

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Ⅱ部:オーダリング

中島研吾
東京大学情報基盤センター

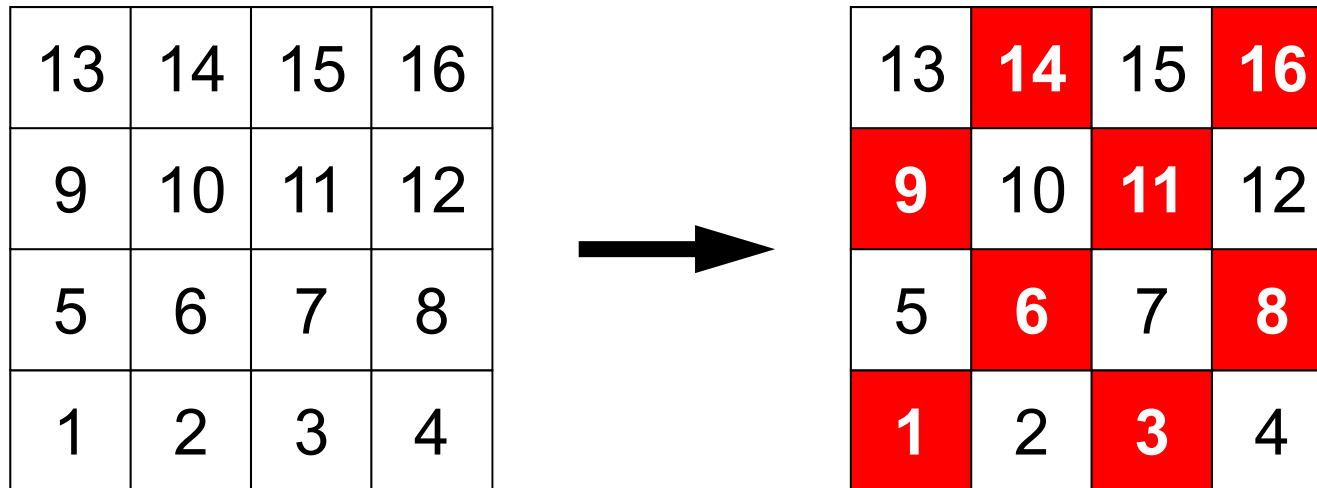
- データ依存性の解決策は？
- オーダリング (Ordering) について
 - Red-Black, Multicolor (MC)
 - Cuthill-McKee (CM), Reverse-CM (RCM)
 - オーダリングと収束の関係
- オーダリングの実装
- オーダリング付ICCG法の実装

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。

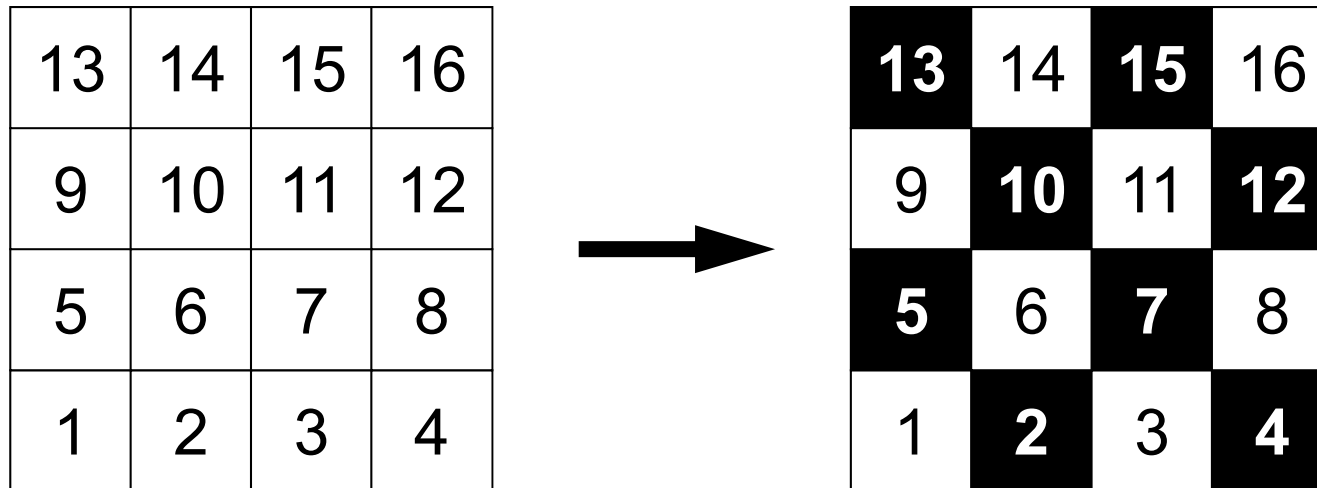
データ依存性の解決策＝ 色分け, 色づけ(coloring)

- 依存性を持たない(互いに独立な)要素を同時に処理するようにすれば良い



データ依存性の解決策＝ 色分け, 色づけ(coloring)

- 依存性を持たない(互いに独立な)要素を同時に処理するようにすれば良い



データ依存性の解決策＝ 色分け, 色づけ(coloring)

- 依存性を持たない要素群⇒同じ「色」に色づけ(coloring)する
- 最も単純な色づけ: Red-Black Coloring (2色)

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



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

Red-Black (1/3)

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

```

!$omp parallel do private (ip, i, k, VAL)
do ip= 1, 4
do i= INDEX(ip-1)+1, INDEX(ip)
  if (COLOR(i).eq. RED) then
    VAL= W(i, Z)
    do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
      VAL= VAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
    enddo
    W(i, Z)= VAL * W(i, DD)
  endif
enddo
enddo
!$omp parallel enddo

!$omp parallel do private (ip, i, k, VAL)
do ip= 1, 4
do i= INDEX(ip-1)+1, INDEX(ip)
  if (COLOR(i).eq. BLACK) then
    VAL= W(i, Z)
    do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
      VAL= VAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
    enddo
    W(i, Z)= VAL * W(i, DD)
  endif
enddo
enddo
!$omp parallel enddo

```

Red-Black (2/3)

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

```
!$omp parallel do private (ip, i, k, VAL)
do ip= 1, 4
do i= INDEX(ip-1)+1, INDEX(ip)
  if (COLOR(i).eq. RED) then
    VAL= W(i, Z)
    do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
      VAL= VAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
    enddo
    W(i, Z)= VAL * W(i, DD)
  endif
enddo
enddo
!$omp parallel enddo
```

- 「Red」要素を処理する間、右辺に来るのは必ず「Black」要素
 - RED: 書き出し, BLACK: 読み込み
- 「Red」要素の処理をする間、「Black」要素の内容が変わることは無い
- データ依存性が回避される

Red-Black (3/3)

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

- 「Black」要素を処理する間, 右辺に来るのは必ず「Red」要素
 - RED: 読み込み, BLACK: 書き出し
- 「Black」要素の処理をする間, 「Red」要素の内容が変わることは無い
- データ依存性が回避される

```

!$omp parallel do private (ip, i, k, VAL)
  do ip= 1, 4
    do i= INDEX(ip-1)+1, INDEX(ip)
      if (COLOR(i).eq. BLACK) then
        VAL= W(i, Z)
        do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
          VAL= VAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
        enddo
        W(i, Z)= VAL * W(i, DD)
      endif
    enddo
  enddo
!$omp parallel enddo

```

Red-Black Ordering/Reordering

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



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

```

do icol= 1, 2
!$omp parallel do private (ip, I, j, VAL)
  do ip= 1, 4
    do i= INDEX(ip-1, icol)+1, INDEX(ip, icol)
      WVAL= W(i, Z)
      do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
        WVAL= WVAL - AL(k) * W(itemL(k), Z)
      enddo
      W(i, Z)= WVAL * W(i, DD)
    enddo
  enddo
!$omp parallel enddo
enddo

```

INDEX (0, 1)= 0
 INDEX (1, 1)= 2
 INDEX (2, 1)= 4
 INDEX (3, 1)= 6
 INDEX (4, 1)= 8

INDEX (0, 2)= 8
 INDEX (1, 2)=10
 INDEX (2, 2)=12
 INDEX (3, 2)=14
 INDEX (4, 2)=16

- 要素番号を「Red」⇒「Black」の順にふり直す (reordering, ordering) とプログラムが簡単になる (計算効率も高い)

- データ依存性の解決策は？
- **オーダリング (Ordering) について**
 - **Red-Black, Multicolor (MC)**
 - **Cuthill-McKee (CM), Reverse-CM (RCM)**
 - オーダリングと収束の関係
- オーダリングの実装
- オーダリング付ICCG法の実装
- マルチコアへの実装 (OpenMP) へ向けて

オーダリング (ordering) の効用

- 並列性を得る: 依存性の排除
- Fill-inを減らす
- バンド幅を減らす, プロファイルを減らす
- ブロック化
- もともとは, 4色問題, 一筆書き (巡回セールスマン問題) 等と関連
 - 数値計算への適用
- 小国他「行列計算ソフトウェア」, 丸善 (1991)

並列計算のためのオーダリング法

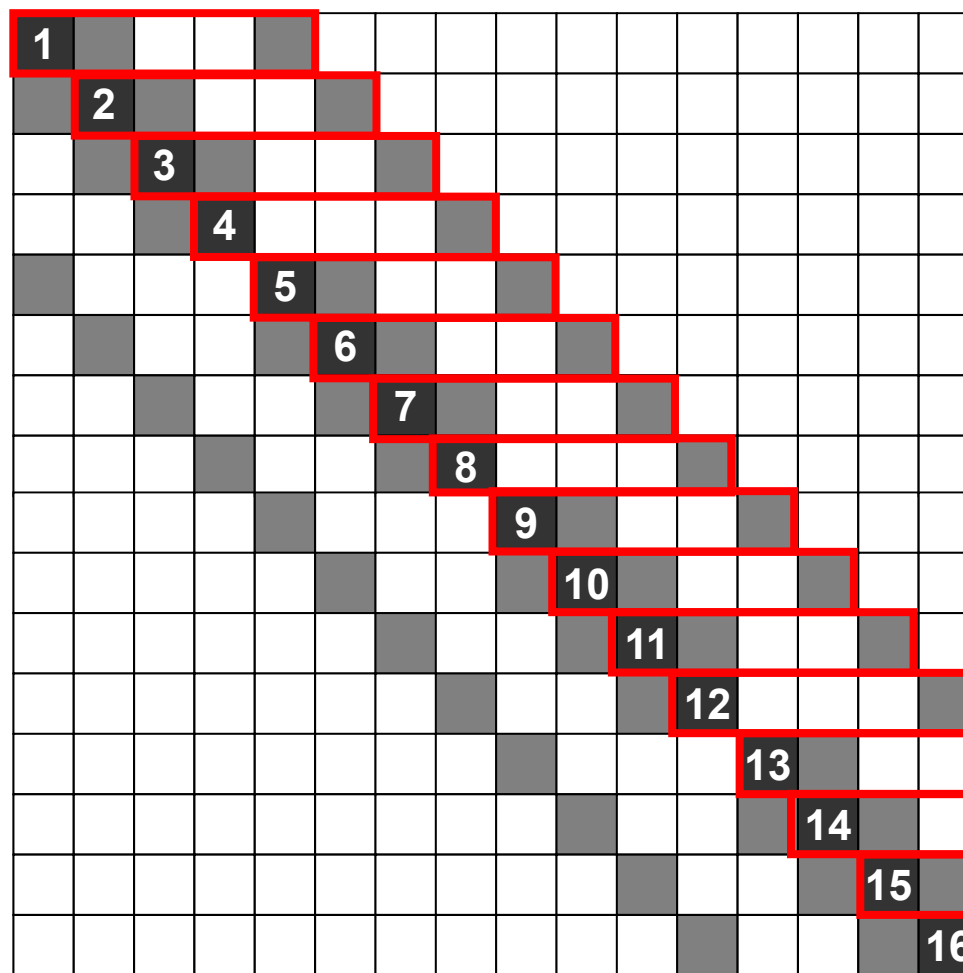
- マルチカラーオーダリング
 - 並列性
 - Red-Black オーダリング(2色)等
- CM法(Cuthill-McKee), RCM法(Reverse Cuthill-McKee)
 - fill-inを減らす
 - マトリクスのバンド幅を減らす, プロフィルを減らす
 - 並列性

用語の定義

- β_i : i 行における非ゼロ成分の列番号の最大値を k とするとき, $\beta_i = k - i$
- バンド幅: β_i の最大値
- プロファイル: β_i の和
- バンド幅, プロファイル, Fill-inともに少ない方が都合が良い
- 特にバンド幅, プロファイルは収束に影響

β_i の定義

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



■ 非ゼロ成分

マルチカラーオーダリング

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

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

- Multicolor Ordering
 - 「MC法」と呼ぶ
- マルチカラーオーダリングは、互いに独立で依存性のない要素同士を同じ「色」に分類し、その分類に従って要素や節点の番号を振りなおす手法である。
 - Red-Blackは2色の場合
 - 複雑形状の場合、より多い「色」が必要
- 同じ「色」に分類された要素に関する計算は並列に実施できる。
- ある要素と、その要素に接続する周囲の要素は違う「色」に属している。

MC法の基本的なアルゴリズム

- ① 「要素数÷色数」を「m」とする。
- ② 初期要素番号が若い順に互いに独立な要素を「m」個選び出して彩色し、次の色へ進む。
- ③ 指定した色数に達して、全ての要素が彩色されるまで②を繰り返す。
- ④ 色番号の若い順番に要素を再番号づけする(各色内では初期要素番号が若い順)。

MC法:4色

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



	3		4
1		2	



7	3	8	4
1	5	2	6



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

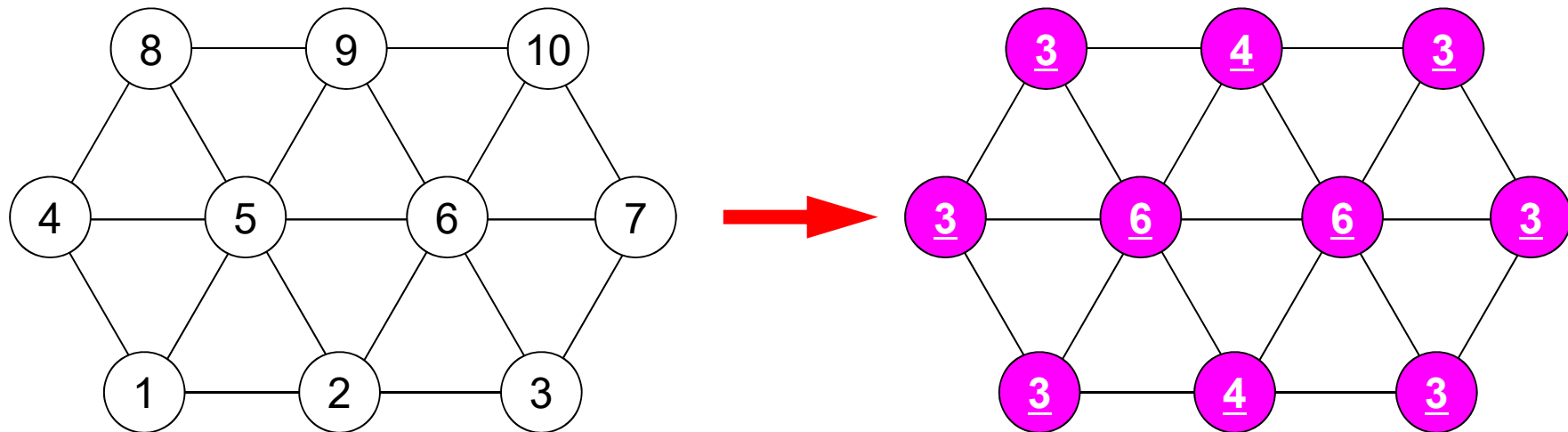


	11		12
9		10	
7	3	8	4
1	5	2	6

修正されたMC法

- ① 「次数」最小の要素を「新要素番号=1」, 「第1色」とし, 「色数のカウンタ=1」とする。
- ② $ITEM_{cou} = ICELTOT / N_{COLOR_{tot}}$ に相当する値を「各色に含まれる要素数」とする。
- ③ $ITEM_{cou}$ 個の独立な要素を初期要素番号が若い順に選び出す。
- ④ $ITEM_{cou}$ 個の要素が選ばれるか, あるいは独立な要素が無くなったら「色数のカウンタ=2」として第2色へ進む。
- ⑤ 全ての要素が彩色されるまで③, ④を繰り返す。
- ⑥ 最終的な色数カウンタの値を $N_{COLOR_{tot}}$ とし, 色番号の若い順番に要素を再番号づけする(各色内では初期要素番号の順番)。

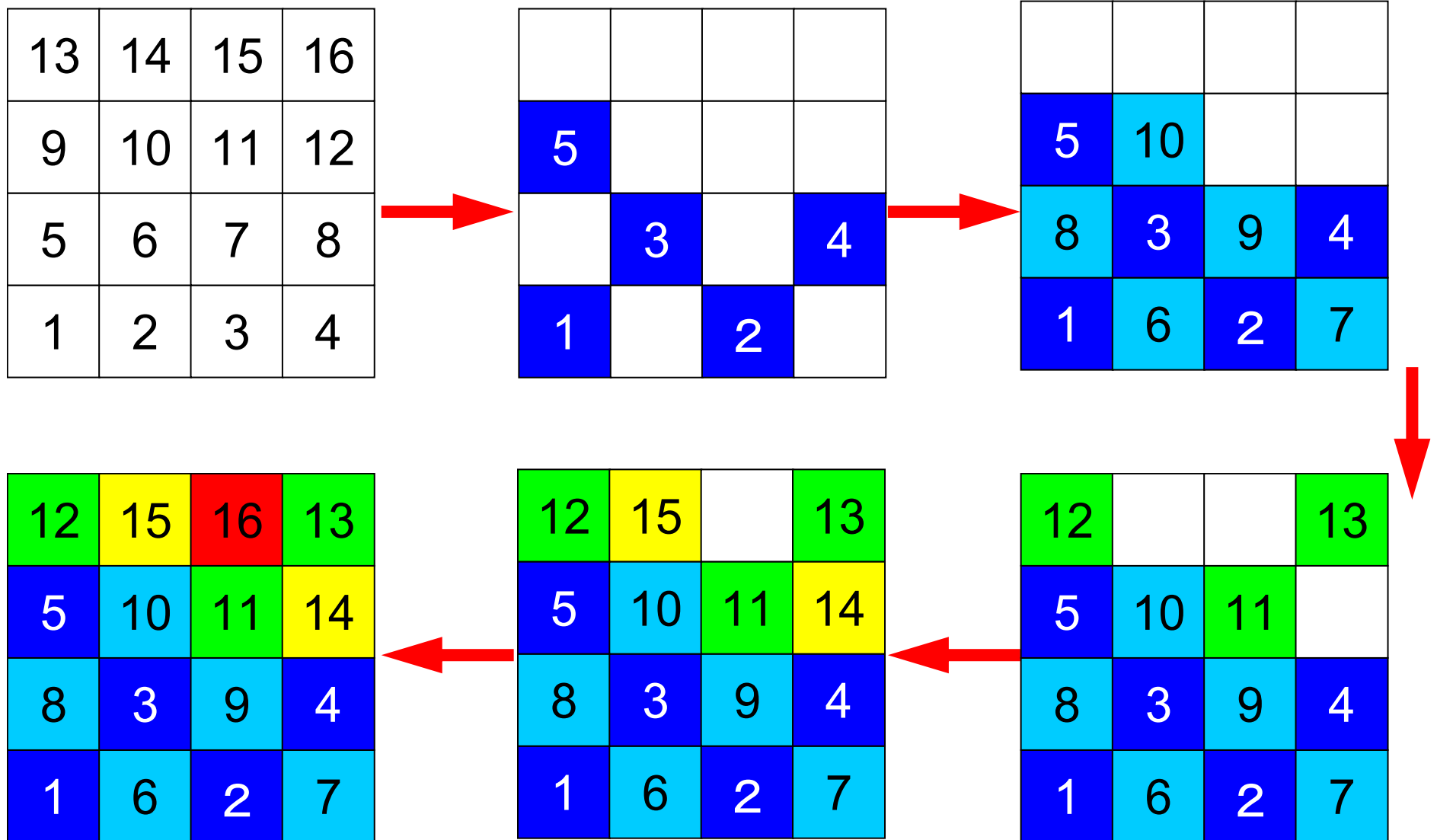
次数 (degree) : 各点 に隣接する点の数



修正されたMC法

- ① 「次数」最小の要素を「新要素番号=1」, 「第1色」とし, 「色数のカウンタ=1」とする。
- ② $ITEM_{cou} = ICELTOT / N_{COLOR_{tot}}$ に相当する値を「各色に含まれる要素数」とする。
- ③ $ITEM_{cou}$ 個の独立な要素を初期要素番号が若い順に選び出す。
- ④ $ITEM_{cou}$ 個の要素が選ばれるか, あるいは独立な要素が無くなったら「色数のカウンタ=2」として第2色へ進む。
- ⑤ 全ての要素が彩色されるまで③, ④を繰り返す。
- ⑥ 最終的な色数カウンタの値を $N_{COLOR_{tot}}$ とし, 色番号の若い順番に要素を再番号づけする(各色内では初期要素番号の順番)。同じ色: 連続した「新」要素番号

MC法: 3色に設定, 実は5色



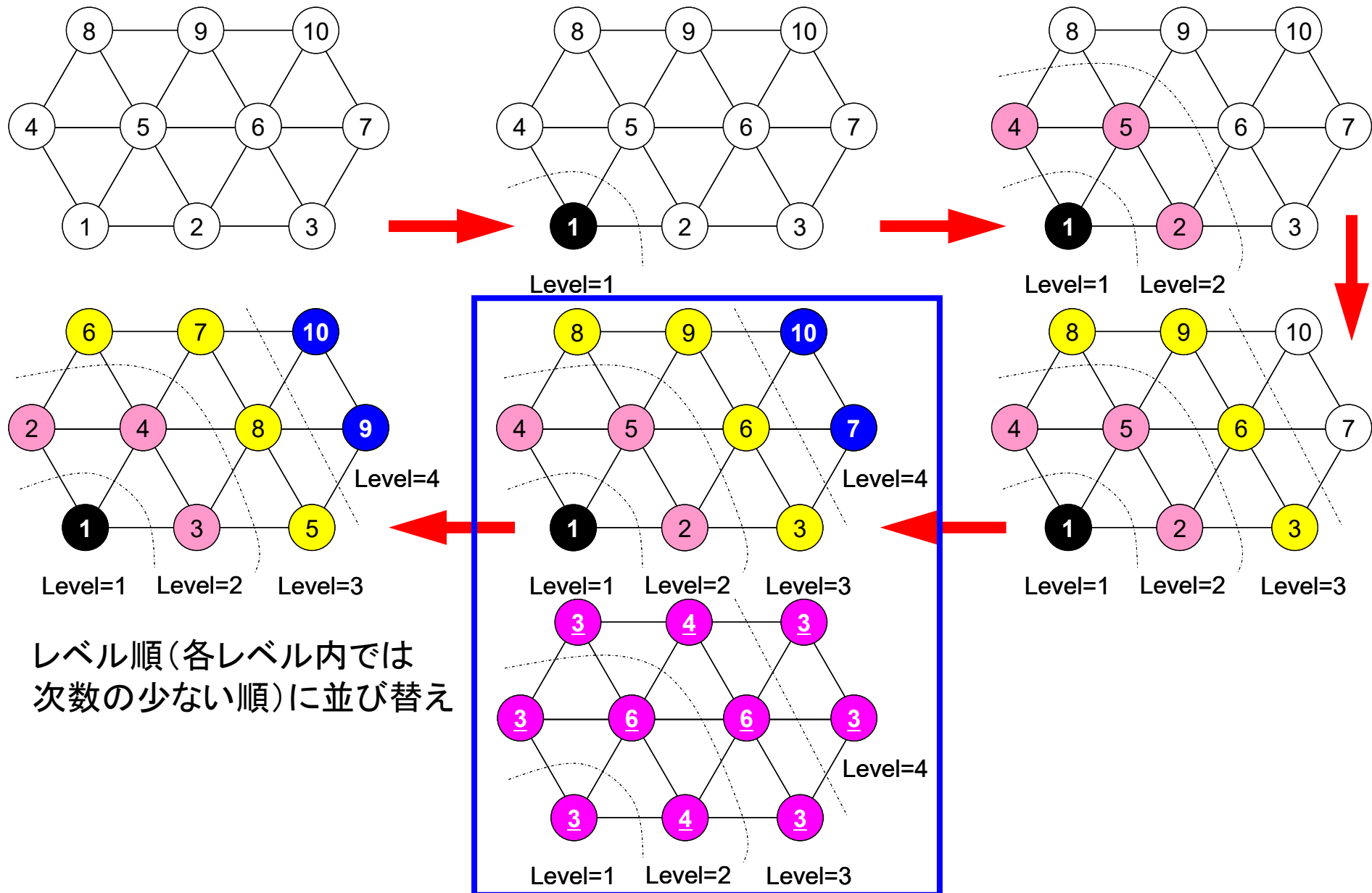
並列計算のためのオーダリング法

- マルチカラーオーダリング
 - 並列性
 - Red-Black オーダリング(2色)等
- CM法(Cuthill-McKee), RCM法(Reverse Cuthill-McKee)
 - fill-inを減らす
 - マトリクスのバンド幅を減らす, プロフィルを減らす
 - 並列性

CM法の基本的なアルゴリズム

- ① 各点に隣接する点の数を「次数 (degree)」, 最小次数の点を「レベル=1」の点とする。
- ② 「レベル=k-1」に属する点に隣接する点を「レベル=k」とする。全ての点にレベルづけがされるまで「k」を1つずつ増やして繰り返す。
- ③ 全ての点がレベルづけされたら, レベルの順番に再番号づけする(各レベル内では「次数」の番号が少ない順)。

Cuthill-Mckee Ordering (CM法) の例



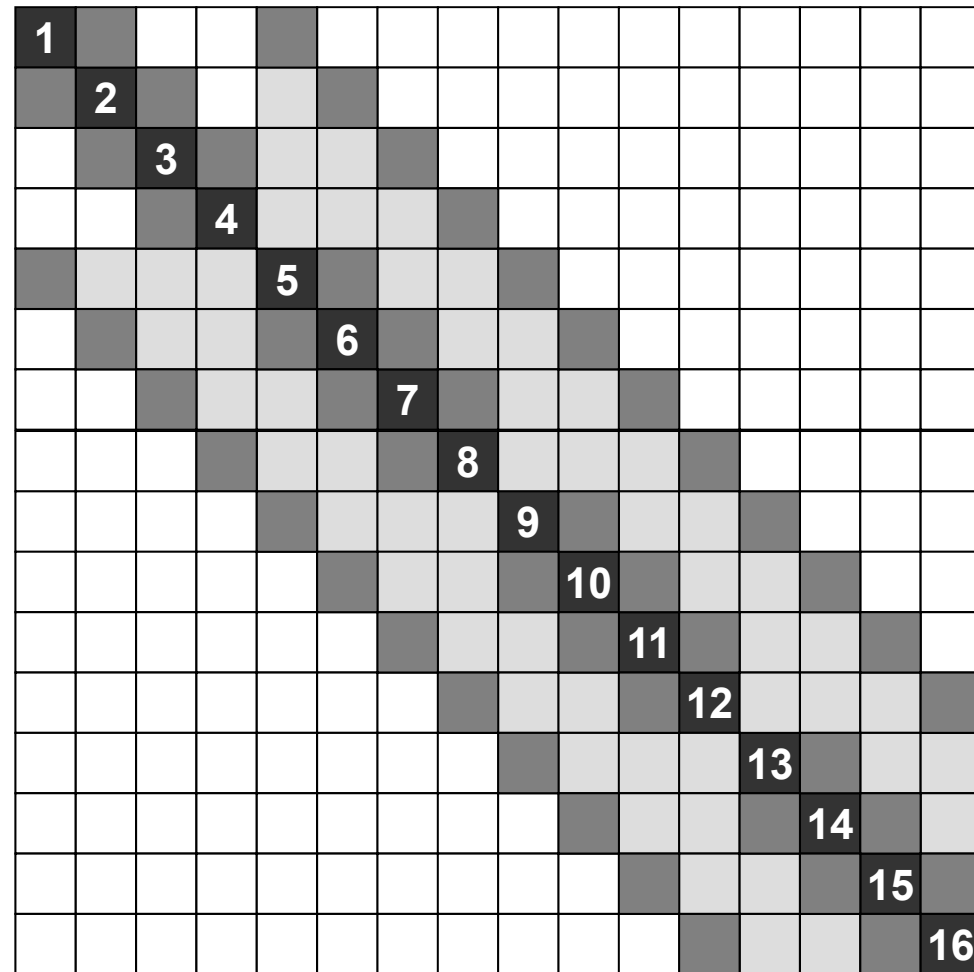
RCM (Reverse CM)

- まずCMの手順を実行
 - 次数 (degree) の計算
 - 「レベル($k(k \geq 2)$)」の要素の選択
 - 繰り返し, 再番号付け
- 再々番号付け
 - CMの番号付けを更に逆順にふり直す
 - Fill-inがCMの場合より少なくなる

初期状態

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

バンド幅 4
プロフィール 51
Fill-in 54

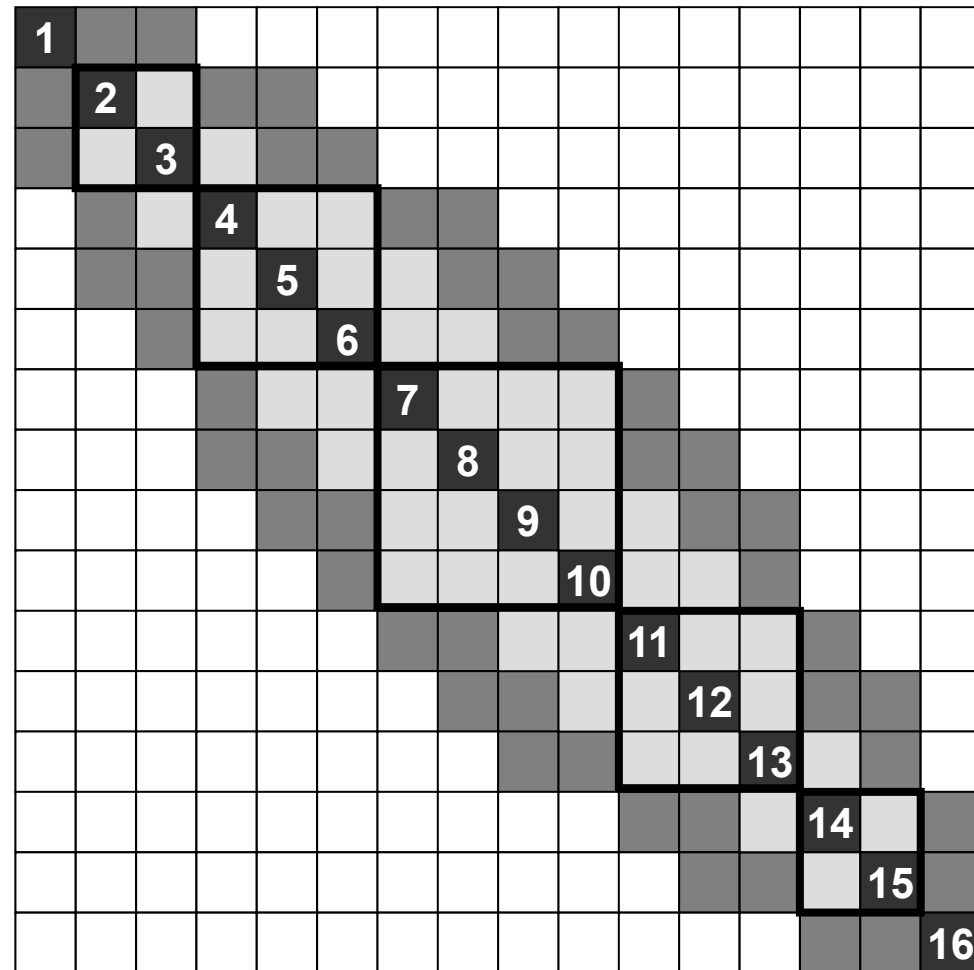


■ 非ゼロ成分, ■ Fill-in

CMオーダリング

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

バンド幅 4
 プロフィル 46
 Fill-in 44

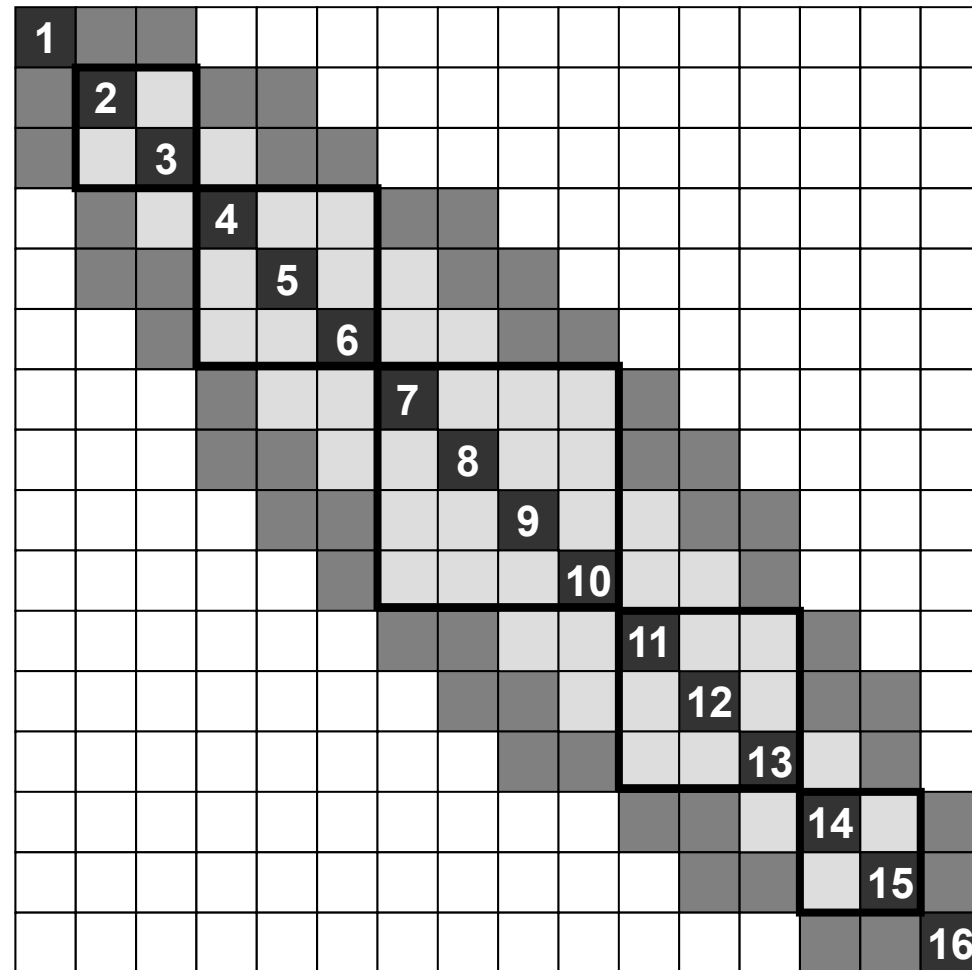


■ 非ゼロ成分, ■ Fill-in

RCMオーダリング

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

バンド幅 4
 プロフィール 46
 Fill-in 44

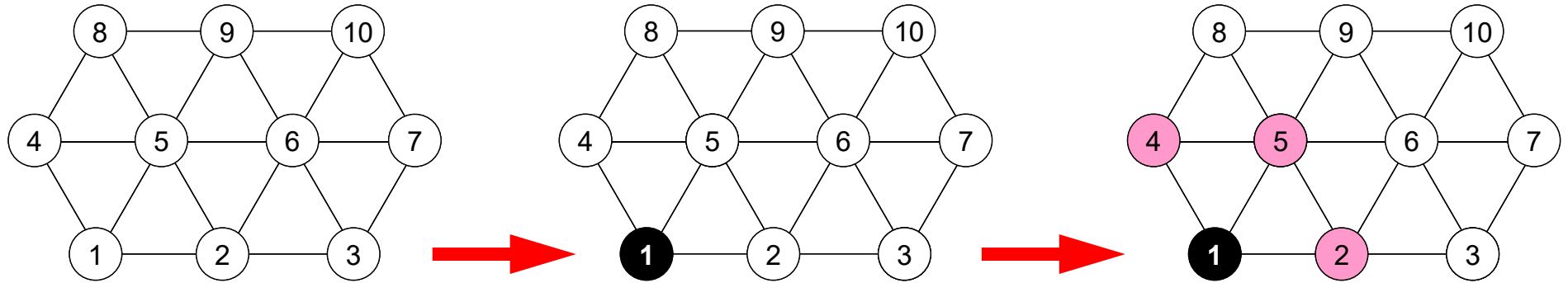


■ 非ゼロ成分, ■ Fill-in

修正されたCM法 並列計算向け

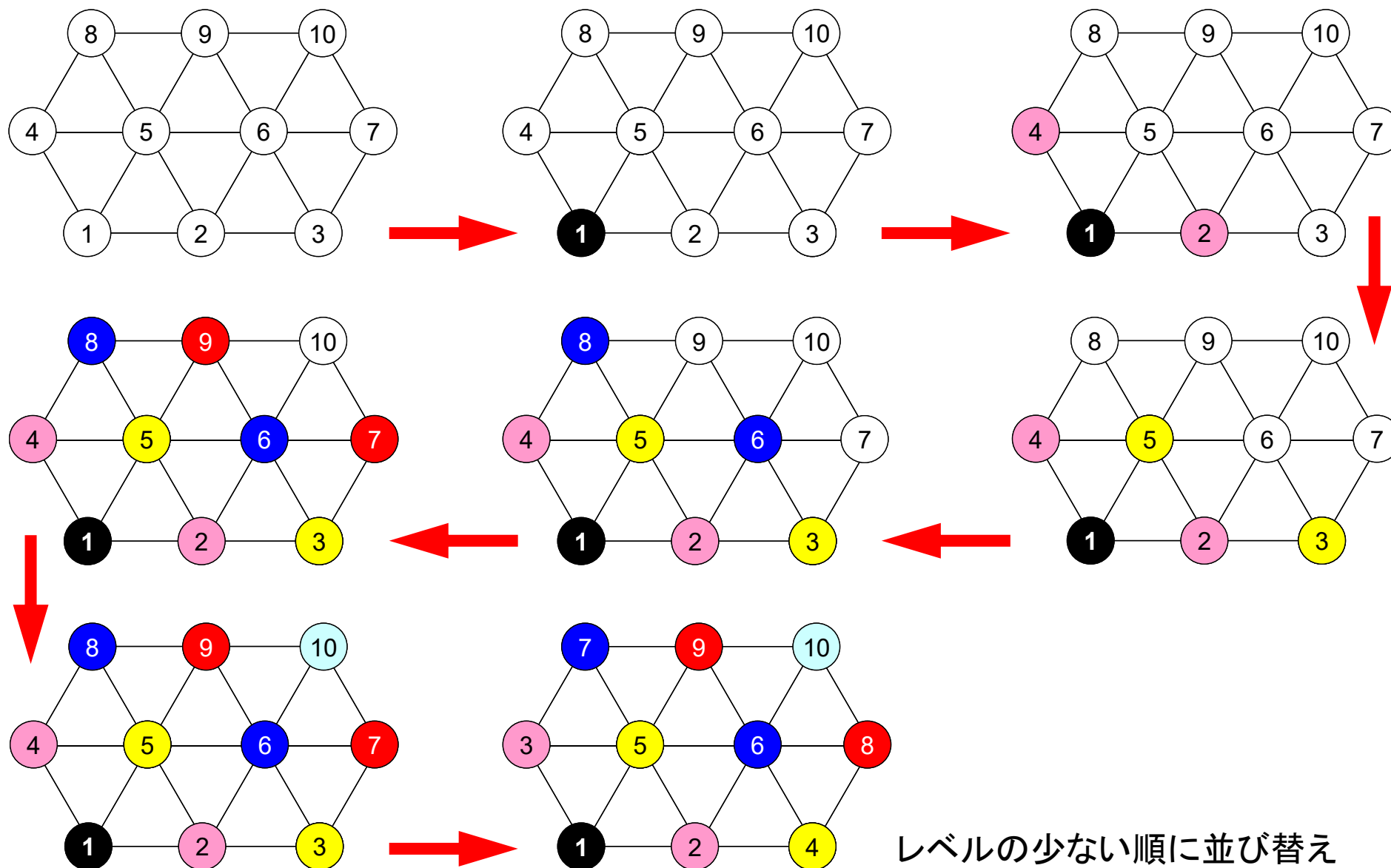
- ① 各要素に隣接する要素数を「次数」とし、最小次数の要素を「レベル=1」の要素とする。
- ② 「レベル=k-1」の要素に隣接する要素を「レベル=k」とする。同じレベルに属する要素はデータ依存性が発生しないように、隣接している要素同士が同じレベルに入る場合は一方を除外する(現状では先に見つかった要素を優先している)。全ての点要素にレベルづけがされるまで「k」を1つずつ増やして繰り返す。
- ③ 全ての要素がレベルづけされたら、レベルの順番に再番号づけする。同じレベル:連続した「新」要素番号

修正されたCM法

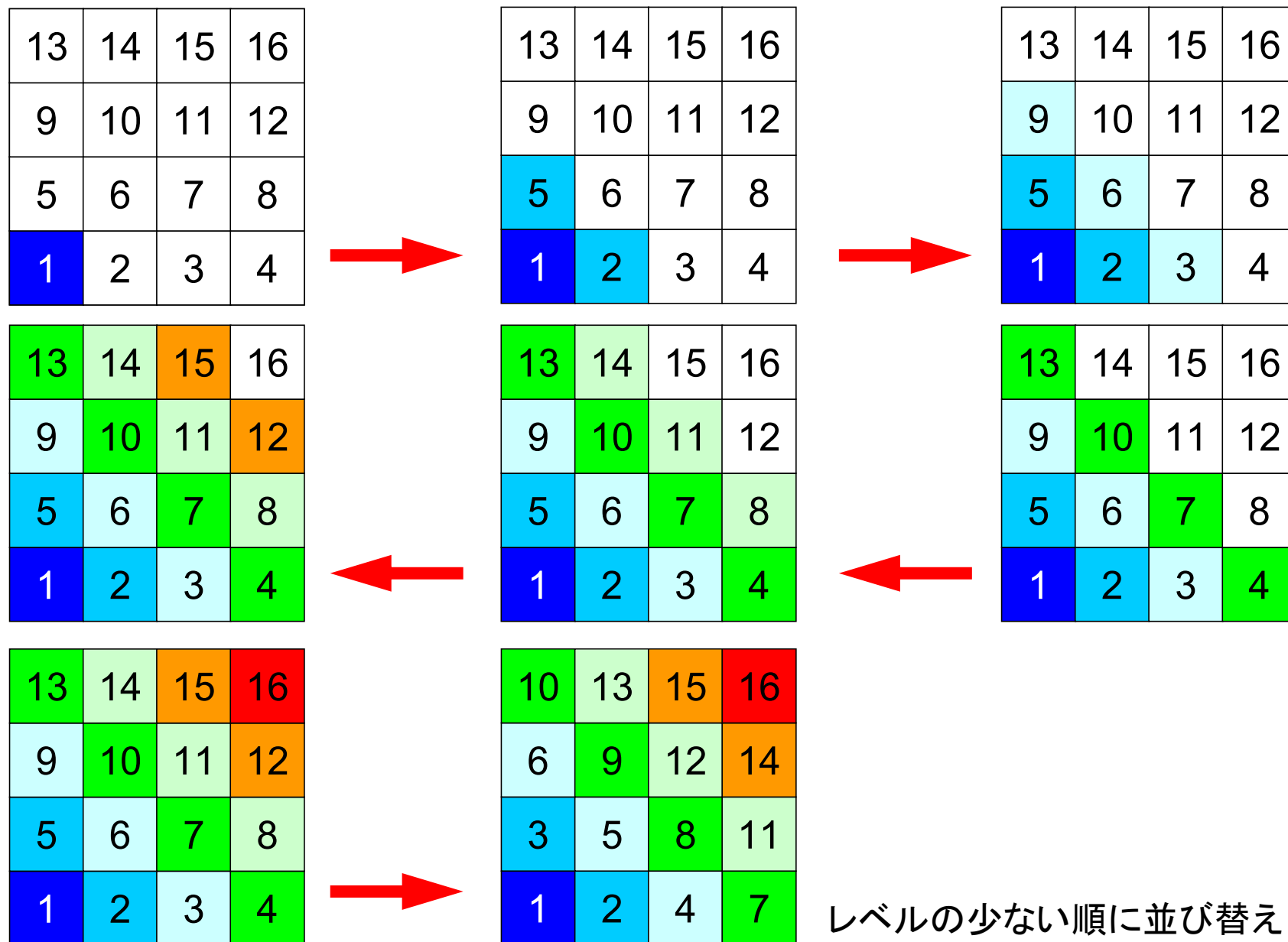


同じレベルに属する要素は
データ依存性が発生しない

修正されたCM法



修正されたCM法



MC法, CM/RCM法の違い

- CM法では, 同一レベル(色)における各要素の独立性だけでなく, 計算順序を考慮して, レベル間の依存性を考慮している点

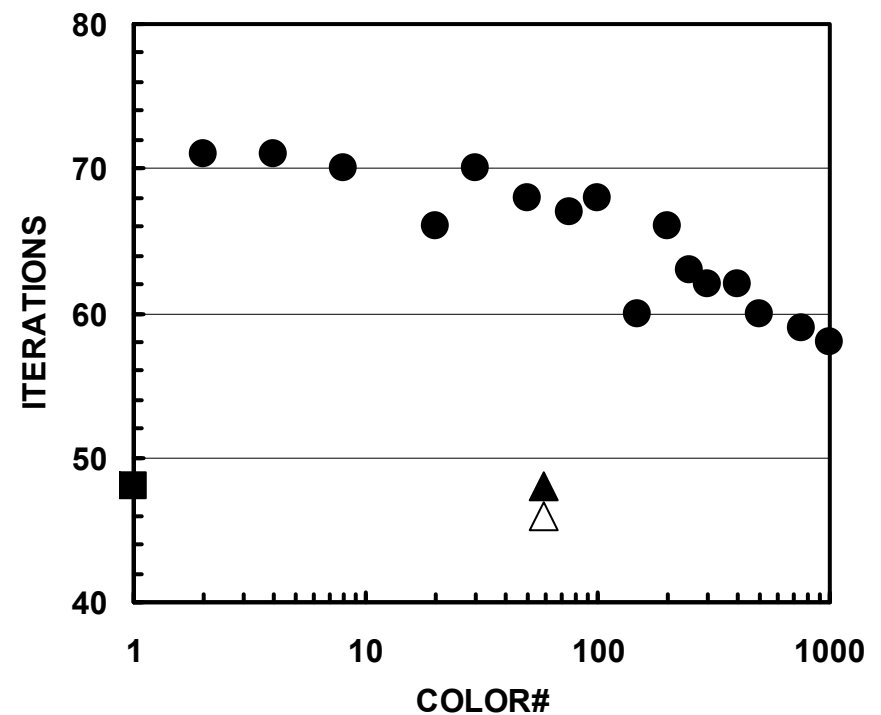
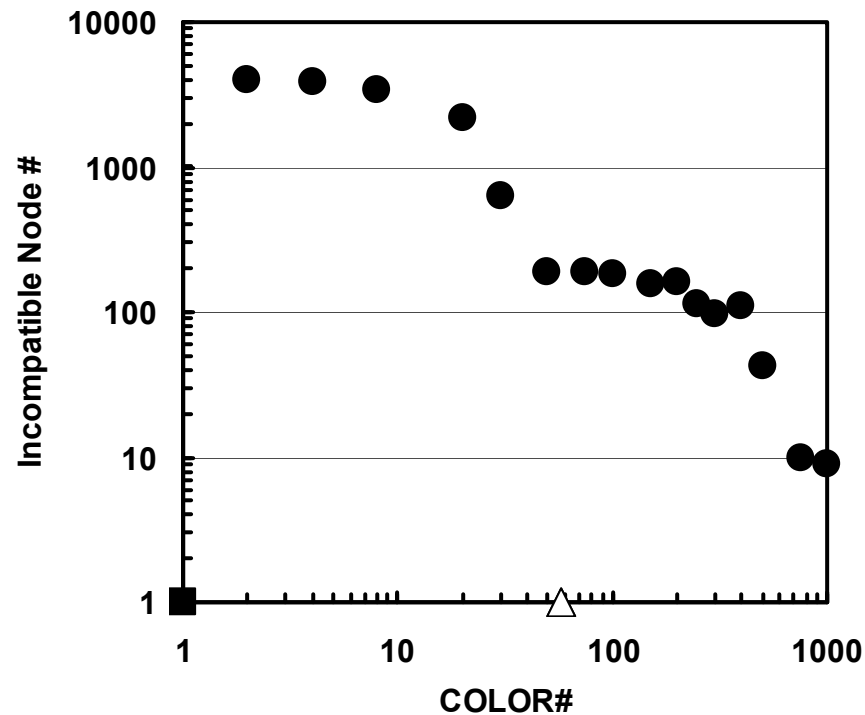
15	7	16	8
5	13	6	14
11	3	12	4
1	9	2	10

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

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

- データ依存性の解決策は?
- **オーダリング (Ordering) について**
 - Red-Black, Multicolor (MC)
 - Cuthill-McKee (CM), Reverse-CM (RCM)
 - **オーダリングと収束の関係**
- オーダリングの実装
- オーダリング付ICCG法の実装
- マルチコアへの実装 (OpenMP) へ向けて

ICCG法の収束（後述）



($20^3=8,000$ 要素, $\text{EPSICCG}=10^{-8}$)

(■ : ICCG(L1), ● : ICCG-MC, ▲ : ICCG-CM, △ : ICCG-RCM)

収束とオーダリングの関係（後述）

- 要素数 = 20^3
- Red-Black $\sim$ 4色 $<$ 初期状態 $\sim$ CM, RCM

初期状態

バンド幅	4
プロフィール	51
Fill-in	54

Red-Black

バンド幅	10
プロフィール	77
Fill-in	44

4色

バンド幅	10
プロフィール	57
Fill-in	46

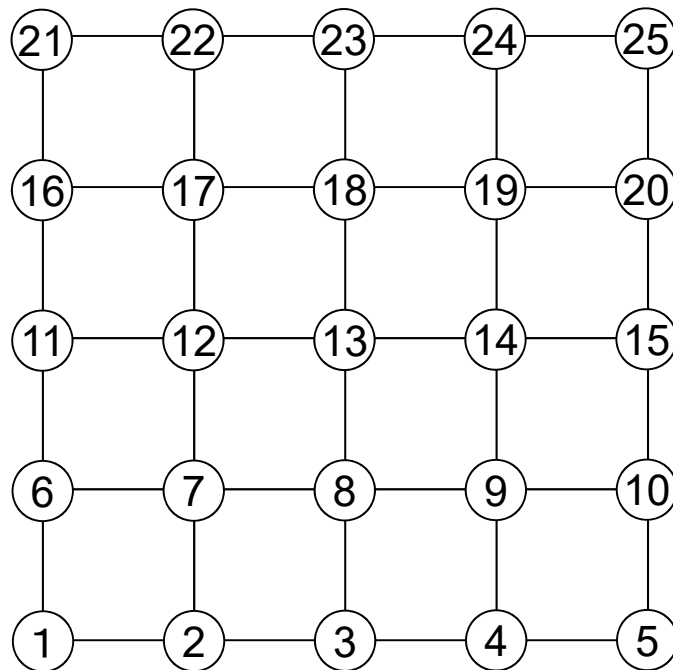
CM, RCM

バンド幅	4
プロフィール	46
Fill-in	44

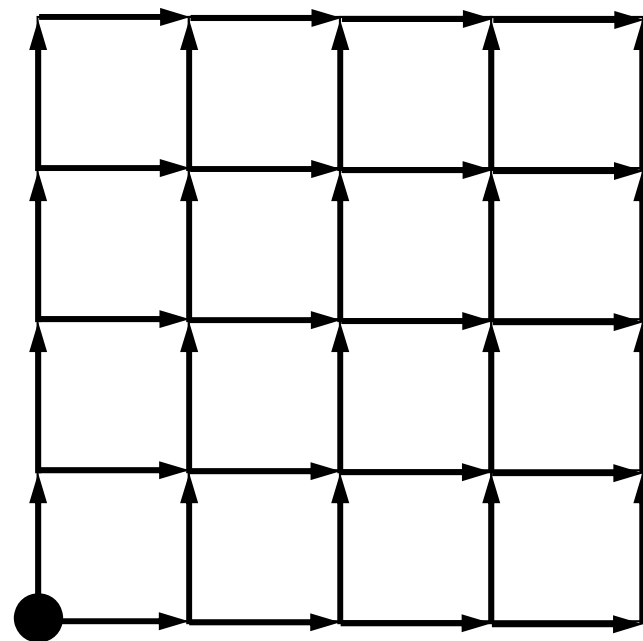
反復回数と色数の関係

Incompatible Nodesとは？

Doi, S. (NEC) et al.

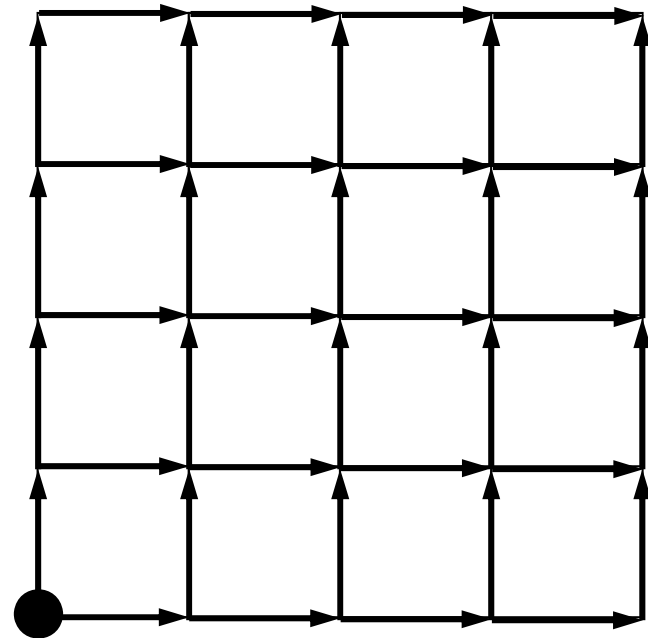
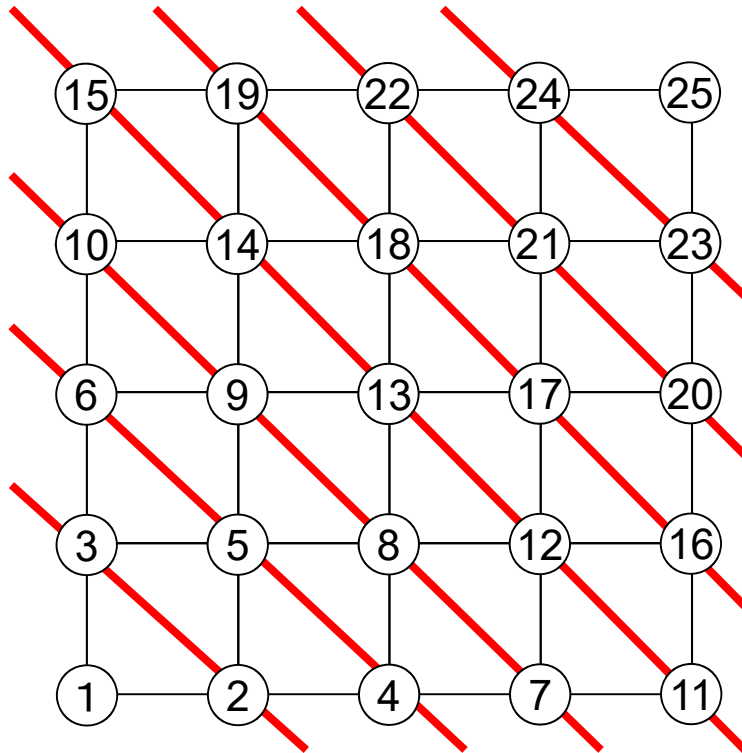


影響の伝わり方



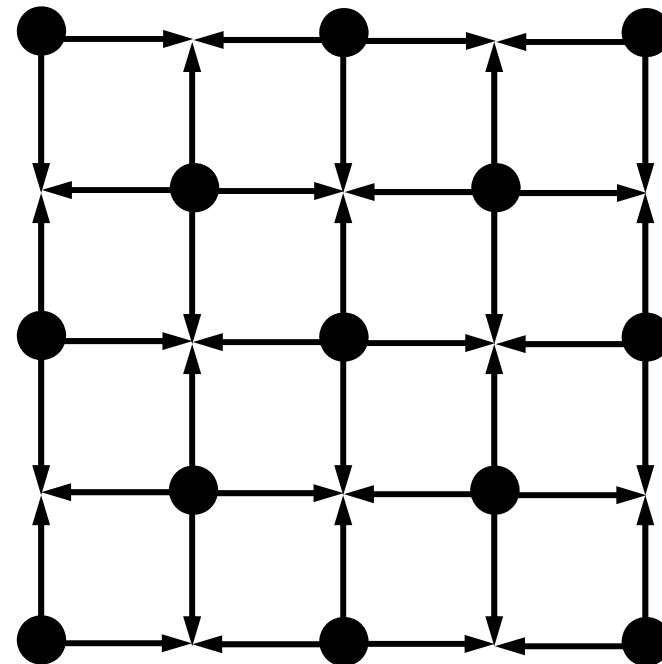
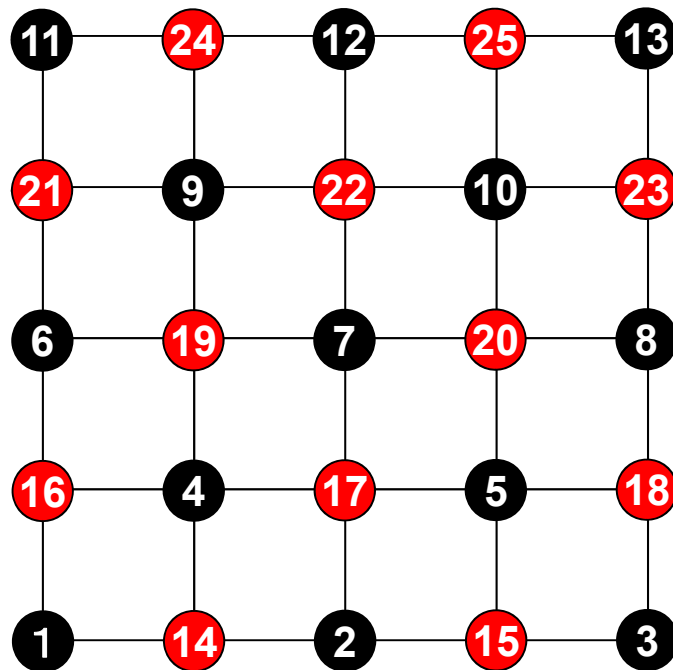
他から影響を受けない点が「Incompatible Node」
周囲の全ての点よりも番号が若い, ということ
少ない方が収束が早い

CM (Cuthill-McKee) の場合



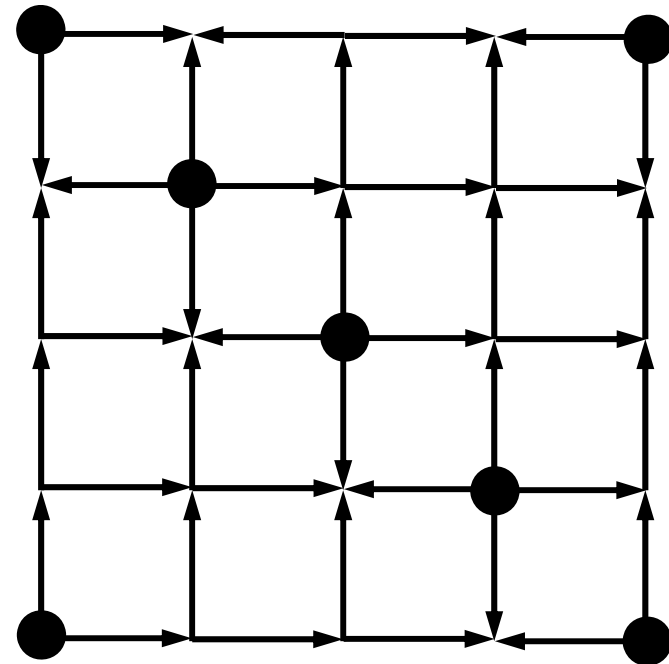
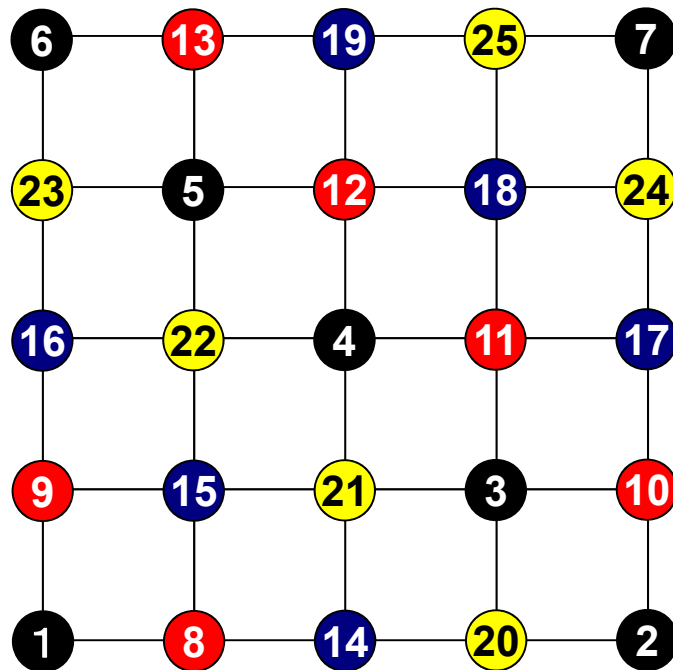
Red-Blackの場合

並列性は高いがincompatible node多い
ILU系前処理, Gauss-Seidelで反復回数増加



4色の場合

並列性は弱まるがincompatible nodeは減少
ILU系前処理, Gauss-Seidelで反復回数減少



収束とオーダーリング

- これ以外にも境界条件の影響などもあり、一概には言えない
- たとえばCMとRCMは本問題の場合全く同じになるはずであるが、RCMの方が若干収束が良い

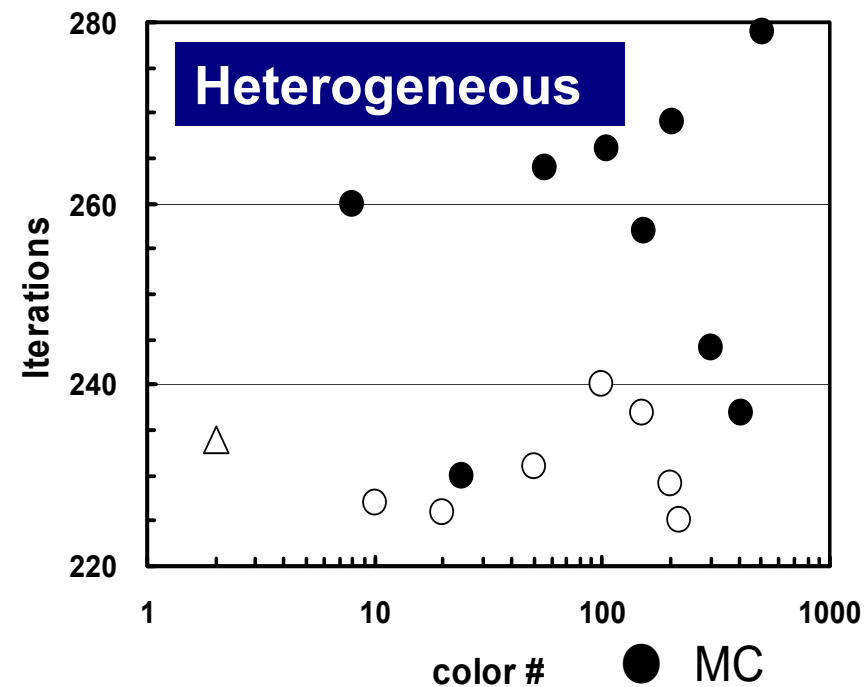
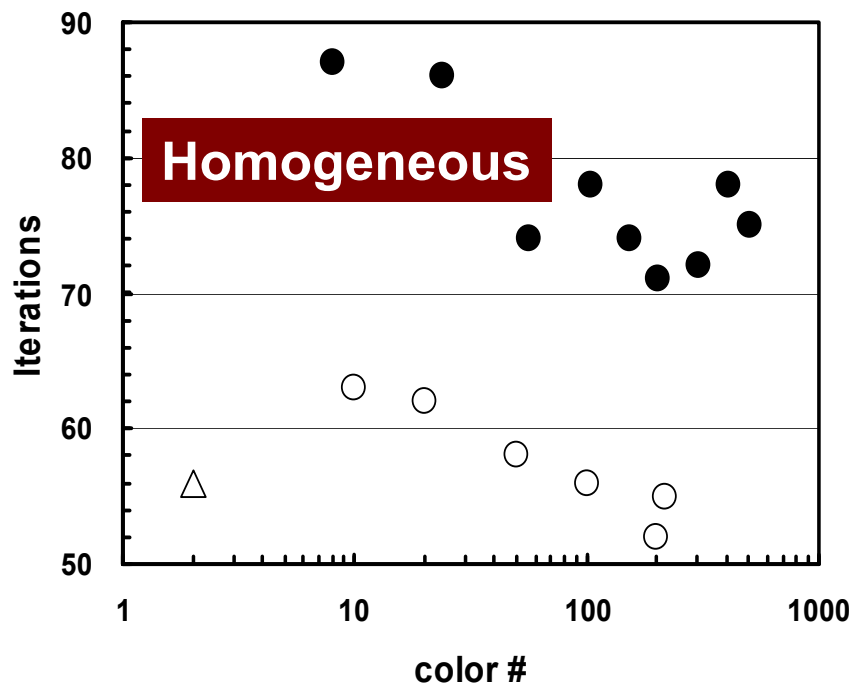
オーダリングの効果

- オーダリングによって、行列の処理の順番が変わり、何らかの「改善」が得られる。
 - 並列性の付与：並列計算，ベクトル計算への適合性
 - 収束が早くなる場合もある。
- 例に示したような単純な形状ですら，オーダリングをしなければ，並列化，ベクトル化できない。
- 注意点
 - オーダリングによって答えが変わることもある。
 - 対象としている物理，数学に関する深い知識と洞察を要する。

オーダリング手法の比較

三次元弾性問題

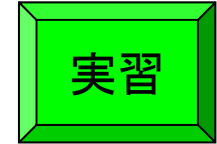
- MCは収束遅い, 不安定(特に不均質(悪条件)問題)
- Cyclic-Mulricoloring + RCM(CM-RCM) が有効(後述)
[Washio et al. 2000]



3D Linear-Elastic Problems with 32,768 DOF

● MC
○ CM-RCM
△ No reordering

- データ依存性の解決策は？
- オーダリング (Ordering) について
 - Red-Black, Multicolor (MC)
 - Cuthill-McKee (CM), Reverse-CM (RCM)
 - オーダリングと収束の関係
- **オーダリングの実装**
- オーダリング付ICCG法の実装
- マルチコアへの実装 (OpenMP) へ向けて



オーダリング実装 : L2-color

- 三次元形状(ここでは二次元)の色づけのプログラム
 - マルチカラーオーダリング, CM法, RCM法(CMRCMについてはこちら)

```
$ cd <$P-L2>/coloring/src
$ make
$ cd ../run
$ ./L2-color
  NX/NY/NZ ?
```

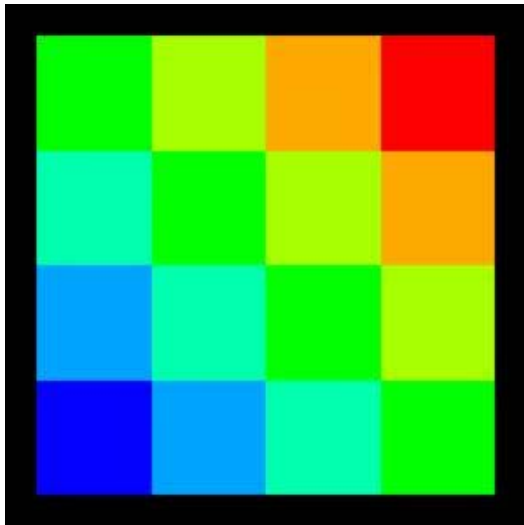
```
  4    4    1    ← このように入力する
You have      16 elements.
How many colors do you need ?
  #COLOR must be more than 2 and
  #COLOR must not be more than
    CM if #COLOR .eq. 0
    RCM if #COLOR .eq. -1
CMRCM if #COLOR .le. -2
=>
```

この2次元形状を接続関係に基づき色づけする。

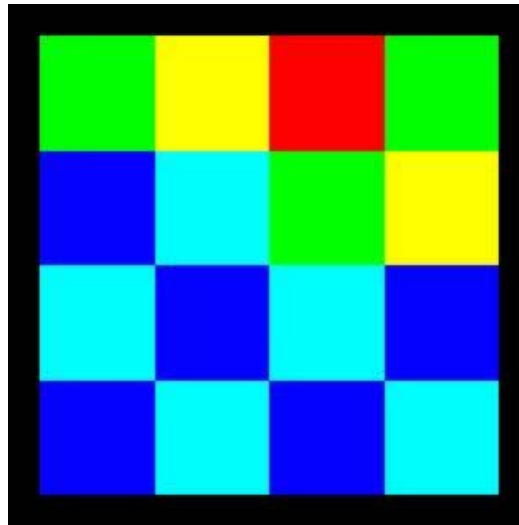
13	14	15	16
9	10	11	12
5	6	7	8
1	2	3	4

実施内容(2/2)

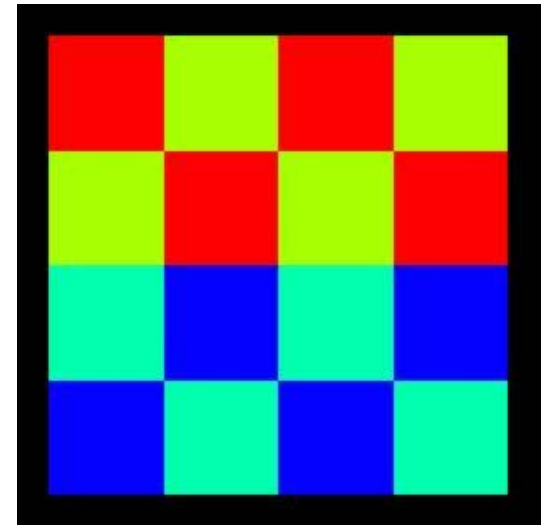
- 2つのファイルが生成される
 - color.log 新旧メッシュ番号の対応表
行列関連情報
 - color.inp メッシュの色分けファイル(ParaView用)



入力: 0
(CM, 7 colors)



入力: 3
(5 colors)



入力: 4
(4 colors)

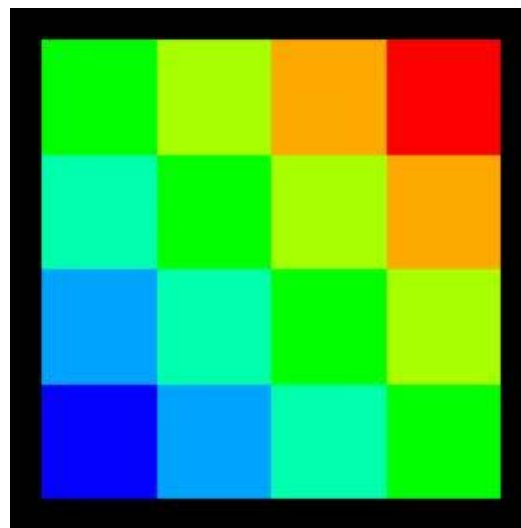
入力=0: CM(7色)

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



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

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



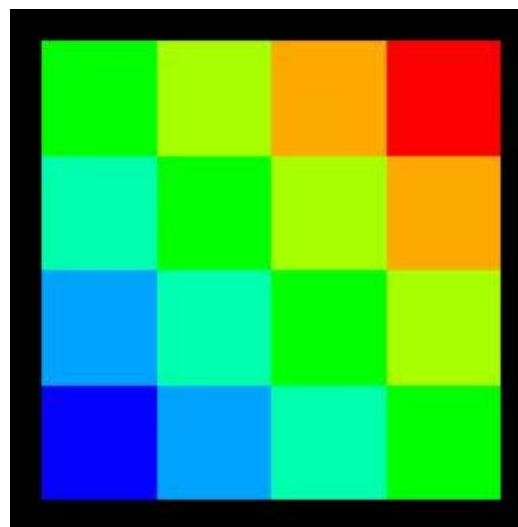
入力=0: CM(7色)

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



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

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



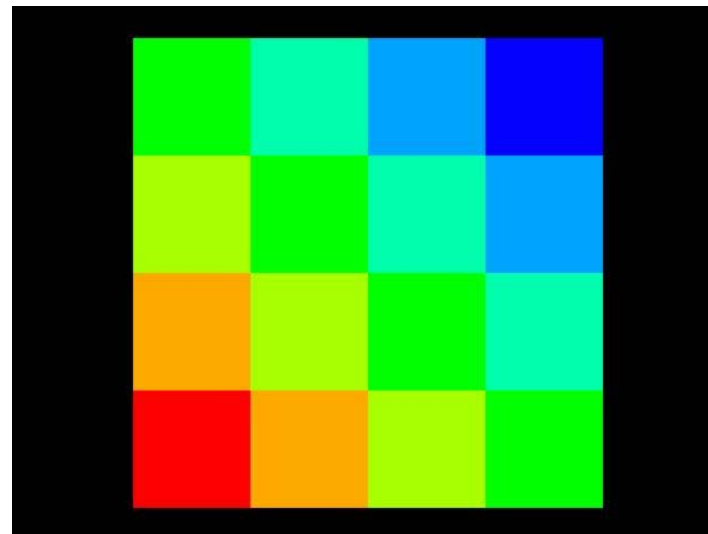
入力=-1: RCM(7色)

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



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

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



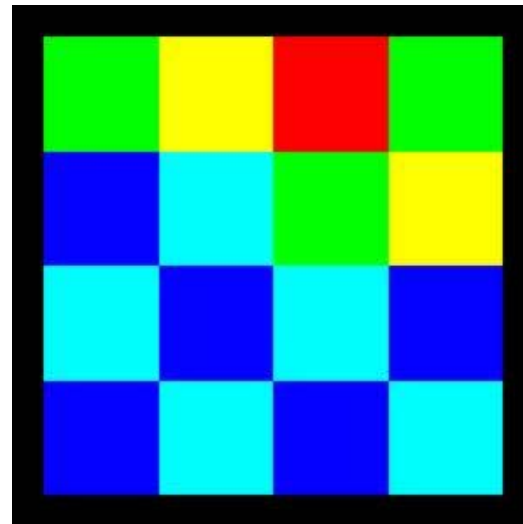
入力=3: 実際は5色(マルチカラー)

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



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

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



入力=3: 実際は5色(マルチカラー)

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



5			
	3		4
1		2	

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

$$16/3=5$$

「5」個ずつ独立な要素を元の
番号順に選択

入力=3: 実際は5色 (multicolor)

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



5	10		
8	3	9	4
1	6	2	7

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

$$16/3=5$$

「5」個ずつ独立な要素を元の
番号順に選択

入力=3: 実際は5色(マルチカラー)

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



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

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

$$16/3=5$$

独立な要素が無くなったら次の色へ

入力=3: 実際は5色(マルチカラー)

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



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

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

$$16/3=5$$

独立な要素が無くなったら次の色へ

入力=3: 実際は5色(マルチカラー)

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



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

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

$$16/3=5$$

最終的に5色必要であった

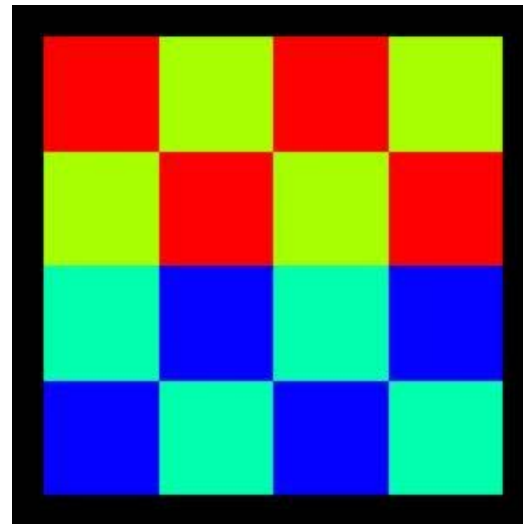
入力=4: 4色(マルチカラー)

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



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

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



入力=3: 実際は5色(マルチカラー)

color.log: 行列関連情報出力

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



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

```

### INITIAL connectivity
I= 1 INL(i)= 0 INU(i)= 2
  IAL: 1
  IAU: 2
I= 2 INL(i)= 1 INU(i)= 2
  IAL: 1
  IAU: 3
I= 3 INL(i)= 1 INU(i)= 2
  IAL: 2
  IAU: 4
I= 4 INL(i)= 1 INU(i)= 1
  IAL: 3
  IAU: 8
I= 5 INL(i)= 1 INU(i)= 2
  IAL: 1
  IAU: 6
I= 6 INL(i)= 2 INU(i)= 2
  IAL: 2
  IAU: 7
I= 7 INL(i)= 2 INU(i)= 2
  IAL: 3
  IAU: 8
I= 8 INL(i)= 2 INU(i)= 1
  IAL: 4
  IAU: 12
I= 9 INL(i)= 1 INU(i)= 2
  IAL: 5
  IAU: 10
I= 10 INL(i)= 2 INU(i)= 2
  IAL: 6
  IAU: 11
I= 11 INL(i)= 2 INU(i)= 2
  IAL: 7
  IAU: 12
I= 12 INL(i)= 2 INU(i)= 1
  IAL: 8
  IAU: 16
I= 13 INL(i)= 1 INU(i)= 1
  IAL: 9
  IAU: 14

```

```

I= 14 INL(i)= 2 INU(i)= 1
  IAL: 10
  IAU: 15
I= 15 INL(i)= 2 INU(i)= 1
  IAL: 11
  IAU: 16
I= 16 INL(i)= 2 INU(i)= 0
  IAL: 12
  IAU: 15

```

COLOR number 5

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

入力=3: 実際は5色(マルチカラー)

color.log: 行列関連情報出力

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



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

```

### FINAL connectivity
I= 1 INL(i)= 0 INU(i)= 2
IAL:
IAU: 6 8
I= 2 INL(i)= 0 INU(i)= 3
IAL:
IAU: 6 7 9
I= 3 INL(i)= 0 INU(i)= 4
IAL:
IAU: 6 8 9 10
I= 4 INL(i)= 0 INU(i)= 3
IAL:
IAU: 7 9 14
I= 5 INL(i)= 0 INU(i)= 3
IAL:
IAU: 8 10 12
I= 6 INL(i)= 3 INU(i)= 0
IAL:
IAU: 1 2 3
I= 7 INL(i)= 2 INU(i)= 0
IAL:
IAU: 2 4
I= 8 INL(i)= 3 INU(i)= 0
IAL:
IAU: 1 3 5
I= 9 INL(i)= 3 INU(i)= 1
IAL:
IAU: 2 3 4
I= 10 INL(i)= 2 INU(i)= 2
IAL:
IAU: 3 5
I= 11 INL(i)= 2 INU(i)= 2
IAL:
IAU: 9 10
I= 12 INL(i)= 1 INU(i)= 1
IAL:
IAU: 14 16
I= 13 INL(i)= 0 INU(i)= 2
IAL:
IAU: 15
IAL: 14 16

```

```

I= 14 INL(i)= 3 INU(i)= 0
IAL: 4 11 13
IAU:
I= 15 INL(i)= 2 INU(i)= 1
IAL: 10 12
IAU: 16
I= 16 INL(i)= 3 INU(i)= 0
IAL: 11 15 13
IAU:

```

「L2-color」のソースファイル

```
$ cd <$P-L2>/coloring/src  
$ ls
```

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

この2次元形状を色づけする。

プログラムの構成

```
program MAIN

use STRUCT
use PCG

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

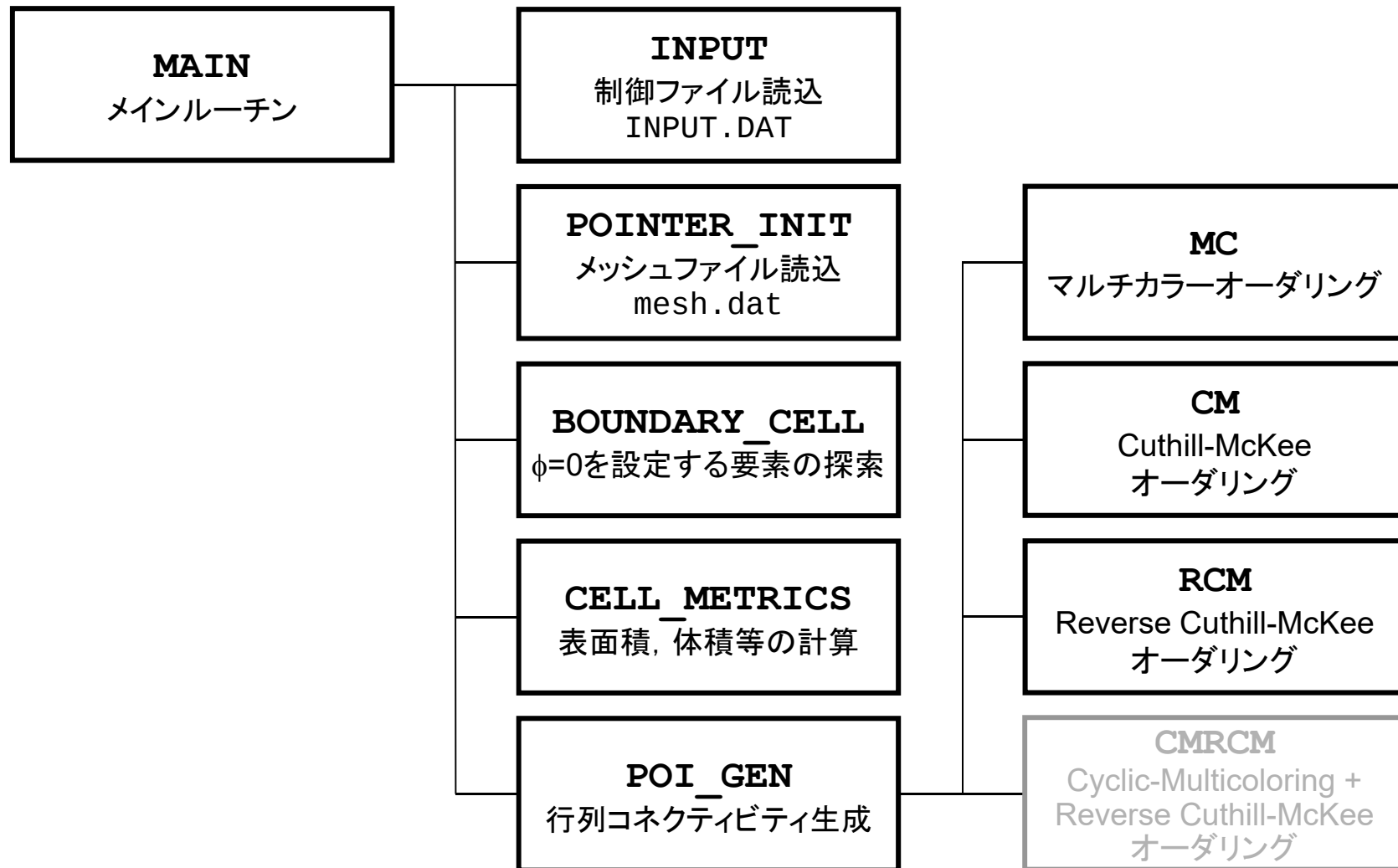
call POINTER_INIT
call POI_GEN

call OUTUCD

open (21, file='color.log', status='unknown')
write (21, '(//, a, i8, /)') 'COLOR number', NCOLORTot
do ic= 1, NCOLORTot
  do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
    write (21, '(3(a, i8))') '#new', i, '#old', NEWtoOLD(i), &
&      color', ic
  enddo
enddo
close (21)

stop
end
```

プログラムの構成図



プログラムの構成

```
program MAIN

  use STRUCT
  use PCG

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

  call POINTER_INIT
  call POI_GEN

  call OUTUCD

  open (21, file='color.log', status='unknown')
    write (21, '(//, a, i8, /)') 'COLOR number', NCOLORTot
    do ic= 1, NCOLORTot
      do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
        write (21, '(3(a, i8))') '#new', i, '#old', NEWtoOLD(i), &
&      color', ic
      enddo
    enddo
  close (21)

  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

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 (後述)

NEIBcell(ICELTOT, 6) :

隣接要素 (後述)

module PCG

```

module PCG

integer, parameter :: N2= 256
integer :: NUmex, NLmax, NCOLORtot, NCOLORk, NU, NL

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

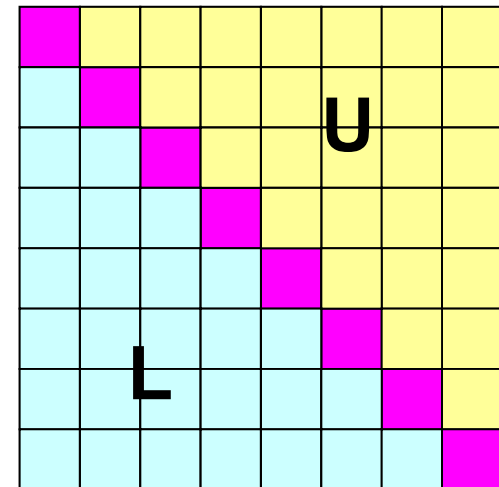
integer, dimension(:, :), allocatable :: IAL, IAU

end module PCG

```

扱う行列：疎行列
 (自分の周辺のみと接続)
 ⇒ 非ゼロ成分のみを記憶する

上下三角成分を別々に記憶



module PCG

```

module PCG

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

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

end module PCG

```

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。

$$IAL(ico_u, i) < i$$

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。

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

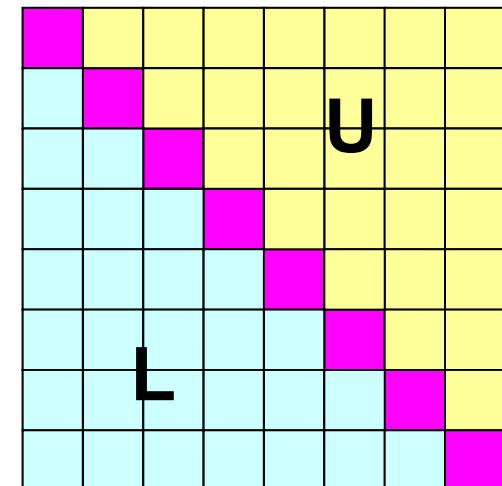
INL (ICELTOT)
IAL (NL, ICELTOT)
INU (ICELTOT)
IAU (NU, ICELTOT)
NU, NL
NUmax, NLmax

NCOLORtot
COLORindex (0:NCOLORtot)

OLDtoNEW, NEWtoOLD

下三角成分の数
下三角成分（列番号）
上三角成分の数
上三角成分（列番号）
上下三角成分の最大数（ここでは6）
未使用

色数, レベル数
各色 (レベル) に含まれる要素数の
インデックス
($\text{COLORindex}(\text{icol}) - \text{COLORindex}(\text{icol} - 1)$)
Coloring前後の要素番号対照表



module PCG

```

module PCG

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

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

end module PCG

```

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)**

INL(ICELTOT)

IAL(NL, ICELTOT)

INU(ICELTOT)

IAU(NU, ICELTOT)

NU, NL

NUmax, NLmax

NCOLORTot

COLORindex(0:NCOLORTot)

OLDtoNEW, NEWtoOLD

下三角成分の数

下三角成分 (列番号)

上三角成分の数

上三角成分 (列番号)

上下三角成分の最大数 (ここでは6)

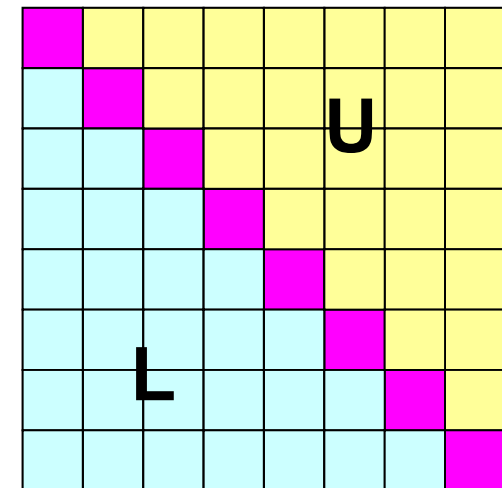
未使用

色数, レベル数

各色 (レベル) に含まれる要素数の
インデックス

$(COLORindex(icol) - COLORindex(icol-1))$

Coloring前後の要素番号対照表



入力=3: 実際は5色 (multicolor)

color.logに行列関連情報出力

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



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

```

### INITIAL connectivity
I= 1 INL(i)= 0 INU(i)= 2
IAL: 1
IAU: 2
I= 2 INL(i)= 1 INU(i)= 2
IAL: 1
IAU: 3
I= 3 INL(i)= 1 INU(i)= 2
IAL: 2
IAU: 4
I= 4 INL(i)= 1 INU(i)= 1
IAL: 3
IAU: 8
I= 5 INL(i)= 1 INU(i)= 2
IAL: 1
IAU: 6
I= 6 INL(i)= 2 INU(i)= 2
IAL: 2
IAU: 7
I= 7 INL(i)= 2 INU(i)= 2
IAL: 3
IAU: 8
I= 8 INL(i)= 2 INU(i)= 1
IAL: 4
IAU: 12
I= 9 INL(i)= 1 INU(i)= 2
IAL: 5
IAU: 10
I= 10 INL(i)= 2 INU(i)= 2
IAL: 6
IAU: 11
I= 11 INL(i)= 2 INU(i)= 2
IAL: 7
IAU: 12
I= 12 INL(i)= 2 INU(i)= 1
IAL: 8
IAU: 16
I= 13 INL(i)= 1 INU(i)= 1
IAL: 9
IAU: 14

```

```

I= 14 INL(i)= 2 INU(i)= 1
IAL: 10
IAU: 15
I= 15 INL(i)= 2 INU(i)= 1
IAL: 11
IAU: 16
I= 16 INL(i)= 2 INU(i)= 0
IAL: 12
IAU: 15

```

COLOR number 5

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

入力=3: 実際は5色 (multicolor)

color.logに行列関連情報出力

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



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

```

### FINAL connectivity
I= 1 IAL: 1 INL(i)= 0 INU(i)= 2
IAU: 6 8
I= 2 IAL: 2 INL(i)= 0 INU(i)= 3
IAU: 6 7 9
I= 3 IAL: 3 INL(i)= 0 INU(i)= 4
IAU: 6 8 9 10
I= 4 IAL: 4 INL(i)= 0 INU(i)= 3
IAU: 7 9 14
I= 5 IAL: 5 INL(i)= 0 INU(i)= 3
IAU: 8 10 12
I= 6 IAL: 6 INL(i)= 3 INU(i)= 0
IAU: 1 2 3
I= 7 IAL: 7 INL(i)= 2 INU(i)= 0
IAU: 2 4
I= 8 IAL: 8 INL(i)= 3 INU(i)= 0
IAU: 1 3 5
I= 9 IAL: 9 INL(i)= 3 INU(i)= 1
IAU: 2 3 4
I= 10 IAL: 10 INL(i)= 2 INU(i)= 2
IAU: 3 5 11 15
I= 11 IAL: 11 INL(i)= 2 INU(i)= 2
IAU: 9 10 14 16
I= 12 IAL: 12 INL(i)= 1 INU(i)= 1
IAU: 5 15
I= 13 IAL: 13 INL(i)= 0 INU(i)= 2
IAU: 14 16
  
```

```

I= 14 IAL: 14 INL(i)= 3 INU(i)= 0
IAU: 4 11 13
I= 15 IAL: 15 INL(i)= 2 INU(i)= 1
IAU: 10 12
I= 16 IAL: 16 INL(i)= 3 INU(i)= 0
IAU: 11 15 13
  
```

プログラムの構成

```
program MAIN

use STRUCT
use PCG

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

call POINTER_INIT
call POI_GEN

call OUTUCD

open (21, file='color.log', status='unknown')
  write (21, '(//, a, i8, /)') 'COLOR number', NCOLORTot
  do ic= 1, NCOLORTot
    do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
      write (21, '(3(a, i8))') '#new', i, '#old', NEWtoOLD(i), &
&      color', ic
    enddo
  enddo
close (21)

stop
end
```

pointer_init(1/3)

```
!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===
      write (*,*) 'NX/NY/NZ ?'
      read  (*,*)  NX, NY, NZ

      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 :

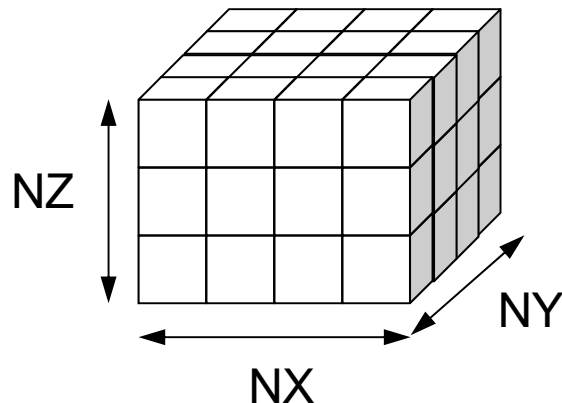
要素数 ($NX \times NY \times NZ$)

NEIBcell(ICELTOT, 6) :

隣接要素

XYZ(ICELTOT, 3) :

要素座標



pointer_init(2/3)

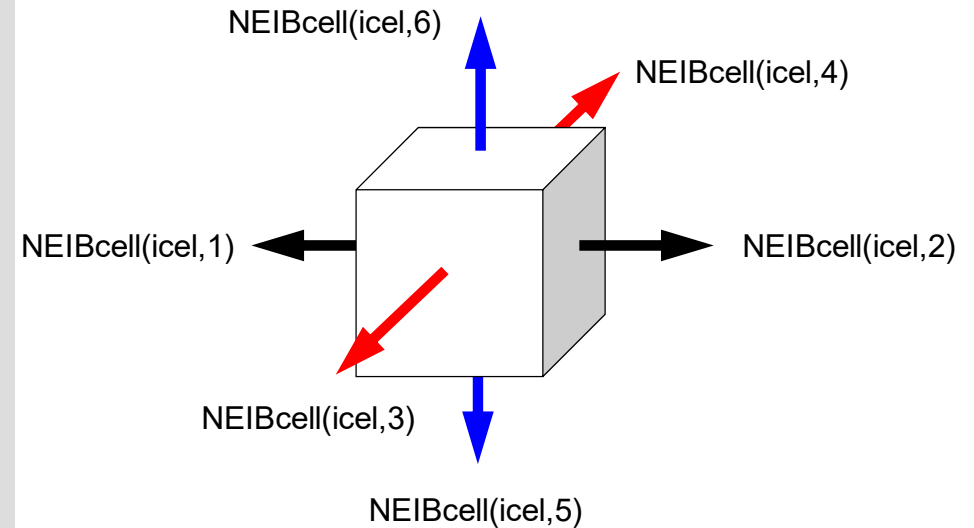
```

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
```

NXP1, NYP1, NZP1などはUCD
ファイル出力に必要

プログラムの構成

```
program MAIN

use STRUCT
use PCG

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

call POINTER_INIT
call POI_GEN

call OUTUCD

open (21, file='color.log', status='unknown')
write (21, '(//, a, i8, /)') 'COLOR number', NCOLORTot
do ic= 1, NCOLORTot
  do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
    write (21, '(3(a, i8))') , #new', i, ' #old', NEWtoOLD(i), &
&      color', ic
  enddo
enddo
close (21)

stop
end
```

poi_gen (1/4)

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

配列の宣言

```

!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)

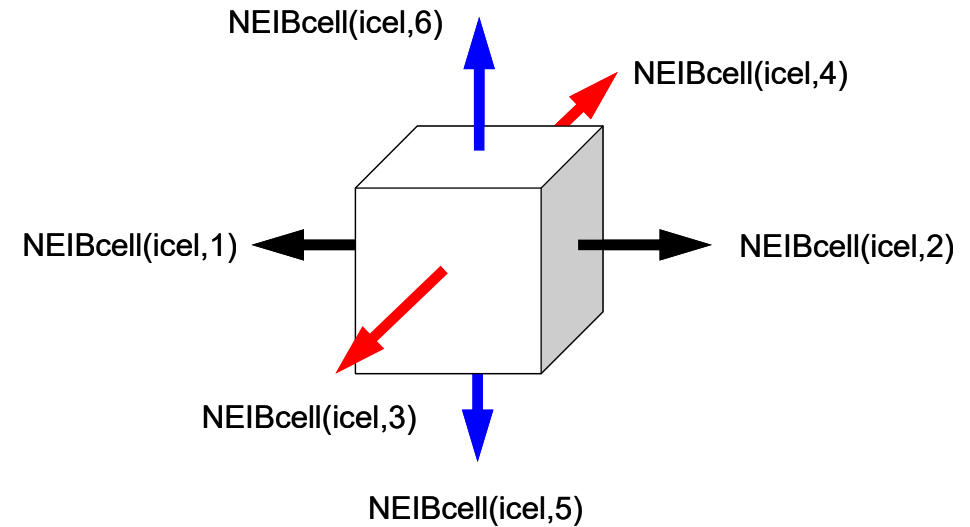
  icouG= 0
  if (icN5.ne.0.and.icN5.le.ICELTOT) then
    icou= INL(icel) + 1
    IAL(icou,icel)= icN5
    INL(      icel)= icou
  endif

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

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

```

poi_gen(2/4)



下三角成分

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

```

!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)

        ...

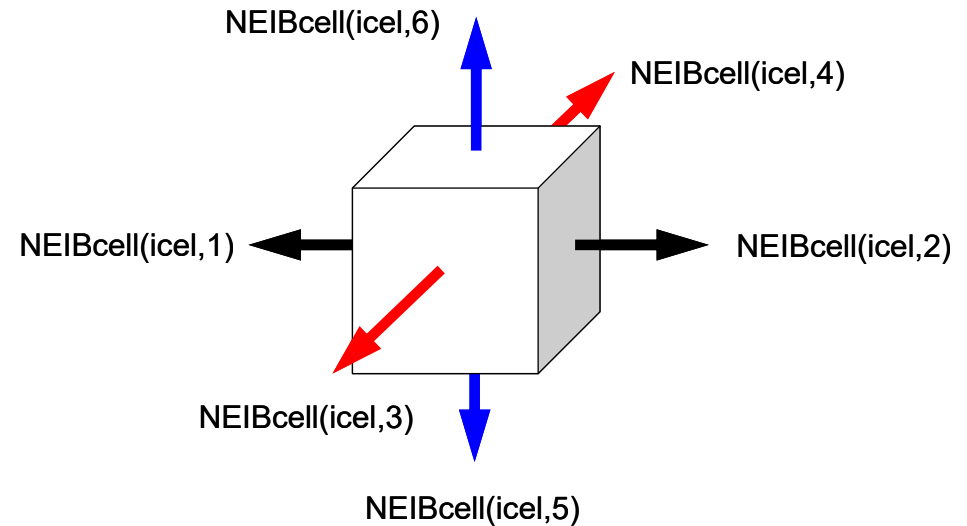
        if (icN2.ne.0.and.icN2.le.ICELTOT) then
          icou= INU(icel) + 1
          IAU(icou,icel)= icN2
          INU(      icel)= icou
        endif

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

        if (icN6.ne.0.and.icN6.le.ICELTOT) then
          icou= INU(icel) + 1
          IAU(icou,icel)= icN6
          INU(      icel)= icou
        endif
      enddo
!C===

```

poi_gen(3/4)



上三角成分

```

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

```

poi_gen(4/4)

```

!C
!C +-----+
!C | MULTICOLORING |
!C +-----+
!C==
111 continue
write (*, '(//a, i8, a)') 'You have', ICELTOT, ' elements.'
write (*, '( a      )') 'How many colors do you need ?'
write (*, '( a      )') ' #COLOR must be more than 2 and'
write (*, '( a, i8  )') ' #COLOR must not be more than', ICELTOT
write (*, '( a      )') ' if #COLOR=0 : CM ordering'
write (*, '( a      )') ' if #COLOR<0 : RCM ordering'
write (*, '( a      )') '=>'
read (*, *) NCOLORTot
if (NCOLORTot.eq.1.or.NCOLORTot.gt.ICELTOT) goto 111

allocate (OLDtoNEW(ICELTOT), NEWtoOLD(ICELTOT))
allocate (COLORindex(0:ICELTOT))

if (NCOLORTot.gt.0) then
  call MC (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&          NCOLORTot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
endif
if (NCOLORTot.eq.0) then
  call CM (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&          NCOLORTot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
endif
if (NCOLORTot.lt.0) then
  call RCM (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&           NCOLORTot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
endif
!C==

write (*, '(//a, i8)') '# TOTAL COLOR number', NCOLORTot

```

色数を読み込む

poi_gen(4/4)

```

!C
!C +-----+
!C | MULTICOLORING |
!C +-----+
!C==
111 continue
write (*, '(//a, i8, a)') 'You have', ICELTOT, ' elements.'
write (*, '( a      )') 'How many colors do you need ?'
write (*, '( a      )') ' #COLOR must be more than 2 and'
write (*, '( a, i8  )') ' #COLOR must not be more than', ICELTOT
write (*, '( a      )') ' if #COLOR=0 : CM ordering'
write (*, '( a      )') ' if #COLOR<0 : RCM ordering'
write (*, '( a      )') '=>'
read (*, *) NCOLORTot
if (NCOLORTot.eq.1.or.NCOLORTot.gt.ICELTOT) goto 111

allocate (OLDtoNEW(ICELTOT), NEWtoOLD(ICELTOT))
allocate (COLORindex(0:ICELTOT))

if (NCOLORTot.gt.0) then
  call MC (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&          NCOLORTot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
endif
if (NCOLORTot.eq.0) then
  call CM (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&          NCOLORTot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
endif
if (NCOLORTot.lt.0) then
  call RCM (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&           NCOLORTot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
endif
!C==

write (*, '(//a, i8)') '# TOTAL COLOR number', NCOLORTot

```

配列宣言を実施する。

poi_gen(4/4)

```
!C
!C +-----+
!C | MULTICOLORING |
!C +-----+
!C==
...
      if (NCOLORtot.gt.0) then
        call MC (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&              NCOLORtot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
      endif
      if (NCOLORtot.eq.0) then
        call CM (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&              NCOLORtot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
      endif
      if (NCOLORtot.lt.0) then
        call RCM (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&              NCOLORtot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
      endif
!C==

      write (*,' (/a, i8)') '# TOTAL COLOR number', NCOLORtot
```

INL, INU, IAL, IAU

OLDtoNEW, NEWtoOLD

NCOLORtot

COLORindex(0:NCOLORtot)

再番号付け後の情報が入る

新旧要素番号対象表

色数(入力値と同じかそれより大きくなる)

COLORindex(ic-1)+1からCOLORindex(ic)までの
要素(再番号付け後)が「ic」色になる。

同じ色の要素は互いに独立: 並列計算可能

COLORindex

COLORindex(0:NCOLORtot)

COLORindex(ic-1)+1からCOLORindex(ic)までの要素(再番号付け後)が「ic」色になる。
同じ色の要素は互いに独立: 並列計算可能

```
do ic= 1, NCOLORtot
  do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
    write (21,*) i, NEWtoOLD(i), ic
  enddo
enddo
```

COLOR	number	5			
#new	1	#old	1	color	1
#new	2	#old	3	color	1
#new	3	#old	6	color	1
#new	4	#old	8	color	1
#new	5	#old	9	color	1
#new	6	#old	2	color	2
#new	7	#old	4	color	2
#new	8	#old	5	color	2
#new	9	#old	7	color	2
#new	10	#old	10	color	2
#new	11	#old	11	color	3
#new	12	#old	13	color	3
#new	13	#old	16	color	3
#new	14	#old	12	color	4
#new	15	#old	14	color	4
#new	16	#old	15	color	5

mc(1/8)

```
!C
!C***
!C*** MC
!C***
!C
!C   Multicolor Ordering Method
!C

      subroutine MC (N, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,          &
&                  NCOLORTot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)

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

      integer, dimension(N)      :: INL, INU, NEWtoOLD, OLDtoNEW
      integer, dimension(0:N)    :: COLORindex
      integer, dimension(NL, N) :: IAL
      integer, dimension(NU, N) :: IAU

      integer, dimension(:)      , allocatable :: IW, INLw, INUw
      integer, dimension(:, :)   , allocatable :: IALw, IAUw
```

```

!C
!C +-----+
!C |  INIT.  |
!C +-----+
!C===
      allocate (IW(N))
      IW= 0

      NCOLORK = NCOLORTOT

      do i= 1, N
        NEWtoOLD (i)= i
        OLDtoNEW (i)= i
      enddo

      INmin= N
      NODmin= 0
      do i= 1, N
        icon= INL(i) + INU(i)
        if (icon.lt.INmin) then
          INmin= icon
          NODmin= i
        endif
      enddo

      OLDtoNEW (NODmin)= 1
      NEWtoOLD (      1)= NODmin
      IW          = 0
      IW (NODmin)= 1

      ITEMcou= N/NCOLORK
!C===

```

mc(2/8)

作業配列「IW」に「0」を入れる
IWには各要素の色番号が入る

接続要素数(次数)が最小の要素を探索
NODmin

```

!C
!C +-----+
!C |  INIT.  |
!C +-----+
!C===
      allocate (IW(N))
      IW= 0

      NCOLORK = NCOLORTOT

      do i= 1, N
        NEWtoOLD (i)= i
        OLDtoNEW (i)= i
      enddo

      INmin= N
      NODmin= 0
      do i= 1, N
        icon= INL(i) + INU(i)
        if (icon.lt. INmin) then
          INmin= icon
          NODmin= i
        endif
      enddo

      OLDtoNEW (NODmin)= 1
      NEWtoOLD (      1)= NODmin
      IW      = 0
      IW (NODmin)= 1

      ITEMcou= N/NCOLORK
!C===

```

mc(2/8)

接続要素数が最小の要素をオーダリング後の「1」番とする。対照表を更新。

作業配列「IW(NODmin)」に「1(色番号)」を入れる。

```

!C
!C +-----+
!C |  INIT.  |
!C +-----+
!C===
      allocate (IW(N))
      IW= 0

      NCOLORK = NCOLORTOT

      do i= 1, N
        NEWtoOLD (i)= i
        OLDtoNEW (i)= i
      enddo

      INmin= N
      NODmin= 0
      do i= 1, N
        icon= INL(i) + INU(i)
        if (icon.lt.INmin) then
          INmin= icon
          NODmin= i
        endif
      enddo

      OLDtoNEW(NODmin)= 1
      NEWtoOLD(      1)= NODmin
      IW      = 0
      IW(NODmin)= 1

      ITEMcou= N/NCOLORK
!C===

```

mc(2/8)

各色に含まれる要素数の目安

入力=3: 実際は5色 (multicolor)

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



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

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

$$16/3=5 = \underline{\text{ITEMcou}}$$

最終的に5色必要であった

切り上げ・切り下げで変わる

mc(3/8)

カウンタ初期化

icou : 全体のカウンタ
icouK : 色内のカウンタ

```
!C
!C +-----+
!C | MULTicoloring |
!C +-----+
!C===
      icou = 1
      icouK= 1

      do icol= 1, N
        NCOLORk= icol
        do i= 1, N
          if (IW(i).le.0) IW(i)= 0
        enddo

        do i= 1, N
!C
!C-- already COLORED
          if (IW(i).eq.icol) then
            do k= 1, INL(i)
              ik= IAL(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
            do k= 1, INU(i)
              ik= IAU(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
          endif
!C
!C-- not COLORED
          if (IW(i).eq.0) then
            icou = icou + 1
            icouK= icouK + 1
            IW(i)= icol
            do k= 1, INL(i)
              ik= IAL(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
            do k= 1, INU(i)
              ik= IAU(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
          endif
        enddo
      enddo
```

mc(3/5)

色数に関するループ

```

!C
!C +-----+
!C | MULTicoloring |
!C +-----+
!C===
      icou = 1
      icouK= 1

      do icol= 1, N
        NCOLORk= icol
        do i= 1, N
          if (IW(i).le.0) IW(i)= 0
        enddo

        do i= 1, N
!C
!C-- already COLORED
          if (IW(i).eq.icol) then
            do k= 1, INL(i)
              ik= IAL(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
            do k= 1, INU(i)
              ik= IAU(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
          endif
!C
!C-- not COLORED
          if (IW(i).eq.0) then
            icou = icou + 1
            icouK= icouK + 1
            IW(i)= icol
            do k= 1, INL(i)
              ik= IAL(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
            do k= 1, INU(i)
              ik= IAU(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
          endif

```

mc(3/8)

```

!C
!C +-----+
!C | MULTicoloring |
!C +-----+
!C===
      icou = 1
      icouK= 1

      do icol= 1, N
        NCOLORK= icol
        do i= 1, N
          if (IW(i).le.0) IW(i)= 0
        enddo

        do i= 1, N
!C
!C-- already COLORED
          if (IW(i).eq.icol) then
            do k= 1, INL(i)
              ik= IAL(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
            do k= 1, INU(i)
              ik= IAU(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
          endif
!C
!C-- not COLORED
          if (IW(i).eq.0) then
            icou = icou + 1
            icouK= icouK + 1
            IW(i)= icol
            do k= 1, INL(i)
              ik= IAL(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
            do k= 1, INU(i)
              ik= IAU(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
          endif

```

現在の色数を「NCOLORk」とする。

色づけされていない要素の「IW」の値を0とする。

```

!C
!C +-----+
!C | MULTicoloring |
!C +-----+
!C===
      icou = 1
      icouK= 1

      do icol= 1, N
        NCOLORK= icol
        do i= 1, N
          if (IW(i).le.0) IW(i)= 0
        enddo

        do i= 1, N
!C
!C-- already COLORED
          if (IW(i).eq.icol) then
            do k= 1, INL(i)
              ik= IAL(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
            do k= 1, INU(i)
              ik= IAU(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
          endif
!C
!C-- not COLORED
          if (IW(i).eq.0) then
            icou = icou + 1
            icouK= icouK + 1
            IW(i)= icol
            do k= 1, INL(i)
              ik= IAL(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
            do k= 1, INU(i)
              ik= IAU(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
          endif

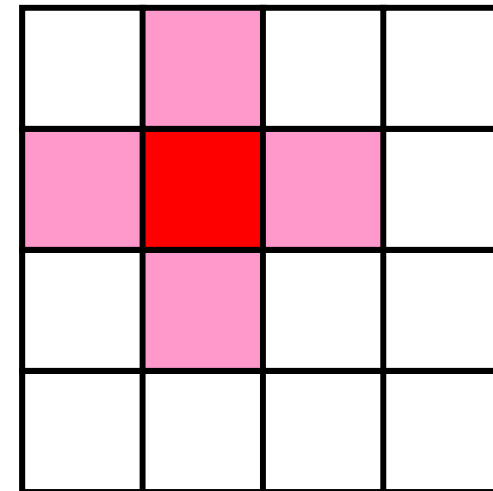
```

mc(3/8)

全要素に関するループ。

すでに現在の色に色づけされている場合は、隣接する要素のIWの値を「-1」とする（実際にこの部分を通る可能性は最初の一回のみであるが、念のため）。

すでに「現在の色」に色づけされている要素の隣接要素は「現在の色」に入る可能性が無いため除外。



mc(3/8)

```

!C
!C +-----+
!C | MULTicoloring |
!C +-----+
!C===
      icou = 1
      icouK= 1

      do icol= 1, N
        NCOLORk= icol
        do i= 1, N
          if (IW(i).le.0) IW(i)= 0
        enddo

        do i= 1, N
!C
!C-- already COLORED
          if (IW(i).eq.icol) then
            do k= 1, INL(i)
              ik= IAL(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
            do k= 1, INU(i)
              ik= IAU(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
          endif
!C
!C-- not COLORED
          if (IW(i).eq.0) then
            icou = icou + 1
            icouK= icouK + 1
            IW(i)= icol
            do k= 1, INL(i)
              ik= IAL(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
            do k= 1, INU(i)
              ik= IAU(k,i)
              if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
            enddo
          endif

```

「IW(i)=0」の場合、カウンタを1つずつ増やし、自分の色をicolとする (IW(i)= icol)。

隣接する要素のIWの値を「-1」とする。

mc(4/8)

```

do icol= 1, N
  NCOLORK= icol
  do i= 1, N
    if (IW(i).le.0) IW(i)= 0
  enddo

  do i= 1, N
!C
!C-- already COLORED
    if (IW(i).eq.icol) then
      do k= 1, INL(i)
        ik= IAL(k, i)
        if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
      enddo
      do k= 1, INU(i)
        ik= IAU(k, i)
        if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
      enddo
    endif

!C
!C-- not COLORED
    if (IW(i).eq.0) then
      icou = icou + 1
      icouK= icouK + 1
      IW(i)= icol
      do k= 1, INL(i)
        ik= IAL(k, i)
        if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
      enddo
      do k= 1, INU(i)
        ik= IAU(k, i)
        if (IW(ik).le.0) IW(ik)= -1
      enddo
    endif
    if (icou .eq. N)      goto 200
    if (icouK.eq. ITEMcou) goto 100
  enddo

```

```

100  continue
     icouK= 0

```

```

enddo
200  continue

```

icou : 全体のカウンタ
icouK : 色内のカウンタ

要素数のカウンタ(icou)が「N(ICELTOT)」を超えたらループを抜ける(全要素の色付け完了)。

色内のカウンタ(icouK)が「ITEMcou」を超えたら「icouK=0」として次の色へ移る。

「icouK < ITEMcou」でも「i」が「N」に到達したら(独立な要素がもうないので)次の色へ移る。

入力=3: 実際は5色 (multicolor)

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



5			
	3		4
1		2	

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

$$16/3=5$$

「5」個ずつ独立な要素を元の
番号順に選択

入力=3: 実際は5色 (multicolor)

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



5	10		
8	3	9	4
1	6	2	7

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

$$16/3=5$$

「5」個ずつ独立な要素を元の
番号順に選択

入力=3: 実際は5色 (multicolor)

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



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

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

$$16/3=5$$

独立な要素が無くなったら次の色へ

入力=3: 実際は5色 (multicolor)

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



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

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

$$16/3=5$$

独立な要素が無くなったら次の色へ

```

!C
!C +-----+
!C | FINAL COLORING |
!C +-----+
!C===
      NCOLORTot= NCOLORK
      COLORindex= 0
      icoug= 0
      do ic= 1, NCOLORTot
        icou= 0
        do i= 1, N
          if (IW(i).eq.ic) then
            icou = icou + 1
            icoug= icoug + 1
            NEWtoOLD(icoug)= i
            OLDtoNEW(i)= icoug
          endif
        enddo
        COLORindex(ic)= icou
      enddo

      do ic= 1, NCOLORTot
        COLORindex(ic)= COLORindex(ic-1) + COLORindex(ic)
      enddo
!C===

```

mc(5/8)

色づけを終了した時点での色数
 「NCOLORK」を最終的な色数とする。
 ユーザーが最初に設定した色数と同じ
 かそれより多くなっている。

mc(5/8)

```

!C
!C +-----+
!C | FINAL COLORING |
!C +-----+
!C===
      NCOLORTot= NCOLORK
      COLORindex= 0
      icoug= 0
      do ic= 1, NCOLORTot
        icou= 0
        do i= 1, N
          if (IW(i).eq.ic) then
            icou = icou + 1
            icoug= icoug + 1
            NEWtoOLD(icoug)= i
            OLDtoNEW(i)= icoug
          endif
        enddo
        COLORindex(ic)= icou
      enddo

      do ic= 1, NCOLORTot
        COLORindex(ic)= COLORindex(ic-1) + COLORindex(ic)
      enddo
!C===

```

各要素の色に従って、色番号の少ない方から、要素の再番号付けを行なう。

```

OLDtoNEW(old_ID)= new_ID
NEWtoOLD(new_ID)= old_ID

```

この時点では「COLORindex」には各色の要素数が入っている。

mc(6/8)

```
!C
!C +-----+
!C | FINAL COLORING |
!C +-----+
!C===
      NCOLORTot= NCOLORK
      COLORindex= 0
      icoug= 0
      do ic= 1, NCOLORTot
        icou= 0
        do i= 1, N
          if (IW(i).eq.ic) then
            icou = icou + 1
            icoug= icoug + 1
            NEWtoOLD(icoug)= i
            OLDtoNEW(i)= icoug
          endif
        enddo
        COLORindex(ic)= icou
      enddo

      do ic= 1, NCOLORTot
        COLORindex(ic)= COLORindex(ic-1) + COLORindex(ic)
      enddo
!C===
```

「COLORindex」を一次元インデックスに置き換える。

mc(6/8)

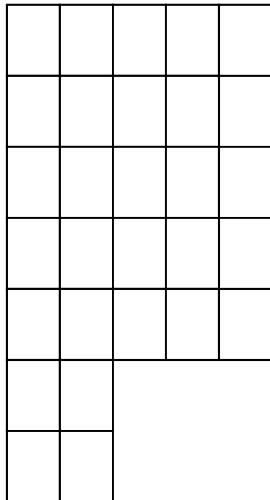
```

!C
!C +-----+
!C | MATRIX transfer |
!C +-----+
!C==
      allocate (INLw(N), INUw(N), IALw(NL, N), IAUw(NU, N))

      do j= 1, NL
        do i= 1, N
          IW(i) = IAL(j, NEWtoOLD(i))
        enddo
        do i= 1, N
          IAL(j, i) = IW(i)
        enddo
      enddo

      do j= 1, NU
        do i= 1, N
          IW(i) = IAU(j, NEWtoOLD(i))
        enddo
        do i= 1, N
          IAU(j, i) = IW(i)
        enddo
      enddo

```



ワーク配列の定義

- ・ INLw (N)
- ・ INUw (N)
- ・ IALw (NL, N)
- ・ IAUw (NU, N)

上下三角成分を, 新しい番号付けに従って入れ替える。上下三角成分そのものの番号はそのまま。

mc(7/8)

上下三角成分の数を, 新しい番号付けに従って入れ替える。

INLを並び替えてINLw に格納する。
INUを並び替えてINUw に格納する。

```
do i= 1, N
  IW(i) = INL (NEWtoOLD(i))
enddo

do i= 1, N
  INLw(i) = IW(i)
enddo

do i= 1, N
  IW(i) = INU (NEWtoOLD(i))
enddo

do i= 1, N
  INUw(i) = IW(i)
enddo

do j= 1, NL
  do i= 1, N
    if (IAL(j,i).eq.0) then
      IALw(j,i) = 0
    else
      IALw(j,i) = OLDtoNEW(IAL(j,i))
    endif
  enddo
enddo

do j= 1, NU
  do i= 1, N
    if (IAU(j,i).eq.0) then
      IAUw(j,i) = 0
    else
      IAUw(j,i) = OLDtoNEW(IAU(j,i))
    endif
  enddo
enddo
```

mc(7/8)

```
do i= 1, N
  IW(i) = INL (NEWtoOLD(i))
enddo

do i= 1, N
  INLw(i) = IW(i)
enddo

do i= 1, N
  IW(i) = INU (NEWtoOLD(i))
enddo

do i= 1, N
  INUw(i) = IW(i)
enddo

do j= 1, NL
  do i= 1, N
    if (IAL(j,i).eq.0) then
      IALw(j,i) = 0
    else
      IALw(j,i) = OLDtoNEW(IAL(j,i))
    endif
  enddo
enddo

do j= 1, NU
  do i= 1, N
    if (IAU(j,i).eq.0) then
      IAUw(j,i) = 0
    else
      IAUw(j,i) = OLDtoNEW(IAU(j,i))
    endif
  enddo
enddo
```

上下三角成分を, 新しい番号付けに従って新しい番号に付け替える。

IALw, IAUw に格納する

mc(8/8)

もともとの下三角成分にたいする処理。

```

INL= 0
INU= 0
IAL= 0
IAU= 0

do i= 1, N
  jL= 0
  jU= 0
  do j= 1, INLw(i)
    if (IALw(j, i).gt. i) then
      jU= jU + 1
      IAU(jU, i)= IALw(j, i)
    else
      jL= jL + 1
      IAL(jL, i)= IALw(j, i)
    endif
  enddo

  do j= 1, INUw(i)
    if (IAUw(j, i).gt. i) then
      jU= jU + 1
      IAU(jU, i)= IAUw(j, i)
    else
      jL= jL + 1
      IAL(jL, i)= IAUw(j, i)
    endif
  enddo

  INL(i)= jL
  INU(i)= jU
enddo

!C===
deallocate (IW, INLw, INUw, IALw, IAUw)

return
end

```

```

do i= 1, N
  jL= 0
  jU= 0
  do j= 1, INLw(i)
    if (IALw(j, i).gt. i) then
      jU= jU + 1
      IAU(jU, i)= IALw(j, i)
    else
      jL= jL + 1
      IAL(jL, i)= IALw(j, i)
    endif
  enddo
enddo

```

新しく番号がついた $IALw(j, i)$ が i より大きい小さいかによって上三角成分と下三角成分に振り分ける。

この操作が必要な理由

Original

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

INL (7) = 2
IAL (1, 7) = 3, IAL (2, 7) = 6

INU (7) = 2
IAU (1, 7) = 8, IAU (2, 7) = 11

5 Color

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

INL (9) = 3
IAL (1, 9) = 2, IAL (2, 9) = 3
IAL (3, 9) = 4

INU (9) = 1
IAU (1, 9) = 11

再番号付けによって隣接要素との大小関係も変わってしまうため

mc(8/8)

```

INL= 0
INU= 0
IAL= 0
IAU= 0

do i= 1, N
  jL= 0
  jU= 0
  do j= 1, INLw(i)
    if (IALw(j, i).gt. i) then
      jU= jU + 1
      IAU(jU, i)= IALw(j, i)
    else
      jL= jL + 1
      IAL(jL, i)= IALw(j, i)
    endif
  enddo

  do j= 1, INUw(i)
    if (IAUw(j, i).gt. i) then
      jU= jU + 1
      IAU(jU, i)= IAUw(j, i)
    else
      jL= jL + 1
      IAL(jL, i)= IAUw(j, i)
    endif
  enddo

  INL(i)= jL
  INU(i)= jU
enddo

!C===
deallocate (IW, INLw, INUw, IALw, IAUw)

return
end

```

もともとの上三角成分にたいする処理。

mc(8/8)

```
INL= 0
INU= 0
IAL= 0
IAU= 0

do i= 1, N
  jL= 0
  jU= 0
  do j= 1, INLw(i)
    if (IALw(j, i).gt. i) then
      jU= jU + 1
      IAU(jU, i)= IALw(j, i)
    else
      jL= jL + 1
      IAL(jL, i)= IALw(j, i)
    endif
  enddo

  do j= 1, INUw(i)
    if (IAUw(j, i).gt. i) then
      jU= jU + 1
      IAU(jU, i)= IAUw(j, i)
    else
      jL= jL + 1
      IAL(jL, i)= IAUw(j, i)
    endif
  enddo

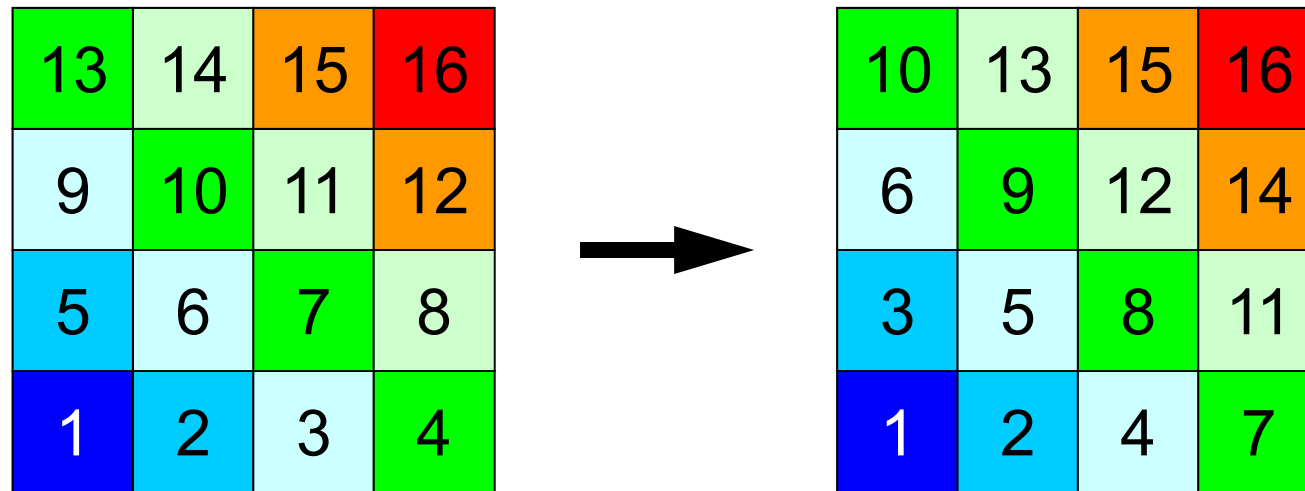
  INL(i)= jL
  INU(i)= jU
enddo

!C===
deallocate (IW, INLw, INUw, IALw, IAUw)

return
end
```

上下三角成分の数。

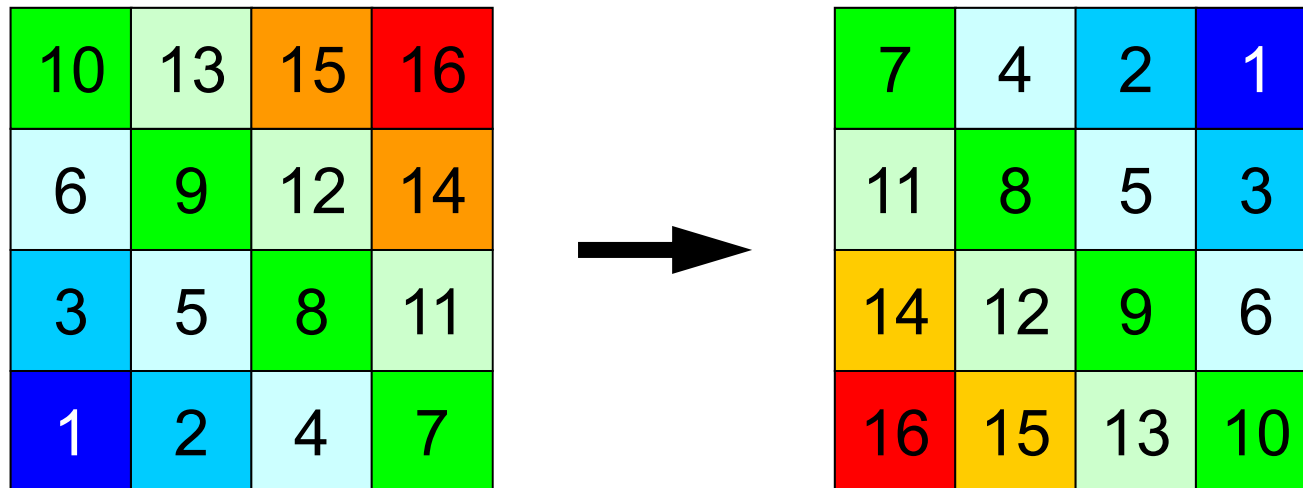
CM法の手順



- 手順3: 繰り返し, 再番号付け
 - 「レベル(k)」に属する条件を満たす要素が無くなったら, $k=k+1$ として, 手順2を繰り返し, 全要素の「レベル」が決定したら終了
 - 「レベル」の若い順に要素番号をふり直す

RCM (Reverse CM)

- まずCMの手順を実行
 - 手順1: 次数 (degree) の計算
 - 手順2: 「レベル ($k (k \geq 2)$)」の要素の選択
 - 手順3: 繰り返し, 再番号付け
- 手順4: 再々番号付け
 - CMの番号付けを更に逆順にふり直す
 - Fill-inがCMの場合より少なくなる



```
!C
!C***
!C*** CM
!C***
!C
      subroutine CM (N, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&                  NCOLORTot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)

      implicit REAL*8 (A-H, O-Z)
      integer, dimension(N) :: INL, INU, NEWtoOLD, OLDtoNEW
      integer, dimension(0:N) :: COLORindex
      integer, dimension(NL, N) :: IAL
      integer, dimension(NU, N) :: IAU

      integer, dimension(:, :), allocatable :: IW
      integer, dimension(:) , allocatable :: INLw, INUw
      integer, dimension(:, :), allocatable :: IALw, IAUw
```

cm(1/5)

cm(2/5)

```

!C
!C +-----+
!C | INIT. |
!C +-----+
!C===
      allocate (IW(N,2))

      IW = 0

      INmin= N
      NODmin= 0

      do i= 1, N
        icon= 0
        do k= 1, INL(i)
          icon= icon + 1
        enddo
        do k= 1, INU(i)
          icon= icon + 1
        enddo

        if (icon.lt.INmin) then
          INmin = icon
          NODmin= i
        endif
      enddo
200  continue

      if (NODmin.eq.0) NODmin= 1

      IW(NODmin,2)= 1

      NEWtoOLD(1)= NODmin
      OLDtoNEW(NODmin)= 1

      icol= 1
!C===

```

補助配列

IW(i,1):ワーク配列

IW(i,2):要素iの所属レベル

cm(2/5)

```

!C
!C +-----+
!C |  INIT.  |
!C +-----+
!C===
      allocate (IW(N,2))

      IW = 0

      INmin= N
      NODmin= 0

      do i= 1, N
        icon= 0
        do k= 1, INL(i)
          icon= icon + 1
        enddo
        do k= 1, INU(i)
          icon= icon + 1
        enddo

        if (icon.lt.INmin) then
          INmin = icon
          NODmin= i
        endif
      enddo
200  continue

      if (NODmin.eq.0) NODmin= 1

      IW(NODmin,2)= 1

      NEWtoOLD(1)= NODmin
      OLDtoNEW(NODmin)= 1

      icol= 1
!C===

```

接続要素数(次数)が最小の要素を探索
NODmin

cm(2/5)

```

!C
!C +-----+
!C | INIT. |
!C +-----+
!C===
      allocate (IW(N,2))

      IW = 0

      INmin= N
      NODmin= 0

      do i= 1, N
        icon= 0
        do k= 1, INL(i)
          icon= icon + 1
        enddo
        do k= 1, INU(i)
          icon= icon + 1
        enddo

        if (icon.lt.INmin) then
          INmin = icon
          NODmin= i
        endif
      enddo
200  continue

      if (NODmin.eq.0) NODmin= 1

      IW(NODmin,2)= 1

      NEWtoOLD(1      )= NODmin
      OLDtoNEW(NODmin)= 1

      icol= 1
!C===

```

NODminの所属レベル「IW(NODmin,2)」を「1」とする。

NODminを新しい番号付けにおける「1」番の要素とする。

```

!C
!C +-----+
!C | COLORING |
!C +-----+
!C==
      icouG= 1
      do icol= 2, N
        icou = 0
        do i= 1, N
          if (IW(i,2).eq.icol-1) then
            do k= 1, INL(i)
              in= IAL(k,i)
              if (IW(in,2).eq.0) then
                IW(in,2)= -icol
                icou      = icou + 1
                IW(icou,1)= in
              endif
            enddo
          do k= 1, INU(i)
            in= IAU(k,i)
            if (IW(in,2).eq.0) then
              IW(in,2)= -icol
              icou      = icou + 1
              IW(icou,1)= in
            endif
          enddo
        endif
      enddo

      if (icou.eq.0) then
        do i= 1, N
          if (IW(i,2).eq.0) then
            icou= icou + 1
            IW(i,2)= -icol
            IW(icou,1)= i
            goto 850
          endif
        enddo
      endif
850 continue

```

cm(3/5)

icouG : 全体のカウンタ
icou : レベル内のカウンタ

「レベル」に関するループ

```

!C
!C +-----+
!C | COLORING |
!C +-----+
!C===
      icouG= 1
      do icol= 2, N
        icou = 0
        do i= 1, N
          if (IW(i,2).eq.icol-1) then
            do k= 1, INL(i)
              in= IAL(k,i)
              if (IW(in,2).eq.0) then
                IW(in,2)= -icol
                icou      = icou + 1
                IW(icou,1)= in
              endif
            enddo
          do k= 1, INU(i)
            in= IAU(k,i)
            if (IW(in,2).eq.0) then
              IW(in,2)= -icol
              icou      = icou + 1
              IW(icou,1)= in
            endif
          enddo
        endif
      enddo

      if (icou.eq.0) then
        do i= 1, N
          if (IW(i,2).eq.0) then
            icou= icou + 1
            IW(i,2)= -icol
            IW(icou,1)= i
            goto 850
          endif
        enddo
      endif
      continue
850

```

cm(3/5)

icouG : 全体のカウンタ
icou : レベル内のカウンタ

「レベル」内での、各要素に関するループ

$IW(i, 2) = icol - 1$

(所属レベル番号: $icol - 1$)である要素 i に接続しており、かつ、

所属レベルが決定していない要素 in に関して、所属レベル番号「 $icol$ 」の要素の候補として、 $IW(in, 2) = -icol$ とする。

レベル内カウンタ $icou = icou + 1$ とする。

また、「見つかった」順番に:

$IW(ic, 1) = in$ ($ic = 1 \sim icou$) とする。

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

$icol=4$

$IW(i, 2) = icol - 1 = 3: i=3, 6, 9$

ということかという

$icouG$: 全体のカウンタ

$icou$: レベル内のカウンタ

「レベル」内での、各要素に関するループ

$IW(i, 2) = icol - 1$

(所属レベル番号: $icol - 1$)である要素 i に接続しており、かつ、

所属レベルが決定していない要素 in に関して、所属レベル番号「 $icol$ 」の要素の候補として、 $IW(in, 2) = -icol$ とする。

レベル内カウンタ $icou = icou + 1$ とする。

また、「見つかった」順番に:

$IW(ic, 1) = in$ ($ic = 1 \sim icou$) とする。

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

$icol=4$

$IW(i, 2) = icol - 1 = 3: i=3, 6, 9$

$IW(4, 2) = -4$

$IW(7, 2) = -4$

$IW(10, 2) = -4$

$IW(13, 2) = -4$

$IW(1, 1) = 4$

$IW(2, 1) = 7$

$IW(3, 1) = 10$

$IW(4, 1) = 13$

ということかという

$icouG$: 全体のカウンタ

$icou$: レベル内のカウンタ

「レベル」内での、各要素に関するループ

$IW(i, 2) = icol - 1$

(所属レベル番号: $icol - 1$)である要素 i に接続しており、かつ、

所属レベルが決定していない要素 in に関して、所属レベル番号「 $icol$ 」の要素の候補として、 $IW(in, 2) = -icol$ とする。

レベル内カウンタ $icou = icou + 1$ とする。

また、「見つかった」順番に:

$IW(ic, 1) = in$ ($ic = 1 \sim icou$) とする。

cm(3/5)

icouG : 全体のカウンタ
icou : レベル内のカウンタ

「レベル」内での、各要素に関するループ

```
!C
!C +-----+
!C | COLORING |
!C +-----+
!C===
      icouG= 1
      do icol= 2, N
        icou = 0
        do i= 1, N
          if (IW(i,2).eq.icol-1) then
            do k= 1, INL(i)
              in= IAL(k,i)
              if (IW(in,2).eq.0) then
                IW(in,2)= -icol
                icou      = icou + 1
                IW(icou,1)= in
              endif
            enddo
          do k= 1, INU(i)
            in= IAU(k,i)
            if (IW(in,2).eq.0) then
              IW(in,2)= -icol
              icou      = icou + 1
              IW(icou,1)= in
            endif
          enddo
        endif
      enddo

      if (icou.eq.0) then
        do i= 1, N
          if (IW(i,2).eq.0) then
            icou= icou + 1
            IW(i,2)= -icol
            IW(icou,1)= i
            goto 850
          endif
        enddo
      endif
850 continue
```

もし icou=0 となったら、まだ所属レベルが決定しない要素の中で最も要素番号が小さいものを選び出す(通常はこのループは通らない)

```
!C
!C +-----+
!C | COLORING |
!C +-----+
!C===
```

```
...
```

```
do ic= 1, icou
  inC= IW(ic,1)
  if (IW(inC,2).ne.0) then
    do k= 1, INL(inC)
      in= IAL(k,inC)
      if (IW(in,2).le.0) IW(in,2)= 0
    enddo
    do k= 1, INU(inC)
      in= IAU(k,inC)
      if (IW(in,2).le.0) IW(in,2)= 0
    enddo
  endif
enddo

do ic= 1, icou
  inC= IW(ic,1)
  if (IW(inC,2).ne.0) then
    icouG = icouG + 1
    IW(inC,2)= icol
  endif
enddo

if (icouG.eq.N) exit
enddo

!C===
```

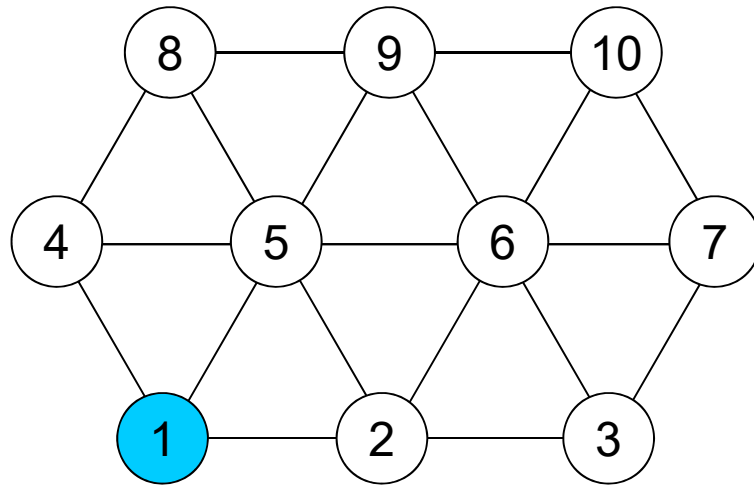
cm(4/5)

所属レベル「icol」の候補となっている要素の番号が, IW(ic,1)(ic=1~icou)に格納されている。

各要素inC=IW(ic,1)(ic=1~icou)に隣接する要素inのうちで, 所属レベル「icol」の候補となっているものがある場合, 要素inを候補の中からはずす。
(隣接する要素同士は同じレベルには属することができない)

そのような要素に対して:

 IW(in,2)=0
とする



例えば①の所属レベル=icol-1とする

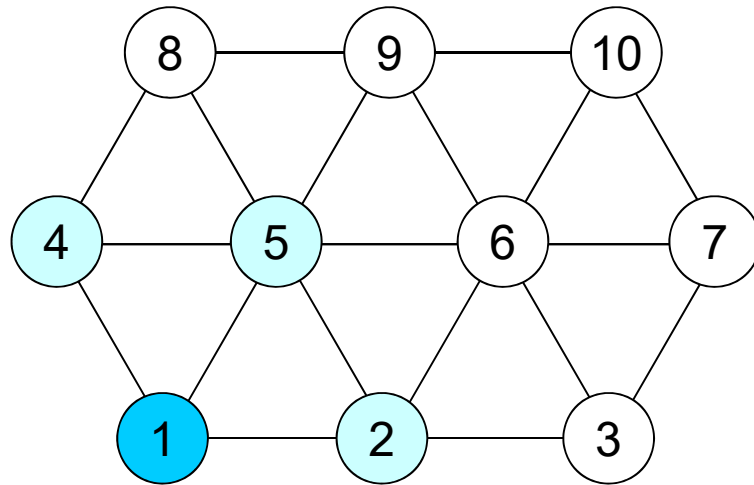
ということかという

所属レベル「icol」の候補となっている要素の番号が、 $IW(ic, 1)$ ($ic=1\sim icou$)に格納されている。

各要素 $inC=IW(ic, 1)$ ($ic=1\sim icou$)に隣接する要素 in のうちで、所属レベル「icol」の候補となっているものがある場合、要素 in を候補の中からはずす。
(隣接する要素同士は同じレベルには属することができない)

そのような要素に対して:

$IW(in, 2)=0$
とする



所属レベル「icol」の候補となる節点は②, ④, ⑤の3点, したがって:

$$IW(2, 2) = -icol$$

$$IW(4, 2) = -icol$$

$$IW(5, 2) = -icol$$

$$IW(1, 1) = 2$$

$$IW(2, 1) = 4$$

$$IW(3, 1) = 5$$

ということかという

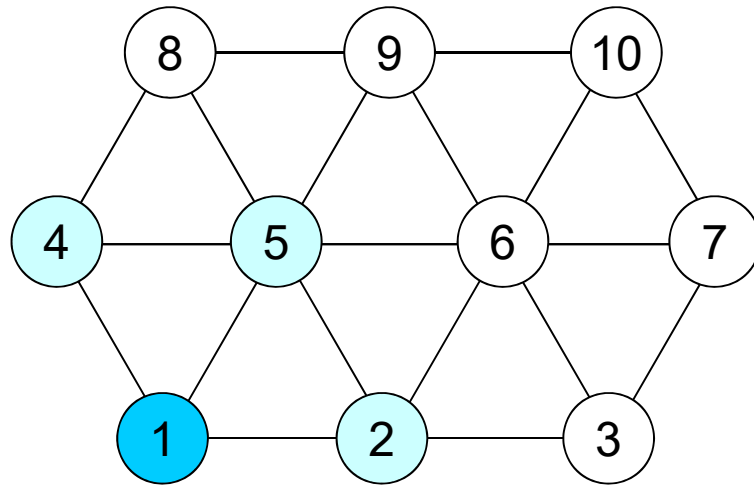
所属レベル「icol」の候補となっている要素の番号が, $IW(ic, 1)$ ($ic=1 \sim icou$) に格納されている。

各要素 $inC = IW(ic, 1)$ ($ic=1 \sim icou$) に隣接する要素 in のうちで, 所属レベル「icol」の候補となっているものがある場合, 要素 in を候補の中からはずす。
(隣接する要素同士は同じレベルには属することができない)

そのような要素に対して:

$$IW(in, 2) = 0$$

とする



⑤は②と隣接しているため、
②と同じレベルに属することはできない:

$IW(2, 2) = -icol$
 $IW(4, 2) = -icol$
 $IW(5, 2) = 0$

ということかということ

所属レベル「icol」の候補となっている要素の番号が、 $IW(ic, 1)$ ($ic=1 \sim icou$) に格納されている。

各要素 $inC = IW(ic, 1)$ ($ic=1 \sim icou$) に隣接する要素 in のうちで、所属レベル「icol」の候補となっているものがある場合、要素 in を候補の中からはずす。
 (隣接する要素同士は同じレベルには属することができない)

そのような要素に対して:

$IW(in, 2) = 0$
 とする

```

!C
!C +-----+
!C | COLORING |
!C +-----+
!C===
...

do ic= 1, icou
  inC= IW(ic, 1)
  if (IW(inC, 2).ne.0) then
    do k= 1, INL(inC)
      in= IAL(k, inC)
      if (IW(in, 2).le.0) IW(in, 2)= 0
    enddo
    do k= 1, INU(inC)
      in= IAU(k, inC)
      if (IW(in, 2).le.0) IW(in, 2)= 0
    enddo
  endif
enddo

do ic= 1, icou
  inC= IW(ic, 1)
  if (IW(inC, 2).ne.0) then
    icouG = icouG + 1
    IW(inC, 2)= icol
  endif
enddo

if (icouG.eq.N) exit
enddo
!C===

```

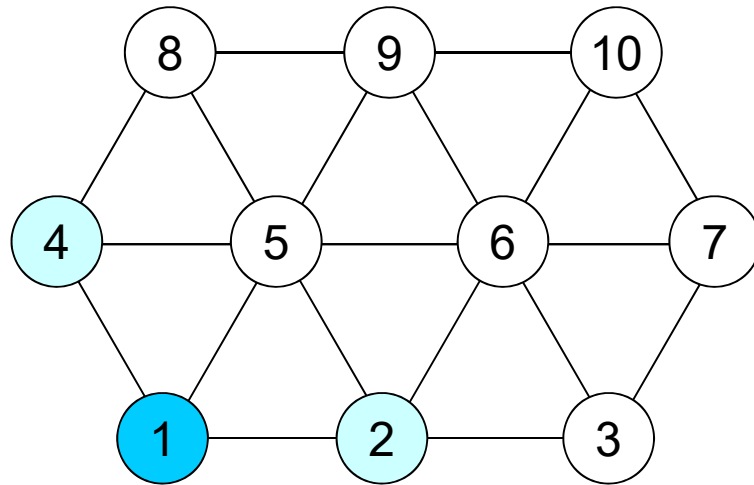
cm(4/5)

icouG : 全体のカウンタ
 icou : レベル内のカウンタ

IW(inC, 2)=-icolの要素inCが最終的に
 レベル番号「icol」に所属する。

このような要素に対して:
 IW(inC, 2)= icol
 とする。

レベル番号が決定した要素数のカウンタ
 「icouG」を1つ増やす。



⑤は②と隣接しているため、
②と同じレベルに属することはできない：

$$IW(2, 2) = -icol$$

$$IW(4, 2) = -icol$$

$$IW(5, 2) = 0$$

②と④のレベル番号を「icol」とする：

$$IW(2, 2) = icol$$

$$IW(4, 2) = icol$$

ということかということ

$IW(inC, 2) = -icol$ の要素inCが最終的にレベル番号「icol」に所属する。

このような要素に対して：

$IW(inC, 2) = icol$
とする。

レベル番号が決定した要素数のカウンタ「icouG」を1つ増やす。

cm(4/5)

icouG : 全体のカウンタ
icou : レベル内のカウンタ

```
!C
!C +-----+
!C | COLORING |
!C +-----+
!C===
...

do ic= 1, icou
  inC= IW(ic,1)
  if (IW(inC,2).ne.0) then
    do k= 1, INL(inC)
      in= IAL(k,inC)
      if (IW(in,2).le.0) IW(in,2)= 0
    enddo
    do k= 1, INU(inC)
      in= IAU(k,inC)
      if (IW(in,2).le.0) IW(in,2)= 0
    enddo
  endif
enddo

do ic= 1, icou
  inC= IW(ic,1)
  if (IW(inC,2).ne.0) then
    icouG = icouG + 1
    IW(inC,2)= icol
  endif
enddo

  if (icouG.eq.N) exit
enddo
!C===
```

icouG=Nとなっていたら、全要素の所属
レベルが決まったことになるので、終了。

そうでない場合は、レベル数を一つ増やして、
探索を継続する。

```

!C
!C +-----+
!C | FINAL COLORING |
!C +-----+
!C===
3000 continue
  NCOLORTot= icol
  icoug= 0
  do ic= 1, NCOLORTot
    icou= 0
    do i= 1, N
      if (IW(i,2).eq.ic) then
        icou = icou + 1
        icoug= icoug + 1
        NEWtoOLD(icoug)= i
        OLDtoNEW(i)= icoug
      endif
    enddo
    COLORindex(ic)= icou
  enddo

  COLORindex(0)= 0
  do ic= 1, NCOLORTot
    COLORindex(ic)= COLORindex(ic-1) + COLORindex(ic)
  enddo
!C===

!C
!C +-----+
!C | MATRIX transfer |
!C +-----+
!C===
...
!C===
  return
end

```

cm(5/5)

icouG=Nとなった時点でのレベル数icolを総レベル数 NCOLORTot とする。

各要素所属レベルに従って、レベル番号の少ない方から、要素の再番号付けを行なう。

OLDtoNEW(old_ID)= new_ID

NEWtoOLD(new_ID)= old_ID

この時点では「COLORindex」には各色の要素数が入っている。

cm (5/5)

```

!C
!C +-----+
!C | FINAL COLORING |
!C +-----+
!C===
3000 continue
    NCOLORTot= icol
    icoug= 0
    do ic= 1, NCOLORTot
        icou= 0
        do i= 1, N
            if (IW(i,2).eq.ic) then
                icou = icou + 1
                icoug= icoug + 1
                NEWtoOLD(icoug)= i
                OLDtoNEW(i)= icoug
            endif
        enddo
        COLORindex(ic)= icou
    enddo

    COLORindex(0)= 0
    do ic= 1, NCOLORTot
        COLORindex(ic)= COLORindex(ic-1) + COLORindex(ic)
    enddo

!C===

!C
!C +-----+
!C | MATRIX transfer |
!C +-----+
!C===
...
!C===
    return
end

```

「COLORindex」を一次元インデックスに
置き換える。

MCとRCMの比較

- MC

- 並列性高い, 負荷分散も良い(そのように設定されている)
- 特に色数少ないと反復回数多い
- 色数を増やす, 反復回数減るが同期オーバーヘッドの影響で性能低下(反復回数あたりの計算時間増加)の可能性あり

- RCM

- 収束は早い, レベル数が多く, 同期オーバーヘッドの影響受けやすく, コア数が増えると不利
- 負荷分散もいまいち

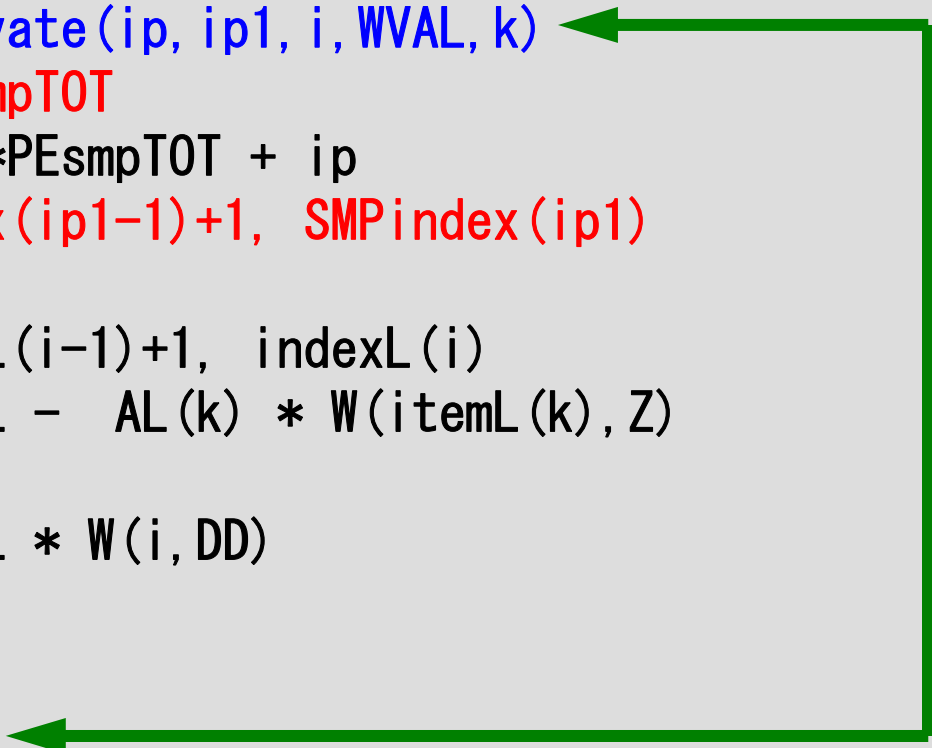
- 反復回数少なくて同期オーバーヘッドの影響が少ない方法が無いものか?

- 色数が少なくて, かつ反復回数が少ないという都合の良い方法

色数増加⇒同期オーバーヘッド増加

必ずある「色」の計算が終わってから次の「色」に行く

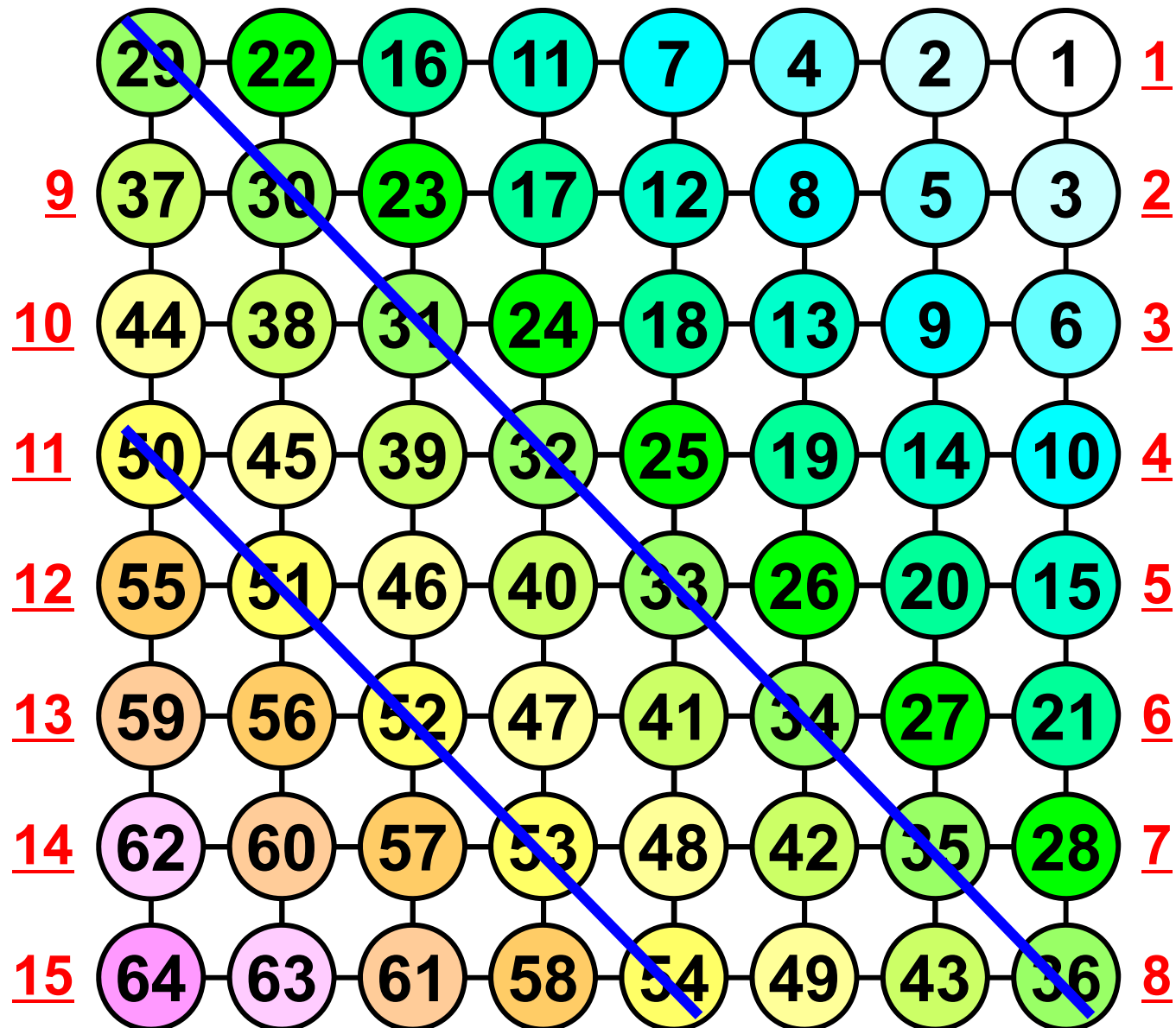
```
do ic= 1, NCOLORTot
!$omp parallel do private(ip,ip1,i,WVAL,k)
  do ip= 1, PEsmptOT
    ip1= (ic-1)*PEsmptOT + ip
    do i= SMPindex(ip1-1)+1, SMPindex(ip1)
      WVAL= W(i,Z)
      do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
        WVAL= WVAL - AL(k) * W(itemL(k),Z)
      enddo
      W(i,Z)= WVAL * W(i,DD)
    enddo
  enddo
!$omp end parallel do
enddo
```



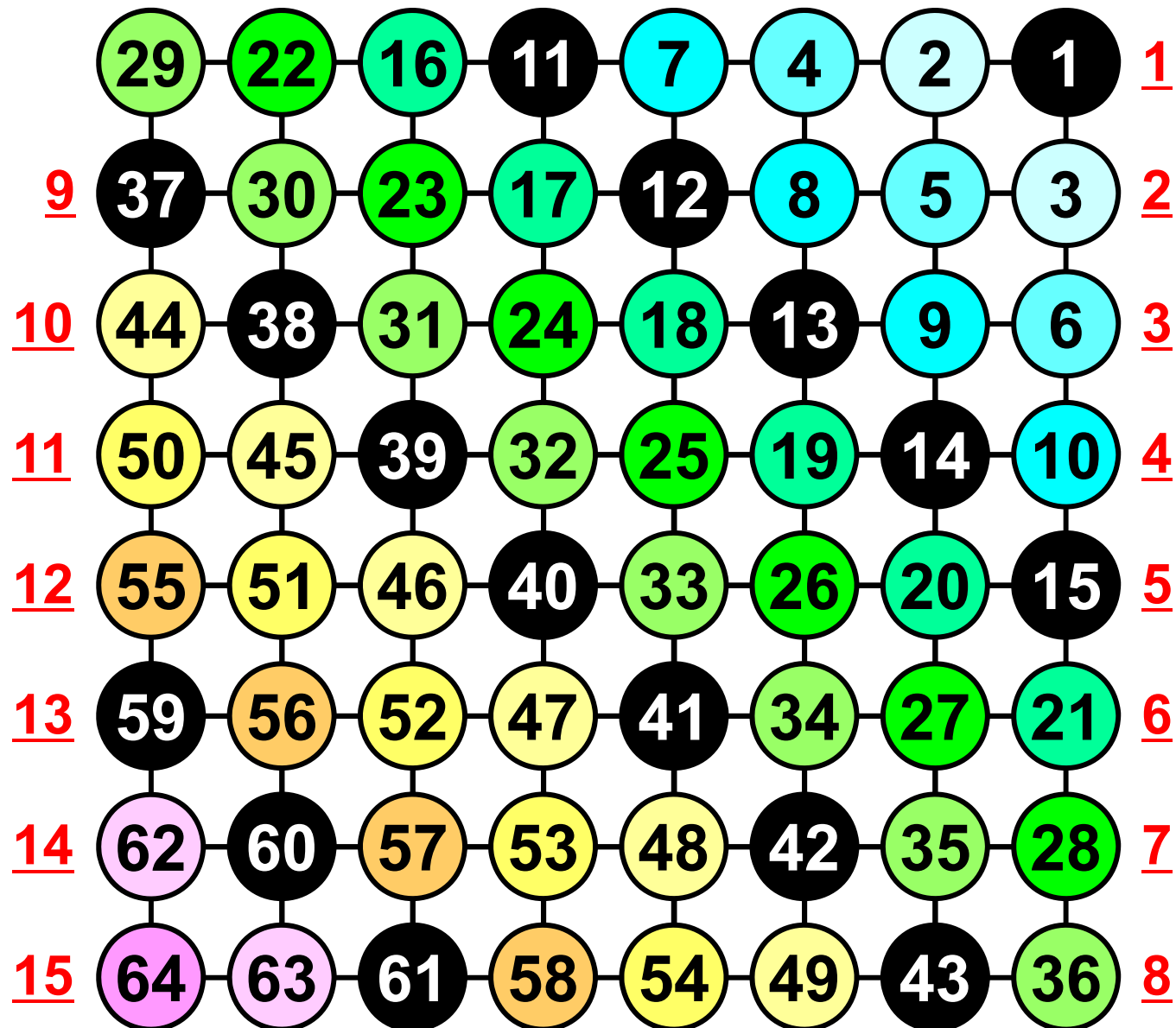
解決策: CM-RCM

- RCM + Cyclic Multicoloring [土肥, 襲田, 鷺尾他]
- 手順
 - まずRCMを施す
 - Cyclic Multicoloring (CM) の色数を決める(N_c)
 - RCMの1番目, (N_c+1)番目, ($2N_c+1$)番目...のレベルに属する要素を「1」色に分類する
 - RCMの k 番目, (N_c+k)番目, ($2N_c+k$)番目...のレベルに属する要素を「 k 」色に分類する
 - 「 k 」が「 N_c 」に達して, 要素が「 $1 \sim N_c$ 」で色付けされたら完了
 - あとはMCのときと同じように, 色の順番に再番号付
 - RCMの各レベルに対して「 N_c 」のサイクルで再色付けを実施している
 - もし同じ色の要素の中に依存性が見つかったら, $N_c = N_c + 1$ として最初からやり直し(ここは少し原始的)

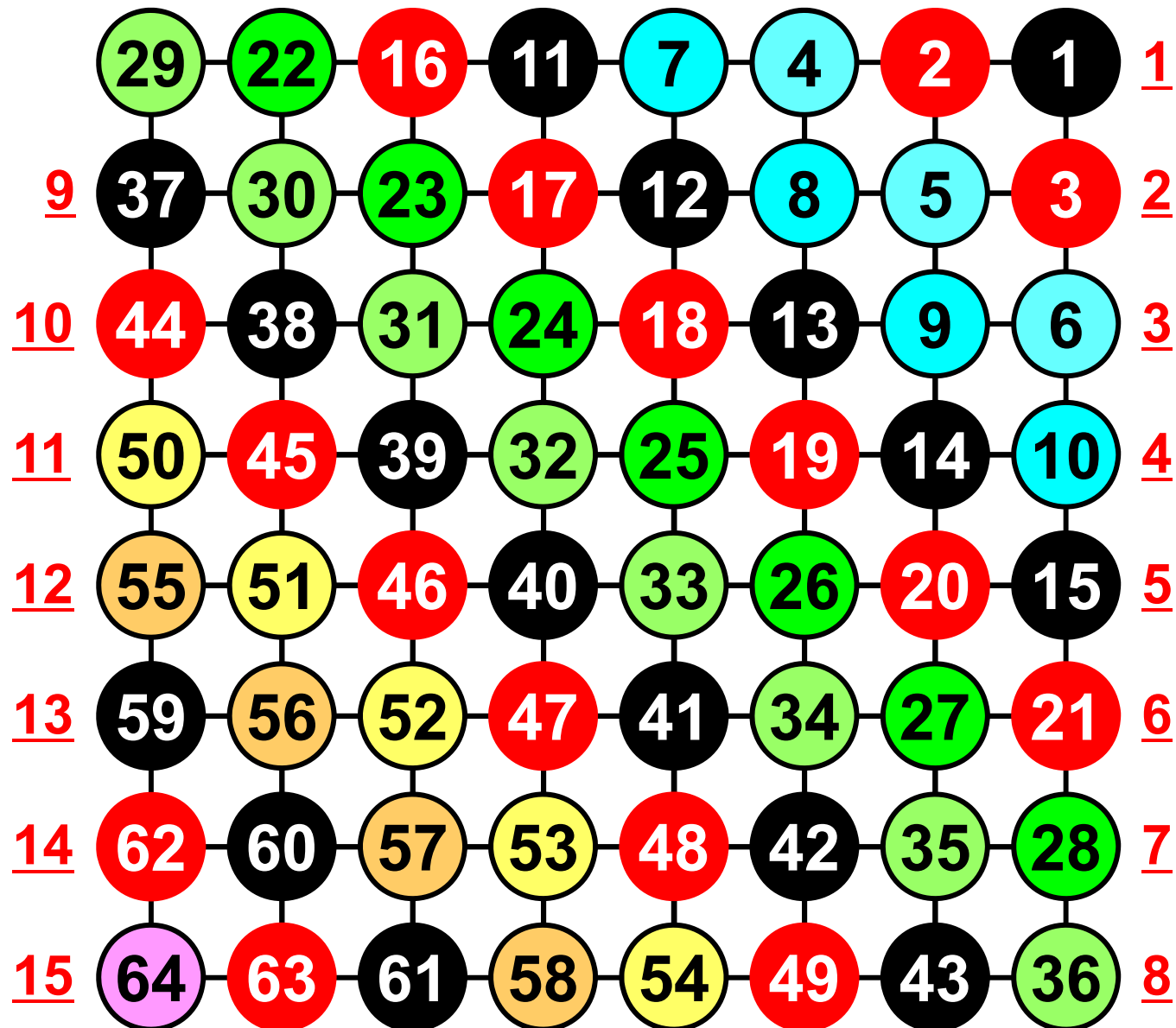
RCM



$N_c=4$, $k=1:1,5,9,13$ レベルを選択

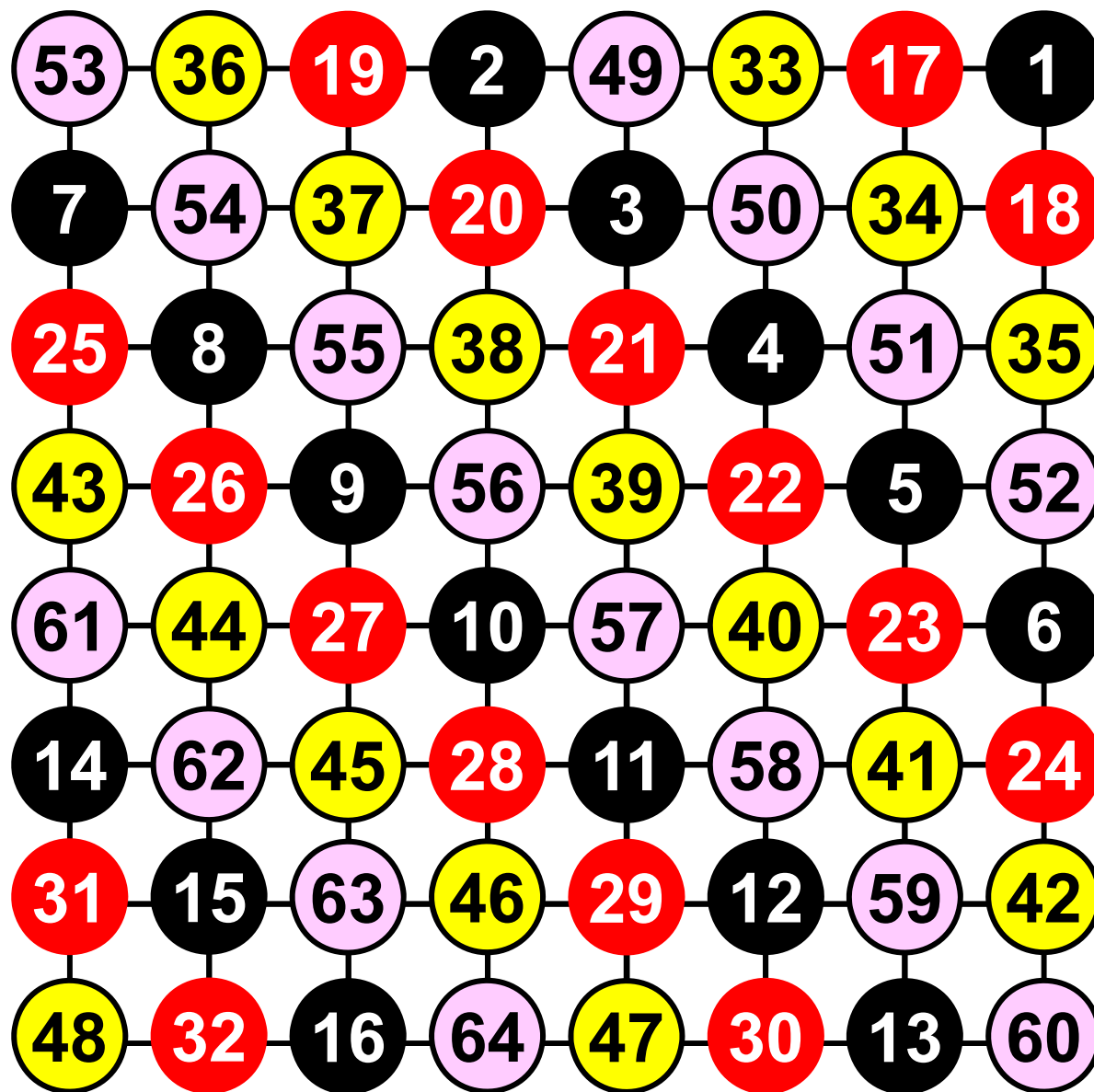


$N_c=4$, $k=2:2,6,10,14$ レベルを選択



CM-RCM ($N_c=4$): 「色」の順番に再並替

k=1: 16
k=2: 16
k=3: 16
k=4: 16



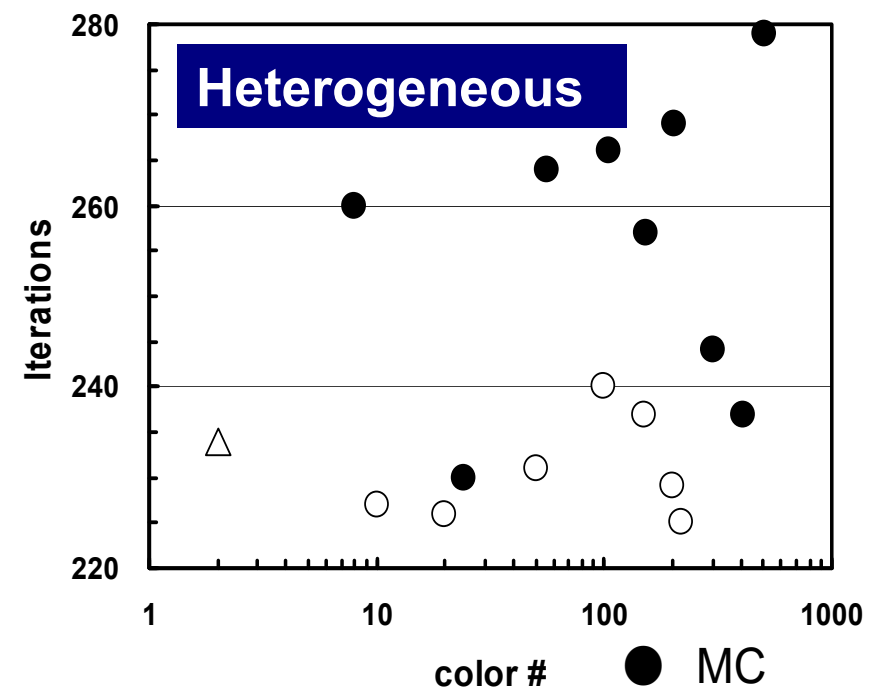
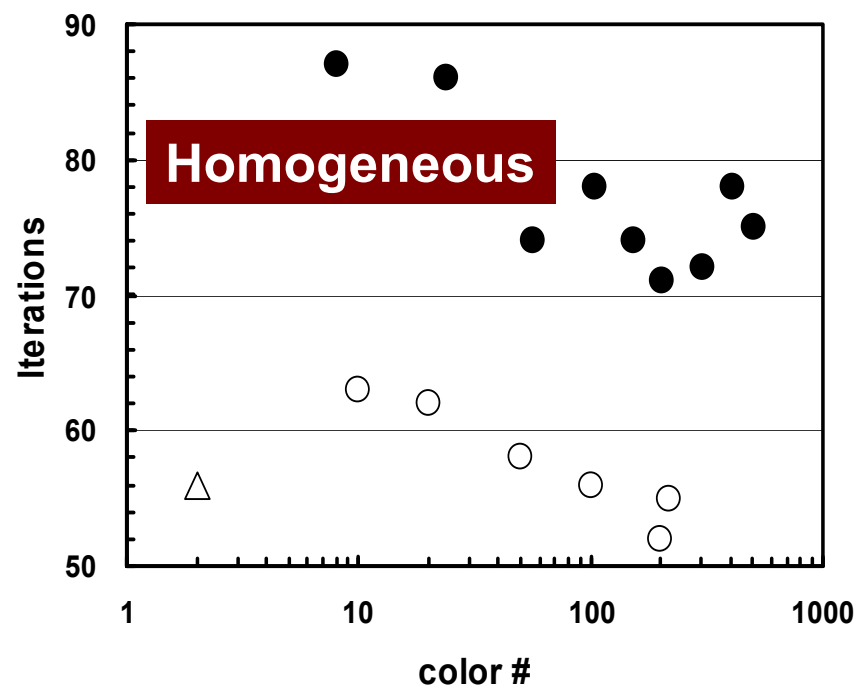
CM-RCM

- 実行方法
 - INPUT.DATで「NCOLO $r_{tot} = -N_c$ 」とする
 - L2に有効なオプションとして導入済み
- 実装は「cmrcm.f」を参照ください

Comparison of Reordering Methods

3D Linear Elastic Problems

- MC: Slow convergence, unstable for heterogeneous cases (ill-conditioned problems).
- Cyclic-Mulricoloring + RCM (CM-RCM) is effective



3D Linear-Elastic Problems with 32,768 DOF

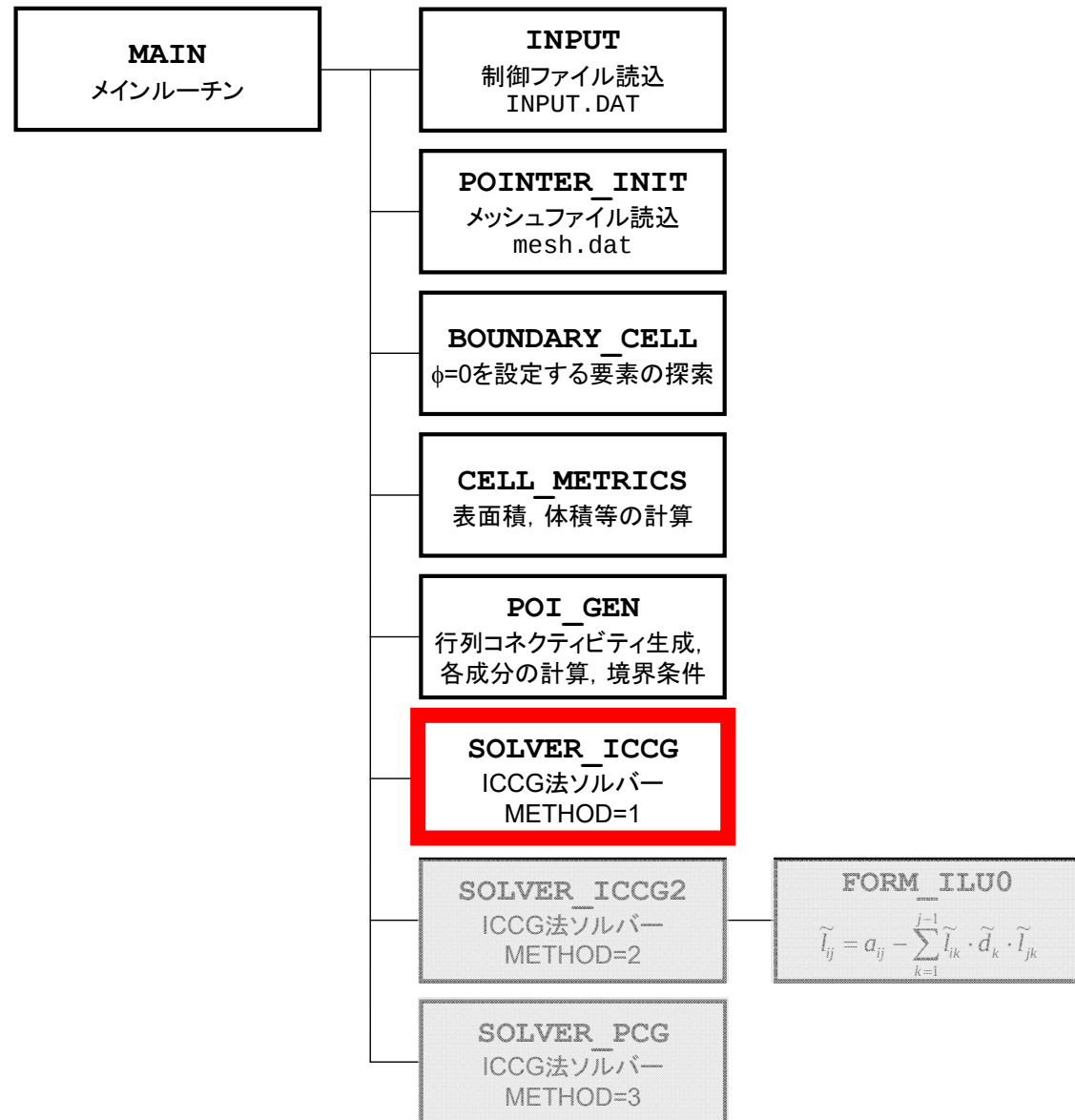
● MC
○ CM-RCM
△ No reordering

- データ依存性の解決策は？
- オーダリング (Ordering) について
 - Red-Black, Multicolor (MC)
 - Cuthill-McKee (CM), Reverse-CM (RCM)
 - オーダリングと収束の関係
- オーダリングの実装
- **オーダリング付ICCG法の実装**
- マルチコアへの実装 (OpenMP) へ向けて

オーダリング付きICCG法の実装

- 「L2-color」の機能を「L1-sol」へ組み込む
- 「POI_GEN」において, INU, INL, IAL, IAUを求めた時点で, 「mc», 「cm», 「rcm」を呼ぶ。
- AL, AUを新しいオーダリングに準じて計算する。
- 境界条件, 右辺(体積フラックス項)を新しいオーダリングに準じて計算する。
- ソルバーを呼ぶ。
- 結果(PHI)を古いオーダリングに戻す。
- UCDファイルを書き出す(OUTPUT_UCDを呼ぶ)

L1-sol



Minv{r}={z} (1/2)

Forward Substitution

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

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

```
do i= 1, N
  WVAL= R(i)
  do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
    WVAL= WVAL - MAL(k) * Z(itemL(k))
  enddo
  Z(i)= WVAL / D(i)
enddo
```

Backward Substitution

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

```
do i= N, 1, -1
  SW = 0.0d0
  do k= indexU(i-1)+1, indexU(i)
    SW= SW + MAU(k) * Z(itemU(k))
  enddo
  Z(i)= Z(i) - SW / MD(i)
enddo
```

データ依存性あり。
ある点におけるZを
求めるために、他の
点におけるZが右辺
に現れる：
⇒ 並列化困難

右辺に自身に依存し
ないZが現れるよう
にすればよい
⇒ オーダリング

Minv{r}={z} (2/2)

Forward Substitution

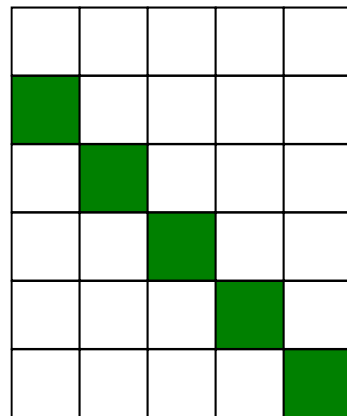
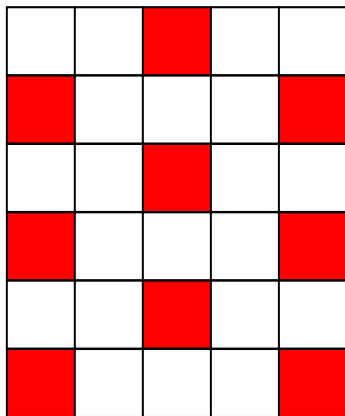
$$(L)\{z\} = \{r\}$$

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

```

do icol= 1, NCOLORTot
  do i= COLORindex(icol-1)+1, COLORindex(icol)
    WVAL= R(i)
    do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
      WVAL= WVAL - MAL(k) * Z(itemL(k))
    enddo
    Z(i)= WVAL / D(i)
  enddo
enddo

```



右辺に現れる「Z」は、必ず、現在の「色」(icol)以外の色に属している。
 同じ色に属している要素はお互いに依存性、関連性を持たない。

⇒データ依存性回避可能

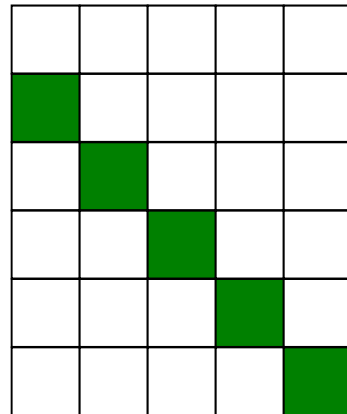
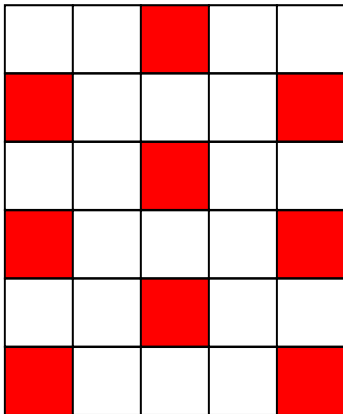
Minv{r}={z} (2/2)

Forward Substitution

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

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

```
do icol= 1, NCOLortot
  do i= COLORindex(icol-1)+1, COLORindex(icol)
    WVAL= R(i)
    do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
      WVAL= WVAL - MAL(k) * Z(itemL(k))
    enddo
    Z(i)= WVAL / D(i)
  enddo
enddo
```



このループ(各色内のループ)は並列, 独立に計算可能である。

ファイルのありかの実行方法

```
$> cd <$P-L2>/solver/run
```

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

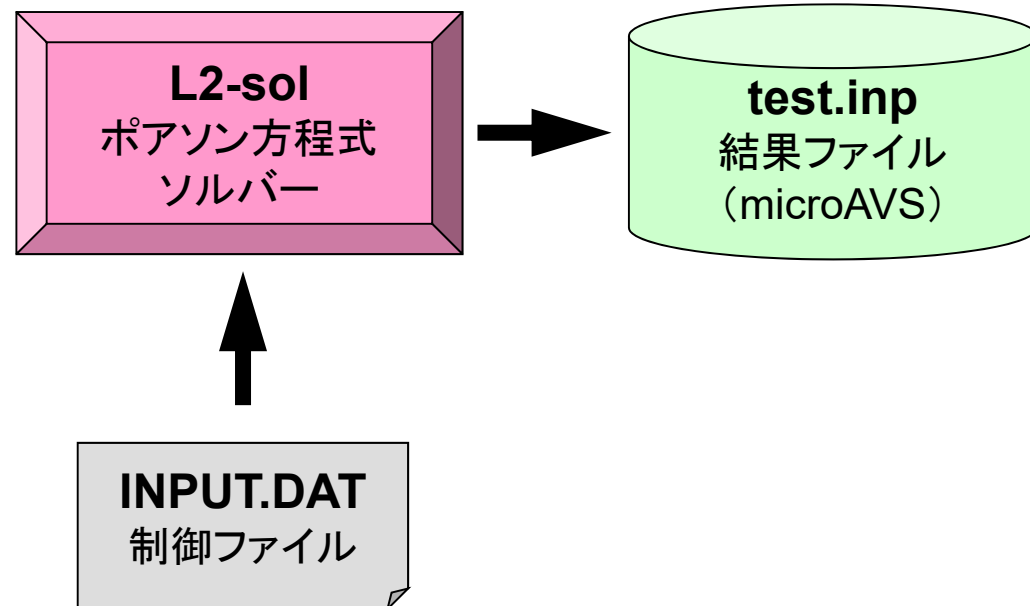
```
$> make
```

```
$> ls ../run/L2-sol  
L2-sol
```

ポアソン方程式ソルバー: L2-sol

プログラムの実行

プログラム, 必要なファイル等
実行ディレクトリ: <\$P-L2>/solver/run



プログラムの実行

制御データ「<\$P-L2>/run/INPUT.DAT」の作成

20 20 20

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

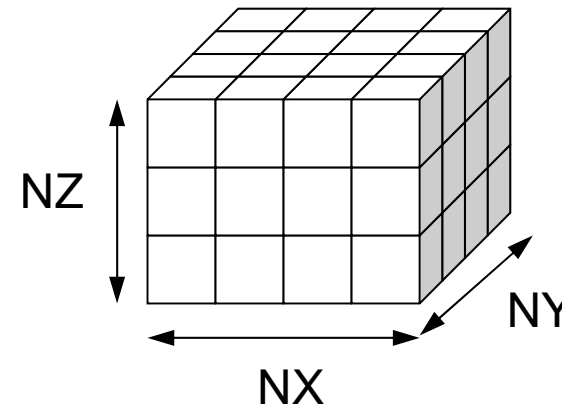
1.0e-08

NX/NY/NZ

DX/DY/DZ

EPSICCG

- NX, NY, NZ
 - 各方向のメッシュ数
- DX, DY, DZ
 - 各要素のX,Y,Z方向辺長さ
- EPSICCG
 - ICCG法の収束判定値



プログラムの実行

<\$P-L2>/solver/run/

```
$ cd <$E-L2>/solver/run  
$ ./L2-sol
```

```
You have      8000 elements.  
How many colors do you need ?  
  #COLOR must be more than 2 and  
  #COLOR must not be more than      8000  
  CM if #COLOR .eq. 0  
  RCM if #COLOR .eq.-1  
CMRCM if #COLOR .le.-2
```

=> **xxx**

```
$ ls test.inp
```

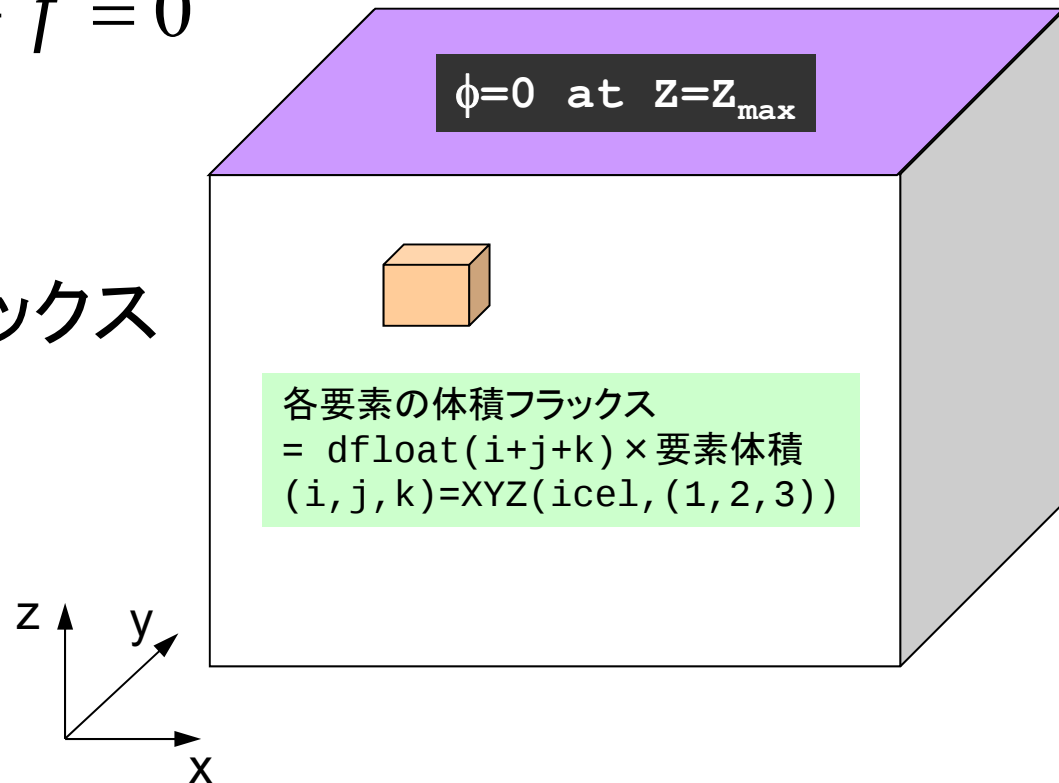
解いている問題：三次元ポアソン方程式

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 $\phi=0$



プログラムの構成

```

program MAIN

use STRUCT
use PCG
use solver_ICCG_mc

implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
real(kind=8), dimension(:), allocatable :: WK

call INPUT
call POINTER_INIT
call BOUNDARY_CELL
call CELL_METRICS
call POI_GEN

PHI= 0.d0
call solve_ICCG_mc
&      ( ICELTOT, NPL, NPU, indexL, itemL, indexU, itemU, D,      &
&      BFORCE, PHI, AL, AU, NCOLORTot, COLORindex,      &
&      EPSICCG, ITR, IER)

allocate (WK(ICELTOT))

do ic0= 1, ICELTOT
  icel= NEWtoOLD(ic0)
  WK(icel)= PHI(ic0)
enddo

do icel= 1, ICELTOT
  PHI(icel)= WK(icel)
enddo

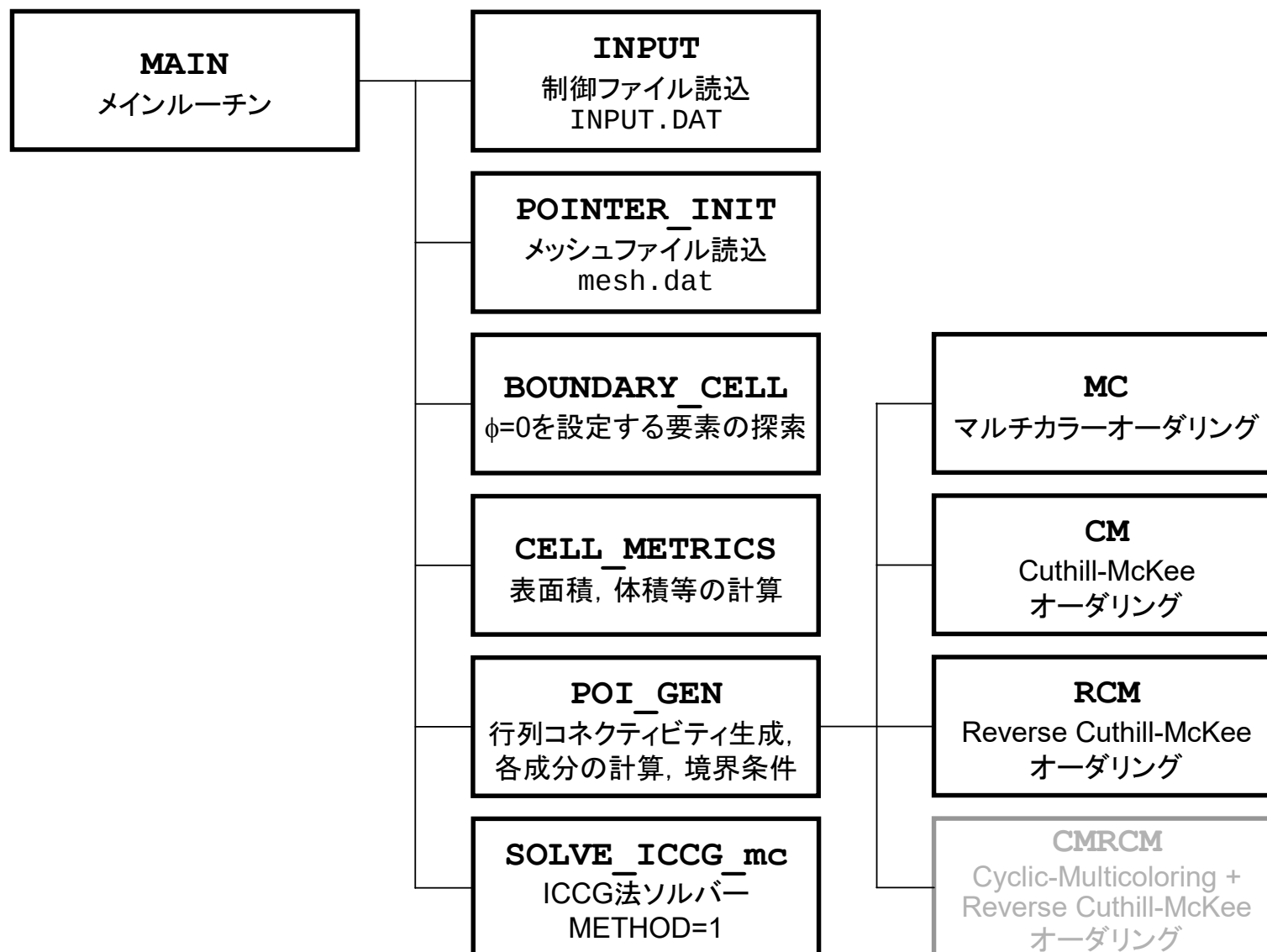
call OUTUCD

stop
end

```

結果(PHI)をもとの番号
付けにもどす

プログラムの構成図



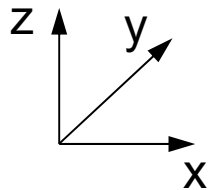
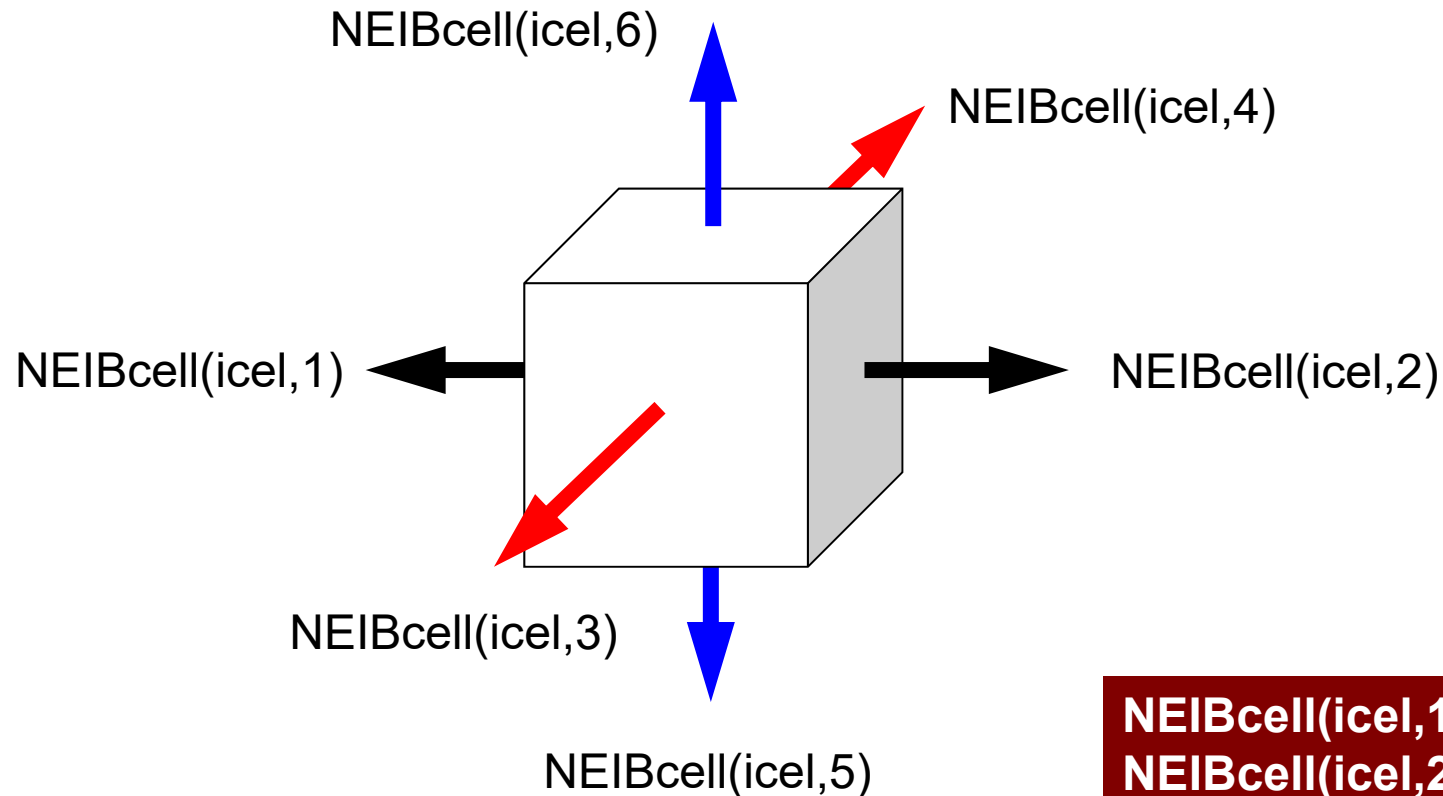
変数表(1/2)

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)
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

変数表(2/2)

配列・変数名	型	内 容
NCOLORtot	I	入力時にはOrdering手法 (≥ 2 : MC, $=0$: CM, $=-1$: RCM, $-2 \leq$: CMRCM) , 最終的には色数, レベル数が入る
COLORindex ($0 : \text{NCOLORtot}$)	I	各色, レベルに含まれる要素数の一次元圧縮配列, COLORindex(icol-1)+1 から COLORindex(icol) までの要素が icol 番目の色 (レベル) に含まれる。
NEWtoOLD (N)	I	新番号⇒旧番号への参照配列
OLDtoNEW (N)	I	旧番号⇒新番号への参照配列

NEIBcell: 隣接している要素番号 境界面の場合は0



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

プログラムの構成

```
program MAIN

use STRUCT
use PCG
use solver_ICCG_mc

implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
real(kind=8), dimension(:), allocatable :: WK

call INPUT
call POINTER_INIT
call BOUNDARY_CELL
call CELL_METRICS
call POI_GEN

PHI= 0.d0
call solve_ICCG_mc
&      ( ICELTOT, NPL, NPU, indexL, itemL, indexU, itemU, D,      &
&      BFORCE, PHI, AL, AU, NCOLORTot, COLORindex,      &
&      EPSICCG, ITR, IER)

allocate (WK(ICELTOT))
do ic0= 1, ICELTOT
  icel= NEWtoOLD(ic0)
  WK(icel)= PHI(ic0)
enddo

do icel= 1, ICELTOT
  PHI(icel)= WK(icel)
enddo

call OUTUCD

stop
end
```

poi_gen (1/8)

```
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
  BFORCE= 0. d0

  INL= 0
  INU= 0
  IAL= 0
  IAU= 0
```

配列の宣言

```

!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)

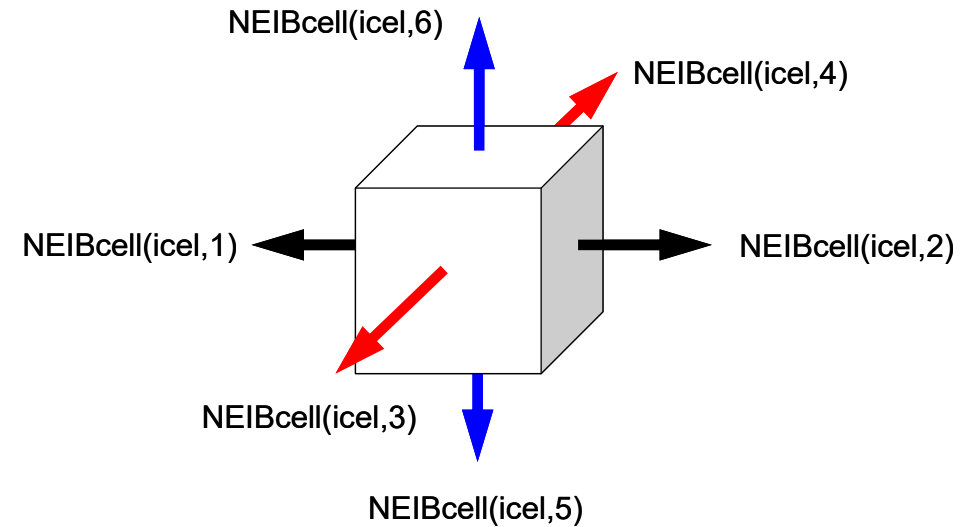
  icouG= 0
  if (icN5.ne. 0. and. icN5.le. ICELTOT) then
    icou= INL(icel) + 1
    IAL(icou, icel)= icN5
    INL(      icel)= icou
  endif

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

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

```

poi_gen(2/8)



下三角成分

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

```

!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

...

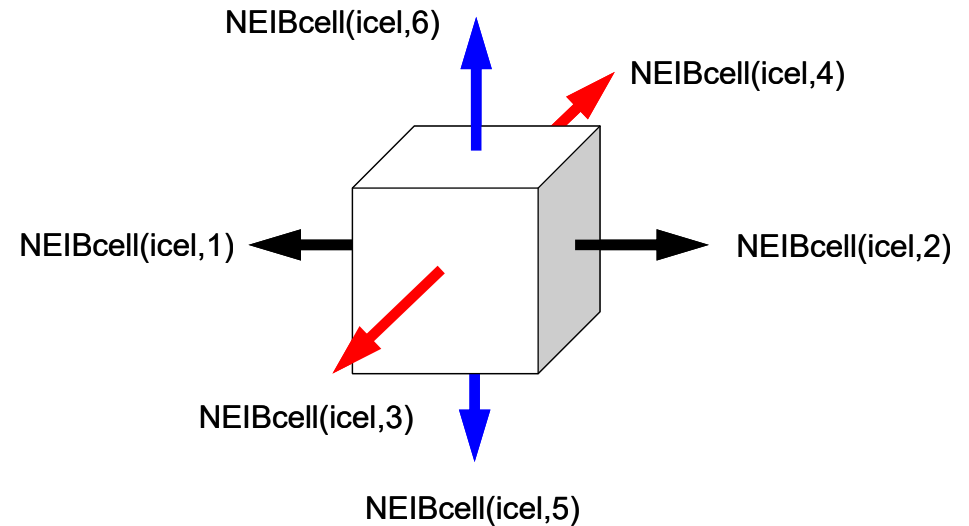
        if (icN2.ne. 0. and. icN2.le. ICELTOT) then
          icou= INU(icel) + 1
          IAU(icou, icel)= icN2
          INU(      icel)= icou
        endif

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

        if (icN6.ne. 0. and. icN6.le. ICELTOT) then
          icou= INU(icel) + 1
          IAU(icou, icel)= icN6
          INU(      icel)= icou
        endif
      enddo
!C===

```

poi_gen(3/8)



上三角成分

```

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

```

poi_gen (4/8)

```

!C
!C +-----+
!C | MULTICOLORING |
!C +-----+
!C===
      allocate (OLDtoNEW(ICELTOT), NEWtoOLD(ICELTOT))
      allocate (COLORindex(0:ICELTOT))

111   continue
      write (*, '(//a,i8,a)') 'You have', ICELTOT, ' elements.'
      write (*, '( a )') 'How many colors do you need ?'
      write (*, '( a )') ' #COLOR must be more than 2 and'
      write (*, '( a,i8 )') ' #COLOR must not be more than', ICELTOT
      write (*, '( a )') ' CM if #COLOR .eq. 0'
      write (*, '( a )') ' RCM if #COLOR .eq. -1'
      write (*, '( a )') ' CMRCM if #COLOR .le. -2'
      write (*, '( a )') '=>'
      read (*,*) NCOLORTot
      if (NCOLORTot.eq.1.or.NCOLORTot.gt.ICELTOT) goto 111

      if (NCOLORTot.gt.0) then
        call MC (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&              NCOLORTot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
&
      endif
      if (NCOLORTot.eq.0) then
        call CM (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&              NCOLORTot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
&
      endif
      if (NCOLORTot.eq.-1) then
        call RCM (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&              NCOLORTot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
&
      endif
      if (NCOLORTot.lt.-1) then
        call CMRCM (ICELTOT, NL, NU, INL, IAL, INU, IAU,
&              NCOLORTot, COLORindex, NEWtoOLD, OLDtoNEW)
&
      endif

      write (*, '(//a,i8,// )') '### FINAL COLOR NUMBER', NCOLORTot
!C===

```

poi_gen (5/8)

これ以降は新しい 番号付けを使用

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)

```
!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===
```

```
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
```

```

!C
!C +-----+
!C | INTERIOR & NEUMANN BOUNDARY CELLS |
!C +-----+
!C==
      icouG= 0
      do icol= 1, NCOLortot
      do icel= COLORindex(icol-1)+1, COLORindex(icol)
      ic0 = NEWtoOLD(icel)
      icN1= NEIBcell (ic0, 1)
      icN2= NEIBcell (ic0, 2)
      icN3= NEIBcell (ic0, 3)
      icN4= NEIBcell (ic0, 4)
      icN5= NEIBcell (ic0, 5)
      icN6= NEIBcell (ic0, 6)
      VOL0= VOLCEL  (ic0)

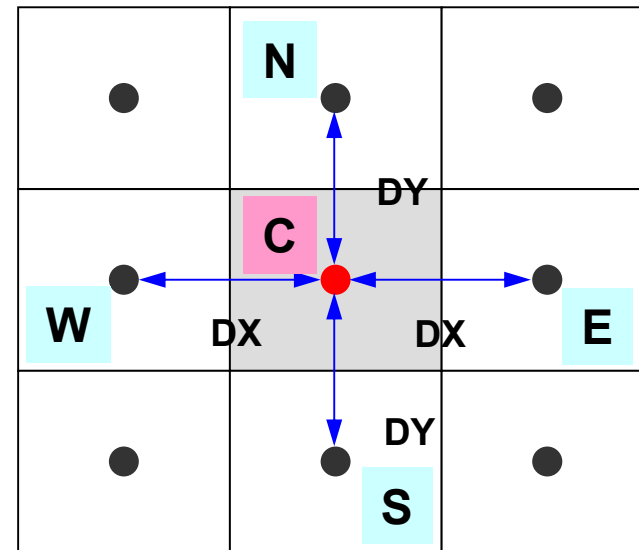
      if (icN5.ne.0) then
      icN5= OLDtoNEW(icN5)
      coef= RDZ * ZAREA
      D(icel)= D(icel) - coef

      if (icN5.lt.icel) then
      do j= 1, INL(icel)
      if (IAL(j,icel).eq.icN5) then
      itemL(j+indexL(icel-1))= icN5
      AL(j+indexL(icel-1))= coef
      exit
      endif
      enddo
      else
      do j= 1, INU(icel)
      if (IAU(j,icel).eq.icN5) then
      itemU(j+indexU(icel-1))= icN5
      AU(j+indexU(icel-1))= coef
      exit
      endif
      enddo
      endif
      endif
      enddo

```

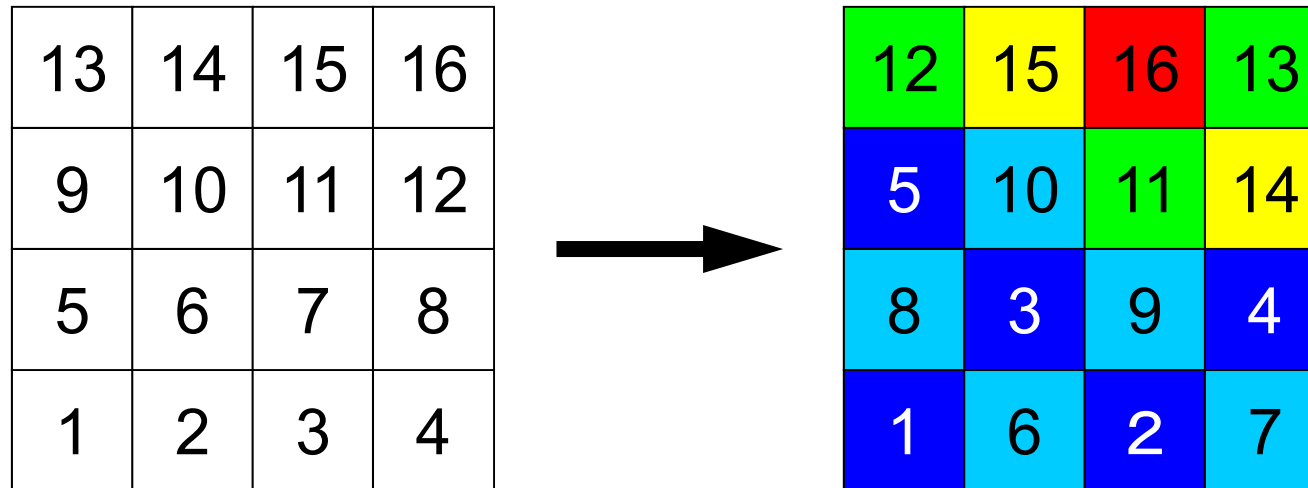
poi_gen (6/8)

係数の計算(境界面以外)



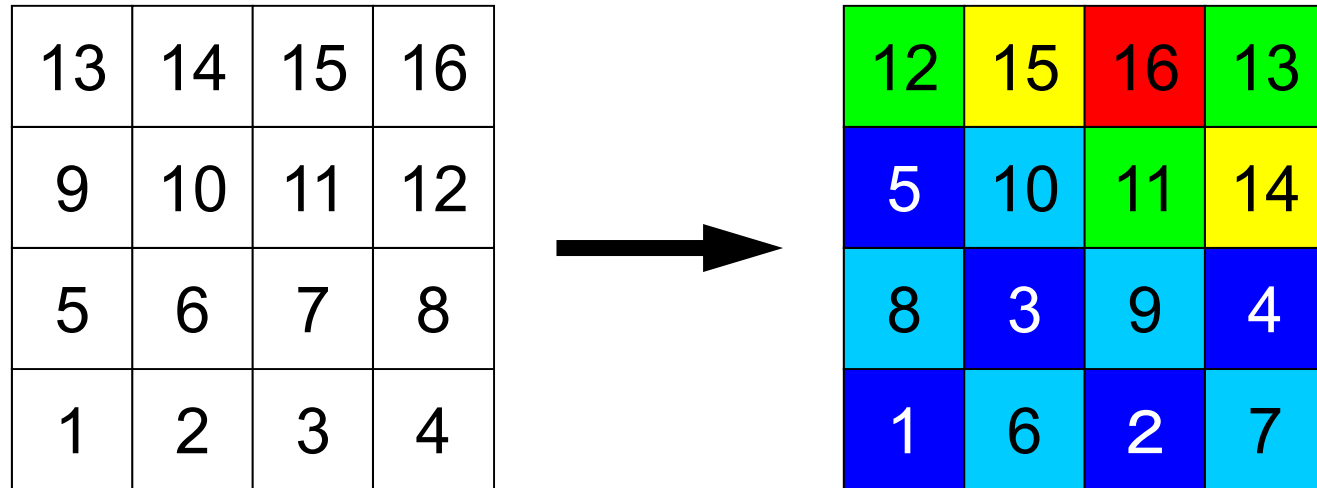
$$\begin{aligned}
 & \frac{\phi_E - \phi_i}{\Delta x} \Delta y + \frac{\phi_W - \phi_i}{\Delta x} \Delta y + \\
 & \frac{\phi_N - \phi_i}{\Delta y} \Delta x + \frac{\phi_S - \phi_i}{\Delta y} \Delta x = f_c \Delta x \Delta y
 \end{aligned}$$

「新しい番号付け」とは？



- RCMまたはマルチカラーによるオーダリングを施す。
- 色番号順に要素番号が並んでいる。上記の例では：
 - 第1色(濃い青): 1,2,3,4,5(旧: 1,3,6,8,9)
 - 第2色(薄い青): 6,7,8,9,10(旧: 2,4,5,7,10)
 - 第3色(黄緑) : 11,12,13(旧: 11,13,16)
 - 第4色(黄) : 14,15(旧: 12,14), 第5色(赤): 16(旧: 15)

「新しい番号付け」とは?(続き)



NCOLORtot= 5

COLORindex(0)= 0, COLORindex(1)= 5, COLORindex(2)= 10

COLORindex(3)= 13, COLORindex(4)= 15, COLORindex(5)= 16

- NEWtoOLD, OLDtoNEW という配列
- OLDtoNEW(6)=3, NEWtoOLD(3)= 6

```

!C
!C +-----+
!C | INTERIOR & NEUMANN BOUNDARY CELLS |
!C +-----+
!C==
      icouG= 0
      do icol= 1, NCOLortot
      do icel= COLORindex(icol-1)+1, COLORindex(icol)
        ic0 = NEWtoOLD(icel)
        icN1= NEIBcell(ic0, 1)
        icN2= NEIBcell(ic0, 2)
        icN3= NEIBcell(ic0, 3)
        icN4= NEIBcell(ic0, 4)
        icN5= NEIBcell(ic0, 5)
        icN6= NEIBcell(ic0, 6)
        VOL0= VOLCEL (ic0)

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

          if (icN5.lt.icel) then
            do j= 1, INL(icel)
              if (IAL(j, icel).eq.icN5) then
                itemL(j+indexL(icel-1))= icN5
                AL(j+indexL(icel-1))= coef
              exit
            endif
          enddo
        else
          do j= 1, INU(icel)
            if (IAU(j, icel).eq.icN5) then
              itemU(j+indexU(icel-1))= icN5
              AU(j+indexU(icel-1))= coef
            exit
          endif
        enddo
      endif
    enddo
  enddo
endif

```

poi_gen(6/8)

$$\frac{\phi_{neib(icel,1)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,2)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,3)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,4)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,5)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,6)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y = f_{icel} \Delta x \Delta y \Delta z$$

```

!C
!C +-----+
!C | INTERIOR & NEUMANN BOUNDARY CELLS |
!C +-----+
!C==
      icouG= 0
      do icol= 1, NCOLortot
      do icel= COLORindex(icol-1)+1, COLORindex(icol)
        ic0 = NEWtoOLD(icel)
        icN1= NEIBcell (ic0, 1)
        icN2= NEIBcell (ic0, 2)
        icN3= NEIBcell (ic0, 3)
        icN4= NEIBcell (ic0, 4)
        icN5= NEIBcell (ic0, 5)
        icN6= NEIBcell (ic0, 6)
        VOL0= VOLCEL (ic0)

        if (icN5.ne.0) then
          icN5= OLDtoNEW(icN5)
          coef= RDZ * ZAREA
          D(icel)= D(icel) - coef
          if (icN5.lt.icel) then
            do j= 1, INL(icel)
              if (IAL(j,icel).eq.icN5) then
                itemL(j+indexL(icel-1))= icN5
                AL(j+indexL(icel-1))= coef
              exit
            endif
          enddo
        else
          do j= 1, INU(icel)
            if (IAU(j,icel).eq.icN5) then
              itemU(j+indexU(icel-1))= icN5
              AU(j+indexU(icel-1))= coef
            exit
          endif
        enddo
      endif
    enddo
  enddo
endif

```

icN5がicelより小さければ下三角成分

poi_gen (6/8)

$$\frac{\phi_{neib(icel,1)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,2)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,3)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,4)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,5)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,6)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y = f_{icel} \Delta x \Delta y \Delta z$$

```

!C
!C +-----+
!C | INTERIOR & NEUMANN BOUNDARY CELLS |
!C +-----+
!C==
      icouG= 0
      do icol= 1, NCOLortot
      do icel= COLORindex(icol-1)+1, COLORindex(icol)
        ic0 = NEWtoOLD(icel)
        icN1= NEIBcell (ic0, 1)
        icN2= NEIBcell (ic0, 2)
        icN3= NEIBcell (ic0, 3)
        icN4= NEIBcell (ic0, 4)
        icN5= NEIBcell (ic0, 5)
        icN6= NEIBcell (ic0, 6)
        VOL0= VOLCEL (ic0)

        if (icN5.ne.0) then
          icN5= OLDtoNEW(icN5)
          coef= RDZ * ZAREA
          D(icel)= D(icel) - coef
          if (icN5.lt.icel) then
            do j= 1, INL(icel)
              if (IAL(j,icel).eq.icN5) then
                itemL(j+indexL(icel-1))= icN5
                AL(j+indexL(icel-1))= coef
              exit
            endif
          enddo
        else
          do j= 1, INU(icel)
            if (IAU(j,icel).eq.icN5) then
              itemU(j+indexU(icel-1))= icN5
              AU(j+indexU(icel-1))= coef
            exit
          endif
        enddo
      endif
    enddo
  enddo
enddo

```

icN5がicelより大きければ上三角成分

poi_gen (6/8)

$$\frac{\phi_{neib(icel,1)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,2)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,3)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,4)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,5)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,6)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y = f_{icel} \Delta x \Delta y \Delta z$$

```

if (icN6.ne.0) then
  icN6= OLDtoNEW(icN6)
  coef= RDZ * ZAREA
  D(icel)= D(icel) - coef

  if (icN6.lt.icel) then
    do j= 1, INL(icel)
      if (IAL(j,icel).eq.icN6) then
        itemL(j+indexL(icel-1))= icN6
        AL(j+indexL(icel-1))= coef
        exit
      endif
    enddo
  else
    do j= 1, INU(icel)
      if (IAU(j,icel).eq.icN6) then
        itemU(j+indexU(icel-1))= icN6
        AU(j+indexU(icel-1))= coef
        exit
      endif
    enddo
  endif
endif
endif

```

もとの座標に従って
BFORCE計算

```

ii= XYZ(ic0,1)
jj= XYZ(ic0,2)
kk= XYZ(ic0,3)

```

```

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

```

```

enddo
enddo

```

```

!C===

```

poi_gen(7/8)

係数の計算(境界面以外)

$$\frac{\phi_{neib(icel,1)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,2)} - \phi_{icel}}{\Delta x} \Delta y \Delta z +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,3)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,4)} - \phi_{icel}}{\Delta y} \Delta z \Delta x +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,5)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y +$$

$$\frac{\phi_{neib(icel,6)} - \phi_{icel}}{\Delta z} \Delta x \Delta y = f_{icel} \Delta x \Delta y \Delta z$$

```

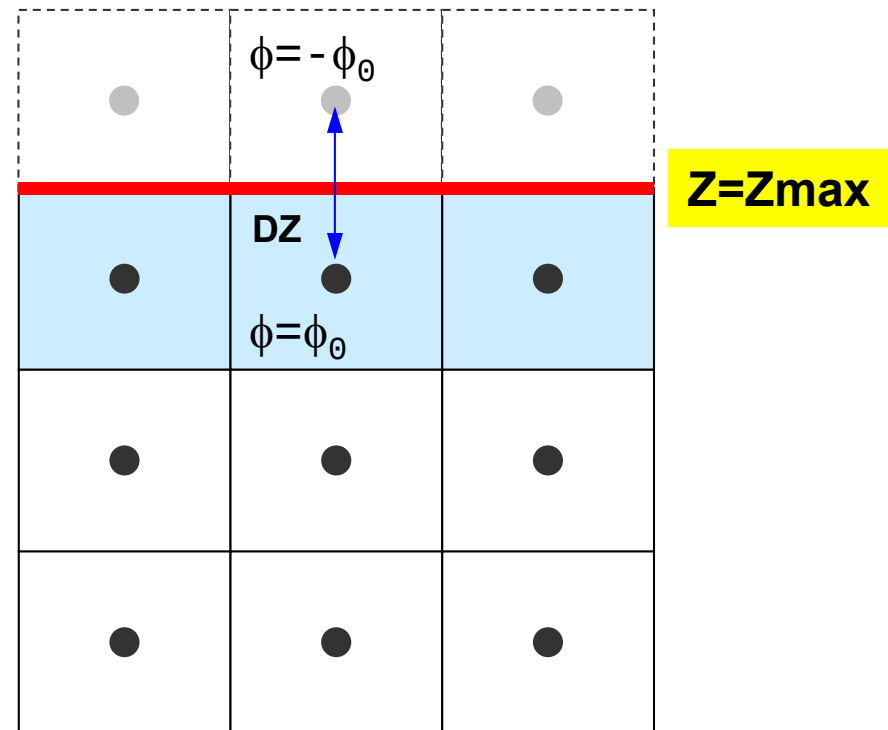
!C
!C +-----+
!C | DIRICHLET BOUNDARY CELLS |
!C +-----+
!C TOP SURFACE
!C==
  do ib= 1, ZmaxGELtot
    ic0= ZmaxGEL(ib)
    coef= 2.d0 * RDZ * ZAREA
    icel= OLDtoNEW(ic0)
    D(icel)= D(icel) - coef
  enddo
!C==
  return
end

```

poi_gen (8/8)

係数の計算(境界面以外)

係数の計算(境界面)



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)。

プログラムの構成

```

program MAIN

use STRUCT
use PCG
use solver_ICCG_mc

implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
real(kind=8), dimension(:), allocatable :: WK

call INPUT
call POINTER_INIT
call BOUNDARY_CELL
call CELL_METRICS
call POI_GEN

PHI= 0.d0
call solve_ICCG_mc
&      ( ICELTOT, NPL, NPU, indexL, itemL, indexU, itemU, D, &
&      BFORCE, PHI, AL, AU, NCOLORTot, COLORindex, &
&      EPSICCG, ITR, IER)
allocate (WK(ICELTOT))

do ic0= 1, ICELTOT
  icel= NEWtoOLD(ic0)
  WK(icel)= PHI(ic0)
enddo

do icel= 1, ICELTOT
  PHI(icel)= WK(icel)
enddo

call OUTUCD

stop
end

```

この時点で、係数、右辺ベクトル
ともに、「新しい」番号にしたがって
計算、記憶されている。

solve_ICCG_mc(1/7)

```

!C***
!C*** module solver_ICCG_mc
!C***
!
      module solver_ICCG_mc
      contains
!C
!C*** solve_ICCG
!C
      subroutine solve_ICCG_mc                                &
      &      ( N, NPL, NPU, indexL, itemL, indexU, itemU, D, B, X, &
      &      AL, AU, NCOLORtot, COLORindex, EPS, ITR, IER)
!C
      implicit REAL*8 (A-H, O-Z)

      integer :: N, NL, NU, NCOLOR

      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

      integer, dimension(0:NCOLORtot) :: COLORindex

      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

```

solve_ICCG_mc(2/7)

```

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

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

      do ic= 1, NCOLRtot
        do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
          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
      enddo
!C==

```

不完全修正
コレスキー分解

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

solve_ICCG_mc(2/7)

```

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

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

      do ic= 1, NCOLortot
        do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
          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
      enddo
!C==

```

不完全修正
コレスキー分解

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



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

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

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
```



```
do ic= 1, NCOLORTot
  do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
    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
enddo
```

右辺に現れる要素「itemL(k)」は
要素「i」とは異なる「色」に
属している ⇒ データ依存性排除

同じ「色」に属する要素はお互いに
依存性を持たない(接続しない)

solve_ICCG_mc(3/7)

```

!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==

```

```

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_mc(4/7)

```

!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 ic= 1, NCOLRtot
          do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
            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

        do ic= NCOLRtot, 1, -1
          do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
            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
        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
 $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$
 $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$
 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_mc(4/7)

```

!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

!C
!C (L){z} = {r}
        do ic= 1, NCOLRtot
          do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
            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

        do ic= NCOLRtot, 1, -1
          do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
            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
        enddo
!C==

```

前進代入
Forward Substitution

				ic=1
<u>3</u>		<u>4</u>		
<u>1</u>		<u>2</u>		

solve_ICCG_mc(4/7)

```

!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 ic= 1, NCOLRtot
        do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
          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

      do ic= NCOLRtot, 1, -1
        do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
          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
      enddo
!C==

```

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

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

前進代入
Forward Substitution

				ic=2
3	<u>7</u>	4	<u>8</u>	
1	<u>5</u>	2	<u>6</u>	

solve_ICCG_mc(4/7)

```

!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

!C
!C (M){z} = (LDL^T){z} = {r}
!C
        do ic= 1, NCOLRtot
          do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
            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

!C
!C (L){z} = {r}
!C
        do ic= NCOLRtot, 1, -1
          do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
            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
        enddo
!C==

```

前進代入
Forward Substitution

<u>11</u>		<u>12</u>		ic=3
3	7	4	8	
<u>9</u>		<u>10</u>		
1	5	2	6	

solve_ICCG_mc(4/7)

```

!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 ic= 1, NCOLRtot
        do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
          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

      do ic= NCOLRtot, 1, -1
        do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
          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
      enddo
!C==

```

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

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

前進代入
Forward Substitution

11	<u>15</u>	12	<u>16</u>	ic=4
3	7	4	8	
9	<u>13</u>	10	<u>14</u>	
1	5	2	6	

solve_ICCG_mc(4/7)

```

!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 ic= 1, NCOLRtot
        do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
          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

      do ic= NCOLRtot, 1, -1
        do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
          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
      enddo

!C==

```

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

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

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

前進代入
Forward Substitution

後退代入
Backward Substitution

solve_ICCG_mc(4/7)

```
!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
```

おなじ色の中で計算順序を変えても
結果は同じ:

i= COLOR(ic-1)+1, COLOR(ic)

i= COLOR(ic), COLOR(ic-1)+1, -1

既に計算した結果(上三角成分)
のみ使用

```
      do ic= NCOLortot, 1, -1
        do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
          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
      enddo
!C==
```

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

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

index(ic)

)
mL(k), Z)

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

前進代入
Forward Substitution

後退代入
Backward Substitution

11	15	12	16
	<u>7</u>		<u>8</u>
9	13	10	14
	<u>5</u>		<u>6</u>

ic=2

前進後退代入

```

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

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

```



```

do ic= 1, NCOLORTot
  do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
    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

do ic= NCOLORTot, 1, -1
  do i= COLORindex(ic-1)+1, COLORindex(ic)
    SW= 0.0d0
    do k= indexL(i-1)+1, indexL(i)
      SW= SW + AU(k) * W(itemU(k), Z)
    enddo
    W(i, Z)= W(i, Z) - W(i, DD) * SW
  enddo
enddo

```

solve_ICCG_mc(5/7)

```

!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==

!C
!C +-----+
!C | {p} = {z} if      ITER=1
!C | BETA= RHO / RHO1 otherwise
!C +-----+
!C==
      if ( L. eq. 1 ) then
        do i= 1, N
          W(i, P)= W(i, Z)
        enddo
      else
        BETA= RHO / RHO1
        do i= 1, N
          W(i, P)= W(i, Z) + BETA*W(i, P)
        enddo
      endif
!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

$\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$

$p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$

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_mc(6/7)

```

!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_mc(7/7)

```

!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

900 continue

```

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

$q^{(i)} = [A]p^{(i)}$

$\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$

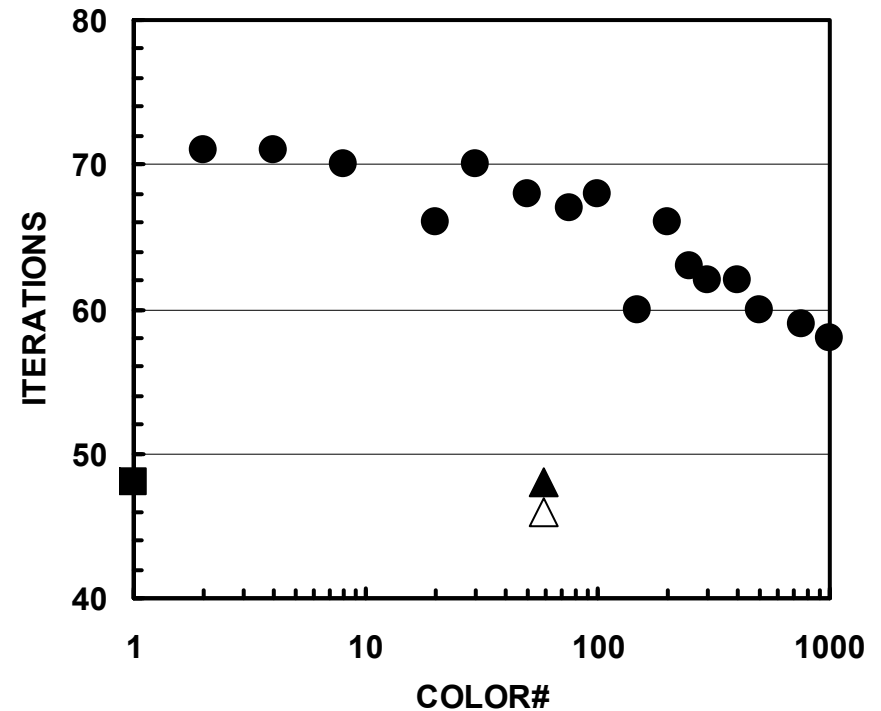
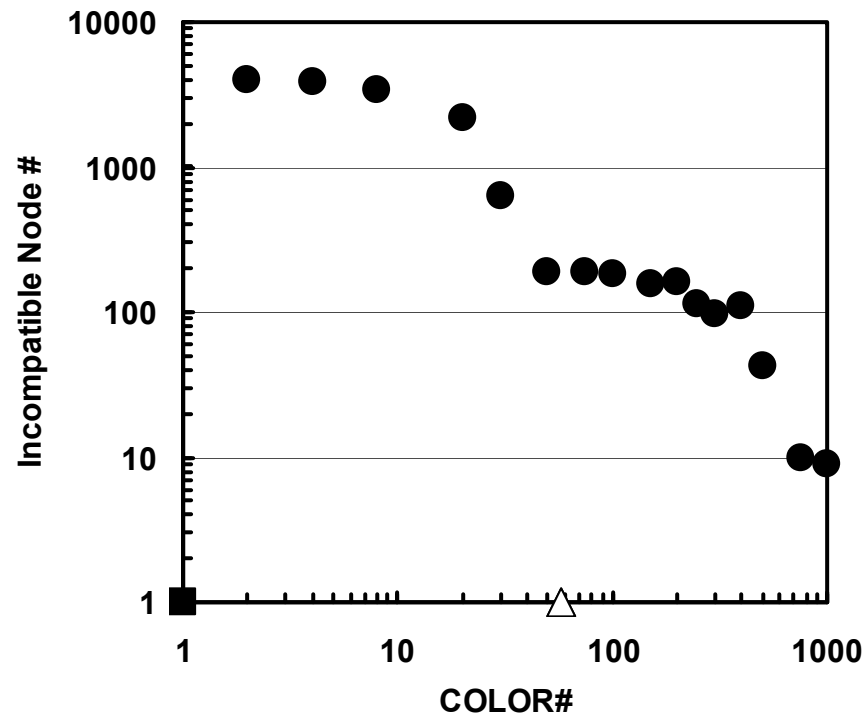
$x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$

$r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$

 check convergence $|r|$

end

ICCG法の収束



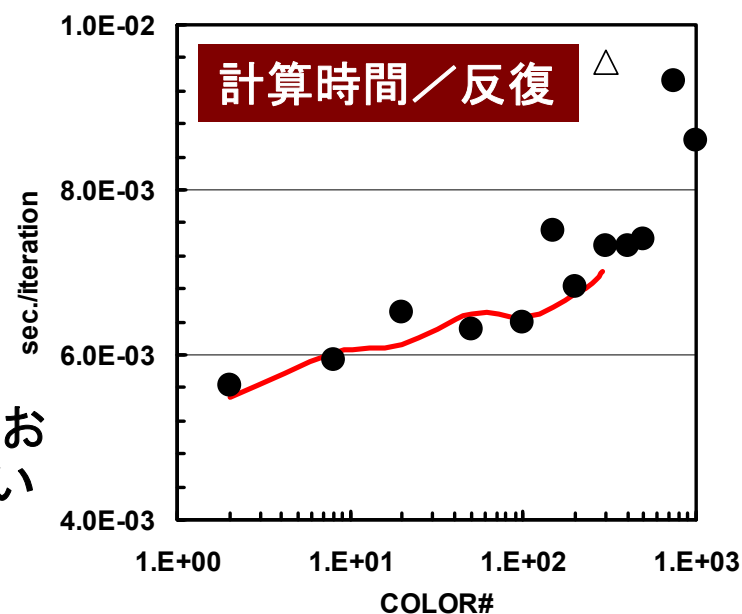
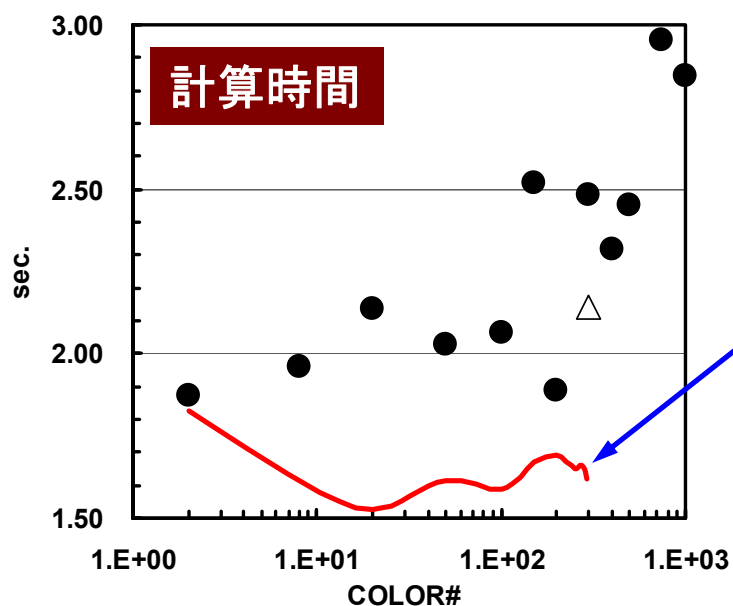
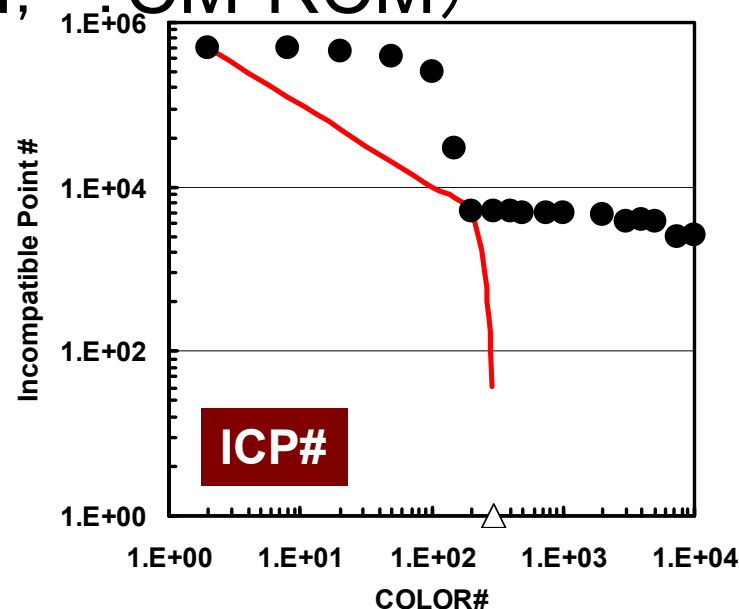
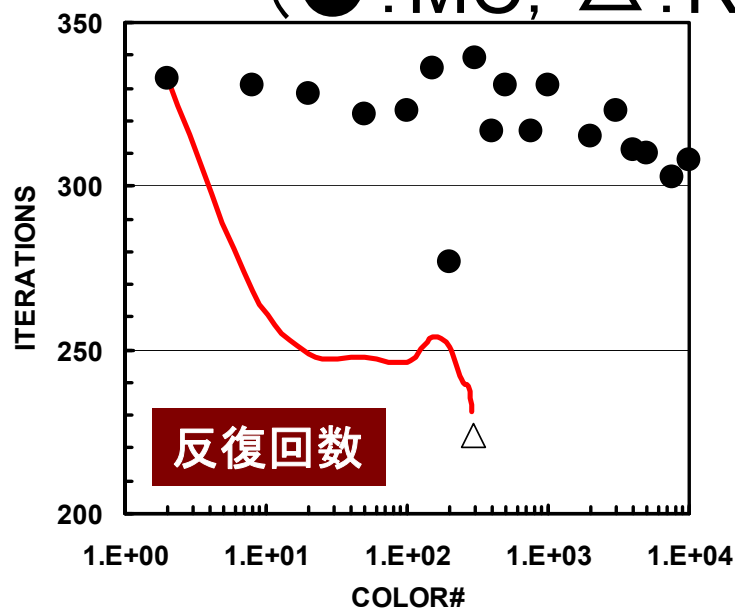
($20^3=8,000$ 要素, $\text{EPSICCG}=10^{-8}$)

(■ : ICCG(L1), ● : ICCG-MC, ▲ : ICCG-CM, △ : ICCG-RCM)

- データ依存性の解決策は？
- オーダリング (Ordering) について
 - Red-Black, Multicolor (MC)
 - Cuthill-McKee (CM), Reverse-CM (RCM)
 - オーダリングと収束の関係
- オーダリングの実装
- オーダリング付ICCG法の実装
- マルチコアへの実装 (OpenMP) へ向けて
 - L2-solにOpenMPを適用するだけ...

SR11000, 16コアにおける結果, 100^3

(●: MC, △: RCM, - : CM-RCM)



FX10, 16コアにおける結果, 128^3

(●:MC, △:RCM, -:CM-RCM)

