

グリッド環境におけるマイクロ磁気学シミュレーションに関する一検討

松尾哲司, 広中悠樹, 岩下武史, 島崎眞昭 (京都大学)

強磁性体内の磁壁移動などミクロな現象が、複雑なマクロ磁気特性に及ぼす影響を記述するため、大規模マイクロ磁気学計算を行うことが考えられる。しかし、この手法ではその計算コストが莫大となるため、PC クラスタおよびグリッド環境下で並列マイクロ磁気学計算を行い、計算時間の短縮と解析領域の拡大を図るための予備的検討を行った。その結果、PC クラスタでは、16 台で約 10 の速度向上率が得られた。Globus Toolkit と MPICH-G2 を用いたグリッド環境下でもある程度の速度向上率が得られた。

A Study of Micromagnetic Simulation on Grid

Tetsuji Matsuo, Yuki, Hironaka, Takeshi Iwashita and Masaaki Shimasaki (Kyoto University)

A preliminary study for large-scale micromagnetic simulation is carried out to describe relations between microscopic magnetic-domain behavior and complex macroscopic magnetic properties of ferromagnetic materials. A parallel micromagnetic simulation by a PC cluster achieves a speed-up ratio of 10 with 16 PCs. Using Globus Toolkit and MPICH-G2, this study examines a grid computing of micromagnetic analysis. The grid computing achieves a small speed-up of micromagnetic simulation.

1. はじめに

計算機性能と計算手法の進歩に伴い、電気機器の開発の際に電磁界シミュレーションを行うことが一般的になっている。しかし、電気機器に用いられる鉄心材料の磁気特性は複雑であり、このことが電気機器解析の高精度化を阻んでいる。鉄心材料の磁気特性が複雑となる要因として、ベクトル特性^[1]・ヒステリシス特性^[2]・異常渦電流損^[2]などがある。これらは、それぞれの現象に応じて測定やモデル化が行われることが多いが、いずれの現象も磁性体内のミクロな磁区構造と密接に関係している。したがって、そのミクロな磁区の振舞いが磁性体全体に及ぼす影響の記述が可能になれば、総合的な物理モデルの構築や解析精度の向上などが期待できる。

磁性体内のミクロな領域の磁化分布を解析する手法として、マイクロマグネティクス^{[2]-[6]}と呼ばれる手法があり、ハードディスクの磁気ヘッドの設計などに用いられている。しかし、鉄心材料の磁壁の厚さは数十 nm 程度であり、それに応じた空間分解能を考慮すると、電気機器の実用的なサイズを解析するのは現在の単体の計算機性能では不可能である。

そこで、本研究ではまず、MPI を用いた並列マイクロ磁気学シミュレーションプログラムを開発し、PC クラスタなどにより、その並列化効率を検討する。さらに、グリッド^{[7][8]}環境下でマ

イクロ磁気学シミュレーションを実行し、グリッド計算の適用可能性について予備的な検討を行う。

2. マイクロマグネティクスシミュレーション

マイクロマグネティクスシミュレーションに用いられる LLG 方程式^{[2]-[4]}は下記のように与えられる。

$$\frac{dm}{dt} = \frac{\gamma}{1 + \alpha^2} m \times (H_{\text{eff}} + \alpha m \times H_{\text{eff}}) \quad (1)$$

ここで、 $m = M/M_S$ 、 M は自発磁化ベクトル、 $M_S = \|M\|$ は飽和磁化、 H_{eff} は有効磁界、 γ はジャイロ磁気定数、 α は制動定数である。有効磁界 H_{eff} は、磁性体のエネルギー密度 e から、

$$H_{\text{eff}} = -\partial e / \partial m \quad (2)$$

のように与えられる。本稿では、エネルギー密度 e は、外部磁界によるエネルギー e_{ap} 、磁気異方性エネルギー e_{an} 、交換エネルギー e_{ex} 、静磁エネルギー e_{st} の和として、

$$e = e_{\text{ap}} + e_{\text{an}} + e_{\text{ex}} + e_{\text{st}} \quad (3)$$

で与えられるとする。これに応じて、 H_{eff} は、

$$H_{\text{eff}} = H_{\text{ap}} + H_{\text{an}} + H_{\text{ex}} + H_{\text{st}} \quad (4)$$

の和で与えられる。ここで、 H_{ap} は外部磁界であり、 H_{an} は磁気異方性による磁界である。交換エネルギーによる磁界 H_{ex} は、

$$H_{\text{ex}} = (2A/M_S) \nabla^2 m \quad (5)$$

で与えられる。ただし、 A は交換スティフネス

定数である。静磁エネルギー密度は、 $e_{st} = -M \cdot H_{st}/2$ で与えられ、静磁界 H_{st} は磁性体内の磁気モーメントによって、

$$H_{st}(r) = -\frac{1}{4\pi\mu_0} \int \left[\frac{M(r')}{R^3} - \frac{3\{M(r') \cdot R\}R}{R^5} \right] dv' \quad (6)$$

で与えられる。ここで $R = r - r'$ 、 $R = \|R\|$ である。

シミュレーションにおいては、式(6)の静磁界計算に大きな計算時間を要する。直方体均一格子を用いる場合には、この計算は畳み込み積分の形で表すことができるので FFT を用いて計算することができる^{[5][6]}。本稿での解析では、大浦氏による FFT の計算コード^[9]を用いて静磁界の計算を行っている。

3. 並列計算手法

解析領域をブロックに分割して、各ブロック内で式(4)の有効磁界の各項を並列計算する。まず、 H_{ap} は既知であり、 H_{an} は各格子点で独立に計算されるので、プロセス間の通信は必要ない。 H_{ex} は 2 階微分を差分近似して求めるため、隣接する格子点の m の値が必要である。そのため、隣接するブロックから隣接点のベクトル m を通信して得る必要がある。 H_{st} の計算は、前述のように畳み込み積分を FFT を用いて行う。以下、FFT 計算の並列化手法について述べる。

ここでは、解析領域が図 1(b)のように z 方向にブロック分割されている場合を考える。図 1 の 0 の部分は、FFT による周期性を回避するために 0 詰めを行う部分である。実際にデータが存在する領域に対して、各方向 2 倍の領域を確保して、その余分な領域には 0 を入れて FFT を行う。ブロック分割は、図 1 のように実際のデータ領域に対して行っている。

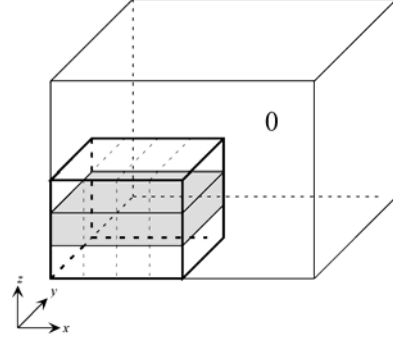
3 次元 FFT は以下のように各方向の FFT の直積で表される。

$$F(k_1, k_2, k_3) = \sum_{nz=0}^{Nz-1} \left[\sum_{ny=0}^{Ny-1} \left\{ \sum_{nx=0}^{Nx-1} f(n_x, n_y, n_z) W_{Nx}^{n_x k_1} \right\} W_{Nz}^{n_z k_3} \right] W_{Nz}^{n_z k_3} \quad (7)$$

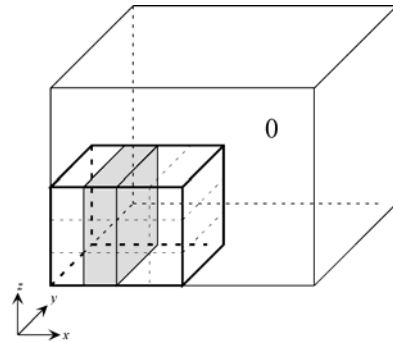
$$W_N = \exp(-j2\pi/N), \quad j^2 = -1 \quad (8)$$

中括弧の中は x 方向の FFT で、その外側の太括弧内は y 方向の FFT であり、それぞれ、 z 方向に分割したブロックにおいて独立に計算することができる。 z 方向の FFT を行うためには、図 1(b)のように領域のブロック分割を x 方向(あるいは y 方向)に変更する必要がある。このため、 x 方向と y 方向の FFT の計算結果を MPI_Alltoall で送受信し、 z 方向の FFT を行う。その後、 x 方向に分割されたブロック内で、畳み込みの積

計算の後、 z 方向の逆 FFT を行う。その計算結果を、再び MPI_Alltoall で通信して、 z 方向のブロック分割に戻す。その後、 y 方向と x 方向の逆 FFT を行って、ブロック内の H_{st} の値を得る。



(a) z 方向のブロック分割



(b) x 方向のブロック分割

図 1 ブロック分割

4. 計算結果

4.1. 解析対象

ここでは、米国標準技術局(NIST)内の μ MAG^[10] グループが提示している Standard Problem #1 を解析対象とする。この問題では、図 2 のような、 $2\mu\text{m} \times 1\mu\text{m} \times 20\text{nm}$ の長辺方向に容易軸を持つパーマロイ薄膜に対して、容易軸方向に外部磁界を印加した場合の磁化分布の変化を観察する。用いる物理定数は、スティフネス定数 $A = 1.3 \times 10^{-11} \text{ J/m}$ 、飽和自発磁化 $M = 8.0 \times 10^5 \text{ A/m}$ 、一軸異方性定数 $K_1 = 5.0 \times 10^2 \text{ J/m}^3$ とする。

初期磁化を $m = (1, 0, 0)$ とし、 x 方向に $8 \times 10^4 \text{ A/m}$ の外部磁界を印加したときに、磁化状態が定常状態に達するまで計算する。

4.2. PC クラスタによる計算結果

まず 16 台の PC によるクラスタを用いて並列計算を行った。PC のスペックは、CPU: Pentium-1GHz, OS: Redhat Linux, メモリ: 512MB, 二次キャッシュ: 128kB である。通信ノードとして 100Base-TX の Ethernet と Myrinet 2000 を用いる。

パーマロイのセルの分割数を $256 \times 2 \times 128$ とし

た場合の速度向上率を図3に示す。図3からわかるように、Ethernetを用いると13台で約5程度、Myrinetを用いると16台で約10程度の速度向上率が得られる。また、Myrinetでは速度向上率がほぼ線形に増加しているが、Ethernetでは速度向上率に飽和が見られる。

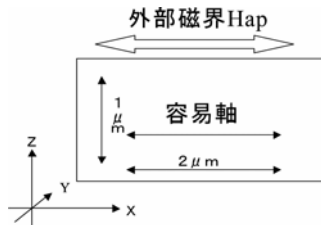


図2 標準問題の薄膜磁性体

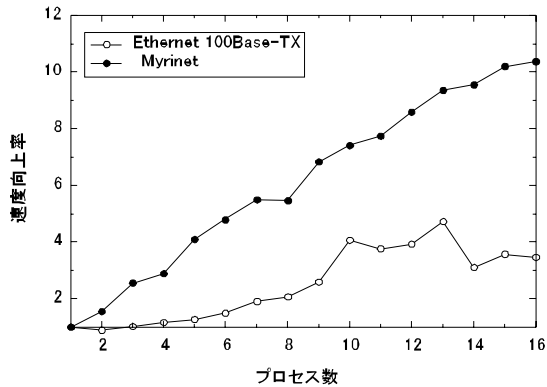


図3 PC クラスタによる速度向上率

4.3. HPC2500 による計算結果

次に富士通 PRIMEPOWER HPC2500 による並列計算を行った。HPC2500 は SMP マシンであるが、ここでは MPI を用い、プロセス並列による高速化を図る。以下にそのスペックを示す。

CPU SPARC64V×128
 クロック 1.56GHz
 一次キャッシュ 命令 128kB, データ 128kB
 二次キャッシュ 2MB
 メモリ 512GB
 理論演算性能 798.72GFLOPS
 (6.24GFLOPS×128)

HPC2500 で 8 プロセスまでの速度向上率を求めた結果を図4に示す。ただし、パーマロイのセルの分割数は 256×1×128 である。図4より、8台で 7.6 倍と高い並列化効率が見られている。

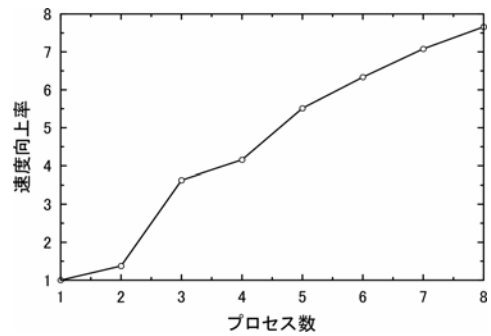


図4 HPC2500 による速度向上率

表1 計算時間の内訳(単位: 秒, Myrinet 使用時)

# proc.	total	H_{ap}	H_{an}	H_{ex}	H_{st}
1	374.0	1.79	5.23	7.73	336.1
2	244.1	1.12	2.84	4.35	222.5
4	129.7	0.55	1.40	2.29	118.4
8	68.5	0.25	0.72	1.21	62.4
16	36.1	0.12	0.29	0.56	32.8

表1に Myrinet を使用した時の計算時間の内訳を記す。全体の計算時間の中で、90%程度が静磁界の計算時間で占められていることがわかる。外部磁界・異方性による有効磁界の計算は並列性が高く、計算時間はプロセス数にほぼ反比例している。交換エネルギーによる有効磁界の計算も、16 プロセス使用時の速度向上率が13.8であり、並列化効率は比較的高い。計算の大部分の時間を占める静磁界の計算では、FFTおよび逆FFTに要する時間が殆どであり、並列化した三次元FFTの性能が重要となる。

4.4. シミュレーション結果

HPC2500 でマイクロ磁気学シミュレーションを行った結果を図5と図6に示す。図5はx正方向の飽和の後、x負方向に3200A/mの外部磁界を印加した場合の磁化分布を示している。ただし、図5は規格化磁化mのz成分を示しており、1のとき白、-1のとき黒となる。図5では、磁区が形成されていることがわかる。

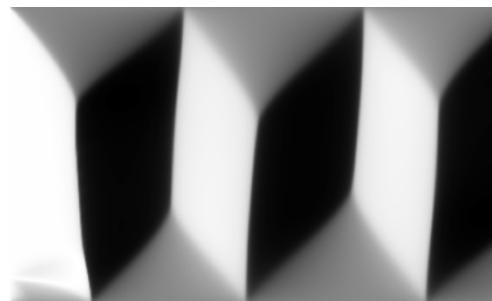


図5 磁化分布

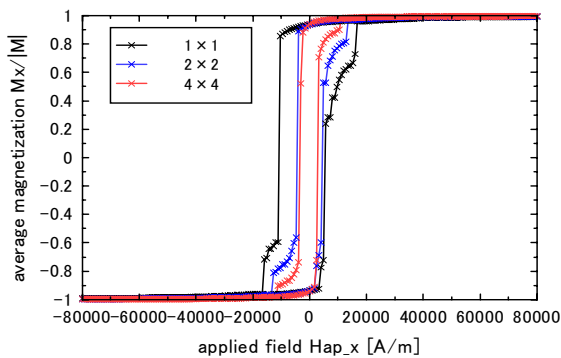


図 6 MH ループ

他方，図 6 は， x 方向印加磁界の変化に対する，磁化の平均値の変化を示している。ただし，薄膜のサイズを標準の $2\mu\text{m}\times 1\mu\text{m}$ から 2×2 倍および 4×4 倍した場合の変化も同時に示している。図では，ヒステリシス特性が現れている。

5. グリッドを用いた計算結果

5.1. グリッド環境の構築

次に，Globus Toolkit と MPICH-G2 を用いて，並列マイクロ磁気学計算を行う。まず，京都大学吉田キャンパス学術情報メディアセンター内に，認証局として PC を一台設置し，これを PC 吉田 1 とする。認証されるマシンとして，同スペックの PC を同センター内に置き，これを PC 吉田 2 とする。また，吉田キャンパスから 15km 程度離れた桂キャンパス内にも PC を設置し，これを PC 桂 1 とする。その他に，異なるアーキテクチャの計算機として HPC2500 をグリッドに参加させる。ただし，ここで使用する HPC2500 は 4 で使用したのとは別の計算機である。これらのスペックを表 2 に示す。尚，HPC2500 のプロセス間通信は全体で 4Gbytes/s である。また，MPICH-G2 のバージョンは 1.2.7，Globus Toolkit のバージョンは 2.4 である。

吉田 1-2 間はギガビットイーサで接続されており，吉田-桂キャンパス間は学内ネットワーク (ATM) で結ばれている。各計算機間の通信性能を調べるために，netpipe (NETwork Protocol Independent Performance Evaluator) を用いて通信ベンチマークテストを行った。PC クラスタでは Myrinet 使用時に最大 1857.85Mbps，Ethernet 使用時に最大 85.25Mbps であった。これに対して，グリッド環境下では，吉田 1-2 間で最大 522.21Mbps，吉田 1-桂 1 間で最大 87.84Mbps であった。

表 2 計算機のスペック

機種	HPC2500	PC
CPU	SPARC64V $\times 128$	Pentium IV $\times 1$
CPU クロック	1.30GHz	3.20GHz
一次キャッシュ	128kB	
二次キャッシュ	4MB	1024kB
メモリ	512GB	1GB

表 3 PC によるグリッド計算時の速度向上率

計算機の構成	256 $\times 4\times 128$	256 $\times 2\times 128$	128 $\times 1\times 64$
吉田1-2	1.42	1.37	1.15
吉田1-桂1	0.84	0.78	0.44
吉田1-2-桂1	1.15	1.06	0.57

5.2. PC 間でのグリッド計算

まず，吉田 1，吉田 2，桂 1 の PC のみでマイクロ磁気学計算を行った。

前述のパーマロイ薄膜の計算の速度向上率を測定した結果を表 3 に示す。ただし，セルの分割数を 256 $\times 4\times 128$ ，256 $\times 2\times 128$ ，256 $\times 1\times 128$ の三通りに設定した。また，吉田 1 単独計算時を 1 としている。表より，通信速度が速い吉田 1-2 間では，セル分割数が 256 $\times 4\times 128$ の時に速度向上率は 1.42 である。しかし，通信速度が遅い吉田 1-桂 1 間では同じセル分割数の時，速度向上率は 0.84 であり，一台より遅くなる。吉田 1, 2，桂 1 の三台での計算時には 1.15 であり，前の 2 例の中間の速度向上率となる。セルの分割数を，256 $\times 2\times 128$ ，128 $\times 1\times 64$ と減少させると，速度向上率は 1.37, 1.15 と減少する。この理由として，

- ・計算時間の大部分を占める FFT の演算量のオーダーが $O(N\log N)$ であり，通信量のオーダーが $O(N)$ であること
- ・プロセス間の通信の開始には問題のサイズに関係なく一定のオーバーヘッドが生じること

の 2 点が考えられる。従って，問題のサイズが大きくなれば，グリッドコンピューティングの効果が現れると考えられる。また，計算率向上のためには，通信量を減らすことが必要であり，そのためには，

- ・FFT に要する通信量を削減する手段を講じる
- ・高速多重極展開^[11]を用いて情報を縮約するなどの対策が考えられる。

このように，同じアーキテクチャの計算機間で，MPI の同期通信命令を用いてグリッドコンピューティングを行う場合，計算性能が通信速度に大きく左右される。従って，グリッド環境

を最大限に使用するためには、計算と通信のロードバランスの変化に柔軟に対応して各計算機にデータを割り振る必要があると考えられる。

5.3. HPC2500 単体でのグリッド計算

前述の PC と HPC2500 の間でグリッドを構成する前に、まず、HPC2500 単体で Globus Toolkit と MPICH-G2 を介しての並列計算を行った。解析対象は前項と同じとし、セルの分割数は $128 \times 4 \times 64$ および $256 \times 2 \times 128$ である。図 7 にプロセス数に対する速度向上率の変化を示す。図より、問題サイズが小さいと、プロセス間通信のコスト、または Globus Toolkit のプロセス起動のオーバーヘッドなどににより、計算効率が低下することが分かる。

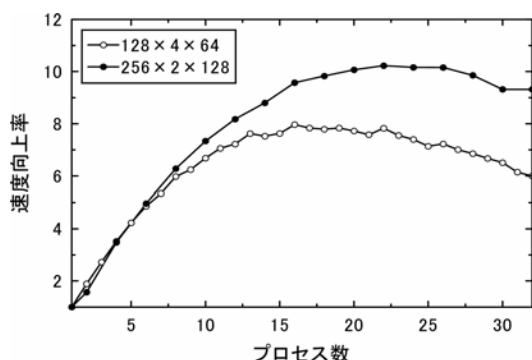


図 7 HPC2500 による速度向上率

5.4. 異なるアーキテクチャ間のグリッド計算

次に HPC2500 と吉田 1, 吉田 2, 桂 1 の間で Globus と MPICH-G2 を用いて並列計算を行った。表 4 に結果を示す。

HPC2500 と吉田 1 での速度向上率は 0.33 と低い、桂 1 を加えると、速度向上率は 0.45 と増加する。吉田 1-桂 1 は異なるキャンパスにあるため通信速度が遅いが、桂 1 が加わることによる計算時間の低減が通信時間による遅延を上回ったため速度が向上したと考えられる。

さらに、HPC2500 でプロセス数を増やしていくと速度向上率が 0.45 から 0.70 と向上する。プロセス間での通信速度が速いマシンをグリッドに参加させると速度が向上していくことがわかる。

表 4 PC と HPC2500 によるグリッド計算

計算機の構成	速度向上率	計算時間(s)
吉田1	1	70.5
HPC2500(1proc.)-吉田1	0.33	212.2
HPC2500(1proc.)-吉田1-桂1	0.45	156.4
HPC2500(2proc.)-吉田1-桂1	0.52	135.5
HPC2500(4proc.)-吉田1-桂1	0.7	100.7

6. むすび

PC クラスタおよびグリッド環境下で並列マイクロ磁気学シミュレーションを行った。その結果、PC クラスタでは、Myrinet 使用時に 16 台で約 10 の速度向上率が得られた。Globus Toolkit および MPICH-G2 を用いてマイクロ磁気学シミュレーションを行った結果、グリッド環境下でもある程度の速度向上率が得られた。しかし、並列 FFT の部分の通信コストが大きく、グリッド環境時など通信速度が遅い場合は計算効率が低くなる。このため、マイクロ磁気学シミュレーションをグリッド環境下で実行するためには、

- ・解析領域を大きくすることにより、通信コストを相対的に小さくする
 - ・高速多重展開による情報の縮約などにより、通信量を削減する
- などにより、通信コストを削減することが必要である。

なお、本研究の一部は、日本学術振興会・科学研究費補助金・基盤研究(C) 16560243 の援助を受けて行われた。

参考文献

- [1] M. Enokizono, T. Todaka, S. Kanao, and J. Sievert, "Two-dimensional magnetic properties of silicon steel sheet subjected to a rotating field," *IEEE Trans. Magn.*, Vol. 29, pp. 3550-3552 (1993).
- [2] G. Bertotti, *Hysteresis in Magnetism*, Academic Press, San Diego (1998).
- [3] 川西健次, 近角聰信, 櫻井良文編, 「磁気工学ハンドブック」, pp. 205-217, 朝倉書店 (1998).
- [4] H. Kronmüller and M. Fähnle, *Micromagnetism and the Microstructure of Ferromagnetic Solids*, Cambridge University Press (2003).
- [5] M. Mansuripur and R. Giles, "Demagnetizing Field Computation for Dynamic Simulation of the Magnetization Reversal Process," *IEEE Trans. Magn.*, Vol. 24, pp. 2326-2328 (1988).
- [6] N. Hayashi, K. Saito and Y. Nakatani, "Calculation of Demagnetizing Field Distribution Based on Fast Fourier Transform of Convolution," *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol. 35, pp. 6065-6073 (1996).
- [7] I. Foster, C. Kesselman, "Globus: A Metacomputing Infrastructure Toolkit," *Intl. J. Supercomputer Applications*, Vol. 11, pp.115-128 (1997).
- [8] I. Foster, C. Kesselman, S. Tuecke, "The

- Anatomy of the Grid: Enabling Scalable Virtual Organizations,” Intl. J. Supercomputer Applications, Vol. 15, pp. 200-222 (2001).
- [9] 大浦拓哉, <http://momonga.t.u-tokyo.ac.jp/~oura/index-j.html>.
- [10] μ MAG-Micromagnetic Modeling Activity Group, <http://www.ctcms.nist.gov/~rdm/mumag.org.html>.
- [11] C. Seberino and H. N. Bertram, “Concise, Efficient Three-Dimensional Fast Multipole Method for Micromagnetics,” *IEEE Trans. Magn.*, Vol. 37, pp. 1078-1086 (2001).