

電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave の高速化技術

小田 嘉則* 小瀬村 大亮* 原田 昌紀*

Acceleration technology for Advance/ParallelWave electromagnetic wave analysis software

Yoshinori Oda*, Daisuke Kosemura* and Masanori Harada*

アドバンスソフトでは、FDTD 法に基づく電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave を開発している。今回、本ソフトウェアの基礎方程式、および高速化技術の一つであるベクトル化について紹介する。ベクトル化については、ベクトルマシン(NEC 社製：SX-Aurora TSUBASA)においてベクトルチューニングを行い、高速化を行ったので、そのチューニング手法と結果について紹介する。

Keywords: 電磁波解析、高速化、ベクトル計算、並列計算、大規模計算

1. はじめに

電磁波は大別して電波領域と光波領域に分かれその中でもさらに細分化されて、アンテナ設計やその配置、生物医学や SAR、EMI/EMC、マイクロ波/ミリ波デバイス、レーダーや散乱、雷サージなど電磁波解析の適用対象は極めて広範囲である。アドバンスソフトではこのニーズに応えるために電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave を開発してきた [1]。

また、Advance/ParallelWave ではマクスウェル方程式を有限差分時間領域法（FDTD 法: Finite Difference Time Domain method）で 3 次元的に解いて電磁波の挙動を解析している [2]。

電磁波解析では、しばしばその計算対象のサイズや、求める精度により解析規模が大きくなることがあり、その際に高速化が重要なポイントとなる。高速化には大きく分けて、並列化とベクトル化という 2 つの手法がある。

Advance/ParallelWave では MPI を用いた領域分割法による並列化の機能は実装済である [3]。

本稿では、最初に FDTD 法の説明を簡単に行い、高速化手法としてベクトル化を用いた場合を検

討する。今回、Advance/ParallelWave に対して NEC 製の次世代イノベーションプラットフォーム NEC SX-Aurora TUSBASA を用いたベクトル化チューニングの手法と処理性能測定を実施し、その効果を評価したので紹介する。

2. 基礎方程式

前述のように、Advance/ParallelWave ではマクスウェル方程式を FDTD 法によって 3 次元的に解き電磁波の挙動を解析している。FDTD 法では、マクスウェル方程式

$$\varepsilon \frac{\partial \vec{E}(\vec{r}, t)}{\partial t} + \sigma \vec{E}(\vec{r}, t) = \text{rot } \vec{H}(\vec{r}, t) \quad (1)$$

$$\mu \frac{\partial \vec{H}(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\text{rot } \vec{E}(\vec{r}, t) \quad (2)$$

と呼ばれる連立した偏微分方程式を、時間と空間について差分法を用いて解いている [4]。

ここで、諸量の定義は次の通りである。

*アドバンスソフト株式会社 第 1 事業部

1st Computational Science and Engineering Group,
AdvanceSoft Corporation

$\vec{E}$	電界ベクトル
$\vec{H}$	磁界ベクトル
$\vec{r}$	空間座標
t	時刻
ε	誘電率
σ	導電率
μ	透磁率

差分法で解くために、3次元空間を図1左のような直交差分格子で分割するが、格子間隔は不均一でも構わない。

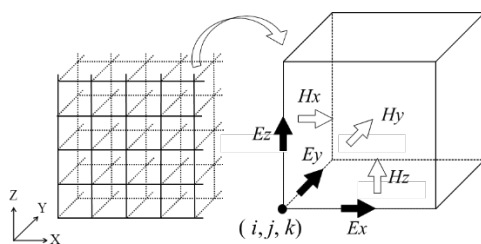


図1 FDTD法における差分格子と電磁界配置。

式(1)において、電界の x 成分について記述すると式(3)のようになる。

$$\varepsilon \frac{\partial E_x}{\partial t} + \sigma E_x = \frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \quad (3)$$

これを差分表記し整理すると次式のようになる。

$$E_{x(i+1/2, j, k)}^{n+1} = \frac{2\varepsilon_{(i, j, k)} - \sigma_{(i, j, k)}\Delta t}{2\varepsilon_{(i, j, k)} + \sigma_{(i, j, k)}\Delta t} E_{x(i+1/2, j, k)}^n + \frac{2\Delta t}{2\varepsilon_{(i, j, k)} + \sigma_{(i, j, k)}\Delta t} \cdot \left(\frac{H_{z(i+1/2, j+1/2, k)}^{n+1/2} - H_{z(i+1/2, j-1/2, k)}^{n+1/2}}{\Delta y(j)} - \frac{H_{y(i+1/2, j, k+1/2)}^{n+1/2} - H_{y(i+1/2, j, k-1/2)}^{n+1/2}}{\Delta z(k)} \right) \quad (4)$$

式(4)は、格子点 $(i+1/2, j, k)$ に位置する時刻 $n+1$ の電界の x 成分が、同じ格子点に位置する時刻 n の電界の x 成分の値と、隣接する格子点に位置する時刻 $n+1/2$ の磁界の z 成分および y 成分の値に

よって更新されることを意味している。電界の y 成分、 z 成分も同様に定式化される。

同様に、式(2)において、磁界の x 成分について記述すると式(5)のようになる。

$$\mu \frac{\partial H_x}{\partial t} = \frac{\partial E_y}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial y} \quad (5)$$

これを差分表記し整理すると次式のようになる。

$$H_{x(i, j+1/2, k+1/2)}^{n+1/2} = H_{x(i, j+1/2, k+1/2)}^{n-1/2} + \frac{\Delta t}{\mu} \cdot \left(\frac{E_{y(i, j+1/2, k+1)}^n - E_{y(i, j+1/2, k)}^n}{\Delta z(k)} - \frac{E_{z(i, j+1, k+1/2)}^n - E_{z(i, j, k+1/2)}^n}{\Delta y(j)} \right) \quad (6)$$

式(6)は、格子点 $(i, j+1/2, k+1/2)$ に位置する時刻 $n+1/2$ の磁界の x 成分が、同じ格子点に位置する時刻 $n-1/2$ の磁界の x 成分の値と、隣接する格子点に位置する時刻 n の電界の y 成分および z 成分の値によって更新されることを意味している。磁界の y 成分、 z 成分も同様に定式化される。

式(4)(6)における半整数の表記は、実際のプログラムでは、 $i+1/2 \Rightarrow i$, $j+1/2 \Rightarrow j$, $k+1/2 \Rightarrow k$ として記述する。

電界の x 、 y 、 z 成分の更新と磁界の x 、 y 、 z 成分の更新を交互に実行すること（リープフロッグ・アルゴリズム）で、格子上に配置した電磁界の値を逐次的に計算し、電磁界の時系列データを算出することができる。このアルゴリズムに、境界条件や波源の計算を加えたフローチャートを図2に示す。ここで、 T は時刻、 Δt は時間刻み幅である。この図の通り、FDTD法においては電磁場の更新がコアな部分である。

なお、Maxwell 方程式の発散の式は、これらのアルゴリズムによって自動的に満足される。

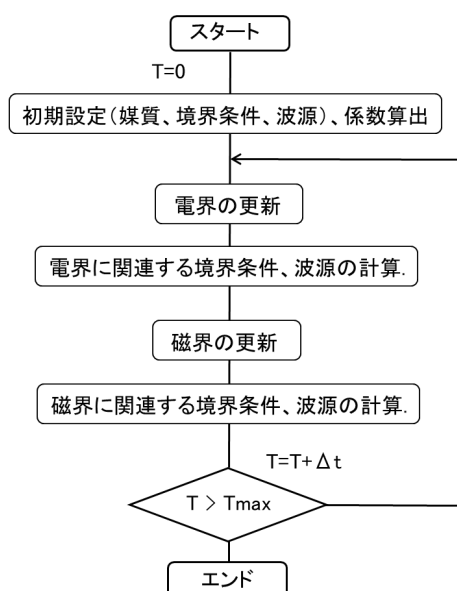


図 2 FDTD 法のフローチャート。

なお、前述のように Advance/ParallelWave では、領域分割による MPI 並列化も既に実装済であるが、詳細は[3]を参照されたい。

3. SX-Aurora TSUBASA

SX-Aurora TSUBASA は NEC のベクトル型スーパーコンピュータシリーズであり、NEC が長年のスーパーコンピュータ開発で培った LSI 技術と、NEC 独自の高密度実装技術、高効率冷却技術などを活用したカード型ベクトルエンジン(VE)を搭載しているのが特徴で、VE の搭載数により、オンサイト用からデータセンター用まで、幅広いラインアップを揃えている。ベクトル演算に加えて、x86 サーバーへの搭載を可能とした新アーキテクチャの採用により、x86 演算のニーズにも対応している。2019 年 12 月と、2020 年 6 月にアップデートを行ない、さらに NEC は 2022 年 10 月に新モデル「SX-Aurora TSUBASA C401-8」を発表し、CPU コア数を既存モデル「同 B401-8」の 10 から 16、搭載メモリを 48GB から 96GB に増やし、L3 キャッシュを新たに搭載したことで、処理性能を 2.5 倍に向上させている [6]。

SX-Aurora TSUBASA の特長としては、ベクトルエンジンが通常のグラフィックカードと同様に、PCIe カードスロットに置き換え・挿入できること、

ホスト側の OS がこれまでの NEC 独自のものから、Linux となることで利用への障壁が非常に小さくなっていることが挙げられる [5]。



②使いやすさ：オープン環境への対応

従来SXシリーズの専用OSから Linux OS に移行
オープン環境での豊富な資産を利用可能

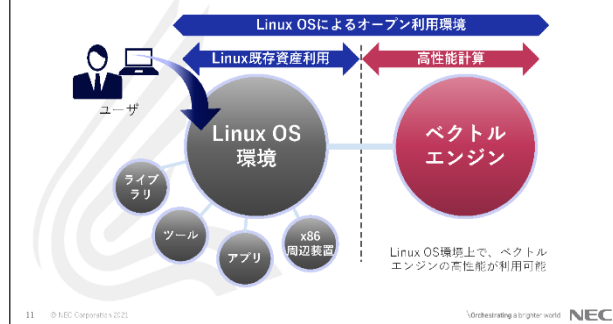


図 3 SX-Aurora TSUBASA の特長[5]

4. ベクトルチューニング

4.1. FDTD 法とベクトル化

もともと FDTD 法は、陽解法であり、コア部が単純なループ構造になっている為、ベクトル化・並列化に適している。

Advance/ParallelWave においてコアとなる電磁場の更新部分（ベクトル化前）を示すと以下のようにになっている。

```

do k = ks_grid_owned_only(bound, 2), ke_grid_owned_only(bound, gnT_z-1)
do j = js_grid_owned_only(bound, 2), je_grid_owned_only(bound, gnT_y-1)
do i = is_cell(bound, 1), ie_cell(bound, cnT_x)
  ex(i,j,k) = cx(i,j,k)*ex(i,j,k) + gx(i,j,k)*(hz(i,j,k) - hz(i,j-1,k)
    - hy(i,j,k) + hy(i,j,k-1))
enddo
enddo
enddo
  
```

図 4 ParallelWave ソースコード(ベクトル化前)

ここで注意点として、オリジナルプログラムでは、部分領域間の MPI データ通信の為に境界処理を系統的に行うために、do ループの初期値・最終値が関数呼び出しになっており見た目も少々複雑なものになっている。

4.2. FTRACE による出力結果

SX-Aurora TSUBASA では、各種のチューニング・解析ツールが用意されており、その中で FTRACE と呼ばれるものは、NEC コンパイラを使用してコンパイルおよびリンクすることで、プログラムの関数ごと、ユーザの指定した任意の区間ごとの CPU 時間やベクトル化に関する詳細な性能情報を得る事ができる解析ツールである。今回この FTRACE を Advance/ParallelWave の解析に適用してベクトルチューニングを行ったのでその結果を次に示す。

-----FTRACE ANALYSIS LIST-----

Execution Date : Mon Dec 18 17:03:51 2018 JST
Total CPU Time : 0.027467507 (586.507 sec.)

FREQ/INDEX	EXECUTIVE TIME(sec)	AVG.TIME (sec)	NRCS	NRLOOPS	V.O.P RATIO (%)	AVG. V.O.P (%)	VECTOR TIME (sec)	NRCS	CPU TIME (sec)	CONF RTR (%)	PROC. NAME
3894	40.034 (24.1)	10.281	6932.0	1359.2	57.33	50.3	47.317	2.551	0.000	58.86	UPD_MAGNETIC_FIELD_PARALLEL_MDI::UPD_MAGNETIC_FIELD
3894	39.561 (23.8)	10.160	5327.1	1359.6	58.58	62.6	47.263	44.251	0.000	49.88	UPD_MAGNETIC_FIELD_PARALLEL_MDI::UPD_MAGNETIC_FIELD
216	20.461 (12.0)	66.777	1336.6	28.5	0.03	17.4	0.021	3.179	0.000	100.00	OUTEM_PLANE_VTK_PARALLEL_MDI::OUTEM_PLANE_VTK
154566886	9.923 (5.9)	0.000	2421.8	0.0	0.00	0.0	0.000	0.004	0.000	0.00	IS_CELL_OWNED_ONLY
154566886	8.742 (5.3)	0.000	2260.3	0.0	0.00	0.0	0.000	11.162	0.000	0.00	IS_CELL_OWNED_ONLY
1547	8.126 (4.9)	4.180	10468.4	5931.9	82.58	50.0	0.000	0.888	0.000	70.98	CALC_ENERGY_PARALLEL_MDI::CALC_ENERGY
122855700	6.814 (4.0)	0.000	2560.3	0.0	0.00	0.0	0.000	2.163	0.000	0.00	IS_CELL_OWNED_ONLY
122855700	6.734 (4.1)	0.000	2809.8	0.0	0.00	0.0	0.000	5.315	0.000	0.00	IS_CELL_OWNED_ONLY
68132363	5.704 (3.3)	0.000	2921.4	0.0	0.00	0.0	0.000	0.200	0.000	0.00	IS_CELL_OWNED_ONLY
68132363	5.587 (3.2)	0.000	2921.8	0.0	0.00	0.0	0.000	0.473	0.000	0.00	IS_CELL_OWNED_ONLY
68975740	5.346 (3.1)	0.000	3021.2	0.0	0.00	0.0	0.000	0.261	0.000	0.00	IS_CELL_OWNED_ONLY
68975740	5.498 (3.1)	0.000	3037.0	0.0	0.00	0.0	0.000	0.243	0.000	0.00	IS_CELL_OWNED_ONLY
1	3.146 (1.9)	3346.277	1001.0	137.6	0.00	125.5	0.000	0.464	0.000	100.00	OUTEM_ENERGY_VTK_PARALLEL_MDI::OUTEM_ENERGY_VTK
1547	1.594 (1.0)	0.819	6651.4	2746.2	73.33	49.5	1.761	0.491	0.001	37.15	OUT_PNC_SIMON_PARALLEL_MDI::OUT_PNC_SIMON
3894	1.076 (0.8)	0.262	5180.9	1381.9	58.63	50.5	1.411	0.461	0.000	54.48	UPD_MAGNETIC_FIELD_PARALLEL_MDI::UPD_MAGNETIC_FIELD
3894	1.301 (0.8)	0.347	5179.2	1411.1	59.03	50.5	1.584	0.484	0.000	59.40	UPD_MAGNETIC_FIELD_PARALLEL_MDI::UPD_MAGNETIC_FIELD
1	0.221 (0.1)	220.562	1940.7	0.1	0.00	0.0	0.000	0.011	0.000	0.00	IS_CELL_OWNED_ONLY
62304	0.219 (0.1)	0.004	5730.2	0.4	90.50	147.7	0.082	0.053	0.040	72.44	TRANSFER_MDI::TRANSFER_FIELD_ISENERGY
3697618	0.218 (0.1)	0.000	5951.4	0.0	0.00	0.0	0.000	0.047	0.000	0.00	IS_CELL_OWNED_ONLY
3697618	0.216 (0.1)	0.000	5925.4	0.0	0.00	0.0	0.000	0.044	0.000	0.00	IS_CELL_OWNED_ONLY

図 5 FTRACE によるオリジナルコードの解析 (上位 20 ルーチンを出力)

出力結果のリストには、全体の処理時間の中でそれぞれのサブルーチン・関数の計算時間が大きい順にリストアップされている。その結果によれば

- ① 電場・磁場の更新ルーチンが上位 2 つに位置している(コア部)
- ② 非常に多い関数呼び出し (IE_CELL_OWNED_ONLY)がある
- ③ 出力ルーチン(OUTEM_PLANE_VTK)での比率も高い

であることが判る。③に関しては、入出力部分はもともベクトル化されないなので、今回は無視する。

4.3. コア部ルーチンのベクトル化

ベクトル化のアプローチとして、ベクトル長を長くするために、リストベクトルを用いたベクトル化(3 重ループの 1 重ループ化)を試みた。この手法により、前述の課題①、②が同時に解決できる。NEC のベクトルコンパイラは、プログラム構造から自動的にベクトル化を行ってくれる。

事前にリストベクトルを作成

```

n = 0
do k = ka_grid_owned_only(bound, 2), ka_grid_owned_only(bound, gnt_r-1)
  do j = ja_grid_owned_only(bound, 2), ja_grid_owned_only(bound, gnt_y-1)
    do i = ia_cell(bound, 1), ie_cell(bound, cnt_x)

      n = n + 1
      iiaex(n) = i
      jiaex(n) = j
      kkaex(n) = k
    } リストベクトル
  enddo
enddo
nhaex = n

```

リストベクトルの作成

```

35: do n = 1, nhaex
36:   i = iiaex(n)
37:   j = jiaex(n)
38:   k = kkaex(n)
39:   ex(i,j,k) = cx(i,j,k)*ex(i,j,k) + gx(i,j,k)*(hz(i,j,k) - hz(i,j-1,k)
40:             - hy(i,j,k) + hy(i,j,k-1))
enddo

```

DIAGNOSTIC MESSAGE

```

35: vec(102): Partially vectorized loop
39: opt(1036): Potential feedback - use directive or compiler option if OF
39: vec(122): Dependency unknown... Unvectorizable dependency is assumed... IX

```

そのままだでは部分ベクトル化しきれない(自動ではやってくれない)

図 6 リストベクトルを用いたベクトル化

ただし、今回のプログラムの場合、そのままでは自動ではベクトル化の判別ができない部分があり、その場合、診断メッセージによりそれを知ることができる。図 6 下側の出力によれば、配列変数 ex にベクトル化を阻害する依存関係がある「可能性」が存在するとコンパイラが判断して自動ではベクトル化されない。図 6 下側のプログラムリスト出力において、ループに「S」の記号が付けられている(ベクトル化されると「V」が付く)。

しかし実は今回の場合は、アルゴリズム的にデータにはベクトル化に不都合な依存関係がない(すなわちベクトル化することにより、シリアル計算と結果が異なる状況が発生することはない)ことが予め判っているので、強制的にベクトル化を行うことをコンパイラに指示してベクトル化を行う事ができる。

4.4. ベクトル化指示行の設定によるベクトル化

今回の場合、コンパイラに具体的なベクトル化指示行は、DO ループの直前に「!NECS IVDEP」を挿入することになる。

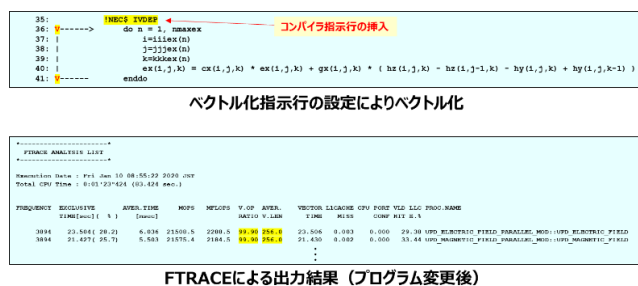


図7 ベクトル化指示行によるベクトル化

この指示行の挿入によりコンパイラは、配列変数 ex の依存関係を見逃して強制的にベクトル化を行ってくれる。図7上のプログラムリストを見れば今回はループに「V」の記号が付いていることが判る。

このようにリストベクトルを用いたベクトル化をコア部全体に行ったプログラムを FTRACE に掛けた結果が図7の下側に出力である。それによると、ベクトル化率 99.9%、平均ベクトル長が最大値である 256 という非常に良い結果が得られた。

4.5. ベンチマーク

今回、ベンチマークを行うにあたって、高速化を強調する為の単純なモデルではなく、現実的かつ実用的な例題を採用することにした。

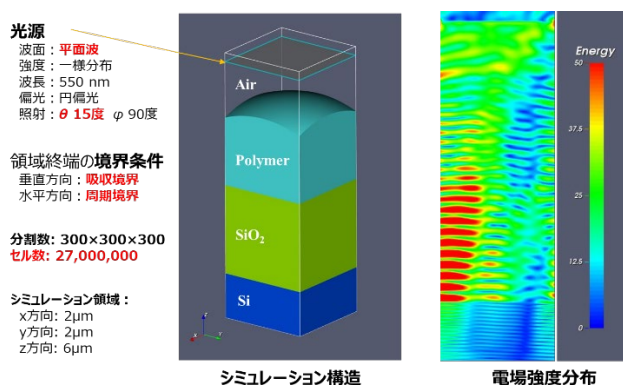


図8 マイクロレンズ付き受光素子

この例題においては、実用的な境界条件（解析対象の周りは周期境界条件、上下に吸収境界条件を設定）、及び光源（平面波の斜め入射）を用いる、マイクロレンズ付き受光素子解析を採用することにした。シミュレーション領域は、x,y 方向が 2 μ m×2 μ m、高さ方向は 6 μ m の直方

体である。材質としては、底部より、1 μ m のシリコン層、2 μ m の SiO₂ 層、2 μ m 程度のポリマーからなるマイクロレンズ層、1 μ m の空気層から構成されている。計算領域の分割数は 300×300×300 でセル数は 27,000,000 である。シミュレーションとしては、解析領域上部に設定した光源から波長 550nm の一様な平面波を 15度の斜めの角度から入射する場合の解析を行うものである。境界条件は、平面方向は周期的境界条件、垂直方向は吸収境界条件を設定した。実際のシミュレーションは計算がスタートしてから定常状態になるまで計算を行うが、今回は予め設定したタイムステップでの計算時間を測定した。

4.6. 高速化性能

SX-Aurora TSUBASA と Intel CPU でベンチマーク計算を実施した。表から分かるように、SX-Aurora TSUBASA は Intel CPU と比較して、今回の比較においては約 3.11 倍以上の性能がある。また、Advance/ParallelWave は、MPI 並列化されており SX-Aurora TSUBASA の複数ノード計算にも対応が可能である。

表1 SX-Aurora TSUBASA と Intel CPU の実行時間比較 (Advance/ParallelWave)

利用した計算機	計算時間
SX-Aurora TSUBASA(1VE)	40.39 s
Intel Xeon(32 コア)	125.61 s

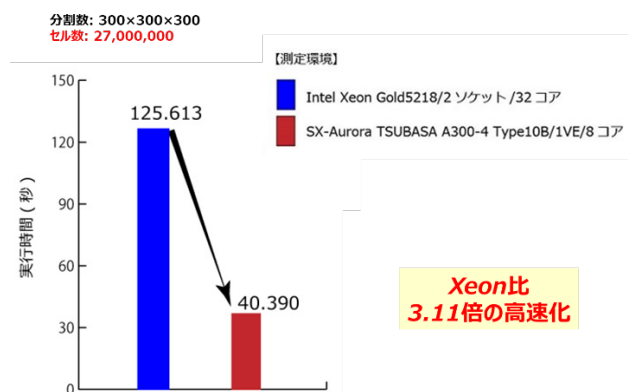


図9 ベクトル化による高速化の結果

4.7. 大規模計算

マイクロレンズ付き受光素子を例に、セル数を変更し、大規模計算を実施した。

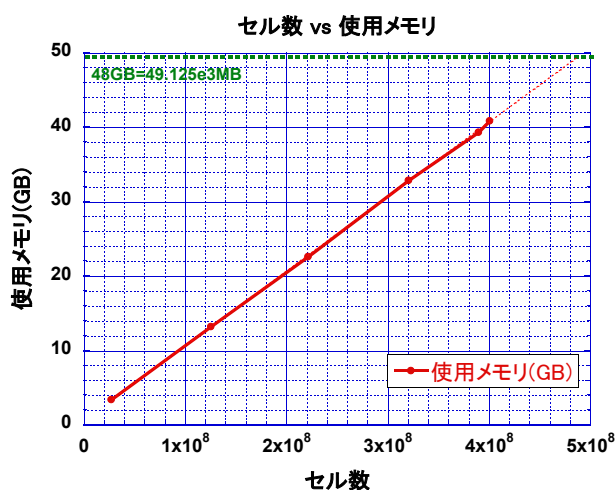


図 10 セル数と使用メモリの関係

表 2 セル数と使用メモリの関係

セル数		使用メモリ (GB)
2.70E+07	2700 万	3.344
1.26E+08	1 億 2600 万	13.136
2.21E+08	2 億 2100 万	22.544
3.20E+08	3 億 2000 万	32.784
3.90E+08	3 億 8955 万	39.248
4.00E+08	4 億 0049 万	40.784

上記より使用メモリは、セル数に線形に変化しており、1 VE に搭載されているメモリの最大値が 48GB であるところまで外挿すると、1 VE の場合には約 4.8 億セルのシミュレーションが可能であると思われる。

5. まとめ

今回、当社ソフトウェアの電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave に対してベクトルチューニングを行い、NEC 製次世代イノベーションプラットフォーム SX-Aurora TSUBASA での高速計算を可能にした。

● 高速化のベンチマーク

- 実用的な例題である、マイクロレンズ付き受光素子についてベンチマークを実施して高速化性能を比較した。
- Intel クラスタマシン(MPI 32 並列)と比較して 1VE を使用して、3.11 倍の高速化が得られた。

● 大規模化のベンチマーク

- 1 つのモデルについてセル数が大きくなるように離散化をして大規模モデルのベンチマークを実施した。
- 1VE (48GB 搭載)の場合、マイクロレンズ付き受光素子において、約 4.8 億セルの FDFTD 計算が可能である。

参考文献

- [1] “電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave,” [オンライン]. Available: https://www.advancesoft.jp/product/advance_parallelwave/index.html.
- [2] 並木 武, 松原 聖, “大規模電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave の開発,” アドバンスシミュレーション, 第 23 巻, p. 115, 2016.
- [3] 小瀬村大亮, 小田嘉則, 大倉康幸, 小山田隆行, 原田昌紀, “電磁波解析ソフトウェア開発の取り組み” 光アライアンス / 光アライアンス編集委員会 編 32 (2), 32-36, 2021-02
- [4] Allen Taflove and Susan C. Hagness., “Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method”, Artech House on Demand; 第 3 版 (2005/6/30)
- [5] 次世代イノベーションプラットフォーム SX-Aurora TSUBASA, 「SX-Aurora_TSUBASA 紹介資料_202112.pdf」 https://jpn.nec.com/hpc/sxauroratsubasa/?cid=online-event-archive&_ga=2.256159883.1474516207.1683544232-359128792.1683544232
- [6] 「高密度水冷型スーパーコンピュータ SX-

Aurora TSUBASA C401-8_202210.pdf]

https://auth.nec.com/download/dl-230301-000-000084?check_logged_in=1&page=3

※ 技術情報誌アドバンスシミュレーションは、アドバンスソフト株式会社 ホームページのシミュレーション図書館から、PDF ファイル（カラー版）がダウンロードできます。（ダウンロードしていただくには、アドバンス/シミュレーションフォーラム会員登録が必要です。）