

並列幾何マルチグリッド法による大規模高周波電磁場有限要素解析

廣谷 迪[†] 美船 健[†] 岩下 武史^{††} 村山 敏夫^{†††}
大谷 秀樹^{†††}

Large-Scale High-Frequency Electromagnetic Finite Element Analysis
Using the Parallel Geometric Multigrid Method

Yu HIROTANI[†], Takeshi MIFUNE[†], Takeshi IWASHITA^{††}, Toshio MURAYAMA^{†††},
and Hideki OHTANI^{†††}

あらまし 本論文では、1 億自由度を超える大規模高周波電磁場問題に対する、幾何マルチグリッド法と分散並列処理を組み合わせた求解手法について述べる。電磁場有限要素解析におけるマルチグリッド法において用いられる“AFW (Arnold, Folk, Winther) スムーザ”は、本質的に並列化が困難な手法であり、並列化には特別な処置が必要となる。そこで筆者らは、差分析等を用いられるマルチカラーオーダーリング法の応用を検討し、並列化アルゴリズムの開発を進めてきた。しかしながら同手法は“反復解法の収束性”と“並列計算の粒度”にトレードオフの関係をもつため、並列計算環境下において収束性の改善が困難となる問題がある。そこで本論文では、本トレードオフ問題を解消し、更なる解析の高速化を図るため、領域分割型オーダーリングとブロック化マルチカラーオーダーリングの併用手法を新たに提案し、SMP クラス型並列計算機 Fujitsu SPARC Enterprise M9000 による数値実験によりその有効性を検証した。その結果、約 1 億 7000 万自由度の問題について、マルチカラーオーダーリングのみを用いた場合と比較して計算時間を約 1/3 まで短縮することに成功したほか、約 8 億自由度の問題を 16 分程度で求解することを可能とした。

キーワード 高周波電磁場解析, マルチグリッド法, マルチカラーオーダーリング, 並列処理

1. ま え が き

計算機による電磁場シミュレーションは、電気電子機器の設計、解析、評価等の目的で広く利用されているが、近年の機器の小型化や動作環境を含めた解析の必要性から、解析の大規模化が進み、その計算コストが多大なものとなってきている。特に、MHz~GHz 帯の電磁場を扱う高周波電磁場解析では、表皮効果や波長分割の観点から、解析対象の大規模化への要請は大きい。そこで筆者らは、高周波電磁場の周波数領域における主流な解析手法である辺要素有限要素法を用いて、解析の大規模化及び高速化を目的とした研究を

進めてきた。有限要素法では、大規模な疎行列を係数とする連立一次方程式を解く必要があり、その計算コストが解析全体の計算コストの大部分を占める。そこで本研究では、大規模解析において有用性がある幾何マルチグリッド法 [1] と並列処理を組み合わせることにより、これまでにほとんど報告例 [2] のない 1 億自由度を超える高周波電磁場有限要素解析を目指す。幾何マルチグリッド法は、有限要素法等により導かれる連立一次方程式に対して問題サイズに依存しない収束性を有する反復解法であり、大規模解析に適した手法として注目されている [3]~[5]。

本論文では、上記の研究の一環として、約 2~8 億自由度の大規模解析を可能とする分散メモリ環境に対応した並列幾何マルチグリッド前処理付き反復法について、その並列化を中心に述べる。幾何マルチグリッド法を用いた反復ソルバの並列化に際しては、反復中の計算の大部分を占めるスムーザの並列化が計算時間の観点で最も重要である。しかしながら、電磁場有限要素解析におけるマルチグリッド法では、Hiptmair

[†] 京都大学大学院工学研究科, 京都市
Graduate School of Engineering, Kyoto University, Kyoto-shi, 615-8510 Japan

^{††} 京都大学学術情報メディアセンター, 京都市
Kyoto University Academic Center for Computing and Media Studies, Kyoto-shi, 606-8501 Japan

^{†††} ソニー株式会社生産本部モノ造り技術部門, 東京都
Sony Corporation, Production Group, MONO-ZUKURI Technology Div., Shinagawa-ku, Tokyo, 141-0032 Japan

の Hybrid スムーザ [6] や Anold らの AFW (Arnold, Falk, Winther) スムーザ [7] といった特殊なスムーザを用いる必要があり、いずれの解法も逐次性を有している。これらのスムーザのうち、本論文では AFW スムーザを用いることとしたが、その分散メモリ並列化が本論文の主題となる。

AFW スムーザは乗法シュワルツ法的一种であるために、そのままでは並列化できず、何らかの並列処理手法の適用が必要となる。そこで筆者らはまず、差分解析等で広く用いられている並列化手法“マルチカラーオーダーリング [8]”を拡張することにより、AFW スムーザの並列化を可能とした [5]。しかしながら、マルチカラーオーダーリングは“解法の収束性”と“並列計算の粒度”にトレードオフの関係をもつ手法であるため、これ以上の計算性能改善を得ることは困難である。このマルチカラーオーダーリングの問題点に対して、筆者らは文献 [9], [10] においてブロック化マルチカラーオーダーリングと呼ばれる手法を提案している。本手法は未知変数や差分格子における節点をまずブロック化し、そのブロックに対してマルチカラーオーダーリングを適用する方法である。このようなブロック化により“並列計算の粒度”を低下させることなく、反復法の収束性を向上させることが可能となる [5]。しかしながら、文献 [5] で開発した手法は共有メモリ環境における並列化を想定したものであり、本研究で対象とする分散メモリ環境においては、プロセス間の境界部分の処理に困難を生ずる。

そこで、本論文では領域分割型オーダーリングとブロック化マルチカラーオーダーリングを併用する方法を AFW スムーザの並列化手法として提案する。同手法では、各プロセスの担当領域間の境界に位置する辺要素の計算を領域内部の計算に対して後回しにすることで、並列化に必要な通信量を最小化する。更に領域内部に対してブロック化マルチカラーオーダーリングを適用することにより、収束性や粒度の低下を抑えながらプロセス/スレッドのハイブリッド並列処理を可能とする。ハイブリッド並列処理では、使用プロセス数を抑えることにより、通信コストや領域分割オーダーリングが収束性に与える影響を低く抑えることができる。

本提案手法について、SMP クラスタ型並列計算機 Fujitsu SPARC Enterprise M9000 を用いて検証を行う。数値実験では、約 1 億 7000 万自由度の問題を対象として提案手法の評価を行い、併せて解法におけるパラメータ値や、適切なプロセス/スレッド数につい

て検討する。また最終的に、約 8 億自由度での大規模解析に対し、提案手法を適用した結果についても報告する。

2. 対象問題と求解手法

2.1 基礎方程式の定式化

本論文では、マクスウェル方程式から導かれる波動方程式、式 (1) を求解対象とする。ただし、 $\vec{E}$ は電界、 ϵ は誘電率、 μ は透磁率、 σ は導電率、 $\vec{J}_0$ は電流ソース、 ω は角周波数、 j は虚数単位である。

$$\nabla \times \frac{1}{\mu} \nabla \times \vec{E} - \omega^2 \left(\epsilon + \frac{\sigma}{j\omega} \right) \vec{E} = -j\omega \vec{J}_0 \quad (1)$$

式 (1) の弱形式について、電界 $\vec{E}$ を未知数として辺要素有限要素法による離散化を行うと、以下のスパースな係数行列をもつ離散化方程式 (連立一次方程式) (2) が導出される [1], [11]。

$$(K_{cc} - \omega^2 K_m) \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad (2)$$

ここで、 K_{cc} 、 K_m 、 $\mathbf{b}$ は剛性行列、質量行列、右辺ベクトルであり、それぞれベクトル基底関数 $\mathbf{N}$ を用いて式 (3)~(5) のように記述される。

$$[K_{cc}]^{ij} = \iiint_{\Omega} \frac{1}{\mu} (\nabla \times \mathbf{N}_i) \cdot (\nabla \times \mathbf{N}_j) dV \quad (3)$$

$$[K_m]^{ij} = \iiint_{\Omega} \left(\epsilon + \frac{\sigma}{j\omega} \right) \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j dV \quad (4)$$

$$[\mathbf{b}]^i = -j\omega \iiint_{\Omega} \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{J}_0 dV \quad (5)$$

式 (2) を解くことにより、各辺要素に定義された電界ベクトル $\mathbf{x}$ を求め、対象問題における電磁場をシミュレートする。

2.2 幾何マルチグリッド法

本論文では、連立一次方程式の求解法として、V サイクル幾何マルチグリッド法を前処理とする反復法を用いる。そこで、幾何マルチグリッド法について、以下に簡単に述べる。幾何マルチグリッド法では、もとのグリッド (ファイングリッド) Ω^1 に対して、制約 (Restriction)・補間 (Prolongation) 行列で結び付けられた、幾何学的に粗いグリッド (コースグリッド) $\Omega^2, \Omega^3, \dots, \Omega^n$ を用意する。これらの複数のグリッドをもとに、図 1 のような処理を行う。ただし、 $\mathbf{A}^m$ 、 $\mathbf{x}^m$ 、 $\mathbf{b}^m$ 、 $\mathbf{r}^m$ は Ω^m における係数行列、解ベクトル、右辺ベクトル、残差ベクトル、 R_m 、 P_m は、 Ω^m にお

```

for m=1,2,...,n-1
  Presmoothing:  $A^m \mathbf{x}^m = \mathbf{b}^m$  on  $\Omega^m$ 
  Restriction:  $\mathbf{b}^{m+1} = R_m \mathbf{r}^m$ 
endfor
solve:  $A^n \mathbf{x}^n = \mathbf{b}^n$  on  $\Omega^n$ 
for m=n-1,n-2,...,1
  Prolongation:  $\mathbf{x}_{\text{new}}^m = \mathbf{x}^m + P_{m+1} \mathbf{x}^{m+1}$ 
  Postsmoothing:  $A^m \mathbf{x}^m = \mathbf{b}^m$  on  $\Omega^m$ 
endfor
    
```

図 1 V サイクルマルチグリッド法
Fig. 1 V-cycle multigrid method.

いて幾何学的に決定される制約行列，補間行列とする。

図 1 のマルチグリッド法には，スムージング (Smoothing) と呼ばれる処理が含まれている。スムージングの役割は，適当な反復法を用いて連立方程式 $A^m \mathbf{x}^m = \mathbf{b}^m$ に対する近似解を更新し，近似解に含まれる誤差成分のうち（空間的）高周波成分を減衰させることである [1]。密なグリッドにおける低周波成分がより疎なグリッドにおいては相対的に高周波成分として表現されることに注意して，グリッド間の写像を行いながら，各グリッドにおいてそのグリッドで表現される高周波誤差成分を減衰させていくことにより，マルチグリッド法全体で良好な反復収束性を得ることができる。

図 1 中の最も粗いグリッドにおける連立一次方程式 $A^n \mathbf{x}^n = \mathbf{b}^n$ の解法としては，通常，直接法が用いられることが多いが，本解析ではクリロフ部分空間法を使用する。

次節において，本論文の議論上重要な AFW (Arnold, Falk, Winther) スムーザについて述べる。

2.3 AFW スムーザ

本手法では前節で述べた幾何マルチグリッド法のスムーザとして，Arnold らが提案した AFW スムーザ [7] を用いる。AFW スムーザは乗法シュワルツ法（ブロックガウスザイデル法）の一種で，有限要素電磁場解析のために提案された特殊なスムーザであり，その有用性多くの解析において実証されている [12]。同スムーザの特徴は乗法シュワルツ法における部分領域（ブロックガウスザイデル法におけるブロック）の構成法にある。具体的には，有限要素において離散化されたモデル上の各節点を単位とし，この節点を端点として共有する辺要素の集合により部分領域（ブロック）を構成する。このような辺要素の集合を文献 [12] では節点パッチと呼んでおり，本論文でも以下その呼

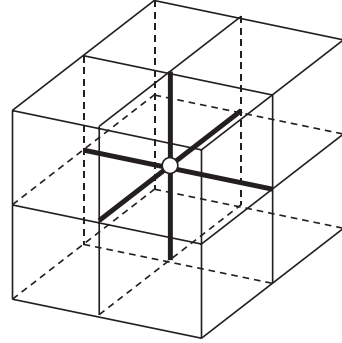


図 2 立方体要素に対する節点パッチ
Fig. 2 A node patch for cubic elements.

```

(a) Input:  $\mathbf{r}^m = \mathbf{b}^m$ 
(b) Setup:  $\mathbf{z}^m = 0$ 
(c) for  $p = 1, 2, \dots, n_p^m$ 
(d)  $\mathbf{z}^m = \mathbf{z}^m + (R_p^m)^T (A_p^m)^{-1} R_p^m (\mathbf{r}^m - A^m \mathbf{z}^m)$ 
(e) endfor
(f) Output:  $\mathbf{x}^m = \mathbf{z}^m$ 
    
```

図 3 AFW スムーザ
Fig. 3 AFW smoother.

称を用いることとする。図 2 に立方体要素に対する節点パッチの例を示す。次に，AFW スムーザを m レベルにおける Presmoothing として使用する場合の手順を図 3 に示す。この図において， $\mathbf{r}^m$ ， $\mathbf{z}^m$ は，グリッド Ω^m 上の未知変数の総数を n_e^m として， n_e^m 次元ベクトルである。また， A^m はグリッド Ω^m 上の係数行列， A_p^m は係数行列 A^m から節点パッチ p に対応する部分を抜き出した行列， n_p^m はグリッド Ω^m の節点の総数， R_p^m は A^m から A_p^m への写像に対応する制約演算子である。

図 3 中の (c)～(e) の処理に見られるように AFW スムーザはガウスザイデル法と同様の逐次性をもっており，単純には並列化できない。なお，Postsmoothing として AFW スムーザを使用する場合には，ループ (c)～(e) の順序を逆にしたものを使用する。

2.4 幾何マルチグリッド法の分散メモリ環境における並列化

本研究では，分散メモリ型の並列計算環境での幾何マルチグリッド法を含むソルバの並列化を行う。より具体的には，複数の共有メモリ型計算機（ノード）がネットワークを通して接続された，一般に SMP クラスタと呼ばれる並列計算機を対象とする。このような計算環境では MPI 通信等によるプロセス並列処理に

加えて、プロセス/スレッド併用型のハイブリッド並列処理が可能となり、より柔軟性の高い並列処理が実現できる。以下にまず、データのメモリ分散に関して述べる。

本研究では、有限要素法の要素形状として直方体辺要素を用いることとし、解析モデル全体を三次元分割する。すなわち、 x, y, z 方向に対してそれぞれ p, q, r 分割する。ここで、使用プロセス数 P は $P = p \times q \times r$ を満たすものとし、各プロセスは分割された領域に関するデータ、具体的には領域に含まれる辺要素やそれらの辺要素に関連する係数行列の部分データを保持する。また、各解析領域の境界に含まれる辺要素は、関連するプロセスが重複して保持するものとする。

上記のデータ分散環境下において、ソルバの並列化は以下のように行われる。まず、本解析におけるソルバは AFW スムーザを用いた幾何マルチグリッド法を前処理とする反復法（クリロフ部分空間法）である。2.2 で述べたように、幾何マルチグリッド法は、1. クリロフ部分空間法を用いた最粗グリッドの求解、2. 制約・補間処理、3. AFW スムーザから構成される。ここで、基礎反復法及び上記 1. 最粗グリッドの解法として用いられるクリロフ部分空間法は、主に「ベクトルの内積」と「疎行列ベクトル積」から構成される。本計算は、各プロセスが保持しているデータをもとに互いに独立に計算を行い、MPIAllreduce や MPIAllgather 等の MPI の集合通信を利用することで比較的簡単に並列化することができる。次に、幾何マルチグリッド法における制約・補間のグリッド間写像についても処理自体は並列化可能で、境界辺要素に関する通信により当該境界に関連する二つのプロセスにおいてデータ交換することで並列化できる。そこで、ソルバ全体の分散・並列処理において問題となるのは AFW スムーザである。図 1、図 3 から示唆されるように、AFW スムーザの計算はソルバ全体の計算時間の大半を占めるためにその並列実行性能がソルバ全体の並列化効率に大きな影響を与える。そこで、次章において AFW スムーザの並列化について詳細に述べる。

3. AFW スムーザの並列化手法

3.1 マルチカラーオーダーリングの AFW スムーザへの拡張

図 3 に示される AFW スムーザの並列化のためには、図中の (c)~(e) の各節点パッチに対する処理が互

```

if  $k \in S_i, l \in S_j$  exist such that  $a_{kl} \neq 0$ 
  節点  $i$  と節点  $j$  は依存関係を持つ
else
  節点  $i$  と節点  $j$  は依存関係を持たない
endif

```

図 4 節点パッチ間の依存関係

Fig. 4 Dependencies between node patches.

いに独立に実行できる必要がある。すなわち、並列化される節点パッチ間に重複する辺要素があってはならない。そこで、本節では差分法における既存並列化手法としてよく知られているマルチカラーオーダーリングを利用することを考える。マルチカラーオーダーリングでは、節点全体 G を“ c 色で色分けされた部分集合 $C(l), l = 1, 2, \dots, c$ ” に分割し、 $C(1)$ から $C(c)$ まで、色の順に並べ換えを行う。ただし、各部分集合 $C(l)$ については、内部の節点間に依存関係がないように選択する。このように並べ換えられた節点は、各色において依存関係をもたないため、色ごとに並列化が可能となる。

本論文では、このマルチカラーオーダーリングを辺要素の集合で構成された AFW スムーザの節点パッチに対して拡張する。つまり、AFW スムーザは辺要素を更新する手法であるが、対象辺要素の参照は節点を単位において行われる。そこで、節点に対して、節点パッチ間の重なり（依存関係）に注意しながら色付けを行うことで、既存のマルチカラーオーダーリングと同様に、並列化が実現できる。ここで“節点パッチ間の依存関係”は係数行列 A^m の非零要素の位置によって決められ、具体的には図 4 のように与えられる。ただし、節点 i が構成する節点パッチに属する辺要素の集合を S_i 、節点 j が構成する節点パッチに属する辺要素の集合を S_j 、行列 A^m の (k, l) 要素を a_{kl} で表す。また、依存関係の判定において行列の対称性を仮定している。本手法では、同色の節点同士が、図 4 に示す意味で依存関係をもたないように色付けを行う。

上述した節点パッチ間の依存関係を考慮したマルチカラーオーダーリングの一つとして、以下のような色付け手法が考えられる [5]。

$$\begin{aligned}
 C(l) = \{(\alpha, \beta, \gamma) \in G \mid & l = 1 + \text{mod}(\alpha - 1, c_x) \\
 & + c_x * \text{mod}(\beta - 1, c_y) \\
 & + c_x * c_y * \text{mod}(\gamma - 1, c_z)\} \quad (6)
 \end{aligned}$$

ここで整数の組 (α, β, γ) は節点の格子座標を表す。 $x,$

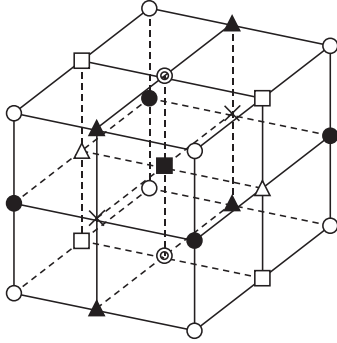


図5 AFW マルチカラーオーダーリング ($c = 8$)
Fig. 5 AFW multi-color ordering ($c = 8$).

y, z 方向の節点数をそれぞれ N_x, N_y, N_z とすれば, $1 \leq \alpha \leq N_x, 1 \leq \beta \leq N_y, 1 \leq \gamma \leq N_z$ である. この色付けでは, 辺要素有限要素法において一つの直方体メッシュに含まれる辺要素 k, l について, $a_{kl} \neq 0$ となる点が考慮されている.

式 (6) の色付け手法について $c_x = c_y = c_z = 2$ とした場合の例を図 5 に示す. ただし, c_x, c_y, c_z はそれぞれ x, y, z 方向の色数で $c = c_x c_y c_z$ である. 以下では同手法を便宜上, “AFW マルチカラーオーダーリング” と呼ぶこととする.

次に, AFW マルチカラーオーダーリングにおける問題点について考える. マルチカラーオーダーリングでは, 色ごとに処理を並列化するために, 色数に比例した回数の同期若しくは通信処理が必要となる. その一方で, 反復法の並列化手法として同手法を利用した場合, 色数が多いほど収束性が高くなる現象が報告されている [5], [8], [9]. したがって, マルチカラーオーダーリングは, “収束性” と “並列計算の粒度” にトレードオフが生じる手法であるといえ, “反復回数” と “1 反復当りの計算時間” を同時に削減することが困難であるという問題を内包している.

上記のマルチカラーオーダーリングの問題に対して, 筆者らは文献 [9], [10] においてブロック化マルチカラーオーダーリングを提案し, より並列性能の高い並列反復ソルバの開発を行っている. ブロック化マルチカラーオーダーリングは節点や未知変数をブロック化し, これらのブロックに対してマルチカラーオーダーリングを適用するもので, ブロック化により並列計算の粒度を維持しながら収束性の改善を行うことが可能となる. しかしながら, 本手法を分散メモリ環境下での AFW スムーザに拡張して適用する場合, 結果的に境界通信を

必要とする節点パッチの数が各プロセス内で増加し, 通信コストの点で問題が生ずる. そこで, 本論文では, 領域分割型のオーダーリングとブロックマルチカラーオーダーリングを併用する AFW スムーザの並列化手法を新たに提案する. 提案手法の詳細について次節で述べる.

3.2 領域分割型オーダーリングとブロック化マルチカラーオーダーリングの併用法 (提案手法)

本論文で提案する手法は, 領域分割型オーダーリングとブロック化マルチカラーオーダーリングを併用し, これらの方法を AFW スムーザ向けに拡張した方法である. 以下にその詳細を示す. まず各プロセスが保持する節点パッチについて, 境界辺要素を含むものを “interface パッチ”, 含まないものを “inner パッチ” として分類する. 更に, inner パッチの中心節点から先にオーダーリングし, interface パッチの中心節点を後から順序付けする. ただし中心節点とは, 節点パッチ S_i に対して節点 i を指すものとする. 次に, 各プロセスの inner パッチに対してブロック化マルチカラーオーダーリングを適用する. この場合, 適用対象が AFW スムーザであることを考慮すると, まず定められた数の節点パッチをブロック化し, 互いに依存関係にないブロックが同色になるように色分けする. ここでブロック間の依存関係は, 図 4 において S_i, S_j をそれぞれ, ブロックに属する辺要素の集合と読み替えることで与えられる (ブロック内における辺要素間には依存関係が生じてよい). 次に, interface パッチに対して 3.1 で述べた AFW マルチカラーオーダーリングを適用する. 本手法は, 通信処理を interface パッチにすべて担当させることにより, 各プロセスがもつ inner パッチにおいてマルチカラーオーダーリングよりも高い性能が期待されるブロック化マルチカラーオーダーリングの利用を可能にするものである. なお, 上記の提案手法において, inner パッチはプロセス間で独立であるため, プロセス並列処理のみを利用する場合には inner パッチへのブロック化マルチカラーオーダーリングの適用は必要とされない. しかしながら, 本研究ではプロセス/スレッドハイブリッド並列処理も視野にいれ, 上記の方法を提案手法としている.

上述の依存関係を考慮した色付けについて考える. まず, interface パッチに対する AFW マルチカラーオーダーリングとしては, 式 (6) の色付け手法を採用する. ただし, このときの色の集合を $C_b(l)$, 色数を c_b とする.

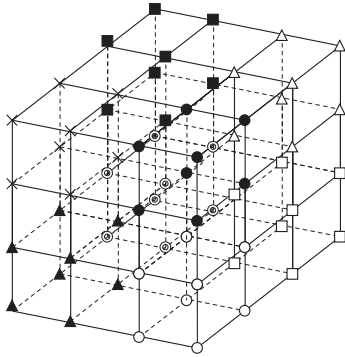


図6 Inner パッチの色付け ($c_i = 8, b_i = 2$)
Fig.6 Coloring of inner patches ($c_i = 8, b_i = 2$).

次に inner パッチに対する色付けを考える. inner パッチは前述したとおり, 「同じブロックに属する節点パッチは互いに依存関係をもってよいが, 同色かつブロックの異なる節点パッチは依存関係をもたない」ような色付けを行う必要がある. このような色付けは多数考えられるが, 本解析では格子座標 (α, β, γ) の節点に対して式 (7) で表される色付けを行い, 更に同色に含まれる節点に対して式 (8) に示すブロック分割を行う. このとき, ブロックは $b_x \times b_y \times b_z$ 個の中心節点から構成されるものとし, ブロックサイズを $b_i (= b_x = b_y = b_z)$ として表す.

$$C_i(l) = \left\{ (\alpha, \beta, \gamma) \in G \mid l = 1 + \text{mod} \left(\left[\frac{\alpha - 1}{b_i} \right], c_{ix} \right) + c_{ix} * \text{mod} \left(\left[\frac{\beta - 1}{b_i} \right], c_{iy} \right) + c_{ix} * c_{iy} * \text{mod} \left(\left[\frac{\gamma - 1}{b_i} \right], c_{iz} \right) \right\} \quad (7)$$

$$B_l(q) = \left\{ (\alpha, \beta, \gamma) \in C_i(l) \mid q = 1 + \left[\frac{\alpha - 1}{c_{ix} * b_i} \right] + \left[\frac{\beta - 1}{c_{iy} * b_i} \right] * \left[\frac{n_x + c_{ix} * b_i - 1}{c_{ix} * b_i} \right] + \left[\frac{\gamma - 1}{c_{iz} * b_i} \right] * \left[\frac{n_x + c_{ix} * b_i - 1}{c_{ix} * b_i} \right] * \left[\frac{n_y + c_{iy} * b_i - 1}{c_{iy} * b_i} \right] \right\} \quad (8)$$

式 (7), (8) は inner パッチのみに適用するものである. (α, β, γ) は各プロセスごとの局所的な格子座標と考えてよい. あるプロセスの扱う領域の x, y, z 方向の節点数を n_x, n_y, n_z とすれば, $1 \leq \alpha \leq n_x, 1 \leq \beta \leq n_y, 1 \leq \gamma \leq n_z$ である. 式 (7) では各色に

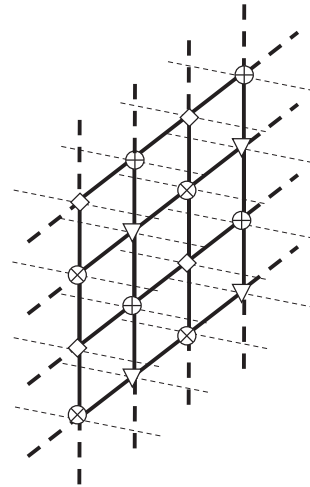


図7 Interface パッチの色付け ($c_b = 8$)
Fig.7 Coloring of interface patches ($c_b = 8$).

```

Input:  $r^m = b^m$ 
Setup:  $z^m = 0$ 
for  $l = 1, 2, \dots, c_i$ 
  Thread-Parallelize
    for  $q = q_{\text{start}}, \dots, q_{\text{end}} \mid B_l(q) \subset C_i(l)$ 
      for  $p = p_{\text{start}}, \dots, p_{\text{end}} \mid p \in B_l(q)$ 
         $z^m = z^m + (R_p^m)^T (A_p^m)^{-1} R_p^m (r^m - A^m z^m)$ 
      endfor
    endfor
  endfor
END Thread-Parallelize
endfor
for  $l = 1, 2, \dots, c_b$ 
  Thread-Parallelize
    for  $p = p_{\text{start}}, \dots, p_{\text{end}} \mid p \in C_b(l)$ 
       $z^m = z^m + (R_p^m)^T (A_p^m)^{-1} R_p^m (r^m - A^m z^m)$ 
    endfor
  END Thread-Parallelize
  MPI Communication
endfor
Output:  $x^m = z^m$ 

```

図8 提案手法を用いて並列化された AFW スムーザ
Fig.8 AFW smoother parallelized by proposed method.

属する中心節点の集合を $C_i(l)$, inner パッチの色数を $c_i (= c_{ix} c_{iy} c_{iz} \mid c_{ix} = c_{iy} = c_{iz})$ とし, 式 (8) では番号 q をもつブロックを $B_l(q)$, x, y 方向の節点の数を n_x, n_y とする. また, x を超えない最大の整数を $[x]$ として表す. 本手法では, 各節点に対してブロックマルチカラーオーダリングにおける色番号 l , ブロック番号 q の組が一意に決定できるため, 各色 l において番号 q に従って $B_l(q)$ を処理することにより, ブロックマル

チカラーオーダーリングの利用が可能となる．本手法における色付けは，以上三つの値 (c_b , c_i , b_i) で決定できる．例として， $c_b = 8$ (式 (6) で $c_x = c_y = c_z = 2$ としたのに相当)， $c_i = 8$, $b_i = 2$ とした場合の色付けを図 6, 図 7 に示す．ただし図 7 ではプロセス境界面の一部のみを表示しているため， $c_b = 8$ 色のうち 4 色のみが現れている．

次に提案手法を用いて並列化された m レベルにおける AFW スムーザ (Presmoothen) を図 8 に示す．この処理の流れから分かるように， c_b は MPI 通信処理の回数， c_i はスレッド並列処理の同期回数， b_i は $B_l(q)$ の決定方法に密接に関連するパラメータとなる．したがって，計算時間になるべく最小となるよう，数値実験により適切な値を決定する必要がある．

4. 数値実験

4.1 解析条件

解析は，京都大学学術メディアセンターのスーパーコンピュータシステム，Fujitsu SPARC Enterprise M9000 クラスタ (SPARC64, 2.5 GHz) 上で実行した．本計算機は，1 ノード当りプロセッサ数 32, CPU コア数 32×4 , メモリ 1 TB のスペックをもつ．本論文では，このうち最大 2 ノード，すなわち，256 個の CPU コアを用いて計算を行った．プログラムコードは FORTRAN を用いて記述した．プロセス並列におけるプロセス間通信には MPI ライブラリを利用し，並列化 AFW スムーザにおいてスレッド並列処理を併せて利用する場合には，OpenMP を使用した．

連立一次方程式の解法としては，クリロフ部分空間法である FGMRES (Flexible Generalized Minimal RESidual) 法 [13], [14] に，前処理として幾何マルチグリッド法を施したものを用いた．解法の相対残差ノルムの収束判定値は 10^{-10} とする．また，幾何マルチグリッド法については，コースグリッド数をメッシュの分割限度までとし，最粗グリッドの解法としては COCR (Conjugate Orthogonal Conjugate Residual) 法 [15] を用いる．COCR 法の収束判定値は 10^{-3} とする．

なお，本数値実験では，反復解法であるマルチグリッド前処理付き FGMRES 法について，セットアップ部分 (コースグリッドの作成，節点パッチの作成) を含む反復開始から収束までの時間を「求解時間 (s)」，反復部分における 1 反復当りの平均求解時間を「1 反復当りの求解時間 (s)」として計時している．

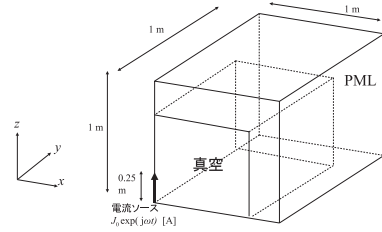


図 9 精度検証用モデル
Fig. 9 Model for validation.

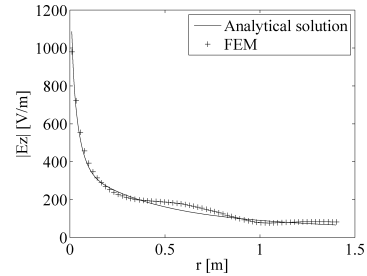


図 10 解析解との比較
Fig. 10 Comparison with the analytical solution.

4.2 解析コードの検証

並列計算実験に先立って，解析コードの信頼性の検証のために，図 9 のように真空中に配置された線状電流ソースによる放射電磁場について解析を行った． x , y , z 方向それぞれを 64 分割したメッシュを用い， $z = 0$, $x = y$ における有限要素解析結果と解析解の比較を図 10 に示す ($r = \sqrt{x^2 + y^2}$)．なお，真空領域の端部には 16 層の電波吸収媒質 PML (Perfectly Matched Layer) [16], [17] を設けている．PML の効果が不完全なための差異は見られるが，有限要素解析による解は解析解とよく一致している．

4.3 解析モデル

以下の並列計算実験では，図 11 に概略を示すモデルを用いて提案手法の評価を行う．解析対象として誘電体や磁性体を含む立方体領域 (一辺 0.15 [m], 1/2 分割) を考え，2.5 [GHz] の周波数の電流源を与えている．モデルの真空領域の端部には PML (Perfectly Matched Layer) を設ける．モデルの諸元を表 1 に示す．

4.4 AFW マルチカラーオーダーリングの検証

提案手法に対する比較対象として，3.1 で述べた AFW マルチカラーオーダーリングをスムーザの並列化手法として用いた場合について，その特性を検証する．

AFW マルチカラーオーダーリングについて，色数 c

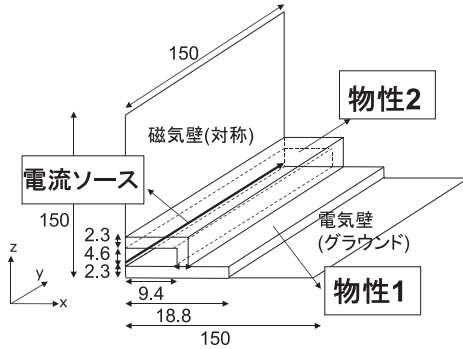


図 11 モデルの概略図 (単位: mm)

Fig. 11 Outline of analysis model (unit: mm).

表 1 モデルの諸元

Table 1 Specification of analysis model.

分割数	384 × 384 × 384 (等分割)
要素形状	立方体
要素数	56,623,104
節点数	57,066,625
未知数	170,755,200
物性 1	$\epsilon_r = 10$, $\mu_r = 1$, $\sigma = 0$
物性 2	$\epsilon_r = 2 - 4j$, $\mu_r = 10 - 5j$, $\sigma = 0$

表 2 AFW マルチカラーオーダーリングの結果

Table 2 Result of analysis using AFW multi-color ordering.

色数 c (1 辺当りの色数)				
8(2)	27(3)	64(4)	125(5)	216(6)
65	44	41	33	35
583	595	818	1038	1556
343(7)	512(8)	729(9)	1000(10)	3375(15)
21	32	21	25	21
1535	2905	2872	4313	11220

注. 枠内の表記 上段: 反復回数, 下段: 求解時間 (s)

を 8 から 3375 まで変化させたときの結果を表 2 に示す。ただし、計算には CPU コアを 256 個使用し、プロセス並列数 P は 64、スレッド並列数 T は 4 とする。この結果から分かるように、AFW マルチカラーオーダーリングでは、色数の増加とともに反復回数はおおむね減少するものの、求解時間は増加する。これは、反復回数削減の効果が、並列計算における粒度が増大することによる 1 反復当りの求解時間の増加により打ち消されるためであると考えられる。

4.5 提案手法のパラメータ設定

次に、3.2 で述べた提案手法の特性について調べる。そのために、提案手法のパラメータである c_b , c_i , b_i について適正値の検討を行う。また同時に、同一の使用コア数に対するプロセス並列数 P とスレッド並列数

表 3 c_b を変化させたときの結果Table 3 Result of various c_b .

interface パッチの色数 c_b (1 辺当りの色数)	反復 回数	求解時間 (s)	1 反復当りの 求解時間 (s)
8(2)	21	550	23.595
27(3)	21	682	28.767
64(4)	21	809	35.976
125(5)	21	1080	48.869

T の組合せについて検討を行う。

4.5.1 c_b の決定

提案手法において、interface パッチの色数 c_b は、通信回数とソルバの収束性に密接にかかわる重要なパラメータである。そこで、AFW ブロック化マルチカラーオーダーリングに用いるパラメータ c_i , b_i を固定し、 c_b のみを変化させることで、interface パッチの色数が収束性や求解時間に与える影響を調べる。64 個の CPU コアを用いて、 $c_i = 8$, $b_i = 10$, $P = 64$, $T = 1$ としたときの結果を表 3 に示す。

表 3 において、 c_b を変えても反復回数は変化していない。つまり interface パッチに関するオーダーリングの変更は、反復解法の収束性に大きな影響を与えていない。これは、本問題のように 1 プロセスの担当する領域が大きく interface パッチの数が inner パッチの数に比べて十分小さい場合には、interface パッチに関するオーダーリングの変更がスムーザの性能に与える影響が小さいためであると考えられる。一方、求解時間については、 c_b を増やすと増加傾向にある。これは、 c_b を大きくすると、interface パッチの処理に伴う同期・通信コストが増大するためである。

上記のことから、1 プロセスが担当する領域が十分大きく interface パッチの数が相対的に小さい場合には、 c_b を小さく設定することが推奨できると考えられる。以下の検討では、本モデルにおける最小色数である $c_b = 8$ を用いる。

4.5.2 P 及び T のセッティング

次に、分散メモリ環境において、256 個の CPU コアを用いたときの最適なプロセス並列数 P 、スレッド並列数 T について検討する。 $c_b = 8$, $c_i = 8$, $b_i = 10$ とし、 T を 1, 2, 4, 8 と変えたときの求解時間を表 4 に示す。この結果から、プロセス並列のみを使用する場合と比べて、プロセス/スレッドハイブリッド並列処理を行う方が求解時間の点で有利であること、及び T が 4 のとき最も求解時間が小さくなることが確認できる。使用計算機はクワッドコアプロセッサにより構

表 4 P 及び T を変化させたときの結果Table 4 Result of various P or T .

スレッド 並列数 T	プロセス 並列数 P	プロセス 当りの分割数	求解時間 (s)
1	256	$48 \times 48 \times 96$	284
2	128	$48 \times 96 \times 96$	217
4	64	$96 \times 96 \times 96$	189
8	32	$96 \times 96 \times 192$	406

表 5 c_i , b_i を変化させたときの結果Table 5 Result of various c_i and b_i .

inner パッチの色数 c_i (1 辺当りの色数)	ブロックサイズ b_i				
	1	2	3	5	10
8	99	28	23	21	21
(2)	902	259	211	191	189
27	46	25	21	21	21
(3)	529	254	206	199	197
64	43	24	21	21	21
(4)	545	262	218	208	212
125	33	23	21	21	21
(5)	469	266	233	224	233

注. 枠内の表記 上段: 反復回数, 下段: 求解時間 (s)

成されており, 各プロセッサをプロセス並列の単位とし, 1 プロセス内のスレッド数をコア数と同数とした場合が最も良い結果となっている.

4.5.3 c_i , b_i の決定

提案手法では, inner パッチはプロセス間通信に直接関係しないため, ブロック化マルチカラーオーダリングにおける変数 c_i , b_i は, スレッド数のみを考慮して決定できる. そこで本項では, $c_b = 8$, $P = 64$, $T = 4$ としたときの, 最適な c_i , b_i の値を決定する.

c_i と b_i を変えたときの反復回数と求解時間を表 5 に示す. この表から, b_i を増やせば反復回数が減少し, c_i を減らせば求解時間が小さくなる傾向が読み取れる. これは, ブロックサイズの増加により収束性を得るという, AFW ブロック化マルチカラーオーダリングの効果を顕著に表したものである. $b_i = 1$ のときのみ, c_i の増加に伴って求解時間が減少しているが, これは他の場合と比べて反復回数の減少傾向が強いためである. $b_i = 1$ のときも, c_i を増やしたとき, 1 反復当りの計算時間は大きくなっている. また, 数値実験から, $c_i = 8$ かつ $b_i = 10$ のとき, 反復回数と求解時間がともに最も小さくなることが読み取れる. これらのことから, 256 個の CPU コアを用いた数値実験において, 提案手法の解析パラメータの適切な組合せの一つとして, $c_b = 8$, $c_i = 8$, $b_i = 10$, $T = 4$ が挙げられる.

表 6 並列化手法による結果の比較

Table 6 Comparison of parallelize methods.

並列化手法	条件	反復 回数	求解時間 (s)	1 反復当りの 求解時間 (s)
色のみを用いた色付け	求解時間最小	65	583	7.9050
	反復回数最小	21	1535	68.412
提案手法	求解時間最小	21	189	6.7106
	反復回数最小	21	189	6.7106

表 7 速度向上率 ($192 \times 192 \times 192$ 分割)

Table 7 Speed-up ratio.

スレッド 並列数 T	プロセス 並列数 P	求解時間 (s)	速度向上率
1 (逐次計算)	1 (逐次計算)	3375	1
1	8	422	8.00
4	8	271	12.4

4.6 提案手法の有効性と大規模モデル (約 8 億自由度) における求解性能

本節では, 特に言及しない限り, 前節において有効であると判断したパラメータ ($c_b = 8$, $c_i = 8$, $b_i = 10$, $T = 4$) を用いる.

提案手法の有効性について, AFW マルチカラーオーダリングとの比較から検証する. 表 6 に, CPU コアを 256 個用いたときの, AFW マルチカラーオーダリングと提案手法の比較を示す. この結果から, 提案手法を用いた場合, 求解時間は AFW マルチカラーオーダリングと比較して約 1/3 の 189 (s) となること, 及び, 提案手法の最小の反復回数は, AFW マルチカラーオーダリングを用いた場合と全く同じ, 21 回であることが確認できる. これらのことから, 提案手法は AFW マルチカラーオーダリングと比較して, 収束性を維持しながらも 1 反復当りの求解時間を大きく削減できることが読み取れる. この理由としては, ブロック化による並列計算の粒度向上の効果, interface パッチの色数を減らすことによる通信コスト削減の効果が考えられる.

次に提案手法を用いたときの並列処理による速度向上率を検証する. ここでは逐次計算との比較のため, メッシュ分割数を $192 \times 192 \times 192$ とした小規模モデルについての結果を示す. 表 7 に示されるように, スレッド並列を用いずプロセス並列数を $P = 8$ とした場合には逐次計算と比較してほぼ理想的な速度向上率が得られている. 更にスレッド並列数を $T = 4$ とした場合, $T = 1$ と比べて 1.6 倍程度的高速化がなされている. スレッド数を増やしたときの速度向上率が理想値に及ばないのは, 使用するプロセッサ数が変わらな

表 8 大規模モデルの解析
Table 8 Analysis with many degrees of freedom.

計算条件	分割数	640 × 640 × 640 (等分割)
	要素数	262,144,000
	節点数	263,374,721
	未知数	788,891,520
計算結果	反復回数	20
	求解時間 (s)	960

いときにはメモリバンド幅の向上が得られないためと考えられる。

最後に、メッシュ分割を $640 \times 640 \times 640$ とした更なる大規模モデルに対する提案手法の性能を検証する。計算条件及び計算結果を表 8 に示す。表に示すように、これまでにほとんど例のない約 8 億自由度の有限要素電磁場解析を約 16 分という短時間で実行することに成功した。

5. む す び

本論文では、周波数領域での高周波電磁場有限要素解析における解析領域の更なる大規模化を目指し、約 1 億 7000 万～8 億の自由度をもつ大規模問題を解析対象とした上で、分散メモリ環境における幾何マルチグリッド法の並列化について検討した。具体的には、幾何マルチグリッド法のスモザ部分について、並列化手法の一つである AFW マルチカラーオーダリングを導入した場合、及び、境界辺要素を含む節点パッチと含まない節点パッチを分けて色付けを行った場合（提案手法）について、比較、検討を行った。その結果、約 1 億 7000 万自由度に対する提案手法における求解時間は 3 分程度となり、AFW マルチカラーオーダリングのおよそ $1/3$ となった。また、約 8 億自由度程度の問題に対しても、16 分程度で求解が可能であることが分かった。

提案手法は、ブロック化マルチカラーオーダリングの概念を AFW スモザに適用し、分散メモリ環境において有効に活用可能とする手法である。数値実験により確かめられた本手法の利点として、境界辺要素を含まない節点パッチに関してブロック化マルチカラーオーダリングの効果を得ることができる点、境界通信のコストを削減することができる点が挙げられる。

謝辞 本論文における数値実験は、京都大学生存圏研究所の共同利用研究プロジェクトとして、電波科学計算機実験装置 (KDK) を用いて行われました。

文 献

- [1] Y. Zhu and A.C. Cangellaris, Multigrid Finite Element Methods for Electromagnetic Field Modeling, IEEE Press, 2006.
- [2] 武居 周, 吉村 忍, 金山 寛, “階層型領域分割法において部分領域に直接法を適用した高周波電磁場解析,” 電気学会静止器・回転機合同研究会資料, SA-09-61 RM-09-67, 2009.
- [3] 亀有昭久, “幾何マルチグリッド法の電磁場数値解析への適用,” 電気学会静止器・回転機合同研究会資料, SA-01-11 RM-01-79, 2000.
- [4] B. Weiß, O. Biro, P. Caldera, K. Hollaus, G. Paoli, and K. Preis, “A multigrid solver for time harmonic three-dimensional electromagnetic wave problems,” IEEE Trans. Magn., vol.42, no.4, pp.639–642, 2006.
- [5] 美船 健, 岩下武史, 村山敏夫, 金子祥宏, 大谷秀樹, “マルチグリッド法を用いた大規模高周波電磁界解析の並列化に関する基礎検討,” 計算工学講演会論文集, vol.13, no.2, pp.667–670, 2008.
- [6] R. Hiptmair, “Multigrid method for Maxwell’s equations,” SIAM J. Numer. Anal., vol.36, no.1, pp.204–225, 1998.
- [7] D.N. Arnold, R.S. Falk, and R. Winther, “Multigrid in $H(\text{div})$ and $H(\text{curl})$,” Numer. Math., vol.85, pp.197–218, 2000.
- [8] S. Doi and T. Washio, “Ordering strategies and related techniques to overcome the trade-off between parallelism and convergence in incomplete factorizations,” Para. Comput., vol.25, pp.1995–2014, 1999.
- [9] 岩下武史, 島崎真昭, “多色順序付けを用いた並列化 ICCG ソルバに関する検討—ブロック化による性能向上と工学的応用,” 情報処理学会研究会報告集ハイパフォーマンスコンピューティング, HPC-85, pp.55–60, 2001.
- [10] 岩下武史, 島崎真昭, “同期点の少ない並列化 ICCG 法のためのブロック化赤—黒順序付け,” 情報学論, vol.43, no.4, pp.893–904, 2004.
- [11] J.L. Volakis, A. Chatterjee, and L.C. Kempel, Finite Element Method for Electromagnetics, IEEE Press, 1998.
- [12] 森 倫也, 用水邦明, 岩下武史, 小林英一, 阿部 眞, “高周波電磁界辺要素有限要素解析のための前処理付き反復法,” 信学論 (C), vol.J89-C, no.8, pp.521–528, Aug. 2006.
- [13] Y. Saad and M.H. Schultz, “GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems,” SIAM J. Sci. Stat. Comput., vol.7, pp.856–869, 1986.
- [14] Y. Saad, “A flexible inner-outer preconditioned GMRES algorithm,” SIAM J. Sci., vol.14, no.2, pp.461–469, 1993.
- [15] T. Sogabe and S.L. Zhang, “A COCR method for solving complex symmetric linear systems,” J. Comput. Appl., vol.199, pp.297–303, 2007.
- [16] J.-P. Berenger, “A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves,” J. Comput.

Phys., vol.114, no.2, pp.185–200, 1994.

- [17] J. Jin, The Finite Element Method in Electromagnetics, IEEE Press, 2002

(平成 22 年 1 月 12 日受付, 4 月 23 日再受付)



廣谷 迪

2008 京大・工・電気電子卒. 同年より同大大学院工学研究科電気工学専攻修士課程在籍, 現在に至る.



美船 健

2003 京都大学大学院工学研究科電気工学専攻博士後期課程了. 博士 (工学). 同年より京都大学大学院工学研究科助手 (2007 職名変更により同助教), 現在に至る. 電磁界解析, 線形反復法に関する研究に従事. IEEE, 電気学会各会員.



岩下 武史

1998 京都大学大学院工学研究科電気工学専攻博士課程了. 博士 (工学). 1998 同大大学院工学研究科リサーチ・アソシエイト (日本学術振興会未来開拓学術研究推進事業 PD), 2000 同大学大型計算機センター助手を経て, 2003 より同大学学術情報メディアセンター助教授 (2007 職名変更により同准教授), 現在に至る. 高性能計算, 線形反復法, 電磁界解析, 並列処理に関する研究に従事. IEEE, SIAM, 電気学会, 情報処理学会, 日本応用数理学会, 日本 AEM 学会, 日本計算工学会各会員.



村山 敏夫 (学生員)

1987 東大・工・計数卒. ソニー (株) 入社. 1991 Univ. of California Santa Barbara, Dept. of Computer Science 了. 東京大学工学系研究科システム創成学専攻博士後期課程在籍. 電気学会, 日本計算工学会各会員. 大規模高周波電磁界解析技術の研究に従事.



大谷 秀樹

1986 電気通信大・電気通信・機械科 (固体力学講座) 卒, 1988 同大大学院電気通信学研究科機械工学専攻 (流体力学講座) 了, ソニー (株) 入社, 現在に至る. 半導体プロセスデバイス, 熱応力, 電磁界シミュレーション技術, デジタル放送技術の研究

開発に従事.