3S-2

電子銃シミュレータ ＥＬＥＧＵＮＳ－ＦＥＭの高速化手法

速水 謙*, 萩原 繁和**, 土肥 俊*, 原田 紀夫*

日本電気（株） C&C情報研究所*, 日本電気技術情報システム開発（株）**

１．はじめに

電子銃３次元シミュレータＥＬＥＧＵＮＳ－ＦＥＭのスーパーコンＳＸ上の高速化手法について報告する。特に、有限要素法による３次元電界解析のための連立一次方程式の解法と、電子軌道計算のための高速化手法について述べる。

２．連立一次方程式の反復解法

有限要素法による３次元の電界解析で生じる対称正定値で大規模スパースな連立一次方程式 $Ax=b$ の解法にはスーパーコン用のアルゴリズムとして新たに開発したＳＣＧ法 (Scaled Conjugate Gradient algorithm) [2),3)] を採用している。

ＳＣＧ法は、行列 $A=(a_{ij})$ をその対角項によってスケーリングしてから共役勾配法（ＣＧ法）を適用するもので、そのアルゴリズムは

① $D^{-1}=\mathrm{diag}[1/a_{11}, 1/a_{22}, .., 1/a_{nn}]$
　を求める.

② $r=b-Ax_1$
　$p=D^{-1}r_1$

$i=1,2,3,\ldots$

$$\alpha_i=\frac{(r_i,\ D^{-1}r_i)}{(p_i,\ Ap_i)}$$
$$x_{i+1}=x_i+\alpha_i p_i$$
$$r_{i+1}=r_i-\alpha_i A p_i$$
$$\beta_i=\frac{(r_{i+1},\ D^{-1}r_{i+1})}{(r_i,\ D^{-1}r_i)}$$
$$p_{i+1}=D^{-1}r_{i+1}+\beta_i p_i \qquad (1)$$

、で表わされる。但し、Ap, $D^{-1}r$, 内積等は反復当たり１回計算すればよい.

ＳＣＧ法は従来の直接法に比べてはるかにメモリー、計算時間ともに少なくて済む。また、反復法として収束性が良く、ＩＣＣＧ法 [4)] などに比べてベクトル性能が容易に引き出せ、メモリーも少なくて済むので本報告で述べる様な大規模な有限要素解析に適している。

ＳＣＧ法のベクトル処理効率を更に高めるには（１）の行列とベクトルの積 $s=Ap$ で用いる行列Ａのデータ構造を工夫する必要がある。

従来、有限要素法などで生じるランダム・スパース行列を格納するのには行方向のリストがよく用いられてきた。しかし、有限要素法などでは１節点につながる節点数は限られているので、行列とベクトルの積の計算における最深ｄｏ ｌｏｏｐ長が短いため、高いベクトル性能を引き出しにくい.

そこで、ベクトル計算機向きのデータ構造として、次の様な対角方向リストを検討する。

ＡＤ（ｉ）：行列Ａの対角要素
ＡＵ（ｍ）：行列Ａの上対角非零要素
ＪＣ（ｍ）：Ａ（ｍ）の列番号
ＫＤ（ｉ）：ｉ本目の対角方向リストは第ＫＤ（ｉ）上対角上にある
ＩＤ（ｉ）：ｉ本目の対角方向リストの先頭要素の要素番号
ＮＴ　　：対角方向リストの本数
Ｎ　　　：元数

として、 対角方向リストで行列とベクトルの積 $s=Ap$ を計算するには、

```
i=1,2,...,N
  S(i)=AD(i)*P(i)

i=1,2,...,NT
  k=KD(i)
  m=ID(i),...,ID(i+1)-1
    j=JC(m)
    S(j-k)=S(j-k)+AU(m)*P(j)
    S(j)=S(j)+AU(m)*P(j-k)
```
（２）

とすればよい.

有限要素メッシュが規則的な場合は行列の非零要素は対角方向に並ぶ、また複雑なメッシュでも空間的に規則的に（例えばｘ，ｙ，ｚ方向の順に）番号付けを行えば、対角方向に並ぶ傾向を持つ。

従って（２）の対角方向リストに沿った、ｍによる最深ｄｏ ｌｏｏｐ長は行方向リストの場合に比べて長い。また、最深ｄｏ ｌｏｏｐ内では Ｓ（ｊ），Ｐ（ｊ）等の引数は単調増加であるから、ベクトル処理に際するデータ参照関係の問題も生じない。

３次元の複雑な形状の電子銃の静電界の有限要素解析に対して、行方向及び対角方向リストによるＳＣＧ法、及び行方向リストによるＩＣＣＧ法を適用した数値実験結果を表１に示す。 打切り相対残差 L_2 ノルムを 10^{-15} にとったときのＳＸ－２ベクトル処理の実行時間と反復数を示した。

Speed Up Methods for the Electron Gun Simulator ELEGUNS-FEM

Ken HAYAMI *, Shigekazu HAGIWARA **, Shun DOI *, Norio HARADA *

NEC Corporation *, NEC Scientific Information System Development Co. Ltd. **

表1　有限要素法による3次元電界解析における
SCG法（対角方向，行方向リスト），ICCG法（行方向リスト）の比較

アルゴリズム		ケース 1	ケース 2	ケース 3	ケース 4
	元数	1167	2039	3575	6309
対角方向 SCG法	SX−2ベクトル 実行時間（msec）	24．1	36．9	55．9	94．3
行方向 SCG法	SX−2ベクトル 実行時間（msec）	50．4	93．9	157	278
行方向/対角方向		2．1	2．5	2．8	2．9
両SCG法	反復数	19	20	20	21
行方向 ICCG法	SX−2ベクトル 実行時間（msec）	4610	17500	49400	
	反復数	5	5	5	

大規模な問題でもＳＣＧ法は短時間で収束している。ＩＣＣＧ法は実行時間の９９％が前処理の不完全コレスキー分解に費やされているので、より適切なデータ構造の検討が必要であろう。

対角方向リストを用いたＳＣＧ法は、行方向リストを用いたＳＣＧ法に比べてＳＸ－２ベクトル処理の実行時間で２～３倍速い。これは、行方向リストの平均ベクトル長が６であるのに対して、対角方向リストの平均ベクトル長が２５～５８と長くなっているためである。

３．電子軌道計算

'代表'電子軌道計算では数百本の独立な運動方程式の時間積分を行う．従って各電子を単位とした並列化が基本的には可能である．しかし単純に時間刻みを一定とすると，電子毎に速度が異なるため電子銃終端側で計算可能な電子にバラツキが生じる．また各時刻ステップ毎に電子を包含する要素とその要素内の体積座標の計算が必要であるが，何れも反復計算となり，その反復数は電子毎に異なる．従ってこの方法では事実上ベクトル化は不可能である．

一方文献1)で導入した二重格子法では，電子は格子面単位に進行し，終端でのバラツキがない．二重格子法による'代表'電子軌道計算は，各格子面において以下の計算を行う．

1) 有限要素法の形状関数に基づいて，節点電位から面上格子点の電界を求める．
2) 格子点電界から各電子が受ける電界を内挿し，電子を次の格子面に進める．
3) 各'代表'電子の電流と速度から，空間電荷を次面上の隣接格子点に配分する．
4) 面上格子点の空間電荷を有限要素モデルの節点電荷ベクトルにくわえこむ．

1)では既に計算されている各格子点の包含要素と体積座標から電界を計算する．これはさらに

1.1) 形状関数の体積座標に関する微分の計算
1.2) Jacobian行列（3×3行列）の計算
1.3) Jacobianの逆行列計算
1.4) 形状関数の絶対座標に関する微分の計算
1.5) 電界の計算

のステップから成る．通常のコーディングでは各格子点毎に上記1.1)から1.5)を逐次的に計算する．一方ベクトル化を考慮したコーディングでは各ステップを一格子面上の全格子点について並列的に行う．即ち，格子点に関するループを最深ループに持ってくる．現在一格子面上の格子点数は200～400程度であり，ベクトル化により十分高速化される．

2)，3)は'代表'電子毎の計算であり，電子を単位としたベクトル化となる．電子の受ける電界の内挿計算及び空間電荷の配分は隣接する４つの格子点から線形補間を用いて行う．これらは単純な代入計算である．

4)は1)と同様に格子点に関するベクトル化である．2)以降のステップは1)よりははるかに単純な代入計算である．

二重格子法の高速化の効果を文献1)の電子銃モデルを用いて評価した．二重格子法を用いない場合，軌道計算は有限要素メッシュ上で直接行っている．従って各時刻ステップ毎に電子を包含する要素とその要素内の体積座標値を計算している．予め'代表'電子が通過する領域の要素を抽出する等して，包含要素の検索に要する時間の短縮化を計っている．数値積分法は３次のRunge-Kutta法を用いている．一方二重格子法では電子の位置ベクトルｘ，速度ベクトルｖを

$$x_{i+1} = x_i + v_i \cdot \Delta t + (e/2m) \cdot E_i \cdot \Delta t^2$$
$$v_{i+1} = v_i + (e/m) \cdot E_i \cdot \Delta t$$

により更新している．

ＳＸ－２での実行時間は，470個の'代表'電子の計算に，二重格子法を用いた場合約１秒かかった．格子面の数は200である．一方有限要素メッシュのみの場合，積分ステップ数を二重格子法における格子面数と同じ200となるようにして，約36秒かかった．

Runge-Kutta法では積分次数と同数の関数評価が必要であるから，この場合有限要素メッシュのみによる計算が不利である．しかしそれを考慮しても二重格子法が約12倍高速である．

４．まとめ

電界解析のための連立一次方程式の解法にＳＣＧ法を用い、電子の軌道解析に二重格子法を適用する事により、３次元非軸対称の複雑形状を有する電子銃のシミュレーションをスーパーコンＳＸ上で高速に行なう事ができた。

参考文献

1) 土肥、他　本大会予稿集
2) 速水　謙，原田　紀夫，情報処理学会第３０回全国大会予稿集　，pp.1731-1732 (1985).
3) Hayami,K. and Harada,N.,Proc. 1st Int. Conf. on Supercomputing Systems, pp.213-221, Florida (1985).
4) Meijerink,J.A. and Van der Vorst,H.A., Math.Comp.,Vol.31,pp.148-162 (1977).