RIKEN Center for Computational Science

2024 年 6 月 26 日

有限要素解析のための並列ソルバーに関するスクール 2024

疎行列による Krylov 部分空間法の実装

鈴木 厚 [1]

[1] 理研計算科学研究センター 大規模並列数値計算技術研究チーム
atsushi.suzuki.aj@a.riken.jp

疎行列格納方法：1/3

n : # 行

nnz : # 非零要素

$[A]_{i\,j}$: $(i,\ j)$ 成分にある非零要素の値

- COO (Coordinate) 形式 `MUMPS`

```
struct COOformat {
  int n, nnz;
  int irow[nnz];
  int jcol[nnz];
  double coef[nnz];
};
```

- CSR (Compressed Sparse Row) /
  CRS (Compressed Row Storage) 形式 `Pardiso`

```
struct CSRformat {
  int n, nnz;
  int ptrow[n+1];
  int indcol[nnz];
  double coef[nnz];
}
```

$[A]_{i\,j}$=coef[k]
j=indcol[k], ptrow[i] $\leq k <$ ptrow[$i+1$]

疎行列格納方法：2/3

5×5 の非対称行列の例：$n = 5, nnz = 15$.

1.1	1.2		1.4	
2.1	2.2	2.3		2.5
	3.2	3.3		
4.1			0.0	4.5
	5.2		5.4	5.5

	0	1	2	3	4
0	0	1		2	
1	3	4	5		6
2		7	8		
3	9			10	11
4		12		13	14

i	0			1				2		3			4			5
ptrow[i]	0			3				7		9			12			15
indcol[k]	0	1	3	0	1	2	4	1	2	0	3	4	1	3	4	
coef[k]	1.1	1.2	1.4	2.1	2.2	2.3	2.5	3.2	3.3	4.1	0.0	4.5	5.2	5.4	5.5	

- 値が 0 であっても対角成分を記憶する
- `indcol[]` はそれぞれの行毎に昇順

疎行列格納方法：3/3

5×5 の対称行列の上三角部分の例：$n = 5, nnz = 10$.

						0	1	2	3	4
1.1	1.2		1.4		0	0	1		2	
	2.2	2.3		2.5	1		3	4		5
		3.3			2			6		
			0.0	4.5	3				7	8
				5.5	4					9

i	0			1			2	3		4	5
ptrow[i]	0			3			6	7		9	10
indcol[k]	0	1	3	1	2	4	2	3	4	4	
coef[k]	1.1	1.2	1.4	2.2	2.3	2.5	3.3	0.0	4.5	5.5	

- 値が 0 であっても対角成分を記憶する
- `indcol[]` はそれぞれの行毎に昇順
- 上三角行列の保存形式は `Pardiso` 直接法で採用されている

SpMV：疎行列ベクトル積演算：1/3

A : CSRformat { ptrow, indcol, coef }, $\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^N$
$\vec{y} = A\,\vec{x}$ の計算は次の様に実行される

$$
\begin{aligned}
[A\vec{x}]_i &= \sum_j [A]_{i\,j}[\vec{x}]_j \\
&= \sum_{j \in \{j\,;\,[A]_{i\,j} \neq 0\}} [A]_{i\,j}[\vec{x}]_j \\
&= \sum_{\texttt{ptrow}[i] \leq k \leq \texttt{ptrow}[i+1]} \texttt{coef}[k] \times [\vec{x}]_{\texttt{indcol}[k]}
\end{aligned}
$$

```
for (i = 0; i < n; i++) {
  y[i] = 0.0;
  for (k = ptrow[i]; k < ptrow[i + 1]; k++) {
    int j = indcol[k];
    y[i] += coef[k] * x[j];
  }
}
```

SpMV：疎行列ベクトル積演算：2/3

A：CSRformat { ptrow, indcol, coef }, 対称行列のうち上三角部分を記憶,
$\vec{x}, \vec{y} \in \mathbb{R}^N$
$\vec{y} = A\vec{x}$ の演算を実行するため次を仮定する

- 行列 A の対角成分を記憶する
- i-行目の最初の非零成分は対角である：`indcol[ptrow[i]] == i`

```
for (i = 0; i < n; i++) {
  y[i] = 0.0;
}
for (i = 0; i < n; i++) {
  for (k = ptrow[i] + 1; k < ptrow[i + 1]; k++) {
    int j = indcol[k];
    y[i] += coef[k] * x[j];
    y[j] += coef[k] * x[i];
  }
  int k = ptrow[i];
//    int j = indcol[k] ( == i )
  y[i] += coef[k] * x[i];
}
```

SpMV：疎行列ベクトル積演算：3/3

スカラ α と β に対して CSRformat で格納している一般の非対称行列 A をベクトルに作用させる演算 $y = \alpha A\vec{x} + \beta\vec{y}$

```
void SparseGEMV(struct CSRformat &A,
                const double &alpha, std::vector<double> &x,
                const double &beta, std::vector<double> &y)
{
  int nrow = A.n;
  for (int i = 0; i < nrow; i++) {
    y[i] *= beta;
  }
  double tmp;
  for (int i = 0; i < nrow; i++) {
    tmp = 0.0;
    for (k = ptrow[i]; k < ptrow[i + 1]; k++) {
      int j = indcol[k];
      tmp += coef[k] * x[j];
    }
  }
  y[i] += alpha * tmp;
}
```

内積演算

二つのベクトル：$\vec{x},\ \vec{y} \in \mathbb{R}^N$ に対して

$$(\vec{x}, \vec{y}) = \sum_{1 \le i \le N} [\vec{x}]_i [\vec{y}]_i$$

```
double tmp = 0.0;
for (i = 0; i < n; i++) {
  tmp += x[i] * y[i];
}
```

BLAS レベル 1 サブルーチン ddot

```
double cblas_ddot(const int n,
                  const double *x, const int incx,
                  const double *y, const int incy);

tmp = cblas_ddot(n, &x[0], 1, &y[0], 1);
```

C++ STL std::vector< > クラス

```
#include <vector>
std::vector<double> x(100);  // allocation with size = 100
x.resize(200); // enlarging array with keeping 100 entries
x.clean();     // deallocation
&x[0];         // double pointer to the first entry
x.data();      //
```

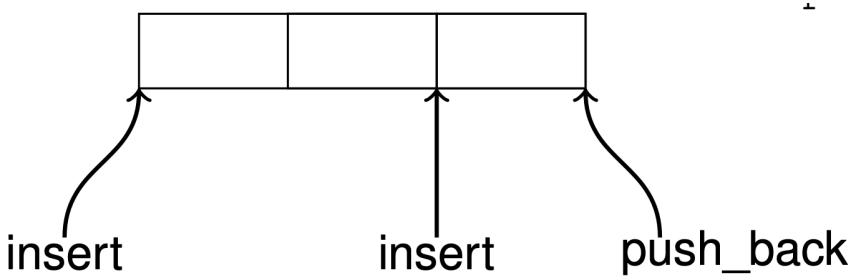
疎行列の格納形式の変換：COO 形式から CSR 形式へ：1/2

5×5 の非対称行列の例：$n = 5, nnz = 15$.

1.1	1.2		1.4	
2.1	2.2	2.3		2.5
	3.2	3.3		
4.1			0.0	4.5
	5.2		5.4	5.5

	pcol				pcoef			
0	0	1	3		1.1	1.2	1.4	
1	0	1	2	4	2.1	2.2	2.3	2.5
2	1	2			3.2	3.3		
3	0	3	4		4.1	0.0	4.5	
4	1	3	4		5.2	5.4	5.5	

列インデックスは i-行毎に `list<int> pcol[i]` に格納



- それぞれの行の配列は `vector<list<int> >` に格納
- 昇順になるようにデータは `std::list` のイテレータを用いる
- 一次元配列データ `int indcol[k]` は `pcol` より複写して作製

リスト構造は動的データの扱いに適するが HPC アプリケーションでは効率的でない

疎行列の格納形式の変換：COO 形式から CSR 形式へ：2/2

- 各行の記憶のため動的なメモリー確保が不可欠

```
std::vector<std::list<int> > pcol(nrow);
std::vector<std::list<double> > pcoef(nrow);
for (int k = 0; k < nnz; k++) {
  int i = Acoo.irow[k], j = Acoo.jcol[k];
  double coef = Acco.coef[k];
  if (pcol[i].empty())
    pcol[i].push_back(j); pcoef[i].push_back(coef);
  else {
    if (pcol[i].back() < j)
      pcol[i].push_back(j); pcoef[i].push_back(coef);
    else {
      std::list<double>::iterator iv = pcoef[i].begin();
      std::list<int>::iterator it = pcol[i].begin();
      for (; it != pcol[i].end(); ++it, ++iv) {
        if ((*it) > j)
          pcol[i].insert(it, j); pcoef[i].insert(iv, coef);
      }  } }
}
Acsr.ptrow[0] = 0;
int k = 0;
for (int i = 0; i < n; i++) {
  ptrow[i + 1] = ptrow[i] + pcol[i].size();
  std::list<double>::iterator iv = pcoef[i].begin();
  std::list<int>::iterator it = pcol[i].begin();
  for (; it != pcol[i].end(); ++it, ++iv, k++) {
    Acsr.pcol[k] = (*it); Acsr.coef[k] = (*iv); } }
```

疎行列の格納形式の変換：CSSR 形式から COO 形式へ

```
int nrow = Acsr.n;
for (int i = 0; i < n; i++) {
  for (int k = Acsr.ptrow[i]; k < Acsr.ptrow[i + 1]; k++) {
    Acoo.irow[k] = i;
    Acoo.jcol[k] = Acsr.indcol[k];
    Acoo.coef[k] = Acsr.coef[k];
  }
}
```

実習：IML++ で C++ で記述された GMRES を実装する：1/2

IML++, https://math.nist.gov/iml++/gmres.h.txt では GMRES は C++ で記述されている
最初の実装は前処理 const Preconditioner &M 無しで Operator, Vector と Matrix クラスを簡単なもので置き換える

- Real は double
- Vector は std::vector<double>
- Operator は struct CSRformat
- Matrix は 一次元配列 std::vector<double> を二つの添え字で参照するものとして

```
std::voctor<double> HH((max_iter + 1) * (max_iter + 1));
#define H(i, j) HH((i) + (j) * (max_iter + 1))
```

残差ベクトルを計算する

```
r = b - A * x;
```

は C++ の演算子で記述されているが, 疎行列の GEMV ルーチンで置き換える

```
std::vector<double> r(b);
SparseGEMV(A, (-1.0), x, 1.0, r);
```

実習：IML++ で C++ で記述された GMRES を実装する：2/2

```
template < class Operator, class Vector, class Preconditioner,
           class Matrix, class Real >
int
GMRES(const Operator &A, Vector &x, const Vector &b,
      const Preconditioner &M, Matrix &H, int &m, int &max_iter,
      Real &tol)
{
  Real resid;
  int i, j = 1, k;
  Vector s(m+1), cs(m+1), sn(m+1), w;

  Real normb = norm(M.solve(b));
  Vector r = M.solve(b - A * x);
```

→ テンプレートの利用を止める

```
int
GMRES(csr_matrix &A, std::vector<double> &x, std::vector<double> &b,
      int &m, int &max_iter,
      double &tol)
{
  double resid;
  int nrow = x.size();
  int i, j = 1, k;
  std::vector<double> s(m+1, 0.0), cs(m+1), sn(m+1), w(nrow);
  std::vector<double> HH((max_iter + 1) * (max_iter + 1));

  double normb = norm(b);
// r = Precond(A, b, x);
```