高周波電磁場解析における 反復法の計算精度の切り替えについて

桝井 晃基[1,a)]　伊野 文彦[1,b)]

概要：大規模高周波電磁場解析では，その特性から反復法が用いられるが，問題が複素数となるため，COCG 法などの Krylov 部分空間法が用いられる．これらの反復法は，丸め誤差の影響を受けやすく，収束に時間がかかるといったことが問題がある．この問題に対し，高精度演算を用いることでその影響を小さくし，反復回数を削減できることが知られているが，高精度演算そのものの演算コストは高いため，倍精度演算で解ける問題に対して全ての計算を高精度演算で実行した場合，総計算時間を短縮できるケースは多くはない．そこで，本研究では反復法の途中で精度を変更する方法について検討し，その混合型の反復法を実装した上でその性能を評価する．

キーワード：高周波電磁場解析，反復法，複素数演算，高精度演算，混合精度演算

1. 緒言

電車内での携帯電話着信による周囲への影響の解析や，がん治療の一種であるハイパーサーミアのシミュレーションのために，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] が用いられる．この解析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．

よって，電磁界シミュレーションを高効率化するためには大規模な複素対称線形方程式に有効な反復法が必要となる．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] や COMINRES-QLP 法 [6] など新たな反復法の開発も進んできている．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知られている．

これまで著者らは倍々精度演算 [7] に基づく複素対称線形方程式向け反復解法システムを開発してきており，複素数における高精度演算の基本的な性能を評価し，反復法の収束性を改善することで，安定的に解を求めることに成功した [8] が，全てを倍精度演算で計算した時と比較して計算時間を短縮したケースは少なかった．これに対し，倍精度と倍々精度の混合精度演算による反復法により計算時間の短縮にも成功した [9]．

一方，これらの研究は全て，反復法の計算中で使う変数の計算精度は不変である．計算時間の削減を目的として計算の途中で精度を変えた反復法を実装した研究例 [10] もあるが，研究例は少なく，特に複素数問題に適用したときの研究例は無い．

そこで，本稿では反復法で計算精度を変更する手法を考案および実装し，高周波電磁場に対して適用したときについて報告する．

2. 高精度演算

シミュレーションの数値計算においては，IEEE754 準拠の倍精度浮動小数点数 (binary64) が広く使われており，10 進数にすると約 16 桁程度の精度である．倍精度数では精度が不足する場合には，倍精度演算よりも高精度である多倍長精度演算が必要となることがある．多倍長精度演算にはいくつか種類があり，4 倍精度，8 倍精度などといった，固定精度型と，決められた範囲の中で精度を決めるこ

1 大阪大学 大学院情報科学研究科
1-5, Yamadaoka, Suita, Osaka 565–0871, Japan
a) masui@ist.osaka-u.ac.jp
b) ino@ist.osaka-u.ac.jp

とができる任意精度型がある．もちろん，高い精度の変数を用いればその分計算誤差の小さい結果を得ることができるが，その分計算コストが高くなる．一方で，Krylov 部分空間法などの反復法のほとんどの問題に対しても倍精度演算よりも少し高精度な倍々精度演算（疑似 4 倍精度演算）の精度で充分であることが多い．倍々精度演算は倍精度演算数を 2 つ用いて上位ビットと下位ビットに割り当てる方法であり，4 倍精度より少しだけ精度は劣るものの高速な計算を実現している．本研究で対象としている問題は複素数問題であるため，この倍々精度演算を実部と虚部に割り当てることで，複素数の倍々精度演算を実装している [8].

3. 関連研究

小武守らによる混合型反復法 [10] について述べる．この論文では反復法の計算精度を変える方法として 2 つの手法を提案している．

- SWITCH

SWITCH は途中まで反復法を倍精度で計算し，残差ノルムが本来の収束判定（τ）よりも緩い，ある判定（τ'）を満たしたときに，k 回反復させて得た解ベクトル x^k 以外を初期化して，その後初期解を x^k としてまた新たに倍々精度演算で反復を行って最終的な収束解 x^n を得る手法である．

- PERIODIC

PERIODIC は反復法を 10 回中 1 回倍々精度で，それ以外は倍精度で行うといったように一定間隔で精度を切り替えるものである．変数自体は全て倍々精度で作成し，倍精度から倍々精度の切り替えは特に特定の操作は行わず，倍々精度から倍精度に切り替える際は下位ビットを 0 クリアする．

4. 提案手法

次に，本研究で実装した提案手法を**図 1** に示す．本稿で扱う反復法は丸め誤差の影響を受けやすく，さらに反復によりその誤差が蓄積していくため，反復法の序盤での影響が反復法の計算全体に強く及ぶ恐れがある．提案手法はこれを抑制するために，反復法の最初は倍々精度で反復法を実行し，あるタイミングで倍精度に切り替えて収束解を得る手法である．

また，ここでは解ベクトル以外の変数も全て倍精度数に変換する（初期化は行わない．）変換する際は，PRIODIC の手法と同様に，下位ビットを 0 として倍精度にキャストしている．

ただし，入力は係数行列 A，右辺ベクトル $\boldsymbol{b}$ および初期解 $\boldsymbol{x^0}$ であり，出力は収束解 $\boldsymbol{x^n}$ である．τ は最終的な収束解を得るための収束判定，τ' 倍々精度から倍精度に切り替えるための収束判定を表す．また，(x, y) はその複素内積 $\Sigma_i \bar{x_i} y_i$ を表し，変数右下の添え字は計算精度（D なら倍精度，DD なら倍々精度）を表す．

calculate preconditioning matrix M_{DD}^{-1}
initial guess x_{DD}^0
$\boldsymbol{r}_{DD}^{0} = \boldsymbol{b}_{DD} - \boldsymbol{A}_{DD}\boldsymbol{x}_{DD}^{0}$
$\boldsymbol{z}_{DD}^{0} = \boldsymbol{M}_{DD}^{-1}\boldsymbol{r}_{DD}^{0}$
$\boldsymbol{p}_{DD}^{0} = \boldsymbol{z}_{DD}^{0}$
for $n = 0, 1, 2 ... until \parallel \boldsymbol{r}_{DD}^{n} \parallel / \parallel \boldsymbol{r}_{DD}^{0} \parallel \leq \tau'$
  $\boldsymbol{q}_{DD}^{n} = \boldsymbol{A}_{DD}\boldsymbol{p}_{DD}^{n}$
  $\alpha_{DD}^{n} = (\boldsymbol{r}_{DD}^{\bar{n}}, \boldsymbol{z}_{DD}^{n})/(\boldsymbol{p}_{DD}^{\bar{n}}, \boldsymbol{q}_{DD}^{n})$
  $\boldsymbol{x}_{DD}^{n+1} = \boldsymbol{x}_{DD}^{n} + \alpha_{DD}^{n}\boldsymbol{p}_{DD}^{n}$
  $\boldsymbol{r}_{DD}^{n+1} = \boldsymbol{r}_{DD}^{n} - \alpha_{DD}^{n}\boldsymbol{q}_{DD}^{n}$
  $\boldsymbol{z}_{DD}^{n+1} = \boldsymbol{M}_{DD}^{-1}\boldsymbol{r}_{DD}^{n+1}$
  $\beta_{DD}^{n} = (\boldsymbol{r}_{DD}^{\overline{n+1}}, \boldsymbol{z}_{DD}^{n+1})/(\boldsymbol{r}_{DD}^{\bar{n}}, \boldsymbol{z}_{DD}^{n})$
  $\boldsymbol{p}_{DD}^{n+1} = \boldsymbol{z}_{DD}^{n} + \beta_{DD}^{n}\boldsymbol{p}_{DD}^{n}$
end for

//Switch from DD precision to double precision

for $k = n, n+1, n+2 ... until \parallel \boldsymbol{r}_{D}^{k} \parallel / \parallel \boldsymbol{r}_{D}^{0} \parallel \leq \tau$
  $\boldsymbol{q}_{D}^{k} = \boldsymbol{A}_{D}\boldsymbol{p}_{D}^{k}$
  $\alpha_{D}^{k} = (\boldsymbol{r}_{D}^{\bar{n}}, \boldsymbol{z}_{D}^{k})/(\boldsymbol{p}_{D}^{\bar{k}}, \boldsymbol{q}_{D}^{k})$
  $\boldsymbol{x}_{D}^{k+1} = \boldsymbol{x}_{D}^{k} + \alpha_{D}^{k}\boldsymbol{p}_{D}^{k}$
  $\boldsymbol{r}_{D}^{k+1} = \boldsymbol{r}_{D}^{k} - \alpha_{D}^{k}\boldsymbol{q}_{D}^{k}$
  $\boldsymbol{z}_{D}^{k+1} = \boldsymbol{M}_{D}^{-1}\boldsymbol{r}_{D}^{k+1}$
  $\beta_{D}^{k} = (\boldsymbol{r}_{D}^{\overline{k+1}}, \boldsymbol{z}_{D}^{k+1})/(\boldsymbol{r}_{D}^{\bar{k}}, \boldsymbol{z}_{D}^{k})$
  $\boldsymbol{p}_{D}^{k+1} = \boldsymbol{z}_{D}^{k} + \beta_{D}^{k}\boldsymbol{p}_{D}^{k}$
end for

図 1: 本稿で提案した混合型反復法

先行研究においては，SWITCH の方が計算時間の短縮効果が大きかったことから，本研究の数値実験においては先行研究の SWITCH による反復法と提案手法による反復法を実装し，高周波電磁場問題に対して適用したときの性能を評価する．

5. 数値実験

5.1 実行環境

本研究で数値実験に用いた計算機は Intel Core i9-9900K 3.60GHz の CPU と 64GB メモリで構成されており，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 -march=core-avx2 とした．

5.2 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．

$$\int_{\omega} rotE_h \cdot \mu^{-1} rotE_h^* d\Omega - \int_{\omega} (\omega^2 \epsilon' - j\omega\sigma) E \cdot rotE_h^* d\Omega$$
$$= j\omega \int_{\omega} J_h \cdot rotE_h^* d\Omega \quad (1)$$

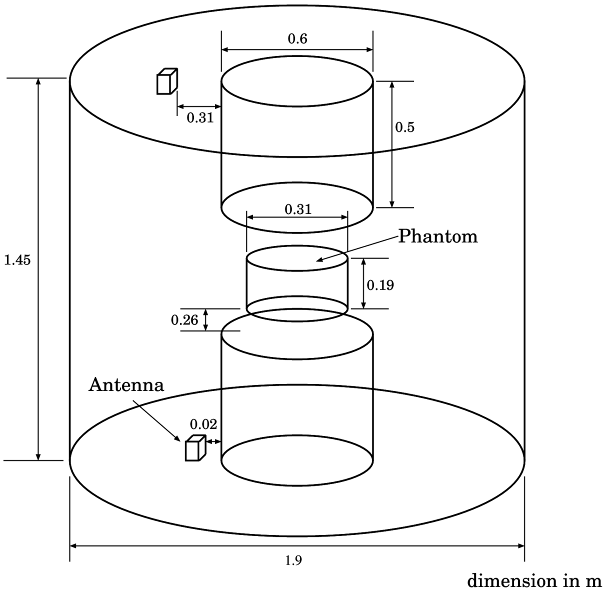


図 2: TEAM Workshop Problem 29 によるテストモデル

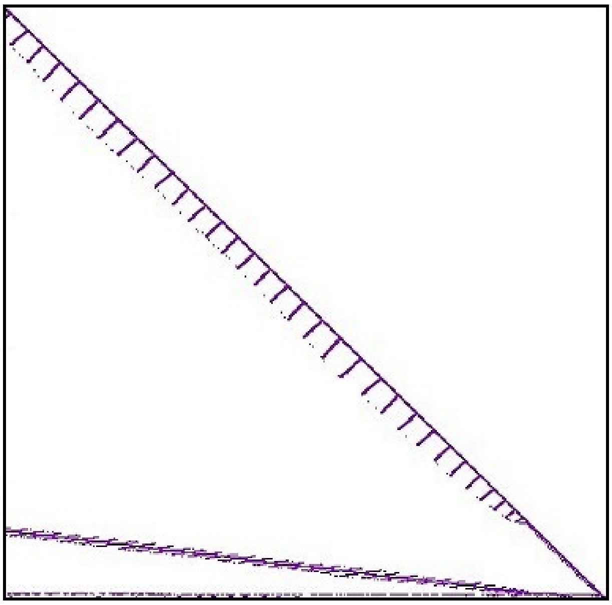


図 3: 高周波電磁場問題の行列形状

ただし，$\mu[H/m]$ は透磁率，$\epsilon_0[F/m]$ は真空の誘電率，ϵ' は比誘電率，$\omega[rad/s]$ 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 (1) 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 [11] 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 2 に形状を示す．なお，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 $1,300[MHz]$ とした時の計算をする．今回は，未知数 160,013, および 439,176 の中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かかわらずそれぞれ 2,527,343, および 7,036,670 である．また，図 3 に行列の形状を示すが，紫色の点が非ゼロ要素の位置を表しており，それ以外の白い部分はゼロ要素である．ただし，この行列は対称行列であるため，下三角の部分のみ描写している．

複素対称線形方程式の構築には，ADVENTURE プロジェクト [12] が提供する ADVENTURE_Magnetic を用いている．

解くべき方程式を $Ax = b$ とし， IC 前処理付き 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 $x^0 = 0$ とする．最終的な収束判定は相対残差ノルム $\| r^n \|_2 / \| r^0 \|_2$ が $\tau \leq 10^{-9}$ となったときとし，精度を切り替える判定を $\tau' = 10^{-1}$ から $\tau' = 10^{-8}$ まで変化させたときの性能を評価した．また，比較のために全て倍精度（double）および倍々精度（DD）で計算したときの結果も示す．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．

5.3 提案手法による性能評価

まず，提案手法の結果を図 4 〜7 に示す．ただし，横軸は精度を倍々精度から倍精度に切り替える判定 τ' を表し，縦軸はそれぞれ反復回数と計算時間を表す．これら全てのケースにおいて，切り替えタイミングが $\tau' = 10^{-1}$〜10^{-4} の場合は反復回数は大きく変わらなかったが、ケースによっては提案手法が倍精度（double）と比べ計算時間を短縮した．また，$\tau' = 10^{-6}$ 以下の場合は，全てを倍々精度（DD）で計算したときと比べ，反復回数の増加は 1〜2 割の増加に抑え，この範囲では約 3 割程度の計算時間の短縮に成功した．提案手法は最大で倍精度と比べ 8.7 %，倍々精度と比べ 62 % 計算時間の削減に成功した．

5.4 SWITCH による性能評価

次に，先行研究の手法 SWITCH の結果を図 8 〜11 に示す．ただし，横軸は提案手法と逆で精度を倍精度から倍々精度に切り替える判定 τ'' を表している．精度を切り替える判定が $\tau'' = 10^{-1} \sim 10^{-3}$ のケースにおいては，数十回以内の反復で倍々精度に切り替わっていた．また，図より，全て倍々精度で計算したとき（DD）に比べ少しでも精度を落とすと反復回数が 10〜20 % 以上増加することが分かった．特に，$\tau'' = 10^{-1}$ のケースにおいては，初めの数回のみ倍精度であったにも関わらず，多くの場合で反復回数が大きく増大した．

また，計算時間の観点で見ると，これらの全てのケースにおいて全て倍精度で計算したとき（double）が最速であった．SWITCH によって部分的に高精度にした場合でも反復回数を大きく削減することが無かったため，この問題においては高速化が望めないということが分かった．しかし，全て倍々精度で計算したとき（DD）の計算時間と途

中で切り替えた時の結果（SWITCH）を見ると，いくつかのケースで SWITCH の手法の方が早くなっている．このことから，倍精度で収束しない他分野の問題においては計算時間を短縮できる可能性がある．また，周波数を変えたことによる結果に顕著な差は見られなかった．

6. 結言

本研究では大規模高周波電磁場解析で出てくる複素対称行列に対して，計算精度を途中で切り替えた反復法を実装し，切り替える判定を変えて性能を評価した．その結果，以下の知見が得られた．

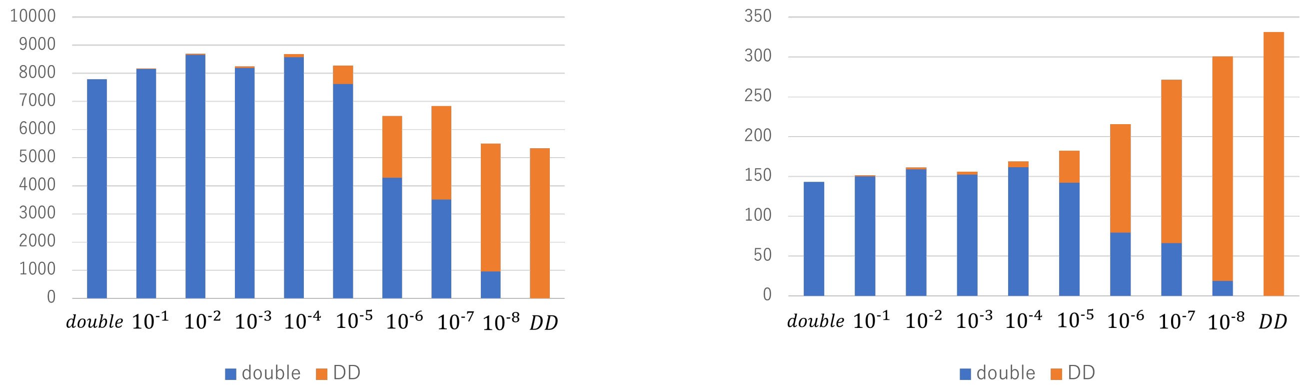
- ほとんどのケースにおいては倍精度演算のみで実行したときが最速であった
- 本研究の問題で SWITCH の手法においては，数回倍精度演算に切り替えるだけでも反復回数が 10 〜 20 % 以上増大した
- 提案手法においては，多くの場合倍精度よりも反復回数を削減し，全てのケースにおいて倍々精度よりも計算時間を削減することに成功した
- ケースによっては提案手法が最速となるケースもあり，最大で倍精度よりも 8.7%，倍々精度よりも 62% 計算時間を短縮した

今後は，他の分野の問題に適用したときの性能を評価していく．また，今回は高精度演算にする場合，全ての変数を倍々精度としていたが，変数の一部だけを倍々精度とする混合精度演算にすることで，さらなる高速化を目指していく．

謝辞　本研究は JSPS 科研費 21K17748 の助成を受けたものである．

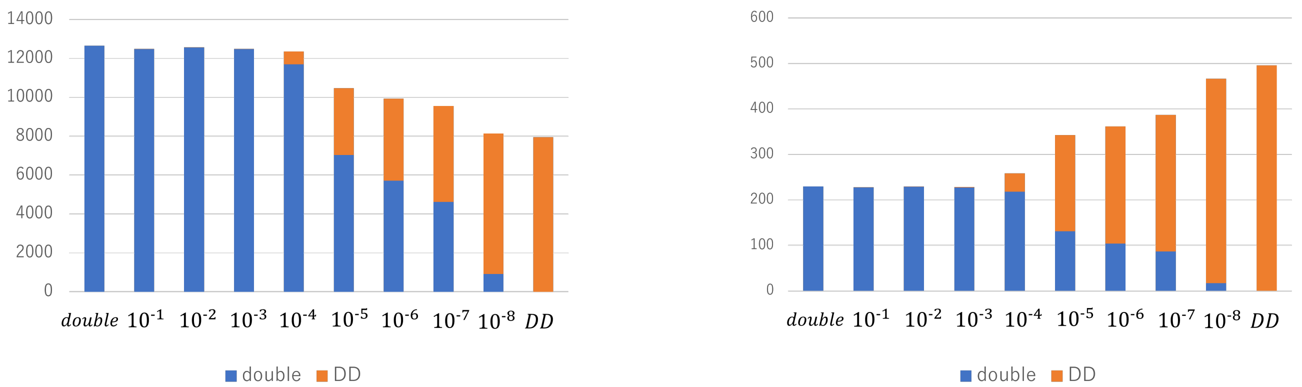
参考文献

[1] 杉本振一郎，金山　寛，淺川修二，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，p. 20070027 (2007).
[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，Vol. 128-A, No. 9, pp. 591–597 (2008).
[3] Van der Vorst, H. and Melissen, J.: A Petrov-Galerkin type method for solving Ax=b and where A is symmetric complex, *Trans. Magn.*, Vol. 26, pp. 706–708 (1990).
[4] Sogabe, T. and Zhang, S.: A COCR method for solving complex symmetric linear systems, *J. Comput.*, Vol. 199-2, pp. 297–303 (2007).
[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, p. 20140017 (2014).
[6] Liu, L., Sekiya, K., Ogino, M. and Masui, K.: A COMINRES-QLP method for solving complex symmetric linear systems, *IEEJ Transactions on Power and Energy*, Vol. 140, No. 12, pp. 832–841 (2021).
[7] Hida, Y., Li, X. and Bailey, D.: Algorithms for quad-double precision floating-point arithmetic, *15th IEEE symposium on Computer Arithmetic*, pp. 155–162 (2001).
[8] 桝井晃基，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，p. 20180007 (2018).
[9] Masui, K. and Ogino, M.: Research on the Convergence of Iterative Method Using Mixed Precision Calculation Solving Complex Symmetric Linear Equation, *IEEE Trans. Magn.*, Vol. 56, No. 1, pp. 1–4 (2020).
[10] 小武守恒，藤井昭宏，長谷川秀彦，西田　晃：反復法ライブラリ向け 4 倍精度演算の実装と SSE2 を用いた高速化，情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム，Vol. 1, No. 1, pp. 73–84 (2008).
[11] Kanai, Y.: Description of TEAM Workshop Problem 29: Whole body cavity resonator, Team workshop in tucson (1998).
[12] Sugimoto, S.: ADVENTURE Project, The University of Tokyo (online), available from ⟨https://adventure.sys.t.u-tokyo.ac.jp/⟩ (accessed 2022-10-28).



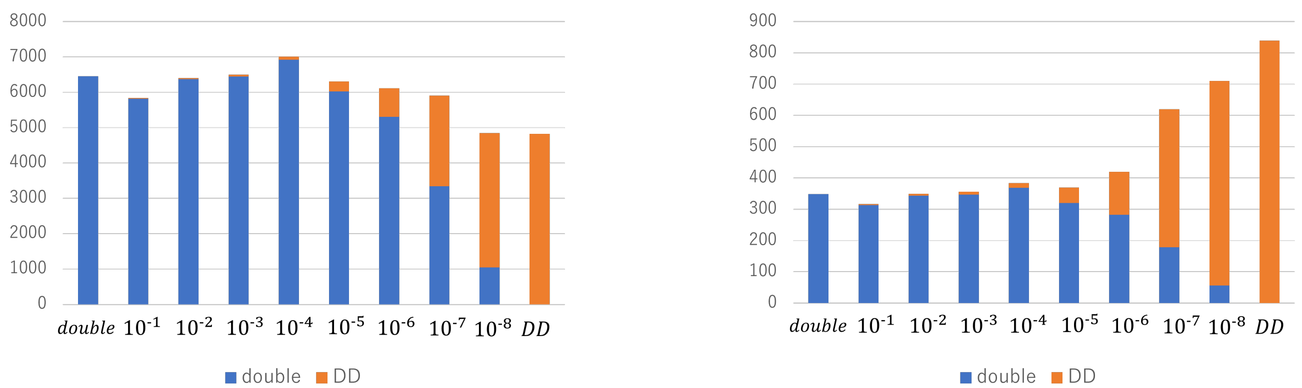
(a) 反復回数　　**(b)** 計算時間

図 4: 自由度 160,013，周波数 1MHz に対する性能評価 (提案手法)



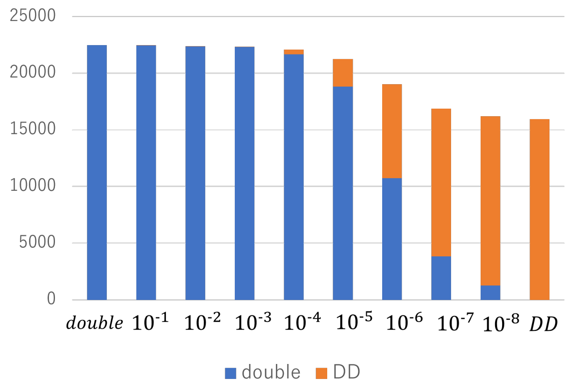
(a) 反復回数　　**(b)** 計算時間

図 5: 自由度 160,013，周波数 300MHz に対する性能評価 (提案手法)

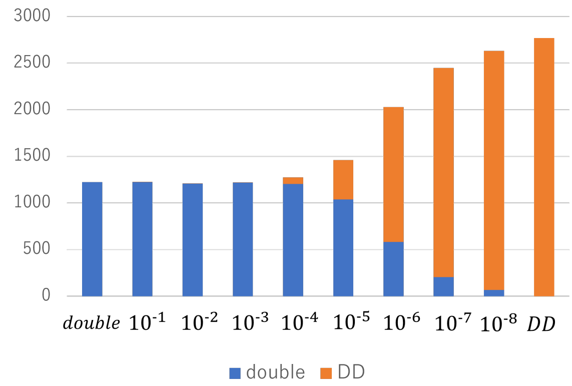


(a) 反復回数　　**(b)** 計算時間

図 6: 自由度 439,176，周波数 1MHz に対する性能評価 (提案手法)

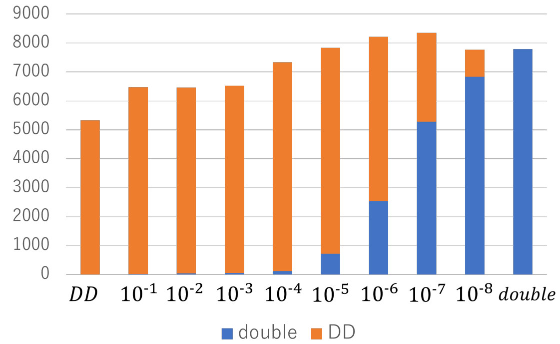


(a) 反復回数

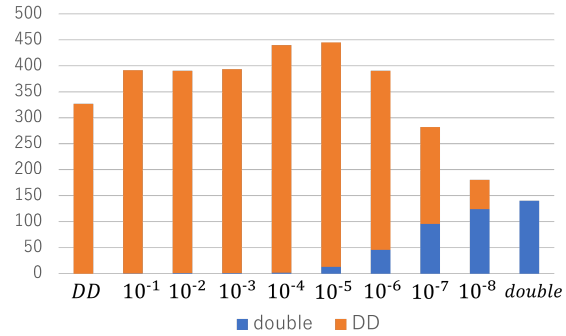


(b) 計算時間

図 7: 自由度 439,176，周波数 300MHz に対する性能評価 (提案手法)

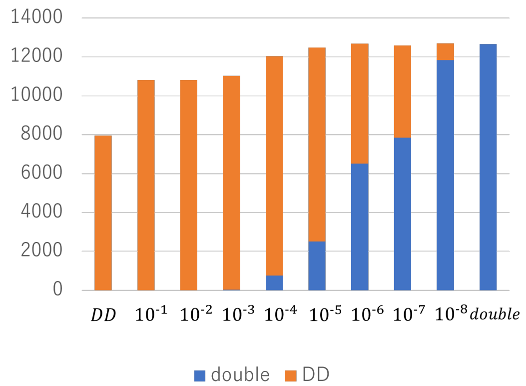


(a) 反復回数

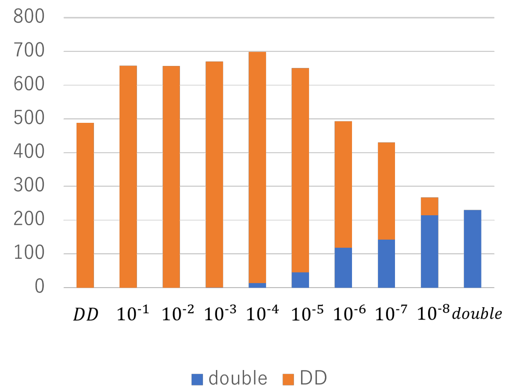


(b) 計算時間

図 8: 自由度 160,013，周波数 1MHz に対する性能評価 (SWITCH)

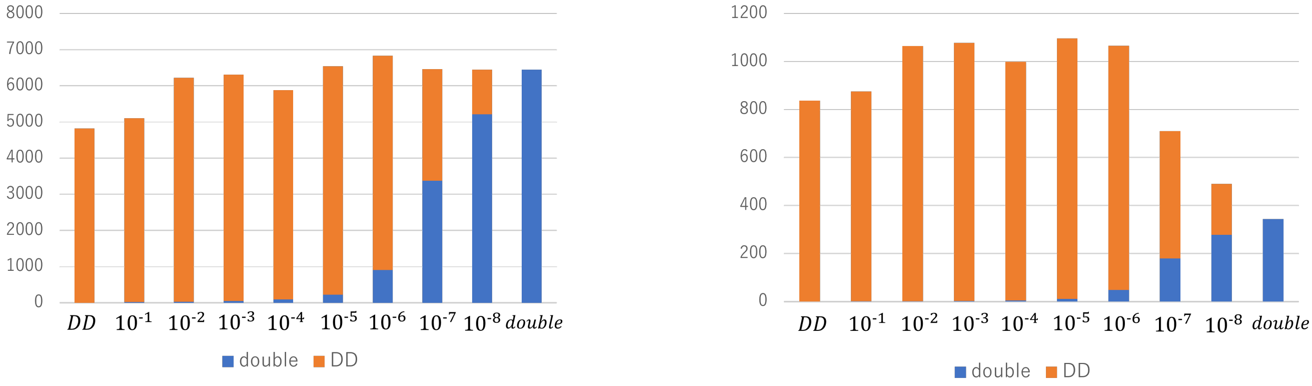


(a) 反復回数



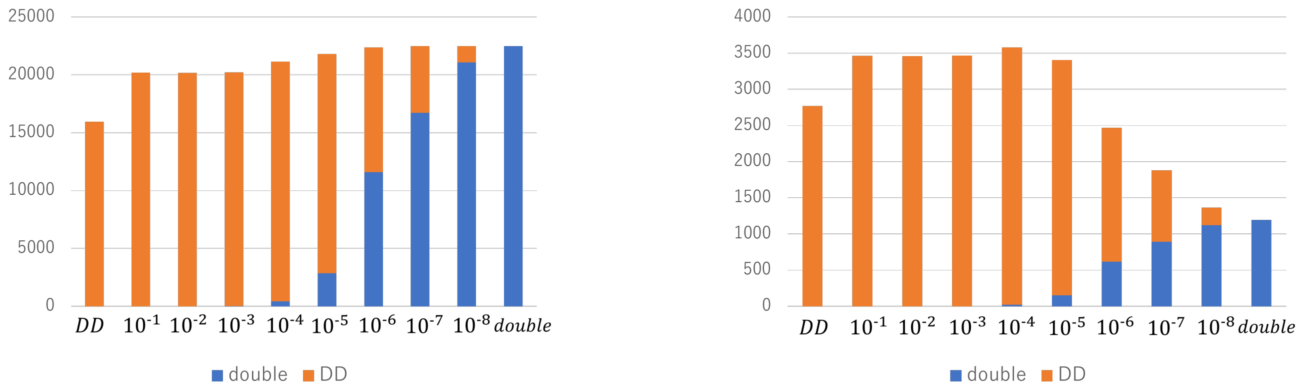
(b) 計算時間

図 9: 自由度 160,013，周波数 300MHz に対する性能評価 (SWITCH)



(a) 反復回数　(b) 計算時間

図 10: 自由度 439,176，周波数 1MHz に対する性能評価 (SWITCH)



(a) 反復回数　(b) 計算時間

図 11: 自由度 439,176，周波数 300MHz に対する性能評価 (SWITCH)