

大規模電磁界解析向けの線形方程式のための IC 分解前処理のフィルインレベルについて

梶井晃基¹ 曾我部知広¹ 片桐孝洋¹ 荻野正雄²

概要：高周波電磁場問題などで得られる複素対称線形方程式は収束性が悪いことが知られている。反復法における前処理としては IC(0)(不完全コレスキー分解)前処理が広く使われている。一方で、フィルインを考慮した IC(1)等はあまり使われておらず、その有効性は自明ではない。特に、高周波電磁場解析問題については研究例が少なく、最適な前処理手法は確立されていない。またフィルインのレベルは自然数であり、IC(1)でも IC(0)に比べ、1 回の反復における計算コストが数倍以上になることもある。そこで今回は電磁場解析問題も含めいくつかの対称行列に対してフィルインを施した場合の反復法の収束性の変化を調査し、さらにメモリ消費量の削減に着目した IC(0)と IC(1)の中間にあたる手法を考案したので、その性能評価を行った結果を報告する。

キーワード：反復法、前処理、電磁場解析、フィルイン、IC(不完全コレスキー分解)

1. 緒言

辺要素有限要素法による時間調和渦電流解析[1]や高周波電磁場解析[2]などで得られる複素対称線形方程式の求解においては、反復法の収束性が悪いことが知られている。また、解析する対象が大規模・複雑になるにつれ収束性はさらに悪化する。さらに一般的な収束判定方法である相対的な残差基準を満たしたとしても、得られた近似解が真の解と大きな誤差を持つ場合があり、電磁場問題において反復法における残差ノルムと収束解と真の解との誤差を調べることは重要である。対称線形方程式に対する反復法としては、Krylov 部分空間法の 1 つである共役勾配(Conjugate Gradient: CG)法やその複素数版である共役直交共役勾配(Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient: COCG)法[3]が広く用いられてきた。近年は、共役残差(Conjugate Residual: CR)法やその複素数版である共役直交共役残差(Conjugate Orthogonal Conjugate Residual: COCR)法[4]や最小残差(MINimal RESidual: MINRES)法アルゴリズムに基づいた MINRES-like_CS 法[5]など新たな反復法の開発も進んでいる。

このような反復法において収束性を向上させるために前処理を施すことが一般的であり、対称線形方程式に対する前処理としては不完全コレスキー分解(IC, Incomplete Cholesky)前処理[6]がよく知られている。特に辺要素有限要素法による電磁場解析分野では、加速係数付き IC 前処理[7]が広く用いられ、加速係数の値は反復回数に大きく影響する重要なパラメータであり、問題ごとに最適な値を決定する必要がある。加速係数は前処理行列の対角成分に通常 1.0 よりも少し大きな値を掛け反復法の収束性を加速させ

るための係数であり、その値の自動決定に関する研究も行われている[8][9]が、大規模解析でも実用的な手法は確立されていない。また、Krylov 部分空間法の収束性は丸め誤差の影響を受けるため、多倍長精度演算によってその影響を小さくすることで収束性改善が期待できることが経験的に知られている。特に複素対称向けの反復法では、多倍長精度演算を用いることで IC 前処理の加速係数や SSOR(Symmetric Successive Over-Relaxation)前処理の緩和係数など前処理のパラメータが収束性に与える影響を小さくできることが報告されている[10]。しかし、多倍長精度演算は計算コストが高いことから、全て倍精度演算で行った場合に比べて総計算時間を削減できるケースは限定される。

IC 前処理の多くはフィルインを行わない IC(0)が用いられ、非対称行列の問題も含めるとフィルインを許容する閾値を決めて不完全分解を行う ILUT 分解[11]や Inverse-based ドロップング分解手法[12]などいくつかの研究があるが、フィルインレベルに基づく不完全分解 ILU(p)[13]については報告があまりない。特に電磁場解析における事例は少なく、最適な前処理手法やそのフィルインレベルは不明である。さらに最近では解析の大規模化により問題のサイズが膨大になり、フィルインにより一般の計算機のメモリに乗りきらなくなるケースもある。

そこで本研究では主に高周波電磁場解析を対象とし、得られる複素対称線形方程式に対して数値実験を行うことで、高周波電磁場解析向けの最適な前処理や加速係数について調査する。また、今回提案する新たな前処理手法については 2 章で説明するが、この手法も含めてデータベース上の実対称行列や電磁場解析問題などで現れる複素対称行列に対して性能評価を行うことで有効性を検討する。

1 名古屋大学
Nagoya University
2 大同大学
Daido University

2. 前処理手法

対称行列向けの前処理として IC 前処理以外にも SSOR 前処理, 対角スケール前処理などがよく知られている. 対角スケール前処理や SSOR 前処理は前処理行列のためのメモリ消費が少なく済むが, IC 前処理はこの 2 つに比べ収束性が良くなる場合が多い. 一方で IC(p)前処理には加速係数やフィルインといった要素があり, p がフィルインのレベルを表すが, この値は自然数であるため, ひとつレベルを上げるだけで問題によっては前処理行列の非ゼロ要素数が数倍以上になり, メモリ消費量や 1 反復当たりの計算量増大につながり, フィルイン数の制御がしづらといった問題がある. そこで本研究では, IC(0)と IC(1)の中間に相当する手法を提案し, ここでは IC(0.5)と呼ぶことにする. これについて, 数値実験を行うことで前処理行列の非ゼロ要素数や反復回数の変化について調査する.

まず式(1)に IC 分解における従来のフィルインのレベル付けを行う式を示す. ただし, $Level_{ij}$ は前処理行列の下三角要素 L_{ij} のレベルを表し, $Level_{ij}$ の初期値は係数行列の非ゼロ要素位置は 0, それ以外は無限大として前処理行列すべての要素について計算する.

$$Level_{ij} = \min_{1 \leq k \leq \min(i,j)} \{Level_{ik} + Level_{kj} + 1\} \quad (1)$$

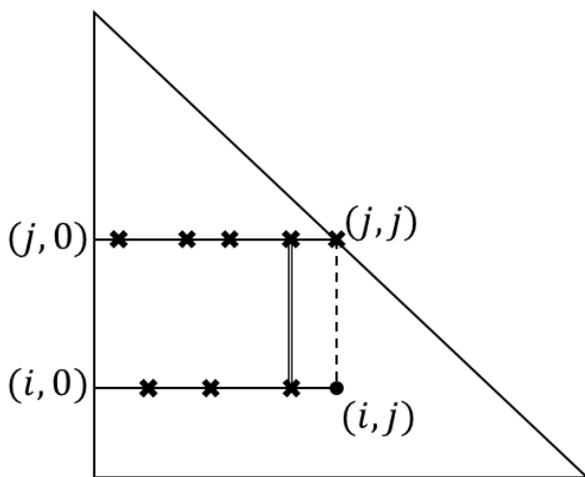


図 1 IC(1)による非ゼロ要素位置の決定方法

これを図で表すと, 図 1 のようになる. 黒丸が追加の非ゼロかどうか判定する要素であり, バツ印の位置が係数行列の非ゼロ要素位置である. 今回のような対称行列の場合において, (i,j) が非ゼロであるかどうかを判定する場合, i 行目と j 行目の要素について調べ, 列が同じものが 1 つでも存在する場合非ゼロとする. これを下三角部分の全要素について調べることで IC(1)の非ゼロ要素位置を決定する.

次に, 今回提案する IC(0.5)の手法を図 2 に示す. IC(1)が i 行目と j 行目の要素について調べ, 列が同じものが 1 つでも存在する場合に非ゼロとするといった手法であったが, IC(0.5)は列が同じものが 2 つ以上存在する場合に非ゼロとするといった手法である. また, 探索位置はその行のうち最初の非ゼロ要素位置から対角成分を除いた最後の非ゼロ要素位置までである. これにより, 係数行列の値によらず IC(1)よりも追加の非ゼロ要素数を削減することが出来る.

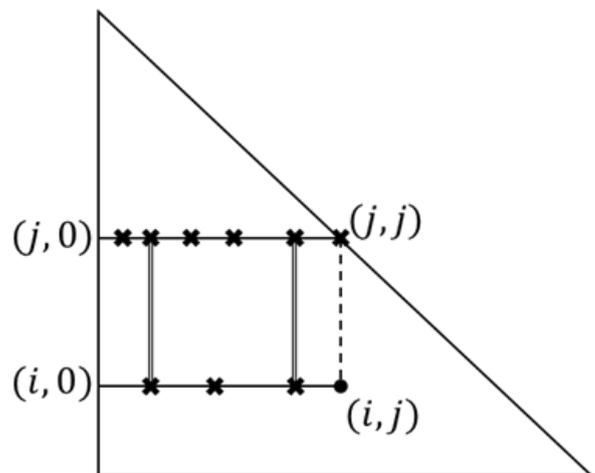


図 2 IC(0.5)による非ゼロ要素位置の決定方法

```

L0,0 := 1.0
D0 := A0,0 × α
for i = 1,2,3,...,n-1
  for j = 0,1,2,...,i
    if (Leveli,j ≥ p) then
      if (i = j) then
        Li,i := 1.0
      else
        Li,j := (Ai,j - ∑k=1j-1 Li,kDkLj,k)/dj,j
      else
        Li,j := -∑k=1j-1 Li,kDkLj,k/dj,j
    end if
  end for
  Di := Ai,i × α - ∑k=1i-1 Lj,k2Dk
end for

```

図 3 フィルインを考慮した IC 前処理

IC 分解は係数行列 A を下三角行列 L とその転置行列 L^T , また対角行列 D を用いて $A \approx LDL^T$ と分解する手法であるが, フィルインを行わない IC(0)においては係数行列と前

処理行列の非ゼロ要素位置が同じである。一方で IC(0.5)以上においてはこの式により前処理行列に追加される非ゼロ要素位置が決定される。[[Level]]_{ij} を決定した後のフィルイン付きの IC 前処理の計算手法を Fig. 3 に示す。ただし α は加速係数を表し、 p はフィルインのレベルを示す。このアルゴリズムにおいて例えば [[Level]]₂₃₌₂ の時、 L_{23} の要素は、IC(0)~IC(1)の時は 0 として計算されるが、IC(2)以上では非ゼロとして計算される。一般的にレベルを増やすと非ゼロ要素が増え前処理行列が係数行列に近づくため、収束性が良くなる可能性が高いが、その分前処理行列を求めたり反復中の前進・後退代入を行ったりする計算時間が増加する。

そこで今回は前処理として IC 前処理におけるフィルインのレベルを変え、様々な種類の行列に対して性能評価を行うことで前処理の有効性を調査した。

3. 数値実験

今回数値実験に用いる計算機は Intel Core i7-7700 3.60GHz の CPU と 64GB メモリで構成されており、コンパイラは gcc 7.3.0、最適化のオプションは-O3 とした。

3.1 データベースの行列に対する性能評価

まず、一般的な対称行列として、Florida Sparse Matrix Collection から表 1 の行列を用いる。またその行列の形状を図 4 に示す。

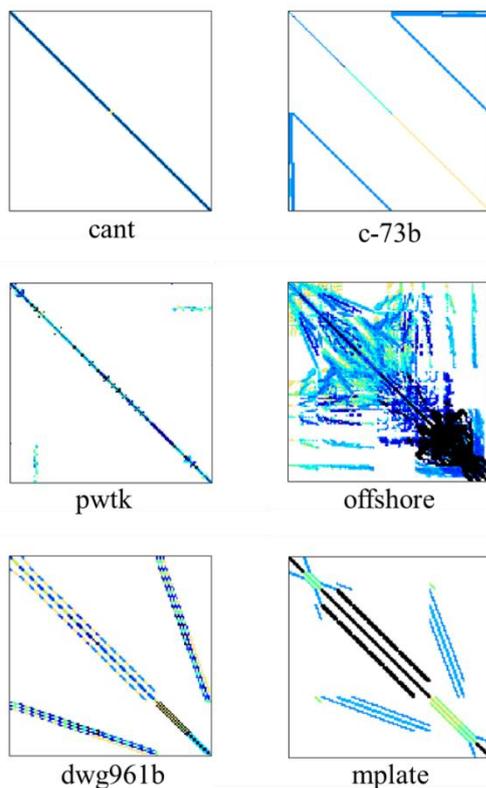


図 4 データベース上の行列の形状

表 1 数値実験に用いた行列

行列	サイズ	非零要素数	実/複	説明
cant	62,451	4,007,383	実数	2D/3D 問題
c-73b	169,422	1,279,274	実数	最適化問題
pwtk	217,918	11,524,432	実数	構造問題
offshore	259,789	4,242,673	実数	電磁場問題
dwg961b	961	10,591	複素数	電磁場問題
mplate	5,962	142,190	複素数	音響問題

解くべき方程式を $Ax = b$ とし、実数の行列に対しては CG 法で、複素数の行列に対しては COCG 法で解くことを考える。ただし、右辺ベクトル b は $x = (1.0 + 1.0i, \dots, 1.0 + 1.0i)^T$ としたときの $b = Ax$ 、初期解 $x^0 = 0$ とする。収束判定は相対残差ノルム $\|r^n\|_2 / \|r^0\|_2$ が 10^{-9} 以下となったときとした。表 1 の係数行列を用いて、IC 前処理のフィルインレベルが計算性能に与える影響を評価する。フィルインレベルとして IC(0)、IC(0.5)、IC(1) の 3 種類を用い、IC 前処理の加速係数は全てのケースにおいて 1.1 とした。まず、表 2 にフィルインのレベルに応じた前処理行列の非ゼロ要素数を示す。表より、フィルインのレベルを上げることで前処理行列の非ゼロ要素数が増加した。おおよその行列についてフィルインのレベルに比例して非ゼロ要素数が段階的に増加し、この観点から、今回提案した IC(0.5) は IC(0) と IC(1) の間の性能となり、IC(1) よりもメモリ使用量の消費を抑えることに成功した。一方で c-73b の行列については IC(0) と IC(0.5) の非ゼロ要素数が同じであり、さらに IC(1) については非ゼロ要素数が 100 倍以上になっていた。このことから IC(0.5) 自体の効果は無かったが、フィルインによる前処理行列の非ゼロ要素数の膨大な増加を防ぐことが出来た。

表 2 各前処理手法による前処理行列の非ゼロ要素数の変化(データベース上の行列)

行列	サイズ	IC(0)	IC(0.5)	IC(1)
cant	62,451	2,034,917	4,465,822	4,500,090
c-73b	169,422	724,348	724,348	852,314,092
pwtk	217,918	5,926,171	8,823,412	8,832,524
offshore	259,789	2,251,231	2,969,234	4,985,743
dwg961b	961	5,776	5,986	8,190
mplate	5,962	74,076	158,276	218,343

また、収束するまでの反復回数と計算時間を表 3 に示す。ただし、計算時間の () 内の数字は反復法のうち前処理にかかった時間を示す。また IC(0) の記載していない部分については 10 万回の反復でも収束せず、IC(1) の記載していない部分については 10 万秒を超えても計算が終了しなかった。表 3 より、おおよそフィルインのレベルを上げることで収

表3 データベース上の行列に対する性能評価

行列	IC(0)		IC(0.5)		IC(1)	
	反復回数	計算時間[sec]	反復回数	計算時間[sec]	反復回数	計算時間[sec]
cant	-	-	1407	24.34(9.31)	1321	28.72(13.94)
c-73b	1678	5.44(0.01)	1678	23.74(18.47)	-	-
pwtk	-	-	2508	97.55(37.45)	2476	98.00(39.43)
offshore	119	1.58(0.13)	104	36.08(34.70)	86	38.64(37.17)
dwg961b	628	0.09(0.00)	592	0.08(0.00)	348	0.06(0.00)
mplate	310	0.42(0.01)	299	0.76(0.17)	239	0.90(0.31)

束性が改善している。一方で、フィルインを行うことで前処理行列の非ゼロ要素位置の探索に時間がかかり、反復回数が少ないケースにおいては総計算時間の大部分を占めることが分かった。ただし、今回は全てを逐次で行っているため、並列化を行うことでこの計算を大幅に短縮できると思われる。また、総計算時間の観点で見ると行列の種類によって最速な前処理が異なるが、今回の問題についてはIC(1)よりも優位に立つケースが多いという結果になった。さらに、今回提案したIC(0.5)は全ての行列に対して収束解を得ることが出来ており、今回のケースにおいてはロバストな手法であると言える。

3.2 高周波電磁場問題に対する性能評価

高周波電磁界のモデルとして、変位電流を含む Maxwell 方程式から導かれる電場 E [V/m] を未知数とする波動方程式を考える。

$$\int_{\Omega} \text{rot} \mathbf{E}_h \cdot \mu^{-1} \text{rot} \mathbf{E}_h^* d\Omega - \int_{\Omega} (\omega^2 \epsilon' - j\omega\sigma) \mathbf{E}_h \cdot \mathbf{E}_h^* d\Omega = j\omega \int_{\Omega} \mathbf{J}_h \cdot \mathbf{E}_h^* d\Omega \quad (2)$$

ただし、 μ [H/m] は透磁率、 ϵ_0 [F/m] は真空の誘電率、 ϵ' は比誘電率、 ω [rad/s] は単一角周波数、 i は虚数単位、 J [A/m²] は電流密度である。式(2)に全周囲で電場 E の接線方向がゼロとなる境界条件を与え、辺要素有限要素法を適用する⁽²⁾。テスト問題として、TEAM Workshop Problem 29⁽¹⁴⁾ として知られる医療用リエントラント型空洞共振器の高周波電磁界解析を考える。

図4に形状を示すが、中心部には円盤状の誘電体ファントムを設置している。ただし、比誘電率 $\epsilon' = 80.0$ 、導電率 $\sigma = 0.52$ [S/m] とする。また、単一角周波数は $\omega = 2\pi f$ とし、周波数 f を 1, 10, 60, 65.2, 100, 109, 134, 140, 300 [MHz] まで変えた時の計算を行う。

今回は、未知数 134,573、かつ、係数行列の非ゼロ要素数が 2,123,849 となる中規模問題、未知数 979,464、かつ、係数行列の非ゼロ要素数が 15,794,744 となる大規模問題を構築した。これらの非ゼロ要素数は周波数に関わらず一定であ

る。複素対称線形方程式の構築には、ADVENTURE プロジェクト⁽¹⁵⁾ が提供する ADVENTURE_Magnetic を用いている。

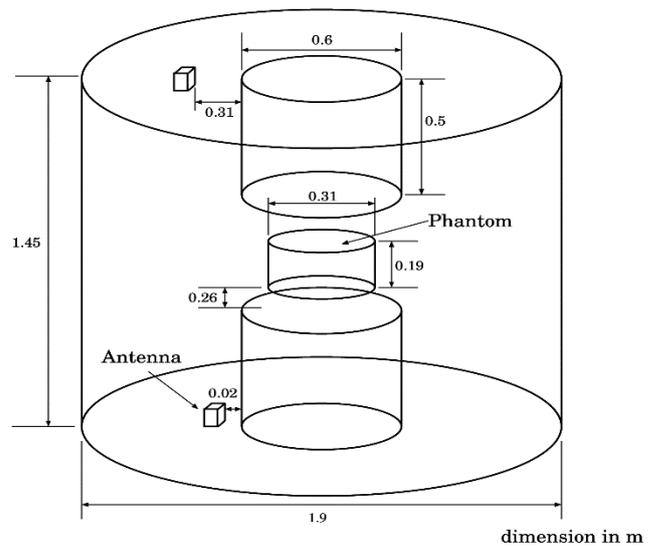


図4 TEAM Workshop Problem 29 によるテストモデル

同様に解くべき方程式を $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ とし、COCG法で解くことを考える。ただし、 A は複素対称行列であり、初期解 $\mathbf{x}^0 = \mathbf{0}$ とする。収束判定は相対残差ノルム $\|\mathbf{r}^n\|_2 / \|\mathbf{r}^0\|_2$ が 10^{-9} 以下となったときとした。これらについても同様に、IC 前処理のフィルインレベルが計算性能に与える影響を評価する。IC 前処理の加速係数は全てのケースにおいて著者らが経験的に用いている 1.05 とした。まず、表4にフィルインのレベルに応じた前処理行列の非ゼロ要素数を示す。この非ゼロ要素数は周波数に関わらず一定である。今回のケースにおいて、IC(0.5)によりIC(1)に比べ前処理行列の非ゼロ要素数を約26%削減した。

表4 各前処理手法による前処理行列の非ゼロ要素数の変化(高周波電磁場問題の行列)

サイズ	IC(0)	IC(0.5)	IC(1)
134,573	1,129,211	1,550,944	2,094,070

また、収束するまでの反復回数を図 5 に、その時の計算時間を図 6 に示す。

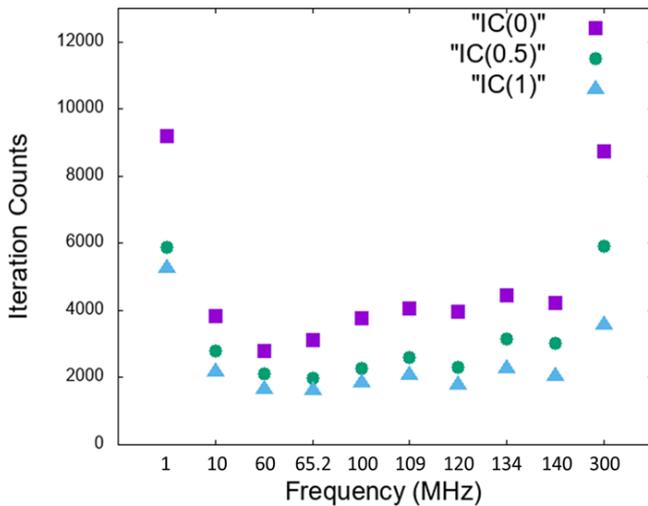


図 5 高周波電磁場問題に対する反復回数

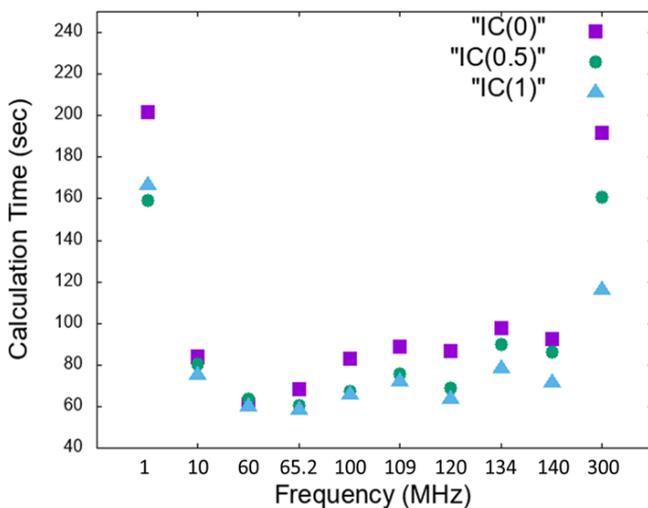


図 6 高周波電磁場問題に対する計算時間

図 5 より、フィルインのレベルを上げることで周波数に関係なく収束性が改善しており、特に 1MHz と 300MHz のケースにおいて大きな削減効果があることが分かる。

また、図 6 より特に高周波帯においては IC(1)が計算時間の観点から有効であるということが分かった。一方で、10MHz~120MHz のケースにおいて今回提案した IC(0.5)は IC(1)に比べて計算時間を同程度に保ちつつ使用メモリ量の削減に成功している。さらに 1MHz の場合においては計算時間の観点からも有効であった。

4. 結言

今回はデータベース上の対称行列および高周波電磁場解析で出てくる複素対称行列に対して IC 前処理の新しいフィルインレベルを提案し、フィルインのレベルを変えた反復法を実装して性能評価を行った。その結果、以下の知見が得られた。

- ・ フィルインのレベルを上げることで前処理行列の非ゼロ要素数は増加し、反復法の収束性は改善する。
- ・ 今回提案した IC(0.5)は IC(1)に比べ非ゼロ要素数の増加を抑えている。
- ・ データベース上の行列に対しては計算時間の観点から最適なフィルインレベルは異なる。
- ・ 高周波電磁場問題についてはほぼすべてのケースにおいてフィルインが有効
- ・ 特に高周波帯においては IC(1)が優位に立つが、10MHz~120MHz のケースにおいて IC(0.5)は IC(1)に比べて計算時間を同程度に保ちつつ使用メモリ量の削減に成功している。
- ・ 1MHz のケースにおいては計算時間の観点からも IC(0.5)が有効

今後はさらに大規模な問題に対して実行し、最適なフィルインレベルの調査や提案システムの有効性を検討していく。

参考文献

- [1] 杉本振一郎, 金山寛, 浅川修二, 吉村忍. 階層型領域分割法を用いた 4,400 万複素自由度の時間調和渦電流解析. 日本計算工学会論文集, 2007, Paper No.20070027.
- [2] 武居周, 吉村忍, 金山寛. 階層型領域分割法による高周波電磁場の大規模解析. 電気学会論文誌 A, 2008, 128-A, 9, p. 591-597.
- [3] van der Vorst, H.A. and Melissen, J.B.M.. A Petrov-Galerkin type method for solving $Ax=b$ and where A is symmetric complex. IEEE Trans. Magn., 1990, 26, p. 706-708.
- [4] Sogabe, T. and Zhang, S.L.. A COCR method for solving complex symmetric linear systems. J. Comput, 2007, Appl. Math., 199-2, p. 297-303.
- [5] 荻野正雄, 武居周, 野津裕史, 杉本振一郎, 吉村忍. 高周波電磁界シミュレーションにおける複素対称行列向けの反復解法の性能評価. 日本計算工学会論文集, 2014, Paper No. 20140017.
- [6] Meijerink J. A. and van der Vorst H. A.. An Iterative Solution Method for Linear Systems of Which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-Matrix. Mathematics of Computation, 1977, Vol. 31, No. 137, p. 148-162.
- [7] Fujiwara, K., Nakata, T. and Fusayasu, H.. Acceleration of Convergence Characteristic of the ICCG Method. IEEE Trans. Magn., 1993, Vol. 29, No. 2, p. 1958-1961.
- [8] Takada A., Noguchi, S. and Igarashi, H.. A New Acceleration Factor Decision Method for ICCG Method Based on Condition Number. IEEE Trans. Magn., 2012, Vol. 48, No. 2, p. 519-522.
- [9] Kitao, J., Takahashi, Y., Fujiwara, K., Mifune, T., and Iwashita T.. Automatic Determination of Acceleration Factor Based on Residual and Functional in Shifted ICCG Method for 3-D Electromagnetic Field Analyses. IEEE Trans. Magn., 2013, Vol.

49, p. 1741-1744.

- [10] 榊井晃基, 荻野正雄. 複素対称線形方程式における多倍長精度共役直交共役勾配法の性能評価. 日本計算工学会論文集, 2018, Paper No, 20180007.
- [11] Saad, Y. A Dual Threshold Incomplete LU Factorization. Numerical Linear Algebra with Applications, 1994, Vol. 1, p. 387-4-2.
- [12] Bollhoefer, M.. A Robust ILU with Pivoting based on Monitoring the Growth of the Inverse Factors. Linear Algebra and Its Applications, 2001, Vol. 338, p. 201-218.
- [13] Saad, Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003, Philadelphia.