

ベクトル計算機による回路行列の高速求解法

下郡 慎太郎 鹿毛 哲郎

(株) 富士通研究所

1. 序論

回路解析プログラムは、信頼性の高い集積回路を効率良く設計するために広く使用されている。従来の回路解析プログラムは、一般に汎用計算機で実行されてきたが、回路の大規模化に伴い、膨大な計算時間を必要とするようになってきた。この問題を解決するために、ベクトル演算機能をそなえたスーパーコンピュータを用いた回路解析プログラムの研究が行われている（【2】～【8】）。

回路解析の解析時間の内訳をみると、(1)非線形素子の値を計算するためのモデル関数の計算、(2)非線形依存電源の線形化・リアクタンス素子の離散化等に伴う行列要素の更新、および(3)連立一次方程式を解くための行列求解に大きく分れる。回路解析で扱う行列は、ランダムスパース行列（非零要素がまばらで不規則な行列）であり、しかも、同じ形の行列を数百～数千回繰り返し解く。そのため、これら3段階が実行時間の大半を占めている。

筆者等が開発を行ってきた汎用回路解析プログラムFINAP-VPでは、スーパーコンピュータにおいて、従来困難とされていたモデル計算・行列更新の効率的なベクトル化に成功し、スカラ演算に比べ10～30倍の高速化を達成した【11】。この

結果、相対的に行列求解の比重が高くなって、解析時間の6～9割以上を占めるようになり、行列求解の高速化をはかる必要がでてきた。

回路解析では、回路行列のスパース性に着目して、行列求解を高速化しようとする試みが幾つかなされてきた。比較的古いものとしては、行列求解手順を機械コードとして生成するコード生成法がある。これは、スカラ演算としては非常に効率的な方法である。ランダムスパース行列の演算では、要素を探すためのアドレス計算、ループを回る時のオーバーヘッド等の時間が大きく、数値的な演算そのものの比率は小さい。コード生成法では、その行列を解くための最適な機械語を生成するため、これらの余分な時間がなくなり、7～10倍の高速化を実現する。

また、ベクトルプロセッサを用いての高速化の研究が活発に行われている（【2】～【8】）。パイプライン型のベクトルプロセッサで高速化するためには、プログラムのベクトル化を促進するとともに、ベクトル長（並列計算可能な要素の数）を長くする必要がある。

ところが、行列求解に用いられるLU分解法やガウスの消去法は、スパース行列に対しては、非常に並列度の低いアルゴリズムで、そのままではほとんど高速化できない。このため、行列を幾つかのブロックに

分けてそのブロック内を並列化する，部分的に稠密行列として扱う【7】，部分回路記述を利用する【2】等の手法が用いられた。

最近，LU分解の最大限の並列性を引き出すアルゴリズムとして，演算を参照順序に従ってレベル付けする方法が示された

【8】。ところが，このベクトル化手法でも，スパース行列に対して，行列求解の全体を効率良くベクトル化しているとは言えない。すなわち，直接解法で最も効率の良いとされるLU分解法において，稠密行列では行列次元 n の3乗に比例して演算が増えるLU分解の過程のみが注目される。しかし，回路行列のようなスパース行列では，通常は無視される前進代入・後退代入の過程もかなりの比重を占めている。このため，ベクトル計算機によって，行列求解を高速化するためには，これらの過程も含めた行列求解全体をベクトル化しなければならない。本稿では，LU分解法の全段階をベクトル化する手法を示し，実行テストを行った結果を示す。さらに，そのための前処理時間・使用メモリ量についても言及する。

2. LU分解法

2. 1 用語の定義

連立一次方程式の直接求解方法としては，ガウスの消去法が良く知られている。これは，前進消去により上三角行列をつくり，それを後退代入により解くというものである。また，別の方法として，LU分解法と

呼ばれる方法がある。これは，行列を一旦，下三角行列(L)と上三角行列(U)の積の形に分解し，その後2回の代入で解を求めるものである。

ガウスの消去法とLU分解法とは，実は，数学的には全く等価な方法であり，演算量も等しいが，計算機で行う場合には，計算順序および演算以外の処理に違いが出てくるため，明確に区別しておく必要がある。また，LU分解法において，行列を分解する過程には幾つかのバリエーションが考えられ，これも数値計算では微妙な差がでてくるにもかかわらず，明確に区別されていない場合がある。

本稿では，混乱を避けるために，行列を一旦下三角行列と上三角行列の積の形に分解した後，代入により解を求める方法を総称してLU分解法と呼ぶ。したがって，ガウス消去法はLU分解法とは区別される。また，行列を分解する過程で，内積計算により分解後の要素を一度で計算する方法をクラウト法，ガウス消去法と同様の計算で少しづつ計算する方法をガウス法と呼ぶことにする。

回路解析における行列求解には，一般にLU分解法が用いられる。LU分解法は，

- ① LU分解 (クラウト法，ガウス法等による)
- ② 前進代入
- ③ 後退代入

の3段階に大きく分かれる。LU分解は，行列を下三角行列と上三角行列の積に分解する過程，前進代入は下三角行列による代入，後退代入は上三角行列による代入である。これらの名称も文献によって違ってい

る場合があるが、本稿ではこのように呼ぶことにする。先にあげたガウスの消去法では、LU分解と前進代入とが前進消去として同時に行われる。

2. 2 MVA (Maximal Vectorization Algorithm)

LU分解の計算は、

$$a = a - b \times c, \quad a = a / b$$

の2種の基本演算のみで計算できる。この特徴に注目して、文献【8】では、両演算を要素の参照関係に基づいてレベル付けし、同じレベルの演算を並列実行することにより、ベクトル長の十分に長いLU分解が可能となることを示している。以下に、このアルゴリズムの概要を述べる。

解くべき行列を $Ax = b$ とする。行列Aの要素と一対一に対応した、各要素の演算レベルを格納するための配列を用意し、その初期値を0とする。

次に、LU分解の過程をシミュレートする。このとき、 $a = a - b \times c$ タイプの演算については、 a 、 b 、 c のレベルのうち最大のものに1を足した値を a の新しいレベルとする。すなわち、

$$LBVEL(a) = \max(LBVEL(a), LBVEL(b), LBVEL(c)) + 1$$

とする。 b 、 c のレベルは変えない。同時に、 a 、 b 、 c の要素ポイントの値を a の新しいレベル（これがこの演算のレベルとなる）にしたがってテーブルに格納する。 $a = a / b$ のタイプについても同様に、 a

と b のレベルの大きい方に1を足した値を a の新しいレベルとし、 a 、 b の要素ポイントをテーブルに格納する。以上の処理が、前処理として一度だけ行われる。

実際に行列求解を行うには、レベルの小さな演算から順に、格納された要素ポイントを使って計算していけば良い。このとき、レベルが同じ演算は互いに参照関係がないため、すべて並列実行できる。

LU分解法による稠密行列の求解では、LU分解と前進代入・後退代入の実行時間は、それぞれ行列次元の3乗、2乗に比例するため、行列次元の大きな行列では、LU分解が大部分の時間を占めるようになる。

しかしながら、回路解析では、非常にスパースな行列（行列次元にかかわらず、1行当り3~6要素程度）を扱うために、稠密行列のようにはならない。筆者等が開発を行ってきた回路解析プログラムFINAPでは、スカラでの高速解析を行うために、コード生成法による行列求解を行っている。コード生成法で生成されるコードにはループがないため、コードの量とその実行時間はほぼ比例すると考えても良い。実際の回路で、LU分解・前進代入・後退代入のコード生成量を調べたところ、約7:3:2の割合であり、これは回路規模に関係しなかった。したがって、行列求解全体を高速化するためには、LU分解のみではなく、前進代入・後退代入も同程度に速くしなければならない。

3. 拡張レベル付けベクトル化LU分解法

3.1 LU分解法における計算

LU分解（クラウト分解による場合）・前進代入・後退代入の各段階では、実際には図3.1のような計算を行う。概念的に式で書けば、

$$\left. \begin{aligned} l &= a - \Sigma l u \\ u &= (a - \Sigma l u) / l \\ y &= (b - \Sigma l y) / l \quad (\text{前進代入}) \\ x &= b - \Sigma u x \quad (\text{後退代入}) \end{aligned} \right\} (\text{LU分解})$$

というような計算である。これらの式では、 l , u , x , y を全て別に書いているが、実際には、メモリ節約のため、行列AとL, U, ベクトルbと x , y とは同一メモリに割り当てられる。

ここで、上式を良く見ると、LU分解のみならず、前進代入・後退代入も $a = a - b \times c$, $a = a / b$ という基本演算のみで計算できることがわかる。このため、LU分解・前進代入・後退代入の各過程にまた

がってレベル付けすることが可能である。このアルゴリズムを拡張レベル付けベクトル化LU分解法と呼ぶことにする。

LU分解はMVAと同様にレベル付けする。計算方法はクラウト法でもガウス法でも効率は同じである。コード生成法を行う場合には、レジスタ上での内積累和のできるクラウト法のほうが有利であるが、MVAでは、内積累和ができないからである。前進代入・後退代入は、LU分解に引き続きレベル付けする。要素ポインタもLU分解の要素ポインタと同じ配列に格納する。これにより、実際の実行時には、LU分解・前進代入・後退代入といった過程を全く意識することなく同等に取り扱うことができる。

3.2 前進代入過程のレベル付け

前進代入のレベル付けをする時には、Aの要素のレベルを記憶するための配列と別にbの要素のレベルを記憶するための配列が必要となる。

さらに注意すべきことは、後退代入に追い越されないように、行列bの要素のレベルを更新しなければならない、ということである。このため、一般的には第一行、第二行、…と行ごとに計算するが、本アルゴリズムでは、図3.2のように第一列、第二列、…と列ごとに計算する。各要素を更新するときに、更新される要素のレベルを変えるのはもちろんであるが、第i列目の前進代入が終わったときに、i列での最大のレベルを b_i の新しいレベルとする。

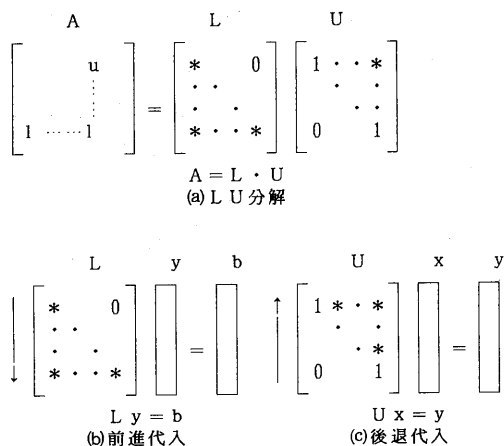


図3.1 LU分解法における計算

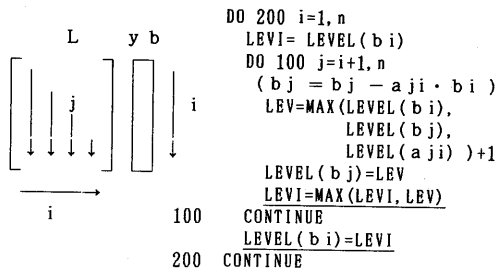


図3.2 レベル付けに適した前進代入

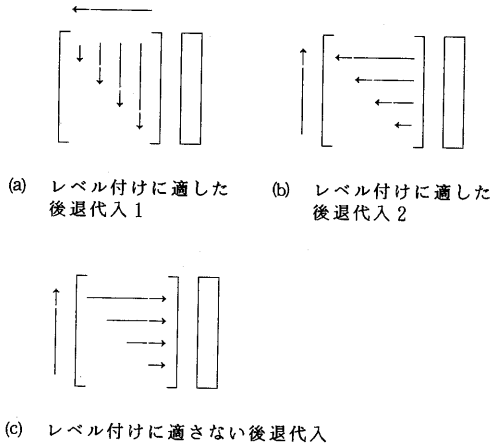


図3.4 各種方法による後退代入

3.3 後退代入過程のレベル付け

後退代入時にも、前進代入と同様にレベル付けの効率を良くするために、図3.4(a)または、(b)のような方法をとったほうが良い。両方法とも等価であるが、行列の要素を示すためのポインタは、一般に行番号・列番号が増える方向に持たせることが多く、この場合(b)の方法ではポインタを追う回数が増えるため、(a)のほうが効率的である。なお、(c)のようにすると（これは一般的に行われる後退代入の方法である）、レベル数が増大し、効率が悪くなる。

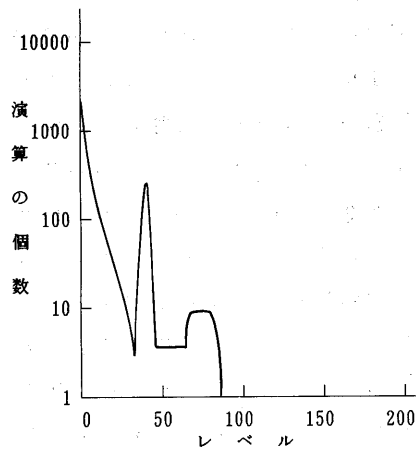
4. 演算並列度の分析

実際の回路行列における、演算の分布を図4.1に示す。これは、16ビットnMOS加算器（ADD16と呼ぶ）の例である。

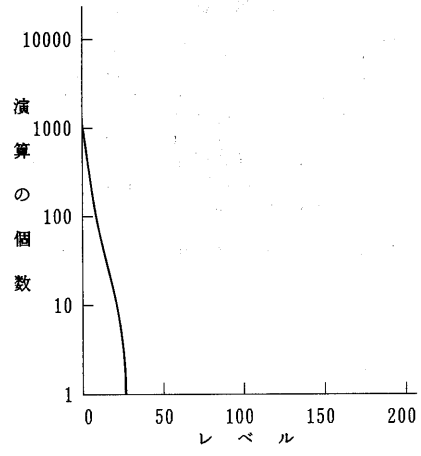
$a = a - b \times c$ タイプについてみると、ピークが3か所ある。最初のピークはレベル1~10くらいのもので、ベクトル長が長く、回路にもよるが数千程度になる。これはLU分解と前進代入によるものである。第2のピークと第3のピークは後退代入によるものである。LU分解と前進代入の影響をあまり受けないものはピーク2に、影響を受けるものはピーク3に集中するものと考えられる。大部分の要素のLU分解と前進代入は、第1のピークで終わっているので、後に残るのは特定のノードに多数の素子が接続されたもの（これは、行列中では多数の要素を含んだ行および列として現れる）である。このノードに関係しない要素の後退代入は、第1のピークが終わった直後に実行可能であり、これが第2のピークを形成する。

$a = a / b$ タイプについてみると、演算の数は最初多くて、あとは急激に減少している。ピークは1個しかない。これは、 $a = a / b$ タイプの演算がLU分解と前進代入にしかないのである。

図4.2にはLU分解・前進代入・後退代入の3段階を完全に分離したときのレベルの分布を示す。3段階を分離せずにレベル付けしたほう（図4.1）が、効率が良いのが一目瞭然である。

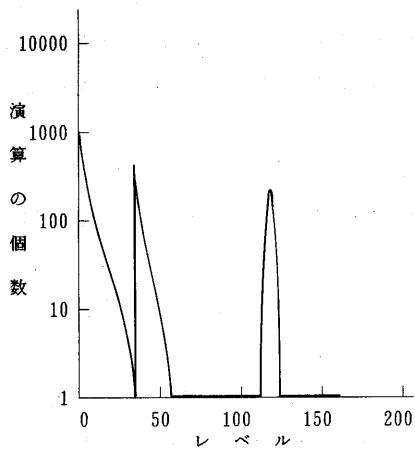


(a) ADD16 $a=a-b \times c$

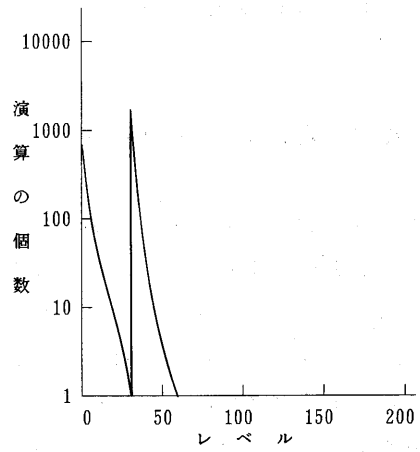


(b) ADD16 $a=a/b$

図 4.1 演算の分布



(a) ADD16 $a=a-b \times c$



(b) ADD16 $a=a/b$

図 4.2 各過程を分離したときの演算の分布

5. 行列求解の実行

今まで述べた方法を、筆者らが開発した、ベクトル処理向き汎用回路解析プログラム FINAP-VP に組み込み、当社のスーパーコンピュータ FACOM VP-400 で実行した。

5.1 FORTRANによる実行

作成したインデックステーブルに従って演算を実行するためのプログラムは、FORTRAN で容易に記述することができる。実行するときには、同じレベルの演算は並列実行可能なのでベクトル計算をする。このとき、ベクトルパイプライン起動時のオーバーヘッドにより、ベクトル長が非常に短いときには、スカラ命令のほうが速く計算できる。そこで、あらかじめスレッシュホールドをきめておき、並列化可能な演算数がそれよりも多ければベクトル演算を、少なければスカラ演算をさせるようにした。

5.2 ベクトルコード生成法による実行

拡張レベル付けによるインデックスを使った計算は、ベクトル化した FORTRAN でも十分高速であるが、それでも、インデックスを取り出すときのアドレス計算、あるいはループを回るときのオーバーヘッドなど、無駄な部分がまだある。これらを取り除いて可能な限りの高速化をはかるために、ベクトルコード生成を行った。

回路解析では、同じ形の行列を多数回解くので、あらかじめ行列を解く過程をシミュレートして、その行列を解くための手順を機械コードとして生成しておくことにより、行列求解を高速に実行できるようになる。この手法をコード生成法と呼ぶ。

今回は、このコード生成法において、ベクトルコードとスカラコードとを混在して生成するようにした。コード生成時には、レベル付けにより作成されたインデックスを調べて、ベクトル長の長いものに対してはベクトルコードを生成し、短いものに対してはスカラコードを生成する、というようにした。

図6.1で、スカラFORTRAN とあるのは、拡張レベル付けLU分解法により作成したインデックスをベクトル化しない FORTRAN プログラムで解いた場合である。したがって、一般の FORTRAN による行列求解よりもアドレス計算が少なく、高速である。また、スカラコード生成では、要素のタイプも考慮した最適化を行っている。ベクトルモードでの解析では、行列求解以外の部分もベクトル化している。

6. 実行テスト

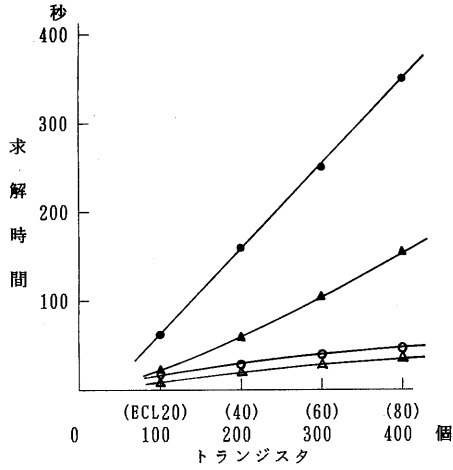
表6.1のような、いくつかの規模の異なる回路に対して実行した結果を、図6.1に示す。ECL_mは、ECLインバータをm段接続した回路、ADD_mはmビットnMOS加算器である。

図6.1で、スカラFORTRAN とあるのは、拡張レベル付けLU分解法により作成したインデックスをベクトル化しない FORTRAN プログラムで解いた場合である。したがって、一般の FORTRAN による行列求解よりもアドレス計算が少なく、高速である。また、スカラコード生成では、要素のタイプも考慮した最適化を行っている。ベクトルモードでの解析では、行列求解以外の部分もベクトル化している。

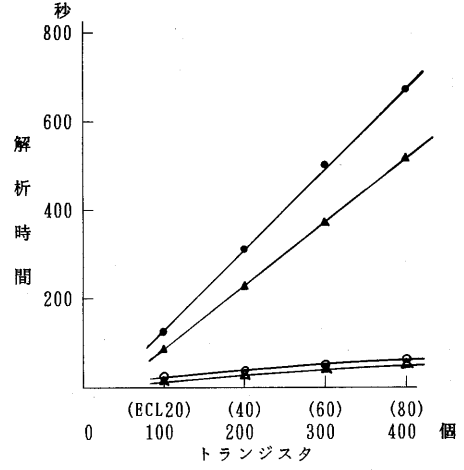
行列求解のみについてみると、ベクトルFORTRAN はスカラFORTRAN に比べ、4~7倍高速化している。ベクトルコード生成で

● スカラ FORTRAN (M-380)
○ ベクトルFORTRAN (VP-400)

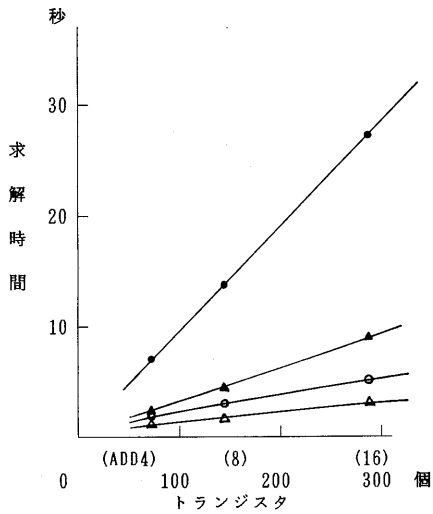
▲ スカラ コード生成 (VP-400)
△ ベクトルコード生成 (VP-400)



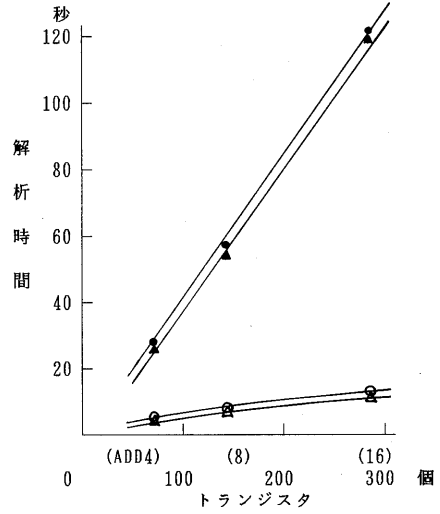
(a) ECL回路行列求解



(b) ECL回路過渡解析



(c) MOS回路行列求解



(d) MOS回路過渡解析

図6.1 各回路の行列求解時間および過渡解析時間

は、7～10倍程度高速になっており、ベクトルFORTRAN に比べても 1.3～1.8 倍高速である。

解析全体の実行時間では、行列求解のみの高速化に比べ、さらに高速化している。これは、行列求解以外の処理（モデル関数計算・行列更新）のベクトル化率が非常に高く、高速になっているためである。

拡張レベル付けLU分解法では、回路の規模が大きくなるにつれて、スカラに対する高速率が高くなっている。実行時間は飽和していく傾向にあり、今回の方法が規模の大きな回路に対して特に有効であることを示している。

次に、各方法で前処理にどの程度の時間がかかるのかを調べてみる。表 6. 2 に前処理に要する時間を示す。どれも、行列求解時間に比べて十分に小さく、2%以下である。なお、スカラコード生成法の前処理時間が長いのは、生成されるコードの最適化を行うのに時間がかかっているからである。

最後に、メモリ量について検討してみる。表 6. 3 に各方法で行列求解に必要とするメモリ量を示す。単位はキロバイトである。概して、必要なメモリ量は同程度ではあるが、スカラコード生成法では、より多くのメモリを必要とする。ベクトルコード生成法では、FORTRAN による場合よりも5～10%程度増えているだけである。これは、ベクトル命令では、数百個分の計算を数十バイトで記述できるために、スカラ命令のように多くのメモリを必要とはしないからである。

表 6. 1 測定用回路の概要

回路名 (タイプ)	デバイス数	行列次元	非零要素数	スパース率
ECL20 (Bip.)	140	867	3375	99.6%
ECL40 (Bip.)	280	1731	6743	99.8
ECL60 (Bip.)	420	2588	10111	99.9
ECL80 (Bip.)	560	3459	13479	99.9
ADD4 (MOS)	72	198	828	97.9
ADD8 (MOS)	144	378	1504	98.9
ADD16 (MOS)	288	738	2856	99.5

表 6. 2 各方法の前処理に要する時間 (秒)

回路名	スカラ FORTRAN	スカラコード生成	ベクトル FORTRAN	ベクトルコード
ECL20	0.10	0.29	0.10	0.11
ECL40	0.21	0.58	0.21	0.22
ECL60	0.31	0.90	0.31	0.33
ECL80	0.41	1.21	0.41	0.43
ADD4	0.02	0.03	0.02	0.02
ADD8	0.03	0.07	0.03	0.03
ADD16	0.05	0.14	0.05	0.05

表 6. 3 行列求解に必要とするメモリ (k Byte)

() 内はFORTRAN に対する比率

回路名	FORTRAN	スカラコード生成	ベクトルコード生成
ECL20	136 (1.00)	152 (1.11)	152 (1.12)
ECL40	280 (1.00)	324 (1.16)	304 (1.09)
ECL60	420 (1.00)	500 (1.19)	440 (1.06)
ECL80	556 (1.00)	688 (1.24)	580 (1.04)
ADD4	24 (1.00)	28 (1.20)	28 (1.13)
ADD8	44 (1.00)	52 (1.22)	48 (1.10)
ADD16	84 (1.00)	112 (1.34)	92 (1.09)

7. 結 論

LU分解法に基づく連立一次方程式の求解が全て2種類の基本的な演算のみから行われることに着目し、全演算をレベル付けすることで、ベクトル長の十分に長いベクトル化を実現した。また、この方法に最適なLU分解・前進代入・後退代入の方法を検討した。

さらに、このアルゴリズムを汎用回路解析プログラムFINAP-VPに組み込んで、実行した。その結果、

- (1) 行列求解では、同じ方法をスカラで実行した場合の4~7倍高速、
- (2) ベクトルコード生成法にすれば、さらに1.3~1.8倍高速になる、
- (3) 大きな回路ほど高速化できる、
- (4) レベル付けの時間は解析時間にくらべて十分に小さい、
- (5) 使用メモリ量はスカラコード生成法よりも少ない、

ということが、わかった。

なお、本手法は、回路解析のみならず、スパース行列の多数回の求解を含む問題には、共通して有効であると考えられる。

謝 辞

本研究について、日頃から御指導していただいている、(株)富士通研究所システム研究部上原部長、石井部長代理および白石主任研究員に深く感謝の意を表します。

【参考文献】

- [1] D. A. Calahan and W. G. Ames, "Vector Processors : Models and Applications", IEEE Trans. Circuit Syst., Vol. CAS-26, Sept. 1979.
- [2] D. A. Calahan, "Multi-Level Vectorized Sparse Solution of LSI Circuits", Proc., IEEE Int. Conf. Circuits Comp., Oct. 1980.
- [3] A. Vladimirescu and D. O. Pederson, "A Computer Program for the Simulation of Large-Scale-Integrated Circuits", Proc., IEEE Int. Symp. Circuits Syst., Apr. 1981.
- [4] A. Vladimirescu and D. O. Pederson, "Performance Limits of the CLASSIE Circuit Simulation Program", Proc., IEEE Int. Symp. Circuits Syst., May 1982.
- [5] A. Vladimirescu and D. O. Pederson, "Circuit Simulation on Vector Processors", Proc., IEEE Int. Conf. Circuits Comp., Sept. 1982.
- [6] S. D. Hamm and S. R. Beckerich, "VAMOS : Circuit Simulation Program for a Vector Computer", Proc., IEEE Int. Conf. Computer-Aided Design, Nov. 1983.
- [7] F. Yamamoto, K. Kobayashi, and Y. Umetani, "A Comparative Study of Two Vectorized LU Decomposition Algorithms for Large Scale Unstructured Sparse Matrix", Proc., IEEE Int. Symp. Circuits Syst., June 1985.
- [8] F. Yamamoto and S. Takahashi, "Vectorized LU Decomposition Algorithms for Large-Scale Circuit Simulation", IEEE Trans. Computer-Aided Design, Vol. CAD-4, No. 3, July 1985.
- [9] T. Kage, Y. Oishi, and M. Ishii, "A Circuit Analysis Program Using an Attached Array Processor - FINAP-AP -", Proc., IEE European Conf. Electronic Design Automation No. 232, Mar. 1984.
- [10] W. Nagel, "SPICE2, A Computer Program to Simulate Semiconductor Circuits", Univ. of California, Berkeley, Memo No. ERL-M520, May 1975.
- [11] 鹿毛, 下郡「ベクトル計算機による回路解析プログラム (FINAP-VP) の高速化の検討」, 信学技報 Vol. 85, No. 279, CAS85-168, 1986年1月.