科研費 KAKENHI

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 26 年　 6 月 24 日現在

機関番号：82118
研究種目：若手研究(B)
研究期間：2011～2013
課題番号：23740218

研究課題名（和文）モンテカルロ法による局所場精密計算システムの開発研究

研究課題名（英文）Development of high-accuracy local-field calculation system in a stochastic approach

研究代表者
阿部　哲郎（Abe, Tetsuo）

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構・加速器研究施設・准教授

研究者番号：70370070

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　3,300,000円、（間接経費）　990,000円

研究成果の概要（和文）：高エネルギー加速器における高電界加速構造内の微細表面欠陥は、その加速性能を制限してしまうことがある。近年のコンピュータ技術の進歩により、そのような欠陥付近の局所電場を数値的に計算できるようになってきた。しかし、空間離散化と決定論的アルゴリズムに基づく従来の方法では高い精度の計算が期待できない。本研究では、空間離散化を要しない確率・統計的な方法として、フローティング・ランダムウォーク法を用い、高い精度で局所場を求めることの出来る計算方法を検証・確立した。

研究成果の概要（英文）：High-gradient RF accelerating structures are linchpins of high-energy accelerators. However, fine surface defects in the structures could increase surface fields, and trigger breakdown of the accelerating structures, leading to deterioration of accelerator performance. In this study, a new method, not based on space discretization, to calculate local electromagnetic fields accurately in a stochastic approach has been verified and established.

研究分野：数物系科学

科研費の分科・細目：物理学／素粒子・原子核・宇宙線・宇宙物理

キーワード：フローティング・ランダムウォーク　モンテカルロ　局所場　電磁場　加速器　高電界　数値計算

１．研究開始当初の背景

高エネルギー加速器において、高電界加速構造は要である。しかし、その製作過程において、機械加工によるバリ、接合面の不完全さから生じるギャップ、結晶構造由来の表面起伏等の微細な欠陥が生じる（例えば、図 1）。

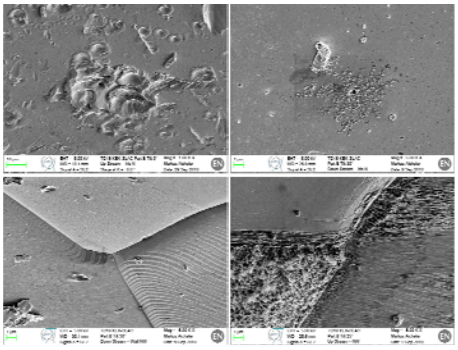

図１．X バンド高電界加速管内の微細表面欠陥の SEM 画像例[1]。

また、高電界試験時には加速管のブレークダウンに伴う放電痕の発生は避けられない。これら表面欠陥における電界放出がトリガーとなって巨視的な放電を誘発すると、加速器の性能が制限されてしまう。微細表面欠陥の具体的な形状は、レーザー顕微鏡等で精密に測定することができる。そして、近年のコンピュータ技術の進歩により、測定した形状から欠陥付近の局所電場を数値的に計算して、加速性能に対する影響を理論的に調べることが可能になってきた。これまでの方法では、測定した形状をモデリングしたソリッドを空間離散化し、固有モード解法を適用して局所電場を求める（例えば、[2]）。しかし、微細表面欠陥のサイズは 100 μm 以下。それに対して、加速構造の典型的なサイズを 10 cm とすると、例えば 10 μm サイズの等方的メッシュで空間離散化した場合には、メッシュ・セルの個数が$(10\mathrm{cm}/10\mu\mathrm{m})^3$ =1 兆個以上にもなる。そこで、通常は、空間離散化を行う前に、測定した形状をある程度簡略化し、さらに、欠陥から遠ざかるにつれてメッシュを段階的に粗くする措置等をとる。しかし、そのようにして行った計算の精度には疑問は残る。

固有モード解法による場の計算自体にも問題がある。固有モード解法では、空間離散化したメッシュ・セル群から生成した巨大行列の固有値問題を解くが、ごく一部の場の強さが大きく間違っていたとしても、固有モード解法の精度には殆ど影響が無いからである。

計算精度を上げるために、より大規模で高速なコンピュータ環境を利用する方法が考えられる。そうすれば、メッシュを細かくすることができる。しかし、必要なメモリと計算時間はメッシュサイズの３乗に反比例して指数関数的に増える上、プロセッサー・コア間のネットワークに高い性能が必要となる。この方針でコンピュータ環境を構築するのは技術的・コスト的に難しい。さらに、空間離散化のアルゴリズムに根差した計算の不確実さがあり、メッシュサイズを無限に小さくしたとしても、計算精度は無限に良くなる訳ではない。一般的に、複雑な形状になればなる程、空間離散化に基づく計算方法は不利になることが知られている。

従来の方法の中で何が問題かを考えてみると、「空間離散化」と「決定論的方法」（上記では固有モード解法）の２点が挙げられる。表面欠陥の形状は一般的には複雑なので、精密な計算を行うには細かいメッシュが必要となってしまう。また、固有モード解法のような決定論的方法では、計算速度を上げるために並列計算を導入したとしても、プロセス間通信がネックとなって性能が出ない。高い並列化効率が得られない限り、並列計算の規模を大きくしても無駄なのである。

以上のような問題の解決策として、本研究では、フローティング・ランダムウォーク（Floating Random Walk (FRW)）型のモンテカルロ法による計算方法（以下、本方法）を導入する。本方法を用いる利点を以下に列挙する。

１．空間離散化を要しないので、形状を近似する必要がない。

２．メッシュが無いので、少ないコンピュータ上のメモリで済む。

３．モンテカルロ法では各プロセスが完全に独立なため、高い並列化効率が期待できる（例えば、[3]）。

４．原理的に、モンテカルロ統計を無限に上げれば、計算精度は無限に良くなる。

尚、本方法は、近年のコンピュータ多数コア化（メニー・コア・プロセッサ）にも沿ったものである。

２．研究の目的

並列計算コードを独自開発する。コンピュータ環境としては、比較的安価でハイパフォーマンス・コンピューティングを行え、さらに性能あたりの消費電力が低いことで最近注目を集めている GPU（Graphics Processing Unit）を使用する。現在市販されている GPU ボードのデバイス・メモリは数 GB 程度であり、空間離散化に基づく電磁場計算では不足することが多いが、本方法では数 MB 程度のメモリで済むため、ジオメトリ及びランダム・ウォークに必要な全情報をローカルデータとしてデバイス・メモリに格納して、各計算プロセスに分配することができる。これにより、プロセス間通信の殆ど無い、高い並列化効率の計算が期待できる。

３．研究の方法

シミュレーションの基幹となる部分のコード開発を行う。現在のところ、モンテカルロによる方法では静的な場のみ計算可能だが、微細表面欠陥のサイズが高周波波長よりも十分小さい場合には、静的な場として扱え

る。つまり、計算はラプラス方程式（Δφ = 0）のディリクレ問題となる。本方法による解法では、ラプラス方程式の解が、場のスカラー・ポテンシャルφ とそのグリーン関数 G(r|r0) を用いて、

$$\phi(\boldsymbol{r}_0) = \oint_S [d\boldsymbol{s} \cdot \nabla_{\boldsymbol{r}} G(\boldsymbol{r}|\boldsymbol{r}_0)]\ \phi(\boldsymbol{r}) \qquad (1)$$

と表わせることを基にする。ここで、境界 S 上でφの値が与えられているとする。式(1)は再帰的で、理論的には無限多重積分になるが、モンテカルロ法ではランダム・ウォーカーが指定された境界上に到達した時点で終わる。例として、3 ステップで境界に到達する場合のダイアグラムを図 2 に示す。

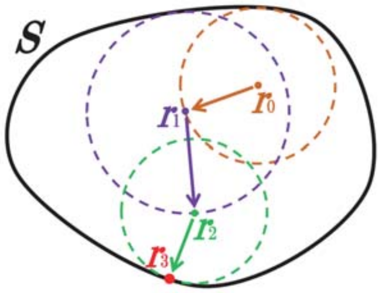

図 2. フローティング・ランダムウォークの例。3 回のステップで境界に到達。

ここで、図 2 中の r_0 が観測点である。ステップ数は使用した乱数に依存し、ランダム・ウォーク毎に異なる。そのため、ステップ数の多いランダム・ウォークの扱いには注意を要する。グリーン関数は境界条件に依存するが、例えば、球面境界に対しては解析的に求まるので、図 2 にあるように、任意の境界（図 2 では S）に対して、サンプル点（r_n）を中心として境界 S に内接する球面（図 2 の点線）を境界としたグリーン関数を用いる。図 2 の例では球面を用いたが、グリーン関数の具体形がわかれば他の形状でもよい。本方法では、任意の境界に対するグリーン関数を多数回のランダム・ウォークにより数値的に求めていることになる。N 回のランダム・ウォークを行った場合、評価値と誤差は、それぞれ、

$$\bar{\phi} = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\phi_n, \quad \sigma = \frac{(\text{Standard Deviation})}{\sqrt{N}} \qquad (2)$$

となり、独立なランダム・ウォークを多く集めれば集める程、計算精度は高くなる。

コンピュータの初期構成は、GPU モジュールを 4 基搭載した計算サーバ 1 台である。GPU モジュール内のデバイス・メモリと GPU コア間のメモリバンド幅は 100GB/s 程度と、通常の CPU・メモリ間のバンド幅（10GB/s 程度）の約 10 倍ある。Streaming Multi-Processors 内では、コア・共有メモリ間のバンド幅はさらに広く、また、コア・キャッシュ間は最もバンド幅が広い構造になっている。このようなアーキテクチャを考慮してコーディングを行い、GPU の理論演算性能（モジュール毎に 1 テラ FLOPS 程度）近くを達成できるようにする。特に、ホスト・メモリと GPU モジュール間の通信は性能を下げる最も大きな要因なので、ランダム・ウォークの計算に必要な全データをデバイス・メモリ内に格納できるようにし、ホスト・メモリと GPU 間の通信量を最小にするアルゴリズムを考案する。

4．研究成果

静的な場における局所場の精密計算 GPU 上で行うための計算コードを CUDA Fortran で作成し、性能試験を行った。コードの検証として、無限にシャープなエッジを持つ形状に対する解析的な厳密解との比較を行い、10mm オーダーのサイズの空洞内の 1μm サイズのエッジに対するフィールドを極めて高い精度で計算可能であることを示した（図 3）。

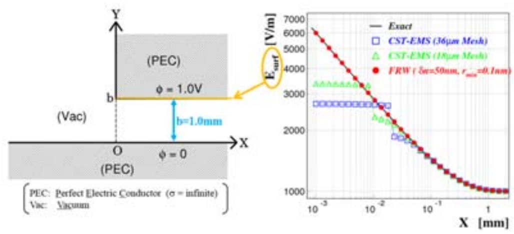

図 3. 数値計算結果と厳密解の比較。

また、期待した計算速度と並列化効率を得られることがわかった（図 4）。

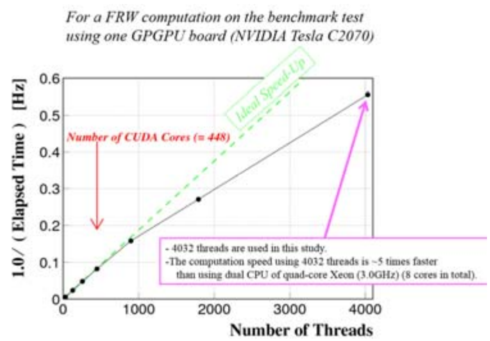

図 4. GPU を用いたフローティング・ランダムウォーク計算の並列化効率測定結果。

さらに、応用として、高電界加速構造の設計において、新しい視点を与えた[4]。

[1] M. Aicheler, CLIC RF Structure Development Meeting, CERN (2010).
[2] Y. Morozumi, Report ID: WEPEC020, IPAC’10, Kyoto, Japan (2010).
[3] K. Chatterjee, Progress in

Electromagnetics Research 57, pp 237-252 (2006).
[4] 阿部 哲郎, 東 保男, 荒木田 是夫, 設楽 哲夫, 高富 俊和, 肥後 寿泰, 松本 修二、「高電界Ｘバンド単セル試験空洞の４分割方式による製作」、 第９回日本加速器学会年会（2012 年）.

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 0 件）

〔学会発表〕（計 4 件）
①阿部 哲郎, 東 保男, 荒木田 是夫, 設楽 哲夫, 高富 俊和, 肥後 寿泰, 松本 修二、「高電界Ｘバンド単セル試験空洞の４分割方式による製作」、 第９回日本加速器学会年会、大阪大学（2012 年）.
②Tetsuo Abe, "Surface Field Calculations for Microscopic Defects," International Workshop on Future Linear Colliders (LCWS11), Granada, Spain, 2011.
③ Tetsuo Abe, "Study of Surface Field Enhancements due to Fine Structures," 第８回日本加速器学会年会、つくば国際会議場（2011 年）.
④Tetsuo Abe, "Numerical Calculations of Field Enhancements due to Small Grooves," The 5th Collaboration Meeting on X-band Structure Design and Test Program, SLAC, California, USA, 2011.

〔図書〕（計 0 件）

〔産業財産権〕
○出願状況（計 0 件）

６．研究組織
(1)研究代表者

阿部　哲郎（ABE, Tetsuo）
高エネルギー加速器研究機構・加速器研究施設・准教授
研究者番号：70370070