

불완전분해법을 전처리로 하는 공액구배법의 안정화에 대한 연구

고진환[†] · 이병채^{*}

(2002년 5월 3일 접수, 2002년 12월 17일 심사완료)

Study on Robustness of Incomplete Cholesky Factorization using Preconditioning for Conjugate Gradient Method

Jin Hwan Ko and Byung Chai Lee

Key Words : Conjugate Gradient Method (공액구배법), Incomplete Cholesky Factorization (불완전분해법), Preconditioning Method (전처리 방법)

Abstract

The preconditioned conjugate gradient method is an efficient iterative solution scheme for large size finite element problems. As preconditioning method, we choose an incomplete Cholesky factorization which has efficiency and easiness in implementation in this paper. The incomplete Cholesky factorization method sometimes leads to breakdown of the computational procedure that means pivots in the matrix become minus during factorization. So, it is inevitable that a reduction process for stabilizing and this process will guarantee robustness of the algorithm at the cost of a little computation. Recently incomplete factorization that enhances robustness through increasing diagonal dominance instead of reduction process has been developed. This method has better efficiency for the problem that has rotational degree of freedom, but is sensitive to parameters and the breakdown can be occurred occasionally. Therefore, this paper presents new method that guarantees robustness for this method. Numerical experiment shows that the present method guarantees robustness without further efficiency loss.

1. 서론

유한요소법에서 $Kx = f$ 라는 선형연립방정식을 푸는 과정은 필수적이며 이 과정의 효율성과 정확성이 매우 중요하다. 이런 선형방정식을 풀기 위한 방법들은 크게 직접방법(direct method)과 축차 방법(iterative method)으로 나눌 수 있다.

대형 문제에 적용할 때, 직접방법은 1980년 초에 개발된 스파스 해석기(sparse solver)가 성능이 우수한 것으로 알려져 있다. 이 방법은 기존의 방법보다 메모리 사용량과 전체 해석시간을 크게 줄였으며 적용성을 넓히게 되었다.⁽¹⁾ 축차방법의 경우는 1990년 이전까지는 안정성과 효율성이 낮은 이유로 연구가 활발히 진행되지 않았으나 최근 컴

퓨터 하드웨어의 획기적인 발전과 함께 안정성과 효율성을 갖춘 방법들이 개발되고 있다.

특히 유한요소법에서는 구조 행렬이 대칭이고 양정치(positive definite)이기 때문에 이 특성에 적합한 공액구배법(conjugate gradient method)이 보편적으로 사용되고 있다. 이 방법이 처음 개발되었을 때는 행렬의 특성이 M 행렬을 만족하는 경우에만 수렴성이 보장이 되었지만 Kershaw⁽²⁾는 이 방법을 보편적인 공학문제에 사용할 수 있도록 개선하고 체계적으로 정립하였다. 여기서 M 행렬이란 비대각 행렬의 항들이 모두 음수이며 음이 아닌 역행렬을 가지는 행렬로서 일반적으로 유한요소법에 의한 구조 행렬은 M 행렬이 아니다.

공액구배법의 수렴성을 높이기 위한 방법으로 원행렬에 전처리 행렬(preconditioned matrix)을 곱하는 전처리 방법(preconditioning method)이 있으며 전처리 행렬이 역행렬과 근사할수록 성능이 좋아진다. 최근 방법들로는 EBE(element by element), 불완전분해(incomplete factorization) 그리고 역행렬 근

[†] 책임저자, 회원, 한국과학기술원 기계공학과

E-mail : jhko@sys713.kaist.ac.kr

TEL : (042)869-3071 FAX : (042)869-3210

^{*} 회원, 한국과학기술원 기계공학과

사(approximate inverse matrix)방법이 있으며 그 중에서 불완전분해법이 다른 방법들보다 성능이 우수하고 적용이 용이한 것으로 알려져 있다. 불완전분해법이란 분해과정 중에 정해진 채움 패턴(fill-in pattern)에 속하는 경우에만 분해를 하는 방법으로 채워짐 패턴을 얻기 위해 탈락항을 결정하는 과정을 필요로 한다. 이때 사용되는 방법은 탈락 한도(drop tolerance)라는 값을 정하고 그 크기를 기준으로 결정하는 방법과 원행렬의 연결성에 근거한 채워짐 수준(level of fill-in)에 따라 결정하는 방법이 있다.

불완전분해법은 탈락항의 영향으로 분해 과정 중에 대각항이 음수가 되거나 0 에 아주 가까워지는 해석불능(breakdown)이 생길 수 있기 때문에 안정성(robustness)을 보장할 수 없다. 그래서 안정성을 보장하기 위해서 분해전의 행렬이 M 행렬을 만족해야 한다고 알려져 있으며⁽²⁾ M 행렬의 만들기 위해서는 단순화(reduction) 과정이라는 안정화 방법이 필요하다. 일반적으로 사용되는 단순화 과정으로는 C 단순화(C-reduction)와 DC 단순화(DC-reduction)^(4,5) 과정이 있다.

불완전분해법은 성능 향상을 위해 기본 방법을 수정하여 크게 두 가지 군으로 개발되었다. 첫 번째 군은 단순화 과정을 사용하고 분해과정에서 탈락항의 일부를 대각항에 보상하는 불완전 분해 방법들로서 XIC 군이라고 한다.⁽⁶⁾ XIC 군은 일반적으로 채워짐 수준에 의해 탈락항을 결정하고 탈락항의 값을 행합개념(row-sum theory)에 근거하여 대각항에 적용한다. 이 군의 방법으로는 IC(incomplete Cholesky), MIC(modified incomplete Cholesky), DMIC(dynamic modified incomplete Cholesky), RIC(relaxation incomplete Cholesky), DRIC(dynamic relaxation incomplete Cholesky)가 있으며 그 중 DRIC 의 방법이 성능이 우수한 것으로 알려져 있다.⁽⁹⁾ XIC 군은 단순화된 행렬을 사용함으로써 안정성은 보장되지만 회전자유도가 있는 문제에서는 성능이 낮다고 알려져 있다.

두 번째 군은 단순화 과정을 사용하지 않고 탈락항의 절대값을 더하여 대각항의 값을 상대적으로 크게 함으로써 안정화를 하며 CIC 군이라고 명명한다. 이 군의 방법으로는 CIC (corrected incomplete Cholesky)⁽¹⁰⁾과 RBIC(robust incomplete Cholesky)⁽¹¹⁾가 있다. CIC 군은 XIC 군과 비교하면 병진자유도가 있는 문제에서는 성능이 떨어지지만 쉘 요소와 같은 회전자유도를 포함한 문제에 대해서 성능이 우수하다고 알려져 있다.⁽¹⁰⁾ 그리고 탈락 한도를 사용하는 방법의 경우가 채워짐 수준을 사용하는 방법보다 성능이 우수하다고 알려져 있다.⁽¹¹⁾ 그러나 이 군은 XIC 군과 달리 매개 변수를 필요로 하고 매개 변수의 값에 따라 성능이 바뀌며 매개 변

수들의 최적 값도 역시 문제나, 메쉬 성능(mesh quality)에 따라 달라질 수 있다는 단점을 안고 있다. 그리고 최적 값에 가까워질수록 해석불능이 생길 수 있음을 수치실험을 통해서 알 수 있었다.

본 논문에서는 단순화 방법과 전처리 공액구배법을 간략히 기술하고 불완전분해법의 기본 개념과 각 군의 알고리즘에 대해 설명한다. 그리고 CIC 군에서 발생할 수 있는 해석불능에 대해서 안정화 방법을 새로 제안한다. 수치실험에서는 제안된 안정화 방법의 효용성과 불완전분해법의, 각 군들의 성능을 알아 보고 직접방법인 스푸스 해석기와의 성능비교를 한다.

2. 본 론

2.1 단순화 과정과 불완전분해법

공액구배법에서 전처리 행렬은 수렴성을 높이기 위해 사용하며 시스템 행렬의 역행렬과 근사할수록 좋은 성능을 보인다. 불완전분해법은 분해과정에서 일부 항을 탈락시켜 전처리 행렬을 구한다. 이때 원행렬이 M 행렬이면, 불완전분해에서 대각항이 0 이나 음이 되지 않으며 축차기법이 실패하지 않는다. 양정치인 구조 행렬을 M 행렬로 만들기 위한 단순화 방법으로는 C 단순화와 D 단순화가 있다.

C 단순화는 Beauwens 와 Wilmet⁽⁴⁾가 제안한 대각항 보상 방법이며 비대각항 중에 양수인 항을 탈락시키고 각 행의 합을 원행렬의 행의 합과 같게 대각항을 보상한다. 즉 식 (1)과 같이 구해진다.

$$K_{C-reduction} \tilde{I} = K\tilde{I} \quad \text{where, } \tilde{I} = \{1 \ 1 \ 1 \ \dots\}^T \quad (1)$$

그리고 D 단순화는 그룹화인데 병진자유도의 각 방향에 해당되는 항들을 그룹화 하고 다른 병진자유도와 연성(coupled term)을 모두 0 으로 놓는 방법이다.⁽⁵⁾

$$K = \begin{bmatrix} K_{xx} & K_{xy} & K_{xz} \\ K_{yx} & K_{yy} & K_{yz} \\ K_{zx} & K_{zy} & K_{zz} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} K_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & K_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & K_{zz} \end{bmatrix} \quad (2)$$

이 방법은 단독으로 사용되지 않고 C 단순화와 같이 사용된다. D 단순화에 이어 C 단순화가 사용되는 방법을 DC 단순화라 하며 C 단순화에 비해 성능이 좋은 것으로 알려져 있다. 그리고 위의 두 방법에 의해 만들어진 M 행렬은 원행렬과 스펙트럼(spectrum)이 같은 것으로 알려져 있다.⁽⁶⁾

불완전분해법은 탈락항 결정방법을 통해 얻어진 채움 패턴(fill-in pattern)에 대해서만 분해과정을 행하는 방법이다

INITIALIZATION
 $U = \text{offdiag}(K)$
 $P = \text{diag}(K)$
 ITERATION
 For $r = 1, \dots, N-1$
 For $i = r+1, \dots, N$ such as $(r, i) \in \text{NZP}$
 $\text{temp} = u_{ri} / p_r$
 $p_i = p_i - \text{temp} u_{ri}$
 For $j = i+1, \dots, N$ such as $(r, j) \in \text{NZP}$
 If $(i, j) \in \text{FP}$ then $u_{ij} = u_{ij} - \text{temp} u_{rj}$

Fig. 1 Incomplete Cholesky factorization(IC)
 (NZP stands for non-zero pattern and
 FP represents fill-in pattern)

탈락항 결정방법으로는 두 가지 방법이 있는데 첫번째 방법은 분해과정에서 비대각항이 탈락 한도보다 작은 경우에 탈락시키는 것이고 두번째 방법은 연결 정보에 의해서 일정한 채워짐 수준에 따라 채워지게 하는 방법이다. 첫번째 방법은 식 (3)과 같은 기준으로 채움 패턴이 결정이 되며 채움 패턴에 속하는 경우 $\psi_{ij} = 1$ 과 같이 표시한다.^(9,10)

$$(\text{candidate})_{ij}^2 > \phi \cdot P_{ii} \cdot P_{jj} \quad (3)$$

여기서, ϕ 는 탈락 한도이고 P_{ii} 는 i 번째 대각항을 의미한다.

두 번째 방법은 식 (4)와 같은 연결관계를 채워짐 수준으로 사용하여 채움 패턴을 결정한다.

$$\begin{aligned} & \bullet \psi_0 \equiv \{(\psi_0)_{ij} = 1 \Leftrightarrow i = j\} \\ & \bullet \psi_1 \equiv \{(\psi_1)_{ij} = 1 \Leftrightarrow K_{ij} \neq 0\} \\ & \bullet \psi_r \equiv \{(\psi_r)_{ij} = 1 \Leftrightarrow (\psi_{r-1})_{ij} = 1 \text{ or} \\ & \exists r < i, j \text{ such that } (\psi_{r-1})_{ri} = 1 \text{ and } (\psi_{r-1})_{rj} = 1\} \end{aligned} \quad (4)$$

수준 0 은 대각행렬만을 갖는 경우이고 수준 1 은 원행렬과 패턴이 같은 경우이며 수준 m 은 수준 $m-1$ 을 포함하고 수준 $m-1$ 과 연결성이 있는 항을 포함하게 된다.

첫번째 방법은 채움 패턴이 불완전 분해과정이 끝난 후에 결정되기 때문에 프로그래밍이 용이하지 않고 두 번째 방법은 채움 패턴을 미리 구하는 과정이 새로 필요하게 되는 반면에 불완전 분해과정 전에 채움 패턴을 알 수 있어 프로그래밍이 용이하다.

앞에 기술한대로 채움 패턴에 따라 불완전 분해과정이 진행되는데 전체 알고리즘은 Fig. 1 에 있다. 여기서, NZP(non-zero pattern)는 원행렬의 비대각항의 패턴을 의미하며 FP(fill-in pattern)은 불완전분해법에서 사용되는 채움 패턴을 의미한다.

INITIALIZATION

$$\begin{aligned} x^0 &= x^{\text{ini}} \\ g^0 &= Kx^0 - f \\ d^0 &= -g^0 \\ h^0 &= g^0 \end{aligned}$$

ITERATION

$$\begin{aligned} \tau_k &= \frac{g^{kT} h^k}{d^{kT} K d^k} \\ x^{k+1} &= x^k + \tau_k d^k \\ g^{k+1} &= g^k + \tau_k K d^k \\ h^{k+1} &= M^{-1} g^{k+1} \\ \beta_k &= \frac{g^{k+1T} h^{k+1}}{g^{kT} h^k} \\ d^{k+1} &= -h^{k+1} + \beta_k d^k \end{aligned}$$

Fig. 2 Preconditioned conjugate gradient method

2.2 전처리 공액구배법

공액구배법의 수렴까지의 횟수 i_ϵ 는 가장 큰 고유치와 가장 작은 고유치의 비인 조건수 κ 와 관련이 있으며 식 (5)와 같이 결정된다.⁽¹⁰⁾

$$i_\epsilon \leq \frac{1}{2} \sqrt{\kappa} \log \frac{2}{\epsilon} + 1 \quad (5)$$

여기서, ϵ 는 식(6)의 수렴조건인 한계치에 해당되는 값이다.

$$\frac{\|x_i - x\|}{\|x\|} \leq \epsilon \quad (6)$$

여기서, x_i 는 i 번째 측차에서의 정해 x 의 근사값이다.

시스템방정식은 구해진 전처리 행렬을 이용하여 식 (7)과 같이 변형할 수 있다.

$$\begin{aligned} Kx &= f \\ [L^{-1}K(L^T)^{-1}](L^T x) &= (L^{-1})f \quad \text{where, } M = L^T L \end{aligned} \quad (7)$$

변형된 $[L^{-1}K(L^T)^{-1}]$ 행렬의 조건수는 원행렬 K 보다는 작기 때문에 식 (5)에 의해 더 빠르게 수렴을 한다. 여기서 얻는 계산량의 감소는 수정된 식 때문에 증가하는 계산량보다는 훨씬 큰 것으로 알려져 있다.

변형된 시스템방정식에 적용되는 전처리 공액구배법의 알고리즘을 Fig. 2 에 보였다.

INITIALIZATION

$$U = \text{offdiag}(K)$$

$$P = \text{diag}(K)$$

ITERATION

For $r = 1, \dots, N-1$

$$\tau_0 = -\frac{1}{P_r} \sum_{i>r} u_{ri}$$

If $\tau_0 > \tau$ then $\omega = \frac{2\tau}{\tau_0} - 1$ else $\omega = 1$

For $i = r+1, \dots, N$ such as $(r, i) \in \text{NZP}$

$$\text{temp} = u_{ri} / p_r$$

$$p_i = p_i - \text{temp} u_{ri}$$

For $j = i+1, \dots, N$ such as $(r, j) \in \text{NZP}$

If $(i, j) \in \text{FP}$ then $u_{ij} = u_{ij} - \text{temp} u_{rj}$

else $p_i = p_i - \omega \text{temp} u_{rj}$

$$p_j = p_j - \omega \text{temp} u_{rj}$$

Fig. 3 DRIC algorithm

2.3 XIC 군과 CIC 군

앞에 설명한 기본 IC 는 탈락되는 비대각행렬 부분을 그대로 없애는 방법이다. 이런 IC 의 성능을 개선하기 위한 방법은 처음 Buleev⁽⁶⁾에 의해 제안되었으며 Axeleson⁽⁷⁾과 Gustafsson⁽⁸⁾은 수정 방법을 해석적으로 성공하였다. 이런 수정 방법의 중요 과정은 식 (8)과 같은 행합개념에 근거한다.

$$Mx = Kx + \Lambda Px \quad (8)$$

여기서, x 는 $Kx \geq 0$ 을 만족하는 양수의 벡터이고, $P = \text{diag}(K)$, $\Lambda = (\lambda_i)$ 음수가 아닌 대각행렬로 추가행렬(perturbation matrix)라고 한다.

그리고 수정방법은 채워짐 패턴에서 탈락된 비대각항의 값을 대각항에 그 영향을 주는 방법으로 정해진다. 이러한 수정방법을 가지고 있는 군(group)을 XIC 군이라고 하며 이 군으로는 MIC, DMIC, RIC, DRIC 가 있다. 이 군 중에서 성능이 가장 우수한 것으로 알려진 DRIC 를 본 논문에서 사용할 것이며 알고리즘은 Fig. 3 과 같다. 여기서는 완화계수 ω 가 사용되며 이 값은 각 행에서 동적으로 변하면서 결정된다.

Fig. 3 에서 τ 는 $1 - \tau = h_0$ 에서 구해지며 h_0 는 식 (9)에서 구해진다.

$$h_0 \approx \frac{1}{\sqrt{\text{number of nodes}}} \quad (9)$$

where, d is spatial dimension

The alternative factorization

For $i = 1, \dots, n$

$$(P)_{ii} \leftarrow (K)_{ii} - \sum_{r<i} (U)_{ri}^2 (P)_{rr}^{-1}$$

For $j = i+1, \dots, n$

$$(\text{candidate})_{ij} \leftarrow (K)_{ij} - \sum_{r<i} (U)_{ri} (U)_{rj} (P)_{rr}^{-1}$$

If $(\psi)_{ij} = 1$

then $(U)_{ij} \leftarrow (\xi)_{ij}$

else $(U)_{ij} \leftarrow 0$

The CIC factorization

For $i = 1, \dots, n$

$$(P)_{ii} \leftarrow (K)_{ii} - \sum_{r<i} (U)_{ri}^2 (P)_{rr}^{-1}$$

For $j = i+1, \dots, n$

$$(\xi)_{ij} \leftarrow (K)_{ij} - \sum_{r<i} (U)_{ri} (U)_{rj} (P)_{rr}^{-1}$$

If $(\psi)_{ij} = 1$

then $(U)_{ij} \leftarrow (\xi)_{ij}$

else compute r

$$(P)_{ii} \leftarrow (P)_{ii} + r^2 |(\xi)_{ij}|$$

$$(P)_{jj} \leftarrow (P)_{jj} + r^{-2} |(\xi)_{ij}|$$

Fig. 4 The alternative IC and the CIC algorithm

이런 XIC 군의 특징은 초기의 단순화 과정을 필요로 하게 되며 행합개념을 기본으로 하며 채워짐 수준에 의해 결정된 방법을 사용한다. 그러나 이 방법은 단순화 방법을 사용하여 안정성을 보장할 수 있으나 반면에 회전자유도가 있는 쉘 문제에서는 성능이 크게 떨어지는 것으로 알려져 있다.

이런 효율성의 단점을 보완하고 회전자유도가 있는 문제에 성능을 높이기 위해 제안된 방법이 CIC 방법이다.⁽¹⁰⁾ 먼저 원행렬을 식 (10)과 같이 나누는 것을 시작으로 한다.

$$K = M - E \quad \text{where, } E \text{ is error matrix (10)}$$

이때 여러 행렬 E 는 M 행렬의 양정치를 만족하기 위하여 대각행렬에 곱해지는 매개변수가 Fig. 4 와 같이 정해진다. 그리고 CIC 는 Fig. 2 의 IC 에서 시작하는 것이 아니고 Fig. 4 의 다른 방식의 IC 를 사용한다. 그렇지만 이 IC 방식은 접근방법만 틀리고 해석 결과는 Fig. 2 의 IC 와 같은 결과를 갖는다. 여기서 XIC 군과 다른 점은 비대각항의 값을 그대로 사용하지 않고 절댓값이 사용함으로써 대각항을 상대적으로 크게 하여 안정성을 높이는 점이다. 그리고 채워짐 패턴을 사용하는데 있어서

탈락 한도를 이용한 방법을 사용하는 점도 다르다고 할 수 있다.

그래서 CIC 에서는 탈락 한도의 결정이 성능에 크게 영향을 미치는 요소가 되며 적절한 값의 결정이 중요하다. 일반적으로 10^{-4} 값을 사용하는 것이 적절하다고 한다. 그리고 CIC 에서 r 의 값을 결정하는 것도 역시 중요하다. 안정성면에서는 1로 결정하는 것이 좋으나 성능을 높이기 위해 식 (11)과 같이 결정하여 사용한다.⁽¹⁰⁾

$$r^2 = \sqrt{\frac{(P)_i}{(P)_j}} \quad (11)$$

다음과 같이 결정하면 Fig. 4의 수정 부분의 식은 식 (12)과 같이 된다.

$$\begin{aligned} (P)_i &\leftarrow (P)_i \left(1 + \frac{|\xi|}{\sqrt{(P)_i (P)_j}} \right) \\ (P)_j &\leftarrow (P)_j \left(1 + \frac{|\xi|}{\sqrt{(P)_i (P)_j}} \right) \end{aligned} \quad (12)$$

이런 CIC 과 같은 개념을 사용하는 방법으로는 RBIC 가 있고 전체 알고리즘은 Fig. 5 에 있다. CIC 와의 다른점은 r 값 대신 완화 계수가 비대각행에 곱해져서 더해지는 방식에 있다. 이때 완화 계수의 최적 값의 결정은 일차원 탐색(line search)에 의해 정해지게 된다. 이것은 r 값이 미리 정해지는 CIC 와 다른점이며 최적 값을 결정하기 위해서는 부수적인 계산 과정이 필요하게 되지만 그 외에 다른 부분은 같은 과정을 사용한다. 그래서 이 두 방법을 같은 군으로 보고 본 논문에서는 CIC 군이라고 명명한다.

CIC 군의 특징은 매개변수의 결정이 중요한 변수가 된다는 점과 XIC 군에 비해 회전자유도가 있는 문제에서 성능이 우수하다는 점이다. 그렇지만 이 방법들의 단점은 매개변수를 결정해야 한다는 점이고 이 매개변수가 문제에 따라, 메쉬 성능에 따라 다르다는 점에 있다. 그리고 RBIC 에서는 일차원 탐색과 조건수 예측과 같은 추가적인 과정이 따르게 되는 점도 계산 효율면에서 단점이라 할 수 있다.

특히 매개변수 값들이 효율성 위주로 결정이 되는 경우에는 분해 중의 대각행렬이 음수가 되는 해석불능이 발생할 수 있다. 다음 절에서 CIC 군에서 발생할 수 있는 해석불능의 경우에 안정성을 높이는 방법에 대하여 제안하였다

For $i=1, \dots, n$

$$(P)_i \leftarrow (K)_i - \sum_{r < i} (U)_r^2 (P)_r^{-1}$$

For $j=i+1, \dots, n$

$$(\xi)_{ij} \leftarrow (K)_{ij} - \sum_{r < i} (U)_r (U)_{rj} (P)_r^{-1}$$

If $(\psi)_{ij} = 1$

$$\text{then } (U)_{ij} \leftarrow (\xi)_{ij}$$

else compute r

$$(P)_i \leftarrow (P)_i + \omega |(\xi)_{ij}|$$

$$(P)_j \leftarrow (P)_j + \omega |(\xi)_{ij}|$$

Fig. 5 RBIC algorithm

2.4 안정화를 위한 새로운 방법

앞에서 설명한 것처럼 CIC 군은 XIC 군보다 성능이 우수하지만 단순화 기법과 같은 안정화 과정이 없기 때문에 안정성을 확신할 수 없다. 그러므로 안정성을 높이는 방법이 필요한데 본 논문에서 CIC 군의 효율성의 희생을 줄이면서 안정성을 높이는 방법을 제안한다.

해석불능은 분해과정에서 대각항이 음수가 되거나 0 에 아주 가까운 값이 되는 경우로 전체 시스템이 안정성이 매우 떨어지게 된다. 0 에 아주 가까워지게 되면 역행렬이 너무 커지게 되어 정확성이 아주 떨어지게 되는데 그때의 기준치가 10^{-15} 정도로 알려져 있으며⁽¹¹⁾ 본 논문에서도 이 값을 안정성을 판단하는 기준으로 사용하였다. 그리고 음수가 되는 경우 역시 행렬의 특성을 나쁘게 하여 수렴성이 떨어지게 된다.

그래서 제안한 방법은 이런 해석불능을 억제하고 기존의 방법의 효율성을 유지하도록 하는 방법이다. 효율성의 희생을 줄이기 위해서 수정방법에서 추가되는 과정은 분해과정 중에서 해석불능에 해당되는 경우에 대해서만 실행이 되도록 하였으며 두 과정을 통해 안정성을 주었다. 첫번째 과정은 비대각항을 순차적으로 대각항에 기여하게 하는 방법으로 기존의 방법의 탈락 한도를 해석불능에 해당되는 경우에만 아주 낮은 값으로 치환하는 효과를 준다. 그러나 해당되는 열의 모든 비대각항이 대각항에 기여해도 대각항이 0 보다 작다면 두번째 과정을 시행한다. 두 번째 과정은 해석불능에 해당되는 열의 비대각항의 영향을 없애는 방법으로 분해과정 중에 비대각항으로 변화하는 영향을 탈락하여 대각항의 양수화를 가능케 하였다.

이 두 과정을 통하여 CIC 군에서 생길 수 있는 해석불능을 방지할 수 있어 안정성을 높이는 결과를 얻었다.

For $i=1, \dots, n$
 $(P)_{ii} \leftarrow (K)_{ii} - \sum_{r < i} (U)_n^2 (P)_{rr}^{-1}$
 \Rightarrow second modification $(P)_{ii} \leftarrow (P)_{ii} + (U)_n^2 (P)_{rr}^{-1}$
 For $j=i+1, \dots, n$
 $(\xi)_{ij} \leftarrow (K)_{ij} - \sum_{r < i} (U)_n (U)_{rj} (P)_{rr}^{-1}$
 If $(\psi)_{ij} = 1$
 then $(U)_{ij} \leftarrow (\xi)_{ij}$
 \Rightarrow first modification $(P)_{ii} \leftarrow (P)_{ii} + |(\xi)_{ij}|$
 $(P)_{jj} \leftarrow (P)_{jj} + |(\xi)_{ij}|$
 else compute r
 $(P)_{ii} \leftarrow (P)_{ii} + r^2 |(\xi)_{ij}|$
 $(P)_{jj} \leftarrow (P)_{jj} + r^{-2} |(\xi)_{ij}|$

Fig. 6 Modified CIC method

자세한 알고리즘은 Fig. 6에 나타나 있다. Fig. 6에서 추가된 수정 방법들은 모두 순차적으로 진행되며 각 과정 중에서 대각항이 10^{-15} 보다 커지게 되면 과정을 마치고 원래 과정으로 복귀한다. 그렇지만 수정 과정의 횟수가 증가할수록 효율성이 떨어지기 때문에 적절한 수정 횟수의 제한이 필요하다. 본 논문에서는 효율성을 고려하여 제한횟수를 10으로 놓고 해석하였다. 이렇게 수정된 CIC 군은 안정성이 높아지고 최적인 매개변수를 선택하는 범위가 넓어지는 장점을 가지게 된다.

3. 수치실험

수치 실험은 두 가지 목적을 가지고 실행하였다.

- CIC 군의 매개변수의 영향을 파악하고 해석불능이 나타났을 때 제안한 방법의 효용성을 알아본다.
- CIC, RBIC 그리고 DRIC-DC의 성능을 다양한 예제에 적용하여 서로의 성능을 비교하고 직접방법인 스파스 해석기와의 성능을 비교하여 본다.

수치 실험에 사용된 모델들은 실제 산업현장이나 실제 생활에서 볼 수 있는 모델들로 자세한 설명은 Table 1에 나타나 있다. T-type은 병진자유도만 있는 문제들이고 R-type은 병진자유도와 회전자유도 모두 있는 문제들이다. Fig 7~14에는 각 예제들의 유한요소 모델이 있다. 그리고 해석에 사용된 방법들은 다음과 같다.

- DRIC-DC(1) : DC 단순화를 거치고 DRIC를 적용하며 채워짐 수준은 1이다.

Table 1 Example problems

	Nodes	Elements	DOF's	Element type (Problem Type)
Annular plate	640	600	3720	Quad (R-Type)
Coffee cup	794	729	4404	Quad (R-Type)
Can	3150	3108	18540	Quad (R-Type)
Vessel cap	4056	3964	23676	Quad, Tria (R-Type)
Car door	11806	12485	60072	Quad, Tria (R-Type)
Solid tank	2597	1710	7023	Hexa, Penta (T-Type)
Curved plate	3751	3000	10890	Hexa (T-Type)
Connecting rod	4747	19596	13896	Tetra (T-Type)

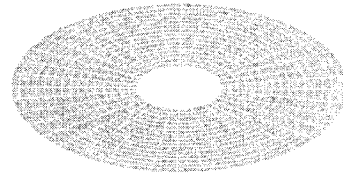


Fig. 7 Annular plate FEM model

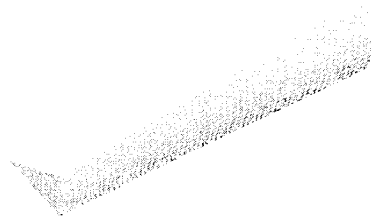


Fig. 8 Coffee cup FEM model

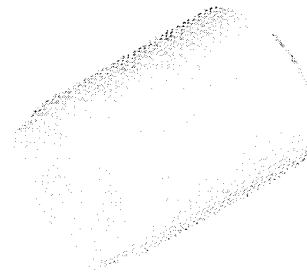


Fig. 9 Can FEM model

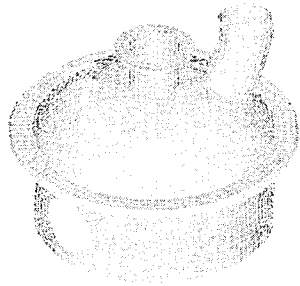


Fig. 10 Vessel cap FEM model

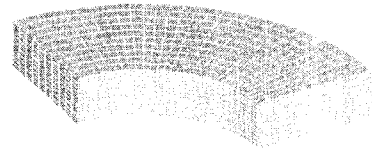


Fig. 13 Curved plate FEM model

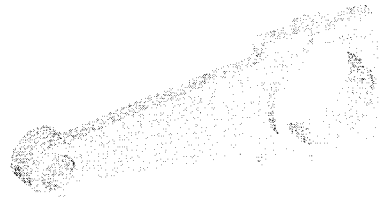


Fig. 14 Connecting rod FEM model

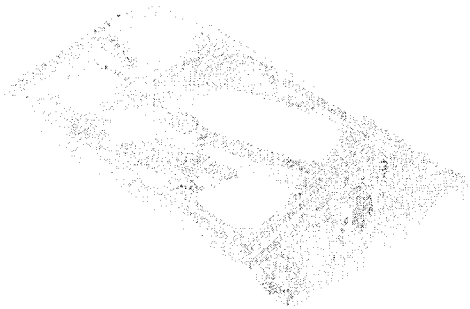


Fig. 11 Car door FEM model

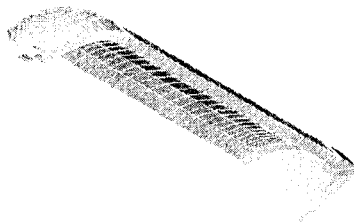


Fig. 12 Solid tank FEM model

- DRIC-DC(2) : DC 단순화를 거치고 DRIC 를 적용하며 채워짐 수준은 2 이다.
- CIC : 탈락 한도를 10^{-4} 로 놓고 CIC 를 적용한다.
- RBIC(ω) : 탈락 한도를 10^{-4} 로 놓고 완화계수는 일정한 값으로 고정하고 RBIC 를 적용한다.

공액구배법의 수렴 조건은 Fig. 2 의 초기 g 값과 축차 과정 중의 g 값의 비로 식 (13)과 같이 결정한다.

$$\frac{\|g_k\|}{\|g_0\|} \leq 10^{-6} \quad (13)$$

Table 2 Performance comparison of each method

		Off-diag terms	Number of iterations	mflops
Solid tank	DRIC-DC(1)	49,074	172	100
	DRIC-DC(2)	108,473	139	100
	CIC	155,680	164	136
	RBIC(0.3)	173,627	93	100
Connecting rod	DRIC-DC(1)	62,337	359	273
	DRIC-DC(2)	128,892	243	218
	CIC	259,448	362	422
	RBIC(0.3)	289,365	226	281
Annular plate	DRIC-DC(1)	57,988	420	143
	DRIC-DC(2)	92,062	393	162
	CIC	46,884	100	33
	RBIC(0.3)	49,645	91	30
Vessel cap	DRIC-DC(1)	262,800	1428	2838
	DRIC-DC(2)	493,770	1231	3023
	CIC	493,540	538	1323
	RBIC(0.3)	556,192	302	792

mflops : 전체 과정 중에 행해진 실수 곱의 연산횟수로 백만 단위(10^6)로 표시한 것이다

3.1 XIC 군과 CIC 군의 성능 비교

T-type 예제와 R-type 예제에 대해 수치실험을 하여 XIC 군의 DRIC-DC 와 CIC 군의 CIC, RBIC 의 성능을 비교하였다. 그리고 RBIC 의 경우는 최적 완화계수를 구하는데 사용되는 일차원 탐색 방법과 조건수 예측 과정들 부수적인 과정을 생략하고 본 논문에 있는 예제들에서 안정성을 가지는 일정한 값 0.3 으로 정하여 해석을 하였다.

Table 2 로부터 T-Type 예제의 경우 XIC 군이 CIC 군보다 우수하며 R-Type 예제의 경우 CIC 군보다 성능이 떨어짐을 알 수 있다.

Table 3 Effect on variation of drop tolerance

	Drop tolerance	Off-diag. terms	Number of iterations	mflops
Annular plate	1.00E-03	34,797	185	55
	1.00E-04	46,884	100	33
	1.00E-05**	59,382	163	58
Coffee cup	1.00E-03	50,263	281	101
	1.00E-04	92,407	148	69
Can	1.00E-03	187,060	491	752
	1.00E-04	351,639	333	628
	1.00E-05	557,749	210	502

Table 4 Effect on variation of relaxation parameter

	Relaxation param.	Off-diag. terms	Number of iterations	mflops
Annular plate	2.50E-01	49,759	90	30
	1.25E-01	50,112	89	30
	6.25E-02**	50,297	138	46
Coffee cup	2.50E-01	97,653	139	66
	1.25E-01	99,767	116	56
	6.25E-02**	100,917	99	47
Can	2.50E-01	402,621	179	365
	1.25E-01**	416,341	158	328
	6.25E-02**	427,353	165	347

** : 해석불능의 경우로 해석결과는 본 논문에서 제안한 방법으로 안정화한 결과이다.

그렇지만 R-Type 에서의 성능 차이가 더 크고 RBIC 에서의 최적완화계수를 찾는 노력이 적어진다면 T-Type 에서의 성능의 차이를 줄일 수 있는 가능성이 있다. 따라서 전체적인 성능에서 CIC 군이 XIC 군보다 우수하다고 할 수 있고 성능향상 가능성도 크다.

3.2 탈락 한도의 변화에 따른 특성변화

CIC 에서는 탈락 한도를 이용하여 채워짐 패턴을 얻는 방식을 사용한다. 이때 탈락 한도의 영향을 알아보고 해석불능이 나타나는 경우 제안한 방법의 효용성을 검토한다.

Table 3 을 보면 Can 에서는 탈락 한도가 작아질수록 성능이 좋아지는 것을 볼 수 있다. 그렇지만 Annular Plate 와 Coffee Cup 은 10^{-5} 에서 해석불능이 발생하였으며 이때 제안한 방법으로 안정화시킬 수 있음을 볼 수 있다. 결과를 보면 각 예제마다 탈락 한도에 대한 영향이 조금씩 다른 것을 볼 수 있고 탈락 한도가 작아질수록 비대각항이 늘어나는 것을 확인할 수 있다. 그리고 제안한 방법으로 안정화 하는 경우 성능이 약간 떨어지지만 실제 해석 가능한 범위가 넓어지므로 적용 범위가 넓어지는 장점을 가진다.

Table 5 Performance comparison with a sparse solver

		Off-diag		Number of operation	
		Number of terms	Ratio (%)	mflops	Ratio (%)
Vessel cap	Sparse solver	12,405,930	100.0	2278	100.0
	CIC	493,540	4.0	1323	58.1
	RBIC(0.3)	556,192	4.5	792	34.8
Car door	Sparse solver	31,229,484	100.0	4908	100.0
	CIC	1,157,402	3.7	1392	28.4
	RBIC(0.3)	1,193,423	3.8	1002	20.4
Connect rod	Sparse solver	3,418,047	100.0	840	100.0
	CIC	259,448	7.6	421	50.1
	RBIC(0.3)	289,365	8.5	281	33.5
	DRIC-DC(1)	62,337	1.8	273	32.5
Curved plate	Sparse solver	4,890,834	100.0	2323	100.0
	CIC	316,510	6.5	272	11.7
	RBIC(0.3)	361,824	7.4	184	7.9
	DRIC-DC(1)	90,711	1.9	138	5.9

3.3 완화 계수의 변화에 따른 특성변화

RBIC 에서 탈락 한도는 10^{-4} 로 정하고 완화계수를 변화하면서 영향을 알아보고 해석불능이 나타나는 경우 제안한 방법에 의한 영향을 파악한다.

Table 4 를 보면 탈락 한도의 경우와는 달리 완화 계수의 변화에 따라 비대각항의 개수 변화가 거의 없다고 할 수 있고 해석불능이 생기는 경우도 다른 경향을 볼 수 있다. 반면에 완화 계수의 경우에도 예제에 따라 영향의 정도가 다르고 제안한 방법으로 안정화가 가능한 것을 볼 수 있어서 탈락 한도의 경우와 동일한 결과를 보였다. 그리고 제안한 방법에 의해 안정화된 경우는 효율성이 크게 떨어지지 않았으며 완화 계수를 구하는 범위가 넓어지는 장점이 있다.

3.4 스파스 해석기와의 비교

큰 크기(10 000~ 70 000 DOF)의 예제들에 대해서 각 방법들의 성능을 스파스 해석기의 성능과 비교하여 본다.

Table 5 를 보면 비대각항의 개수에서 축차 해석기의 방법들의 대부분이 훨씬 작음을 볼 수 있다. 이것은 예제의 크기가 커질수록 더 크게 나타나는 현상으로 예제의 크기가 커질수록 직접방법에 비해 성능이 좋아질 수 있음을 알 수 있다. 헤를 수렴시키기까지의 계산량은 직접 방법의 35% 이하이며 충분히 경쟁력이 있는 정도이며 문제의 대형화에 따른 이점, 패러렐프로세싱(parallel processing)의 적용이 쉬운 점 등을 고려하면 축차방법을 대안으로 생각할 수 있다.

4. 결론

본 논문에서는 불완전분해법을 전처리 방법으로 사용하는 공액구배법을 다양한 예제에 적용하여 성능을 비교하였다. 불완전분해법은 탈락된 비대각항의 값을 이용하는 XIC 군과 절대값을 이용하는 CIC 군으로 분리하여 사용되었고 예제들은 회전자유도가 있는 R-type 과 병진자유도만으로 이루어진 T-type 으로 분리하여 적용되었다.

수치실험의 결과에서 CIC 군은 XIC 군에 비해 T-type 에서의 성능은 떨어지지만 R-type 에서의 성능이 훨씬 좋고 성능 향상의 가능성도 있기 때문에 전반적인 성능면에서 우수하다고 할 수 있다. 그렇지만 CIC 군은 매개변수에 따라 성능차이가 나며 효율성만을 위해 매개변수를 결정하는 경우 해석불능이 생길 수 있음을 알 수 있었다. 그래서 해석불능의 경우에 대해서 안정화 방법을 새로 제안하였고 제안한 방법에 의해 효율성의 희생이 줄이면서 안정화되어 CIC 군의 적용성이 넓어지게 되었다.

그리고 축차방법인 전처리공액구배법과 직접방법인 스파스 해석기와의 성능 비교를 통해 전처리 방법을 사용한 공액구배법이 크기가 큰 예제에서 메모리 사용량과 해석에 드는 노력 모두 우수하고 대형 문제로 갈수록 성능 차이가 더 커질 수 있음을 알 수 있었다.

앞으로의 연구로는 CIC 군의 성능개선과 전처리 행렬의 개선을 통한 효율향상, 고유치문제, 비선형 문제로의 확장 등을 들 수 있다.

참고문헌

- (1) George, A., 1981, *Computer Solution of Large Sparse Positive Definite System*, Prentice-Hall.
- (2) Meijerink, J. A. and Van der vorst, H. A., 1977, "An Iterative Solution Method for Linear System of Which the Coefficient Matrix is a Symmetric M-matrix," *Mathematical Computation*, Vol. 31, pp. 148~162.
- (3) Kershaw, D. S., 1978, "The Incomplete Cholesky-Conjugate Gradient Method for the Iterative Solution of Systems of Linear Equation," *Journal of Computational Physics*, Vol. 26, pp. 43~65.
- (4) Beauwens, R. and Wilmet, R., 1989, "Conditioning Analysis of Positive Definite Matrices by Approximate Factorizations," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 26, pp. 257~269.
- (5) Axelsson, O. and Kolotilina, I., 1994, "Diagonal Compensated Reduction and Related Preconditioning Methods," *Numerical Linear Algebra Application*, Vol. 1, pp. 155~177.
- (6) Buleev, N. I., 1960, "A Numerical Method for the Solution of Two-Dimensional and Three-Dimensional Equation of Diffusion," *Math. Sb.*, Vol. 51, pp. 227~238.
- (7) Axelsson, O., 1972, "A Generalized SSOR Method," *BIT*, Vol. 13, pp. 443~467.
- (8) Gustafsson, I., 1978, "A Class of First Order Factorization Methods," *BIT*, Vol. 18, pp. 142~156.
- (9) Saint-Georges, P., Warzee, G., Beauwens, R., and Notay, Y., 1996, "High-Performance PCG Solvers for FEM Structural Analysis," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 39, pp. 1313~1340.
- (10) Saint-Georges, P., Warzee, G., Beauwens, R., and Notay, Y., 1999, "Problem-Dependant Preconditioners for Iterative Solvers in FE Elastostatics," *Computers and Structures*, Vol. 73, pp. 33~43.
- (11) Hladic, I., Reed, M. B., Swoboda, G., 1997, "Robust Preconditioners for Linear Elasticity FEM Analyses," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 40, pp. 2109~2127.
- (12) Chow, E. and Saad, Y., 1997, "Experimental Study of ILU Preconditioners for Indefinite Matrices," *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 86, pp. 387~414.