

CRAY X-MP 上の表面電荷法と電子軌道計算

Surface Charge Method and Electron Ray Tracing on CRAY X-MP

飯吉 僚 丹羽寛之 竹松英夫
Ryo Iiyoshi Hiroyuki Niwa Hideo Takematsu

Abstract *The surface charge method (SCM) is the precise electric field solver utilized for the numerical analysis of the electron optical devices, such as electron guns and lenses. Because of its long computing time, the SCM brings a serious problem when a large number of electron trajectories have to be calculated for the analysis. This paper describes the SCM and the electron ray tracing on the vector pipeline supercomputer CRAY X-MP/14se. The SCM-code was optimized for the parallel computation, and the effect on the ray tracing time was examined. The method and result are presented.*

Keywords= parallel computation; vector computer; electric field; electron ray tracing; CRAY X-MP

1. はじめに

電子銃や電子レンズなど電子光学デバイスの数値解析には、電界・磁界計算に加えて電子軌道計算が利用される。電子光学デバイスの特性は、電磁界中を進む電子の軌道で決定されるので、その特性解析には電界・磁界や電子軌道の計算に高い精度が要求される。電界計算法の一つである表面電荷法は、電極形状を細部まで正確に考慮できること、多電極系の取り扱いが容易であること、高い計算精度が得られることなど、多くの利点をもつ数値計算法であるため、ポイント陰極電子銃^{1,2)}や電子レンズ³⁾の特性解析に応用されてきた。しかし、表面電荷法は境界積分法であり、差分法や有限要素法などの領域計算法に比べて電界計算に要する時間は長い。このため、電界計算を何度も繰り返す電子軌道計算を実行すると計算時間は著しく増加する。

こうした理由から、表面電荷法を利用した電子光学デバイスの特性解析は、限られた数の軌道計算結果から特性を推定する方法¹⁾や、軸上電位分布のみ

を利用して近軸電子軌道を計算する近似的方法³⁾が採用されてきた。表面電荷法の高い計算精度を保持して、多数の軌道が短時間で計算できれば、従来計算時間の制約から実現困難と考えられてきた電子ビーム密度分布の直接評価やその解析方法を検証できることになり、電子光学デバイスの特性解析への応用をさらに拡大できるはずである。

我々は、こうした電子光学問題の数値解析という立場から、本学計算センターに導入されたベクトル・パイプライン・スーパーコンピュータ CRAY X-MP/14se (以下、CRAY) の性能評価と使用計算コードの改良を進めている。スーパーコンピュータの実際の性能は使用計算コードに強く依存し、最大実行性能は並列演算機能を最大限活用したときに達成される。このため、使用計算コードの最適化とその性能評価が必要になる。

すでに前報で、表面電荷法を利用した電子軌道計算コードの構成と最適化(ベクトル化)手法を述べ、表面電荷法による電界計算を最適化することによって、軌道計算時間を大幅に削減できる見通しが得られたことを報告した⁴⁾。本報告では、軌道計算コードと電界計算コードの概略を述べた後、計算コード

の性能分析結果、その後の改良点、計算速度と時間の関係など改良の中で得られた知見を報告したい。

2. 軌道計算コード

軌道計算コードは、回転軸対称系電磁界中の電子の微分運動方程式を数値積分するコードと、電界・磁界計算コードからなる。

電子の運動方程式は次式で与えられる。

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\frac{e}{m} (\mathbf{E}(\mathbf{r}) + \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B}(\mathbf{r})) \quad (1)$$

ここで \mathbf{r} 、 $-e$ 、 m はそれぞれ電子の位置ベクトル、電荷、質量、 \mathbf{E} 、 \mathbf{B} は電界、磁束密度分布である。数値積分にはロンバーグ積分法の一つである Rational Extrapolation Method⁵⁾ を使用している。電子の位置が変化すると、電界・磁界の値は変化するので、電子軌道計算では電界・磁界計算を何度も繰り返す必要がある。軌道計算コードの基本構成を図 1 に示す。

表面電荷法では電界を次の数値積分で計算する。

$$E(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\pi \epsilon_0} \sum_{j=1}^M \sigma_j \sum_{l=1}^N \beta_l f_{jl}(s_{jl}; \mathbf{r}) \quad (2)$$

ここで M は電荷密度を離散化した電極表面分割数(全積分数)、 N は各分割区間での部分積分点数、

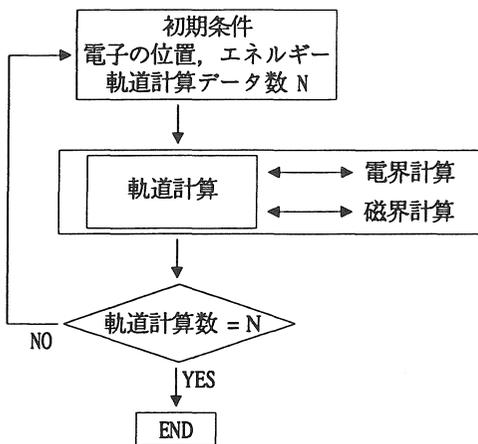


図 1 軌道計算コードの構成

σ_j は電極表面電荷密度分布、 β_l は数値積分の重み、 f_{jl} は電極表面座標 s_{jl} と電子座標 \mathbf{r} の関数である。

電界は光軸方向成分と半径方向成分をもつ。被積分関数 f_{jl} は、光軸方向成分では第一種完全楕円積分、半径方向成分では第一種および第二種完全楕円積分を含む^{1,4)}。

表面電荷法では電界計算精度を保つために、電極表面分割数 M を多くとる。このため、数値積分に必要な被積分関数 f_{jl} の計算数 ($M \times N$) は増加するので計算時間が長くなる。さらに、被積分関数の値は計算位置 \mathbf{r} に依存しているため、計算位置が変化すると、被積分関数をすべて再計算することになる。従って、電界計算が電子軌道計算の大きな負荷になる。

我々が使用した数値解析モデルには、磁界計算も含まれるが、磁界は理論解で計算すれば十分なのでこの計算時間は問題にならない。

3. 性能分析ツール

使用計算コードに対する CRAY の性能は、次の性能分析ツールで調べた。

• FLOW TRACE

計算コード全体の流れを追跡し、各サブルーチン・コードがどこで何回使用されたか、その計算に要した時間、この時間が全体の計算時間に占める割合、全体の計算時間などを分析する機能をもつ。

• LOOP MARK

計算コード中で使用された DO LOOP を分析して、並列(ベクトル)演算可能か否かを示す。並列演算が不可能な場合にはその原因も示す機能をもつ。

• PERFORMANCE MONITOR

計算性能(速度)を分析する機能をもつ。浮動小数点演算回数、スカラ演算の命令実行回数などを調べ、実行時間から、計算速度を評価する。メモリ参照速度も与える。

上記以外に、FLOW TRACE に近い分析機能をもつ SPY や、サブルーチン・コードのつながり、コメント・ブロック変数、全計算コードのクロス・リファレンスなどを分析する FTREF などもある。ここでは主として上記 3 つの性能分析ツールを利用して、軌道計算の実行時間・速度を調べ、最適化を進めた。

4. オリジナル(スカラ)コードの分析

軌道計算コードは、汎用スカラ計算機上で開発・使用してきたコードで、機能別に分けた多くのサブルーチンで構成したスカラ計算コードである。スカラ計算機 IBM 3081K 上で長い計算時間を要した軌道計算を CRAY 上で実行して、計算時間・速度などを調べた。実行には Cray ForTran コンパイラ CFT, CFT77 を使用した。

軌道計算に用いた電極モデルの電界計算条件は、電極表面分割数 $M = 167$ 、各分割区間内の部分積分点数 $N = 24$ である。この電界計算条件で、代表的な 1 本の電子軌道を計算したときの計算時間を図 2 に示す。IBM 3081K 上で 206 秒要した軌道計算は、CRAY 上で 57.3 秒で完了し、計算時間は 1/3.6 に減少した。スカラ計算コードに対する CRAY の性能は、IBM 3081K の 3.6 倍である。PERFORMANCE MONITOR で調べた計算速度は 10 Mflops であった。

図 2 に示した CRAY の計算時間の斜線部分は、電界計算に費やされた時間である。電界計算は、軌道計算時間全体の 98.2 % を占め、その時間は 56.3 秒である。残りの 1 秒が電極座標データの入力、軌道計算とその結果の出力に要した時間である。微分軌道方程式 (1) の数値積分に要した時間はわずか 10 msec であった。計算コードは一部並列演算(自動ベクトル化)されたところもあったが、自動ベクトル

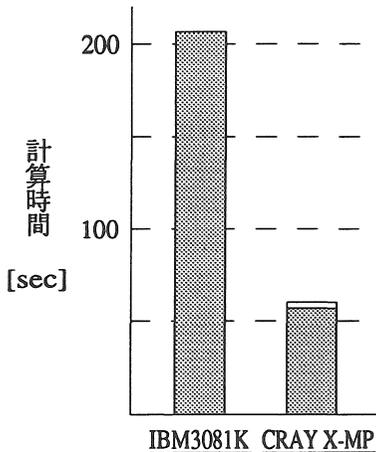


図2 オリジナル(スカラ)コードの計算時間

化を強制的に禁止しても、上記割合はほとんど変化しない(98.3%)。従って、汎用スカラ計算機上でも、軌道計算時間の 98% は電界計算に費やされていると考えてよい。

図 3 は、FLOW TRACE で調べた電界計算各サブルーチンの実行時間の割合(使用状況)である。この軌道計算では、電界計算が 587 回実行された。計算位置は毎回変化するので、被積分関数はすべて再計算される。被積分関数の計算回数は $M \times N \times 587$ 回、すなわち 235 万回を超える。このため、座標関数の計算(完全楕円積分の母数も含む)に 23.6 秒、第一種・第二種完全楕円積分に 22.5 秒、合計 46.1 秒費やされ、その時間は電界計算時間の 82% を占めている。

5. 電界計算の最適化と軌道計算時間

CRAY の並列演算処理機能を活用するように、電界計算コードを最適化して、軌道計算がどの程度高速化できるか調べた。ベクトル計算機は DO LOOP 内部に置かれた配列演算を解析して並列演算処理する機能をもつ。しかし、この並列演算にはいくつかの制約がある。LOOP 内部でサブルーチン・コールや逆方向分岐が存在すると並列処理は行われない。そこで、各関数計算、部分積分、全積分など機能別に分離していた電界計算サブルーチン群を 1 つに統合して、電界計算を 2 重 DO LOOP で処理するよう

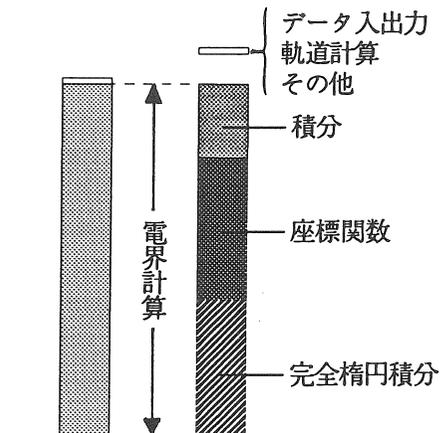


図3 計算時間の分析結果

にした。

被積分関数を構成する各関数（座標関数、母数、第一種、第二種完全楕円積分など）は、電極座標データ配列 ($M \times N$) と同じ型の配列に置き、各配列要素は要素位置に対応した電極座標データから計算するように工夫した。改良した電界計算コードが並列演算可能か否かは、性能分析ツール LOOP MARK を利用して調べた。

改良した電界計算コードを使用して、同じ電子軌道を計算し、FLOW TRACE と PERFORMANCE MONITOR で計算時間と速度を調べ、並列演算の効果を評価した。結果を図 4 に示す。電界計算の最適化を進めると、軌道計算時間は大幅に減少することがわかる。

VC-1 は 2 重 DO LOOP の内部 LOOP で部分積分、外部 LOOP で全積分を実行する通常の手順に従ったコードである。2 重 DO LOOP は、内部 LOOP だけが並列演算処理されるため、内部 LOOP の繰り返し回数 ($N < M$) が少ない VC-1 の並列演算効率は低い。このときの軌道計算時間は 34 秒であった。このうち電界計算に要した時間は約 33 秒である。

VC-2 は、上述の点を考慮して、繰り返し回数の多い LOOP を内部に置くように改良したコードである。この変更は、理論上、部分積分と全積分順序を入れ替えることに相当するが、電極座標データと同じ型の配列を用いて、各座標データに対応する関数をすべて計算する方法に置き換えていけば、変更は比較的容易である。VC-2 を使用すれば、軌道計算時間は 8.4 秒に減少する。計算時間から評価すると、VC-2 は VC-1 に比べて 4 倍以上の計算速度を与える。

VC-3 は VC-2 にさらにいくつかの改良を加えたコードである。計算アルゴリズム細部の改良で軌道計算時間はさらに 4.35 秒まで減少している。このとき電界計算に要した時間は 3.31 秒であった。VC-3 に加えた改良点は、以下のようなものがあげられる。第一種、第二種完全楕円積分の計算には級数展開近似式を使用した。母数の値で使用する式が異なるために、論理 IF 文による判別が必要である。第一種、第二種完全楕円積分それぞれに個別に使用されていた IF 文を一つにまとめ、各楕円積分を同時に計算できるようにし、さらに使用頻度が高い式を IF 文の直後に、低い式を ELSE の後に置いた。また、近似式に含まれていた余分な除算や () など

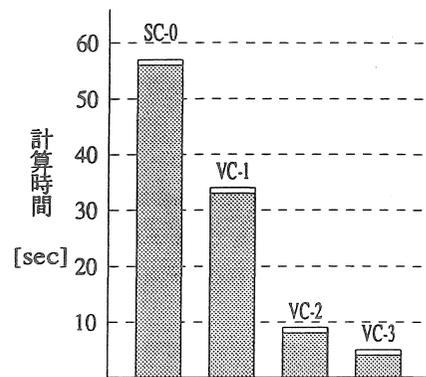


図 4 最適化の効果

除去した。

VC-3 の電界計算時間は、オリジナル (スカラ) コード SC-0 の $1/17$ 、VC-1 の $1/10$ 、VC-2 の $1/2.2$ である。また、VC-3 を使用したときの軌道計算時間は、SC-0 の $1/13$ 、VC-1 の $1/7.8$ 、VC-2 の $1/1.9$ に減少している。電界計算の最適化 (並列演算) の効果は大きいことが確かめられた。

6. 討論

最適化を進める中で、電界計算コードには大きな変更が加えられた。機能別サブルーチン群を統合する過程で、スカラ変数をベクトル変数に置換して、数値積分全体を並列演算処理できるようにした。各最適化過程の中で、入り込む可能性のある誤りを防止するために、計算精度の比較・検討も行った。電界・軌道計算計算結果に、差は認められなかった。

すでに述べたように、実行には CFT (V-1.15) と CFT77 (V-3.0) コンパイラを使用した。コンパイル時間は CFT で 2~3 秒、CFT77 で 8~10 秒であった。CFT に比べて、CFT77 が長いコンパイル時間を必要とするのは、並列演算の許容度が高く、スカラ演算の最適化も含めて多様なコード解析を実行しているためである。実際、オリジナルコード SC-0 での計算時間は、CFT77 で 57.3 秒であるのに対して、CFT では 60.7 秒であった。また、最適化を進める中でいくつかのコードを検討したが、CFT77 を使用すれば、CFT が受け付けられないような長い LOOP 長

をもつコードも並列演算可能であった。

最適化の過程で調べたいくつかのコードの計算速度 (Mflops 値) と計算時間を図 5 に示す。最も短い軌道計算時間 4.35 秒は、CFT で得られたもので、その計算速度は 88 Mflops であった。同じコードを CFT77 で実行すると、計算速度は 95 Mflops になるにもかかわらず、計算時間は 6.01 秒に増加した。これは、最小の計算時間、すなわち高い計算効率を与える最適化条件が各コンパイラで異なることを意味している。

また、完全楕円積分の計算を後述する算術幾何平均法に変更すると、CFT77 で計算速度は 103 Mflops になったが、軌道計算時間は 4.66 秒であった。この電界計算コードは LOOP 長が長くなることもあって、CFT では並列演算処理されない。LOOP を 2 つに分け、かつ並列演算できるように工夫すると、CFT で 105 Mflops、5.48 秒という結果を得た。この場合、CFT77 が短い計算時間を与えるが、CFT で得られた最小計算時間 (4.35 秒) にはおよばない。算術幾何平均法で高い Mflops 値が得られたのは、最適化のために演算が増加して、演算回数が実質的に増加したためである。異なる計算方法を比較する場合にも、計算時間の比較は意味をもつ。

多数の軌道計算結果を得るといふ実際の目的から見れば、計算時間が短く計算効率の高いコードを使用する方が有利であることは言うまでもない。従って、計算速度は実際に要した計算時間で比較・評価する方が良く、Mflops 値の比較・評価よりも実用上

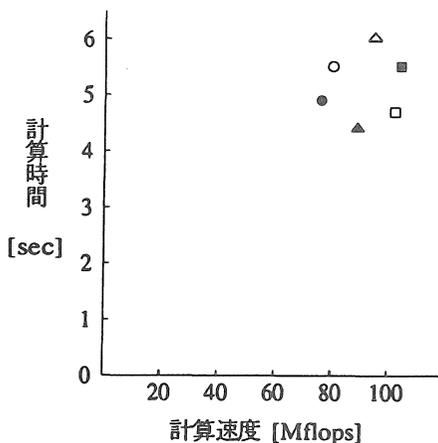


図 5 計算速度と時間

大切である。

計算速度 Mflops 値は、実行された浮動小数点演算回数を全計算時間で除算した値である。軌道計算では、電界計算用電極データの入力や軌道計算結果の出力に約 1 秒要するので、多数の軌道計算を一度に実行すれば、計算速度は増加する。最も短い計算時間を与えた電界計算コード VC-3 を使用して、200 本の軌道を一度に計算したとき、110 Mflops を越える計算速度を得た。計算時間は 11.6 分であった。異なる初期条件の電子軌道を多数計算する場合を想定して、計算時間を評価してみると、ここで述べた電界・軌道計算条件で、軌道を 1,000 本計算する場合、オリジナル (スカラ) コードでは 15.6 時間必要であるが、最適化したコードを使用すれば 56 分で完了する。電界計算を最適化する効果は大きい。

ベクトル計算機の実際の性能は、使用計算コードの構成とそのベクトル化率 (並列演算あるいは最適化の割合) に強く依存する。CRAY X-MP/14se は、ベクトル化率 70 ~ 80 % で 54 Mflops、90 % で 105 Mflops、100 % で 300 Mflops の理論性能をもつ。この性能は、計算機のハードウェア構成やその特性から評価した理論値であって、実際に使用する計算コードで達成される性能ではない。また、実際の計算コードで、ベクトル化率 100 % を実現することはできない。軌道計算で実際に確認した最大実行性能は 110 Mflops を越えていること、このときベクトル化率は 96 % に達することなどから、現状の最適化の程度は高いと判断している。

完全楕円積分の計算には、級数展開近似式のほかに算術幾何平均を繰り返す方法がある。この計算法を調べたところ、収束は速く、母数が 1 付近で大きく変化する第一種完全楕円積分の値も 7 回の繰り返して精度よく得られることがわかった。本来、算術幾何平均法には、収束判定を伴う逆方向分岐が使用されるので、並列演算には不向きと考えられるが、7 回の反復で十分な精度が得られるので、同じ式を 7 つ並べて順次収束するように工夫すれば、並列演算を妨げないようにできる。こうした改良で同じ計算結果・精度が得られることを確認している。

最適化のために、Timing Examples⁶⁾ リストを参考にしたが、最適化を進めるに伴い、効果的な計算式の記述形式が存在するか否かが問題になった。たとえば、乗算より除算を使用した方が計算時間が短くなるような場合があったり、並列演算効率を向上

しようとして配列演算を多用すると逆に計算時間が長くなったり、多数の()を使用した式を展開して計算速度を比較しようとする、LOOP 長が長くなって並列演算不能となることもあった。こうした点に答える資料は、上記リストには見られない。図 5 に示した計算速度と時間の関係からいえば、最適化がある程度進めば、計算式のわずかな変更で大きな効果は期待できず、通常の Fortran coding で高い演算効率が得られるようにコンパイルされていると考えることもできる。しかし、長時間にわたって多量の計算を実行するためには、より効率の高い計算コードが望まれるので、使用するベクトル計算機に対して効率のよい記述形式・計算方式の有無について、詳細な多くの情報が提供されていることが望ましい。

より多くの軌道計算を実施するために、使用計算コードの最適化と性能評価は重要である。他の最適化手法の検討も含め、改良は今後も引き続き進めて行く予定である。すでに、現状の軌道計算コードを使用して電子ビーム密度分布を解析する試みも一部進めているが、これらの結果は別の機会に逐次報告して行きたい。

7. おわりに

電界計算に表面電荷法を使用した軌道計算コードをベクトル計算機 CRAY X-MP/14se 上で実行して、電界計算の最適化が軌道計算時間に与える効果を調べた。電界計算を最適化すれば、計算精度を犠牲にすることなく、軌道計算時間を大幅に削減できる。

いくつかの改良点とその効果、計算時間と速度について述べた。

参考文献

- 1) Rauh H: Ein Näherungsverfahren zur Berechnung rotationssymmetrischer elektrostatischer Felder mit beliebigen Randbedingungen und seine Anwendung auf einen Elektronenstrahlerzeuger mit Spitzenkathode, *Z. Naturforsch.*, Bd.26a, 1667-1675, 1972
- 2) Ozaki K, Ohye T, Tamura N and Uchikawa Y: Computation of Field Distribution on the Emitter Tip Using the Surface Charge Method, *J. Electron Microsc.*, Vol.30, 281-291, 1981
- 3) Harting E and Read FH: *Electrostatic Lenses*, 32-40, Elsevier Scientific Publishing Co., (Amsterdam) 1976
- 4) 飯吉 僚, 竹松英夫: CRAY X-MP 上での電子軌道計算, 愛知工業大学研究報告, No.24B, 21-27, 1989
- 5) Bulirsh R and Stoer J: Numerical Treatment of Ordinary Differential Equations by Extrapolation Methods, *Numerische Math.*, Vol.8, 1-13, 1966
- 6) Cray Reserch Inc.: Training Workbook for CFT77 on CRAY X-MP and CRAY Y-MP Computer Systems, Cray Reserch Inc., Training Dept., June, 1988

(受理 平成 4 年 3 月 20 日)