

ADVENTURE_Magnetic による

1,000 億自由度数値人体モデルの高周波電磁界解析

杉本 振一郎

八戸工業大学 工学部

武居 周

宮崎大学 工学教育研究部

荻野 正雄

大同大学 情報学部

1. はじめに

ADVENTURE プロジェクト^[1]では、数万ノード規模の超並列計算機環境において効率的に大規模電磁界解析を行うことを目的に、並列電磁界解析ソルバ ADVENTURE_Magnetic (AdvMag) の研究開発を行っている。AdvMag のアプリケーションの一つとして、高周波誘電加温による癌の温熱療法の効果を定量的に評価するために情報通信研究機構が公開している数値人体モデル^[2]の高周波電磁界解析に取り組んでいる。

この数値人体モデルは 1 辺 2 mm のボクセルから成るため、有限要素法ではボクセル由来の階段形状が電界の反射や回折を起こして精度が低下してしまう。また温熱療法の対象となる癌の直径は数 mm 程度であるため、2 mm 幅のボクセルでは解像度が十分ではない。これらの問題の解決にはボクセルを分割した四面体をベースにスムージングする技術^[3]の導入や要素の細分割^[4]が有効であるが、これらは解析対象の自由度を飛躍的に増やしてしまう。例えば 1 辺 0.25 mm のボクセルで人体を分割し、さらにボクセルを四面体に分割した高周波電磁界解析モデルの自由度は約 1,300 億になり、電界の反射や回折を低減させるためのスムージングを施すと自由度はさらに何割か増えてしまう。

FDTD 法により 0.5 mm 幅のボクセルを用いた数値人体モデルの電磁線量測定問題の解析がすでに行われている^[5]。しかし、FDTD 法は陽解法に基づく時間発展問題であるため膨大な時間ステップが必要となり、計算時間が非常に長くなってしまふ。そこで我々は階層型領域分割法 (Hierarchical Domain Decomposition Method: HDDM) を用い、時間微分項 $\partial/\partial t$ を $-i\omega$ (i : 虚数単位, ω : 角周波数) で置き換えた時間調和問題の解析に取り組んでいる。時間調和問題では複素数の行列を一度解くだけですむため、必要なメモリは倍になるが、計算時間は大幅に短縮できる。

HDDM は領域分割法^{[6]-[8]}を並列計算機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^[9]。HDDM は大規模な構造解析^[10]や熱伝導解析^[11]、電磁界解析^{[12][13]}に適用され、構造解析では 1,000 億自由度の解析^[14]に成功している。一方、電磁

界解析では、有限要素方程式が複素数になる、行列が不定性を持つか悪条件である、などの理由からこれまでに解析された最大の自由度は 300 億^[15]であった。この解析は 2016 年度の東京大学情報基盤センターの FX10 スーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」にて、当時稼働していた FX10 の全ノードでほぼすべてのメモリを使用して、著者らが実施したものである。また HDDM 以外では自由空間での 8 億自由度の単純な線電流モデルの解析例^[16]が最大の規模であった。

近年、電磁界解析で複素対称行列の求解に広く用いられてきた共役直交共役勾配(Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient: COCG)法^[17]よりも共役直交共役残差(Conjugate Orthogonal Conjugate Residual: COCR)法^[18]が大規模な解析で反復回数および計算時間の面で有利なことがわかってきた^[19]。また、最小残差(MINRES)法を複素対称行列向けに拡張した MINRES-like_CS 法、準最小残差(QMR)法を用いた場合も、COCG 法に比べて計算時間を削減できることがわかってきた^[20]。これらを AdvMag に実装し、大規模解析に取り組んでいる。

本稿では、東京大学情報基盤センターの Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」に採択され、電磁界問題において数千億自由度の複素対称行列の解析が可能であることを示すために Oakforest-PACS^[21]の 8,192 ノードを用いて 1,300 億自由度の解析を実施した結果について報告する。

2. 有限要素方程式^[13]

領域 Ω を考え、その境界を $\partial\Omega$ 、境界上の単位法線ベクトルを n とする。Maxwell 方程式より導かれる電界 E [V/m]を未知関数とするベクトル波動方程式を考える。

$$\text{rot} \left(\frac{1}{\mu} \text{rot} E \right) - (\omega^2 \epsilon - i\omega\sigma)E = i\omega J \quad \text{in } \Omega, \quad (1)$$

$$E \times n = 0 \quad \text{on } \partial\Omega, \quad (2)$$

$$J = \sigma \hat{E}. \quad (3)$$

ここで、 μ は透磁率[H/m]、 ϵ は誘電率[F/m]、 σ は導電率[S/m]、 J は放射源の電流密度[A/m²]である。 \hat{E} は既知の電界であり、式(3)は式(1)へ代入される。境界条件の式(2)を満たすよう式(1)を解くことによって、 E が得られる。

次に式(1)の弱形式を導き、領域 Ω の有限要素分割を考える。 E を Nedelec の四面体一次要素(辺要素)で近似し、 J を通常の四面体一次要素で近似する。 E_h 、 J_h をそれぞれ E 、 J の有限要素近似とすると次のような有限要素方程式が導かれる。

$$\iiint_{\Omega} \text{rot} E_h \cdot \frac{1}{\mu} \text{rot} E_h^* dv - \iiint_{\Omega} (\omega^2 \epsilon - i\omega\sigma) E_h \cdot E_h^* dv = \iiint_{\Omega} i\omega J_h \cdot E_h^* dv. \quad (4)$$

ここで、 E_h^* は任意の試験関数である。

$$K_{IB} = \begin{bmatrix} K_{IB}^{(0,0)} R_B^{(0,0)} \\ \vdots \\ K_{IB}^{(0,N_s-1)} R_B^{(0,N_s-1)} \\ K_{IB}^{(1,0)} R_B^{(1,0)} \\ \vdots \\ K_{IB}^{(N_p-1,N_s-1)} R_B^{(N_p-1,N_s-1)} \end{bmatrix},$$

$$K_{BB} = \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} K_{BB}^{(i,j)} R_B^{(i,j)},$$

$$f_i = \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_I^{(i,j)T} f_I^{(i,j)},$$

$$f_B = \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} f_B^{(i,j)},$$

である。下付添え字 I, B はそれぞれ subdomain 内部の自由度、インターフェース自由度に関する項であり、 $R_I^{(i,j)}$, $R_B^{(i,j)}$ は自由度をそれぞれ subdomain 内部の自由度、またはインターフェース自由度へと制限する 0-1 行列である。式(7)より自由度をインターフェース自由度に静的縮約したインターフェース問題が以下のように得られる。

$$S u_B = g. \quad (8)$$

ただし、

$$S = \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} S^{(i,j)} R_B^{(i,j)},$$

$$S^{(i,j)} = K_{BB}^{(i,j)} - K_{IB}^{(i,j)T} \left(K_{II}^{(i,j)} \right)^{-1} K_{IB}^{(i,j)},$$

$$g = \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} \left(f_B^{(i,j)} - K_{IB}^{(i,j)T} \left(K_{II}^{(i,j)} \right)^{-1} f_I^{(i,j)} \right),$$

であり、 S はシュア補元行列、 $S^{(i,j)}$ は領域 $\Omega^{(i,j)}$ におけるローカルシュア補元行列である。HDDM では並列環境下で式(8)を共役直交共役勾配(Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient: COCG)法などで解き、得られた u_B を Dirichlet 条件として式(9)を解くことで、全体の解を得る。

$$K_{II}^{(i,j)} u_I^{(i,j)} = f_I^{(i,j)} - K_{IB}^{(i,j)T} R_B^{(i,j)} u_B, \quad i = 0, \dots, N_p - 1, j = 0, \dots, N_s - 1. \quad (9)$$

4. 1,300億自由度数値人体モデルの解析

NICT が公開している成人男性の数値人体モデル(図 2)は周辺の空気領域も含めて $320 \times 160 \times 866$ 個の 2 mm 幅のボクセルから成る。モデルのサイズは $x = 0.64 \text{ m}$, $y = 0.32 \text{ m}$, $z = 1.732 \text{ m}$ である。身体組織の誘電率や導電率などの物性値は、理化学研究所が公開している身体組織物性値データベース^[22]のデータを用いた。放射源としてダイポールアンテナ($L = 0.5 \text{ m}$)が胸の上($H = 0.06 \text{ m}$)に設置されており、印加する電流を 0.8 A とし、電流の周波数を 300 MHz とした。このモデルのボクセルを四面体に分割し、3 回細分割することで解像度 0.25 mm 相当の要素数 $113,508,352,000$ 、自由度 $132,575,181,328$ のメッシュを生成した。この解析では、スムージングは用いていない。メッシュを $32,768$ の part に分割し、各 part をさらに $34,000$ の subdomain に分割した。

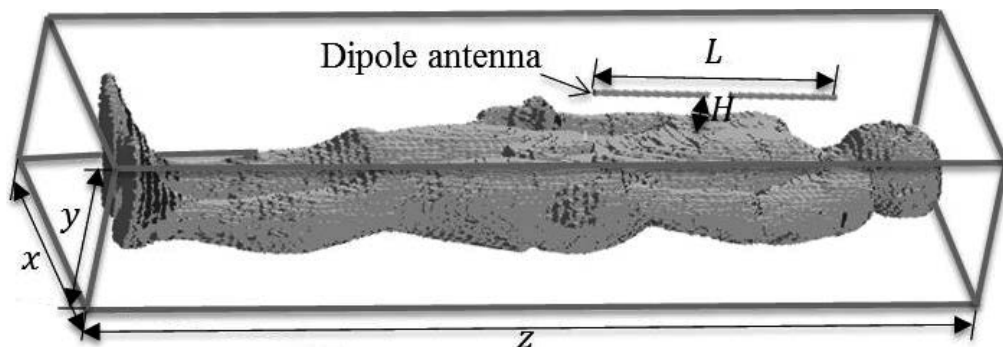


図 2. 数値人体モデル。

簡易対角スケールリングを前処理とする COCG 法, COCR 法, MINRES-like_CS 法, QMR 法をインターフェース問題の求解に用い、収束判定値を 10^{-7} とした。subdomain の解法には LDL^T 分解による直接法を用いた。Oakforest-PACS の $8,192$ ノードを用い、ノードあたり 4 つの MPI プロセス, MPI プロセスあたり 68 スレッドとした。

図 3 に収束履歴, 表 1 に反復回数, 計算時間, 全体のメモリ使用量, および part ごとの平均メモリ使用量を示す。ノードあたり 4 つの MPI プロセスが割り当てられ、それぞれの MPI プロセスが 1 つの part を担当するため、ノードあたりの平均メモリ使用量は part あたりの平均メモリ使用量の 4 倍になる。COCG 法は $5,000$ 反復までに収束せず、発散に進む傾向が見られた。一方、他の反復法はスムーズに収束した。最も高速であった COCR 法は 327 反復, 932 秒で収束した。

part 単位で入力ファイル, 出力ファイルがあるため、入力ファイル数, 出力ファイル数はそれぞれ $32,768$ であり、容量の合計は入力ファイルが約 13.2 TB , 出力ファイルが約 16.4 TB であった。2016 年に Oakleaf-FX で実施した大規模 HPC チャレンジは今回のチャレンジの 8 分の 1 の規模であったが、ファイル出力時にディスクシステムが不安定になってファイル書き込みに非常に長い時間がかかったり、ノードダウンが起こったりした。しかし、今回のチャレンジではファイル出力時に特にトラブルは起こらず、スムーズに進んだ。

また、領域分割について課題がいくつか見つかった。一つは分割に非常に長い時間がかかることである。ADVENTURE システムでは ParMETIS ライブラリを用いて part 分割し、さらにそれ

それぞれのMPIプロセスが part 内の細分割と METIS ライブラリを用いた subdomain 分割を行う。解析にかかる時間が COCR 法で約 15 分であるのに対して、領域分割には約 3 時間半かかり、解析本体よりも前処理にあたる領域分割に時間がかかっている。また、part 数、subdomain 数が 4 万を超えると、ParMETIS ライブラリ、METIS ライブラリが処理を終えられなくなり、最終的にノードダウンが起こった。今後、さらに規模を大きくするには、領域分割に関する対処が必要になると考えられる。

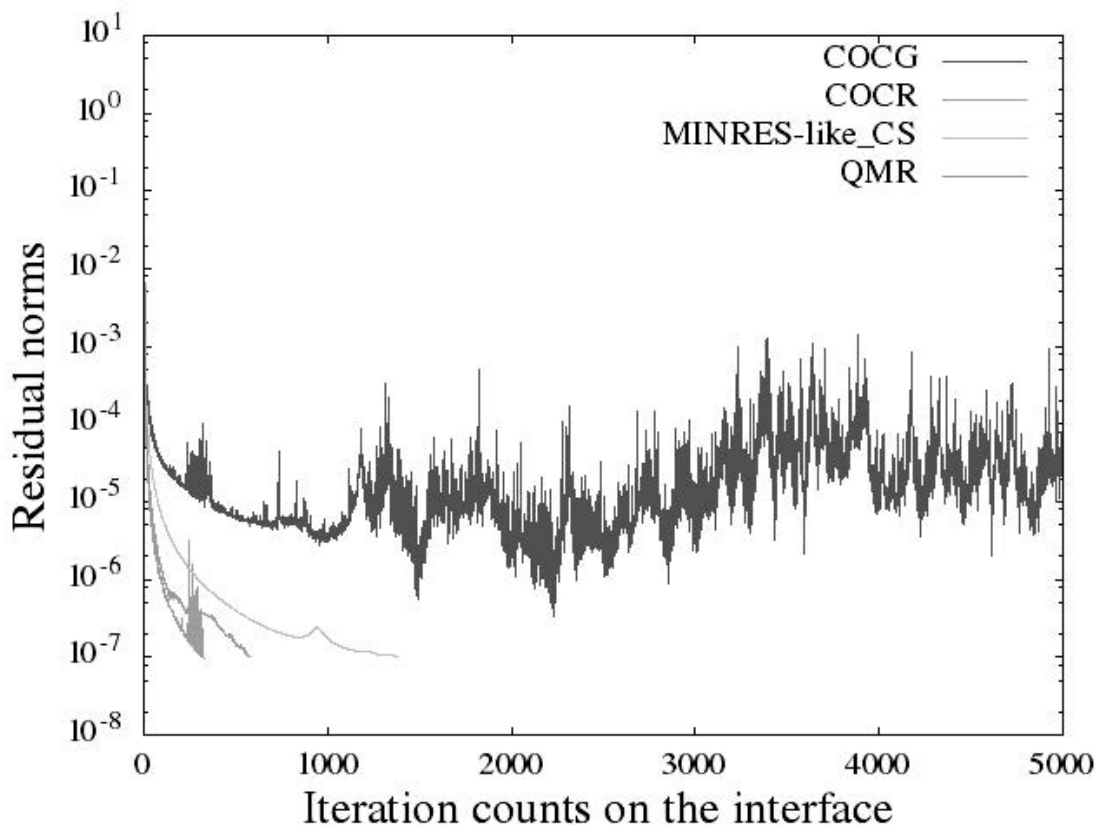


図 3. 収束履歴。

表 1. 計算結果。

HDDM Solver	Iterations	Time [s]	Mem. [TB]	Mem./part [GB]
COCG	(over 5,000)	-	508	15.9
COCR	327	932	510	15.9
MINRES-like_CS	1,380	3,739	511	16.0
QMR	572	1,620	512	16.0

5. おわりに

1,300 億自由度数値人体モデルの高周波電磁界解析に成功した。COCG 法では 5,000 反復までに収束解を得られなかったが、COCR 法, MINRES-like_CS 法, QMR 法では収束解を得ることができた。最も高速であった COCR 法は 327 反復, 932 秒で収束した。

今後は, 多倍長精度の導入による COCG 法の収束性改善, 得られた約 30 TB の入出ファイルを用いた可視化, スムージングによる精度向上, さらに細分割を行った 1 兆自由度規模の解析などに取り組んでいく。

謝 辞

本研究で用いた計算機リソースは東京大学情報基盤センターの Oakforest-PACS スーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」より提供された。

本研究の一部は JSPS 科研費 17H02829, 17H03256, および青森県工業技術教育振興会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] ADVENTURE プロジェクト HP: <http://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/jp/>
- [2] 情報通信研究機構 電磁環境研究室 HP: <http://emc.nict.go.jp/index.html>
- [3] A. Takei, K. Murotani, S. Sugimoto, M. Ogino and H. Kawai: “High-Accuracy Electromagnetic Field Simulation using Numerical Human Body Models”, IEEE Transaction on Magnetics, Vol.52, Issue 3, 7402704, 4p (2016).
- [4] K. Murotani, S. Sugimoto, H. Kawai and S. Yoshimura: “Hierarchical Domain Decomposition with Parallel Mesh Refinement for Billions-of-DOF Scale Finite Element Analyses”, International Journal of Computational Methods, Vol.11, Issue 4, p.1350061-1 - 1350061-30 (2014).
- [5] J. Chakarothai, K. Wake and S. Watanabe: “Scalable GPU-parallelized FDTD method for analysis of large-scale electromagnetic dosimetry problems”, ACES Journal, Vol.31, No.6, pp.661-668 (2016).
- [6] 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).
- [7] A. Quarteroni and A. Valli: “Domain Decomposition Methods for Partial Differential Equations”, Clarendon Press, Oxford (1999).
- [8] A. Toselli and O. Widlund: “Domain Decomposition Methods: Algorithms and Theory (Springer Series in Computational Mechanics)”, Springer (2004).
- [9] 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).
- [10] 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).
- [11] 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).
- [12] H. Kanayama and S. Sugimoto: “Effectiveness of A^{-1} method in a parallel computing with an iterative domain decomposition method”, IEEE Transactions on Magnetics, Vol.42, Issue 4, pp.539-542 (2006).
- [13] A. Takei, S. Yoshimura and H. Kanayama: “Large-scale parallel finite element analyses of high frequency electromagnetic field in commuter trains”, Computer Modeling in Engineering & Sciences, Vol.31, No.1, pp.13-24 (2008).
- [14] M. Ogino and R. Shioya: “Scalable non-overlapping domain decomposition method for finite element simulations with 100 billion degrees of freedom model”, Proceedings of the 1st International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental problems, pp.96-99 (2014).
- [15] 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, Vo.3 (2017).
- [16] T. Iwashita, Y. Hirotsu, T. Mifune, T. Murayama and H. Ohtani: “Large-scale time-harmonic electromagnetic field analysis using a multigrid solver on a distributed memory parallel computer”, Parallel Computing, Vol.38, No.9, pp.485-500 (2012).
- [17] H.A. Vorst and J.B.M. Melissen: “A Petrov-Galerkin type method for solving $Ax=b$ and where A is symmetric complex”, IEEE Transaction on Magnetics, Vol.26, No.2, pp.706-708 (1990).
- [18] T. Sogabe and S.L. Zhang: “A COCR method for solving complex symmetric linear systems”, Journal of Computational and Applied Mechematics, Vol.199, No.2, pp.297-303 (2007).
- [19] M. Ogino, A. Takei, H. Notsu, S. Sugimoto and S. Yoshimura: “Finite element analysis of high frequency electromagnetic fields using a domain decomposition method based on the COCR method”, Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vol.61, pp.173-181 (2013).
- [20] M. Ogino, A. Takei, S. Sugimoto and S. Yoshimura: “A numerical study of iterative substructuring method for finite element analysis of high frequency electromagnetic fields”, Computational & Mathematics with Applications, Vol.72, Issue 8, pp.2020-2027 (2016).
- [21] 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:
<http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/>
- [22] 理化学研究所生物情報基盤構築チーム HP: <http://cfd-duo.riken.go.jp/cbms-mp/j/>