jh150030-NA18

階層分割型数値計算フレームワークを用いた 3 次元電磁界解析の高速化研究

杉本振一郎 (諏訪東京理科大学工学部機械工学科)

概要 本研究では,演算カーネルに係数が複素数となる疎行列ベクトル積を持つ並列電磁界解析ソルバ ADVENTURE_Magnetic の高速化を行うため,問題規模・並列台数を変えた数値実験を通して大規模電磁界解析の性能向上に向けた問題点の洗い出しを行い,それらを改善することで最終的にピーク性能比 10%程度を目指す.計画に沿って,これまでにウィークスケーリングによる性能評価と複素数演算のチューニングを行った.ウィークスケーリングは FX10 上で最大 1,440 ノードを用いて評価を行い,比較的新しい複素数演算の実装では 360 ノード以上で性能が低下し,通信性能に課題があることが分かった.今後は非同期通信の導入などにより性能向上を図る.複素数演算のチューニングは FX10 と FX100 にて 4 ノード,400 万自由度規模で行い,チューニング前に比べて最大で 1.80 倍の高速化を達成した.しかし FX100 でのピーク性能比は FX10 の半分以下であり,まだ課題が残っている.また別の検討として複素数演算のチューニングをFX10 8 ノード,100 万自由度規模で行い,ピーク性能比を 7.41%まで向上させることができた.今後はさらに SIMD 演算の幅が倍になった FX100 にも対応するためさらに SIMD 化を進める検討を行うとともに,より高並列な環境での性能向上を検討し,ピーク性能比 10%を目指す.

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名 東京大学 名古屋大学

(2) 共同研究分野

■ 超大規模数値計算系応用分野

(3) 参加研究者の役割分担

杉本振一郎(諏訪東京理科大学工学部機械工学 科):全体統括,並列化コーディング,物理モ デル開発

荻野正雄(名古屋大学情報基盤センター大型計算支援環境研究部門): 階層領域分割型ソルバーライブラリの開発,並列化性能評価

塩谷隆二 (東洋大学総合情報学部総合情報学 科):階層領域分割型ソルバーライブラリの開 発,連続体力学向け DSL の開発

金山寛(日本女子大学理学部数物科学科): 物理 モデルの開発

河合浩志(諏訪東京理科大学工学部コンピュー

タメディア工学科): 連続体力学向け DSL の 開発, 高速化

武居周(宮崎大学工学教育研究部電気システム 工学科):物理モデルの開発,並列化性能評価 室谷浩平(東京大学大学院工学系研究科システム創成学専攻):大規模プリプロセス支援 片桐孝洋(東京大学情報基盤センタースーパー コンピューティング研究部門):高速化

2. 研究の目的と意義

(ア) 研究の目的

近年,変圧器や回転機などの各種産業用機器,電車内などの環境中における電磁界解析を効率的に行うために有限要素法が広く用いられるようになってきた.しかし,電磁界解析分野はその問題の複雑さから,構造解析分野などに比べて分散並列化や高速化の研究が十分ではなく,インフラとして整備されつつあるスーパーコンピュータを活用しきれていないのが現状である.よって,有限要素法による3次元電磁界解析のHPC利用技術が確立されることは,特に産業界

において高く期待されている. そこで我々は大 規模数値計算システムの基盤技術として,塩 谷・荻野らによって有限要素法による構造解析 分野向けに開発されてきた階層型領域分割法の 技術を応用した, 階層分割型数値計算フレーム ワークの研究開発を行っている. 階層型領域分 割法は Glowinski らが提案した領域分割法を分 散メモリ型並列計算機環境に効率よく実装する 手法であり, 大規模問題を高い並列効率で数値 計算できる手法として知られている. 本研究で は, 主に通常の節点要素や実数向けに開発され てきた階層分割型数値計算フレームワークを, 電磁界解析などに出てくる辺要素や複素数を用 いた数値計算にも対応させ,3次元電磁界解析向 けの並列有限要素解析ソルバとして整備し, ソ ルバ全体での演算効率・並列効率を向上させる ことを目標とする.

我々は階層分割型数値計算フレームワークを 用いた並列電磁界解析ソルバ ADVENTURE Magnetic (以下, AdvMag)の研究開発を行って いる. これまでに東京大学情報基盤センター Fujitsu PRIMEHPC FX10 (以下, FX10)にて 35 億複素自由度の時間調和渦電流解析, 2.6 億複素 自由度の高周波電磁波解析に成功しているが, ソルバ全体のピーク性能比は 1~2%程度と計算 資源を有効活用できていない状況である. これ らの解析では本来非定常である問題を, 商用電 源および電磁波が正弦波的に規則正しく変化す ることを利用して, 複素数での求解を一度だけ 行う準定常問題としている. 最終的に得られる 連立一次方程式は共役直交共役勾配法などの反 復解法で解くことができるため,数値計算にお ける演算カーネルは係数が複素数となる疎行列 ベクトル積となる. 節点要素を用いた有限要素 法における疎行列ベクトル積の高速化に関する 研究は行われているが、辺要素を用いた場合の 性能評価や高速化技術の開発は行われていない. また、AdvMag は C 言語における複素数演算の コーディングとして関数,マクロ, C99 の複素 数ライブラリにもとづく実装を持っているが,

事前の数値実験でその演算性能は計算機環境に 大きく依存することが分かっており、最適化な らびに効率的なコーディング方法の確立が必要 である. さらに、並列化効率は階層分割型数値 計算フレームワークによって十分な性能が得ら れることが期待されるが、Tofu などネットワー クトポロジに対する性能評価と最適化は行われ ていない. 本研究では、問題規模・並列台数を 変えた数値実験を通して大規模電磁界解析の性 能向上に向けた問題点の洗い出しを行い、それ らを改善することで、最終的にピーク性能比 10%程度を目指す.

(イ) 研究の意義

電磁界解析では電場,磁場に空間的な広がり があるため、解析したい機器だけでなくその周 辺の空間も解析対象としなければならず、解析 領域が大きくなりやすい. また電磁波を対象と する場合には要素の辺長を電磁波の波長の10分 の 1 以下にする必要があり、大きく広がる空間 を大きな要素で埋めることができない. さらに 電磁場の様子を詳細に知りたい箇所は機器の中 でも特に薄い構造をしているうえ、電磁界解析 で用いる反復法の収束性はアスペクト比に非常 に敏感であるため扁平な要素でそれらをモデル 化することができない. そのため電磁界解析の ためのメッシュは大自由度になりやすく,機器 の丸ごと解析では簡単に数千万~数億自由度の モデルとなってしまう. しかし、計算時間や大 規模問題における収束解を得ることの難しさか ら電磁界解析での並列化研究はなかなか浸透せ ず、企業における設計・開発の現場ではいまで も数千~数十万自由度での解析が主流である. そのような自由度に抑えるためにモデルの簡略 化や扱う物理現象の単純化が行われ, 十分とは 言いがたい解析精度で工夫を凝らして設計・開 発が行われているのが現状である.

本研究によって AdvMag の演算効率,並列効率を向上させることにより,数億自由度の機器の丸ごと解析をモデルの簡略化や物理現象の単

純化をせずに行うことがより容易になり、大規模電磁界解析を浸透させる一助になると考える.

3. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

物理モデル開発研究が進行中とも言える電磁 界解析分野が日々進化する計算機アーキテクチ ャに対応するためには、工学・応用数学者らと 計算科学者らの学際的共同研究体制が必要不可 欠である. 本研究体制では, 物理モデル開発と 並列プログラム実装に強い研究代表者(杉本)を 筆頭に, 基盤とする階層分割型数値計算フレー ムワークの開発者であり並列計算に強い研究者 (荻野・塩谷),物理モデル開発の研究者(金山・ 武居), 高速化の研究者(河合)が参加している. また、電磁界解析分野はメッシュ品質が非常に 重要となるため、プリポストに強い研究者(室谷) も参加している. さらに、複素数演算を高性能 かつ効率的に実装するために自動チューニング 技術の研究者(片桐)も参加している.これにより、 モデリングと数値計算アルゴリズムの両方を改 善しながらシミュレーション全体を高速化でき た.

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

今年度新規課題のため、該当項目なし.

5. 今年度の研究成果の詳細

(ア) 性能評価

まず FX10 を用いて最大 1,440 ノードのウィークスケーリングを行った.

モデルとして図 1 の無限長ソレノイドコイルを用いた渦電流解析の精度検証問題[1]を用いる. 導体部の半径は 0.1[m]であるとする. 磁気抵抗率 ν は解析領域全体で $(1/(4\pi))\times10^7$ [m/H], 導体部の導電率 σ は 7.7×10^6 [S/m], 角周波数 ω は $2\pi\times60$ [rad/s]とする. コイルに流れる強制電流密度 I の実部, 虚部の大きさは 50, 0 [A/m²]とする. 問題の対称性を考慮し,中心角 20° ,高さ 0.1 [m]の領域を解析対象のモデルとする(図 2 参照). 表 1 に本報告で用いるメッシュの要素数,

節点数,部分領域数を示す.部分領域あたりの要素数が約100となるように領域分割を行い, ノードに2,000ずつ部分領域を割り当てることでノードごとの負荷を均一にしている.

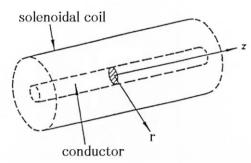


図 1. 無限長ソレノイドコイル

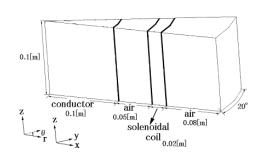


図 2. ケーキモデル

表 1. 要素数, 節点数, 部分領域数

Comp.	Elements	Nodes	Subdomains
45	8,739,045	11,733,539	45×2,000
90	17,532,512	23,453,016	90×2,000
180	34,665,506	46,232,824	180×2,000
360	69,310,254	92,212,658	360×2,000
720	140,260,096	187,852,707	720×2,000
1,440	277,324,048	370,872,163	1,440×2,000

インターフェース問題には COCG 法に基づく 階層型領域分割法を適用し、近似対角スケーリング前処理[2]を用いる。収束判定値は与えず、 反復を 10,000 回繰り返すこととする。部分領域 解法には ICCOCG 法を用い、収束判定値を 109、前処理の加速係数を 1.2 とする。使用する AdvMag のバージョンは 1.6.0 であり、モジュールはハイブリッド並列版を用いる。また、部分

領域間の自由度のばらつきを抑えるため、不導体領域にも導電率 0 [S/m]を与える.

```
struct Complex {
  double re; /* real part */
  double im; /* imaginary part */
};
```

図 3. 構造体"Complex"

```
void ComplexPlus( Complex *x, Complex a,
Complex b)
{
   (*x).re = a.re + b.re;
   (*x).im = a.im + b.im;
} /* addition */

void ComplexMulti( Complex *x, Complex a,
Complex b)
{
   (*x).re = a.re*b.re - a.im*b.im;
   (*x).im = a.im*b.re + a.re*b.im;
} /* multiplication */
```

図 4. 構造体と関数(Str.&Func.)

```
#define ComplexPlus(_x,_a,_b){\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{
```

図 5. 構造体とマクロ(Str.&Macros)

図 6. double complex 型とマクロ(C99&Macros)

C 言語には C99 規格(ISO/IEC 9899:1999)で 標準化された複素数型, 例えば倍精度複素数型 として double complex 型があり、複素数を実装 するにはこの型を用いることが考えられる. し かし、AdvMag の開発が開始されたのは 1990 年 代であり、その当時はまだ C99 規格は存在しな かった. そのため、AdvMag では倍精度の浮動 小数点型 double を 2 つもつ構造体 "Complex" を用いて複素数を表現した(図 3). この構造体で はメンバ "re" が複素数の実部, "im" が複素数 の虚部を表す. また, 構造体を用いるために AdvMag では四則演算を始め複素数の演算はす べて関数によって表現していた(Str.&Func., 図 4). しかし関数呼び出しではコンパイラによる最 適化が効きにくいため、これらの関数をマクロ によってインライン展開した(Str.&Macros, 図 5). さらに構造体を double complex 型に置き換 えた実装も行った(C99&Macros, 図 6). これら の実装と計測はFX10上で2014年度までに行い、 ピーク性能比はインライン展開によって4倍, double complex型の使用によりさらに1.15倍と なった. 本報告では Str.&Func., Str.&Macros, C99&Macros それぞれについてウィークスケー リングを行う.

図 7 にウィークスケーリングの結果を示す. Str.&Func.では 1,440 ノードまで良好なスケーリング結果が得られているが、関数をマクロでイン ライン 展 開 した Str.&Macros と C99&Macros は 360 ノード以上で大きく低下し

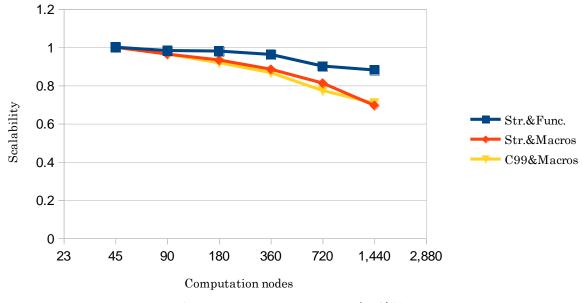


図 7. ウィークスケーリングの結果

ている.これは単体性能が低く全体の計算時間 に占める通信関連部分の割合が低かった Str.&Func.に対して、インライン展開によって 単体性能が向上したため、通信関連部分が全体 に占める割合が向上したことにより性能低下が 顕在化したためと思われる.今後は、非同期通信の導入などにより、性能の改善を図っていく.

(イ) 複素数演算のチューニング 1

FX10 および、名古屋大学情報基盤センターのFX100 にて、複素数演算のチューニングを行った. 使用する AdvMag のバージョンは 1.6.0 であり、モジュールはハイブリッド並列版を用いる. 複素数の実装は C99&Macros とし、コンパイラオプションとして・Kfast を用いてコンパイルしたものを基本とする. モデルとして 400 万自由度のケーキモデルを用い、部分領域数を30,720 とする. 計測には FX10, FX100 とも 4 ノードを用いる.

本項での検討として,以下を行う.

- a) コンパイラによる SIMD 化促進のため指示行を挿入
- b) a)+高コストな多重ループで最内側ループ長 が長くなるようにループ入れ替え
- c) b)+realloc 呼び出し回数の削減

d) c)+スレッド内でのメモリ確保/解放コスト を削減するために実行時に以下を指定

XOS_MMM_L_ARENA_LOCK_TYPE=0

表 2 にチューニング結果を示す. FX10 では c)まででピーク性能比が 1.42 倍, FX100 では d)までで 1.80 倍になっている. FX100 では FX10 に比べてピーク性能比が半分以下であるため, FX10 から FX100 へのピーク性能の向上に比べて, 計算時間の短縮幅は小さいものにとどまった.

表 2. チューニング結果1

	FX10		FX100	
	Time [s]	FLOPS /		FLOPS /
	(ratio to	PEAK	Time [s]	PEAK
	FX100)	[%]		[%]
asis	424 (2.27)	4.22	187	1.64
	412			
a)	(2.28)	4.35	181	1.69
b)	320 (2.50)	5.57	128	2.38
c)	298 (2.37)	5.98	126	2.44
d)	-	-	100	2.95

(ウ) 複素数演算のチューニング 2

前項とは別のケースとして, FX10 上にてノー ドあたりの計算負荷を減らしたケースで複素数 演算のチューニングを行った. 使用する AdvMag のバージョンは 1.6.1 であり, モジュールはハイブリッド並列版を用いる. 複素数の実装は C99&Macros とし, コンパイラオプションとして-Kfast を用いてコンパイルしたものを基本とする. モデルとして 100 万自由度のケーキモデルを用い, 部分領域数を 8,800 とする. 計測には 8 ノードを用いる.

本項での検討として,以下を行う.

- a) 最内側ループを行で回していた 2 次元配列を 扱うループで、最内側ループを列で回すよう にループ入れ替え
- b) a) +realloc 呼び出し回数の削減
- c) b) +コンパイラによる SIMD 化促進のための 指示行を挿入
- d) c) +コンパイラオプションによる最適化を試行: -Kfast,ocl,restp=arg,preex

表 3 にチューニング結果を示す. ノードあたりの計算負荷が小さいにも関わらず前項よりも計算時間が長くなっているのは、テストした反復回数が異なるためである. ピーク性能比は1.24 倍程度にとどまったが、ノードあたりの計算負荷が小さいにも関わらず前項よりもピーク性能比が高く、最終的に7.41%まで向上することができた. チューニング開始前は約0.8%であったことから、一連のチューニングによって9倍以上の効率化を達成できた.

表 3. チューニング結果 2

	Time [s] (ratio to asis)	FLOPS / PEAK [%]
asis	850.63 (1.00)	5.95
a)	725.48 (1.17)	6.96
b)	703.35 (1.21)	7.20
c)	690.18 (1.23)	7.31
d)	683.17 (1.25)	7.41

参考文献

[1] 金山寛, 岩波講座 現代工学の基礎 <空間系 IV> 計算電磁気学, 岩波書店,

2000.

[2] 宮村倫司,野口裕久,塩谷隆二,吉村忍, 矢川元基,階層型領域分割法による超並 列弾塑性有限要素解析,日本機械学会論 文集(A 編), 65-634, pp. 1201-1208, 1999.

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

ほぼ計画通りに進めることができた. ピーク性能比もチューニング前は FX10 で約 0.8%であったが,最終的に 7.41%まで向上させることができた. ただし FX100 では半分程度に落ちてしまい,課題が残った. これは SIMD 化が不十分で,FX10 から 2 倍になった SIMD 演算の幅に対応できていていないためと思われる. 今後はさらにSIMD 化を進める検討を行うとともに,より高並列な環境での性能向上を検討していく.

7. 研究成果リスト

(1) 学術論文

- [1] Amane TAKEI, Kohei MUROTANI,
 Shin-ichiro SUGIMOTO, Masao OGINO
 and Hiroshi KAWAI, High-Accuracy
 Electromagnetic Field Simulation using
 Numerical Human Body Models, IEEE
 Transactions on Magnetics, in press.
- (2) 国際会議プロシーディングス

(3) 国際会議発表

- [1] Shin-ichiro SUGIMOTO, Daisuke TAGAMI, Masao OGINO, Amane TAKEI and Hiroshi KANAYAMA, Improvement of Convergence in Time-Harmonic Eddy Current Analysis by Hierarchical Domain Method, The Decomposition 20th International Conference the on Computation of Electromagnetic Fields (COMPUMAG2015), USB, 2015.
- [2] <u>Amane TAKEI</u>, <u>Kohei MUROTANI</u>, <u>Shin-ichiro SUGIMOTO</u>, <u>Masao OGINO</u> and Hiroshi KAWAI, High-accuracy

- electromagnetic field simulation using numerical human body models, The 20th International Conference on the Computation of Electromagnetic Fields (COMPUMAG2015), USB, 2015.
- [3] <u>Hiroshi KANAYAMA</u>, <u>Masao OGINO</u> and <u>Shin-ichiro SUGIMOTO</u>, Preconditioners in Domain Decomposition Method for Magnetostatic Problems, The 6th International Conference on Computational Methods, 2015.
- [4] Shin-ichiro SUGIMOTO, Implementation and Acceleration of the HDDM for the Electromagnetic Field Problem (2nd report), The 34th JSST Annual Conference, International Conference on Simulation Technology, online, 2015.

(4) 国内会議発表

- [1] <u>金山寛</u>, <u>荻野正雄</u>, <u>杉本振一郎</u>, 鄭宏杰, 大規模静磁場インターフェイス問題用前処 理の開発, 第 27 回「電磁力関連のダイナミ クス」シンポジウム講演論文集, pp.451-454, 2015.
- [2] 武居周, <u>杉本振一郎</u>, ボクセルメッシュモデルを用いる並列高周波電磁界解析, 第 27 回「電磁力関連のダイナミクス」シンポジウム講演論文集, pp.455-458, 2015.
- [3] <u>杉本振一郎</u>,領域分割法における時間調和 渦電流解析の収束性改善,第 27 回「電磁力 関連のダイナミクス」シンポジウム講演論 文集,pp.459-460,2015.
- [4] <u>武居周</u>, <u>杉本振一郎</u>, ボクセルメッシュモデルを用いる並列 full-wave 電磁界解析, 計算工学講演会論文集, Vol.20, CD-ROM, 2015.
- [5] <u>杉本振一郎</u>,田上大助,<u>荻野正雄</u>,武居周, 金山寛, 階層型領域分割法における時間調 和渦電流解析の収束性改善(第2報),計算工 学講演会論文集,Vol.20,CD-ROM, 2015.
- [6] 杉本振一郎,電磁場解析向け並列有限要素

- 法ソルバの高度化・高速化の取り組み,日本機械学会 第 28 回計算力学講演会 (CMD2015), CD-ROM, 2015.
- [7] <u>金山寛</u>, <u>荻野正雄</u>, <u>杉本振一郎</u>, 鄭宏杰, 淀薫, 静磁場領域分割インターフェイス問 題の前処理付き共役勾配法
- [8] 武居周,領域分割法に基づく高性能並列電磁界解析手法,日本機械学会 第 28 回計算力学講演会(CMD2015), CD-ROM, 2015.
- (5) その他(特許, プレス発表, 著書等)