連立1次方程式の直接解法の並列化

寒川 光*

Approach to Parallelize Linear Equations on Distributed Memory Parallel Computers

Hikaru Samukawa*

Key words: Sparse matrix, Linear equations, Distributed parallel computer, WSMP, EMSurf

1. はじめに

本稿では連立1次方程式の直接解法の並列化手法について述べる．電磁界シミュレーションを有限要素法(FEM)あるいは境界要素法(BEM)またはモーメント法(MoM)で行う場合，最終的には連立1次方程式を解くことになる．FEMでは疎行列を，BEMやMoMでは密行列を扱う．

疎行列の直接解法の問題 $Ax=b$ が，密行列の問題ともっとも異なるところは，順序付け(ordering)によって演算量が大きく変化する点である．これは消去の過程で，A ではゼロの項が非ゼロに変わる**フィルイン**項の数が，順序付けによって大きく変化するからである．正方形領域を格子状にメッシュ切りして離散化された問題では，問題の次数 n に対する演算量は，素朴な順序では $O(n^2)$ であるが，最適に近い順序付けが実現されると $O(n^{1.5})$ にまで削減することができる．しかしそれでもなお，大規模な問題に対する直接解法の最大の問題はフィルインである．現代の大容量メモリを搭載した並列計算機でも，フィルインのために，実際に解くことのできる問題の規模が計算機のキャパシティに制限される．

直接解法の利点は，係数行列の一部や境界条件を変更して解き直すような場合に，前回の三角分解の結果を利用して少ない演算数で解を得ることができる柔軟性にある．また非常に多くの右辺ベクトルに対して解を求めるような場合も便利である．これに対する間接解法であるが，前処理つき共役勾配法の長所は，フィルインに影響されないこと，つまりメモリサイズが基本的に疎行列の非ゼロ要素数に依存する容量で解けること，解が順調に収束する好条件の問題では演算量のオーダーが $O(n)$ に近く，直接解法に比して格段に少ないことがあげられる．反対に短所は，解法が右辺に依存することである．つまり右辺ベクトルが変わると初めから解き直さなくてはならない．係数行列の一部が変更された場合でも，前回の解法の経過を利用できないので，基本的に右辺ベクトルごとに解くことになる．このような解法の比較を考慮すると，計算機のキャパシティの将来性や解くべき問題の性質に応じて，現在でも直接解法のアルゴリズムを知っておくことは有益であると考える．

次章で順序付けの問題を概観する．3章で疎行列を係数行列とする連立1次方程式の直接解法を行うライブラリであるWSMP(Watson Sparse Matrix Package)の対称行列用ライブラリを紹介する．4章で，直接解法によって正則ではないかもしれない行列を，軸選択(pivoting)によってどのように扱うかを考えてみる．5章で，密行列をBiCG法を局所前処理を合わせて解くEMSurfの例を紹介する．前処理行列は部分領域だけの係数行列になるので，ここに直接法を用いる．最後にまとめを述べる．

* 芝浦工業大学システム工学部電子情報システム学科
Dept. of Electronic Information Systems, College of Systems Engineering, Shibaura Institute of Technology

2. 順序付けと計算量の関係

2.1 疎行列の順序付けの概要

疎行列の三角分解の演算回数を少なくする順序付けの問題は1970年代から活発に研究されたが[1]，ベクトル型スーパーコンピュータの影響で下火になった．ベクトル計算機では，演算数をたとえ10分の1に減らしても，その順序を実現する計算方法がベクトル化されなければ，加速率が10倍以上あるベクトル計算機ではその効果は打ち消される．このため多少演算数が多くとも，ベクトル化可能な帯行列ソルバーやスカイライン法が好まれた．これらの計算方法に適した順序付けスキームが，カットヒル・マッキー法，逆カットヒル・マッキー法である．これらの手法は通常，もっとも接続の少ない節点から始めて，その節点に接続する節点(k 個あるとする)を次に(2から $k+1$ に)番号付けすることで，帯半幅の拡大を抑える．次のステップは，これらの k 個の節点のうちで，もっとも接続の少ない節点を選び，先のステップを繰り返す．このステップを全節点が番号付けされるまで繰り返すのがカットヒル・マッキー法であり，この番号付けを逆転するのが逆カットヒル・マッキー法である．しかしこのアプローチを大規模な問題に適用すると，行列のまばらさが失われ，演算量の増加を招く．

疎行列のまばらさをできる限り保存する順序付けの問題における，最適な順序付けを探す問題はNP完全(Non-deterministic Polynomial complete)である．そこでヒューリスティックを用いて，最適ではないが実用的な解を，現実的な時間内に見つける方法が採られる．2つの有効なヒューリスティックが用いられてきた．最小次数順序(minimum degree ordering)とグラフ分割(graph partitioning)に基づく方法で，後者は解剖法順序(nested dissection ordering，ND法)とも呼ばれる．

最小次数順序法

この方法は，多くの節点に接続する節点よりも，少ない節点に接続する節点のほうが，その節点を消去したときに発生するフィルインが少ないという考えに基づいている．ここでの接続は，消去の過程で生じたフィルインを含めたものなので，順序付けごとに三角分解をシミュレートすることが必要になり，順序付けの計算時間はカットヒル・マッキー法よりも長くなる．具体的には接続の少ない節点を消去し，それによって更新される接続関係から，再び接続の少ないものを選んでゆく．この操作を繰り返すことで得られる行列は，行列全体に非ゼロ要素が散在するが，フィルインはカットヒル・マッキー法などの方法によるよりもかなり少なく抑えられる．

図1に8×8にメッシュ分割した正方形領域に，最小次数順序法の番号付けを適用して得られる行列を示した．図で対角項は■印，行列 A の非ゼロ要素は●印，フィルインは○印で示した．この行列を三角分解するのに要する計算量は5.6Kflop(FLoating-point OPerations，浮動小数点演算命令の実行回数)で，自然な番号付けを行って帯行列とした場合の7.6Kflopよりも少なくなる．

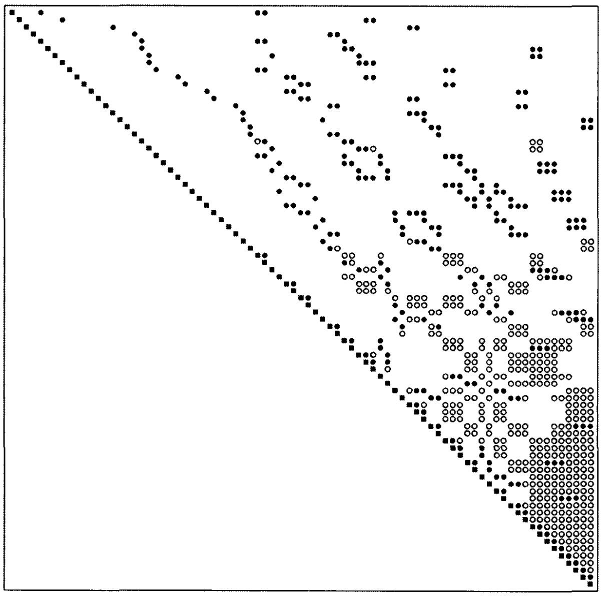

図1　最小次数順序法による8×8正方形領域の行列

1	2	3	4	5	6	7	8	9
10	11	12	13	14	15	16	17	18
19	20	21	22	23	24	25	26	27
28	29	30	31	32	33	34	35	36
37	38	39	40	41	42	43	44	45
46	47	48	49	50	51	52	53	54
55	56	57	58	59	60	61	62	63
64	65	66	67	68	69	70	71	72
73	74	75	76	77	78	79	80	81

1	2	3	4	73	40	39	38	37
5	6	7	8	74	44	43	42	41
9	10	11	12	75	48	47	46	45
13	14	15	16	76	52	51	50	49
17	18	19	20	77	56	55	54	53
21	22	23	24	78	60	59	58	57
25	26	27	28	79	64	63	62	61
29	30	31	32	80	68	67	66	65
33	34	35	36	81	72	71	70	69

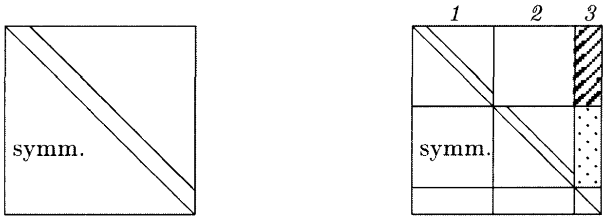

図2　番号付けとフィルイン

この差は正方形領域の一辺のメッシュ数が増えると増加する．

グラフ分割による方法(解剖法)

カットヒル・マッキー法や最小次数順序法は，接続関係(グラフ)を局所的に眺めるのに対し，解剖法は接続関係を全体的に眺める．まず，解析領域を2つの部分領域と，その間に両者が直接接続しないように入れる干渉領域(セパレータ)の3つに分割する．節点順序は，分離された境界節点を部分領域節点の後に入れる．この操作を，それ以上分割ができなくなるまで繰り返す．

自然な順序での演算量

自然な順序では行列Aの初期の非ゼロ要素の位置は，対角項とその隣，および帯半幅の周辺に限定される．この行列を1行目，2行目，… と分解してゆくと，帯半幅の縁の内側に最初のフィルインが現れ，計算の進行とともにフィルインが新たなフィルインを生む．消去が正方形領域の上の辺の全節点に及ぶと，その行の帯半幅の内側は，初期の非ゼロ項とフィルインで埋められる．いったん密な行が形成されると，後続の行はすべて密になるので，分解が終わると帯半幅の内側に存在した初期のゼロ要素は，最上部を除いてすべてフィルインに変わる．演算量は，総節点数(行列の次数m^2，帯半幅をmとすると，m^4と見積もることができる．mと総節点数はnの関係は$m = \sqrt{n}$なので，演算量は総節点数nに対して$O(n^2)$である．

解剖法順序のフィルインと演算量

図2の例は，正方格子の座標値を利用して2つの部分領域に分割した．部分領域の内部の節点を先に，境界節点を後回しに番号付けする．

ここで節点1から36までを(イタリック体で)*1*，節点37から72までを*2*，節点73から81を*3*とグループ化する．グループ*1*に含まれる節点は，グループ*2*には直接接続していない(**連成がない**)．このことはグループ番号を添字とした小行列では，A_{12}がゼロ行列であることが対応している．これがグループ*1*と*2*の**並列性**である．

もうひとつの重要な性質はA_{23}の**プロファイル形状の保存**である．これは図2の右では，ハッチングで示したA_{13}の非ゼロ要素は，図で網かけしたA_{23}の部分にフィルインを生み出さないからである．

この分割を繰り返すことで並列に消去できる領域を増やしてゆく．**図3**では分割を2回繰り返して4つの部分領域に分けた．対応する行列を右に示したが，縁付きのブロック対角行列が再帰的に作られる．2回分割すると4つの独立した領域が形成される．p回の分割で2^pの独立した領域ができる．kウェイの並列性を作り出すためには，$\log_2 k$回の分割を再帰的に行う[1]．

1　図3の疎行列の形状は，分散メモリ型の並列計算機にはあまり意味がない．この行列を4ウェイで解くなら，4つの独立した対角位置の小行列は同時に分解されてゆき，それぞれの縁の疎行列も2ウェイの並列性を持っている．三角行列Lは分解された状態のメモリ位置で次のステップの代入計算に渡されるなら(Lを外部のシーケンシャル・ファイルに保存して，分解した時とは異なる並列度あるいは逐次計算で使用するのでなければ)Lの内部フォーマットは一般にユーザは知る必要がない．

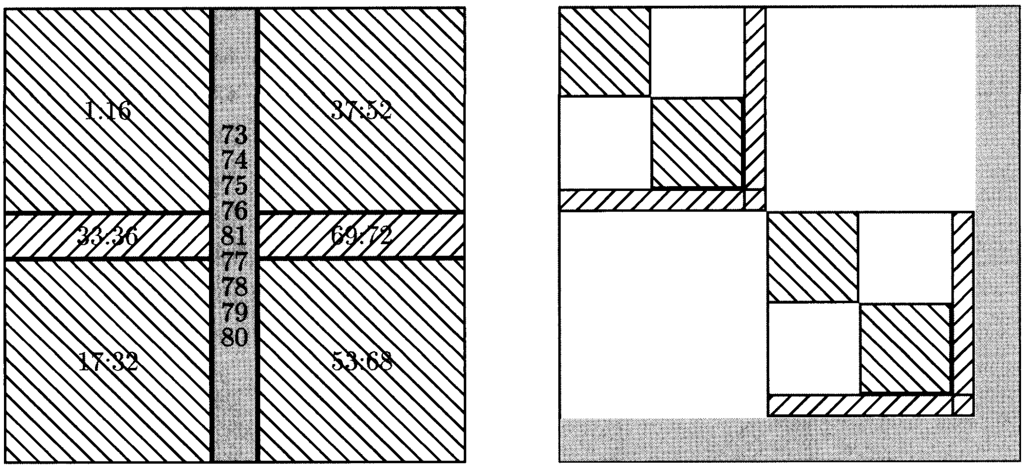

図3　正方形領域に対する2回の分割と対応する疎行列

表1　反復回数と演算数(Mflop値)

m	0	2	4	6	8	10	12
32	1.2	.67	.59	.48	.46	—	—
64	18.	9.5	7.4	4.9	4.3	4.2	—
128	276.	143.	102.	54.	40.	37.	37.

図3では8×8の格子に対して2回の分割を行ったが，32×32に対して2回の分割を行うと，LU分解に要する演算量は半分近くになる．分割回数を4回，6回，8回と増やしてゆくと，自然な順序の38％ほどに減らせる[2)]．この効果は格子が細かくなればさらに大きくなり，128×128の格子に対して10回分割すると13％まで減少する(**表1**)．

3. WSMPのアルゴリズム

WSMP(Watson Sparse Matrix Package)はミネソタ大学でKumar教授に師事したAnshul Guptaによって開発されたパッケージで，対称行列用と一般行列用がある[3)]．現在はIBMのαワークスからダウンロード可能で，IBMのAIX環境，IA32のLinux環境，IA64のSGI Altix環境など複数の環境で稼動する．

http://www-users.cs.umn.edu/~agupta/wsmp

Fortranまたは C から呼び出せるライブラリで，順序付け(ordering)，シンボリック分解(symbolic factorization)，数値分解(numerical factorization)，代入(triangular solves)，解の改良(iterative refinement)の5つのタスクからなる．対称行列用も一般行列用も，逐次および SMP 並列計算機用の版と，分散メモリ型並列計算機用の版(MPI版)を持つ[2]．軸選択は，対称行列用はBunch and Kaufmanのアルゴリズムによる対角軸選択(diagonal pivoting)が用いられ，一般行列用はrook pivotingが用いられる．これらの軸選択は，閾値(threshold)をユーザが与えると，対角項の絶対値がこれよりも小さいときに軸選択を行う．なお，MPI版では軸選択機能がない．本章では対称行列用のMPI版のアルゴリズムを紹介する．

3.1 順序付け(ordering)アルゴリズム

前章では規則的な構造を持つ問題に対して解剖法を適用して，フィルインが少なくなること，演算量を削減できることを説明したが，本節ではWSMPの方法を例に，有限要素法(FEM)や有限体積法(FVM)，あるいは線形計画法(LP)などで使用される不規則な(非構造メッシュから生み出される)疎行列に対して，再帰的なグラフ分割を行う方法を紹介する．ここではグラフ理論に基づくアルゴリズムを用いている．分割はコースニング(coarsening)，初期分割(initial partitioning)，アンコースニングと洗練(uncoarsening & refinement)の3つのフェイズからなる．

コースニング

疎行列の要素間の接続関係を表わしたグラフは，はじめは各頂点に重み1がつけられている．コースニングの目的はグラフの特性を保ったままグラフを縮小してゆくことにある．具体的には，マッチング(独立辺集合)を見つけて，その辺を取り除き，その辺に接続した端点を1つの頂点とすることで頂点(vertex)と辺(edge)

2　SMPはSymmetric Multi Processorの略で，複数のプロセッサが単一のメモリ空間を共有する並列計算機，MPIはMessage Passing Interfaceの略で，複数のプロセッサがそれぞれのメモリ空間を持ち，メッセージ交換（通信）をしながら並列計算を行うための規格である．

の数を少なくしてゆく．**図4**はグラフ理論ではよく引用される，五角形の内側に星型が入り，五角形の頂点と星型の頂点は接続されたペテルセン・グラフである．図で点線で示した5本の辺は，各辺の端点を共有しない．このように**互いに接続しない辺の集合**を**マッチング**という．WSMPではマッチングを作ると，その辺(この例では5本)を取り除き，その両端点を合体させて，両方の重みの和を重みとする頂点を作ることで，グラフの特性を残す．この処理を繰り返すことでグラフを縮小してゆく．nが100万程度で$k=1024$ウェイの並列化を考えるなら，繰返し回数は各回で平均半分に縮小できるとすると$\log_2 \frac{n}{k}=10$回程度である．

初期分割

グラフが十分小さくなると，次にこれを独立なk個のグラフに分割することで，k個の独立な部分領域を見つける．これが前節で述べた「直接接続しない部分領域」になり，最初に消去されるところなので初期分割と呼んでいる．ここではグラフ拡大(graph-growing)ヒューリスティックを用いる．まずランダムに1つの頂点を選び，それにタグ付けする．その頂点に接続する頂点にもタグ付けし，さらにそれに接続する頂点にもタグ付けする，という具合に拡大して，タグ付けされた頂点とされない頂点の重みの和が所望の値に到達するまで拡大させる．グラフ拡大によって，n頂点のグラフをk個に分割することで，k個のクラスターが作られる．

アンコースニングと洗練

アンコースニングはコースニングの逆を1ステップで行う．このとき，粗いグラフでの親頂点のタグを受け継ぐ．アンコースニングの過程で異なる分割グラフに接続する辺が現われるが，これをセパレータとする．このセパレータを取り除けば，グラフはk個の独立なサブグラフに分離される．

またアンコースニングのたびにセパレータを改良する．ここではセパレータのサイズを小さくすることと，各サブグラフの重みが均等になるようにする．

アンコースニングと洗練の処理を数回反復することで，反復中で最良のものを選ぶ．選択の基準はセパレータのサイズとサブグラフの重みの不均等の逆数の重み付き平均を用いる．

最終的に得られた独立したサブグラフに対して，最小次数順序法で順序付けする．WSMPは入力された疎行列の接続情報からグラフを作成して，そのグラフを再帰的に分割することで並列性を生み出しながら，かつフィルインを少なくする順序付けを決定し，結果をPERM(permutation)配列とINVP(inverse permutation)配列に返す．MPI版では順序付けも並列化して行う．

3.2 シンボリック分解

グラフを再帰的に分割することは，実際の数値的な三角分解に多階層(multilevel)の消去の道筋を決めることになる．これに続くシンボリック分解は，三角分解をシミュレートしてフィルインを特定する．WSMPではこれを疎行列の接続情報と順序付けのPERM配列とINVP配列を入力情報として行う(グラフ分割時に派生して得られる情報を利用しない)．順序付けでは入力行列の接続関係をグラフで表し，グラフ分割によってk個のサブグラフに分割したが，消去の道筋は消去木(elimination tree)として掌握される．図3に対応する消去木を**図5**に示した．

シンボリック分解を行うとフィルインも確定するので，並列計算の性能を向上させる順序付けの微調整も行うことができる．WSMPは微調整を改良案としてPERM配列とINVP配列を書き替えることで反映する．この段階でフィルインは最終決定され，各ノードが必要とするメモリ容量と消去の段階で行う通信が確定する．したがって後続の数値的な三角分解は，シンボリック分解の決めたシナリオで進む．軸選択はフィルインの状況を変化させるので，SMP並列版では実装されて

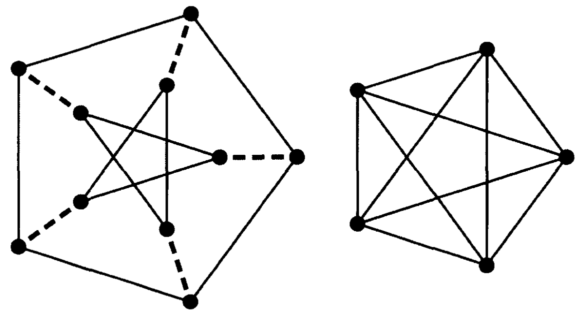

図4　ペテルセン・グラフのマッチング

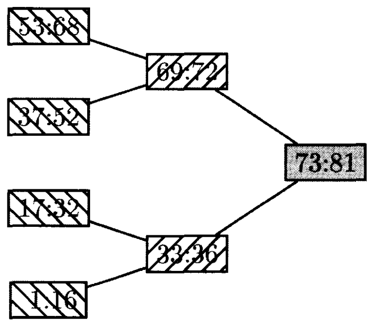

図5　図3に対応する消去木

いるが，MPI並列版では通信パターンの変更を伴うので実装されていない．

3.3 数値的な三角分解

マルチフロンタル法で三角分解を行う．消去木は行列の列インデックスを持つので，これによって消去木に対応するフロント行列を作成して，extended-addと呼ばれる2つのフロント行列のインデクスのセットを併せて1つのフロント行列に更新する操作によって，消去木の末端から幹へと消去計算を進める．MPI版ではフロント行列は，サブツリー・サブキューブ・マッピングによって分散される．これは末端のグループは単一の計算ノードで所有するが，消去木の集合する部分では，下位のグループを所有していた計算ノードによってビットマスクを用いてフロント行列をブロックサイクリック分散する．したがってフロント行列の更新操作(extended-add)は，相手方の計算ノードのみとの通信で行うことができる．

分解の最終フェイズでは並列性は少なくなってゆき，行列も密行列に近づくので，適当なタイミングで密行列に再分散して，密な対称行列の分解ルーチンにスイッチする．

3.4 前後進代入

行列要素は(通信を行いながら分解したので)三角分解の終了時の所有ノードの状態になっている．代入計算では右辺$\boldsymbol{b}$を三角行列の対角項の所有者と同じ計算ノードに分散してから開始する．代入計算も三角分解と同様に消去木の最下位から行われ，更新されたベクトルを消去木に沿って通信しながら進める．

3.5 反復的な解の改良

直接解法で大規模なLU分解を行って連立方程式を解いても，計算誤差が載った解が得られるだけなので，反復的な改良を行わなくてはならない．求まった解を$\boldsymbol{x}$とすると，残差ベクトル$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}$を求める．この計算は倍精度よりも高い精度で行う．前進代入と後進代入によって$\boldsymbol{z} = (LU)^{-1}\boldsymbol{r}$を求め，改良された解$\boldsymbol{x}_{new} = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{z}$を得る．これを1回の反復として，十分な精度が得られるまで繰り返すが，WSMPでは通常1回の反復で十分な解が得られている．

以上，WSMPを例に対称行列の分散メモリ型並列計算機での並列化アルゴリズムの概要を述べた．直接解法だけで精度の良い解が得られず，1回だけ反復改良が必要になることは象徴的である．つまり三角分解を小規模計算の場合のガウスの消去法のようには考えずに，最良の前処理と見るのである．現在の共役勾配法に対する研究の多くは前処理行列に向けられている．ILU(0)，ILU(1)などのレベルによる方法，行列要素の絶対値を目安に棄却する手法，分解された三角行列の要素の絶対値を目安に棄却する方法といろいろ存在する．電磁界解析では行列の特異性のために反復法も収束が困難になっているので，分散メモリ型であっても，局所前処理の制限を緩めて，かなり通信が増加しても，より完全に近い前処理を用いて確実な収束を試すには，ここで紹介した直接解法の節点の順序付けの技術や並列化プログラミング技法は利用価値があるかもしれない．

4. 特異行列の扱い方

電磁界解析で特徴的な，正則でない係数行列の扱い方を考えてみたい．特異性にはその根拠となる特異性のタイプに応じた解法が開発されている．例えばFEM構造解析では，拘束条件がない(飛行物体が加速度を持って飛行する場合の静解析)ことによって生じる特異性，平板を2自由度の面内要素と3自由度の平板曲げ要素を重ね合わせることで作られる(面内回転自由度を持たない)5自由度平板が僅かな角度をもって接続することで生じる特異性，ポアソン比が0.5となることによって生じる要素剛性行列のランク落ちに起因する特異性などがある．これらの特異性はそれぞれ扱い方が異なる．これは特異行列を直接三角分解せずに，境界条件を適用して解くための方策である．電磁界解析では未知変数が磁界そのものではなくベクトルポテンシャルAであり，これの回転をとったものが磁界になるように定式化されている．このため積分定数の選択の任意性があるので係数行列は特異である．また個々の要素行列も(本小特集ですでに解説されているように)木－補木ゲージを適用してゲージ固定する方法はあまり採られない．さらに回路と連成する場合は，対角項が零の方程式が連立するので特別な処理が必要になる．FEMによる電磁界解析は，辺要素の成功が，前処理付きCG法の成功と時期的に重なっていたこともあり，構造解析のように特異性ごとに細かな境界条件処理によって問題を直接解法に乗せる手法が開発されることなく，ゼロ固有値を多くもったままの係数行列を反復解法で扱うことが多い．

本小特集ではすでにゲージ固定理論を解説したが，ここでは三角分解側で，係数行列が特異あるいは特異に近い状態であった場合に，ミドルウェア側の三角分解で行える階数判定(rank revealing)について解説する．また並列化ではこの機能が制限される場合が多いが，その理由を説明する．

連立1次方程式の解と右辺の関係

対称行列を係数行列とする $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ の問題で，A の全固有値 λ_i と固有ベクトル $\boldsymbol{v}_i$ が既知としよう．固有ベクトルは互いに直交$(\boldsymbol{v}_i^T\boldsymbol{v}_j=0,\ i\neq j)$しており，また $\boldsymbol{v}_i^T\boldsymbol{v}_i=1$ に正規化されているとする．いま，解ベクトルがこの固有ベクトルの1次結合で $\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}\beta_i\boldsymbol{v}_i$ の形で展開されるとする．連立1次方程式は次のように書き換えられる．

$$A\boldsymbol{x}=V\Lambda V^T\left(\sum_{i=1}^{n}\beta_i\boldsymbol{v}_i\right)=V\left(\lambda_i\beta_i\boldsymbol{v}_i^T\boldsymbol{v}_i\right)=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\beta_i\boldsymbol{v}_i \quad (1)$$

ただし Λ は λ_i を対角項とする対角行列，$V=(\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_1\ \dots\ \boldsymbol{v}_n)$ である[3]．

今，$\alpha_i=\lambda_i\beta_i$ の変数の置き換えをすれば，解 $\boldsymbol{x}$ と右辺 $\boldsymbol{b}$ の間には次の関係がある．

$$\boldsymbol{b}=\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\boldsymbol{v}_i,\quad \boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}\frac{\alpha_i}{\lambda_i}\boldsymbol{v}_i \qquad (2)$$

つまり，右辺ベクトルを固有ベクトルで展開したときの係数 α_i を固有値 λ_i で割った係数が，解ベクトルを固有ベクトルで展開したときの係数になっている．このため，非常に小さい固有値を持つ行列を係数とする連立1次方程式の解は，絶対値最小の固有値に対応する固有ベクトルの成分が支配的になる．

ランクリヴィーリング・アルゴリズム

図6に5本のバネの連結された問題を示した．各節点は x 方向のみの自由度をもつものとする．図では左端は拘束されているので，この連結バネの右端の点を引っ張ると，各バネは均等に伸びる．さて，左端の拘束を外してみよう．バネ定数を $k=1$ として，拘束のない(空中に浮いた)連結バネの右端に荷重1を与える問題 $\boldsymbol{Kx}=\boldsymbol{f}$ を考える．

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & -1 & 2 & -1 & & \\ & & -1 & 2 & -1 & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad (3)$$

この問題を素朴にLU分解すれば，最後の段で $u_{66}=a_{66}$

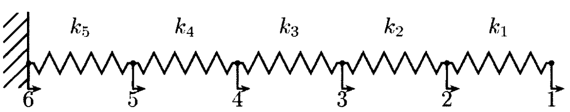

図6　5本のバネの連結

3　$V^TV=I$ であり，$AV=V\Lambda$ の両辺に左から V^T を掛けることで $A=V\Lambda V^T$ が得られる．

$-(-1)\times(-1)=0$ となるので，剛性行列 K は次のように分解される．

$$K=LU\equiv\begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ -1 & 1 & & & & \\ & -1 & 1 & & & \\ & & -1 & 1 & & \\ & & & -1 & 1 & \\ & & & & -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -1 & & & & \\ & 1 & -1 & & & \\ & & 1 & -1 & & \\ & & & 1 & -1 & \\ & & & & 1 & -1 \\ & & & & & 0 \end{pmatrix} \qquad (4)$$

$L(U\boldsymbol{x})=\boldsymbol{f}$ の形になっているので，$U\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$ と置いて，前進代入で $L\boldsymbol{y}=\boldsymbol{f}$ を求めると $\boldsymbol{y}=(1\,1\,1\,1\,1\,1)^T$ と全要素が1になる．後進代入では対角項 u_{nn} で割る操作から始まるので，ここで $x_6=1\div 0=\infty$ となる．このまま計算を続けられれば $1-(-1)\times\infty=\infty$ より $\boldsymbol{x}=(\infty\infty\infty\infty\infty\infty)^T$ と全要素が ∞ になる．この解は元の問題の物理に適っている．拘束のない構造物に荷重を加えれば吹っ飛んでいくからで，これを剛体変位(変形を伴わない変位)という．ここでは荷重は右端の点を引っ張ったが，逆符号を与えれば∞が $-\infty$ になること，また右端ではなくどの点に荷重を加えても同じ剛体変位が得られることに注意されたい．つまり，右辺に依存しない剛体モードが得られる．

さて，実際の数値計算ではここで示した筆算のように綺麗に $u_{nn}=0$ となってくれないことがほとんどである．そこで階数判定(rank revealing)アルゴリズムが実装される．

$n\times n$ の疎行列の階数が r の場合，対称性を崩さないように対角軸選択を行い，左上の $r\times r$ の小行列が正則になるように追い込んでゆくことができる．この方法を用いると，階数が $n-1$ の $n\times n$ の行列をLU分解した場合，u_{nn} がゼロになるように行交換を行う．実際には正確にゼロにはならないので，閾値を指定して，これよりも小さい $|u_{nn}|$ をゼロと判定する．対応する代入計算では u_{nn} で割る操作を行わずに $x_n=1$ として処理すると，ゼロ固有値に対応する固有ベクトルつまり剛体モードが得られる．

FEM電磁界解析での利用

発射直後のロケットのように加速度を持って飛行する物体の静解析は，境界条件として仮拘束を用いることによって，特異行列を直接三角分解することなく解析することが可能であるが，現在ではここに述べた階数判定アルゴリズムで自動的に処理することも可能である．FEMによる電磁界解析では，木－補木ゲージ固定すれば少ないランク落ち，つまり全体系に重ね合わせた後のベクトルポテンシャルの積分定数の任意性の

みのランク落ち状態まで係数行列を変形することができ，WSMPのような直接解法のミドルウェアを利用して並列化して解を得ることは可能であると考えている．MPI並列版では動的な軸選択を行うことができないので，回路と連成したゼロ対角項をもつ問題では，その自由度を始めから最後に割り当てるオプションを用いると解くことができるかもしれない．いずれにしても疎行列の直接解法の問題は，大量のフィルインに対して，反復解法と比較した計算コストの問題になると思われる．

5. モーメント法による高周波解析の並列化例

前章までに疎行列を係数行列とする連立1次方程式の，分散メモリ型並列計算機での並列化について，基本的な事項とWSMPでの実装例を紹介した．密行列の並列化はこれに比較すると容易で，計算機の性能の指標として長年用いられていたLINPACKベンチマーク性能値も，並列計算機用に改訂されたHPL(High Performance Linpack)として公開されており，Top 500の性能値もほとんどがこのプログラムを使用して計測されている．密行列の並列化は，疎行列の場合に比較すると単純なアルゴリズムで解決される．しかし演算量が$O(n^3)$ということは，nが10倍になると1000倍の演算量になるということなので，比較的小さな問題しか解くことができない．実際，構造解析でもソルバーが連立1次方程式を解くための時間は，$O(n^{1.5})$のFEMと，$O(n^3)$のBEMとを比較すると，両者のnはFEMでは解析対象の体積を，BEMでは解析対象の表面積を分割して得られる数であるにも拘わらず，BEMのほうが長時間になるのが一般的と考えられる．つまりBEMは(メッシュ生成の利点に眼を瞑って)高速解法の観点でFEMと比較すると，現在ではFMM(Fast Multipole Method：高速多重極法)と併用することで価値がある[4]．電磁界解析ではMoMとBEMが密行列を生成する代表的な解法である．これらの解法では電磁界を解析する場合でも，未知数は回路をサポートする表面の要素の電流密度なので，方程式の規模は小さい．高速化の手法は本小特集でもすでに述べたFMMが用いられるのが一般的である．

本節ではIBMのαワークスに公開されているEMSurfで採られた並列化手法を紹介する．ここではIBMでLSIパッケージ開発で使用しているモーメント法によるフルウェーブ電磁解析シミュレータであるEMSurfで用いられているReduced coupling法を紹介する[4)]．EMSurfではFMMの収束性の問題を回避するために，Reduced couplingとPrecorrected FFTと呼ばれる方法を採用している．LSIパッケージでは電子部品の集積度の向上に伴って電気的に小さくかつ多数の未知数を持つ問題を解析する必要があるため，フルウェーブ解析が必須となってきている．今日のパッケージ解析問題においては，モーメント法における面未知数は簡単に数万を越えてしまう．計算機においてこのような問題を直接法によって解くと，例えば未知数75000の場合でも複数の周波数に対して毎回係数行列の分解を行わなくてはならないので，解析時間は数10時間になってしまう．このため連立1次方程式の解法にはFMM等の高速化手法を用いた反復解法がポピュラーである．

これまで大規模な散乱問題の解析に適用されてきた方法をパッケージやインターコネクト問題に用いた場合，モーメント法の低周波限界，高アスペクト比メッシュによる収束性などが新たな問題としてクローズアップされている．

EMSurfは非ガラーキン型の重み関数を用いるため，係数行列は非対称となるので，反復解法としてBiCG(双対共役)法を用いる．Reduced coupling法はその前処理として使用されている．並列化は，回路表面を並列度に応じた部分領域に分割し，基底関数と試験関数を部分領域の内部に限定して用いる．しかし未知数である電流の連続性は隣接する部分領域と連続する条件を強制する．前処理行列は部分行列を1つのブロックとする縁取り型になる(非ガラーキン型であるため，係数行列は非対称である)．

$$\left(\begin{array}{cccc|c} A_1 & & & & \\ & A_2 & & & \\ & & \ddots & & B \\ & & & A_n & \\ \hline & & C & & D \end{array}\right) \tag{5}$$

Reduced Couplingは密行列が係数行列の連立1次方程式に対する，局所前処理法になるが，電磁界解析(マクスウェル方程式)に特化した定式化を採用している特徴がある．**図7**のように解析対象を部分領域に分割する．各部分構造は独立しているが，電流連続性は部分領域境界を越えて保たれる．部分領域を跨る連成項の情報は失われるが，これによって計算の高速化と記憶領域の節約が達成される．

表面での定式化は，ポックリントンの電界積分方程

4　この結果，ベンチマークで名高いHPLを現在そのまま利用するアプリケーションは見当たらないという皮肉な現状にあるのかもしれない．

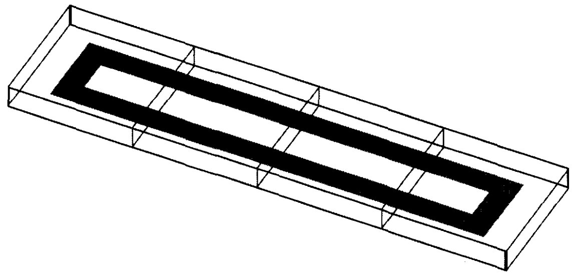

図7　4部分領域を回る伝導電流

式をMoMによって離散化している．使用可能なメッシュは長方形および三角形メッシュで，長方形にはハーフループトップ関数を，三角形にはRWG基底関数を割り当て，レイザーブレード試験関数として知られる1次元線形試験関数を用いて標本化する．

メッシュ分割後の各要素の寄与は，基底関数も試験関数もその半分だけを計算できるように作られる．「半分」は両側のメッシュの片方ずつを選択的に扱えるようにするための単位処理である．各々の基底関数は部分領域の内部にだけ電界を放射し，半分の試験関数も部分領域の内側にだけ作用する．部分領域境界を跨ぐ試験関数は独立に両方の半分部分をテストされる．部分領域内部の試験関数は他の内部要素からの電界をテストする．このように処理するため，変位電流は部分領域から外部に出ることはない．しかし伝導電流は境界要素によって部分領域を跨いで流れる．このような仮定を設定することは，解析対象のジオメトリにカットオフ半径を適用して連成項をゼロにするアプローチに比較すると，よりマクスウェル方程式に忠実な前処理となっている．つまり変位電流がゼロに近づく低周波領域で，Reduced Coupling法の前処理行列はより忠実に真の解に近づく．

6.　まとめ

最近では共役勾配法の前処理技術が進歩したため，大規模な疎行列を係数行列とする連立1次方程式を直接解法で解く機会が少なくなった．しかし，計算機は進化するので，利用可能なメモリの容量が増加するに伴って，実用的な問題の多くを確実に解が得られる直接解法で扱うことの魅力も捨てがたい．本稿では，疎行列を係数行列とする連立1次方程式の直接解法を行うパッケージであるWSMPを例に，疎行列の直接解法の概要と，正則性が疑われる問題，あるいは明らかに階数が落ちている問題を直接法でどのように扱うかについて，その1例を紹介した．またMoMの前処理として使用されている直接解法の並列化を，EMSurfの例で紹介した．

参　考　文　献

1) D. J. Rose and R. A. Willoughby, eds.: Block Eliminations on Finite Element Systems of Equations, Sparse Matrices and Their Applications, Plenum Press (1972)

2) 寒川光：解剖法順序を活かす多重スカイライン法，情報処理学会論文誌，**38**-10，1879/1885 (1997)

3) A. Gupta: Fast and Effective Algorithm for Graph Partitioning and Sparse Matrix ordering, IBM J. Res. Develop., **41**-1/2, (1997)

4) J. Morsey: A Broadband, Low Storage Preconditioning Scheme Based on Reduced Coupling for Full-wave Method of Moments Solvers, Applied Computational Electromagnetics Society Conference (2004)