

直方体要素用高速多重極法を用いた 大規模マイクロマグネティックス計算の並列化

高橋 康人^{†1} 岩下 武史^{†1}
中島 浩^{†1} 若尾 真治^{†2}

高速多重極法 (FMM) を導入したマイクロマグネティックス計算の大規模高速化を目的として, MPI を用いた並列化および負荷分散法について検討を行う. マイクロマグネティックスで用いられる均一な要素分割の周期性を活用し演算量を大幅に削減できる直方体要素用 FMM において, その特長を保持したまま適切な負荷分散を行う方法を提案するとともに, 100 プロセス以上の並列計算における台数効果について検証する. 最終的に, 垂直記録用単磁極磁気ヘッドの記録磁界解析に適用し, 複雑形状を有する実機を対象とした大規模解析における開発手法の有効性を明らかにする.

Large-scale Micromagnetic Simulation by Using Parallel Fast Multipole Method Specialized for Uniform Brick Elements

YASUHITO TAKAHASHI,^{†1} TAKESHI IWASHITA,^{†1}
HIROSHI NAKASHIMA^{†1} and SHINJI WAKAO^{†2}

This paper investigates the scalability of a large-scale micromagnetic simulation by using the parallel fast multipole method (FMM) specialized for uniform brick elements. The load balancing technique suitable for the micromagnetic simulation with the FMM is also proposed. As a practical example, the developed method is applied to the single-pole-type head model for perpendicular magnetic recording system. The numerical results clarify the good scalability in the case of the practical model with complex configuration.

^{†1} 京都大学
Kyoto University
^{†2} 早稲田大学
Waseda University

1. はじめに

磁気記録の分野では, 磁化の回転などを直接考慮し磁壁移動などのマイクロな現象の再現が可能なモデリング手法^{1),2)} であるマイクロマグネティックスが, 特に強磁性体の磁区構造解析手法として物理現象の解釈やデバイスの設計に用いられている. 近年では, マイクロマグネティックスにより積層電磁鋼板のヒステリシス現象をモデル化するなど, 電気機器を対象とした磁界解析への導入に向けた検討も報告されており³⁾⁻⁵⁾, 計算機の高性能化とあいまってその応用分野はさらに広がりつつある.

マイクロマグネティックスでは, 磁化の定義された要素からの静磁界相互作用 (反磁界) を求める必要がある. その演算量は要素数 N の 2 乗に比例し, 全計算時間の大部分を占めるため, 反磁界計算の演算量削減手法に関する研究がさかに行われている⁶⁾⁻⁸⁾. 代表的な方法として, 反磁界の量み込み計算に高速フーリエ変換 (FFT) を用いる手法があり⁹⁾, 演算量を $O(N \log N)$ にまで削減できる. 一方, 著者らは文献 10) において, 必要な精度を確保しつつ多体間相互作用の近似値を高速に計算する手法である高速多重極法 (FMM)¹¹⁾⁻¹³⁾ に着目し, 計算コストが $O(N)$ である新たな反磁界計算方法を提案した. マイクロマグネティックスではあらかじめ磁化分布を予想することが困難であるため, 直方体などを用いた均一な要素分割が一般的に用いられる. 高速多重極法に基づく提案手法では, この直方体要素分割の周期性を活用することで, FFT や通常の FMM を用いた従来法と比較して, 計算時間・使用メモリの大幅な削減を達成した. しかしながら, マイクロマグネティックスではマイクロな物理現象を考慮するために磁壁のサイズ以下の詳細な要素分割が必要となる. したがって, 磁気ヘッドなどの実機へ適用する際には解析の大規模化が避けられず, さらなる高速化が要望されている.

このような背景のもと, 本論文では大規模マイクロマグネティックス計算のさらなる高速化を目的として, MPI (Message Passing Interface) を用いた直方体要素法用 FMM の並列化および負荷分散法に関する検討を行う. FMM の並列化および負荷分散法についてはこれまでもいくつか報告例があり¹⁴⁾⁻¹⁶⁾, ヘルムホルツ場においては境界要素法を用いた実機解析に適用されている^{17),18)}. しかしながら, 本論文が対象とするようなラプラス場では, たとえば 100 プロセス以上などの高並列計算時における並列化効果については明らかにされておらず, マイクロマグネティックス計算においては検討例がほとんどない. さらに, 実機解析では複雑形状を扱う必要があるため, 適切な負荷分散方法の開発は必須である. そこで, マイクロマグネティックスに用いられる均一な直方体要素分割の周期性を活用

した直方体要素用 FMM の特長を保持したまま負荷分散を行う方法を提案し, 100 プロセス以上の並列計算における台数効果について検証する. 最終的に, 垂直記録用単磁極磁気ヘッドの記録磁界解析に適用し, 複雑形状を有する実機を対象とした大規模解析における開発手法の有効性を明らかにする.

2. マイクロマグネティックス

マイクロマグネティックスでは, 外部磁界によるエネルギー, 磁気モーメントどうしの相互作用である反磁界によるエネルギー, 隣り合うスピン間の相互作用である交換磁気エネルギー, 磁気異方性に起因する磁気異方性エネルギーの総和が極小になるよう磁化の分布を決定する. このとき, 磁化 M の歳差運動を表す方程式が, 以下の Landau-Lifshitz-Gilbert (LLG) 方程式である.

$$(1 + \alpha^2) \frac{\partial M}{\partial t} = -\gamma (M \times H_{\text{eff}}) - \frac{\alpha\gamma}{M_s} (M \times (M \times H_{\text{eff}})) \quad (1)$$

ここで, M_s は飽和磁化の大きさ, H_{eff} は実効磁界, α は減衰定数, γ はジャイロ磁気定数である. 本論文では, 式 (1) の時間微分を前進差分で表し, 次式により新たな時刻における単位磁化ベクトル m を求める.

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

ここで, Δt は時間刻み幅, 上付き添え字はタイムステップを表す. 式 (2) により新しい時刻の m を求めたのち, 大きさが 1 になるよう規格化する.

また, 式 (2) 右辺の実効磁界 H_{eff} は次式で与えられる.

$$H_{\text{eff}} = H^E + H^D + H^K + H^A \quad (3)$$

ここで, H^E は外部磁界, H^D は反磁界, H^K は磁気異方性エネルギーに起因した磁界, H^A は交換磁気エネルギーに起因した磁界である. H^K (一軸異方性で磁化容易軸は z 軸方向の場合) および H^A は, それぞれ次式のように表される.

$$H^K = \left(-\frac{2K_u}{M_s} m_x, -\frac{2K_u}{M_s} m_y, 0 \right) \quad (4)$$

$$H^A = \frac{2A}{M_s} \nabla^2 m \quad (5)$$

ここで, K_u は異方性定数, A は交換スティフネス定数である. 直方体で要素分割を行った場合, 式 (5) における 2 階微分は差分法を用いて以下のように計算できる²⁾.

$$\begin{aligned} \nabla^2 m(i, j, k) = & \frac{m(i+1, j, k) - 2m(i, j, k) + m(i-1, j, k)}{\delta x^2} \\ & + \frac{m(i, j+1, k) - 2m(i, j, k) + m(i, j-1, k)}{\delta y^2} \\ & + \frac{m(i, j, k+1) - 2m(i, j, k) + m(i, j, k-1)}{\delta z^2} \end{aligned} \quad (6)$$

ここで, $\delta x, \delta y, \delta z$ は, x, y, z 軸方向の分割幅である. また, 静磁界相互作用である反磁界 H^D は, 以下の積分方程式より求める.

$$\begin{aligned} H^D(r) = & \sum_{l=1}^N \left(\frac{1}{4\pi\mu_0} \int_{V_l} -(\nabla' \cdot M(r')) \frac{(r-r')}{|r-r'|^3} dV' \right. \\ & \left. + \frac{1}{4\pi\mu_0} \int_{\partial V_l} M(r') \cdot n' \frac{(r-r')}{|r-r'|^3} dS' \right) \end{aligned} \quad (7)$$

V と ∂V は磁化の定義された直方体要素とその境界, 下付き添え字 l は要素番号, μ_0 は真空の透磁率, n は各要素表面における外向き単位法線ベクトル, r および r' は位置ベクトルを表し, ∇' および dV' , dS' は r' に作用する微分および積分であることを意味する. また, 式 (7) の体積積分・境界積分は各直方体要素ごとに実行する. 本論文では磁化ベクトルを要素内で一定としているため, 式 (7) 右辺第 1 項は 0 となる.

式 (1) による磁化 M の更新や, H^E と H^K の算出は各要素ごとに行うため, その演算量は $O(N)$ となる. また, H^A の算出では隣り合う要素間の相互作用を計算すればよく, この演算量も $O(N)$ である. しかし, 反磁界 H^D の算出では, 式 (7) を用いてすべての直方体要素からの寄与を求める必要があり, $O(N^2)$ の膨大な計算コストを要する. したがって, 反磁界の算出がマイクロマグネティックスにおける全計算時間の大部分を占めることになる.

3. 高速多重極法

3.1 高速多重極法の計算手順

式 (7) で表される反磁界は, 静磁界相互作用 (ラプラス場) である. ラプラス場においては, 任意の点のポテンシャルを多重極展開と局所展開を用いて無限級数で記述できる. 展開係数の打ち切り上限数を p としたとき, 極座標 (r, θ, ϕ) におけるポテンシャル V は以下のように表せる.

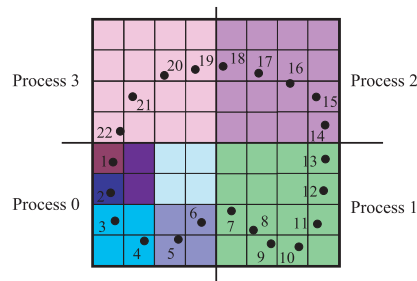


図 1 2次元解析での例
Fig. 1 Example of 2-dimensional analysis.

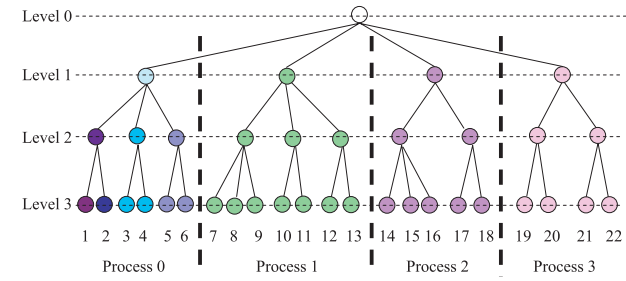


図 2 図 1 に対応した 4 分木構造
Fig. 2 Quadtree structure corresponding to Fig. 1.

$$V(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^p \sum_{m=-n}^n \left(L_n^m r^n + \frac{M_n^m}{r^{n+1}} \right) Y_n^m(\theta, \phi) \quad (8)$$

ここで、 Y_n^m は文献 11) で定義される球面調和関数、 $M_n^m \cdot L_n^m$ は多重極・局所展開係数、下付き・上付き添え字は次数・位数を表す。位数 m は次数 n に対して $-n \leq m \leq n$ を満たす整数であるため、多重極・局所展開係数の個数は $(p+1)^2$ 個となる。FMM では、磁化の集合に階層的なセル構造を導入し、その構造を利用して分割統治計算を進める。その計算過程において、できるだけ多くの磁化からの影響を多重極・局所展開表現を用いて一括計算を行う。以下、FMM の概要を述べる^{11)–13)}。

まず、分割統治計算のために 3 次元解析領域をセルに分割し、階層的な 8 分木を作成する。説明の簡単化のために、静磁界相互作用である式 (7) と同様のラプラス場の例として、2 次元空間に分布している 22 個の点電荷の静電界相互作用を考える。図 1 に上記問題におけるセル構造の例を、図 2 に図 1 に対応した 4 分木構造を示す。境界要素法やマイクロマグネティクス計算などに FMM を導入する際には、四角形や六面体など要素の集合に対してセル構造を作成するが、その場合はこの例の点電荷を要素重心に置き換えればよい。解析領域中の全点電荷を含む立方体 (図 1 では正方形) をルートと呼び、レベル 0 のセルとする。その立方体を 8 等分してレベル 1 のセルを作成する。以下同様に、レベル l のセル (親セル) を 8 等分してレベル $l+1$ のセル (子セル) を作成し、設定したレベル数、もしくはセル内の点電荷 (要素) 数が指定した値以下になるまでセル分割を繰り返す。最下層のセル (子セルを持たないセル) をリーフと呼ぶ。

次に、このセル構造に基づき各セルにおいて多重極・局所展開係数を求め、相互作用計算

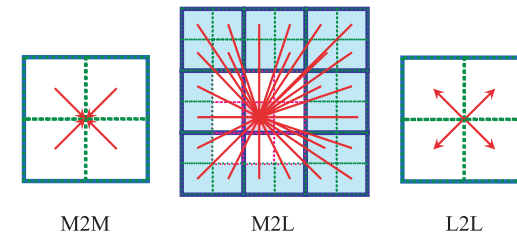


図 3 M2M, M2L, L2L 変換の概念図
Fig. 3 Concept of M2M, M2L, L2L translations.

を行う。まず、リーフからルートへ向かって以下の手順を実行する (upward pass)。

- (1) リーフセル中心に多重極展開を定義する (MP)。
 - (2) 子セルで定義された多重極展開を親セルに移動 (M2M) して加え合わせる。
- 以上の手順により、すべてのセルに多重極展開係数が定義された状態となる。続いて、ルートからリーフに向かって各レベルごとに以下の手順を実行する (downward pass)。
- (3) 親セルに局所展開がある場合、その局所展開を自分に移動 (L2L) し、加え合わせる。
 - (4) 遠方にあるセルの多重極展開を自分のセルの局所展開に変換 (M2L) し、手順 (3) で求めた局所展開に加え合わせる。
 - (5) リーフセルにおいて、局所展開の寄与 (LC) と近傍セル内点電荷 (要素) の影響を加え合わせ、任意位置でのポテンシャルを求める。

図 3 に、2 次元問題の場合における M2M, M2L, L2L 変換の概念図を示す。M2M, L2L は親子 (レベル) 間の変換であるのに対し、M2L は同一レベル内遠方セル間での変換となる。

セル間の遠近は、セル構造に基づいて決定する。2つのセル間に辺または頂点などの共有部分があるセルを近傍、親セルの近傍セルの子セルのうち自分自身とは近傍ではないセルを遠方という。M2L変換は、遠方セルが定義可能なレベル2で初めて実行される(レベル0および1における局所展開は0である)ため、M2M変換はレベル2まで行えば十分であり、L2L変換はレベル3から行われる。M2M, L2L変換は1セルあたり最大で8回実行し、M2L変換は1セルあたり最大189(親セルの近傍セルの子セル数(6³) - 近傍セルの数(3³))回実行する。よって、M2L変換がFMMプロセスの中で最も演算量を要する。

上記手順を実行する各種変換公式は、以下のとおりである。

M2M変換：子セル(極中心a)から親セル(極中心b)への多重極展開係数の変換。

$$M_{[b]j}^k = \sum_{n=0}^j \sum_{m=-n}^n \frac{A_n^m A_{j-n}^{k+m} \left(\frac{\rho}{R_{[b]}}\right)^{j+1} Y_{[b]n}^m(\alpha, \beta)}{i^{|k+m|-|k|+|m|} A_j^k \left(\frac{\rho}{R_{[a]}}\right)^{j-n+1}} M_{[a]j-n}^{k+m} \quad (9)$$

L2L変換：親セル(極中心a)から子セル(極中心b)への局所展開係数の変換。

$$L_{[b]j}^k = \sum_{n=0}^{p-j} \sum_{m=-n}^n \frac{(-1)^n A_j^k A_n^m \left(\frac{\rho}{R_{[a]}}\right)^{j+n} Y_{[b]n}^m(\alpha, \beta)}{i^{-|k+m|+|m|+|k|} A_{j+n}^{k+m} \left(\frac{\rho}{R_{[b]}}\right)^j} L_{[a]j+n}^{k+m} \quad (10)$$

M2L変換：遠方セル(極中心a)の多重極展開係数から自分のセル(極中心b)の局所展開係数への変換。

$$L_{[b]j}^k = \sum_{n=j}^{j+p} \sum_{m=-k-(n-j)}^{-k+(n-j)} \frac{(-1)^{n-j} A_j^k A_{n-j}^{m+k} Y_{[b]n}^m(\alpha, \beta) M_{[a]n-j}^{m+k}}{i^{|k+m|-|m|+|k|} A_n^m \left(\frac{\rho}{R_{[b]}}\right)^j \left(\frac{\rho}{R_{[a]}}\right)^{n-j+1}} \quad (11)$$

ここで、 i は虚数単位、 A_n^m は n と m により与えられる定数¹¹⁾、 (ρ, α, β) は極bからaを観測したときの極座標、 j および k は $0 \leq j \leq p$ 、 $-j \leq k \leq j$ を満たす整数であり、 $[]$ 内は極中心、 $R_{[a]}$ および $R_{[b]}$ は極aおよびbに対応する球面の陽に与えた展開半径を表す¹⁹⁾。これらの変換は、多重極・局所展開の展開半径を陽的に与えることで、すべてのレベルで同一の演算となる。よって、変換行列をあらかじめ準備・格納しておくことで、各種変換の高速化が可能となる²⁰⁾。また、リーフセル内においては、以下の変換公式を用いる。

MP：リーフセル内に K 個の点電荷 q_j ($1 \leq j \leq K$ 、各点電荷の極座標： $(\rho_j, \alpha_j, \beta_j)$)がある場合のセル中心cにおける多重極展開係数 $M_{[c]n}^m$ ($0 \leq n \leq p$ 、 $-n \leq m \leq n$)。

$$M_{[c]n}^m = \sum_{j=1}^K q_j \frac{\rho_j^n}{R_{[c]}^{n+1}} Y_{[c]n}^{-m}(\alpha_j, \beta_j) \quad (12)$$

LC：リーフセル中心cから見た極座標 (r, θ, ϕ) における局所展開の寄与。

$$V(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=0}^p \sum_{m=-n}^n \left(\frac{r}{R_{[c]}}\right)^n Y_{[c]n}^m(\theta, \phi) L_{[c]n}^m \quad (13)$$

解析領域中の点電荷数(要素数)が N の場合、手順(1)および(5)は点電荷数(要素数)回実行するため演算量は $O(N)$ となる。また、手順(2)、(3)、(4)はすべてのレベルで行うのでセルの総数回実行することになるが、セルの総数は $O(N)$ であるためこれらの演算量も $O(N)$ となる。したがって、FMM全体に要する演算量は $O(N)$ となる。

式(9)、(10)、(11)で表されるM2M, M2L, L2L変換は、 $(p+1)^2$ 個の展開係数から $(p+1)^2$ 個の展開係数を算出する演算である。したがって、通常のFMMは、M2M, M2L, L2L変換に $O(p^4)$ の演算量が必要となり、次数の増加にともない計算コストが急激に増大する。そこで、M2MおよびL2L変換においては座標軸の回転操作を導入することで、演算量を $O(p^3)$ にまで削減する^{11),12),20)}。また、最も演算量を要するM2L部分においては、座標軸の回転操作とポテンシャルの指数関数展開を導入し、さらなる高速化を図っている^{11),12),20)}。

3.2 直方体要素用高速多重極法

FMMを反磁界計算に導入することで、直接計算と比較した場合、使用メモリ・計算時間を削減できる。しかし、時間ステップごとに展開係数を計算し直すためある程度の演算量が必要であり、また近傍要素からの寄与を表す係数行列の格納にも相応のメモリを要する。したがって、磁気ヘッドなど実機を対象とした大規模解析への適用は、従来困難であった。一方、マイクロマグネティクスでは、通常均一な直方体要素分割が用いられる。均一な要素分割の周期性を活用することで、FMMにおけるMP, LC, 近傍寄与計算の演算量・使用メモリをさらに削減できる^{10),20)}。

マイクロマグネティクスでは磁性体中のミクロな現象を対象としているため、極端に扁平な要素分割ではなく、立方体もしくはそれに近い立方体を用いた要素分割が多い。したがって、要素の寸法を調整することで、いくつかの直方体要素を組み合わせて立方体(に近い)形状を構築できるように要素分割を行うことは容易である。上記のような要素分割を行い、いくつかの直方体要素を組み合わせた立方体形状をセル構造におけるリーフと考える。2次元問題の例である図4を考えると、 x 軸方向に2個、 y 軸方向に3個の要素を組み

合わせることで、正方形形状のリーフセルを構成している。このようにリーフを決定すると、すべてのリーフセルは同一レベルに位置し、6個の要素（もしくはその一部）から構成されていることになる。このとき、リーフセル中心と要素間の相対位置関係は、6種類のみとなる。これは、解析領域全体において、MP・LC演算が6種類のみであることを意味する。通常のFMMでは、リーフセルごとに要素形状や大きさ、含まれている要素数が異なるので、MP、LC演算のための変換行列を用いるためにはすべての要素について考慮しなければならない。よって、解析領域全体でN種類の変換行列を準備するため使用メモリに難点があり、通常は時間ステップごとに定義式から直接計算を行うことになる。これに対し均一な直方体要素分割の場合、リーフ内のx, y, z軸方向分割数を n_x, n_y, n_z とすると、MP、LC演算の種類はたかだか $n_x n_y n_z$ である。したがって、MP、LC演算についても変換行列をあらかじめ準備・格納しておくことで、演算量・使用メモリを大幅に削減できる。

同様に考えると、あるリーフセル内要素において、そのセルの近傍セル内要素との相対位置関係の種類も限定できる。たとえば図4では、リーフセルA内要素に対して近傍寄与計算を行う際に、自分自身を含めてy軸正負方向へそれぞれ最大6要素、x軸正負方向へそれぞれ最大4要素分の寄与（緑色の要素からの寄与）を考える必要がある。したがって、リーフセルAにおける近傍セル内要素からの寄与は合計 $(2 \times 6 - 1) \times (2 \times 4 - 1) = 77$ 種類となり、その隣のリーフセルにおける近傍セル内要素からの寄与も先の77種類のいずれかと一致する。一般的な場合を考えると、近傍要素からの寄与を表す変換行列の種類は、たかだか $(4n_x - 1) \times (4n_y - 1) \times (4n_z - 1)$ となる。解析領域全体における近傍要素からの総寄与数は膨大であるため、要素分割の周期性を利用することで、使用メモリを浪費することなく近傍要素からの寄与を表す変換行列を準備・格納できる。

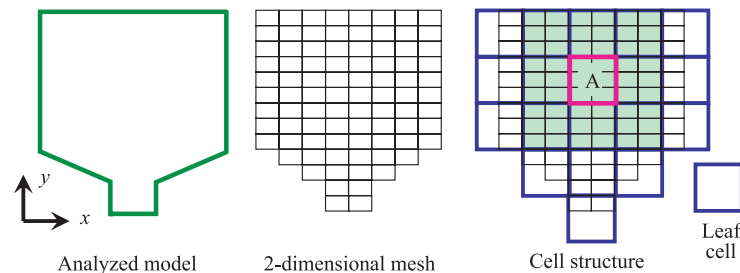


図4 長方形要素分割におけるセル構造
Fig. 4 Cell structure for rectangles.

以上のように、M2M, M2L, L2L変換に加えて、MP, LC演算、近傍寄与計算にも変換行列を用いることで、演算量・使用メモリの大幅な削減が可能となる。

4. 直方体要素用高速多重極法に基づくマイクロマグネティクス計算の並列化

4.1 直方体要素用高速多重極法の並列化

マイクロマグネティクス計算の並列化を考えた場合、式(1)による磁化Mの更新や、外部磁界 H^E や磁気異性エネルギーに起因した磁界 H^K の算出は、各プロセスに割り当てられた要素ごとに独立に実行できる。また、隣り合う要素間の相互作用である交換磁気エネルギーに起因した磁界 H^A の算出では、割り当てられた領域の境界に位置する要素情報について隣接領域を担当するプロセスと通信することになるが、これも容易である。そこで以下では、反磁界 H^D の算出で必要になる直方体要素用FMMの並列化方法について述べる。基本的には粒子間相互作用を対象とした文献[14]の方法を採用しているが、直方体要素用FMMに適合するよう修正を行っている。

まず、セル構造に基づいて全解析領域を部分領域に分割し、各プロセスに割り当てる。図1および図2に、4並列の場合の一例を示す。図2の木構造では、レベル1以下の階層において親セルと子セルがすべて同じプロセスの担当となる。このとき、MP, LC演算, M2M, L2L変換は各プロセスが記憶しているセルおよび要素のみで実行すればよく、通信を必要としない。

一方、M2L変換においては、各プロセスが担当している領域内に遠方セルがあるとは限らないため、該当遠方セルを担当しているプロセスとの通信が必要となる。たとえば図5の場合、process 0が担当するレベル3のセルにおいてM2L変換を実行するためには、process 1から3の担当セルのうち緑色と青色のセルの多重展開係数が必要であり、これらを process

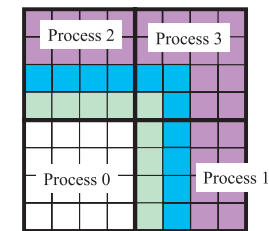


図5 M2L変換および近傍寄与計算に必要な通信
Fig. 5 Communication for M2L translations and nearfield interactions.

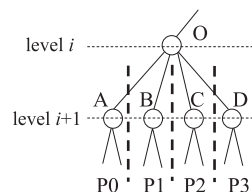


図 6 M2M および L2L 変換に必要な通信

Fig. 6 Communication for M2M and L2L translations.

0 に送信する．各セルにおける多重極展開係数は MP または M2M 変換後に定義されるが，M2L 変換が実行されるまで参照されることはない．したがって，各セルにおいて多重極展開係数を求めた後，そのセルの情報を必要とするプロセスに非同期通信を行い，受信は M2L 変換を実行するまでに完了すればよい．この非同期通信により，M2L 変換に必要な通信処理の大部分を極力隠蔽することができる．

近傍寄与と計算についても，近傍セルが同一プロセスの担当とは限らないので，通信が必要になる．たとえば図 5 において，process 0 で近傍寄与と計算を行うためには緑色のセル内要素の磁化の情報が必要であり，他プロセスから process 0 に送信する．近傍寄与と計算のために通信される近傍セル内要素の磁化情報は，交換磁気エネルギーに起因した磁界 H^A の算出にも活用できる．なお，MP，M2M，M2L，L2L，LC および近傍寄与と計算のための変換行列は，すべてのプロセスで記憶しておく．また，近傍・遠方セル以外のセル（図 5 において紫色のセル）の情報は使用しないため，その部分は記憶する必要がない．

レベル 2 のセル数（3 次元の場合，最大でも 64）以上のプロセス数で並列計算を実行する際には，上位レベルにおいてプロセス数が過剰となり，1 つのセルを複数のプロセスで担当することになる．このような場合，M2M および L2L 変換においても通信が必要になる．たとえば図 6 のように，レベル i のセル O の子セルを A, B, C, D とし，それぞれ別のプロセスが担当しているとすると，セル O の多重極展開係数を求めるためには A から D の多重極展開係数が必要なので，セル O を担当するプロセス $P0$ から $P3$ の中で最も小さい rank を有するプロセス（この例では $P0$ ）に送信する．多重極展開係数を受信した $P0$ のみが M2M を実行し，引き続きレベル $i-1$ での計算を続行する．逆に， A, B, C, D で L2L 変換を行う際には，セル O を担当するプロセスの中で最も小さい rank を有するものから他のプロセスへ局所展開係数を送信する．M2M および L2L 変換の際に通信が付加されることになるが，最も演算量を要する M2L 変換に影響を与えることなく，プロセス数がセル数

に対して過剰な場合でも並列計算が実行可能となる．

4.2 負荷分散方法

1 プロセスあたりの演算量は担当する要素数とセル数に依存しており，担当する要素数が多ければセル数もそれにともない増加する．したがって，各プロセスの負荷を適切に分散させるためには，担当する要素数を均等化させることが望ましい．ラプラス場における FMM の負荷分散方法として，たとえば文献 16) では粒子シミュレーションにおいて communication graph を用いた方法が，文献 15) では compressed octree を用いた方法が報告されている．しかし，本論文が対象とするマイクロマグネティクス計算では，粒子挙動解析のように解析領域中のある部分に極端に考察点が集中することはない．また，compressed octree を用いる場合には異なる大きさのセル間で M2L 変換を扱う必要があるため，M2L 変換行列を使用できないうえに，3.2 節で述べた直方体要素分割の周期性を利用した演算量・使用メモリ削減法を適用できないという問題が生じる．そこで本論文では，マイクロマグネティクスで用いる均一な直方体要素分割の特徴を考慮した負荷分散方法を提案する．

負荷の均等化のみに着目すると，リーフセルが位置する最下層レベルにおいて領域分割を行い，各プロセスへの割当てを行えばよい．しかし，1 つのセルを複数のプロセスで担当する（子セルと親セルの担当プロセスが異なる）場合が増加し，結果として M2M，L2L 変換のための通信が増加する．M2M，L2L 変換のための通信を極力抑えるためには，なるべく上位レベルでプロセスを割り当てるのが望ましい．そこで，比較的上位レベルの段階でできる限り担当要素数を均等化することを目的として，以下の手順により負荷分散を行った．

- (1) 全プロセス数 N_p よりもセルの数 N_c が多い，つまり $N_p \leq N_c$ が成立する最小レベルを L_m とする．
- (2) 担当要素数ができるべく均等になるように，レベル $L_m + \lambda$ (λ は 0 以上の整数) に位置する全セルを各プロセスに割り当てる．このとき，すべてのプロセスがレベル $L_m + \lambda$ のセルを最低でも 1 つは担当することとする．
- (3) レベル $L_m + \lambda$ よりも下位レベルのセルについては，親セルの担当プロセスを子セルも引き継ぐ．
- (4) レベル $L_m + \lambda$ よりも上位レベルのセルについては，子セルを担当しているセルのうち最もランクの小さいセルを親セルの担当プロセスとする．

上記手順では， λ が小さいほど上位レベル（大きな部分木）での割当てを優先するため，複雑な形状の場合，各プロセス間で担当要素数に偏りが生じる可能性がある．一方， λ を大きく設定すれば担当要素数は均等化されるが，M2M，L2L 変換における通信量が増加する．

ここで、上記の負荷分散による負荷均衡度を評価する指標を導入する．前述のようにマイクロマグネティクスでは考察点が極端に集中することはないため、解析領域の全要素数 N_T とリーフセル数 N_{leaf} とがほぼ比例し、したがって全セル数とも比例関係にある．FMMの演算量は要素数およびセル数に比例するため $O(N_T)$ となるが、これは8分木構造の任意の部分木においてその部分木が含む要素数に対しても成り立つ．したがって、上記手順のように部分木単位で各プロセスに要素を割り当てる場合、レベル $L_m + \lambda$ 以下の演算量は各プロセスの担当要素数にほぼ比例すると考えられる．一方、レベル L_m のセル数はプロセス数 N_p に対してたかだか $8N_p$ であることを考慮すると、レベル数が1増加するとセル数が8倍になるとすれば、レベル $L_m + (\lambda - 1)$ 以上の全セル数はたかだか $8^{\lambda+1}N_p/7$ となる．全セル数は $8N_{leaf}/7$ なので、 $L_m + (\lambda - 1)$ 以上のレベルにおけるM2M, M2L, L2L変換の演算量の割合は $8^\lambda N_p/N_{leaf}$ と見積もれる．通信量と演算量のトレードオフから λ は0に近い値であり、FMM全体ではさらにリーフセルにおける演算量が追加されるため、後述する実規模モデルのように N_{leaf} が N_p と比較して十分大きい場合、 $L_m + (\lambda - 1)$ 以上のレベルにおける演算量はFMMの全演算量に対して無視できるほど小さい．したがって、各プロセスの演算量は近似的に担当する要素数に比例すると見なせる．そこで、担当要素数に着目した簡便な負荷分散指標として、次式で定義されるプロセスの最大担当要素数が全要素数に占める割合の逆数 R を用いる．

$$R = N_T/N_{\max} \left(N_{\max} = \max(N_1, N_2, \dots, N_{N_p}), N_T = \sum_{i=1}^{N_p} N_i \right) \quad (14)$$

ここで、 N_i はプロセス i が担当する要素数、 N_{\max} は各プロセスが担当する要素数の最大値である．なお、 R は通信を無視した場合の理想的な台数効果ととらえることもできる．

5. 数値解析による検証

5.1 磁性体薄膜モデル

開発手法の有効性を検証するために、図7に示す磁性体薄膜モデルを対象に大規模マイクロマグネティクス計算を行う． $5 \times 5 \times 5 \text{ nm}^3$ の立方体要素に分割し、要素数は12,441,600である．高速多重極法の設定として、実用上十分な精度を得るために多重極・局所展開項数は10次とし²¹⁾、指数関数展開においては $s(\epsilon) = 18$ の積分公式を用いた¹¹⁾．直方体要素用FMMでは、リーフセル内の要素数が増加するにつれて、解析領域中の全セル数が減少する．このとき、使用メモリとM2M, L2L, M2L変換の演算量は減少するが、1リーフセ

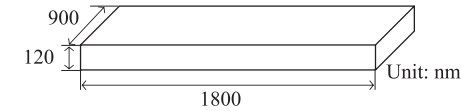


図7 磁性体薄膜モデル
Fig. 7 Thin magnetic medium model.

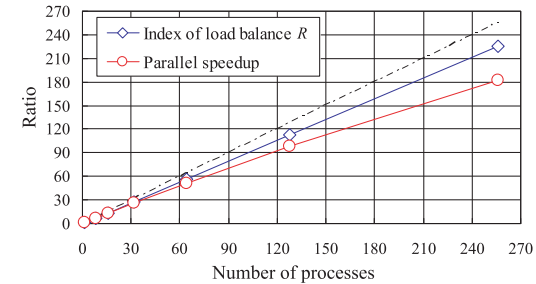


図8 磁性体薄膜モデルにおける台数効果 ($\lambda = 0$)
Fig. 8 Scalability in thin magnetic medium model at $\lambda = 0$.

ルあたりのMP, LCや、近傍要素からの寄与計算は増加する．上記演算量に関するトレードオフ関係をふまえ、リーフセル内の要素数は逐次計算において最も高速であった27要素で構成することとした¹⁰⁾．使用計算機は、京都大学学術情報メディアセンターのスーパーコンピュータ Fujitsu HX600²²⁾ である．1ノードあたり Quad Core AMD Opteron 8356×4で、最大16ノード(256コア)を用いて台数効果を検証した．

4.2節の負荷分散手順における λ が台数効果に与える影響を検討するため、図8および図9に、 $\lambda = 0$ および $\lambda = 1$ それぞれの場合における速度向上率(台数効果)および負荷分散の指標(式(14)の R)を示す．図中の破線は、理想的な台数効果(=プロセス数)を示している．また、図10に並列化効果および負荷分散指標 R のプロセス数に対する割合(効率)を示す．本モデルでは形状が単純であるため、 $\lambda = 0$ の場合でも比較的良好な負荷分散が行われており、プロセス数が小さい範囲では台数効果と負荷分散の指標はほぼ同程度の値を示している．これはM2L変換において通信を極力隠蔽しており、通信のオーバーヘッドが台数効果に対してほとんど影響しないためだと考えられる．しかし、図10を見るとプロセス数の増加にともない R の効率は一定であるが、並列化効率はなだらかに減少している．これは、プロセス数が大きい場合にはM2L変換のための通信を隠蔽しきれなくなるこ

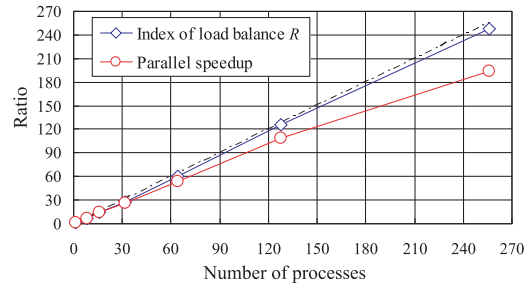


図 9 磁性体薄膜モデルにおける台数効果 ($\lambda = 1$)
Fig. 9 Scalability in thin magnetic medium model at $\lambda = 1$.

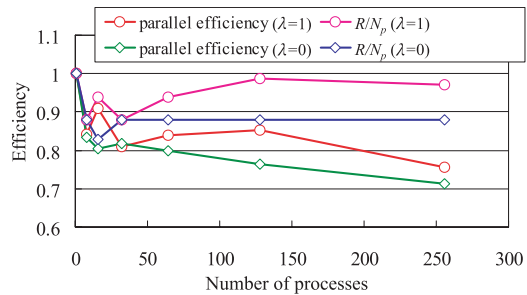


図 10 磁性体薄膜モデルにおける並列化効率
Fig. 10 Parallel efficiency in thin magnetic medium model.

とや, M2M, L2L 変換や近傍寄与計算のための通信の影響などが原因として考えられる。一方, $\lambda = 1$ とすることで R が改善されている部分では負荷が均等化されるため, $\lambda = 0$ の場合と比較して全体的に並列性能が改善されている。256 並列で 193 倍の台数効果 (100 ステップ: 367 秒) を達成しており, 開発手法の有効性が確認できる。

負荷分散指標 R は通信を無視した場合の理想的な台数効果, すなわち提案手法による台数効果の最大値を表しているため, λ の最適値を判断する際にも活用できる。本例題の場合, $\lambda = 1$ ですでに負荷は十分均等化されているため, λ をさらに大きくしても M2M, L2L 変換のための通信が増加するだけで, 特にプロセス数が大きい場合にはこれ以上の台数効果の改善はほとんど期待できないことが分かる。

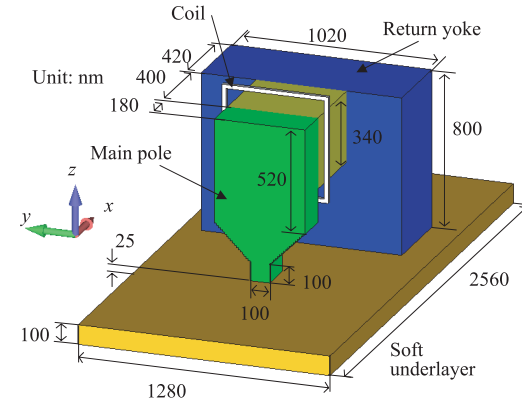


図 11 垂直記録用単磁極磁気ヘッドモデル
Fig. 11 Single-pole-type write head model for perpendicular magnetic recording.

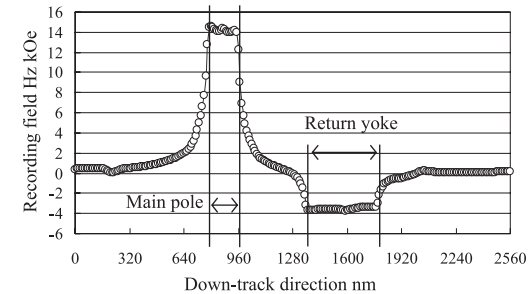


図 12 4 ns における記録磁界分布
Fig. 12 Perpendicular component of recording fields at 4 ns.

5.2 垂直記録用単磁極磁気ヘッド

複雑形状を有する実規模モデルとして, 垂直記録用単磁極 (SPT) 磁気ヘッドの記録磁界解析を実行した。図 11 に, 解析モデルの全体図を示す。要素サイズは $5 \times 5 \times 5 \text{ nm}^3$ であり, 全要素数は 6,296,400 である。コイル電流は 3000 AT, 時間刻みは 1 ps で, 減衰定数は 1 とした。記録層は空気として扱い, SPT ヘッドと下地層との間隔は 25 nm である。各部の寸法や電流値の時間変化, その他の物質定数などは, 文献 23) と同様とした。ただし, 文献 23) で採用されている intermediate plane²⁴⁾ は, 本論文では用いていない。

図 12 に, $t = 4 \text{ ns}$, 下地層から 15 nm における記録磁界の垂直成分を示す。主磁極とリ

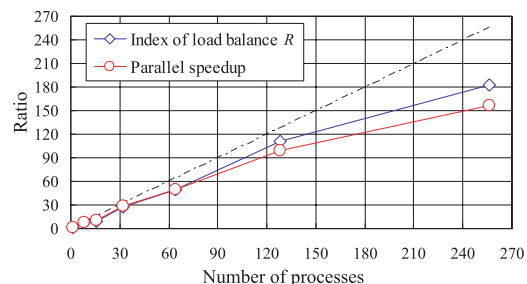
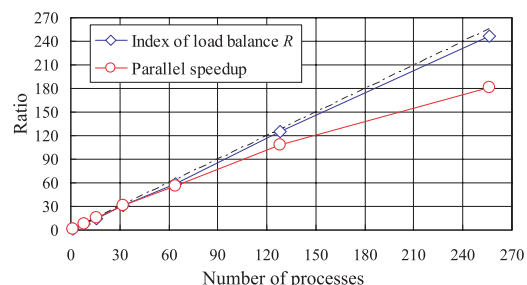
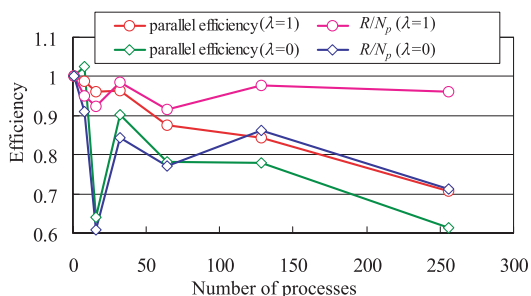
図 13 SPT ヘッドモデルにおける台数効果 ($\lambda = 0$)Fig. 13 Scalability in SPT head model at $\lambda = 0$.図 14 SPT ヘッドモデルにおける台数効果 ($\lambda = 1$)Fig. 14 Scalability in SPT head model at $\lambda = 1$.

図 15 SPT モデルにおける並列化効率

Fig. 15 Parallel efficiency in SPT head model.

ターンヨーク付近におけるピーク値も含めて記録磁界は文献 23) とよく一致している。

図 13 および図 14 に、SPT ヘッドモデルの場合の速度向上率および負荷分散の指標を示す。また、図 15 に並列化効率および負荷分散効率を示す。SPT ヘッドモデルは形状が複雑であるため、図 15 に示すとおり各プロセスへの要素割当てに不均衡が生じやすい。しかし、 λ を変更することで R が改善され、プロセス数の大小にかかわらず並列性能が改善されている。また、 $\lambda = 1$ とすることでほぼ理想的な負荷分散が達成されているため、これ以上 λ を大きくしても台数効果の大幅な改善は見込めないことが分かる。本モデルのような複雑形状を有する実機解析においても、256 並列で 181 倍の台数効果 (100 ステップ: 228 秒) を達成しており、開発手法の有用性が確認できる。

6. まとめ

大規模マイクロマグネティクス計算の高速化を目的として、直方体要素用 FMM の並列化に関する検討を行った。均一な要素分割の周期性を活用し演算量を削減している直方体要素用 FMM の長所を保持したまま、適切に各プロセスに負荷を割り当てる簡便な負荷分散方法を提案した。開発手法の有効性を検証するために、単純形状の磁性体薄膜モデルおよび形状が複雑な SPT ヘッドモデルを対象とした大規模マイクロマグネティクス計算を実行した。その結果、直方体要素用 FMM において最も演算量が必要な M2L 変換にともなう通信を極力隠蔽するとともに、各プロセスが担当する要素数を均等化することで、磁性体薄膜モデルおよび SPT ヘッドモデルそれぞれにおいて 256 並列で 193 倍および 181 倍という優れた台数効果を達成し、形状の複雑さにかかわらず開発手法の有効性を明らかにした。

今後の課題として、さらにプロセス数を増やした場合における開発手法の台数効果の検証があげられる。また、FMM を導入した積分方程式法の並列化についても検討を行う予定である。

参考文献

- 1) Brown, Jr. W.F.: *Micromagnetics*, John Wiley & Sons, Inc., NY (1963).
- 2) Nakatani, Y., Uesaka, Y. and Hayashi, N.: Direct Solution of the Landau-Lifshitz-Gilbert Equation for Micromagnetics, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol.20, No.12, pp.2485-2507 (1989).
- 3) Muramatsu, K. and Madoka, N.: Micromagnetics Simulation for Large Size Magnetic Domain Structure of Ferromagnetic Material, *Proc. 16th Intl. Conf. on the Computation of Electromagnetic Fields*, pp.1025-1026 (2007).

- 4) 菅原 豊, 五十嵐一: マイクロマグネティクスによる一次元周期磁区の解析, 第 18 回「電磁力関連のダイナミクス」シンポジウム, pp.661-664 (2006).
- 5) 松尾哲司, 杉野弘宜, 島崎真昭: 磁区構造のモデル化に関するマイクロ磁気学を用いた基礎的検討, 電気学会マグネティクス研究会資料, MAG-05-108 (2005).
- 6) Popovic, N. and Praetorius, D.: Application of H-Matrix Technique in Micromagnetics, *Computing*, Vol.74, pp.177-204 (2005).
- 7) Seberino, C. and Bertram, H.N.: Concise, Efficient Three-Dimensional Fast Multipole Method for Micromagnetics, *IEEE Trans. Magn.*, Vol.37, No.3, pp.1078-1086 (2001).
- 8) Knittel, A., Franchin, M., Bordignon, G., Fischbacher, T., Bending, S. and Fangohr, H.: Compression of Boundary Element Matrix in Micromagnetic Simulations, *J. Appl. Phys.*, Vol.105, 07D542 (2008).
- 9) Hayashi, N., Saito, K. and Nakatani, Y.: Calculation of Demagnetizing Field Distribution Based on Fast Fourier Transform of Convolution, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol.35, No.12A, part 1, pp.6065-6073 (1996).
- 10) Takahashi, Y., Wakao, S., Iwashita, T. and Kanazawa, M.: Micromagnetic Simulation by Using Fast Multipole Method Specialized for Uniform Brick Elements, *J. Appl. Phys.*, Vol.105, 07D514 (2008).
- 11) Greengard, L. and Rokhlin, V.: A new version of the Fast Multipole Method for the Laplace equation in three dimensions, *Acta Numerica*, Vol.6, pp.229-269 (1997).
- 12) Cheng, H., Greengard, L. and Rokhlin, V.: A Fast Adaptive Multipole Algorithm in Three Dimensions, *J. Comput. Phys.*, Vol.155, pp.468-498 (1999).
- 13) 小林昭一 (編): 波動解析と境界要素法, 京都大学学術出版会 (2000).
- 14) Lu, E.J. and Okunbor, D.I.: A massively parallel fast multipole algorithm in three dimensions, *Proc. 5th IEEE Int. Symp. High Performance Distributed Computing*, pp.40-48 (1996).
- 15) Sevilgen, F., Aluru, S. and Futamura, N.: A provably optimal, distribution independent parallel fast multipole method, *Proc. Intl. Parallel and Distributed Processing Symp.*, pp.77-84 (2000).
- 16) Teng, S.H.: Provably good partitioning and load balancing algorithms for parallel adaptive N-body simulation, *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol.19, pp.635-656 (1998).
- 17) Hariharan, B., Aluru, S. and Shanker, B.: A scalable parallel fast multipole method for analysis of scattering from perfect electrically conducting surfaces, *Proc. 2002 ACM/IEEE conference on Supercomputing*, pp.1-17 (2002).
- 18) Velampambil, S. and Chew, W.C.: Analysis and Performance of a Distributed Memory Multilevel Fast Multipole Algorithm, *IEEE Trans. Antenna Propag.*, Vol.53, No.8, pp.2719-2727 (2005).
- 19) 濱田昌司, 山本 修, 小林哲生: 等価多重極モーメント法の拡張と低周波磁界誘導電界計算への応用, 電気学会論文誌, Vol.125-A, No.6, pp.533-543 (2005).
- 20) 濱田昌司, 小林哲生: ボクセルデータ用高速多重極表面電荷法による低周波磁界誘導電界計算, 電気学会論文誌, Vol.126-A, No.5, pp.355-362 (2006).
- 21) 高橋康人, 若尾真治: マイクロマグネティクスの反磁界計算における FMM および ACA の適用, 電気学会静止器・回転機合同研究会資料, SA-07-65/RM-07-81 (2007).
- 22) Nakashima, H.: T2K Open Supercomputer: Inter University and Inter-Disciplinary Collaboration on the New Generation Supercomputer, *Proc. Intl. Conf. Informatics Education and Research for Knowledge-Circulating Society*, pp.137-142 (2008).
- 23) Kanai, Y., Saiki, M., Hirasawa, K., Tsukamoto, T. and Yoshida, K.: Landau-Lifshitz-Gilbert Micromagnetic Analysis of Single-Pole-Type Write Head for Perpendicular Magnetic Recording Using Full-FFT Program on PC Cluster System, *IEEE Trans. Magn.*, Vol.44, No.6, pp.1602-1605 (2008).
- 24) Kanai, Y., Saiki, M. and Yoshida, K.: Micromagnetic Simulations of Perpendicular Single-Pole-Type Head for Various Pole Tip Structures, *IEEE Trans. Magn.*, Vol.43, No.4, pp.1665-1668 (2007).

(平成 21 年 7 月 24 日受付)

(平成 21 年 11 月 10 日採録)



高橋 康人

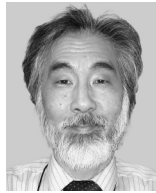
昭和 55 年生。平成 20 年 3 月早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程修了。平成 18 年 4 月早稲田大学理工学術院助手。平成 20 年 4 月より京都大学大学院情報学研究所特定助教。主に電磁現象を対象とした高速大規模数値解析技術に関する研究に従事。平成 17 年, 平成 20 年電気学会優秀論文発表賞受賞。博士(工学)。電気学会, IEEE 各会員。



岩下 武史(正会員)

昭和 46 年生。平成 10 年京都大学大学院工学研究科電気工学専攻博士課程修了。京都大学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), 同大学助手を経て, 平成 15 年より同大学学術情報メディアセンター助教, 平成 19 年職名変更により同准教授。高性能計算, 線形反復法, 電磁界解析に関する研究に従事。京都大学博士(工学)。

IEEE, SIAM, 日本 AEM 学会, 日本計算工学会各会員。



中島 浩 (正会員)

昭和 31 年生。昭和 56 年京都大学大学院工学研究科情報工学専攻修士課程修了。同年三菱電機(株)入社。推論マシンの研究開発に従事。平成 4 年より京都大学工学部助教授。平成 9 年より豊橋技術科学大学教授。平成 18 年より京都大学教授。並列計算機のアーキテクチャ、プログラミング言語の実装方式に関する研究に従事。工学博士。昭和 63 年元岡賞、平成 5 年坂井記念特別賞受賞。IEEE-CS, ACM, ALP, TUG 各会員。



若尾 真治

昭和 40 年生。平成 5 年 3 月早稲田大学大学院理工学研究科博士後期課程修了。平成 8 年 4 月早稲田大学理工学部専任講師。平成 18 年 4 月より同大学理工学術院教授。主として、電磁エネルギー機器を対象とする数値解析技術、太陽光発電システムの設計・運用最適化技術に関する研究に従事。博士(工学)。2008 年電気学会学術振興賞・論文賞受賞。日本太陽エネルギー学会理事、IEEE 等の会員。