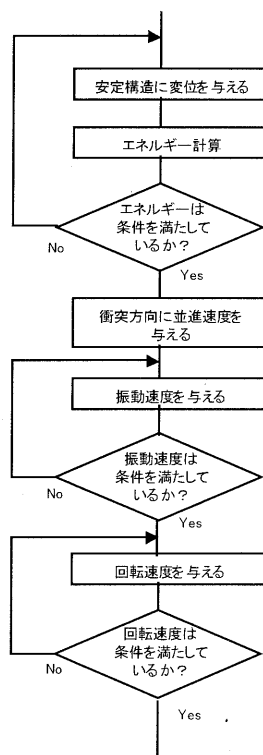


図2: 分子生成の流れ

## 2.3. 結合状態解析

初期構造と最終構造(反応解析の結果)のそれぞれについて各原子間の結合距離を分子計算ソフトで計算する。ユーザが設定した”結合しているとみなす距離”によって、分子の結合状態を解析する。初期構造と最終構造の結合状態が違えば反

応していると判定している。反応した最終構造については、どういう反応生成物であるか化学反応式に変換して反応生成物リストに登録する。これにより、多数回の反応解析で、どういう反応生成物がいくつ出来たのかを知ることができる。

## 3. おわりに

我々が開発した分子計算支援システムを使用することにより、生じる可能性のある反応経路を網羅的に計算でき、従来は見逃されていた新たな反応経路を算出する事ができた<sup>[1]</sup>。これは、半導体デバイス製造プロセスのプロセス条件最適化のために必須である反応過程の理解には重要であり、プロセス開発期間の短縮という効果がある。

また、反応解析のための入力データ作成や結果の整理を容易に行うことができるので分子計算を専門としないユーザでも使用できる。

我々はこのシステムをパラレルコンピュータ SGI Origin2000 上でも使用し、一度に多数のスレッドを発生する本システムの機能を活かした効率の良いシミュレーションを行っている。

なお、今回は分子設計用に開発したが、他のシミュレーションにも同様の考え方を適用できると考えている。

今後は、システムの効率化(例えば、Java の RMI(Remote Method Invocation)による分散プログラミングの導入)の検討を行っていく。

## 参考文献

- [1] 佐藤裕輔、森本亜澄香他:分子軌道法による動力学的反応解析手法の開発、化学工学会第31回秋季大会(1998)
- [2] S.Oaks and H.Wong : JAVA Threads, O'REILLY (1997)(戸松豊和、西村利浩訳 : JAVA スレッドプログラミング、オライリー・ジャパン (1997))
- [3] 石畑清:岩波講座ソフトウェア科学 3 アルゴリズムとデータ構造、岩波書店(1989)
- [4] 平野恒夫、田辺和利編:分子軌道法 MOPAC ガイドブック、海文堂出版(1991)
- [5] J. Stewart:MOPAC93 MANUAL(1993)
- [6] J. Stewart:MOPAC2000 MANUAL(1999)