

法を用いた場合、大規模では圧倒的に行列計算時間が大きかった。これに対し、開発済のベクトル化LU分解方式¹⁾を用いると、図中の棒グラフに示すように著しい効果があった。しかし、デバイスモデル計算は規模に比例して増加するのに対し、行列計算はこの方式でも、規模の1.3~1.9乗で増加する。また、メモリ量も同程度の割合で増加する点が大きな問題であり、今後の大規模化でさらに深刻化すると考えられる。したがって、行列演算の高性能化の研究開発は依然不可欠である。

2. 回路行列の特性と解法

2.1 回路行列特性

回路行列の最大の特徴は図2.1に示すように、スパース率が非常に高く、非零要素の存在位置が非対称で不規則なことである。また、動的な特性として、行列の条件数は時としてかなり大きくなる。図2.2に示したものは、比較的条件の良い例である。

2.2 回路行列の解法

回路シミュレーションの方式は幾つかある(図2.3)が、ここでは現実の回路に対して、現時点では最も確実なMatrix-Based Methodをとる。したがって、これ以降、非対称不規則疎行列の解法について議論する。解法として、上に述べた背景から、これまでの直接系解法に替えて、反復系解法を試みることにした。本報告では、図2.3に示した内で特に共役残差法を取り上げた。その動機および第3章で述べる方式を構成するに至った経過は次の通りである。

共役残差法適用の動機

- (1) 論理的に自然な解法であり、分かりやすい。
- (2) LU分解に比べ、記憶容量、演算量/反復は少なそうである。
- (3) スーパーコンピュータ上で使われ始めた。(分布定数系)

回路行列への適用上の問題点

- (1) 前処理無しCR法, 不完全LU分解(fill-in除く)付CR法ではほとんど収束しない。

- (2) 分布定数系での、Meijerink-Gustafsson 流前処理²⁾に相当するものが行列構造上、見つからない。

方針

- (1) 収束しない場合は、完全LU分解で求解する。そのLUで後続の行列を前処理する。(過渡解析に対応する行列)
 (2) 残差の停留を早期に検出する。

3. 完全LU分解付共役残差法の構成

上記のような理由から、図3.1に示す完全LU分解付共役残差法 (CLUCR法) を新たに構成した。この方法では、CR法が収束しない場合、完全LU分解を実行し求解する。この時の分解結果を保存しておき、次の行列ではこれを用いて前処理し、CR反復に入る。過渡解析の時間刻みは通常十分小さいことから、完全LU分解起動率はかなり低く押えられると考えた。一方、起動された場合は、CR法反復は無駄になるので、図に示したように、解の修正状況パラメータ α 、 β による残差停留の検出を行い、適切に不要な反復を打ち切る工夫を施した。

4. 残差減少状況の考察

ここでは、96元行列を有する1つの回路について、CLUCR法の収束特性を調べてみる。図4.1は、この回路の過渡解析で解かれた多数の行列の内から、ランダムに選択したケースについて、残差減少の様子を示したものである。この図から、収束しない場合には、残差は早期に停留していることが多いと言える。一方、残差は反復の途中で一時的に停留することがある。したがって、残差自体を観測するだけでは不都合が生じる。そこで、第3章で述べた α 、 β の観測による残差停留検出を行うことにしたわけである。(図4.2)

次に、この回路について、 α 、 β の変化を、高速に収束する場合 (図4.3)、収束するが低速な場合 (図4.4)、および収束しない場合 (図4.5) について示す。図4.3では、 α は1~10という、かなり大きな動きを示し、 β も1には近く

ない。図4.4では、 α は1より小さく、 β も1に接近しており、収束速度が鈍っている。途中、残差の疑似停留があるが、今回の停留検出法では、反復を続行すべきと判定された。これに対し、収束しない図4.5では、 α が急速に減少し、 β が1に極めて近づいた点で、残差停留と判定され、反復は打ち切られた。

5. 大規模回路への適用性評価

本章では、35～3668元行列を持つ現実の回路10題にCLUCR法を適用した結果を検討する。

5.1 完全LU分解起動率と反復回数

10題の内、波形変化の特に激しい1題を除き、完全LU分解起動率0.01～0.07(図5.2)、すなわち、100回の行列演算でLU分解の必要回数は1～7回、CR法(共役残差法)反復平均8～40回(図5.1)でいずれも相対残差 10^{-12} の収束解を得た。完全LU分解起動率がこのように低いのは、過渡解析では一般に波形変化が滑らかな区間の割合が比較的大きいためと思われる。広範囲の規模の回路行列に対して、CR法に入ってから収束性は、少数回の完全LU分解の効果によって、著しく向上したと判断される。なお、今回考案した残差停留検出法により、CR法の収束に至るまでの反復回数は、最大で元の個数回反復を許容する場合の約半数で済むことも確認できた。(図5.1)

5.2 浮動小数点演算回数の分析

以上で、CLUCR法の収束特性が明らかになったので、次に演算量の分析を行なう。図5.3は完全LU分解、行列変換及び収束解変換など反復の外側にある前後処理、CR法反復1回の演算量を各々浮動小数点演算回数で示したものである。この図から、特に小規模回路では、CR法反復1回の演算量は、完全LU分解より多いことがわかる。しかし、この演算量の差は、規模の増大で完全LU分解演算量が急増するとともに縮まる傾向が明らかであり、すでにこれが大きく逆転している回路も見られる。

5.3 直接解法との比較

直接解法（LU分解法）との性能比較を浮動小数点演算回数で示したのが図5.4である。この図では、行列元数の増大にともなう演算量の増加傾向を推定するのが目的なので、CLUCR法では収束性を正規化して示した。すなわち、完全LU分解起動率とCR法平均反復回数に関して、図5.2と図5.1のデータから、やゝ楽観的なCase 1と悲観的なCase 2の2ケースを設定して示した。小規模の場合には、完全と不完全のLU分解演算量に大きな差がないこと、及び図3.1②③④でのCR法反復内外の行列乗算が意外に多いことにより、CLUCR法は直接解法より演算量が多くなる。しかし、規模の増大とともに、直接解法での完全LU分解演算量が急速に増加し、CLUCR法内行列乗算は相対的に少なくなる。このため、Case 1では約6000元以上の行列から次第に直接解法を凌駕し始めると推定される。

図5.5は主記憶容量の比較である。この図には、行列演算に必要な主記憶容量のみを示した。CLUCR法では、完全LU分解を高速に実行するのに必要データは、上記のように、その使用頻度が極めて低いことから、高速外部記憶であるS-810拡張記憶を使うものとした。CLUCR法の主メモリ量は、ベクトル化による直接解法（BVA法¹⁾）に比べ非常に少なく、規模の増大に対する増加率もかなり低い。図中には、10000元規模の回路行列に対する主メモリ量の推定値も示した。カッコ内はシミュレーション全体に必要なメモリ量の合計である。これから、CLUCR法では、拡張記憶が使えるなら、10000元行列の回路シミュレーションを主記憶33MBで実行できると推定される。なお、拡張記憶使用によるUSE時間の増加は、次節で示すように僅かである。

5.4 1万元回路行列に対する推定性能

今後出現が予想される、10000トランジスタ規模の回路に対する性能予測を表5.1に示した。この場合、回路行列は1万元、計算時間点数は800点と仮定した。表中、EはCLUCR法で完全LU分解に通常のDiskを用いた場合、Fは、S-810拡張記憶を用いた場合である。表中のCPU時間は多数の大規模回路の実測データから、USE時間は他プログラムでの実績などを参考にして、データ転送量

で換算して算出した。Disk使用ではやはりUSE時間の増加は耐え難いことがわかる。これに対し、拡張記憶使用の場合は、CPU1.3時間にたいしてUSE1.7時間と推定され、十分実用範囲である。また、毎回完全LU分解が必要な直接解法では、主メモリ量を減らすため拡張記憶を用いると、USE時間はEの場合と同じく10時間程度と推定され、実用的でない。1万元行列に対しては、以上の通り、CLUCR法は主記憶容量の面で大きな効果が期待できるが、CPU時間の削減は僅かである。CLUCR法が直接解法を圧倒的に凌駕するのは、もう1桁規模が大きい回路に対してであると考えられる。

5.5 他の反復解法との比較

第2章図2.3に示した反復解法の内、CR法以外に演算量の少なさの面で直接解法に勝る可能性を残していたのは、反復改良法³⁾、Southwell緩和法⁴⁾であった。これらに、やはり完全LU分解を結合した方式を構成し、CLUCR法と比較した。

(図5.6) この図から、規模の増大にともなって、CLUCR法以外は完全LU分解の必要回数が極めて多くなり、収束性は非常に悪化することが推測された。したがって、CLUCR法を用いるべきと考える。

6. 結 言

(1) 回路行列解法として、共役残差法とLU分解法を組み合わせた方式を構成した。

- 過渡解析における行列の、比較的滑らかな変化を利用して、間欠的にLU分解を起動する。
- 反復回数を低減させるため、解の修正状況から残差の停留を早期に検出する。

(2) 実回路10題(35~3668元行列)に用いた結果、いずれも相対残差 10^{-12} の収束解を得た。

- 完全LU分解起動率 : 0.01 ~ 0.07
- CR法平均反復回数 : 8 ~ 40回

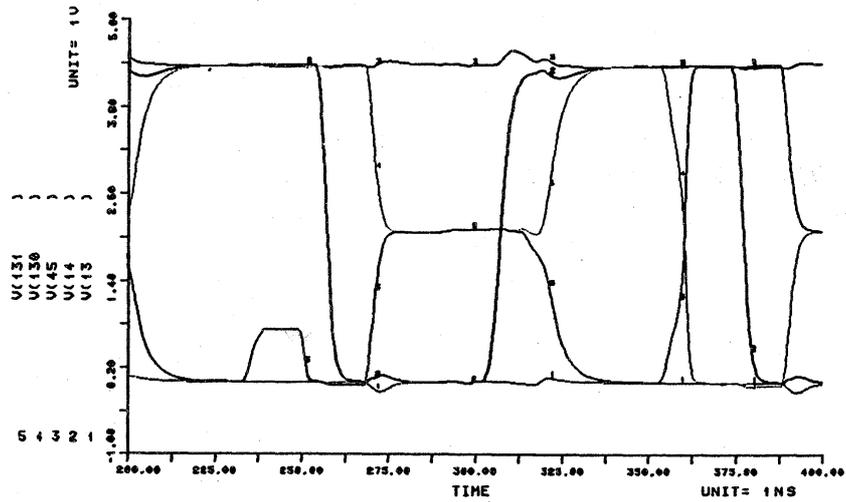
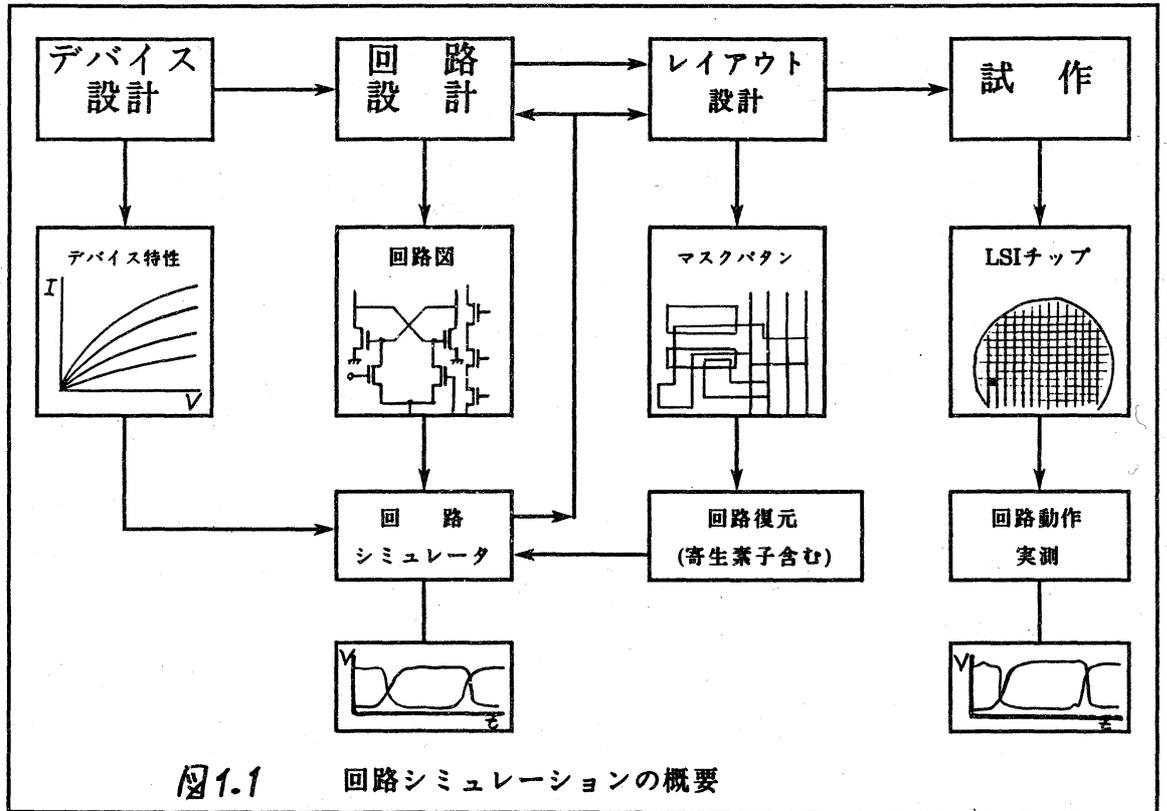
- (3) 収束性と演算量の分析から、約6000元以上の行列で、直接解法(LU分解)の性能を上回ると推定した。
- (4) 大規模回路でも、完全LU分解起動率が上記のように低いので、高速ベクトル化LU分解の大量データをS-810拡張記憶装置などに置くことができる。
- (5) 回路動作特性とCR法非収束との因果関係についての考察は今後の課題である。

謝辞

共役残差法などの反復解法の性能特性について御教示いただいた、図書館情報大学村田健郎教授に感謝の意を表す。

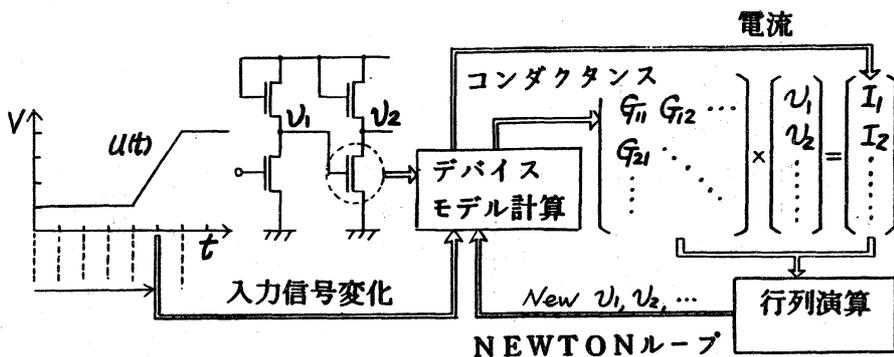
参考文献

- 1) F.Yamamoto, S.Takahashi: Vectorized LU Decomposition Algorithms for Large-Scale Circuit Simulation; IEEE Trans. on CAD Vol. CAD-4, No.3, 1985, pp. 232-239
- 2) 村田・小国・唐木: スーパーコンピュータ 科学技術計算への適用; 丸善、昭和60年3月、pp. 136-153
- 3) フォーサイス、モウラー (渋谷・田辺共訳): 線形計算の基礎; 培風館、昭和44年11月、pp. 58-64, 137-142
- 4) 赤坂隆: 数値計算; 応用数学講座第7巻、コロナ社、昭和60年6月、pp. 247-265



ENTER COMMAND
 G
 ENTER COMMAND

図1.2 回路シミュレーションの出力結果例



2 1 3 2 MOST (数千~数万回反復)

入出力

1611×1611行列

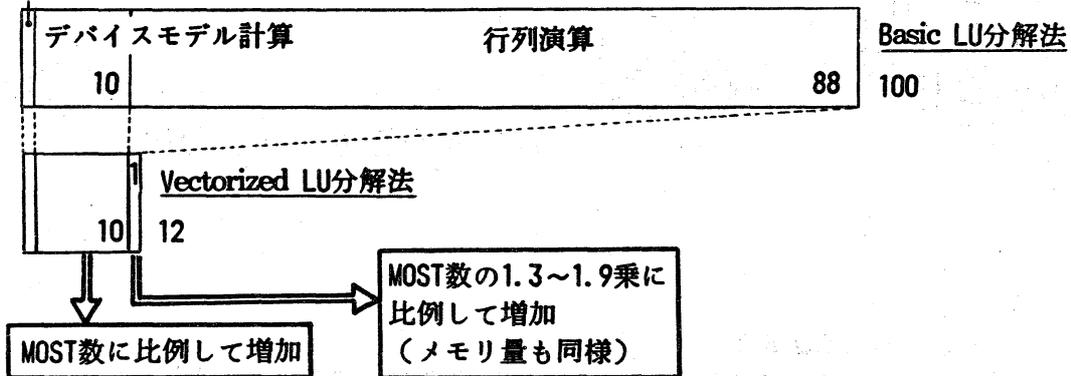


図1.3 大規模回路シミュレーションの性能上の問題点

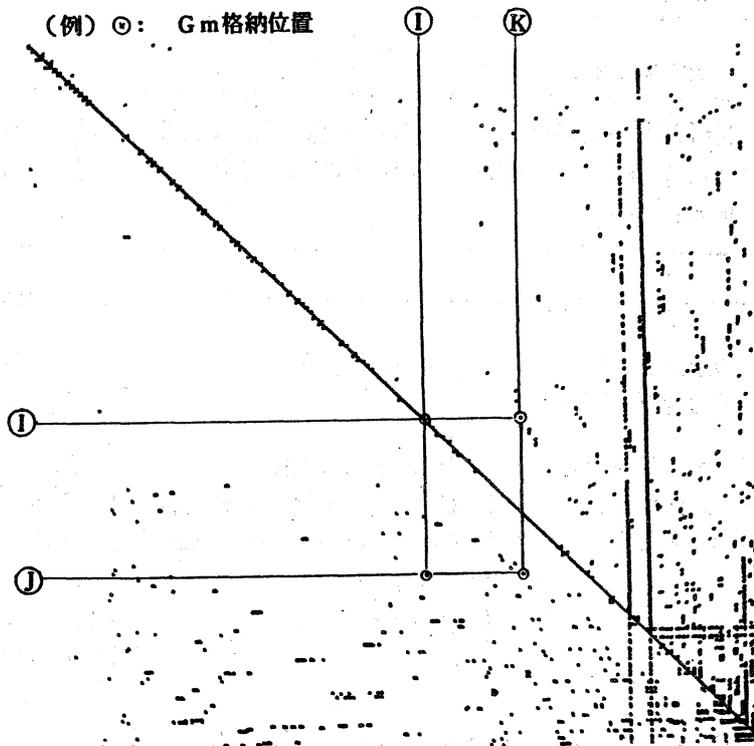
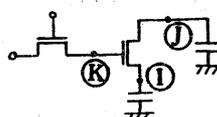


図2.1 回路行列の非零要素の分布 (DRAM部分回路)



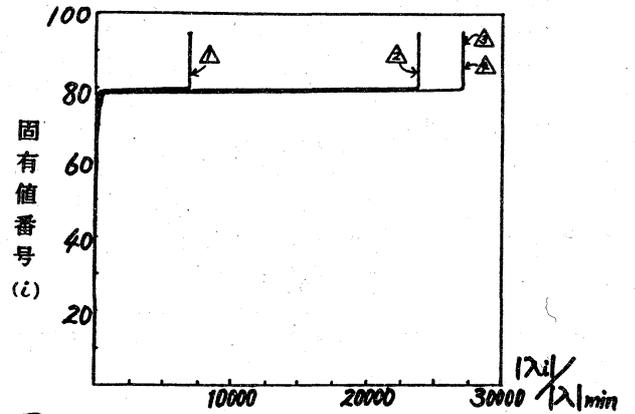
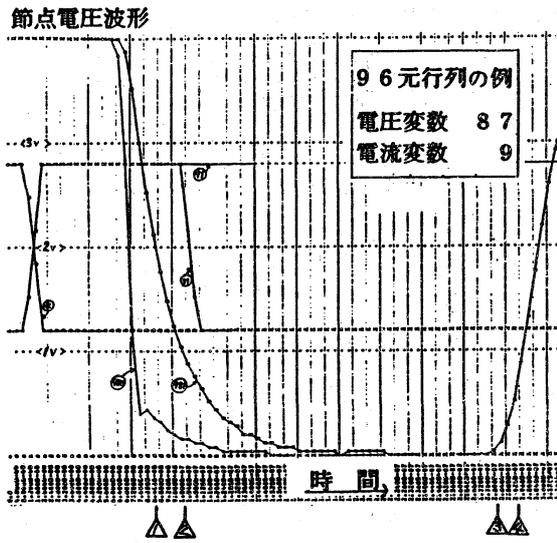


図 2.2 前処理前の回路行列の固有値分布

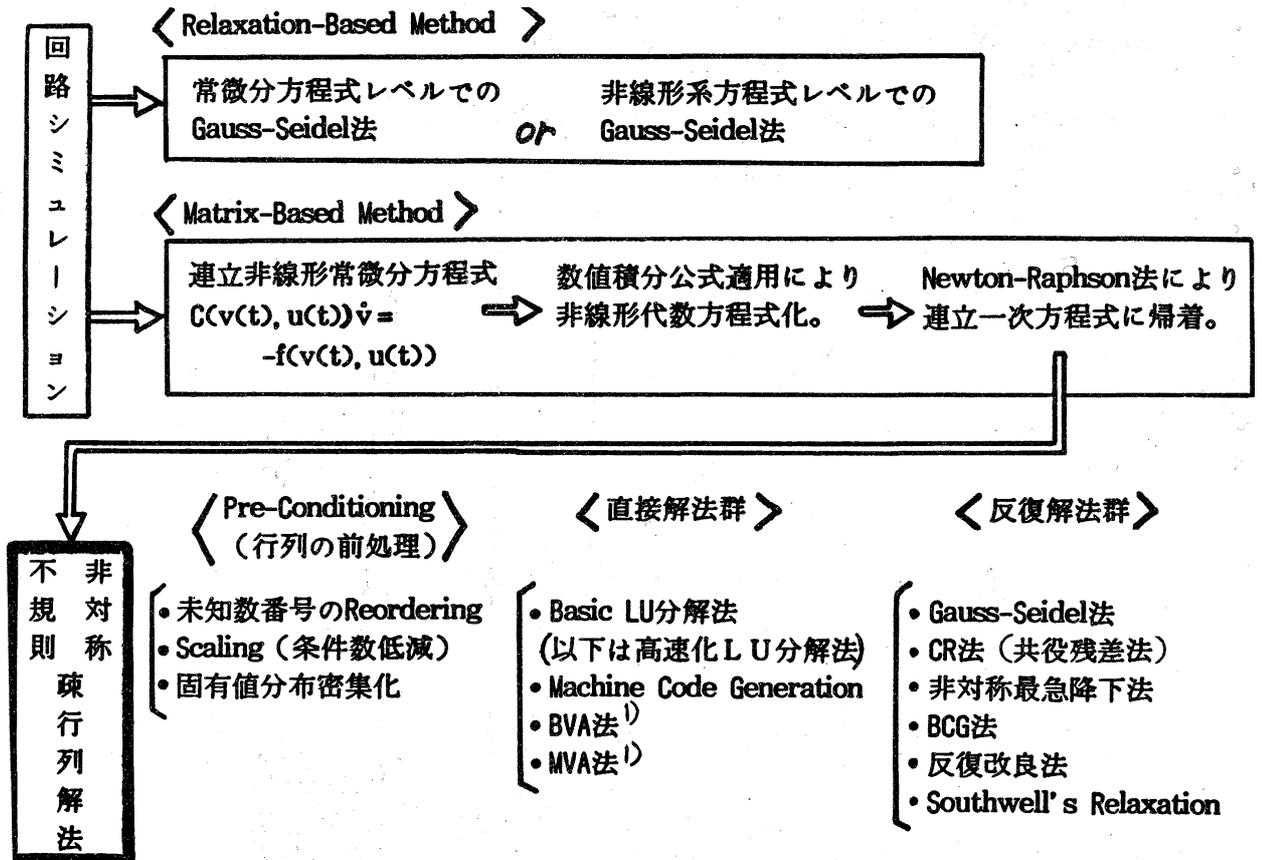


図 2.3 回路行列に対する解法

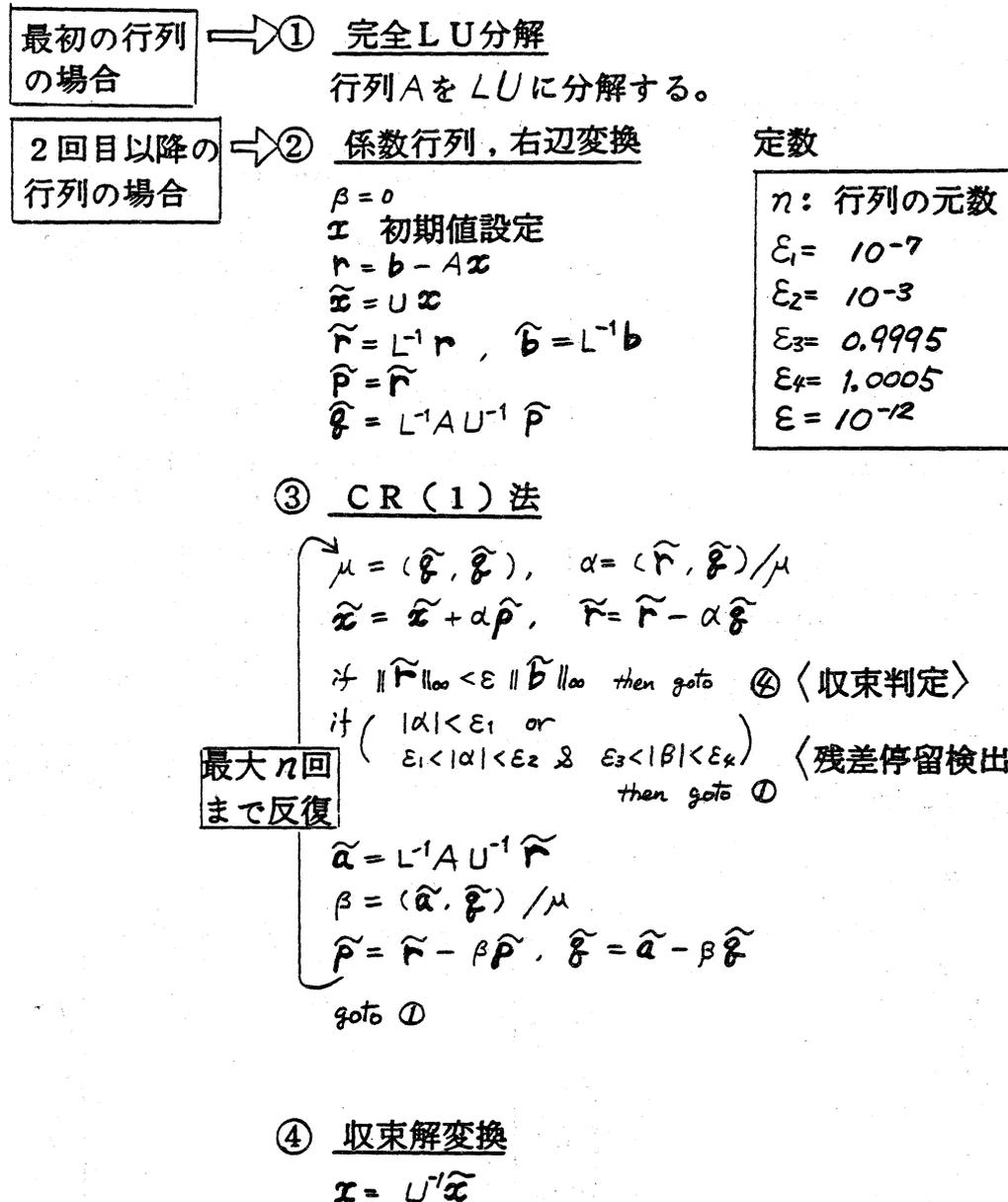


図 3.1 完全LU分解付共役残差法(CLUCR法)の構成

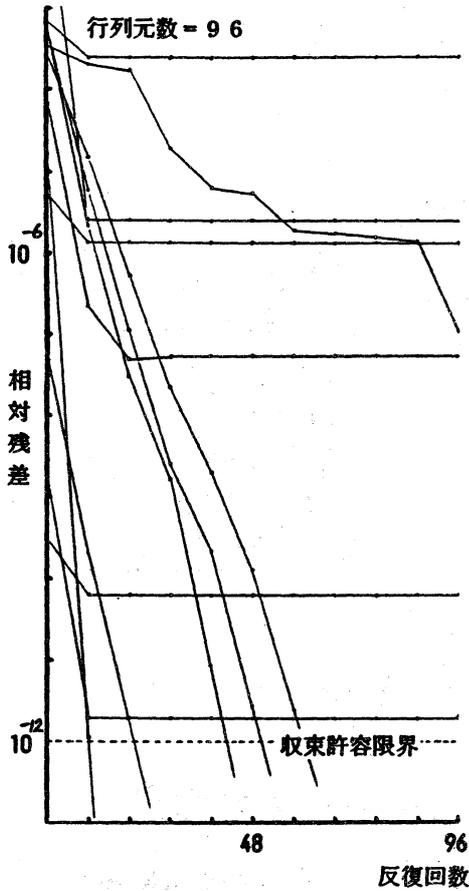


図 4.1 残差減少パターン例

残差停留状態の検出法

- (1) 残差(最大値ノルム)は一時的に停留することがあり、残差自体の観測では不都合である。
- (2) 解の修正活動状況(α, β)により検出する。
 α : 最適修正量
 β : 共役直交条件

非収束とみなす条件(次のいずれか):

- ① $|\beta|$ が1にきわめて近く、 $|\alpha|$ もあまり大きくない。

$$\rightarrow \beta = (\tilde{A}\tilde{r}, \tilde{A}\tilde{p}) / (\tilde{A}\tilde{p}, \tilde{A}\tilde{p})$$

から、 $\tilde{r} = \tilde{p}$ の可能性大。

- ② $|\alpha|$ がきわめて小さい。

\rightarrow 反復続行しても、改善される可能性が低い。(経験的に)

図 4.2 残差停留状態の検出法

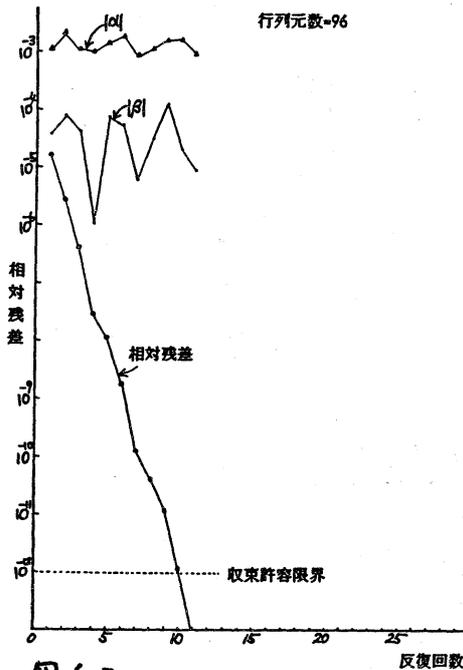


図 4.3 高速に収束する場合

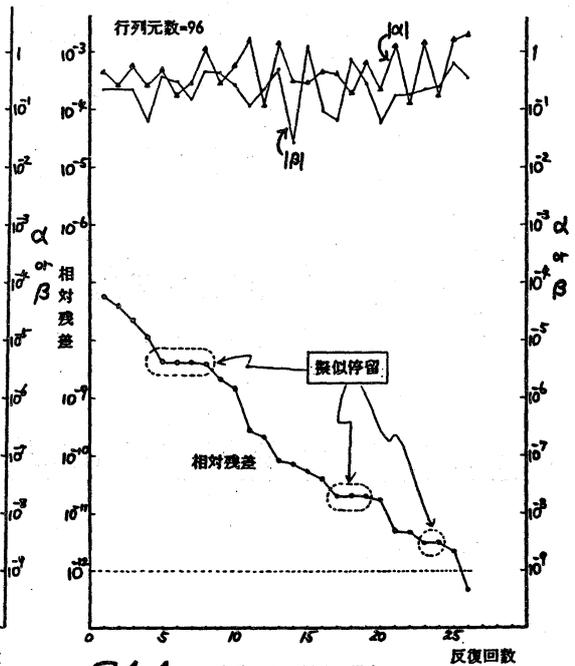


図 4.4 収束するが低速な場合

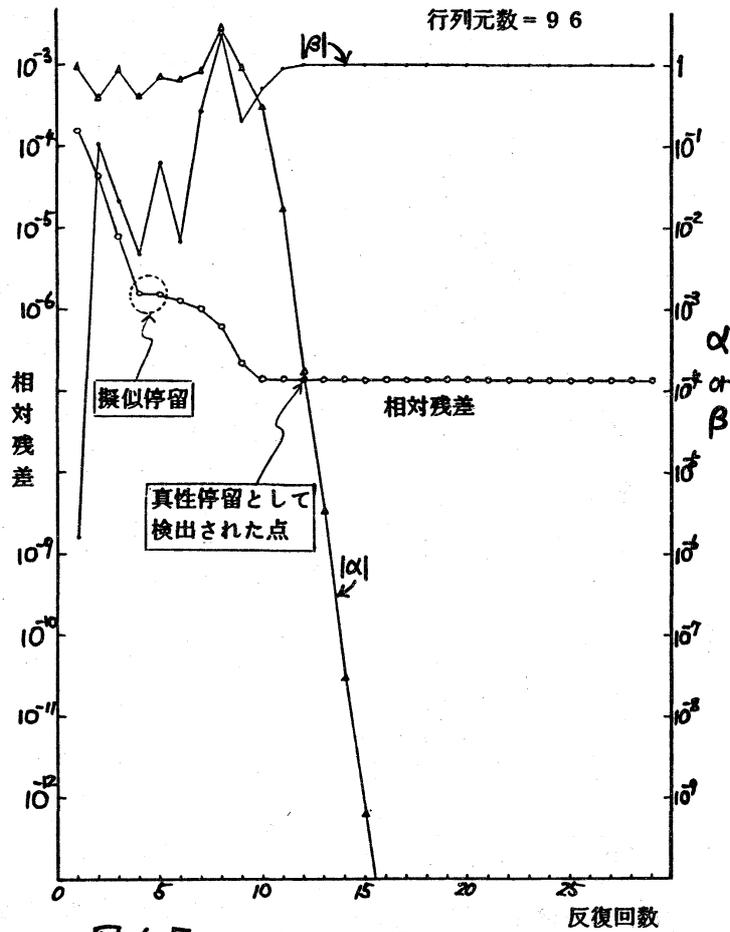


図 4.5 収束しない場合

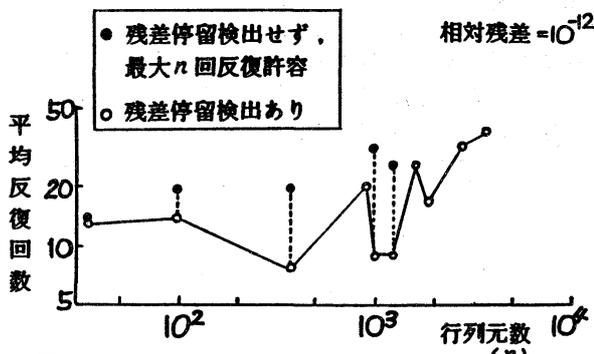


図 5.1 CR法平均反復回数

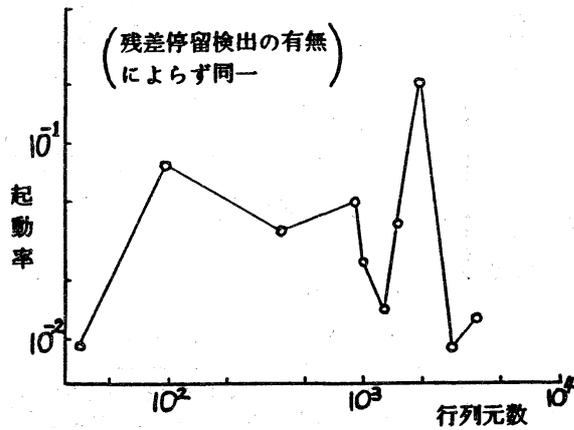


図 5.2 完全LU分解起動率

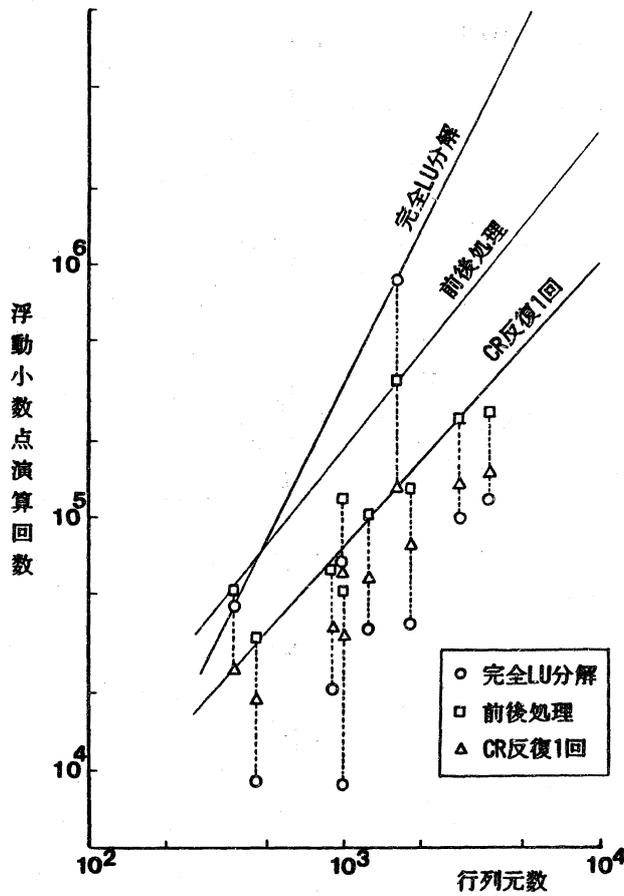


図5.3 CLUCR法の浮動小数点演算の内訳

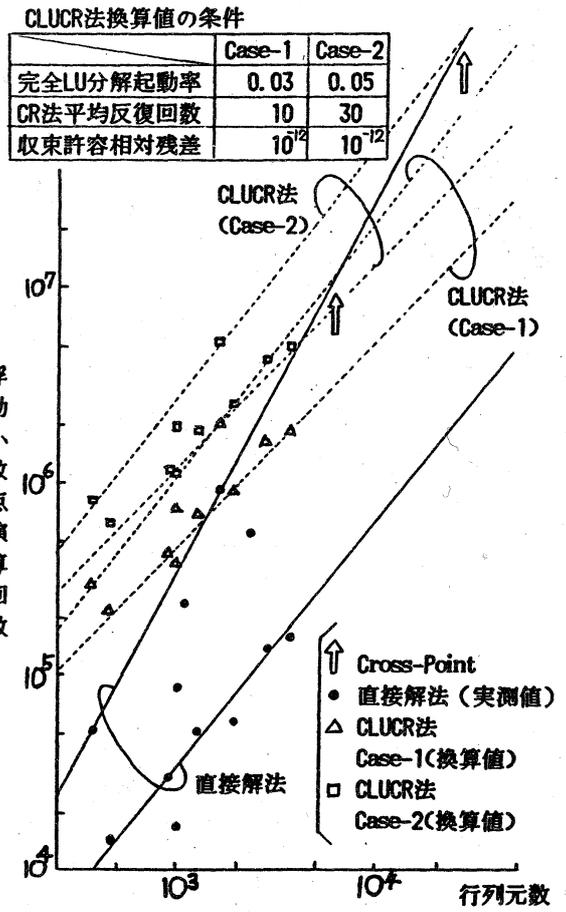


図5.4 行列演算量の比較

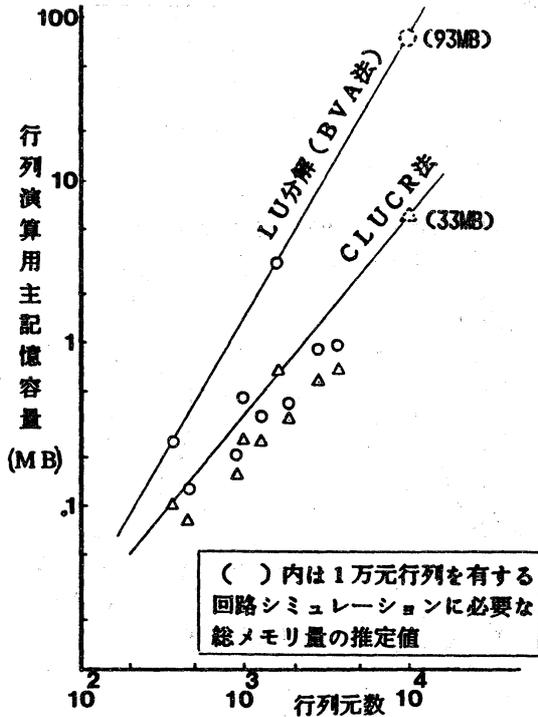


図5.5 行列演算用主記憶容量の比較

(注)

CLUCR法ではLU分解起動率が極めて低いことから、それに必要なデータを外部(S-810拡張記憶)に置くものとする。

(注) 2 サイクル解析。行列は 1 万元とする。

表5.1 10000 MOST に対する性能推定値(on S810)

方式	諸元	CPU Time	USE Time	主記憶容量	Disk 容量	ES ²⁾ 容量	備考
A	ベクトル化方式 LU分解 ¹⁾	5HR	6HR	77MB	-	-	デバイスモデル はスカラ計算
B	ベクトル化方式 LU分解	1.6	1.9	93	-	-	デバイスモデル はベクトル化
C	スカラLU分解 +CLUCR	97	116	33	-	-	//
D	ベクトル化方式 LU分解+CLUCR (すべて主記憶)	1.3	1.6	98	-	-	//
E	ベクトル化方式 LU分解+CLUCR (with Disk)	1.3	9.8	34	65MB	-	//
F	ベクトル化方式 LU分解+CLUCR (with ES)	1.3	1.7	34	-	65MB	//

1)並列化ブロック分割(BVA)

2)S810拡張記憶装置

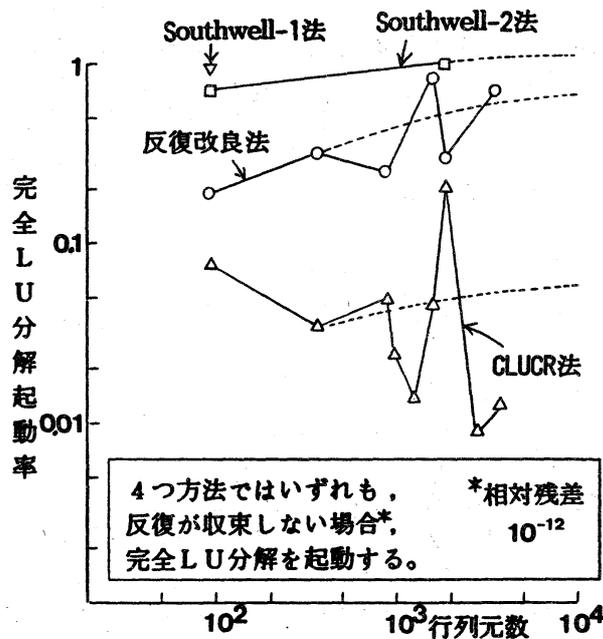


図5.6 他の反復解法との比較