

科学技術計算のための マルチコアプログラミング入門 Fortran編

第 I 部：概要，対象アプリケーション，OpenMP

中島研吾

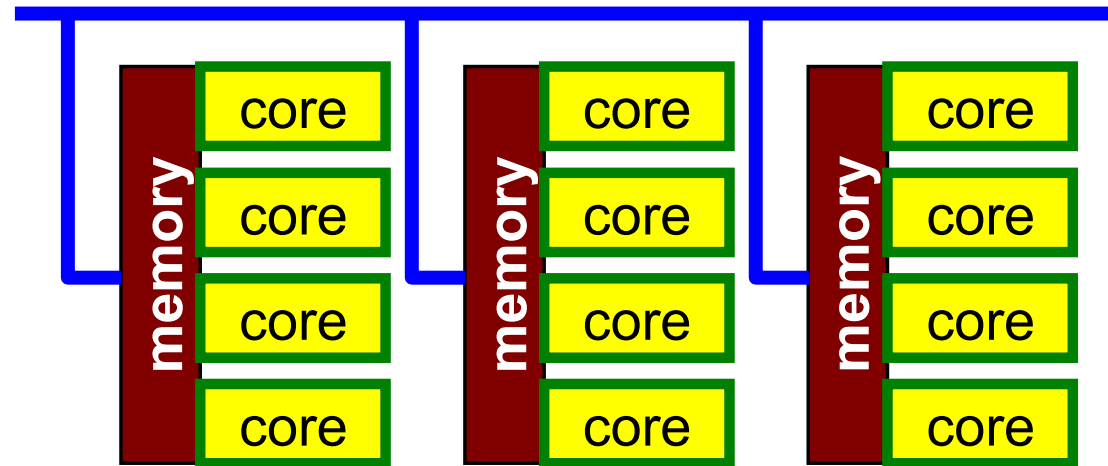
東京大学情報基盤センター

本編の背景

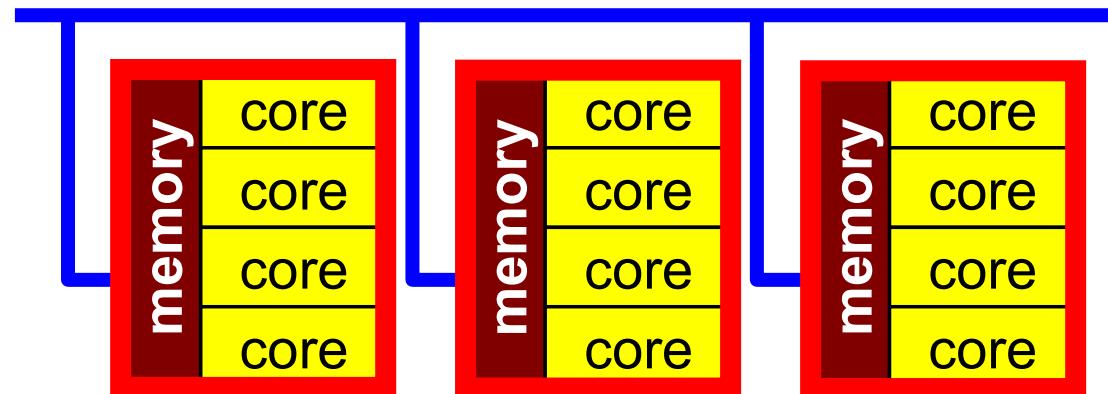
- マイクロプロセッサのマルチコア化, メニーコア化
 - 低消費電力, 様々なプログラミングモデル
- OpenMP
 - 指示行(ディレクティブ)を挿入するだけで手軽に「並列化」ができるため, 広く使用されている
 - 様々な解説書
- データ依存性(data dependency)
 - メモリへの書き込みと参照が同時に発生
 - 並列化を実施するには, 適切なデータの並べ替えを施す必要がある
 - このような対策はOpenMP向けの解説書でも詳しく取り上げられることは余りない: とても面倒くさい
- Hybrid 並列プログラミングモデル

Flat MPI vs. Hybrid

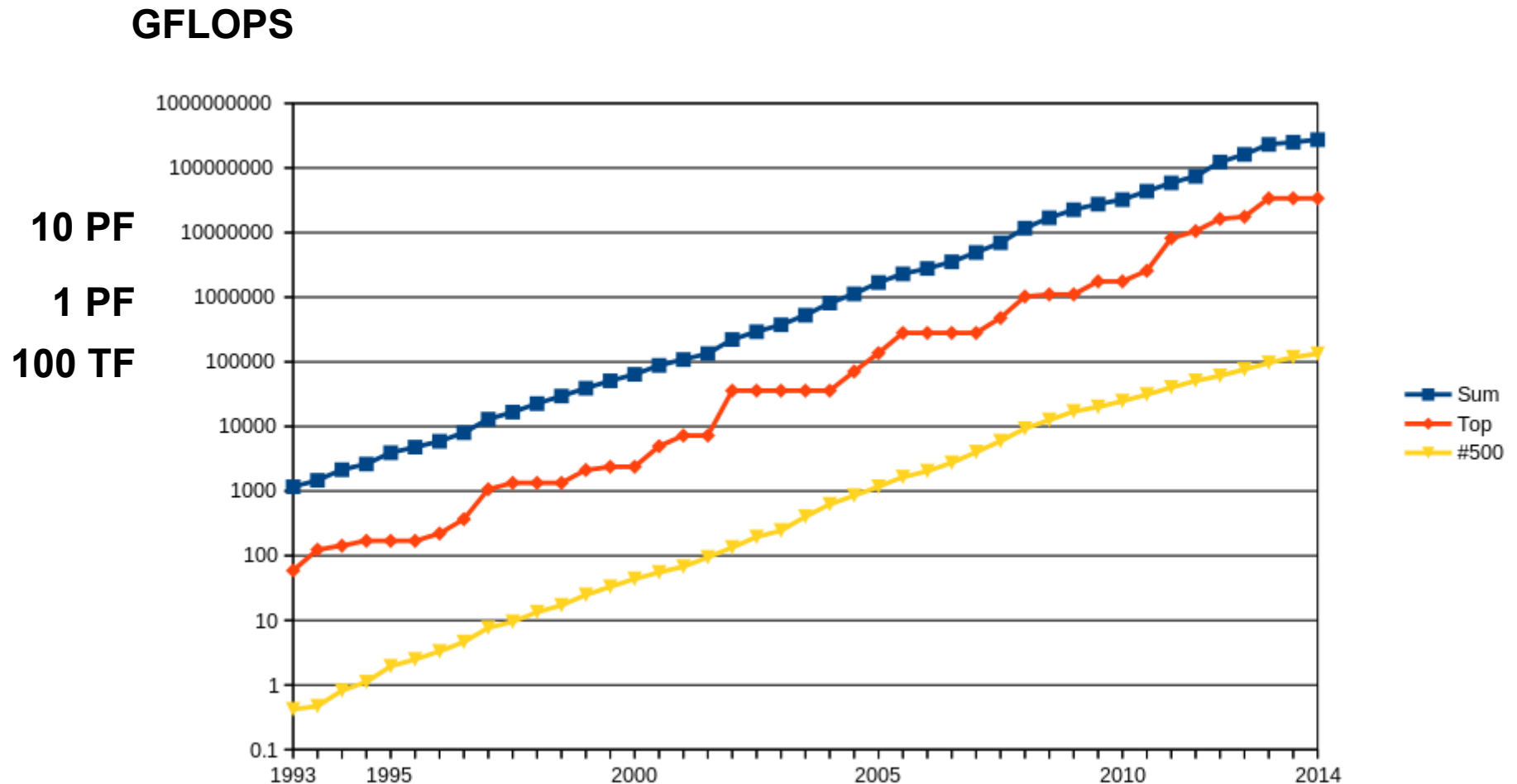
Flat-MPI: Each PE -> Independent



Hybrid: Hierarchical Structure



We are now in Post-Peta-Scale Era



- PFLOPS: Peta ($=10^{15}$) Floating OPerations per Sec.
- Exa-FLOPS ($=10^{18}$) will be attained in 2020-

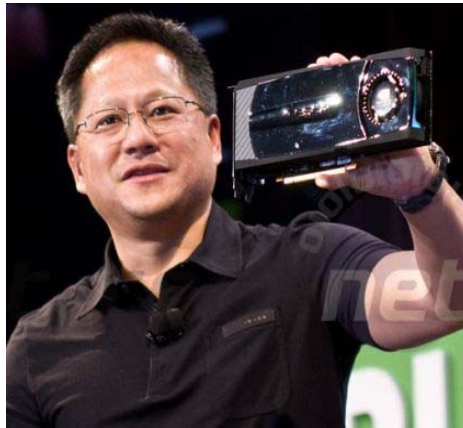
Key-Issues towards Appl./Algorithms on Exa-Scale Systems

Jack Dongarra (ORNL/U. Tennessee) at SIAM/PP10

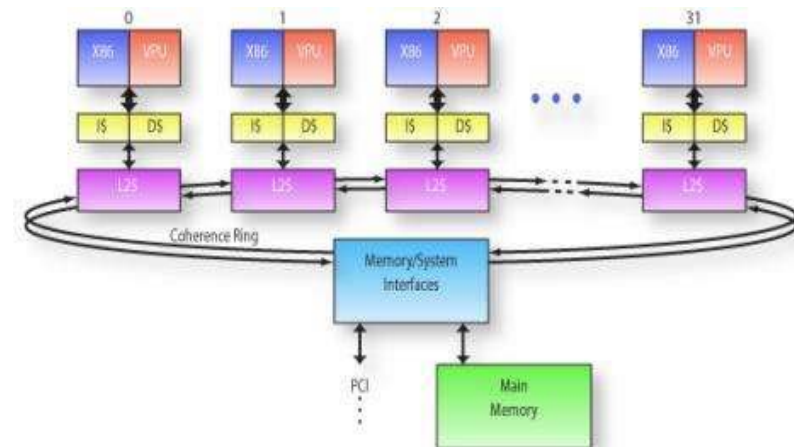
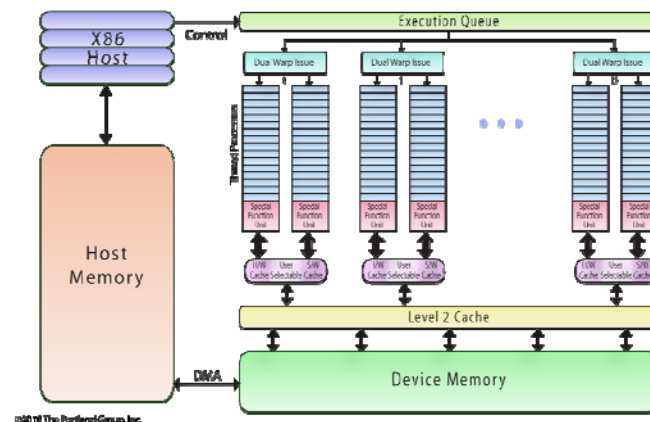
- Hybrid/Heterogeneous Architecture
 - Multicore + GPU
 - Multicore + Manycore (more intelligent)
- Mixed Precision Computation
- Auto-Tuning/Self-Adapting
- Fault Tolerant
- Communication Reducing Algorithms

Heterogeneous Architecture by (CPU+GPU) or (CPU+Manycore) will be general in less than 5 years

NVIDIA Fermi

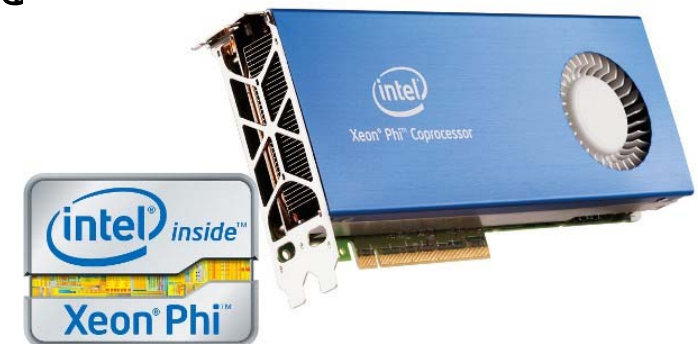


Intel MIC



CPU+Accelerator/Co-Processor (GPU, Manycore)

- 高いメモリーバンド幅
- GPU
 - プログラミング環境: CUDA, OpenCL
 - 一部のアプリケーションでは高効率: 陽的FDM, BEM
- メニーコア (Manycores)
 - Intel Many Integrated Core Architecture (MIC)
 - GPUより賢い: 軽いOS, コンパイラが使える
 - Intel Xeon Phi



Hybrid並列プログラミングモデルは必須

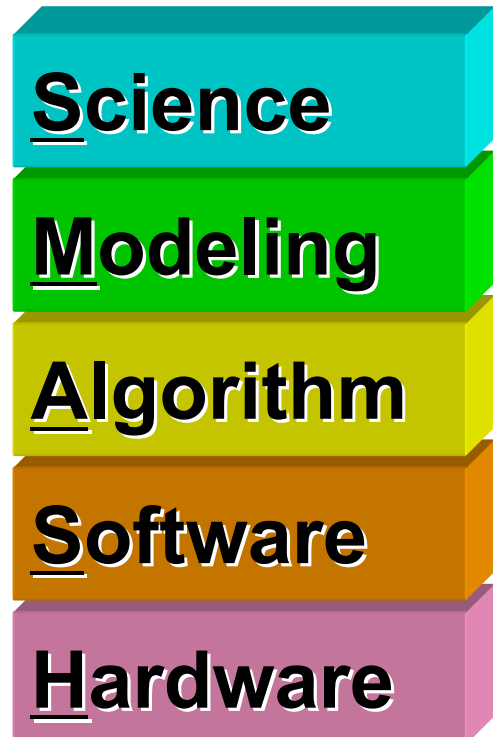
- Message Passing
 - MPI
- Multi Threading
 - OpenMP, CUDA, OpenCL, OpenACC
- 「京」でもHybrid並列プログラミングモデルが推奨されている
 - 但し MPI+自動並列化(ノード内)

本編の目的

- 「有限体積法から導かれる疎行列を対象としたICCG法」を題材とした, データ配置, reorderingなど, 科学技術計算のためのマルチコアプログラミングにおいて重要なアルゴリズムについての講習
- 更に理解を深めるための, [FX10](#)を利用した実習
- 単一のアプリケーションに特化した内容であるが, 基本的な考え方は様々な分野に適用可能である
 - 実はこの方法は意外に効果的である

本編の目的(続き)

- 単一のアプリケーションに特化した内容であるが, 基本的な考え方は様々な分野に適用可能である
 - 実はこの方法は意外に効果的である
- いわゆる「並列化講習会」とはだいぶ趣が異なる
- SMASH:「Science」無き科学技術計算はあり得ない！



ファイルの用意 on your PC

コピー, 展開

<http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/files/multicore-c.tar>

<http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/files/multicore-f.tar>

```
>$ cd <$CUR>
```

```
>$ tar xvf multicore-c.tar
```

```
>$ tar xvf multicore-f.tar
```

```
>$ cd multicore
```

以下のディレクトリが出来ていることを確認

L1 L2

これらを以降 <\$P-L1>, <\$P-L2>

Your PC

FX10

可視化にはParaViewを使用

<http://www.paraview.org/>

フリーソフトウェア
Windows版, Mac版がある
UNIX版もあり

<http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/class/HowtouseParaView.pdf>

資料はWeb上にもあります

<http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/seminars/2016-Spring/>

- 背景
 - 有限体積法
 - 前処理付反復法
- ICCG法によるポアソン方程式法ソルバーについて
 - 実行方法
 - データ構造
 - プログラムの説明
 - 初期化
 - 係数マトリクス生成
 - ICCG法
- OpenMP

本編の目的より

- 「有限体積法から導かれる疎行列を対象としたICCG法」を題材とした，データ配置，reorderingなど，科学技術計算のためのマルチコアプログラミングにおいて重要なアルゴリズムについての講習
- 有限体積法
- 疎行列
- ICCG法

対象とするアプリケーションの概要

- 支配方程式: 三次元ポアソン方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + f = 0$$

- 有限体積法 (Finite Volume Method, **FVM**) による空間離散化
 - 任意形状の要素, 要素中心で変数を定義。
 - 直接差分法 (Direct Finite Difference Method) とも呼ばれる。
- 境界条件
 - ディリクレ, 体積フラックス
- 反復法による連立一次方程式解法
 - 共役勾配法 (CG) + 前処理

解いている問題: 三次元ポアソン方程式

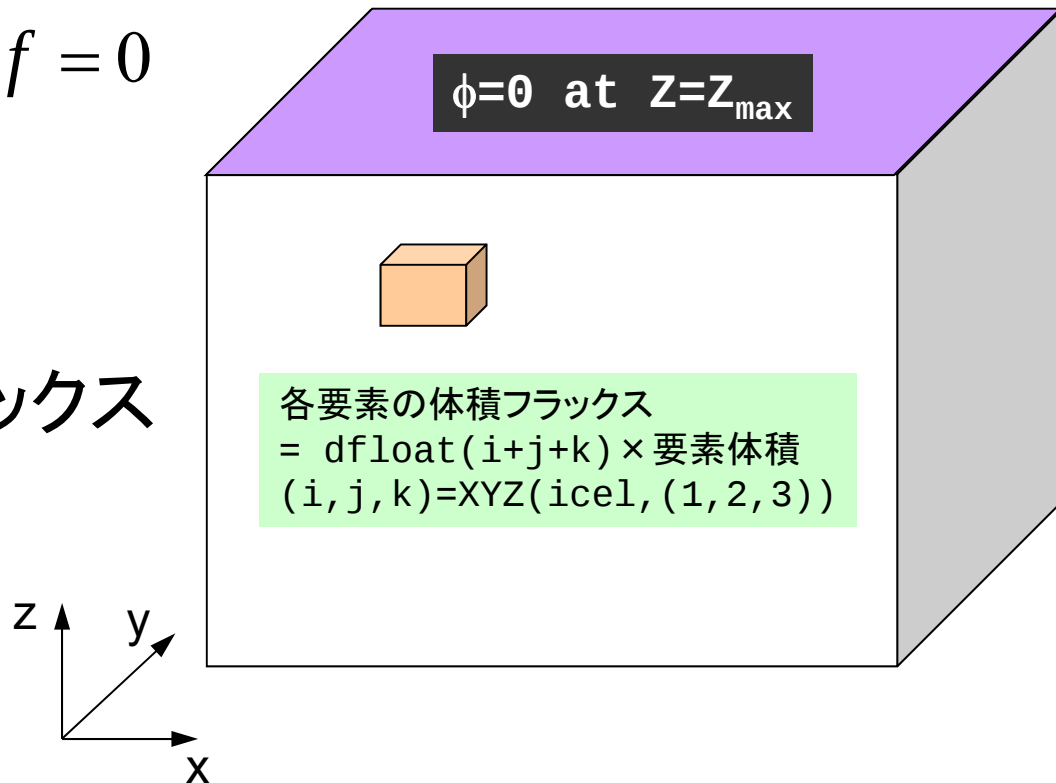
変数: 要素中心で定義

ポアソン方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + f = 0$$

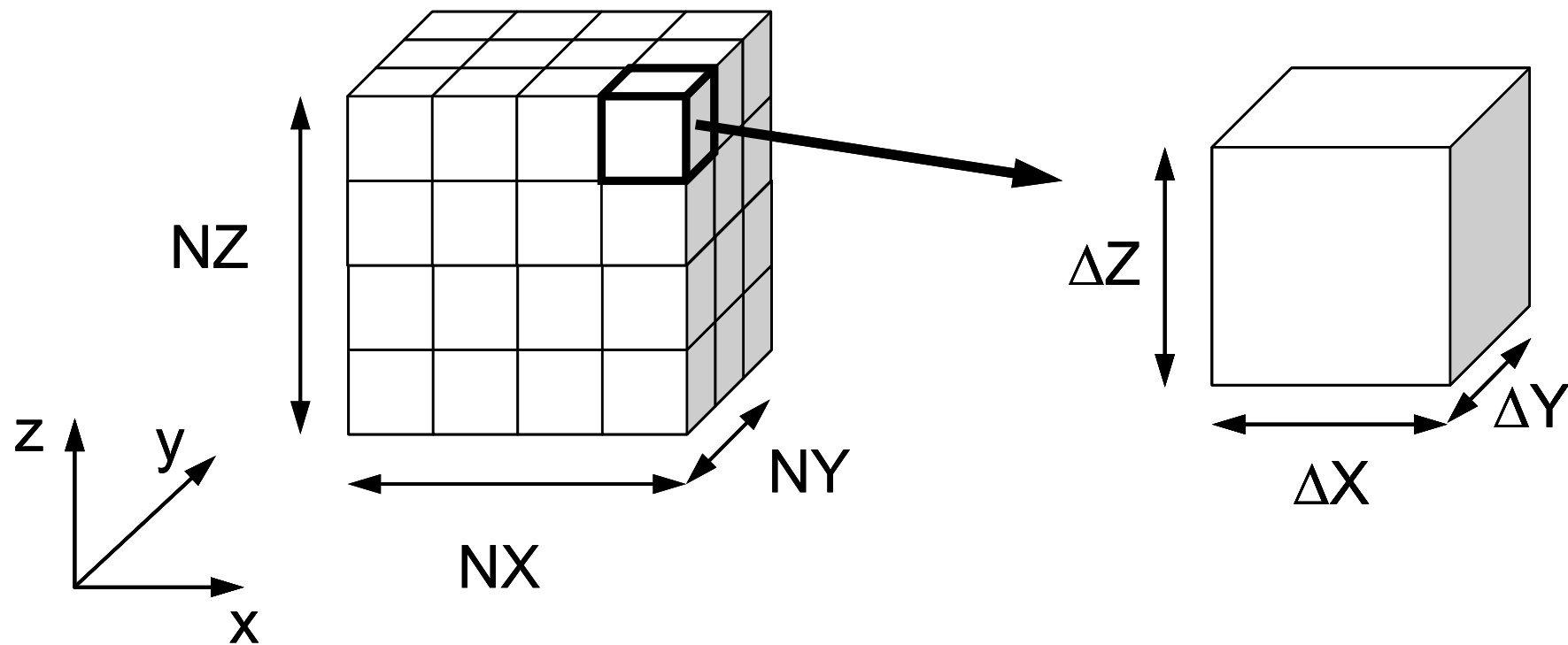
境界条件

- 各要素で体積フラックス
- $Z=Z_{\max}$ 面で $\phi=0$



対象：規則正しい三次元差分格子

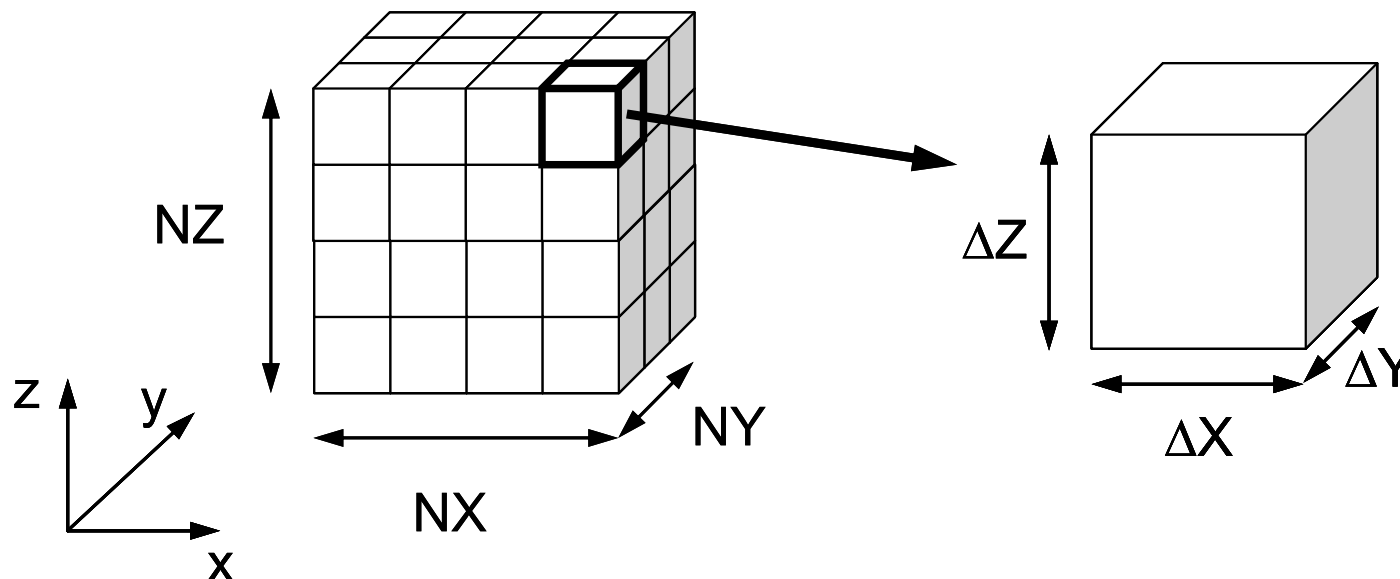
半非構造的に扱う



体積フラックスfの内容 $\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + f = 0$

$$f = dfloat(i_0 + j_0 + k_0)$$

$i_0 = XYZ(icel, 1)$, $XYZ(icel, k) (k=1,2,3)$ は
 $j_0 = XYZ(icel, 2)$, X, Y, Z方向の差分格子のインデックス
 $k_0 = XYZ(icel, 3)$ 各メッシュがX, Y, Z方向の何番目に
 あるかを示している。



有限体積法

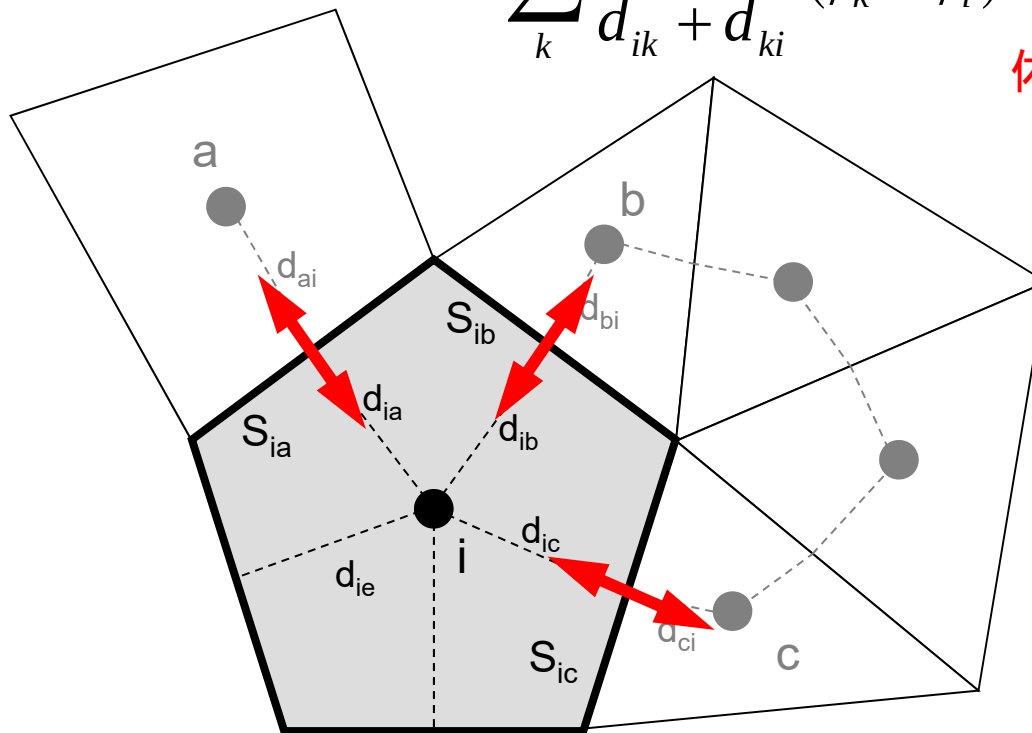
Finite Volume Method (FVM)

面を通過するフラックスの保存に着目

隣接要素との拡散

$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

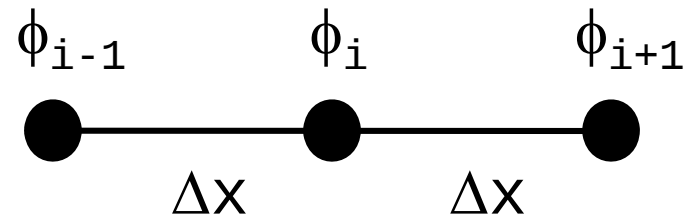
体積フラックス



- V_i : 要素体積
- S : 表面面積
- d_{ij} : 要素中心から表面までの距離
- Q : 体積フラックス

一次元ポアソン方程式：中央差分

$$\left(\frac{d^2 \phi}{dx^2} \right)_i + Q = 0$$



$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_i &= \frac{\left(\frac{d\phi}{dx} \right)_{i+1/2} - \left(\frac{d\phi}{dx} \right)_{i-1/2}}{\Delta x} = \frac{\frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{\Delta x} - \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} \\ &= \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} \end{aligned}$$

有限体積法

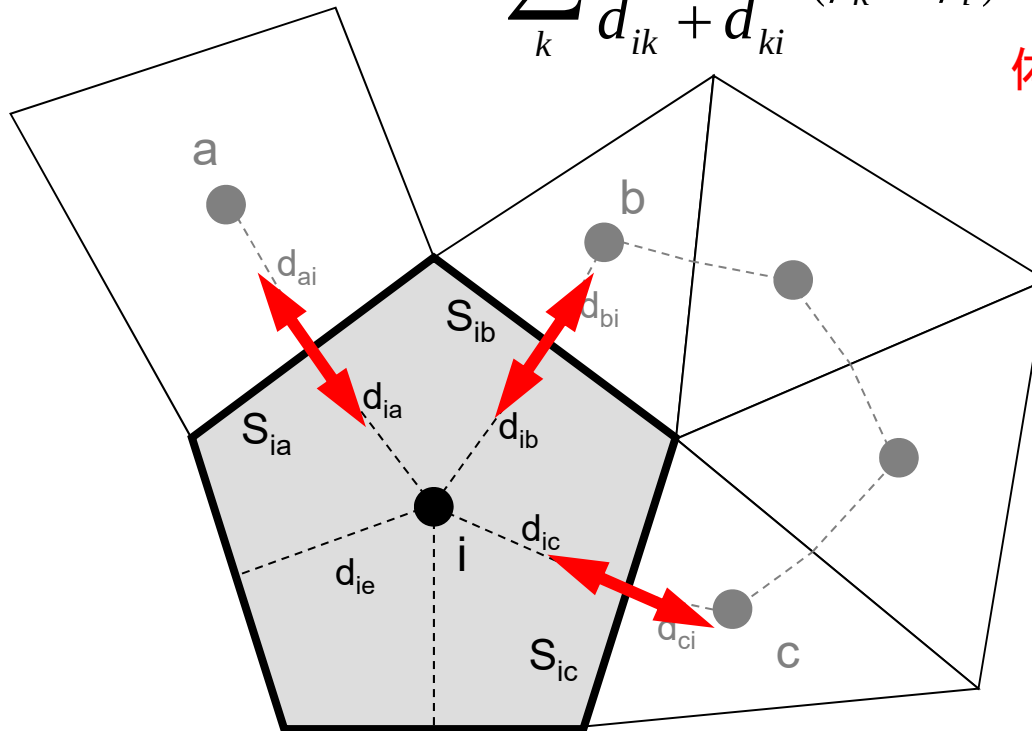
Finite Volume Method (FVM)

面を通過するフラックスの保存に着目

隣接要素との拡散

$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

体積フラックス



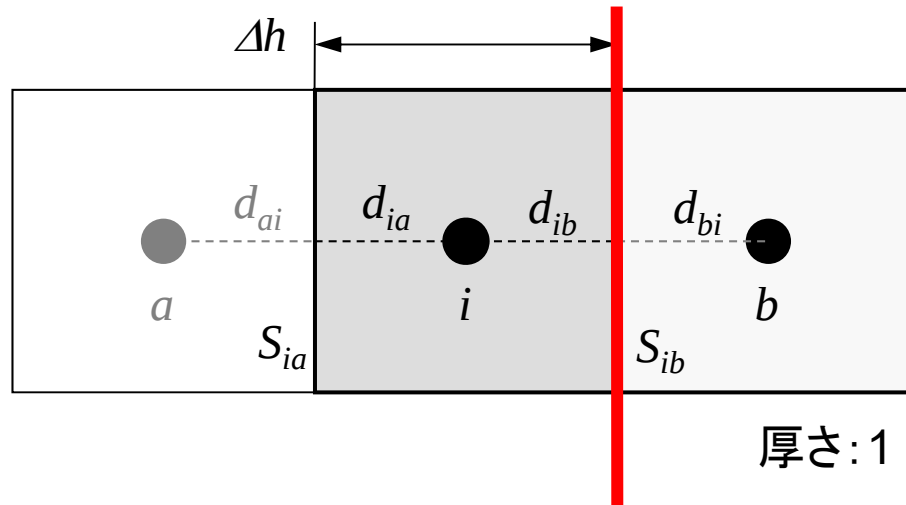
V_i : 要素体積

S : 表面面積

d_{ij} : 要素中心から表面までの距離

Q : 体積フラックス

一次元差分法との比較(1/3)



一辺の長さ Δh の正方形メッシュ

接触面積: $S_{ik} = \Delta h$

要素体積: $V_i = \Delta h^2$

接触面までの距離: $d_{ij} = \Delta h/2$

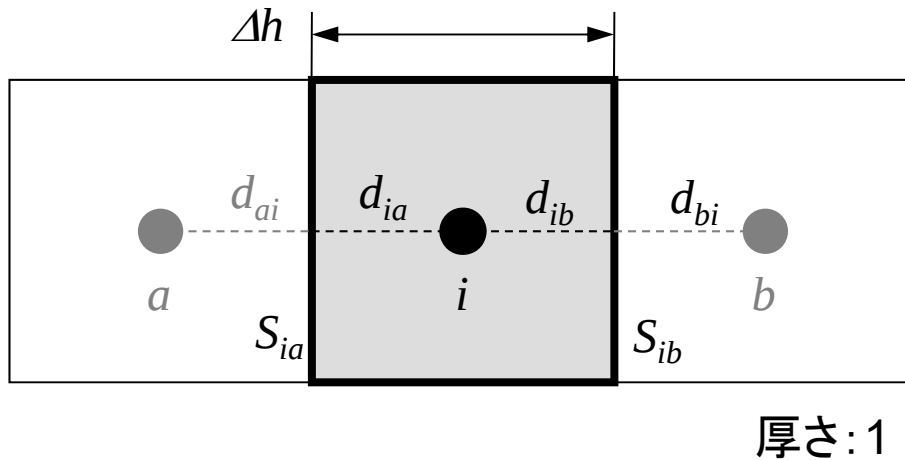
この面を通過するフラックス: $Q_{S_{ib}}$

$$Q_{S_{ib}} = -\frac{\phi_b - \phi_i}{d_{ib} + d_{bi}} \cdot S_{ib}$$

フーリエの法則

面を通過するフラックス
 = - (ポテンシャル勾配)

一次元差分法との比較(2/3)



一辺の長さ Δh の正方形メッシュ

接触面積: $S_{ik} = \Delta h$

要素体積: $V_i = \Delta h^2$

接触面までの距離: $d_{ij} = \Delta h/2$

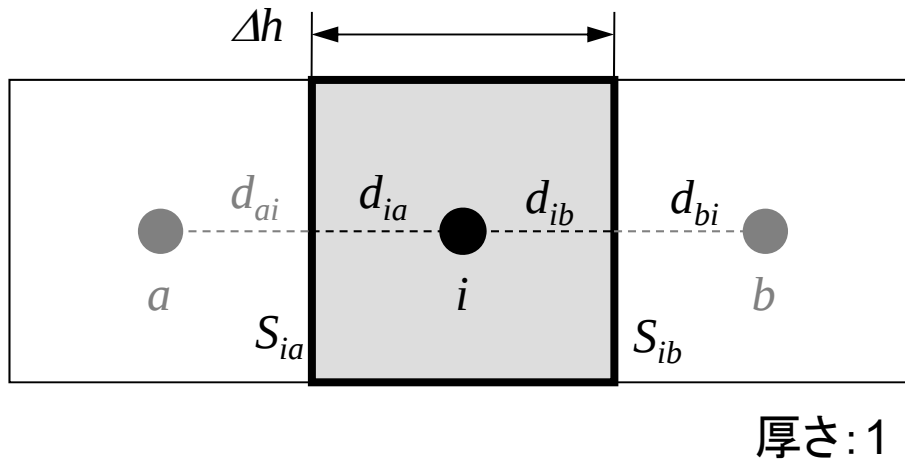
$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

両辺を V_i で割る:

$$\frac{1}{V_i} \sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + \dot{Q}_i = 0$$

この部分に注目すると

一次元差分法との比較(3/3)



一辺の長さ Δh の正方形メッシュ

接触面積: $S_{ik} = \Delta h$

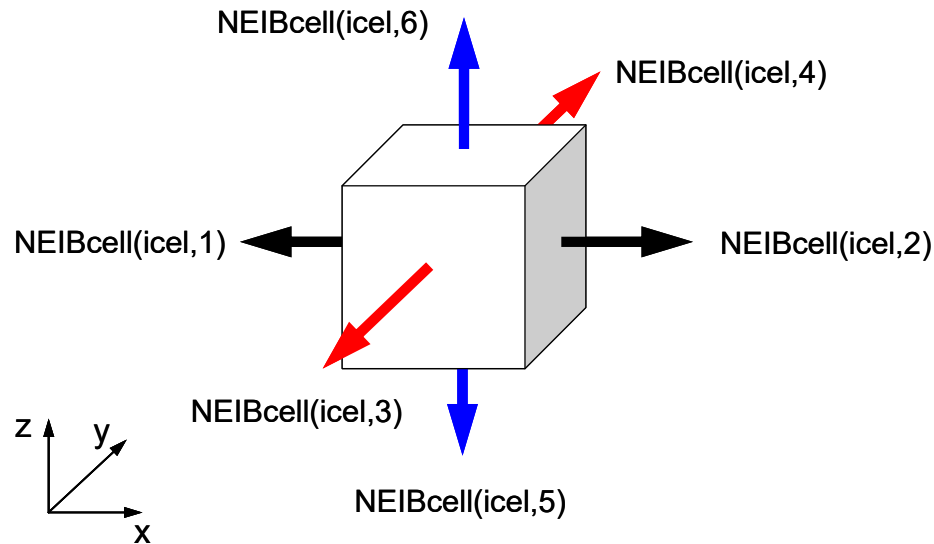
要素体積: $V_i = \Delta h^2$

接触面までの距離: $d_{ij} = \Delta h/2$

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{V_i} \sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) &= \frac{1}{(\Delta h)^2} \sum_{k=a,b} \frac{\Delta h}{\frac{\Delta h}{2} + \frac{\Delta h}{2}} (\phi_k - \phi_i) \\
 &= \frac{1}{(\Delta h)^2} \sum_{k=a,b} \frac{\Delta h}{\frac{\Delta h}{2} + \frac{\Delta h}{2}} (\phi_k - \phi_i) = \frac{1}{(\Delta h)^2} \sum_{k=a,b} \frac{\Delta h}{\Delta h} (\phi_k - \phi_i) = \frac{1}{(\Delta h)^2} \sum_{k=a,b} (\phi_k - \phi_i) \\
 &= \frac{1}{(\Delta h)^2} (\phi_a - \phi_i) + \frac{1}{(\Delta h)^2} (\phi_b - \phi_i) = \frac{\phi_a - 2\phi_i + \phi_b}{(\Delta h)^2}
 \end{aligned}$$

要素*i*について成立
連立一次方程式

三次元では・・・



$$\begin{aligned}
 & \frac{\phi_{neib(icel,1)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z + \frac{\phi_{neib(icel,2)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z + \\
 & \frac{\phi_{neib(icel,3)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x + \frac{\phi_{neib(icel,4)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x + \\
 & \frac{\phi_{neib(icel,5)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y + \frac{\phi_{neib(icel,6)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y + f_{icel} \Delta x \Delta y \Delta z = 0
 \end{aligned}$$

整理すると: 連立一次方程式

$$\begin{aligned} & \frac{\phi_{neib(icel,1)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z + \frac{\phi_{neib(icel,2)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z + \\ & \frac{\phi_{neib(icel,3)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x + \frac{\phi_{neib(icel,4)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x + \\ & \frac{\phi_{neib(icel,5)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y + \frac{\phi_{neib(icel,6)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y + f_{icel} \Delta x \Delta y \Delta z = 0 \end{aligned}$$

$$\sum_k \frac{S_{icel-k}}{d_{icel-k}} (\phi_k - \phi_{icel}) = -f_{icel} V_i$$

$$-\left[\sum_k \frac{S_{icel-k}}{d_{icel-k}} \right] \phi_{icel} + \left[\sum_k \frac{S_{icel-k}}{d_{icel-k}} \phi_k \right] = -f_{icel} V_i \quad (icel = 1, N)$$

対角項

非対角項



$$[A]\{\phi\} = \{f\}$$

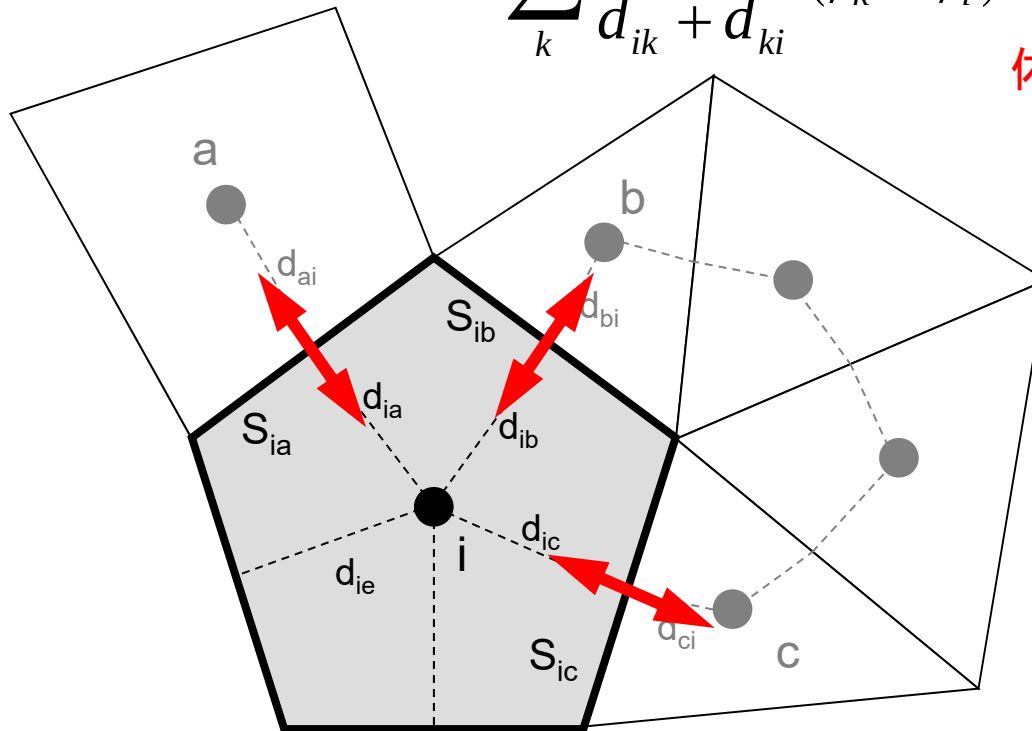
FVMの係数行列も疎行列

面を通過するフラックスの保存に着目
周囲の要素とのみ関係がある

隣接要素との拡散

$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

体積フラックス



V_i : 要素体積

S : 表面面積

d_{ij} : 要素中心から表面までの距離

Q : 体積フラックス

疎行列: 0が多い

- $A(i,j)$ のように正方行列の全成分を記憶することは疎行列では非効率的
 - 「密」行列向け

$$\begin{bmatrix}
 D & X & & & X & X & & & & & & & & & & & & \\
 X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & & & & \\
 & & X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & & \\
 & & & X & D & & & X & X & & & & & & & & & \\
 X & X & & & D & X & & & X & X & & & & & & & & \\
 X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & & & & \\
 & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & & \\
 & & & X & X & & & X & D & & & X & X & & & & & \\
 & & & & X & X & & & D & X & & & X & X & & & & \\
 & & & & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & \\
 & & & & & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & \\
 & & & & & & & X & X & & & D & X & & & & & \\
 & & & & & & & & X & X & X & & X & D & X & & & \\
 & & & & & & & & & X & X & & & X & D & X & & \\
 & & & & & & & & & & X & X & & & & X & D & \\
 & & & & & & & & & & & X & X & & & & & X & D
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 \Phi_1 \\
 \Phi_2 \\
 \Phi_3 \\
 \Phi_4 \\
 \Phi_5 \\
 \Phi_6 \\
 \Phi_7 \\
 \Phi_8 \\
 \Phi_9 \\
 \Phi_{10} \\
 \Phi_{11} \\
 \Phi_{12} \\
 \Phi_{13} \\
 \Phi_{14} \\
 \Phi_{15} \\
 \Phi_{16}
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 F_1 \\
 F_2 \\
 F_3 \\
 F_4 \\
 F_5 \\
 F_6 \\
 F_7 \\
 F_8 \\
 F_9 \\
 F_{10} \\
 F_{11} \\
 F_{12} \\
 F_{13} \\
 F_{14} \\
 F_{15} \\
 F_{16}
 \end{bmatrix}$$

- 有限体積法: 非零非対角成分の数は高々「数百」規模
 - 例えば未知数が 10^8 個あるとすると記憶容量(ワード数)は
 - 正方行列: $O(10^{16})$
 - 非零非対角成分数: $O(10^{10})$
- 非零成分のみ記憶するのが効率的

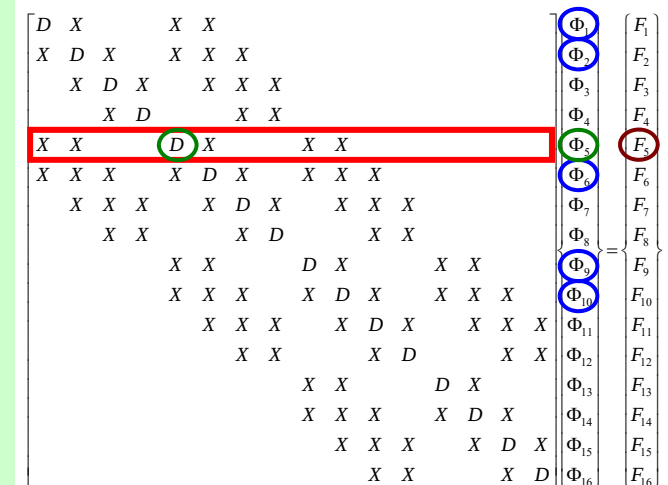
行列ベクトル積への適用

(非零)非対角成分のみを格納, 疎行列向け方法
Compressed Row Storage (CRS)

Diag (i) 対角成分(実数, $i=1, N$)
Index(i) 非対角成分に関する一次元配列(通し番号)
 (整数, $i=0, N$)
Item(k) 非対角成分の要素(列)番号
 (整数, $k=1, \text{index}(N)$)
AMat(k) 非対角成分
 (実数, $k=1, \text{index}(N)$)

$$\{Y\} = [A] \{X\}$$

```
do i= 1, N
  Y(i)= Diag(i)*X(i)
  do k= Index(i-1)+1, Index(i)
    Y(i)= Y(i) + Amat(k)*X(Item(k))
  enddo
enddo
```



行列ベクトル積への適用

(非零)非対角成分のみを格納, 疎行列向け方法
Compressed Row Storage (CRS)

```
{Q}=[A] {P}
```

```
for (i=0; i<N; i++) {  
    W[Q][i] = Diag[i] * W[P][i];  
    for (k=Index[i]; k<Index[i+1]; k++) {  
        W[Q][i] += AMat[k]*W[P][Item[k]];  
    }  
}
```

行列ベクトル積：密行列⇒とても簡単

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,N-1} & a_{1,N} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2,N-1} & a_{2,N} \\ \cdots & & \cdots & & \cdots \\ a_{N-1,1} & a_{N-1,2} & & a_{N-1,N-1} & a_{N-1,N} \\ a_{N,1} & a_{N,2} & \cdots & a_{N,N-1} & a_{N,N} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{Bmatrix}$$

$$\{Y\} = [A] \{X\}$$

```
do j= 1, N
  Y(j)= 0. d0
  do i= 1, N
    Y(j)= Y(j) + A(i, j)*X(i)
  enddo
enddo
```

Compressed Row Storage (CRS)

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.1	2.4	0	0	3.2	0	0	0
2	4.3	3.6	0	2.5	0	3.7	0	9.1
3	0	0	5.7	0	1.5	0	3.1	0
4	0	4.1	0	9.8	2.5	2.7	0	0
5	3.1	9.5	10.4	0	11.5	0	4.3	0
6	0	0	6.5	0	0	12.4	9.5	0
7	0	6.4	2.5	0	0	1.4	23.1	13.1
8	0	9.5	1.3	9.6	0	3.1	0	51.3

Compressed Row Storage (CRS)

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1.1 ①	2.4 ②			3.2 ⑤			
2	4.3 ①	3.6 ②		2.5 ④		3.7 ⑥		9.1 ⑧
3			5.7 ③		1.5 ⑤		3.1 ⑦	
4		4.1 ②		9.8 ④	2.5 ⑤	2.7 ⑥		
5	3.1 ①	9.5 ②	10.4 ③		11.5 ⑤		4.3 ⑦	
6			6.5 ③			12.4 ⑥	9.5 ⑦	
7		6.4 ②	2.5 ③			1.4 ⑥	23.1 ⑦	13.1 ⑧
8		9.5 ②	1.3 ③	9.6 ④		3.1 ⑥		51.3 ⑧

NODE_tot= 8

対角成分

$D(1) = 1.1$

$D(2) = 3.6$

$D(3) = 5.7$

$D(4) = 9.8$

$D(5) = 11.5$

$D(6) = 12.4$

$D(7) = 23.1$

$D(8) = 51.3$

Compressed Row Storage (CRS)

	①	②	③	④	⑤	⑥	⑦	⑧
①	1.1 ①		2.4 ②			3.2 ⑤		
②	3.6 ②	4.3 ①			2.5 ④		3.7 ⑥	9.1 ⑧
③	5.7 ③					1.5 ⑤		3.1 ⑦
④	9.8 ④		4.1 ②			2.5 ⑤	2.7 ⑥	
⑤	11.5 ⑤	3.1 ①	9.5 ②	10.4 ③				4.3 ⑦
⑥	12.4 ⑥			6.5 ③				9.5 ⑦
⑦	23.1 ⑦		6.4 ②	2.5 ③			1.4 ⑥	13.1 ⑧
⑧	51.3 ⑧		9.5 ②	1.3 ③	9.6 ④		3.1 ⑥	

Compressed Row Storage (CRS)

						非対角 成分数	
①	1.1 ①	2.4 ②	3.2 ⑤			2	$\text{index}(0) = 0$
②	3.6 ②	4.3 ①	2.5 ④	3.7 ⑥	9.1 ⑧	4	$\text{index}(1) = 2$
③	5.7 ③	1.5 ⑤	3.1 ⑦			2	$\text{index}(2) = 6$
④	9.8 ④	4.1 ②	2.5 ⑤	2.7 ⑥		3	$\text{index}(3) = 8$
⑤	11.5 ⑤	3.1 ①	9.5 ②	10.4 ③	4.3 ⑦	4	$\text{index}(4) = 11$
⑥	12.4 ⑥	6.5 ③	9.5 ⑦			2	$\text{index}(5) = 15$
⑦	23.1 ⑦	6.4 ②	2.5 ③	1.4 ⑥	13.1 ⑧	4	$\text{index}(6) = 17$
⑧	51.3 ⑧	9.5 ②	1.3 ③	9.6 ④	3.1 ⑥	4	$\text{index}(7) = 21$
							$\text{index}(8) = 25$

NPLU= 25
(=index(N))

$\text{index}(i-1)+1 \sim \text{index}(i)$ 番目が i 行目の非対角成分

Compressed Row Storage (CRS)

	非対角 成分数						
1	1.1 ①	2.4 ②,1	3.2 ⑤,2			2	index(0)= 0
2	3.6 ②	4.3 ①,3	2.5 ④,4	3.7 ⑥,5	9.1 ⑧,6	4	index(1)= 2
3	5.7 ③	1.5 ⑤,7	3.1 ⑦,8			2	<u>index(2)= 6</u>
4	9.8 ④	4.1 ②,9	2.5 ⑤,10	2.7 ⑥,11		3	<u>index(3)= 8</u>
5	11.5 ⑤	3.1 ①,12	9.5 ②,13	10.4 ③,14	4.3 ⑦,15	4	index(4)= 11
6	12.4 ⑥	6.5 ③,16	9.5 ⑦,17			2	index(5)= 15
7	23.1 ⑦	6.4 ②,18	2.5 ③,19	1.4 ⑥,20	13.1 ⑧,21	4	index(6)= 17
8	51.3 ⑧	9.5 ②,22	1.3 ③,23	9.6 ④,24	3.1 ⑥,25	4	index(7)= 21
							index(8)= 25

NPLU= 25
(=index(N))

$\text{index}(i-1)+1 \sim \text{index}(i)$ 番目が i 行目の非対角成分

Compressed Row Storage (CRS)

1	1.1 ①	2.4 ②,1	3.2 ⑤,2		
2	3.6 ②	4.3 ①,3	2.5 ④,4	3.7 ⑥,5	9.1 ⑧,6
3	5.7 ③	1.5 ⑤,7	3.1 ⑦,8		
4	9.8 ④	4.1 ②,9	2.5 ⑤,10	2.7 ⑥,11	
5	11.5 ⑤	3.1 ①,12	9.5 ②,13	10.4 ③,14	4.3 ⑦,15
6	12.4 ⑥	6.5 ③,16	9.5 ⑦,17		
7	23.1 ⑦	6.4 ②,18	2.5 ③,19	1.4 ⑥,20	13.1 ⑧,21
8	51.3 ⑧	9.5 ②,22	1.3 ③,23	9.6 ④,24	3.1 ⑥,25

例:

item(7)= 5, AMAT(7)= 1.5

item(19)= 3, AMAT(19)= 2.5

Compressed Row Storage (CRS)

1	1.1 ①	2.4 ②,1	3.2 ⑤,2		
2	3.6 ②	4.3 ①,3	2.5 ④,4	3.7 ⑥,5	9.1 ⑧,6
3	5.7 ③	1.5 ⑤,7	3.1 ⑦,8		
4	9.8 ④	4.1 ②,9	2.5 ⑤,10	2.7 ⑥,11	
5	11.5 ⑤	3.1 ①,12	9.5 ②,13	10.4 ③,14	4.3 ⑦,15
6	12.4 ⑥	6.5 ③,16	9.5 ⑦,17		
7	23.1 ⑦	6.4 ②,18	2.5 ③,19	1.4 ⑥,20	13.1 ⑧,21
8	51.3 ⑧	9.5 ②,22	1.3 ③,23	9.6 ④,24	3.1 ⑥,25

D (i) 対角成分(実数, $i=1, N$)
index(i) 非対角成分に関する一次元配列
 (通し番号)(整数, $i=0, N$)
item(k) 非対角成分の要素(列)番号
 (整数, $k=1, \text{index}(N)$)
AMAT(k) 非対角成分
 (実数, $k=1, \text{index}(N)$)

$$\{Y\} = [A] \{X\}$$

```

do i= 1, N
  Y(i)= D(i)*X(i)
  do k= index(i-1)+1, index(i)
    Y(i)= Y(i) + AMAT(k)*X(item(k))
  enddo
enddo
  
```

疎行列：非零成分のみ記憶
⇒メモリへの負担大
(memory-bound)：間接参照
(差分, FEM, FVM)

$$\{Y\} = [A] \{X\}$$

```
do i= 1, N
  Y(i)= D(i)*X(i)
  do k= index(i-1)+1, index(i)
    kk= item(k)
    Y(i)= Y(i) + AMAT(k)*X(kk)
  enddo
enddo
```

行列ベクトル積：密行列⇒とても簡単 メモリへの負担も小さい

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,N-1} & a_{1,N} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2,N-1} & a_{2,N} \\ \cdots & & \cdots & & \cdots \\ a_{N-1,1} & a_{N-1,2} & & a_{N-1,N-1} & a_{N-1,N} \\ a_{N,1} & a_{N,2} & \cdots & a_{N,N-1} & a_{N,N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{bmatrix}$$

$$\{Y\} = [A] \{X\}$$

```
do j= 1, N
  Y(j)= 0. d0
  do i= 1, N
    Y(j)= Y(j) + A(i, j)*X(i)
  enddo
enddo
```

- 背景
 - 有限体積法
 - 前処理付反復法
- ICCG法によるポアソン方程式法ソルバーについて
 - 実行方法
 - データ構造
 - プログラムの説明
 - 初期化
 - 係数マトリクス生成
 - ICCG法
- OpenMP

科学技術計算における 大規模線形方程式の解法

- 多くの科学技術計算は、最終的に大規模線形方程式 $Ax=b$ を解くことに帰着される。
 - important, expensive
- アプリケーションに応じて様々な手法が提案されている
 - 疎行列 (sparse), 密行列 (dense)
 - 直接法 (direct), 反復法 (iterative)
- 密行列 (dense)
 - グローバルな相互作用: BEM, スペクトル法, MO, MD (気液)
- 疎行列 (sparse)
 - ローカルな相互作用: FEM, FDM, MD (固), 高速多重極展開付 BEM

直接法 (Direct Method)

- Gaussの消去法, 完全LU分解
 - 逆行列 A^{-1} を直接求める
- 利点
 - 安定, 幅広いアプリケーションに適用可能
 - Partial Pivoting
 - 疎行列, 密行列いずれにも適用可能
- 欠点
 - 反復法よりもメモリ, 計算時間を必要とする
 - 密行列の場合, $O(N^3)$ の計算量
 - 大規模な計算向けではない
 - $O(N^2)$ の記憶容量, $O(N^3)$ の計算量

反復法とは . . .

Linear Equations
連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

A **x** **b**

Initial Solution
初期解

$$\mathbf{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \\ \vdots \\ x_n^{(0)} \end{pmatrix}$$

適当な初期解 $\mathbf{x}^{(0)}$ から始めて, 繰り返し計算によって真の解に収束(converge)させていく

$$\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \dots$$

反復法 (Iterative Method)

- 定常 (stationary) 法

- 反復計算中, 解ベクトル以外の変数は変化せず
- SOR, Gauss-Seidel, Jacobiなど
- 概して遅い

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Rightarrow$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{M}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{N}\mathbf{b}$$

- 非定常 (nonstationary) 法

- 拘束, 最適化条件が加わる
- Krylov部分空間 (subspace) への写像を基底として使用するため, Krylov部分空間法とも呼ばれる
- CG (Conjugate Gradient: 共役勾配法)
- BiCGSTAB (Bi-Conjugate Gradient Stabilized)
- GMRES (Generalized Minimal Residual)

反復法 (Iterative Method) (続き)

- 利点
 - 直接法と比較して, メモリ使用量, 計算量が少ない。
 - 並列計算には適している。
- 欠点
 - 収束性が, アプリケーション, 境界条件の影響を受けやすい。
 - 前処理 (preconditioning) が重要。

非定常反復法: クリロフ部分空間法 (1/2)

Krylov Subspace Method

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{b} + (\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{x}$$

以下の反復式を導入し $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k$ を求める:

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_k &= \mathbf{b} + (\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{x}_{k-1} \\ &= (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}_{k-1}) + \mathbf{x}_{k-1}\end{aligned}$$

$$= \mathbf{r}_{k-1} + \mathbf{x}_{k-1} \quad \text{where } \mathbf{r}_k = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}_k : \text{残差ベクトル (residual)}$$



$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + \sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{r}_i$$

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_k &= \mathbf{b} - \mathbf{Ax}_k = \mathbf{b} - \mathbf{A}(\mathbf{r}_{k-1} + \mathbf{x}_{k-1}) \\ &= (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}_{k-1}) - \mathbf{Ar}_{k-1} = \mathbf{r}_{k-1} - \mathbf{Ar}_{k-1} = (\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{r}_{k-1}\end{aligned}$$

非定常反復法: クリロフ部分空間法 (2/2)

Krylov Subspace Method

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + \sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{r}_i = \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}_0 + \sum_{i=0}^{k-2} (\mathbf{I} - \mathbf{A}) \mathbf{r}_i = \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}_0 + \sum_{i=1}^{k-1} (\mathbf{I} - \mathbf{A})^i \mathbf{r}_0$$

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{r}_0 + \sum_{i=1}^{k-1} (\mathbf{I} - \mathbf{A})^i \mathbf{r}_0 = \left[\mathbf{I} + \sum_{i=1}^{k-1} (\mathbf{I} - \mathbf{A})^i \right] \mathbf{r}_0$$



$\mathbf{z}_k$ は k 次のクリロフ部分空間 (Krylov Subspace) に属するベクトル, 問題はクリロフ部分空間からどのようにして解の近似ベクトル $\mathbf{x}_k$ を求めるかにある:

$$[\mathbf{r}_0, \mathbf{A}\mathbf{r}_0, \mathbf{A}^2\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{A}^{k-1}\mathbf{r}_0]$$

代表的な非定常反復法：共役勾配法

- Conjugate Gradient法, 略して「CG」法
 - 最も代表的な「非定常」反復法
- 対称正定値行列 (Symmetric Positive Definite: SPD)
 - 任意のベクトル $\{x\}$ に対して $\{x\}^T[A]\{x\} > 0$
 - 全対角成分 > 0 , 全固有値 > 0 , 全部分行列式 (主小行列式・首座行列式) > 0 と同値
- アルゴリズム
 - 最急降下法 (Steepest Descent Method) の変種
 - $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$
 - $x^{(i)}$: 反復解, $p^{(i)}$: 探索方向, α_i : 定数
 - 厳密解を y とするとき $\{x-y\}^T[A]\{x-y\}$ を最小とするような $\{x\}$ を求める。
 - 詳細は参考文献参照
 - 例えば: 森正武「数値解析 (第2版)」(共立出版)

$$\det \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & \cdots & a_{3n} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & \cdots & a_{4n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & a_{n4} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

共役勾配法 (CG法) のアルゴリズム

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
     $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} \cdot r^{(i-1)}$ 
    if  $i = 1$ 
         $p^{(1)} = r^{(0)}$ 
    else
         $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
         $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
    endif
     $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
     $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} \cdot q^{(i)}$ 
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
     $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
    check convergence  $|r|$ 
end

```

- 行列ベクトル積
- ベクトル内積
- ベクトル定数倍の加減 (DAXPY)

$x^{(i)}$: Vector

α_i : Scalar

共役勾配法 (CG法) のアルゴリズム

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
     $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} \cdot r^{(i-1)}$ 
    if  $i = 1$ 
         $p^{(1)} = r^{(0)}$ 
    else
         $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
         $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
    endif
     $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
     $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} \cdot q^{(i)}$ 
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
     $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
    check convergence  $|r|$ 
end

```

- 行列ベクトル積
- ベクトル内積
- ベクトル定数倍の加減 (DAXPY)

$x^{(i)}$: Vector

α_i : Scalar

共役勾配法 (CG法) のアルゴリズム

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
     $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} \cdot r^{(i-1)}$ 
    if  $i = 1$ 
         $p^{(1)} = r^{(0)}$ 
    else
         $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
         $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
    endif
     $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
     $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} \cdot q^{(i)}$ 
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
     $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
    check convergence  $|r|$ 
end

```

- 行列ベクトル積
- ベクトル内積
- ベクトル定数倍の加減 (DAXPY)

$x^{(i)}$: Vector

α_i : Scalar

共役勾配法 (CG法) のアルゴリズム

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
     $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} \cdot r^{(i-1)}$ 
    if  $i = 1$ 
         $p^{(1)} = r^{(0)}$ 
    else
         $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
         $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
    endif
     $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
     $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} \cdot q^{(i)}$ 
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
     $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
    check convergence  $|r|$ 
end

```

- 行列ベクトル積
- ベクトル内積
- ベクトル定数倍の加減 (DAXPY)
 - Double
 - $\{y\} = a\{x\} + \{y\}$

$x^{(i)}$: Vector

α_i : Scalar

共役勾配法 (CG法) のアルゴリズム

```
Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
     $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} r^{(i-1)}$ 
    if  $i = 1$ 
         $p^{(1)} = r^{(0)}$ 
    else
         $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
         $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
    endif
     $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
     $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
     $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
    check convergence  $|r|$ 
end
```

$x^{(i)}$: Vector
 α_i : Scalar

CG法アルゴリズムの導出(1/5)

y を厳密解 ($Ay=b$) とするとき, 下式を最小にする x を求める:

$$(x-y)^T [A](x-y)$$

$$\begin{aligned}(x-y)^T [A](x-y) &= (x, Ax) - (y, Ax) - (x, Ay) + (y, Ay) \\ &= (x, Ax) - 2(x, Ay) + (y, Ay) = (x, Ax) - 2(x, b) + \underline{(y, b)} \quad \text{定数}\end{aligned}$$

従って, 下記 $f(x)$ を最小にする x を求めればよい:

$$f(x) = \frac{1}{2}(x, Ax) - (x, b)$$

$$f(x+h) = f(x) + (h, Ax-b) + \frac{1}{2}(h, Ah) \quad \text{任意のベクトル } h$$

$$f(x) = \frac{1}{2}(x, Ax) - (x, b)$$

$$f(x+h) = f(x) + (h, Ax-b) + \frac{1}{2}(h, Ah)$$

•任意のベクトル h

$$\begin{aligned} f(x+h) &= \frac{1}{2}(x+h, A(x+h)) - (x+h, b) \\ &= \frac{1}{2}(x+h, Ax) + \frac{1}{2}(x+h, Ah) - (x, b) - (h, b) \\ &= \frac{1}{2}(x, Ax) + \frac{1}{2}(h, Ax) + \frac{1}{2}(x, Ah) + \frac{1}{2}(h, Ah) - (x, b) - (h, b) \\ &= \frac{1}{2}(x, Ax) - (x, b) + (h, Ax) - (h, b) + \frac{1}{2}(h, Ah) \\ &= f(x) + (h, Ax-b) + \frac{1}{2}(h, Ah) \end{aligned}$$

CG法アルゴリズムの導出(2/5)

CG法は任意の $x^{(0)}$ から始めて, $f(x)$ の最小値を逐次探索する。
 今, k 番目の近似値 $x^{(k)}$ と探索方向 $p^{(k)}$ が決まったとすると:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$$

$f(x^{(k+1)})$ を最小にするためには:

$$f(x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}) = \frac{1}{2} \alpha_k^2 (p^{(k)}, Ap^{(k)}) - \alpha_k (p^{(k)}, b - Ax^{(k)}) + f(x^{(k)})$$

$$\frac{\partial f(x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)})}{\partial \alpha_k} = 0 \Rightarrow \alpha_k = \frac{(p^{(k)}, b - Ax^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} = \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} \quad (1)$$

$r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ は第 k 近似に対する残差

CG法アルゴリズムの導出(3/5)

残差 $r^{(k)}$ も以下の式によって計算できる:

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)} \quad \text{(2)} \quad r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)}, r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$$
$$r^{(k+1)} - r^{(k)} = Ax^{(k+1)} - Ax^{(k)} = \alpha_k A p^{(k)}$$

探索方向を以下の漸化式によって求める:

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}, p^{(0)} = p^{(0)} \quad \text{(3)}$$

本当のところは下記のように $(k+1)$ 回目に厳密解 y が求まれば良いのであるが, 解がわかっていない場合は困難...

$$y = x^{(k+1)} + \alpha_{k+1} p^{(k+1)}$$

CG法アルゴリズムの導出(4/5)

ところで, 下式のような都合の良い直交関係がある:

$$(Ap^{(k)}, y - x^{(k+1)}) = 0$$

$$\begin{aligned} (Ap^{(k)}, y - x^{(k+1)}) &= (p^{(k)}, Ay - Ax^{(k+1)}) = (p^{(k)}, b - Ax^{(k+1)}) \\ &= (p^{(k)}, b - A[x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}]) = (p^{(k)}, b - Ax^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}) \\ &= (p^{(k)}, r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}) = (p^{(k)}, r^{(k)}) - \alpha_k (p^{(k)}, Ap^{(k)}) = 0 \end{aligned}$$

$$\therefore \alpha_k = \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

従って以下が成立する:

$$(Ap^{(k)}, y - x^{(k+1)}) = (Ap^{(k)}, \alpha_{k+1} p^{(k+1)}) = 0 \Rightarrow (p^{(k+1)}, Ap^{(k)}) = 0$$

CG法アルゴリズムの導出(5/5)

$$\begin{aligned} (p^{(k+1)}, Ap^{(k)}) &= (r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}, Ap^{(k)}) = (r^{(k+1)}, Ap^{(k)}) + \beta_k (p^{(k)}, Ap^{(k)}) = 0 \\ \Rightarrow \beta_k &= \frac{-(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} \quad (4) \end{aligned}$$

$(p^{(k+1)}, Ap^{(k)}) = 0$ $p^{(k)}$ と $p^{(k+1)}$ が行列Aに関して共役 (conjugate)

```

Compute  $p^{(0)} = r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for i= 1, 2, ...
    calc.  $\alpha_{i-1}$ 
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_{i-1}p^{(i-1)}$ 
     $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_{i-1}[A]p^{(i-1)}$ 

    check convergence  $|r|$ 
    (if not converged)
    calc.  $\beta_{i-1}$ 
     $p^{(i)} = r^{(i)} + \beta_{i-1}p^{(i-1)}$ 
end
  
```

$$\alpha_{i-1} = \frac{(p^{(i-1)}, r^{(i-1)})}{(p^{(i-1)}, Ap^{(i-1)})}$$

$$\beta_{i-1} = \frac{-(r^{(i)}, Ap^{(i-1)})}{(p^{(i-1)}, Ap^{(i-1)})}$$

CG法アルゴリズム

任意の (i,j) に対して以下の共役関係が得られる:

$$(p^{(i)}, Ap^{(j)}) = 0 \quad (i \neq j)$$

探索方向 $p^{(k)}$, 残差ベクトル $r^{(k)}$ についても以下の関係が成立する:

$$(r^{(i)}, r^{(j)}) = 0 \quad (i \neq j), \quad (p^{(k)}, r^{(k)}) = (r^{(k)}, r^{(k)})$$

N次元空間で互いに直交で一次独立な残差ベクトル $r^{(k)}$ はN個しか存在しない, 従って共役勾配法は未知数がN個のときにN回以内に収束する $\Rightarrow$ 実際は丸め誤差の影響がある(条件数が大きい場合)

Top 10 Algorithms in the 20th Century (SIAM)

<http://www.siam.org/news/news.php?id=637>

モンテカルロ法, シンプレックス法, クリロフ部分空間法, 行列分解法, 最適化Fortranコンパイラ, QR法, クイックソート, FFT, 整数関係アルゴリズム, FMM(高速多重極法)

Proof (1/3)

Mathematical Induction

数学的帰納法

$$\begin{aligned} (r^{(i)}, r^{(j)}) &= 0 \quad (i \neq j) & \text{直交性} \\ (p^{(i)}, Ap^{(j)}) &= 0 \quad (i \neq j) & \text{共役性} \end{aligned}$$

$$(1) \quad \alpha_k = \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$(2) \quad r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}$$

$$(3) \quad p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}, \quad r^{(0)} = p^{(0)}$$

$$(4) \quad \beta_k = \frac{-(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

Proof (2/3)

Mathematical Induction

数学的帰納法

$$\begin{aligned} (r^{(i)}, r^{(j)}) &= 0 \quad (i \neq j) \\ (p^{(i)}, Ap^{(j)}) &= 0 \quad (i \neq j) \end{aligned} \quad (*)$$

$(*)$ is satisfied for $i \leq k, j \leq k$ where $i \neq j$

$$\begin{aligned} \text{if } i < k \quad (r^{(k+1)}, r^{(i)}) &= (r^{(i)}, r^{(k+1)}) \stackrel{(2)}{=} (r^{(i)}, r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}) \\ &\stackrel{(*)}{=} -\alpha_k (r^{(i)}, Ap^{(k)}) \stackrel{(3)}{=} -\alpha_k (p^{(i)} - \beta_{i-1} p^{(i-1)}, Ap^{(k)}) \\ &= -\alpha_k (p^{(i)}, Ap^{(k)}) + \alpha_k \beta_{i-1} (p^{(i-1)}, Ap^{(k)}) \stackrel{(*)}{=} 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{if } i = k \quad (r^{(k+1)}, r^{(k)}) &\stackrel{(2)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - (r^{(k)}, \alpha_k Ap^{(k)}) \\ &\stackrel{(3)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - (p^{(k)} - \beta_{k-1} p^{(k-1)}, \alpha_k Ap^{(k)}) \\ &\stackrel{(*)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - \alpha_k (p^{(k)}, Ap^{(k)}) \stackrel{(1)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - (p^{(k)}, r^{(k)}) \\ &\stackrel{(3)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - (\beta_{k-1} p^{(k-1)} + r^{(k)}, r^{(k)}) \\ &= -\beta_{k-1} (p^{(k-1)}, r^{(k)}) \stackrel{(2)}{=} -\beta_{k-1} (p^{(k-1)}, r^{(k-1)} - \alpha_{k-1} Ap^{(k-1)}) \\ &= -\beta_{k-1} \{ (p^{(k-1)}, r^{(k-1)}) - \alpha_{k-1} (p^{(k-1)}, Ap^{(k-1)}) \} \stackrel{(1)}{=} 0 \end{aligned}$$

$$(1) \alpha_k = \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$(2) r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}$$

$$(3) p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}$$

$$(4) \beta_k = \frac{-(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

Proof (3/3)

Mathematical Induction

数学的帰納法

$$\begin{aligned} (r^{(i)}, r^{(j)}) &= 0 \quad (i \neq j) \\ (p^{(i)}, Ap^{(j)}) &= 0 \quad (i \neq j) \end{aligned} \quad (*)$$

$(*)$ is satisfied for $i \leq k, j \leq k$ where $i \neq j$

$$\begin{aligned} \text{if } i < k \quad (p^{(k+1)}, Ap^{(i)}) &\stackrel{(3)}{=} (r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}, Ap^{(i)}) \\ &\stackrel{(*)}{=} (r^{(k+1)}, Ap^{(i)}) \end{aligned}$$

$$\stackrel{(2)}{=} \frac{1}{\alpha_k} (r^{(k+1)}, r^{(i)} - r^{(i+1)}) = 0$$

$$\begin{aligned} \text{if } i = k \quad (p^{(k+1)}, Ap^{(k)}) &\stackrel{(3)}{=} (r^{(k+1)}, Ap^{(k)}) + \beta_k (p^{(k)}, Ap^{(k)}) \\ &\stackrel{(4)}{=} 0 \end{aligned}$$

$$(1) \alpha_k = \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$(2) r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}$$

$$(3) p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}$$

$$(4) \beta_k = \frac{-(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$\begin{aligned}
 (r^{(k+1)}, r^{(k)}) &= 0 \\
 (r^{(k+1)}, r^{(k)}) &\stackrel{(2)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - (r^{(k)}, \alpha_k A p^{(k)}) \\
 &\stackrel{(3)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - (p^{(k)} - \beta_{k-1} p^{(k-1)}, \alpha_k A p^{(k)}) \\
 &\stackrel{(*)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - \alpha_k (p^{(k)}, A p^{(k)}) \stackrel{(1)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - (p^{(k)}, r^{(k)}) = 0
 \end{aligned}$$

$$\therefore (r^{(k)}, r^{(k)}) = (p^{(k)}, r^{(k)})$$

$$\begin{aligned}
 (1) \alpha_k &= \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, A p^{(k)})} \\
 (2) r^{(k+1)} &= r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)} \\
 (3) p^{(k+1)} &= r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)} \\
 (4) \beta_k &= \frac{-(r^{(k+1)}, A p^{(k)})}{(p^{(k)}, A p^{(k)})}
 \end{aligned}$$

$$\alpha_k, \beta_k$$

実際は α_k, β_k はもうちょっと簡単な形に変形できる:

$$\alpha_k = \frac{(p^{(k)}, b - Ax^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} = \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$\because (p^{(k)}, r^{(k)}) = (r^{(k)}, r^{(k)})$$

$$\beta_k = \frac{-(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} = \frac{(r^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{(r^{(k)}, r^{(k)})}$$

$$\because (r^{(k+1)}, Ap^{(k)}) = \frac{(r^{(k+1)}, r^{(k)} - r^{(k+1)})}{\alpha_k} = -\frac{(r^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{\alpha_k}$$

共役勾配法 (CG法) のアルゴリズム

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
     $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} \cdot r^{(i-1)}$ 
    if  $i = 1$ 
         $p^{(1)} = r^{(0)}$ 
    else
         $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
         $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
    endif
     $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
     $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} \cdot q^{(i)}$ 
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
     $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
    check convergence  $|r|$ 
end

```

$x^{(i)}$: Vector

α_i : Scalar

$$\beta_{i-1} = \frac{(r^{(i-1)}, r^{(i-1)})}{(r^{(i-2)}, r^{(i-2)})} \quad (= \rho_{i-1})$$

$$\alpha_i = \frac{(r^{(i-1)}, r^{(i-1)})}{(p^{(i)}, Ap^{(i)})} \quad (= \rho_{i-1})$$

前処理 (preconditioning) とは？

- 反復法の収束は係数行列の固有値分布に依存
 - 固有値分布が少なく、かつ1に近いほど収束が早い(単位行列)
 - 条件数(condition number)(対称正定) = 最大最小固有値比
 - 条件数が1に近いほど収束しやすい
- もとの係数行列 $[A]$ に良く似た前処理行列 $[M]$ を適用することによって固有値分布を改善する。
 - 前処理行列 $[M]$ によって元の方程式 $[A]\{x\}=\{b\}$ を $[A']\{x\}=\{b'\}$ へと変換する。ここで $[A']=[M]^{-1}[A]$, $\{b'\}=[M]^{-1}\{b\}$ である。
 - $[A']=[M]^{-1}[A]$ が単位行列に近ければ良いということになる。
 - $[A']=[A][M]^{-1}$ のように右からかけることもある。
- 「前処理」は密行列, 疎行列ともに使用するが, 普通は疎行列を対象にすることが多い。

前処理付共役勾配法

Preconditioned Conjugate Gradient Method (PCG)

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
    solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
     $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
    if  $i=1$ 
         $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
    else
         $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
         $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
    endif
     $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
     $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
     $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
    check convergence  $|r|$ 
end

```

$$[M] = [M_1][M_2]$$

$$[A']x' = b'$$

$$[A'] = [M_1]^{-1}[A][M_2]^{-1}$$

$$x' = [M_2]x, \quad b' = [M_1]^{-1}b$$

$$p' \Rightarrow [M_2]p, \quad r' \Rightarrow [M_1]^{-1}r$$

$$p'^{(i)} = r'^{(i-1)} + \beta'_{i-1} p'^{(i-1)}$$

$$[M_2]p^{(i)} = [M_1]^{-1}r^{(i-1)} + \beta'_{i-1} [M_2]p^{(i-1)}$$

$$p^{(i)} = [M_2]^{-1}[M_1]^{-1}r^{(i-1)} + \beta'_{i-1} p^{(i-1)}$$

$$p^{(i)} = [M]^{-1}r^{(i-1)} + \beta'_{i-1} p^{(i-1)}$$

$$\beta'_{i-1} = \frac{([M]^{-1}r^{(i-1)}, r^{(i-1)})}{([M]^{-1}r^{(i-2)}, r^{(i-2)})}$$

$$\alpha'_{i-1} = \frac{([M]^{-1}r^{(i-1)}, r^{(i-1)})}{(p^{(i-1)}, [A]p^{(i-1)})}$$

前処理付共役勾配法

Preconditioned Conjugate Gradient Method (PCG)

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
    solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
     $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
    if  $i=1$ 
         $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
    else
         $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
         $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
    endif
     $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
     $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
     $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
     $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
    check convergence  $|r|$ 
end

```

実際にやるべき計算は:

$$\{z\} = [M]^{-1} \{r\}$$

「近似逆行列」の計算が必要:

$$[M]^{-1} \approx [A]^{-1}, \quad [M] \approx [A]$$

究極の前処理: 本当の逆行列

$$[M]^{-1} = [A]^{-1}, \quad [M] = [A]$$

対角スケーリング: 簡単=弱い

$$[M]^{-1} = [D]^{-1}, \quad [M] = [D]$$

対角スケーリング, 点ヤコビ前処理

- 前処理行列として, もとの行列の対角成分のみを取り出した行列を前処理行列 $[M]$ とする。
 - 対角スケーリング, 点ヤコビ (point-Jacobi) 前処理

$$[M] = \begin{bmatrix} D_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & D_2 & & 0 & 0 \\ \dots & & \dots & & \dots \\ 0 & 0 & & D_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & D_N \end{bmatrix}$$

- **solve $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$** という場合に逆行列を簡単に求めることができる。
- 簡単な問題では収束する。

ILU(0), IC(0)

- 最もよく使用されている前処理(疎行列用)
 - 不完全LU分解
 - Incomplete LU Factorization
 - 不完全コレスキー分解
 - Incomplete Cholesky Factorization (対称行列)
- 不完全な直接法
 - もとの行列が疎でも, 逆行列は疎とは限らない。
 - fill-in
 - もとの行列と同じ非ゼロパターン(fill-in無し)を持っているのがILU(0), IC(0)



LU分解法：完全LU分解法

- 直接法の一つ
 - 逆行列を直接求める手法
 - 「逆行列」に相当するものを保存しておけるので、右辺が変わったときに計算時間を節約できる
 - 逆行列を求める際にFill-in(もとの行列では0であったところに値が入る)が生じる
- LU factorization



「不」完全LU分解法

- ILU factorization
 - Incomplete LU factorization
- Fill-inの発生を制限して, 前処理に使う手法
 - 不完全な逆行列, 少し弱い直接法
 - Fill-inを許さないとき: ILU(0)

LU分解による連立一次方程式 の解法



Aが $n \times n$ 行列のとき、Aを次式のように表すことを
(あるいは、そのようなLとUそのものを)AのLU分解という。

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}$$

L: Lower triangular part of matrix A

U: Upper triangular part of matrix A



連立一次方程式の行列表現

n元の連立一次方程式の一般形

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2$$

$\vdots$

$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n$$

行列表現



$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

A

x

b



LU分解を用いた $Ax=b$ の解法

1 $A = LU$ となる A のLU分解 L と U を求める.

2 $Ly = b$ の解 y を求める.(簡単!)

3 $Ux = y$ の解 x を求める.(簡単!)

この x が $Ax = b$ の解となる

$$\therefore Ax = LUx = Ly = b$$

$\mathbf{L}\mathbf{y}=\mathbf{b}$ の解法：前進代入



$$\mathbf{L}\mathbf{y} = \mathbf{b} \quad \longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

$$y_1 = b_1$$

$$l_{21}y_1 + y_2 = b_2$$

$$\vdots$$

$$l_{n1}y_1 + l_{n2}y_2 + \cdots + y_n = b_n$$

$$y_1 = b_1$$

$$y_2 = b_2 - l_{21}y_1$$

$$\vdots$$

$$y_n = b_n - l_{n1}y_1 - l_{n2}y_2 = b_n - \sum_{i=1}^{n-1} l_{ni}y_i$$

芋づる式に (one after another) 解が求まる.

Ux=yの解法：後退代入



$$\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{y} \quad \longleftrightarrow \quad \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{array}{l} u_{nn}x_n = y_n \\ u_{n-1,n-1}x_{n-1} + u_{n-1,n}x_n = y_{n-1} \\ \vdots \\ u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n = y_1 \end{array} \quad \longleftrightarrow \quad \begin{array}{l} x_n = y_n / u_{nn} \\ x_{n-1} = (y_{n-1} - u_{n-1,n}x_n) / u_{n-1,n-1} \\ \vdots \\ x_1 = \left(y_1 - \sum_{i=2}^n u_{1i}x_i \right) / u_{11} \end{array}$$

芋づる式に (one after another) 解が求まる.

LU分解の求め方



①

$$\begin{array}{c}
 \text{②} \quad \text{④} \quad \text{③}
 \end{array}
 \begin{pmatrix}
 a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\
 a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\
 a_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn}
 \end{pmatrix}
 =
 \begin{pmatrix}
 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\
 l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\
 l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1
 \end{pmatrix}
 \begin{pmatrix}
 u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\
 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\
 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\
 \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn}
 \end{pmatrix}$$

① $\Rightarrow a_{11} = u_{11}, a_{12} = u_{12}, \dots, a_{1n} = u_{1n} \Rightarrow u_{11}, u_{12}, \dots, u_{1n}$

② $\Rightarrow a_{21} = l_{21}u_{11}, a_{31} = l_{31}u_{11}, \dots, a_{n1} = l_{n1}u_{11} \Rightarrow l_{21}, l_{31}, \dots, l_{n1}$

③ $\Rightarrow a_{22} = l_{21}u_{12} + u_{22}, \dots, a_{2n} = l_{21}u_{1n} + u_{2n} \Rightarrow u_{22}, u_{23}, \dots, u_{2n}$

④ $\Rightarrow a_{32} = l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22}, \dots \Rightarrow l_{32}, l_{42}, \dots, l_{n2}$

数值例



$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 6 & 7 & 10 \\ 2 & 2 & 8 & 7 \\ 0 & -4 & 7 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{pmatrix}$$

第1行 $\Rightarrow 1 = u_{11}, 2 = u_{12}, 3 = u_{13}, 4 = u_{14}$

第1列 $\Rightarrow 2 = l_{21}u_{11} \Rightarrow l_{21} = 2/u_{11} = 2, \quad 2 = l_{31}u_{11} \Rightarrow l_{31} = 2/u_{11} = 2$
 $0 = l_{41}u_{11} \Rightarrow l_{41} = 0/u_{11} = 0$

第2行 $\Rightarrow 6 = l_{21}u_{12} + u_{22} \Rightarrow u_{22} = 2, \quad 7 = l_{21}u_{13} + u_{23} \Rightarrow u_{23} = 1$
 $10 = l_{21}u_{14} + u_{24} \Rightarrow u_{24} = 2$

第2列 $\Rightarrow 2 = l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22} \Rightarrow l_{32} = -1, \quad -4 = l_{41}u_{12} + l_{42}u_{22} \Rightarrow l_{42} = -2$

数値例(続き)



$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 6 & 7 & 10 \\ 2 & 2 & 8 & 7 \\ 0 & -4 & 7 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{pmatrix}$$

第3行 $\Rightarrow 8 = l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + u_{33} \Rightarrow u_{33} = 3,$
 $7 = l_{31}u_{14} + l_{32}u_{24} + u_{34} \Rightarrow u_{34} = 1$

第3列 $\Rightarrow 7 = l_{41}u_{13} + l_{42}u_{23} + l_{43}u_{33} \Rightarrow u_{43} = 3$

第4行(第4列) $\Rightarrow 1 = l_{41}u_{14} + l_{42}u_{24} + l_{43}u_{34} + u_{44} \Rightarrow u_{44} = 2$

1行、1列、2行、2列、・・・の順に求める式を作っていく.

数値例(続き)



結局

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 6 & 7 & 10 \\ 2 & 2 & 8 & 7 \\ 0 & -4 & 7 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 2 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

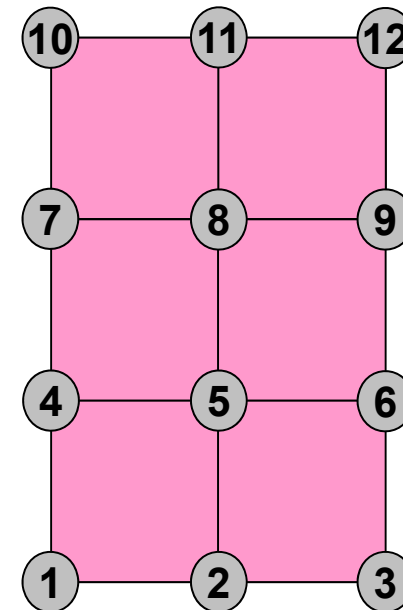
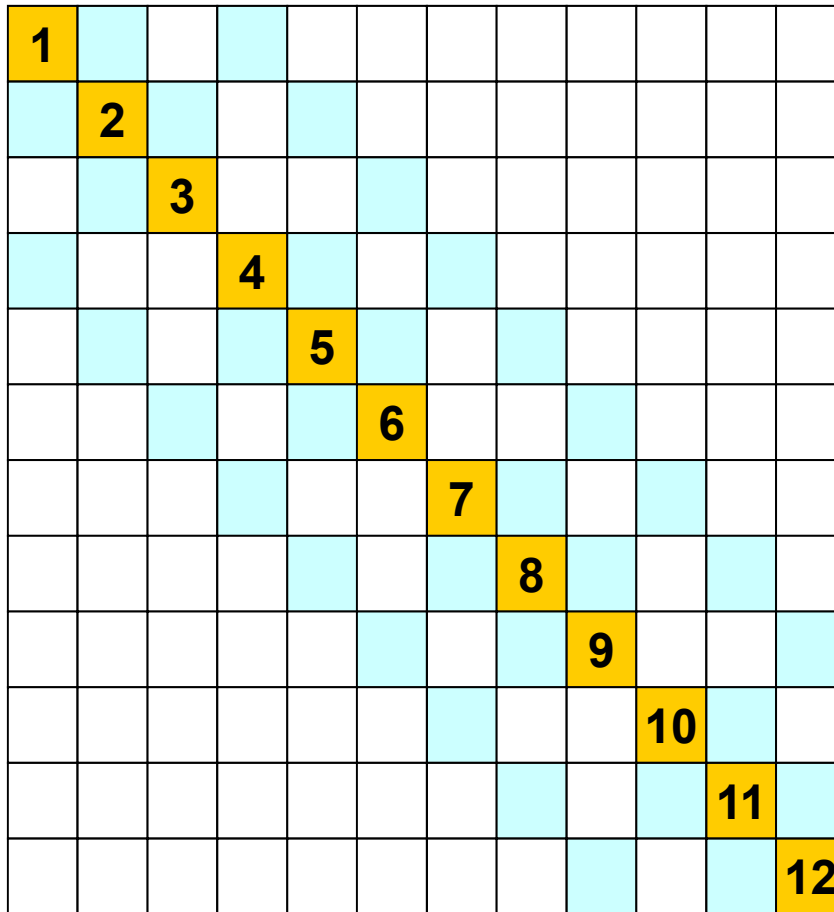


L

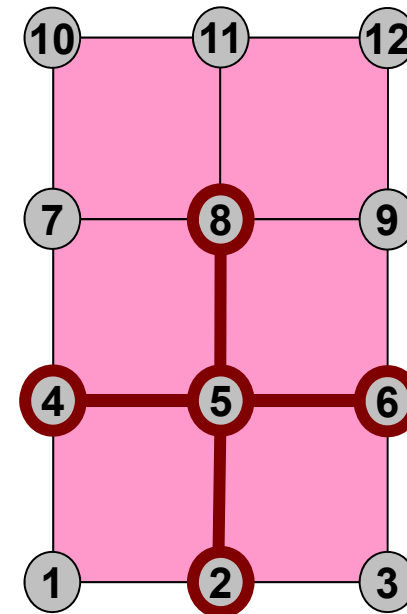
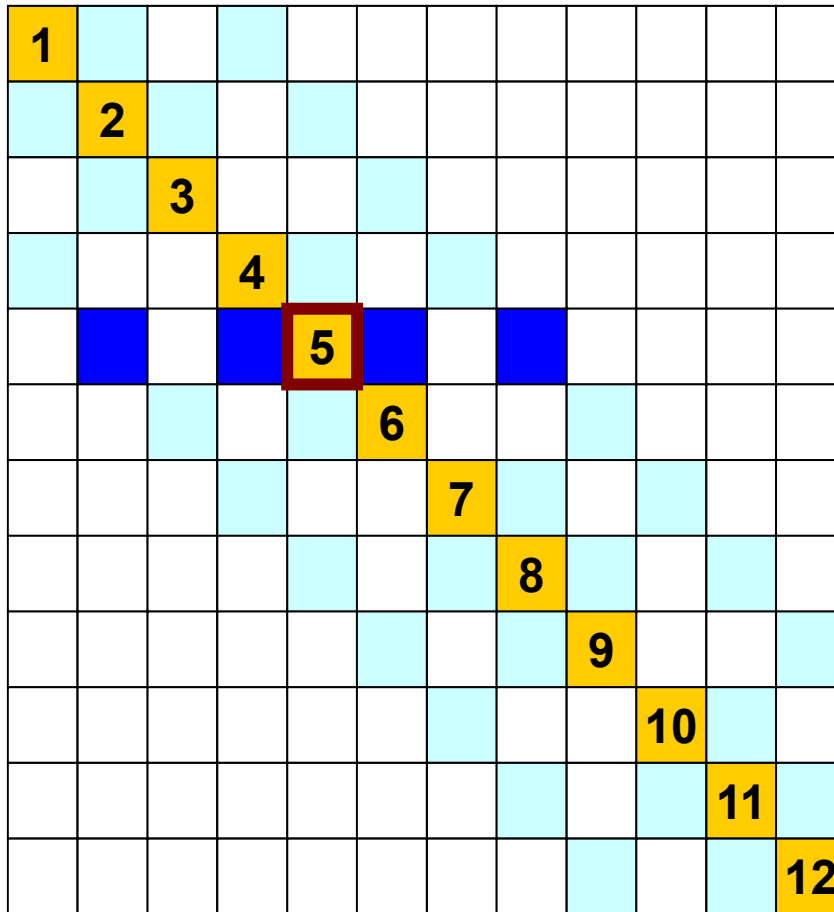


U

实例：5点差分

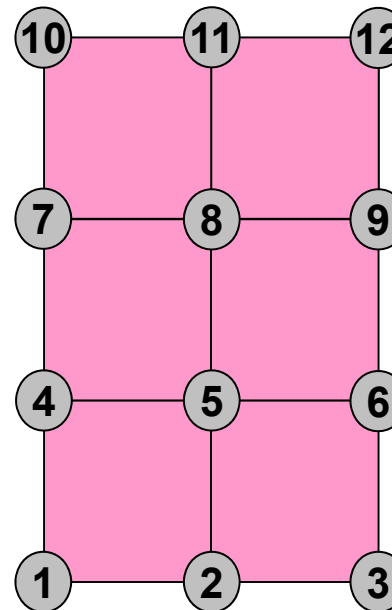
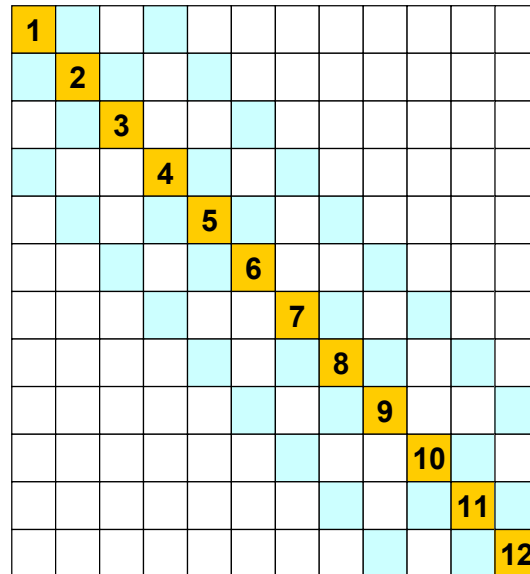


实例：5点差分



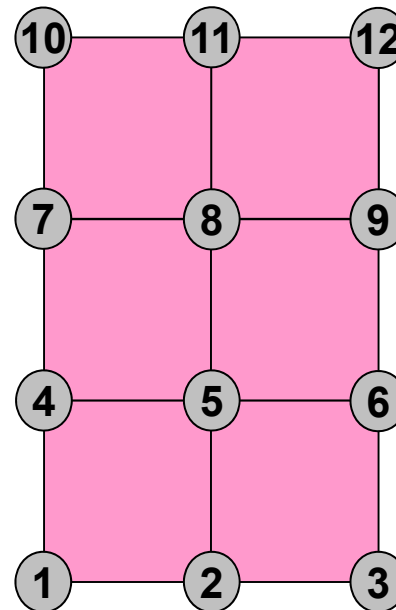
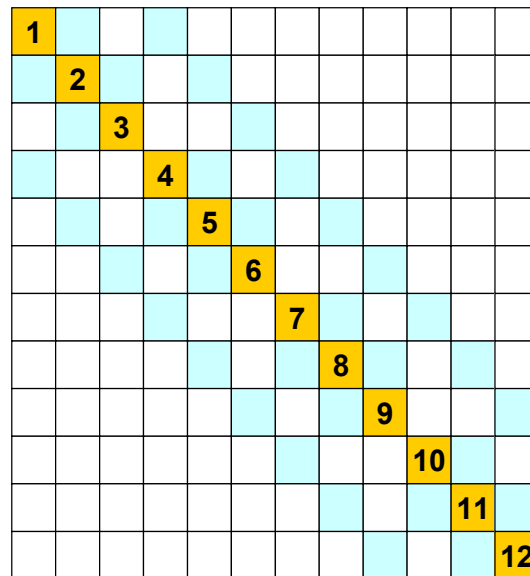
実例：係数マトリクス

$$\begin{bmatrix}
 6.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
 -1.00 & 6.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
 0.00 & -1.00 & 6.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
 -1.00 & 0.00 & 0.00 & 6.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
 0.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 6.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 6.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
 0.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 6.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 \\
 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 6.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 \\
 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 6.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 \\
 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 6.00 & -1.00 & 0.00 \\
 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 6.00 & -1.00 \\
 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 6.00
 \end{bmatrix}
 \times
 \begin{bmatrix}
 \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\ \\
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 0.00 \\
 3.00 \\
 10.00 \\
 11.00 \\
 10.00 \\
 19.00 \\
 20.00 \\
 16.00 \\
 28.00 \\
 42.00 \\
 36.00 \\
 52.00
 \end{bmatrix}$$



实例：解

$$\begin{bmatrix}
 6.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
 -1.00 & 6.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
 0.00 & -1.00 & 6.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
 -1.00 & 0.00 & 0.00 & 6.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
 0.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 6.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 6.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
 0.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 6.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 \\
 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 6.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 \\
 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 6.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 \\
 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & 0.00 & 6.00 & -1.00 & 0.00 \\
 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 6.00 & -1.00 \\
 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & -1.00 & 0.00 & -1.00 & 6.00
 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix}
 1.00 \\
 2.00 \\
 3.00 \\
 4.00 \\
 5.00 \\
 6.00 \\
 7.00 \\
 8.00 \\
 9.00 \\
 10.00 \\
 11.00 \\
 12.00
 \end{bmatrix}
 =
 \begin{bmatrix}
 0.00 \\
 3.00 \\
 10.00 \\
 11.00 \\
 10.00 \\
 19.00 \\
 20.00 \\
 16.00 \\
 28.00 \\
 42.00 \\
 36.00 \\
 52.00
 \end{bmatrix}$$



完全LU分解したマトリクス

もとのマトリクス

6.00	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
-1.00	6.00	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	-1.00	6.00	0.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
-1.00	0.00	0.00	6.00	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	-1.00	0.00	-1.00	6.00	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	0.00	-1.00	0.00	-1.00	6.00	0.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	6.00	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	-1.00	0.00	-1.00	6.00	-1.00	0.00	-1.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-1.00	0.00	-1.00	6.00	0.00	0.00	-1.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	6.00	-1.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-1.00	0.00	-1.00	6.00	-1.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-1.00	0.00	-1.00	6.00

LU分解したマトリクス

[L][U]同時に表示

[L]対角成分(=1)省略

(fill-inが生じている。もともとは0だった成分が非ゼロになっている)

6.00	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
-0.17	5.83	-1.00	-0.17	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	-0.17	5.83	-0.03	-0.17	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
-0.17	-0.03	0.00	5.83	-1.03	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	-0.17	-0.03	-0.18	5.64	-1.03	-0.18	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	0.00	-0.17	0.00	-0.18	5.64	-0.03	-0.18	-1.00	0.00	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.03	-0.01	5.82	-1.03	-0.01	-1.00	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.03	-0.18	5.63	-1.03	-0.18	-1.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.18	5.63	-0.03	-0.18	-1.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.03	-0.01	5.82	-1.03	-0.01
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.03	-0.18	5.63	-1.03
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.18	5.63

不完全LU分解したマトリクス(fill-in無し)

不完全LU分解した
マトリクス(fill-in無し)

[L][U]同時に表示

[L]対角成分(=1)省略

6.00	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
-0.17	5.83	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	-0.17	5.83	0.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
-0.17	0.00	0.00	5.83	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	-0.17	0.00	-0.17	5.66	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	0.00	-0.17	0.00	-0.18	5.65	0.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	5.83	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.17	5.65	-1.00	0.00	-1.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.18	5.65	0.00	0.00	-1.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	5.83	-1.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.17	5.65	-1.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.18	5.65

完全LU分解した
マトリクス

[L][U]同時に表示

[L]対角成分(=1)省略

(fill-inが生じている。も
ともと0だった成分が非
ゼロになっている)

6.00	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
-0.17	5.83	-1.00	-0.17	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	-0.17	5.83	-0.03	-0.17	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
-0.17	-0.03	0.00	5.83	-1.03	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	-0.17	-0.03	-0.18	5.64	-1.03	-0.18	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00
0.00	0.00	-0.17	0.00	-0.18	5.64	-0.03	-0.18	-1.00	0.00	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.03	-0.01	5.82	-1.03	-0.01	-1.00	0.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.03	-0.18	5.63	-1.03	-0.18	-1.00	0.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.18	5.63	-0.03	-0.18	-1.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.03	-0.01	5.82	-1.03	-0.01
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.03	-0.18	5.63	-1.03
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.18	5.63

解の比較: ちよつと違ふ

不完全LU分解

6.00	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.92
-0.17	5.83	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.75
0.00	-0.17	5.83	0.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.76
-0.17	0.00	0.00	5.83	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	3.79
0.00	-0.17	0.00	-0.17	5.66	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	4.46
0.00	0.00	-0.17	0.00	-0.18	5.65	0.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	5.57
0.00	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	5.83	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	6.66
0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.17	5.65	-1.00	0.00	-1.00	0.00	7.25
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.18	5.65	0.00	0.00	-1.00	8.46
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	0.00	0.00	5.83	-1.00	0.00	9.66
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.17	5.65	-1.00	10.54
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.18	5.65	11.83



完全LU分解

6.00	-1.00	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	1.00
-0.17	5.83	-1.00	-0.17	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	2.00
0.00	-0.17	5.83	-0.03	-0.17	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	3.00
-0.17	-0.03	0.00	5.83	-1.03	0.00	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	4.00
0.00	-0.17	-0.03	-0.18	5.64	-1.03	-0.18	-1.00	0.00	0.00	0.00	0.00	5.00
0.00	0.00	-0.17	0.00	-0.18	5.64	-0.03	-0.18	-1.00	0.00	0.00	0.00	6.00
0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.03	-0.01	5.82	-1.03	-0.01	-1.00	0.00	0.00	7.00
0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.03	-0.18	5.63	-1.03	-0.18	-1.00	0.00	8.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.18	5.63	-0.03	-0.18	-1.00	9.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.17	-0.03	-0.01	5.82	-1.03	-0.01	10.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	-0.03	-0.18	5.63	-1.03	11.00
0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	-0.18	0.00	-0.18	5.63	12.00



ILU(0), IC(0) 前処理

- Fill-inを全く考慮しない「不完全な」分解
 - 記憶容量, 計算量削減
- これを解くと「不完全な」解が得られるが, 本来の解とそれほどずれているわけではない
 - 問題に依存する

前処理の分類: Trade-off

Weak

Strong

Point Jacobi

Diagonal
Blocking

ILU(0)

ILU(1)

ILU(2)

Gaussian
Elimination

- Simple
- Easy to be Parallelized
- Cheap

- Complicated
- Global Dependency
- Expensive

- 背景
 - 有限体積法
 - 前処理付反復法
- ICCG法によるポアソン方程式法ソルバーについて
 - 実行方法
 - データ構造
 - プログラムの説明
 - 初期化
 - 係数マトリクス生成
 - ICCG法
- OpenMP「超」入門

対象とするアプリケーションの概要

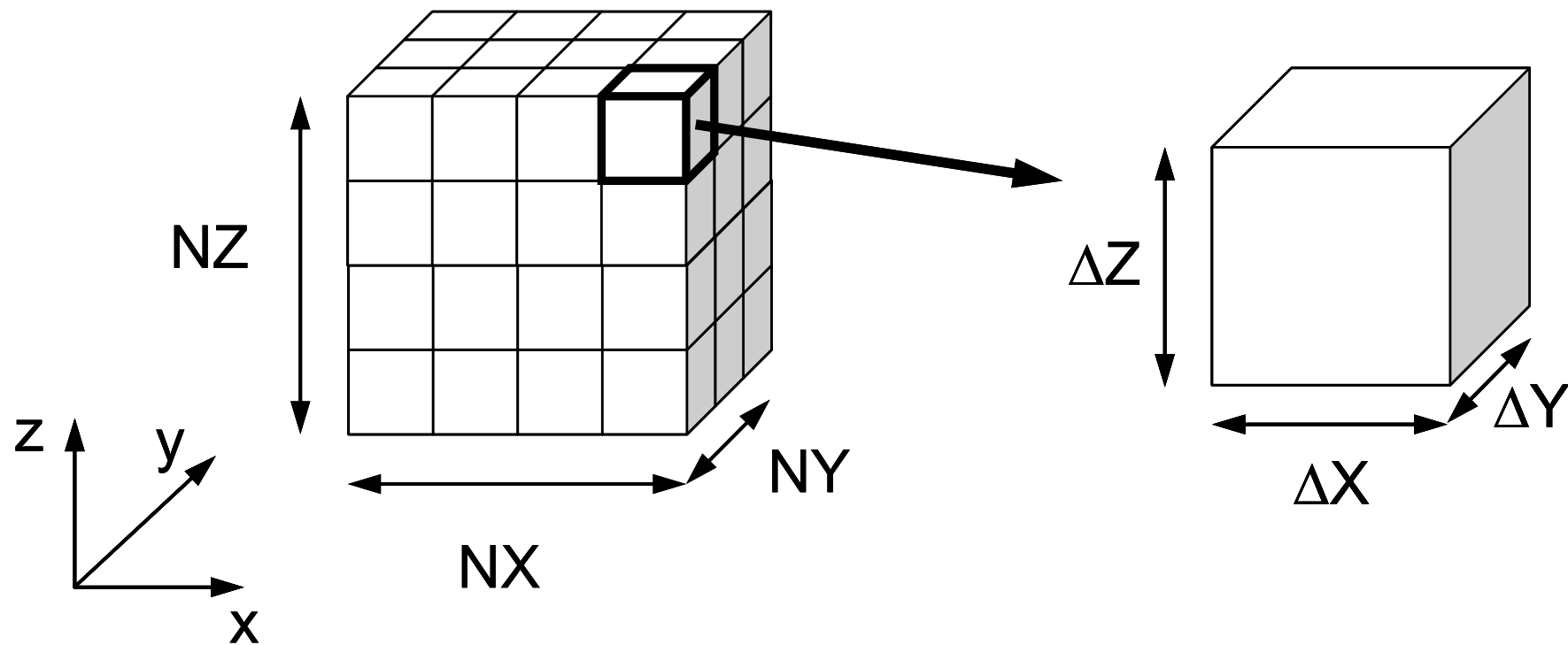
- 支配方程式: 三次元ポアソン方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + f = 0$$

- 有限体積法 (Finite Volume Method, **FVM**) による空間離散化
 - 任意形状の要素, 要素中心で変数を定義。
 - 直接差分法 (Direct Finite Difference Method) とも呼ばれる。
- 境界条件
 - ディリクレ, 体積フラックス
- 反復法による連立一次方程式解法
 - 共役勾配法 (CG) + 前処理

対象：規則正しい三次元差分格子

半非構造的に扱う



解いている問題: 三次元ポアソン方程式

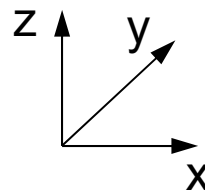
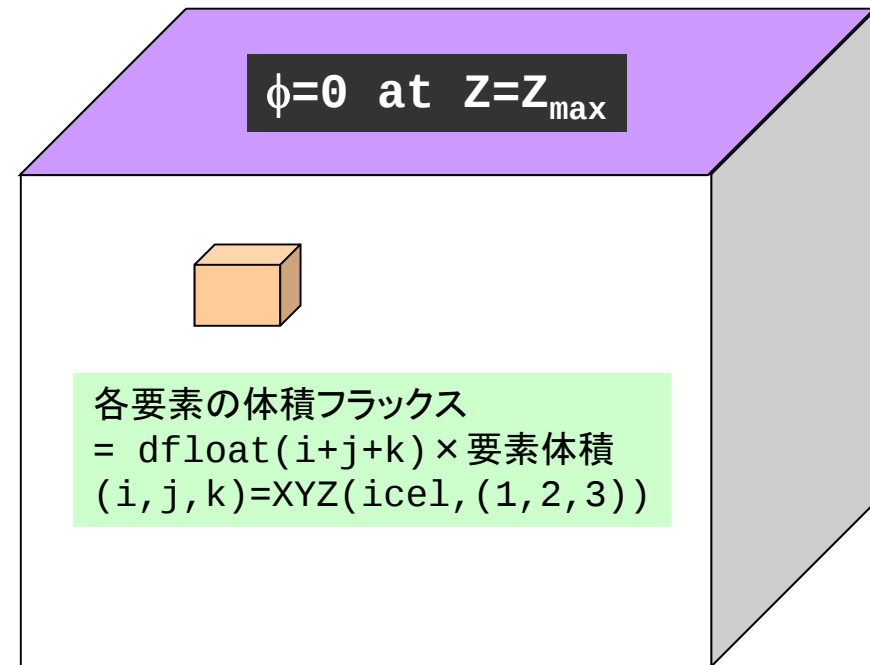
変数: 要素中心で定義

ポアソン方程式

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} + f = 0$$

境界条件

- 各要素で体積フラックス
- $Z=Z_{\max}$ 面で $\phi=0$



有限体積法

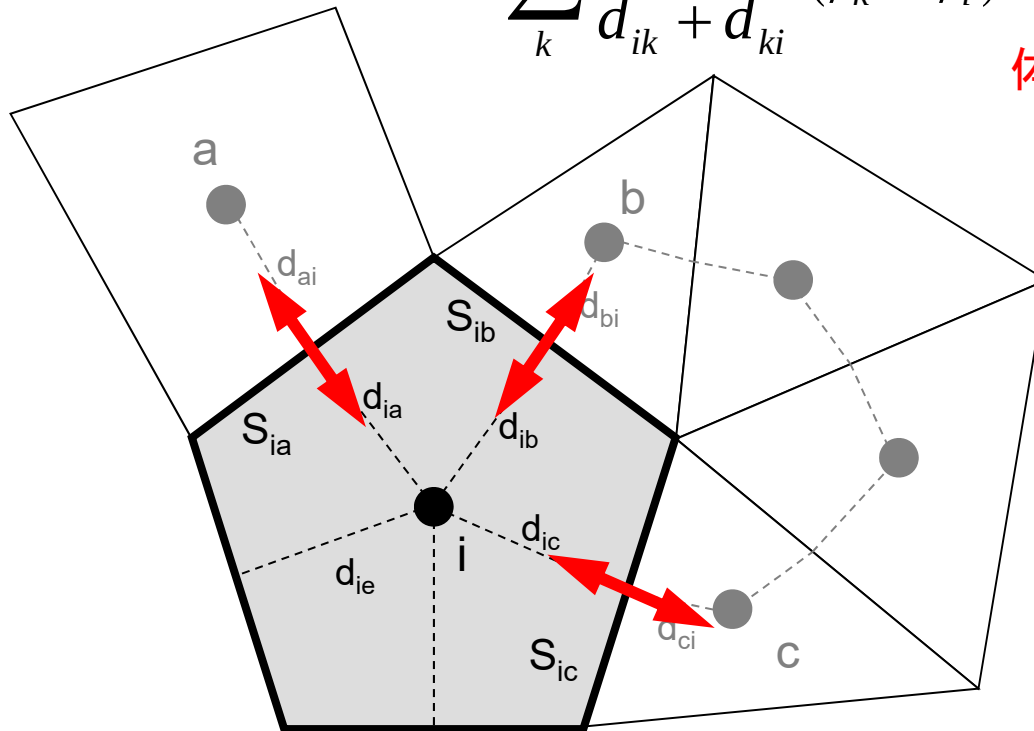
Finite Volume Method (FVM)

面を通過するフラックスの保存に着目

隣接要素との拡散

$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

体積フラックス



V_i : 要素体積

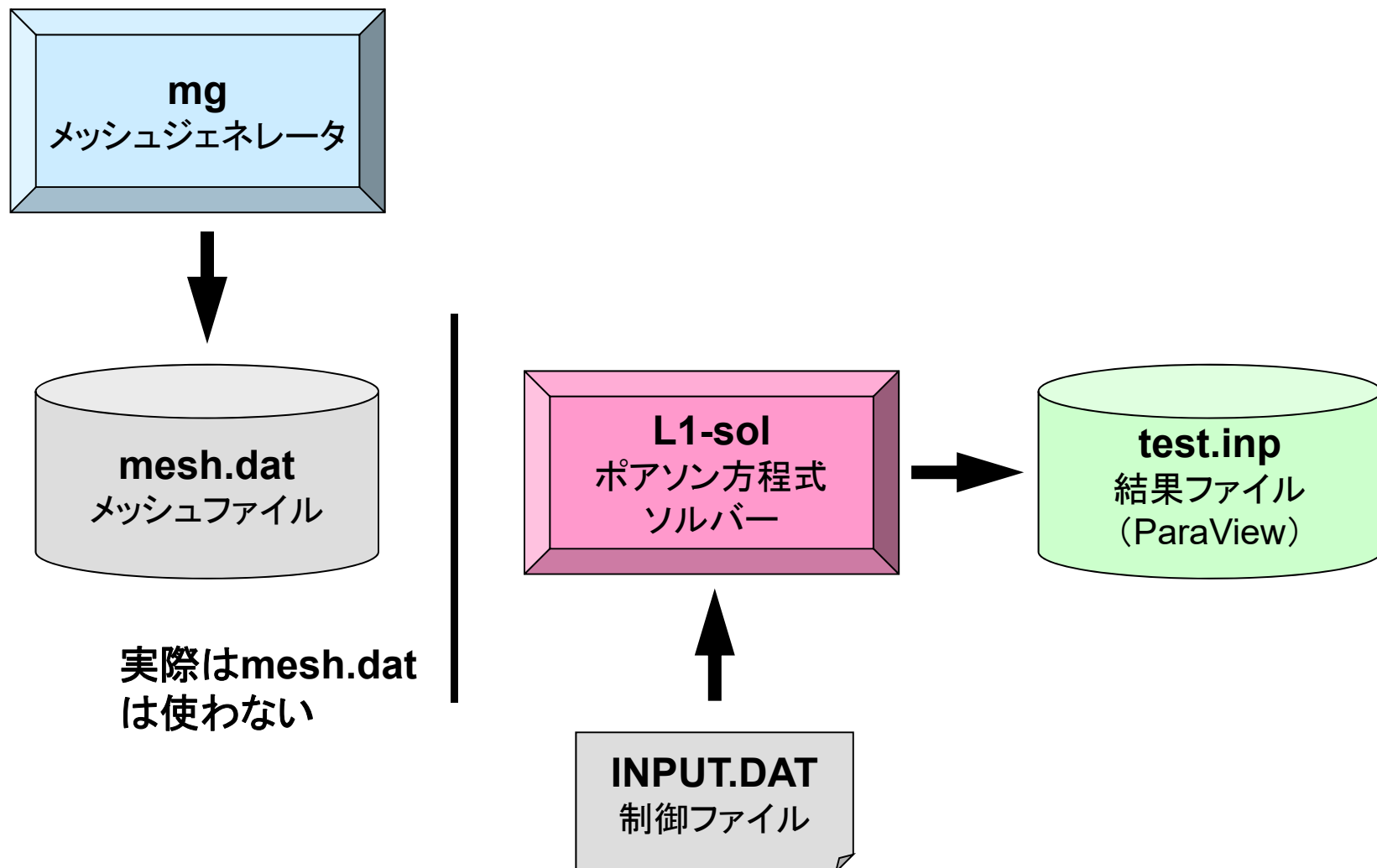
S : 表面面積

d_{ij} : 要素中心から表面までの距離

Q : 体積フラックス

プログラムの実行

プログラム, 必要ファイル, 実行ディレクトリ: <\$P-L1>/run



プログラムの実行 コンパイル

```
$> cd <$P-L1>/run
```

```
$> gfortran -O mg.f -o mg (or cc -O mg.c -o mg)
```

```
$> ls mg  
mg
```

メッシュジェネレータ: mg

```
$> cd ../src
```

```
$> make
```

```
$> ls ../run/L1-sol  
L1-sol
```

ポアソン方程式ソルバー: L1-sol

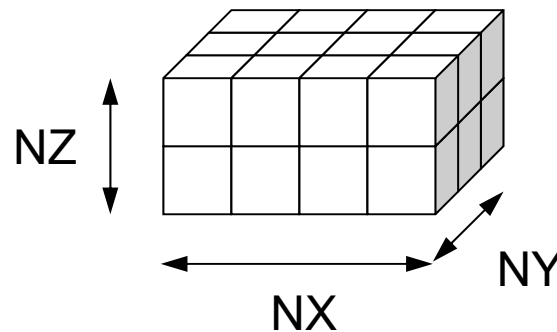
gfortranが無い場合はg95などをご利用ください
Makefileも書き換える

プログラムの実行

メッシュ生成

```
$> cd ../run  
$> ./mg  
4 3 2  
$> ls mesh.dat  
mesh.dat
```

下図のNX, NY, NZを入力すると,
「mesh.dat」が生成される



mesh.dat(1/5)

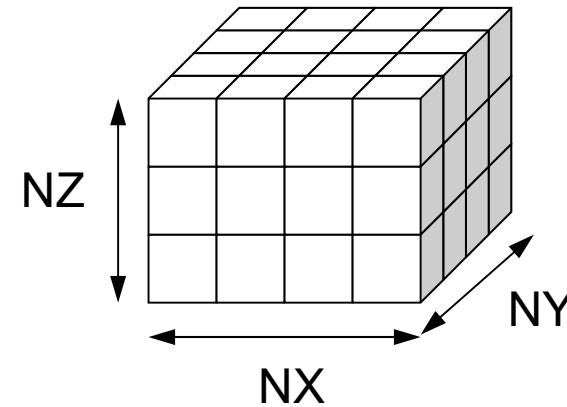
4	3	2							
24									
1	0	2	0	5	0	13	1	1	1
2	1	3	0	6	0	14	2	1	1
3	2	4	0	7	0	15	3	1	1
4	3	0	0	8	0	16	4	1	1
5	0	6	1	9	0	17	1	2	1
6	5	7	2	10	0	18	2	2	1
7	6	8	3	11	0	19	3	2	1
8	7	0	4	12	0	20	4	2	1
9	0	10	5	0	0	21	1	3	1
10	9	11	6	0	0	22	2	3	1
11	10	12	7	0	0	23	3	3	1
12	11	0	8	0	0	24	4	3	1
13	0	14	0	17	1	0	1	1	2
14	13	15	0	18	2	0	2	1	2
15	14	16	0	19	3	0	3	1	2
16	15	0	0	20	4	0	4	1	2
17	0	18	13	21	5	0	1	2	2
18	17	19	14	22	6	0	2	2	2
19	18	20	15	23	7	0	3	2	2
20	19	0	16	24	8	0	4	2	2
21	0	22	17	0	9	0	1	3	2
22	21	23	18	0	10	0	2	3	2
23	22	24	19	0	11	0	3	3	2
24	23	0	20	0	12	0	4	3	2

```
read (21,'(10i10)') NX , NY , NZ
read (21,'(10i10)') ICELTOT
```

```
do i= 1, ICELTOT
  read (21, '(10i10)' ) ii, (NEIBcell(i,k), k= 1, 6), (XYZ(i,j), j= 1, 3)
enddo
```

mesh.dat(2/5)

	4	3	2						
24									
1	0	2	0	5	0	13	1	1	1
2	1	3	0	6	0	14	2	1	1
3	2	4	0	7	0	15	3	1	1
4	3	0	0	8	0	16	4	1	1
5	0	6	1	9	0	17	1	2	1
6	5	7	2	10	0	18	2	2	1
7	6	8	3	11	0	19	3	2	1
8	7	0	4	12	0	20	4	2	1
9	0	10	5	0	0	21	1	3	1
10	9	11	6	0	0	22	2	3	1
11	10	12	7	0	0	23	3	3	1
12	11	0	8	0	0	24	4	3	1
13	0	14	0	17	1	0	1	1	2
14	13	15	0	18	2	0	2	1	2
15	14	16	0	19	3	0	3	1	2
16	15	0	0	20	4	0	4	1	2
17	0	18	13	21	5	0	1	2	2
18	17	19	14	22	6	0	2	2	2
19	18	20	15	23	7	0	3	2	2
20	19	0	16	24	8	0	4	2	2
21	0	22	17	0	9	0	1	3	2
22	21	23	18	0	10	0	2	3	2
23	22	24	19	0	11	0	3	3	2
24	23	0	20	0	12	0	4	3	2



X,Y,Z方向の要素数

```
read (21,'(10i10)') NX , NY , NZ
read (21,'(10i10)') ICELTOT
```

```
do i= 1, ICELTOT
  read (21, '(10i10)' ) ii, (NEIBcell(i,k), k= 1, 6), (XYZ(i,j), j= 1, 3)
enddo
```

mesh.dat(3/5)

要素数: $NX \times NY \times NZ$

4	3	2							
24	1	0	2	0	5	0	13	1	1
	2	1	3	0	6	0	14	2	1
	3	2	4	0	7	0	15	3	1
	4	3	0	0	8	0	16	4	1
	5	0	6	1	9	0	17	1	2
	6	5	7	2	10	0	18	2	2
	7	6	8	3	11	0	19	3	2
	8	7	0	4	12	0	20	4	2
	9	0	10	5	0	0	21	1	3
	10	9	11	6	0	0	22	2	3
	11	10	12	7	0	0	23	3	3
	12	11	0	8	0	0	24	4	3
	13	0	14	0	17	1	0	1	1
	14	13	15	0	18	2	0	2	1
	15	14	16	0	19	3	0	3	1
	16	15	0	0	20	4	0	4	1
	17	0	18	13	21	5	0	1	2
	18	17	19	14	22	6	0	2	2
	19	18	20	15	23	7	0	3	2
	20	19	0	16	24	8	0	4	2
	21	0	22	17	0	9	0	1	3
	22	21	23	18	0	10	0	2	3
	23	22	24	19	0	11	0	3	3
	24	23	0	20	0	12	0	4	3

```
read (21,'(10i10)') NX , NY , NZ
```

```
read (21,'(10i10)') ICELTOT
```

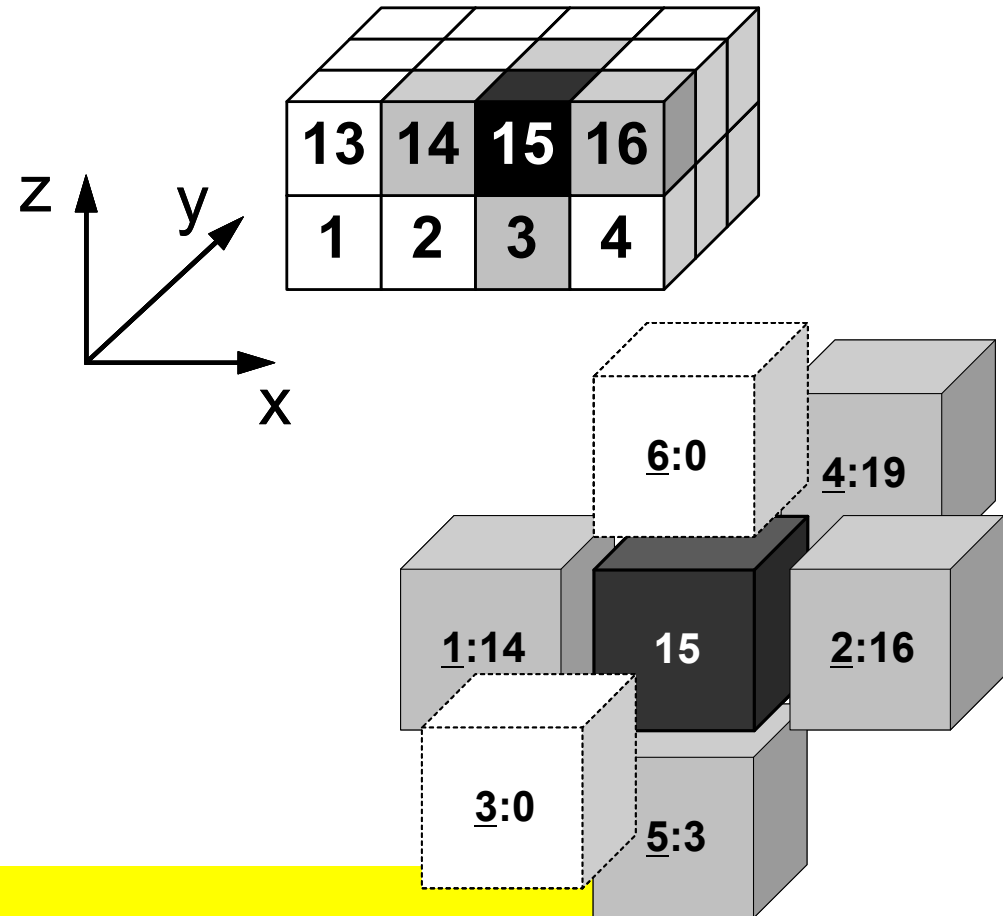
```
do i= 1, ICELTOT
```

```
  read (21, '(10i10)' ) ii, (NEIBcell(i,k), k= 1, 6), (XYZ(i,j), j= 1, 3)
```

```
enddo
```

mesh.dat(4/5)

隣接要素: NEIBcell(i,k)



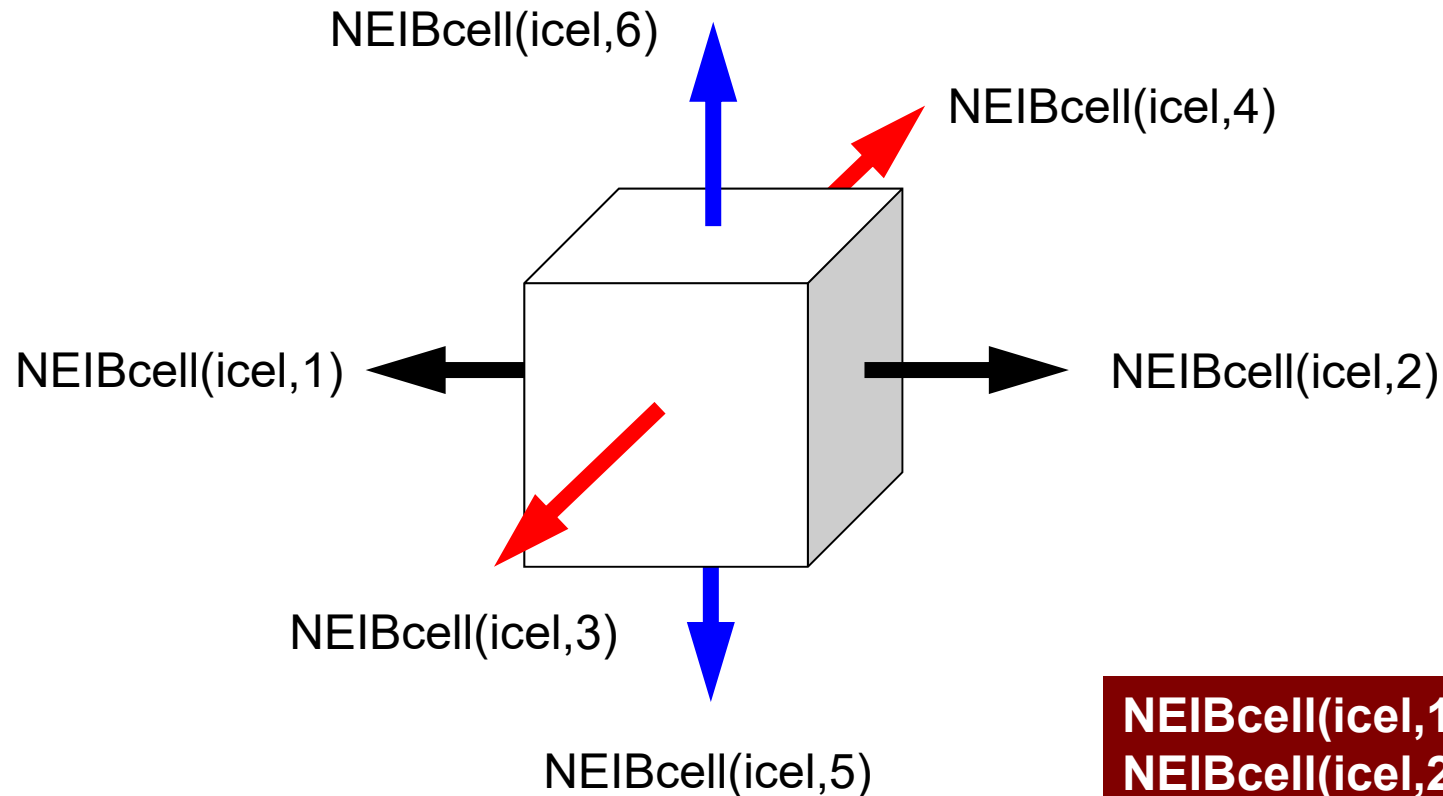
4	3	2							
24	1	0	2	0	5	0	13	1	1
2	1	3	0	6	0	14	2	1	1
3	2	4	0	7	0	15	3	1	1
4	3	0	0	8	0	16	4	1	1
5	0	6	1	9	0	17	1	2	1
6	5	7	2	10	0	18	2	2	1
7	6	8	3	11	0	19	3	2	1
8	7	0	4	12	0	20	4	2	1
9	0	10	5	0	0	21	1	3	1
10	9	11	6	0	0	22	2	3	1
11	10	12	7	0	0	23	3	3	1
12	11	0	8	0	0	24	4	3	1
13	0	14	0	17	1	0	1	1	2
14	13	15	0	18	2	0	2	1	2
15	14	16	0	19	3	0	3	1	2
16	15	0	0	20	4	0	4	1	2
17	0	18	13	21	5	0	1	2	2
18	17	19	14	22	6	0	2	2	2
19	18	20	15	23	7	0	3	2	2
20	19	0	16	24	8	0	4	2	2
21	0	22	17	0	9	0	1	3	2
22	21	23	18	0	10	0	2	3	2
23	22	24	19	0	11	0	3	3	2
24	23	0	20	0	12	0	4	3	2

```
read (21,'(10i10)') NX , NY , NZ
read (21,'(10i10)') ICELTOT
```

```
do i= 1, ICELTOT
  read (21, '(10i10)') ii, (NEIBcell(i,k), k= 1, 6), (XYZ(i,j), j= 1, 3)
enddo
```

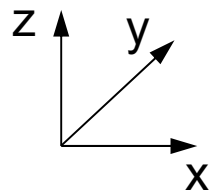
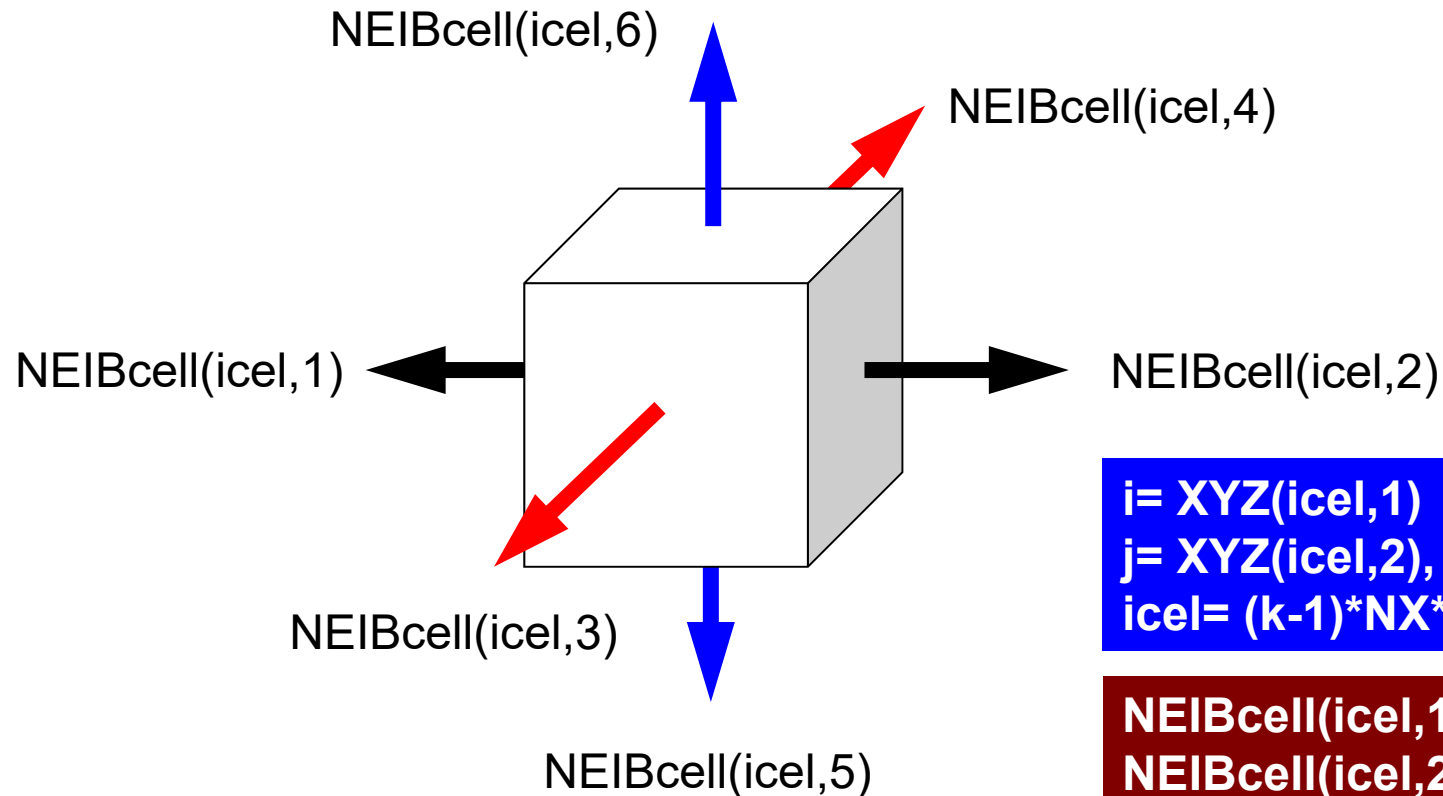
1項目目は通し番号です(読み飛ばし)

NEIBcell: 隣接している要素番号 境界面の場合は0



**$NEIBcell(icel, 1) = icel - 1$
 $NEIBcell(icel, 2) = icel + 1$
 $NEIBcell(icel, 3) = icel - NX$
 $NEIBcell(icel, 4) = icel + NX$
 $NEIBcell(icel, 5) = icel - NX * NY$
 $NEIBcell(icel, 6) = icel + NX * NY$**

NEIBcell: 隣接している要素番号 境界面の場合は0



$i = XYZ(icel, 1)$
 $j = XYZ(icel, 2), k = XYZ(icel, 3)$
 $icel = (k-1)*NX*NY + (j-1)*NX + i$

$NEIBcell(icel, 1) = icel - 1$
 $NEIBcell(icel, 2) = icel + 1$
 $NEIBcell(icel, 3) = icel - NX$
 $NEIBcell(icel, 4) = icel + NX$
 $NEIBcell(icel, 5) = icel - NX*NY$
 $NEIBcell(icel, 6) = icel + NX*NY$

プログラムの実行

制御データ「<\$P-L1>/run/INPUT.DAT」の作成

32 32 32

1

1.00e-00 1.00e-00 1.00e-00

1.0e-08

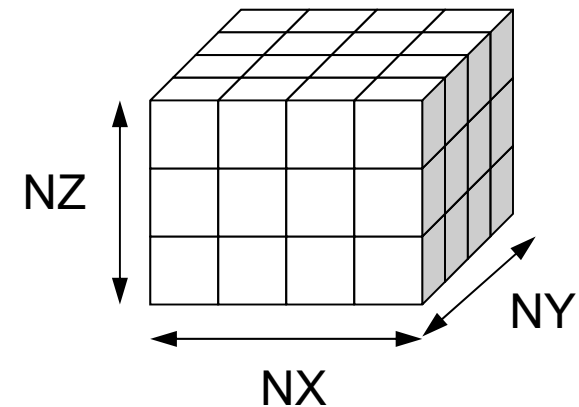
NX/NY/NZ

METHOD 1:2

DX/DY/DZ

EPSICCG

- NX, NY, NZ
 - 各方向のメッシュ数
- METHOD
 - 前処理行列の作成方法: 次ページ
- DX, DY, DZ
 - 各要素のX,Y,Z方向辺長さ
- EPSICCG
 - ICCG法の収束判定値



前処理手法の選択

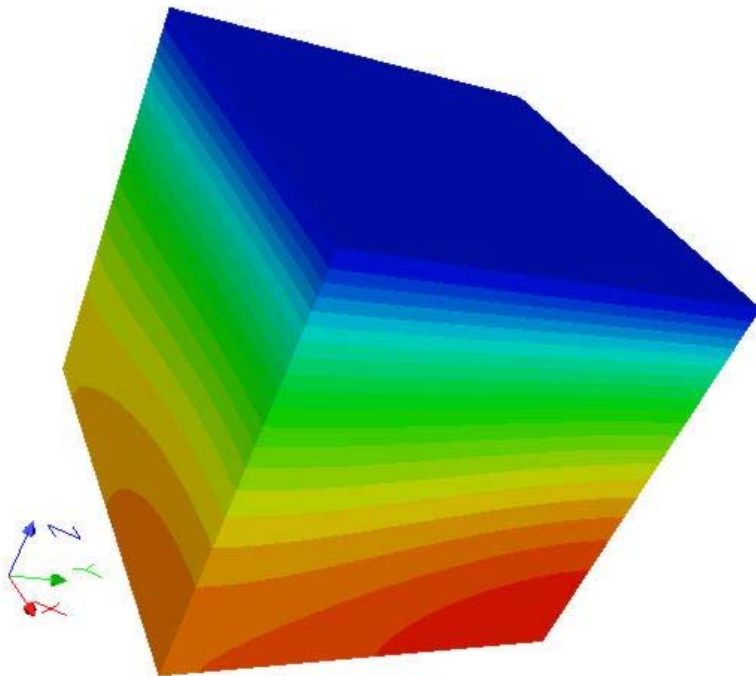
32 32 32	NX/NY/NZ
1	METHOD 1:2
1.00e-00 1.00e-00 1.00e-00	DX/DY/DZ
1.0e-08	EPSICCG

- METHOD=1 不完全修正コレスキー分解
(非対角項保存)
- METHOD=2 不完全修正コレスキー分解
- METHOD=3 対角スケーリング(点ヤコビ)
- METHOD=1,2,3について計算してみよ !

プログラムの実行

計算実行, ポスト処理

```
$> cd <$P-L1>/run  
$> ./L1-sol  
  
$> ls test.inp  
test.inp
```



ParaView

- ファイルを開く
- 図の表示
- イメージファイルの保存

UCD Format (1/3)

Unstructured Cell Data

要素の種類

点

線

三角形

四角形

四面体

角錐

三角柱

六面体

二次要素

線2

三角形2

四角形2

四面体2

角錐2

三角柱2

六面体2

キーワード

pt

line

tri

quad

tet

pyr

prism

hex

line2

tri2

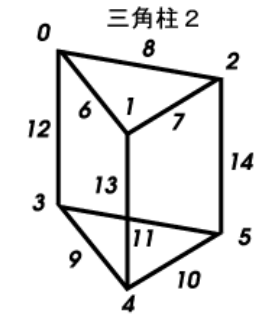
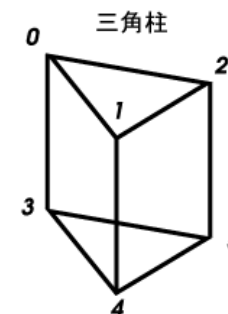
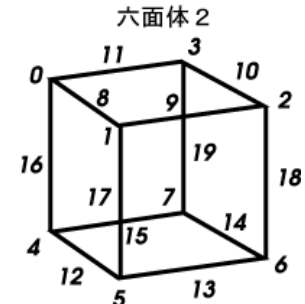
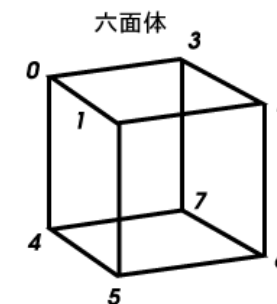
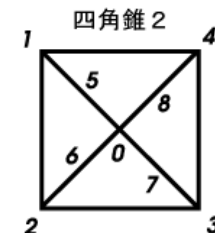
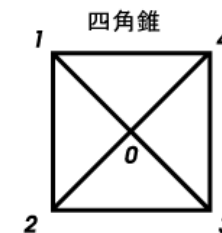
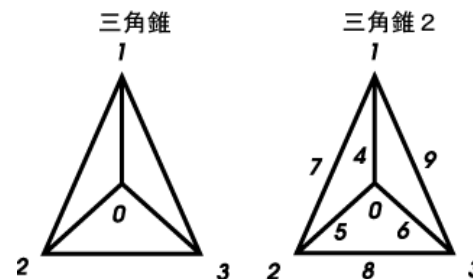
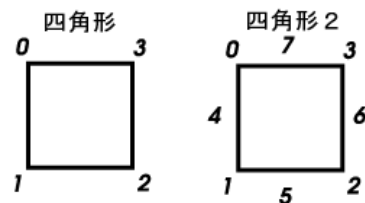
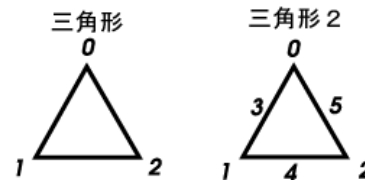
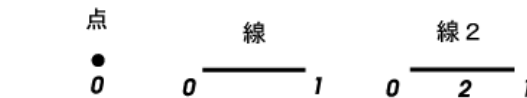
quad2

tet2

pyr2

prism2

hex2



UCD Format (2/3)

- Originally for AVS, microAVS
- Extension of the UCD file is “inp”
- There are two types of formats. Only old type can be read by ParaView.

UCD Format (3/3): Old Format

(全節点数) (全要素数) (各節点のデータ数) (各要素のデータ数) (モデルのデータ数)
 (節点番号1) (X座標) (Y座標) (Z座標)
 (節点番号2) (X座標) (Y座標) (Z座標)

・
 ・
 ・

(要素番号1) (材料番号) (要素の種類) (要素を構成する節点のつながり)
 (要素番号2) (材料番号) (要素の種類) (要素を構成する節点のつながり)

・
 ・
 ・

(節点のデータ成分数) (成分1の構成数) (成分2の構成数) ... (各成分の構成数)
 (節点データ成分1のラベル), (単位)
 (節点データ成分2のラベル), (単位)

・
 ・
 ・

(各節点データ成分のラベル), (単位)
 (節点番号1) (節点データ1) (節点データ2)
 (節点番号2) (節点データ1) (節点データ2)

・
 ・
 ・

(要素のデータ成分数) (成分1の構成数) (成分2の構成数) ... (各成分の構成数)
 (要素データ成分1のラベル), (単位)
 (要素データ成分2のラベル), (単位)

・
 ・
 ・

(各要素データ成分のラベル), (単位)
 (要素番号1) (要素データ1) (要素データ2)
 (要素番号2) (要素データ1) (要素データ2)

・
 ・
 ・

- 背景
 - 有限体積法
 - 前処理付反復法
- **ICCG法によるポアソン方程式法ソルバーについて**
 - 実行方法
 - データ構造
 - **プログラムの説明**
 - 初期化
 - 係数マトリクス生成
 - ICCG法
- OpenMP

プログラムの構成

```

program MAIN

  use STRUCT
  use PCG
  use solver_ICCG
  use solver_ICCG2
  use solver_PCG

  implicit REAL*8 (A-H, O-Z)

  call INPUT
  call POINTER_INIT
  call BOUNDARY_CELL
  call CELL_METRICS
  call POI_GEN

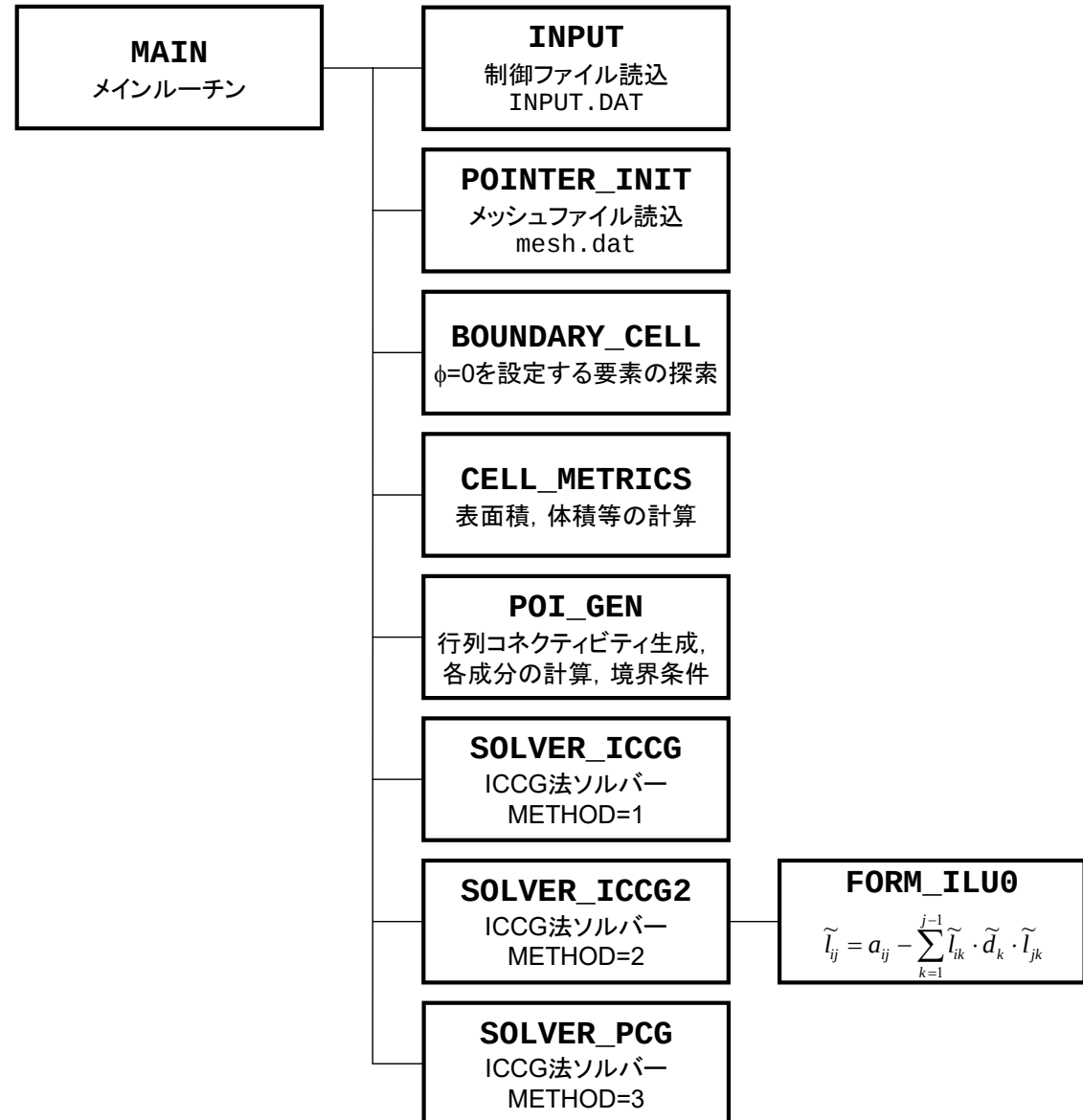
  PHI= 0. d0

  if (METHOD.eq.1) call solve_ICCG (...)
  if (METHOD.eq.2) call solve_ICCG2 (...)
  if (METHOD.eq.3) call solve_PCG (...)

  call OUTUCD

  stop
end

```



module STRUCT

```

module STRUCT

  include 'precision.inc'

  !C
  !C-- METRICs & FLUX
  integer (kind=kint) :: ICELTOT, ICELTOTp, N
  integer (kind=kint) :: NX, NY, NZ, NXP1, NYP1, NZP1, IBNODTOT
  integer (kind=kint) :: NXc, NYc, NZc

  real (kind=kreal) ::
  &   DX, DY, DZ, XAREA, YAREA, ZAREA, RDX, RDY, RDZ,
  &   RDX2, RDY2, RDZ2, R2DX, R2DY, R2DZ

  real (kind=kreal), dimension(:), allocatable ::
  &   VOLCEL, VOLNOD, RVC, RVN

  integer (kind=kint), dimension(:,:), allocatable ::
  &   XYZ, NEIBcell

  !C
  !C-- BOUNDARYs
  integer (kind=kint) :: ZmaxCELTot
  integer (kind=kint), dimension(:), allocatable :: BC_INDEX, BC_NOD
  integer (kind=kint), dimension(:), allocatable :: ZmaxCEL

  !C
  !C-- WORK
  integer (kind=kint), dimension(:,:), allocatable :: IWKX
  real (kind=kreal), dimension(:,:), allocatable :: FCV

end module STRUCT

```

ICELTOT : 要素数 ($NX \times NY \times NZ$)
 N : 節点数

NX, NY, NZ : x, y, z方向要素数
 NXP1, NYP1, NZP1 :
 x, y, z方向節点数

IBNODTOT : $NXP1 \times NYP1$

XYZ(ICELTOT, 3) : 要素座標
 NEIBcell(ICELTOT, 6) :
 隣接要素

module PCG(1/5)

```

module PCG

integer, parameter :: N2= 256
integer :: NUmax, NLmax, NCOLORTot, NCOLORk, NU, NL, METHOD

real(kind=8) :: EPSICCG

real(kind=8), dimension(:), allocatable :: D, PHI, BFORCE
real(kind=8), dimension(:), allocatable :: AL, AU

integer, dimension(:), allocatable :: INL, INU, COLORindex
integer, dimension(:), allocatable :: OLDtoNEW, NEWtoOLD

integer, dimension(:, :), allocatable :: IAL, IAU

integer, dimension(:), allocatable :: indexL, itemL
integer, dimension(:), allocatable :: indexU, itemU

end module PCG

```

module PCG (2/5)

```

module PCG

integer, parameter :: N2= 256
integer :: NUmex, NLmax, NCOLORTot, NCOLORk, NU, NL, METHOD
integer :: NPL, NPU

real(kind=8) :: EPSICCG

real(kind=8), dimension(:), allocatable :: D, PHI, BFORCE
real(kind=8), dimension(:), allocatable :: AL, AU

integer, dimension(:), allocatable :: INL, INU, COLORindex
integer, dimension(:), allocatable :: OLDtoNEW, NEWtoOLD

integer, dimension(:, :), allocatable :: IAL, IAU

integer, dimension(:), allocatable :: indexL, itemL
integer, dimension(:), allocatable :: indexU, itemU

end module PCG

```

INL(ICELTOT)
IAL(NL, ICELTOT)
 INU(ICELTOT)
IAU(NU, ICELTOT)
 NU, NL

indexL(0:ICELTOT)
 indexU(0:ICELTOT)
 NPL, NPU
 itemL(NPL), itemU(NPU)

非零下三角成分の数
非零下三角成分 (列番号)
 非零上三角成分の数
非零上三角成分 (列番号)
 非零上下三角成分の最大数 (ここでは6)

各行の非零下三角成分数 (CRS)
 各行の非零上三角成分数 (CRS)
 非零上下三角成分数の合計 (CRS)
 比零上下三角成分 (列番号) (CRS)

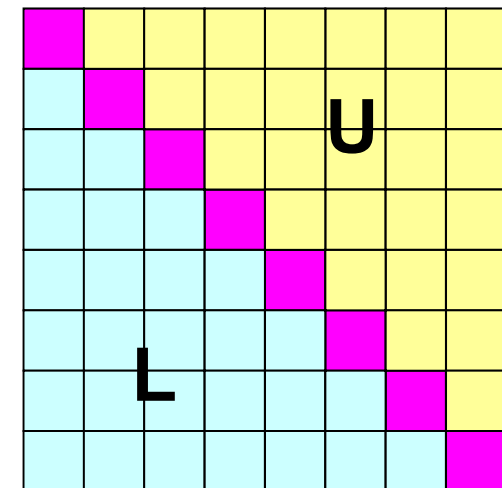
補助配列

下三角成分(列番号):
 非対角成分で自分より要素番号
 が小さい。

$$\text{IAL}(\text{icou}, i) < i$$

上三角成分(列番号):
 非対角成分で自分より要素番号
 が大きい。

$$\text{IAU}(\text{icou}, i) > i$$



module PCG (3/5)

```

module PCG

integer, parameter :: N2= 256
integer :: NUmex, NLmax, NCOLORTot, NCOLORK, NU, NL, METHOD
integer :: NPL, NPU

real(kind=8) :: EPSICCG

real(kind=8), dimension(:), allocatable :: D, PHI, BFORCE
real(kind=8), dimension(:), allocatable :: AL, AU

integer, dimension(:), allocatable :: INL, INU, COLORindex
integer, dimension(:), allocatable :: OLDtoNEW, NEWtoOLD

integer, dimension(:, :), allocatable :: IAL, IAU

integer, dimension(:), allocatable :: indexL, itemL
integer, dimension(:), allocatable :: indexU, itemU

end module PCG

```

INL(ICELTOT)

IAL(NL, ICELTOT)

INU(ICELTOT)

IAU(NU, ICELTOT)

NU, NL

indexL(0:ICELTOT)

indexU(0:ICELTOT)

NPL, NPU

itemL(NPL), itemU(NPU)

非零下三角成分の数

非零下三角成分 (列番号)

非零上三角成分の数

非零上三角成分 (列番号)

非零上下三角成分の最大数 (ここでは6)

各行の非零下三角成分数 (CRS)

各行の非零上三角成分数 (CRS)

非零上下三角成分数の合計 (CRS)

比零上下三角成分 (列番号) (CRS)

補助配列

下三角成分(列番号):

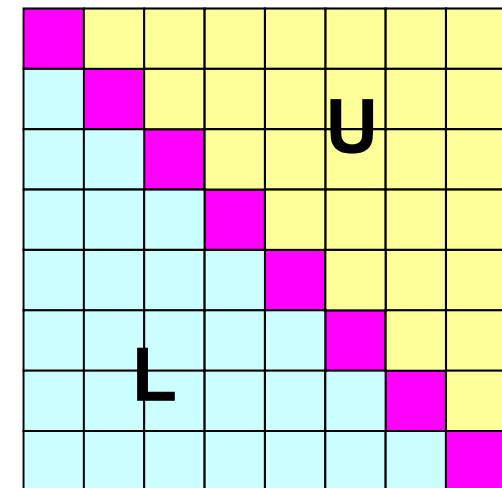
IAL(icou,i) < i

その個数が INL(i)

上三角成分(列番号):

IAU(icou,i) > i

その個数が INU(i)



module PCG (4/5)

```

module PCG

integer, parameter :: N2= 256
integer :: NUmex, NLmax, NCOLORTot, NCOLORk, NU, NL, METHOD
integer :: NPL, NPU

real(kind=8) :: EPSICCG

real(kind=8), dimension(:), allocatable :: D, PHI, BFORCE
real(kind=8), dimension(:), allocatable :: AL, AU

integer, dimension(:), allocatable :: INL, INU, COLORindex
integer, dimension(:), allocatable :: OLDtoNEW, NEWtoOLD

integer, dimension(:, :), allocatable :: IAL, IAU

integer, dimension(:), allocatable :: indexL, itemL
integer, dimension(:), allocatable :: indexU, itemU

end module PCG

```

INL(ICELTOT)
 IAL(NL, ICELTOT)
 INU(ICELTOT)
 IAU(NU, ICELTOT)
 NU, NL

indexL(0:ICELTOT)
 indexU(0:ICELTOT)
 NPL, NPU
 itemL(NPL), itemU(NPU)

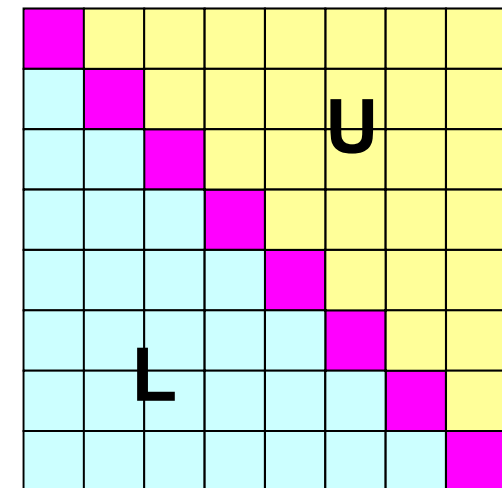
非零下三角成分の数
 非零下三角成分 (列番号)
 非零上三角成分の数
 非零上三角成分 (列番号)
 非零上下三角成分の最大数 (ここでは6)

各行の非零下三角成分数 (CRS)
 各行の非零上三角成分数 (CRS)
 非零上下三角成分数の合計 (CRS)
 比零上下三角成分 (列番号) (CRS)

補助配列

下三角成分(列番号):
 $IAL(icou, i) < i$
 その個数が INL(i)

上三角成分(列番号):
 $IAU(icou, i) > i$
 その個数が INU(i)



module PCG (5/5)

```

module PCG

integer, parameter :: N2= 256
integer :: NUmex, NLmax, NCOLORTot, NCOLORk, NU, NL, METHOD
integer :: NPL, NPU

real(kind=8) :: EPSICCG

real(kind=8), dimension(:), allocatable :: D, PHI, BFORCE
real(kind=8), dimension(:), allocatable :: AL, AU

integer, dimension(:), allocatable :: INL, INU, COLORindex
integer, dimension(:), allocatable :: OLDtoNEW, NEWtoOLD

integer, dimension(:, :), allocatable :: IAL, IAU

integer, dimension(:), allocatable :: indexL, itemL
integer, dimension(:), allocatable :: indexU, itemU

end module PCG

```

METHOD

前処理手法 (=1, =2, =3)

EPSICCG

収束打切残差

D (ICELTOT)

係数行列の対角成分

PHI (ICLETOT)

従属変数

BFORCE (ICELTOT)

連立一次方程式の右辺ベクトル

AL (NPL), AU (NPU)

係数行列の比零上下三角成分 (CRS)

行列関係変数：まとめ

配列・変数名	型	内 容
D(N)	R	対角成分, (N:全メッシュ数=ICELTOT)
BFORCE(N)	R	右辺ベクトル
PHI(N)	R	未知数ベクトル
indexL(0:N)	I	各行の非零下三角成分数(CRS)
indexU(0:N)	I	各行の非零上三角成分数(CRS)
NPL	I	非零下三角成分総数(CRS)
NPU	I	非零上三角成分総数(CRS)
itemL(NPL)	I	非零下三角成分(列番号)(CRS)
itemU(NPU)	I	非零上三角成分(列番号)(CRS)
AL(NPL)	R	非零下三角成分(係数)(CRS)
AU(NPL)	R	非零上三角成分(係数)(CRS)

行列関係変数：まとめ（補助配列）

配列・変数名	型	内 容
NL, NU	I	各行の非零上下三角成分の最大数（ここでは6）
INL(N)	I	各行の非零下三角成分数
INU(N)	I	各行の非零上三角成分数
IAL(NL, N)	I	各行の非零下三角成分に対応する列番号
IAU(NU, N)	I	各行の非零上三角成分に対応する列番号

補助配列を使う理由

- ① NPL, NPUの値が前以てわからない
- ② 後掲の並び替え（ordering, reordering）のときCRS形式ではやりにくい

行列ベクトル積: $\{q\} = [A]\{p\}$

```
do i= 1, N
```

```
    VAL= D(i)*p(i)
```

```
    do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
```

```
        VAL= VAL + AL(k)*p(itemL(k))
```

```
    enddo
```

```
    do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
```

```
        VAL= VAL + AU(k)*p(itemU(k))
```

```
    enddo
```

```
    q(i)= VAL
```

```
enddo
```

プログラムの構成

```
program MAIN
```

```
use STRUCT
use PCG
use solver_ICCG
use solver_ICCG2
use solver_PCG
```

```
implicit REAL*8 (A-H, O-Z)
```

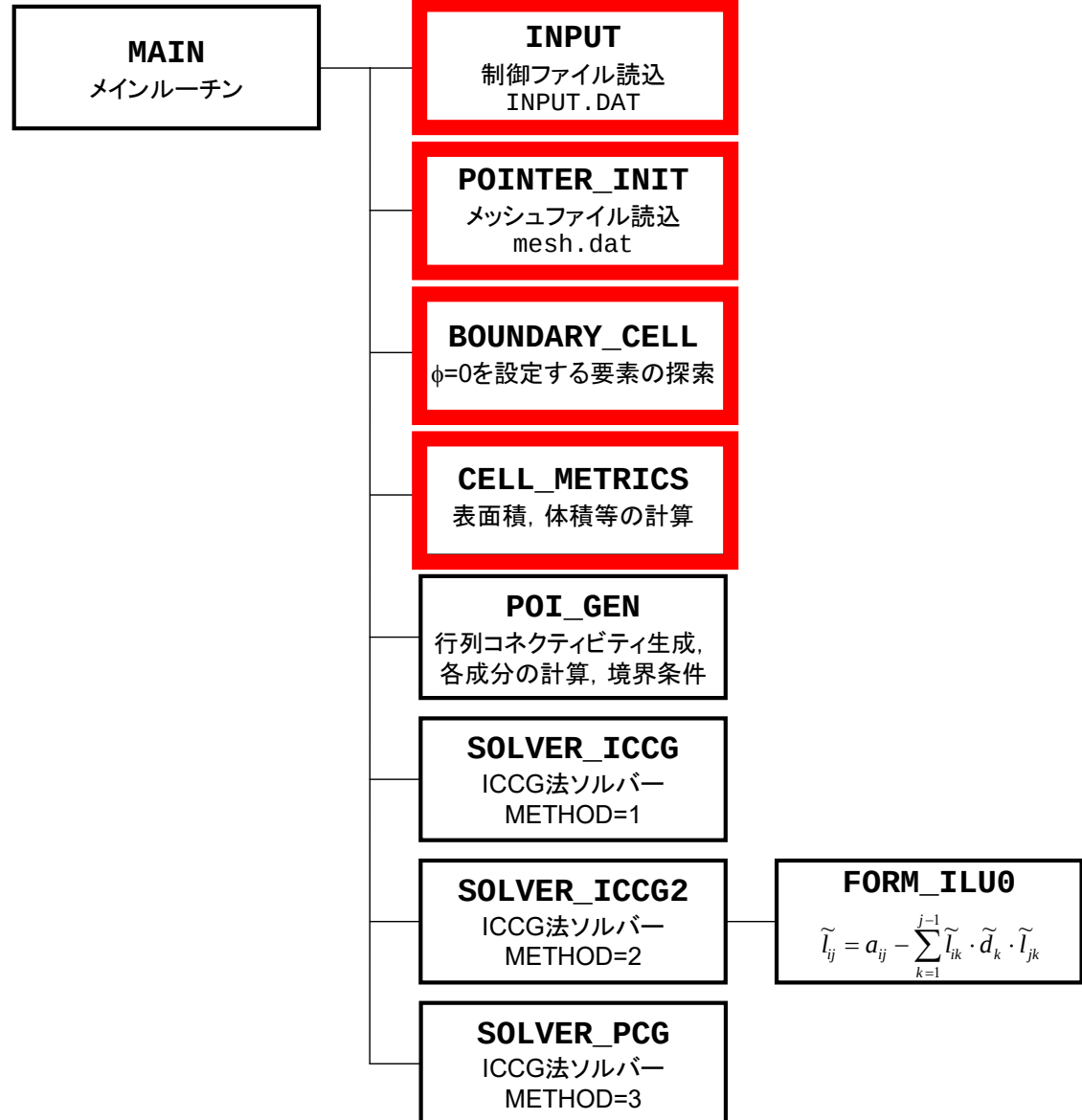
```
call INPUT
call POINTER_INIT
call BOUNDARY_CELL
call CELL_METRICS
call POI_GEN
```

```
PHI= 0. d0
```

```
if (METHOD.eq. 1) call solve_ICCG (...)
if (METHOD.eq. 2) call solve_ICCG2 (...)
if (METHOD.eq. 3) call solve_PCG (...)
```

```
call OUTUCD
```

```
stop
end
```



input:「INPUT.DAT」の読み込み

```
!C
!C***
!C*** INPUT
!C***
!C
!C   INPUT CONTROL DATA
!C
      subroutine INPUT
      use STRUCT
      use PCG

      implicit REAL*8 (A-H, O-Z)

      character*80 CNTFIL

!C
!C-- CNTL. file
      open (11, file='INPUT.DAT', status='unknown')
         read (11,*) NX, NY, NZ
         read (11,*) METHOD
         read (11,*) DX, DY, DZ
         read (11,*) EPSICCG
      close (11)
!C==

      return
      end
```

32 32 32

1

1.00e-00 1.00e-00 1.00e-00

1.0e-08

NX/NY/NZ

MEHOD 1-3

DX/DY/DZ

EPSICCG

pointer_init(1/3) : 「mesh.dat」の作成

```
!C
!C***
!C*** POINTER_INIT
!C***
!C
      subroutine POINTER_INIT

      use STRUCT
      use PCG
      implicit REAL*8 (A-H, O-Z)

!C
!C +-----+
!C | Generating MESH info. |
!C +-----+
!C==
      ICELTOT= NX  * NY  * NZ

      NXP1= NX + 1
      NYP1= NY + 1
      NZP1= NZ + 1

      allocate (NEIBcell(ICELTOT,6), XYZ(ICELTOT,3))
      NEIBcell= 0
```

NX, NY, NZ :

x, y, z方向要素数

NXP1, NYP1, NZP1 :

x, y, z節点数 (可視化用)

ICELTOT :

要素数 ($NX \times NY \times NZ$)

NEIBcell(ICELTOT, 6) :

隣接要素

XYZ(ICELTOT, 3) :

要素座標

**allocate/deallocate
for C**

pointer_init(2/3) : 「mesh.dat」の作成

```

do k= 1, NZ
  do j= 1, NY
    do i= 1, NX
      icel= (k-1)*NX*NY + (j-1)*NX + i
      NEIBcell(icel, 1)= icel - 1
      NEIBcell(icel, 2)= icel + 1
      NEIBcell(icel, 3)= icel - NX
      NEIBcell(icel, 4)= icel + NX
      NEIBcell(icel, 5)= icel - NX*NY
      NEIBcell(icel, 6)= icel + NX*NY
      if (i. eq. 1) NEIBcell(icel, 1)= 0
      if (i. eq. NX) NEIBcell(icel, 2)= 0
      if (j. eq. 1) NEIBcell(icel, 3)= 0
      if (j. eq. NY) NEIBcell(icel, 4)= 0
      if (k. eq. 1) NEIBcell(icel, 5)= 0
      if (k. eq. NZ) NEIBcell(icel, 6)= 0

      XYZ(icel, 1)= i
      XYZ(icel, 2)= j
      XYZ(icel, 3)= k

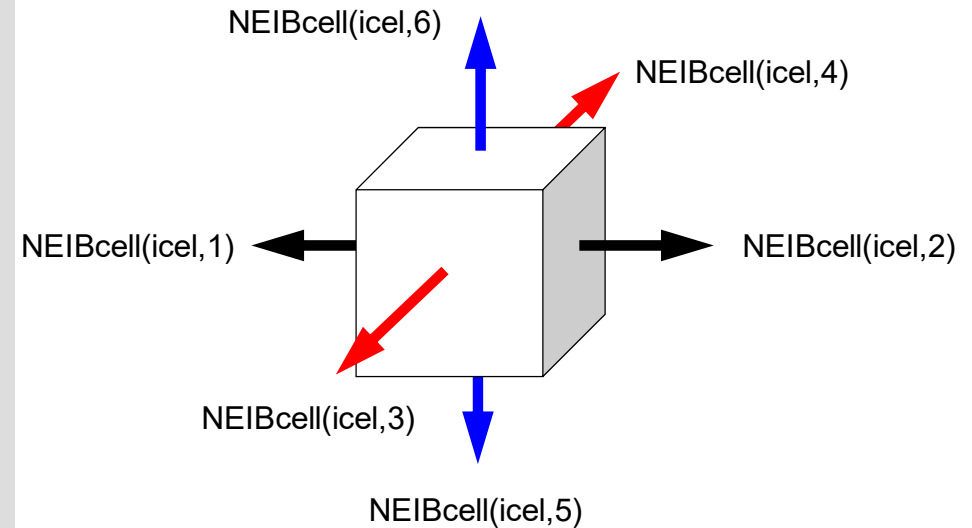
    enddo
  enddo
enddo
!C===

```

```

i= XYZ(icel,1)
j= XYZ(icel,2), k= XYZ(icel,3)
icel= (k-1)*NX*NY + (j-1)*NX + i

```



```

NEIBcell(icel,1)= icel - 1
NEIBcell(icel,2)= icel + 1
NEIBcell(icel,3)= icel - NX
NEIBcell(icel,4)= icel + NX
NEIBcell(icel,5)= icel - NX*NY
NEIBcell(icel,6)= icel + NX*NY

```

pointer_init(3/3)

```
!C
!C +-----+
!C | Parameters |
!C +-----+
!C==
      if (DX.le.0.0e0) then
        DX= 1.d0 / dfloat(NX)
        DY= 1.d0 / dfloat(NY)
        DZ= 1.d0 / dfloat(NZ)
      endif

      NXP1= NX + 1
      NYP1= NY + 1
      NZP1= NZ + 1

      IBNODTOT= NXP1 * NYP1
      N        = NXP1 * NYP1 * NZP1
!C==
      return
      end
```

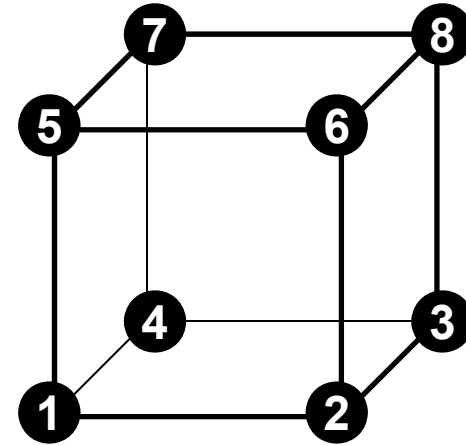
DX=0.0となっていた場合
のみ, DX, DY, DZをこのよう
に指定

pointer_init(3/3) : 節点⇒可視化用

```
!C
!C +-----+
!C | Parameters |
!C +-----+
!C==
      if (DX.le.0.0e0) then
        DX= 1.d0 / dfloat(NX)
        DY= 1.d0 / dfloat(NY)
        DZ= 1.d0 / dfloat(NZ)
      endif

      NXP1= NX + 1
      NYP1= NY + 1
      NZP1= NZ + 1

      IBNODTOT= NXP1 * NYP1
      N        = NXP1 * NYP1 * NZP1
!C==
      return
      end
```



NXP1, NYP1, NZP1 :
x, y, z方向節点数

IBNODTOT :
 $NXP1 \times NYP1$

N :
節点数（可視化に使用）

boundary_cell

```

!C
!C***
!C*** BOUNDARY_CELL
!C***
!C
      subroutine BOUNDARY_CELL
      use STRUCT

      implicit REAL*8 (A-H, O-Z)

!C
!C +-----+
!C | Zmax |
!C +-----+
!C==
      IFACTOT= NX * NY
      ZmaxCELtot= IFACTOT

      allocate (ZmaxCEL(ZmaxCELtot))

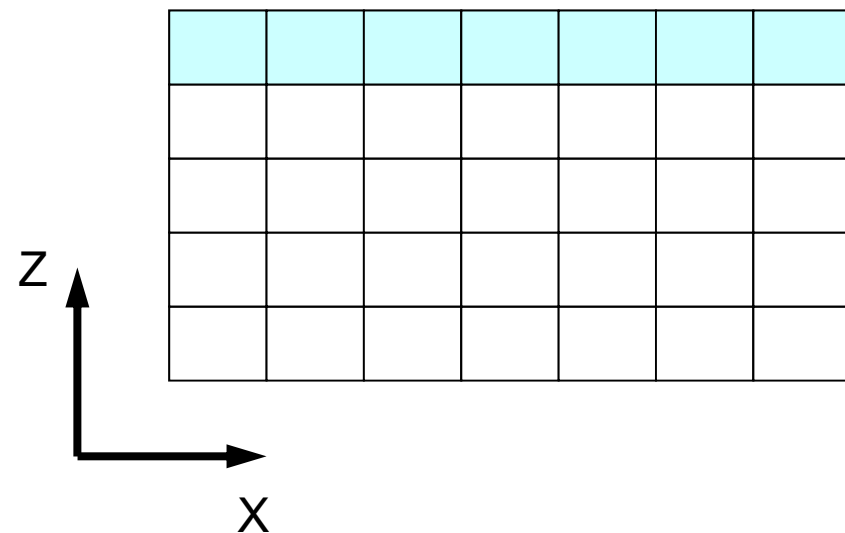
      icou= 0
      k  = NZ
      do j= 1, NY
      do i= 1, NX
          icel= (k-1)*IFACTOT + (j-1)*NX + i
          icou= icou + 1
          ZmaxCEL(icou)= icel
      enddo
      enddo
!C==
      return
      end

```

$Z=Z_{\max}$ の要素の定義

総数: $Z_{\max}CEL_{tot}$

要素番号: $Z_{\max}CEL(:)$



cell_metrics

```

!C
!C***
!C*** CELL_METRICS
!C***
!C
      subroutine CELL_METRICS
      use STRUCT
      use PCG
      implicit REAL*8 (A-H, O-Z)

!C
!C-- ALLOCATE
      allocate (VOLCEL(ICELTOT))
      allocate ( RVC(ICELTOT))

!C
!C-- VOLUME, AREA, PROJECTION etc.
      XAREA= DY * DZ
      YAREA= DX * DZ
      ZAREA= DX * DY

      RDX= 1. d0 / DX
      RDY= 1. d0 / DY
      RDZ= 1. d0 / DZ

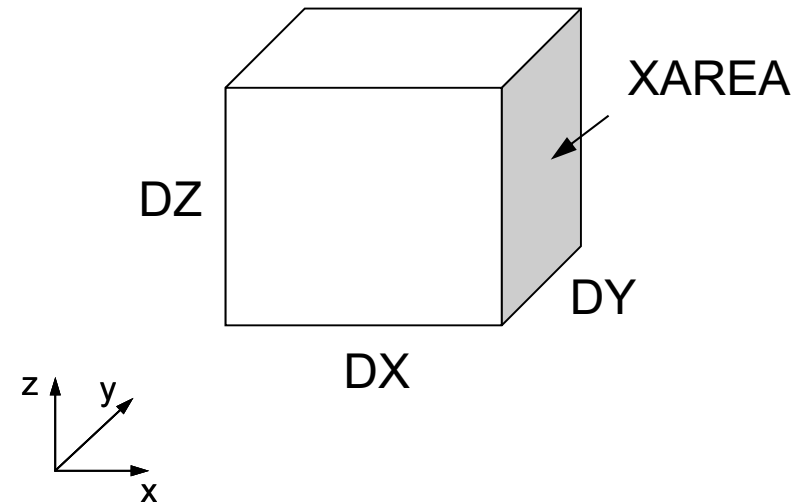
      RDX2= 1. d0 / (DX**2)
      RDY2= 1. d0 / (DY**2)
      RDZ2= 1. d0 / (DZ**2)
      R2DX= 1. d0 / (0. 50d0*DX)
      R2DY= 1. d0 / (0. 50d0*DY)
      R2DZ= 1. d0 / (0. 50d0*DZ)

      V0= DX * DY * DZ
      RV0= 1. d0/V0
      VOLCEL= V0
      RVC = RV0

      return
      end

```

計算に必要な諸パラメータ



$$XAREA = \Delta Y \times \Delta Z, \quad YAREA = \Delta Z \times \Delta X, \\ ZAREA = \Delta X \times \Delta Y$$

$$RDX = \frac{1}{\Delta X}, \quad RDY = \frac{1}{\Delta Y}, \quad RDZ = \frac{1}{\Delta Z}$$

cell_metrics

```

!C
!C***
!C*** CELL_METRICS
!C***
!C
      subroutine CELL_METRICS
      use STRUCT
      use PCG
      implicit REAL*8 (A-H, O-Z)

!C
!C-- ALLOCATE
      allocate (VOLCEL(ICELTOT))
      allocate ( RVC(ICELTOT))

!C
!C-- VOLUME, AREA, PROJECTION etc.
      XAREA= DY * DZ
      YAREA= DX * DZ
      ZAREA= DX * DY

      RDX= 1. d0 / DX
      RDY= 1. d0 / DY
      RDZ= 1. d0 / DZ

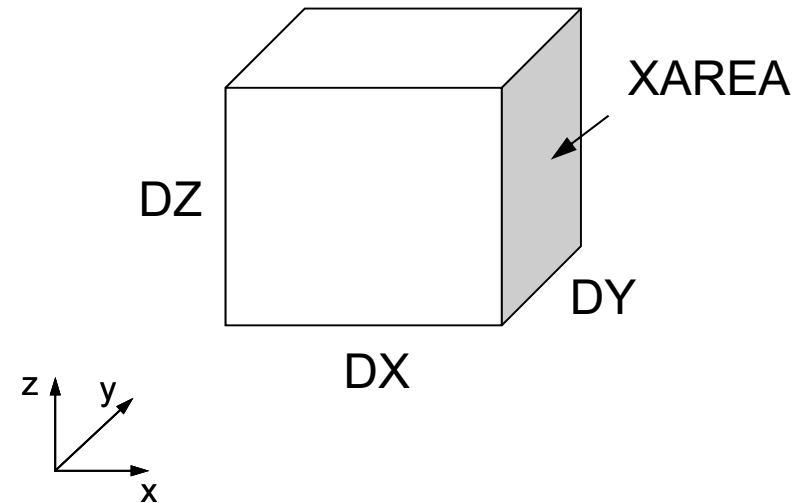
      RDX2= 1. d0 / (DX**2)
      RDY2= 1. d0 / (DY**2)
      RDZ2= 1. d0 / (DZ**2)
      R2DX= 1. d0 / (0.5d0*DX)
      R2DY= 1. d0 / (0.5d0*DY)
      R2DZ= 1. d0 / (0.5d0*DZ)

      V0= DX * DY * DZ
      RV0= 1. d0/V0
      VOLCEL= V0
      RVC = RV0

      return
      end

```

計算に必要な諸パラメータ



$$RDX2 = \frac{1}{\Delta X^2}, \quad RDY2 = \frac{1}{\Delta Y^2}, \quad RDZ2 = \frac{1}{\Delta Z^2}$$

$$R2DX = \frac{1}{0.5 \times \Delta X}, \quad R2DY = \frac{1}{0.5 \times \Delta Y},$$

$$R2DZ = \frac{1}{0.5 \times \Delta Z}$$

cell_metrics

```

!C
!C***
!C*** CELL_METRICS
!C***
!C
      subroutine CELL_METRICS
      use STRUCT
      use PCG
      implicit REAL*8 (A-H, O-Z)

!C
!C-- ALLOCATE
      allocate (VOLCEL(ICELTOT))
      allocate ( RVC(ICELTOT))

!C
!C-- VOLUME, AREA, PROJECTION etc.
      XAREA= DY * DZ
      YAREA= DX * DZ
      ZAREA= DX * DY

      RDX= 1. d0 / DX
      RDY= 1. d0 / DY
      RDZ= 1. d0 / DZ

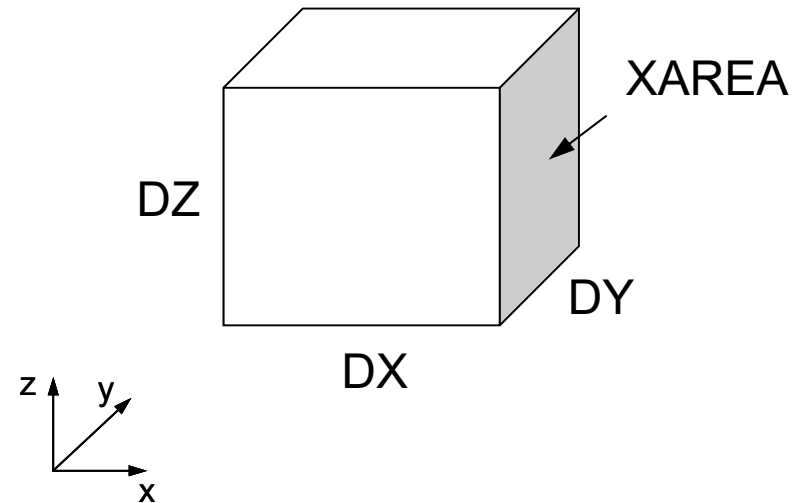
      RDX2= 1. d0 / (DX**2)
      RDY2= 1. d0 / (DY**2)
      RDZ2= 1. d0 / (DZ**2)
      R2DX= 1. d0 / (0. 50d0*DX)
      R2DY= 1. d0 / (0. 50d0*DY)
      R2DZ= 1. d0 / (0. 50d0*DZ)

      V0= DX * DY * DZ
      RV0= 1. d0/V0
      VOLCEL= V0
      RVC = RV0

      return
      end

```

計算に必要な諸パラメータ



$$VOLCEL = V0 = \Delta X \times \Delta Y \times \Delta Z$$

$$RV0 = RVC = \frac{1}{VOLCEL}$$

プログラムの構成

```
program MAIN
```

```
use STRUCT
use PCG
use solver_ICCG
use solver_ICCG2
use solver_PCG
```

```
implicit REAL*8 (A-H, O-Z)
```

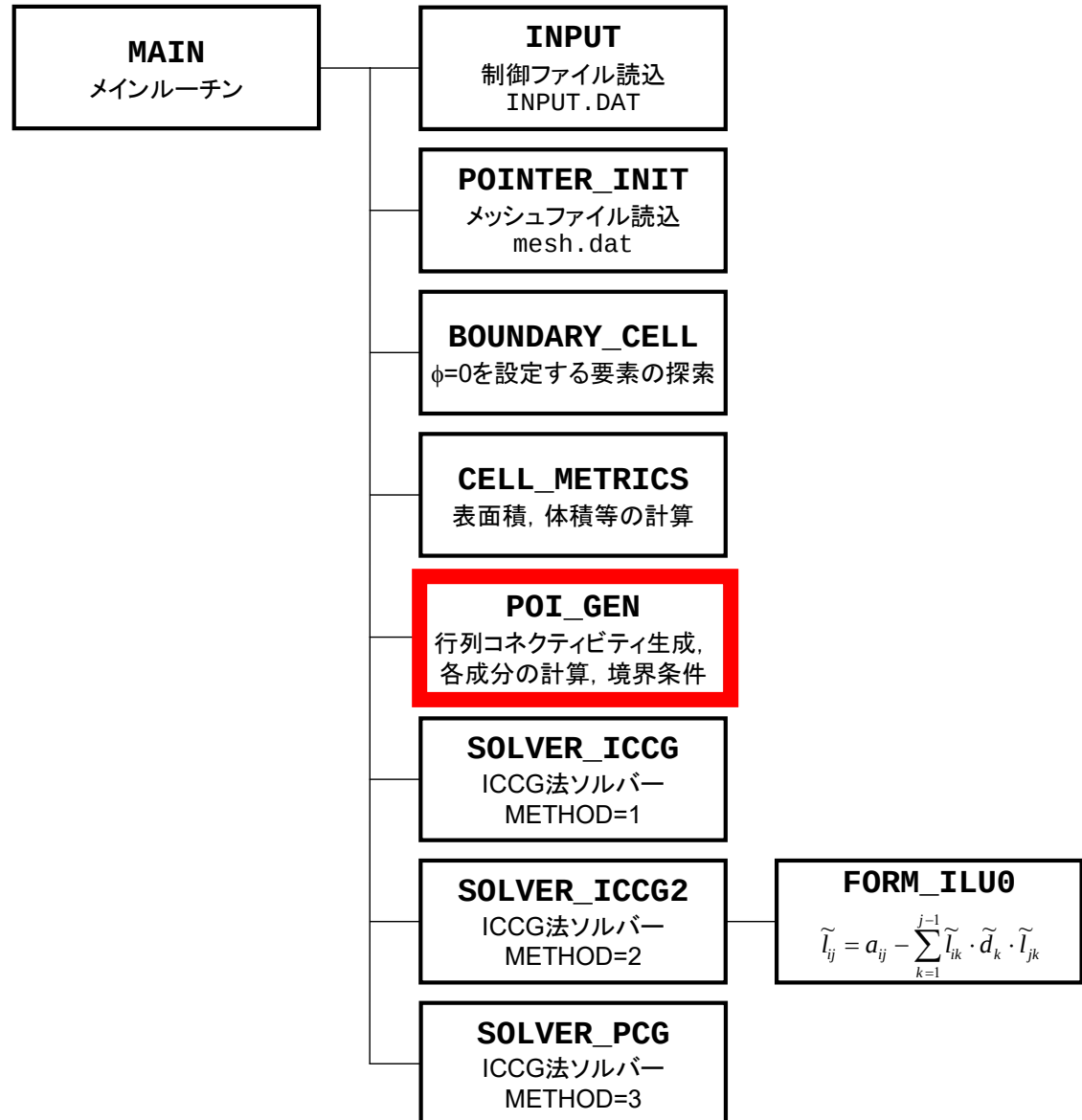
```
call INPUT
call POINTER_INIT
call BOUNDARY_CELL
call CELL_METRICS
call POI_GEN
```

```
PHI= 0. d0
```

```
if (METHOD.eq. 1) call solve_ICCG (...)
if (METHOD.eq. 2) call solve_ICCG2 (...)
if (METHOD.eq. 3) call solve_PCG (...)
```

```
call OUTUCD
```

```
stop
end
```



poi_gen(1/7)

```
subroutine POI_GEN  
  
  use STRUCT  
  use PCG  
  
  implicit REAL*8 (A-H, O-Z)  
  
!C  
!C-- INIT.  
  nn = ICELTOT  
  
  NU= 6  
  NL= 6  
  
  allocate (BFORCE(nn), D(nn), PHI(nn))  
  allocate (INL(nn), INU(nn), IAL(NL, nn), IAU(NU, nn))  
  
  PHI= 0. d0  
  D= 0. d0  
  
  INL= 0  
  INU= 0  
  IAL= 0  
  IAU= 0
```

配列の宣言

配列・変数名	型	内 容
D(N)	R	対角成分, (N:全メッシュ数=ICELTOT)
BFORCE(N)	R	右辺ベクトル
PHI(N)	R	未知数ベクトル
indexL(0:N)	I	各行の非零下三角成分数(CRS)
indexU(0:N)	I	各行の非零上三角成分数(CRS)
NPL	I	非零下三角成分総数(CRS)
NPU	I	非零上三角成分総数(CRS)
itemL(NPL)	I	非零下三角成分(列番号)(CRS)
itemU(NPU)	I	非零上三角成分(列番号)(CRS)
AL(NPL)	R	非零下三角成分(係数)(CRS)
AU(NPL)	R	非零上三角成分(係数)(CRS)

配列・変数名	型	内 容
NL,NU	I	各行の非零上下三角成分の最大数 (ここでは6)
INL(N)	I	各行の非零下三角成分数
INU(N)	I	各行の非零上三角成分数
IAL(NL,N)	I	各行の非零下三角成分に対応する列番号
IAU(NU,N)	I	各行の非零上三角成分に対応する列番号

```

!C
!C +-----+
!C | CONNECTIVITY |
!C +-----+
!C==
do icel= 1, ICELTOT
  icN1= NEIBcell(icel, 1)
  icN2= NEIBcell(icel, 2)
  icN3= NEIBcell(icel, 3)
  icN4= NEIBcell(icel, 4)
  icN5= NEIBcell(icel, 5)
  icN6= NEIBcell(icel, 6)

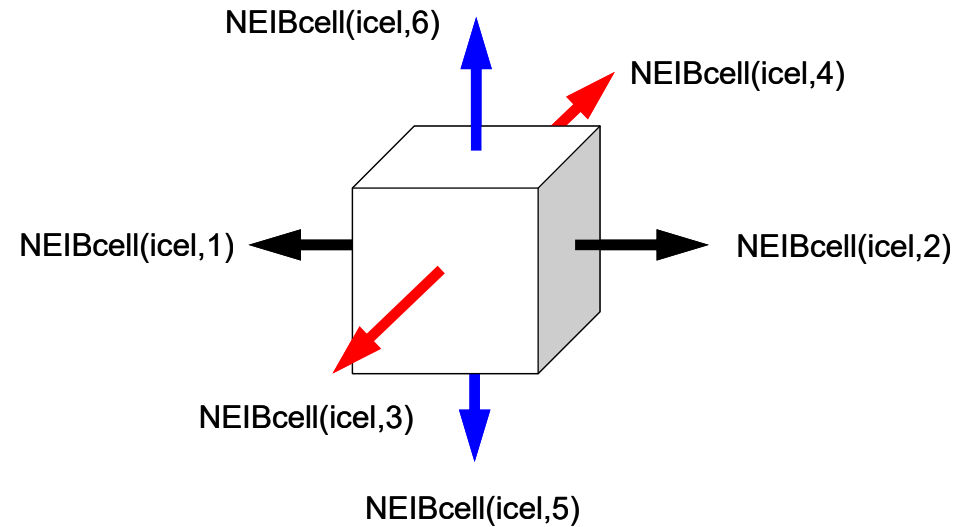
  icouG= 0
  if (icN5.ne.0) then
    icou= INL(icel) + 1
    IAL(icou, icel)= icN5
    INL(      icel)= icou
  endif

  if (icN3.ne.0) then
    icou= INL(icel) + 1
    IAL(icou, icel)= icN3
    INL(      icel)= icou
  endif

  if (icN1.ne.0) then
    icou= INL(icel) + 1
    IAL(icou, icel)= icN1
    INL(      icel)= icou
  endif

```

poi_gen(2/7)



下三角成分

$NEIBcell(icel,5) = icel - NX * NY$
 $NEIBcell(icel,3) = icel - NX$
 $NEIBcell(icel,1) = icel - 1$

```

if (icN2.ne.0) then
  icou= INU(icel) + 1
  IAU(icou, icel)= icN2
  INU(      icel)= icou
endif

```

```

if (icN4.ne.0) then
  icou= INU(icel) + 1
  IAU(icou, icel)= icN4
  INU(      icel)= icou
endif

```

```

if (icN6.ne.0) then
  icou= INU(icel) + 1
  IAU(icou, icel)= icN6
  INU(      icel)= icou
endif

```

```

enddo

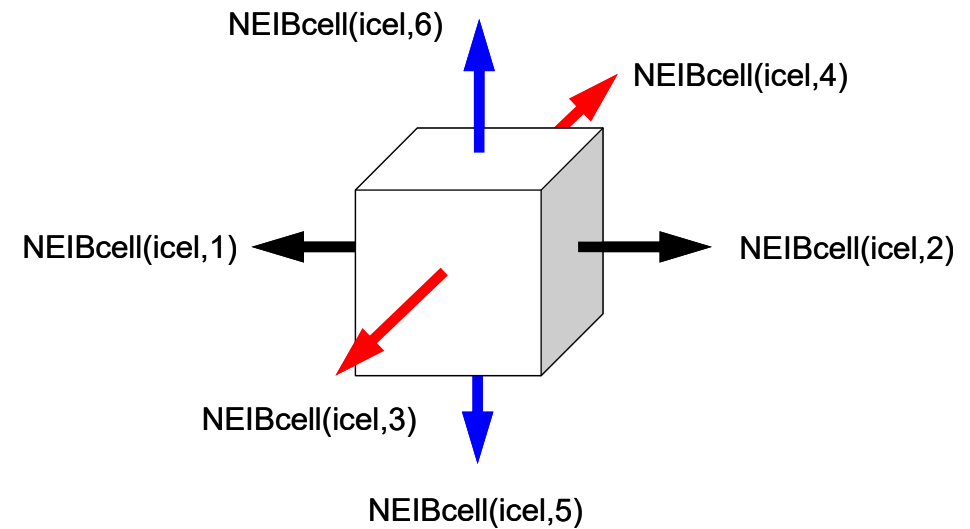
```

```

!C===

```

poi_gen(3/7)



上三角成分

NEIBcell(icel,2)= icel + 1

NEIBcell(icel,4)= icel + NX

NEIBcell(icel,6)= icel + NX*NY

```

!C
!C--- 1D array

allocate (indexL(0:nn), indexU(0:nn))
indexL= 0
indexU= 0

do icel= 1, ICELTOT
  indexL(icel)= INL(icel)
  indexU(icel)= INU(icel)
enddo

do icel= 1, ICELTOT
  indexL(icel)= indexL(icel) + indexL(icel-1)
  indexU(icel)= indexU(icel) + indexU(icel-1)
enddo

NPL= indexL(ICELTOT)
NPU= indexU(ICELTOT)

allocate (itemL(NPL), AL(NPL))
allocate (itemU(NPU), AU(NPU))

itemL= 0
itemU= 0

      AL= 0.d0
      AU= 0.d0
!C===

```

poi_gen(4/7)

配列の宣言

配列・変数名	型	内 容
D(N)	R	対角成分, (N:全メッシュ数=ICELTOT)
BFORCE(N)	R	右辺ベクトル
PHI(N)	R	未知数ベクトル
indexL(0:N)	I	各行の非零下三角成分数(CRS)
indexU(0:N)	I	各行の非零上三角成分数(CRS)
NPL	I	非零下三角成分総数(CRS)
NPU	I	非零上三角成分総数(CRS)
itemL(NPL)	I	非零下三角成分(列番号)(CRS)
itemU(NPU)	I	非零上三角成分(列番号)(CRS)
AL(NPL)	R	非零下三角成分(係数)(CRS)
AU(NPL)	R	非零上三角成分(係数)(CRS)

```

do i= 1, N

  VAL= D(i)*p(i)

  do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    VAL= VAL + AL(k)*p(itemL(k))
  enddo

  do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
    VAL= VAL + AU(k)*p(itemU(k))
  enddo

  q(i)= VAL

enddo

```

有限体積法

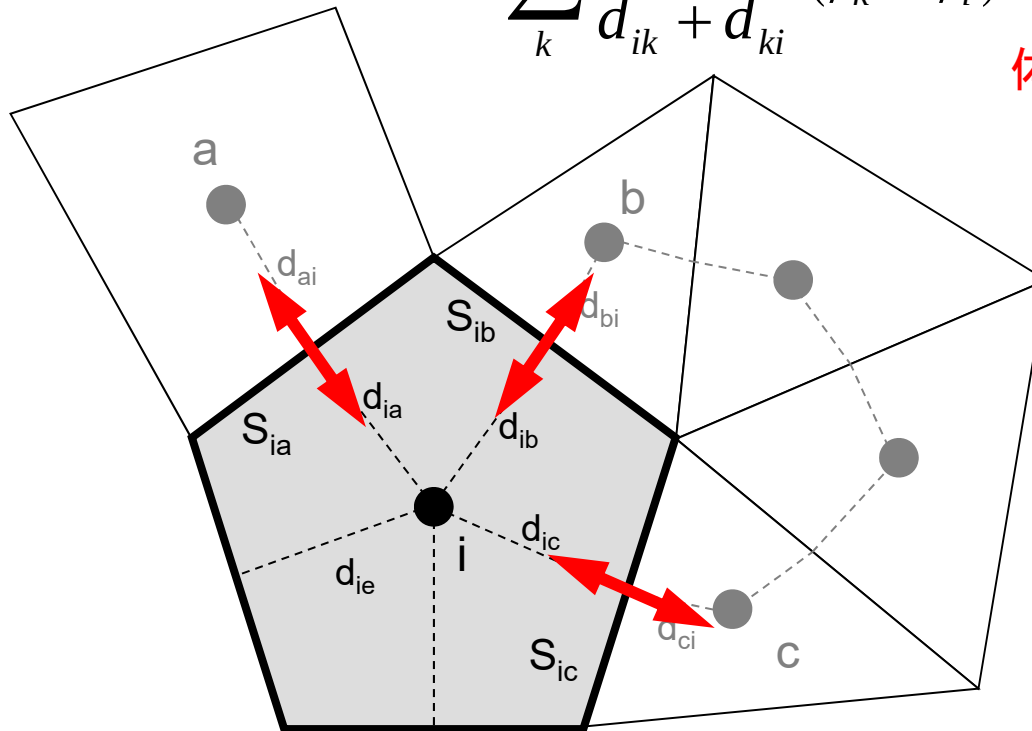
Finite Volume Method (FVM)

面を通過するフラックスの保存に着目

隣接要素との拡散

$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

体積フラックス



V_i : 要素体積

S : 表面面積

d_{ij} : 要素中心から表面までの距離

Q : 体積フラックス

全体マトリクスの生成

要素iに関する釣り合い

$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

$$-\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k + \sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_i = +V_i \dot{Q}_i$$

$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] = -V_i \dot{Q}_i$$

D(対角成分)

AL, AU
(非対角成分)

BFORCE
(右辺)

```

!C
!C +-----+
!C | INTERIOR & NEUMANN BOUNDARY CELLS |
!C +-----+
!C==
      icouG= 0
      do icel= 1, ICELTOT
        icN1= NEIBcell(icel,1)
        icN2= NEIBcell(icel,2)
        icN3= NEIBcell(icel,3)
        icN4= NEIBcell(icel,4)
        icN5= NEIBcell(icel,5)
        icN6= NEIBcell(icel,6)
        VOL0= VOLCEL(icel)
        icou= 0
        if (icN5.ne.0) then
          coef =RDZ * ZAREA
          D(icel)= D(icel) - coef
          icou= icou + 1
          k   = icou + indexL(icel-1)
          itemL(k)= icN5
          AL(k)= coef
        endif

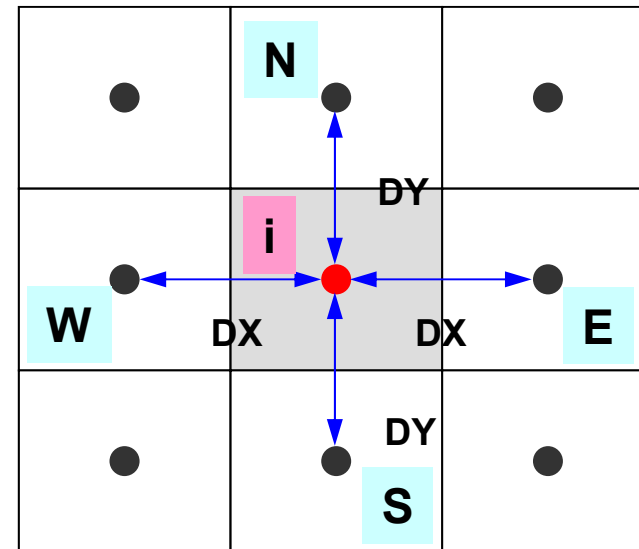
        if (icN3.ne.0) then
          coef =RDY * YAREA
          D(icel)= D(icel) - coef
          icou= icou + 1
          k   = icou + indexL(icel-1)
          itemL(k)= icN3
          AL(k)= coef
        endif

        if (icN1.ne.0) then
          coef =RDX * XAREA
          D(icel)= D(icel) - coef
          icou= icou + 1
          k   = icou + indexL(icel-1)
          itemL(k)= icN1
          AL(k)= coef
        endif
      enddo

```

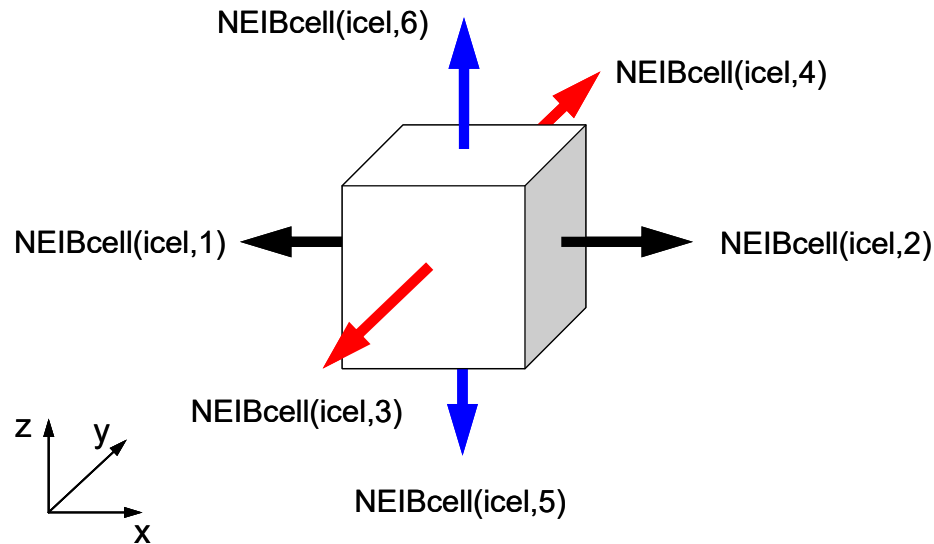
poi_gen(5/7)

係数の計算(境界面以外)



$$\begin{aligned}
 & \frac{\phi_E - \phi_i}{\Delta x} \Delta y + \frac{\phi_W - \phi_i}{\Delta x} \Delta y + \\
 & \frac{\phi_N - \phi_i}{\Delta y} \Delta x + \frac{\phi_S - \phi_i}{\Delta y} \Delta x + f_c \Delta x \Delta y = 0
 \end{aligned}$$

三次元では・・・



```

if (icN5.ne.0) then
  coef = RDZ * ZAREA
  D(icel)= D(icel) - coef

  icou= icou + 1
  k= icou + indexL(icel-1)

  itemL(k)= icN5
  AL(k)= coef
endif
  
```

$$\begin{aligned}
 & \frac{\phi_{neib(icel,1)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z + \frac{\phi_{neib(icel,2)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z + \\
 & \frac{\phi_{neib(icel,3)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x + \frac{\phi_{neib(icel,4)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x + \\
 & \boxed{\frac{\phi_{neib(icel,5)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y} + \frac{\phi_{neib(icel,6)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y + f_{icel} \Delta x \Delta y \Delta z = 0
 \end{aligned}$$

poi_gen(6/7)

```

icou= 0
if (icN2.ne.0) then
  coef = RDX * XAREA
  D(icel)= D(icel) - coef
  icou= icou + 1
  k = icou + indexU(icel-1)
  itemU(k)= icN2
  AU(k)= coef
endif

if (icN4.ne.0) then
  coef = RDY * YAREA
  D(icel)= D(icel) - coef
  icou= icou + 1
  k = icou + indexU(icel-1)
  itemU(k)= icN4
  AU(k)= coef
endif

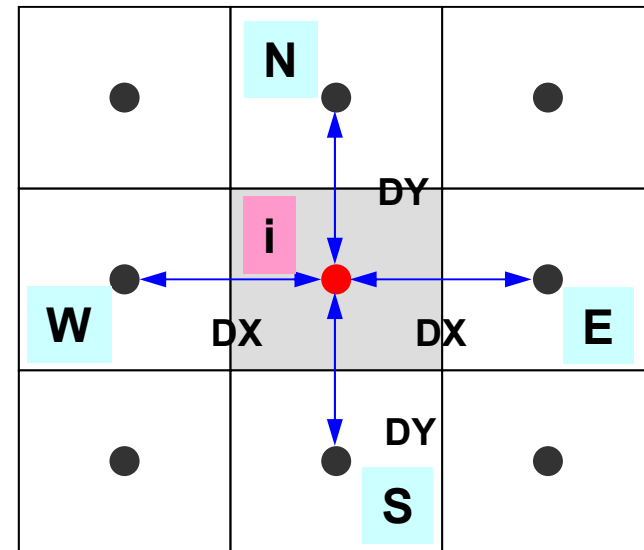
if (icN6.ne.0) then
  coef = RDZ * ZAREA
  D(icel)= D(icel) - coef
  icou= icou + 1
  k = icou + indexU(icel-1)
  itemU(k)= icN6
  AU(k)= coef
endif

ii= XYZ(icel,1)
jj= XYZ(icel,2)
kk= XYZ(icel,3)

BFORCE(icel)= -dfloat(ii+jj+kk) * VOL0
enddo
!C===

```

係数の計算(境界面以外)



$$\begin{aligned}
 & \frac{\phi_E - \phi_i}{\Delta x} \Delta y + \frac{\phi_W - \phi_i}{\Delta x} \Delta y + \\
 & \frac{\phi_N - \phi_i}{\Delta y} \Delta x + \frac{\phi_S - \phi_i}{\Delta y} \Delta x + f_c \Delta x \Delta y = 0
 \end{aligned}$$

poi_gen(6/7)

体積発熱

$$f = dfloat(i_0 + j_0 + k_0)$$

$$i_0 = XYZ(icel, 1),$$

$$j_0 = XYZ(icel, 2),$$

$$k_0 = XYZ(icel, 3)$$

$XYZ(icel, k)$ ($k=1,2,3$) は X, Y, Z 方向の差分格子のインデックス

各メッシュが X, Y, Z 方向の何番目にあるかを示している。

```

icou= 0
if (icN2.ne.0) then
  coef = RDX * XAREA
  D(icel)= D(icel) - coef
  icou= icou + 1
  k = icou + indexU(icel-1)
  itemU(k)= icN2
  AU(k)= coef
endif

if (icN4.ne.0) then
  coef = RDY * YAREA
  D(icel)= D(icel) - coef
  icou= icou + 1
  k = icou + indexU(icel-1)
  itemU(k)= icN4
  AU(k)= coef
endif

if (icN6.ne.0) then
  coef = RDZ * ZAREA
  D(icel)= D(icel) - coef
  icou= icou + 1
  k = icou + indexU(icel-1)
  itemU(k)= icN6
  AU(k)= coef
endif

ii= XYZ(icel, 1)
jj= XYZ(icel, 2)
kk= XYZ(icel, 3)

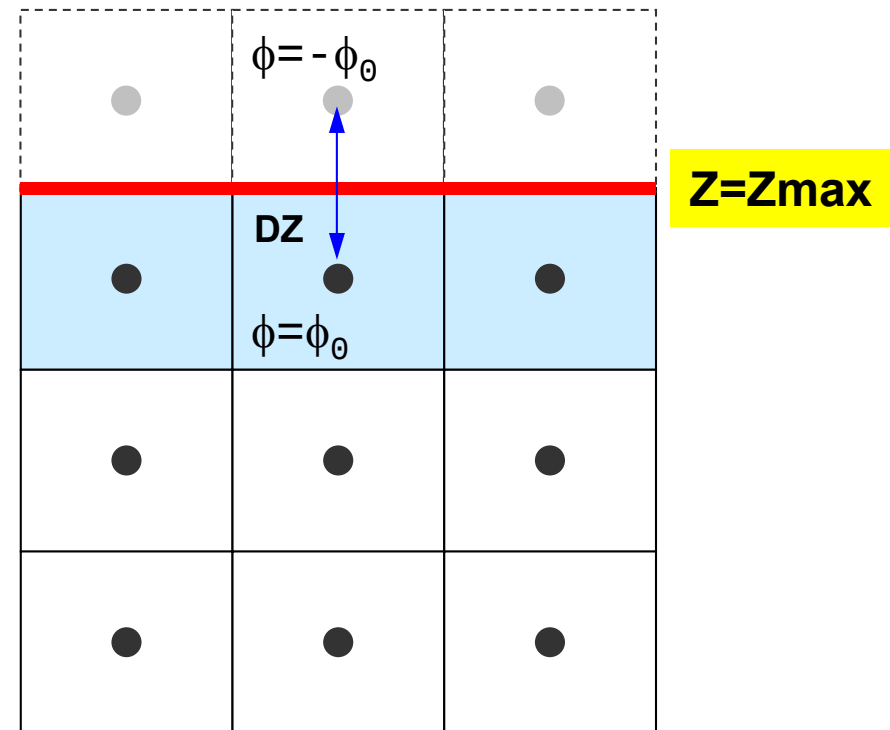
BFORCE(icel)= -dfloat(ii+jj+kk) * VOL0
enddo
!C===

```

poi_gen(7/7)

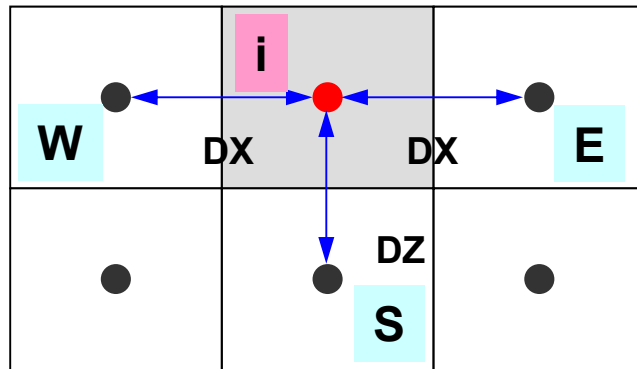
係数の計算(境界面)

```
!C
!C +-----+
!C | DIRICHLET BOUNDARY CELLS |
!C +-----+
!C TOP SURFACE
!C===
  do ib= 1, ZmaxCELtot
    icel= ZmaxCEL(ib)
    coef= 2. d0 * RDZ * ZAREA
    D(icel)= D(icel) - coef
  enddo
!C===
  return
end
```



境界面の外側に、大きさが同じで、値が $\phi = -\phi_0$ となるような要素があると仮定(境界面で丁度 $\phi = 0$ となる): 一次近似

ディリクレ条件



$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

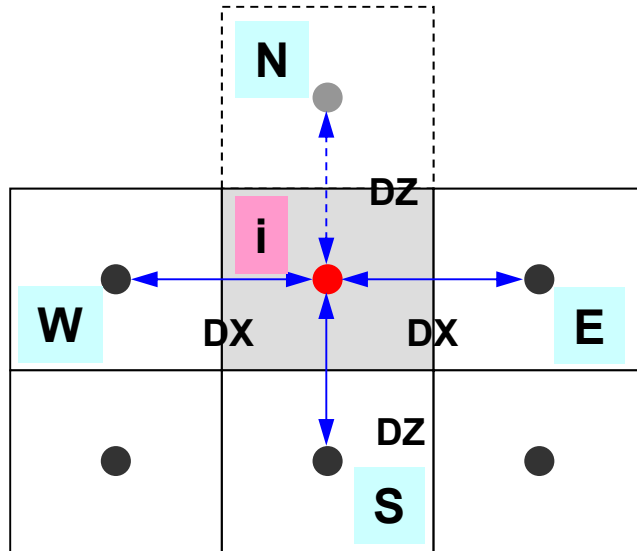
$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] = -V_i \dot{Q}_i$$

D(対角成分)

AL, AU
(非対角成分)

BFORCE
(右辺)

ディリクレ条件



$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] = -V_i \dot{Q}_i$$

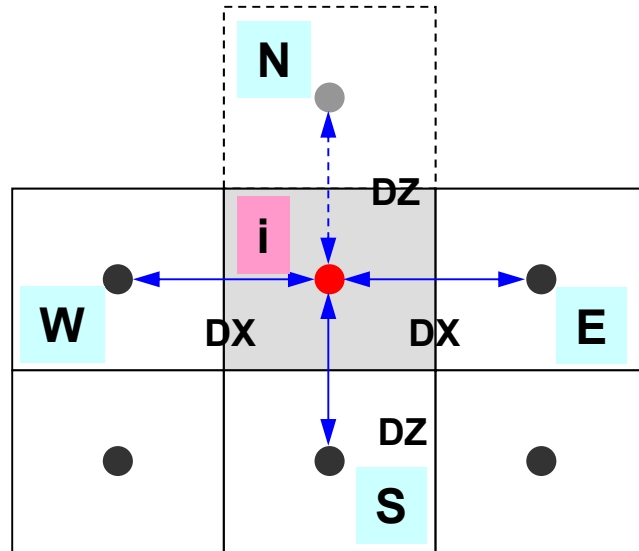
D(対角成分)

AL, AU
(非対角成分)

BFORCE
(右辺)

$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] + \frac{\phi_N - \phi_i}{\Delta z} \Delta x \Delta y = -V_i \dot{Q}_i, \quad \phi_N = -\phi_i$$

ディリクレ条件



$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] = -V_i \dot{Q}_i$$

D(対角成分)

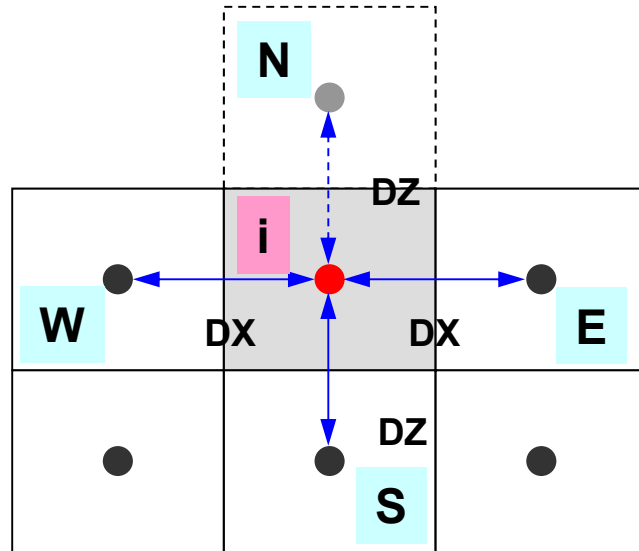
AL, AU
(非対角成分)

BFORCE
(右辺)

$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] + \frac{\phi_N - \phi_i}{\Delta z} \Delta x \Delta y = -V_i \dot{Q}_i, \quad \phi_N = -\phi_i$$

$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] + \frac{-\phi_i - \phi_i}{\Delta z} \Delta x \Delta y = -V_i \dot{Q}_i$$

ディリクレ条件



$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] = -V_i \dot{Q}_i$$

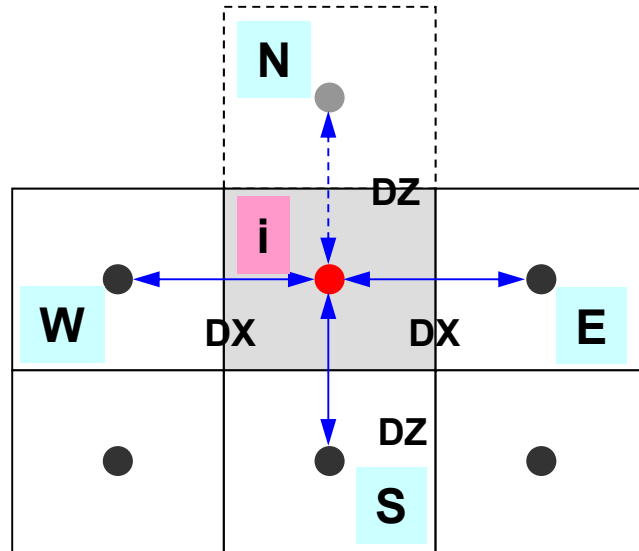
D(対角成分)

AL, AU
(非対角成分)

BFORCE
(右辺)

$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] + \frac{-2\phi_i}{\Delta z} \Delta x \Delta y = +V_i \dot{Q}_i$$

ディリクレ条件



$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] = -V_i \dot{Q}_i$$

D(対角成分)

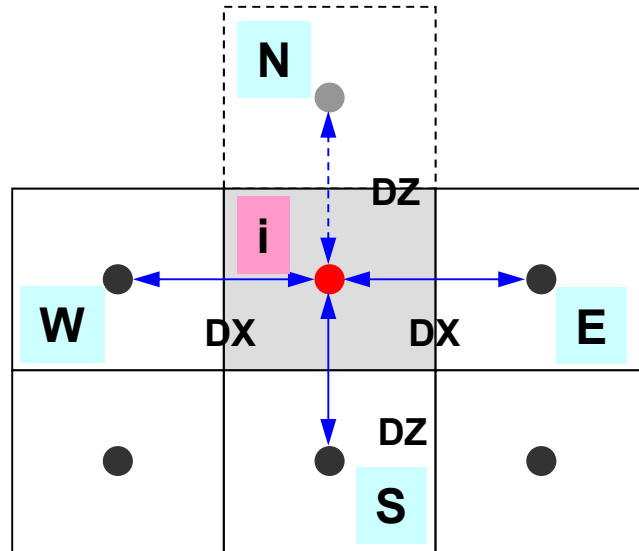
AL, AU
(非対角成分)

BFORCE
(右辺)

$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] + \frac{-2\phi_i}{\Delta z} \Delta x \Delta y = +V_i \dot{Q}_i$$

$$\left[-\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} - \frac{2}{\Delta z} \Delta x \Delta y \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] + = -V_i \dot{Q}_i$$

ディリクレ条件



$$\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} (\phi_k - \phi_i) + V_i \dot{Q}_i = 0$$

$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] = -V_i \dot{Q}_i$$

D(対角成分)

AL, AU
(非対角成分)

BFORCE
(右辺)

$$-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right]$$

```
do ib= 1, ZmaxCELtot
  icel= ZmaxCEL(ib)
  coef= 2. d0 * RDZ * ZAREA
  D(icel)= D(icel) - coef
enddo
```

$$\left[-\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} - \frac{2}{\Delta z} \Delta x \Delta y \right] \phi_i + \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{d_{ik} + d_{ki}} \phi_k \right] + = -V_i \dot{Q}_i$$

プログラムの構成

```
program MAIN
```

```
use STRUCT
use PCG
use solver_ICCG
use solver_ICCG2
use solver_PCG
```

```
implicit REAL*8 (A-H, O-Z)
```

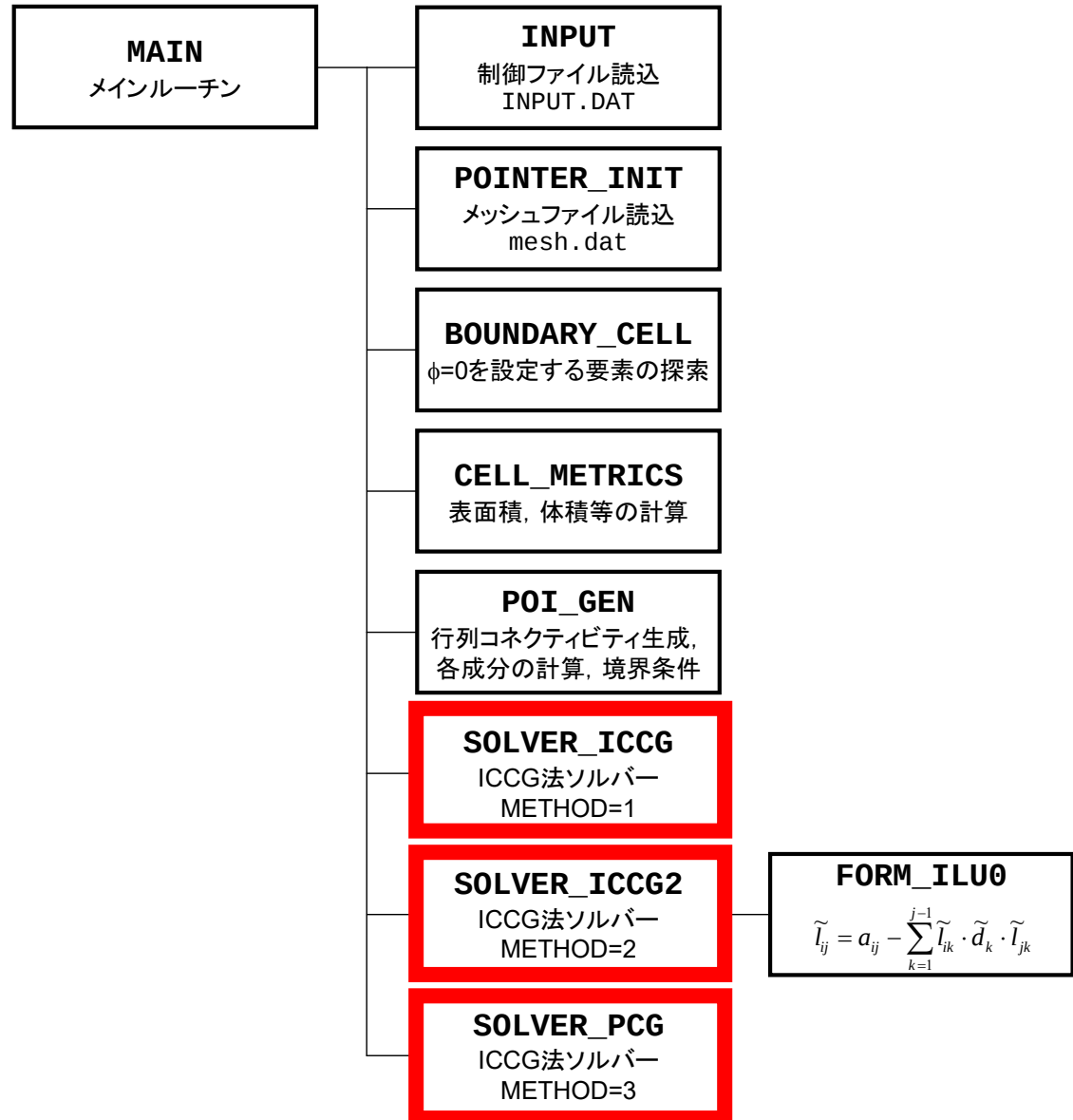
```
call INPUT
call POINTER_INIT
call BOUNDARY_CELL
call CELL_METRICS
call POI_GEN
```

```
PHI= 0. d0
```

```
if (METHOD.eq. 1) call solve_ICCG (...)
if (METHOD.eq. 2) call solve_ICCG2 (...)
if (METHOD.eq. 3) call solve_PCG (...)
```

```
call OUTUCD
```

```
stop
end
```



- 背景
 - 有限体積法
 - 前処理付反復法
- **ICCG法によるポアソン方程式法ソルバーについて**
 - 実行方法
 - データ構造
 - **プログラムの説明**
 - 初期化
 - 係数マトリクス生成
 - **ICCG法**
- OpenMP

あとは線形方程式を解けば良い

- 共役勾配法 (Conjugate Gradient, CG)
- 前処理
 - 不完全コレスキー分解 (Incomplete Cholesky Factorization, IC)
 - 実は不完全「修正」コレスキー分解
- ICCG

修正コレスキー分解

- 対称行列AのLU分解
- 対称行列Aは, 対角行列Dを利用して, $[A] = [L][D][L]^T$ のような形に分解することができる。
 - この分解をLDL^T分解または修正コレスキー分解(modified Cholesky decomposition)と呼ぶ。
 - $[A] = [L][L]^T$ とするような分解法もある(コレスキー分解)

N=5の場合の例

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} & 0 \\ l_{51} & l_{52} & l_{53} & l_{54} & l_{55} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & l_{41} & l_{51} \\ 0 & l_{22} & l_{32} & l_{42} & l_{52} \\ 0 & 0 & l_{33} & l_{43} & l_{53} \\ 0 & 0 & 0 & l_{44} & l_{54} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & l_{55} \end{bmatrix}$$

修正コレスキー分解

$$\sum_{k=1}^j l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk} = a_{ij} \quad (j = 1, 2, \dots, i-1)$$

$$\sum_{k=1}^i l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{ik} = a_{ii}$$

ここで $l_{ii} \cdot d_i = 1$ とすると以下が導かれる

$$i = 1, 2, \dots, n$$

$$j = 1, 2, \dots, i-1$$

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk}$$

$$d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}$$

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} & 0 \\ l_{51} & l_{52} & l_{53} & l_{54} & l_{55} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & l_{41} & l_{51} \\ 0 & l_{22} & l_{32} & l_{42} & l_{52} \\ 0 & 0 & l_{33} & l_{43} & l_{53} \\ 0 & 0 & 0 & l_{44} & l_{54} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & l_{55} \end{bmatrix} \\
& = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} & 0 \\ l_{51} & l_{52} & l_{53} & l_{54} & l_{55} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1 \cdot l_{11} & d_1 \cdot l_{21} & d_1 \cdot l_{31} & d_1 \cdot l_{41} & d_1 \cdot l_{51} \\ 0 & d_2 \cdot l_{22} & d_2 \cdot l_{32} & d_2 \cdot l_{42} & d_2 \cdot l_{52} \\ 0 & 0 & d_3 \cdot l_{33} & d_3 \cdot l_{43} & d_3 \cdot l_{53} \\ 0 & 0 & 0 & d_4 \cdot l_{44} & d_4 \cdot l_{54} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_5 \cdot l_{55} \end{bmatrix} \\
& = \begin{bmatrix} l_{11} \cdot d_1 \cdot l_{11} & l_{11} \cdot d_1 \cdot l_{21} & l_{11} \cdot d_1 \cdot l_{31} & l_{11} \cdot d_1 \cdot l_{41} & l_{11} \cdot d_1 \cdot l_{51} \\ l_{21} \cdot d_1 \cdot l_{11} & l_{21} \cdot d_1 \cdot l_{21} + l_{22} \cdot d_2 \cdot l_{22} & l_{21} \cdot d_1 \cdot l_{31} + l_{22} \cdot d_2 \cdot l_{32} & l_{21} \cdot d_1 \cdot l_{41} + l_{22} \cdot d_2 \cdot l_{42} & l_{21} \cdot d_1 \cdot l_{51} + l_{22} \cdot d_2 \cdot l_{52} \\ l_{31} \cdot d_1 \cdot l_{11} & l_{31} \cdot d_1 \cdot l_{21} + l_{32} \cdot d_2 \cdot l_{22} & l_{31} \cdot d_1 \cdot l_{31} + l_{32} \cdot d_2 \cdot l_{32} + l_{33} \cdot d_3 \cdot l_{33} & l_{31} \cdot d_1 \cdot l_{41} + l_{32} \cdot d_2 \cdot l_{42} + l_{33} \cdot d_3 \cdot l_{43} & l_{31} \cdot d_1 \cdot l_{51} + l_{32} \cdot d_2 \cdot l_{52} + l_{33} \cdot d_3 \cdot l_{53} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} & a_{55} \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

$$\sum_{k=1}^j l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk} = a_{ij} \quad (j = 1, 2, \dots, i-1)$$

$$\sum_{k=1}^i l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{ik} = a_{ii}$$

$$\begin{aligned}
a_{ij} &= \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk} \\
&= l_{ij} \cdot d_j \cdot l_{jj} = l_{ij}
\end{aligned}$$

不完全修正コレスキー分解

$$\sum_{k=1}^j l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk} = a_{ij} \quad (j = 1, 2, \dots, i-1)$$

$$\sum_{k=1}^i l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{ik} = a_{ii}$$

ここで $l_{ii} \cdot d_i = 1$ とすると以下が導かれる

$$i = 1, 2, \dots, n$$

$$j = 1, 2, \dots, i-1$$

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk} \rightarrow \boxed{l_{ij} = a_{ij}}$$

$$d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}$$

実際には、「不完全」な分解を実施し、このような形を用いることが多い

プログラムの実行

制御データ「<\$P-L1>/run/INPUT.DAT」の作成

32 32 32	NX/NY/NZ
1	MEHOD 1:2
1.00e-00 1.00e-00 1.00e-00	DX/DY/DZ
0.10 1.0e-08	OMEGA, EPSICCG

• METHOD

– 前処理行列の作成方法: 不完全修正コレスキー分解

- METHOD=1 対角成分のみ変更
- METHOD=2 非対角成分変更 (Fill-inは無し: $a_{ij} \neq 0$ の場合のみ)
- METHOD=3 対角スケーリング (点ヤコビ)

$$\begin{cases} i = 1, 2, \dots, n \\ \left\{ \begin{array}{l} j = 1, 2, \dots, i-1 \\ l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk} \\ d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1} \end{array} \right. \end{cases}$$

不完全修正コレスキー分解

$$\sum_{k=1}^j l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk} = a_{ij} \quad (j=1,2,\dots,i-1)$$

$$\sum_{k=1}^i l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{ik} = a_{ii}$$

ここで $l_{ii} \cdot d_i = 1$ とすると以下が導かれる

$$i = 1, 2, \dots, n$$

$$j = 1, 2, \dots, i-1$$

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk} \rightarrow l_{ij} = a_{ij}$$

$$d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}$$

対角成分のみがもとの
行列と変わる

不完全修正コレスキー分解を使用した 前進後退代入

$$(M)\{z\} = (LDL^T)\{z\} = \{r\}$$

$$\{z\} = (LDL^T)^{-1}\{r\} \longrightarrow \begin{aligned} (L)\{y\} &= \{r\} \\ (DL^T)\{z\} &= \{y\} \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} d_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & d_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & d_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & l_{41} & l_{51} \\ 0 & l_{22} & l_{32} & l_{42} & l_{52} \\ 0 & 0 & l_{33} & l_{43} & l_{53} \\ 0 & 0 & 0 & l_{44} & l_{54} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & l_{55} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & l_{21}/l_{11} & l_{31}/l_{11} & l_{41}/l_{11} & l_{51}/l_{11} \\ 0 & 1 & l_{32}/l_{22} & l_{42}/l_{22} & l_{52}/l_{22} \\ 0 & 0 & 1 & l_{43}/l_{33} & l_{53}/l_{33} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & l_{54}/l_{44} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

不完全修正コレスキー分解を使用した 前進後退代入

$$(L)\{y\} = \{r\}$$

$$(DL^T)\{z\} = \{y\}$$

```
!C
!C +-----+
!C | {z}= [Minv] {r} |
!C +-----+
!C ===
      do i= 1, N
        W(i, Y)= W(i, R)
      enddo

      do i= 1, N
        WVAL= W(i, Y)
        do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
          WVAL= WVAL - AL(k) * W(itemL(k), Y)
        enddo
        W(i, Y)= WVAL * W(i, DD)
      enddo

      do i= N, 1, -1
        SW = 0.0d0
        do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
          SW= SW + AU(k) * W(itemU(k), Z)
        enddo
        W(i, Z)= W(i, Y) - W(i, DD) * SW
      enddo
!C===
```

$$W(i, DD) = 1/l_{ii} = d_{ii}$$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} & 0 \\ l_{51} & l_{52} & l_{53} & l_{54} & l_{55} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & l_{21}/l_{11} & l_{31}/l_{11} & l_{41}/l_{11} & l_{51}/l_{11} \\ 0 & 1 & l_{32}/l_{22} & l_{42}/l_{22} & l_{52}/l_{22} \\ 0 & 0 & 1 & l_{43}/l_{33} & l_{53}/l_{33} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & l_{54}/l_{44} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

不完全修正コレスキー分解を使用した 前進後退代入: 計算順序考慮

```

!C
!C +-----+
!C | {z} = [Minv] {r} |
!C +-----+
!C ==
do i= 1, N
  W(i, Z) = W(i, R)
enddo

do i= 1, N
  WVAL = W(i, Z)
  do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    WVAL = WVAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
  enddo
  W(i, Z) = WVAL * W(i, DD)
enddo

do i= N, 1, -1
  SW = 0.0d0
  do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
    SW = SW + AU(k) * W(itemU(k), Z)
  enddo
  W(i, Z) = W(i, Z) - W(i, DD) * SW
enddo
!C ==

```

$$(L)\{z\} = \{z\}$$

$$(DL^T)\{z\} = \{z\}$$

$$W(i, DD) = 1/l_{ii} = d_{ii}$$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & l_{44} & 0 \\ l_{51} & l_{52} & l_{53} & l_{54} & l_{55} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & l_{21}/l_{11} & l_{31}/l_{11} & l_{41}/l_{11} & l_{51}/l_{11} \\ 0 & 1 & l_{32}/l_{22} & l_{42}/l_{22} & l_{52}/l_{22} \\ 0 & 0 & 1 & l_{43}/l_{33} & l_{53}/l_{33} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & l_{54}/l_{44} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

solve_ICCG(1/7):METHOD=1

```
!C***
!C*** module solver_ICCG
!C***
!
      module solver_ICCG
      contains
!C
!C*** solve_ICCG
!C
      subroutine solve_ICCG                                &
      &      ( N, NPL, NPU, indexL, itemL, indexU, itemU, D, B, X, &
      &      AL, AU, EPS, ITR, IER)

      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      real(kind=8), dimension(N)      :: D
      real(kind=8), dimension(N)      :: B
      real(kind=8), dimension(N)      :: X
      real(kind=8), dimension(NPL)    :: AL
      real(kind=8), dimension(NPU)    :: AU

      integer, dimension(0:N) :: indexL, indexU
      integer, dimension(NPL) :: itemL
      integer, dimension(NPU) :: itemU
      real(kind=8), dimension(:, :), allocatable :: W

      integer, parameter :: R= 1
      integer, parameter :: Z= 2
      integer, parameter :: Q= 2
      integer, parameter :: P= 3
      integer, parameter :: DD= 4
```

変数名:

ICELTOT → **N**

BFORCE → **B**

PHI → **X**

EPSICCG → **EPS**

W(i, 1) = W(i, R) ⇒ {r}

W(i, 2) = W(i, Z) ⇒ {z}

W(i, 2) = W(i, Q) ⇒ {q}

W(i, 3) = W(i, P) ⇒ {p}

W(i, 4) = W(i, DD) ⇒ {d}

solve_ICCG(2/7):METHOD=1

```

!C
!C +-----+
!C |  INIT  |
!C +-----+
!C===
      allocate (W(N,4))

      do i= 1, N
        X(i) = 0. d0
        W(i,1)= 0. 0D0
        W(i,2)= 0. 0D0
        W(i,3)= 0. 0D0
        W(i,4)= 0. 0D0
      enddo

      do i= 1, N
        VAL= D(i)
        do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
          VAL= VAL - (AL(k)**2) * W(itemL(k), DD)
        enddo
        W(i, DD)= 1. d0/VAL
      enddo
!C===

```

不完全修正コレスキー分解
 $W(i, DD) = d_i$

$W(i, DD):$	d_i
$D(i):$	a_{ii}
$itemL(j):$	k
$AL(j):$	a_{ik}

$i = 1, 2, \dots, n$

$j = 1, 2, \dots, i-1$

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk} \rightarrow l_{ij} = a_{ij}$$

$$d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}$$

対角成分のみがもとの
行列と変わる

solve_ICCG(3/7):METHOD=1

```
!C
!C +-----+
!C | {r0} = {b} - [A] {xini} |
!C +-----+
!C===
      do i= 1, N
        VAL= D(i)*X(i)
        do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
          VAL= VAL + AL(k)*X(itemL(k))
        enddo
        do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
          VAL= VAL + AU(k)*X(itemU(k))
        enddo
        W(i, R)= B(i) - VAL
      enddo

      BNRM2= 0.0D0
      do i= 1, N
        BNRM2 = BNRM2 + B(i) **2
      enddo
!C===
```

BNRM2=|b|²
 あとで収束判定に使用

```
Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for i= 1, 2, ...
  solve [M]z(i-1)= r(i-1)
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if i=1
    p(1)= z(0)
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
  q(i)= [A]p(i)
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
  x(i)= x(i-1) +  $\alpha_i p^{(i)}$ 
  r(i)= r(i-1) -  $\alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence |r|
end
```

solve_ICCG(4/7):METHOD=1

```

!C
!C***** ITERATION
      ITR= N

      do L= 1, ITR

!C
!C +-----+
!C | {z}= [Minv] {r} |
!C +-----+
!C==
        do i= 1, N
          W(i, Z)= W(i, R)
        enddo

        do i= 1, N
          WVAL= W(i, Z)
          do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
            WVAL= WVAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
          enddo
          W(i, Z)= WVAL * W(i, DD)
        enddo

        do i= N, 1, -1
          SW = 0.0d0
          do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
            SW= SW + AU(k) * W(itemU(k), Z)
          enddo
          W(i, Z)= W(i, Z) - W(i, DD)*SW
        enddo
!C==

```

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
  solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if  $i=1$ 
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end

```

solve_ICCG(4/7):METHOD=1

```

!C
!C***** ITERATION
      ITR= N

      do L= 1, ITR

!C
!C +-----+
!C | {z}= [Minv] {r} |
!C +-----+
!C==
!C
      do i= 1, N
        W(i, Z)= W(i, R)
      enddo

      do i= 1, N
        WVAL= W(i, Z)
        do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
          WVAL= WVAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
        enddo
        W(i, Z)= WVAL * W(i, DD)
      enddo

      do i= N, 1, -1
        SW = 0.0d0
        do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
          SW= SW + AU(k) * W(itemU(k), Z)
        enddo
        W(i, Z)= W(i, Z) - W(i, DD)*SW
      enddo
!C==

```

$$(M)\{z\} = (LDL^T)\{z\} = \{r\}$$

$$(L)\{z\} = \{r\}$$

前進代入
Forward Substitution

$$(DL^T)\{z\} = \{z\}$$

後退代入
Backward Substitution

solve_ICCG(5/7):METHOD=1

```
!C
!C +-----+
!C | RHO= {r} {z} |
!C +-----+
!C==
      RHO= 0. d0
      do i= 1, N
        RHO= RHO + W(i, R)*W(i, Z)
      enddo
!C==
```

```
Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for i= 1, 2, ...
  solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if i=1
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end
```

solve_ICCG(6/7):METHOD=1

```

!C
!C +-----+
!C | {p} = {z} if      ITER=1 |
!C | BETA= RHO / RH01 otherwise |
!C +-----+
!C==
      if ( L.eq.1 ) then
        do i= 1, N
          W(i,P)= W(i,Z)
        enddo
      else
        BETA= RHO / RH01
        do i= 1, N
          W(i,P)= W(i,Z) + BETA*W(i,P)
        enddo
      endif
!C==

!C
!C +-----+
!C | {q}= [A] {p} |
!C +-----+
!C==
      do i= 1, N
        VAL= D(i)*W(i,P)
        do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
          VAL= VAL + AL(k)*W(itemL(k),P)
        enddo
        do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
          VAL= VAL + AU(k)*W(itemU(k),P)
        enddo
        W(i,Q)= VAL
      enddo
!C==

```

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for i= 1, 2, ...
  solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if i=1
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence |r|
end

```

solve_ICCG(7/7): METHOD=1

```

!C
!C +-----+
!C | ALPHA= RHO / {p} {q} |
!C +-----+
!C===
      C1= 0. d0
      do i= 1, N
        C1= C1 + W(i, P)*W(i, Q)
      enddo
      ALPHA= RHO / C1
!C===
!C
!C +-----+
!C | {x}= {x} + ALPHA*{p} |
!C | {r}= {r} - ALPHA*{q} |
!C +-----+
!C===
      do i= 1, N
        X(i) = X(i) + ALPHA * W(i, P)
        W(i, R)= W(i, R) - ALPHA * W(i, Q)
      enddo
      DNRM2= 0. d0
      do i= 1, N
        DNRM2= DNRM2 + W(i, R)**2
      enddo
!C===
      ERR = dsqrt(DNRM2/BNRM2)
      if (ERR .lt. EPS) then
        IER = 0
        goto 900
      else
        RH01 = RHO
      endif
    enddo
    IER = 1

```

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for i= 1, 2, ...
  solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if i=1
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence |r|
end

```

solve_ICCG(7/7): METHOD=1

```

!C
!C +-----+
!C | ALPHA= RHO / {p} {q} |
!C +-----+
!C==
      C1= 0. d0
      do i= 1, N
        C1= C1 + W(i, P)*W(i, Q)
      enddo
      ALPHA= RHO / C1
!C==
!C
!C +-----+
!C | {x}= {x} + ALPHA*{p} |
!C | {r}= {r} - ALPHA*{q} |
!C +-----+
!C==
      do i= 1, N
        X(i) = X(i) + ALPHA * W(i, P)
        W(i, R)= W(i, R) - ALPHA * W(i, Q)
      enddo
      DNRM2= 0. d0
      do i= 1, N
        DNRM2= DNRM2 + W(i, R)**2
      enddo
!C==
      ERR = dsqrt(DNRM2/BNRM2)
      if (ERR .lt. EPS) then
        IER = 0
        goto 900
      else
        RH01 = RHO
      endif
      enddo
      IER = 1

```

```

r= b- [A]x
DNRM2=|r|2
BNRM2=|b|2

```

```

ERR= |r|/|b|

```

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for i= 1, 2, ...
  solve [M]z(i-1)= r(i-1)
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if i=1
    p(1)= z(0)
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
    p(i)= z(i-1) +  $\beta_{i-1}$  p(i)
  endif
  q(i)= [A]p(i)
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
  x(i)= x(i-1) +  $\alpha_i p^{(i)}$ 
  r(i)= r(i-1) -  $\alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence |r|
end

```

solve_ICCG2(1/3): METHOD=2

```

!C
!C***
!C*** module solver_ICCG2
!C***
!C
      module solver_ICCG2
      contains
!C
!C*** solve_ICCG2
!C
      subroutine solve_ICCG2                                &
      & ( N, NPL, NPU, indexL, itemL, indexU, itemU, D, B, X, &
      &   AL, AU, EPS, ITR, IER)

      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      real(kind=8), dimension(N)      :: D
      real(kind=8), dimension(N)      :: B
      real(kind=8), dimension(N)      :: X
      real(kind=8), dimension(NPL)    :: AL
      real(kind=8), dimension(NPU)    :: AU

      integer, dimension(0:N)         :: indexL, indexU
      integer, dimension(NPL)         :: itemL
      integer, dimension(NPU)         :: itemU

      real(kind=8), dimension(:, :), allocatable :: W

      integer, parameter :: R= 1
      integer, parameter :: Z= 2
      integer, parameter :: Q= 2
      integer, parameter :: P= 3
      integer, parameter :: DD= 4

      real(kind=8), dimension(:), allocatable :: ALlu0, AUlu0
      real(kind=8), dimension(:), allocatable :: Dlu0

```

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for i= 1, 2, ...
  solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if i=1
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence |r|
end

```

solve_ICCG2(2/3): METHOD=2

```
!C
!C +-----+
!C |  INIT  |
!C +-----+
!C==
      allocate (W(N,4))

      do i= 1, N
        X(i) = 0.d0
        W(i,1)= 0.0D0
        W(i,2)= 0.0D0
        W(i,3)= 0.0D0
        W(i,4)= 0.0D0
      enddo

      call FORM_ILU0
!C==
```

Dlu0, ALlu0, AUlu0にはILU(0)分解された対角, 下三角, 上三角成分が入る(行列[M])。

FORM_ILU0(1/2)

不完全修正コレスキー分解: 正確には不完全修正LU分解
solver ICCG2.fに附属

contains

```
!C
!C***
!C*** FORM_ILU0
!C***
!C
!C   form ILU(0) matrix
!C
subroutine FORM_ILU0
implicit REAL*8 (A-H, O-Z)
integer, dimension(:), allocatable :: IW1, IW2
integer, dimension(:), allocatable :: IWsL, IWsU
real (kind=8) :: RHS_Aij, DkINV, Aik, Akj

!C
!C +-----+
!C |  INIT.  |
!C +-----+
!C===
allocate (ALlu0(NPL), AUlu0(NPU))
allocate (Dlu0(N))

do i= 1, N
  Dlu0(i)= D(i)
  do k= 1, INL(i)
    ALlu0(k, i)= AL(k, i)
  enddo

  do k= 1, INU(i)
    AUlu0(k, i)= AU(k, i)
  enddo
enddo
!C===
```

$$\begin{aligned}
 & i = 1, 2, \dots, n \\
 & \quad j = 1, 2, \dots, i-1 \\
 & \quad \quad l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk} \\
 & \quad \quad d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}
 \end{aligned}$$

Dlu0, ALlu0, AUlu0にはILU(0)分解
された対角, 下三角, 上三角成分が
入る(行列[M])。

「Dlu0,ALlu0,AUlu0」初期値として,
「D,AL,AU」の値を代入する。

FORM_ILU0 (2/2)

```

!C
!C +-----+
!C | ILU(0) factorization |
!C +-----+
!C===
      allocate (IW1(N) , IW2(N))
      IW1=0
      IW2= 0

      do i= 1, N
        do k0= indexL(i-1)+1, indexL(i)
          IW1(itemL(k0))= k0
        enddo

        do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
          IW2(itemU(k0))= k0
        enddo

        do icon= indexL(i-1)+1, indexL(i)
          k= itemL(icon)
          D11= Dlu0(k)

          DkINV= 1. d0/D11
          Aik= ALlu0(icon)

          do kcon= indexU(k-1)+1, indexU(k)
            j= itemU(kcon)

            if (j.eq.i) then
              Akj= AUlu0(kcon)
              RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
              Dlu0(i)= Dlu0(i) - RHS_Aij
            endif

            if (j.lt.i .and. IW1(j).ne.0) then
              Akj= AUlu0(kcon)
              RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj

              ij0 = IW1(j)
              ALlu0(ij0)= ALlu0(ij0) - RHS_Aij
            endif
          enddo
        enddo
      enddo

```

```

      if (j.gt.i .and. IW2(j).ne.0) then
        Akj= AUlu0(kcon)
        RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj

        ij0 = IW2(j)
        AUlu0(ij0)= AUlu0(ij0) - RHS_Aij
      endif

    enddo
  enddo

  do k0= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    IW1(itemL(k0))= 0
  enddo

  do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
    IW2(itemU(k0))= 0
  enddo
enddo

do i= 1, N
  Dlu0(i)= 1. d0 / Dlu0(i)
enddo
deallocate (IW1, IW2)
!C===
end subroutine FORM_ILU0

```

```

do i= 1, N
  do k= 1, i-1
    if (A(i,k) is non-zero) then
      do j= k+1, N
        if (A(i,j) is non-zero) then
          A(i,j)= A(i,j) &
            -A(i,k)*(A(k,k))-1*A(k,j)
        endif
      enddo
    endif
  enddo
enddo

```

FORM_ILU0 (2/2)

```

!C
!C +-----+
!C | ILU(0) factorization |
!C +-----+
!C===
allocate (IW1(N) , IW2(N))
IW1=0
IW2= 0

do i= 1, N
  do k0= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    IW1(itemL(k0))= k0
  enddo

  do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
    IW2(itemU(k0))= k0
  enddo

  do icon= indexL(i-1)+1, indexU(i)
    k= itemL(icon)
    D11= Dlu0(k)
    DkINV= 1. d0/D11
    Aik= ALlu0(icon)

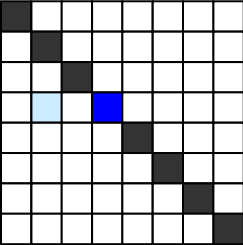
    do kcon= indexU(k-1)+1, indexU(k)
      j= itemU(kcon)

      if (j.eq.i) then
        Akj= AUlu0(kcon)
        RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
        Dlu0(i)= Dlu0(i) - RHS_Aij
      endif

      if (j.lt.i .and. IW1(j).ne.0) then
        Akj= AUlu0(kcon)
        RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj

        ij0 = IW1(j)
        ALlu0(ij0)= ALlu0(ij0) - RHS_Aij
      endif
    enddo
  enddo
enddo

```



```

      if (j.gt.i .and. IW2(j).ne.0) then
        Akj= AUlu0(kcon)
        RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj

        ij0 = IW2(j)
        AUlu0(ij0)= AUlu0(ij0) - RHS_Aij
      endif

    enddo
  enddo

  do k0= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    IW1(itemL(k0))= 0
  enddo

  do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
    IW2(itemU(k0))= 0
  enddo
enddo

do i= 1, N
  Dlu0(i)= 1. d0 / Dlu0(i)
enddo
deallocate (IW1, IW2)
!C===
end subroutine FORM_ILU0

```

```

do i= 1, N
  do k= 1, i-1
    if (A(i,k) is non-zero) then
      do j= k+1, N
        if (A(i,j) is non-zero) then
          A(i,j)= A(i,j)
            & -A(i,k)*(A(k,k))-1*A(k,j)
        endif
      enddo
    endif
  enddo
enddo

```

FORM_ILU0 (2/2)

```

!C
!C +-----+
!C | ILU(0) factorization |
!C +-----+
!C===
allocate (IW1(N) , IW2(N))
IW1=0
IW2= 0

do i= 1, N
  do k0= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    IW1(itemL(k0))= k0
  enddo

  do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
    IW2(itemU(k0))= k0
  enddo

  do icon= indexL(i-1)+1, indexU(i)
    k= itemL(icon)
    D11= Dlu0(k)

    DkINV= 1.d0/D11
    Aik= ALlu0(icon)

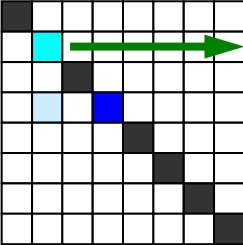
    → do kcon= indexU(k-1)+1, indexU(k)
      j= itemU(kcon)

      if (j.eq.i) then
        Akj= AUlu0(kcon)
        RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
        Dlu0(i)= Dlu0(i) - RHS_Aij
      endif

      if (j.lt.i .and. IW1(j).ne.0) then
        Akj= AUlu0(kcon)
        RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj

        ij0 = IW1(j)
        ALlu0(ij0)= ALlu0(ij0) - RHS_Aij
      endif
    enddo
  enddo
enddo

```



```

      if (j.gt.i .and. IW2(j).ne.0) then
        Akj= AUlu0(kcon)
        RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj

        ij0 = IW2(j)
        AUlu0(ij0)= AUlu0(ij0) - RHS_Aij
      endif

    enddo
  enddo

  do k0= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    IW1(itemL(k0))= 0
  enddo

  do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
    IW2(itemU(k0))= 0
  enddo
enddo

do i= 1, N
  Dlu0(i)= 1.d0 / Dlu0(i)
enddo
deallocate (IW1, IW2)
!C===
end subroutine FORM_ILU0

```

```

do i= 1, N
  do k= 1, i-1
    if (A(i,k) is non-zero) then
      do j= k+1, N
        if (A(i,j) is non-zero) then
          A(i,j)= A(i,j)
            & -A(i,k)*(A(k,k))-1*A(k,j)
        endif
      enddo
    endif
  enddo
enddo

```

FORM_ILU0 (2/2)

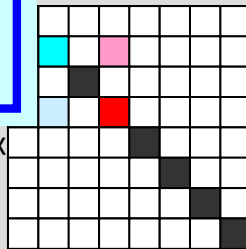
```
!C
!C +-----+
!C | ILU(0) factorization |
!C +-----+
!C===
```

$i = 1, 2, \dots, n$

$j = 1, 2, \dots, i-1$

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk}$$

$$d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}$$



```
do icon= indexL(i-1)+1, index
  k= itemL(icon)
  D11= Dlu0(k)
```

```
DkINV= 1. d0/D11
Aik= ALlu0(icon)
```

→ **do kcon= indexU(k-1)+1, indexU(k)**
j= itemU(kcon)

```
if (j.eq.i) then
  Akj= AUlu0(kcon)
  RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
  Dlu0(i)= Dlu0(i) - RHS_Aij
endif
```

j=i

```
if (j.lt.i .and. IW1(j).ne.0) then
  Akj= AUlu0(kcon)
  RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
```

```
  ij0 = IW1(j)
  ALlu0(ij0)= ALlu0(ij0) - RHS_Aij
endif
```

```
if (j.gt.i .and. IW2(j).ne.0) then
  Akj= AUlu0(kcon)
  RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
```

```
  ij0 = IW2(j)
  AUlu0(ij0)= AUlu0(ij0) - RHS_Aij
endif
```

```
enddo
enddo
```

```
do k0= indexL(i-1)+1, indexL(i)
  IW1(itemL(k0))= 0
enddo
```

```
do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
  IW2(itemU(k0))= 0
enddo
```

enddo

```
do i= 1, N
  Dlu0(i)= 1. d0 / Dlu0(i)
enddo
deallocate (IW1, IW2)
```

```
!C===
```

```
end subroutine FORM_ILU0
```

```
do i= 1, N
  do k= 1, i-1
    if (A(i,k) is non-zero) then
      do j= k+1, N
        if (A(i,j) is non-zero) then
          A(i,j)= A(i,j) &
            -A(i,k)*(A(k,k))-1*A(k,j)
        endif
      enddo
    endif
  enddo
enddo
```

FORM_ILU0 (2/2)

$i = 1, 2, \dots, n$

$j = 1, 2, \dots, i-1$

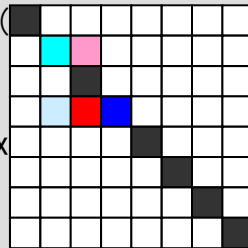
$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk}$$

$$d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}$$

do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
 IW2(itemU(k0))= k0
 enddo

do icon= indexL(i-1)+1, indexL(i)
 k= itemL(icon)
 D11= Dlu0(k)

DkINV= 1. d0/D11
 Aik= ALlu0(icon)



→ do kcon= indexU(k-1)+1, indexU(k)
 j= itemU(kcon)

if (j. eq. i) then
 Akj= AUlu0(kcon)
 RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
 Dlu0(i)= Dlu0(i) - RHS_Aij
 endif

$j < i$

if (j. lt. i .and. IW1(j).ne.0) then
 Akj= AUlu0(kcon)
 RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
 ij0 = IW1(j)
 ALlu0(ij0)= ALlu0(ij0) - RHS_Aij
 endif

if (j. gt. i .and. IW2(j).ne.0) then
 Akj= AUlu0(kcon)
 RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj

ij0 = IW2(j)
 AUlu0(ij0)= AUlu0(ij0) - RHS_Aij
 endif

enddo
 enddo

do k0= indexL(i-1)+1, indexL(i)
 IW1(itemL(k0))= 0
 enddo

do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
 IW2(itemU(k0))= 0
 enddo

enddo

do i= 1, N
 Dlu0(i)= 1. d0 / Dlu0(i)
 enddo
 deallocate (IW1, IW2)

!C==

end subroutine FORM_ILU0

do i= 1, N
 do k= 1, i-1
 if (A(i,k) is non-zero) then
 do j= k+1, N
 if (A(i,j) is non-zero) then
 A(i,j)= A(i,j) &
 -A(i,k)*(A(k,k))⁻¹*A(k,j)
 endif
 enddo
 endif
 enddo
 enddo

FORM_ILU0 (2/2)

 $i = 1, 2, \dots, n$
 $j = 1, 2, \dots, i-1$

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk}$$

$$d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}$$

```
do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
  IW2(itemU(k0))= k0
enddo
```

```
do icon= indexL(i-1)+1, indexL(i)
  k= itemL(icon)
  D11= Dlu0(k)
```

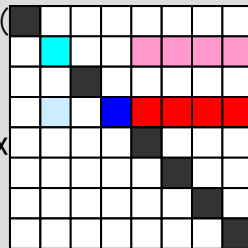
```
DkINV= 1. d0/D11
Aik= ALlu0(icon)
```

→ **do kcon= indexU(k-1)+1, indexU(k)**
j= itemU(kcon)

```
if (j. eq. i) then
  Akj= AUlu0(kcon)
  RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
  Dlu0(i)= Dlu0(i) - RHS_Aij
endif
```

```
if (j. lt. i .and. IW1(j).ne.0) then
  Akj= AUlu0(kcon)
  RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
```

```
  ij0 = IW1(j)
  ALlu0(ij0)= ALlu0(ij0) - RHS_Aij
endif
```



```
if (j. gt. i .and. IW2(j).ne.0) then
  Akj= AUlu0(kcon)
  RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj

  ij0 = IW2(j)
  AUlu0(ij0)= AUlu0(ij0) - RHS_Aij
endif
```

j>i

```
enddo
enddo
```

```
do k0= indexL(i-1)+1, indexL(i)
  IW1(itemL(k0))= 0
enddo
```

```
do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
  IW2(itemU(k0))= 0
enddo
```

enddo

```
do i= 1, N
  Dlu0(i)= 1. d0 / Dlu0(i)
enddo
deallocate (IW1, IW2)
```

!C==

end subroutine FORM_ILU0

```
do i= 1, N
  do k= 1, i-1
    if (A(i,k) is non-zero) then
      do j= k+1, N
        if (A(i,j) is non-zero) then
          A(i,j)= A(i,j)
            & -A(i,k)*(A(k,k))-1*A(k,j)
          endif
        enddo
      enddo
    endif
  enddo
enddo
```

FORM_ILU0 (2/2)

$i = 1, 2, \dots, n$

$j = 1, 2, \dots, i-1$

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk}$$

$$d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}$$

do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
IW2(itemU(k0))= k0
enddo

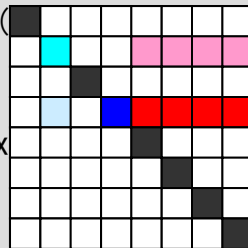
do icon= indexL(i-1)+1, indexL(i)
k= itemL(icon)
D11= Dlu0(k)

DkINV= 1. d0/D11
Aik= ALlu0(icon)

→ do kcon= indexU(k-1)+1, indexU(k)
j= itemU(kcon)

if (j. eq. i) then
Akj= AUlu0(kcon)
RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
Dlu0(i)= Dlu0(i) - RHS_Aij
endif

if (j. lt. i .and. IW1(j).ne. 0) then
Akj= AUlu0(kcon)
RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
ij0 = IW1(j)
ALlu0(ij0)= ALlu0(ij0) - RHS_Aij
endif



if (j. gt. i .and. IW2(j).ne. 0) then
Akj= AUlu0(kcon)
RHS_Aij= Aik * DkINV * Akj
ij0 = IW2(j)
AUlu0(ij0)= AUlu0(ij0) - RHS_Aij
endif

$j > i$

enddo
enddo

do k0= indexL(i-1)+1, indexL(i)
IW1(itemL(k0))= 0
enddo

do k0= indexU(i-1)+1, indexU(i)
IW2(itemU(k0))= 0
enddo

enddo

do i= 1, N
Dlu0(i)= 1. d0 / Dlu0(i)
enddo
deallocate (IW1, IW2)

!C==

end subroutine FORM_ILU0

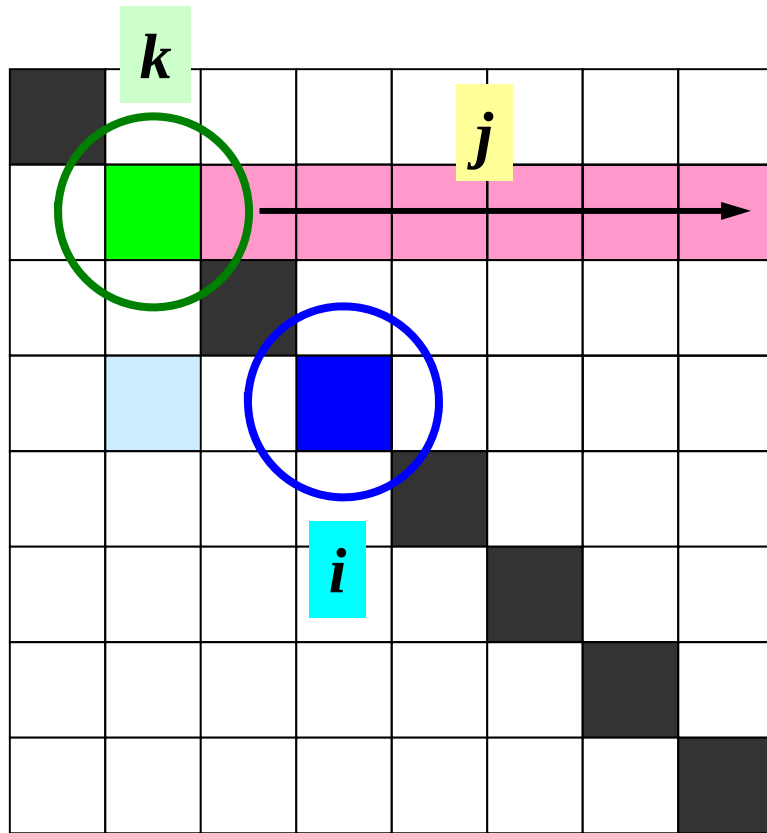
実はこのIF文の中は通らない
(理由は後述) したがって,

ALlu0= AL

AUlu0= AU

$j < i$

$j=i, j<i, j>i$ (1/3)



ある要素「 i (○)」に接続する下三角成分「 k (□○)」の上三角成分「 j (□)」が:

(1) $j=i$

「 i 」自身である場合, Dlu (■)更新

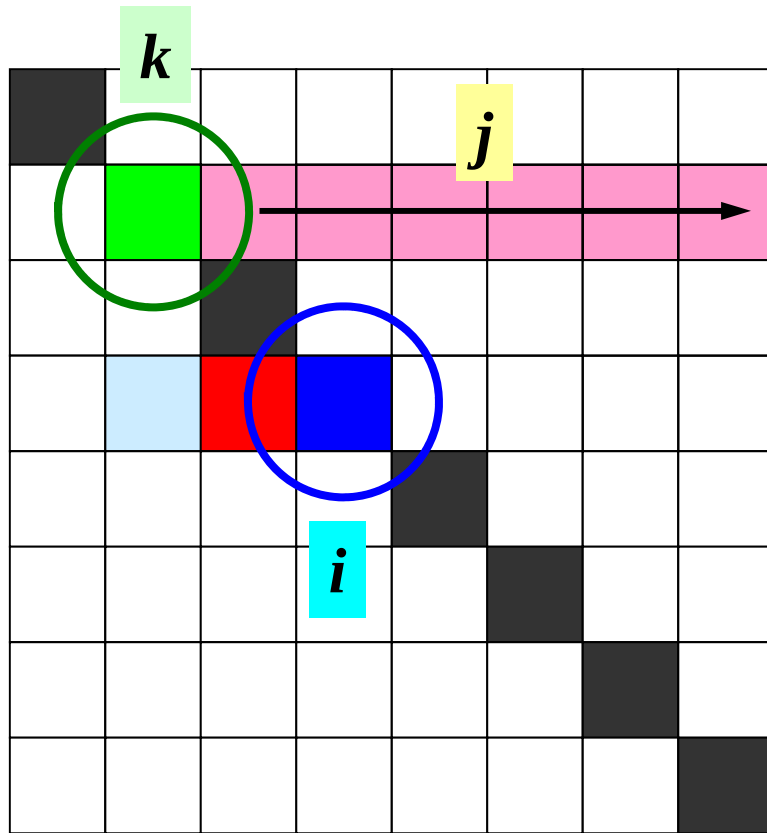
$$i = 1, 2, \dots, n$$

$$j = 1, 2, \dots, i-1$$

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk}$$

$$d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}$$

$j=i, j<i, j>i$ (2/3)



ある要素「 i (○)」に接続する下三角成分「 k (□○)」の上三角成分「 j (□)」が:

(2) $j < i$

「 i 」の下三角成分である場合
 $ALu0(i-j)$ (■)更新

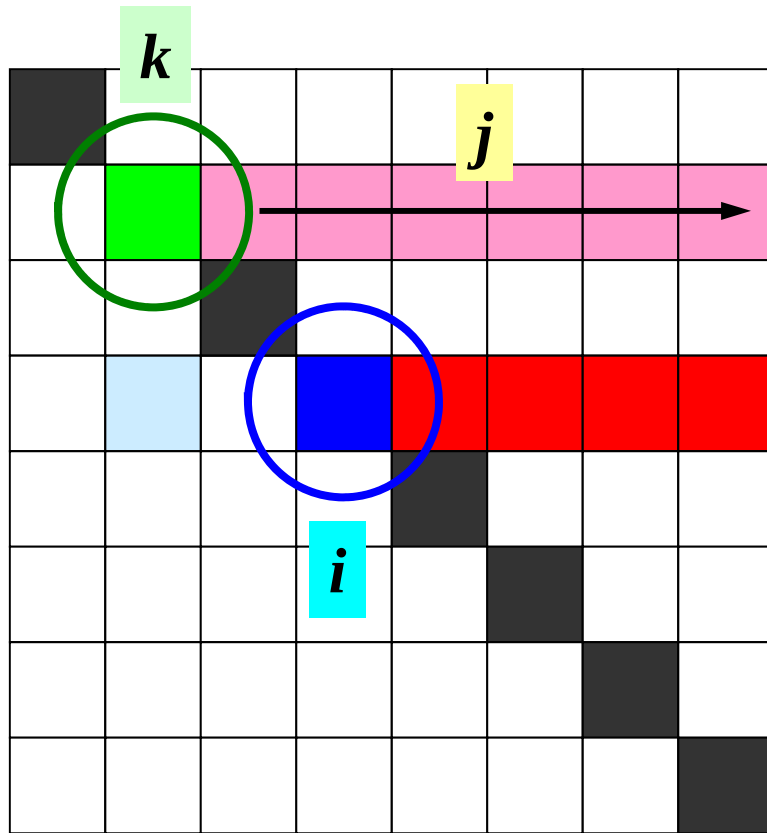
$$i = 1, 2, \dots, n$$

$$j = 1, 2, \dots, i-1$$

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk}$$

$$d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}$$

$j=i, j<i, j>i$ (3/3)



ある要素「 i (○)」に接続する下三角成分「 k (□○)」の上三角成分「 j (□)」が:

(3) $j>i$

「 i 」の上三角成分である場合

AUlu0($i-j$)(■)更新

実際は(2), (3)に該当する場合は無し

$$i = 1, 2, \dots, n$$

$$j = 1, 2, \dots, i-1$$

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk}$$

$$d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}$$

solve_ICCG2(3/3): METHOD=2

```
!C
!C***** ITERATION
      ITR= N
      do L= 1, ITR
!C
!C +-----+
!C | {z}= [Minv] {r} |
!C +-----+
!C==
      do i= 1, N
        W(i,Z)= W(i,R)
      enddo
      do i= 1, N
        WVAL= W(i,Z)
        do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
          WVAL= WVAL - ALlu0(k) * W(itemL(k),Z)
        enddo
        W(i,Z)= WVAL * Dlu0(i)
      enddo
      do i= N, 1, -1
        SW = 0.0d0
        do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
          SW= SW + AUlu0(k) * W(itemU(k),Z)
        enddo
        W(i,Z)= W(i,Z) - Dlu0(i)*SW
      enddo
!C==
```

```
Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for i= 1, 2, ...
  solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if i=1
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence |r|
end
```

これ以下の処理は「solve_ICCG」と全く同じ

solve_ICCG2(3/3): METHOD=2

```
!C
!C***** ITERATION
      ITR= N

      do L= 1, ITR

!C
!C +-----+
!C | {z}= [Minv] {r} |
!C +-----+
!C==
      do i= 1, N
        W(i, Z)= W(i, R)
      enddo

      do i= 1, N
        WVAL= W(i, Z)
        do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
          WVAL= WVAL - ALlu0(k) * W(itemL(k), Z)
        enddo
        W(i, Z)= WVAL * Dlu0(i)
      enddo

      do i= N, 1, -1
        SW = 0.0d0
        do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
          SW= SW + AUlu0(k) * W(itemU(k), Z)
        enddo
        W(i, Z)= W(i, Z) - Dlu0(i)*SW
      enddo
!C==
```

$$(M)\{z\} = (LDL^T)\{z\} = \{r\}$$

$$(L)\{z\} = \{r\}$$

前進代入
Forward Substitution

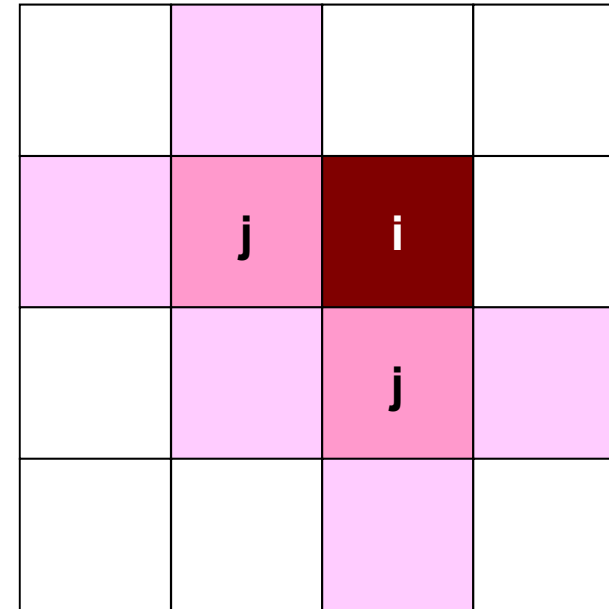
$$(DL^T)\{z\} = \{z\}$$

後退代入
Backward Substitution

実は, ALlu0, AUlu0の値はAL, AUと全く同じである。
METHOD=1, METHOD=2の答え(反復回数)は同じ

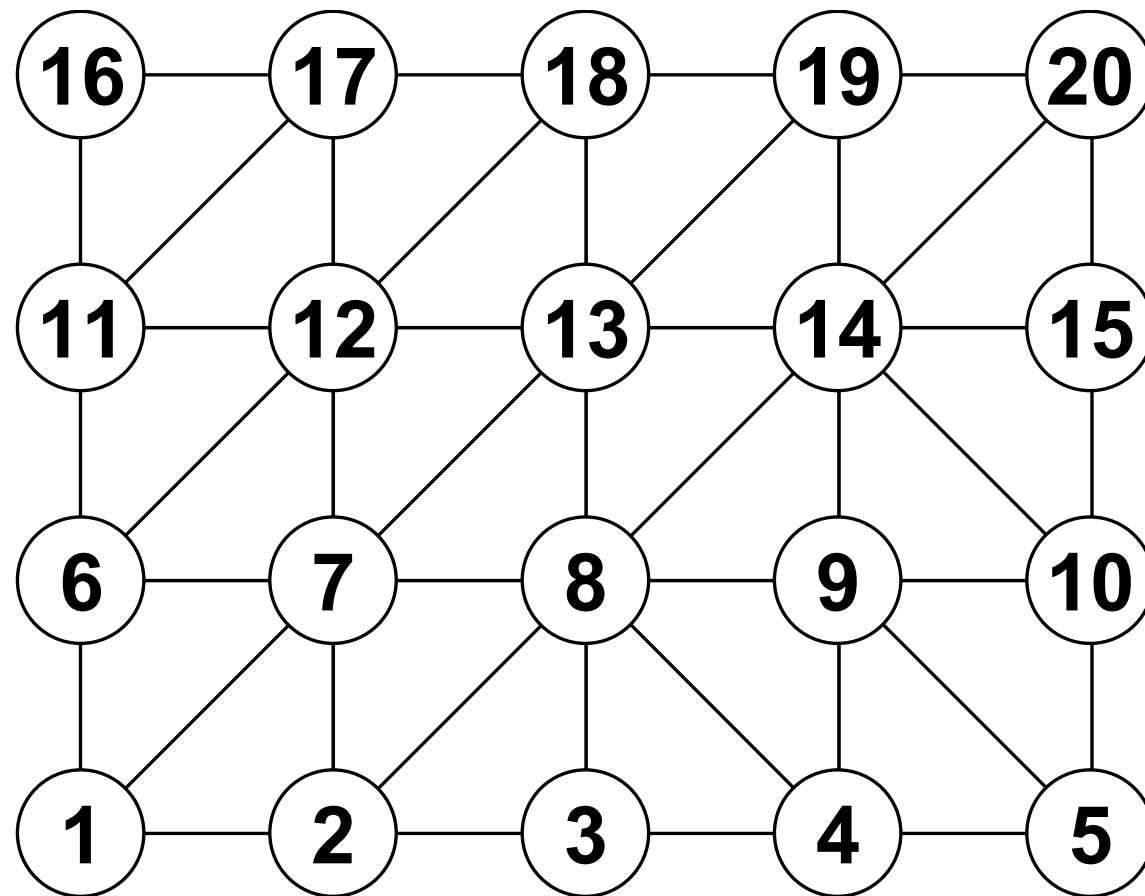
不完全修正コレスキー分解 現在のようなメッシュの場合

$$\begin{aligned}
 & i = 1, 2, \dots, n \\
 & \quad j = 1, 2, \dots, i-1 \\
 & \quad \quad \boxed{l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_k \cdot l_{jk}} \\
 & \quad d_i = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \cdot d_k \right)^{-1} = l_{ii}^{-1}
 \end{aligned}$$



□を満たすような(i-j-k) (i,jの両方に接続するk)が無い
従って, $l_{ij} = a_{ij}$

こういう場合はAUIu0, ALIu0が
更新される可能性あり



- 背景
 - 有限体積法
 - 前処理付反復法
- ICCG法によるポアソン方程式法ソルバーについて
 - 実行方法
 - データ構造
 - プログラムの説明
 - 初期化
 - 係数マトリクス生成
 - ICCG法
- **OpenMP**

OpenMPを適用するには？(内積)

```
VAL= 0. d0  
do i= 1, N  
  VAL= VAL + W(i, R) * W(i, Z)  
enddo
```

OpenMPを適用するには？(内積)

```
VAL= 0. d0  
do i= 1, N  
  VAL= VAL + W(i, R) * W(i, Z)  
enddo
```



```
VAL= 0. d0  
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(i) REDUCTION(+:VAL)  
do i= 1, N  
  VAL= VAL + W(i, R) * W(i, Z)  
enddo  
!$OMP END PARALLEL DO
```

OpenMPディレクティブの挿入
これでも並列計算は可能

OpenMPを適用するには？(内積)

```
VAL= 0. d0
do i= 1, N
  VAL= VAL + W(i, R) * W(i, Z)
enddo
```



```
VAL= 0. d0
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(i) REDUCTION(+:VAL)
do i= 1, N
  VAL= VAL + W(i, R) * W(i, Z)
enddo
!$OMP END PARALLEL DO
```

OpenMPディレクティブの挿入
それでも並列計算は可能



```
VAL= 0. d0
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(ip, i) REDUCTION(+:VAL)
do ip= 1, PEsmptOT
  do i= index(ip-1)+1, index(ip)
    VAL= VAL + W(i, R) * W(i, Z)
  enddo
enddo
!$OMP END PARALLEL DO
```

多重ループの導入
PEsmptOT:スレッド数
あらかじめ「INDEX(:)」を用意しておく
より確実に並列計算実施
(別に効率がよくなるわけでは無い)

OpenMPを適用するには？(内積)

```
VAL= 0. d0
do i= 1, N
  VAL= VAL + W(i, R) * W(i, Z)
enddo
```



```
VAL= 0. d0
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(i) REDUCTION(+:VAL)
do i= 1, N
  VAL= VAL + W(i, R) * W(i, Z)
enddo
!$OMP END PARALLEL DO
```

OpenMPディレクティブの挿入
それでも並列計算は可能



```
VAL= 0. d0
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(ip, i) REDUCTION(+:VAL)
do ip= 1, PEsmptTOT
  do i= index(ip-1)+1, index(ip)
    VAL= VAL + W(i, R) * W(i, Z)
  enddo
enddo
!$OMP END PARALLEL DO
```

多重ループの導入
PEsmptTOT:スレッド数
あらかじめ「INDEX(:)」を用意しておく
より確実に並列計算実施

PEsmptTOT個のスレッドが立ち上がり,
並列に実行

OpenMPを適用するには？(内積)

```
VAL= 0. d0
!$OMP PARALLEL DO PRIVATE(ip, i) REDUCTION(+:VAL)
do ip= 1, PEsmptOT
  do i= index(ip-1)+1, index(ip)
    VAL= VAL + W(i,R) * W(i,Z)
  enddo
enddo
!$OMP END PARALLEL DO
```

多重ループの導入

PEsmptOT: スレッド数

あらかじめ「INDEX(:)」を用意しておく
より確実に並列計算実施

PEsmptOT個のスレッドが立ち上がり、
並列に実行

各要素が計算されるスレッドを
指定できる

例えば, N=100, PEsmptOT=4とすると:

```
INDEX(0)= 0
INDEX(1)= 25
INDEX(2)= 50
INDEX(3)= 75
INDEX(4)= 100
```

OpenMP/Directives

Array Operations

Simple Substitution

```
!$omp parallel do
  do i= 1, NP
    W(i, 1)= 0. d0
    W(i, 2)= 0. d0
  enddo
!$omp end parallel do
```

DAXPY

```
!$omp parallel do
  do i= 1, NP
    Y(i)= ALPHA*X(i) + Y(i)
  enddo
!$omp end parallel do
```

Dot Products

```
!$omp parallel do private(iS, iE, i)
!$omp&                                reduction(+:RHO)
  do ip= 1, PEsmptOT
    iS= STACKmcG(ip-1) + 1
    iE= STACKmcG(ip )
    do i= iS, iE
      RHO= RHO + W(i, R)*W(i, Z)
    enddo
  enddo
!$omp end parallel do
```

omp parallel (do)

- omp parallel-omp end parallelはそのたびにスレッドを生成，消滅させる：fork-join
- ループが連続するとこれがオーバーヘッドになることがある。
- omp parallel + omp do/omp for

```
!$omp parallel ...
```

```
!$omp do  
    do i= 1, N
```

```
...
```

```
!$omp do  
    do i= 1, N
```

```
...
```

```
!$omp end parallel 必須
```

```
#pragma omp parallel ...
```

```
#pragma omp for {
```

```
...
```

```
#pragma omp for {
```

ICCG法の並列化

- 内積: **OK**
- DAXPY: **OK**
- 行列ベクトル積
- 前処理

行列ベクトル積

```
do i = 1, N
  VAL = D(i) * W(i, P)
  do k = indexL(i-1)+1, indexL(i)
    VAL = VAL + AL(k) * W(itemL(k), P)
  enddo
  do k = indexU(i-1)+1, indexU(i)
    VAL = VAL + AU(k) * W(itemU(k), P)
  enddo
  W(i, Q) = VAL
enddo
```

行列ベクトル積

```
!$omp parallel do private(ip, i, VAL, k)
  do ip= 1, PEsmptTOT
    do i = INDEX(ip-1)+1, INDEX(ip)
      VAL= D(i)*W(i, P)
      do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
        VAL= VAL + AL(k)*W(itemL(k), P)
      enddo
      do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
        VAL= VAL + AU(k)*W(itemU(k), P)
      enddo
      W(i, Q)= VAL
    enddo
  enddo
!$omp end parallel do
```

行列ベクトル積: これでもOK

GPU, メニィコアではこちらの方が良い場合も
あり: ループ構造単純

```
!$omp parallel do private(i, VAL, k)
  do i = 1, N
    VAL= D(i)*W(i, P)
    do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
      VAL= VAL + AL(k)*W(itemL(k), P)
    enddo
    do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
      VAL= VAL + AU(k)*W(itemU(k), P)
    enddo
    W(i, Q)= VAL
  enddo
!$omp end parallel do
```

ICCG法の並列化

- 内積: OK
- DAXPY: OK
- 行列ベクトル積: OK
- 前処理

前処理はどうか？

対角スケーリングなら簡単：でも遅い

```
do i= 1, N
  W(i, Z) = W(i, R)*W(i, DD)
enddo
```

```
!$omp parallel do private(i)
  do i = 1, N
    W(i, Z) = W(i, R)*W(i, DD)
  enddo
!$omp end parallel do
```

```
!$omp parallel do private(ip, i)
  do ip= 1, PEsmptOT
    do i = INDEX(ip-1)+1, INDEX(ip)
      W(i, Z) = W(i, R)*W(i, DD)
    enddo
  enddo
!$omp end parallel do
```

```
64*64*64
METHOD= 1
1      6.543963E+00
101    1.748392E-05
146    9.731945E-09

real    0m14.662s
```

```
METHOD= 3
1      6.299987E+00
101    1.298539E+00
201    2.725948E-02
301    3.664216E-05
401    2.146428E-08
413    9.621688E-09

real    0m19.660s
```

前処理はどうするか？

不完全修正 コレスキー 分解

```
do i= 1, N
  VAL= D(i)
  do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    VAL= VAL - (AL(k)**2) * W(itemL(k), DD)
  enddo
  W(i, DD)= 1. d0/VAL
enddo
```

前進代入

```
do i= 1, N
  WVAL= W(i, Z)
  do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    WVAL= WVAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
  enddo
  W(i, Z)= WVAL * W(i, DD)
enddo
```

データ依存性：メモリの読み込みと書き出しが同時に発生し，並列化困難

不完全修正 コレスキー 分解

```
do i= 1, N
  VAL= D(i)
  do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    VAL= VAL - (AL(k)**2) * W(itemL(k), DD)
  enddo
  W(i, DD)= 1. d0/VAL
enddo
```

前進代入

```
do i= 1, N
  WVAL= W(i, Z)
  do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    WVAL= WVAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
  enddo
  W(i, Z)= WVAL * W(i, DD)
enddo
```

前進代入

4スレッドによる並列化を試みる

13	14	15	16
9	10	11	12
5	6	7	8
1	2	3	4

```
do i= 1, N
  WVAL= W(i, Z)
  do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    WVAL= WVAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
  enddo
  W(i, Z)= WVAL * W(i, DD)
enddo
```

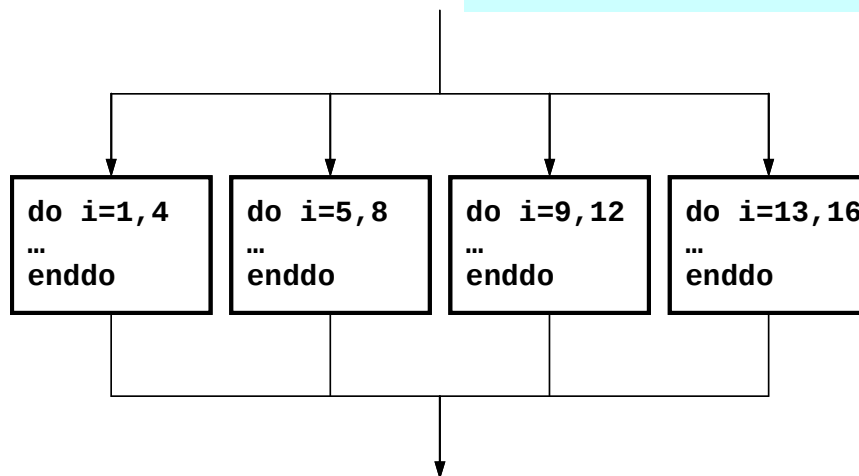
前進代入

4スレッドによる並列化を試みる

13	14	15	16
9	10	11	12
5	6	7	8
1	2	3	4

```
!$omp parallel do private (ip,i,k,VAL)
  do ip= 1, 4
    do i= INDEX(ip-1)+1, INDEX(ip)
      WVAL= W(i, Z)
      do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
        WVAL= WVAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
      enddo
      W(i, Z)= WVAL * W(i, DD)
    enddo
  enddo
!$omp parallel enddo
```

INDEX(0)= 0
INDEX(1)= 4
INDEX(2)= 8
INDEX(3)=12
INDEX(4)=16



このような4スレッドが同時に
実施される...

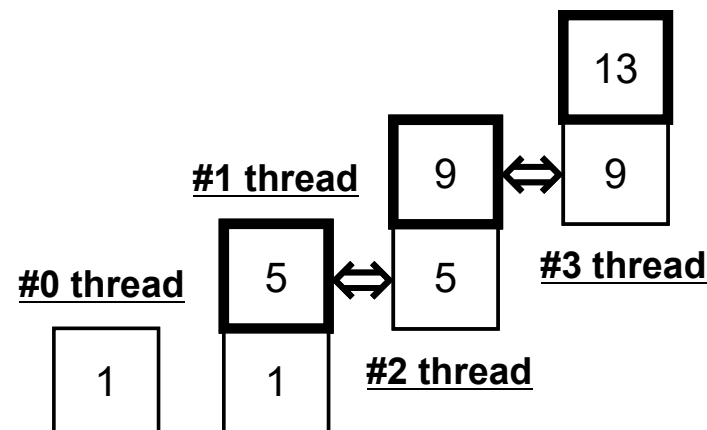
データ依存性：メモリへの書き出し，読み込みが同時に発生

13	14	15	16
9	10	11	12
5	6	7	8
1	2	3	4

```

!$omp parallel do private (ip, I, k, VAL)
  do ip= 1, 4
    do i= INDEX(ip-1)+1, INDEX(ip)
      WVAL= W(i, Z)
      do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
        WVAL= WVAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
      enddo
      W(i, Z)= WVAL * W(i, DD)
    enddo
  enddo
!$omp parallel enddo
  
```

INDEX(0)= 0
 INDEX(1)= 4
 INDEX(2)= 8
 INDEX(3)=12
 INDEX(4)=16



⇔の部分に
 データ依存性発生
 (1のときは下三角
 成分無し)

ICCG法の並列化

- 内積: **OK**
- DAXPY: **OK**
- 行列ベクトル積: **OK**
- 前処理: **なんとかしなければならない**
 - 単純にOpenMPなどの指示行(directive)を挿入しただけでは「並列化」できない。