

ハイブリッドMPI-OpenMP並列版自動チューニングライブラリ

pXabclib 0.1.0

詳細仕様書

東京大学情報基盤センター

(株)日立製作所中央研究所

2014年12月17日

DISCLAIMER

This software, pOpenATLib and pXabclib, is provided by the copyright holders and contributors, Information Technology Center, The University of Tokyo and Central Research Laboratory, Hitachi Ltd., "AS IS" and any express or implied warranties, including, but not limited to, the implied warranties of merchantability and fitness for a particular purpose are disclaimed. In no event shall the copyright owner or contributors be liable for any direct, indirect, incidental, special, exemplary, or consequential damages (including, but not limited to, procurement of substitute goods or services; loss of use, data, or profits; or business interruption) however caused and on any theory of liability, whether in contract, strict liability, or tort (including negligence of otherwise) arising in any way out of the use of this software, even if advised of the possibility of such damage.

目次

1 概要.....	4
2 pXabclib 使用における前提条件.....	4
3 pOpenATI_init.....	5
3.1 pOpenATI_init の用途.....	5
3.2 引数仕様.....	5
3.3 IATPARAM 仕様.....	5
3.4 RATPARAM 仕様.....	6
4 pOpenATI_DAFDC_setup.....	7
4.1 pOpenATI_DAFDC_setup の用途.....	7
4.2 引数仕様.....	7
4.3 処理手順.....	7
5 pOpenATI_DAFDC.....	9
5.1 pOpenATI_DAFDC の用途.....	9
5.2 引数仕様.....	9
5.3 処理手順.....	10
6 pOpenATI_DURMV_presetup.....	13
6.1 pOpenATI_DURMV_presetup の用途.....	13
6.2 引数仕様.....	13
6.3 Xabclib_COMM_SETUP 仕様.....	14
6.4 処理手順.....	14
7 pOpenATI_DURMV_setup.....	19
7.1 pOpenATI_DURMV_setup の用途.....	19
7.2 引数仕様.....	19
7.3 Xabclib_COMM_INFO 仕様.....	20
7.4 処理手順.....	21
8 pOpenATI_DURMV.....	25
8.1 pOpenATI_DURMV の用途.....	25
8.2 引数仕様.....	25
8.3 処理手順.....	26
9 pXabclib_BICGSTAB.....	28
9.1 pXabclib_BICGSTAB の用途.....	28

9.2 pXabclib_BICGSTAB アルゴリズム.....	28
9.3 pXabclib_BICGSTAB を呼び出すまでの流れ.....	29
9.4 pXabclib_BICGSTAB 引数仕様.....	29
付録 行列, ベクトルの分割方式の図.....	31

全 35 頁

1 概要

本文書では「自動チューニングライブラリのハイブリッド MPI-OpenMP 並列化」で開発する pXabclib および pOpenATLib の仕様について記述する。

本件では以下の機能を開発する。

- pOpenATI_DAFDC_setup, pOpenATI_DAFDC 各 rank の担当するローカル行列の作成および配布
- pOpenATI_DURMV_presetup, pOpenATI_DURMV_setup SpMV に必要な通信情報と各 thread 担当行情報の作成
- pOpenATI_DURMV MPI-OpenMP でハイブリッド並列化された SpMV
- pXabclib_BICGSTAB MPI-OpenMP でハイブリッド並列化された BiCGStab 法ソルバ

【用語定義】

- SpMV : 疎行列ベクトル積
- rank : MPI 並列で割り振られるプロセス
- thread : OpenMP 並列で設定する実行単位
- グローバル行列 : 全体行列
- ローカル行列 : グローバル行列を分割し、各 rank で分担して持つ部分行列
- ハイブリッド並列 : MPI と OpenMP を併用した並列化方針
- CRS(Compressed Row Storage)形式 : 要素を行方向に圧縮して保持する行列格納形式

2 pXabclib 使用における前提条件

- rank 番号は 0-`NUMPROCS-1` で割り当てる。
- 各 rank がローカルな行列およびベクトル(右辺、初期近似解)を保持している。(※1)
- 行列分割情報(DECOMP)が設定されている。(※1)
- 分割方式は行列、ベクトル共に rank 番号順に連続する行を保持する方式とする。
- 分割方法は各 rank が担当する非零要素数が均等に近づくように分割する。
- 行列の格納形式は CRS 形式とする。
- パラメーターリスト(IATPARAM, RATPARAM)に初期値が設定されている。
- 同じ行列を入力として使用していても、rank 数か thread 数を変更した場合は pOpenATI_DURMV_presetup と pOpenATI_DURMV_setup を再度呼び出す必要がある。

(※1)rank0 のみがグローバルな行列、ベクトルを保持している場合は、pOpenATI_DAFDC_setup, pOpenATI_DAFDC を用いて行列分割情報の作成と各 rank にローカルな行列およびベクトルを送付する。

3 pOpenATI_init

3.1 pOpenATI_init の用途

パラメーターリストである IATPARAM と RATPARAM に初期値を設定する関数。

3.2 引数仕様

変数名	型	I/O	説明
IATPARAM(200)	INT	I	INTEGER 型パラメーターリスト
RATPARAM(200)	DOUBLE	I	DOUBLE 型パラメーターリスト
INFO	INT	O	エラーコード INFO=0: 正常値

3.3 IATPARAM 仕様

番号	初期値	I/O	説明
OpenATLib's Information[3-100]			
3	OMP_GET_MAX_THREADS	I	OpenMP の使用 thread 数
9	0	I	SpMV の自動チューニング機能の ON/OFF (自動チューニング機能は未実装)
10	12	I	SpMV の行列の thread 分割方式の選択 (thread 分割は非零要素数分割のみ実装)
Xablib's Information[101-200]			
102	-1	I	ソルバ内最大反復回数 IATPARAM(102)=-1: 次元数 N を設定
103	-	O	ソルバ内反復回数
105	2	I	前処理の選択 IATPARAM(105)=1: 前処理なし IATPARAM(105)=2: Jacobi 前処理
111	-	O	SpMV 演算回数
115	0	O	MPI エラーコード IATPARAM(115)=0: 正常値 IATPARAM(115)≠0: 異常値
200	0	I	デバッグプリントの ON/OFF IATPARAM(200)=0: デバッグプリントなし IATPARAM(200)=1: デバッグプリントあり

3.4 RATPARAM 仕様

番号	初期値	I/O	説明
OpenATLib's Information[3~100]			
7	-	0	pOpenATI_DURMV 内の行列ベクトル積の 1 回の演算時間
8	-	0	pOpenATI_DURMV での 1 回の MPI 並列処理のオーバーヘッド時間
Xablib's Information[101~200]			
102	-1	I	ソルバ最大演算時間
103	1.0E-8	I	収束判定基準値
108	-	0	右辺ベクトルのノルム
109	-	0	最終残差($\ Ax-b\ _2/\ b\ _2$)
110	-	0	ソルバの演算量
111	-	0	前処理の演算時間
112	-	0	ソルバの演算時間
115	-	0	pOpenATI_DURMV 内の行列ベクトル積の合計演算時間
116	-	0	pOpenATI_DURMV での MPI 並列処理のオーバーヘッド時間の合計
117	-	0	pOpenATI_DURMV 以外での MPI 通信時間(他 rank とのノルム計算の和や、エラーコードの集計に使用)

4 pOpenATI_DAFDC_setup

4.1 pOpenATI_DAFDC_setup の用途

各 rank の担当するローカル行列の作成および配布を行う関数 pOpenATI_DAFDC(詳細は 5 章)のセットアップ用関数。グローバル行列の分割情報とローカル行列の次元数、非零要素数を計算する。

4.2 引数仕様

CALL pOpenATI_DAFDC_setup(NL,NZL,N,NZ,IRP,MYID,NUMPROCS,COMM,DECOMP,INFO)

変数名	型	I/O	説明
NL	INT*8	O	自 rank の次元数
NZL	INT*8	O	自 rank の非零要素数
N	INT*8	I	グローバル行列の次元数
NZ	INT*8	I	グローバル行列の非零要素数
IRP(N+1)	INT*8	I	グローバル行列の非零要素の各行先頭へのポインタ
MYID	INT	I	自 rank 番号(0-NUMPROCS-1)
NUMPROCS	INT	I	総 rank 数
COMM	INT	I	MPI コミュニケータ
DECOMP(NUMPROCS+1)	INT*8	O	グローバル行列の分割情報。各 rank の先頭行番号(グローバルな番号)
INFO	INT	O	エラーコード INFO=0 : 正常値 INFO=-i : i 番目の引数の値が不正

4.3 処理手順

<p>手順</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. work 領域の設定 & 非零要素分割の閾値設定(PNZ,T) 2. 行列分割情報作成と各 rank の非零要素数のカウント(DECOMP,PNZ) (rank0 のみ行う) 3. rank0 から他 rank へ行列分割情報を送信(DECOMP を BCAST) 4. rank0 から各 rank へそれぞれの非零要素数を送信(NZL) 5. 自 rank の次元数を求める(NL)
--

4.3.1 work 領域の設定 & 非零要素分割の閾値設定(PNZ,T)

<p>(実装例)</p> <pre>ALLOCATE(PNZ(NUMPROCS)) T=NZ/NUMPROCS</pre>

4.3.2 行列分割情報作成と各 rank の非零要素数のカウント(DECOMP,PNZ)

```
(実装例)
IF(MYID.EQ.0)THEN
  K=1
  NZ_CNT=0
  DSUM2=0
  DECOMP(1)=1
  DO I=1,N
    DSUM1=DSUM2
    DSUM2+=IRP(I+1)-IRP(I)
    IF(DSUM2.GE.T)THEN
      IF(K.EQ.NUMPROCS)THEN
        GO TO 100
      END IF
      IF(ABS(DSUM1-T).LT.ABS(DSUM2-T))THEN
        DECOMP(K+1)=I
        PNZ(K)=DSUM1
        DSUM2=IRP(I+1)-IRP(I)
      ELSE
        DECOMP(K+1)=I+1
        PNZ(K)=DSUM2
        DSUM2=0
      END IF
      NZ_CNT+=PNZ(K)
      K++
      DSUM1=0
    END IF
  END DO
  100 CONTINUE
  DECOMP(NUMPROCS+1)=N+1
  PNZ(NUMPROCS)=NZ-NZ_CNT
END IF
```

4.3.3 rank0 から他 rank へ行列分割情報を送信(DECOMP を BCAST)

```
(実装例)
CALL MPI_BCAST(DECOMP,NUMPROCS+1,MPI_INTEGER8,0,COMM,IERR)
```

4.3.4 rank0 から各 rank へそれぞれの非零要素数を送信(NZL)

```
(実装例)
CALL MPI_SCATTER(PNZ,1,MPI_INTEGER8,NZL,1,MPI_INTEGER8,
                 0,COMM,IERR)
```

4.3.5 自 rank の次元数を求める(NL)

```
(実装例)
NL=DECOMP(MYID+2)-DECOMP(MYID+1)
```

5 pOpenATI_DAFDC

5.1 pOpenATI_DAFDC の用途

pOpenATI_DAFDC_setup の出力を利用し、各 rank の担当するローカル行列の作成および配布を行う関数。関数を呼び出す前にローカル行列の領域確保を行う必要がある。

5.2 引数仕様

CALL pOpenATI_DAFDC(NL,NZL,N,NZ,IRP,ICOL,VAL,X,B,IRP_L,ICOL_L,VAL_L,X_L,B_L,MYID,NUMPROCS,COMM,DECOMP,INFO)

変数名	型	I/O	説明
NL	INT*8	I	自 rank の次元数
NZL	INT*8	I	自 rank の非零要素数
N	INT*8	I	グローバル行列の次元数
NZ	INT*8	I	グローバル行列の非零要素数
IRP(N+1)	INT*8	I	グローバル行列の非零要素の各行先頭へのポインタ
ICOL(NZ)	INT*8	I	グローバル行列の非零要素の列番号
VAL(NZ)	DOUBLE	I	グローバル行列の非零要素の値
X(N)	DOUBLE	I	グローバル行列のベクトルの値
B(N)	DOUBLE	I	グローバル行列の右辺ベクトル
IRP_L(NL+1)	INT*8	O	自 rank の非零要素の各行先頭へのポインタ
ICOL_L(NZL)	INT*8	O	自 rank の非零要素の列番号(グローバルな番号)
VAL_L(NZL)	DOUBLE	O	自 rank の非零要素の値
X_L(NL)	DOUBLE	O	自 rank のベクトルの値
B_L(NL)	DOUBLE	O	自 rank の右辺ベクトル
MYID	INT	I	自 rank 番号(0-NUMPROCS-1)
NUMPROCS	INT	I	総 rank 数
COMM	INT	I	MPI コミュニケータ
DECOMP(NUMPROCS+1)	INT*8	I	グローバル行列の分割情報。各 rank の先頭行番号(グローバルな番号)
INFO	INT	O	エラーコード INFO=0 : 正常値 INFO=-i : i 番目の引数の値が不正

5.3 処理手順

手順

1. pOpenATI_DAFDC 前にローカルな行列情報のリストの領域確保 (IRP_L,ICOL_L,VAL_L,X_L,B_L)
2. mpi 通信用配列の設定(SSTAT,SREQ,RSTAT,RREQ)
3. エラーチェック
4. rank0 から各 rank へローカル行列を送信する(IRP_L,ICOL_L,VAL_L,X_L,B_L)
5. 各 rank は rank0 からローカル行列を受信する(IRP_L,ICOL_L,VAL_L,X_L,B_L)

5.3.1 pOpenATI_DAFDC 前にローカルな行列情報のリストの領域確保 (IRP_L,ICOL_L,VAL_L,X_L,B_L)

(実装例)

```
ALLOCATE(IRP_L(NL+1),ICOL_L(NZL),VAL_L(NZL),X_L(NL),B_L(NL))
```

5.3.2 mpi 通信用配列の設定(SSTAT,SREQ,RSTAT,RREQ)

(実装例)

```
ALLOCATE(SSTAT(MPI_STATUS_SIZE,(NUMPROCS-1)*5),SREQ((NUMPROCS-1)*5),
RSTAT(MPI_STATUS_SIZE,5),RREQ(5))
```

5.3.3 エラーチェック

(実装例)

```
INFO_G = 0
//NL が 2G 以下か
IF (NL .GT. 2000000000) THEN
    INFO = -1
END IF
CALL MPI_ALLREDUCE(INFO,INFO_G,1,MPI_INTEGER,MPI_SUM,COMM,IERR)
//NZL が 2G 以下か
IF (NZL .GT. 2000000000) THEN
    INFO = -2
END IF
CALL MPI_ALLREDUCE(INFO,INFO_G,1,MPI_INTEGER,MPI_SUM,COMM,IERR)
```

5.3.4 rank0 から各 rank へローカル行列を送信する

(IRP_L,ICOL_L,VAL_L,X_L,B_L)

```

(実装例)
CNT = 0
IF (MYID .EQ. 0) THEN
  DO IP = 2, NUMPROCS
    ST = DECOMP(IP)
    NL_TMP = INT(DECOMP(IP+1) - ST,4)
    NZL_TMP = INT(IRP(DECOMP(IP+1)) - IRP(ST),4)
    CALL MPI_ISEND(IRP(ST),NL_TMP+1,MPI_INTEGER8,IP-1,
                  5*CNT+1,COMM,SREQ(5*CNT+1),IERR)
    CALL MPI_ISEND(X(ST),NL_TMP,MPI_DOUBLE_PRECISION,IP-1,
                  5*CNT+2,COMM,SREQ(5*CNT+2),IERR)
    CALL MPI_ISEND(B(ST),NL_TMP,MPI_DOUBLE_PRECISION,IP-1,
                  5*CNT+3,COMM,SREQ(5*CNT+3),IERR)
    CALL MPI_ISEND(ICOL(IRP(ST)),NZL_TMP,MPI_INTEGER8,IP-1,
                  5*CNT+4,COMM,SREQ(5*CNT+4),IERR)
    CALL MPI_ISEND(VAL(IRP(ST)),NZL_TMP,MPI_DOUBLE_PRECISION,
                  IP-1,5*CNT+5,COMM,SREQ(5*CNT+5),IERR)

    CNT++
  END DO
  IF (NUMPROCS .GT. 1) THEN
    CALL MPI_WAITALL((NUMPROCS-1)*5,SREQ,SSTAT,IERR)
  END IF
  IRP_L(1) = 1
  DO I = 1, NL
    IRP_L(I+1) += IRP(I+1) - IRP(I)
    X_L(I) = X(I)
    B_L(I) = B(I)
    DO J = IRP_L(I), IRP_L(I+1)-1
      ICOL_L(J) = ICOL(J)
      VAL_L(J) = VAL(J)
    END DO
  END DO
END DO
END IF

```

※MPI_ISEND, MPI_IRECV で使用する通信バッファの個数(第 2 引数)を変数型 INTEGER8 とした場合、バッファに正常な値が受信されないため、INTEGER4 にキャストしてから通信を行う。

5.3.5 各 rank は rank0 からローカル行列を受信する

(IRP_L,ICOL_L,VAL_L,X_L,B_L)

```
(実装例)
IF (MYID .NE. 0) THEN
  NL_TMP = INT(NL,4)
  NZL_TMP = INT(NZL,4)
  CALL MPI_Irecv(IRP_L,NL_TMP+1,MPI_INTEGER8,0,(MYID-1)*5+1,
                COMM,RREQ(1),IERR)
  CALL MPI_Irecv(X_L,NL_TMP,MPI_DOUBLE_PRECISION,0,(MYID-1)*5+2,
                COMM,RREQ(2),IERR)
  CALL MPI_Irecv(B_L,NL_TMP,MPI_DOUBLE_PRECISION,0,(MYID-1)*5+3,
                COMM,RREQ(3),IERR)
  CALL MPI_Irecv(ICOL_L,NZL_TMP,MPI_INTEGER8,0,(MYID-1)*5+4,
                COMM,RREQ(4),IERR)
  CALL MPI_Irecv(VAL_L,NZL_TMP,MPI_DOUBLE_PRECISION,0,
                (MYID-1)*5+5,COMM,RREQ(5),IERR)
  CALL MPI_WAITALL(5,RREQ,RSTAT,IERR)
  ST = IRP_L(1)
  IRP_L(1) = 1
  DO I = 1, NL
    DIF = IRP_L(I+1) - ST
    ST = IRP_L(I+1)
    IRP_L(I+1) = IRP_L(I) + DIF
  END DO
END IF
```

※MPI_ISEND, MPI_Irecv で使用する通信バッファの個数(第 2 引数)を変数型 INTEGER8 とした場合、バッファに正常な値が受信されないため、INTEGER4 にキャストしてから通信を行う。

6 pOpenATI_DURMV_presetup

6.1 pOpenATI_DURMV_presetup の用途

SpMV に必要な通信情報と各 thread 担当行情報を作成する関数 pOpenATI_DURMV_setup(詳細は 7 章)の前準備を行う関数。MPI 通信情報のセットアップ用配列の作成と pOpenATI_DURMV_setup の出力となっている MPI 通信情報格納配列のサイズの計算を行う。

6.2 引数仕様

CALL pOpenATI_DURMV_presetup(NL,NZL,N,IRP_L,ICOL_L,IATPARAM,RATPARAM,MYID, NUMPROCS,COMM,DECOMP,Xablib_COMM_SETUP,LCS, LCI,INFO)

変数名	型	I/O	説明
NL	INT*8	I	自 rank の次元数
NZL	INT*8	I	自 rank の非零要素数
N	INT*8	I	グローバル行列の次元数
IRP_L(NL+1)	INT*8	I	自 rank の非零要素の各行先頭へのポインタ
ICOL_L(NZL)	INT*8	I	自 rank の非零要素の列番号(グローバルな番号)
IATPARAM(200)	INT	I	INTEGER 型パラメーターリスト
RATPARAM(200)	DOUBLE	I	DOUBLE 型パラメーターリスト
MYID	INT	I	自 rank 番号(0-NUMPROCS-1)
NUMPROCS	INT	I	総 rank 数
COMM	INT	I	MPI コミュニケータ
DECOMP(NUMPROCS+1)	INT*8	I	グローバル行列の分割情報。各 rank の先頭行番号(グローバルな番号)
Xablib_COMM_SETUP(LCS)	INT*8	O	MPI 通信情報セットアップ用配列(詳細は図 1)
LCS	INT*8	I	Xablib_COMM_SETUP のサイズ $LCS \geq 6+4*NUMPROCS$
LCI	INT*8	O	pOpenATI_DURMV_setup で作成する Xablib_COMM_INFO のサイズ $LCI \geq 7+2*NS_RANKS+2*NR_RANKS+NS_TOT+NZL+NUMTHREADS$
INFO	INT	O	エラーコード INFO=0 : 正常値 INFO=-i : i 番目の引数の値が不正

6.3 Xablib_COMM_SETUP 仕様

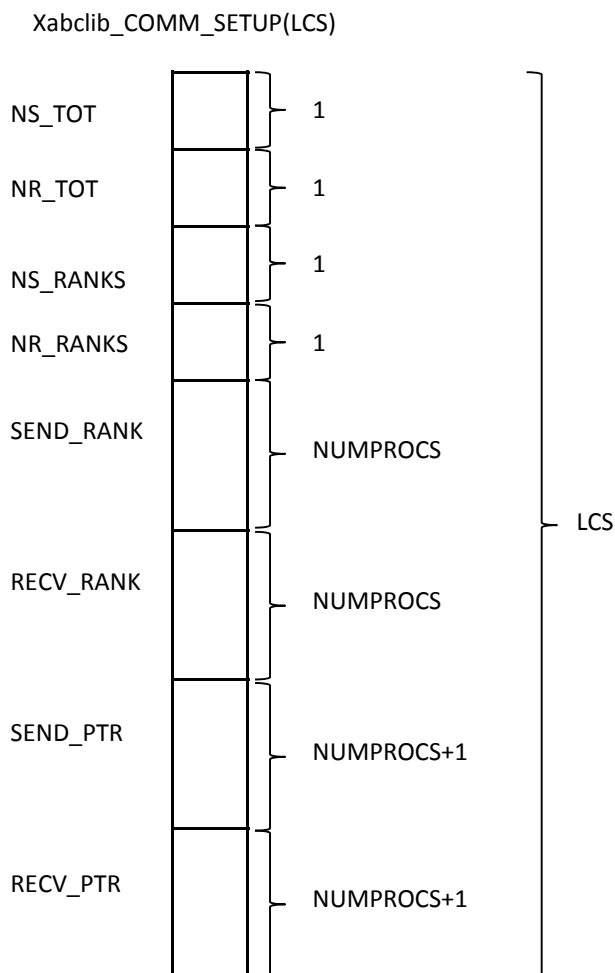


図 1 MPI 通信情報セットアップ用配列 Xablib_COMM_SETUP の仕様

6.4 処理手順

- 手順
1. エラーチェック
 2. work 領域の設定(MARK,R_COUNT,S_COUNT)
 3. MPI 通信情報セットアップ用配列の分割ポインタの設定(Xablib_COMM_SETUP 用ポインタ)
 4. 通信相手の rank 番号取得と通信する要素数のカウント(R_COUNT)
 5. 他 rank に通信相手と通信要素数を送信(R_COUNT を ALLTOALL)
 6. MPI 通信情報セットアップ用配列の受信側要素作成 (NR_TOT,NR_RANKS,RECV_RANK,RECV_PTR)
 7. MPI 通信情報セットアップ用配列の送信側要素作成 (NS_TOT,NS_RANKS,SEND_RANK,SEND_PTR)
 8. OpenMP 並列の thread 数を取得する(NUMTHREADS)
 9. pOpenATI_DURMV_setup で作成する MPI 通信情報格納配列のサイズを計算する(LCI)

6.4.1 エラーチェック

```

(実装例)
//rank 番号が 0~NUMPROCS-1 になっているか
IF(MYID.LT.0 .OR. MYID.GT.NUMPROCS-1)THEN
  INFO=-1
END IF
CALL MPI_ALLREDUCE(INFO,INFO_G,1,MPI_INTEGER,MPI_SUM,COMM,IERR)
//NL が N よりも大きくないか
IF(NL.GT.N)THEN
  INFO=-5
END IF
CALL MPI_ALLREDUCE(INFO,INFO_G,1,MPI_INTEGER,MPI_SUM,COMM,IERR)
//一つ前の rank が担当している DECOMP が小さくないか
DO I=1,NUMPROCS
  IF(DECOMP(I+1).LT.DECOMP(I))THEN
    INFO=-7
  END IF
END DO
//DECOMP, NL が正しい値か
IF(DECOMP(MYID+2)-DECOMP(MYID+1).NE.NL)THEN
  INFO=-7
END IF
//NL の合計が N となっているか
SIZE=0
DO I=1,NUMPROCS
  SIZE+=DECOMP(I+1)-DECOMP(I)
END DO
IF(SIZE.NE.N)THEN
  INFO=-7
ENDIF
//DECOMP の第一要素が 1 になっているか
IF(DECOMP(1).NE.1)THEN
  INFO=-7
END IF
//DECOMP の最終要素が N+1 になっているか
IF(DECOMP(NUMPROCS+1)-1.NE.N)THEN
  INFO=-7
END IF
CALL MPI_ALLREDUCE(INFO,INFO_G,1,MPI_INTEGER,MPI_SUM,COMM,IERR)
//LCS は十分大きいか
IF(LCS.LT.6+4*NUMPROCS)THEN
  INFO=-13
END IF
CALL MPI_ALLREDUCE(INFO,INFO_G,1,MPI_INTEGER,MPI_SUM,COMM,IERR)

```


6.4.2 work 領域の設定(MARK,R_COUNT,S_COUNT)

```
(実装例)
ALLOCATE(MARK(N),R_COUNT(NUMPROCS),S_COUNT(NUMPROCS))
R_COUNT(1:NUMPROCS)=0
S_COUNT(1:NUMPROCS)=0
MARK(1:N)=0
DO I=DECOMP(MYID+1),DECOMP(MYID+2)-1
    MARK(I)=1
END DO
```

6.4.3 MPI 通信情報セットアップ用配列の分割ポインタの設定

(Xablib_COMM_SETUP 用ポインタ)

```
(実装例)
IP_NS_TOT=1
IP_NR_TOT= IP_NS_TOT+1
IP_NS_RANKS=IP_NR_TOT+1
IP_NR_RANKS=IP_NS_RANKS+1
IP_SEND_RANK=IP_NR_RANKS+1
IP_RECV_RANK=IP_SEND_RANK+NUMPROCS
IP_SEND_PTR=IP_RECV_RANK+NUMPROCS
IP_RECV_PTR=IP_SEND_PTR+NUMPROCS+1
※以降、設定したポインタにより分割された Xablib_COMM_SETUP は以下のように表す
NS_TOT=Xablib_COMM_SETUP(IP_NS_TOT)
NR_TOT=Xablib_COMM_SETUP(IP_NR_TOT)
NS_RANKS=Xablib_COMM_SETUP(IP_NS_RANKS)
NR_RANKS=Xablib_COMM_SETUP(IP_NR_RANKS)
SEND_RANK=Xablib_COMM_SETUP(IP_SEND_RANK)
RECV_RANK=Xablib_COMM_SETUP(IP_RECV_RANK)
SEND_PTR=Xablib_COMM_SETUP(IP_SEND_PTR)
RECV_PTR= Xablib_COMM_SETUP(IP_RECV_PTR)
```

6.4.4 通信相手の rank 番号取得と通信する要素数のカウント(R_COUNT)

```
(実装例)
DO I=1,NL
    DO J=IRP_L(I),IRP_L(I+1)-1
        JP=ICOL_L(J)
        IF (MARK(JP).EQ.0) THEN
            MARK(JP)=1
        END IF
    END DO
END DO
DO I=1,NUMPROCS
    DO J=DECOMP(I),DECOMP(I+1)-1
        R_COUNT(I)+=MARK(J)
    END DO
END DO
R_COUNT(MYID+1)=0
```

6.4.5 他 rank に通信相手と通信要素数を送信(R_COUNT を ALLTOALL)

```
(実装例)
CALL MPI_ALLTOALL(R_COUNT,1,MPI_INTEGER8,S_COUNT,1,MPI_INTEGER8,
                  COMM,IERR)
```

6.4.6 MPI 通信情報セットアップ用配列の受信側要素作成

(NR_TOT,NR_RANKS,RECV_RANK,RECV_PTR)

```
(実装例)
RECV_PTR(1)=NL+1
NR_RANKS=0
NR_TOT=0
DO I=1,NUMPROCS
  IF (R_COUNT(I).NE.0) THEN
    NR_RANKS++
    RECV_PTR(NR_RANKS+1)=RECV_PTR(NR_RANKS)+R_COUNT(I)
    RECV_RANK(NR_RANKS)=I-1
    NR_TOT+=R_COUNT(I)
  END IF
END DO
```

6.4.7 MPI 通信情報セットアップ用配列の送信側要素作成

(NS_TOT,NS_RANKS,SEND_RANK,SEND_PTR)

```
(実装例)
SEND_PTR(1)=1
NS_RANKS=0
NS_TOT=0
DO I=1,NUMPROCS
  IF (S_COUNT(I).NE.0) THEN
    NS_RANKS++
    SEND_PTR(NS_RANKS+1)=SEND_PTR(NS_RANKS)+S_COUNT(I)
    SEND_RANK(NS_RANKS)=I-1
    NS_TOT+=S_COUNT(I)
  END IF
END DO
```

6.4.8 OpenMP 並列の thread 数を取得する(NUMTHREADS)

```
(実装例)
NUMTHREADS=IATPARAM(3)
```

6.4.9 pOpenATI_DURMV_setup で作成する MPI 通信情報格納配のサイズを計算する(LCI)

(実装例)

```
LCI=7+2*NS_RANKS+2*NR_RANKS+NS_TOT+NZL+NUMTHREADS
```

7 pOpenATI_DURMV_setup

7.1 pOpenATI_DURMV_setup の用途

pOpenATI_DURMV_setup で作成した MPI 通信情報セットアップ用配列を利用し、SpMV に必要な通信情報と各 thread 担当行情報を作成する関数。関数を呼び出す前に MPI 通信情報格納配列の領域確保を行う必要がある。

7.2 引数仕様

CALL pOpenATI_DURMV_setup(NL,NZL,N,IRP_L,ICOL_L,IATPARAM,RATPARAM,MYID,
NUMPROCS,COMM,DECOMP,Xabclib_COMM_SETUP,LCS,
Xabclib_COMM_INFO,LCI,INFO)

変数名	型	I/O	説明
NL	INT*8	I	自 rank の次元数
NZL	INT*8	I	自 rank の非零要素数
N	INT*8	I	グローバル行列の次元数
IRP_L(NL+1)	INT*8	I	自 rank の非零要素の各行先頭へのポインタ
ICOL_L(NZL)	INT*8	I	自 rank の非零要素の列番号(グローバルな番号)
IATPARAM(200)	INT	I	INTEGER 型パラメーターリスト
RATPARAM(200)	DOUBLE	I	DOUBLE 型パラメーターリスト
MYID	INT	I	自 rank 番号(0-NUMPROCS-1)
NUMPROCS	INT	I	総 rank 数
COMM	INT	I	MPI コミュニケータ
DECOMP(NUMPROCS+1)	INT*8	I	グローバル行列の分割情報。各 rank の先頭行番号(グローバルな番号)
Xabclib_COMM_SETUP(LCS)	INT*8	I	MPI 通信情報セットアップ用配列 (pOpenATI_DURMV_presetup の出力をそのまま使用)
LCS	INT*8	I	Xabclib_COMM_SETUP のサイズ $LCS \geq 6+4*NUMPROCS$
Xabclib_COMM_INFO(LCI)	INT*8	O	MPI 通信情報格納配列(詳細は図 2)
LCI	INT*8	I	Xabclib_COMM_INFO のサイズ $LCI \geq 7+2*NS_RANKS+2*NR_RANKS+NS_TOT+NZL+NUMTHREADS$ (pOpenATI_DURMV_presetup の出力をそのまま使用)
INFO	INT	O	エラーコード INFO=0 : 正常値 INFO=-i : i 番目の引数の値が不正

7.3 Xablib_COMM_INFO 仕様

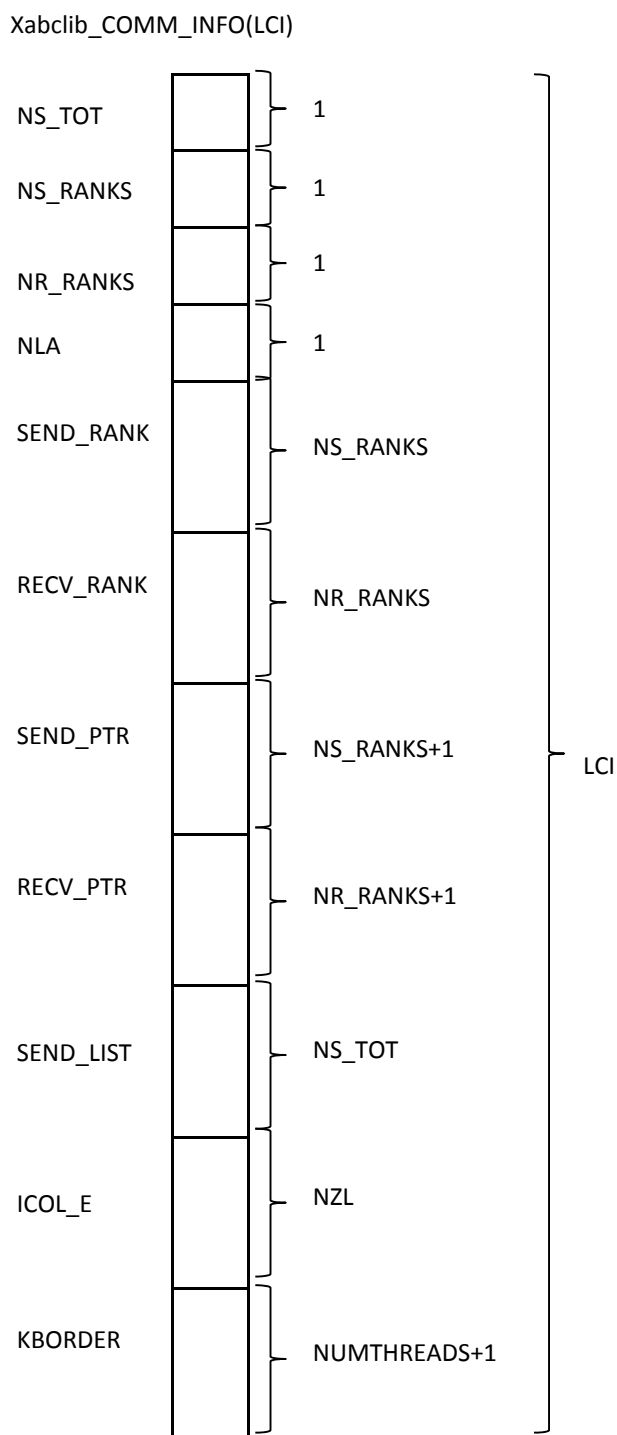


図 2 MPI 通信情報格納配列 Xablib_COMM_INFO の仕様

7.4 処理手順

手順

1. pOpenATI_DURMV_setup 前に MPI 通信情報格納配列の領域確保 (Xablib_COMM_INFO)
2. エラーチェック
3. MPI 通信情報格納配列の分割情報の設定(Xablib_COMM_INFO 用ポインタ)
4. work 領域&MPI 通信用配列の設定 (MARK,ROW_NUM,IORD,RECV_LIST,SSTAT,SREQ,RSTAT,RREQ)
5. ICOL_E の作成と要求する行番号のバック(ICOL_E,RECV_LIST)
6. 要求する行番号の LIST を他 rank に送信(RECV_LIST を ISEND)
7. 他 rank から要求行番号の受信(SEND_LIST に IRECV)
8. 受信した行番号をグローバルな番号からローカルなものへ変更する
9. OpenMP を利用したローカル行列の分割情報作成(KBORDER)

7.4.1 pOpenATI_DURMV_setup 前に MPI 通信情報格納配列の領域確保 (Xablib_COMM_INFO)

(実装例)

```
ALLOCATE(Xablib_COMM_INFO(LCI))
```

7.4.2 エラーチェック

(実装例)

```
//LCI は十分大きいか
IF(LCI.LT.7+2*NS_RANKS+2*NR_RANKS+NS_TOT+NZL+NUMTHREADS)THEN
    INFO=-15
END IF
INFO_G = 0
//NL が 2G 以下か
IF (NL .GT. 2000000000) THEN
    INFO = -1
END IF
CALL MPI_ALLREDUCE(INFO,INFO_G,1,MPI_INTEGER,MPI_SUM,COMM,IERR)
//NZL が 2G 以下か
IF (NZL .GT. 2000000000) THEN
    INFO = -2
END IF
CALL MPI_ALLREDUCE(INFO,INFO_G,1,MPI_INTEGER,MPI_SUM,COMM,IERR)
```

7.4.3 MPI 通信情報格納配列の分割情報の設定(Xablib_COMM_INFO 用ポインタ)

(実装例)

```
IP_NS_TOT=1
IP_NS_RANKS=IP_NS_TOT+1
IP_NR_RANKS=IP_NS_RANKS+1
IP_NLA=IP_NR_RANKS+1
IP_SEND_RANK=IP_NLA+1
IP_RECV_RANK=IP_SEND_RANK+NS_RANKS
IP_SEND_PTR=IP_RECV_RANK+NR_RANKS
IP_RECV_PTR=IP_SEND_PTR+NS_RANKS+1
IP_SEND_LIST=IP_RECV_PTR+NR_RANKS+1
IP_ICOL_E=IP_SEND_LIST+NS_TOT
IP_KBORDER=IP_ICOL_E+NZL
```

※以降、設定したポインタにより分割された Xablib_COMM_INFO は以下のように表す

```
NS_TOT=Xablib_COMM_INFO(NS_TOT)
NS_RANKS=Xablib_COMM_INFO(IP_NS_RANKS)
NR_RANKS=Xablib_COMM_INFO(IP_NR_RANKS)
NLA=Xablib_COMM_INFO(IP_NLA)
SEND_RANK=Xablib_COMM_INFO(IP_SEND_RANK)
RECV_RANK=Xablib_COMM_INFO(IP_RECV_RANK)
SEND_PTR=Xablib_COMM_INFO(IP_SEND_PTR)
RECV_PTR=Xablib_COMM_INFO(IP_RECV_PTR)
SEND_LIST=Xablib_COMM_INFO(IP_SEND_LIST)
ICOL_E=Xablib_COMM_INFO(IP_ICOL_E)
KBODER=Xablib_COMM_INFO(IP_KBODER)
```

7.4.4 work 領域&MPI 通信用配列の設定

(MARK,ROW_NUM,IORD,RECV_LIST,SSTAT,SREQ,RSTAT,RREQ)

(実装例)

```
ALLOCATE(MARK(N),ROW_NUM(NR_TOT),IORD(NR_TOT),RECV_LIST(NR_TOT),
          SSTAT(MPI_STATUS_SIZE,NR_RANKS),SREQ(NR_RANKS),
          RSTAT(MPI_STATUS_SIZE,NS_RANKS),RREQ(NS_RANKS))
MARK(1:N)=0
IP=DECOMP(MYID+1)-1
DO I=DECOMP(MYID+1),DECOMP(MYID+2)-1
    MARK(I)=I-IP
END DO
```

7.4.5 ICOL_E の作成と要求する行番号のパック(ICOL_E,RECV_LIST)

```

(実装例)
K=1
DO I=1,NL
  DO J=IRP_L(I),IRP_L(I+1)-1
    JP=ICOL_L(J)
    IF (MARK(JP).EQ.0) THEN
      MARK(JP)=1
      ROW_NUM(K)=JP
      K++
    END IF
  END DO
END DO
CALL pOPENATI_QSORT(IORD,NR_TOT,ROW_NUM)
K=NL+1
DO I=1,NR_TOT
  RECV_LIST(I)=ROW_NUM(IORD(I))
  MARK(RECV_LIST(I))=K
  K++
END DO
DO I=1,NL
  DO J=IRP_L(I),IRP_L(I+1)-1
    JP=ICOL_L(J)
    ICOL_E(J)=MARK(JP)
  END DO
END DO

```

7.4.6 要求する行番号のリストを他 rank に送信(RECV_LIST を ISEND)

```

(実装例)
DO I=1,NR_RANKS
  RANK=RECV_RANK(I)
  SIZE=INT(RECV_PTR(I+1)-RECV_PTR(I),4)
  CALL MPI_ISEND(RECV_LIST(RECV_PTR(I)-NL),SIZE,MPI_INTEGER8,
                RANK,RANK+1,COMM,SREQ(I),IERR)
END DO

```

※MPI_ISEND, MPI_IRECV で使用する通信バッファの個数(第 2 引数)を変数型 INTEGER8 とした場合、バッファに正常な値が受信されないため、INTEGER4 にキャストしてから通信を行う。

7.4.7 他 rank から要求行番号の受信(SEND_LIST に IRECV)

```

(実装例)
DO I=1,NS_RANKS
  RANK=SEND_RANK(I)
  SIZE=INT(SEND_PTR(I+1)-SEND_PTR(I),4)
  CALL MPI_Irecv(SEND_LIST(SEND_PTR(I)),SIZE,MPI_INTEGER8,
                RANK,MYID+1,COMM,RREQ(I),IERR)
END DO

IF (NR_RANKS.NE.0) THEN
  RANK=INT(NR_RANKS,4)
  CALL MPI_WAITALL(RANK,SREQ,SSTAT,IERR)
END IF
IF (NS_RANKS.NE.0) THEN
  RANK=INT(NS_RANKS,4)
  CALL MPI_WAITALL(RANK,RREQ,RSTAT,IERR)
END IF

```

※MPI_ISEND, MPI_Irecv で使用する通信バッファの個数(第 2 引数)を変数型 INTEGER8 とした場合、バッファに正常な値が受信されないため、INTEGER4 にキャストしてから通信を行う。MPI_WAITALL で使用する同期の必要な通信回数(第 1 引数)を変数型 INTEGER8 とした場合、INTEGER4 にキャストしてから通信を行う。

7.4.8 受信した行番号をグローバルな番号からローカルなものへ変更する

```

(実装例)
DO I=1,NS_TOT
  SEND_LIST(I)=SEND_LIST(I)-DECOMP(MYID+1)+1
END DO

```

7.4.9 OpenMP を利用したローカル行列の分割情報作成(KBORDER)

```

(実装例)
CALL pOpenATI_DURMV_SetupOMP(NL,NZL,IRP_L,NUMTHREADS,KBORDER)

```

8 pOpenATI_DURMV

8.1 pOpenATI_DURMV の用途

OpenMP と MPI でハイブリッド並列化された SpMV を実行する関数。計算を行う前に MPI 通信情報格納配列を利用し、入力ベクトルの送受信をする。

8.2 引数仕様

CALL pOpenATI_DURMV(NL,NLA,NZL,IRP_L,VAL_L,XM_L,Y_L,IATPARAM,RATPARAM,
MYID,NUMPROCS,COMM,Xabclib_COMM_INFO,LCI,INFO)

変数名	型	I/O	説明
NL	INT*8	I	自 rank の次元数
NLA	INT*8	I	自 rank の行数と他 rank から受信する X_L の要素数の和
NZL	INT*8	I	自 rank の非零要素数
IRP_L(NL+1)	INT*8	I	自 rank の非零要素の各行先頭へのポインタ
VAL_L(NZL)	DOUBLE	I	自 rank の非零要素の値
XM_L(NLA)	DOUBLE	I/O	1~NL に自 rank のベクトルの値を格納して入力 関数内で NL+1~NLA に” pOpenATI_DURMV”で他 rank から 受信した値が格納される
Y_L(NL)	DOUBLE	O	自 rank の解ベクトルの値
IATPARAM(200)	INT	I	INTEGER 型パラメーターリスト
RATPARAM(200)	DOUBLE	I	DOUBLE 型パラメーターリスト
MYID	INT	I	自 rank 番号(0-NUMPROCS-1)
NUMPROCS	INT	I	総 rank 数
COMM	INT	I	MPI コミュニケータ
Xabclib_COMM_INFO(LCI)	INT*8	I	MPI 通信情報格納配列
LCI	INT*8	I	Xabclib_COMM_INFO のサイズ LCI ≥ 7+2*NS_RANKS+2*NR_RANKS+NS_TOT+NZL+NUMTHREADS
INFO	INT	O	エラーコード INFO=0 : 正常値 INFO=-I : i 番目の引数の値が不正 INFO=1100 : MPI エラー

8.3 処理手順

手順

1. work 領域&MPI 通信用配列の設定(SEND_X,SSTAT,SREQ,RSTAT,RREQ)
2. 送信する X をパックし他 rank へ送信(SEND_X を作成し ISEND)
3. 参照する X の受信(XM_L に IRECV)
4. ハイブリッド並列版 SpMV

8.3.1 work 領域&MPI 通信用配列の設定(SEND_X,SSTAT,SREQ,RSTAT,RREQ)

(実装例)

```
ALLOCATE(SEND_X(NS_TOT),
          SSTAT(MPI_STATUS_SIZE,NS_RANKS),SREQ(NS_RANKS),
          RSTAT(MPI_STATUS_SIZE,NR_RANKS),RREQ(NR_RANKS))
```

8.3.2 送信する X をパックし他 rank へ送信(SEND_X を作成し ISEND)

(実装例)

```
DO I=1,NS_RANKS
  DO J=SEND_PTR(I),SEND_PTR(I+1)-1
    JP=SEND_LIST(J)
    SEND_X(J)=XM_L(JP)
  END DO
END DO
DO I=1,NS_RANKS
  RANK=SEND_RANK(I)
  SIZE=INT(SEND_PTR(I+1)-SEND_PTR(I),4)
  CALL
MPI_ISEND(SEND_X(SEND_PTR(I)),SIZE,MPI_DOUBLE_PRECISION,RANK,
          RANK+1,COMM,SREQ(I),IERR)
END DO
```

※MPI_ISEND, MPI_IRECV で使用する通信バッファの個数(第 2 引数)を変数型 INTEGER8 とした場合、バッファに正常な値が受信されないため、INTEGER4 にキャストしてから通信を行う。

8.3.3 参照する X の受信(X_L に IRECV)

```
(実装例)
DO I=1,NR_RANKS
  RANK=RECV_RANK(I)
  SIZE=INT(RECV_PTR(I+1)-RECV_PTR(I),4)
  CALL MPI_IRECV(XM_L(RECV_PTR(I)),SIZE,MPI_DOUBLE_PRECISION,RANK,
                MYID+1,COMM,RREQ(I),IERR)
END DO
IF (NR_RANKS.NE.0) THEN
  RANK=INT(NR_RANKS,4)
  CALL MPI_WAITALL(RANK,RREQ,RSTAT,IERR)
END IF
IF (NS_RANKS.NE.0) THEN
  RANK=(NS_RANKS,4)
  CALL MPI_WAITALL(RANK,SREQ,SSTAT,IERR)
END IF
```

※MPI_ISEND, MPI_Irecv で使用する通信バッファの個数(第 2 引数)を変数型 INTEGER8 とした場合、バッファに正常な値が受信されないため、INTEGER4 にキャストしてから通信を行う。MPI_WAITALL で使用する同期の必要な通信回数(第 1 引数)を変数型 INTEGER8 とした場合、INTEGER4 にキャストしてから通信を行う。

8.3.4 ハイブリッド並列版 SpMV

```
(実装例)
!$omp parallel do private(S,J,I,JP)
DO K=1,NUMTHREADS
  DO I=KBORDER(K),KBORDER(K+1)-1
    S=0.0D0
    DO J=IRP_L(I),IRP_L(I+1)-1
      JP=ICOL_E(J)
      S+=VAL_L(J)*XM_L(JP)
    END DO
    Y_L(I)=S
  END DO
END DO
!$omp end parallel do
```

9 pXablib_BICGSTAB

9.1 pXablib_BICGSTAB の用途

OpenMP と MPI でハイブリッド並列化された BiCGStab 法。大規模な非対称疎行列を係数とする連立一次方程式 $Ax=b$ を反復解法で解く方式を取る。

9.2 pXablib_BICGSTAB アルゴリズム

- (1) $x_0 = \text{initial guess}$
- (2) pOpenATI_DURMV($r_0 = Ax_0$)
- (3) $r_0 = b - r_0$
- (4) $r_0^* = M^{-1}r_0$, solve $M\hat{r}_0 = r_0$, $\rho_0 = \langle r_0^*, \hat{r}_0 \rangle$, $\beta_0^G = 0$, $p_0 = v_0 = 0$
- (5) MPI_Allreduce($\rho_0 \rightarrow \rho_0^G$)
- (6) $k = 0, 1, 2, \dots do$
- (7) $p_k = \hat{r}_k + \beta_k^G p_k$
- (8) pOpenATI_DURMV($\hat{p}_k = Ap_k$)
- (9) solve $Mv_k = \hat{p}_k$
- (10) $\gamma_k = \langle r_0^*, v_k \rangle$
- (11) MPI_Allreduce($\gamma_k \rightarrow \gamma_k^G$)
- (12) $\alpha_k^G = \rho_0^G / \gamma_k^G$
- (13) $s_k = r_k - \alpha_k^G \hat{p}_k$
- (14) $\hat{s}_k = \hat{r}_k - \alpha_k^G v_k$
- (15) check conv.?if " $\|\hat{s}_k\|$ " small enough then $x_{k+1} = x_k + \alpha_k^G p_k$; exit
- (16) pOpenATI_DURMV($t_k = A\hat{s}_k$)
- (17) $td = \langle t_k, s_k \rangle$
- (18) MPI_Allreduce($td \rightarrow td^G$)
- (19) $tmpt = \langle t_k, t_k \rangle$
- (20) MPI_Allreduce($tmpt \rightarrow tmpt^G$)
- (21) $\zeta_k^G = td^G / tmpt^G$
- (22) $x_{k+1} = x_k + \alpha_k^G p_k + \zeta_k^G \hat{s}_k$
- (23) $r_{k+1} = s_k - \zeta_k^G t_k$
- (24) $rnorm_k = \|r_{k+1}\|$
- (25) MPI_Allreduce($rnorm_k \rightarrow rnorm_k^G$)
- (26) check conv.?if " $rnorm_k^G$ " small enough exit
- (27) solve $M\hat{r}_{k+1} = r_{k+1}$
- (28) $\rho_k = \langle r_0^*, \hat{r}_{k+1} \rangle$
- (29) MPI_Allreduce($\rho_k \rightarrow \rho_k^G$)
- (30) $p_{k+1} = p_k - \zeta_k^G v_k$
- (31) $\beta_{k+1}^G = (\rho_k^G / \rho_0^G) * (\alpha_k^G / \zeta_k^G)$
- (32) $\rho_0^G = \rho_k^G$
- (33) enddo

※全 rank で共有している変数、配列は上付き G で表示する

9.3 pXabclib_BICGSTAB を呼び出すまでの流れ

- ① pXabclib_BICGSTAB のパラメーターをセット(pOpenATI_init)
※既に各 rank がローカル行列を保持している場合は⑤へ
- ② 行列情報の作成(N,NZ,IRP(N+1),ICOL(NZ),VAL(NZ),X(N),B(N))
- ③ 分割情報の作成(DECOMP(NUMPROCS+1))(ユーザーが作成)
- ④ ローカルな行列情報の作成(NL,NZL,IRP_L(NL+1),ICOL_L(NZL),VAL_L(NZL),X_L(NL),B_L(NL))(ユーザーが作成)
- ⑤ MPI 通信情報セットアップ用配列の確保(Xabclib_COMM_SETUP(LCS))
LCS=6+4*NUMPROCS
- ⑥ pOpenATI_DURMV_presetup 呼び出し
- ⑦ MPI 通信情報格納配列の確保(Xabclib_COMM_INFO(LCI))
LCI=7+2*NS_RANKS+2*NR_RANKS+NS_TOT+NZL+NUMTHREADS
- ⑧ pOpenATI_DURMV_setup 呼び出し
- ⑨ pXabclib_BICGSTAB 呼び出し
- ⑩ 結果の収集

9.4 pXabclib_BICGSTAB 引数仕様

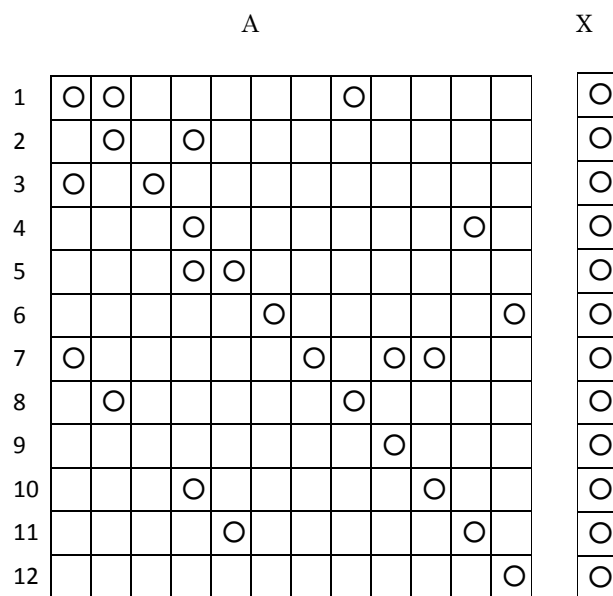
CALL pXabclib_BICGSTAB(NL,NZL,N,NZ,IRP_L,ICOL_L,VAL_L,X_L,B_L,PRECOND,IWPC,
IATPARAM,RATPARAM,MYID,NUMPROCS,COMM,DECOMP,
Xabclib_COMM_INFO,LCI,WORK,LDWORK,INFO)

変数名	型	I/O	説明
NL	INT*8	I	自 rank の次元数
NZL	INT*8	I	自 rank の非零要素数
N	INT*8	I	グローバル行列の次元数
NZ	INT*8	I	グローバル行列の非零要素数
IRP_L(NL+1)	INT*8	I	自 rank の非零要素の各行先頭へのポインタ
ICOL_L(NZL)	INT*8	I	自 rank の非零要素の列番号(グローバルな番号)
VAL_L(NZL)	DOUBLE	I	自 rank の非零要素の値
X_L(NL)	DOUBLE	I/O	自 rank のベクトルの値
B_L(NL)	DOUBLE	I	自 rank の右辺ベクトル
PRECOND(IWPC)	INT*8	I	前処理行列(対角スケーリング)
IWPC	INT*8	I	PRECOND のサイズ(IWPC ≥ NL)
IATPARAM(200)	INT	I/O	INTEGER 型パラメーターリスト
RATPARAM(200)	DOUBLE	I/O	DOUBLE 型パラメーターリスト
MYID	INT	I	自 rank 番号(0-NUMPROCS-1)
NUMPROCS	INT	I	総 rank 数
COMM	INT	I	MPI コミュニケータ
DECOMP(NUMPROCS+1)	INT*8	I	グローバル行列の分割情報。各 rank の先頭行番号(グローバルな番号)

Xabclib_COMM_INFO(LCI)	INT*8	I	MPI 通信情報格納配列
LCI	INT*8	I	Xabclib_COMM_INFO のサイズ LCI ≥ 7+2*NS_RANKS+2*NR_RANKS+NS_TOT+NZL+NUMTHREADS
WORK(LDWORK)	DOUBLE	WORK	作業領域
LDWORK	INT*8	I	WORK のサイズ LDWORK ≥ 8NL+2NLA
INFO	INT	O	エラーコード INFO=0 : 正常値 INFO=-i : i 番目の引数の値が不正 INFO=100 : 前処理行列作成部分での異常検知 INFO=200 : プログラム breakdown INFO=400 : 最大演算時間オーバー INFO=500 : 最大反復回数オーバー INFO=1100 : MPI エラー

付録 行列, ベクトルの分割方式の図

- N : 行列の次元数
- NZ : 行列の非ゼロ数
- IRP(N+1) : 非ゼロ要素の各行先頭へのポインタ
- ICOL(NZ) : 非ゼロ要素の列番号
- X(N) : ベクトルの値



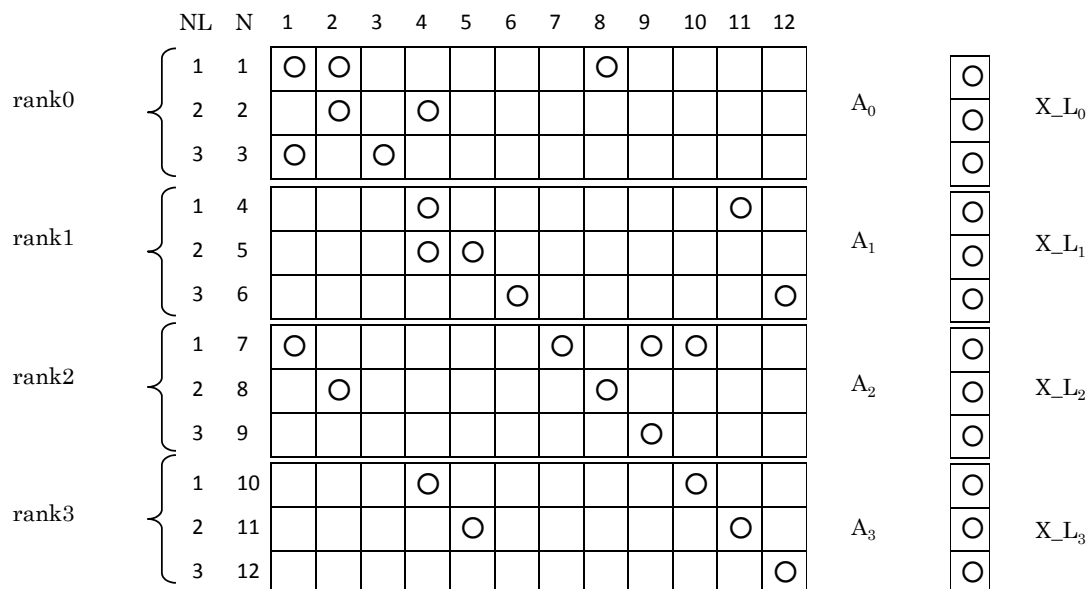
※図中の”○”は非ゼロ要素を表す

N=12、NZ=25

IRP={1,4,6,8,10,12,14,18,20,21,23,25,26}

ICOL={1,2,8 | 2,4 | 1,3 | 4,11 | 4,5 | 6,12 | 1,7,9,10 | 2,8 | 9 | 4,10 | 5,11 | 12}

- NL : 自rankの行列の次元数
- NZL : 自rankの行列の非ゼロ数
- NLA : 自rankの行数と他rankから受信するX_Lの和
- IRP_L(NL+1) : 自rankの非ゼロ要素の各行先頭へのポインタ
- ICOL_L(NZL) : 自rankの非ゼロ要素の列番号(列番号はグローバルな値)
- X_L(NLA) : 1 ~NLに自rankのベクトルの値を格納
- DECOMP(NUMPROCS+1) : 分割情報。各rankの先頭ポインタ

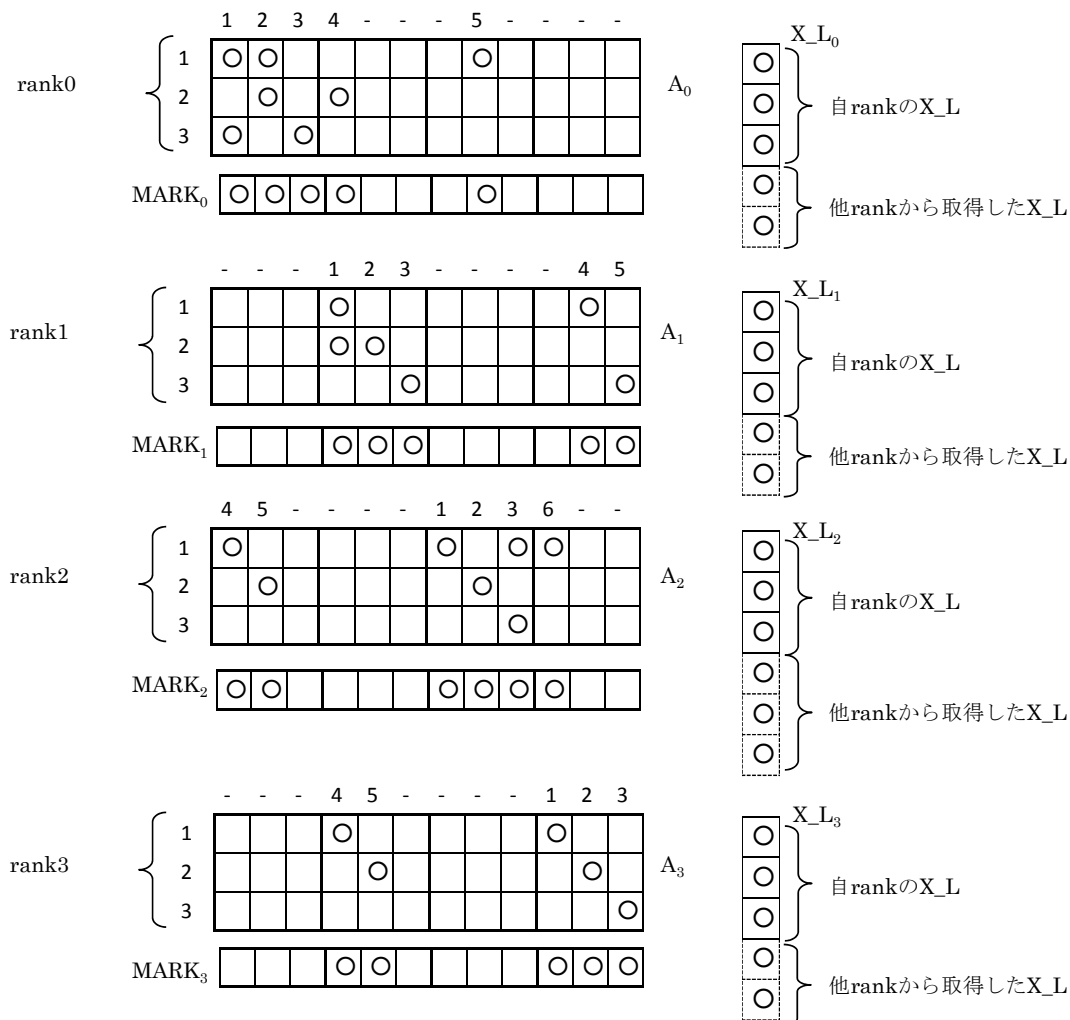


※図中の”○”は非ゼロ要素を表す

```

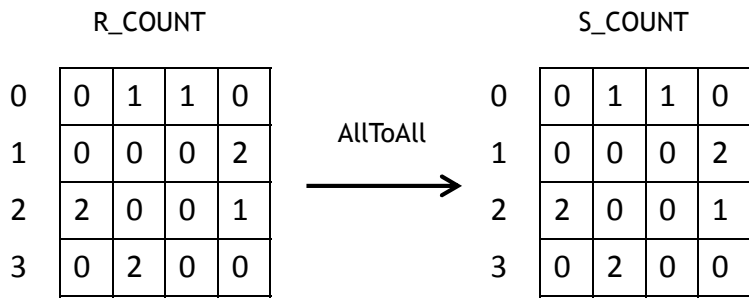
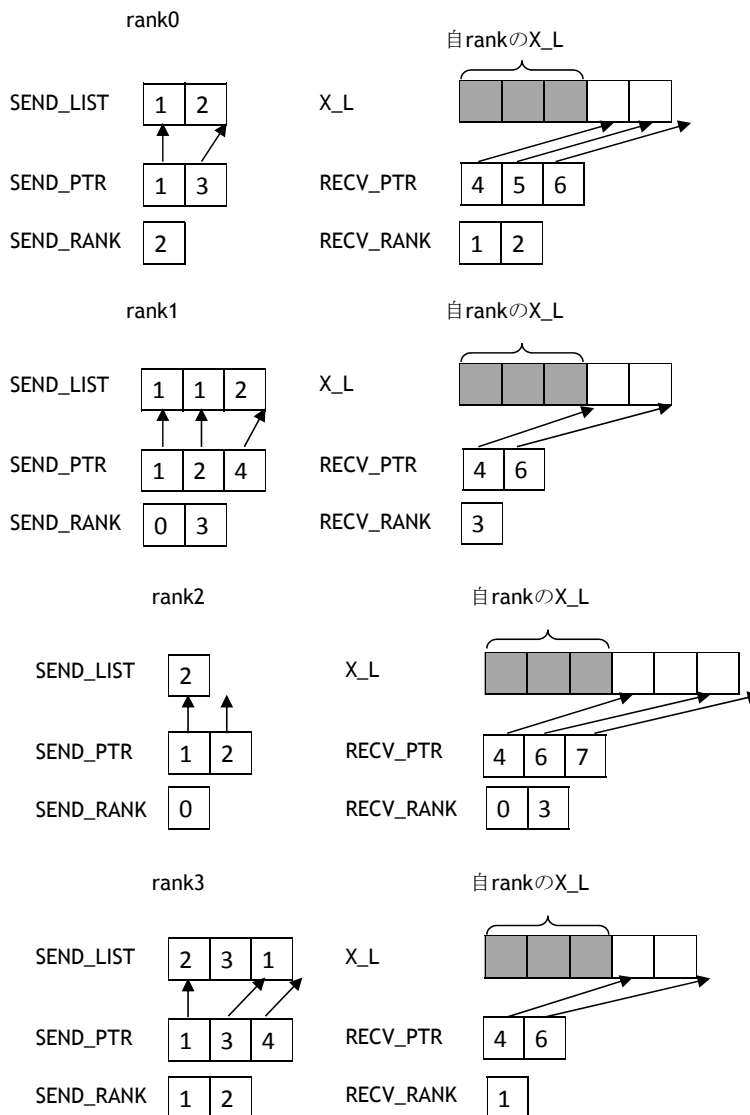
DECOMP={1,4,7,10,13}
NL0=3、NZL0=7
IRP_L0={1,4,6,8}
ICOL_L0={1,2,8 | 2,4 | 1,3}
NL1=3、NZL1=6
IRP_L1={1,3,5,7}
ICOL_L1={4,11 | 4,5 | 6,12}
NL2=3、NZL2=7
IRP_L2={1,5,7,8}
ICOL_L2={1,7,9,10 | 2,8 | 9}
NL3=3、NZL3=5
IRP_L3={1,3,5,6}
ICOL_L3={4,10 | 5,11 | 12}
    
```

ICOL_E(NZL) : ICOL_Lの列番号をX_L用にリナンバリングしたリスト
 MARK(N) : 非ゼロ要素に対応した列にマーク



※図中の“○”は非ゼロ要素を表す

ICOL_L₀={1,2,8 | 2,4 | 1,3}
 MARK₀={1,1,1,1,0,0,1,0,0,0}
 ICOL_E₀={1,2,5 | 2,4 | 1,3}
 ICOL_L₁={4,11 | 4,5 | 6,12}
 MARK₁={0,0,0,1,1,1,0,0,0,1,1}
 ICOL_E₁={1,4 | 1,2 | 3,5}
 ICOL_L₂={1,7,9,10 | 2,8 | 9}
 MARK₂={1,1,0,0,0,0,1,1,1,1,0,0}
 ICOL_E₂={4,1,3,6 | 5,2 | 3}
 ICOL_L₃={4,10 | 5,11 | 12}
 MARK₃={0,0,0,1,1,0,0,0,0,1,1,1}
 ICOL_E₃={4,1 | 5,2 | 3}



IDIAGP_L₀

1	4	7
---	---	---

IDIAGP_L₁

1	4	5
---	---	---

IDIAGP_L₂

2	6	7
---	---	---

IDIAGP_L₃

2	4	5
---	---	---

ROW_NUM₀

4	8
---	---

ROW_NUM₁

11	12
----	----

ROW_NUM₂

1	2	10
---	---	----

ROW_NUM₃

4	5
---	---