

階層型領域分割法による電磁場解析での 四倍精度演算CG法, COCG法

CG and COCG methods with Quadruple-Precision Arithmetic
in Electromagnetic Field Analysis by HDDM

杉本振一郎¹⁾

Shin-ichiro Sugimoto

1) 博(工) 八戸工業大学 工学部 准教授(〒031-8501 青森県八戸市妙字大開88-1, E-mail: sugimoto@hi-tech.ac.jp)

This paper deals with a parallel finite element analysis by Hierarchical Domain Decomposition Method (HDDM) of an electromagnetic field problem with a quadruple precision floating point number. A Conjugate Gradient (CG) method for real symmetric matrices and a Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient (COCG) method for complex symmetric matrices are implemented in the quadruple precision for the parallel computing. Then, the HDDM with the quadruple precision arithmetic for the electromagnetic field problem is implemented by the C language. As a result, the convergence of the iterative method is improved, and the minimum residual norm is reduced by approximately four orders of magnitude in a high-frequency electromagnetic field analysis.

Key Words : Parallel Computing, Finite Element Method, Hierarchical Domain Decomposition Method, Electromagnetic Field Analysis, Quadruple-Precision Arithmetic

1. はじめに

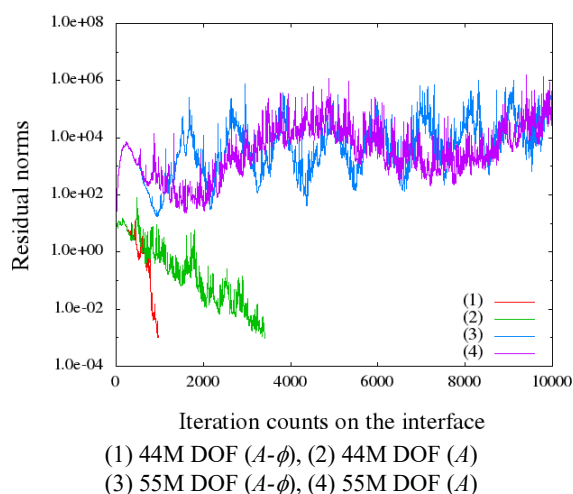


図 1. 時間調和渦電流問題の収束履歴[1].

電磁界解析は、温熱療法など電磁波を用いる医療行為の効果を明らかにするための数値人体モデルの解析や、変圧器などの静止器、モータや発電機などの回転機といった電気機器の設計などに広く活用されている。しかし人体や機器だけでなくそのまわりの空間も解析対象としなければならない電磁界解析のメッシュは自由度が大きくなりやすく、他の物理現象の解析に比べて演算量が多くなり傾向にある。また電磁界解析で解くべき方程式には不定性があるため求解には反復法を用いざるを得ないが、条件数も悪いためその反復回数は非常に多く、演算量をさらに増加させている。そのうえ、方程式を構成する各項の係数となる物理量は材質によって桁が大きく異なる。演算量の増加は丸め誤差の蓄積を促進し、物理量の桁

の違いは情報落ちを招く。

解析ソフトウェアのプログラミングでは実数の取り扱いに倍精度の浮動小数点数を用いるのが一般的であるが、電磁界解析においては丸め誤差の蓄積と情報落ちが倍精度演算では解析の破綻(=解が得られない)につながる恐れがあるほどに深刻である。例えばより高い精度の解を得るために同じモデルで自由度を増やすだけで解が得られなくなることがある。図 1 は無限長ソレノイドコイルモデル [2] の時間調和渦電流問題を階層型領域分割法 Hierarchical Domain Decomposition Method: HDDM) で解いた際の収束履歴である。4,400 万自由度のメッシュでは A-φ 法, A 法とも収束しているが、5,500 万自由度では残差が減ることなく発散してしまっている。

この問題を解決するには、実数の表現としてより精度の高い四倍精度や八倍精度などの多倍長精度浮動小数点数を用いることが考えられる。しかし多倍長精度演算には倍精度演算に比べてより長い時間がかかったり、メモリ使用量が増えたりといった問題がある。例えば四倍精度演算は倍精度演算に比べて演算時間が 20~30 倍、メモリ使用量は 2 倍となる。かつては十分な精度を得られるだけの自由度で実用的な時間内に解析を行うにはコンピュータの性能をギリギリまで使わなければならなかった。そのため計算時間が大幅に増え、メモリ使用量も数倍になる多倍長精度演算は、それを利用しなければ解を得られないようなごく一部の解析での利用に限られていた。しかしコンピュータ技術の進展により、演算性能が高く 100 GB 以上のメモリを搭載したパソコンが数十万円程度で手に入るようになった。また京と富岳を頂点とする

HPCI環境の整備により、年数万円程度で並列数数万、搭載メモリ100 TB以上のスーパーコンピュータを利用できるようになっている。さらにGNU Compiler Collection (GCC)やIntel C++ Compiler (ICC)などのC言語コンパイラでも四倍精度浮動小数点型__float128をサポートするようになり、多倍長精度演算を活用するための環境が整ってきたと考えられる。

本稿では四倍精度演算を用いた共役勾配法(Conjugate Gradient method: CG法) [3], 複素対称行列向けに共役直交共役勾配法(Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient method: COCG法) [4]に基づく階層型領域分割法(Quadruple)を実装し、倍精度演算の階層型領域分割法(Double)と収束履歴、残差の最小値、計算時間を比較する。

2. 四倍精度演算での実装

本稿ではC言語で四倍精度演算を用いた有限要素解析の実装を行う。パソコンからスーパーコンピュータまで様々な環境に対応できるように、コンパイラにはそれらで幅広く用いられているGCCとICCを用いることとし、これらでコンパイルできるようにプログラムを記述する。前述のとおり、この2つのコンパイラでは四倍精度浮動小数点型として__float128型(先頭の「_」(アンダーバー)は2つ)をサポートしているので、__float128型を用いて実装する。数学関数ライブラリは標準のlibquadmath.aを用いる。

また四倍精度の複素数型としては__complex128型(先頭の「_」(アンダーバー)は2つ)がサポートされている。ただし__float128型と__complex128型は相互に代入することが標準で有効なためバグに気づきにくくなること、環境によっては構造体の複素数の方が計算時間面で有利になることから、図2のように四倍精度の複素数型は__complex128型と構造体を切り替えて利用できるようにする。

```
typedef __complex128 Complex128 ;
```

(a) __complex128型の別名を定義

```
typedef struct {
    __float128 re ; __float128 im ;
} Complex128 ;
```

(b) 構造体による四倍精度複素数型

図2. 四倍精度複素数型。

次に、CG法、COCG法に基づく階層型領域分割法を実装した。解くべき行列と既知ベクトルは四倍精度で作成する。ただし、実験で四倍精度に相当する精度で物性値を決定することが困難であること、四倍精度に相当する精度の座標値を持つメッシュを生成できるメッシュがないことから、入力データは倍精度であり、それらを四倍精度に型キャストしたうえで用いる。また、同様に四倍精度に相当する精度のデータを扱う可視化を行えるソフトウェアもないことから、出力データも倍精度とする。

3. 階層型領域分割法

階層型領域分割法(は領域分割法[5]-[7]を並列計算環境に効率よく実装するための1手法である。大規模問題を効率よく数値計算することのできる手法としてよく知られており、分散メモリ環境で良好な並列効率を得られることが期待できる[8]。階層型領域分割法は大規模な構造解析[9]や熱伝導解析[10]に適用され、また電磁界解析でも数値人体モデルの高周波電磁界解析について2016年に300億自由度[11]、2019年に1,300億自由度[12]の解析に成功している。

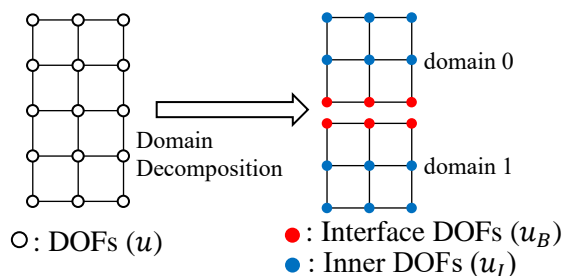


図3. 領域分割。

元の問題: $Ku = f$

↓ 領域分割

$$\begin{bmatrix} K_{II} & K_{IB} \\ K_{IB}^T & K_{BB} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_I \\ u_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_I \\ f_B \end{bmatrix}$$

↓ 静的縮約

インターフェース問題: $Su_B = g$

図4. 自由度の静的縮約。

$$y = Sx$$

$$= \sum_{i=0}^1 R_B^i S^i R_B^i \cdot x = \sum_{i=0}^1 R_B^i S^i x^i = \sum_{i=0}^1 R_B^i T y^i,$$

$$y^i = S^i x^i = (K_{BB}^i - K_{IB}^i (K_{II}^i)^{-1} K_{IB}^i) x^i$$

$$= K_{BB}^i x^i + K_{IB}^i z^i,$$

$$K_{II}^i z^i = -K_{IB}^i x^i. \quad \text{: 小領域での有限要素計算}$$

図5. S の行列ベクトル積。

階層型領域分割法では解析領域を並列数よりもはるかに多くの小領域(1小領域あたり数百自由度程度)に分割し、自由度を領域分割によって生じる領域間のインターフェース自由度(図3)に静的縮約したインターフェース問題(図4)を並列反復法で解く。解くべき問題そのものが変わるため並列性能を阻害する不完全Cholesky分解(IC)前処理を使わずとも収束解を得られる。また分割数を変えずに並列数を変えられるため並列反復法の収束性に並列数は影響しない。そのため、多倍長精度演算を階層型領域分割法に適用すれば並列数を増やすことにより計算時間とメモリ使用量の問題をともに解決することが期待できる。一方で解くべき行列 S が密であり、作成してしまうと効率的な解析ができなくなるので、並列反復法に必要な S の行

列ベクトル積は小領域での有限要素計算の結果の重ね合わせ(図 5)で行っている。

並列処理についてはMPIとOpenMPを用いるハイブリッド並列とする。階層型領域分割法ではまずメッシュをMPIのプロセス数と同じpart数に分割する。次にpart内で図 3のdomainに相当するsubdomainに分割する。ノード内のスレッド並列ではsubdomain単位で演算をスレッドに割り当てる。

4. 数値計算例

数値計算例としてTEAM20モデル[13]の静磁場解析(Magnetostatic), 無限長ソレノイドコイルのA-φ法での時間調和渦電流解析(TH_Eddy), TEAM29モデル[14]の高周波電磁波解析(HF_EM)をそれぞれ倍精度演算, 四倍精度演算で行う。それぞれの有限要素方程式の特徴を表 1に示す。モデルはいずれも四面体に分割され, それぞれの要素数は857,468, 843,594, 838,803, 自由度はいずれも約100万自由度である。解析には東京大学情報基盤センターOakbridge-CXスーパーコンピュータ(OBCX) [15]を用いる。OBCXは1,240ノードのFujitsu PRIMERGY CX2550 M5 (Intel Xeon Platinum 8280 (2.7GHz, 28+28コア), 192 GB memory搭載)をIntel Omni-Pathで接続したスーパーコンピュータである。本稿では32ノード用いることとし, それぞれのメッシュは32 parts, 各part内は224 subdomainsに分割する。静磁場解析ではCG法, 時間調和渦電流解析, 高周波電磁波解析ではCOCG法に基づく階層型領域分割法を簡易対角スケールリング前処理[16]とともに用いる。収束判定値は設けず10,000回反復させて収束履歴, 残差の最小値, 計算時間を比較する。

表 1. 有限要素方程式の特徴.

	Matrix	Singular	DOFs on
Magnetostatic	Symmetric Real	Yes	Edges
TH_Eddy	Symmetric Complex	Yes	Edges Apexes
HF_EM	Symmetric Complex	No	Edges

DOFs: Degrees of freedom

複素行列である時間調和渦電流解析, 高周波電磁波解析で__complex128型と構造体の実装を計算時間で比較した結果, 違いは最大でも1割にも満たず, どちらかが必ず短いということもなかった。そのためバグの発見のしやすさから, 以降は構造体により複素数を表現する実装を用いることとする。

図 6にそれぞれの収束履歴を示す。解くべき方程式に不定性がある静磁場解析, 時間調和渦電流解析は反復500回あたりで最小値をとって以降は発散するので, 1,000回までの履歴である。表 2に残差の最小値と倍精度演算に対する四倍精度演算での減少率を示す。いずれも比較的解きやすいモデルであるためか静磁場解析, 時間調和渦

電流解析では最小値に大きな差はなかった。一方, 不定性はないが静磁場解析, 時間調和渦電流解析よりも条件数の悪い高周波電磁波解析では10,000反復までで4桁近く残差が小さくなった。倍精度演算に対する四倍精度演算の計算時間は静磁場解析で15.6倍, 時間調和渦電流解析で23.5倍, 高周波電磁波解析で14.4倍であった。

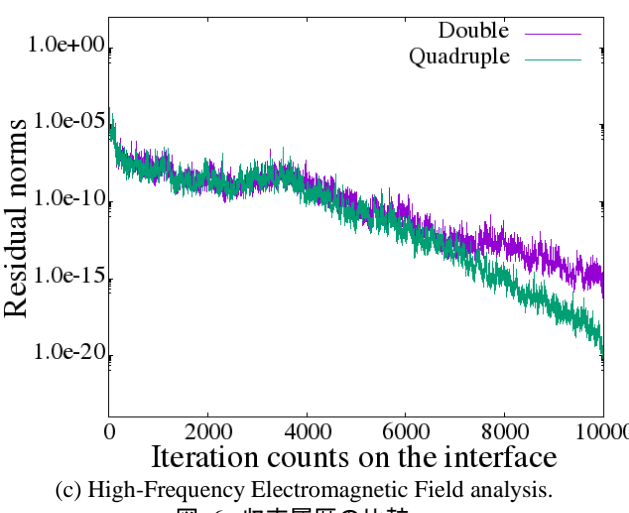
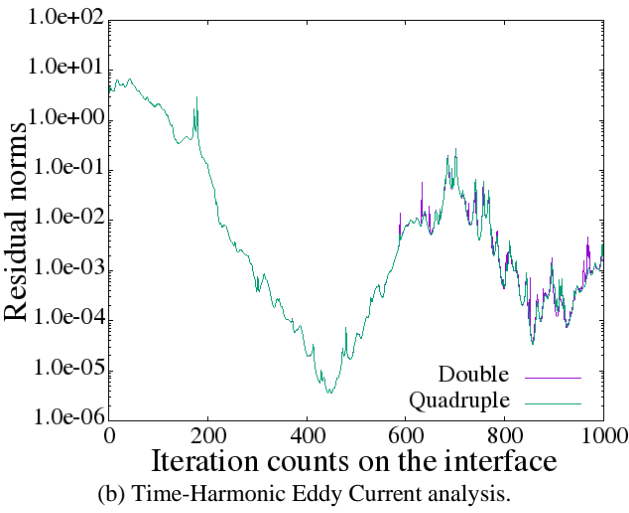
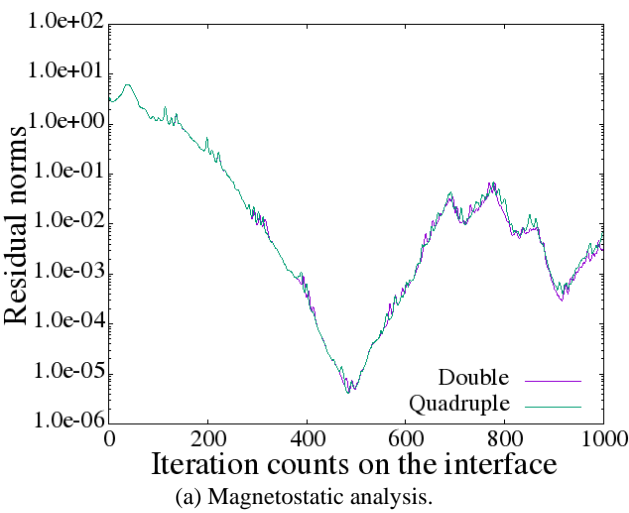


図 6. 収束履歴の比較.

表 2. 残差最小値の比較.

	Double	Quadruple	Q / D
Magnetostatic	4.278591e-06	4.108636e-06	9.60278e-01
TH Eddy	3.564778e-06	3.564556e-06	9.99938e-01
HF EM	5.549787e-17	6.805313e-21	1.22623e-04

5. おわりに

四倍精度演算を用い、ハイブリッド並列でCG法、およびCOCG法に基づく階層型領域分割法を実装した。約100万自由度のメッシュで倍精度演算に比べて四倍精度演算では反復法の残差の最小値が高周波電磁波解析で4桁減少し、四倍精度演算の利用が収束性の改善に効果があることを確認できた。今後はCG法、COCG法以外の反復法に基づく階層型領域分割法の実装を行うとともに、より大規模な問題やより複雑な問題で四倍精度演算導入の効果を検証していく。

謝辞

本研究の一部はJSPS科研費22H03605, 22K19779の助成を受けて実施された。ここに記し、感謝の意を示す。

参考文献

- [1] 杉本振一郎, 田上大助, 荻野正雄, 武居周, 金山寛: 階層型領域分割法による時間調和渦電流解析の収束性改善, 日本シミュレーション学会論文誌, Vol.7, No.1, pp.11-17, 2015.
- [2] 金山寛: 計算電磁気学 岩波講座 現代工学の基礎 <空間系 IV>, 岩波書店, 2000.
- [3] M. R. Hestenes and E. Stiefel: Methods of conjugate gradients for solving linear systems, *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, Vol.49, No.6, pp.409-436, 1952.
- [4] H. A. Vorst and J. B. M. Melissen: A Petrov-Galerkin type method for solving $Ax=b$ and where A is symmetric complex, *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol.26, Issue 2, pp.706-708, 1990.
- [5] R. Glowinski, Q.V. Dinh and J. Periaux: Domain decomposition methods for nonlinear problems in fluid dynamics, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.40, Issue 1, pp.27-109, 1983.
- [6] A. Quarteroni and A. Valli: Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations, *Clarendon Press, Oxford*, 1999.
- [7] A. Toselli and O. Widlund: Domain Decomposition Methods: Algorithms and Theory (Springer Series in Computational Mechanics), *Springer*, 2004.
- [8] R. Shioya and G. Yagawa: Iterative domain decomposition FEM with preconditioning technique for large scale, problem, *ECM'99 Progress in Experimental and Computational Mechanics in Engineering and Material Behaviour*, pp.255-260, 1999.
- [9] S. Yoshimura, R. Shioya, H. Noguchi and T. Miyamura: Advanced general-purpose computational mechanics system for large-scale analysis and design, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol.149, Issue 1, pp.279-296, 2002.
- [10] A.M.M. Mukaddes, M. Ogino, M. H. Kanayama and R. Shioya: A scalable balancing domain decomposition based preconditioner for large scale heat transfer problems, *JSME International Journal Series B Fluids and Thermal Engineering*, Vol.49, No.2, pp.533-540, 2006.
- [11] S. Sugimoto, A. Takei and M. Ogino: Finite element analysis with tens of billions of degrees of freedom in a high-frequency electromagnetic field, *Mechanical Engineering Letters*, Vol.3, 2017.
- [12] S. Sugimoto, A. Takei and M. Ogino: High-Frequency Electromagnetic Field Analysis with 130 Billion of Degrees of Freedom, *The 38th JSST Annual Conference, International Conference on Simulation Technology*, pp.290-295, 2019.
- [13] 回転機電磁界解析ソフトウェアの適用技術調査専門委員会: 回転機電磁界解析ソフトウェアの適用技術, 電気学会技術報告, No.486, 1994.
- [14] Y. Kanai: Description of TEAM Workshop Problem 29: Whole body cavity resonator, TEAM Workshop in Tucson, 1998.
- [15] 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部門HP : <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/>
- [16] H. Kanayama and S. Sugimoto: Effectiveness of A-phi Method in a parallel computing with an iterative domain decomposition method, *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol.42, No.4, pp.539-542, 2006.