

大規模電磁場問題に対する反復法における フィルインと加速係数の性能評価

梶井晃基¹ 伊野文彦¹

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。反復法の収束性を改善させるには前処理手法が重要となり、対称行列においては IC 分解前処理が広く使われている。一方で、その研究例の多くはフィルインを付さない IC(0)前処理であり、IC(1)以上を用いた反復法やその加速係数に関する研究例は少ない。また、具体的な実装方法を示した文献等もない。そこで、今回は高周波電磁場問題を対象として、IC(0), IC(1), IC(2)前処理の反復法を実装したのち、それぞれにおける加速係数の影響を調査し、その性能評価について報告する。

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

がん治療などで使われるハイパーサーミアの人体への影響[1]や電車内における携帯電話着信の影響[2]のシミュレーションにおいては辺要素有限要素法による時間調和渦電流解析[3]や高周波電磁場解析[4]が用いられる。これらから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。この線形方程式の求解は解析の計算時間の大部分を占めるため、シミュレーションが実行時間内に終わらない場合がある。そのため、この反復法に対する高速化は重要であり、需要が高まっている。

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[5]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[6]や最小残差(MINimal RESidual: MINRES)法アルゴリズムに基づいた MINRES-like_CS 法[7]や COMINRES-QLP 法[8]など新たな反復法の開発も進んできている。

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[9]が広く用いられている。この加速係数は反復回数に大きく影響する重要なパラメータであり、通常 1.0 よりも少し大きな値が用いられる。最適な加速係数の値の自動決定に

関する研究も行われているが[10][11]、大規模解析でも実用的な手法は確立されていない。

また、IC 前処理の多くは前処理行列と係数行列の非ゼロ要素位置が同じ、すなわちフィルインを行わない IC(0)が用いられている。フィルインを付した IC(p)前処理[12](pがフィルインレベル)に関する研究例はあるものの、複数のフィルインレベルと計算時間について詳細に調査した文献はなく、実装方法を示した論文もない。特に電磁場解析における事例は無く、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。

疎行列向け反復法ライブラリのうち広く使われているものとしては、Lis[13]や PETSc[14]などがあげられ、特に Lis では 10 種類の前処理を選択できる。Lis には非対称行列向けの ILU(p)[15]前処理が実装されているが、対称行列向けの IC(p)前処理は実装されていない。さらに、実際の実装手法について示した論文も無いため、ライブラリを利用する人自らが IC(p)前処理について手法を考案、実装しなければいけない。

そこで本研究では反復法の計算時間削減を目的として、フィルインを付した IC 前処理の実装方法を示す。また実装の後、数値実験として、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。これにより、高周波電磁場解析向けの最適なフィルインレベルや加速係数について調査し、有効性を検討する。

2. 前処理手法

IC 前処理は対称行列 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 $A \equiv LDL^T$ と分解する手法である。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

¹ 大阪大学大学院情報科学研究科
Graduate School of Information Science and Technology, Osaka University

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し、 $p = 0$ 、すなわち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が、IC(1)以上ではフィルインが発生し、係数行列ではゼロであった要素位置に前処理行列には非ゼロの値が入ることになる。まず式(1)に IC 分解における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。行列の自由度を N としたとき、 i を 1 から N まで増大させ、その中で j を 1 から i まで増大させる。

このループが終了したのちに、IC(1)の場合、 $Level_{ij}=1$ となっている要素位置を新しく前処理行列の非ゼロ要素として追加する。

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

しかし、この手法を式(1)の計算順序通りに実装した場合、行列の全要素位置（対称行列の下三角部分全て）について調べるので、問題が大規模になるにつれ前処理計算にかかる時間も増大する。そこで、COO (COOrdinate) 形式を用いて計算量の削減を目的とした IC(p)前処理手法を図 1 に示す。この手法では、行列を列方向に見ていき、その列に含まれる非ゼロ要素位置から追加の非ゼロ要素位置を計算するものとなっている。図 1 のように m を 1 から N まで増大させたとき、 $(i, m), (j, m), (k, m), (l, m)$ に非ゼロ要素が含まれている場合、新たに $(j, i), (k, i), (k, j), (l, i), (l, j), (l, k)$ に非ゼロを追加していく。この手法の場合計算量のオーダは係数行列の非ゼロ要素数に依存するため、疎行列においては式(1)そのものの手法に比べ計算量を削減できる。

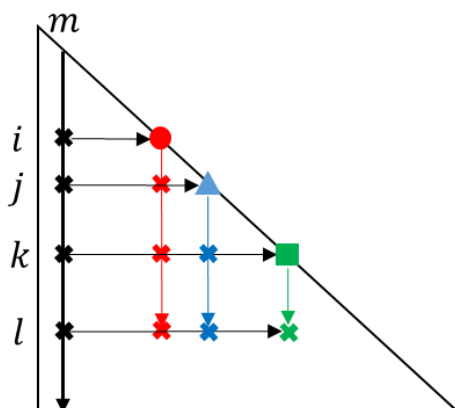


図 1 IC(1)前処理による非ゼロ要素位置の決定方法

1. CRS 形式の係数行列を COO 形式に変換
2. 係数行列の非ゼロ要素を j の要素で昇順にソート
3. j の要素でソートしたうえで i の要素も昇順にソート
4. 図 1 の手法により前処理行列の探索・追加
5. 追加要素位置の重複部分を削除
6. 前処理行列の非ゼロ要素を i の要素で昇順にソート
7. i の要素でソートしたうえで j の要素も昇順にソート
8. 生成した COO 形式の前処理行列を CRS 形式に変換

図 2 IC(1)前処理の非ゼロ要素位置の計算手法

```

 $L_{0,0} := 1.0$ 
 $D_0 := A_{0,0} \times \alpha$ 
for  $i = 1, 2, 3, \dots, n - 1$ 
  for  $j = 0, 1, 2, \dots, i$ 
    if ( $Level_{i,j} \geq p$ ) then
      if ( $i = j$ ) then
         $L_{i,i} := 1.0$ 
      else
         $L_{i,j} := (A_{i,j} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{i,k} D_k L_{j,k}) / d_{jj}$ 
      else
         $L_{i,j} := -\sum_{k=1}^{j-1} L_{i,k} D_k L_{j,k} / d_{jj}$ 
    end if
  end for
 $D_i := A_{i,i} \times \alpha - \sum_{k=1}^{i-1} L_{j,k}^2 D_k$ 
end for

```

図 3 IC(p)前処理の計算手法

また、この手法を実現するために今回実装したプログラムの流れを図 2 に示す。ただし、今回は実際の実装を考え、入力は CRS (Compressed Row Storage) 形式の係数行列、出力は CRS 形式の前処理行列となっている。

図 3 に、 $Level_{ij}$ 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示す。ここで、 α は加速係数を表す。このアルゴリズムにおいて例えば $Level_{ij} = 1$ のとき、 $L_{2,3}$ の要素は、IC(0)の時はゼロとして計算されるが、IC(1)以上では非ゼロとして計算される。一般に、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。しかし、非ゼロ要素数は増加するため、前処理行列の計算や反復中の前進・後退代入に伴う計算時間が増加する。つまり、フィルインレベルを上げた時の収束性の改善効果が薄い場合、1 反復当たりの計算量の増加により結果として総計算時間が増大する可能性がある。

そこで、図 1 および図 2 の方法で IC(p)前処理を実装したのち、高周波電磁場問題における反復法について、IC 前処理のフィルインレベルおよび前処理に含まれる加速係数の値を変化させたときの性能を評価する。これにより、高周波電磁場問題に最適なフィルインレベルや加速係数を調査すると同時に反復法の計算時間削減を目指す。

3. 数値実験

3.1 実行環境

数値実験に用いた計算機は Intel Core i9-9900K 3.60GHz の CPU と 32 GB のメモリで構成されており、使用言語は C 言語、コンパイラは gcc 10.2.0、コンパイル時の最適化のオプションは-O3 とした。

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 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 は透磁率、 ϵ_0 は真空の誘電率、 ϵ' は比誘電率、 ω は単一角周波数、 i は虚数単位、 J 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。

テスト問題として、TEAM Workshop Problem 29[16]として知られる医療用リエンテ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。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 σ は 0.52 (S/m) とした。また、単一角周波数は $\omega = 2\pi f$ とし、周波数 f を 300 (MHz) とした。

今回は未知数 $134,573, 439,176, 979,464, 1,646,787$ の中規模から大規模の問題を構築した。これらの複素対称線形方程式の構築には、ADVENTURE プロジェクト[17]が提供する ADVENTURE_Magnetic を用いる。

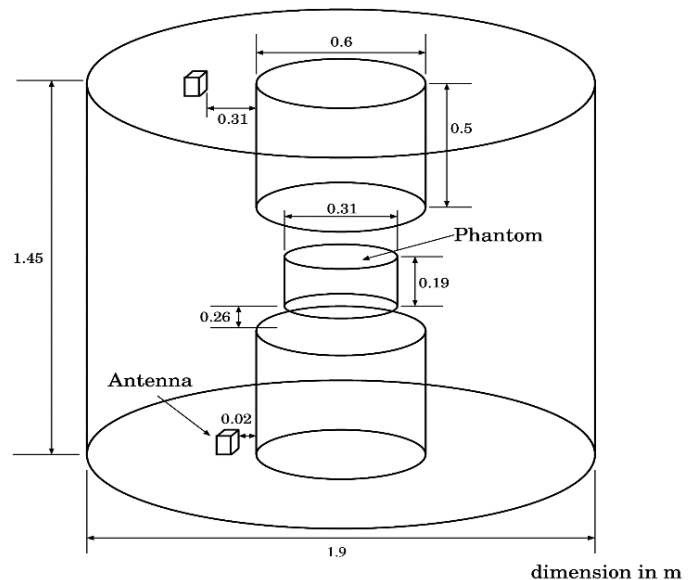


図 4 TEAM Workshop Problem 29 によるテストモデル

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、初期解を $\mathbf{x}^0 = \mathbf{0}$ 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。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。今回はフィルインレベル p を $0, 1, 2$ とし、IC 前処理に含まれる加速係数 α を $1.03 \sim 1.15$ としたときの性能を評価した。まず、表 1 にフィルインのレベルに応じた前処理行列 L の非ゼロ要素数を示す。ただし、 N は問題のサイズ (行列の自由度) である。表 1 より、フィルインのレベルを 1 つ上げるにつれ問題のサイズによらず前処理行列の非ゼロ要素数は 2~3 倍に増加することが分かった。

表 1 前処理手法適用後の前処理行列の非ゼロ要素数

| N | $p = 0$ | $p = 1$ | $p = 2$ |
|-----------|------------|------------|-------------|
| 134,573 | 1,129,211 | 2,094,069 | 4,680,923 |
| 439,176 | 3,737,923 | 9,853,213 | 27,919,791 |
| 979,464 | 8,387,104 | 22,268,604 | 63,799,785 |
| 1,646,787 | 14,148,990 | 37,688,670 | 108,516,995 |

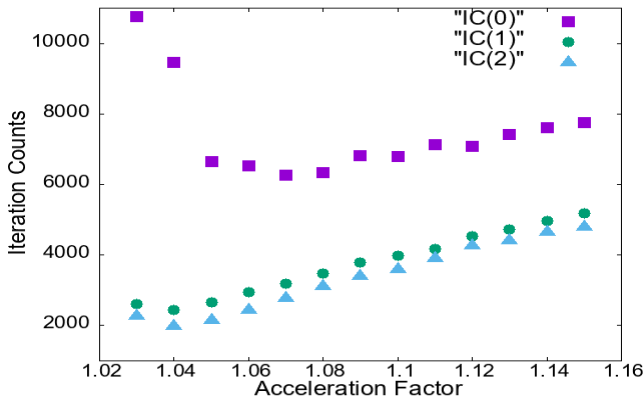


図 5 自由度 134,573 の行列に対する反復回数

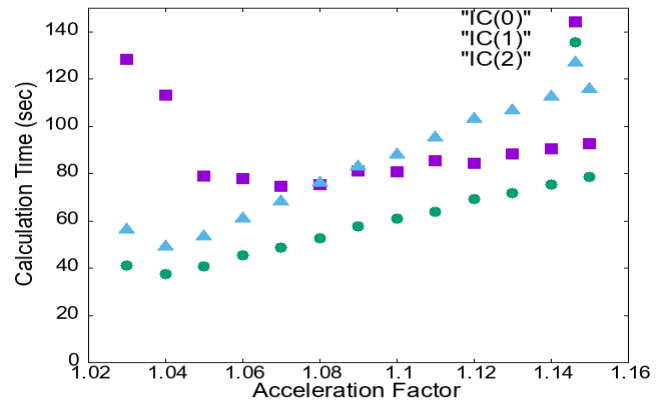


図 6 自由度 134,573 の行列に対する計算時間

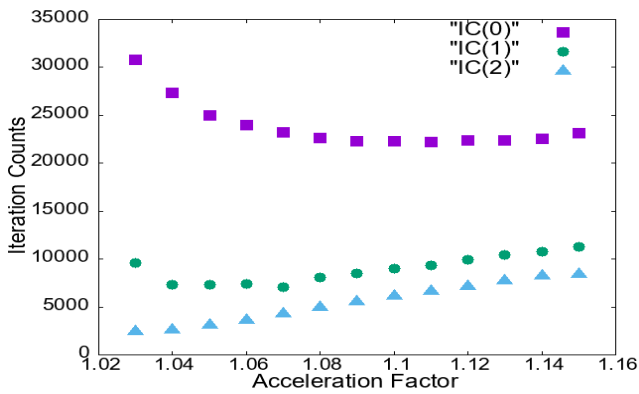


図 7 自由度 439,176 の行列に対する反復回数

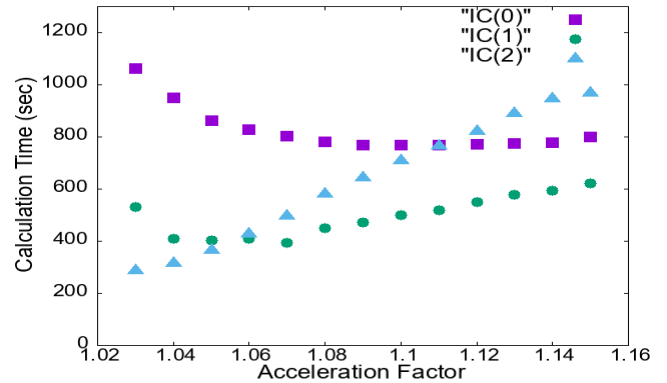


図 8 自由度 439,176 の行列に対する計算時間

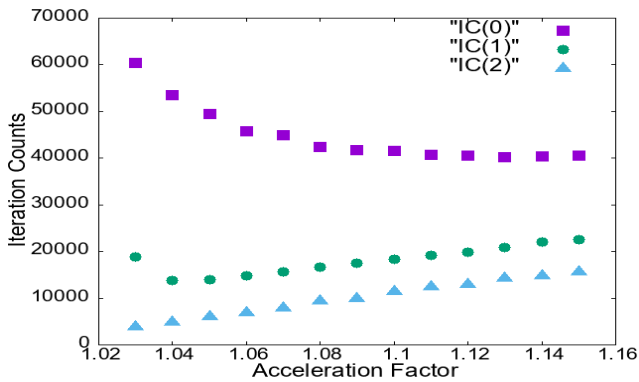


図 9 自由度 979,464 の行列に対する反復回数

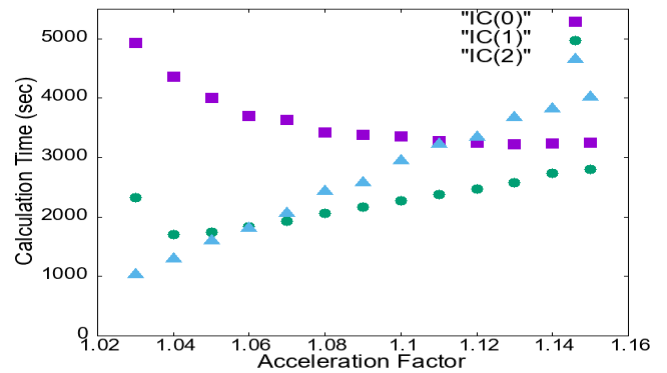


図 10 自由度 979,464 の行列に対する計算時間

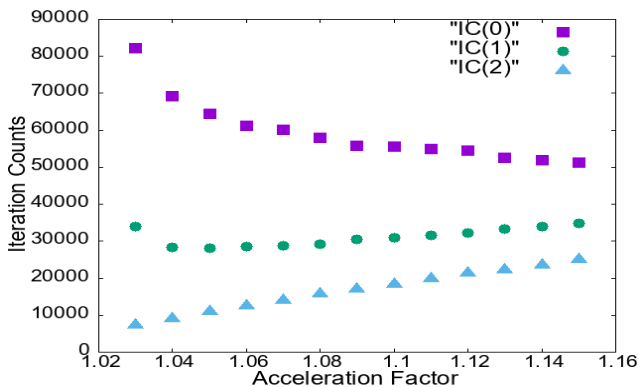


図 11 自由度 1,646,787 の行列に対する反復回数

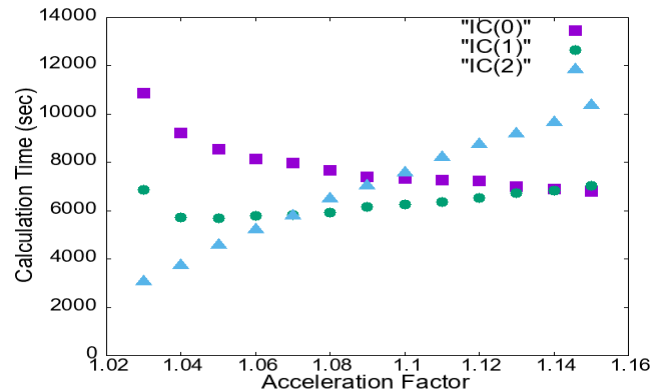


図 12 自由度 1,646,787 の行列に対する計算時間

表2 最適な加速係数を選択した時の性能評価

| N | p = 0 | | | p = 1 | | | p = 2 | | |
|-----------|-------|--------|---------|-------|--------|---------|-------|-------|---------|
| | 加速係数 | 反復回数 | 時間(sec) | 加速係数 | 反復回数 | 時間(sec) | 加速係数 | 反復回数 | 時間(sec) |
| 134,573 | 1.07 | 6,267 | 75 | 1.04 | 2,442 | 37 | 1.04 | 1,975 | 49 |
| 439,176 | 1.11 | 22,222 | 768 | 1.07 | 7,101 | 394 | 1.03 | 2,405 | 289 |
| 979,464 | 1.13 | 40,259 | 3,231 | 1.04 | 13,778 | 1,709 | 1.03 | 3,863 | 1,026 |
| 1,646,787 | 1.15 | 51,233 | 6,804 | 1.05 | 28,182 | 5,695 | 1.03 | 7,383 | 3,074 |

次に、反復法を実行し収束するまでの反復回数およびその計算時間を図5～図12に示す。さらに、4つのケースにおいて最速であった場合の加速係数とそのときの結果を表2に示す。ただし、計算時間の単位は秒である。

図5～12より、フィルインレベルを上げることで問題のサイズや加速係数に関係なく収束性が改善しており、電磁場解析の問題において有効であるということが示された。特にどのケースにおいてもフィルインレベルを0から1に上げたときに大きな収束性の改善効果があることが分かった。また、問題サイズが134,573以外の問題においては、フィルインレベルを1から2に上げた時にも大きな収束性の改善効果が見られた。

一方で、計算時間の観点からは、ほぼすべてのケースにおいてフィルインを付したIC前処理の時間がフィルインを付さないIC(0)の時よりも計算時間が短いことが分かった。また、最適な加速係数を選択した場合においては問題のサイズ134,573の中規模問題ではIC(1)が最適な手法であったが、それ以外の大規模問題においてはIC(2)が最適な前処理手法であることが分かった。これは、問題が大規模になるにつれて係数行列の条件数が高くなり収束性が悪くなる(=反復回数が増大する)ため、フィルインレベルを上げたことによる収束性の改善効果がより大きくなったためだと考えられる。

また、表2より、問題のサイズによる最適な加速係数の値はIC(0)では問題のサイズが大きくなるにつれ最適な値も大きくなったが、IC(1)では1.05付近、IC(2)では1.03付近と一定の値となることも分かった。さらに、図6, 8, 10, 12より、IC(2)は加速係数によってはIC(0), IC(1), IC(2)の中で最も時間がかかる場合があるため、加速係数の値に注意する必要がある。

4. 結言

今回は高周波電磁場解析で出てくる複素対称行列に対してIC(p)前処理の計算手法を提案し、フィルインのレベルを変えた反復法を実装して性能を評価した。その結果、以下の知見が得られた。

- ・ フィルインを付したIC前処理により従来のIC(0)前処理に比べ計算時間の削減に成功した。

- ・ 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。
- ・ 高周波電磁場問題についてはすべてのケースにおいてフィルインが有効。
- ・ 中規模問題に対しては計算時間の観点からIC(1)が優位に立つが、大規模問題に対してはIC(2)が優位に立つ。
- ・ IC(2)を用いる場合は加速係数の値に注意する必要がある。

今後は大規模な問題や、周波数や導電率を変えた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。さらに、他分野の問題にも適用することで、汎用性についても調査していく。

謝辞

本研究の一部はJSPS科研費JP19J12838の支援を受けたものである。

参考文献

- [1] 武居周, 室谷浩平, 吉村忍, 金山寛. 数値人体モデルを用いたマイクロ波帯域の有限要素電磁界解析. 日本シミュレーション学会論文誌, 2012, Vol.4, No.3, p.81-95.
- [2] Takei, A., Yoshimura, S., and Kanayama, H., "Large-Scale Parallel Finite Element Analyses of High Frequency Electromagnetic Field in Computer Trains," CMES: Computer Modeling in Engineering & Sciences, 2008, Vol.31, No.1, p.13-24.
- [3] 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.
- [4] 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.
- [5] 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.
- [6] 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.
- [7] 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.
- [8] 劉麗君, 関谷和明, 荻野正雄, 梶井晃基.

複素対称線形システム向けの COMINRES-QLP 法.
電気学会論文誌 B, 2020, 140-12, p.832-841.

- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] 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.
- [13] 反復解法ライブラリ Lis, (<https://www.ssisc.org/lis/>)
- [14] PETSc, (<https://www.mcs.anl.gov/petsc/>)
- [15] Saad, Y.. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003, Philadelphia.
- [16] Y. Kanai, "Description of TEAM Workshop Problem 29", Whole body cavity resonator, TEAM Workshop in Tucson, 1998.
- [17] ADVENTURE PROJECT, (<http://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/>)