

バウンダリ フィット法のスーパーコンピュータへの適用

Application of Boundary-Fit Technique to Supercomputers

高性能な新製品の開発のためには、複雑で大規模、高速な科学技術計算が必要である。そのためには、スーパーコンピュータだけでなく高度なシミュレーション技術が必ず(須)となる。この要求にこたえるため、従来航空機の流体解析に使われていた複雑形状を取り扱えるバウンダリ フィット法を改良、発展させて大規模科学技術計算をHITAC S-810スーパーコンピュータで高速で行えるようにした。

本稿は、バウンダリ フィット法による大規模計算、高速化の実現とその手法を、カラーブラウン管の電子軌道解析に適用した例について述べる。

青井秀樹* Hideki Aoi
小割健一** Ken'ichi Kowari
宮崎正志*** Masashi Miyazaki
三木一克**** Kazuyoshi Miki

1 緒 言

新製品の早期開発、従来製品の性能向上を短期間で行うためには、高度のシミュレーションを高速度で実施できるスーパーコンピュータが有用である。またスーパーコンピュータに適用できる解析手法の開発及びその手法のプログラム化も同様に重要である。シミュレーションで取り扱う形状もますます複雑になってきており、複雑形状を取り扱えるBoundary-Fitted Coordinates Transformation Technique¹⁾(以下、バウンダリ フィット法と言う。)は、今後その適用範囲を広げるものと考えられる。

そこで流体解析、電磁場解析などの複雑形状を取り扱うため、バウンダリ フィット法に基づいた数値格子生成プログラムGRID-3D及びこれらの物理現象の基礎となるポテンシャル場を解析するプログラムPOISSONをスーパーコンピュータHITAC S-810(以下、S-810と略す。)上で高速計算できるようにした。

以下本論文では、バウンダリ フィット法の概要、GRID-3Dコード及びPOISSONコードの高速化について述べ、更にこれらのプログラムをカラーブラウン管の電子銃内の電子軌道解析に適用した例を示すことによって、新解析手法がスーパーコンピュータで有用であることを明らかにする。

2 バウンダリ フィット法の概要とその応用

2.1 バウンダリ フィット法の概要

電子計算機により連続系の物理現象を数値的に解析する数値シミュレーションでは、流れ場、応力、ひずみ場、電磁場などの場を記述する偏微分方程式を解析領域内にとられた多数の座標格子点で離散化し、連立一次方程式又は固有値問題の計算に帰着させる方法が多く用いられている。この場合、数値解の精度、安定性、収束性の観点から、離散化に際して、

- (1) 境界形状を正確に取り扱うこと。
- (2) 物理量が大きく変化する領域に格子点を集中すること。
- (3) 解析領域全体にわたって、格子点を滑らかに配置すること。
- (4) 隣接する格子点間の相対関係(計算順序、相対位置など)を最適化すること。

といった条件を満たすことが必要となる。特に工学上の問題では、粘性境界層、応力集中といったように、境界近傍にこの配の大きな領域が存在し、場全体の特性を支配するため、上記(1)、(2)の条件をいかに満たすかが数値解法上重要となる。

このため、差分法では直方体領域には直交座標格子、円筒

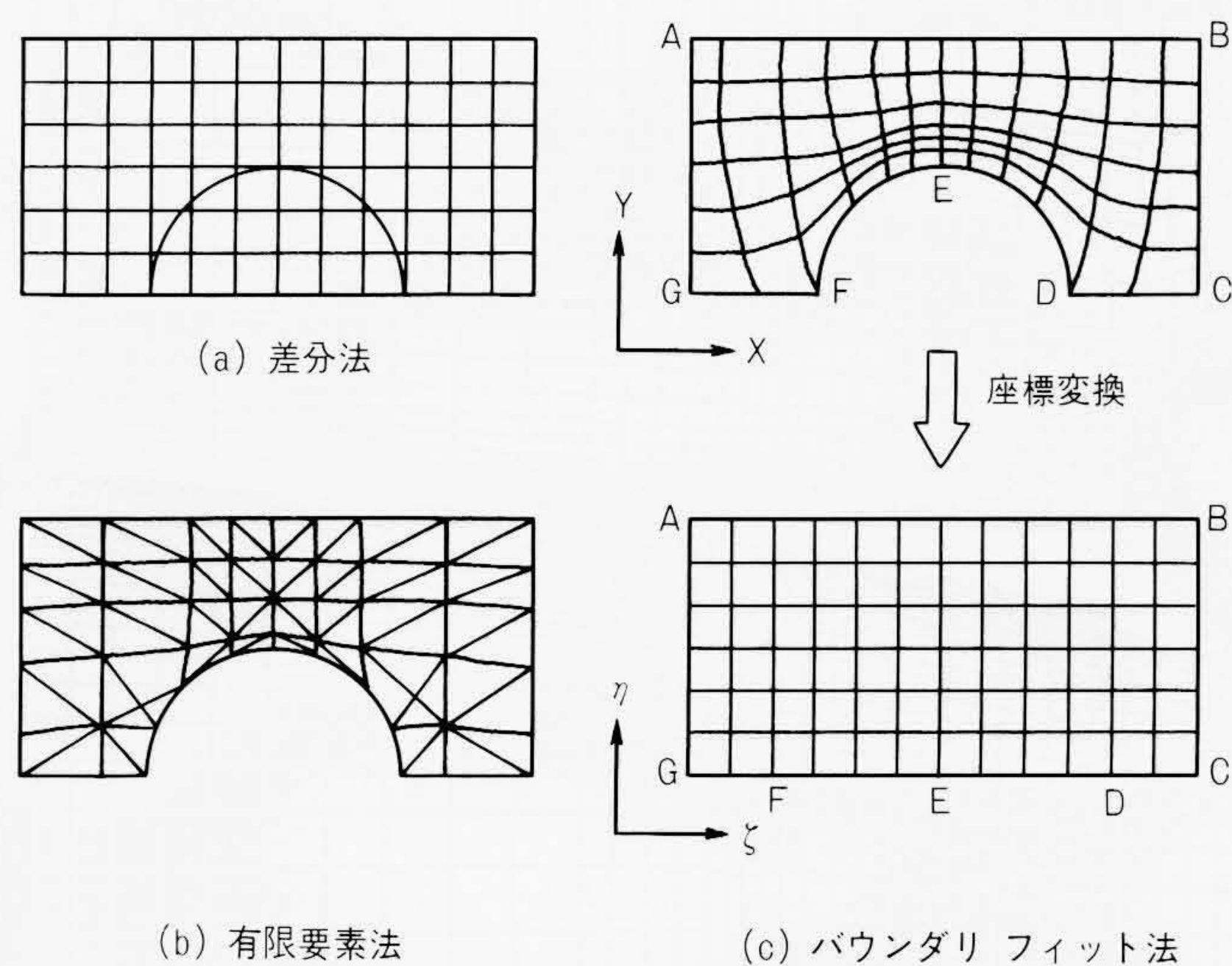


図1 座標格子の比較 差分法、有限要素法及びバウンダリ フィット法の座標格子の比較を示したものである。

* 日立製作所大森ソフトウェア工場 理学博士 ** 日立コンピュータコンサルタント株式会社 理学博士 *** 日立製作所茂原工場
**** 日立製作所エネルギー研究所 工学博士

領域には円筒座標格子といったように、解析領域の幾何形状に沿った座標格子が適用されている。

しかし、一般の複雑な形状に対しては、図1(a)に示すように座標格子が境界と一致しないため、内外挿により境界条件を近似する方法が採られ、数値誤差を生じるという問題がある。一方、座標格子点を任意の空間に配置できる有限要素法では、同図(b)に示すように、複雑な境界形状を正確に取り扱うことができるが、特に3次元領域の場合、上記(2)~(4)項の条件を満たす座標格子を作成するには多くの経験と作業量を必要とする。

バウンダリ フィット法は、実空間上の解析領域を直交座標から成る形状の簡単な領域に座標変換し、写像空間で物理現象を支配する偏微分方程式を解く手法である〔図1(c)参照〕。

この方法では写像空間から実空間への逆座標変換によって、境界形状に沿った曲線座標格子を自動的に生成することができ、更に解析領域全体にわたって座標格子の配置を制御することができるため、上述した(1)~(4)項の条件を容易に満たすことができる。本手法は、1970年代の後半に、航空機の流体(外部流れ)解析法として開発され、その後一般の熱流体機器内の流体(内部流れ)解析のほか電磁場解析、構造解析など、流体以外の工学分野に応用範囲を広げつつある²⁾。

2.2 バウンダリ フィット法の応用

(1) アメリカにおける研究の現状

バウンダリ フィット法を航空機周りの流体解析に使用した座標格子の例³⁾を図2に示す。機体及び主翼の形状に沿った座

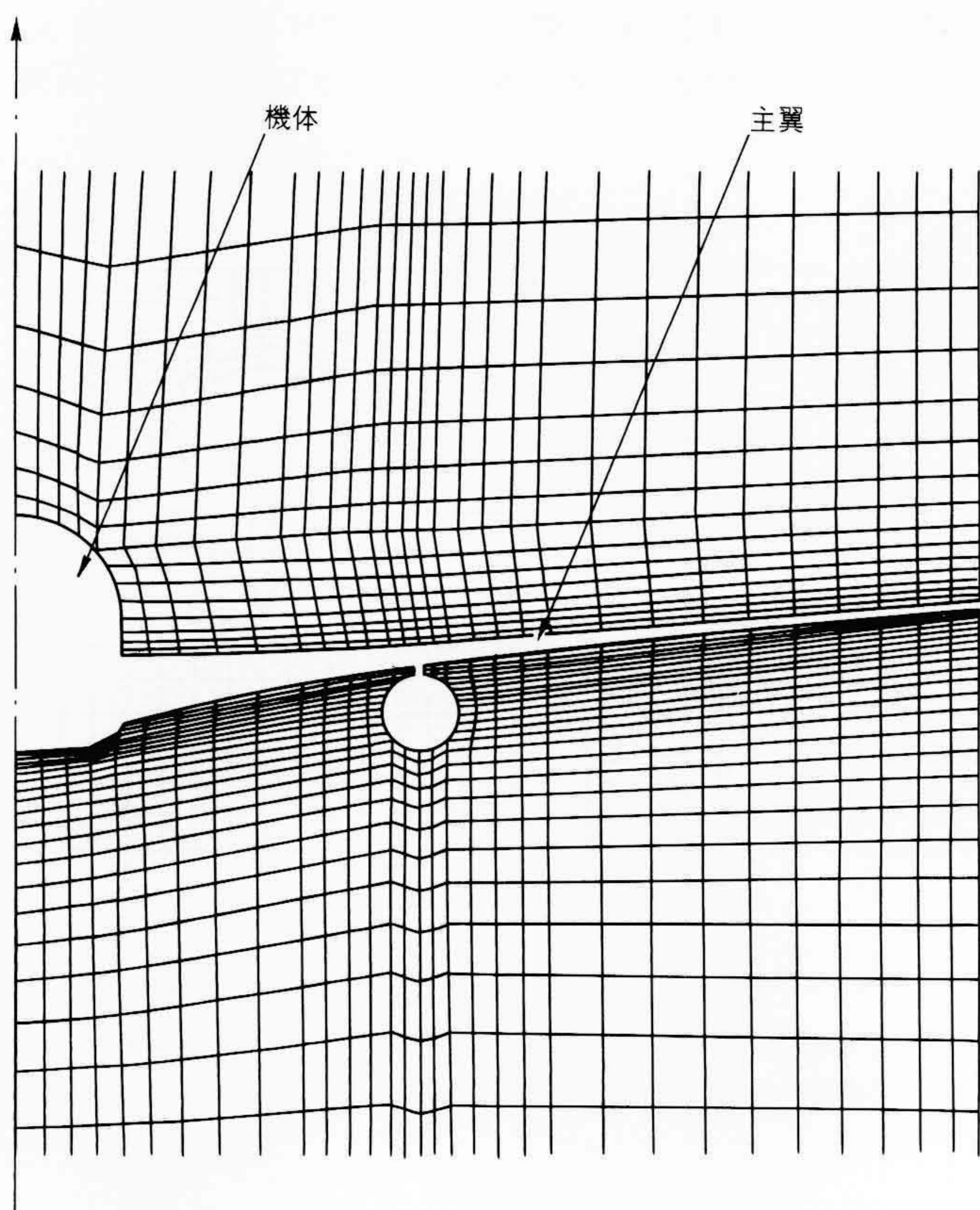


図2 航空機周りの流体解析への適用例³⁾ バウンダリ フィット法を航空機周りの流体解析に使用した座標格子の例を示す。

標格子を使用し、また主翼近傍で座標格子を集中することによって、粘性境界層での解析精度の向上を図っている。本例のように、格子を集中化した領域から体系全体にわたって座標格子の間隔を連続的に変化することができる点が、バウンダリ フィット法の特徴の一つである。

航空機以外の流体解析では、ガスタービン、原子炉燃料集合体などの内部流れの解析に広く適用されている。また複雑な境界形状を持つ海洋及び河川の流れや、自由液面挙動への適用例もある³⁾。図3は2次元の自由液面の挙動を重ねて表示したもので、時間とともに液が発達していく様子が分かる。この例では、物理現象を解いて得られた液面形状を境界条件として、液面に沿った曲線座標格子を自動生成し、再び物理現象を解析するといった反復計算が使用されている。

(2) 工学への応用(当社の応用例)

上記したように、バウンダリ フィット法は各種工学分野へ応用されつつある。日立製作所では図4に示すような分野への応用を進めている。

(3) 六面体分割法

各種の製品では、製品内部の3次元的な物理現象を解析することが必要とされるが、製品形状は一般に、複数の基本立体から構造された複合立体形状をしている場合が多い。この場合3次元で解析し、実空間上の複合立体を写像空間上の直方体に座標変換する方法が考えられる。しかしこの場合、境界条件として直方体の六つの表面の複合体表面を対応させることが難しくはん(汎)用性に欠ける。また、生成された曲線座標格子の粗密及びひずみが大きくなる可能性がある。

この問題を解析するため日立製作所では六面体分割法を開発した⁴⁾。図5に示すように3次元領域を複数の部分領域(六面体)に分割し、個々の六面体ごとにバウンダリ フィット法を適用する。その際、六面体間に重複領域を設定し、一方の領域の内部格子を他方の領域の境界上の格子に一致させる。六面体内部の座標格子は、重複領域にある隣接六面体の内部格子を境界条件として、3次元の座標変換方程式を解いて求

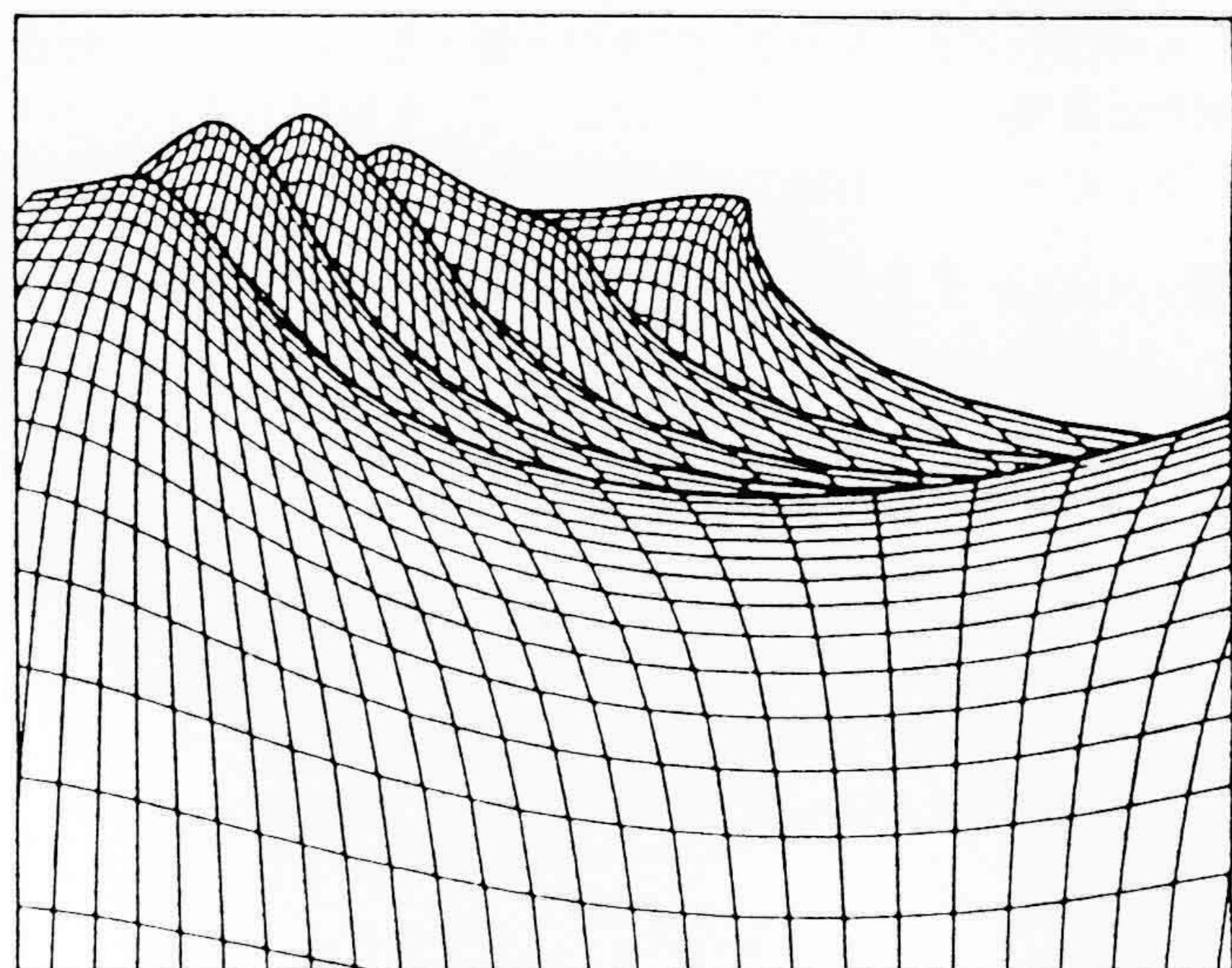


図3 自由液面挙動解析への適用例³⁾ バウンダリ フィット法を2次元の自由液面挙動に適用したものである。

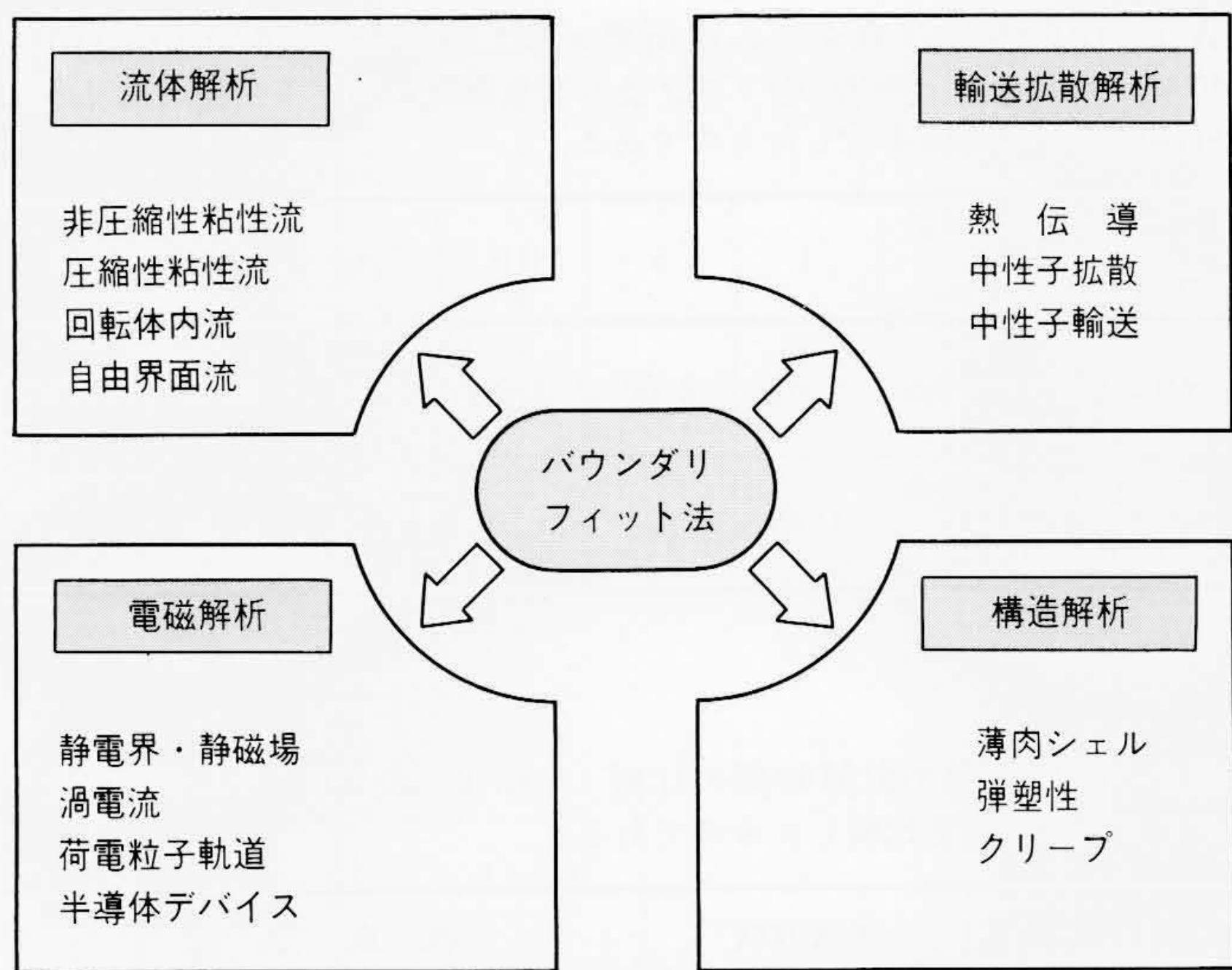


図4 バウンダリ フィット法の適用分野 日立製作所でのバウンダリ フィット法の適用分野を示したものである。

める。これにより、六面体間の境界で座標格子線の一次微分連続性が保たれ、滑らかな格子が生成できる。六面体分割法は3次元曲線座標格子生成法として広範囲の分野に適用できる。

3 数値格子生成プログラム(GRID-3D)の高速化

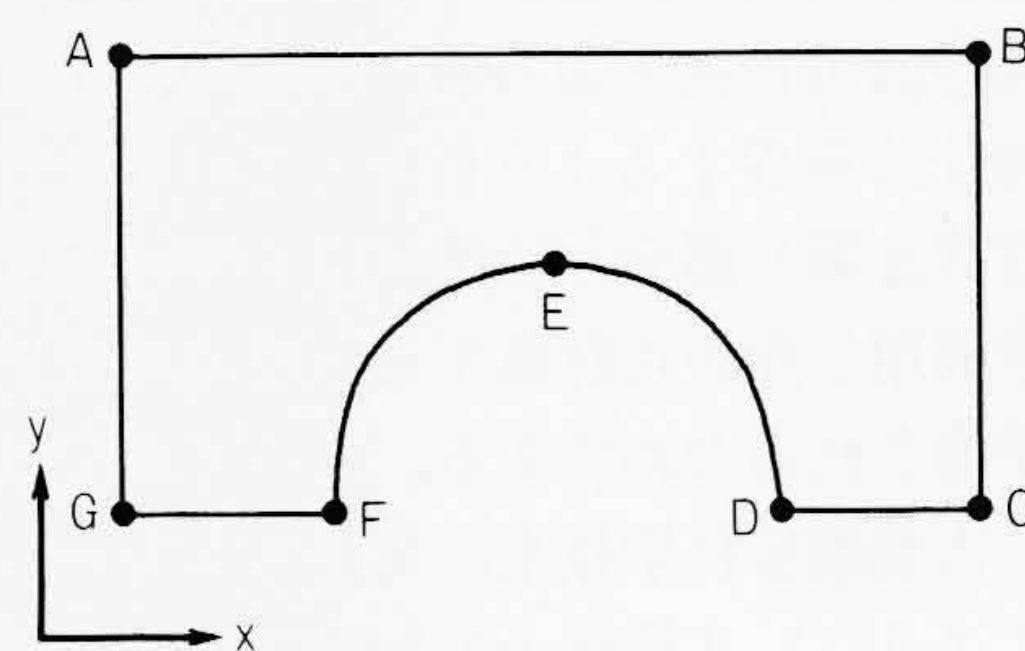
3.1 GRID-3Dプログラムの概要

バウンダリ フィット曲線座標変換法の計算コードGRID-3Dは、任意形状の3次元体系の境界に沿って曲線座標系を自動的に生成し、これを立方格子から成る計算体系に座標変換するものである。図6にGRID-3Dコードによる数値格子生成の概略を示す。

3.2 GRID-3Dの改良

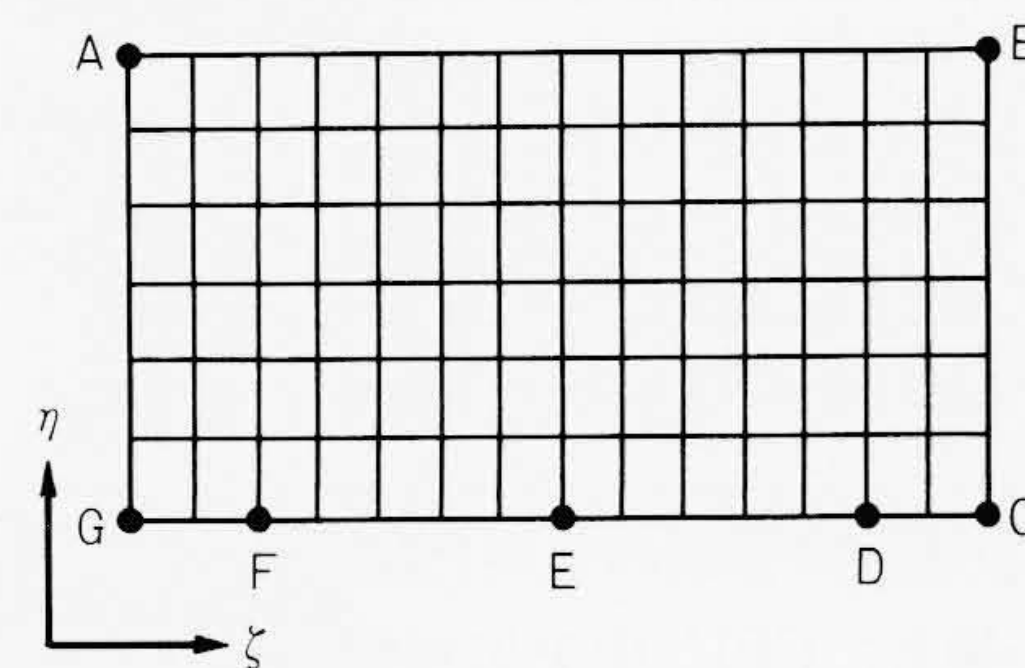
(1) 補助記憶装置の利用(ステップ1)

処理の概略



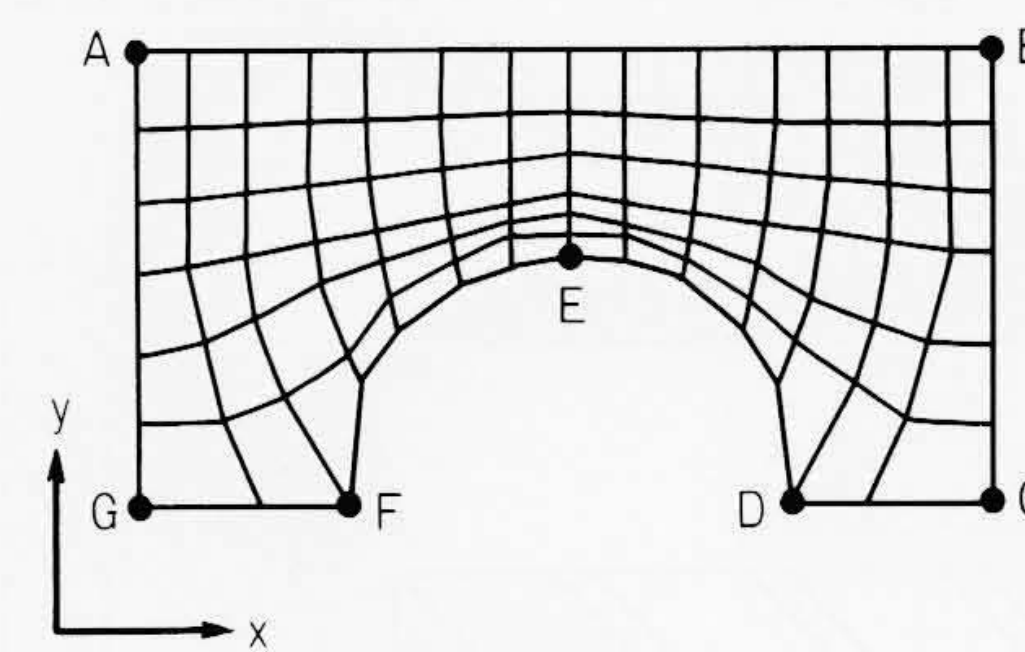
(a) 実平面

解析対象の形状データ
の入力(代表点)
(境界上のデータ設定)



(b) 写像平面

写像平面での内部格子
点の生成

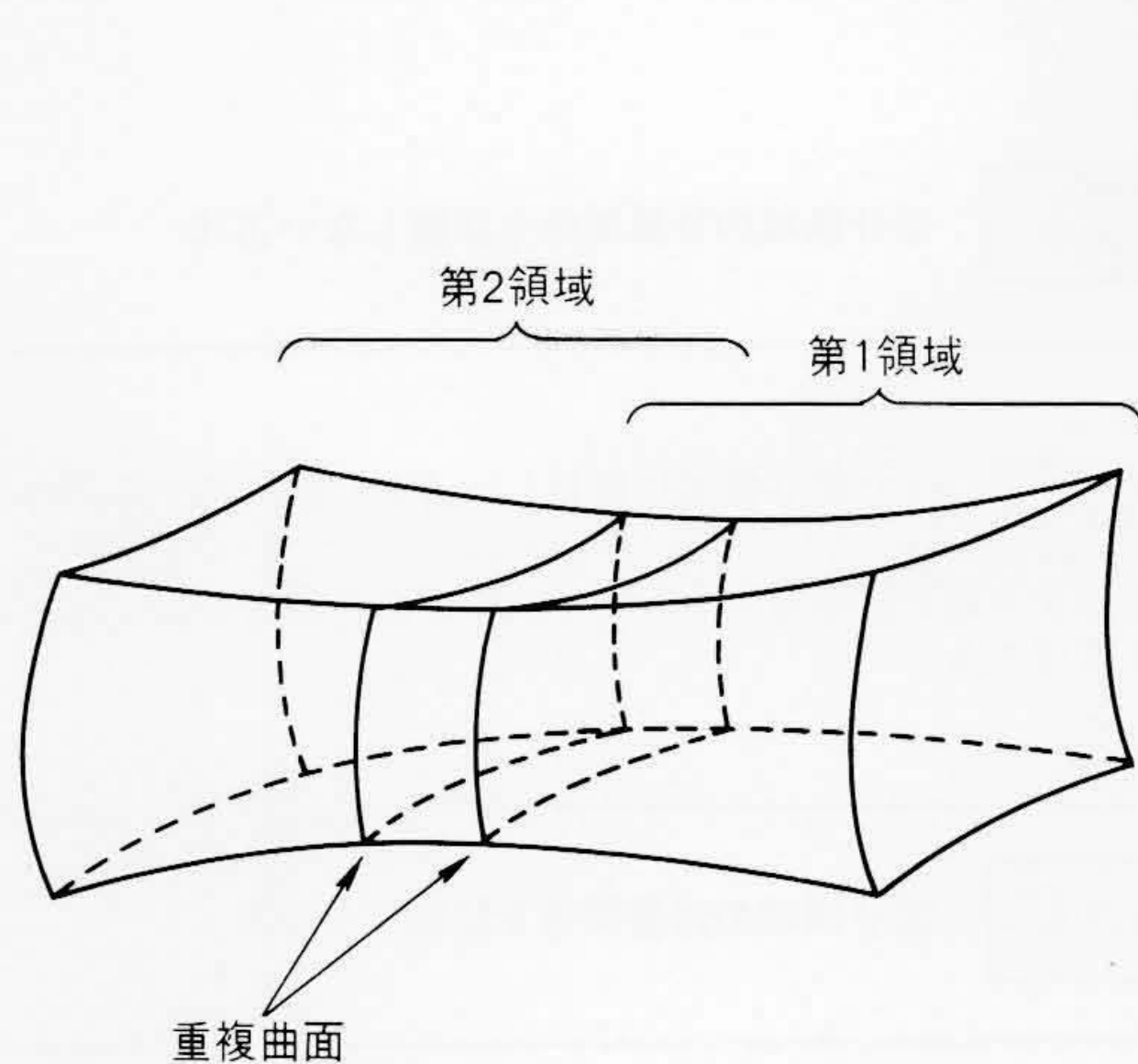


(c) 実平面

数値格子生成

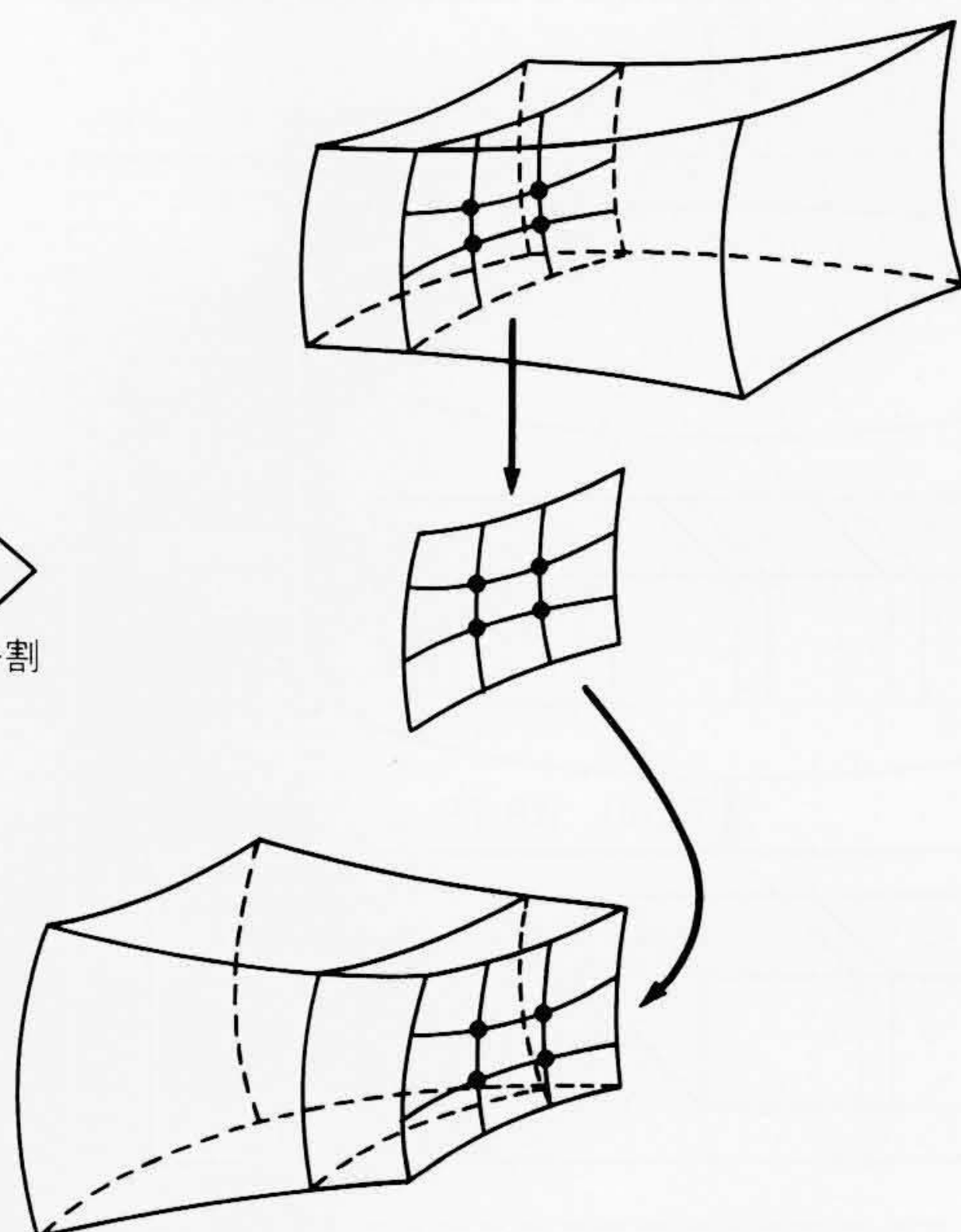
(写像平面と実平面の
内部格子点を対応づ
ける偏微分方程式を
解く。)

図6 GRID-3Dプログラムの機能(数値格子生成) GRID-3Dコードの数値格子生成機能について説明したものである。



(a) 解析領域全体

六面体分割



(b) 分割領域

第1領域の
計算

内部格子の
隣接領域への
移動

第2領域の
計算

図5 六面体分割法 六面体分割法を説明したものである。

GRID-3Dのオリジナル版は、六面体分割法により解析対象を部分領域に分け、数値格子生成の計算ができるようになっている。しかし、図7に示すように実平面の格子座標(X, Y, Z)は全領域分主記憶装置上に確保するようになっている。この理由は、連立一次方程式を解く部分が反復解法を使っているため、補助記憶装置を利用しながら計算すると経過時間が非常に長くなることが予想されるためである。この方法ではメモリ上の制限があり、大規模な科学技術計算はできない。そのため図7下段に示すように、2領域分の配列で補助記憶装置(拡張記憶装置又は磁気ディスク装置)を利用して計算できるように改良した。

表1に、改良前後の所要主記憶装置容量と分割領域数の関係を示す。改良後では分割領域数に関係なく、主記憶装置は1.75Mバイトしか使用していないことが分かる。したがって、メモリ上の制限はない。

(2) アルゴリズムの改良(ステップ2)

S-810/20による性能測定を表2に示してあるが、上記の改良では、I/O(入出力)回数が部分領域の二乗に比例するため、解析対象の分割数が多い場合、CPU(中央処理装置)時間が増加するという欠点がある(CPU: 8.35秒→22.5秒)。そこでアルゴリズムを変更して、I/O回数は部分領域数に比例するように改良した。旧アルゴリズムと新アルゴリズムの概念を図8

表1 GRID-3Dプログラムの所要メモリと部分領域数との関係(単位Mバイト) GRID-3Dプログラム改良前後に対する所要メモリと部分領域数との関係を示したものである。

部分領域数 プログラム	1	5	10	20	30	50
オリジナルプログラム	1.03	2.00	3.22	5.97	8.93	14.90
補助記憶装置適用プログラム	1.75	1.75	1.75	1.75	1.75	1.75

表2 改良前後の計算時間の比較 GRID-3Dプログラム改良前後に対する計算時間を比較したものである。

	従来方式**		改良方法			
アルゴリズム	インコア版		ブロック版			
補助記憶装置	—		拡張記憶		磁気ディスク	
計算時間(s)*	CPU時間	経過時間	CPU時間	経過時間	CPU時間	経過時間
ステップ1	8.35	26.1	22.5	22.7	85.4	2,940
ステップ2	—	—	9.93	10.0	23.7	720

注：* データの大きさ(メッシュ数): 21×21×5×12
** スカラー計算の場合、従来方式では、CPU時間、経過時間は各116.1秒、135.2秒である。

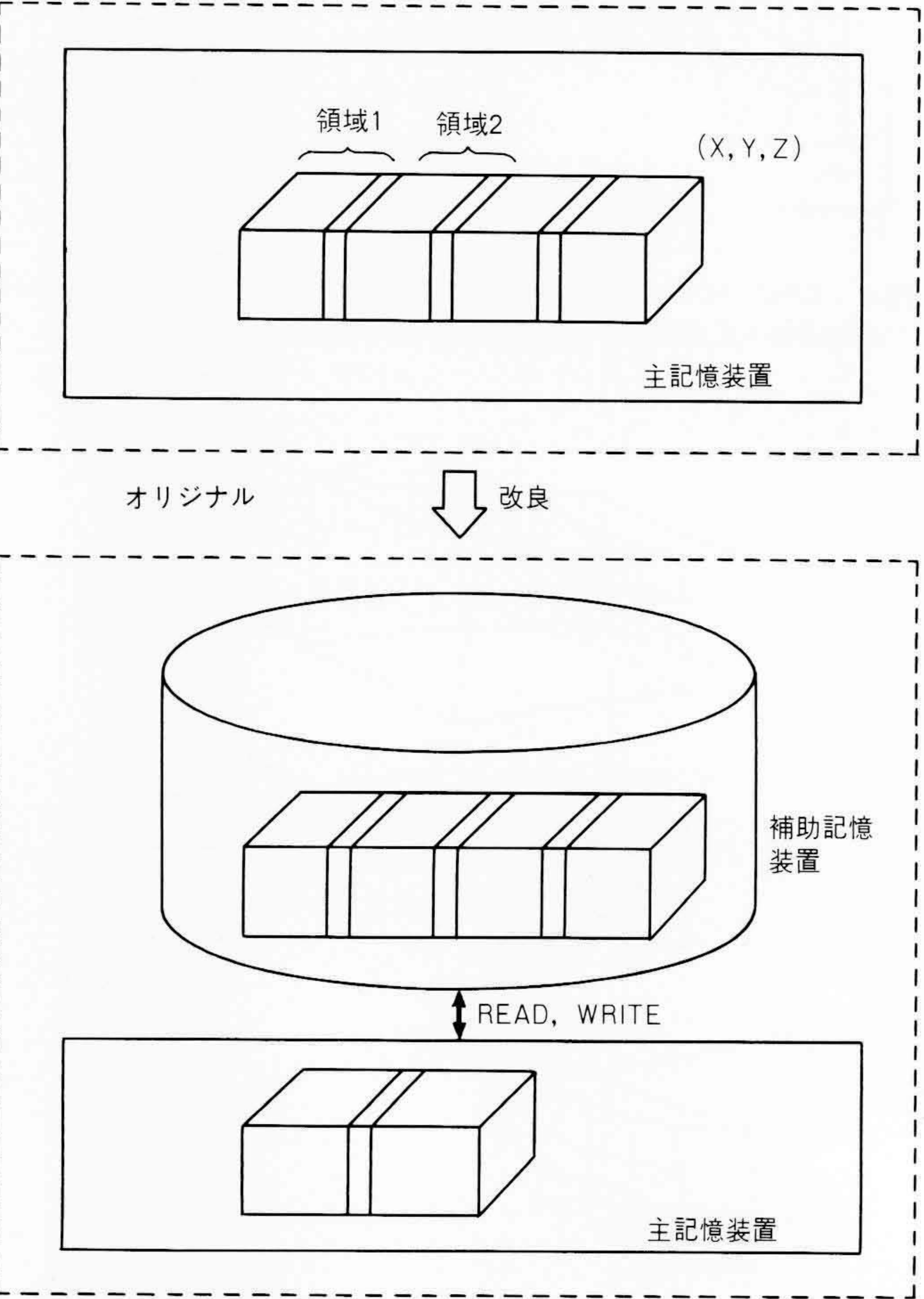


図7 改良内容の概要 メモリネックをなくすためのGRID-3Dコード改良内容を示したものである。

に示す。
3.3 S-810/20での性能測定
(1) 測定モデル

上記の改良(ステップ1, ステップ2)を行ったプログラムの性能をS-810/20を用いて測定した。性能測定用のデータは図9に示すドーナツ形状のモデルを用い、分割数を12としメッシュを21×21×5とした。

旧アルゴリズム

：部分領域の位置関係を認識しない方法

(i) 計算が終わった部分領域に着目し、それに面で接する部分領域に座標値を移す。

(ii) 着目する部分領域番号を一つずつ下げ、1番目の部分領域まで(i)を実行する。

新アルゴリズム

：部分領域の位置関係を認識する方法

計算が終わった部分領域に着目し、それに面、辺及び頂点で接する部分領域に座標値を移す。

図8 新旧アルゴリズムの比較 旧アルゴリズムではCPU時間がかかるため新アルゴリズムを採用した。本図は両アルゴリズムを比較したものである。

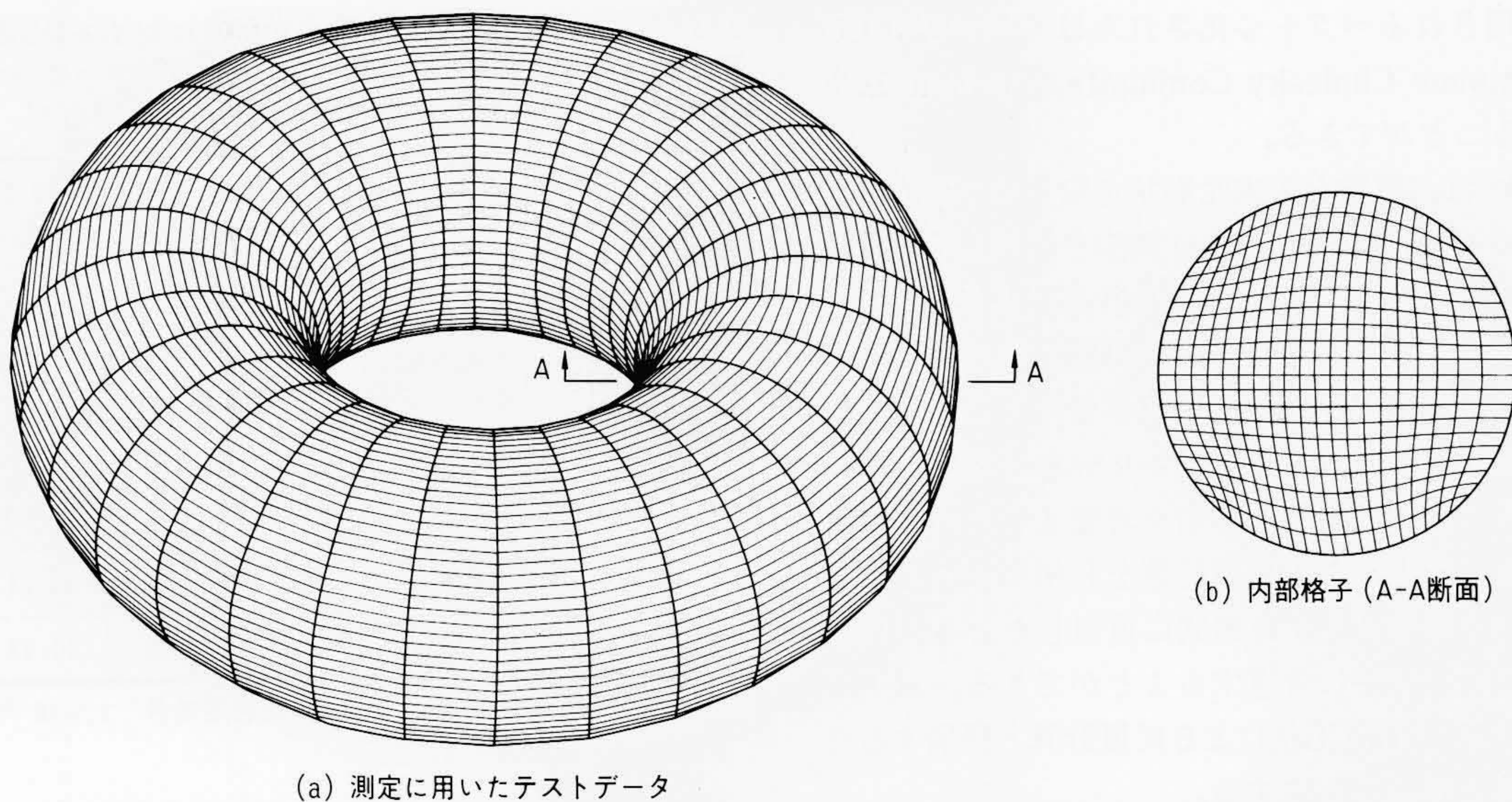


図9 測定に用いたテストデータと内部格子 改良されたGRID-3Dの性能を見るためのテストデータである。

(2) 性能測定

性能測定は従来のもの(インコア版)と、改良したもの(ブロック版)について行い、改良したものについては拡張記憶と磁気ディスクの両者について、ステップ1、ステップ2の段階で測定した。測定結果を表2に示す。同表から以下のことが分かる。

(a) 拡張記憶使用の場合

ステップ1の改良では、I/Oの回数が多いためCPU時間は増加している。ステップ2の改良によりCPU時間、経過時間ともステップ1より改善されている。インコア版と比較するとCPU時間は同程度、経過時間は速くなっている。

(b) 磁気ディスク使用の場合

ステップ1では、CPU時間及び経過時間が大幅に増加しているが、ステップ2ではステップ1に比べてCPU時間、経過時間の両方について改善されている。

以上からS-810のように拡張記憶装置を使用できる場合は、メモリの制限がないためインコア版では計算できないような大規模科学計算を、インコア版とほぼ同等の計算速度で計算できる。したがって、S-810などスーパーコンピュータに最適な手法である。

また磁気ディスクを使用する場合は、CPU時間、経過時間はかかるがメモリの制限はないため大規模計算ができる。

4 ポテンシャル場解析プログラム(POISSON-3D)の高速化

4.1 POISSON-3Dの概要

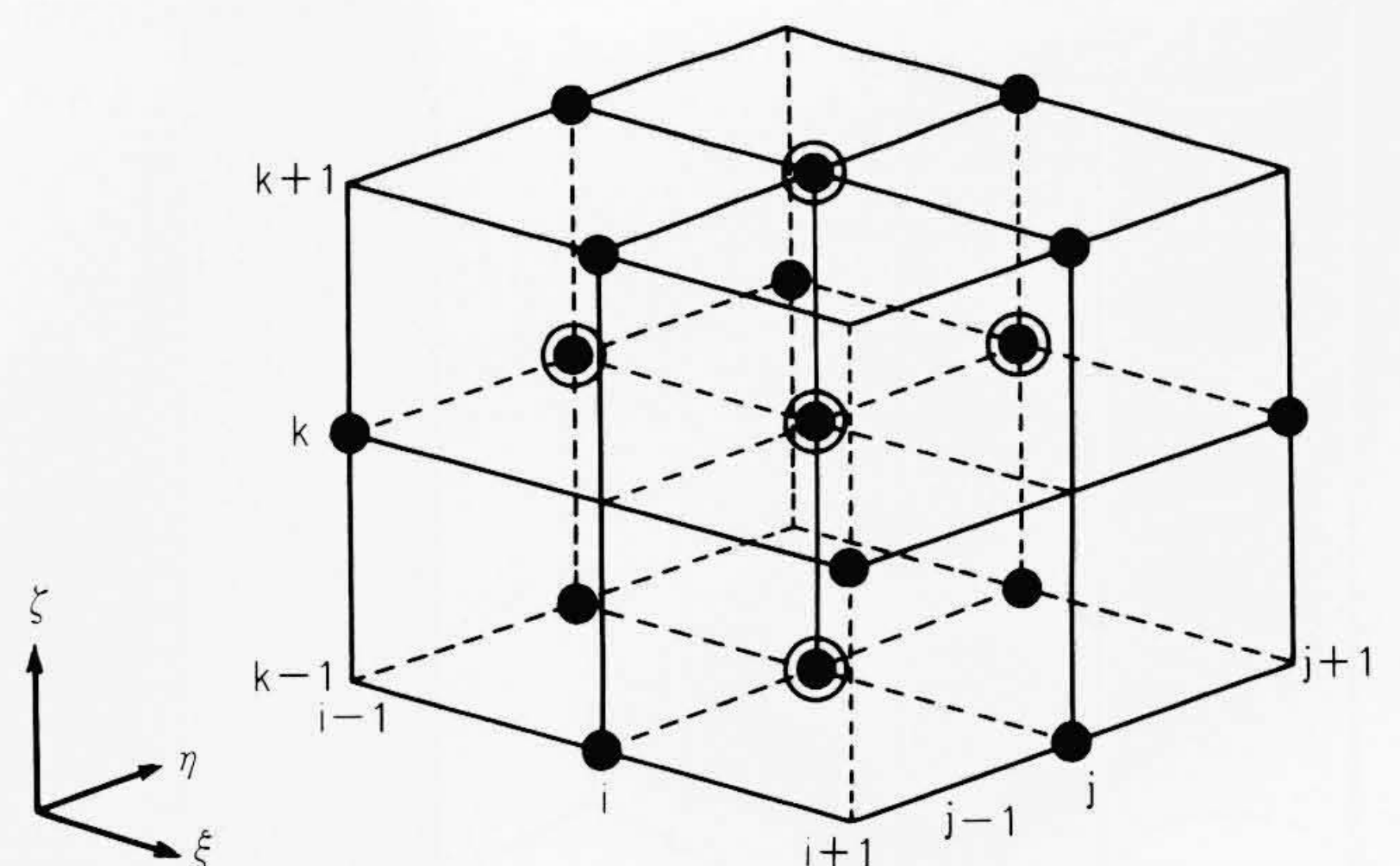
静電場、定常熱伝導、非圧縮性非粘性流れなどは、いずれもポアソン方程式の解であるスカラーポテンシャルによって記述することができ、ポアソン方程式を数値的に解く計算プログラムは、工学の多くの分野で設計用の手段として必要となっている。

3次元の場合、ポアソン方程式は次式で表すことができる。

$$\frac{\partial}{\partial x} \lambda \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \lambda \frac{\partial \phi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \lambda \frac{\partial \phi}{\partial z} = S \quad \dots\dots\dots(1)$$

ここで、 ϕ はスカラーポテンシャル、 λ は空間依存の物性定数、 S はソース項である。図10に、上式を離散化したときに関連する格子点を示す。直交座標格子を使用する差分法では、3次元の場合、●印で示した7点の階差式となるのに対し、曲線座標格子を使用するバウンダリ フィット法では●印の12点を加えた19点階差式となる。19点階差式を使用すると、連立一次方程式の係数行列が非対称となり、かつ非零成分が増すため、計算時間及びメモリ上好ましくない。このため同図に●で示した12個の格子点での ϕ の値を、反復計算の1回前の値を用いて既知項として取り扱い、差分法と同じ7点階差式を利用する方法を採用した。

これにより、係数行列は対称な規則的スパース行列となり、



注：● 7点階差式での計算点
●, ● 19点階差式での計算点

図10 写像空間における差分点 3次元ポアソン方程式を差分法及びバウンダリ フィット法で離散化した場合の格子点を示す。

差分法などに使用されるベクトル化されたはん用のMICCG (Modified Incomplete Cholesky Conjugate Gradient) 法をそのまま使用することができる。

POISSON-3Dでは、複雑な3次元形状を取り扱うために、GRID-3Dプログラムと同様、六面体分割法を使用している。この場合、分割された部分領域(六面体)を計算の基本として、六面体のポテンシャル分布を計算する。隣接した六面体との重複領域でのポテンシャルはDirichlet境界条件として取り扱う。境界条件は隣接六面体のポテンシャル分布の変化に伴って変化するため、六面体間の相互作用を考慮するための反復計算が必要となる。一方、この反復計算を利用することによって、前述した19点階差式を7点差式に近似したときの12個の格子点からの寄与を同時に考慮することができる。以下では、上記の反復計算をMICCG法による反復計算と区別するため、外部反復計算と呼ぶことにする。

4.2 S-810/20での性能評価

六面体分割法で採用している部分構造反復の計算性能を評価するため、図11に示す円筒体系内のポテンシャル分布を計算した。本例では、曲線座標格子の非直交性の影響を考慮するため、円筒上端面に示すような格子を使用した。また、六面体の相互作用を考慮するため円筒全体の座標格子数を一定として、円筒を軸方向に複数の六面体に分割した。

表3に、領域分割数と計算時間、メモリ容量との関係を示す。

六面体分割法では、体系全体の情報は外部記憶(本例では、拡張記憶を使用)に保存し、着目している六面体の情報だけを主記憶に移す方法を採用している。このため、領域分割数の増加とともに主記憶容量は減少し、6分割の場合は、分割しない場合に比べて約1/4となる。一方、計算時間は、6分割の場合でも、S-810のベクトル計算で2.2倍、スカラー計算で1.6倍程度の増加にとどまる。これは、分割数の増加に伴って六面

表3 円筒体系内のポテンシャル計算に対するPOISSON-3Dの計算性能 円筒体系内のポテンシャル計算について、六面体分割数とPOISSON-3Dの計算時間との関係を示したものである。

六面体分割数	六面体当たりの格子数 I×J×K	主記憶容量 (相対比)	ベクトル化率 (%)	CPUタイム(s)		
				ベクトル計算	スカラー計算	スカラー/ベクトル
1	15×15×62	1.0	98.7	1.78	19.04	10.7
2	15×15×32	0.54	98.4	2.49	26.47	10.6
3	15×15×22	0.40	98.1	2.88	27.33	9.5
4	15×15×17	0.33	97.8	3.20	28.50	8.9
5	15×15×14	0.29	97.4	3.49	29.21	8.4
6	15×15×12	0.26	97.1	3.93	30.78	7.8

注：* 座標格子総数=13,950, 収束判定条件 $\epsilon \leq 10^{-10}$

体間の反復回数(外部反復回数)が増加するが、1個の六面体に要する計算時間が格子数の減少に伴って短縮され、体系全体に要する計算時間の大幅な増加を抑えていることによる。なお、スカラー計算に比べて、ベクトル計算のほうが分割に伴う計算時間の増加割合が大きいのは、分割数の増加により六面体当たりの格子数が減少し、ベクトル計算による加速率が低下することに起因する。

5 カラーブラウン管電子銃の電子軌道解析

カラーブラウン管、電子顕微鏡、粒子加速器、半導体製造用あるいは表面改質用のイオン打込装置などでは、電界及び磁界により、荷電粒子(電子、イオンなど)を加速・制御し、集中された一様なビームを標的に入射する必要がある。そのビームフォーカス特性を定量的に評価するために、3次元電磁界中の荷電粒子の高精度な軌道解析が要求される。以下で

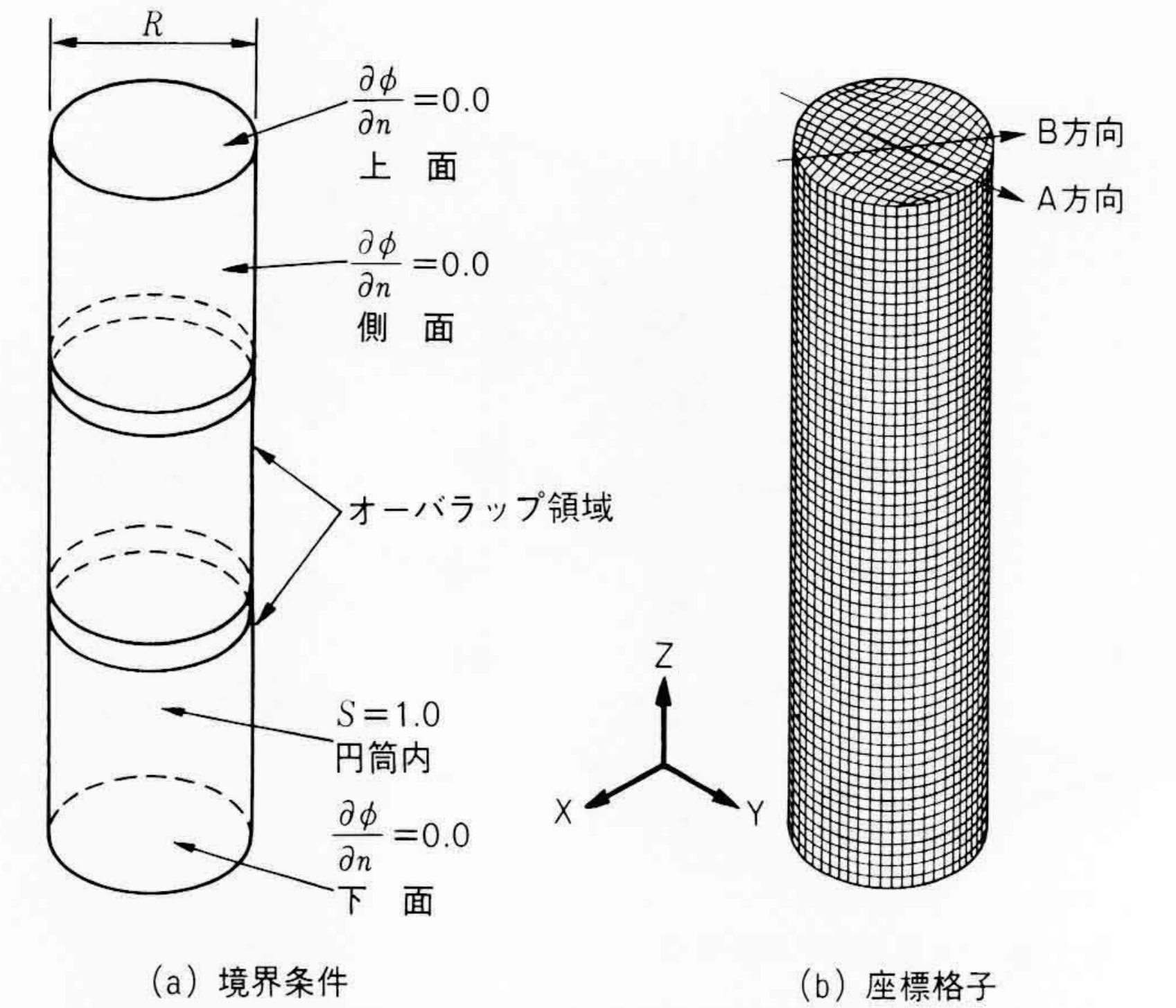


図11 円筒体系内の電位計算用境界条件及び座標格子 六面体分割法で採用している部分構造反復の計算性能を評価するため、図に示すような円筒体系内でポテンシャル分布を計算する。

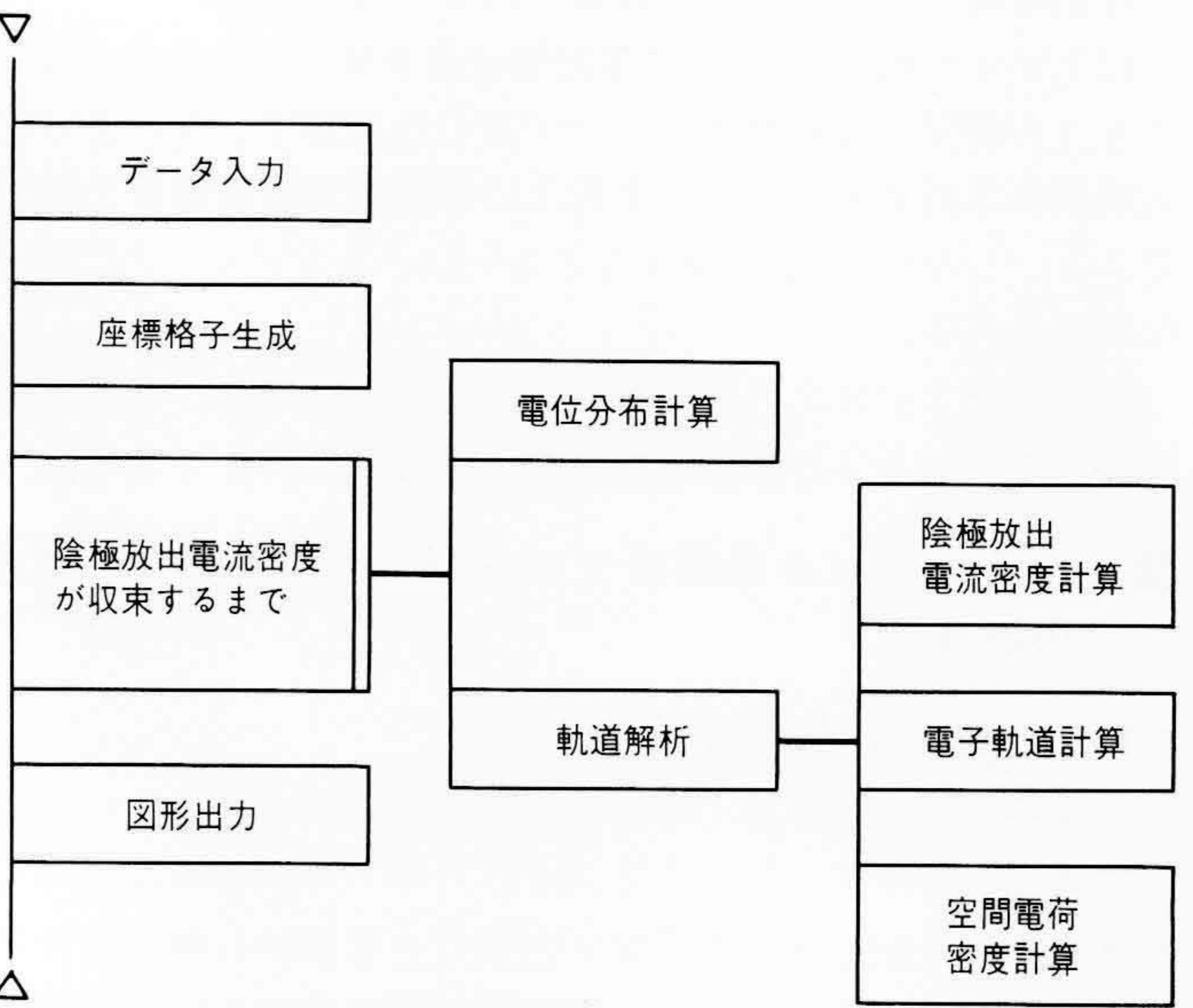


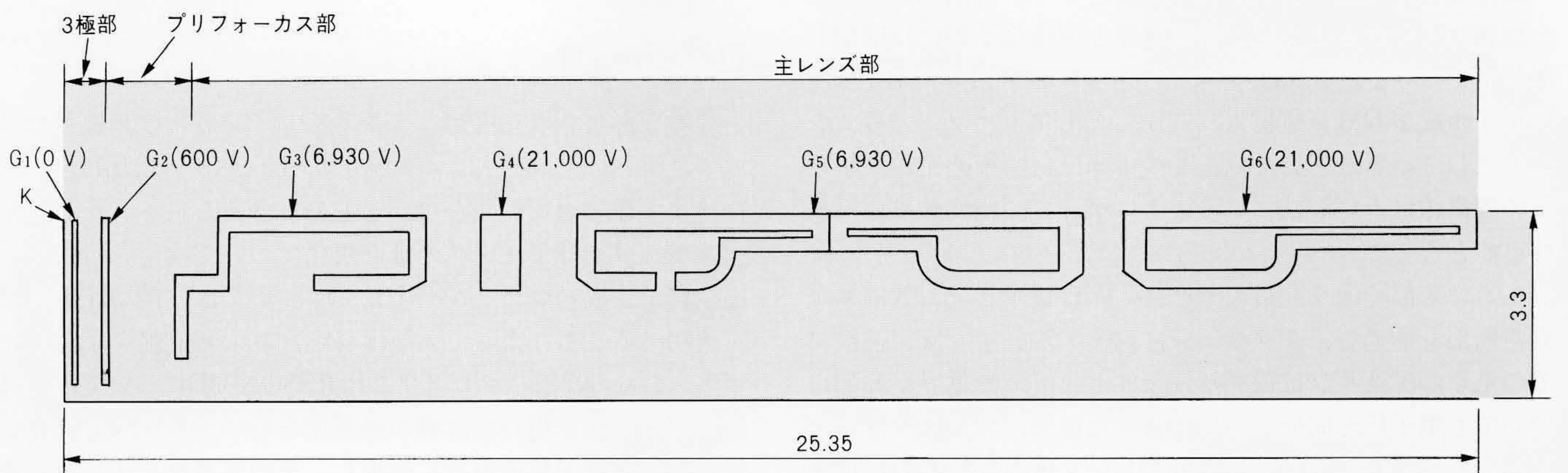
図12 3次元電子軌道解析の構成 3次元電子軌道解析の概要を示す。

は、カラーブラウン管を例にとり、電場中の電子の3次元軌道解析結果について紹介する。

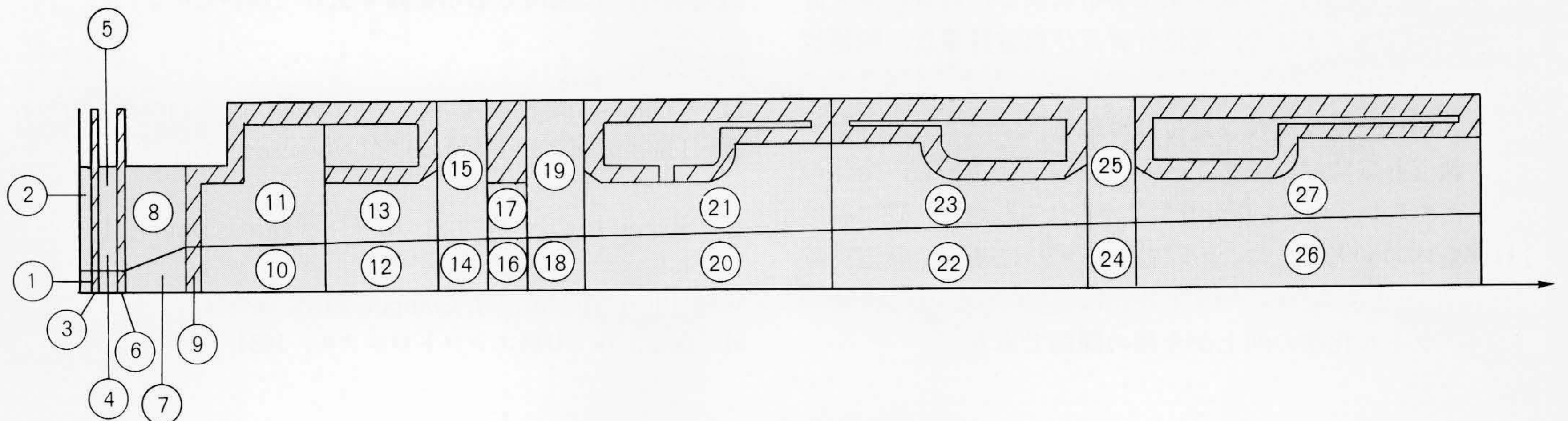
図12に解析の概要を示す。本解析では入力された電極の表面形状をもとに、GRID-3Dを用いて計算体系内に曲線座標格子を生成する部分、POISSON-3Dを用いて電位分布を計算する部分、及び陰極放出電流密度、電子軌道、空間電荷密度を計算する軌道解析部分から構成されている。計算の手順は、まず空間電荷を無視して〔(1)式で $S=0$ 〕ラプラス方程式を解き、電位分布を求める。次に、陰極放出電流密度を計算し、

電子の軌道を求める。計算された空間での電子軌道をもとに空間電荷密度を求め、(1)式のポアソン方程式を解き、再び電位分布を計算する。以上の計算を陰極放出電流密度 J が収束するまで繰り返す。

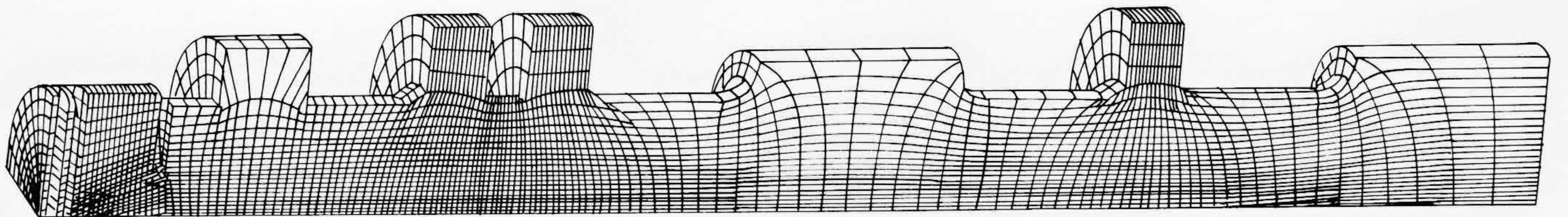
解析対象としたB-UPF形(Bi-Uni Potential Focus形)電子銃⁵⁾の電極形状を図13(a)に示す。同図に示すようにB-UPF形電子銃は、3極部、プリフォーカス部を形成する3個の電極(K, G_1, G_2)と主レンズ部を形成する4個の電極(G_3, G_4, G_5, G_6)から成る。主レンズ部は、 G_3 と G_4, G_4 と G_5, G_5 と G_6 の間



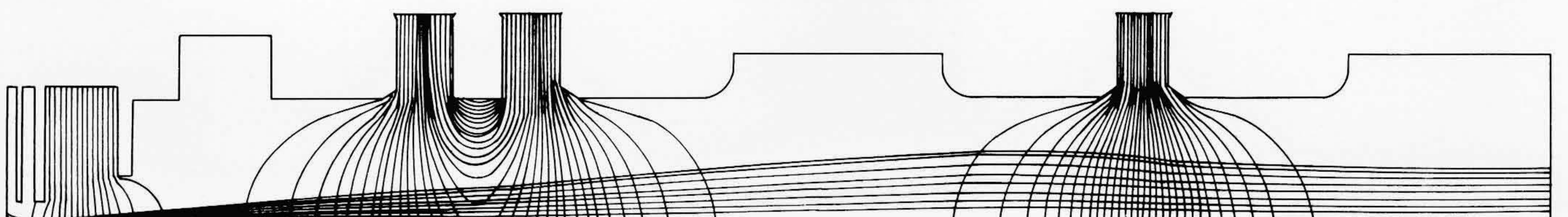
(a) 形状図



(b) 六面体分割図



(c) メッシュ分割図



(d) 等電位線及び電子軌道図

図13 カラーブラウン管電子銃の電子軌道解析 カラーブラウン管電子銃の電子軌道解析を実施した。(a)には電子銃の電極状態を示す。(b)には六面体分割を、(c)にはメッシュ分割を、(d)には電位分布と電子軌道を示す。

に形成される3個の複合レンズから成っている。

図13(b), (c)に領域分割図及び座標格子の鳥観図を示す。本例では、90度セクタを対象とし、全体を27個の六面体に分割した。体系全体の格子総数は、10万1,500点であるが、上記分割により、計算機記憶容量を分割しない場合の $\frac{1}{6}$ 以下に低減し、計算を6 Mバイトで実行可能とした。同図(c)に示すように、座標格子は、電子ビームによって作られる空間電荷の密度が高い3極部、及び電子軌道が集中する中心軸近傍に集中させ、解析精度の向上を図った。隣り合う格子点間の距離をメッシュサイズとすれば、Z方向のメッシュサイズは、主レンズ出口付近で250 μ m、カソード近傍で4 μ mである。

図13(d)に、電位分布及び電子軌道を示す。同図(d)と同図(c)を比較して分かるように、等電位線と座標格子線はほぼ同じ形状をしている。これはバウンダリ フィット法で使用する座標格子生成方程式と電位方程式が、ともにポアソン方程式をもとにしていることによる。このように、座標格子線を物理量の等高線に近い形状にすることによって、精度の高い解析が可能となる。

主レンズ部を通り、集束力を与えられ電子ビームは、無電界空間部を通過し、スクリーンに到達する。主レンズ部出口での電子の速度及び位置を初期条件として、無電界空間部についても電子銃と同様の計算を行った結果、スクリーン上のビームスポット径(電流密度分布でピーク値の $\frac{1}{10}$ となる径)は実測値と10%以内の範囲で一致した。

表4に、電子銃内での電子軌道解析に要した計算時間を計算部ごとに示す。ここで、電位計算及び軌道計算は、陰極放出電流密度が収束するまで5回反復した結果を合計した値で示した。座標格子生成及び電位計算の時間は、スカラー計算では、軌道計算時間に比べてそれぞれ約4.7倍を要し、全体の90%を占めるが、ベクトル計算では、 $\frac{1}{10}$ に短縮され、逆に軌道計算が全体の50%以上になる。粒子モデルに基づく軌道計算部は行列計算を含まず、ベクトル化は容易ではないが、この部分のベクトル化率の向上が今後の課題である。

表4 電子銃内の電子軌道解析*に対する計算性能 電子銃内の電子軌道解析についてベクトル計算とスカラー計算の計算時間を比較したものである。

	ベクトル化率 (%)	CPUタイム(s)		
		ベクトル計算	スカラー計算	スカラー/ベクトル
座標格子生成	96.5	361	3,867	10.7
電位計算**	97.6	307	3,809	12.4
軌道計算***	21.0	797	812	1.0

注：* 座標格子総数=101,500
** 収束判定条件= $\epsilon \leq 10^{-8}$
*** 電子ビーム本数=3,600

6 結 言

複雑な形状を取り扱えるバウンダリ フィット法の概要について説明した。本手法はスーパーコンピュータの増加に伴い、今後ますます適用範囲が広がるものと考えられる。そこで、スーパーコンピュータへのはん用化について検討を行った。座標格子生成プログラムGRID-3Dについては、補助記憶装置を利用することによって大規模科学計算の可能性を示した。ポテンシャル場解析プログラムPOISSON-3Dについては、外部反復計算法を用いて計算の高速化を行い、カラーブラウン管電子銃の電子軌道解析に適用し、その有用性を示した。今後はこれらのプログラムを大規模な流体解析、輸送拡散、構造解析などに適用し応用範囲を広げてゆきたい。

参考文献

1) Thompson, J. F. et al. : J. Comput. Phys. 15, 299(1974)
2) Thompson, J. F. et al. : "Numerical Grid Generation" (1982), Elsevier
3) Steger J. L. et al. : SIAM J. Sci Stat. Comput. 1(1980), 431
4) Miki K, et al. : J. Comput. Phys. 53-2(1984), 319
5) 山崎, 外 : 日経エレクトロニクス, 1984, 6, 12号, p.126