

# 1,000億自由度規模の電磁界解析を可能とするための、 階層分割型数値計算フレームワーク ADVENTURE\_Magnetic の 高並列化・高速化研究

杉本振一郎

八戸工業大学 工学部 機械工学科

## 1. 数値人体モデルの大規模電磁界解析への取り組み

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[1]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程度であり、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[2]の導入や要素の細分割[3]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0.5 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160億になり、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[4]。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う。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,  $\omega$ : 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。

HDDMは領域分割法[5]-[7]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[8]。HDDMは大規模な構造解析[9]や熱伝導解析[10]、電磁界解析[11]-[12]に適用され、構造解析では1,000億自由度の解析[13]に成功している。また時間調和問題は電磁波や交流電流など正弦波状に変化する現象に適用することのできる手法であり、本来は多くの時間ステップで実数の行列を解かなければならない非定常問題を複素数の行列を一度だけ解く準定常問題に変換することで計算時間を大きく削減できる。これまでにHDDMと時間調和問題を渦電流問題に適用し、35億自由度の解析[14]に成功している。また高周波電磁界問題では1辺2 mmのボクセルを2回細分割した0.5 mmボクセルを四面体に分割した160億自由度数値人体モデル、および300億自由度簡易温熱治療器モデルの解析[15]にも成功している。

本研究では数値人体モデルにおいて直径1 mmの癌も解析対象とするため、解像度0.1 mmのメッシュを用いた解析を最終的な目標としている。しかしこのような要素サイズのメッシュは1兆自由度規模となり、非構造格子を用いた解析でこのような規模を扱うには現在はソフトウェア、ハードウェアの両面から困難である。そこで0.5 mmのボクセルをさらに細分割した解像度0.25 mm、1,280億自由度の解析を次の目標として設定し、研究を進めている。ADVENTUREプロジェクト[16]では数万～数十万ノード規模の超並列計算機環境において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)の開発を進めている。その一環として、2016年度のFX10スーパーコンピュータシステム「大規模HPCチャレンジ」にて研究

課題「ADVENTURE\_Magneticによる100億自由度数値人体モデルの高周波電磁界解析」を実施し、前述のとおり160億自由度の数値人体モデル(解像度0.5 mm)を10分、300億自由度の簡易温熱治療器モデルを19分で解析することに成功している。しかしFX10では全ノードを用いても300億自由度の解析がメモリ搭載量の観点から限界であることがわかっている。一方Oakforest-PACS (OFP)では全ノードを用いれば1,800億自由度程度まで扱うことができると予想される。そこでOFP上で最大2,048ノードを用いてAdvMagの並列性能を評価し、1,000億自由度規模の電磁界解析を行うための初期検討を行った。

本稿では、FX10での100億自由度規模の解析とその可視化、1,000億自由度規模の電磁界解析を行うための初期検討について報告する。

## 2. 100億自由度規模の電磁界解析

### 2.1. 有限要素方程式

領域 $\Omega$ 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、 $i$ は虚数単位、 $\mu$ は透磁率[H/m]、 $\omega$ は角周波数[rad/s]、 $\epsilon$ は誘電率[F/m]、 $\sigma$ は導電率[S/m]、 $J$ は放射源の電流密度[A/m<sup>2</sup>]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 $\Omega$ 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。

### 2.2. 階層型領域分割法(Hierarchical Domain Decomposition Method: HDDM)

HDDMでは要素の重なりがないように解析領域を分割するが、このときpartとsubdomainからなる階層構造が作られる(図1)。

$$\Omega = \bigcup_{i=0}^{N_p-1} \bigcup_{j=0}^{N_s-1} \Omega^{(i,j)}. \quad (5)$$

ここで、 $\Omega^{(i,j)}$ はpart  $i$ の中のsubdomain  $j$ を表す。上付き添え字 $(i,j)$ は領域 $\Omega^{(i,j)}$ に関連する項目であることを表す。 $N_p$ 、 $N_s$ はそれぞれpart数、subdomain数を表す。ここで、 $N_s$ はすべてのpartで等しい。図1の例ではまず2つのpartに分割し、それぞれのpartは2つのsubdomainに分割されている( $N_p = N_s = 2$ )。図中の赤丸はpart、subdomain間で共有される自由度であり、インターフェース自由度と呼ばれる。

領域 $\Omega$ で考える有限要素方程式(4)を以下のように行列形式で表す。

$$Ku = f. \quad (6)$$

ここで、 $K$ は係数行列、 $u$ は未知自由度、 $f$ は右辺ベクトルを表す。式(6)にHDDMを適用すると、次のように書ける。



は $S$ の行列ベクトル積演算が必要であるが、これをsubdomainでの演算をもってあてる。 $S$ とベクトル $x$ の積 $y$ は以下のように考えられる。

$$\begin{aligned}
 y &= Sx \\
 &= \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} S^{(i,j)} R_B^{(i,j)} \cdot x \\
 &= \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} S^{(i,j)} x^{(i,j)} \\
 &= \sum_{i=0}^{N_p-1} \sum_{j=0}^{N_s-1} R_B^{(i,j)T} y^{(i,j)}.
 \end{aligned} \tag{10}$$

ただし、

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

であり、各subdomainで求められた $y^{(i,j)}$ の重ね合わせにより $y$ が求められることがわかる。ここで、 $z^{(i,j)} = \left( K_{II}^{(i,j)} \right)^{-1} K_{IB}^{(i,j)} x^{(i,j)}$ とすると、 $z^{(i,j)}$ は以下のようにsubdomainでの有限要素計算により求めることができる。

$$K_{II}^{(i,j)} z^{(i,j)} = K_{IB}^{(i,j)} x^{(i,j)}. \tag{11}$$

### 2.3. 数値人体モデルの解析

本節では 160 億自由度の数値人体モデルを COCG 法または COCR 法を用いて解析する。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  $x=0.64$  m,  $y=0.32$  m,  $z=1.732$  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[17]のデータを用いる。放射源としてダイポールアンテナ( $L=0.5$  m)が胸の上( $H=0.06$  m)に設置されており、印加する電流を 0.8 A とする。電流の周波数は 300 MHz とする。このモデルのボクセルを四面体に分割し、2 回細分割することで解像度 0.5 mm 相当の要素数 14,188,544,000, 自由度 16,605,276,424 のメッシュを生成する。COCG 法, COCR 法とも、簡易対角スケーリングを前処理としてインターフェース問題の求解に用い、収束判定値を  $10^{-7}$  とする。部分領域問題の求解には不完全 Cholesky 分解による直接法を用いる。計算には Oakleaf-FX の全ノードを用いる。9,600 の MPI プロセスを起動し、それぞれのプロセスは 8 つのスレッドを起動することとする。

表 1 に計算結果、図 3 に収束履歴を示す。300 MHz での COCR 法の計算時間は約 10 分であり、このモデルを効率よく解析できた。

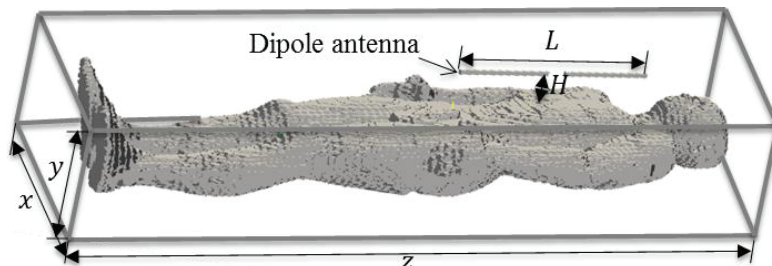


図 2. 数値人体モデル.

表 1. 計算結果.

Iterative method of interface	Iterations	Elapsed time [s]
COCG	1,021	1,480
COCR	206	601

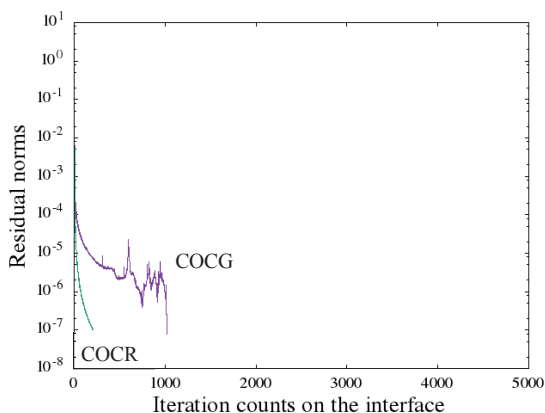


図 3. 収束履歴.

## 2.4. 大規模可視化[19]

解析で得られたデータは領域分割されたメッシュなどの入力データ(9,600個, 約1.7 TB)と, 有限要素方程式から得られる解と磁場, 電場, 渦電流密度の実部と虚部を含む解析結果(9,600個, 約2.0 TB)である. 解析結果は倍精度で, ADVENTUREプロジェクト独自のバイナリ形式(AdvIO)で記録されている. 階層型の領域分割(partとsubdomain)に基づき解析結果も分割されている. それぞれの物理量でsubdomainごとにデータが分割され, 一つのファイルに一つのpartのデータがまとめて記録されている. これらのファイルを可視化に用いる. なおOakleaf-FXでは9,600ものプロセスが同時に書き込むと20分程度で終わるはずの結果出力が2時間経っても終わらないなどの問題が発生し, 解析結果を十分に残せなかった. そこで後述するように同時書き込みの制限とファイルの圧縮機能を導入することで, OFP上で新たに得られた解析結果も可視化に用いた.

可視化は名古屋大学情報基盤センターの大規模可視化システムUV2000 [20]上でAVS/Express Developer Edition 8.4.1 fcs linux\_64\_el6 (AVS)を用いて行った. メッシュと解析結果を記録しているAdvIOはAVSで読み込むことができないため, まずこれらをAVSが読み込むことのできるUCDファイル[21]に変換した. この過程でsubdomainデータのマージ, 倍精度データの単精度への変換を行いUCDファイルは9,600個, 537 GBとなった. 続いて臓器ごとに特定の物理量を取り出してUCDファイルよりも高速に読み込むことのできるHDF5ファイル[22]に変換し, 心臓の磁場の実部を記録したHDF5ファイルは約757 MBとなった. さらに癌の治療効果を検討する際には特定の断面の情報があればよく, また物理量ごとに検討したい値の範囲が限定できるので, 可視化に必要なデータは断面を含めた臓器の形状情報, 臓器表面や断面での色情報となり, データ量を大きく減らすことができる. このようなデータをAVSで作成し, 3D AVS Player (Player)で読み込むことのできる4Dアニメーション(動画を再生しながら視点変更が可能)ファイルであるGFAファイルに変換し, Playerで最終的な可視化結果を得た. 心臓のGFAファイルは約50 MBとなった.

図 4に心臓のメッシュ, 図 5に心臓表面の磁場, 図 6に右上半身の磁場の等値面の可視化結果を示す. 可視化に必要な情報とファイル形式の選別を適切に行うことで100億自由度を超える規



模の可視化が可能であることを示し、高周波誘電加温による癌の温熱療法において大規模解析の結果を使った治療効果の検討の可能性を示した。

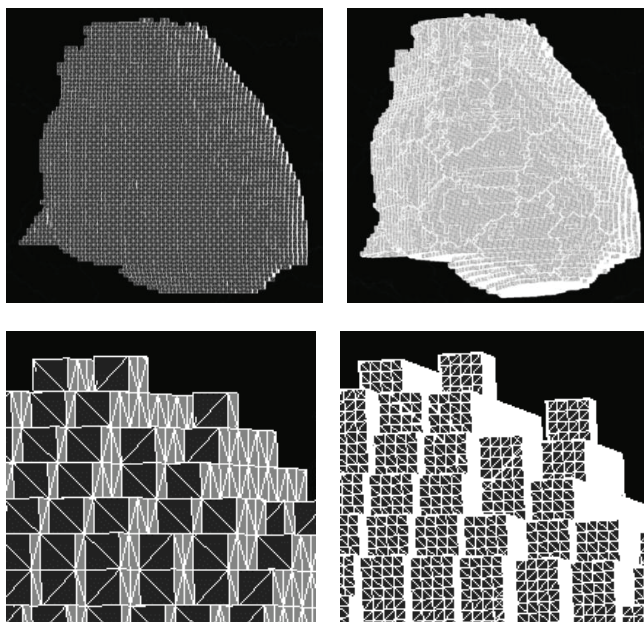


図 4. 心臓のメッシュ.

(左上：解像度 2 mm 全景，右上：解像度 0.5 mm 全景，  
左下：解像度 2 mm 左心房周辺，右下：解像度 0.5 mm 左心房周辺)

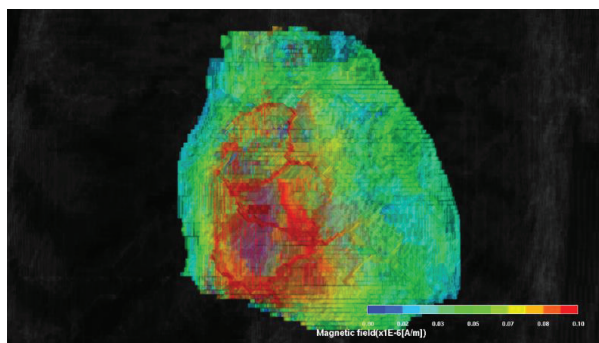


図 5. 心臓表面の磁場.

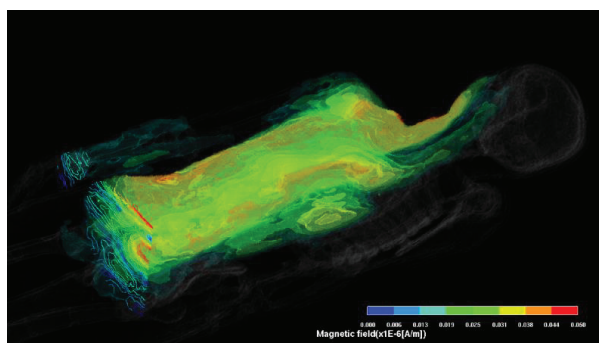


図 6. 右上半身の磁場の等値面.

### 3. 1,000 億自由度規模の電磁界解析のための初期検討

平成 29 年度 東京大学情報基盤センター「若手・女性利用」後期において「1,000 億自由度規模の電磁界解析を可能とするための、階層分割型数値計算フレームワーク ADVENTURE\_Magnetic の高並列化・高速化研究」を実施した。この中で 1,000 億自由度規模の電磁界解析を行う上での課題を洗い出すため、OFP においてウィークスケールリングおよびストロングスケールリングをノード内、および複数のノードにて行い AdvMag の性能を評価した。その結果を受けて各種パラメータの調整と、MPI プロセス数とスレッド数のバランスを検討した。その結果、現状では全 8,208 ノードを用いる際には 1 ノードあたり 16 の MPI プロセス、MPI プロセスあたり 17 スレッドとし、領域分割は MPI プロセスあたり 8,840 領域が良いのではないかとあたりをつけてその後のテストを行った。テストでは辺要素を用いるために必要な処理の部分で並列数の増大にあわせて処理時間が大幅に増える現象が確認され、今後の課題となった。また 2016 年度の FX10 スーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」を実施した際、9,600 のプロセスが一斉に結果の書き込みを行うと著しく書き込みに時間がかかるようになったり、書き込みに失敗したりしてしまいほんの一部の解析結果しか残せなかった。さらに自由度が増えると必要なディスク容量も大きくなる。OFP 上で行った 160 億自由度の解析では障害は発生しなかったが、本課題で対象にするのは 1,000 億自由度規模であり、プロセス数も 13 万を超え、再び障害が発生する可能性がある。そこで同時に書き込みを行うプロセス数を制限する機能、および出力後にファイルをシステムコールによって GNU zip 形式で圧縮する機能を開発した。この機能を使用することにより入出力にかかる時間は増えてしまうが、確実に解析結果を残すことを優先できる。

今後は OFP の大規模 HPC チャレンジでの 1,280 億自由度数値人体モデルの電磁界解析を目指し、さらなる検討を行っていく。

### 謝 辞

本研究で用いた計算機リソースの一部は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」および東京大学情報基盤センター「若手・女性利用」により提供された。

本研究の一部は JSPS 科研費 15K17499, 17H02829, 17H03256, および独立行政法人 科学技術振興機構の戦略的研究推進事業 CREST の助成を受けて実施された。

数値人体モデルの解析および電磁界解析ソルバの高速化において宮崎大学工学部 武居周准教授および名古屋大学情報基盤センター 荻野正雄准教授の支援を受けた。

AVS を使用するにあたって名古屋大学情報連携統括本部 高橋一郎特任主席技師およびサイバネットシステム株式会社 汎用可視化技術グループの皆様の支援を受けた。

ここに記し、感謝の意を示す。

### 参 考 文 献

- [1] 情報通信研究機構 電磁環境研究室 HP: <http://emc.nict.go.jp/index.html>
- [2] A. Takei, K. Murotani, S. Sugimoto, M. Ogino and H. Kawai, High-accuracy electromagnetic field simulation using numerical human body models, IEEE Transactions on Magnetics, Vol.52, Issue 3, 7402704, 4p, 2016.
- [3] 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, pp.1350061-1 - 1350061-30, 2014.
- [4] J. Chakarothai, K. Wake and S. Watanabe, Scalable GPU-parallelized FDTD method for analysis of large-scale electromagnetic dosimetry problems, Applied Computational Electromagnetics Society Journal, Vol.31, No.6, pp.661-668, 2016.
- [5] R. Glowinski, Q.V. Dinh, 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, 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, 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, Issue 2, pp.533-540, 2006.
- [11] 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, Issue 4, pp.539-542, 2006.
- [12] 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.
- [13] M. Ogino and R. Shioya, Scalable non-overlapping domain decomposition method for finite element simulations with 100 billion degrees of freedom model, Proceedings of 1st International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems, pp.96-99, 2014.
- [14] 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.
- [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, Vol.3, 10p, 2017.
- [16] ADVENTURE プロジェクト HP: <http://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/jp/>
- [17] 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/>



- [18] Y. Kanai, Description of TEAM Workshop Problem 29: Whole body cavity resonator, Technical Report of TEAM Workshop in Tucson, 1998.
- [19] 杉本振一郎, 高橋一郎, 荻野正雄, 武居周, 160 億自由度数値人体モデルの高周波電磁界問題の大規模可視化, 第 23 回計算工学講演会論文集, 6p, 2018.
- [20] 名古屋大学情報基盤センタースーパーコンピュータシステム HP:  
<http://www.icts.nagoya-u.ac.jp/ja/sc/>
- [21] AVS/Express ユーザーズ・ガイド, サイバネットシステム株式会社, 2017.
- [22] The HDF Group HP: <https://www.hdfgroup.org/>