

前処理行列の虚部切り捨てによる 複素対称線形方程式向け反復法的高速化

Accelerating Iterative Methods for Complex Symmetric Linear Systems
by Truncation of the Preconditioner's Imaginary Part

上木脩生¹⁾ 榊井晃基²⁾ 伊野文彦³⁾
Shusei Ueki, Koki Masui and Fumihiko Ino

¹⁾大阪大学 (〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 1-5 E-mail: shu-ueki@ist.osaka-u.ac.jp)

²⁾大阪大学 大学院情報科学研究科 助教 (〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 1-5 E-mail: masui@ist.osaka-u.ac.jp)

³⁾大阪大学 大学院情報科学研究科 教授 (〒 565-0871 大阪府吹田市山田丘 1-5 E-mail: ino@ist.osaka-u.ac.jp)

In large-scale electromagnetic field analysis, the iterative methods with complex number suffer from bad convergence. As problems become larger and more complex, convergence becomes more worse, it sometimes runs out of memory. The calculation time of preconditioning during the iteration often dominates the calculation time of the whole iterative method. The imaginary parts of the preconditioner matrices are typically much smaller than their real parts, and they are believed to have minimal impact on convergence. Therefore, we developed an iterative method to truncate the imaginary part of the preconditioning matrix in order to reduce calculation time and memory. As a result, our proposed method succeeded in reducing the memory usage by up to about 25% and achieving a speedup of up to 1.39 times.

Key Words : *Complex symmetric linear equations, Preconditioning matrix, Large-scale electromagnetic field analysis*

1. はじめに

近年、電磁場を生じる携帯電話や MRI などの電子機器が広く普及している。また、がん治療に用いられるハイパーサーミア用の機器の開発 [1] など電磁場を発生することで知られている。それに伴い、大規模な電磁場による機器同士の干渉、人体への影響を解析する需要が高まっている [2]。電磁場解析では、Maxwell 方程式から導出した偏微分方程式を辺要素有限要素法などの数値解法を用いて求解する手法が広く用いられている。辺要素有限要素法は時間調和渦電流解析 [3] や高周波電磁場解析 [4] などに適用されてきているが、問題規模や複雑さによっては解析に数か月以上を要することもあるため、実用時間内に解析を終えることが求められている。また、大規模電磁場解析における係数行列は行および列数が 100 万を超えることもあり、メモリ不足問題の解消も求められている。

解析の手順は、入力行列の生成、複素対称線形方程式の求解、数値の可視化などのように分類できる。とりわけ複素対称線形方程式の求解は解析時間の大部分を占めており、解析システム全体的高速化には線形方程式の求解を高速化することが肝要である。線形方程式の求解方法は直接法と反復法に分類できる。大規模電磁場解析では係数行列が大規模な疎行列となるため、使用メモリ量、計算時間の点で反復法が主に用いられている。反復法では Krylov 部分空間法の一つである CG 法 (Conjugate Gradient) 法が代表的である。また、電磁場解析であらわれる複素数問題に拡張した COCG (Conjugate Orthogonal Conjugate Gradient) 法 [5] が広く用いられている。

COCG 法は丸め誤差の影響を受けるため、収束性が悪いことが知られている。また、電磁場解析が大規模になるにつれてさらに収束性は悪化する。そのため、収束性の改善を目的に前処理を適用することが一般的である。特に、不完全 Cholesky (IC) 分解 [6]、SSOR 前処理 [7]、対角スケーリング前処理 [8] が広く用いられている。

これらの前処理を施すことによって反復法の収束性が改善する一方で、1 反復当たりの計算時間は増大する。特に、IC 分解前処理や SSOR 前処理では前処理計算が反復法全体にかかる計算時間の大部分を占めることも多い。

前処理計算では、前処理行列が入力行列として与えられる。文献 [4] で示されるような大規模電磁場解析問題では、係数行列は複素数の疎行列となるが、その非ゼロ要素のうち、大部分の虚部はゼロであることが多く、その前処理行列も同様の傾向がみられることが多い。しかし、現状では前処理行列は複素行列としてメモリに格納されているため、大部分で 0 の乗算を計算しており、余分なメモリ領域を確保している。

そこで本研究では、反復法にかかる計算時間の大部分を占める前処理計算の計算コストと使用メモリ量の削減を目的として、前処理行列の虚部を切り捨てて実数へと変換した前処理手法を提案する。

表-1 虚部の大きさの割合 ($\times 10^{-5}$)

行列	前処理		
	IC	SSOR	対角スケーリング
S	7.88	9.47	9.51
M	3.11	2.50	2.51
L	1.47	1.28	1.28

2. 前処理

前処理行列とは、反復法において収束性を向上させるために導入される係数行列 A の近似行列である。線形方程式

$$Ax = b \quad (1)$$

に前処理行列 M の逆行列 M^{-1} を

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b \quad (2)$$

のように作用させて求解する。式 (2) の方程式は式 (1) と比較して、線形方程式における係数行列の条件数が小さくなり、収束性が向上する。前処理は主に IC 分解、SSOR 前処理および対角スケーリング前処理などがある。

3. 高周波電磁場解析問題における前処理行列の虚部

高周波電磁場解析問題における係数行列の虚部は大部分がゼロもしくは実部と比較して小さい。それに伴って前処理行列も同様の傾向がみられる。虚部の大きさを調べるために以下の式を定義する。 Re_{sum} 、 Im_{sum} をそれぞれ前処理行列の非ゼロ要素における実部の絶対値の和と虚部の絶対値の和として、虚部の大きさの割合 Im_{rate} を

$$Im_{rate} = \frac{Im_{sum}}{Re_{sum} + Im_{sum}} \quad (3)$$

とする。

表 1 に、本研究で性能評価に使用した問題において前処理を IC 分解、SSOR 前処理、対角スケーリング前処理としたときの前処理行列における虚部の大きさの割合 Im_{rate} を示す。表 1 より、すべての行列において虚部の大きさの割合が 10^{-4} 以下となっており、実部と比較して微小となっている。そのため、前処理行列の虚部が収束性に与える影響は小さいと考えられる。

4. 提案手法

提案手法では、前処理計算の計算コストと使用メモリ量を削減することを目的に、前処理行列の虚部を切り捨てる。これにより、複素数乗算 xy に含まれる乗算数と加減算数を削減する。また、特に IC 分解を前処理とした場合において使用メモリ量を削減する。

(1) 虚部の切り捨て

式 (4) は既存手法における複素数乗算 xy を表している。ただし、添え字の Re は要素の実部、 Im は虚部であり、 i は虚数単位である。既存手法は、複素数乗算 xy において 4 回の乗算と 2 回の加減算を含む。

$$\begin{aligned} xy &= (x_{Re} + ix_{Im})(y_{Re} + iy_{Im}) \\ &= (x_{Re}y_{Re} - x_{Im}y_{Im}) + i(x_{Re}y_{Im} + x_{Im}y_{Re}) \end{aligned} \quad (4)$$

表-2 IC 分解前処理の計算コスト

	既存手法	提案手法	削減数
乗除算数	$8(z - N)$	$4(z - N)$	$4(z - N)$
加減算数	$8(z - N)$	$4(z - N)$	$4(z - N)$

表-3 SSOR 前処理の計算コスト

	既存手法	提案手法	削減数
乗除算数	$8z + 12N$	$4z + 10N$	$4z + 2N$
加減算数	$8z + N$	$4z - N$	$4z + 2N$

一方、提案手法は前処理行列の虚部 l_{Im} を切り捨てることにより、 xy の乗算を複素数同士の乗算から実数と複素数の乗算へと変換する。式 (5) は、提案手法における乗算を表している。提案手法では、 xy における乗算は 2 回である。結果、既存手法と比較して 1 回の xy あたり 2 回の乗算と 2 回の加減算の計算コストを削減できる。

$$\begin{aligned} xy &= x_{Re} \times (y_{Re} + iy_{Im}) \\ &= (x_{Re}y_{Re}) + i(x_{Re}y_{Im}) \end{aligned} \quad (5)$$

(2) 計算コストの削減

式 (4) と式 (5) より、虚部の切り捨てにより 1 回の xy を求める計算において、2 回の乗算と 2 回の加減算分の計算コストを削減できる。よって、1 反復当たりにおいて、乗算回数と加減算回数はそれぞれ $2 \times (xy$ の計算回数) 回削減できる。 N を係数行列のサイズ、 z は前処理行列の非ゼロ要素数とすると、IC 分解における (xy の計算回数) は $2(z - N)$ 回、SSOR 前処理における (xy の計算回数) は $2z + N$ 回、対角スケーリング前処理における (xy の計算回数) は N 回である。

表 2~4 に前処理を IC 分解、SSOR 前処理、対角スケーリング前処理としたときの既存手法と提案手法における乗除算数、加減算数、削減数を示す。

IC 分解では、既存手法においては乗除算数と加減算数ともに $8(z - N)$ となり、削減数は乗除算数と加減算数ともに $4(z - N)$ となるので、提案手法の適用により 1 反復当たりの乗算 xy 計算コストの削減率は 50% となる (表 2)。

SSOR 前処理では、既存手法における乗除算数は $8z + 12N$ 、加減算数は $8z + N$ となり、乗除算数と加減算数の削減数は $4z + 2N$ となる。大規模電磁場解析においては $z \gg N$ となることが多い。そのため、既存手法における乗除算数と加減算数はおよそ $8z$ になり、乗除算数と加減算数の削減数はおよそ $4z$ になるため、計算コスト全体の 50% に近い削減となる (表 3)。

対角スケーリング前処理では、既存手法における乗除算数は $4N$ となり、乗除算数の削減数は $2N$ となるので、乗除算数における削減率は 50% となる。加減算における削減率は 100% であるので、提案手法の適用により 1 反復当たりの乗算 xy 計算コストの削減率は 50% 以上となる (表 4)。

表-4 対角スケーリング前処理の計算コスト

	既存手法	提案手法	削減数
乗除算数	4N	2N	2N
加減算数	2N	0	2N

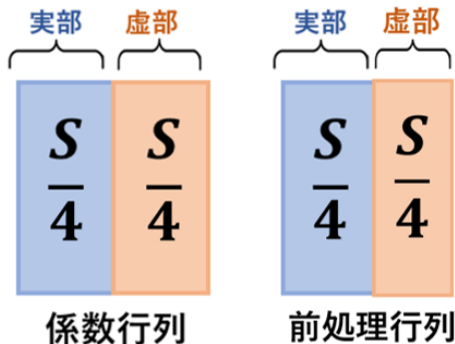


図-1 使用メモリ量（既存手法）

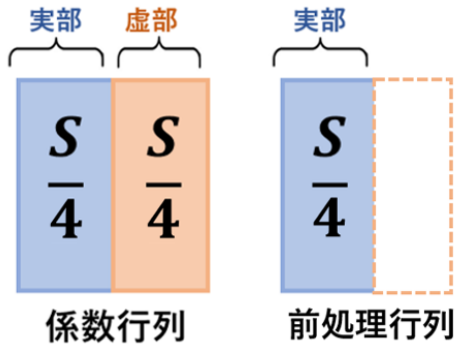


図-2 使用メモリ量（提案手法）

表-5 使用メモリ量の比較

手法	係数行列	前処理行列	全体
既存手法	S/2	S/2	S
提案手法	S/2	S/4	3S/4

(3) 使用メモリ量の削減

IC 分解前処理の場合では、大規模電磁場解析における使用メモリ量は係数行列と前処理行列が支配的である。よって、本研究での使用メモリ量は係数行列と前処理行列のみであるとする。IC 分解における前処理行列は係数行列と非ゼロ要素数は同じであるため、使用メモリ量はどちらも同じである。

係数行列と前処理行列は複素行列であるので、行列要素は実部と虚部をもち、それぞれメモリに格納されている。虚部を切り捨てたのち実部のみをメモリに格納すればよいので、前処理行列の使用メモリ量を 50% 削減できる。IC 分解における係数行列と前処理行列の使用メモリ量は同じであるので、全体の使用メモリ量は 25% 削減できる。表 5 に使用メモリ量の削減率を示す。ただし、既存手法における全体の使用メモリ量を S とする。

SSOR 前処理の場合では、前処理行列は係数行列を

表-6 実験環境

項目	仕様
CPU	Intel Core i7-8565U@1.80GHz
コア数	4
スレッド数	8
OS	Windows 10 Home
ライブラリ	OpenMP

使用するため新たにメモリ領域を確保しない。そのため、既存手法と提案手法における使用メモリ量是不変である。

対角スケーリング前処理の場合では、前処理行列は係数行列のスケーリングした対角成分のみを格納すればよいので係数行列と比較して使用メモリ量は微小である。そのため、提案手法による全体の使用メモリの削減量も微小である。

5. 実験

(1) 高周波電磁場問題

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 [9]。

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \text{rot} E_h \cdot \mu^{-1} \text{rot} E_h^* d\Omega - \int_{\Omega} \Omega(\omega^2 \epsilon' - i\omega\sigma) E_h \cdot E_h^* d\Omega \\ = i\omega \int_{\Omega} J_h \cdot E_i^* d\Omega \end{aligned} \tag{6}$$

式 (6) を解くべき方程式とする。ただし、 μ は透過率、 ϵ' は比誘電率、 ω は単一角周波数、 σ は導電率、 J は電流密度である。式 (6) に全周囲で電場 E の接戦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ことにより、係数行列 A 、未知ベクトル x 、既知ベクトル b を用いて解くべき方程式 $Ax = b$ が得られる。

テスト問題として、TEAM Workshop Problem 29 [10] として知られる医療用リエンタラント型空洞共振器の高周波電磁界解析を考える。

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、周波数を 1MHz とした。未知数 160,013, 439,176, および 979,464 の 3 つの問題を構築し、それぞれ行列 S, M および L を得た。

(2) 実験環境

IC 分解、SSOR 前処理における前処理計算では前進後退代入が支配的である。また、前進後退代入では前進代入と後退代入が支配的であり、どちらも同等の計算コストである。よって、性能評価では IC 分解と SSOR 前処理においては前進代入、対角スケーリング前処理では前処理計算の実行時間を計測する。表 6 に実験環境、表 7 に実験の条件、表 8 に使用する係数行列を示す。

表-7 実験の条件

条件	値
反復法	COCG 法
収束判定	10^{-9}
加速係数	1.05
緩和係数	0.50
初期解 x_0	0
初期残差	b

表-8 使用する係数行列

行列	サイズ数	非ゼロ要素数
S	160,013	2,527,343
M	439,176	7,036,670
L	979,464	15,794,744

表-9 前処理を IC 分解とした場合の 1 反復当たりの実行時間

行列	実行時間 (ms)		高速化率
	既存手法	提案手法	
S	4.23	2.84	1.49
M	12.4	8.17	1.52
L	27.4	17.7	1.55

表-10 前処理を SSOR とした場合の 1 反復当たりの実行時間

行列	実行時間 (ms)		高速化率
	既存手法	提案手法	
S	4.08	2.86	1.43
M	12.9	9.03	1.44
L	28.9	19.1	1.51

(3) 性能評価

a) 1 反復当たりの結果

表 9～表 11 にそれぞれ IC 分解, SSOR 前処理, および対角スケーリング前処理を前処理とした既存手法と提案手法における 1 反復当たりの実行時間を示す。

表 9～表 11 より, すべての場合において提案手法の適用により 1 反復当たりの計算が高速化していることがわかる。特に IC 分解と SSOR 前処理を前処理とした場合では, すべての行列で 1.40 倍以上の高速化を達成している。一方で, 対角スケーリング前処理を前処理とした場合では, 前処理計算に前進後退代入が含まれておらず実行時間に対する計算時間が比較的小さいため, 高速化率が最大でも約 1.27 倍となった。

また, 行列サイズが大きくなるほど 1 反復当たりの前処理計算の高速化率が大きくなっていることがわかる。これは行列サイズが大きいくほど配列の参照時間に対し, 計算時間の比率が大きくなるためだと考えられる。つまり, 扱う問題が大規模になるほど提案手法の適用により, 1 反復当たりの実行時間が高速化することができると考えられる。

b) 前処理計算全体の結果

表 12～表 14 にそれぞれ IC 分解, SSOR 前処理および対角スケーリング前処理を前処理とした既存手法と

表-11 前処理を対角スケーリングとした場合の

1 反復当たりの実行時間

行列	実行時間 (ms)		高速化率
	既存手法	提案手法	
S	0.508	0.404	1.26
M	1.48	1.17	1.26
L	3.11	2.45	1.27

表-12 前処理を IC 分解とした場合の反復回数と実行時間

行列	反復回数		実行時間 (s)	
	既存手法	提案手法	既存手法	提案手法
S	9,101	10,165	38.5	28.9
M	7,192	8,006	89.4	65.4
L	10,120	11,244	277	199

表-13 前処理を SSOR 前処理とした場合の反復回数と実行時間

行列	反復回数		実行時間 (s)	
	既存手法	提案手法	既存手法	提案手法
S	13,072	14,746	53.3	42.1
M	10,880	11,978	140	108
L	13,778	14,775	399	283

表-14 前処理を対角スケーリング前処理とした場合の反復回数と実行時間

行列	反復回数		実行時間 (s)	
	既存手法	提案手法	既存手法	提案手法
S	28,929	30,234	14.7	12.2
M	21,215	21,933	31.4	25.7
L	24,439	30,414	76.1	74.6

提案手法における反復回数と実行時間を示す。ただし, IC 分解と SSOR 前処理は前進代入, 対角スケーリング前処理は前処理計算の実行時間を示す。また, 表 15～表 17 に反復回数の増加率と高速化率を示す。

表 15 と表 16 から, IC 前処理と SSOR 前処理を前処理とした場合では提案手法の適用によりすべての行列において 1.25 倍以上の高速化を達成していることがわかる。一方で対角スケーリング前処理を前処理とした場合では, 高速化率が最大でも約 1.22 倍となった。また, ほぼすべての場合で表 1 に示した虚部の大きさの割合が小さいほど反復回数の増加率が小さくなり, 高速化率も高くなった。よって, 虚部の絶対値の和が実部に比べて小さい行列では提案手法が有効である場合が多いことがわかる。しかし, 対角スケーリング前処理を前処理とした場合の行列 L では提案手法の適用により, 反復回数の増加率が約 1.24 倍と比較的高く, 高速化率は約 1.02 倍と他の実験結果よりも低くなった。このように虚部の大きさの割合は小さいが反復回数に比較的大きな影響がある問題に関しては今後条件数などを用いて調査する必要がある。

表-15 前処理を IC 分解とした場合の反復回数増加率と高速化率

行列	反復回数増加率	高速化率
S	1.12	1.33
M	1.11	1.37
L	1.11	1.39

表-16 前処理を SSOR 前処理とした場合の反復回数増加率と高速化率

行列	反復回数増加率	高速化率
S	1.13	1.27
M	1.10	1.30
L	1.07	1.41

表-17 前処理を対角スケーリング前処理とした場合の反復回数と実行時間

行列	反復回数増加率	高速化率
S	1.05	1.20
M	1.03	1.22
L	1.24	1.02

6. 結論

本報告は、大規模電磁場解析の高速化と使用メモリ量の削減を目的とし、IC 分解、SSOR 前処理および対角スケーリング前処理による前処理行列の虚部を切り捨てることにより、1 反復当たりの計算コストと使用メモリ量を削減した COCG 法を提案した。

提案手法の適用により、IC 分解を前処理とした場合に使用メモリ量を約 25 %削減した。また、IC 分解を前処理とした場合では前進代入を最大 1.39 倍高速化し、SSOR 前処理を前処理とした場合は前進代入を最大 1.41 倍高速化し、対角スケーリング前処理を前処理とした場合は前処理計算を最大 1.22 倍高速化した。

今後の展望は前処理行列の新たな実数への変換法の考案、提案手法が有効な場合のさらなる調査などが挙げられる。

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] 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, Vol.4, pp.81–95, 2012.

[2] Amane Takei, Shinobu Yoshimura and Hiroshi Kanayama.: Large-Scale Parallel Finite Element Analyses of High Frequency Electromagnetic Field in Commuter Trains, *CMES: Computer Modeling in Engineering & Sciences*, Vol.31, No.1, pp.13–24, 2008.

[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, p. 20070027, 2007.

[4] 武居周, 杉本振一郎, 荻野正雄, 吉村忍, 金山寛: 階層型領域分割法において部分領域に直接法を適用した高周波電磁場の大規模解析, 電気学会論文誌 A, Vol.130, pp.239–246, 2010.

[5] Henk A Van Der Vorst and J.B.M Melissen.: A Petrov-Galerkin type method for solving $Ax=b$ and where A is symmetric complex, *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol.26, pp.706–708, 1990.

[6] Jelle Meijerinkand and Henk A Van Der Vorst.: An Iterative Solution Method for Linear Systems of Which the Coefficient Matrix Is a Symmetric M-matrix, *Mathematics of Computation*, Vol.31, pp.148–162, 1977.

[7] 伊藤千晶, 岩里洗介, 村上啓一, 藤野清次: EisenstatSSOR 前処理用 Cache-Cache(カシュカシュ) Elements 並列化手法の提案, 日本計算工学会論文集, p. 20140013, 2014.

[8] 荻野正雄: 領域分割法の対角スケーリング前処理に関する考察, 日本計算工学会論文集, p.20130013, 2013.

[9] 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, pp.591–597, 2008.

[10] Yasushi Kanai.: Description of team workshop problem 29: Whole body cavity resonator, *In TEAM Workshop in Tucson*, 1998.