

THE LEADING-EDGE SIMULATION SOFTWARE FOR 3D EM AND CHARGED PARTICLE DYNAMICS, AND ITS APPLICATIONS

Koichi Kanno #, Eiji Tanabe

AET Inc.

2-7-6 Kurigi, Asao-ku, Kawasaki-shi, Kanagawa 215-0033

Abstract

The latest 3D electromagnetic and charged particle dynamics simulation software enables scientists and engineers to develop accelerators and its components in less time at a lower cost as compared to testing experientially, even when only personal computers are available. These simulations provide solutions for various applications in industry, medicine and research, including non-destructive inspection, radiation cancer treatment, medical device sterilization and synchrotron radiation. Additionally, we are benefiting from advances in computer hardware technology, especially GPU computing. This paper reviews the current status of the latest 3D EM and charged particle dynamics simulation software and its applications.

最新の3次元電磁界・荷電粒子運動解析ソフトウェアとその応用

1. はじめに

荷電粒子ビームの応用はますます高度かつ広範になり、加速器に求められる要求は非常に高くなってきている。しかし、研究開発環境は、大学における研究時間の減少^[1]、研究開発の短期化^[2]、製品ライフサイクルの短縮^[2,3]や海外競争の激化など研究開発リードタイムが短くなり、厳しくなっている。一方、三次元電磁界・荷電粒子運動解析技術の着実な蓄積とコンピュータハードウェア性能の驚異的な向上により、従来よりも幅広いシミュレーションができるようになってきている。そして、GPU コンピューティングなどコンピュータのハードウェアテクノロジーの普及による更なる高速化も手軽に利用可能となった。これらのような背景から、シミュレーションソフトウェアの有効活用による研究開発の効率化が期待されている。

2. シミュレーションの有効性・必要性

実験や製作前に現象や性能を推定し、定量的議論や可視化を可能とするため、シミュレーションには以下のような様々な利点がある。

- 現象・装置の理解と課題の明確化
- 開発コストの削減
- 新規アイデアの検証とその実現性の評価
- 実測で得ることが困難なデータの取得
- 製造とQAの効率化

これらから分かるように、シミュレーションは、研究開発から設計・製造工程まで幅広く活用できる。また、シミュレーションの成果内容は共有や蓄積が容易で、問題解決の議論を円滑に進めるのに役立つ。このようにシミュレーションは設計・開発に非常に有意義なツールであり、複雑化する装置製作を助けるツールである。

3. シミュレーションの現状と動向

3.1 現状と動向

電磁界・荷電粒子運動におけるシミュレーションは、最適な設計パラメータ値を探すことに使われることが多かったが、高度で安定な装置の開発には、起こり得る問題現象を再現し、把握した上で対策をとることが重要である。しかし、そのような問題は複合的な現象が原因となっていることも多い。例えば、マイクロ波管やX線管において、電子ビームがコレクタやターゲットにあたり、二次電子や熱が発生するが、これらのために装置の性能が制限されることもある。この場合、適切な二次電子放出の設定と衝突した電子を熱源とする熱のシミュレーションは重要である。CST STUDIO SUITE^[4]を用いたDepressedコレクタの計算結果を図1に示す。

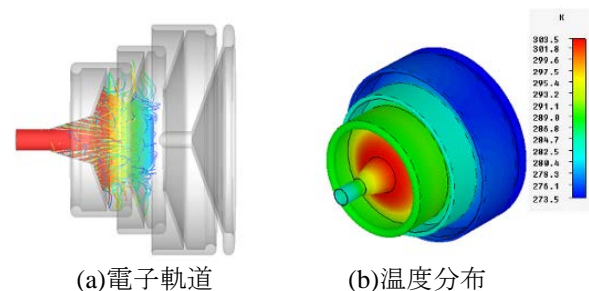


図1. Depressed コレクタ内の電子軌道と電子衝突による温度上昇のシミュレーション結果。電子ビームエネルギーは200keV、電流は10mA。

コレクタの荷電粒子運動解析において、二次電子放出モデルを適用し、電子衝突によって発生した熱を熱源とした熱解析へ連携させたことにより、コレクタに関しての知見をより深く得ることができる。このような、シミュレーションの解析範囲の拡大が期

#kanno@aetjapan.com

待されている。CST STUDIO SUITE は、3次元電磁界解析ソフトウェア MW STUDIO (以下 MWS) を中核としたマルチフィジックスシミュレーションツールで、荷電粒子運動や熱、応力を解析できる各ソルバーを備え、この解析が可能である。コレクタの解析においては、二次電子放出を考慮しているため、解析すべき粒子が多くなり、必要な計算時間やメモリも増える。そのため、更なるコンピュータハードウェア性能向上が期待される。今までは、CPUの高速化が解析の高速化につながっていたが、CPUクロック数増加が頭打ちになり、現在では、高クロック化よりもコア数を増やすことが高速化に寄与している。特に、GPUやMPI(Message Passing Interface)などを用いたHPC(High Performance Computing)での高速化が効果を挙げている。このように、最新の三次元電磁界・荷電粒子解析ソフトウェアでは解析範囲の拡大とハードウェアによる解析高速化がなされている。

3.2 解析範囲の拡大

コレクタの解析でみたように、さまざまな物理モデルの適用や電磁界・荷電粒子運動解析以外のシミュレーションとの連携が、高度な装置開発に必要となっている。

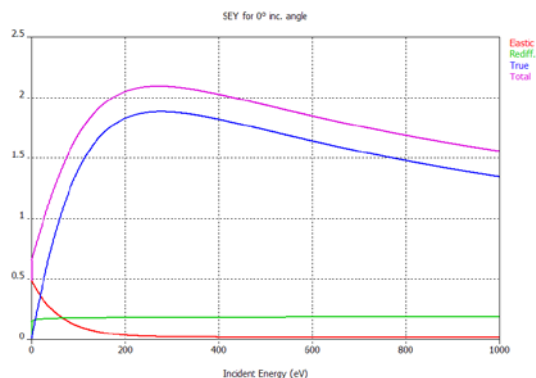
RF窓や超伝導加速空洞、導波管において、重要な問題となるマルチパクタ現象は、電磁界・荷電粒子運動解析の範疇で解析できる現象だが、二次電子モデルの適用が必要である。また、マルチパクタ現象は、解析粒子数が雪崩式に増大する。そのため、解析に必要な時間とメモリが急増してしまう。解析時間とメモリを過剰に消費しないための処理も必要である。CST PARTICLE STUDIO (以下 CST PS) では、指数的粒子増加を検出し、マルチパクタ現象を検出する機能により、マルチパクタ現象を検出したら解析を停止する機能を活用している。これにより計算時間とメモリの無駄がなく解析できる。

また、二次電子放出モデルが実際の電子放出現象に限りなく合致し、且つ現実的な解析リソースで実施できるように導入されなくてはならない。二次電子放出は、真の二次電子のほかに、表面近くで後方散乱した一次電子と材質内に入射しエネルギーを失って再び放出した一次電子も含む比較的複雑な現象である^[5]。CST PSでは、二次電子放出モデルとして、実験と良く合うFurmanモデルを導入できる。このモデルは、上記の3種類の電子放出を考慮している。また、二次電子放出効率をエネルギー閾値、最大二次電子放出効率とその時のエネルギー値で設定できるVaughanモデルも擁している。さらに、二次電子放出特性データをインポートして、シミュレーションに反映する事も可能である。このようにシミュレーションに応じて適したモデルを選択することも重要である。

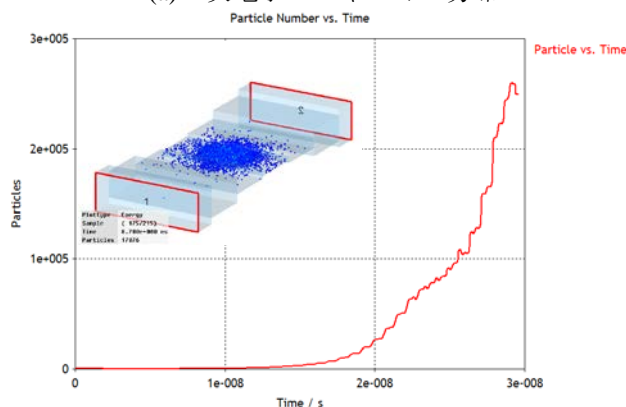
図2に導波管でのマルチパクタ現象のシミュレーション結果を示す。二次電子放出には、一次電子のエネルギーと入射角が考慮されている。

物理モデル適用に関しては二次電子放出を例にあげたが、このモデルのみに限らず、マクスウェル分

布を持つ粒子の配置や周波数分散材質の設定など、さまざまな解析対象に応じて必要な各種物理モデルを使えるようになってきている。



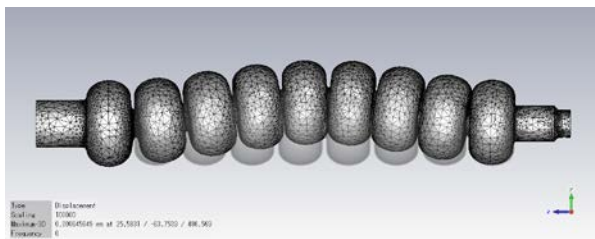
(a)二次電子のエネルギー分布



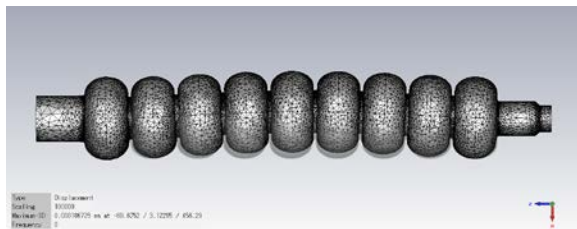
(b)マルチパクタ現象による電子の増加

図2. 導波管のマルチパクタ現象のシミュレーション結果。(a)に示すように、二次電子には後方散乱や減速して出てきた電子も含んでいる。また、(b)に示すように指数関数的に電子数が増加するので、電子ビームの増加を検出して一定の増加になった時、解析を停止する。

電磁界・荷電粒子運動シミュレーション以外との連携に関しては、超伝導空洞のローレンツ・デチューニング^[6-9]を例としてあげる。超伝導加速空洞は薄板構造のため、高周波電界を印加すると、電磁界応力による空洞変形が起り、共振周波数がずれてしまう。これがローレンツ・デチューニングあり、その結果、加速電界もパルスの終端で低下してしまう。この現象を把握するためにはシミュレーションが必要となる。一般的に、ローレンツ・デチューニングを解析するには、電磁界解析ソフトウェアで得られる電磁界分布から空洞壁面での電磁界応力を求め、構造解析ソフトウェアに設定して計算できる。応力分布を解析すると、定常状態での空洞の変形量が得られる。CST STUDIO SUITE はMWSの固有値解析ソルバーとCST MPHYSICS STUDIOの応力ソルバーを擁し、同じ操作環境で解析ができる。図3は超伝導加速空洞^[10]にStiffeningリングがある場合とない場合の電磁界応力による変形の比較を示している。



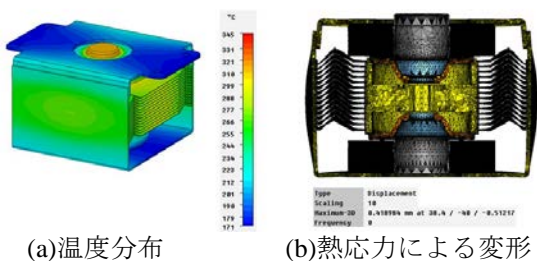
(a)Stiffening リングなし



(b)Stiffening リングあり

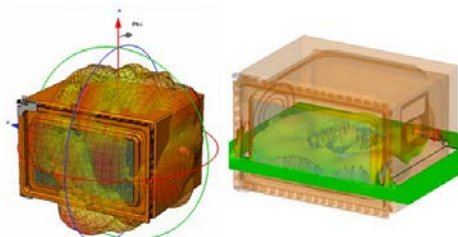
図 3. 超伝導加速空洞の電磁界応力による空洞形状変形解析。MWS の固有値ソルバーにて電磁界解析とそれから導くことができる電磁界応力の計算を実施し、CST MPHYSICS STUDIO の応力ソルバーで形状変化を解析した。図中の変形はスケールリングで強調して表示している

マイクロ波管を用いた装置から漏洩してしまう電磁波はシステムを干渉する放射ノイズとなる。CST STUDIO SUITE はこのような EMI 解析を効率よく行う事が出来る。しかも、その解析は電磁波源であるマイクロ波管の磁石や電極設計、共振解析、荷電粒子運動解析と同じ解析環境で実施できる。マイクロ波管を運転する事により発生する熱の解析及びそれによる応力解析も可能で、一つのシステムの重要な課題の大部分を CST STUDIO SUITE で解くことが可能である。図 4 に電子レンジの解析のうち、マグネトロン熱解析と応力解析、そして EMI 問題解決のための電磁波放射パターン（遠方界）と電界分布を示す。



(a)温度分布

(b)熱応力による変形



(c)電磁放射パターン

(d)電界分布

図 4. 電子レンジに関する 3 次元電磁界解析を中心としたマルチフィジックス解析。

3.3 HPC による解析効率化

HPC の恩恵の受け、GPU や MPI による解析効率化が荷電粒子応用装置でも効力を発揮している。

画像処理に特化されている GPU は並列演算が得意で、CPU より高い演算性能を持つ。GPU コンピューティングは、GPU の高い演算能力を汎用的な計算に応用する技術である。CPU は 2~8 個程度のコアからなるが、GPU は百を超える小さいコアからなり、大量のコア数で大量データを並列で計算できる。メモリバンド幅は CPU が 32GB/s (DDR-1333 RAM) であるのに対して、GPU は 144GB/s (Tesla20) もある。流体力学、量子化学、天文学、バイオ・インフォマティクス、金融工学など幅広い分野へ適用されており、電磁界・荷電粒子運動解析でも適用されている。CST STUDIO SUITE では MWS の時間領域ソルバーと、CST PS の Particle-In-Cell 解析を行う PIC ソルバーで適用可能になっている。

表 1 はマグネトロン、進行波管、及び後進波管の電子ビームで電磁波が励起または増幅される様子を CST PS の PIC ソルバーでシミュレーションした結果である。GPU でシミュレーションを高速化したところ、CPU に比べてマグネトロンでは 1/4、進行波管では 1/6、後進波管では 1/3 に短縮された。

表 1. マイクロ波管計算比較

	Magnetron	TWT	BWO
Meshcell 数	1,610,280	1,000,188	399,388
粒子数	1.39e4	7.74e5	3.41e5
計算時間 : CPU	36h40m7s	1h14m44s	7h4m20s
: GPU	9h6m18s	0h12m25s	2h21m22s

MPI コンピューティングは、電氣的に大規模な構造や極端に複雑な構造に効果的である。いずれの場合も非常に多くのメッシュセル数が必要な構造である。この技術は、元の計算ドメインを幾つかのサブドメイン群に分割し、各クラスターノードに割り当てる。各計算ノードは、それぞれが担当するサブドメイン内の自由度に対応するデータのみが格納され、全てのクラスターノードのリソースを同時進行的に利用することで、あたかも単一のスーパーコンピュータのように動作する。CST PS のウェーク場解析ソルバーにおいて MPI コンピューティングを実施することが出来る。

この技術は組み合わせることも可能な場合もあり、GPU における高速化可能なモデル規模の制約を克服する副次的効果も得られる。

4. まとめ

電磁界・荷電粒子シミュレーションによる仮想実験の範囲は、物理モデルの適用と熱解析や応力解析などとの連携を効率的に行うことでますます拡大している。そして、コンピュータハードウェア技術に

よる解析の高速化は、この傾向をより顕著にするだろう。高度化・複雑化する装置の研究・開発・設計の視点から見ても、好ましいことであり、ますます必要になってくるであろう。シミュレーションソフトウェアはこのようなニーズに対応すべく進歩している。これまでのようにソフトウェアは理論、実験の進展とともに発展し続け、装置開発や実験に大きな指標を与え続けるだろう。

参考文献

- [1] 文部科学省 科学技術政策研究所、減少する大学教員の研究時間 — 「大学等におけるフルタイム換算データに関する調査」による 2002 年と 2008 年の比較—
- [2] 経済産業省、第 3 1 回研究開発小委員会（平成 23 年 6 月）
- [3] 2007 年版ものづくり白書（ものづくり基盤技術振興基本法第 8 条に基づく年次報告）

- [4] <http://www.cst.com>
- [5] 電気学会, 電気学会大学講座 電子・イオンビーム工学, pp29-30
- [6] 高エネルギー加速器セミナー 「超伝導リニアコライダー」、2006 年 8 月。
- [8] K. Mukugi, et. al., " Mechanical Characteristics of 972 MHz Superconducting Cavities for High Intensity Proton Linac", Proceedings of the 25th Linear Accelerator Meeting in Japan (July 12-14, 2000, Himeji, Japan),pp314-316.
http://www.pasj.jp/web_publish/lam25/PDF/13P-12.pdf
- [9] N. Akaoka, et. Al., "SUPERCONDUCTING CAVITY DEVELOPMENT FOR HIGH INTENSITY PROTON LINAC IN JAERI", Proceedings of the 9th Workshop on RF Superconductivity, New Mexico, USA (1999).
http://laacg1.lanl.gov/rfsc99/rfsc99_web/WEP/wep020.pdf
- [10] Y. Morozumi, " Design and Analysis of 45MV/m Structures". <http://lcdev.kek.jp/ILC-AsiaWG/WG5notes/7th-meeting/Moro-45MVStructure.pdf>