

分散環境におけるマイクロマグネティクス シミュレーションの並列実行

キティ コサビスット 砂原 秀樹 林 信夫

電気通信大学 情報工学科

近年、ワークステーションやネットワークの処理能力が飛躍的に向上してきている。これらのワークステーションがネットワークで結合された分散環境を利用することによって高速処理能力を得ることが可能となる。本研究では、この分散環境上での並列処理機構を検討し、計算対象として長い計算時間を要することが知られているマイクロマグネティクス・シミュレーションへの適用を行なった。その適用例に対する並列計算モデルを設計し、実装時に生じた諸問題と応用に対する問題をあわせて改良法を考え、高速化を実現した。また、実際に得られた結果、高速向上いわゆる実行時の評価を示す。

A Parallel Execution for Micromagnetic Simulation in Distributed Environment

Kitti Kosavisutte Sunahara Hideki Hayashi Nobuo

The University of Electro-Communications

1-5-1 Chofukaoga, Chofu-shi, Tokyo, 182 JAPAN

The processing speed of workstations and personal computers is increased. These computers are connected by LAN or the Internet. When we use these networked multiple computers, we can have potential high computational power.

In order to study the feasibility of parallel processing in multiple computers, the micromagnetic simulation is chosen as an application. The most time-consuming procedure of this application is the demagnetizing field calculation. The demagnetizing field calculation based on the magnetic potential method is solved by the SOR numerical method.

This paper proposes the parallel calculation model for the demagnetizing field calculation named the pipeline model. The implementation results and its improvement show the feasibility of parallel processing in distributed environment. In addition, the efficiency of parallel calculation and its performance evaluation are also discussed.

1 はじめに

高速計算の要求は最近ますます高まっている。そして、ネットワークが高速化され、さらにワークステーションが大量に導入される環境が現実のものとなっている。ネットワークに接続された多数のワークステーションを並列に効率よく利用することによって、処理時間を短かくすることができる。この問題を検討するために計算対象として選んだマイクロマクネティクス・シミュレーションは磁化分布の時間変化を辿るものであり、計算時間の大部分は磁性体内部に磁化自身が作る静磁界(反磁界)の計算に使われる。2次元問題に適用することを考え、計算領域を一定の大きさの長方形セルで分割し、支配方式から導かれる連立一次方程式をSOR法を用いて解く。ここでは、SOR法に独得のセルの掃引順を利用して、並列計算モデルであるパイプラインモデルを設計した。また、そのモデルを用いて実装時に生じた諸問題と応用に対する問題をあわせて改良法を考え、高速化の実現、ネットワーク通信の解析について述べる。

2 マイクロマクネティクスの背景

2.1 概要

マイクロマクネティクスとは、ある磁化ベクトルをベクトル場(場所 r の連続関数)と考えて求めることにより、様々な磁気現象を解析する分野である。対象とする磁性体が非平衡状態にあれば、平衡状態に変遷し、特性も変化すると考えて解析する。近年、磁気記録媒体の高品質化に伴い、さらに大型の計算が必要とされているため、この分野の数値シミュレーションの高速化が不可欠である。ここで対象として選んだ磁化分布の変遷における数値計算は、計算時間の大部分が磁性体内部に磁化自身が作る静磁界(反磁界)の計算に使われる。反磁界を計算するために、従来の直接計算法は計算時間が計算点数の2乗に比例して増加してしまう。またFFT法は周期的な磁化分布を扱う場合には有効であるが、そうでない場合には用いることができない。これらに対し、ポテンシャル法を用いて磁化分布から磁極分布を求めて磁位を求め、その勾配をとって静磁界に直す。しかし、ポテンシャルを求める境界値問題としては普通、磁性体の内部のみならず、外部における磁位も一緒

に求めるように定式化される。この欠点が克服されているFredkinとKoehlerの定式化に基づいて磁性体内部の磁位 ϕ_{in} (ポテンシャル)をPoisson方程式のNeumann問題とLaplace方程式のDirichlet問題を用いて求める[1],[2]。次にLLG方程式を解くことにより、磁気の分布の変遷を計算する。

2.2 反磁界の計算

上に述べたFredkinとKoehlerの方法を2次元問題に適用することを考える。この方法は磁性体の内部の磁位 ϕ_{in} だけを計算するもので、以下のように要約される。計算領域を Ω 、境界を Γ とする。 ϕ_{in} を ϕ_1 と ϕ_2 という二つのポテンシャルに分ける。

$$\phi_{in} = \phi_1 + \phi_2 \quad (\text{in } \Omega) \quad (1)$$

ϕ_1 は Poisson 方程式の Neumann 問題の解とする。

$$\nabla^2 \phi_1 = 4\pi \nabla \cdot M \quad (\text{in } \Omega) \quad (2)$$

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial n} = 4\pi M_n \quad (\text{on } \Gamma) \quad (3)$$

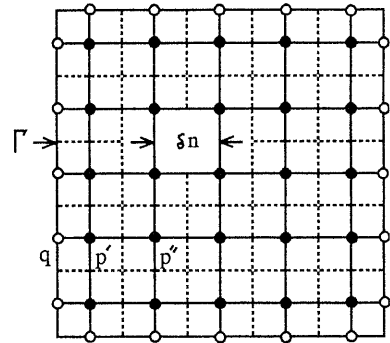


図 1: Discrete calculation model

そうすると、 ϕ_2 は Laplace 方程式の Dirichlet 問題の解となる。

$$\nabla^2 \phi_2 = 0 \quad (\text{in } \Omega) \quad (4)$$

$$\phi_2(Q') = \int_{Q \in \Gamma'} \phi_1(Q) \frac{\partial^* u(Q, Q')}{\partial n} d\Gamma - \frac{1}{2} \phi_1(Q') (\text{on } \Gamma) \quad (5)$$

二つのポテンシャル ϕ_1 と ϕ_2 を求めてから次式で反磁界を計算する。

$$H^D = -\nabla(\phi_1 + \phi_2) \quad (6)$$

2.3 離散モデル

前述の定式化を全体の計算領域を一定の大きさのセルに分割することにより、離散化する。セルの中心に計算点を置く(図1参照)。図1においてQが境界点、P'が境界に隣接する内点(境界隣接点)、P''はさらに内側の内点を表す。境界点、Qでは ϕ_1 の方程式の場合はNeumann条件が、 ϕ_2 の方程式の場合はDirichlet条件が境界条件として与えられる。ポテンシャル u (ϕ_1 または ϕ_2)を定めるPoissonまたはLaplace方程式は、Taylor展開を用いて離散化され、すべての計算点におけるポテンシャルの連立一次方程式となる。その方程式を解くためにSOR法を用いた。SOR法は各計算点において近隣の4つの計算点における値を加えあわせて計算するものである。これをそれぞれの計算点に対して式(7)に従って順に反復して計算する。

$$u_{i,j}^{k+1} = u_{i,j}^k + \omega [b_{i,j} - (L_2 u_{i,j-1}^{k+1} + L_1 u_{i-1,j}^{k+1} + Du_{i,j}^k + U_1 u_{i+1,j}^{k+1} + U_2 u_{i,j+1}^{k+1})] / D \quad (7)$$

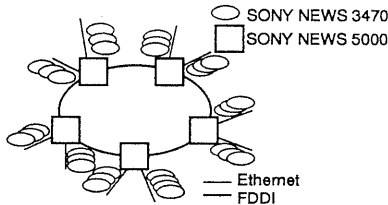


図2: Experimental environment

3 分散環境における並列型モデル

3.1 システムの構成

複数のコンピュータがネットワークに接続されて構成されている分散環境では、独立したメモリをもった配置されるCPU資源を利用し、計算機1台で計算するものを複数の計算機に分散して計算させることができる。従って、各コンピュータが相互に通信しつつ、割り当てられた計算を行なうことによって高速の処理を行なうことができる。このような環境上

で上述のマイクロマクネティックスの問題を並列化することを行なう。本研究では、図2のような環境上で実験を行なった。この実験環境は100Mbpsの転送速度をもつFDDIと10Mbpsの転送速度のEthernetに接続されたネットワークシステムからなる。

3.2 並列型モデル

SOR法を用いた反復計算を並列的に実行させるバイプラインモデルを設計した[3],[4]。この計算モデルは、全体の計算領域を多数の副領域に分け、ワークステーションに割り当てる(図3参照)。全体の計算領域を副領域に分けることを副領域の境界と呼ぶことにする。SOR法の計算により、副領域の境界上にある内点の u を計算する時に必要なデータが隣接するプロセス上にあるので、プロセス間通信が必要になる。最初に割り当てられたプロセス、プロセス#1、から計算が始まる。それぞれのワークステーションが担当している副領域の計算点の u を計算し終わったら隣接するプロセスに副領域の境界データを送る。そして、次の反復計算が始まるとともに隣接するプロセスが計算を始める。このように隣接するプロセスが順に計算を始め、すべてのプロセスが計算を始めたなら完全に並列に計算がなされることになる。このような機構を実現するためにmaster-slaveモデルを採用した。masterプロセスは計算領域のプロセスの割り当て、プロセスの起動及び終了の管理を行なう。

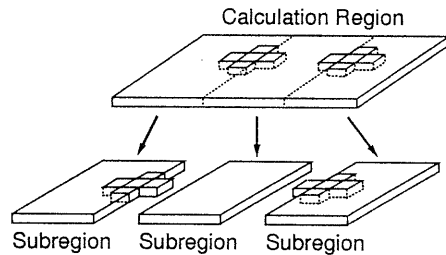


図3: Calculation region partitioning

また、masterプロセスは設定されているパラメータに寄ってslaveプロセスを実行させるとともに必要な計算パラメータを渡すことも行なう(図4,5)。一方slaveプロセスは1台のワークステーションに

対して 1 個の slave プロセスが実行され、実際に問題を計算するプロセスである。

また境界積分の計算 (式 5) においてはパイプライン計算で得られた Poisson 方程式の解 ϕ_1 を用いた積分により、 ϕ_2 の境界値が計算される。このため、リングモデルと呼ぶ仕組みを設計した。このモデルは副領域に分散している全体の計算領域の境界データを取めるためにその境界データをすべてのプロセスに循環させるためのモデルである。境界データを得るとすべてのプロセスは担当している副領域の Dirichlet 問題を計算し、パイプラインを用いて Laplace 方程式を解く。そして、 ϕ_1 と ϕ_2 を加えて磁性体内部ポテンシャルを求めることができる。次に LLG 方程式を解くことにより、磁化の分布の変遷を計算し、1 time step の計算が終る。

3.3 計算機間の通信モデル

分散環境におけるパイプライン方式は、メッセージパッシングに基づいて行なう仕様なので、共用メモリのアクセス競合のような問題は生じない。しかし、計算機間の通信モデルの問題がある。それを検討し改良するために 2 通りの slave プロセスの通信モデルを考えた。一つはモデル 1 と呼ぶ。このモデルは計算が速く進むことを考慮して計算プロセスを分け離し、メッセージキューを用いてプロセス間通信を行なうモデルである。隣接している slave プロセスとのデータ交換は通信プロセスの役割である。一方、計算プロセスと通信プロセスを一つのプロセスとして隣接しているプロセスと直接に通信するようにしたものがモデル 2 である。

3.4 計算速度向上の評価式

パイプラインモデルの評価には式 (8) を用いた。

$$Speedup = \frac{n_x n_y t_c}{\frac{n_x n_y t_c}{N} + t_t} \quad (8)$$

n_x, n_y は x と y 軸方向のセルの数、 N は割り当てられたワークステーションの台数、 t_c は一つのセルに対する計算時間、 $t_t(N, n_x, n_y, etc)$ は通信時間である。通信時間 t_t は、実行時に生じるネットワークの負荷やデータのやりとりの待ち時間などいわば現実の通信時間を意味する。通信時間 t_t には静的な

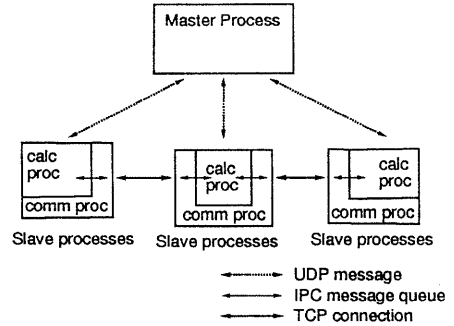


図 4: Transmission model 1

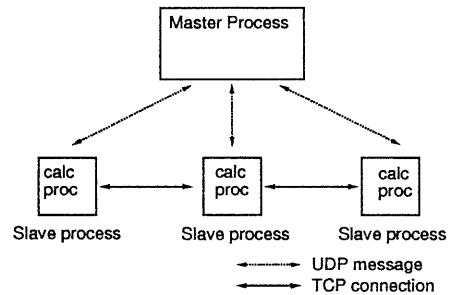


図 5: Transmission model 2

部分 (パケットサイズに関連してきまる部分) と動的な部分 (ネットワークの負荷による部分) がある。

4 評価

この節では、実験の結果得られた実行時間を示す。図 6 は副領域の大きさを固定し、計算機の台数を変えた場合の計算速度向上を示す。モデル 1 では通信時間に通信プロセスを経由する時間も含まれているため t_t が大きくなり、性能が落ちる。副領域が大きくなると、計算時間の通信時間に対する割合は大きくなる。つまり、粒度が大きくなる。図 7 はその時のパケット衝突の発生回数を示している。

パケット衝突が生じる時はネットワーク負荷が大きくてパケットを再転送する回数が増加するために通信時間 t_t が大きくなる。よって、計算速度の向上が悪くなる要因の一つになる。

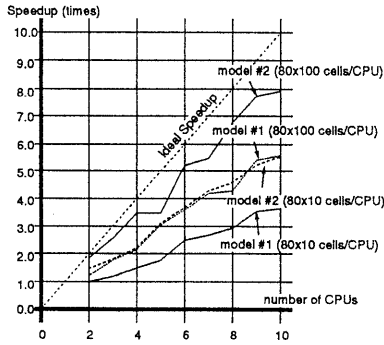


図 6: The calculation speedup by the number of CPUs with fixed calculation sub-region

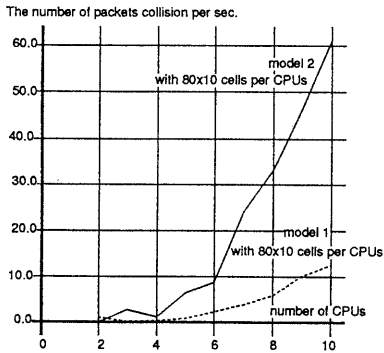


図 7: The packet collision occurrence on transmission path by the number of CPUs with fixed calculation sub-region

実験結果より、メッセージキューを用いたモデル 1 においては通信時間が通信プロセスを経由する時間も含んでいるため、大きな影響になり、モデル 2の方がメッセージキューを用いたモデル 1 より速い。 t_t は計算領域の大きさと台数を変えると変化する。実験結果を用いて Lagrange の内挿法を使って解析すると

各副領域の大きさが 80×10 セルの場合:

$$t_t = 0.077N^2 - 0.623N + 6.02$$

各副領域の大きさが 80×10 セルの場合:

$$t_t = 0.1375N^2 - 0.64N + 3.2325$$

という実験式が得られた。これらの式を式 (8) に代入するとパイプラインモデルの性能は図 9 のように表すことができる。 80×10 の場合は最も性能がよくなるのは 14 台の計算機を用いる場合で、その場合、速度の向上は 5.49 倍となる。 80×100 の場合は最も性能がよくなり、25 台の時で、速度の向上は 13.06 倍である。

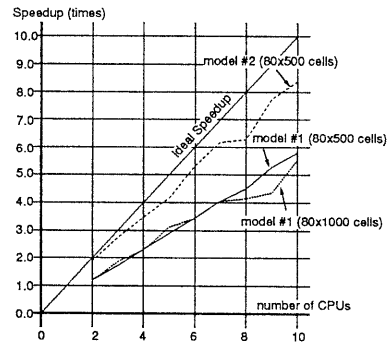


図 8: The calculation speedup by the number of CPUs with fixed calculation region

しかし、実際には、25 台で計算できるような環境はめったにないし、できるとしてもネットワークの負荷が非線形に増加するので、計算速度向上が急に悪くなる。

図 11 は、大規模な計算の結果である。全体の計算領域が固定され、100 台までのワークステーションを用いて計算を行なった。各イーサネットは 9 又は 10 台の計算機を接続されているので、ネットワークの負荷が小規模の計算の時 (10 台) と近い。しかし、subnetwork 間の相互通信が増加するために負荷が更に増え、また台数が多くなるにつれて副領域が小さくなるため、通信時間の占める割合が大きくなり、計算速度向上が ideal case から離れていく。

下のテーブルは式 8 により、 t_c が $16 \mu\text{sec}$ で実行時に生じる通信量を計算したものである。

計算の副領域 (cells)	一台に対する通信量 (KB/sec)
80×10	$100N$
80×100	$10N$

Note: N は計算機の台数

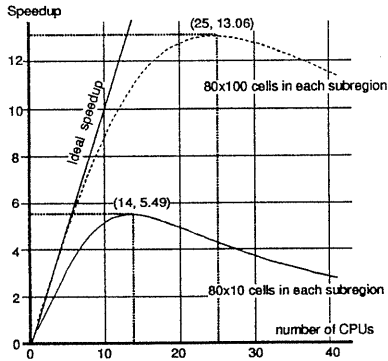


図 9: Calculation performance of pipeline model

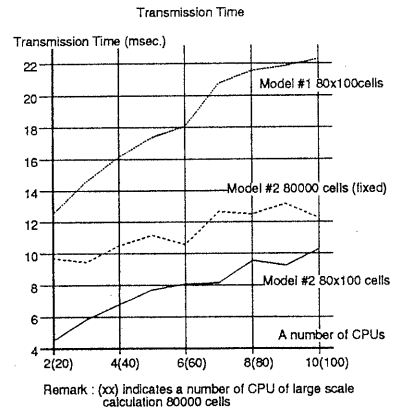


図 11: Transmission time

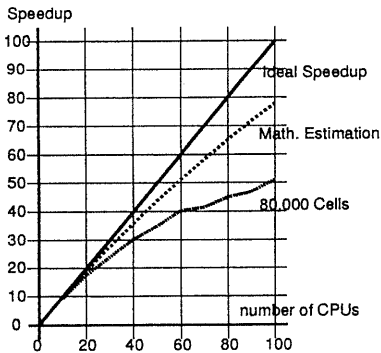


図 10: Large scale calculation speedup of pipeline model

5 おわりに

分散環境上での並列処理について問題の並列化、アルゴリズム、実装環境などについて考察した。それらの問題を検討するための応用としてマイクロマグネティックス・シミュレーションを例として研究を行なった。また、この応用に対する並列化の問題を含む改良法を考え、実際に生じた問題を解決した。通信負荷と計算負荷の相互間のバランスが重要であることがわかった。さらに、計算機の台数を増やすとパケット衝突や再送の確率が増加し、通信時間 t_t

が余計に大きくなり、分散環境上での並列計算に対して問題になることがわかった。

参考文献

- [1] D.R. Fredkin and T.R. Koehler, "Ab Initio Micromagnetic Calculations for Particles", J.Appl.Phys, vol.67, No.9, pp.5544-5548, 1990.
- [2] 水倉 貴美、林 信夫、" 磁位を利用したマイクロマグネティックスのための高速シミュレーション"、日本応用磁気学会誌、17、682 (1993).
- [3] A. L. Ananda and B. Srinivasan, "Distributed Computing Systems: Concept and Structures", IEEE Computer Society Press, 1990.
- [4] D. J. Lilja, "Reducing the Branch Penalty in Pipelined Processors", IEEE Computer, pp.47-55, July 1988.
- [5] W. R. Stevens, "UNIX Network Programming", Prentice-Hall International, Inc., 1991.
- [6] M. Yabuki, M. Hatakeyama, "Distributed Processing for Numerical Calculation in UNIX Local Area Network", Information Processing Society of Japan, vol.91, No.61, pp.9-16, July, 1991. (in Japanese)