計算数理工学論文集　Vol.7, No.2（2008 年 3 月），論文 No. 12-080317　　　JASCOME

電磁界解析のための前処理付き並列クリロフ部分空間法

PARALLEL PRECONDITIONED KRYLOV SUBSPACE METHODS FOR ELECTROMAGNETC FIELD ANALYSIS

渡辺　浩太 1),　五十嵐　一 2)

Kota Watanabe and Hajime Igarashi

1) 北海道大学大学院情報科学研究科 (〒060-0814 札幌市北区北 14 西 9,　E-mail: watanabe@ssi.ist.hokudai.ac.jp)
2)　同上　(　同上,　E-mail: igarashi@ssi.ist.hokudai.ac.jp)

This paper discusses linear solvers for finite element method of electromagnetic field analysis on parallel computers. The solvers using overlapping domain decomposition are effective methods for distributed memory computers. A preconditioner based on the Incomplete Cholesky decomposition is introduced for this method. The present method improves the convergence of iteration as well as scalability. The numerical results show that the combination of the present preconditioner and stabilized conjugate gradient methods results in good convergence and robustness for mesh distortion as well as the parallel efficiency in the magnetostatic analysis.

Key Words : Domain decomposition, Krylov subspace method, Parallel computation

1.　はじめに

近年，電磁界の有限要素解析において，計算機の性能向上により，三次元の大規模解析が可能になりつつある。これにより，電磁機器の設計・開発に電磁界解析が利用されるなっている。しかしながら，モータ等の電磁機器では，積層鋼板がもっぱら用いられており，積層構造を考慮してメッシュ分割するためには莫大な要素数が必要となる。さらに，電磁鋼板の非線形磁化特性も相まって，現在の計算機を持ってしても，高精度な電磁界解析には多大な解析時間を要する。最適化問題においても，繰り返し解析を行うため，解析時間の短縮が必要である。このように，電磁界解析では，高速化がなおも重要な課題となっている。

有限要素解析の高速化の方法の一つして並列計算がある。近年，CPU のクロックが頭打ちとなり，その代わりマルチコア化が進んでおり，並列計算の重要度はますます増加している。有限要素法の解析時間の大部分を占める連立方程式の求解に対する並列計算は，様々な手法が提案されており，多くの報告例がある(1)-(4)。中でも領域分割法は，代表的な手法の一つである(1)-(2)。この手法では，解析領域をいくつかの領域に分割して，それぞれに PE（Processing Element）を割り当てるものである。

一方，電磁界の有限要素解析において，前処理付き共役勾配法 PCG(Preconditioned Conjugate Gradient)法の中でも IC（Incomplete Cholesky）分解を前処理とする ICCG 法が連立方程式の求解にもっぱら用いられている。しかしながら，分散メモリ環境下の領域分割法において，IC 分解による前処理行列の作成には，分割された他の領域に対応する係数行列の情報が必要となり，PE 間の通信量が多くなる。そして，領域をまたがる項の計算を省略することで通信量を減らすと，ICCG 法の収束性が悪化する。そこで，領域を互いにオーバーラップさせて領域分割を行い，収束性を改善する方法が提案されている。

本論文では，オーバーラップした領域分割法において，IC 分解をもとにして，反復計算時の通信量を削減することができる前処理方法に注目した(4)。この方法を電磁界の辺要素有限要素解析に適用できるよう拡張した。この方法では通信量を減らせる半面，前処理行列が非対称となるために，CG 法を用いることができず，非対称係数行列用のクリロフ部分空間法を用いる必要がある。非対称向けのこれらの手法には，いくつかの手法が知られている。そこで，電磁界有限要素解析において，この前処理方法といくつかのクリロフ部分空間法とを組み合わせて，その有効性を確認すると共に，従来手法との比較を行う。

2.　定式化

2･1　領域分割法

電磁界の有限要素解析では，辺に未知数を置く辺要素がもっぱら用いられている。そこで，参考文献(4)による領

2007 年 12 月 29 日受付，2008 年 2 月 7 日受理

域分割方法を辺要素に応用する。まず，全領域を分割し，各 PE に配分するために，解析領域の全ての辺の集合 G を重複しないように n_p 個の集合 G_k (k=1,2,..., n_p) に分割する。つぎに，集合 G_k に含まれる辺を少なくとも一つ所有する要素の集合を $\tilde{E}_k$ と定義する。さらに，$\tilde{E}_k$ に含まれる辺の集合を $\tilde{G}_k$ と定義する。これらの定義により，G_k は $\tilde{G}_k$ の部分集合となる。また，$\tilde{G}_k$ は分割した領域の境界付近の辺をオーバーラップして保持していることになる。さらに，すべての辺の集合 G から G_k への投影演算子を R_k と定義する。同様に G から $\tilde{G}_k$ への投影演算子を $\tilde{R}_k$ と定義する。例として Fig. 1 に示すような 3 角形辺要素によるメッシュを考え，これを二つの領域に分割することを考える。今，全ての辺を G_1 = {1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8}， G_2 = {9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18}に分割したとする。このとき，オーバーラップした要素の集合 $\tilde{E}_1$ と $\tilde{E}_2$ は図の点線のようになる。そして，オーバーラップした辺の集合 $\tilde{G}_1$，$\tilde{G}_2$ は $\tilde{G}_1$ = {1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12}, $\tilde{G}_2$ = {4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18}となる。

2･2 PCG 法の並列化

PCG 法はメッシュの質や，係数行列の条件数の悪化などに対して比較的ロバストであるために，有限要素解析において広く用いられている。一般的な PCG 法のアルゴリズムを Fig.2 に示す[5]。この図において，行列 M は前処理された係数行列である。オーバーラップした領域分割法において，前処理行列として次式を用いる。

$$M=\sum_{k=1}^{n_p}\tilde{R}_k\tilde{M}_k\tilde{R}_k^T \tag{1}$$

ここで，$\tilde{M}_k$ はもとの係数行列 K を次式,

$$\tilde{K}_k \equiv \tilde{R}_k K\tilde{R}_k^T \tag{2}$$

を用いて分割した係数行列 $\tilde{K}_k$ に対して前処理を行ったものである。PCG 法の実際の反復計算では，k 番目の PE は自身が担当する領域に対応する $\tilde{M}_k$ のみを保持する。さらに反復計算で用いるベクトル $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{r}, \boldsymbol{z}, \boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}$ はこれらのベクトルに制限演算子 $\tilde{R}_k$ を施したベクトル $\tilde{\boldsymbol{x}}^k, \tilde{\boldsymbol{r}}^k, \tilde{\boldsymbol{z}}^k, \tilde{\boldsymbol{p}}^k, \tilde{\boldsymbol{q}}^k$ を各 PE が保持することとする。従って，それぞれの PE はオーバーラップしていない他の領域の情報を持たない。ただし，$\tilde{M}_k\tilde{\boldsymbol{z}}^k=\tilde{\boldsymbol{r}}^k$ を解いてベクトル $\tilde{\boldsymbol{z}}^k$ を求める際には，他の PE が求めた $\tilde{\boldsymbol{z}}^{k'}$ $(k'\neq k)$ の中から，オーバーラップしている辺に対応する成分のみを通信により取得し，自身が求めた $\tilde{\boldsymbol{z}}^k$ と足し合わせる必要がある。

本報告では，(1)式だけでなく，次式で定義される前処理行列も試した。

$$M=\sum_{k=1}^{n_p}R_kR_k^T\tilde{R}_k^T\tilde{M}_k\tilde{R}_k^T \tag{3}$$

(3)式の $R_kR_k^T$ の項により行列 M の最大固有値が減少し，条件数が小さくなるために PCG 法の収束性が改善されることが報告されている。また，この前処理行列を用いると，PCG 法の反復において，オーバーラップした辺に対応するベクトル $\tilde{\boldsymbol{z}}^k$ の値を足し合わせる必要がない。そのため，並列計算における通信量を減らすことができる。しかしながら，この前処理行列は非対称となるため，対称行列を前提とした共役勾配法では収束しない。そのため，非対称行列向けの解法と組み合わせる必要がある。

行列ベクトル積の演算 $\boldsymbol{q}=K\boldsymbol{p}$ は

$$\boldsymbol{q}^k=\tilde{R}_kK\tilde{R}_k^T\tilde{\boldsymbol{p}}^k=\tilde{K}_k\tilde{\boldsymbol{p}}^k \tag{4}$$

によって計算することができる。ここで $\boldsymbol{q}^k\equiv R_k\boldsymbol{q}$ であり，$\boldsymbol{q}^k$ にはオーバーラップした辺に対応する項を持っていない。しかし，反復計算には $\tilde{\boldsymbol{q}}^k$ が必要であるため，$\tilde{\boldsymbol{q}}^k$ と $\boldsymbol{q}^k$ の差分，すなわちオーバーラップしている辺に対応する成分を他の PE から通信により取得する必要がある。

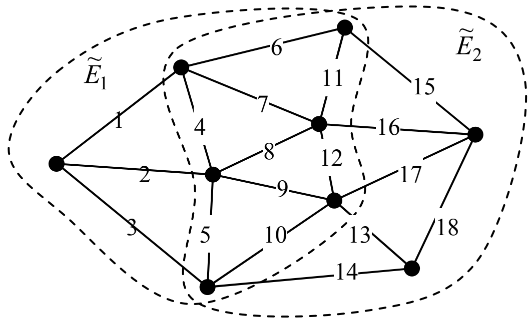

Fig.1 An example of overlapping domain decomposition

Compute $\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{b}-K\boldsymbol{x}_0$ for some initial guess $\boldsymbol{x}_0$
for i = 1, 2, ...
  solve $M\,z_{i-1}=\boldsymbol{r}_{i-1}$
  $\rho_{i-1}=\boldsymbol{r}_{i-1}^{\mathrm{T}}z_{i-1}$
  if(i = 1) then
    $\boldsymbol{p}_1=z_0$
  else
    $\beta_{i-1}=\rho_{i-1}/\rho_{i-2}$
    $\boldsymbol{p}_i=z_{i-1}+\beta_{i-1}\boldsymbol{p}_{i-1}$
  endif
  $\boldsymbol{q}_i=K\boldsymbol{p}_i$
  $\alpha_i=\rho_{i-1}/\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{q}_i$
  $\boldsymbol{x}_i=\boldsymbol{x}_{i-1}+\alpha_i\boldsymbol{p}_i$
  $\boldsymbol{r}_i=\boldsymbol{r}_{i-1}-\alpha_i\boldsymbol{q}_i$
  check convergence
end for

Fig.2 Algorithm for PCG method

2･3 非対称係数行列向けの解法

(3)式を用いた前処理を用いた場合，反復計算における通信量を減らせる利点があるものの，前処理行列が非対称行列になるために，PCG 法では収束しない。そのため非対称向けの反復解法を用いる必要がある。PCG 法が属するクリロフ部分空間法では，解ベクトルの更新にクリロフ部分空間の正規直交基底を求める必要がある。対称行列であれば，CG 法のように正規直交基底を容易に求めことが可能である。しかしながら，非対称行列に対しては少ない

計算コストでこれを求めることは困難である。そのため，多くの解法が提案されている。中でも GMRES (generalized minimal residual method)法およびそのリスタート法は収束の安定性に優れているが，計算に必要なメモリ量が大きいため，本研究では採用しなかった。そこで，本研究では収束の安定性と計算コストのバランスがよいと思われる BiCGSTAB 法，GPBiCG 法を採用した(6),(7)。さらに，問題によっては CG 法よりも収束性が良いことが報告されている共役残差（Conjugate Residual）法に属する GPBiCR 法も試した(8)。これらの解法において，反復計算の前にシャドー残差ベクトルを設定する必要がある(9)。このベクトルとして，初期残差ベクトル，定数ベクトル，[0, 1]区間の一様乱数の 3 種類を試し，最も収束が良かった初期残差ベクトルを採用した。

なお，これらの非対称向け手法を用いているが，解くべき問題の係数行列はあくまでも対称行列である。さらに IC 分解を前処理に用いているので，非対称となる前処理行列は陽には求めない。そのため，行列の上三角を計算機に保持するだけでよく，メモリの使用量は ICCG 法とほぼ同じである。

3. 解析例

前章までの定式化に基づいた領域分割法によるいくつかの解析例を示す。以下に示す例において，前処理としてシフトパラメータを導入した IC 分解を用い(10)，そのパラメータとして最も収束が良かった 1.12 を用いた。計算には 4PE（CPU: Pentium4 3.4GHz, PE につき CPU1 個）で構成される HIT 社製の PC クラスタを用いた。ノード間は 2 系統のギガビットイーサーネットで相互接続した構成になっている。プログラム言語には C++，コンパイラには Intel C++ Compiler8.0，並列計算ライブラリである MPI（Message Passing Interface）には MPICH(11)を用いた。

3·1 計算時間の比較

Fig.3 に示す磁気ヘッドモデルに対して静磁場線形解析を行った。支配方程式は

$$\nabla\times(\nu\nabla\times\boldsymbol{A})=\nabla\times\boldsymbol{T} \tag{5}$$

で与えられる。ここで，ν :磁気抵抗率，$\boldsymbol{A}$: 磁気ベクトルポテンシャル，$\boldsymbol{T}$: 電流ベクトルポテンシャルである。なお，ベクトルポテンシャルの任意性により，係数行列は特異となり，解は不定である。しかし，得られた解をもとに計算される磁界分布は一意に決まり，さらに正則化せずに不定のまま(5)式を解いた方が，収束がよいことが示されている(12)。収束判定は，残差ベクトル $\boldsymbol{r}$ と右辺ベクトル $\boldsymbol{b}$ に対して $|\boldsymbol{r}|/|\boldsymbol{b}|\le 10^{-6}$ とした。なお，反復終了時に得られる解ベクトルは各 PE に分散されて保持されている。なお，真に収束したことを検証するために，これらを一つの PE に集約し，元の分割前の方程式に対する残差ベクトルを直接計算したところ，収束判定条件を満足していることを確認した。

Table 1 に PE 数を変えた場合の反復回数および計算時間を掲げた。ここで ICCG 法は(1)式に基づく前処理を用いたものであり，その他の手法は(3)式による前処理を用いている。また，表中の時間は計算にかかった実経過時間である。PE 数を増やすと，収束までに必要な反復回数が概ね増加する傾向ある。これは IC 分解の際に，領域をまたがる項を無視しているためである。反復回数を比較すると，(3)式による前処理による提案手法は ICCG 法の半分程度に抑えられている。しかし，一回の反復に必要な計算量は ICCG 法の 2 倍程度必要であるため，計算時間を比較すると，ICCG 法と同程度の計算時間となる。

Fig.4 に PE 数が 1 の場合の計算時間を基準とした並列計算による加速率を示す。どの方法も概ね線形に加速していることが分かる。また，ICCG 法よりも他の 3 手法の効率が優れている。これは(3)式による前処理に必要な通信量が(1)式のそれよりも少ないためであると推測される。なお，より多ノード環境での加速率を評価するために，スーパーコンピュータ（富士通 PRIMEQUEST580, 16CPU 使用）を試したところ，同様にほぼ線形に加速率が伸びており，ICCG 法よりも他の 3 手法の方が加速率が良いことを確認している。

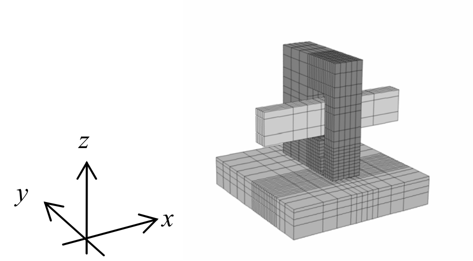

Fig.3. Analysis model for magnetostatic analysis

TABLE I RESULTS OF COMPUTATION TIME AGAINST NUMBER OF PEs

# of PEs	# of iterations (Computation time[s])			
	ICCG	BiCGStab	GPBiCG	GPBiCR
1	297(162)	213(226)	172(198)	186(214)
2	322(97)	199(117)	187(115)	191(117)
3	334(76)	215(91)	179(80)	183(81)
4	313(59)	197(70)	186(67)	173(62)

Number of unknowns: 1,096,640, Number of elements: 354,816

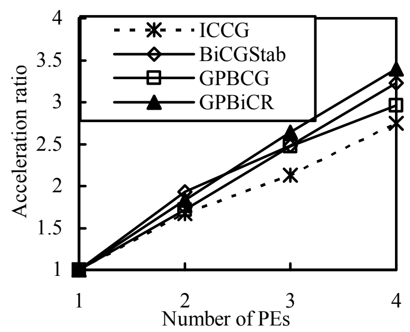

Fig.4 Acceleration ratio against number of PEs

3·2　安定性評価

実用上, 有限要素解析に用いる解法には計算速度だけでなく，様々な条件に対する安定性も重要である。そこで, 前節で用いたモデルの一部の節点を動かすことで, 偏平な要素を含むメッシュを作成し, メッシュの質が収束性に与える影響を調べた。一般に，偏平な要素が含まれると係数行列の条件数が増大し，PCG 法の収束性が悪化することが知られている。Table II にその比較結果を示す。メッシュが偏平になるにつれて，どの方法も反復回数が増加しているが，その増加率は同程度である。もともと，ICCG 法は, このようなメッシュの質の悪化に対するロバスト性の高さから広く用いられている。従って，ICCG 法以外の 3 手法も十分な安定性を持っていると言える。

さらに領域分割の際の分割方向による収束性の影響度を調べるために，Fig.5 に示した 3 種類の領域分割に対する収束性の違いを Table III に示す。どの手法も分割方法には大きく影響を受けないことがわかる。このように提案手法は良好な安定性を持っていることを確認した。

4.　結言

電磁界の有限要素解析における連立方程式の求解に, オーバーラップした領域分割による並列計算を行った。従来手法である ICCG 法および, 反復計算における計算機間の通信量を減らした前処理と非対称行列向けの解法を組み合わせた手法との比較を数値実験により行った。その結果，どの手法も並列計算による高速化および，メッシュの質，分割方法に対するロバスト性を確認できた。特に高速化に関しては BiCGSTAB 法，GPBiCG 法，GPBiCR 法が優れている。これらの手法は非対称行列用の解法ではあるが，解くべき問題の行列が対称であることを利用して，メモリ使用量は ICCG 法と同程度である。また，提案手法は反復計算中の通信量を減らすことを特徴としており，PC グリッド環境のような PE 間の通信が低速な環境に有効な方法であると思われる。今後，渦電流問題や非線形解析などに応用していく予定である。

なお, 本研究の一部は九州大学情報基盤研究開発センターの平成 19 年度公募研究プロジェクトの支援を受けて行われた。

TABLE II RESULTS OF ITERATIONS AGAINST MESH DISTORTION

Mesh	mean of flatness	# of iterations			
		ICCG	BiCGStab	GPBiCG	GPBiCR
A	4.47	313	197	183	173
B	6.31	407	241	240	240
C	14.71	698	455	414	406

TABLE III RESULTS OF ITERATIONS AGAINST DECOMPOSITION

Type	# of iterations			
	ICCG	BiCGStab	GPBiCG	GPBiCR
I	313	197	183	173
II	358	195	202	199
III	370	218	186	189

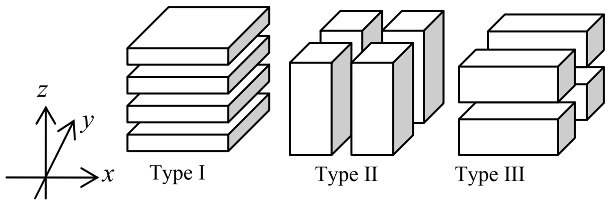

Fig.5 Illustration of three type of domain decomposition

参考文献

(1) T. F. Chan and T. Mathew, "Domain decomposition algorithms", *Acta Numerica*, (1994) pp. 61-144.

(2) B. Smith, P. Bjorstad and W. Gropp, "Domain Decomposition: Parallel Multilevel Methods for Elliptic Partial Differential Equations", Cambridge University Press, (1996).

(3) 高速大規模電磁界数値解析技術調査専門委員会 : 電磁界解析における高速大規模数値計算技術, 電気学会技術報告　第 1043 号 (2006)

(4) 鷲尾巧，鈴木健二，久田俊明 : 心臓の流体構造連成問題における並列反復ソルバについて，第 9 回環瀬戸内応用数理研究部会シンポジウム, (2005) pp. 46-51.

(5) Richard Barrett, Michael Berry, Tony F. Chan, James Demmel, June M. Donato, Jack Dongarra, Victor Eikhout, Roldan Pozo, Charles Romine, and Henk van der Vorst: "Templates for the solution of linear systems: Building Blocks for Iterative Methods," SIAM, (1994)

(6) H.A. van der Vorst, "Bi-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems", SIAM *J. Sci. Comput.* **13** (1992) pp. 631-644.

(7) S.L. Zhang, "GPBi-CG: generalized product-type methods based on Bi-CG for solving nonsymmetrical linear systems", SIAM. *J. Sci. Comput.* **18** (1997) pp. 537–551.

(8) 阿部 邦美, 曽我部 知広, 藤野 清次, 張 紹良 : 非対称行列用共役残差法に基づく積型反復解法(数値アルゴリズム)，情報処理学会論文誌　コンピューティングシステム **48**, No.SIG_8(2007) pp. 11-21.

(9) 藤野清次，尾上勇介 : BiCR 法の残差を礎に構築した BiCRSafe 法の収束性評価，電気学会　静止器・回転器合同研究会資料，SA-07-59/ RM-07-75, (2007) pp.31-36.

(10) K. Fujiwara, T. Nakata, and H. Fusayasu, "Acceleration of convergence characteristic of the ICCG method," IEEE *Trans. Magn.* **29**, no. 2(1993) pp. 1958-1961.

(11) http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich/

(12) H. Igarashi and T. Honma, "On convergence of ICCG applied to finite-element equation for quasi-static fields," IEEE *Tran. Magn.* **38**, no. 2(2002) pp. 565-568.