

Lis ユーザガイド  
バージョン 2.0.4



The Scalable Software Infrastructure Project  
<http://www.ssisc.org/>

Copyright © 2005 The Scalable Software Infrastructure Project, supported by “Development of Software Infrastructure for Large Scale Scientific Simulation” Team, CREST, JST.  
Akira Nishida, Research Institute for Information Technology, Kyushu University, 6-10-1, Hakozaki, Higashi-ku, Fukuoka 812-8581, Japan.  
All rights reserved.

Redistribution and use in source and binary forms, with or without modification, are permitted provided that the following conditions are met:

1. Redistributions of source code must retain the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimer.
2. Redistributions in binary form must reproduce the above copyright notice, this list of conditions and the following disclaimer in the documentation and/or other materials provided with the distribution.
3. Neither the name of the University nor the names of its contributors may be used to endorse or promote products derived from this software without specific prior written permission.

THIS SOFTWARE IS PROVIDED BY THE SCALABLE SOFTWARE INFRASTRUCTURE PROJECT “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 SCALABLE SOFTWARE INFRASTRUCTURE PROJECT 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 OR OTHERWISE) ARISING IN ANY WAY OUT OF THE USE OF THIS SOFTWARE, EVEN IF ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGE.

# 目次

1	はじめに	5
2	導入	6
2.1	システム要件	6
2.2	UNIX 及び互換システムへの導入	6
2.2.1	アーカイブの展開	6
2.2.2	ソースツリーの設定	7
2.2.3	実行ファイルの生成	7
2.2.4	導入	11
2.3	Windows システムへの導入	12
2.4	検証	12
2.4.1	test1	12
2.4.2	test2	13
2.4.3	test2b	13
2.4.4	test3	13
2.4.5	test3b	14
2.4.6	test3c	14
2.4.7	test4	14
2.4.8	test5	14
2.4.9	test6	15
2.4.10	test7	15
2.4.11	etest1	15
2.4.12	getest1	15
2.4.13	etest2	15
2.4.14	etest3	16
2.4.15	etest4	16
2.4.16	etest5	16
2.4.17	etest5b	16
2.4.18	getest5	17
2.4.19	getest5b	17
2.4.20	etest6	17
2.4.21	etest7	17
2.4.22	spmvtest1	17
2.4.23	spmvtest2	18
2.4.24	spmvtest2b	18
2.4.25	spmvtest3	19
2.4.26	spmvtest3b	19
2.4.27	spmvtest4	19
2.4.28	spmvtest5	19
2.5	制限事項	20

<b>3</b>	<b>基本操作</b>	<b>21</b>
3.1	初期化・終了処理	21
3.2	ベクトルの操作	22
3.3	行列の操作	25
3.4	線型方程式の求解	31
3.5	固有値問題の求解	36
3.6	プログラムの作成	40
3.7	前処理とソルバの分離	43
3.8	実行ファイルの生成	46
3.9	実行	47
3.10	プロセス上での自由度について	48
<b>4</b>	<b>4倍精度演算</b>	<b>49</b>
4.1	4倍精度演算の使用	49
<b>5</b>	<b>行列格納形式</b>	<b>51</b>
5.1	Compressed Sparse Row (CSR)	51
5.1.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	51
5.1.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	52
5.1.3	関連する関数	52
5.2	Compressed Sparse Column (CSC)	53
5.2.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	53
5.2.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	54
5.2.3	関連する関数	54
5.3	Modified Compressed Sparse Row (MSR)	55
5.3.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	55
5.3.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	56
5.3.3	関連する関数	56
5.4	Diagonal (DIA)	57
5.4.1	行列の作成 (逐次環境)	57
5.4.2	行列の作成 (マルチスレッド環境)	58
5.4.3	行列の作成 (マルチプロセス環境)	59
5.4.4	関連する関数	59
5.5	Ellpack-Itpack Generalized Diagonal (ELL)	60
5.5.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	60
5.5.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	61
5.5.3	関連する関数	61
5.6	Jagged Diagonal (JAD)	62
5.6.1	行列の作成 (逐次環境)	63
5.6.2	行列の作成 (マルチスレッド環境)	64
5.6.3	行列の作成 (マルチプロセス環境)	65
5.6.4	関連する関数	65
5.7	Block Sparse Row (BSR)	67

5.7.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	67
5.7.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	68
5.7.3	関連する関数	68
5.8	Block Sparse Column (BSC)	69
5.8.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	69
5.8.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	70
5.8.3	関連する関数	70
5.9	Variable Block Row (VBR)	71
5.9.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	72
5.9.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	73
5.9.3	関連する関数	74
5.10	Coordinate (COO)	75
5.10.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	75
5.10.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	76
5.10.3	関連する関数	76
5.11	Dense (DNS)	77
5.11.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	77
5.11.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	78
5.11.3	関連する関数	78
<b>6</b>	<b>関数</b>	<b>79</b>
6.1	ベクトルの操作	80
6.1.1	lis_vector_create	80
6.1.2	lis_vector_destroy	80
6.1.3	lis_vector_duplicate	81
6.1.4	lis_vector_set_size	82
6.1.5	lis_vector_get_size	83
6.1.6	lis_vector_get_range	83
6.1.7	lis_vector_set_value	84
6.1.8	lis_vector_get_value	85
6.1.9	lis_vector_set_values	86
6.1.10	lis_vector_get_values	87
6.1.11	lis_vector_scatter	88
6.1.12	lis_vector_gather	88
6.1.13	lis_vector_is_null	89
6.2	行列の操作	90
6.2.1	lis_matrix_create	90
6.2.2	lis_matrix_destroy	90
6.2.3	lis_matrix_duplicate	91
6.2.4	lis_matrix_malloc	91
6.2.5	lis_matrix_set_value	92
6.2.6	lis_matrix_assemble	93
6.2.7	lis_matrix_set_size	93

6.2.8	lis_matrix_get_size	94
6.2.9	lis_matrix_get_range	94
6.2.10	lis_matrix_get_nnz	95
6.2.11	lis_matrix_set_type	96
6.2.12	lis_matrix_get_type	97
6.2.13	lis_matrix_set_csr	98
6.2.14	lis_matrix_set_csc	98
6.2.15	lis_matrix_set_msr	99
6.2.16	lis_matrix_set_dia	100
6.2.17	lis_matrix_set_ell	100
6.2.18	lis_matrix_set_jad	101
6.2.19	lis_matrix_set_bsr	102
6.2.20	lis_matrix_set_bsc	103
6.2.21	lis_matrix_set_vbr	104
6.2.22	lis_matrix_set_coo	105
6.2.23	lis_matrix_set_dns	105
6.2.24	lis_matrix_unset	106
6.3	ベクトルと行列を用いた計算	107
6.3.1	lis_vector_swap	107
6.3.2	lis_vector_copy	107
6.3.3	lis_vector_axpy	108
6.3.4	lis_vector_xpay	108
6.3.5	lis_vector_axpyz	109
6.3.6	lis_vector_scale	109
6.3.7	lis_vector_pmul	110
6.3.8	lis_vector_pdiv	110
6.3.9	lis_vector_set_all	111
6.3.10	lis_vector_abs	111
6.3.11	lis_vector_reciprocal	112
6.3.12	lis_vector_conjugate	112
6.3.13	lis_vector_shift	113
6.3.14	lis_vector_dot	114
6.3.15	lis_vector_nhdot	114
6.3.16	lis_vector_nrm1	115
6.3.17	lis_vector_nrm2	115
6.3.18	lis_vector_nrmi	116
6.3.19	lis_vector_sum	116
6.3.20	lis_matrix_set_blocksize	117
6.3.21	lis_matrix_convert	118
6.3.22	lis_matrix_copy	119
6.3.23	lis_matrix_axpy	119
6.3.24	lis_matrix_xpay	120

6.3.25	lis_matrix_axpyz	120
6.3.26	lis_matrix_scale	121
6.3.27	lis_matrix_get_diagonal	121
6.3.28	lis_matrix_shift_diagonal	122
6.3.29	lis_matrix_shift_matrix	122
6.3.30	lis_matvec	123
6.3.31	lis_matvech	123
6.4	線型方程式の求解	124
6.4.1	lis_solver_create	124
6.4.2	lis_solver_destroy	124
6.4.3	lis_precon_create	125
6.4.4	lis_precon_destroy	125
6.4.5	lis_solver_set_option	126
6.4.6	lis_solver_set_optionC	130
6.4.7	lis_solve	130
6.4.8	lis_solve_kernel	132
6.4.9	lis_solver_get_status	133
6.4.10	lis_solver_get_iter	133
6.4.11	lis_solver_get_iterex	134
6.4.12	lis_solver_get_time	134
6.4.13	lis_solver_get_timeex	135
6.4.14	lis_solver_get_residualnorm	135
6.4.15	lis_solver_get_rhistory	136
6.4.16	lis_solver_get_solver	137
6.4.17	lis_solver_get_precon	137
6.4.18	lis_solver_get_solvername	138
6.4.19	lis_solver_get_preconname	138
6.5	固有値問題の求解	139
6.5.1	lis_esolver_create	139
6.5.2	lis_esolver_destroy	139
6.5.3	lis_esolver_set_option	140
6.5.4	lis_esolver_set_optionC	143
6.5.5	lis_esolve	144
6.5.6	lis_gesolve	145
6.5.7	lis_esolver_get_status	146
6.5.8	lis_esolver_get_iter	146
6.5.9	lis_esolver_get_iterex	147
6.5.10	lis_esolver_get_time	147
6.5.11	lis_esolver_get_timeex	148
6.5.12	lis_esolver_get_residualnorm	148
6.5.13	lis_esolver_get_rhistory	149
6.5.14	lis_esolver_get_evalues	149

6.5.15	lis_esolver_get_evector	150
6.5.16	lis_esolver_get_residualnorms	150
6.5.17	lis_esolver_get_iters	151
6.5.18	lis_esolver_get_esolver	151
6.5.19	lis_esolver_get_esolvername	152
6.6	配列を用いた計算	153
6.6.1	lis_array_swap	153
6.6.2	lis_array_copy	153
6.6.3	lis_array_axpy	154
6.6.4	lis_array_xpay	154
6.6.5	lis_array_axpyz	155
6.6.6	lis_array_scale	155
6.6.7	lis_array_pmul	156
6.6.8	lis_array_pdiv	156
6.6.9	lis_array_set_all	157
6.6.10	lis_array_abs	157
6.6.11	lis_array_reciprocal	158
6.6.12	lis_array_conjugate	158
6.6.13	lis_array_shift	159
6.6.14	lis_array_dot	159
6.6.15	lis_array_nhdot	160
6.6.16	lis_array_nrm1	160
6.6.17	lis_array_nrm2	161
6.6.18	lis_array_nrmi	161
6.6.19	lis_array_sum	162
6.6.20	lis_array_matvec	163
6.6.21	lis_array_matvech	164
6.6.22	lis_array_matvec_ns	165
6.6.23	lis_array_matmat	166
6.6.24	lis_array_matmat_ns	167
6.6.25	lis_array_ge	168
6.6.26	lis_array_solve	168
6.6.27	lis_array_cgs	169
6.6.28	lis_array_mgs	169
6.6.29	lis_array_qr	170
6.7	ファイルの操作	171
6.7.1	lis_input	171
6.7.2	lis_input_vector	172
6.7.3	lis_input_matrix	173
6.7.4	lis_output	174
6.7.5	lis_output_vector	175
6.7.6	lis_output_matrix	176



6.8	その他 . . . . .	177
6.8.1	lis_initialize . . . . .	177
6.8.2	lis_finalize . . . . .	177
6.8.3	lis_wtime . . . . .	178
6.8.4	CHKERR . . . . .	178
6.8.5	lis_printf . . . . .	179
	<b>参考文献</b>	<b>180</b>
<b>A</b>	<b>ファイル形式</b>	<b>186</b>
A.1	拡張 Matrix Market 形式 . . . . .	186
A.2	Harwell-Boeing 形式 . . . . .	187
A.3	ベクトル用拡張 Matrix Market 形式 . . . . .	188
A.4	ベクトル用 PLAIN 形式 . . . . .	188

## バージョン 1.0 からの変更点

1. double-double 型 4 倍精度演算に対応.
2. Fortran コンパイラに対応.
3. Autotools に対応.
4. (a) ソルバの構造を変更.  
(b) 関数 `lis_matrix_create()`, `lis_vector_create()` の引数を変更.  
(c) コマンドラインオプションの記法を変更.

## バージョン 1.1 からの変更点

1. 標準固有値問題に対応.
2. 64 ビット整数型に対応.
3. (a) 関数 `lis_output_residual_history()`, `lis_get_residual_history()` の名称をそれぞれ `lis_solver_output_rhistory()`, `lis_solver_get_rhistory()` に変更.  
(b) Fortran インタフェース `lis_vector_set_value()`, `lis_vector_get_value()` の配列起点を 1 に変更.  
(c) Fortran インタフェース `lis_vector_set_size()` の配列起点を 1 に変更.  
(d) 演算精度に関するオプションの名称を `-precision` から `-f` に変更.
4. 関数 `lis_solve_kernel()` の仕様を `lis_solve_execute()` で計算された残差を返すよう変更.
5. 整数型の仕様を変更.
  - (a) C プログラムにおける整数型を `LIS_INT` に変更. `LIS_INT` の既定値は `int`. プリプロセッサマクロ `_LONGLONG` が定義された場合には, `long long int` に置き換えられる.
  - (b) Fortran プログラムにおける整数型を `LIS_INTEGER` に変更. `LIS_INTEGER` の既定値は `integer`. プリプロセッサマクロ `LONGLONG` が定義された場合には, `integer*8` に置き換えられる.
6. 行列格納形式 CRS (Compressed Row Storage), CCS (Compressed Column Storage) の名称をそれぞれ CSR (Compressed Sparse Row), CSC (Compressed Sparse Column) に変更.
7. 関数 `lis_get_solvername()`, `lis_get_preconname()`, `lis_get_esolvername()` の名称をそれぞれ `lis_solver_get_solvername()`, `lis_solver_get_preconname()`, `lis_esolver_get_esolvername()` に変更.

## バージョン 1.2 からの変更点

1. nmake に対応.
2. ファイル `lis_config_win32.h` の名称を `lis_config_win.h` に変更.
3. 行列格納形式 JDS (Jagged Diagonal Storage) の名称を JAD (Jagged Diagonal) に変更.
4. 関数 `lis_fscan_double()`, `lis_bswap_double()` の名称をそれぞれ `lis_fscan_scalar()`, `lis_bswap_scalar()` に変更.

## バージョン 1.3 からの変更点

1. long double 型 4 倍精度演算に対応.
2. Fortran でのポインタ操作に対応.
3. 構造体 LIS\_SOLVER, LIS\_ESOLVER のメンバ `residual` の名称を `rhistory` に変更.
4. 構造体 LIS\_SOLVER, LIS\_ESOLVER のメンバ `iters`, `iters2` の名称をそれぞれ `iter`, `iter2` に変更.
5. 関数 `lis_solver_get_iters()`, `lis_solver_get_itersex()`, `lis_esolver_get_iters()`, `lis_esolver_get_itersex()` の名称をそれぞれ `lis_solver_get_iter()`, `lis_solver_get_iterex()`, `lis_esolver_get_iter()`, `lis_esolver_get_iterex()` に変更.
6. 構造体 LIS\_SOLVER, LIS\_ESOLVER のメンバ `*times` の名称をそれぞれ `*time` に変更.
7. 構造体 LIS\_VECTOR にメンバ `intvalue` を追加.
8. 関数 `lis_output_vector*`(`lis_output_mm_vec()`) の仕様を整数値を格納できるよう変更.
9. 関数 `lis_matrix_scaling*`(`lis_matrix_scale*`) に変更.
10. 関数 `lis_array_dot2()`, `lis_array_invGauss()` の名称をそれぞれ `lis_array_dot()`, `lis_array_ge()` に変更.

## バージョン 1.4 からの変更点

1. 配列操作に対応.
2. 前処理とソルバの分離に対応.
3. 関数 `lis_array_qr()` の仕様を QR 法の反復回数及び誤差を返すよう変更.
4. 関数 `lis_array_matvec2()`, `lis_array_matmat2()` の名称をそれぞれ `lis_array_matvec_ns()`, `lis_array_matmat_ns()` に変更.
5. プリプロセッサマクロ `_LONGLONG`, `LONGLONG` の名称をそれぞれ `_LONG_LONG`, `LONG_LONG` に変更.

## バージョン 1.5 からの変更点

1. 複素数演算に対応.

## バージョン 1.6 からの変更点

1. 一般化固有値問題に対応.
2. GCC libquadmath に対応.
3. 固有値解法のシフト量の符号を慣例に合わせて変更.
4. `lis_matrix_shift_diagonal()`, `lis_vector_shift()`, `lis_array_shift()` のシフト量の符号をそれぞれ変更.

## バージョン 1.7 からの変更点

1. マルチステップ線型方程式解法に対応.
2. オプション `-ssor_w` 及び `-hybrid_w` の名称を `-ssor_omega` 及び `-hybrid_omega` にそれぞれ変更.

## バージョン 1.8 からの変更点

1. 線型方程式解法を複素演算向けに一般化.
2. 非対称固有値問題に対応.
3. エルミート内積の定義  $(x, y) = y^H x$  を  $(x, y) = x^H y$  に変更.
4.  $A^T$  に関する関数 `lis_lis_matvect*()`, `lis_lis_array_matvect*()`, `lis_matrix_solvect*()`, `lis_psolvect*()` の名称と定義を,  $A^H$  に関する `lis_lis_matvech*()`, `lis_lis_array_matvech*()`, `lis_matrix_solveh*()`, `lis_psolveh*()` にそれぞれ変更.
5. 関数 `lis_matrix_shift_general()` の名称を `lis_matrix_shift_matrix()` に変更.

# 1 はじめに

Lis (Library of Iterative Solvers for linear systems, 発音は [lis]) は, 偏微分方程式の数値計算に現れる疎行列を係数とする線型方程式

$$Ax = b$$

及び固有値問題

$$Ax = \lambda Bx$$

を解くための並列反復法ソフトウェアライブラリである [1]. 対応する線型方程式解法, 固有値解法の一覧を表 1-2, 前処理を表 3 に示す. また行列格納形式の一覧を表 4 に示す.

表 1: 線型方程式解法

CG[2, 3]	CR[2]
BiCG[4, 5, 6]	BiCR[7]
CGS[8]	CRS[9]
BiCGSTAB[10]	BiCRSTAB[9]
GPBiCG[11]	GPBiCR[9]
BiCGSafe[12]	BiCRSafe[13]
BiCGSTAB(1)[14]	TFQMR[15]
Jacobi[16]	Orthomin(m)[17]
Gauss-Seidel[18, 19]	GMRES(m)[20]
SOR[21, 22]	FGMRES(m)[23]
IDR(s)[24]	MINRES[25]
COCG[26]	COCR[27]

表 2: 固有値解法

Power[28]
Inverse[29]
Rayleigh Quotient[30]
CG[31]
CR[32]
Subspace[34]
Lanczos[35]
Arnoldi[36]

表 3: 前処理

Jacobi[37]
SSOR[37]
ILU(k)[38, 39]
ILUT[40, 41]
Crout ILU[41, 42]
I+S[43]
SA-AMG[44]
Hybrid[45]
SAINV[46]
Additive Schwarz[47, 48]
ユーザ定義

表 4: 行列格納形式

Compressed Sparse Row	(CSR)
Compressed Sparse Column	(CSC)
Modified Compressed Sparse Row	(MSR)
Diagonal	(DIA)
Ellpack-Itpack Generalized Diagonal	(ELL)
Jagged Diagonal	(JAD)
Block Sparse Row	(BSR)
Block Sparse Column	(BSC)
Variable Block Row	(VBR)
Coordinate	(COO)
Dense	(DNS)

## 2 導入

本節では、導入、検証の手順について述べる。

### 2.1 システム要件

Lis の導入には C コンパイラが必要である。また、Fortran インタフェースを使用する場合は Fortran コンパイラ、AMG 前処理ルーチンを使用する場合は Fortran 90 コンパイラが必要である。並列計算環境では、OpenMP ライブラリ [90] または MPI-1 ライブラリ [84] を使用する [49, 50]。データの入出力には、Harwell-Boeing 形式 [76], Matrix Market 形式 [80] が利用可能である。表 5 に主な動作確認環境を示す (表 7 も参照のこと)。

表 5: 主な動作確認環境

C コンパイラ (必須)	OS
Intel C/C++ Compiler 7.0, 8.0, 9.1, 10.1, 11.1, 12.1, 14.0, 16.0, 17.0, 18.0	Linux Windows
IBM XL C/C++ V7.0, 9.0	AIX Linux
Sun WorkShop 6, Sun ONE Studio 7, Sun Studio 11, 12	Solaris
PGI C++ 6.0, 7.1, 10.5, 16.10	Linux
gcc 3.3, 4.4, 5.4, 6.4	Linux Mac OS X Windows
Microsoft Visual C++ 2008, 2010, 2012, 2013, 2015, 2017	Windows
Fortran コンパイラ (オプション)	OS
Intel Fortran Compiler 8.1, 9.1, 10.1, 11.1, 12.1, 14.0, 16.0, 17.0, 18.0	Linux Windows
IBM XL Fortran V9.1, 11.1	AIX Linux
Sun WorkShop 6, Sun ONE Studio 7, Sun Studio 11, 12	Solaris
PGI Fortran 6.0, 7.1, 10.5, 16.10	Linux
g77 3.3 gfortran 4.4, 5.4, 6.4	Linux Mac OS X Windows

### 2.2 UNIX 及び互換システムへの導入

#### 2.2.1 アーカイブの展開

次のコマンドを入力し、アーカイブを展開する。(\$VERSION) はバージョンを示す。

```
> unzip lis-($VERSION).zip
```

これにより、ディレクトリ lis-(\$VERSION) に図 1 に示すサブディレクトリが作成される。

```

lis-($VERSION)
+ config
| 設定ファイル
+ doc
| 説明書
+ graphics
| 描画用サンプルファイル
+ include
| ヘッダファイル
+ src
| ソースファイル
+ test
| 検証プログラム
+ win
  Windows システム用設定ファイル

```

図 1: lis-(\$VERSION).zip のファイル構成

### 2.2.2 ソースツリーの設定

ディレクトリ lis-(\$VERSION) において次のコマンドを実行し、ソースツリーを設定する。

- 既定の設定を使用する場合： `> ./configure`
- 導入先を指定する場合： `> ./configure --prefix=<install-dir>`

表 6 に主な設定オプションを示す。また、表 7 に TARGET として指定できる主な計算機環境を示す。

### 2.2.3 実行ファイルの生成

ディレクトリ lis-(\$VERSION) において次のコマンドを入力し、実行ファイルを生成する。

```
> make
```

実行ファイルが正常に生成されたかどうかを確認するには、ディレクトリ lis-(\$VERSION) において次のコマンドを入力し、ディレクトリ lis-(\$VERSION)/test に生成された実行ファイルを用いて検証を行う。

```
> make check
```

このコマンドでは、Matrix Market 形式のファイル test/testmat.mtx から行列、ベクトルデータを読み込み、BiCG 法を用いて線型方程式  $Ax = b$  の解を求める。以下に SGI Altix 3700 上での実行結果を示す。なおオプション `--enable-omp` と `--enable-mpi` は組み合わせて使用することができる。

表 6: 主な設定オプション (一覧は `./configure --help` を参照)

<code>--enable-omp</code>	OpenMP ライブラリを使用
<code>--enable-mpi</code>	MPI ライブラリを使用
<code>--enable-fortran</code>	FORTRAN 77 互換インタフェースを使用
<code>--enable-f90</code>	Fortran 90 互換インタフェースを使用
<code>--enable-saamg</code>	SA-AMG 前処理を使用
<code>--enable-quad</code>	double-double 型 4 倍精度演算を使用
<code>--enable-longdouble</code>	long double 型 4 倍精度演算を使用
<code>--enable-longlong</code>	64 ビット整数型を使用
<code>--enable-complex</code>	スカラ型として複素数型を使用
<code>--enable-debug</code>	デバッグモードを使用
<code>--enable-shared</code>	動的リンクを使用
<code>--enable-gprof</code>	プロファイラを使用
<code>--prefix=&lt;install-dir&gt;</code>	導入先を指定
<code>TARGET=&lt;target&gt;</code>	計算機環境を指定
<code>CC=&lt;c_compiler&gt;</code>	C コンパイラを指定
<code>CFLAGS=&lt;c_flags&gt;</code>	C コンパイラオプションを指定
<code>F77=&lt;f77_compiler&gt;</code>	FORTRAN 77 コンパイラを指定
<code>F77FLAGS=&lt;f77_flags&gt;</code>	FORTRAN 77 コンパイラオプションを指定
<code>FC=&lt;f90_compiler&gt;</code>	Fortran 90 コンパイラを指定
<code>FCFLAGS=&lt;f90_flags&gt;</code>	Fortran 90 コンパイラオプションを指定
<code>LDFLAGS=&lt;ld_flags&gt;</code>	リンクオプションを指定



表 7: TARGET の例 (詳細は `lis-($VERSION)/configure.ac` を参照)

<target>	等価なオプション
cray_xt3_cross	<pre>./configure CC=cc FC=ftn CFLAGS="-O3 -B -fastsse -tp k8-64" FCFLAGS="-O3 -fastsse -tp k8-64 -Mpreprocess" FCLDFLAGS="-Mnomain" ac_cv_sizeof_void_p=8 cross_compiling=yes ax_f77_mangling="lower case, no underscore, extra underscore"</pre>
fujitsu_fx10_cross	<pre>./configure CC=fccpx FC=frtpx CFLAGS="-Kfast,ocl,preex" FCFLAGS="-Kfast,ocl,preex -Cpp -fs" FCLDFLAGS="-mlcmain=main" ac_cv_sizeof_void_p=8 cross_compiling=yes ax_f77_mangling="lower case, underscore, no extra underscore"</pre>
hitachi_sr16k	<pre>./configure CC=cc FC=f90 CFLAGS="-O3 -noparallel" FCFLAGS="-O3s -noparallel" FCLDFLAGS="-lf90s" ac_cv_sizeof_void_p=8 ax_f77_mangling="lower case, underscore, no extra underscore"</pre>
ibm_bg1_cross	<pre>./configure CC=blrts_xlc FC=blrts_xlf90 CFLAGS="-O3 -qarch=440d -qtune=440 -qstrict" FCFLAGS="-O3 -qarch=440d -qtune=440 -qsuffix=cpp=F90" ac_cv_sizeof_void_p=4 cross_compiling=yes ax_f77_mangling="lower case, no underscore, no extra underscore"</pre>
intel_mic_cross	<pre>./configure CC=icc F77=ifort FC=ifort MPICC=mpiicc MPIF77=mpiifort MPIFC=mpiifort CFLAGS="-mmic" FFLAGS="-mmic" FCFLAGS="-mmic" LDFLAGS="-mmic" FCLDFLAGS="-mmic" cross_compiling=yes host=x86_64-pc-linux-gnu host_alias=x86_64-linux-gnu host_cpu=x86_64 host_os=linux-gnu host_vendor=pc target=k10m-mpss-linux-gnu target_alias=k10m-mpss-linux target_cpu=k10m target_os=linux-gnu target_vendor=mpss</pre>
nec_sx9_cross	<pre>./configure CC=sxmpic++ FC=sxmpif90 AR=sxar RANLIB=true ac_cv_sizeof_void_p=8 ax_vector_machine=yes cross_compiling=yes ax_f77_mangling="lower case, no underscore, extra underscore"</pre>

既定

```
matrix size = 100 x 100 (460 nonzero entries)

initial vector x      : all components set to 0
precision             : double
linear solver         : BiCG
preconditioner        : none
convergence condition : ||b-Ax||_2 <= 1.0e-12 * ||b-Ax_0||_2
matrix storage format : CSR
linear solver status  : normal end

BiCG: number of iterations = 15 (double = 15, quad = 0)
BiCG: elapsed time         = 5.178690e-03 sec.
BiCG: preconditioner      = 1.277685e-03 sec.
BiCG: matrix creation     = 1.254797e-03 sec.
BiCG: linear solver       = 3.901005e-03 sec.
BiCG: relative residual   = 6.327297e-15
```

--enable-omp

```
max number of threads = 32
number of threads = 2
matrix size = 100 x 100 (460 nonzero entries)

initial vector x      : all components set to 0
precision             : double
linear solver         : BiCG
preconditioner        : none
convergence condition : ||b-Ax||_2 <= 1.0e-12 * ||b-Ax_0||_2
matrix storage format : CSR
linear solver status  : normal end

BiCG: number of iterations = 15 (double = 15, quad = 0)
BiCG: elapsed time         = 8.960009e-03 sec.
BiCG: preconditioner      = 2.297878e-03 sec.
BiCG: matrix creation     = 2.072096e-03 sec.
BiCG: linear solver       = 6.662130e-03 sec.
BiCG: relative residual   = 6.221213e-15
```

```

--enable-mpi
number of processes = 2
matrix size = 100 x 100 (460 nonzero entries)

initial vector x      : all components set to 0
precision             : double
linear solver         : BiCG
preconditioner        : none
convergence condition : ||b-Ax||_2 <= 1.0e-12 * ||b-Ax_0||_2
matrix storage format : CSR
linear solver status  : normal end

BiCG: number of iterations = 15 (double = 15, quad = 0)
BiCG: elapsed time         = 2.911400e-03 sec.
BiCG: preconditioner      = 1.560780e-04 sec.
BiCG: matrix creation     = 1.459997e-04 sec.
BiCG: linear solver       = 2.755322e-03 sec.
BiCG: relative residual   = 6.221213e-15

```

#### 2.2.4 導入

ディレクトリ `lis-($VERSION)` において次のコマンドを入力し、導入先のディレクトリにファイルを複製する。

```
> make install
```

これにより、ディレクトリ (`$INSTALLDIR`) に以下のファイルが複製される。

```

($INSTALLDIR)
+bin
| +lsolve esolve esolver gesolve gesolver hpcg_kernel hpcg_spmvtest spmvtest*
+include
| +lis_config.h lis.h lisf.h
+lib
| +liblis.a
+share
  +doc/lis examples/lis man

```

`lis_config.h` はライブラリを生成する際に、また `lis.h` は C, `lisf.h` は Fortran でライブラリを使用する際に必要なヘッダファイルである。 `liblis.a` は生成されたライブラリである。ライブラリが正常に導入されたかどうかを確認するには、ディレクトリ `lis-($VERSION)` において次のコマンドを入力し、ディレクトリ `examples/lis` に生成された実行ファイルを用いて検証を行う。

```
> make installcheck
```

`examples/lis` 下の `test1`, `etest5`, `etest5b`, `getest5`, `getest5b`, `test3b`, `spmvtest3b` は, `lsolve`,

esolve, esolver, gesolve, gesolver, hpcg\_kernel, hpcg\_spmvtest の別名で (\$INSTALLDIR)/bin に複製される. examples/lis/spmvtest\*も, それぞれ (\$INSTALLDIR)/bin に複製される.

(\$INSTALLDIR) に複製されたファイルを削除するには, 次のコマンドを入力する.

```
> make uninstall
```

lis-(\$VERSION) に生成されたライブラリ, 及び実行ファイルを削除するには, 次のコマンドを入力する.

```
> make clean
```

生成された設定ファイルを合わせて削除するには, 次のコマンドを入力する.

```
> make distclean
```

## 2.3 Windows システムへの導入

適当なツールを用いてアーカイブを展開した後, Microsoft Build Engine を使用する場合は, ディレクトリ lis-(\$VERSION)\win において次のコマンドを入力し, 設定ファイル Makefile を生成する (詳細は configure.bat --help を参照).

```
> configure.bat
```

Makefile の既定値は Makefile.in で定義される. 実行ファイルを生成するには, lis-(\$VERSION)\win において次のコマンドを入力する.

```
> nmake
```

実行ファイルが正常に生成されたかどうかを確認するには, 次のコマンドを入力し, 生成された実行ファイルを用いて検証を行う.

```
> nmake check
```

生成されたライブラリ, 実行ファイル, ヘッダファイル, 及び PDF 文書は, 以下のコマンドにより (\$INSTALLDIR)\lib, (\$INSTALLDIR)\bin, (\$INSTALLDIR)\include, 及び (\$INSTALLDIR)\doc にそれぞれ格納される.

```
> nmake install
```

(\$INSTALLDIR) に複製されたファイルを削除するには, 次のコマンドを入力する.

```
> nmake uninstall
```

(\$INSTALLDIR)\win に生成されたライブラリ, 及び実行ファイルを削除するには, 次のコマンドを入力する.

```
> nmake clean
```

生成された設定ファイルを合わせて削除するには, 次のコマンドを入力する.

```
> nmake distclean
```

UNIX 互換環境を使用する場合は前節を参照のこと.

## 2.4 検証

検証プログラムは lis-(\$VERSION)/test に格納される.

### 2.4.1 test1

ディレクトリ lis-(\$VERSION)/test において

```
> test1 matrix_filename rhs_setting solution_filename rhistory_filename [options]
```

と入力すると, `matrix_filename` から行列データを読み込み, 線型方程式  $Ax = b$  を `options` で指定された解法で解く. また, 解を拡張 Matrix Market 形式で `solution_filename` に, 残差履歴を PLAIN 形式で `rhistory_filename` に書き出す (付録 A を参照). 入力可能な行列データ形式は拡張 Matrix Market 形式, Harwell-Boeing 形式のいずれかである. `rhs_setting` には

0	行列データファイルに含まれる右辺ベクトルを用いる
1	$b = (1, \dots, 1)^T$ を用いる
2	$b = A \times (1, \dots, 1)^T$ を用いる
<code>rhs_filename</code>	右辺ベクトルのファイル名

のいずれかを指定できる. `rhs_filename` は PLAIN 形式, Matrix Market 形式に対応する. `test1f.F` は `test1.c` の Fortran 版である.

#### 2.4.2 test2

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> test2 m n matrix_type solution_filename rhistory_filename [options]
```

と入力すると, 2次元 Laplace 作用素を 5点中心差分により離散化して得られる次数  $mn$  の行列  $A$  を係数とする線型方程式  $Ax = b$  を, `matrix_type` で指定された行列格納形式, `options` で指定された解法で解く. また, 解を拡張 Matrix Market 形式で `solution_filename` に, 残差履歴を PLAIN 形式で `rhistory_filename` に書き出す. 右辺ベクトル  $b$  は解ベクトル  $x$  の値がすべて 1 となるよう設定される.  $m, n$  は各次元の格子点数である. `test2f.F90` は `test2.c` の Fortran 90 版である.

#### 2.4.3 test2b

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> test2b m n matrix_type solution_filename rhistory_filename [options]
```

と入力すると, 2次元 Laplace 作用素を 9点中心差分により離散化して得られる次数  $mn$  の行列  $A$  を係数とする線型方程式  $Ax = b$  を, `matrix_type` で指定された行列格納形式, `options` で指定された解法で解く. また, 解を拡張 Matrix Market 形式で `solution_filename` に, 残差履歴を PLAIN 形式で `rhistory_filename` に書き出す. 右辺ベクトル  $b$  は解ベクトル  $x$  の値がすべて 1 となるよう設定される.  $m, n$  は各次元の格子点数である.

#### 2.4.4 test3

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> test3 l m n matrix_type solution_filename rhistory_filename [options]
```

と入力すると, 3次元 Laplace 作用素を 7点中心差分により離散化して得られる次数  $lmn$  の行列  $A$  を係数とする線型方程式  $Ax = b$  を, `matrix_type` で指定された行列格納形式, `options` で指定された解法で解く. また, 解を拡張 Matrix Market 形式で `solution_filename` に, 残差履歴を PLAIN 形式で `rhistory_filename` に書き出す. 右辺ベクトル  $b$  は解ベクトル  $x$  の値がすべて 1 となるよう設定される.  $l, m, n$  は各次元の格子点数である.

#### 2.4.5 test3b

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> test3b l m n matrix_type solution_filename rhistory_filename [options]
```

と入力すると, 3次元 Laplace 作用素を 27 点中心差分により離散化して得られる次数  $lmn$  の行列  $A$  を係数とする線型方程式  $Ax = b$  を, `matrix_type` で指定された行列格納形式, `options` で指定された解法で解く. また, 解を拡張 Matrix Market 形式で `solution_filename` に, 残差履歴を PLAIN 形式で `rhistory_filename` に書き出す. 右辺ベクトル  $b$  は解ベクトル  $x$  の値がすべて 1 となるよう設定される.  $l, m, n$  は各次元の格子点数である.

#### 2.4.6 test3c

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> test3c l m n step [options]
```

と入力すると, 3次元 Laplace 作用素を 7 点中心差分により離散化して得られる次数  $lmn$  の行列  $A$  を係数とする線型方程式  $Ax = b$  を, `options` で指定された解法で `step` ステップ分解く. 右辺ベクトル  $b$  は解ベクトル  $x$  の値がすべて 1 となるよう設定される. 行列, 右辺ベクトルの値はステップ毎に更新される.  $l, m, n$  は各次元の格子点数である.

#### 2.4.7 test4

線型方程式  $Ax = b$  を指定された解法で解き, 解を標準出力に書き出す. 行列  $A$  は次数 12 の 3 重対角行列

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

である. 右辺ベクトル  $b$  は解ベクトル  $x$  の値がすべて 1 となるよう設定される. `test4f.F` は `test4.c` の Fortran 版である.

#### 2.4.8 test5

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> test5 n gamma [options]
```

と入力すると, 線型方程式  $Ax = b$  を指定された解法で解く. 行列  $A$  は次数  $n$  の Toeplitz 行列

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & & & & \\ 0 & 2 & 1 & & & \\ \gamma & 0 & 2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \gamma & 0 & 2 & 1 \\ & & & & \gamma & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

である. 右辺ベクトル  $b$  は解ベクトル  $x$  の値がすべて 1 となるよう設定される.

#### 2.4.9 test6

test6.c は test2.c の配列版である。ディレクトリ lis-(\$VERSION)/test において

```
> test6 m n
```

と入力すると、2次元 Laplace 作用素を5点中心差分により離散化して得られる次数  $mn$  の行列  $A$  を係数とする線型方程式  $Ax = b$  を直接法で解く。右辺ベクトル  $b$  は解ベクトル  $x$  の値がすべて1となるよう設定される。 $m, n$  は各次元の格子点数である。test6f.F90 は test6.c の Fortran 90 版である。

#### 2.4.10 test7

ディレクトリ lis-(\$VERSION)/test において

```
> test7
```

と入力すると、複素演算の使用例を示す。test7f.F は test7.c の Fortran 版である。

#### 2.4.11 etest1

ディレクトリ lis-(\$VERSION)/test において

```
> etest1 matrix_filename evector_filename rhistory_filename [options]
```

と入力すると、matrix\_filename から行列データを読み込み、標準固有値問題  $Ax = \lambda x$  を options で指定された解法で解いて、指定された固有値を標準出力に書き出す。また、対応する固有ベクトルを拡張 Matrix Market 形式で evector\_filename に、残差履歴を PLAIN 形式で rhistory\_filename に書き出す。入力可能な行列データ形式は Matrix Market 形式、もしくは Harwell-Boeing 形式のいずれかである。etest1f.F は etest1.c の Fortran 版である。複数の固有対を取得する場合は etest5 を参照のこと。

#### 2.4.12 getest1

ディレクトリ lis-(\$VERSION)/test において

```
> getest1 matrix_a_filename matrix_b_filename evector_filename rhistory_filename  
[options]
```

と入力すると、matrix\_a\_filename 及び matrix\_b\_filename から行列データを読み込み、一般化固有値問題  $Ax = \lambda Bx$  を options で指定された解法で解いて、指定された固有値を標準出力に書き出す。また、対応する固有ベクトルを拡張 Matrix Market 形式で evector\_filename に、残差履歴を PLAIN 形式で rhistory\_filename に書き出す。入力可能な行列データ形式は Matrix Market 形式、もしくは Harwell-Boeing 形式のいずれかである。複数の固有対を取得する場合は getest5 を参照のこと。

#### 2.4.13 etest2

ディレクトリ lis-(\$VERSION)/test において

```
> etest2 m n matrix_type evector_filename rhistory_filename [options]
```

と入力すると、2次元 Laplace 作用素を5点中心差分により離散化して得られる次数  $mn$  の行列  $A$  に関する固有値問題  $Ax = \lambda x$  を、matrix\_type で指定された行列格納形式、options で指定された解法で解き、指定された固有値を標準出力に書き出す。また、対応する固有ベクトルを evector\_filename に、残差履歴を rhistory\_filename に書き出す。 $m, n$  は各次元の格子点数である。

#### 2.4.14 etest3

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> etest3 l m n matrix_type evector_filename rhistory_filename [options]
```

と入力すると, 3次元 Laplace 作用素を 7点中心差分により離散化して得られる次数  $lmn$  の行列  $A$  に関する固有値問題  $Ax = \lambda x$  を, `matrix_type` で指定された行列格納形式, `options` で指定された解法で解き, 指定された固有値を標準出力に書き出す. また, 対応する固有ベクトルを拡張 Matrix Market 形式で `evector_filename` に, 残差履歴を PLAIN 形式で `rhistory_filename` に書き出す.  $l, m, n$  は各次元の格子点数である. 複数の固有対を取得する場合は `etest6` を参照のこと.

#### 2.4.15 etest4

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> etest4 n [options]
```

と入力すると, 固有値問題  $Ax = \lambda x$  を指定された解法で解き, 指定された固有値を標準出力に書き出す. 行列  $A$  は次数  $n$  の 3重対角行列

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & & -1 & 2 & -1 & \\ & & & & -1 & 2 & \end{pmatrix}$$

である. `etest4f.F` は `etest4.c` の Fortran 版である.

#### 2.4.16 etest5

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> etest5 matrix_filename evalues_filename evector_filenames residuals_filename
iters_filenames [options]
```

と入力すると, `matrix_filename` から行列データを読み込み, 標準固有値問題  $Ax = \lambda x$  を `options` で指定された解法で解く. また, オプション `-ss` により指定された個数の固有値を `evalues_filename` に, 対応する固有ベクトル, 残差ノルム及び反復回数を `evector_filenames`, `residuals_filename` 及び `iters_filenames` に拡張 Matrix Market 形式で書き出す. 入力可能な行列データ形式は Matrix Market 形式, もしくは Harwell-Boeing 形式のいずれかである.

#### 2.4.17 etest5b

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> etest5b matrix_filename evalues_filename [options]
```

と入力すると, `matrix_filename` から行列データを読み込み, 標準固有値問題  $Ax = \lambda x$  を `options` で指定された解法で解く. また, オプション `-ss` により指定された個数の Ritz 値を `evalues_filename` に拡張 Matrix Market 形式で書き出す. 入力可能な行列データ形式は Matrix Market 形式, もしくは Harwell-Boeing 形式のいずれかである.



#### 2.4.18 getest5

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> getest5 matrix_a_filename matrix_b_filename values_filename evecors_filename
residuals_filename iters_filename [options]
```

と入力すると, `matrix_a_filename` 及び `matrix_b_filename` から行列データを読み込み, 一般化固有値問題  $Ax = \lambda Bx$  を `options` で指定された解法で解く. また, オプション `-ss` により指定された個数の固有値を `values_filename` に, 対応する固有ベクトル, 残差ノルム及び反復回数を `evecors_filename`, `residuals_filename` 及び `iters_filename` に拡張 Matrix Market 形式で書き出す. 入力可能な行列データ形式は Matrix Market 形式, もしくは Harwell-Boeing 形式のいずれかである.

#### 2.4.19 getest5b

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> getest5b matrix_a_filename matrix_b_filename values_filename [options]
```

と入力すると, `matrix_a_filename` 及び `matrix_b_filename` から行列データを読み込み, 一般化固有値問題  $Ax = \lambda Bx$  を `options` で指定された解法で解く. また, オプション `-ss` により指定された個数の Ritz 値を `values_filename` に拡張 Matrix Market 形式で書き出す. 入力可能な行列データ形式は Matrix Market 形式, もしくは Harwell-Boeing 形式のいずれかである.

#### 2.4.20 etest6

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> etest6 l m n matrix_type values_filename evecors_filename residuals_filename
iters_filename [options]
```

と入力すると, 3次元 Laplace 作用素を 7点中心差分により離散化して得られる次数  $lmn$  の行列  $A$  に関する固有値問題  $Ax = \lambda x$  を, `matrix_type` で指定された行列格納形式, `options` で指定された解法で解く. また, オプション `-ss` により指定された個数の固有値を `values_filename` に, 対応する固有ベクトル, 残差ノルム及び反復回数を `evecors_filename`, `residuals_filename` 及び `iters_filename` に拡張 Matrix Market 形式で書き出す.  $l, m, n$  は各次元の格子点数である.

#### 2.4.21 etest7

`etest7.c` は `etest2.c` の配列版である. ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> etest7 m n
```

と入力すると, 2次元 Laplace 作用素を 5点中心差分により離散化して得られる次数  $mn$  の行列  $A$  に関する固有値問題  $Ax = \lambda x$  を QR 法で解く.  $m, n$  は各次元の格子点数である.

#### 2.4.22 spmvtest1

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> spmvtest1 n iter [matrix_type]
```



#### 2.4.25 spmvtest3

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> spmvtest3 l m n iter [matrix_type]
```

と入力すると、3次元 Laplace 作用素を7点中心差分により離散化して得られる次数  $lmn$  の7重対角行列とベクトル  $(1, \dots, 1)^T$  との積を `iter` で指定された回数実行し、FLOPS 値を算出する。必要なら `matrix_type` により、

0	実行可能なすべての行列格納形式について測定する
1-11	行列格納形式の番号

のいずれかを指定する。1, m, n は各次元の格子点数である。

#### 2.4.26 spmvtest3b

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> spmvtest3b l m n iter [matrix_type]
```

と入力すると、3次元 Laplace 作用素を27点中心差分により離散化して得られる次数  $lmn$  の27重対角行列とベクトル  $(1, \dots, 1)^T$  との積を `iter` で指定された回数実行し、FLOPS 値を算出する。必要なら `matrix_type` により、

0	実行可能なすべての行列格納形式について測定する
1-11	行列格納形式の番号

のいずれかを指定する。1, m, n は各次元の格子点数である。

#### 2.4.27 spmvtest4

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> spmvtest4 matrix_filename_list iter [block]
```

と入力すると、`matrix_filename_list` の示す行列データファイルリストから行列データを読み込み、各行列とベクトル  $(1, \dots, 1)^T$  との積を実行可能な行列格納形式について `iter` で指定された回数実行し、FLOPS 値を算出する。入力可能な行列データ形式は Matrix Market 形式、もしくは Harwell-Boeing 形式のいずれかである。必要なら `block` により、BSR, BSC 形式のブロックサイズを指定する。

#### 2.4.28 spmvtest5

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> spmvtest5 matrix_filename matrix_type iter [block]
```

と入力すると、`matrix_filename` の示す行列データファイルから行列データを読み込み、行列とベクトル  $(1, \dots, 1)^T$  との積を行列格納形式 `matrix_type` について `iter` で指定された回数実行し、FLOPS 値を算出する。入力可能な行列データ形式は Matrix Market 形式、もしくは Harwell-Boeing 形式のいずれかである。必要なら `block` により、BSR, BSC 形式のブロックサイズを指定する。

## 2.5 制限事項

現バージョンには以下の制限がある.

- 行列格納形式
  - VBR 形式はマルチプロセス環境では使用できない.
  - CSR 形式以外の格納形式は SA-AMG 前処理では使用できない.
  - マルチプロセス環境において必要な配列を直接定義する場合は, CSR 形式を使用しなければならない. 他の格納形式を使用する場合は, 関数 `lis_matrix_convert()` を用いて変換を行う.
- double-double 型 4 倍精度演算 (4 節を参照)
  - 線型方程式解法のうち, Jacobi, Gauss-Seidel, SOR, IDR(s), COCG, COCR 法では使用できない.
  - 固有値解法では使用できない.
  - Hybrid 前処理での内部反復解法のうち, Jacobi, Gauss-Seidel, SOR 法では使用できない.
  - I+S, SA-AMG 前処理では使用できない.
  - double-double 型 4 倍精度演算は複素演算には対応していない.
- 前処理
  - ILU(k) 前処理のアルゴリズムは, ブロック対角要素を並列に分解する局所 ILU 前処理 [39] に基づく. スレッド数またはプロセス数が増加するにつれて収束特性が Jacobi 前処理に近づく点に注意のこと.
  - Jacobi, SSOR 以外の前処理が選択され, かつ行列  $A$  が CSR 形式でない場合, 前処理作成時に CSR 形式の行列  $A$  が作成される.
  - 非対称線型方程式解法として BiCG 法が選択された場合, SA-AMG 前処理は使用できない.
  - SA-AMG 前処理はマルチスレッド計算には対応していない.
  - SA-AMG 前処理は複素演算には対応していない.
  - SAINV 前処理の前処理行列作成部分は逐次実行される.
  - ユーザ定義前処理は使用できない.
- 固有値解法
  - 複素固有値を計算する場合には, 複素演算を有効にする必要がある.

### 3 基本操作

本節では、ライブラリの使用方法について述べる。プログラムでは、以下の処理を行う必要がある。

- 初期化処理
- 行列の作成
- ベクトルの作成
- ソルバ (解法の情報格納する構造体) の作成
- 行列, ベクトルへの値の代入
- 解法の設定
- 求解
- 終了処理

また、プログラムの先頭には以下のコンパイラ指示文を記述しなければならない。

- C `#include "lis.h"`
- Fortran `#include "lisf.h"`

`lis.h`, `lisf.h` は、導入時に `($INSTALLDIR)/include` 下に格納される。

#### 3.1 初期化・終了処理

初期化, 終了処理は以下のように記述する。初期化処理はプログラムの最初に, 終了処理は最後に実行しなければならない。

```
C
1: #include "lis.h"
2: LIS_INT main(LIS_INT argc, char* argv[])
3: {
4:     lis_initialize(&argc, &argv);
5:     ...
6:     lis_finalize();
7: }
```

```
Fortran
1: #include "lisf.h"
2:     call lis_initialize(ierr)
3:     ...
4:     call lis_finalize(ierr)
```

##### 初期化処理

初期化処理を行うには、関数

- C `LIS_INT lis_initialize(LIS_INT* argc, char** argv[])`

- Fortran subroutine `lis_initialize(LIS_INTEGER ierr)`

を用いる。この関数は、MPIの初期化、コマンドライン引数の取得等の初期化処理を行う。

LIS\_INTの既定値 `int` は、プリプロセッサマクロ `_LONG_LONG` が定義された場合には `long long int` に、また LIS\_INTEGERの既定値 `integer` は、プリプロセッサマクロ `LONG_LONG` が定義された場合には `integer*8` に置き換えられる。

### 終了処理

終了処理を行うには、関数

- C `LIS_INT lis_finalize()`
- Fortran subroutine `lis_finalize(LIS_INTEGER ierr)`

を用いる。

## 3.2 ベクトルの操作

ベクトル  $v$  の次数を  $global\_n$  とする。ベクトル  $v$  を  $nprocs$  個のプロセスで行ブロック分割する場合の各部分ベクトルの行数を  $local\_n$  とする。 $global\_n$  が  $nprocs$  で割り切れる場合は  $local\_n = global\_n / nprocs$  となる。例えば、ベクトル  $v$  を (3.1) 式のように 2 プロセスで行ブロック分割する場合、 $global\_n$  と  $local\_n$  はそれぞれ 4 と 2 となる。

$$v = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \begin{matrix} PE0 \\ PE1 \end{matrix} \quad (3.1)$$

(3.1) 式のベクトル  $v$  を作成する場合、逐次、マルチスレッド環境ではベクトル  $v$  そのものを、マルチプロセス環境では各プロセスにプロセス数で行ブロック分割した部分ベクトルを作成する。

ベクトル  $v$  を作成するプログラムは以下のように記述する。ただし、マルチプロセス環境のプロセス数は 2 とする。

C (逐次・マルチスレッド環境)

```

1: LIS_INT i,n;
2: LIS_VECTOR v;
3: n = 4;
4: lis_vector_create(0,&v);
5: lis_vector_set_size(v,0,n);          /* or lis_vector_set_size(v,n,0); */
6:
7: for(i=0;i<n;i++)
8: {
9:     lis_vector_set_value(LIS_INS_VALUE,i,(double)i,v);
10: }
```

#### C (マルチプロセス環境)

```
1: LIS_INT i,n,is,ie;                /* or LIS_INT i,ln,is,ie; */
2: LIS_VECTOR v;
3: n = 4;                            /* ln = 2; */
4: lis_vector_create(MPI_COMM_WORLD,&v);
5: lis_vector_set_size(v,0,n);        /* lis_vector_set_size(v,ln,0); */
6: lis_vector_get_range(v,&is,&ie);
7: for(i=is;i<ie;i++)
8: {
9:     lis_vector_set_value(LIS_INS_VALUE,i,(double)i,v);
10: }
```

#### Fortran (逐次・マルチスレッド環境)

```
1: LIS_INTEGER i,n
2: LIS_VECTOR v
3: n = 4
4: call lis_vector_create(0,v,ierr)
5: call lis_vector_set_size(v,0,n,ierr)
6:
7: do i=1,n
9:     call lis_vector_set_value(LIS_INS_VALUE,i,DBLE(i),v,ierr)
10: enddo
```

#### Fortran (マルチプロセス環境)

```
1: LIS_INTEGER i,n,is,ie
2: LIS_VECTOR v
3: n = 4
4: call lis_vector_create(MPI_COMM_WORLD,v,ierr)
5: call lis_vector_set_size(v,0,n,ierr)
6: call lis_vector_get_range(v,is,ie,ierr)
7: do i=is,ie-1
8:     call lis_vector_set_value(LIS_INS_VALUE,i,DBLE(i),v,ierr);
9: enddo
```

### ベクトルの作成

ベクトル  $v$  の作成には、関数

- C        LIS\_INT lis\_vector\_create(LIS\_Comm comm, LIS\_VECTOR \*v)
- Fortran subroutine lis\_vector\_create(LIS\_Comm comm, LIS\_VECTOR v, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる。comm には MPI コミュニケータを指定する。逐次、マルチスレッド環境では comm の値は無視される。

### 次数の設定

次数の設定には、関数

- C        LIS\_INTEGER lis\_vector\_set\_size(LIS\_VECTOR v, LIS\_INT local\_n,  
         LIS\_INT global\_n)
- Fortran subroutine lis\_vector\_set\_size(LIS\_VECTIR v, LIS\_INTEGER local\_n,  
         LIS\_INTEGER global\_n, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる. *local\_n* か *global\_n* のどちらか一方を与えなければならない.

逐次, マルチスレッド環境では, *local\_n* は *global\_n* に等しい. したがって, `lis_vector_set_size(v,n,0)` と `lis_vector_set_size(v,0,n)` は, いずれも次数  $n$  のベクトルを作成する.

マルチプロセス環境においては, `lis_vector_set_size(v,n,0)` は各プロセス上に次数  $n$  の部分ベクトルを作成する. 一方, `lis_vector_set_size(v,0,n)` は各プロセス  $p$  上に次数  $m_p$  の部分ベクトルを作成する.  $m_p$  はライブラリ側で決定される.

## 値の代入

ベクトル  $v$  の第  $i$  行に値を代入するには, 関数

- C `LIS_INT lis_vector_set_value(LIS_INT flag, LIS_INT i, LIS_SCALAR value, LIS_VECTOR v)`
- Fortran subroutine `lis_vector_set_value(LIS_INTEGER flag, LIS_INTEGER i, LIS_SCALAR value, LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる. マルチプロセス環境では, 部分ベクトルの第  $i$  行ではなく, 全体ベクトルの第  $i$  行を指定する. `flag` には

`LIS_INS_VALUE` 挿入:  $v[i] = value$

`LIS_ADD_VALUE` 加算代入:  $v[i] = v[i] + value$

のどちらかを指定する.

## ベクトルの複製

既存のベクトルと同じ情報を持つベクトルを作成するには, 関数

- C `LIS_INT lis_vector_duplicate(LIS_VECTOR vin, LIS_VECTOR *vout)`
- Fortran subroutine `lis_vector_duplicate(LIS_VECTOR vin, LIS_VECTOR vout, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる. 第1引数 `LIS_VECTOR vin` は `LIS_MATRIX` を指定することも可能である. この関数はベクトルの要素の値は複製しない. 値も複製する場合は, この関数の後に

- C `LIS_INT lis_vector_copy(LIS_VECTOR vsrc, LIS_VECTOR vdst)`
- Fortran subroutine `lis_vector_copy(LIS_VECTOR vsrc, LIS_VECTOR vdst, LIS_INTEGER ierr)`

を呼び出す.

## ベクトルの破棄

不要になったベクトルをメモリから破棄するには,

- C `LIS_INT lis_vector_destroy(LIS_VECTOR v)`
- Fortran subroutine `lis_vector_destroy(LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる.



### 3.3 行列の操作

行列  $A$  の次数を  $global\_n \times global\_n$  とする. 行列  $A$  を  $nprocs$  個のプロセスで行ブロック分割する場合の各ブロックの行数を  $local\_n$  とする.  $global\_n$  が  $nprocs$  で割り切れる場合は  $local\_n = global\_n / nprocs$  となる. 例えば, 行列  $A$  を (3.2) 式のように 2 個のプロセスで行ブロック分割する場合,  $global\_n$  と  $local\_n$  はそれぞれ 4 と 2 となる.

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & & \\ 1 & 2 & 1 & \\ & 1 & 2 & 1 \\ & & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{matrix} PE0 \\ \\ PE1 \\ \end{matrix} \quad (3.2)$$

目的の格納形式の行列を作成するには以下の 3 つの方法がある.

方法 1: ライブラリ関数を用いて目的の格納形式の配列を定義する場合

(3.2) 式の行列  $A$  を CSR 形式で作成する場合, 逐次, マルチスレッド環境では行列  $A$  そのものを, マルチプロセス環境では各プロセスにプロセス数で行ブロック分割した部分行列を作成する.

行列  $A$  を CSR 形式で作成するプログラムは以下のように記述する. ただし, マルチプロセス環境のプロセス数は 2 とする.

C (逐次・マルチスレッド環境)

```
1: LIS_INT i,n;
2: LIS_MATRIX A;
3: n = 4;
4: lis_matrix_create(0,&A);
5: lis_matrix_set_size(A,0,n);          /* or lis_matrix_set_size(A,n,0); */
6: for(i=0;i<n;i++) {
7:     if( i>0 ) lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i-1,1.0,A);
8:     if( i<n-1 ) lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i+1,1.0,A);
9:     lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i,2.0,A);
10: }
11: lis_matrix_set_type(A,LIS_MATRIX_CSR);
12: lis_matrix_assemble(A);
```

C (マルチプロセス環境)

```
1: LIS_INT i,n,gn,is,ie;
2: LIS_MATRIX A;
3: gn = 4;                               /* or n=2 */
4: lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD,&A);
5: lis_matrix_set_size(A,0,gn);          /* lis_matrix_set_size(A,n,0); */
6: lis_matrix_get_size(A,&n,&gn);
7: lis_matrix_get_range(A,&is,&ie);
8: for(i=is;i<ie;i++) {
9:     if( i>0 ) lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i-1,1.0,A);
10:    if( i<gn-1 ) lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i+1,1.0,A);
11:    lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i,2.0,A);
12: }
13: lis_matrix_set_type(A,LIS_MATRIX_CSR);
14: lis_matrix_assemble(A);
```

Fortran (逐次・マルチスレッド環境)

```
1: LIS_INTEGER i,n
2: LIS_MATRIX A
3: n = 4
4: call lis_matrix_create(0,A,ierr)
5: call lis_matrix_set_size(A,0,n,ierr)
6: do i=1,n
7:   if( i>1 ) call lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i-1,1.0d0,A,ierr)
8:   if( i<n ) call lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i+1,1.0d0,A,ierr)
9:   call lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i,2.0d0,A,ierr)
10: enddo
11: call lis_matrix_set_type(A,LIS_MATRIX_CSR,ierr)
12: call lis_matrix_assemble(A,ierr)
```

Fortran (マルチプロセス環境)

```
1: LIS_INTEGER i,n,gn,is,ie
2: LIS_MATRIX A
3: gn = 4
4: call lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD,A,ierr)
5: call lis_matrix_set_size(A,0,gn,ierr)
6: call lis_matrix_get_size(A,n,gn,ierr)
7: call lis_matrix_get_range(A,is,ie,ierr)
8: do i=is,ie-1
9:   if( i>1 ) call lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i-1,1.0d0,A,ierr)
10:  if( i<gn ) call lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i+1,1.0d0,A,ierr)
11:  call lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i,2.0d0,A,ierr)
12: enddo
13: call lis_matrix_set_type(A,LIS_MATRIX_CSR,ierr)
14: call lis_matrix_assemble(A,ierr)
```

## 行列の作成

行列  $A$  の作成には、関数

- C `LIS_INT lis_matrix_create(LIS_Comm comm, LIS_MATRIX *A)`
- Fortran subroutine `lis_matrix_create(LIS_Comm comm, LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる。comm には MPI コミュニケータを指定する。逐次、マルチスレッド環境では、comm の値は無視される。

## 次数の設定

次数の設定には、関数

- C `LIS_INT lis_matrix_set_size(LIS_MATRIX A, LIS_INT local_n, LIS_INT global_n)`
- Fortran subroutine `lis_matrix_set_size(LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER local_n, LIS_INTEGER global_n, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる。local\_n か global\_n のどちらか一方を与えなければならない。

逐次、マルチスレッド環境では、local\_n は global\_n に等しい。したがって、`lis_matrix_set_size(A,n,0)` と `lis_matrix_set_size(A,0,n)` は、いずれも次数  $n \times n$  の行列を作成する。

マルチプロセス環境においては, `lis_matrix_set_size(A,n,0)` は各プロセス上に次数  $n \times N$  の部分行列を作成する.  $N$  は  $n$  の総和である.

一方, `lis_matrix_set_size(A,0,n)` は各プロセス  $p$  上に次数  $m_p \times n$  の部分行列を作成する.  $m_p$  はライブラリ側で決定される.

### 値の代入

行列  $A$  の第  $i$  行第  $j$  列に値を代入するには, 関数

- C `LIS_INT lis_matrix_set_value(LIS_INT flag, LIS_INT i, LIS_INT j, LIS_SCALAR value, LIS_MATRIX A)`
- Fortran subroutine `lis_matrix_set_value(LIS_INTEGER flag, LIS_INTEGER i, LIS_INTEGER j, LIS_SCALAR value, LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる. マルチプロセス環境では, 全体行列の第  $i$  行第  $j$  列を指定する. `flag` には

`LIS_INS_VALUE` 挿入:  $A[i, j] = value$

`LIS_ADD_VALUE` 加算代入:  $A[i, j] = A[i, j] + value$

のどちらかを指定する.

### 行列格納形式の設定

行列の格納形式を設定するには, 関数

- C `LIS_INT lis_matrix_set_type(LIS_MATRIX A, LIS_INT matrix_type)`
- Fortran subroutine `lis_matrix_set_type(LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER matrix_type, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる. 行列作成時の  $A$  の `matrix_type` は `LIS_MATRIX_CSR` である. 以下に対応する格納形式を示す.

格納形式		<code>matrix_type</code>
Compressed Sparse Row	(CSR)	{LIS_MATRIX_CSR 1}
Compressed Sparse Column	(CSC)	{LIS_MATRIX_CSC 2}
Modified Compressed Sparse Row	(MSR)	{LIS_MATRIX_MSR 3}
Diagonal	(DIA)	{LIS_MATRIX_DIA 4}
Ellpack-Itpack Generalized Diagonal	(ELL)	{LIS_MATRIX_ELL 5}
Jagged Diagonal	(JAD)	{LIS_MATRIX_JAD 6}
Block Sparse Row	(BSR)	{LIS_MATRIX_BSR 7}
Block Sparse Column	(BSC)	{LIS_MATRIX_BSC 8}
Variable Block Row	(VBR)	{LIS_MATRIX_VBR 9}
Coordinate	(COO)	{LIS_MATRIX_COO 10}
Dense	(DNS)	{LIS_MATRIX_DNS 11}

### 行列の組み立て

行列の要素と格納形式を設定した後, 関数

- C LIS\_INT lis\_matrix\_assemble(LIS\_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis\_matrix\_assemble(LIS\_MATRIX A, LIS\_INTEGER ierr)

を呼び出す。lis\_matrix\_assemble は lis\_matrix\_set\_type で指定された格納形式に組み立てられる。

### 行列の破棄

不要になった行列をメモリから破棄するには、

- C LIS\_INT lis\_matrix\_destroy(LIS\_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis\_matrix\_destroy(LIS\_MATRIX A, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる。

### 方法 2: 目的の格納形式の配列を直接定義する場合

(3.2) 式の行列  $A$  を CSR 形式で作成する場合、逐次、マルチスレッド環境では行列  $A$  そのものを、マルチプロセス環境では各プロセスにプロセス数で行ブロック分割した部分行列を作成する。

行列  $A$  を CSR 形式で作成するプログラムは以下のように記述する。ただし、マルチプロセス環境のプロセス数は 2 とする。

C (逐次・マルチスレッド環境)

```

1: LIS_INT i,k,n,nnz;
2: LIS_INT *ptr,*index;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: n = 4; nnz = 10; k = 0;
6: lis_matrix_malloc_csr(n,nnz,&ptr,&index,&value);
7: lis_matrix_create(0,&A);
8: lis_matrix_set_size(A,0,n);          /* or lis_matrix_set_size(A,n,0); */
9:
10: for(i=0;i<n;i++)
11: {
12:     if( i>0 ) {index[k] = i-1; value[k] = 1; k++;}
13:     index[k] = i; value[k] = 2; k++;
14:     if( i<n-1 ) {index[k] = i+1; value[k] = 1; k++;}
15:     ptr[i+1] = k;
16: }
17: ptr[0] = 0;
18: lis_matrix_set_csr(nnz,ptr,index,value,A);
19: lis_matrix_assemble(A);

```

C (マルチプロセス環境)

```
1: LIS_INT i,k,n,nnz,is,ie;
2: LIS_INT *ptr,*index;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: n = 2; nnz = 5; k = 0;
6: lis_matrix_malloc_csr(n,nnz,&ptr,&index,&value);
7: lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD,&A);
8: lis_matrix_set_size(A,n,0);
9: lis_matrix_get_range(A,&is,&ie);
10: for(i=is;i<ie;i++)
11: {
12:     if( i>0 ) {index[k] = i-1; value[k] = 1; k++;}
13:     index[k] = i; value[k] = 2; k++;
14:     if( i<n-1 ) {index[k] = i+1; value[k] = 1; k++;}
15:     ptr[i-is+1] = k;
16: }
17: ptr[0] = 0;
18: lis_matrix_set_csr(nnz,ptr,index,value,A);
19: lis_matrix_assemble(A);
```

#### 配列の関連付け

CSR形式の配列をライブラリが扱えるよう行列  $A$  に関連付けるには、関数

- C LIS\_INT lis\_matrix\_set\_csr(LIS\_INT nnz, LIS\_INT ptr[], LIS\_INT index[], LIS\_SCALAR value[], LIS\_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis\_matrix\_set\_csr(LIS\_INTEGER nnz, LIS\_INTEGER ptr(), LIS\_INTEGER index(), LIS\_SCALAR value(), LIS\_MATRIX A, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる。その他の格納形式については5節を参照のこと。

#### 方法3: 外部ファイルから行列、ベクトルデータを読み込む場合

外部ファイルから(3.2)式の行列  $A$  をCSR形式で読み込む場合、プログラムは以下のように記述する。

C (逐次・マルチスレッド・マルチプロセス環境)

```
1: LIS_MATRIX A;
3: lis_matrix_create(LIS_COMM_WORLD,&A);
6: lis_matrix_set_type(A,LIS_MATRIX_CSR);
7: lis_input_matrix(A,"matvec.mtx");
```

Fortran (逐次・マルチスレッド・マルチプロセス環境)

```
1: LIS_MATRIX A
3: call lis_matrix_create(LIS_COMM_WORLD,A,ierr)
6: call lis_matrix_set_type(A,LIS_MATRIX_CSR,ierr)
7: call lis_input_matrix(A,'matvec.mtx',ierr)
```

Matrix Market形式による外部ファイル matvec.mtx の記述例を以下に示す。

```
%%MatrixMarket matrix coordinate real general
4 4 10 1 0
1 2 1.0e+00
```

```

1 1  2.0e+00
2 3  1.0e+00
2 1  1.0e+00
2 2  2.0e+00
3 4  1.0e+00
3 2  1.0e+00
3 3  2.0e+00
4 4  2.0e+00
4 3  1.0e+00

```

外部ファイルから (3.2) 式の行列  $A$  を CSR 形式で、また (3.1) 式のベクトル  $b$  を読み込む場合のプログラムは以下のように記述する。

C (逐次・マルチスレッド・マルチプロセス環境)

```

1: LIS_MATRIX A;
2: LIS_VECTOR b,x;
3: lis_matrix_create(LIS_COMM_WORLD,&A);
4: lis_vector_create(LIS_COMM_WORLD,&b);
5: lis_vector_create(LIS_COMM_WORLD,&x);
6: lis_matrix_set_type(A,LIS_MATRIX_CSR);
7: lis_input(A,b,x,"matvec.mtx");

```

Fortran (逐次・マルチスレッド・マルチプロセス環境)

```

1: LIS_MATRIX A
2: LIS_VECTOR b,x
3: call lis_matrix_create(LIS_COMM_WORLD,A,ierr)
4: call lis_vector_create(LIS_COMM_WORLD,b,ierr)
5: call lis_vector_create(LIS_COMM_WORLD,x,ierr)
6: call lis_matrix_set_type(A,LIS_MATRIX_CSR,ierr)
7: call lis_input(A,b,x,'matvec.mtx',ierr)

```

拡張 Matrix Market 形式による外部ファイル `matvec.mtx` の記述例を以下に示す (付録 A を参照)。

```

%%MatrixMarket matrix coordinate real general
4 4 10 1 0
1 2  1.0e+00
1 1  2.0e+00
2 3  1.0e+00
2 1  1.0e+00
2 2  2.0e+00
3 4  1.0e+00
3 2  1.0e+00
3 3  2.0e+00
4 4  2.0e+00
4 3  1.0e+00
1  0.0e+00
2  1.0e+00
3  2.0e+00
4  3.0e+00

```

外部ファイルからの読み込み

外部ファイルから行列  $A$  のデータを読み込むには、関数

- C        `LIS_INT lis_input_matrix(LIS_MATRIX A, char *filename)`

- Fortran subroutine `lis_input_matrix(LIS_MATRIX A, character filename, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる. `filename` にはファイルパスを指定する. 対応するファイル形式は以下の通りである (ファイル形式については付録 A を参照).

- Matrix Market 形式
- Harwell-Boeing 形式

外部ファイルから行列  $A$  とベクトル  $b, x$  のデータを読み込むには, 関数

- C `LIS_INT lis_input(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR b, LIS_VECTOR x, char *filename)`
- Fortran subroutine `lis_input(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR b, LIS_VECTOR x, character filename, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる. `filename` にはファイルパスを指定する. 対応するファイル形式は以下の通りである (ファイル形式については付録 A を参照).

- 拡張 Matrix Market 形式
- Harwell-Boeing 形式

### 3.4 線型方程式の求解

線型方程式  $Ax = b$  を指定された解法で解く場合, プログラムは以下のように記述する.

C (逐次・マルチスレッド・マルチプロセス環境)

```
1: LIS_MATRIX A;
2: LIS_VECTOR b,x;
3: LIS_SOLVER solver;
4:
5: /* 行列とベクトルの作成 */
6:
7: lis_solver_create(&solver);
8: lis_solver_set_option("-i bicg -p none",solver);
9: lis_solver_set_option("-tol 1.0e-12",solver);
10: lis_solve(A,b,x,solver);
```

Fortran (逐次・マルチスレッド・マルチプロセス環境)

```
1: LIS_MATRIX A
2: LIS_VECTOR b,x
3: LIS_SOLVER solver
4:
5: /* 行列とベクトルの作成 */
6:
7: call lis_solver_create(solver,ierr)
8: call lis_solver_set_option('-i bicg -p none',solver,ierr)
9: call lis_solver_set_option('-tol 1.0e-12',solver,ierr)
10: call lis_solve(A,b,x,solver,ierr)
```

ソルバの作成

ソルバ (線型方程式解法の情報を格納する構造体) を作成するには, 関数

- C `LIS_INT lis_solver_create(LIS_SOLVER *solver)`
- Fortran subroutine `lis_solver_create(LIS_SOLVER solver, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる.

#### オプションの設定

線型方程式解法をソルバに設定するには, 関数

- C `LIS_INT lis_solver_set_option(char *text, LIS_SOLVER solver)`
- Fortran subroutine `lis_solver_set_option(character text, LIS_SOLVER solver, LIS_INTEGER ierr)`

または

- C `LIS_INT lis_solver_set_optionC(LIS_SOLVER solver)`
- Fortran subroutine `lis_solver_set_optionC(LIS_SOLVER solver, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる. `lis_solver_set_optionC` は, ユーザプログラム実行時にコマンドラインで指定されたオプションをソルバに設定する関数である.

以下に指定可能なコマンドラインオプションを示す. `-i {cg|1}` は `-i cg` または `-i 1` を意味する. `-maxiter [1000]` は, `-maxiter` の既定値が 1000 であることを意味する.



線型方程式解法に関するオプション (既定値: -i bicg)

線型方程式解法	オプション	補助オプション	
CG	-i {cg 1}		
BiCG	-i {bicg 2}		
CGS	-i {cgs 3}		
BiCGSTAB	-i {bicgstab 4}		
BiCGSTAB(l)	-i {bicgstabl 5}	-ell [2]	次数 $l$
GPBiCG	-i {gpbicg 6}		
TFQMR	-i {tfqmr 7}		
Orthomin(m)	-i {orthomin 8}	-restart [40]	リスタート値 $m$
GMRES(m)	-i {gmres 9}	-restart [40]	リスタート値 $m$
Jacobi	-i {jacobi 10}		
Gauss-Seidel	-i {gs 11}		
SOR	-i {sor 12}	-omega [1.9]	緩和係数 $\omega$ ( $0 < \omega < 2$ )
BiCGSafe	-i {bicgsafe 13}		
CR	-i {cr 14}		
BiCR	-i {bicr 15}		
CRS	-i {crs 16}		
BiCRSTAB	-i {bicrstab 17}		
GPBiCR	-i {gpbicr 18}		
BiCRSafe	-i {bicrsafe 19}		
FGMRES(m)	-i {fgmres 20}	-restart [40]	リスタート値 $m$
IDR(s)	-i {idrs 21}	-irestart [2]	リスタート値 $s$
IDR(1)	-i {idr1 22}		
MINRES	-i {minres 23}		
COCG	-i {cocg 24}		
COCR	-i {cocr 25}		

前処理に関するオプション (既定値: -p none)

前処理	オプション	補助オプション	
なし	-p {none 0}		
Jacobi	-p {jacobi 1}		
ILU(k)	-p {ilu 2}	-ilu_fill [0]	フィルインレベル $k$
SSOR	-p {ssor 3}	-ssor_omega [1.0]	緩和係数 $\omega$ ( $0 < \omega < 2$ )
Hybrid	-p {hybrid 4}	-hybrid_i [sor]	線型方程式解法
		-hybrid_maxiter [25]	最大反復回数
		-hybrid_tol [1.0e-3]	収束判定基準
		-hybrid_omega [1.5]	SOR の緩和係数 $\omega$ ( $0 < \omega < 2$ )
		-hybrid_ell [2]	BiCGSTAB(1) の次数 $l$
		-hybrid_restart [40]	GMRES(m), Orthomin(m) の リスタート値 $m$
I+S	-p {is 5}	-is_alpha [1.0]	$I + \alpha S^{(m)}$ のパラメータ $\alpha$
		-is_m [3]	$I + \alpha S^{(m)}$ のパラメータ $m$
SAINV	-p {sainv 6}	-sainv_drop [0.05]	ドロップ基準
SA-AMG	-p {saamg 7}	-saamg_unsym [false]	非対称版の選択 (行列構造は対称とする)
		-saamg_theta [0.05 0.12]	ドロップ基準 $a_{ij}^2 \leq \theta^2  a_{ii}   a_{jj} $ (対称 非対称)
Crout ILU	-p {iluc 8}	-iluc_drop [0.05]	ドロップ基準
		-iluc_rate [5.0]	最大フィルイン数の倍率
ILUT	-p {ilut 9}		
Additive Schwarz	-adds true	-adds_iter [1]	反復回数

その他のオプション

オプション	
-maxiter [1000]	最大反復回数
-tol [1.0e-12]	収束判定基準 $tol$
-tol_w [1.0]	収束判定基準 $tol_w$
-print [0]	残差履歴の出力
	-print {none 0} 残差履歴を出力しない
	-print {mem 1} 残差履歴をメモリに保存する
	-print {out 2} 残差履歴を標準出力に書き出す
	-print {all 3} 残差履歴をメモリに保存し、標準出力に書き出す
-scale [0]	スケーリングの選択. 結果は元の行列, ベクトルに上書きされる
	-scale {none 0} スケーリングなし
	-scale {jacobi 1} Jacobi スケーリング $D^{-1}Ax = D^{-1}b$ ( $D$ は $A = (a_{ij})$ の対角部分)
	-scale {symm_diag 2} 対角スケーリング $D^{-1/2}AD^{-1/2}x = D^{-1/2}b$ ( $D^{-1/2}$ は対角要素の値が $1/\sqrt{a_{ii}}$ である対角行列)
-initx_zeros [1]	初期ベクトル $x_0$
	-initx_zeros {false 0} 関数 lis_solve() の引数 $x$ により 与えられる要素の値を使用
	-initx_zeros {true 1} すべての要素の値を 0 にする
-conv_cond [0]	収束条件
	-conv_cond {nrm2_r 0} $\ b - Ax\ _2 \leq tol * \ b - Ax_0\ _2$
	-conv_cond {nrm2_b 1} $\ b - Ax\ _2 \leq tol * \ b\ _2$
	-conv_cond {nrm1_b 2} $\ b - Ax\ _1 \leq tol_w * \ b\ _1 + tol$
-omp_num_threads [t]	実行スレッド数 ( $t$ は最大スレッド数)
-storage [0]	行列格納形式
-storage_block [2]	BSR, BSC 形式のブロックサイズ
-f [0]	線型方程式解法の精度
	-f {double 0} 倍精度
	-f {quad 1} double-double 型 4 倍精度

求解

線型方程式  $Ax = b$  を解くには, 関数

- C LIS\_INT lis\_solve(LIS\_MATRIX A, LIS\_VECTOR b, LIS\_VECTOR x, LIS\_SOLVER solver)
- Fortran subroutine lis\_solve(LIS\_MATRIX A, LIS\_VECTOR b, LIS\_VECTOR x, LIS\_SOLVER solver, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる.

### 3.5 固有値問題の求解

標準固有値問題  $Ax = \lambda x$  を指定された解法で解く場合、プログラムは以下のように記述する。

C (逐次・マルチスレッド・マルチプロセス環境)

```
1: LIS_MATRIX A;
2: LIS_VECTOR x;
3: LIS_REAL evalue;
4: LIS_ESOLVER esolver;
5:
6: /* 行列とベクトルの作成 */
7:
8: lis_esolver_create(&esolver);
9: lis_esolver_set_option("-e ii -i bicg -p none",esolver);
10: lis_esolver_set_option("-etol 1.0e-12 -tol 1.0e-12",esolver);
11: lis_solve(A,x,evalue,esolver);
```

Fortran (逐次・マルチスレッド・マルチプロセス環境)

```
1: LIS_MATRIX A
2: LIS_VECTOR x
3: LIS_REAL evalue
4: LIS_ESOLVER esolver
5:
6: /* 行列とベクトルの作成 */
7:
8: call lis_esolver_create(esolver,ierr)
9: call lis_esolver_set_option('-e ii -i bicg -p none',esolver,ierr)
10: call lis_esolver_set_option('-etol 1.0e-12 -tol 1.0e-12',esolver,ierr)
11: call lis_solve(A,x,evalue,esolver,ierr)
```

#### ソルバの作成

ソルバ (固有値解法の情報を格納する構造体) を作成するには、関数

- C LIS\_INT lis\_esolver\_create(LIS\_ESOLVER \*esolver)
- Fortran subroutine lis\_esolver\_create(LIS\_ESOLVER esolver, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる。

#### オプションの設定

固有値解法をソルバに設定するには、関数

- C LIS\_INT lis\_esolver\_set\_option(char \*text, LIS\_ESOLVER esolver)
- Fortran subroutine lis\_esolver\_set\_option(character text, LIS\_ESOLVER esolver, LIS\_INTEGER ierr)

または

- C LIS\_INT lis\_esolver\_set\_optionC(LIS\_ESOLVER esolver)
- Fortran subroutine lis\_esolver\_set\_optionC(LIS\_ESOLVER esolver, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる。lis\_esolver\_set\_optionC は、ユーザプログラム実行時にコマンドラインで指定されたオプションをソルバに設定する関数である。

以下に指定可能なコマンドラインオプションを示す。-e {pi|1} は -e pi または -e 1 を意味する。  
-emaxiter [1000] は、-emaxiter の既定値が 1000 であることを意味する。

固有値解法に関するオプション (既定値: -e cr)

固有値解法	オプション	補助オプション	
Power	-e {pi 1}		
Inverse	-e {iii 2}	-i [bicg]	線型方程式解法
Rayleigh Quotient	-e {rqi 3}	-i [bicg]	線型方程式解法
CG	-e {cgl 4}	-i [cg]	線型方程式解法
CR	-e {crl 5}	-i [bicg]	線型方程式解法
Subspace	-e {si 6}	-ss [1]	部分空間の大きさ
Lanczos	-e {li 7}	-ss [1]	部分空間の大きさ
Arnoldi	-e {ai 8}	-ss [1]	部分空間の大きさ
Generalized Power	-e {gpi 9}	-i [bicg]	線型方程式解法
Generalized Inverse	-e {gii 10}	-i [bicg]	線型方程式解法
Generalized Rayleigh Quotient	-e {gii 11}	-i [bicg]	線型方程式解法
Generalized CG	-e {gcl 12}	-i [cg]	線型方程式解法
Generalized CR	-e {gcr 13}	-i [bicg]	線型方程式解法
Generalized Subspace	-e {gsi 14}	-ss [1]	部分空間の大きさ
Generalized Lanczos	-e {gli 15}	-ss [1]	部分空間の大きさ
Generalized Arnoldi	-e {gai 16}	-ss [1]	部分空間の大きさ

前処理に関するオプション (既定値: -p none)

前処理	オプション	補助オプション	
なし	-p {none 0}		
Jacobi	-p {jacobi 1}		
ILU(k)	-p {ilu 2}	-ilu_fill [0]	フィルインレベル $k$
SSOR	-p {ssor 3}	-ssor_omega [1.0]	緩和係数 $\omega$ ( $0 < \omega < 2$ )
Hybrid	-p {hybrid 4}	-hybrid_i [sor]	線型方程式解法
		-hybrid_maxiter [25]	最大反復回数
		-hybrid_tol [1.0e-3]	収束判定基準
		-hybrid_omega [1.5]	SOR の緩和係数 $\omega$ ( $0 < \omega < 2$ )
		-hybrid_ell [2]	BiCGSTAB(1) の次数 $l$
		-hybrid_restart [40]	GMRES(m), Orthomin(m) の リスタート値 $m$
I+S	-p {is 5}	-is_alpha [1.0]	$I + \alpha S^{(m)}$ のパラメータ $\alpha$
		-is_m [3]	$I + \alpha S^{(m)}$ のパラメータ $m$
SAINV	-p {sainv 6}	-sainv_drop [0.05]	ドロップ基準
SA-AMG	-p {saamg 7}	-saamg_unsym [false]	非対称版の選択 (行列構造は対称とする)
		-saamg_theta [0.05 0.12]	ドロップ基準 $a_{ij}^2 \leq \theta^2  a_{ii}   a_{jj} $ (対称 非対称)
crout ILU	-p {iluc 8}	-iluc_drop [0.05]	ドロップ基準
		-iluc_rate [5.0]	最大フィルイン数の倍率
ILUT	-p {ilut 9}		
Additive Schwarz	-adds true	-adds_iter [1]	反復回数

その他のオプション

オプション	
-emaxiter [1000]	最大反復回数
-etol [1.0e-12]	収束判定基準
-eprint [0]	残差履歴の出力
-eprint {none 0}	残差履歴を出力しない
-eprint {mem 1}	残差履歴をメモリに保存する
-eprint {out 2}	残差履歴を標準出力に書き出す
-eprint {all 3}	残差履歴をメモリに保存し、標準出力に書き出す
-ie [ii]	Subspace, Lanczos, Arnoldi の内部で使用する固有値解法の指定
-ige [gii]	Generalized Subspace, Generalized Lanczos, Generalized Arnoldi の内部で使用する固有値解法の指定
-shift [0.0]	$A - \sigma B$ を計算するためのシフト量 $\sigma$ の実部
-shift_im [0.0]	シフト量 $\sigma$ の虚部
-initx_ones [1]	初期ベクトル $x_0$
-initx_ones {false 0}	関数 <code>lis_esolve()</code> の引数 $x$ により与えられる要素の値を使用
-initx_ones {true 1}	すべての要素の値を 1 にする
-omp_num_threads [t]	実行スレッド数 $t$ は最大スレッド数
-estorage [0]	行列格納形式
-estorage_block [2]	BSR, BSC 形式のブロックサイズ
-ef [0]	固有値解法の精度
-ef {double 0}	倍精度
-ef {quad 1}	double-double 型 4 倍精度
-rval [0]	Ritz 値
-rval {false 0}	Ritz 値をもとに固有値を計算
-rval {true 1}	Ritz 値のみを計算

求解

標準固有値問題  $Ax = \lambda x$  を解くには、関数

- C LIS\_INT lis\_esolve(LIS\_MATRIX A, LIS\_VECTOR x, LIS\_REAL evalue, LIS\_ESOLVER esolver)
- Fortran subroutine lis\_esolve(LIS\_MATRIX A, LIS\_VECTOR x, LIS\_ESOLVER esolver, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる。

一般化固有値問題  $Ax = \lambda Bx$  を解くには、関数

- C LIS\_INT lis\_gesolve(LIS\_MATRIX A, LIS\_MATRIX B, LIS\_VECTOR x, LIS\_REAL evalue, LIS\_ESOLVER esolver)

- Fortran subroutine `lis_gesolve(LIS_MATRIX A, LIS_MATRIX B, LIS_VECTOR x, LIS_ESOLVER esolver, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる.

### 3.6 プログラムの作成

線型方程式  $Ax = b$  を指定された解法で解き, その解を標準出力に書き出すプログラムを以下に示す.  
行列  $A$  は次数 12 の 3 重対角行列

$$A = \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & & \\ -1 & 2 & -1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & -1 & 2 & -1 \\ & & & & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

である. 右辺ベクトル  $b$  は解  $x$  がすべて 1 となるよう設定される.

プログラムはディレクトリ `lis-($VERSION)/test` に含まれる.



検証プログラム: test4.c

```
1: #include <stdio.h>
2: #include "lis.h"
3: main(LIS_INT argc, char *argv[])
4: {
5:     LIS_INT i,n,gn,is,ie,iter;
6:     LIS_MATRIX A;
7:     LIS_VECTOR b,x,u;
8:     LIS_SOLVER solver;
9:     n = 12;
10:    lis_initialize(&argc,&argv);
11:    lis_matrix_create(LIS_COMM_WORLD,&A);
12:    lis_matrix_set_size(A,0,n);
13:    lis_matrix_get_size(A,&n,&gn)
14:    lis_matrix_get_range(A,&is,&ie)
15:    for(i=is;i<ie;i++)
16:    {
17:        if( i>0 ) lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i-1,-1.0,A);
18:        if( i<gn-1 ) lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i+1,-1.0,A);
19:        lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i,2.0,A);
20:    }
21:    lis_matrix_set_type(A,LIS_MATRIX_CSR);
22:    lis_matrix_assemble(A);
23:
24:    lis_vector_duplicate(A,&u);
25:    lis_vector_duplicate(A,&b);
26:    lis_vector_duplicate(A,&x);
27:    lis_vector_set_all(1.0,u);
28:    lis_matvec(A,u,b);
29:
30:    lis_solver_create(&solver);
31:    lis_solver_set_optionC(solver);
32:    lis_solve(A,b,x,solver);
33:    lis_solver_get_iter(solver,&iter);
34:    printf("number of iterations = %d\n",iter);
35:    lis_vector_print(x);
36:    lis_matrix_destroy(A);
37:    lis_vector_destroy(u);
38:    lis_vector_destroy(b);
39:    lis_vector_destroy(x);
40:    lis_solver_destroy(solver);
41:    lis_finalize();
42:    return 0;
43: }
}
```

検証プログラム: test4f.F

```
1:      implicit none
2:
3: #include "lisf.h"
4:
5:      LIS_INTEGER i,n,gn,is,ie,iter,ierr
6:      LIS_MATRIX A
7:      LIS_VECTOR b,x,u
8:      LIS_SOLVER solver
9:      n = 12
10:     call lis_initialize(ierr)
11:     call lis_matrix_create(LIS_COMM_WORLD,A,ierr)
12:     call lis_matrix_set_size(A,0,n,ierr)
13:     call lis_matrix_get_size(A,n,gn,ierr)
14:     call lis_matrix_get_range(A,is,ie,ierr)
15:     do i=is,ie-1
16:         if( i>1 ) call lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i-1,-1.0d0,
17:                                             A,ierr)
18:         if( i<gn ) call lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i+1,-1.0d0,
19:                                             A,ierr)
20:         call lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,i,2.0d0,A,ierr)
21:     enddo
22:     call lis_matrix_set_type(A,LIS_MATRIX_CSR,ierr)
23:     call lis_matrix_assemble(A,ierr)
24:
25:     call lis_vector_duplicate(A,u,ierr)
26:     call lis_vector_duplicate(A,b,ierr)
27:     call lis_vector_duplicate(A,x,ierr)
28:     call lis_vector_set_all(1.0d0,u,ierr)
29:     call lis_matvec(A,u,b,ierr)
30:
31:     call lis_solver_create(solver,ierr)
32:     call lis_solver_set_optionC(solver,ierr)
33:     call lis_solve(A,b,x,solver,ierr)
34:     call lis_solver_get_iter(solver,iter,ierr)
35:     write(*,*) 'number of iterations = ',iter
36:     call lis_vector_print(x,ierr)
37:     call lis_matrix_destroy(A,ierr)
38:     call lis_vector_destroy(b,ierr)
39:     call lis_vector_destroy(x,ierr)
40:     call lis_vector_destroy(u,ierr)
41:     call lis_solver_destroy(solver,ierr)
42:     call lis_finalize(ierr)
43:
44:     stop
45:     end
```

### 3.7 前処理とソルバの分離

前節では、前処理は `lis_solve` が呼び出されるたびに更新されていた。本節では、前処理とソルバを分離し、前処理をソルバと切り離して更新する方法について述べる。この方法は、非線形偏微分方程式を含むある種の問題に対して極めて有効である。実際、Newton-Raphson 法では反復法が用いられ、各反復での線型方程式の解をもとに解ベクトルが逐次的に求められる。この機能を実現するためには、以下の関数を実装する必要がある。

- `lis_matrix_psd_set_value`: 行列要素の値を再定義する。
- `lis_matrix_psd_reset_scale`: 行列のスケーリングに関する情報を更新する。この関数、及び次の関数は、自明でないスケーリングを行う場合にのみ用いる。
- `lis_vector_psd_reset_scale`: ベクトルのスケーリングに関する情報を更新する。
- `lis_solver_set_matrix`: 与えられた行列とソルバを関連付ける。この関数は `lis_precon_psd_create` より前に呼び出されなければならない。
- `lis_precon_psd_create`: 選択された前処理のためのデータ構造を生成する。
- `lis_precon_psd_update`: 前処理を評価する。

この方法には現在以下の制限がある。

- 利用可能な行列格納形式は CSR のみである。
- 利用可能なソルバは GMRES のみである。
- 利用可能な前処理は ILU(k) 及び SA-AMG のみである。

実装例を疑似コードにより示す。詳細は `test8f.F90` を参照のこと。

疑似コード

```

1:    PROGRAM psd_driver
2:
3:    implicit none
4:
5: #include "lisf.h"
6:
7:    LIS_INTEGER i,n,gn,is,ie,iter,ierr
8:    LIS_MATRIX A
9:    LIS_VECTOR b,x
10:   LIS_SOLVER solver
11:   REAL :: u(:),du
12:
13:   CALL lis_initialize(ierr)
14:
15:   !=====
16:   ! initialization, only done once
17:   !=====
18:   CALL lis_matrix_create(LIS_COMM_WORLD,A,ierr)
19:   CALL lis_matrix_set_size(A,0,n,ierr)
20:   CALL lis_matrix_get_size(A,n,gn,ierr)
21:   CALL lis_matrix_get_range(A,is,ie,ierr)
22:
23:   CALL UpdateLinearSystem(RHS,LHS)
24:   DO i=is,ie-1
25:     DO j=1,gn
26:       IF (LHS(i,j) exists) THEN
27:         CALL lis_matrix_set_value(LIS_INS_VALUE,i,j,LHS(i,j),A,ierr)
28:       END IF
29:     END DO
30:   END DO
31:   CALL lis_matrix_set_type(A,LIS_MATRIX_CSR,ierr)
32:   CALL lis_matrix_assemble(A,ierr)
33:
34:   CALL lis_vector_duplicate(A,b,ierr)
35:   CALL lis_vector_duplicate(A,x,ierr)
36:   DO i=is,ie-1
37:     CALL lis_vector_set_value(LIS_INS_VALUE,i,RHS(i),b,ierr)
38:   END DO
39:   u = u_initial
40:
41:   CALL lis_solver_create(solver,ierr)
42:   WRITE(UNIT=options,FMT='(a)') "-p ilu -i gmres -print out -scale none"
43:   CALL lis_solver_set_option(TRIM(options),solver,ierr)
44:
45:   !=====
46:   ! everything up to this point is more or less identical to the standard workflow.
47:   ! Now comes the preconditioner initialization, and the Newton-Raphson
48:   ! iteration.
49:   !=====
50:   CALL lis_solver_set_matrix(A,solver,ierr)
51:   CALL lis_precon_psd_create(solver,precon,ierr)
52:   ! evaluate the preconditioner, at least once . . .
53:   CALL lis_precon_psd_update(solver,precon,ierr)
54:

```

— 疑似コード (続き) —

```

55:    DO
56:
57:        IF (UpdateLHS) THEN
58:            DO i=is,ie-1
59:                DO j=1,gn
60:                    IF (component (i,j) exists) THEN
61:                        CALL lis_matrix_psd_set_value(LIS_INS_VALUE,i,j,LHS(i,j),A,ierr)
62:                    END IF
63:                END DO
64:            END DO
65:            CALL lis_matrix_psd_reset_scale(A,ierr)
66:        END IF
67:
68:        ! update RHS every iteration
69:        DO i=is,ie-1
70:            CALL lis_vector_set_value(LIS_INS_VALUE,i,RHS(i),b,ierr)
71:        END DO
72:        CALL lis_vector_psd_reset_scale(A,ierr)
73:
74:        IF (UpdateLHS) THEN
75:            CALL lis_precon_psd_update(solver,precon,ierr)
76:        END IF
77:        CALL lis_solve_kernel(A,b,x,solver,precon,ierr)
78:        CALL lis_solver_get_iter(solver,iter,ierr)
79:        write(*,*) 'number of iterations = ',iter
80:        CALL lis_vector_print(x,ierr)
81:
82:        ! update the solution
83:        DO i=is,ie-1
84:            CALL lis_vector_get_value(x,i,du,ierr)
85:            u(i)=u(i)-du
86:        END DO
87:
88:        CALL UpdateLinearSystem(RHS,LHS)
89:
90:        IF (termination criteria satisfied) EXIT
91:
92:    END DO
93:
94:
95:    CALL lis_matrix_destroy(A,ierr)
96:    CALL lis_vector_destroy(b,ierr)
97:    CALL lis_vector_destroy(x,ierr)
98:    CALL lis_vector_destroy(u,ierr)
99:    CALL lis_solver_destroy(solver,ierr)
100:
101:    CALL lis_finalize(ierr)
102:
103:    END PROGRAM psd_driver

```

### 3.8 実行ファイルの生成

test4.c から実行ファイルを生成する方法について述べる。ディレクトリ lis-(\$VERSION)/test にある検証プログラム test4.c を SGI Altix 3700 上の Intel C Compiler (icc), Intel Fortran Compiler (ifort) でコンパイルする場合の例を以下に示す。SA-AMG 前処理には Fortran 90 で記述されたコードが含まれるため、SA-AMG 前処理を使用する場合には Fortran 90 コンパイラでリンクしなければならない。また、マルチプロセス環境ではプリプロセッサマクロ USE\_MPI が定義されなければならない。64bit 整数型を使用する場合は、C プログラムではプリプロセッサマクロ LONG\_LONG, Fortran プログラムではプリプロセッサマクロ LONG\_LONG が定義されなければならない。

#### 逐次環境

##### コンパイル

```
> icc -c -I($INSTALLDIR)/include test4.c
```

##### リンク

```
> icc -o test4 test4.o -L($INSTALLDIR)/lib -llis
```

##### リンク (--enable-saamg)

```
> ifort -nofor_main -o test4 test4.o -L($INSTALLDIR)/lib -llis
```

#### マルチスレッド環境

##### コンパイル

```
> icc -c -openmp -I($INSTALLDIR)/include test4.c
```

##### リンク

```
> icc -openmp -o test4 test4.o -L($INSTALLDIR)/lib -llis
```

##### リンク (--enable-saamg)

```
> ifort -nofor_main -openmp -o test4 test4.o -L($INSTALLDIR)/lib -llis
```

#### マルチプロセス環境

##### コンパイル

```
> icc -c -DUSE_MPI -I($INSTALLDIR)/include test4.c
```

##### リンク

```
> icc -o test4 test4.o -L($INSTALLDIR)/lib -llis -lmpi
```

##### リンク (--enable-saamg)

```
> ifort -nofor_main -o test4 test4.o -L($INSTALLDIR)/lib -llis -lmpi
```

#### マルチスレッド・マルチプロセス環境

##### コンパイル

```
> icc -c -openmp -DUSE_MPI -I($INSTALLDIR)/include test4.c
```

##### リンク

```
> icc -openmp -o test4 test4.o -L($INSTALLDIR)/lib -llis -lmpi
```

##### リンク (--enable-saamg)

```
> ifort -nofor_main -openmp -o test4 test4.o -L($INSTALLDIR)/lib -llis -lmpi
```

次に、test4f.F から実行ファイルを生成する方法について述べる。ディレクトリ lis-(\$VERSION)/test にある検証プログラム test4f.F を SGI Altix 3700 上の Intel Fortran Compiler (ifort) でコンパイルする場合の例を以下に示す。Fortran のユーザプログラムにはコンパイラ指示文が含まれるため、プリプロセッサを使用するようコンパイラに指示しなければならない。ifort の場合は、オプション -fpp が必要である。

#### 逐次環境

コンパイル

```
> ifort -c -fpp -I($INSTALLDIR)/include test4f.F
```

リンク

```
> ifort -o test4f test4f.o -L($INSTALLDIR)/lib -llis
```

#### マルチスレッド環境

コンパイル

```
> ifort -c -fpp -openmp -I($INSTALLDIR)/include test4f.F
```

リンク

```
> ifort -openmp -o test4f test4f.o -L($INSTALLDIR)/lib -llis
```

#### マルチプロセス環境

コンパイル

```
> ifort -c -fpp -DUSE_MPI -I($INSTALLDIR)/include test4f.F
```

リンク

```
> ifort -o test4f test4f.o -L($INSTALLDIR)/lib -llis -lmpi
```

#### マルチスレッド・マルチプロセス環境

コンパイル

```
> ifort -c -fpp -openmp -DUSE_MPI -I($INSTALLDIR)/include test4f.F
```

リンク

```
> ifort -openmp -o test4f test4f.o -L($INSTALLDIR)/lib -llis -lmpi
```

### 3.9 実行

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` にある検証プログラム `test4` または `test4f` を SGI Altix 3700 上のそれぞれの環境で

逐次環境

```
> ./test4 -i bicgstab
```

マルチスレッド環境

```
> env OMP_NUM_THREADS=2 ./test4 -i bicgstab
```

マルチプロセス環境

```
> mpirun -np 2 ./test4 -i bicgstab
```

マルチスレッド・マルチプロセス環境

```
> mpirun -np 2 env OMP_NUM_THREADS=2 ./test4 -i bicgstab
```

と入力して実行すると、以下のように解が標準出力に書き出される。

```
initial vector x      : all components set to 0
precision             : double
linear solver         : BiCGSTAB
preconditioner        : none
convergence condition : ||b-Ax||_2 <= 1.0e-12 * ||b-Ax_0||_2
```

```
matrix storage format : CSR
linear solver status  : normal end
```

```
0  1.000000e-00
1  1.000000e+00
2  1.000000e-00
3  1.000000e+00
4  1.000000e-00
5  1.000000e+00
6  1.000000e+00
7  1.000000e-00
8  1.000000e+00
9  1.000000e-00
10 1.000000e+00
11 1.000000e-00
```

### 3.10 プロセス上での自由度について

MPI プロセスを複数使用する場合には,  $global\_n = 0$ ,  $local\_n \geq 0$  であってもよい. すなわち, 一つ以上のプロセスにおいて自由度を 0 とすることができる. ただし, その場合においても  $global\_n = 0$  ならば  $local\_n$  の総和は 0 より大きくなければならない.



## 4 4倍精度演算

反復法の計算では、丸め誤差の影響によって収束が停滞することがある。本ライブラリでは、long double 型及び倍精度浮動小数点数を 2 個用いた”double-double” [51, 52] 型の 4 倍精度演算を用いることにより、収束を改善することが可能である。double-double 型演算では、浮動小数  $a$  を  $a = a.hi + a.lo$ ,  $\frac{1}{2}ulp(a.hi) \geq |a.lo|$  (上位  $a.hi$  と下位  $a.lo$  は倍精度浮動小数) により定義し、Dekker[53] と Knuth[54] のアルゴリズムに基づいて倍精度の四則演算の組み合わせにより 4 倍精度演算を実現する。double-double 型の演算は一般に Fortran の 4 倍精度演算より高速である [55] が、Fortran の表現形式 [56] では仮数部が 112 ビットであるのに対して、倍精度浮動小数を 2 個使用するため、仮数部が 104 ビットとなり、8 ビット少ない。また、指数部は倍精度浮動小数と同じ 11 ビットである。

double-double 型演算では、入力として与えられる行列、ベクトル、及び出力の解は倍精度である。ユーザプログラムは 4 倍精度変数を直接扱うことはなく、オプションとして 4 倍精度演算を使用するかどうかを指定するだけでよい。なお、Intel 系のアーキテクチャに対しては Streaming SIMD Extensions (SSE) 命令を用いて高速化を行う [57]。

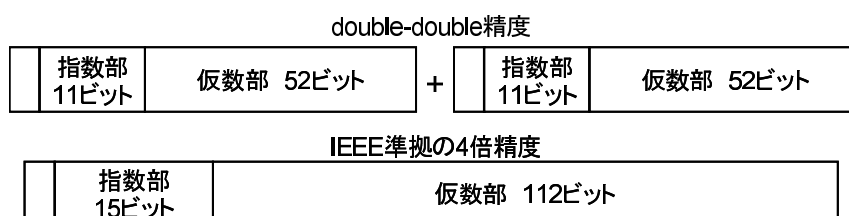


図 2: double-double 型のビット数

### 4.1 4倍精度演算の使用

Toeplitz 行列

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & & & & & \\ 0 & 2 & 1 & & & & \\ \gamma & 0 & 2 & 1 & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \gamma & 0 & 2 & 1 \\ & & & & \gamma & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

に対する線型方程式  $Ax = b$  を指定された解法で解き、解を標準出力に書き出す検証プログラムが test5.c である。右辺ベクトル  $b$  は解  $x$  がすべて 1 となるよう設定される。 $n$  は行列  $A$  の次数である。test5 において、

#### 倍精度の場合

```
> ./test5 200 2.0 -f double
```

または

```
> ./test5 200 2.0
```

と入力して実行すると、以下の結果が得られる.

```
n = 200, gamma = 2.000000
```

```
initial vector x      : all components set to 0
precision             : double
linear solver         : BiCG
preconditioner        : none
convergence condition : ||b-Ax||_2 <= 1.0e-12 * ||b-Ax_0||_2
matrix storage format : CSR
linear solver status  : normal end
```

```
BiCG: number of iterations = 1001 (double = 1001, quad = 0)
BiCG: elapsed time         = 2.044368e-02 sec.
BiCG: preconditioner      = 4.768372e-06 sec.
BiCG: matrix creation     = 4.768372e-06 sec.
BiCG: linear solver       = 2.043891e-02 sec.
BiCG: relative residual   = 8.917591e+01
```

#### 4倍精度の場合

```
> ./test5 200 2.0 -f quad
```

と入力して実行すると、以下の結果が得られる.

```
n = 200, gamma = 2.000000
```

```
initial vector x      : all components set to 0
precision             : quad
linear solver         : BiCG
preconditioner        : none
convergence condition : ||b-Ax||_2 <= 1.0e-12 * ||b-Ax_0||_2
matrix storage format : CSR
linear solver status  : normal end
```

```
BiCG: number of iterations = 230 (double = 230, quad = 0)
BiCG: elapsed time         = 2.267408e-02 sec.
BiCG: preconditioner      = 4.549026e-04 sec.
BiCG: matrix creation     = 5.006790e-06 sec.
BiCG: linear solver       = 2.221918e-02 sec.
BiCG: relative residual   = 6.499145e-11
```

## 5 行列格納形式

本節では、ライブラリで使用できる行列の格納形式について述べる。行列の行 (列) 番号は 0 から始まるものとする。次数  $n \times n$  の行列  $A = (a_{ij})$  の非零要素数を  $nnz$  とする。

### 5.1 Compressed Sparse Row (CSR)

CSR 形式では、データを 3 つの配列 ( $ptr, index, value$ ) に格納する。

- 長さ  $nnz$  の倍精度配列  $value$  は、行列  $A$  の非零要素の値を行方向に沿って格納する。
- 長さ  $nnz$  の整数配列  $index$  は、配列  $value$  に格納された非零要素の列番号を格納する。
- 長さ  $n + 1$  の整数配列  $ptr$  は、配列  $value$  と  $index$  の各行の開始位置を格納する。

#### 5.1.1 行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)

行列  $A$  の CSR 形式での格納方法を図 3 に示す。この行列を CSR 形式で作成する場合、プログラムは以下のように記述する。

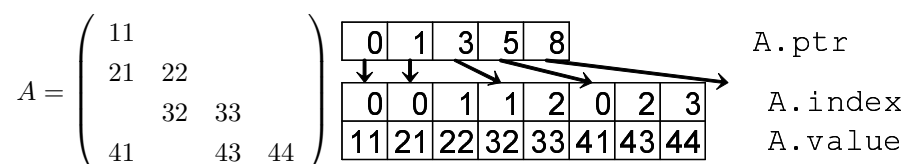


図 3: CSR 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

#### 逐次・マルチスレッド環境

```
1: LIS_INT n, nnz;
2: LIS_INT *ptr, *index;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: n = 4; nnz = 8;
6: ptr = (LIS_INT *)malloc( (n+1)*sizeof(int) );
7: index = (LIS_INT *)malloc( nnz*sizeof(int) );
8: value = (LIS_SCALAR *)malloc( nnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
9: lis_matrix_create(0, &A);
10: lis_matrix_set_size(A, 0, n);
11:
12: ptr[0] = 0; ptr[1] = 1; ptr[2] = 3; ptr[3] = 5; ptr[4] = 8;
13: index[0] = 0; index[1] = 0; index[2] = 1; index[3] = 1;
14: index[4] = 2; index[5] = 0; index[6] = 2; index[7] = 3;
15: value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 22; value[3] = 32;
16: value[4] = 33; value[5] = 41; value[6] = 43; value[7] = 44;
17:
18: lis_matrix_set_csr(nnz, ptr, index, value, A);
19: lis_matrix_assemble(A);
```

### 5.1.2 行列の作成 (マルチプロセス環境)

2 プロセス上への行列  $A$  の CSR 形式での格納方法を図 4 に示す. 2 プロセス上にこの行列を CSR 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

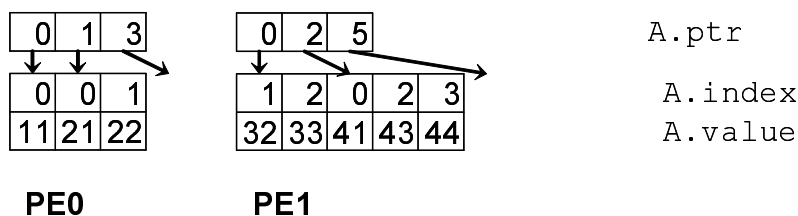


図 4: CSR 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

マルチプロセス環境

```

1: LIS_INT i,k,n,nnz,my_rank;
2: LIS_INT *ptr,*index;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,&my_rank);
6: if( my_rank==0 ) {n = 2; nnz = 3;}
7: else {n = 2; nnz = 5;}
8: ptr = (LIS_INT *)malloc( (n+1)*sizeof(int) );
9: index = (LIS_INT *)malloc( nnz*sizeof(int) );
10: value = (LIS_SCALAR *)malloc( nnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
11: lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD,&A);
12: lis_matrix_set_size(A,n,0);
13: if( my_rank==0 ) {
14:     ptr[0] = 0; ptr[1] = 1; ptr[2] = 3;
15:     index[0] = 0; index[1] = 0; index[2] = 1;
16:     value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 22;}
17: else {
18:     ptr[0] = 0; ptr[1] = 2; ptr[2] = 5;
19:     index[0] = 1; index[1] = 2; index[2] = 0; index[3] = 2; index[4] = 3;
20:     value[0] = 32; value[1] = 33; value[2] = 41; value[3] = 43; value[4] = 44;}
21: lis_matrix_set_csr(nnz,ptr,index,value,A);
22: lis_matrix_assemble(A);

```

### 5.1.3 関連する関数

配列の関連付け

CSR 形式の配列を行列  $A$  に関連付けるには, 関数

- C LIS\_INT lis\_matrix\_set\_csr(LIS\_INT nnz, LIS\_INT ptr[], LIS\_INT index[], LIS\_SCALAR value[], LIS\_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis\_matrix\_set\_csr(LIS\_INTEGER nnz, LIS\_INTEGER ptr(), LIS\_INTEGER index(), LIS\_SCALAR value(), LIS\_MATRIX A, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる.

## 5.2 Compressed Sparse Column (CSC)

CSC 形式では、データを 3 つの配列 (`ptr`, `index`, `value`) に格納する。

- 長さ  $nnz$  の倍精度配列 `value` は、行列  $A$  の非零要素の値を列方向に沿って格納する。
- 長さ  $nnz$  の整数配列 `index` は、配列 `value` に格納された非零要素の行番号を格納する。
- 長さ  $n + 1$  の整数配列 `ptr` は、配列 `value` と `index` の各列の開始位置を格納する。

### 5.2.1 行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)

行列  $A$  の CSC 形式での格納方法を図 5 に示す。この行列を CSC 形式で作成する場合、プログラムは以下のように記述する。

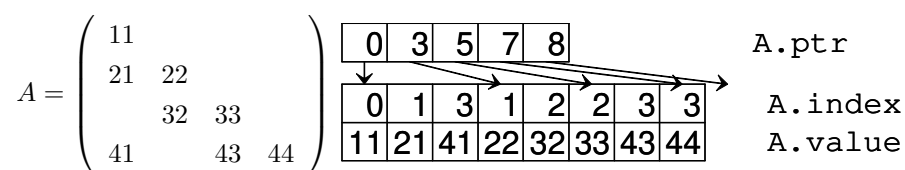


図 5: CSC 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

逐次・マルチスレッド環境

```
1: LIS_INT n, nnz;
2: LIS_INT *ptr, *index;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: n = 4; nnz = 8;
6: ptr = (LIS_INT *)malloc( (n+1)*sizeof(int) );
7: index = (LIS_INT *)malloc( nnz*sizeof(int) );
8: value = (LIS_SCALAR *)malloc( nnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
9: lis_matrix_create(0, &A);
10: lis_matrix_set_size(A, 0, n);
11:
12: ptr[0] = 0; ptr[1] = 3; ptr[2] = 5; ptr[3] = 7; ptr[4] = 8;
13: index[0] = 0; index[1] = 1; index[2] = 3; index[3] = 1;
14: index[4] = 2; index[5] = 2; index[6] = 3; index[7] = 3;
15: value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 41; value[3] = 22;
16: value[4] = 32; value[5] = 33; value[6] = 43; value[7] = 44;
17:
18: lis_matrix_set_csc(nnz, ptr, index, value, A);
19: lis_matrix_assemble(A);
```

## 5.2.2 行列の作成 (マルチプロセス環境)

2 プロセス上への行列  $A$  の CSC 形式での格納方法を図 6 に示す. 2 プロセス上にこの行列を CSC 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

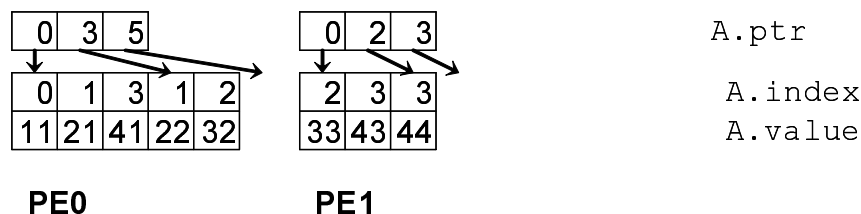


図 6: CSC 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

マルチプロセス環境

```

1: LIS_INT i,k,n,nnz,my_rank;
2: LIS_INT *ptr,*index;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,&my_rank);
6: if( my_rank==0 ) {n = 2; nnz = 3;}
7: else {n = 2; nnz = 5;}
8: ptr = (LIS_INT *)malloc( (n+1)*sizeof(int) );
9: index = (LIS_INT *)malloc( nnz*sizeof(int) );
10: value = (LIS_SCALAR *)malloc( nnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
11: lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD,&A);
12: lis_matrix_set_size(A,n,0);
13: if( my_rank==0 ) {
14:     ptr[0] = 0; ptr[1] = 3; ptr[2] = 5;
15:     index[0] = 0; index[1] = 1; index[2] = 3; index[3] = 1; index[4] = 2;
16:     value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 41; value[3] = 22; value[4] = 32;
17: } else {
18:     ptr[0] = 0; ptr[1] = 2; ptr[2] = 3;
19:     index[0] = 2; index[1] = 3; index[2] = 3;
20:     value[0] = 33; value[1] = 43; value[2] = 44;
21: lis_matrix_set_csc(nnz,ptr,index,value,A);
22: lis_matrix_assemble(A);

```

## 5.2.3 関連する関数

配列の関連付け

CSC 形式の配列を行列  $A$  に関連付けるには, 関数

- C        LIS\_INT lis\_matrix\_set\_csc(LIS\_INT nnz, LIS\_INT ptr[], LIS\_INT index[], LIS\_SCALAR value[], LIS\_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis\_matrix\_set\_csc(LIS\_INTEGER nnz, LIS\_INTEGER ptr(), LIS\_INTEGER index(), LIS\_SCALAR value(), LIS\_MATRIX A, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる.

### 5.3 Modified Compressed Sparse Row (MSR)

MSR 形式では、データを2つの配列 (index,value) に格納する。ndz を対角部分の零要素数とする。

- 長さ  $nnz + ndz + 1$  の倍精度配列 value は、第  $n$  要素までは行列  $A$  の対角部分を格納する。第  $n + 1$  要素は使用しない。第  $n + 2$  要素からは行列  $A$  の対角部分以外の非零要素の値を行方向に沿って格納する。
- 長さ  $nnz + ndz + 1$  の整数配列 index は、第  $n + 1$  要素までは行列  $A$  の非対角部分の各行の開始位置を格納する。第  $n + 2$  要素からは行列  $A$  の非対角部分の配列 value に格納された非零要素の列番号を格納する。

#### 5.3.1 行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)

行列  $A$  の MSR 形式での格納方法を図 7 に示す。この行列を MSR 形式で作成する場合、プログラムは以下のように記述する。

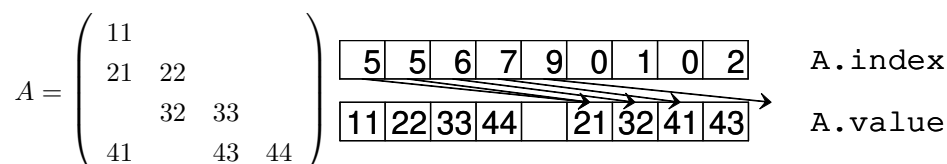


図 7: MSR 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

逐次・マルチスレッド環境

```

1: LIS_INT n,nnz,ndz;
2: LIS_INT *index;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: n = 4; nnz = 8; ndz = 0;
6: index = (LIS_INT *)malloc( (nnz+ndz+1)*sizeof(int) );
7: value = (LIS_SCALAR *)malloc( (nnz+ndz+1)*sizeof(LIS_SCALAR) );
8: lis_matrix_create(0,&A);
9: lis_matrix_set_size(A,0,n);
10:
11: index[0] = 5; index[1] = 5; index[2] = 6; index[3] = 7;
12: index[4] = 9; index[5] = 0; index[6] = 1; index[7] = 0; index[8] = 2;
13: value[0] = 11; value[1] = 22; value[2] = 33; value[3] = 44;
14: value[4] = 0; value[5] = 21; value[6] = 32; value[7] = 41; value[8] = 43;
15:
16: lis_matrix_set_msr(nnz,ndz,index,value,A);
17: lis_matrix_assemble(A);

```

### 5.3.2 行列の作成 (マルチプロセス環境)

2 プロセス上への行列  $A$  の MSR 形式での格納方法を図 8 に示す. 2 プロセス上にこの行列を MSR 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

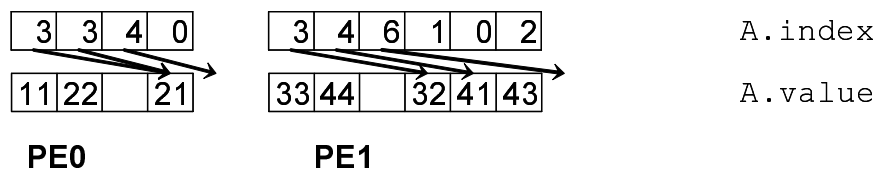


図 8: MSR 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

マルチプロセス環境

```

1: LIS_INT i,k,n,nnz,ndz,my_rank;
2: LIS_INT *index;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,&my_rank);
6: if( my_rank==0 ) {n = 2; nnz = 3; ndz = 0;}
7: else {n = 2; nnz = 5; ndz = 0;}
8: index = (LIS_INT *)malloc( (nnz+ndz+1)*sizeof(int) );
9: value = (LIS_SCALAR *)malloc( (nnz+ndz+1)*sizeof(LIS_SCALAR) );
10: lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD,&A);
11: lis_matrix_set_size(A,n,0);
12: if( my_rank==0 ) {
13:     index[0] = 3; index[1] = 3; index[2] = 4; index[3] = 0;
14:     value[0] = 11; value[1] = 22; value[2] = 0; value[3] = 21;}
15: else {
16:     index[0] = 3; index[1] = 4; index[2] = 6; index[3] = 1;
17:     index[4] = 0; index[5] = 2;
18:     value[0] = 33; value[1] = 44; value[2] = 0; value[3] = 32;
19:     value[4] = 41; value[5] = 43;}
20: lis_matrix_set_msr(nnz,ndz,index,value,A);
21: lis_matrix_assemble(A);

```

### 5.3.3 関連する関数

配列の関連付け

MSR 形式の配列を行列  $A$  に関連付けるには, 関数

- C LIS\_INT lis\_matrix\_set\_msr(LIS\_INT nnz, LIS\_INT ndz, LIS\_INT index[], LIS\_SCALAR value[], LIS\_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis\_matrix\_set\_msr(LIS\_INTEGER nnz, LIS\_INTEGER ndz, LIS\_INTEGER index(), LIS\_SCALAR value(), LIS\_MATRIX A, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる.











### 5.5.2 行列の作成 (マルチプロセス環境)

2 プロセス上への行列  $A$  の ELL 形式での格納方法を図 13 に示す. 2 プロセス上にこの行列を ELL 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

<table border="1"><tr><td>0</td><td>0</td><td>0</td><td>1</td></tr><tr><td>11</td><td>21</td><td>0</td><td>22</td></tr></table>	0	0	0	1	11	21	0	22	<table border="1"><tr><td>1</td><td>0</td><td>2</td><td>2</td><td>2</td><td>3</td></tr><tr><td>32</td><td>41</td><td>33</td><td>43</td><td>0</td><td>44</td></tr></table>	1	0	2	2	2	3	32	41	33	43	0	44	A.index A.value
0	0	0	1																			
11	21	0	22																			
1	0	2	2	2	3																	
32	41	33	43	0	44																	
PE0	PE1																					

図 13: ELL 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

マルチプロセス環境

```
1: LIS_INT i,n,maxnzs,my_rank;
2: LIS_INT *index;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,&my_rank);
6: if( my_rank==0 ) {n = 2; maxnzs = 2;}
7: else {n = 2; maxnzs = 3;}
8: index = (LIS_INT *)malloc( n*maxnzs*sizeof(int) );
9: value = (LIS_SCALAR *)malloc( n*maxnzs*sizeof(LIS_SCALAR) );
10: lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD,&A);
11: lis_matrix_set_size(A,n,0);
12: if( my_rank==0 ) {
13:     index[0] = 0; index[1] = 0; index[2] = 0; index[3] = 1;
14:     value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 0; value[3] = 22;}
15: else {
16:     index[0] = 1; index[1] = 0; index[2] = 2; index[3] = 2; index[4] = 2;
17:     index[5] = 3;
18:     value[0] = 32; value[1] = 41; value[2] = 33; value[3] = 43; value[4] = 0;
19:     value[5] = 44;}
20: lis_matrix_set_ell(maxnzs,index,value,A);
21: lis_matrix_assemble(A);
```

### 5.5.3 関連する関数

配列の関連付け

ELL 形式の配列を行列  $A$  に関連付けるには, 関数

- C LIS\_INT lis\_matrix\_set\_ell(LIS\_INT maxnzs, LIS\_INT index[], LIS\_SCALAR value[], LIS\_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis\_matrix\_set\_ell(LIS\_INTEGER maxnzs, LIS\_INTEGER index(), LIS\_SCALAR value(), LIS\_MATRIX A, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる.

## 5.6 Jagged Diagonal (JAD)

JAD 形式では、最初に各行の非零要素数の大きい順に行の並び替えを行い、各行の非零要素を列方向に沿って格納する。JAD 形式では、データを 4 つの配列 (`perm`, `ptr`, `index`, `value`) に格納する。`maxnzs` を行列  $A$  の各行での非零要素数の最大値とする。

- 長さ  $n$  の整数配列 `perm` は、並び替えた行番号を格納する。
- 長さ  $nnz$  の倍精度配列 `value` は、並び替えられた行列  $A$  の鋸歯状対角要素の値を格納する。最初の鋸歯状対角要素は各行の第 1 非零要素からなる。次の鋸歯状対角要素は各行の第 2 非零要素からなる。これを順次繰り返していく。
- 長さ  $nnz$  の整数配列 `index` は、配列 `value` に格納された非零要素の列番号を格納する。
- 長さ  $maxnzs + 1$  の整数配列 `ptr` は、各鋸歯状対角要素の開始位置を格納する。

マルチスレッド環境では以下のように格納する。

データを 4 つの配列 (`perm`, `ptr`, `index`, `value`) に格納する。 $nprocs$  をスレッド数とする。 $maxnzs_p$  を行列  $A$  を行ブロック分割した部分行列の各行での非零要素数の最大値とする。 $maxmaxnzs$  は配列  $maxnzs_p$  の値の最大値である。

- 長さ  $n$  の整数配列 `perm` は、行列  $A$  を行ブロック分割した部分行列を並び替えた行番号を格納する。
- 長さ  $nnz$  の倍精度配列 `value` は、並び替えられた行列  $A$  の鋸歯状対角要素の値を格納する。最初の鋸歯状対角要素は各行の第 1 非零要素からなる。次の鋸歯状対角要素は各行の第 2 非零要素からなる。これを順次繰り返していく。
- 長さ  $nnz$  の整数配列 `index` は、配列 `value` に格納された非零要素の列番号を格納する。
- 長さ  $nprocs \times (maxmaxnzs + 1)$  の整数配列 `ptr` は、行列  $A$  を行ブロック分割した部分行列の各鋸歯状対角要素の開始位置を格納する。

### 5.6.1 行列の作成 (逐次環境)

行列  $A$  の JAD 形式での格納方法を図 14 に示す. この行列を JAD 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

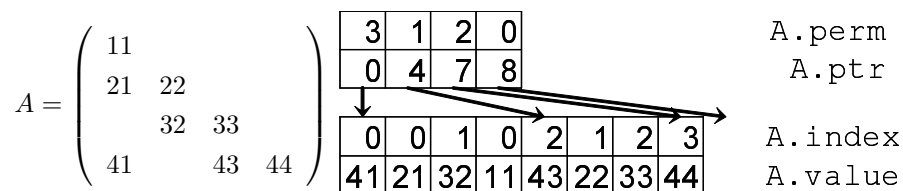


図 14: JAD 形式のデータ構造 (逐次環境)

逐次環境

```

1: LIS_INT n, nnz, maxnzs;
2: LIS_INT *perm, *ptr, *index;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: n = 4; nnz = 8; maxnzs = 3;
6: perm = (LIS_INT *)malloc( n*sizeof(int) );
7: ptr = (LIS_INT *)malloc( (maxnzs+1)*sizeof(int) );
8: index = (LIS_INT *)malloc( nnz*sizeof(int) );
9: value = (LIS_SCALAR *)malloc( nnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
10: lis_matrix_create(0, &A);
11: lis_matrix_set_size(A, 0, n);
12:
13: perm[0] = 3; perm[1] = 1; perm[2] = 2; perm[3] = 0;
14: ptr[0] = 0; ptr[1] = 4; ptr[2] = 7; ptr[3] = 8;
15: index[0] = 0; index[1] = 0; index[2] = 1; index[3] = 0;
16: index[4] = 2; index[5] = 1; index[6] = 2; index[7] = 3;
17: value[0] = 41; value[1] = 21; value[2] = 32; value[3] = 11;
18: value[4] = 43; value[5] = 22; value[6] = 33; value[7] = 44;
19:
20: lis_matrix_set_jad(nnz, maxnzs, perm, ptr, index, value, A);
21: lis_matrix_assemble(A);
  
```

### 5.6.2 行列の作成 (マルチスレッド環境)

2スレッド上への行列  $A$  の JAD 形式での格納方法を図 15 に示す. 2スレッド上にこの行列を JAD 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

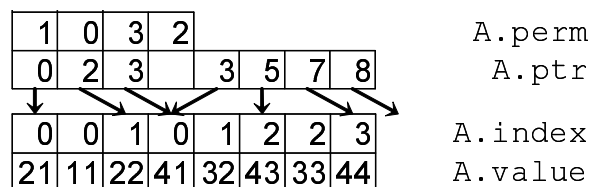


図 15: JAD 形式のデータ構造 (マルチスレッド環境)

マルチスレッド環境

```

1: LIS_INT n, nnz, maxmaxnzs, nprocs;
2: LIS_INT *perm, *ptr, *index;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: n = 4; nnz = 8; maxmaxnzs = 3; nprocs = 2;
6: perm = (LIS_INT *)malloc( n*sizeof(int) );
7: ptr = (LIS_INT *)malloc( nprocs*(maxmaxnzs+1)*sizeof(int) );
8: index = (LIS_INT *)malloc( nnz*sizeof(int) );
9: value = (LIS_SCALAR *)malloc( nnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
10: lis_matrix_create(0, &A);
11: lis_matrix_set_size(A, 0, n);
12:
13: perm[0] = 1; perm[1] = 0; perm[2] = 3; perm[3] = 2;
14: ptr[0] = 0; ptr[1] = 2; ptr[2] = 3; ptr[3] = 0;
15: ptr[4] = 3; ptr[5] = 5; ptr[6] = 7; ptr[7] = 8;
16: index[0] = 0; index[1] = 0; index[2] = 1; index[3] = 0;
17: index[4] = 1; index[5] = 2; index[6] = 2; index[7] = 3;
18: value[0] = 21; value[1] = 11; value[2] = 22; value[3] = 41;
19: value[4] = 32; value[5] = 43; value[6] = 33; value[7] = 44;
20:
21: lis_matrix_set_jad(nnz, maxmaxnzs, perm, ptr, index, value, A);
22: lis_matrix_assemble(A);

```



### 5.6.3 行列の作成 (マルチプロセス環境)

2 プロセス上への行列  $A$  の JAD 形式での格納方法を図 16 に示す. 2 プロセス上にこの行列を JAD 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

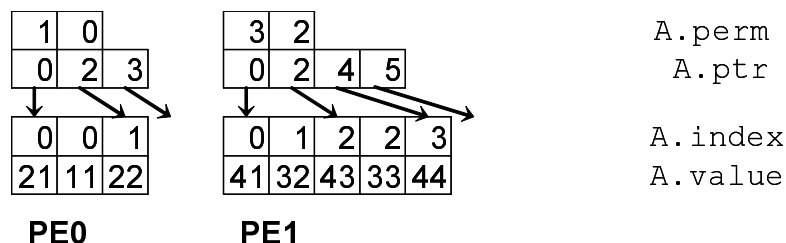


図 16: JAD 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

マルチプロセス環境

```

1: LIS_INT i,n,nnz,maxnzs,my_rank;
2: LIS_INT *perm,*ptr,*index;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,&my_rank);
6: if( my_rank==0 ) {n = 2; nnz = 3; maxnzs = 2;}
7: else {n = 2; nnz = 5; maxnzs = 3;}
8: perm = (LIS_INT *)malloc( n*sizeof(int) );
9: ptr = (LIS_INT *)malloc( (maxnzs+1)*sizeof(int) );
10: index = (LIS_INT *)malloc( nnz*sizeof(int) );
11: value = (LIS_SCALAR *)malloc( nnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
12: lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD,&A);
13: lis_matrix_set_size(A,n,0);
14: if( my_rank==0 ) {
15:     perm[0] = 1; perm[1] = 0;
16:     ptr[0] = 0; ptr[1] = 2; ptr[2] = 3;
17:     index[0] = 0; index[1] = 0; index[2] = 1;
18:     value[0] = 21; value[1] = 11; value[2] = 22;}
19: else {
20:     perm[0] = 3; perm[1] = 2;
21:     ptr[0] = 0; ptr[1] = 2; ptr[2] = 4; ptr[3] = 5;
22:     index[0] = 0; index[1] = 1; index[2] = 2; index[3] = 2; index[4] = 3;
23:     value[0] = 41; value[1] = 32; value[2] = 43; value[3] = 33; value[4] = 44;}
24: lis_matrix_set_jad(nnz,maxnzs,perm,ptr,index,value,A);
25: lis_matrix_assemble(A);

```

### 5.6.4 関連する関数

#### 配列の関連付け

JAD 形式の配列を行列  $A$  に関連付けるには, 関数

- C LIS\_INT lis\_matrix\_set\_jad(LIS\_INT nnz, LIS\_INT maxnzs, LIS\_INT perm[], LIS\_INT ptr[], LIS\_INT index[], LIS\_SCALAR value[], LIS\_MATRIX A)

- Fortran subroutine `lis_matrix_set_jad(LIS_INTEGER nnz, LIS_INTEGER maxnzs,`  
`LIS_INTEGER perm(), LIS_INTEGER ptr(), LIS_INTEGER index(), LIS_SCALAR value(),`  
`LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる.

## 5.7 Block Sparse Row (BSR)

BSR 形式では、行列を  $r \times c$  の大きさの部分行列 (ブロックと呼ぶ) に分解する。BSR 形式では、CSR 形式と同様の手順で非零ブロック (少なくとも 1 つの非零要素が存在する) を格納する。  $nr = n/r$ ,  $bnnz$  を  $A$  の非零ブロック数とする。BSR 形式では、データを 3 つの配列 (`bptr`, `bindex`, `value`) に格納する。

- 長さ  $bnnz \times r \times c$  の倍精度配列 `value` は、非零ブロックの全要素の値を格納する。
- 長さ  $bnnz$  の整数配列 `bindex` は、非零ブロックのブロック列番号を格納する。
- 長さ  $nr + 1$  の整数配列 `bptr` は、配列 `bindex` のブロック行の開始位置を格納する。

### 5.7.1 行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)

行列  $A$  の BSR 形式での格納方法を図 17 に示す。この行列を BSR 形式で作成する場合、プログラムは以下のように記述する。

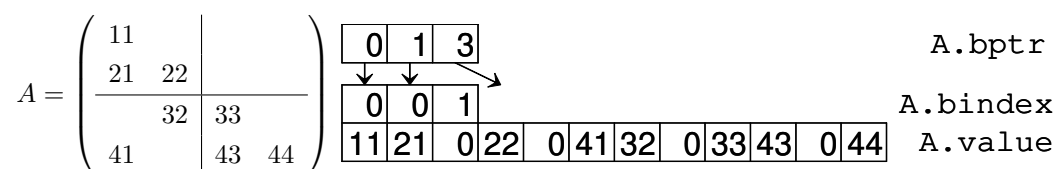


図 17: BSR 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

逐次・マルチスレッド環境

```

1: LIS_INT n, bnr, bnc, nr, nc, bnnz;
2: LIS_INT *bptr, *bindex;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: n = 4; bnr = 2; bnc = 2; bnnz = 3; nr = (n-1)/bnr+1; nc = (n-1)/bnc+1;
6: bptr = (LIS_INT *)malloc( (nr+1)*sizeof(int) );
7: bindex = (LIS_INT *)malloc( bnnz*sizeof(int) );
8: value = (LIS_SCALAR *)malloc( bnr*bnc*bnnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
9: lis_matrix_create(0, &A);
10: lis_matrix_set_size(A, 0, n);
11:
12: bptr[0] = 0; bptr[1] = 1; bptr[2] = 3;
13: bindex[0] = 0; bindex[1] = 0; bindex[2] = 1;
14: value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 0; value[3] = 22;
15: value[4] = 0; value[5] = 41; value[6] = 32; value[7] = 0;
16: value[8] = 33; value[9] = 43; value[10] = 0; value[11] = 44;
17:
18: lis_matrix_set_bsr(bnr, bnc, bnnz, bptr, bindex, value, A);
19: lis_matrix_assemble(A);

```

### 5.7.2 行列の作成 (マルチプロセス環境)

2 プロセス上への行列  $A$  の BSR 形式での格納方法を図 18 に示す. 2 プロセス上にこの行列を BSR 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

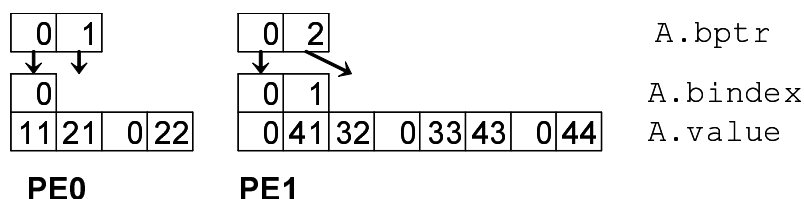


図 18: BSR 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

マルチプロセス環境

```

1: LIS_INT n, bnr, bnc, nr, nc, bnnz, my_rank;
2: LIS_INT *bptr, *bindex;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &my_rank);
6: if( my_rank==0 ) {n = 2; bnr = 2; bnc = 2; bnnz = 1; nr = (n-1)/bnr+1; nc = (n-1)/bnc+1;}
7: else {n = 2; bnr = 2; bnc = 2; bnnz = 2; nr = (n-1)/bnr+1; nc = (n-1)/bnc+1;}
8: bptr = (LIS_INT *)malloc( (nr+1)*sizeof(int) );
9: bindex = (LIS_INT *)malloc( bnnz*sizeof(int) );
10: value = (LIS_SCALAR *)malloc( bnr*bnc*bnnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
11: lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD, &A);
12: lis_matrix_set_size(A, n, 0);
13: if( my_rank==0 ) {
14:     bptr[0] = 0; bptr[1] = 1;
15:     bindex[0] = 0;
16:     value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 0; value[3] = 22;}
17: else {
18:     bptr[0] = 0; bptr[1] = 2;
19:     bindex[0] = 0; bindex[1] = 1;
20:     value[0] = 0; value[1] = 41; value[2] = 32; value[3] = 0;
21:     value[4] = 33; value[5] = 43; value[6] = 0; value[7] = 44;}
22: lis_matrix_set_bsr(bnr, bnc, bnnz, bptr, bindex, value, A);
23: lis_matrix_assemble(A);

```

### 5.7.3 関連する関数

配列の関連付け

BSR 形式の配列を行列  $A$  に関連付けるには, 関数

- C LIS\_INT lis\_matrix\_set\_bsr(LIS\_INT bnr, LIS\_INT bnc, LIS\_INT bnnz, LIS\_INT bptr[], LIS\_INT bindex[], LIS\_SCALAR value[], LIS\_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis\_matrix\_set\_bsr(LIS\_INTEGER bnr, LIS\_INTEGER bnc, LIS\_INTEGER bnnz, LIS\_INTEGER bptr(), LIS\_INTEGER bindex(), LIS\_SCALAR value(), LIS\_MATRIX A, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる.

## 5.8 Block Sparse Column (BSC)

BSC 形式では、行列を  $r \times c$  の大きさの部分行列 (ブロックと呼ぶ) に分解する。BSC 形式では、CSC 形式と同様の手順で非零ブロック (少なくとも 1 つの非零要素が存在する) を格納する。  $nc = n/c$ ,  $bnnz$  を  $A$  の非零ブロック数とする。BSC 形式では、データを 3 つの配列 (`bptr`, `bindex`, `value`) に格納する。

- 長さ  $bnnz \times r \times c$  の倍精度配列 `value` は、非零ブロックの全要素の値を格納する。
- 長さ  $bnnz$  の整数配列 `bindex` は、非零ブロックのブロック行番号を格納する。
- 長さ  $nc + 1$  の整数配列 `bptr` は、配列 `bindex` のブロック列の開始位置を格納する。

### 5.8.1 行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)

行列  $A$  の BSC 形式での格納方法を図 19 に示す。この行列を BSC 形式で作成する場合、プログラムは以下のように記述する。

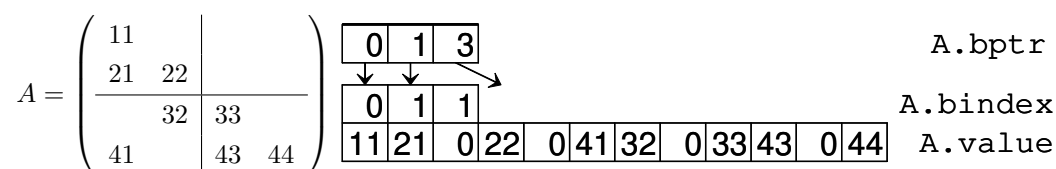


図 19: BSC 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

逐次・マルチスレッド環境

```

1: LIS_INT n, bnr, bnc, nr, nc, bnnz;
2: LIS_INT *bptr, *bindex;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: n = 4; bnr = 2; bnc = 2; bnnz = 3; nr = (n-1)/bnr+1; nc = (n-1)/bnc+1;
6: bptr = (LIS_INT *)malloc( (nc+1)*sizeof(int) );
7: bindex = (LIS_INT *)malloc( bnnz*sizeof(int) );
8: value = (LIS_SCALAR *)malloc( bnr*bnc*bnnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
9: lis_matrix_create(0, &A);
10: lis_matrix_set_size(A, 0, n);
11:
12: bptr[0] = 0; bptr[1] = 1; bptr[2] = 3;
13: bindex[0] = 0; bindex[1] = 1; bindex[2] = 1;
14: value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 0; value[3] = 22;
15: value[4] = 0; value[5] = 41; value[6] = 32; value[7] = 0;
16: value[8] = 33; value[9] = 43; value[10] = 0; value[11] = 44;
17:
18: lis_matrix_set_bsc(bnr, bnc, bnnz, bptr, bindex, value, A);
19: lis_matrix_assemble(A);

```

### 5.8.2 行列の作成 (マルチプロセス環境)

2 プロセス上への行列  $A$  の BSC 形式での格納方法を図 20 に示す. 2 プロセス上にこの行列を BSC 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

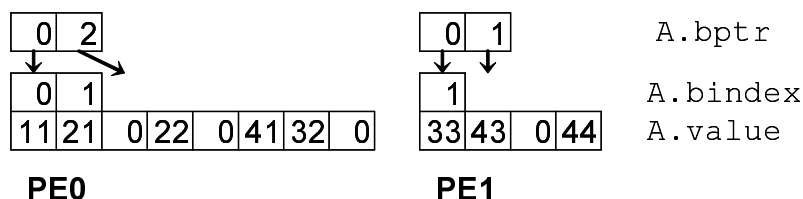


図 20: BSC 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

マルチプロセス環境

```

1: LIS_INT n, bnr, bnc, nr, nc, bnnz, my_rank;
2: LIS_INT *bptr, *bindex;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &my_rank);
6: if( my_rank==0 ) {n = 2; bnr = 2; bnc = 2; bnnz = 2; nr = (n-1)/bnr+1; nc = (n-1)/bnc+1;}
7: else {n = 2; bnr = 2; bnc = 2; bnnz = 1; nr = (n-1)/bnr+1; nc = (n-1)/bnc+1;}
8: bptr = (LIS_INT *)malloc( (nr+1)*sizeof(int) );
9: bindex = (LIS_INT *)malloc( bnnz*sizeof(int) );
10: value = (LIS_SCALAR *)malloc( bnr*bnc*bnnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
11: lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD, &A);
12: lis_matrix_set_size(A, n, 0);
13: if( my_rank==0 ) {
14:     bptr[0] = 0; bptr[1] = 2;
15:     bindex[0] = 0; bindex[1] = 1;
16:     value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 0; value[3] = 22;
17:     value[4] = 0; value[5] = 41; value[6] = 32; value[7] = 0;}
18: else {
19:     bptr[0] = 0; bptr[1] = 1;
20:     bindex[0] = 1;
21:     value[0] = 33; value[1] = 43; value[2] = 0; value[3] = 44;}
22: lis_matrix_set_bsc(bnr, bnc, bnnz, bptr, bindex, value, A);
23: lis_matrix_assemble(A);

```

### 5.8.3 関連する関数

配列の関連付け

BSC 形式の配列を行列  $A$  に関連付けるには, 関数

- C LIS\_INT lis\_matrix\_set\_bsc(LIS\_INT bnr, LIS\_INT bnc, LIS\_INT bnnz, LIS\_INT bptr[], LIS\_INT bindex[], LIS\_SCALAR value[], LIS\_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis\_matrix\_set\_bsc(LIS\_INTEGER bnr, LIS\_INTEGER bnc, LIS\_INTEGER bnnz, LIS\_INTEGER bptr(), LIS\_INTEGER bindex(), LIS\_SCALAR value(), LIS\_MATRIX A, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる.

## 5.9 Variable Block Row (VBR)

VBR形式はBSR形式を一般化したものである。行と列の分割位置は配列 (`row`, `col`) で与えられる。VBR形式では、CSR形式と同様の手順で非零ブロック (少なくとも1つの非零要素が存在する) を格納する。  $nr$ ,  $nc$  をそれぞれ行分割数, 列分割数とする。  $bnnz$  を  $A$  の非零ブロック数,  $nnz$  を非零ブロックの全要素数とする。VBR形式では、データを6つの配列 (`bptr`, `bindex`, `row`, `col`, `ptr`, `value`) に格納する。

- 長さ  $nr + 1$  の整数配列 `row` は、ブロック行の開始行番号を格納する。
- 長さ  $nc + 1$  の整数配列 `col` は、ブロック列の開始列番号を格納する。
- 長さ  $bnnz$  の整数配列 `bindex` は、非零ブロックのブロック列番号を格納する。
- 長さ  $nr + 1$  の整数配列 `bptr` は、配列 `bindex` のブロック行の開始位置を格納する。
- 長さ  $nnz$  の倍精度配列 `value` は、非零ブロックの全要素の値を格納する。
- 長さ  $bnnz + 1$  の整数配列 `ptr` は、配列 `value` の非零ブロックの開始位置を格納する。

### 5.9.1 行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)

行列  $A$  の VBR 形式での格納方法を図 21 に示す. この行列を VBR 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

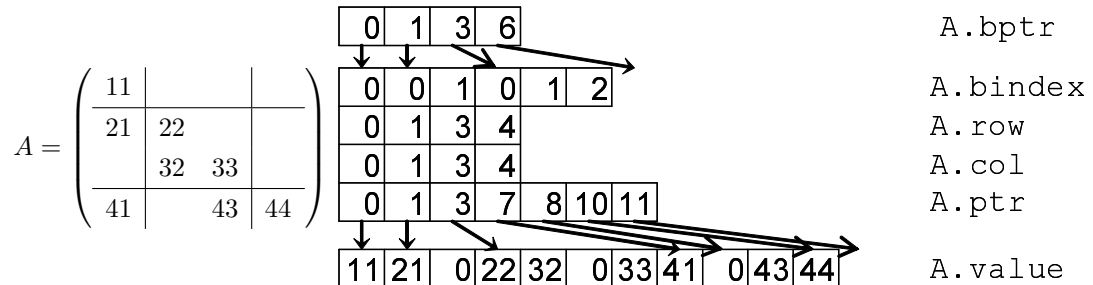


図 21: VBR 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

逐次・マルチスレッド環境

```

1: LIS_INT n, nnz, nr, nc, bnnz;
2: LIS_INT *row, *col, *ptr, *bptr, *bindex;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: n = 4; nnz = 11; bnnz = 6; nr = 3; nc = 3;
6: bptr = (LIS_INT *)malloc( (nr+1)*sizeof(int) );
7: row = (LIS_INT *)malloc( (nr+1)*sizeof(int) );
8: col = (LIS_INT *)malloc( (nc+1)*sizeof(int) );
9: ptr = (LIS_INT *)malloc( (bnnz+1)*sizeof(int) );
10: bindex = (LIS_INT *)malloc( bnnz*sizeof(int) );
11: value = (LIS_SCALAR *)malloc( nnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
12: lis_matrix_create(0, &A);
13: lis_matrix_set_size(A, 0, n);
14:
15: bptr[0] = 0; bptr[1] = 1; bptr[2] = 3; bptr[3] = 6;
16: row[0] = 0; row[1] = 1; row[2] = 3; row[3] = 4;
17: col[0] = 0; col[1] = 1; col[2] = 3; col[3] = 4;
18: bindex[0] = 0; bindex[1] = 0; bindex[2] = 1; bindex[3] = 0;
19: bindex[4] = 1; bindex[5] = 2;
20: ptr[0] = 0; ptr[1] = 1; ptr[2] = 3; ptr[3] = 7;
21: ptr[4] = 8; ptr[5] = 10; ptr[6] = 11;
22: value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 0; value[3] = 22;
23: value[4] = 32; value[5] = 0; value[6] = 33; value[7] = 41;
24: value[8] = 0; value[9] = 43; value[10] = 44;
25:
26: lis_matrix_set_vbr(nnz, nr, nc, bnnz, row, col, ptr, bptr, bindex, value, A);
27: lis_matrix_assemble(A);

```



## 5.9.2 行列の作成 (マルチプロセス環境)

2 プロセス上への行列  $A$  の VBR 形式での格納方法を図 22 に示す. 2 プロセス上にこの行列を VBR 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

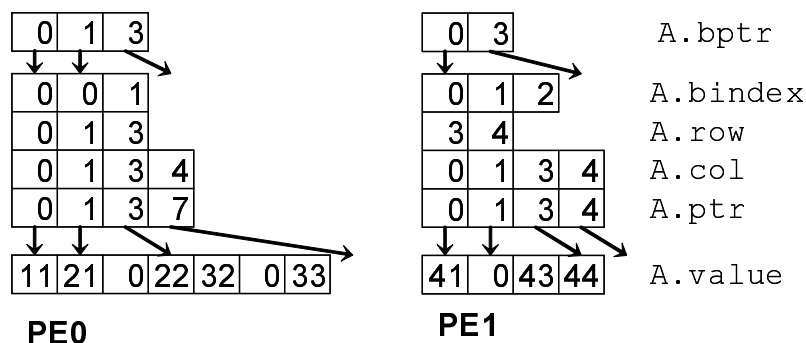


図 22: VBR 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

マルチプロセス環境

```

1: LIS_INT n, nnz, nr, nc, bnnz, my_rank;
2: LIS_INT *row, *col, *ptr, *bptr, *bindex;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &my_rank);
6: if( my_rank==0 ) {n = 2; nnz = 7; bnnz = 3; nr = 2; nc = 3;}
7: else {n = 2; nnz = 4; bnnz = 3; nr = 1; nc = 3;}
8: bptr = (LIS_INT *)malloc( (nr+1)*sizeof(int) );
9: row = (LIS_INT *)malloc( (nr+1)*sizeof(int) );
10: col = (LIS_INT *)malloc( (nc+1)*sizeof(int) );
11: ptr = (LIS_INT *)malloc( (bnnz+1)*sizeof(int) );
12: bindex = (LIS_INT *)malloc( bnnz*sizeof(int) );
13: value = (LIS_SCALAR *)malloc( nnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
14: lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD, &A);
15: lis_matrix_set_size(A, n, 0);
16: if( my_rank==0 ) {
17:     bptr[0] = 0; bptr[1] = 1; bptr[2] = 3;
18:     row[0] = 0; row[1] = 1; row[2] = 3;
19:     col[0] = 0; col[1] = 1; col[2] = 3; col[3] = 4;
20:     bindex[0] = 0; bindex[1] = 0; bindex[2] = 1;
21:     ptr[0] = 0; ptr[1] = 1; ptr[2] = 3; ptr[3] = 7;
22:     value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 0; value[3] = 22;
23:     value[4] = 32; value[5] = 0; value[6] = 33;}
24: else {
25:     bptr[0] = 0; bptr[1] = 3;
26:     row[0] = 3; row[1] = 4;
27:     col[0] = 0; col[1] = 1; col[2] = 3; col[3] = 4;
28:     bindex[0] = 0; bindex[1] = 1; bindex[2] = 2;
29:     ptr[0] = 0; ptr[1] = 1; ptr[2] = 3; ptr[3] = 4;
30:     value[0] = 41; value[1] = 0; value[2] = 43; value[3] = 44;}
31: lis_matrix_set_vbr(nnz, nr, nc, bnnz, row, col, ptr, bptr, bindex, value, A);
32: lis_matrix_assemble(A);

```

### 5.9.3 関連する関数

#### 配列の関連付け

VBR 形式の配列を行列  $A$  に関連付けるには, 関数

- C `LIS_INT lis_matrix_set_vbr(LIS_INT nnz, LIS_INT nr, LIS_INT nc, LIS_INT bnnz, LIS_INT row[], LIS_INT col[], LIS_INT ptr[], LIS_INT bptr[], LIS_INT bindex[], LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)`
- Fortran subroutine `lis_matrix_set_vbr(LIS_INTEGER nnz, LIS_INTEGER nr, LIS_INTEGER nc, LIS_INTEGER bnnz, LIS_INTEGER row(), LIS_INTEGER col(), LIS_INTEGER ptr(), LIS_INTEGER bptr(), LIS_INTEGER bindex(), LIS_SCALAR value(), LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)`

を用いる.

## 5.10 Coordinate (COO)

COO 形式では, データを 3 つの配列 (row, col, value) に格納する.

- 長さ  $nnz$  の倍精度配列 value は, 非零要素の値を格納する.
- 長さ  $nnz$  の整数配列 row は, 非零要素の行番号を格納する.
- 長さ  $nnz$  の整数配列 col は, 非零要素の列番号を格納する.

### 5.10.1 行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)

行列  $A$  の COO 形式での格納方法を図 23 に示す. この行列を COO 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

$$A = \begin{pmatrix} 11 & & & & & & & & \\ 21 & 22 & & & & & & & \\ & 32 & 33 & & & & & & \\ 41 & & 43 & 44 & & & & & \end{pmatrix} \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|c|} \hline 0 & 1 & 3 & 1 & 2 & 2 & 3 & 3 & \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 2 & 2 & 3 & \\ \hline 11 & 21 & 41 & 22 & 32 & 33 & 43 & 44 & \\ \hline \end{array} \begin{array}{l} A.\text{row} \\ A.\text{col} \\ A.\text{value} \end{array}$$

図 23: COO 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

逐次・マルチスレッド環境

```
1: LIS_INT n, nnz;
2: LIS_INT *row, *col;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: n = 4; nnz = 8;
6: row = (LIS_INT *)malloc( nnz*sizeof(int) );
7: col = (LIS_INT *)malloc( nnz*sizeof(int) );
8: value = (LIS_SCALAR *)malloc( nnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
9: lis_matrix_create(0, &A);
10: lis_matrix_set_size(A, 0, n);
11:
12: row[0] = 0; row[1] = 1; row[2] = 3; row[3] = 1;
13: row[4] = 2; row[5] = 2; row[6] = 3; row[7] = 3;
14: col[0] = 0; col[1] = 0; col[2] = 0; col[3] = 1;
15: col[4] = 1; col[5] = 2; col[6] = 2; col[7] = 3;
16: value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 41; value[3] = 22;
17: value[4] = 32; value[5] = 33; value[6] = 43; value[7] = 44;
18:
19: lis_matrix_set_coo(nnz, row, col, value, A);
20: lis_matrix_assemble(A);
```

### 5.10.2 行列の作成 (マルチプロセス環境)

2 プロセス上への行列  $A$  の COO 形式での格納方法を図 24 に示す. 2 プロセス上にこの行列を COO 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

<table border="1"><tr><td>0</td><td>1</td><td>1</td></tr><tr><td>0</td><td>0</td><td>1</td></tr><tr><td>11</td><td>21</td><td>22</td></tr></table>	0	1	1	0	0	1	11	21	22	<table border="1"><tr><td>3</td><td>2</td><td>2</td><td>3</td><td>3</td></tr><tr><td>0</td><td>1</td><td>2</td><td>2</td><td>3</td></tr><tr><td>41</td><td>32</td><td>33</td><td>43</td><td>44</td></tr></table>	3	2	2	3	3	0	1	2	2	3	41	32	33	43	44	A.row A.col A.value
0	1	1																								
0	0	1																								
11	21	22																								
3	2	2	3	3																						
0	1	2	2	3																						
41	32	33	43	44																						
<b>PE0</b>	<b>PE1</b>																									

図 24: COO 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

マルチプロセス環境

```
1: LIS_INT n, nnz, my_rank;
2: LIS_INT *row, *col;
3: LIS_SCALAR *value;
4: LIS_MATRIX A;
5: MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &my_rank);
6: if( my_rank==0 ) {n = 2; nnz = 3;}
7: else {n = 2; nnz = 5;}
8: row = (LIS_INT *)malloc( nnz*sizeof(int) );
9: col = (LIS_INT *)malloc( nnz*sizeof(int) );
10: value = (LIS_SCALAR *)malloc( nnz*sizeof(LIS_SCALAR) );
11: lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD, &A);
12: lis_matrix_set_size(A, n, 0);
13: if( my_rank==0 ) {
14:     row[0] = 0; row[1] = 1; row[2] = 1;
15:     col[0] = 0; col[1] = 0; col[2] = 1;
16:     value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 22;}
17: else {
18:     row[0] = 3; row[1] = 2; row[2] = 2; row[3] = 3; row[4] = 3;
19:     col[0] = 0; col[1] = 1; col[2] = 2; col[3] = 2; col[4] = 3;
20:     value[0] = 41; value[1] = 32; value[2] = 33; value[3] = 43; value[4] = 44;}
21: lis_matrix_set_coo(nnz, row, col, value, A);
22: lis_matrix_assemble(A);
```

### 5.10.3 関連する関数

配列の関連付け

COO 形式の配列を行列  $A$  に関連付けるには, 関数

- C LIS\_INT lis\_matrix\_set\_coo(LIS\_INT nnz, LIS\_INT row[], LIS\_INT col[], LIS\_SCALAR value[], LIS\_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis\_matrix\_set\_coo(LIS\_INTEGER nnz, LIS\_INTEGER row(), LIS\_INTEGER col(), LIS\_SCALAR value(), LIS\_MATRIX A, LIS\_INTEGER ierr)

を用いる.



### 5.11.2 行列の作成 (マルチプロセス環境)

2 プロセス上への行列  $A$  の DNS 形式での格納方法を図 26 に示す. 2 プロセス上にこの行列を DNS 形式で作成する場合, プログラムは以下のように記述する.

11	21	0	22	0	41	32	0	A.Value
0	0	0	0	33	43	0	44	
<b>PE0</b>				<b>PE1</b>				

図 26: DNS 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

マルチプロセス環境

```
1: LIS_INT n,my_rank;
2: LIS_SCALAR *value;
3: LIS_MATRIX A;
4: MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD,&my_rank);
5: if( my_rank==0 ) {n = 2;}
6: else {n = 2;}
7: value = (LIS_SCALAR *)malloc( n*n*sizeof(LIS_SCALAR) );
8: lis_matrix_create(MPI_COMM_WORLD,&A);
9: lis_matrix_set_size(A,n,0);
10: if( my_rank==0 ) {
11:     value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 0; value[3] = 22;
12:     value[4] = 0; value[5] = 0; value[6] = 0; value[7] = 0;}
13: else {
14:     value[0] = 0; value[1] = 41; value[2] = 32; value[3] = 0;
15:     value[4] = 33; value[5] = 43; value[6] = 0; value[7] = 44;}
16: lis_matrix_set_dns(value,A);
17: lis_matrix_assemble(A);
```

### 5.11.3 関連する関数

#### 配列の関連付け

DNS 形式の配列を行列  $A$  に関連付けるには, 関数

- C LIS\_INT lis\_matrix\_set\_dns(LIS\_SCALAR value[], LIS\_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis\_matrix\_set\_dns(LIS\_SCALAR value(), LIS\_MATRIX A,  
LIS\_INTEGER ierr)

を用いる.

## 6 関数

本節では、ユーザが使用できる関数について述べる。関数の解説は C を基準に記述する。配列の要素番号は、C では 0 から、Fortran では 1 から始まるものとする。なお、各ソルバの状態は以下のように定義する。

LIS_SUCCESS(0)	正常終了
LIS_ILL_OPTION(1)	オプション不正
LIS_BREAKDOWN(2)	ブレイクダウン (ゼロ除算)
LIS_OUT_OF_MEMORY(3)	メモリ不足
LIS_MAXITER(4)	最大反復回数超過
LIS_NOT_IMPLEMENTED(5)	未実装
LIS_ERR_FILE_IO(6)	ファイル I/O エラー

## 6.1 ベクトルの操作

ベクトル  $v$  の次数を  $global\_n$  とする. ベクトル  $v$  を  $nprocs$  個のプロセスで行ブロック分割する場合の各ブロックの行数を  $local\_n$  とする.  $global\_n$  をグローバルな次数,  $local\_n$  をローカルな次数と呼ぶ.

### 6.1.1 lis\_vector\_create

```
C      LIS_INT lis_vector_create(LIS_Comm comm, LIS_VECTOR *v)
Fortran subroutine lis_vector_create(LIS_Comm comm, LIS_VECTOR v,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトルを作成する.

#### 入力

`comm`                                    MPI コミュニケータ

#### 出力

`v`                                        ベクトル

`ierr`                                    リターンコード

#### 注釈

逐次, マルチスレッド環境では, `comm` の値は無視される.

### 6.1.2 lis\_vector\_destroy

```
C      LIS_INT lis_vector_destroy(LIS_VECTOR v)
Fortran subroutine lis_vector_destroy(LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

不要になったベクトルをメモリから破棄する.

#### 入力

`v`                                        メモリから破棄するベクトル

#### 出力

`ierr`                                    リターンコード



### 6.1.3 lis\_vector\_duplicate

```
C      LIS_INT lis_vector_duplicate(void *vin, LIS_VECTOR *vout)
Fortran subroutine lis_vector_duplicate(LIS_VECTOR vin, LIS_VECTOR vout,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

既存のベクトルまたは行列と同じ情報を持つベクトルを作成する。

#### 入力

vin                                      複製元のベクトルまたは行列

#### 出力

vout                                     複製先のベクトル

ierr                                     リターンコード

#### 注釈

vin には LIS\_VECOTR または LIS\_MATRIX を指定することが可能である。関数 lis\_vector\_duplicate は要素の値は複製せず、メモリ領域のみ確保する。値も複製する場合は、この関数の後に関数 lis\_vector\_copy を呼び出す。

#### 6.1.4 lis\_vector\_set\_size

```
C      LIS_INT lis_vector_set_size(LIS_VECTOR v, LIS_INT local_n,  
                                LIS_INT global_n)  
Fortran subroutine lis_vector_set_size(LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER local_n,  
                                       LIS_INTEGER global_n, LIS_INTEGER ierr)
```

##### 機能

ベクトルの次数を設定する.

##### 入力

<code>v</code>	ベクトル
<code>local_n</code>	ベクトルのローカルな次数
<code>global_n</code>	ベクトルのグローバルな次数

##### 出力

<code>ierr</code>	リターンコード
-------------------	---------

##### 注釈

`local_n` か `global_n` のどちらか一方を与えなければならない.

逐次, マルチスレッド環境では, `local_n` は `global_n` に等しい. したがって, `lis_vector_set_size(v,n,0)` と `lis_vector_set_size(v,0,n)` は, いずれも次数  $n$  のベクトルを作成する.

マルチプロセス環境においては, `lis_vector_set_size(v,n,0)` は各プロセス上に次数  $n$  の部分ベクトルを作成する. 一方, `lis_vector_set_size(v,0,n)` は各プロセス  $p$  上に次数  $m_p$  の部分ベクトルを作成する.  $m_p$  はライブラリ側で決定される.



### 6.1.7 lis\_vector\_set\_value

```
C      LIS_INT lis_vector_set_value(LIS_INT flag, LIS_INT i, LIS_SCALAR value,
      LIS_VECTOR v)
Fortran subroutine lis_vector_set_value(LIS_INTEGER flag, LIS_INTEGER i,
      LIS_SCALAR value, LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $v$  の第  $i$  行にスカラ値を代入する.

#### 入力

flag	LIS_INS.VALUE 挿入: $v[i] = value$ LIS_ADD.VALUE 加算代入: $v[i] = v[i] + value$
i	代入する場所
value	代入するスカラ値
v	ベクトル

#### 出力

v	第 $i$ 行にスカラ値が代入されたベクトル
ierr	リターンコード

#### 注釈

マルチプロセス環境では, 全体ベクトルの第  $i$  行を指定する.

### 6.1.8 lis\_vector\_get\_value

```
C      LIS_INT lis_vector_get_value(LIS_VECTOR v, LIS_INT i, LIS_SCALAR *value)
Fortran subroutine lis_vector_get_value(LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER i,
      LIS_SCALAR value, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $v$  の第  $i$  行の値を取得する。

#### 入力

<code>i</code>	取得する場所
<code>v</code>	値を取得するベクトル

#### 出力

<code>value</code>	スカラ値
<code>ierr</code>	リターンコード

#### 注釈

マルチプロセス環境では、全体ベクトルの第  $i$  行を指定する。

### 6.1.9 lis\_vector\_set\_values

```
C      LIS_INT lis_vector_set_values(LIS_INT flag, LIS_INT count, LIS_INT index[],
      LIS_SCALAR value[], LIS_VECTOR v)
Fortran subroutine lis_vector_set_values(LIS_INTEGER flag, LIS_INTEGER count,
      LIS_INTEGER index(), LIS_SCALAR value(), LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $v$  の第  $index[i]$  行にスカラ値  $value[i]$  を代入する.

#### 入力

flag	LIS_INS.VALUE 挿入: $v[index[i]] = value[i]$ LIS_ADD.VALUE 加算代入: $v[index[i]] = v[index[i]] + value[i]$
count	代入するスカラ値を格納する配列の要素数
index	代入する場所を格納する配列
value	代入するスカラ値を格納する配列
v	ベクトル

#### 出力

v	第 $index[i]$ 行にスカラ値 $value[i]$ が代入されたベクトル
ierr	リターンコード

#### 注釈

マルチプロセス環境では, 全体ベクトルの第  $index[i]$  行を指定する.

### 6.1.10 lis\_vector\_get\_values

```
C      LIS_INT lis_vector_get_values(LIS_VECTOR v, LIS_INT start, LIS_INT count,
      LIS_SCALAR value[])
Fortran subroutine lis_vector_get_values(LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER start,
      LIS_INTEGER count, LIS_SCALAR value(), LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $v$  の第  $start + i$  行の値 ( $i = 0, 1, \dots, count - 1$ ) を  $value[i]$  に格納する.

#### 入力

<code>start</code>	取得する場所の始点
<code>count</code>	取得するスカラ値の個数
<code>v</code>	値を取得するベクトル

#### 出力

<code>value</code>	取得したスカラ値を格納する配列
<code>ierr</code>	リターンコード

#### 注釈

マルチプロセス環境では, 全体ベクトルの第  $start + i$  行を指定する.

### 6.1.11 lis\_vector\_scatter

```
C      LIS_INT lis_vector_scatter(LIS_SCALAR value[], LIS_VECTOR v)
Fortran subroutine lis_vector_scatter(LIS_SCALAR value(), LIS_VECTOR v,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $v$  の第  $i$  行の値 ( $i = 0, 1, \dots, global\_n - 1$ ) を  $value[i]$  から取得する.

#### 入力

`value` 取得するスカラ値を格納する配列

#### 出力

`v` 値を取得したベクトル

`ierr` リターンコード

### 6.1.12 lis\_vector\_gather

```
C      LIS_INT lis_vector_gather(LIS_VECTOR v, LIS_SCALAR value[])
Fortran subroutine lis_vector_gather(LIS_VECTOR v, LIS_SCALAR value(),
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $v$  の第  $i$  行の値 ( $i = 0, 1, \dots, global\_n - 1$ ) を  $value[i]$  に格納する.

#### 入力

`v` 値を取得するベクトル

#### 出力

`value` 取得したスカラ値を格納する配列

`ierr` リターンコード





## 6.2 行列の操作

行列  $A$  の次数を  $global\_n \times global\_n$  とする. 行列  $A$  を  $nprocs$  個のプロセスで行ブロック分割する場合の各部分行列の行数を  $local\_n$  とする.  $global\_n$  をグローバルな行数,  $local\_n$  をローカルな行数と呼ぶ.

### 6.2.1 `lis_matrix_create`

```
C      LIS_INT lis_matrix_create(LIS_Comm comm, LIS_MATRIX *A)
Fortran subroutine lis_matrix_create(LIS_Comm comm, LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列を作成する.

#### 入力

`comm`                                      MPI コミュニケータ

#### 出力

`A`    行列

`ierr`                                         リターンコード

#### 注釈

逐次, マルチスレッド環境では, `comm` の値は無視される.

### 6.2.2 `lis_matrix_destroy`

```
C      LIS_INT lis_matrix_destroy(LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_destroy(LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

不要になった行列をメモリから破棄する.

#### 入力

`A`    メモリから破棄する行列

#### 出力

`ierr`                                         リターンコード

#### 注釈

関数 `lis_matrix_destroy` により, 行列  $A$  に関連付けられた配列も破棄される.

### 6.2.3 lis\_matrix\_duplicate

```
C      LIS_INT lis_matrix_duplicate(LIS_MATRIX Ain, LIS_MATRIX *Aout)
Fortran subroutine lis_matrix_duplicate(LIS_MATRIX Ain, LIS_MATRIX Aout,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

既存の行列と同じ情報を持つ行列を作成する.

#### 入力

Ain 複製元の行列

#### 出力

Aout 複製先の行列

ierr リターンコード

#### 注釈

関数 `lis_matrix_duplicate` は行列の要素の値は複製せず、メモリ領域のみ確保する. 値も複製する場合は、この関数の後に関数 `lis_matrix_copy` を呼び出す.

### 6.2.4 lis\_matrix\_malloc

```
C      LIS_INT lis_matrix_malloc(LIS_MATRIX A, LIS_INT nnz_row, LIS_INT nnz[])
Fortran subroutine lis_matrix_malloc(LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER nnz_row,
      LIS_INTEGER nnz[], LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列のメモリ領域を確保する.

#### 入力

A 行列

nnz\_row 各行の平均非零要素数

nnz 各行の非零要素数を格納した配列

#### 出力

ierr リターンコード

#### 注釈

`nnz_row` または `nnz` のどちらか一方を指定する. この関数は、`lis_matrix_set_value` のためにメモリ領域を確保する.

### 6.2.5 lis\_matrix\_set\_value

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_value(LIS_INT flag, LIS_INT i, LIS_INT j,
      LIS_SCALAR value, LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_set_value(LIS_INTEGER flag, LIS_INTEGER i,
      LIS_INTEGER j, LIS_SCALAR value, LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列  $A$  の第  $i$  行第  $j$  列に値を代入する.

#### 入力

flag	LIS_INS.VALUE 挿入: $A[i, j] = value$ LIS_ADD.VALUE 加算代入: $A[i, j] = A[i, j] + value$
i	行列の行番号
j	行列の列番号
value	代入するスカラー値
A	行列

#### 出力

A	第 $i$ 行第 $j$ 列に値が代入された行列
ierr	リターンコード

#### 注釈

マルチプロセス環境では, 全体行列の第  $i$  行第  $j$  列を指定する.

関数 `lis_matrix_set_value` は代入された値を一時的な内部形式で格納するため, `lis_matrix_set_value` を用いた後には関数 `lis_matrix_assemble` を呼び出さなければならない.

大規模な行列に対しては, 関数 `lis_matrix_set_type` の導入を検討すべきである. 詳細については `lis-($VERSION)/test/test2.c` 及び `lis-($VERSION)/test/test2f.F90` を参照のこと.

### 6.2.6 lis\_matrix\_assemble

```
C      LIS_INT lis_matrix_assemble(LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_assemble(LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列をライブラリで使用可能にする.

#### 入力

A 行列

#### 出力

A 使用可能になった行列

ierr リターンコード

### 6.2.7 lis\_matrix\_set\_size

```
LIS_INT lis_matrix_set_size(LIS_MATRIX A, LIS_INT local_n, LIS_INT global_n)
Fortran subroutine lis_matrix_set_size(LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER local_n,
    LIS_INTEGER global_n, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列の次数を設定する.

#### 入力

A 行列

local\_n 行列 A のローカルな行数

global\_n 行列 A のグローバルな行数

#### 出力

ierr リターンコード

#### 注釈

*local\_n* か *global\_n* のどちらか一方を与えなければならない.

逐次, マルチスレッド環境では, *local\_n* は *global\_n* に等しい. したがって, `lis_matrix_set_size(A,n,0)` と `lis_matrix_set_size(A,0,n)` は, いずれも次数  $n \times n$  の行列を作成する.

マルチプロセス環境においては, `lis_matrix_set_size(A,n,0)` は各プロセス上に次数  $n \times N$  の部分行列を作成する.  $N$  は  $n$  の総和である.

一方, `lis_matrix_set_size(A,0,n)` は各プロセス  $p$  上に次数  $m_p \times n$  の部分行列を作成する.  $m_p$  はライブラリ側で決定される.

### 6.2.8 lis\_matrix\_get\_size

```
C      LIS_INT lis_matrix_get_size(LIS_MATRIX A, LIS_INT *local_n,  
                                LIS_INT *global_n)  
Fortran subroutine lis_matrix_get_size(LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER local_n,  
                                       LIS_INTEGER global_n, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列の次数を取得する.

#### 入力

A 行列

#### 出力

local\_n 行列 A のローカルな行数  
global\_n 行列 A のグローバルな行数  
ierr リターンコード

#### 注釈

逐次, マルチスレッド環境では, *local\_n* は *global\_n* に等しい.

### 6.2.9 lis\_matrix\_get\_range

```
C      LIS_INT lis_matrix_get_range(LIS_MATRIX A, LIS_INT *is, LIS_INT *ie)  
Fortran subroutine lis_matrix_get_range(LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER is,  
                                       LIS_INTEGER ie, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

部分行列 A が全体行列のどこに位置するのかを調べる.

#### 入力

A 部分行列

#### 出力

is 部分行列 A の全体行列中での開始位置  
ie 部分行列 A の全体行列中での終了位置+1  
ierr リターンコード

#### 注釈

逐次, マルチスレッド環境では, 行列の次数が  $n \times n$  ならば, C 版では  $is = 0$ ,  $ie = n$ , Fortran 版では  $is = 1$ ,  $ie = n + 1$  である.









### 6.2.13 lis\_matrix\_set\_csr

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_csr(LIS_INT nnz, LIS_INT ptr[], LIS_INT index[],
                                LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_set_csr(LIS_INTEGER nnz, LIS_INTEGER ptr(),
                                     LIS_INTEGER index(), LIS_SCALAR value(), LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

CSR 形式の配列を行列  $A$  に関連付ける。

#### 入力

nnz	非零要素数
ptr, index, value	CSR 形式の配列
A	行列

#### 出力

A	関連付けられた行列
---	-----------

#### 注釈

lis\_matrix\_set\_csr を用いた後には、lis\_matrix\_assemble を呼び出さなければならない。また、Fortran 版の配列データは 0 を起点としなければならない。

### 6.2.14 lis\_matrix\_set\_csc

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_csc(LIS_INT nnz, LIS_INT ptr[], LIS_INT index[],
                                LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_set_csc(LIS_INTEGER nnz, LIS_INTEGER ptr(),
                                     LIS_INTEGER index(), LIS_SCALAR value(), LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

CSC 形式の配列を行列  $A$  に関連付ける。

#### 入力

nnz	非零要素数
ptr, index, value	CSC 形式の配列
A	行列

#### 出力

A	関連付けられた行列
---	-----------

#### 注釈

lis\_matrix\_set\_csc を用いた後には、lis\_matrix\_assemble を呼び出さなければならない。また、Fortran 版の配列データは 0 を起点としなければならない。

### 6.2.15 lis\_matrix\_set\_msr

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_msr(LIS_INT nnz, LIS_INT ndz, LIS_INT index[],
                                LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_set_msr(LIS_INTEGER nnz, LIS_INTEGER ndz,
                                      LIS_INTEGER index(), LIS_SCALAR value(), LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

MSR 形式の配列を行列  $A$  に関連付ける。

#### 入力

<code>nnz</code>	非零要素数
<code>ndz</code>	対角部分の零要素数
<code>index, value</code>	MSR 形式の配列
<code>A</code>	行列

#### 出力

<code>A</code>	関連付けられた行列
----------------	-----------

#### 注釈

`lis_matrix_set_msr` を用いた後には、`lis_matrix_assemble` を呼び出さなければならない。また、Fortran 版の配列データは 0 を起点としなければならない。

### 6.2.16 lis\_matrix\_set\_dia

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_dia(LIS_INT nnd, LIS_INT index[],
                                LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_set_dia(LIS_INTEGER nnd, LIS_INTEGER index(),
                                      LIS_SCALAR value(), LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

DIA 形式の配列を行列  $A$  に関連付ける。

#### 入力

nnd	非零な対角要素の本数
index, value	DIA 形式の配列
A	行列

#### 出力

A	関連付けられた行列
---	-----------

#### 注釈

lis\_matrix\_set\_dia を用いた後には、lis\_matrix\_assemble を呼び出さなければならない。また、Fortran 版の配列データは 0 を起点としなければならない。

### 6.2.17 lis\_matrix\_set\_ell

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_ell(LIS_INT maxnzs, LIS_INT index[],
                                 LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_set_ell(LIS_INTEGER maxnzs, LIS_INTEGER index(),
                                      LIS_SCALAR value(), LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ELL 形式の配列を行列  $A$  に関連付ける。

#### 入力

maxnzs	各行の非零要素数の最大値
index, value	ELL 形式の配列
A	行列

#### 出力

A	関連付けられた行列
---	-----------

#### 注釈

lis\_matrix\_set\_ell を用いた後には、lis\_matrix\_assemble を呼び出さなければならない。また、Fortran 版の配列データは 0 を起点としなければならない。

## 6.2.18 lis\_matrix\_set\_jad

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_jad(LIS_INT nnz, LIS_INT maxnzs, LIS_INT perm[],
      LIS_INT ptr[], LIS_INT index[], LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_set_jad(LIS_INTEGER nnz, LIS_INTEGER maxnzs,
      LIS_INTEGER perm(), LIS_INTEGER ptr(), LIS_INTEGER index(),
      LIS_SCALAR value(), LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

### 機能

JAD 形式の配列を行列  $A$  に関連付ける。

### 入力

nnz	非零要素数
maxnzs	各行の非零要素数の最大値
perm, ptr, index, value	JAD 形式の配列
A	行列

### 出力

A	関連付けられた行列
---	-----------

### 注釈

lis\_matrix\_set\_jad を用いた後には、lis\_matrix\_assemble を呼び出さなければならない。また、Fortran 版の配列データは 0 を起点としなければならない。

### 6.2.19 lis\_matrix\_set\_bsr

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_bsr(LIS_INT bnr, LIS_INT bnc,  
                                LIS_INT bnnz, LIS_INT bptr[], LIS_INT bindex[],  
                                LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)  
Fortran subroutine lis_matrix_set_bsr(LIS_INTEGER bnr, LIS_INTEGER bnc,  
                                      LIS_INTEGER bnnz, LIS_INTEGER bptr(), LIS_INTEGER bindex(),  
                                      LIS_SCALAR value(), LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

BSR 形式の配列を行列  $A$  に関連付ける。

#### 入力

bnr	行ブロックサイズ
bnc	列ブロックサイズ
bnnz	非零ブロック数
bptr, bindex, value	BSR 形式の配列
A	行列

#### 出力

A	関連付けられた行列
---	-----------

#### 注釈

lis\_matrix\_set\_bsr を用いた後には、lis\_matrix\_assemble を呼び出さなければならない。また、Fortran 版の配列データは 0 を起点としなければならない。

## 6.2.20 lis\_matrix\_set\_bsc

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_bsc(LIS_INT bnr, LIS_INT bnc, LIS_INT bnnz,
                                LIS_INT bptr[], LIS_INT bindex[], LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_set_bsc(LIS_INTEGER bnr, LIS_INTEGER bnc,
                                     LIS_INTEGER bnnz, LIS_INTEGER bptr(), LIS_INTEGER bindex(),
                                     LIS_SCALAR value(), LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

### 機能

BSC 形式の配列を行列  $A$  に関連付ける。

### 入力

bnr	行ブロックサイズ
bnc	列ブロックサイズ
bnnz	非零ブロック数
bptr, bindex, value	BSC 形式の配列
A	行列

### 出力

A	関連付けられた行列
---	-----------

### 注釈

lis\_matrix\_set\_bsc を用いた後には、lis\_matrix\_assemble を呼び出さなければならない。また、Fortran 版の配列データは 0 を起点としなければならない。

### 6.2.21 lis\_matrix\_set\_vbr

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_vbr(LIS_INT nnz, LIS_INT nr, LIS_INT nc,
      LIS_INT bnnz, LIS_INT row[], LIS_INT col[], LIS_INT ptr[],
      LIS_INT bptr[], LIS_INT bindex[], LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_set_vbr(LIS_INTEGER nnz, LIS_INTEGER nr,
      LIS_INTEGER nc, LIS_INTEGER bnnz, LIS_INTEGER row(), LIS_INTEGER col(),
      LIS_INTEGER ptr(), LIS_INTEGER bptr(), LIS_INTEGER bindex(),
      LIS_SCALAR value(), LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

VBR 形式の配列を行列  $A$  に関連付ける。

#### 入力

nnz	非零ブロックの全要素数
nr	行ブロック数
nc	列ブロック数
bnnz	非零ブロック数
row, col, ptr, bptr, bindex, value	VBR 形式の配列
A	行列

#### 出力

A	関連付けられた行列
---	-----------

#### 注釈

lis\_matrix\_set\_vbr を用いた後には、lis\_matrix\_assemble を呼び出さなければならない。また、Fortran 版の配列データは 0 を起点としなければならない。



### 6.2.22 lis\_matrix\_set\_coo

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_coo(LIS_INT nnz, LIS_INT row[], LIS_INT col[],
                                LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_set_coo(LIS_INTEGER nnz, LIS_INTEGER row(),
                                     LIS_INTEGER col(), LIS_SCALAR value(), LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

COO 形式の配列を行列  $A$  に関連付ける。

#### 入力

nnz	非零要素数
row, col, value	COO 形式の配列
A	行列

#### 出力

A	関連付けられた行列
---	-----------

#### 注釈

lis\_matrix\_set\_coo を用いた後には、lis\_matrix\_assemble を呼び出さなければならない。また、Fortran 版の配列データは 0 を起点としなければならない。

### 6.2.23 lis\_matrix\_set\_dns

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_dns(LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_matrix_set_dns(LIS_SCALAR value(), LIS_MATRIX A,
                                     LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

DNS 形式の配列を行列  $A$  に関連付ける。

#### 入力

value	DNS 形式の配列
A	行列

#### 出力

A	関連付けられた行列
---	-----------

#### 注釈

lis\_matrix\_set\_dns を用いた後には、lis\_matrix\_assemble を呼び出さなければならない。また、Fortran 版の配列データは 0 を起点としなければならない。





### 6.3.3 lis\_vector\_axpy

```
C      LIS_INT lis_vector_axpy(LIS_SCALAR alpha, LIS_VECTOR x, LIS_VECTOR y)
Fortran subroutine lis_vector_axpy(LIS_SCALAR alpha, LIS_VECTOR x, LIS_VECTOR y,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル和  $y = \alpha x + y$  を計算する.

#### 入力

alpha	スカラ値
x, y	ベクトル

#### 出力

y	$\alpha x + y$ (ベクトル $y$ の値は上書きされる)
ierr	リターンコード

### 6.3.4 lis\_vector\_xpay

```
C      LIS_INT lis_vector_xpay(LIS_VECTOR x, LIS_SCALAR alpha, LIS_VECTOR y)
Fortran subroutine lis_vector_xpay(LIS_VECTOR x, LIS_SCALAR alpha, LIS_VECTOR y,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル和  $y = x + \alpha y$  を計算する.

#### 入力

alpha	スカラ値
x, y	ベクトル

#### 出力

y	$x + \alpha y$ (ベクトル $y$ の値は上書きされる)
ierr	リターンコード

### 6.3.5 lis\_vector\_axpyz

```
C      LIS_INT lis_vector_axpyz(LIS_SCALAR alpha, LIS_VECTOR x, LIS_VECTOR y,  
                               LIS_VECTOR z)  
Fortran subroutine lis_vector_axpyz(LIS_SCALAR alpha, LIS_VECTOR x, LIS_VECTOR y,  
                                   LIS_VECTOR z, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル和  $z = \alpha x + y$  を計算する.

#### 入力

alpha	スカラ値
x, y	ベクトル

#### 出力

z	$\alpha x + y$
ierr	リターンコード

### 6.3.6 lis\_vector\_scale

```
C      LIS_INT lis_vector_scale(LIS_SCALAR alpha, LIS_VECTOR x)  
Fortran subroutine lis_vector_scale(LIS_SCALAR alpha, LIS_VECTOR x,  
                                   LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の要素を  $\alpha$  倍する.

#### 入力

alpha	スカラ値
x	ベクトル

#### 出力

x	$\alpha x$ (ベクトル $x$ の値は上書きされる)
ierr	リターンコード



### 6.3.9 lis\_vector\_set\_all

```
C      LIS_INT lis_vector_set_all(LIS_SCALAR value, LIS_VECTOR x)
Fortran subroutine lis_vector_set_all(LIS_SCALAR value, LIS_VECTOR x,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の要素にスカラ値を代入する.

#### 入力

value	代入するスカラ値
x	ベクトル

#### 出力

x	各要素にスカラ値が代入されたベクトル
ierr	リターンコード

### 6.3.10 lis\_vector\_abs

```
C      LIS_INT lis_vector_abs(LIS_VECTOR x)
Fortran subroutine lis_vector_abs(LIS_VECTOR x, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の要素の絶対値を求める.

#### 入力

x	ベクトル
---	------

#### 出力

x	各要素の絶対値を格納したベクトル
ierr	リターンコード





### 6.3.13 lis\_vector\_shift

```
C      LIS_INT lis_vector_shift(LIS_SCALAR sigma, LIS_VECTOR x)
Fortran subroutine lis_vector_shift(LIS_SCALAR sigma, LIS_VECTOR x,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  をシフトする.

#### 入力

sigma	シフト量
x	ベクトル

#### 出力

x	各要素のシフト後の値 $x_i - \sigma$ を格納したベクトル
ierr	リターンコード

### 6.3.14 lis\_vector\_dot

```
C      LIS_INT lis_vector_dot(LIS_VECTOR x, LIS_VECTOR y, LIS_SCALAR *value)
Fortran subroutine lis_vector_dot(LIS_VECTOR x, LIS_VECTOR y, LIS_SCALAR value,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

エルミート内積  $x^H y$  を計算する.

#### 入力

x, y                                  ベクトル

#### 出力

value                                エルミート内積

ierr                                 リターンコード

### 6.3.15 lis\_vector\_nhdot

```
C      LIS_INT lis_vector_nhdot(LIS_VECTOR x, LIS_VECTOR y, LIS_SCALAR *value)
Fortran subroutine lis_vector_nhdot(LIS_VECTOR x, LIS_VECTOR y, LIS_SCALAR value,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

非エルミート内積  $x^T y$  を計算する.

#### 入力

x, y                                  ベクトル

#### 出力

value                                非エルミート内積

ierr                                 リターンコード





### 6.3.20 lis\_matrix\_set\_blocksize

```
C      LIS_INT lis_matrix_set_blocksize(LIS_MATRIX A, LIS_INT bnr, LIS_INT bnc,  
      LIS_INT row[], LIS_INT col[])  
Fortran subroutine lis_matrix_set_blocksize(LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER bnr,  
      LIS_INTEGER bnc, LIS_INTEGER row[], LIS_INTEGER col[], LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

BSR, BSC, VBR 形式のブロックサイズ, 分割情報を設定する.

#### 入力

A	行列
bnr	BSR(BSC) 形式の行ブロックサイズ, または VBR 形式の行ブロック数
bnc	BSR(BSC) 形式の列ブロックサイズ, または VBR 形式の列ブロック数
row	VBR 形式の行分割情報の配列
col	VBR 形式の列分割情報の配列

#### 出力

ierr	リターンコード
------	---------





### 6.3.24 lis\_matrix\_xpay

```
C      LIS_INT lis_matrix_xpay(LIS_SCALAR alpha, LIS_MATRIX A, LIS_MATRIX B)
Fortran subroutine lis_matrix_xpay(LIS_SCALAR alpha, LIS_MATRIX A, LIS_MATRIX B,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列和  $B = A + \alpha B$  を計算する.

#### 入力

alpha	スカラ値
A, B	行列

#### 出力

B	$A + \alpha B$ (行列 B の値は上書きされる)
ierr	リターンコード

#### 注釈

行列 A, B は DNS 形式でなければならない.

### 6.3.25 lis\_matrix\_axpyz

```
C      LIS_INT lis_matrix_axpyz(LIS_SCALAR alpha, LIS_MATRIX A, LIS_MATRIX B,
      LIS_MATRIX C)
Fortran subroutine lis_matrix_axpyz(LIS_SCALAR alpha, LIS_MATRIX A, LIS_MATRIX B,
      LIS_MATRIX C, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列和  $C = \alpha A + B$  を計算する.

#### 入力

alpha	スカラ値
A, B	行列

#### 出力

C	$\alpha A + B$
ierr	リターンコード

#### 注釈

行列 A, B, C は DNS 形式でなければならない.



### 6.3.26 lis\_matrix\_scale

```
C      LIS_INT lis_matrix_scale(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR b, LIS_VECTOR d,  
                               LIS_INT action)  
Fortran subroutine lis_matrix_scale(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR b,  
                                   LIS_VECTOR d, LIS_INTEGER action, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列  $A$  及びベクトル  $b$  のスケーリングを行う。

#### 入力

A	行列
b	ベクトル
action	LIS_SCALE_JACOBI Jacobi スケーリング $D^{-1}Ax = D^{-1}b$ ( $D$ は $A = (a_{ij})$ の対角部分) LIS_SCALE_SYMM_DIAG 対角スケーリング $D^{-1/2}AD^{-1/2}x = D^{-1/2}b$ ( $D^{-1/2}$ は対角要素の値が $1/\sqrt{a_{ii}}$ である対角行列)

#### 出力

A	スケーリングによって得られる行列
b	スケーリングによって得られるベクトル
d	$D^{-1}$ または $D^{-1/2}$ の対角部分を格納したベクトル
ierr	リターンコード

### 6.3.27 lis\_matrix\_get\_diagonal

```
C      LIS_INT lis_matrix_get_diagonal(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR d)  
Fortran subroutine lis_matrix_get_diagonal(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR d,  
                                           LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列  $A$  の対角部分をベクトル  $d$  に複製する。

#### 入力

A	行列
---	----

#### 出力

d	対角要素が格納されたベクトル
ierr	リターンコード

### 6.3.28 lis\_matrix\_shift\_diagonal

```
C      LIS_INT lis_matrix_shift_diagonal(LIS_MATRIX A, LIS_SCALAR sigma)
Fortran subroutine lis_matrix_shift_diagonal(LIS_MATRIX A, LIS_SCALAR sigma,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列  $A$  をシフトする.

#### 入力

sigma	シフト量
A	行列

#### 出力

A	シフト後の行列 $A - \sigma E$
ierr	リターンコード

### 6.3.29 lis\_matrix\_shift\_matrix

```
C      LIS_INT lis_matrix_shift_matrix(LIS_MATRIX A, LIS_MATRIX B,
      LIS_SCALAR sigma)
Fortran subroutine lis_matrix_shift_matrix(LIS_MATRIX A, LIS_MATRIX B,
      LIS_SCALAR sigma, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列  $A$  をシフトする.

#### 入力

sigma	シフト量
A	行列
B	行列

#### 出力

A	シフト後の行列 $A - \sigma B$
ierr	リターンコード

### 6.3.30 lis\_matvec

```
C      LIS_INT lis_matvec(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR x, LIS_VECTOR y)
Fortran subroutine lis_matvec(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR x, LIS_VECTOR y,
                             LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列ベクトル積  $y = Ax$  を計算する.

#### 入力

A	行列
x	ベクトル

#### 出力

y	$Ax$
ierr	リターンコード

### 6.3.31 lis\_matvech

```
C      LIS_INT lis_matvech(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR x, LIS_VECTOR y)
Fortran subroutine lis_matvech(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR x, LIS_VECTOR y,
                              LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列ベクトル積  $y = A^H x$  を計算する.

#### 入力

A	行列
x	ベクトル

#### 出力

y	$A^H x$
ierr	リターンコード

## 6.4 線型方程式の求解

### 6.4.1 lis\_solver\_create

```
C      LIS_INT lis_solver_create(LIS_SOLVER *solver)
Fortran subroutine lis_solver_create(LIS_SOLVER solver, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ソルバ (線型方程式解法の情報格納する構造体) を作成する。

#### 入力

なし

#### 出力

<code>solver</code>	ソルバ
<code>ierr</code>	リターンコード

#### 注釈

ソルバは線型方程式解法の情報を持つ。

### 6.4.2 lis\_solver\_destroy

```
C      LIS_INT lis_solver_destroy(LIS_SOLVER solver)
Fortran subroutine lis_solver_destroy(LIS_SOLVER solver, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

不要になったソルバをメモリから破棄する。

#### 入力

<code>solver</code>	メモリから破棄するソルバ
---------------------	--------------

#### 出力

<code>ierr</code>	リターンコード
-------------------	---------

### 6.4.3 lis\_precon\_create

```
C      LIS_INT lis_precon_create(LIS_SOLVER solver, LIS_PRECON *precon)
Fortran subroutine lis_precon_create(LIS_SOLVER solver, LIS_PRECON precon,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

前処理行列を作成する.

#### 入力

なし

#### 出力

precon	前処理行列
ierr	リターンコード

### 6.4.4 lis\_precon\_destroy

```
C      LIS_INT lis_precon_destroy(LIS_PRECON precon)
Fortran subroutine lis_precon_destroy(LIS_PRECON precon, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

不要になった前処理行列をメモリから破棄する.

#### 入力

precon	メモリから破棄する前処理行列
--------	----------------

#### 出力

ierr	リターンコード
------	---------



線型方程式解法に関するオプション (既定値: -i bicg)

線型方程式解法	オプション	補助オプション	
CG	-i {cg 1}		
BiCG	-i {bicg 2}		
CGS	-i {cgs 3}		
BiCGSTAB	-i {bicgstab 4}		
BiCGSTAB(l)	-i {bicgstabl 5}	-ell [2]	次数 $l$
GPBiCG	-i {gpbicg 6}		
TFQMR	-i {tfqmr 7}		
Orthomin(m)	-i {orthomin 8}	-restart [40]	リスタート値 $m$
GMRES(m)	-i {gmres 9}	-restart [40]	リスタート値 $m$
Jacobi	-i {jacobi 10}		
Gauss-Seidel	-i {gs 11}		
SOR	-i {sor 12}	-omega [1.9]	緩和係数 $\omega$ ( $0 < \omega < 2$ )
BiCGSafe	-i {bicgsafe 13}		
CR	-i {cr 14}		
BiCR	-i {bicr 15}		
CRS	-i {crs 16}		
BiCRSTAB	-i {bicrstab 17}		
GPBiCR	-i {gpbicr 18}		
BiCRSafe	-i {bicrsafe 19}		
FGMRES(m)	-i {fgmres 20}	-restart [40]	リスタート値 $m$
IDR(s)	-i {idrs 21}	-irestart [2]	リスタート値 $s$
IDR(1)	-i {idr1 22}		
MINRES	-i {minres 23}		
COCG	-i {cocg 24}		
COCR	-i {cocr 25}		

前処理に関するオプション (既定値: -p none)

前処理	オプション	補助オプション	
なし	-p {none 0}		
Jacobi	-p {jacobi 1}		
ILU(k)	-p {ilu 2}	-ilu_fill [0]	フィルインレベル $k$
SSOR	-p {ssor 3}	-ssor_omega [1.0]	緩和係数 $\omega$ ( $0 < \omega < 2$ )
Hybrid	-p {hybrid 4}	-hybrid_i [sor]	線型方程式解法
		-hybrid_maxiter [25]	最大反復回数
		-hybrid_tol [1.0e-3]	収束判定基準
		-hybrid_omega [1.5]	SOR の緩和係数 $\omega$ ( $0 < \omega < 2$ )
		-hybrid_ell [2]	BiCGSTAB(1) の次数 $l$
		-hybrid_restart [40]	GMRES(m), Orthomin(m) の リスタート値 $m$
I+S	-p {is 5}	-is_alpha [1.0]	$I + \alpha S^{(m)}$ のパラメータ $\alpha$
		-is_m [3]	$I + \alpha S^{(m)}$ のパラメータ $m$
SAINV	-p {sainv 6}	-sainv_drop [0.05]	ドロップ基準
SA-AMG	-p {saamg 7}	-saamg_unsym [false]	非対称版の選択 (行列構造は対称とする)
		-saamg_theta [0.05 0.12]	ドロップ基準 $a_{ij}^2 \leq \theta^2  a_{ii}   a_{jj} $ (対称 非対称)
Crout ILU	-p {iluc 8}	-iluc_drop [0.05]	ドロップ基準
		-iluc_rate [5.0]	最大フィルイン数の倍率
ILUT	-p {ilut 9}		
Additive Schwarz	-adds true	-adds_iter [1]	反復回数



その他のオプション

オプション	
-maxiter [1000]	最大反復回数
-tol [1.0e-12]	収束判定基準 $tol$
-tol_w [1.0]	収束判定基準 $tol_w$
-print [0]	残差履歴の出力
	-print {none 0} 残差履歴を出力しない
	-print {mem 1} 残差履歴をメモリに保存する
	-print {out 2} 残差履歴を標準出力に書き出す
	-print {all 3} 残差履歴をメモリに保存し、標準出力に書き出す
-scale [0]	スケーリングの選択. 結果は元の行列, ベクトルに上書きされる
	-scale {none 0} スケーリングなし
	-scale {jacobi 1} Jacobi スケーリング $D^{-1}Ax = D^{-1}b$ ( $D$ は $A = (a_{ij})$ の対角部分)
	-scale {symm_diag 2} 対角スケーリング $D^{-1/2}AD^{-1/2}x = D^{-1/2}b$ ( $D^{-1/2}$ は対角要素の値が $1/\sqrt{a_{ii}}$ である対角行列)
-initx_zeros [1]	初期ベクトル $x_0$
	-initx_zeros {false 0} 関数 <code>lis_solve()</code> の引数 $x$ により 与えられる要素の値を使用
	-initx_zeros {true 1} すべての要素の値を 0 にする
-conv_cond [0]	収束条件
	-conv_cond {nrm2_r 0} $\ b - Ax\ _2 \leq tol * \ b - Ax_0\ _2$
	-conv_cond {nrm2_b 1} $\ b - Ax\ _2 \leq tol * \ b\ _2$
	-conv_cond {nrm1_b 2} $\ b - Ax\ _1 \leq tol_w * \ b\ _1 + tol$
-omp_num_threads [t]	実行スレッド数 $t$ は最大スレッド数
-storage [0]	行列格納形式
-storage_block [2]	BSR, BSC のブロックサイズ
-f [0]	線型方程式解法の精度
	-f {double 0} 倍精度
	-f {quad 1} double-double 型 4 倍精度

#### 6.4.6 lis\_solver\_set\_optionC

```
C      LIS_INT lis_solver_set_optionC(LIS_SOLVER solver)
Fortran subroutine lis_solver_set_optionC(LIS_SOLVER solver, LIS_INTEGER ierr)
```

##### 機能

ユーザプログラム実行時にコマンドラインで指定された線型方程式解法のオプションをソルバに設定する。

##### 入力

なし

##### 出力

solver	ソルバ
ierr	リターンコード

#### 6.4.7 lis\_solve

```
C      LIS_INT lis_solve(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR b, LIS_VECTOR x,
                       LIS_SOLVER solver)
Fortran subroutine lis_solve(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR b, LIS_VECTOR x,
                             LIS_SOLVER solver, LIS_INTEGER ierr)
```

##### 機能

指定された解法で線型方程式  $Ax = b$  を解く。

##### 入力

A	係数行列
b	右辺ベクトル
x	初期ベクトル
solver	ソルバ

##### 出力

x	解
solver	反復回数, 経過時間等の情報
ierr	リターンコード

## 注釈

オプション `-initx_zeros {false|0}` が指定された場合, 初期ベクトルは引数 `x` により与えられる. その他の場合には, 初期ベクトルのすべての要素の値は 0 に設定される.

この関数は, ソルバの状態 (`solver->retcode`) が `LIS_BREAKDOWN` または `LIS_MAXITER` の場合には 0 を返す. 関数 `lis_solver_get_status()` も参照のこと.

### 6.4.8 lis\_solve\_kernel

```
C      LIS_INT lis_solve_kernel(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR b, LIS_VECTOR x,
                               LIS_SOLVER solver, LIS_PRECON precon)
Fortran subroutine lis_solve_kernel(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR b, LIS_VECTOR x,
                                   LIS_SOLVER solver, LIS_PRECON precon, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

指定された解法について、外部で定義された前処理を用いて線型方程式  $Ax = b$  を解く。

#### 入力

A	係数行列
b	右辺ベクトル
x	初期ベクトル
solver	ソルバ
precon	前処理

#### 出力

x	解
solver	反復回数, 経過時間等の情報
ierr	リターンコード

#### 注釈

lis-(\$VERSION)/src/esolver/lis\_esolver\_ii.cなどを参照のこと。このプログラムでは、lis\_solve\_kernelを複数回呼び出して最小固有値を計算する。

この関数は、ソルバの状態 (solver->rcode) が LIS\_BREAKDOWN または LIS\_MAXITER の場合には 0 を返す。関数 lis\_solver\_get\_status() も参照のこと。

#### 6.4.9 lis\_solver\_get\_status

```
C      LIS_INT lis_solver_get_status(LIS_SOLVER solver, LIS_INT *status)
Fortran subroutine lis_solver_get_status(LIS_SOLVER solver, LIS_INTEGER status,
      LIS_INTEGER ierr)
```

##### 機能

状態をソルバから取得する.

##### 入力

    solver                               ソルバ

##### 出力

    status                              状態  
    ierr                                リターンコード

##### 注釈

この関数は, ソルバの状態 (solver->retcode) を返す.

#### 6.4.10 lis\_solver\_get\_iter

```
C      LIS_INT lis_solver_get_iter(LIS_SOLVER solver, LIS_INT *iter)
Fortran subroutine lis_solver_get_iter(LIS_SOLVER solver, LIS_INTEGER iter,
      LIS_INTEGER ierr)
```

##### 機能

反復回数をソルバから取得する.

##### 入力

    solver                               ソルバ

##### 出力

    iter                                反復回数  
    ierr                                リターンコード











#### 6.4.18 lis\_solver\_get\_solvername

```
C      LIS_INT lis_solver_get_solvername(LIS_INT nsol, char *name)
Fortran subroutine lis_solver_get_solvername(LIS_INTEGER nsol, character name,
      LIS_INTEGER ierr)
```

##### 機能

線型方程式解法の番号から解法名を取得する。

##### 入力

nsol                                   線型方程式解法の番号

##### 出力

name                                   線型方程式解法名

ierr                                   リターンコード

#### 6.4.19 lis\_solver\_get\_preconname

```
C      LIS_INT lis_solver_get_preconname(LIS_INT precon_type, char *name)
Fortran subroutine lis_solver_get_preconname(LIS_INTEGER precon_type,
      character name, LIS_INTEGER ierr)
```

##### 機能

前処理の番号から前処理名を取得する。

##### 入力

precon\_type                           前処理の番号

##### 出力

name                                   前処理名

ierr                                   リターンコード

## 6.5 固有値問題の求解

### 6.5.1 lis\_esolver\_create

```
C      LIS_INT lis_esolver_create(LIS_ESOLVER *esolver)
Fortran subroutine lis_esolver_create(LIS_ESOLVER esolver, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ソルバ (固有値解法の情報を格納する構造体) を作成する.

#### 入力

なし

#### 出力

<code>esolver</code>	ソルバ
<code>ierr</code>	リターンコード

#### 注釈

ソルバは固有値解法の情報を持つ.

### 6.5.2 lis\_esolver\_destroy

```
C      LIS_INT lis_esolver_destroy(LIS_ESOLVER esolver)
Fortran subroutine lis_esolver_destroy(LIS_ESOLVER esolver, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

不要になったソルバをメモリから破棄する.

#### 入力

<code>esolver</code>	メモリから破棄するソルバ
----------------------	--------------

#### 出力

<code>ierr</code>	リターンコード
-------------------	---------



前処理に関するオプション (既定値: -p none)

前処理	オプション	補助オプション	
なし	-p {none 0}		
Jacobi	-p {jacobi 1}		
ILU(k)	-p {ilu 2}	-ilu_fill [0]	フィルインレベル $k$
SSOR	-p {ssor 3}	-ssor_omega [1.0]	緩和係数 $\omega$ ( $0 < \omega < 2$ )
Hybrid	-p {hybrid 4}	-hybrid_i [sor]	線型方程式解法
		-hybrid_maxiter [25]	最大反復回数
		-hybrid_tol [1.0e-3]	収束判定基準
		-hybrid_omega [1.5]	SOR の緩和係数 $\omega$ ( $0 < \omega < 2$ )
		-hybrid_ell [2]	BiCGSTAB(1) の次数 $l$
		-hybrid_restart [40]	GMRES(m), Orthomin(m) の リスタート値 $m$
I+S	-p {is 5}	-is_alpha [1.0]	$I + \alpha S^{(m)}$ のパラメータ $\alpha$
		-is_m [3]	$I + \alpha S^{(m)}$ のパラメータ $m$
SAINV	-p {sainv 6}	-sainv_drop [0.05]	ドロップ基準
SA-AMG	-p {saamg 7}	-saamg_unsym [false]	非対称版の選択 (行列構造は対称とする)
		-saamg_theta [0.05 0.12]	ドロップ基準 $a_{ij}^2 \leq \theta^2  a_{ii}   a_{jj} $ (対称 非対称)
Crout ILU	-p {iluc 8}	-iluc_drop [0.05]	ドロップ基準
		-iluc_rate [5.0]	最大フィルイン数の倍率
ILUT	-p {ilut 9}		
Additive Schwarz	-adds true	-adds_iter [1]	反復回数

その他のオプション

オプション	
-emaxiter [1000]	最大反復回数
-etol [1.0e-12]	収束判定基準
-eprint [0]	残差履歴の出力
-eprint {none 0}	残差履歴を出力しない
-eprint {mem 1}	残差履歴をメモリに保存する
-eprint {out 2}	残差履歴を標準出力に書き出す
-eprint {all 3}	残差履歴をメモリに保存し、標準出力に書き出す
-ie [ii]	Subspace, Lanczos, Arnoldi の内部で使用する固有値解法の指定
-ige [gii]	Generalized Subspace, Generalized Lanczos, Generalized Arnoldi の内部で使用する固有値解法の指定
-shift [0.0]	$A - \sigma B$ を計算するためのシフト量 $\sigma$ の実部
-shift_im [0.0]	シフト量 $\sigma$ の虚部
-initx_ones [1]	初期ベクトル $x_0$
-initx_ones {false 0}	関数 <code>lis_esolve()</code> の引数 $x$ により与えられる要素の値を使用
-initx_ones {true 1}	すべての要素の値を 1 にする
-omp_num_threads [t]	実行スレッド数 $t$ は最大スレッド数
-estorage [0]	行列格納形式
-estorage_block [2]	BSR, BSC 形式のブロックサイズ
-ef [0]	固有値解法の精度
-ef {double 0}	倍精度
-ef {quad 1}	double-double 型 4 倍精度
-rval [0]	Ritz 値
-rval {false 0}	Ritz 値をもとに固有値を計算
-rval {true 1}	Ritz 値のみを計算

#### 6.5.4 lis\_esolver\_set\_optionC

```
C      LIS_INT lis_esolver_set_optionC(LIS_ESOLVER esolver)
Fortran subroutine lis_esolver_set_optionC(LIS_ESOLVER esolver, LIS_INTEGER ierr)
```

##### 機能

ユーザプログラム実行時にコマンドラインで指定された固有値解法のオプションをソルバに設定する.

##### 入力

なし

##### 出力

esolver	ソルバ
ierr	リターンコード

### 6.5.5 lis\_solve

```
C      LIS_INT lis_solve(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR x,
                       LIS_REAL evalue, LIS_ESOLVER esolver)
Fortran subroutine lis_solve(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR x,
                             LIS_ESOLVER esolver, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

指定された解法で標準固有値問題  $Ax = \lambda x$  を解く。

#### 入力

A	係数行列
x	初期ベクトル
esolver	ソルバ

#### 出力

evalue	モード 0 の固有値
x	固有値に対応する固有ベクトル
esolver	反復回数, 経過時間等の情報
ierr	リターンコード

#### 注釈

オプション `-initx_ones {false|0}` が指定された場合, 初期ベクトルは引数 `x` により与えられる。その他の場合には, 初期ベクトルのすべての要素の値は 0 に設定される。

この関数は, ソルバの状態 (`esolver->retcode`) が `LIS_MAXITER` の場合には 0 を返す。関数 `lis.esolver_get_status()` も参照のこと。



### 6.5.6 lis\_gesolve

```
C      LIS_INT lis_gesolve(LIS_MATRIX A, LIS_MATRIX B,  
                          LIS_VECTOR x, LIS_REAL evalue, LIS_ESOLVER esolver)  
Fortran subroutine lis_gesolve(LIS_MATRIX A, LIS_MATRIX B,  
                               LIS_VECTOR x, LIS_ESOLVER esolver, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

指定された解法で一般化固有値問題  $Ax = \lambda Bx$  を解く。

#### 入力

A	係数行列
B	係数行列
x	初期ベクトル
esolver	ソルバ

#### 出力

evalue	モード 0 の固有値
x	固有値に対応する固有ベクトル
esolver	反復回数, 経過時間等の情報
ierr	リターンコード

#### 注釈

オプション `-initx_ones {false|0}` が指定された場合, 初期ベクトルは引数 `x` により与えられる。その他の場合には, 初期ベクトルのすべての要素の値は 0 に設定される。

この関数は, ソルバの状態 (`esolver->retcode`) が `LIS_MAXITER` の場合には 0 を返す。関数 `lis_esolver_get_status()` も参照のこと。



### 6.5.9 lis\_esolver\_get\_iterex

```
C      LIS_INT lis_esolver_get_iterex(LIS_ESOLVER esolver, LIS_INT *iter)
Fortran subroutine lis_esolver_get_iterex(LIS_ESOLVER esolver, LIS_INTEGER iter,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

指定された固有対の反復回数に関する詳細情報をソルバから取得する。

#### 入力

esolver	ソルバ
---------	-----

#### 出力

iter	総反復回数
iter_double	倍精度演算の反復回数
iter_quad	double-double 型 4 倍精度演算の反復回数
ierr	リターンコード

### 6.5.10 lis\_esolver\_get\_time

```
C      LIS_INT lis_esolver_get_time(LIS_ESOLVER esolver, double *time)
Fortran subroutine lis_esolver_get_time(LIS_ESOLVER esolver, real*8 time,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

指定された固有対の経過時間をソルバから取得する。

#### 入力

esolver	ソルバ
---------	-----

#### 出力

time	経過時間
ierr	リターンコード













## 6.6 配列を用いた計算

以下はローカルな処理のための関数であり、並列化されない。配列データは0を起点とし、列優先順序で格納される。lis-(\$VERSION)/test/test6.c 及び lis-(\$VERSION)/test/test6f.F90 を参照のこと。

### 6.6.1 lis\_array\_swap

```
C      LIS_INT lis_array_swap(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[], LIS_SCALAR y[])
Fortran subroutine lis_array_swap(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(), LIS_SCALAR y(),
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x, y$  の要素を交換する。

#### 入力

n	ベクトルの次数
x, y	次数 $n$ のベクトル $x, y$ を格納する配列

#### 出力

x, y	交換後の配列
ierr	リターンコード

### 6.6.2 lis\_array\_copy

```
C      LIS_INT lis_array_copy(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[], LIS_SCALAR y[])
Fortran subroutine lis_array_copy(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(), LIS_SCALAR y(),
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の要素をベクトル  $y$  に複製する。

#### 入力

n	ベクトルの次数
x	複製元のベクトル $x$ を格納する配列

#### 出力

y	複製先のベクトル $y$ が格納された配列
ierr	リターンコード

### 6.6.3 lis\_array\_axpy

```
C      LIS_INT lis_array_axpy(LIS_INT n, LIS_SCALAR alpha, LIS_SCALAR x[],
                             LIS_SCALAR y[])
Fortran subroutine lis_array_axpy(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR alpha, LIS_SCALAR x(),
                                  LIS_SCALAR y(), LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル和  $y = \alpha x + y$  を計算する.

#### 入力

n	ベクトルの次数
alpha	スカラ値
x, y	ベクトル $x, y$ を格納する配列

#### 出力

y	$\alpha x + y$ (ベクトル $y$ の値は上書きされる)
ierr	リターンコード

### 6.6.4 lis\_array\_xpay

```
C      LIS_INT lis_array_xpay(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[], LIS_SCALAR alpha,
                             LIS_SCALAR y[])
Fortran subroutine lis_array_xpay(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(), LIS_SCALAR alpha,
                                  LIS_SCALAR y(), LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル和  $y = x + \alpha y$  を計算する.

#### 入力

n	ベクトルの次数
alpha	スカラ値
x, y	ベクトル $x, y$ を格納する配列

#### 出力

y	$x + \alpha y$ (ベクトル $y$ の値は上書きされる)
ierr	リターンコード

### 6.6.5 lis\_array\_axpyz

```
C      LIS_INT lis_array_axpyz(LIS_INT n, LIS_SCALAR alpha, LIS_SCALAR x[],
                             LIS_SCALAR y[], LIS_SCALAR z[])
Fortran subroutine lis_array_axpyz(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR alpha, LIS_SCALAR x(),
                                  LIS_SCALAR y(), LIS_SCALAR z(), LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル和  $z = \alpha x + y$  を計算する.

#### 入力

n	ベクトルの次数
alpha	スカラ値
x, y	ベクトル $x, y$ を格納する配列

#### 出力

z	$\alpha x + y$
ierr	リターンコード

### 6.6.6 lis\_array\_scale

```
C      LIS_INT lis_array_scale(LIS_INT n, LIS_SCALAR alpha, LIS_SCALAR x[])
Fortran subroutine lis_array_scale(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR alpha, LIS_SCALAR x(),
                                  LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の要素を  $\alpha$  倍する.

#### 入力

n	ベクトルの次数
alpha	スカラ値
x	ベクトル $x$ を格納する配列

#### 出力

x	$\alpha x$ (ベクトル $x$ の値は上書きされる)
ierr	リターンコード

### 6.6.7 lis\_array\_pmul

```
C      LIS_INT lis_array_pmul(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[], LIS_SCALAR y[],
                             LIS_SCALAR z[])
Fortran subroutine lis_array_pmul(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(), LIS_SCALAR y(),
                                  LIS_SCALAR z(), LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の要素にベクトル  $y$  の対応する要素を掛ける.

#### 入力

n	ベクトルの次数
x, y	ベクトル $x, y$ を格納する配列

#### 出力

z	計算結果が格納された配列
ierr	リターンコード

### 6.6.8 lis\_array\_pdiv

```
C      LIS_INT lis_array_pdiv(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[], LIS_SCALAR y[],
                              LIS_SCALAR z[])
Fortran subroutine lis_array_pdiv(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(), LIS_SCALAR y(),
                                  LIS_SCALAR z(), LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の要素をベクトル  $y$  の対応する要素で割る.

#### 入力

n	ベクトルの次数
x, y	ベクトル $x, y$ を格納する配列

#### 出力

z	計算結果が格納された配列
ierr	リターンコード

### 6.6.9 lis\_array\_set\_all

```
C      LIS_INT lis_array_set_all(LIS_INT n, LIS_SCALAR value, LIS_SCALAR x[])
Fortran subroutine lis_array_set_all(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR value,
      LIS_SCALAR x(), LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の要素にスカラ値を代入する.

#### 入力

n	ベクトルの次数
value	代入するスカラ値
x	ベクトル $x$ を格納する配列

#### 出力

x	各要素にスカラ値が代入された配列
ierr	リターンコード

### 6.6.10 lis\_array\_abs

```
C      LIS_INT lis_array_abs(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[])
Fortran subroutine lis_array_abs(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(), LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の要素の絶対値を求める.

#### 入力

n	ベクトルの次数
x	ベクトル $x$ を格納する配列

#### 出力

x	各要素の絶対値が格納された配列
ierr	リターンコード

### 6.6.11 lis\_array\_reciprocal

```
C      LIS_INT lis_array_reciprocal(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[])
Fortran subroutine lis_array_reciprocal(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(),
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の要素の逆数を求める。

#### 入力

n	ベクトルの次数
x	ベクトル $x$ を格納する配列

#### 出力

x	各要素の逆数が格納された配列
ierr	リターンコード

### 6.6.12 lis\_array\_conjugate

```
C      LIS_INT lis_array_conjugate(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[])
Fortran subroutine lis_array_conjugate(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(),
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の要素の共役複素数を求める。

#### 入力

n	ベクトルの次数
x	ベクトル $x$ を格納する配列

#### 出力

x	各要素の共役複素数が格納された配列
ierr	リターンコード

### 6.6.13 lis\_array\_shift

```
C      LIS_INT lis_array_shift(LIS_INT n, LIS_SCALAR sigma, LIS_SCALAR x[])
Fortran subroutine lis_array_shift(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR sigma, LIS_SCALAR x(),
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  をシフトする.

#### 入力

n	ベクトルの次数
sigma	シフト量
x	ベクトル $x$ を格納する配列

#### 出力

x	各要素のシフト後の値 $x_i - \sigma$ が格納された配列
ierr	リターンコード

### 6.6.14 lis\_array\_dot

```
C      LIS_INT lis_array_dot(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[], LIS_SCALAR y[],
      LIS_SCALAR *value)
Fortran subroutine lis_array_dot(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(), LIS_SCALAR y(),
      LIS_SCALAR value, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

エルミート内積  $x^H y$  を計算する.

#### 入力

n	ベクトルの次数
x, y	ベクトル $x, y$ を格納する配列

#### 出力

value	エルミート内積
ierr	リターンコード

### 6.6.15 lis\_array\_nhdot

```
C      LIS_INT lis_array_nhdot(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[], LIS_SCALAR y[],
                             LIS_SCALAR *value)
Fortran subroutine lis_array_nhdot(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(), LIS_SCALAR y(),
                                  LIS_SCALAR value, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

非エルミート内積  $x^T y$  を計算する.

#### 入力

n	ベクトルの次数
x, y	ベクトル $x, y$ を格納する配列

#### 出力

value	非エルミート内積
ierr	リターンコード

### 6.6.16 lis\_array\_nrm1

```
C      LIS_INT lis_array_nrm1(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[], LIS_REAL *value)
Fortran subroutine lis_array_nrm1(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(), LIS_REAL value,
                                  LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の 1 ノルムを計算する.

#### 入力

n	ベクトルの次数
x	ベクトル $x$ を格納する配列

#### 出力

value	ベクトルの 1 ノルム
ierr	リターンコード



### 6.6.17 lis\_array\_nrm2

```
C      LIS_INT lis_array_nrm2(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[], LIS_REAL *value)
Fortran subroutine lis_array_nrm2(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(), LIS_REAL value,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の 2 ノルムを計算する.

#### 入力

n	ベクトルの次数
x	ベクトル $x$ を格納する配列

#### 出力

value	ベクトルの 2 ノルム
ierr	リターンコード

### 6.6.18 lis\_array\_nrmi

```
C      LIS_INT lis_array_nrmi(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[], LIS_REAL *value)
Fortran subroutine lis_array_nrmi(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(), LIS_REAL value,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の無限大ノルムを計算する.

#### 入力

n	ベクトルの次数
x	ベクトル $x$ を格納する配列

#### 出力

value	ベクトルの無限大ノルム
ierr	リターンコード

### 6.6.19 lis\_array\_sum

```
C      LIS_INT lis_array_sum(LIS_INT n, LIS_SCALAR x[], LIS_SCALAR *value)
Fortran subroutine lis_array_sum(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR x(), LIS_SCALAR value,
                                LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトル  $x$  の要素の和を計算する.

#### 入力

n	ベクトルの次数
x	ベクトル $x$ を格納する配列

#### 出力

value	ベクトルの要素の和
ierr	リターンコード

### 6.6.20 lis\_array\_matvec

```
C      LIS_INT lis_array_matvec(LIS_INT n, LIS_SCALAR a[], LIS_SCALAR x[],
      LIS_SCALAR y[], LIS_INT op)
Fortran subroutine lis_array_matvec(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR a(), LIS_SCALAR x(),
      LIS_SCALAR y(), LIS_INTEGER op, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列ベクトル積  $Ax$  を計算する.

#### 入力

n	行列の次数
a	次数 $n \times n$ の行列 $A$ を格納する配列
x	次数 $n$ のベクトル $x$ を格納する配列
y	次数 $n$ のベクトル $y$ を格納する配列
op	LIS_INS.VALUE 挿入: $y = Ax$ LIS_SUB.VALUE 減算代入: $y = y - Ax$

#### 出力

y	$y$
ierr	リターンコード

### 6.6.21 lis\_array\_matvech

```
C      LIS_INT lis_array_matvech(LIS_INT n, LIS_SCALAR a[], LIS_SCALAR x[],
                                LIS_SCALAR y[], LIS_INT op)
Fortran subroutine lis_array_matvech(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR a(), LIS_SCALAR x(),
                                     LIS_SCALAR y(), LIS_INTEGER op, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列ベクトル積  $A^H x$  を計算する.

#### 入力

n	行列の次数
a	次数 $n \times n$ の行列 $A$ を格納する配列
x	次数 $n$ のベクトル $x$ を格納する配列
y	次数 $n$ のベクトル $y$ を格納する配列
op	LIS_INS.VALUE 挿入: $y = A^H x$ LIS_SUB.VALUE 減算代入: $y = y - H^T x$

#### 出力

y	$y$
ierr	リターンコード

### 6.6.22 lis\_array\_matvec\_ns

```
C      LIS_INT lis_array_matvec_ns(LIS_INT m, LIS_INT n, LIS_SCALAR a[],
      LIS_INT lda, LIS_SCALAR x[], LIS_SCALAR y[], LIS_INT op)
Fortran subroutine lis_array_matvec_ns(LIS_INTEGER m, LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR a(),
      LIS_INTEGER lda, LIS_SCALAR x(), LIS_SCALAR y(), LIS_INTEGER op,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列  $A$  が正方形でない場合に行列ベクトル積  $Ax$  を計算する。

#### 入力

<code>m, n</code>	行列の次数
<code>a</code>	次数 $m \times n$ の行列 $A$ を格納する配列
<code>lda</code>	配列 $A$ の第一次元の次数
<code>x</code>	次数 $n$ のベクトル $x$ を格納する配列
<code>y</code>	次数 $m$ のベクトル $y$ を格納する配列
<code>op</code>	LIS_INS.VALUE 挿入: $y = Ax$ LIS_SUB.VALUE 減算代入: $y = y - Ax$

#### 出力

<code>y</code>	$y$
<code>ierr</code>	リターンコード

### 6.6.23 lis\_array\_matmat

```
C      LIS_INT lis_array_matmat(LIS_INT n, LIS_SCALAR a[], LIS_SCALAR b[],
                               LIS_SCALAR c[], LIS_INT op)
Fortran subroutine lis_array_matmat(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR a(), LIS_SCALAR b(),
                                   LIS_SCALAR c(), LIS_INTEGER op, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列積  $AB$  を計算する.

#### 入力

n	行列の次数
a	次数 $n \times n$ の行列 $A$ を格納する配列
b	次数 $n \times n$ の行列 $B$ を格納する配列
c	次数 $n \times n$ の行列 $C$ を格納する配列
op	LIS_INS.VALUE 挿入: $C = AB$ LIS_SUB.VALUE 減算代入: $C = C - AB$

#### 出力

c	$C$
ierr	リターンコード

### 6.6.24 lis\_array\_matmat\_ns

```
C      LIS_INT lis_array_matmat_ns(LIS_INT l, LIS_INT m, LIS_INT n,  
      LIS_SCALAR a[], LIS_INT lda, LIS_SCALAR b[], LIS_INT ldb, LIS_SCALAR c[],  
      LIS_INT ldc, LIS_INT op)  
Fortran subroutine lis_array_matmat_ns(LIS_INTEGER l, LIS_INTEGER m, LIS_INTEGER n,  
      LIS_SCALAR a(), LIS_INTEGER lda, LIS_SCALAR b(), LIS_INTEGER ldb,  
      LIS_SCALAR c(), LIS_INTEGER ldc, LIS_INTEGER op, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列  $A$ ,  $B$  が正方でない場合に積  $AB$  を計算する.

#### 入力

<code>l, m, n</code>	行列の次数
<code>a</code>	次数 $l \times m$ の行列 $A$ を格納する配列
<code>lda</code>	配列 $A$ の第一次元の次数
<code>b</code>	次数 $m \times n$ の行列 $B$ を格納する配列
<code>ldb</code>	配列 $B$ の第一次元の次数
<code>c</code>	次数 $l \times n$ の行列 $C$ を格納する配列
<code>ldc</code>	配列 $C$ の第一次元の次数
<code>op</code>	LIS_INS.VALUE 挿入: $C = AB$ LIS_SUB.VALUE 減算代入: $C = C - AB$

#### 出力

<code>c</code>	$C$
<code>ierr</code>	リターンコード

### 6.6.25 lis\_array\_ge

```
C      LIS_INT lis_array_ge(LIS_INT n, LIS_SCALAR a[])
Fortran subroutine lis_array_solve(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR a(), LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

Gauss の消去法を用いて行列  $A$  の逆を計算する.

#### 入力

n	行列の次数
a	次数 $n \times n$ の行列 $A$ を格納する配列

#### 出力

a	$A^{-1}$
ierr	リターンコード

### 6.6.26 lis\_array\_solve

```
C      LIS_INT lis_array_solve(LIS_INT n, LIS_SCALAR a[], LIS_SCALAR b[],
                               LIS_SCALAR x[], LIS_SCALAR w[])
Fortran subroutine lis_array_solve(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR a(), LIS_SCALAR b(),
                                   LIS_SCALAR x(), LIS_SCALAR w(), LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

直接法を用いて線型方程式  $Ax = b$  を解く.

#### 入力

n	行列の次数
a	次数 $n \times n$ の係数行列 $A$ を格納する配列
b	次数 $n$ の右辺ベクトル $b$ を格納する配列
w	要素数 $n \times n$ の作業配列

#### 出力

x	解 $x$
ierr	リターンコード



### 6.6.27 lis\_array\_cgs

```
C      LIS_INT lis_array_cgs(LIS_INT n, LIS_SCALAR a[], LIS_SCALAR q[],
                           LIS_SCALAR r[])
Fortran subroutine lis_array_cgs(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR a(), LIS_SCALAR q(),
                               LIS_SCALAR r(), LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

古典 Gram-Schmidt 法を用いて QR 分解  $QR = A$  を計算する.

#### 入力

n                                    行列の次数  
a                                    次数  $n \times n$  の行列  $A$  を格納する配列

#### 出力

q                                    次数  $n \times n$  の直交行列  $Q$  が格納された配列  
r                                    次数  $n \times n$  の上三角行列  $R$  が格納された配列  
ierr                                 リターンコード

### 6.6.28 lis\_array\_mgs

```
C      LIS_INT lis_array_mgs(LIS_INT n, LIS_SCALAR a[], LIS_SCALAR q[],
                           LIS_SCALAR r[])
Fortran subroutine lis_array_mgs(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR a(), LIS_SCALAR q(),
                               LIS_SCALAR r(), LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

修正 Gram-Schmidt 法を用いて QR 分解  $QR = A$  を計算する.

#### 入力

n                                    行列の次数  
a                                    次数  $n \times n$  の行列  $A$  を格納する配列

#### 出力

q                                    次数  $n \times n$  の直交行列  $Q$  が格納された配列  
r                                    次数  $n \times n$  の上三角行列  $R$  が格納された配列  
ierr                                 リターンコード

### 6.6.29 lis\_array\_qr

```
C      LIS_INT lis_array_qr(LIS_INT n, LIS_SCALAR a[], LIS_SCALAR q[],
      LIS_SCALAR r[], LIS_INT *qr iter, LIS_REAL *qrerr)
Fortran subroutine lis_array_qr(LIS_INTEGER n, LIS_SCALAR a(), LIS_SCALAR q(),
      LIS_SCALAR r(), LIS_INTEGER qr iter, LIS_REAL qrerr, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

QR 法を用いて行列  $A$  の固有値を計算する。

#### 入力

n	行列の次数
a	次数 $n \times n$ の行列 $A$ を格納する配列
q	要素数 $n \times n$ の作業配列 $Q$
r	要素数 $n \times n$ の作業配列 $R$

#### 出力

a	固有値をブロック対角要素に持つ相似変換後のブロック上三角行列 $A$ が格納された配列
qr iter	QR 法の反復回数
qrerr	相似変換後の第 1 劣対角要素 $A(2, 1)$ の 2 ノルム
ierr	リターンコード

## 6.7 ファイルの操作

### 6.7.1 lis\_input

```
C      LIS_INT lis_input(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR b, LIS_VECTOR x, char *filename)
Fortran subroutine lis_input(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR b, LIS_VECTOR x,
      character filename, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

外部ファイルから行列, ベクトルデータを読み込む.

#### 入力

filename                      ファイル名

#### 出力

A                              指定された格納形式の行列

b                              右辺ベクトル

x                              解ベクトル

ierr                          リターンコード

#### 注釈

対応するファイル形式は以下の通りである.

- 拡張 Matrix Market 形式 (ベクトルデータに対応)
- Harwell-Boeing 形式

これらのデータ構造については付録 A を参照のこと.

## 6.7.2 lis\_input\_vector

```
C      LIS_INT lis_input_vector(LIS_VECTOR v, char *filename)
Fortran subroutine lis_input_vector(LIS_VECTOR v, character filename,
      LIS_INTEGER ierr)
```

### 機能

外部ファイルからベクトルデータを読み込む。

### 入力

filename                      ファイル名

### 出力

v                              ベクトル

ierr                          リターンコード

### 注釈

対応するファイル形式は

- PLAIN 形式
- 拡張 Matrix Market 形式 (ベクトルデータに対応)

これらのデータ構造については付録 A を参照のこと。

### 6.7.3 lis\_input\_matrix

```
C      LIS_INT lis_input_matrix(LIS_MATRIX A, char *filename)
Fortran subroutine lis_input_matrix(LIS_MATRIX A, character filename,
      LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

外部ファイルから行列データを読み込む。

#### 入力

filename                      ファイル名

#### 出力

A                              指定された格納形式の行列

ierr                          リターンコード

#### 注釈

対応するファイル形式は以下の通りである。

- Matrix Market 形式
- Harwell-Boeing 形式

これらのデータ構造については付録 A を参照のこと。

#### 6.7.4 lis\_output

```
C      LIS_INT lis_output(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR b, LIS_VECTOR x,
      LIS_INT format, char *filename)
Fortran subroutine lis_output(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR b, LIS_VECTOR x,
      LIS_INTEGER format, character filename, LIS_INTEGER ierr)
```

##### 機能

行列, ベクトルデータを外部ファイルに書き込む.

##### 入力

A	行列	
b	右辺ベクトル	
x	解ベクトル	
format	ファイル形式	
	LIS_FMT_MM	Matrix Market 形式
filename	ファイル名	

##### 出力

ierr	リターンコード
------	---------

##### 注釈

ファイル形式のデータ構造については付録 A を参照のこと.

C 言語版において, ベクトルをファイルに書き込まない場合は NULL を代入することができる.

### 6.7.5 lis\_output\_vector

```
C      LIS_INT lis_output_vector(LIS_VECTOR v, LIS_INT format, char *filename)
Fortran subroutine lis_output_vector(LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER format,
      character filename, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

ベクトルデータを外部ファイルに書き込む。

#### 入力

<code>v</code>	ベクトル	
<code>format</code>	ファイル形式	
	<code>LIS_FMT_PLAIN</code>	PLAIN 形式
	<code>LIS_FMT_MM</code>	Matrix Market 形式
<code>filename</code>	ファイル名	

#### 出力

<code>ierr</code>	リターンコード
-------------------	---------

#### 注釈

ファイル形式のデータ構造については付録 A を参照のこと。

### 6.7.6 lis\_output\_matrix

```
C      LIS_INT lis_output_matrix(LIS_MATRIX A, LIS_INT format, char *filename)
Fortran subroutine lis_output_matrix(LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER format,
      character filename, LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

行列データを外部ファイルに書き込む。

#### 入力

A	行列	
format	ファイル形式	
	LIS_FMT_MM	Matrix Market 形式
filename	ファイル名	

#### 出力

ierr	リターンコード
------	---------



## 6.8 その他

### 6.8.1 lis\_initialize

```
C      LIS_INT lis_initialize(int* argc, char** argv[])
Fortran subroutine lis_initialize(LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

MPI の初期化, コマンドライン引数の取得等の初期化処理を行う.

#### 入力

argc	コマンドライン引数の数
argv	コマンドライン引数

#### 出力

ierr	リターンコード
------	---------

### 6.8.2 lis\_finalize

```
C      LIS_INT lis_finalize()
Fortran subroutine lis_finalize(LIS_INTEGER ierr)
```

#### 機能

終了処理を行う.

#### 入力

なし

#### 出力

ierr	リターンコード
------	---------



## 6.8.5 lis\_printf

```
C LIS_INT lis_printf(LIS_Comm comm, const char *mess, ...)
```

### 機能

プロセス 0 上で書式付きの文字列を出力する.

### 入力

`comm` MPI コミュニケータ

### 出力

`mess` 文字列

### 注釈

文字列において, '%D' は LIS\_INT が long long int の場合には '%lld' に, int の場合には '%d' に置き換えられる.

逐次, マルチスレッド環境では, `comm` の値は無視される.

## 参考文献

- [1] A. Nishida. Experience in Developing an Open Source Scalable Software Infrastructure in Japan. Lecture Notes in Computer Science 6017, pp. 87-98, Springer, 2010.
- [2] M. R. Hestenes and E. Stiefel. Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems. Journal of Research of the National Bureau of Standards, Vol. 49, No. 6, pp. 409-436, 1952.
- [3] C. Lanczos. Solution of Linear Equations by Minimized Iterations. Journal of Research of the National Bureau of Standards, Vol. 49, No. 1, pp. 33-53, 1952.
- [4] R. Fletcher. Conjugate Gradient Methods for Indefinite Systems. Lecture Notes in Mathematics 506, pp. 73-89, Springer, 1976.
- [5] P. Joly and G. Meurant. Complex Conjugate Gradient Methods. Numerical Algorithms, Vol. 4, pp. 379-406, 1993.
- [6] M. D. Pockock and S. P. Walker. The Complex Bi-Conjugate Gradient Solver Applied to Large Electromagnetic Scattering Problems, Computational Costs, and Cost Scalings. IEEE Transactions on Antennas and Propagation, Vol. 45, No. 1, pp. 140-146, 1997.
- [7] T. Sogabe, M. Sugihara, and S. Zhang. An Extension of the Conjugate Residual Method to Nonsymmetric Linear Systems. Journal of Computational and Applied Mathematics, Vol. 226, No. 1, pp. 103-113, 2009.
- [8] P. Sonneveld. CGS, A Fast Lanczos-Type Solver for Nonsymmetric Linear Systems. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, Vol. 10, No. 1, pp. 36-52, 1989.
- [9] K. Abe, T. Sogabe, S. Fujino, and S. Zhang. A Product-Type Krylov Subspace Method Based on Conjugate Residual Method for Nonsymmetric Coefficient Matrices (in Japanese). IPSJ Transactions on Advanced Computing Systems, Vol. 48, No. SIG8(ACS18), pp. 11-21, 2007.
- [10] H. van der Vorst. Bi-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of Bi-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems. SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing, Vol. 13, No. 2, pp. 631-644, 1992.
- [11] S. Zhang. Generalized Product-Type Methods Preconditionings Based on Bi-CG for Solving Nonsymmetric Linear Systems. SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 18, No. 2, pp. 537-551, 1997.
- [12] S. Fujino, M. Fujiwara, and M. Yoshida. A Proposal of Preconditioned BiCGSafe Method with Safe Convergence. Proceedings of The 17th IMACS World Congress on Scientific Computation, Applied Mathematics and Simulation, CD-ROM, 2005.
- [13] S. Fujino and Y. Onoue. Estimation of BiCRSafe Method Based on Residual of BiCR Method (in Japanese). IPSJ SIG Technical Report, 2007-HPC-111, pp. 25-30, 2007.
- [14] G. L. G. Sleijpen, H. A. van der Vorst, and D. R. Fokkema. BiCGstab(l) and Other Hybrid Bi-CG Methods. Numerical Algorithms, Vol. 7, No. 1, pp. 75-109, 1994.

- [15] R. W. Freund. A Transpose-Free Quasi-Minimal Residual Algorithm for Non-Hermitian Linear Systems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 14, No. 2, pp. 470–482, 1993.
- [16] K. R. Biermann. Eine unveröffentlichte Jugendarbeit C. G. J. Jacobi über wiederholte Funktionen. *Journal für die reine und angewandte Mathematik*, Vol. 207, pp. 996–112, 1961.
- [17] S. C. Eisenstat, H. C. Elman, and M. H. Schultz. Variational Iterative Methods for Nonsymmetric Systems of Linear Equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 20, No. 2, pp. 345–357, 1983.
- [18] C. F. Gauss. *Theoria Motus Corporum Coelestium in Sectionibus Conicis Solem*. Perthes et Besser, 1809.
- [19] L. Seidel. Über ein Verfahren, die Gleichungen, auf welche die Methode der kleinsten Quadrate führt, sowie lineäre Gleichungen überhaupt, durch successive Annäherung aufzulösen. *Abhandlungen der Bayerischen Akademie*, Vol. 11, pp. 81–108, 1873.
- [20] Y. Saad and M. H. Schultz. GMRES: A Generalized Minimal Residual Algorithm for Solving Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, Vol. 7, No. 3, pp. 856–869, 1986.
- [21] D. M. Young. *Iterative Methods for Solving Partial Difference Equations of Elliptic Type*. Doctoral Thesis, Harvard University, 1950.
- [22] S. P. Frankel. Convergence Rates of Iterative Treatments of Partial Differential Equations. *Mathematical Tables and Other Aids to Computation*, Vol. 4, No. 30, pp. 65–75, 1950.
- [23] Y. Saad. A Flexible Inner-outer Preconditioned GMRES Algorithm. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, Vol. 14, No. 2, pp. 461–469, 1993.
- [24] P. Sonneveld and M. B. van Gijzen. IDR(s): A Family of Simple and Fast Algorithms for Solving Large Nonsymmetric Systems of Linear Equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 31, No. 2, pp. 1035–1062, 2008.
- [25] C. C. Paige and M. A. Saunders. Solution of Sparse Indefinite Systems of Linear Equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, Vol. 12, No. 4, pp. 617–629, 1975.
- [26] H. A. van der Vorst and J. B. M. Melissen. A Petrov-Galerkin Type Method for Solving  $Ax = b$ , where  $A$  is Symmetric Complex. *IEEE Transactions on Magnetics*, Vol. 26, No. 2, pp. 706–708, 1990.
- [27] T. Sogabe and S. Zhang. A COCR Method for Solving Complex Symmetric Linear Systems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 199, No. 2, pp. 297–303, 2007.
- [28] R. von Mises and H. Pollaczek-Geiringer. *Praktische Verfahren der Gleichungsauflösung*. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, Vol. 9, No. 2, pp. 152–164, 1929.
- [29] H. Wielandt. *Beiträge zur mathematischen Behandlung komplexer Eigenwertprobleme, Teil V: Bestimmung höherer Eigenwerte durch gebrochene Iteration*. Bericht B 44/J/37, Aerodynamische Versuchsanstalt Göttingen, 1944.

- [30] J. W. S. Rayleigh. Some General Theorems relating to Vibrations. Proceedings of the London Mathematical Society, Vol. 4, No. 1, pp. 357–368, 1873.
- [31] A. V. Knyazev. Toward the Optimal Preconditioned Eigensolver: Locally Optimal Block Preconditioned Conjugate Gradient Method. SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 23, No. 2, pp. 517–541, 2001.
- [32] E. Suetomi and H. Sekimoto. Conjugate Gradient Like Methods and Their Application to Eigenvalue Problems for Neutron Diffusion Equation. Annals of Nuclear Energy, Vol. 18, No. 4, pp. 205–227, 1991.
- [33] G. L. G. Sleijpen and H. A. van der Vorst. A Jacobi-Davidson Iteration Method for Linear Eigenvalue Problems. SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications, Vol. 17, No. 2, pp. 401–425, 1996.
- [34] H. R. Rutishauser. Computational Aspects of F. L. Bauser’s Simultaneous Iteration Method. Numerische Mathematik, Vol. 13, No. 1, pp. 4–13, 1969.
- [35] C. Lanczos. An Iteration Method for the Solution of the Eigenvalue Problem of Linear Differential and Integral Operators. Journal of Research of the National Bureau of Standards, Vol. 45, No. 4, pp. 255–282, 1950.
- [36] W. E. Arnoldi. The Principle of Minimized Iterations in the Solution of the Matrix Eigenvalue Problems. Quarterly of Applied Mathematics, Vol. 9, No. 17, pp. 17–29, 1951.
- [37] O. Axelsson. A Survey of Preconditioned Iterative Methods for Linear Systems of Equations. BIT, Vol. 25, No. 1, pp. 166–187, 1985.
- [38] I. Gustafsson. A Class of First Order Factorization Methods. BIT, Vol. 18, No. 2, pp. 142–156, 1978.
- [39] K. Nakajima, H. Nakamura, and T. Tanahashi. Parallel Iterative Solvers with Localized ILU Preconditioning. Lecture Notes in Computer Science 1225, pp. 342–350, 1997.
- [40] Y. Saad. ILUT: A Dual Threshold Incomplete LU Factorization. Numerical Linear Algebra with Applications, Vol. 1, No. 4, pp. 387–402, 1994.
- [41] Y. Saad, et al. ITSOL: ITERATIVE SOLVERS Package.  
<http://www-users.cs.umn.edu/~saad/software/ITSOL/>.
- [42] N. Li, Y. Saad, and E. Chow. Crout Version of ILU for General Sparse Matrices. SIAM Journal on Scientific Computing, Vol. 25, No. 2, pp. 716–728, 2003.
- [43] T. Kohno, H. Kotakemori, and H. Niki. Improving the Modified Gauss-Seidel Method for Z-matrices. Linear Algebra and its Applications, Vol. 267, pp. 113–123, 1997.
- [44] A. Fujii, A. Nishida, and Y. Oyanagi. Evaluation of Parallel Aggregate Creation Orders : Smoothed Aggregation Algebraic Multigrid Method. High Performance Computational Science and Engineering, pp. 99–122, Springer, 2005.
- [45] K. Abe, S. Zhang, H. Hasegawa, and R. Himeno. A SOR-base Variable Preconditioned CGR Method (in Japanese). Transactions of the JSIAM, Vol. 11, No. 4, pp. 157–170, 2001.

- [46] R. Bridson and W. P. Tang. Refining an Approximate Inverse. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 123, No. 1-2, pp. 293–306, 2000.
- [47] T. Chan and T. Mathew. Domain Decomposition Algorithms. *Acta Numerica*, Vol. 3, pp. 61–143, 1994.
- [48] M. Dryja and O. B. Widlund. Domain Decomposition Algorithms with Small Overlap. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 15, No. 3, pp. 604–620, 1994.
- [49] H. Kotakemori, H. Hasegawa, and A. Nishida. Performance Evaluation of a Parallel Iterative Method Library using OpenMP. *Proceedings of the 8th International Conference on High Performance Computing in Asia Pacific Region*, pp. 432–436, IEEE, 2005.
- [50] H. Kotakemori, H. Hasegawa, T. Kajiyama, A. Nukada, R. Suda, and A. Nishida. Performance Evaluation of Parallel Sparse Matrix-Vector Products on SGI Altix 3700. *Lecture Notes in Computer Science 4315*, pp. 153–163, Springer, 2008.
- [51] D. H. Bailey. A Fortran-90 Double-Double Library. <http://crd-legacy.lbl.gov/~dhbailey/mpdist/>.
- [52] Y. Hida, X. S. Li, and D. H. Bailey. Algorithms for Quad-Double Precision Floating Point Arithmetic. *Proceedings of the 15th Symposium on Computer Arithmetic*, pp. 155–162, 2001.
- [53] T. Dekker. A Floating-Point Technique for Extending the Available Precision. *Numerische Mathematik*, Vol. 18, No. 3, pp. 224–242, 1971.
- [54] D. E. Knuth. *The Art of Computer Programming: Seminumerical Algorithms*, Vol. 2. Addison-Wesley, 1969.
- [55] D. H. Bailey. High-Precision Floating-Point Arithmetic in Scientific Computation. *Computing in Science and Engineering*, Vol. 7, No. 3, pp. 54–61, IEEE, 2005.
- [56] Intel Fortran Compiler for Linux Systems User’s Guide, Vol I. Intel Corporation, 2004.
- [57] H. Kotakemori, A. Fujii, H. Hasegawa, and A. Nishida. Implementation of Fast Quad Precision Operation and Acceleration with SSE2 for Iterative Solver Library (in Japanese). *IPJS Transactions on Advanced Computing Systems*, Vol. 1, No. 1, pp. 73–84, 2008.
- [58] R. Courant and D. Hilbert. *Methods of Mathematical Physics*. Wiley-VCH, 1989.
- [59] C. Lanczos. *The Variational Principles of Mechanics*, 4th Edition. University of Toronto Press, 1970.
- [60] J. H. Wilkinson. *The Algebraic Eigenvalue Problem*. Oxford University Press, 1988.
- [61] D. M. Young. *Iterative Solution of Large Linear Systems*. Academic Press, 1971.
- [62] G. H. Golub and C. F. Van Loan. *Matrix Computations*, 3rd Edition. The Johns Hopkins University Press, 1996.
- [63] J. J. Dongarra, I. S. Duff, D. C. Sorensen, and H. A. van der Vorst. *Solving Linear Systems on Vector and Shared Memory Computers*. SIAM, 1991.

- [64] Y. Saad. Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems. Halsted Press, 1992.
- [65] R. Barrett, et al. Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods. SIAM, 1994.
- [66] Y. Saad. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. Second Edition. SIAM, 2003.
- [67] A. Greenbaum. Iterative Methods for Solving Linear Systems. SIAM, 1997.
- [68] Z. Bai, et al. Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems. SIAM, 2000.
- [69] J. H. Wilkinson and C. Reinsch. Handbook for Automatic Computation, Vol. 2: Linear Algebra. Grundlehren Der Mathematischen Wissenschaften, Vol. 186, Springer, 1971.
- [70] B. T. Smith, J. M. Boyle, Y. Ikebe, V. C. Klema, and C. B. Moler. Matrix Eigensystem Routines: EISPACK Guide, 2nd ed. Lecture Notes in Computer Science 6, Springer, 1970.
- [71] B. S. Garbow, J. M. Boyle, J. J. Dongarra, and C. B. Moler. Matrix Eigensystem Routines: EISPACK Guide Extension. Lecture Notes in Computer Science 51, Springer, 1972.
- [72] J. J. Dongarra, J. R. Bunch, G. B. Moler, and G. M. Stewart. LINPACK Users' Guide. SIAM, 1979.
- [73] J. R. Rice and R. F. Boisvert. Solving Elliptic Problems Using ELLPACK. Springer, 1985.
- [74] E. Anderson, et al. LAPACK Users' Guide. 3rd ed. SIAM, 1987.
- [75] J. Dongarra, A. Lumsdaine, R. Pozo, and K. Remington. A Sparse Matrix Library in C++ for High Performance Architectures. Proceedings of the Second Object Oriented Numerics Conference, pp. 214–218, 1992.
- [76] I. S. Duff, R. G. Grimes, and J. G. Lewis. Users' Guide for the Harwell-Boeing Sparse Matrix Collection (Release I). Technical Report TR/PA/92/86, CERFACS, 1992.
- [77] Y. Saad. SPARSKIT: A Basic Tool Kit for Sparse Matrix Computations, Version 2, 1994. <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/software/SPARSKIT/>.
- [78] A. Geist, et al. PVM: Parallel Virtual Machine. MIT Press, 1994.
- [79] R. Bramley and X. Wang. SPLIB: A library of Iterative Methods for Sparse Linear System. Technical Report, Department of Computer Science, Indiana University, 1995.
- [80] R. F. Boisvert, et al. The Matrix Market Exchange Formats: Initial Design. Technical Report NISTIR 5935, National Institute of Standards and Technology, 1996.
- [81] L. S. Blackford, et al. ScaLAPACK Users' Guide. SIAM, 1997.
- [82] R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen, and C. Yang. ARPACK Users' Guide: Solution of Large-Scale Eigenvalue Problems with Implicitly-Restarted Arnoldi Methods. SIAM, 1998.
- [83] R. S. Tuminaro, et al. Official Aztec User's Guide, Version 2.1. Technical Report SAND99-8801J, Sandia National Laboratories, 1999.



- [84] W. Gropp, E. Lusk, and A. Skjellum. *Using MPI, 2nd Edition: Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface*. MIT Press, 1999.
- [85] K. Garatani, H. Nakamura, H. Okuda, and G. Yagawa. *GeoFEM: High Performance Parallel FEM for Solid Earth*. *Lecture Notes in Computer Science* 1593, pp. 133–140, Springer, 1999.
- [86] S. Balay, et al. *PETSc Users Manual*. Technical Report ANL-95/11, Argonne National Laboratory, 2004.
- [87] V. Hernandez, J. E. Roman, and V. Vidal. *SLEPc: A Scalable and Flexible Toolkit for the Solution of Eigenvalue Problems*. *ACM Transactions on Mathematical Software*, Vol. 31, No. 3, pp. 351–362, 2005.
- [88] M. A. Heroux, et al. *An Overview of the Trilinos Project*. *ACM Transactions on Mathematical Software*, Vol. 31, No. 3, pp. 397–423, 2005.
- [89] R. D. Falgout, J. E. Jones, and U. M. Yang. *The Design and Implementation of hypre, a Library of Parallel High Performance Preconditioners*. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering* 51, pp. 209–236, Springer, 2006.
- [90] B. Chapman, G. Jost, and R. van der Pas. *Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming*. MIT Press, 2007.
- [91] J. Dongarra and M. Heroux. *Toward a New Metric for Ranking High Performance Computing Systems*. Technical Report SAND2013-4744, Sandia National Laboratories, 2013.

## A ファイル形式

本節では、本ライブラリで使用できるファイル形式について述べる。なお Harwell-Boeing 形式では、行列が対称である場合にも上三角及び下三角要素の双方を格納する必要がある。

### A.1 拡張 Matrix Market 形式

Matrix Market 形式はベクトルデータの格納に対応していないため、拡張 Matrix Market 形式では行列とベクトルを合わせて格納できるよう仕様を拡張する。 $M \times N$  の行列  $A = (a_{ij})$  の非零要素数を  $L$  とする。 $a_{ij} = A(I, J)$  とする。ファイル形式を以下に示す。

```
%%MatrixMarket matrix coordinate real general <-- ヘッダ
% <--+
% | 0 行以上のコメント行
% <--+
M N L B X <-- 行数 列数 非零要素数 (0 or 1) (0 or 1)
I1 J1 A(I1,J1) <--+
I2 J2 A(I2,J2) | 行番号 列番号 値
. . . | 配列起点は 1
IL JL A(IL,JL) <--+
I1 B(I1) <--+
I2 B(I2) | 右辺ベクトル (B=1 の場合のみ存在する)
. . . | 行番号 値
IM B(IM) <--+
I1 X(I1) <--+
I2 X(I2) | 解 (X=1 の場合のみ存在する)
. . . | 行番号 値
IM X(IM) <--+
```

(A.1) 式の行列  $A$  とベクトル  $b$  に対するファイル形式を以下に示す。

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & & \\ 1 & 2 & 1 & \\ & 1 & 2 & 1 \\ & & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

```
%%MatrixMarket matrix coordinate real general
4 4 10 1 0
1 2 1.00e+00
1 1 2.00e+00
2 3 1.00e+00
2 1 1.00e+00
2 2 2.00e+00
3 4 1.00e+00
3 2 1.00e+00
3 3 2.00e+00
4 4 2.00e+00
4 3 1.00e+00
1 0.00e+00
2 1.00e+00
3 2.00e+00
4 3.00e+00
```

## A.2 Harwell-Boeing 形式

Harwell-Boeing 形式では, CSC 形式で行列を格納する. `value` を行列  $A$  の非零要素の値, `index` を非零要素の行番号, `ptr` を `value` と `index` の各列の開始位置を格納する配列とする. ファイル形式を以下に示す.

```

第 1 行 (A72,A8)
  1 - 72 Title
  73 - 80 Key
第 2 行 (5I14)
  1 - 14 ヘッダを除く総行数
  15 - 28 ptr の行数
  29 - 42 index の行数
  43 - 56 value の行数
  57 - 70 右辺ベクトルの行数
第 3 行 (A3,11X,4I14)
  1 - 3 行列の種類
      第 1 列:
        R Real matrix
        C Complex matrix
        P Pattern only (非対応)
      第 2 列:
        S Symmetric (非対応)
        U Unsymmetric
        H Hermitian (非対応)
        Z Skew symmetric (非対応)
        R Rectangular (非対応)
      第 3 列:
        A Assembled
        E Elemental matrices (非対応)
  4 - 14 空白
  15 - 28 行数
  29 - 42 列数
  43 - 56 非零要素数
  57 - 70 0
第 4 行 (2A16,2A20)
  1 - 16 ptr の形式
  17 - 32 index の形式
  33 - 52 value の形式
  53 - 72 右辺の形式
第 5 行 (A3,11X,2I14) 右辺ベクトルが存在する場合
  1   右辺ベクトルの種類
      F フルベクトル
      M 行列と同じ形式 (非対応)
  2   初期値が与えられるならば G
  3   解が与えられるならば X
  4 - 14 空白
  15 - 28 右辺ベクトルの数
  29 - 42 非零要素数

```

(A.1) 式の行列  $A$  とベクトル  $b$  に対するファイル形式を以下に示す.

```

1-----10-----20-----30-----40-----50-----60-----70-----80
Harwell-Boeing format sample                               Lis
      8           1           1           4           2
RUA      4           4           10          4
(11i7)      (13i6)      (3e26.18)      (3e26.18)
F           1           0
      1   3   6   9

```

```

      1      2      1      2      3      2      3      4      3      4
2.000000000000000000000000E+00  1.0000000000000000000000E+00  1.0000000000000000000000E+00
2.000000000000000000000000E+00  1.0000000000000000000000E+00  1.0000000000000000000000E+00
2.000000000000000000000000E+00  1.0000000000000000000000E+00  1.0000000000000000000000E+00
2.000000000000000000000000E+00
0.000000000000000000000000E+00  1.0000000000000000000000E+00  2.0000000000000000000000E+00
3.000000000000000000000000E+00

```

### A.3 ベクトル用拡張 Matrix Market 形式

ベクトル用拡張 Matrix Market 形式では、ベクトルデータを格納できるように Matrix Market 形式の仕様を拡張する。次数  $N$  のベクトル  $b = (b_i)$  に対して  $b_i = B(I)$  とする。ファイル形式を以下に示す。

```

%%MatrixMarket vector coordinate real general <-- ヘッダ
% <--+
% | 0 行以上のコメント行
% <--+
N <-- 行数
I1 B(I1) <--+
I2 B(I2) | 行番号 値
. . . | 配列起点は 1
IN B(IN) <--+

```

(A.1) 式のベクトル  $b$  に対するファイル形式を以下に示す。

```

%%MatrixMarket vector coordinate real general
4
1 0.00e+00
2 1.00e+00
3 2.00e+00
4 3.00e+00

```

### A.4 ベクトル用 PLAIN 形式

ベクトル用 PLAIN 形式は、ベクトルの値を第 1 要素から順に書き出したものである。次数  $N$  のベクトル  $b = (b_i)$  に対して  $b_i = B(I)$  とする。ファイル形式を以下に示す。

```

B(1) <--+
B(2) | N 個
. . . |
B(N) <--+

```

(A.1) 式のベクトル  $b$  に対するファイル形式を以下に示す。

```

0.00e+00
1.00e+00
2.00e+00
3.00e+00

```