生産と技術　第73巻　第4号（2021）

高精度演算基盤の開発および電磁場解析問題への適用

若　　者

桝　井　晃　基*

Development of high-precision calculation platform and
application to electromagnetic field analysis problems

Key Words：High-precision calculation, iterative method, large-scale problem

1．はじめに

私は2020年3月に名古屋大学にて博士号を取り，その半年後の2020年10月に助教として着任しました．今回は私の研究内容を簡単に紹介するとともに，これまで中学高校などで勉強してきた内容とのつながりについて述べていきます．

2．シミュレーションの仕組み

自然界の多くの現象はなんらかの数式で表すことができます．単純な例だと，運動方程式により物体の速さや移動距離などを計算できます．実際に私たちの生活で使われている例においても，状態方程式などにより，天気予報や地震による津波の影響などを調べることができます．

これらの数式をコンピュータで計算するために，離散化という操作が必要になります．数式を離散化すると多くの場合，連立一次方程式に帰着します．現実の問題では変数の数が100万個以上の連立一次方程式を解くこともあります．また近年ではその数が1000億個以上の問題も出てきています．そして，その解を用いて結果を可視化しています．

例えば，災害が発生した場合にテレビのニュース速報で右下に被害予想図が表示されることがあると思います．その仕組みは，スーパーコンピュータなどを使って解析を行ない，その結果をリアルタイムで表示しています．

この流れを図で表すと図1のようになります．

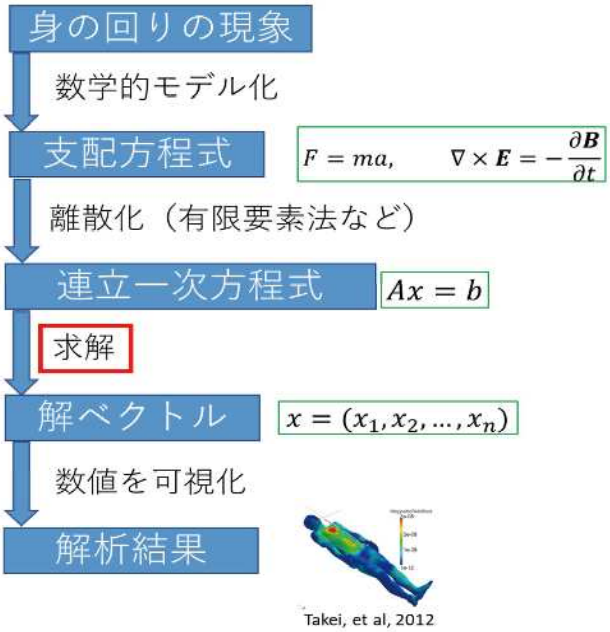

図1　シミュレーションの主な流れ

電磁場解析の高速化

私は今，電磁場解析の高速化に関する研究を行なっています．電磁場解析といってもさまざまなものがありますが，私が対象とする問題は，がん治療に使われるハイパーサーミアという温熱療法のシミュレーション[1)]や建築物内部における流体解析があります．これらの問題は，問題の規模や複雑さによってはシミュレーション完了までに1か月以上計算時間を要する場合があります．

流石にこのままでは使い物にならないため，高速化が必要になってきます．その中でも，図1における求解のプロセスがシミュレーション時間の大部分を占めているため，この高速化に取り組んでいます．

* Koki MASUI
1993年1月生まれ
名古屋大学大学院　情報学研究科　情報システム学専攻博士後期課程（2020年）
現在、大阪大学大学院　情報科学研究科　コンピュータサイエンス専攻　助教
情報学博士
TEL：06-6879-4352
E-mail：masui@ist.osaka-u.ac.jp

さて，先ほどこれらの問題を解くときに連立一次方程式が出てくると述べましたが，この方程式を解くための手法として，大きく分けて直接法と反復法の２種類があります．

まず，直接法について，どのように解くのかを説明します．簡単のため，変数が２つの場合を例に挙げます．

$$2x + 3y = 8 \quad \cdots ①$$
$$4x + 5y = 14 \cdots ②$$

この場合，①×2 − ②により，$y = 2$ を導出し，その後，$x = 1$ を求めることができます．これはガウスの消去法と呼ばれるもので，中学や高校ではこのように計算したと思います．

ここで,①,②を別の形式で表すと，以下（次式）になります．

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 14 \end{pmatrix}$$

このように，連立一次方程式は行列 A と解ベクトル x と右辺ベクトル b を用いて $Ax = b$ と表すことができます．

ここで，$\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}$ の逆行列を両辺に左からかけることでも，以下のように解を求めることができます．

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix} 8 \\ 14 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 5 & -3 \\ -4 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 8 \\ 14 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

シミュレーション内で離散化されたデータは行列の形式で保持されることが多いため，行列ベクトルの形式で計算されることが多いです．

直接法は行列のサイズを n とすると，計算量が $O(n^3)$ であるため，規模の小さい問題に対してはそこまで時間を要しませんが，n が 100 万以上の問題となるとかなりの時間を要します．もし，n が 100 万となるとその要素数は 100 万 ×100 万となり，これらをすべて倍精度（double）の値で保持しようとすると 8 TB のサイズになり，一般的な計算機のメモリには到底乗りません．しかし，このような大規模問題の多くは行列の要素の 99％以上が 0 である疎行列であるため，非ゼロ要素部分のみを保持する方法がとられます．ちなみに深層学習の分野でも疎行列はたびたび出てきます．

大規模な行列ベクトルの方程式に対して先ほどと同様に逆行列を求める場合，逆行列は疎でない場合があります．そうなると，非ゼロ要素数が 10 倍以上に増加し，メモリに乗りきらなくなってしまいます．そのため，大規模問題に対して直接法はあまり向いていません．

次に，反復法について説明します．これは名前の通り計算を反復させて解を求めるという手法ですが，行列の疎性を保持したまま計算できるという特性があります．そのため，大規模問題に対しては，よく反復法が用いられます．反復法は $Ax = b$ に対して，残差ベクトル $r = b-Ax$ とし，r の大きさ（残差ノルム）が基準値以下に収束するまで計算を反復させ，反復終了時の x を解とする手法です．

反復法にも 10 種類以上の解法があるため，その選択や行列の種類によって収束までの反復回数は異なり，場合によっては収束することなく無限に計算がループしてしまうことがあります．この反復回数は事前に予測することが難しく，反復法を実行してみて初めて分かるということも多々あります．そのため，高速で安定して収束させるような反復法の開発が必要です．

今回対象としている電磁場解析の問題の特徴として，反復法の収束性が悪く，計算誤差の影響をうけやすいといった問題があります．さらに，問題が複素数かつ超大規模で１億自由度以上の行列も出てきます．ここで重要な要素となってくるのが計算精度です．普段，プログラムを組むにあたり，小数を使用する際はほとんどの場合，float（単精度）や double（倍精度）を利用することが多いと思います．double は 10 進数で約 16 桁の精度があり，ほとんどの数値計算の問題に対してはこの精度で十分です．

しかし，中には倍精度以上の精度が必要となることがあります．それが今回の大規模電磁場解析問題です．というのも，この問題で使用される反復法には行列ベクトル積や内積演算があり，n が大きいため，誤差が蓄積し，反復を重ねるごとにさらに計算誤差が蓄積していきます．誤差が蓄積していくと，収束までの反復回数も増大していきます．

これらの反復法においては，数学的には残差ベクトル r の大きさは反復ごとに単調減少し，n 回で収

束することが保証されています．しかし，実際は n 回以上の反復回数を要し，図2のように r の大きさもかなり振動しながら小さくなっていきます．問題の設定によってはその回数を超えるどころか停滞し，無限に収束しないことがあります．

反復法には，ほかにも前処理やそれに含まれるパラメータも重要な要素となりますが，計算精度も重要な要素の一つです．

計算誤差を抑制するために，高精度演算が用いられます．高精度演算の例として，倍精度のさらに倍の容量を使用した四倍精度は10進数でおよそ34桁の精度があります．しかし，この四倍精度数は一般的に整数演算によるソフトウェアで実装されていることが多く，同じ演算をする場合，倍精度演算と比べて10倍以上の時間を要します．

そのため，高速化のために倍々精度（疑似四倍精度）が2005年あたりに開発されました．これは，倍精度数を2つ用いて，それぞれを小数点数の上位ビットと下位ビットに割り当てることでおよそ四倍精度を実現しているものです．実際の精度は10進数で32桁の精度と若干四倍精度には劣るものの，倍精度よりは十分に高精度であり，倍精度演算で構成されているため，高速な演算（倍精度の2倍～3倍の計算時間）が期待できます．

これまで実数の範囲においては，倍々精度はすでに開発されており，最適化を行なったライブラリも存在しています．一方で複素数においては高精度演算が利用可能なライブラリ自体がほとんどなく，あったとしても実数の計算をそのまま複素数に拡張したのみで最適化がなされていないという現状でした．

これに対し，私たちは複素数に向けた，高精度演算基盤を構築し，反復法に適用しました．図2が結果の一例です．高精度演算の適用により必要な反復回数が削減できています．問題のケースにもよりますが，計算時間の短縮にも成功しています[2]．実際のがん治療などの解析に使われるソフトウェアへの組み込みや実用化はまだ行っていないため，今後行っていく予定です．

今回は大規模電磁場問題の解析ということで，複素数や高精度演算という分野を扱ってきましたが，今後解析の高性能化に伴い高精度演算の需要が高まって活用されることを期待しています．

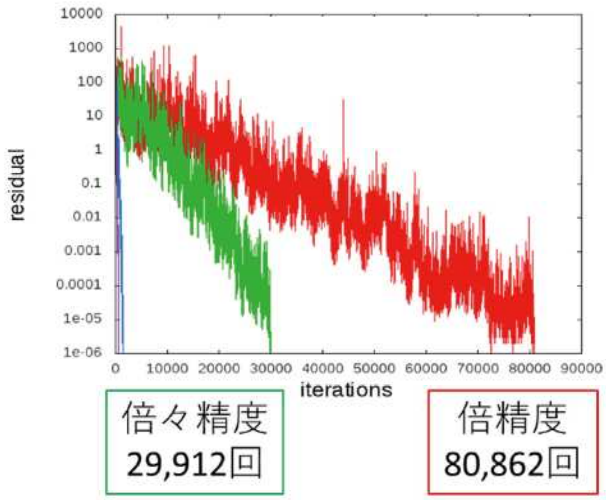

図2　収束まで要した反復回数と収束履歴

おわりに

助教として着任してもう1年が経とうとしています．早いものです．私は違う大学からの着任であったので，環境が一新され，早々に講義の担当など着任直後はかなり忙しい状態でした．ようやく落ち着いてきたタイミングでありますので，これから研究室の発展に寄与していきたいと思っています．

最後に，貴重な執筆の機会を与えてくださった萩原兼一名誉教授および「生産と技術」関係者の方に深く感謝の気持ちを申し上げます．

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，No. 3，pp. 81-95（2012）
2) Koki Masui，Masao Ogino，“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)