5G-05

複素数電磁場解析の問題における Smoothed Aggregation Algebraic Multigrid 法の適用

朝倉豪彦† 野村直也† 藤井昭宏† 田中輝雄†

工学院大学†

1. はじめに

大規模連立一次方程式の解法のひとつにAMG(Algebraic Multigrid)法がある．AMG 法は，問題行列から大きさの異なる複数の行列を生成して解く手法である．AMG 法の中で，Smoothed Aggregation に基づく AMG 法（以下，SA-AMG 法）があり，様々な反復解法の前処理として利用可能で，多くの実数形式の問題で有効である[1]．また，収束が難しい誤差成分を指定することで，収束性の改善が可能である[2]．そこで我々は SA-AMG 法のライブラリ化を進めてきた[3][4]．本研究では，この SA-AMG 法を複素数問題に適用させることに着目し，その有用性について評価する．複素数問題の各要素をそれぞれ実数部と虚数部の 2×2 のブロック行列として格納し，非対称な実数形式の問題に変換することで適用する．SA-AMG 法では，収束が難しい成分を抽出し，利用することで収束性を改善できる．この手法も含めて複素数問題に対する SA-AMG 法の有効性を分析する．

2. SA-AMG 法

2.1 概要と流れ

問題行列を粗くする構築部，残差を小さくして解を求めていく解法部から構成される．

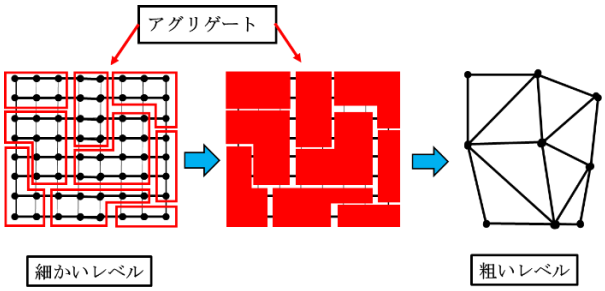

図 1 アグリゲートを作成しまとめる過程

Application of Smoothed Aggregation Algebraic Multigrid Method to Three-Dimensional Complex Electromagnetic Field Analysis Problem

Tsuyohiko Asakura†, Naoya Nomura†, Akihiro Fujii† and Teruo Tanaka†

†Kogakuin University

図 1 で示すように，構築部はアグリゲートと呼ばれる未知数集合を作成して補間演算子である P 行列，縮約演算子である R 行列を作成し，問題行列を代数的に粗くする．これを再帰的に行い大きさの異なる複数の行列を生成する．解法部は，構築部で階層的に生成された粗い行列を Gauss-Seidel 法などの緩和法を用いて問題行列を解く．本研究では，この SA-AMG 法を複素数問題から実数問題に変換して適用する．

2.2 ニアカーネルベクトル

二アカーネルベクトルは，行列 P を作成する際に用いる，$\boldsymbol{Ax} \approx 0, \boldsymbol{x} \neq 0$ となるベクトル $\boldsymbol{x}$ を示す．ニアカーネルベクトルは収束しにくい成分として知られ，SA-AMG 法において補間行列 P を生成するときに利用することで収束性の改善が可能である．本研究では，$\boldsymbol{Ax} = 0$ に対して初期解を乱数で与え，解法部を何回か反復させ，残った解をニアカーネルベクトルとして抽出する．

3. 複素数問題の解法と実数形式への変換

3.1 前処理付 COCG 法

大規模な対称正定値行列を係数に持つ連立一次方程式 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ を解く反復解法として広く用いられる共役勾配法を複素数問題に適用させたものである．本研究ではこれを SSOR 前処理付き解法とし，SA-AMG を適用した場合と比較する．

3.2 実数形式への変換

(3.1)で表すように i を虚数単位とし，$A_r, \boldsymbol{b}_r, \boldsymbol{x}_r$ を実数部，$A_i, \boldsymbol{b}_i, \boldsymbol{x}_i$ を虚数部とした複素数問題を本研究で扱う．

(3.1) $A = A_r + iA_i,\ \boldsymbol{x} = x_r + ix_i,\ \boldsymbol{b} = b_r + ib_r$

これを n 元連立一次方程式 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ に当てはめ，実部と虚部に分けて変換すると(3.2)となる．

(3.2) $$\begin{pmatrix} A_r & -A_i \\ A_i & A_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{x}_r \\ \boldsymbol{x}_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{b}_r \\ \boldsymbol{b}_i \end{pmatrix}$$

これにより複素数の問題が実数の問題に変換することができたので，これまでに開発した SA-AMG 法ライブラリの適用が可能となる．

4. 数値実験

従来手法と提案手法を比較する．従来手法は 3 章で扱った SSOR 前処理付き COCG 法，提案手法は 2 章で扱った SA-AMG 前処理付き GPBICG 法を適用する．SA-AMG 法を適用するときは，複素数を実数に変換したデータを用意し適用する．SA-AMG 法では MPI を用いて並列化を行い，その効果も検証する．実験には東京大学の FX10[5](CPU は SPARC64™IXfx，コンパイラは mpifrtpx，オプションは-Kfast,openmp)を使用する．対象問題は，複素数電磁場解析の問題を 2 つ用意し，問題 1 は未知数の個数が複素形式で 6,750，実数形式で 13,750，従来手法では収束性が悪く，問題 2 は未知数の個数が複素形式で 91,275，実数形式で 182,550 の収束性が良いデータを扱う．

5. 実験結果と考察

従来手法と提案手法の比較を表 1 に示す．

表 1　従来手法と提案手法の比較（逐次）

	収束時間[s]	反復回数
問題 1 従来手法	0.95E+01	2449
問題 1 提案手法	2.20E+01	387
問題 2 従来手法	1.91E+01	83
問題 2 提案手法	36.9E+01	135

逐次では従来手法が提案手法より収束時間はよかった．一方で問題 1 では反復回数は改善された．問題 2 では反復回数も悪くなり，これは問題がもともとマルチレベルでなくとも収束性が良いのが原因と思われる．MPI 化のデータを図 2-a，図 2-b に表す．問題 1 ではプロセス数を上げすぎると収束時間に良くない影響が出たが，問題 2 ではプロセス数を上げていくと収束時間は短く

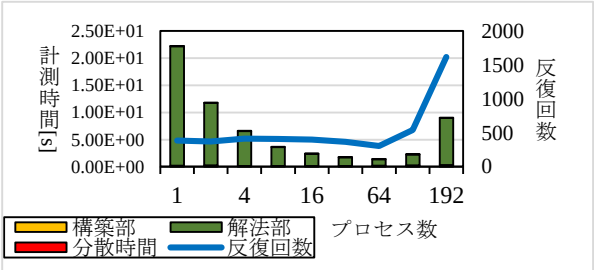

図 2-a　問題 1 のフラット MPI 並列化

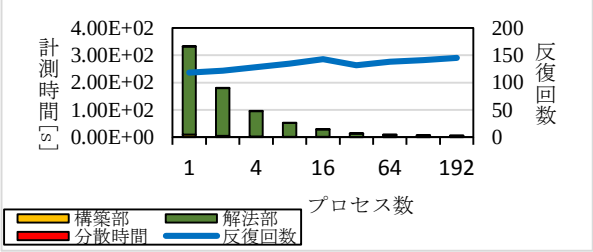

図 2-b　問題 2 のフラット MPI 並列化

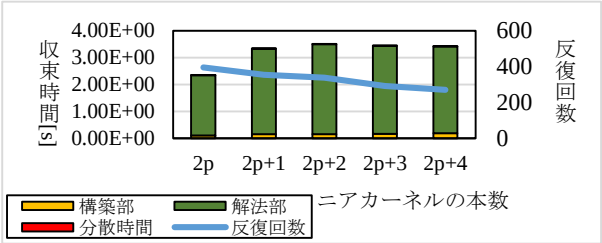

図 3-a　ニアカーネルを加えたときの影響(問題 1)

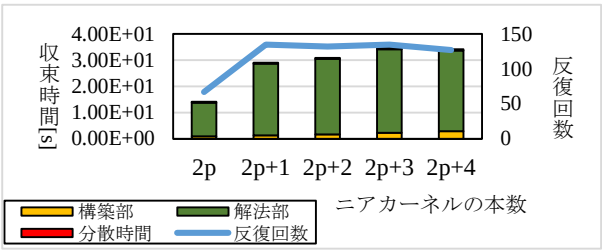

図 3-b　ニアカーネルを加えたときの影響(問題 2)

なった．さらに収束しにくい誤差成分を抽出し，ニアカーネルベクトルとして付け加えた図が図 3-a と図 3-b である．図 3 の 2p は，実数の定数ベクトルと虚数の定数ベクトルの 2 本を示しており，これにニアカーネルベクトルを追加する．この実験は 16 プロセスで行い，問題 1 は反復回数が約 30%減少したが，問題 2 では初めの 2 本で十分であるとわかった．

6. まとめ

本研究では，複素数問題を実数化し，SA-AMG 法を適用させ MPI 並列化を行った．2 種類のデータに適用し，実数問題として MPI 並列化も有効であることも含め，適用可能なことがわかった．ただし，複素数問題をそのまま解く従来手法より高速ではなかったため，今後ニアカーネルベクトル追加の設定などについて調べていきたい．

謝辞

本研究の一部は JSPS 科学研究費 15K15998 の助成を受けて行われた．

参考文献

[1] P. Vaněk, J.Mandel, M.Brezina, “Algebraic multigrid by smoothed aggregation for second and fourth order elliptic problems”, Univ. of Colorado at Denver , CO, USA (1995)

[2] N. Nomura, A. Fujii, T. Tanaka, K. Nakajima and O. Marques, "Performance Analysis of SA-AMG Method by Setting Extracted Near-kernel Vectors", 12th International Meeting on HPC for Computational Science (VECPAR2016)

[3] 代数的マルチグリッド(AMG)法　のライブラリ http://hpcl.info.kogakuin.ac.jp/lab/software/amgs

[4] 野村卓矢，高並列環境における SA-AMG 法の領域集約手法，修士学位論文，工学院大学大学院(2015)

[5] FX10 Supercomputer System, http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/system/fx10/