3版

様　式　C－19、F－19、Z－19　（共通）

科学研究費助成事業　　研究成果報告書

平成 ２８ 年　 ６ 月　 ６ 日現在

機関番号：１０１０１

研究種目：挑戦的萌芽研究

研究期間：2014～2015

課題番号：２６５４００５２

研究課題名（和文）過去の求解プロセス情報を活用する高性能な線形反復法ライブラリ

研究課題名（英文）High Performance Linear Solver Library Using Information Obtained in Previous Solution Steps

研究代表者

岩下　武史（IWASHITA, TAKESHI）

北海道大学・情報基盤センター・教授

研究者番号：３０３２４６８５

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費）　　1,300,000円

研究成果の概要（和文）：応用分野で頻出する同一もしくは類似の係数行列を持つ一連の連立一次方程式の求解の高速化を研究対象とした．連立一次方程式の求解法として線形反復法を用いた場合について，誤差修正法による収束性の改善について研究を行った．本研究では，過去の求解過程から得られる情報に基づいて自動的に誤差修正法で用いる写像行列を構成する方法を提案した．提案手法は最小限のメモリ量で実装可能であり，実応用性の高い手法である．本手法を時間発展型の電磁場問題に適用し，その有効性を検証した．その結果，T-Ω法に基づく，2次元，3次元渦電流有限要素解析において提案手法の有効性が確認できた．

研究成果の概要（英文）：In this research, we focused on a series of linear systems having an identical or similar coefficient matrix. We examined the improvement of convergence of the linear solver by means of error correction methods. In the research, we proposed an automatic construction method for a mapping operator for the error correction method based on the information obtained in the previous solution steps. Because the proposed method constructs an appropriate mapping operator with minimum memory requirement, it is easily applied to practical simulations. The proposed method was examined in the context of time-dependent electromagnetic field problems. Numerical tests of 2-d and 3-d eddy-current finite element analyses with T-Omega formulation confirmed the effectiveness of the method.

研究分野：High Performance Computing

キーワード：高性能計算　線形反復法　誤差修正法　自動生成

１．研究開始当初の背景

線形反復法は有限要素解析等の物理シミュレーションにおける連立一次方程式の標準的な求解法として広く用いられてきた．特に 1980 年代後半から 90 年代にかけ，GMRES 法，積型反復法，マルチグリッド前処理等の重要な提案，発見があり，計算機の能力向上とあいまって，飛躍的に応用分野での利用が進んだ．しかしながら，2000 年以降では，IDR(s)法等の注目される提案や試みがいくつかあったものの，応用分野の実問題において線形反復法の求解性能を大幅に向上させる手法は見当たらず，主に HPC 技術や並列処理技術による性能改善が行われてきた．

こうした背景の下，反復法において収束の遅い誤差成分を抽出し，除去する高速誤差修正技術が近年注目されてきた．岩下（研究代表者）は 2008 年に陽的／陰的誤差修正法(EEC/IEC 法)と呼ぶ解法フレームワークを提案し，本手法は例えば電動モータの解析において定常周期解を高速に導出する TP-EEC 法(Y. Takahashi et al., IEEE Trans. Magn., 2010) 等の応用分野で活用されてきた．しかし，これらの誤差修正法では，収束の遅い誤差成分ベクトルを含む部分空間を定める写像行列を予め決定する必要があった．従来，この写像行列は各応用分野の知見を基に構成されてきたが，基礎方程式や解析モデル情報から直接的に写像行列を構成できる事例は必ずしも多くなく，幅広い応用分野への展開のためにその効率的な構築法が求められていた．

２．研究の目的

上記で述べた研究背景の下で，岩下らは，線形反復法ライブラリの内部で適切な写像行列を自動的に生成することができれば，幅広い応用分野において誤差修正法を活用し，反復法の性能を大幅に向上させることができるのではないかとの着想に至った．また，自動的な写像行列の構築に際して，応用分野では，時間発展解析や非線形解析が扱われることが多く，このような解析では同一もしくは類似の係数行列を持つ連立一次方程式が多数回解かれることに着目し，過去の求解プロセス情報を用いて構成する方法に関して研究を行うこととした．

即ち，近年解法面において大きな進展が見られていない線形反復法ライブラリにおいて，過去の求解プロセスの情報を活用するという新たなアプローチによる性能改善を研究対象とし，高速な誤差修正に必要な写像行列の自動生成と応用分野におけるその性能評価を研究目的とした．

３．研究の方法

本研究では，まず過去の求解プロセス情報からどのように誤差修正用の写像行列を生成するか，そのアルゴリズムの検討を行った．国内外での文献調査を実施し，類似研究における方法論を調査した上で，実応用への展開に求められる省メモリ，省演算なアルゴリズムの開発を行った．次に，考案したアルゴリズムを計算機上に実装し，時間発展問題を対象とした応用解析上で評価した．更に，得られた成果について対外発表を行った．

４．研究成果

(1) 誤差修正用写像行列の自動構築法の提案

ここでは，まず本研究の成果として最も重要な誤差修正法における写像行列の自動生成法の提案について述べる．

〈誤差修正法の概要〉

以下の様な連立一次方程式を解くことを考える．

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

ここで，Aは$n \times n$の係数行列であり，$\boldsymbol{x}$ は未知数のベクトル，$\boldsymbol{b}$ は右辺ベクトルである．陰的誤差修正法（以下，IEC 法）では，このような連立一次方程式に対し写像行列Bを導入して，以下の様な拡大された方程式を求解する．

$$\begin{pmatrix} A & AB \\ B^T A & B^T AB \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{y}_1 \\ \boldsymbol{y}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{b} \\ B^T \boldsymbol{b} \end{pmatrix}$$

このとき，写像行列Bを適切に選ぶことによって収束性が改善されることが知られている．

また，陽的誤差修正法（以下，EEC 法）では，写像行列Bを用いて以下の手順により近似解$\tilde{\boldsymbol{x}}$を更新する．

a) $\boldsymbol{f} = B^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b} - A\tilde{\boldsymbol{x}})$を計算

b) $(B^{\mathrm{T}}AB)\boldsymbol{u} = \boldsymbol{f}$ を（近似的に）求解し，$\boldsymbol{u}$の近似解$\tilde{\boldsymbol{u}}$を得る．

c) $\tilde{\boldsymbol{x}} \leftarrow \tilde{\boldsymbol{x}} + B\tilde{\boldsymbol{u}}$

本手法は一般化された 2 レベルのマルチグリッド法と解釈でき，IEC 法と同様に適切な写像行列Bを選ぶことで，近似解の収束性を高めることができる．

〈提案した写像行列の自動構築法〉

本研究では，同一の係数行列を持つ一連の連立一次方程式

$$A\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{b}_k \; (k = 1, \cdots n)$$

の線形反復法による求解を取り扱う．提案手法では，各求解ステップにおいて，連立一次方程式$A\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{b}_k$の求解プロセス情報からそのステップでの収束の遅い成分を抽出して誤差ベクトルを構成する．具体的にはk番目のステップにおいて，m_k本の近似解ベクトル$\tilde{\boldsymbol{x}}_k^l, (l = 1, 2, \cdots m_k)$をメモリ上に保存する．$k$番目のステップの求解が$N_k$回の反復で終了した場合，誤差ベクトル$\boldsymbol{e}_k^l, (l = 1, 2, \cdots m_k)$は

$$\boldsymbol{e}_k^l = \tilde{\boldsymbol{x}}_k^{N_k} - \tilde{\boldsymbol{x}}_k^l$$

のように算出される．提案する方法では，$k+1$ステップ目の連立一次方程式$A\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{b}_{k+1}$の求解において用いる誤差修正法の写像行列

BをB_kと表すとした場合,

$$E_i = (\boldsymbol{e}_i^1, \boldsymbol{e}_i^2, \cdots, \boldsymbol{e}_i^{m_k})$$
$$B_k = (E_1, E_2, \cdots, E_k)$$

のように構成する.

〈提案した構築法の省メモリ性能〉

前述した写像行列の構築法における要点の一つに求解中のどの近似解ベクトルをメモリ上に保存するかという点がある. 本研究を進める中で, 経験的にlとしてN_kの 1/2 程度の値を選ぶことができればよいということが明らかとなった. しかし, 線形反復法の求解過程では, 一般に残差ノルムがある一定の基準に達した段階で十分な精度の近似解が得られたものとして反復を打ち切るため, 事前にN_kの値を知ることはできない. そこで, 岩下らは, lが $9N_k/25$～$3N_k/5$ や $N_k/4$～$N_k/2$ の範囲に収まるようにした上で近似解ベクトルを保存するアルゴリズムを考案した. 本アルゴリズムでは, 近似解ベクトルの選択にベクトル 2 本分のメモリ量のみを使用する. 従って, 提案手法を応用分野の解析に展開する場合にメモリ量の制約をほとんど受けず, これは本手法の大きな長所といえる.

(2) 2 次元電磁場解析における検証

項目(1)で述べた提案手法に基づいて作成した写像行列を用いた誤差修正法を応用分野の解析上で評価した. 具体的に, 提案手法の評価を T-Ω 法に基づく 2 次元過渡渦電流場の有限要素解析上で行った. 本解析の解析モデルを図 1 に示す. 本モデルは微小な導電率を持つ領域 (疑似導体部) を持つ. 本領域は 3 次元解析において空洞を有する導電性部品を扱う際に用いられるモデルを模擬している. 本領域が存在する場合, 有限要素法により生ずる連立一次方程式の反復法による求解性能 (収束率) が著しく悪化することが知られている.

本解析では, 各タイムステップにおける連立一次方程式を対角前処理または IC 分解前処理付き CG 法で解く. 誤差修正法としては, IEC 法を用い, 各タイムステップで誤差修正のために保存するベクトルは 1 本, 即ち$m_k = 1$ とした. 近似解ベクトルの選択には, lが$N_k/4$～$N_k/2$の範囲に入るアルゴリズムを用いた. また, 誤差修正に要する演算量, メモリ量が過度に大きくなることを防ぐため, 本解析ではk_m番目以降のステップでは写像行列の更新を行わないこととした.

解析結果 (60 タイムステップ分の総 CG 反復数) を表 1 に示す. 表 1 から, 誤差修正法の適用により前処理付き CG 法の収束性を改善できることが分かる. 収束性の改善効果は, k_mの増加に従い拡大しているが, $k_m = 2$の場合においても, 誤差修正法を用いない場合と比べて, 対角前処理の場合で約 40%, IC 分解前処理を用いた場合で約 20%の反復数の削減を実現している.

以上の結果から, 過去の求解プロセス情報

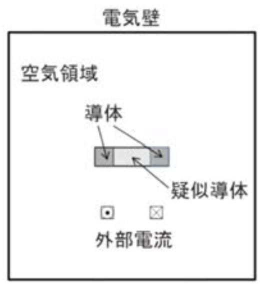

図 1. 2 次元渦電流場解析モデル
(提案手法の評価実験用)

表 1. 数値実験結果 (反復数)

k_m	対角前処理	IC 分解前処理
修正なし	11558	4235
2	7162	3380
4	6199	2834
8	5123	2294

に基づいて自動的に構築した写像行列を使って後続の求解過程を高速化できることが明らかとなった. 本数値実験結果は提案手法の有効性を示す結果であると言える.

(3) 3 次元電磁場解析における検証

項目(2)で述べたように, 本研究で提案した手法は, 2 次元渦電流場解析において研究当初の目論見通りの成果を達成した. しかしながら, 例えば電磁場解析分野では, 実応用分野で 2 次元解析が用いられることは稀で, 3 次元解析が主流となっている. そこで, 本研究ではさらに実用的な応用において提案手法を評価するために, 3 次元渦電流場解析における性能評価を実施した.

図 2 に数値実験に用いた 3 次元渦電流解析の解析モデルを示す. 本モデルも導体内に空洞部を有しており, 当該領域には疑似導体が設定されている.

解析結果 (60 タイムステップ分の総 CG 反復数) を表 2 に示す. 本解析では, 誤差修正法として EEC 法と IEC 法の 2 種類を実装し, 評価を行った. 表 2 に示された数値実験結果から, 3 次元渦電流解析においても提案した方法に基づく EEC 法, IEC 法により収束性が改善されることが確認された.

(4) 今後の展望

本研究では, 研究構想時に想定していた誤差修正法の自動生成を実現し, その効果を実社会でも使用されている応用解析において示すことができた. 提案手法は, 非線形解析や非定常解析で広く用いることができると考えられるため, 引き続き応用展開について検討を行っていく予定である.

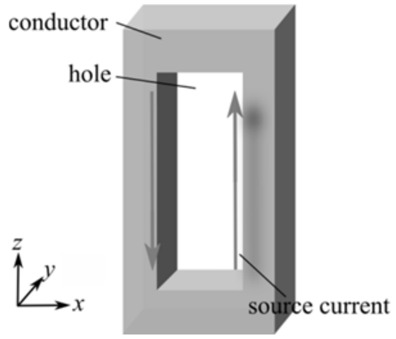

図 2. 3 次元渦電流場解析モデル
（提案手法の評価実験用）

表 2. 3 次元渦電流解析における数値実験結果（反復数）
(a) EEC 法による結果

k_m	対角前処理	IC 分解前処理
修正なし	13126	3869
2	7603	3373
4	7033	3277
8	7511	2736

(b) IEC 法による結果

k_m	対角前処理	IC 分解前処理
修正なし	13126	3689
2	7551	3378
4	6965	3221
8	7410	2565

５．主な発表論文等
（研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線）

〔雑誌論文〕（計 0 件）

〔学会発表〕（計 3 件）

[1] 岩下武史, 河口慈, 美舩健, 松尾哲司 ; 「過去の求解プロセス情報を活用した誤差修正用写像行列の構築」, 日本応用数理学会 2015 年度年会, 於 金沢大学（石川県・金沢市）, 2015 年 9 月 11 日.

[2] 河口慈, 美舩健, 岩下武史, 松尾哲司 ; 「過去の求解プロセスを利用した誤差修正法による 2 次元渦電流解析の高速化」, 電気学会静止器・回転機合同研究会資料, SA-16-19/RM-16-19, 於 汐留シティセンター（東京都・港区）, 2016 年 1 月 20 日.

[3] 河口慈, 美舩健, 岩下武史, 松尾哲司 ; 「過去の求解プロセスを利用した誤差修正法の 3 次元渦電流解析への適用」, 平成 28 年電気学会全国大会, 5-062, 於 東北大学（宮城県・仙台市）, 2016 年 3 月 16 日.

〔図書〕（計 0 件）

〔産業財産権〕
○出願状況（計 0 件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
出願年月日：
国内外の別：

○取得状況（計 0 件）

名称：
発明者：
権利者：
種類：
番号：
取得年月日：
国内外の別：

〔その他〕
ホームページ等

６．研究組織
(1)研究代表者
岩下　武史（IWASHITA TAKESHI）
北海道大学・情報基盤センター
教授
研究者番号：30324685

(2)研究分担者
（　　）

研究者番号：

(3)連携研究者
美舩　健（MIFUNE TAKESHI）
京都大学・大学院工学研究科
助教
研究者番号：20362460