

Lis ユーザガイド

バージョン 1.4.29



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

Copyright © 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.

表紙: 尾形光琳. 燕子花図. 1705 年頃. 根津美術館.

目 次

1	はじめに	3
2	導入	4
2.1	システム要件	4
2.2	UNIX 及び互換システムへの導入	4
2.2.1	アーカイブの展開	4
2.2.2	ソースツリーの設定	5
2.2.3	実行ファイルの生成	5
2.2.4	導入	8
2.3	Windows システムへの導入	9
2.4	検証	9
2.4.1	test1	9
2.4.2	test2	10
2.4.3	test2b	10
2.4.4	test3	10
2.4.5	test3b	11
2.4.6	test4	11
2.4.7	test5	11
2.4.8	etest1	11
2.4.9	etest2	12
2.4.10	etest3	12
2.4.11	etest4	12
2.4.12	etest5	12
2.4.13	etest6	13
2.4.14	spmvtest1	13
2.4.15	spmvtest2	13
2.4.16	spmvtest2b	14
2.4.17	spmvtest3	14
2.4.18	spmvtest3b	14
2.4.19	spmvtest4	14
2.4.20	spmvtest5	15
2.5	制限事項	15
3	基本操作	16
3.1	初期化・終了処理	16
3.2	ベクトル操作	17
3.3	行列操作	20
3.4	線型方程式の求解	26
3.5	固有値問題の求解	31
3.6	プログラムの作成	33
3.7	実行ファイルの生成	36

3.8	実行	38
4	4 倍精度演算	40
4.1	4 倍精度演算の使用	40
5	行列格納形式	42
5.1	Compressed Sparse Row (CSR)	42
5.1.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	42
5.1.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	43
5.1.3	関連する関数	43
5.2	Compressed Sparse Column (CSC)	44
5.2.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	44
5.2.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	45
5.2.3	関連する関数	45
5.3	Modified Compressed Sparse Row (MSR)	46
5.3.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	46
5.3.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	47
5.3.3	関連する関数	47
5.4	Diagonal (DIA)	48
5.4.1	行列の作成 (逐次環境)	48
5.4.2	行列の作成 (マルチスレッド環境)	49
5.4.3	行列の作成 (マルチプロセス環境)	50
5.4.4	関連する関数	50
5.5	Ellpack-Itpack Generalized Diagonal (ELL)	51
5.5.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	51
5.5.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	52
5.5.3	関連する関数	52
5.6	Jagged Diagonal (JAD)	53
5.6.1	行列の作成 (逐次環境)	54
5.6.2	行列の作成 (マルチスレッド環境)	55
5.6.3	行列の作成 (マルチプロセス環境)	56
5.6.4	関連する関数	56
5.7	Block Sparse Row (BSR)	58
5.7.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	58
5.7.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	59
5.7.3	関連する関数	59
5.8	Block Sparse Column (BSC)	60
5.8.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	60
5.8.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	61
5.8.3	関連する関数	61
5.9	Variable Block Row (VBR)	62
5.9.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	63
5.9.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	64

5.9.3	関連する関数	65
5.10	Coordinate (COO)	66
5.10.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	66
5.10.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	67
5.10.3	関連する関数	67
5.11	Dense (DNS)	68
5.11.1	行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)	68
5.11.2	行列の作成 (マルチプロセス環境)	69
5.11.3	関連する関数	69
6	関数	70
6.1	ベクトル操作	71
6.1.1	lis_vector_create	71
6.1.2	lis_vector_destroy	71
6.1.3	lis_vector_duplicate	72
6.1.4	lis_vector_set_size	73
6.1.5	lis_vector_get_size	74
6.1.6	lis_vector_get_range	74
6.1.7	lis_vector_set_value	75
6.1.8	lis_vector_get_value	76
6.1.9	lis_vector_set_values	77
6.1.10	lis_vector_get_values	78
6.1.11	lis_vector_scatter	79
6.1.12	lis_vector_gather	79
6.1.13	lis_vector_copy	80
6.1.14	lis_vector_set_all	80
6.1.15	lis_vector_is_null	81
6.2	行列操作	82
6.2.1	lis_matrix_create	82
6.2.2	lis_matrix_destroy	82
6.2.3	lis_matrix_duplicate	83
6.2.4	lis_matrix_malloc	83
6.2.5	lis_matrix_set_value	84
6.2.6	lis_matrix_assemble	84
6.2.7	lis_matrix_set_size	85
6.2.8	lis_matrix_get_size	86
6.2.9	lis_matrix_get_range	86
6.2.10	lis_matrix_set_type	87
6.2.11	lis_matrix_get_type	88
6.2.12	lis_matrix_set_blocksize	88
6.2.13	lis_matrix_convert	89
6.2.14	lis_matrix_copy	89
6.2.15	lis_matrix_get_diagonal	90

6.2.16	lis_matrix_set_csr	91
6.2.17	lis_matrix_set_csc	91
6.2.18	lis_matrix_set_msr	92
6.2.19	lis_matrix_set_dia	92
6.2.20	lis_matrix_set_ell	93
6.2.21	lis_matrix_set_jad	94
6.2.22	lis_matrix_set_bsr	95
6.2.23	lis_matrix_set_bsc	96
6.2.24	lis_matrix_set_vbr	97
6.2.25	lis_matrix_set_coo	98
6.2.26	lis_matrix_set_dns	98
6.3	ベクトルと行列の計算	99
6.3.1	lis_vector_scale	99
6.3.2	lis_vector_dot	99
6.3.3	lis_vector_nrm1	100
6.3.4	lis_vector_nrm2	100
6.3.5	lis_vector_nrmi	101
6.3.6	lis_vector_axpy	101
6.3.7	lis_vector_xpay	102
6.3.8	lis_vector_axpyz	102
6.3.9	lis_matrix_scaling	103
6.3.10	lis_matvec	104
6.3.11	lis_matvect	104
6.4	線型方程式の求解	105
6.4.1	lis_solver_create	105
6.4.2	lis_solver_destroy	105
6.4.3	lis_solver_set_option	106
6.4.4	lis_solver_set_optionC	110
6.4.5	lis_solve	110
6.4.6	lis_solve_kernel	111
6.4.7	lis_solver_get_status	112
6.4.8	lis_solver_get_iters	112
6.4.9	lis_solver_get_itersex	113
6.4.10	lis_solver_get_time	113
6.4.11	lis_solver_get_timeex	114
6.4.12	lis_solver_get_residualnorm	114
6.4.13	lis_solver_get_rhistory	115
6.4.14	lis_solver_get_solver	116
6.4.15	lis_solver_get_precon	117
6.4.16	lis_solver_get_solvername	118
6.4.17	lis_solver_get_preconname	118
6.5	固有値問題の求解	119

6.5.1	lis_esolver_create	119
6.5.2	lis_esolver_destroy	119
6.5.3	lis_esolver_set_option	120
6.5.4	lis_esolver_set_optionC	123
6.5.5	lis_solve	123
6.5.6	lis_esolver_get_status	124
6.5.7	lis_esolver_get_iters	124
6.5.8	lis_esolver_get_itersex	125
6.5.9	lis_esolver_get_time	125
6.5.10	lis_esolver_get_timeex	126
6.5.11	lis_esolver_get_residualnorm	126
6.5.12	lis_esolver_get_rhistory	127
6.5.13	lis_esolver_get_evalues	127
6.5.14	lis_esolver_get_evectors	128
6.5.15	lis_esolver_get_esolver	129
6.5.16	lis_esolver_get_esolvername	130
6.6	ファイル操作	131
6.6.1	lis_input	131
6.6.2	lis_input_vector	132
6.6.3	lis_input_matrix	133
6.6.4	lis_output	134
6.6.5	lis_output_vector	135
6.6.6	lis_output_matrix	136
6.7	その他	137
6.7.1	lis_initialize	137
6.7.2	lis_finalize	137
6.7.3	lis_wtime	138
6.7.4	CHKERR	138
	参考文献	139
	A ファイル形式	145
A.1	拡張 Matrix Market 形式	145
A.2	Harwell-Boeing 形式	146
A.3	ベクトル用拡張 Matrix Market 形式	147
A.4	ベクトル用 PLAIN 形式	147

バージョン 1.1 からの変更点

1. 固有値解法を追加.
2. 関数の仕様を一部変更.
 - (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.
3. 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.
4. 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 `LONG_LONG` 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 `LONG_LONG` が定義された場合には, `integer*8` に置き換えられる.
5. 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.
6. 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. ファイル `lis_config_win32.h` の名称を `lis_config_win.h` に変更.
2. 行列格納形式 JDS (Jagged Diagonal Storage) の名称を JAD (Jagged Diagonal) に変更.
3. 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.

1 はじめに

Lis (a Library of Iterative Solvers for linear systems) は、偏微分方程式の数値計算に現れる実疎行列を係数とする線型方程式

$$Ax = b$$

及び標準固有値問題

$$Ax = \lambda x$$

を解くための並列反復法ライブラリである [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]	BiCR[5]
CGS[6]	CRS[7]
BiCGSTAB[8]	BiCRSTAB[7]
GPBiCG[9]	GPBiCR[7]
BiCGSafe[10]	BiCRSafe[11]
BiCGSTAB(l)[12]	TFQMR[13]
Jacobi[14]	Orthomin(m)[15]
Gauss-Seidel[16, 17]	GMRES(m)[18]
SOR[19, 20]	FGMRES(m)[21]
IDR(s)[22]	MINRES[23]

表 2: 固有値解法

Power[24]
Inverse[25]
Approximate Inverse[1]
Rayleigh Quotient[26]
Subspace[27]
Lanczos[28]
CG[29]
CR[30]

表 3: 前処理

Jacobi[31]
SSOR[31]
ILU(k)[32]
ILUT[33, 34]
Crout ILU[34, 35]
I+S[36]
SA-AMG[37]
Hybrid[38]
SAINV[39]
Additive Schwarz[40, 41]
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。なおここでは Linux オペレーティングシステムを用いたサーバクラスタへの導入を想定している。

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 [?] または MPI-1 ライブラリ [77] を使用する [42, 43]。データの入出力には、Harwell-Boeing 形式 [69]、Matrix Market 形式 [73] 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	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	Linux
gcc 3.3, 4.4	Linux Mac OS X Windows
Microsoft Visual C++ 2008, 2010, 2012	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	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	Linux
g77 3.3 gfortran 4.4	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。

```
> gunzip -c lis-($VERSION).tar.gz | tar xvf -
```

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).tar.gz 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 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-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=<install-dir></code>	導入先を指定
<code>TARGET=<target></code>	計算機環境を指定
<code>CC=<c_compiler></code>	C コンパイラを指定
<code>CFLAGS=<c_flags></code>	C コンパイラオプションを指定
<code>FC=<fortran_compiler></code>	Fortran コンパイラを指定
<code>FCFLAGS=<fc_flags></code>	Fortran コンパイラオプションを指定
<code>LDLFLAGS=<ld_flags></code>	リンクオプションを指定

既定

```

matrix size = 100 x 100 (460 nonzero entries)
initial vector x = 0
precision : double
solver    : BiCG 2
precon    : none
conv_cond : ||b-Ax||_2 <= 1.0e-12 * ||b-Ax_0||_2
storage   : CSR
lis_solve : 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

```

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

<target>	等価なオプション
cray_xt3_cross	<code>./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"</code>
fujitsu_fx10_cross	<code>./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"</code>
hitachi_sr16k	<code>./configure CC=cc FC=f90 CFLAGS="-Os -noparallel" FCFLAGS="-Oss -noparallel" FCLDFLAGS="-lf90s" ac_cv_sizeof_void_p=8 ax_f77_mangling="lower case, underscore, no extra underscore"</code>
ibm_bgl_cross	<code>./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"</code>
nec_sx9_cross	<code>./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"</code>

```
--enable-omp --
max number of threads = 32
number of threads = 2
matrix size = 100 x 100 (460 nonzero entries)
initial vector x = 0
precision : double
solver      : BiCG 2
precon      : none
conv_cond  : ||b-Ax||_2 <= 1.0e-12 * ||b-Ax_0||_2
storage     : CSR
lis_solve  : 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 = 0
precision : double
solver      : BiCG 2
precon      : none
conv_cond  : ||b-Ax||_2 <= 1.0e-12 * ||b-Ax_0||_2
storage     : CSR
lis_solve  : 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 hpcg 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ファイルである。ライブラリファイル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, test3b は, lsolve, esolve, hpcg 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。

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 lis-(\$VERSION).zip 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 --help を参照)。

```
> configure
```

Makefile の既定値は Makefile.in で定義されている。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及び検証プログラムの実行ファイルは、以下のコマンドにより lis-(\$VERSION)\lib, lis-(\$VERSION)\bin にそれぞれ格納される。

```
> nmake install
```

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

2.4.1 test1

ディレクトリ lis-(\$VERSION)/test において

```
> test1 matrix_filename rhs_setting solution_filename residual_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, 収束履歴を PLAIN 形式で `residual_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 Matrix Market 形式, 拡張 Matrix Market 形式である. `rhs_setting` には

0	行列データファイルに含まれてい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 形式に対応している. `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 residual_filename [options]
```

と入力すると, 2次元 Poisson 方程式を 5 点中心差分で離散化して得られる次数 mn の 5 重対角行列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, 収束履歴を PLAIN 形式で `residual_filename` に書き出す. ただし, 線型方程式 $Ax = b$ の解ベクトルの値がすべて 1 となるように右辺ベクトル b を設定している. `m`, `n` は各次元の格子点数である.

2.4.3 test2b

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

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

と入力すると, 2次元 Poisson 方程式を 9 点中心差分で離散化して得られる次数 mn の 9 重対角行列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, 収束履歴を PLAIN 形式で `residual_filename` に書き出す. ただし, 線型方程式 $Ax = b$ の解ベクトルの値がすべて 1 となるように右辺ベクトル b を設定している. `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 residual_filename [options]
```

と入力すると, 3次元 Poisson 方程式を 7 点中心差分で離散化して得られる次数 lmn の 7 重対角行列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, 収束履歴を PLAIN 形式で `residual_filename` に書き出す. ただし, 線型方程式 $Ax = b$ の解ベクトルの値がすべて 1 となるように右辺ベクトル b を設定している. `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 residual_filename [options]
```

と入力すると, 3次元 Poisson 方程式を 27 点中心差分で離散化して得られる次数 lmn の 27 重対角行列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, 収束履歴を PLAIN 形式で `residual_filename` に書き出す. ただし, 線型方程式 $Ax = b$ の解ベクトルの値がすべて 1 となるように右辺ベクトル b を設定している. l, m, n は各次元の格子点数である.

2.4.6 test4

線型方程式 $Ax = b$ を指定された解法で解き, 解を表示する. 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 となるように設定している. `test4f.F` は `test4.c` の Fortran 版である.

2.4.7 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き, 解を表示する. 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 x がすべて 1 となるように設定している.

2.4.8 etest1

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> etest1 matrix_filename solution_filename residual_filename [options]
```

と入力すると, `matrix_filename` から行列データを読み込み, 固有値問題 $Ax = \lambda x$ を `options` で指定された解法で解いて, 指定されたモードの固有値を表示する. また, 対応する固有ベクトルを拡張 Matrix Market 形式で `solution_filename` に, 収束履歴を PLAIN 形式で `residual_filename` に書き出す. 入力可能な行列データ形式は Matrix Market 形式である. `etest1f.F` は `etest1.c` の Fortran 版である.

2.4.9 etest2

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> etest2 m n matrix_type solution_filename residual_filename [options]
```

と入力すると, 2次元 Helmholtz 方程式を 5 点中心差分で離散化して得られる次数 mn の 5 重対角行列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, 指定されたモードの固有値を表示する. また, 対応する固有ベクトルを `solution_filename` に, 収束履歴を `residual_filename` に書き出す. m, n は各次元の格子点数である.

2.4.10 etest3

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> etest3 l m n matrix_type solution_filename residual_filename [options]
```

と入力すると, 3次元 Helmholtz 方程式を 7 点中心差分で離散化して得られる次数 lmn の 7 重対角行列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, 指定されたモードの固有値を表示する. また, 対応する固有ベクトルを拡張 Matrix Market 形式で `solution_filename` に, 収束履歴を PLAIN 形式で `residual_filename` に書き出す. l, m, n は各次元の格子点数である.

2.4.11 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, 指定されたモードの固有値を表示する. 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.

2.4.12 etest5

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> etest5 matrix_filename eigenvalue_filename eigenvector_filename [options]
```

と入力すると, `matrix_filename` から行列データを読み込み, 固有値問題 $Ax = \lambda x$ を `options` で指定された解法で解いて, 指定されたモードの固有値を表示する. また, 指定された個数の固有値を `eigenvalue_filename` に, 対応する固有ベクトルを `eigenvector_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 形式である.

2.4.13 etest6

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> etest6 l m n matrix_type eigenvalue_filename eigenvector_filename [options]
```

と入力すると, 3 次元 Helmholtz 方程式を 7 点中心差分で離散化して得られる次数 lmn の 7 重対角行列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, 指定されたモードの固有値を表示する. また, 指定された個数の固有値を `eigenvalue_filename` に, 対応する固有ベクトルを `eigenvector_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.

2.4.14 spmvtest1

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

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

と入力すると, 1 次元 Laplace 演算子を 3 点中心差分で離散化して得られる次数 n の 3 重対角係数行列

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

と $(1, \dots, 1)^T$ 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.

2.4.15 spmvtest2

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> spmvtest2 m n iter [matrix_type]
```

と入力すると, 2 次元 Laplace 演算子を 5 点中心差分で離散化して得られる次数 mn の 5 重対角係数行列とベクトル $(1, \dots, 1)^T$ 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. m, n は各次元の格子点数である.

2.4.16 spmvtest2b

ディレクトリ `lis-($VERSION)/test` において

```
> spmvtest2b m n iter [matrix_type]
```

と入力すると、2次元 Laplace 演算子を 9 点中心差分で離散化して得られる次数 mn の 9 重対角係数行列とベクトル $(1, \dots, 1)^T$ 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。m, n は各次元の格子点数である。

2.4.17 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 演算子を 7 点中心差分で離散化して得られる次数 lmn の 7 重対角係数行列とベクトル $(1, \dots, 1)^T$ 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。l, m, n は各次元の格子点数である。

2.4.18 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 演算子を 27 点中心差分で離散化して得られる次数 lmn の 27 重対角係数行列とベクトル $(1, \dots, 1)^T$ 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。l, m, n は各次元の格子点数である。

2.4.19 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。

2.4.20 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.

- ポインタ操作
 - Fortran インタフェースでは使用できない.
- 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) 法では使用できない.
 - 固有値解法のうち, CG, CR 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.
- long double 型 4 倍精度演算
 - Fortran インタフェースでは使用できない.
 - SA-AMG 前処理では使用できない.
- 前処理
 - 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.
 - 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環境では使用できない.
 - SAINV 前処理の前処理行列作成部分は逐次実行される.

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 (解法の情報を格納する構造体) 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 `LONGLONG` 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 `LONGLONG` 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 ベクトル操作

ベクトル v の次元を $global_n$ 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。

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

(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
8:     call lis_vector_set_value(LIS_INS_VALUE,i,DBLE(i),v,ierr)
9: 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
```

変数宣言

第2行のように

```
LIS_VECTOR   v;
```

と宣言する.

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 行列操作

係数行列 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。

$$A = \left(\begin{array}{ccc} 2 & 1 & \\ 1 & 2 & 1 \\ & 1 & 2 & 1 \\ & & 1 & 2 \end{array} \right) \begin{array}{l} PE0 \\ PE1 \end{array} \quad (3.2)$$

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)
```

変数宣言

第2行のように

```
LIS_MATRIX   A;
```

と宣言する。

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)	{ <code>LIS_MATRIX_CSR</code> 1}
Compressed Sparse Column	(CSC)	{ <code>LIS_MATRIX_CSC</code> 2}
Modified Compressed Sparse Row	(MSR)	{ <code>LIS_MATRIX_MSR</code> 3}
Diagonal	(DIA)	{ <code>LIS_MATRIX_DIA</code> 4}
Ellpack-Itpack Generalized Diagonal	(ELL)	{ <code>LIS_MATRIX_ELL</code> 5}
Jagged Diagonal	(JAD)	{ <code>LIS_MATRIX_JAD</code> 6}
Block Sparse Row	(BSR)	{ <code>LIS_MATRIX_BSR</code> 7}
Block Sparse Column	(BSC)	{ <code>LIS_MATRIX_BSC</code> 8}
Variable Block Row	(VBR)	{ <code>LIS_MATRIX_VBR</code> 9}
Coordinate	(COO)	{ <code>LIS_MATRIX_COO</code> 10}
Dense	(DNS)	{ <code>LIS_MATRIX_DNS</code> 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 row[], LIS_INT index[], LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)`
- Fortran subroutine `lis_matrix_set_csr(LIS_INTEGER nnz, LIS_INTEGER row(), 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 節を参照せよ。

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 ω ($0 < \omega < 2$)
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
MINRES	-i {minres 22}		

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_w [1.0]	緩和係数 ω ($0 < \omega < 2$)
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_w [1.5]	SOR の緩和係数 ω ($0 < \omega < 2$)
		-hybrid_ell [2]	BiCGSTAB(l) 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 α
		-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}	-ilut_drop [0.05]	ドロップ基準
		-ilut_rate [5.0]	最大フィルイン数の倍率
Additive Schwarz	-adds true	-adds_iter [1]	繰り返し回数

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]	残差の画面表示
	-print {none 0} 何もしない
	-print {mem 1} 収束履歴をメモリに保存する
	-print {out 2} 収束履歴を画面に表示する
	-print {all 3} 収束履歴をメモリに保存し, 画面に表示する
-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} 与えられた値を使用
	-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} $\ b - Ax\ _2 \leq tol * \ b\ _2$
	-conv_cond {nrm2_b 1} $\ b - Ax\ _2 \leq tol * \ b - Ax_0\ _2$
	-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} 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

固有値問題 $Ax = \lambda x$ を指定の解法で解く場合、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_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。-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 pi)

固有値解法	オプション	補助オプション
Power	-e {pi 1}	
Inverse	-e {ii 2}	-i [cg] 線型方程式解法
Approximate Inverse	-e {aii 3}	-i [cg] 線型方程式解法
Rayleigh Quotient	-e {rqi 4}	-i [cg] 線型方程式解法
Subspace	-e {si 5}	-ss [2] 部分空間の大きさ -m [0] モード番号
Lanczos	-e {li 6}	-ss [2] 部分空間の大きさ -m [0] モード番号
CG	-e {cg 7}	
CR	-e {cr 8}	

前処理に関するオプション (既定値: -p ilu)

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_w [1.0] 緩和係数 ω ($0 < \omega < 2$)
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_w [1.5] SOR の緩和係数 ω ($0 < \omega < 2$) -hybrid_ell [2] BiCGSTAB(l) 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 α -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}	-ilut_drop [0.05] ドロップ基準 -ilut_rate [5.0] 最大フィルイン数の倍率
Additive Schwarz	-adds true	-adds_iter [1] 繰り返し回数

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]	残差の画面表示
	-eprint {none 0} 何もしない
	-eprint {mem 1} 収束履歴をメモリに保存する
	-eprint {out 2} 収束履歴を画面に表示する
	-eprint {all 3} 収束履歴をメモリに保存し、画面に表示する
-ie [ii]	Lanczos, Subspace の内部で使用する固有値解法の指定
	-ie {pi 1} Power (Subspace のみ)
	-ie {ii 2} Inverse
	-ie {aii 3} Approximate Inverse
	-ie {rqi 4} Rayleigh Quotient
-shift [0.0]	固有値のシフト量
-initx_ones [1]	初期ベクトル x_0
	-initx_ones {false 0} 与えられた値を使用
	-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} 4 倍精度

求解

固有値問題 $Ax = \lambda x$ を解くには、関数

- C LIS_INT lis_solve(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR x,
 LIS_REAL eval, LIS_ESOLVER solver)
- Fortran subroutine lis_solve(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR x,
 LIS_ESOLVER solver, 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、その解を表示する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 となるように設定している.

このプログラムはディレクトリ `lis-($VERSION)/test` にある.

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,gm,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,&gm)
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<gm-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_iters(solver,&iter);
34:    printf("iter = %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_iters(solver,iter,ierr)
35:     write(*,*) 'iter = ',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 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/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 Fortran90 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 Fortran90 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、C プログラムについてはプリプロセッサマクロ `_LONGLONG` が、また Fortran プログラムについてはプリプロセッサマクロ `LONGLONG` 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 -llis
```

リンク (--enable-saamg)

```
> ifort -nofor_main -o test4 test4.o -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 -llis
```

リンク (--enable-saamg)

```
> ifort -nofor_main -openmp -o test4 test4.o -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 -llis -lmpi
```

リンク (--enable-saamg)

```
> ifort -nofor_main -o test4 test4.o -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 -llis -lmpi
```

リンク (--enable-saamg)

```
> ifort -nofor_main -openmp -o test4 test4.o -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用いられているため、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 の場合のオプションは `-fpp` 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 -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 -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 -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 -llis -lmpi
```

3.8 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、以下のように表示される。

```
initial vector x = 0
precision : double
solver    : BiCGSTAB 4
precon    : none
conv_cond : ||b-Ax||_2 <= 1.0e-12 * ||b-Ax_0||_2
storage   : CSR
lis_solve : normal end
```

```
iter = 6
```

```
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

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”[44, 45] 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 $a = a.hi + a.lo$, $\frac{1}{2}\text{ulp}(a.hi) \geq |a.lo|$ (上位 $a.hi$ と下位 $a.lo$ は倍精度浮動小数) により定義し、Dekker[46] と Knuth[47] 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倍精度演算を実現している。doubledouble 型の演算は一般に Fortran の4倍精度演算より高速である[48]が、Fortran の表現形式[49]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個使用しているため、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としている。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っている[50]。

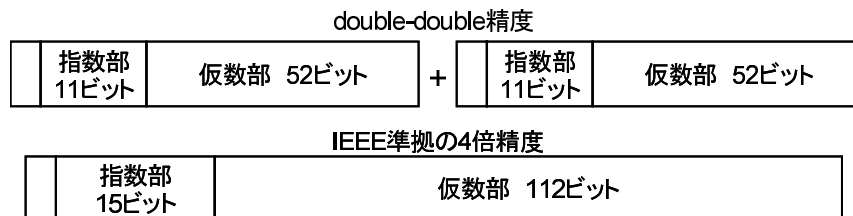


図 2: double double 型のビット数

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、解を表示する検証プログラムが test5.c である。右辺ベクトル b は解 x がすべて1となるように設定している。 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 = 0
precision : double
solver    : BiCG 2
precon    : none
conv_cond : ||b-Ax||_2 <= 1.0e-12 * ||b-Ax_0||_2
storage   : CSR
lis_solve : LIS_MAXITER(code=4)

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 = 0
precision : quad
solver    : BiCG 2
precon    : none
conv_cond : ||b-Ax||_2 <= 1.0e-12 * ||b-Ax_0||_2
storage   : CSR
lis_solve : 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、ライブラリで使え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。

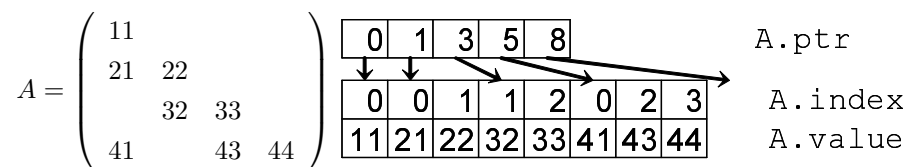


図 3: CSR 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

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.

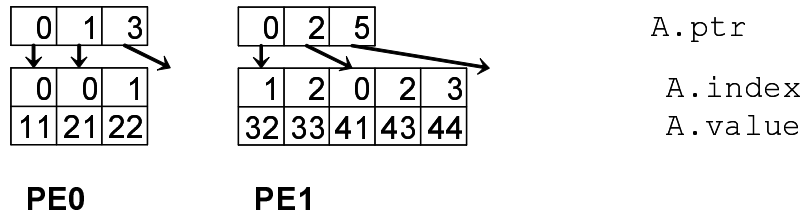


図 4: CSR 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

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 row[], LIS_INT index[], LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis_matrix_set_csr(LIS_INTEGER nnz, LIS_INTEGER row(), 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.

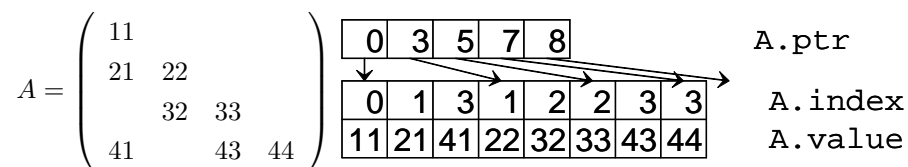


図 5: CSC 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

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.

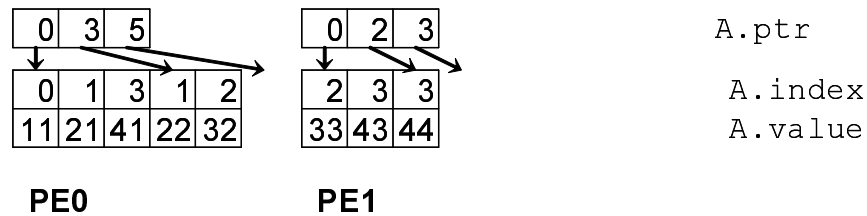


図 6: CSC 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

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 row[], LIS_INT index[], LIS_SCALAR value[], LIS_MATRIX A)
- Fortran subroutine lis_matrix_set_csc(LIS_INTEGER nnz, LIS_INTEGER row(), 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。

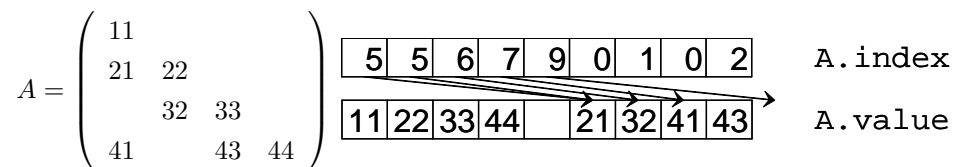


図 7: MSR 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

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.

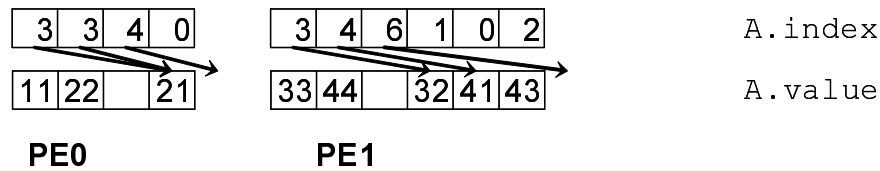


図 8: MSR 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

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.

5.4 Diagonal (DIA)

DIA 形式では、データを 2 つの配列 (index, value) に格納する。nnd を行列 A の非零な対角要素の本数とする。

- 長さ $nnd \times n$ の倍精度配列 value は、行列 A の非零な対角要素の値を格納する。
- 長さ nnd の整数配列 index は、主対角要素から各対角要素へのオフセットを格納する。

マルチスレッド環境では以下のように修正を行っている。

データを 2 つの配列 (index, value) に格納する。nprocs をスレッド数とする。nnd_p を行列 A を行ブロック分割した部分行列の非零な対角の本数とする。maxnnd を nnd_p の値の最大値とする。

- 長さ maxnnd \times n の倍精度配列 value は、行列 A を行ブロック分割した部分行列の非零な対角要素の値を格納する。
- 長さ nprocs \times maxnnd の整数配列 index は、主対角要素から各対角要素へのオフセットを格納する。

5.4.1 行列の作成 (逐次環境)

行列 A の DIA 形式での格納方法を図 9 に示す。この行列を DIA 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。

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

図 9: DIA 形式のデータ構造 (逐次環境)

逐次環境

```

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

```

2 スレッド上への行列 A の DIA 形式での格納方法を図 10 に示す. 2 スレッド上にこの行列を DIA 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 10: DIA 形式のデータ構造 (マルチスレッド環境)

```

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

```

5.4.3 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 DIA 形式での格納方法を図 11 に示す. 2 プロセス上にこの行列を DIA 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.

-1	0									A.index A.value
0	21	11	22	-3	-1	0	0	41	32	
PE0		PE1								

図 11: DIA 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,nnd,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; nnd = 2;}
7: else          {n = 2; nnd = 3;}
8: index = (LIS_INT *)malloc( nnd*sizeof(int) );
9: value = (LIS_SCALAR *)malloc( n*nnd*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] = -1; index[1] = 0;
14:     value[0] = 0; value[1] = 21; value[2] = 11; value[3] = 22;}
15: else {
16:     index[0] = -3; index[1] = -1; index[2] = 0;
17:     value[0] = 0; value[1] = 41; value[2] = 32; value[3] = 43; value[4] = 33;
18:     value[5] = 44;}
19: lis_matrix_set_dia(nnd,index,value,A);
20: lis_matrix_assemble(A);

```

5.4.4 関連する関数

配列の関連付け

DIA 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_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)`

を用いる.

5.5 Ellpack-Itpack Generalized Diagonal (ELL)

ELL 形式では、データを 2 つの配列 (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 $\text{maxnzs} \times n$ の倍精度配列 value は、行列 A の各行の非零要素の値を列方向に沿って格納する。最初の列は各行の最初の非零要素からなる。ただし、格納する非零要素がない場合は 0 を格納する。
- 長さ $\text{maxnzs} \times n$ 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。ただし、第 i 行の非零要素数を nnz とすると $\text{index}[\text{nnz} \times n + i]$ にはその行番号 i を格納する。

5.5.1 行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)

行列 A の ELL 形式での格納方法を図 12 に示す。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。

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

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

```

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							A.index A.value				
0	0	0	1																			
11	21	0	22																			
PE0																						
				<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
1	0	2	2	2	3																	
32	41	33	43	0	44																	
				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。 $maxn_zr$ 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 $maxn_zr + 1$ 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修正を行っている。

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。 $maxn_zr_p$ 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。 $maxmaxn_zr$ は配列 $maxn_zr_p$ 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 $nprocs \times (maxmaxn_zr + 1)$ 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.

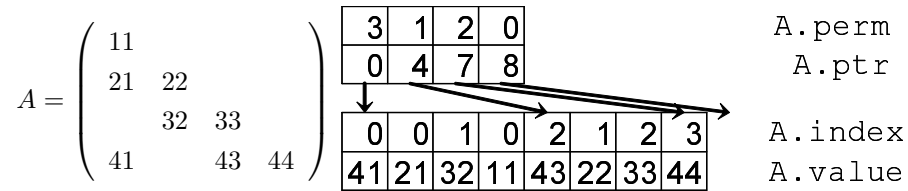


図 14: JAD 形式のデータ構造 (逐次環境)

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.

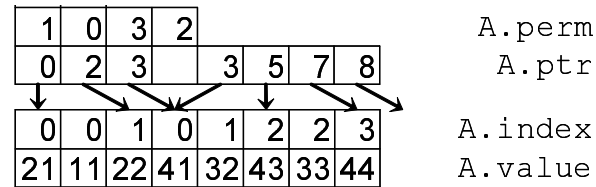


図 15: JAD 形式のデータ構造 (マルチスレッド環境)

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.

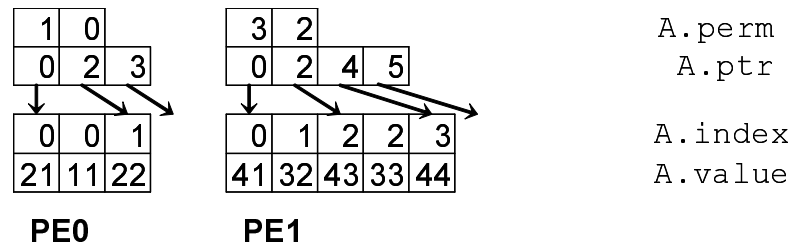


図 16: JAD 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

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 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。 $nr = n/r$, $nnzb$ 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 $nnzb \times r \times c$ 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 $nnzb$ 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。

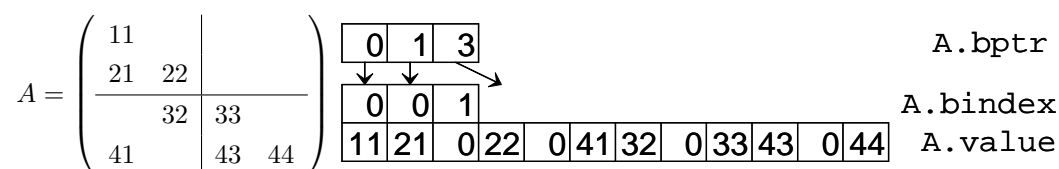


図 17: BSR 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

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.

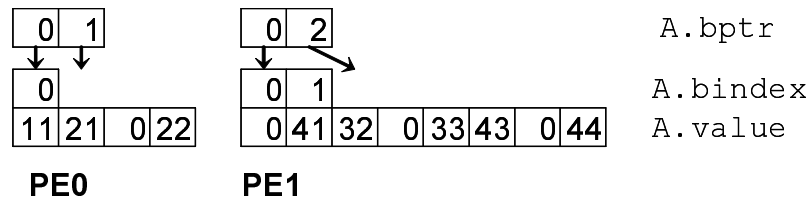


図 18: BSR 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

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。 $nc = n/c$, $nnzb$ 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 $nnzb \times r \times c$ 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 $nnzb$ 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。

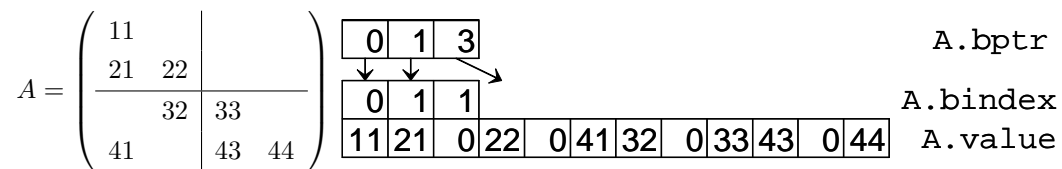


図 19: BSC 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

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.

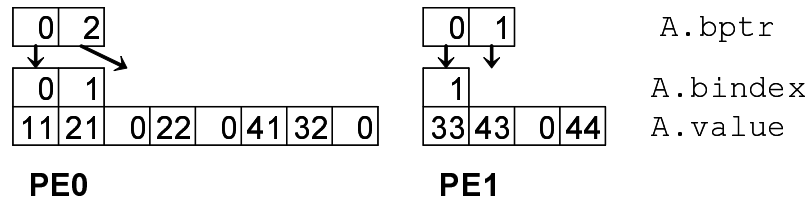


図 20: BSC 形式のデータ構造 (マルチプロセス環境)

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。 $nnzb$ 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 $nnzb$ 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 $nnzb + 1$ 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.

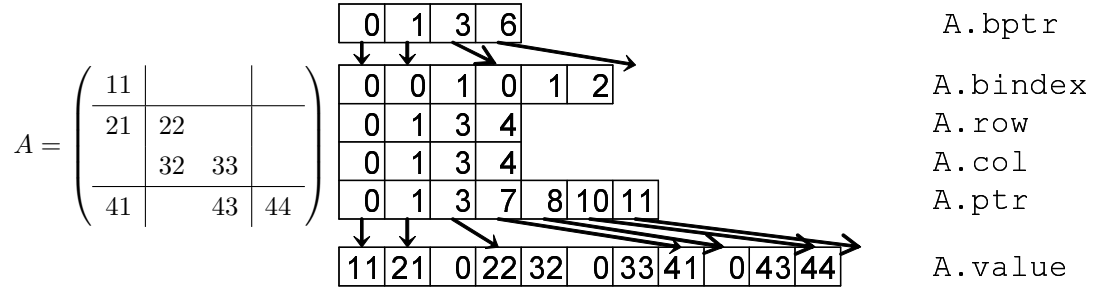


図 21: VBR 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

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.

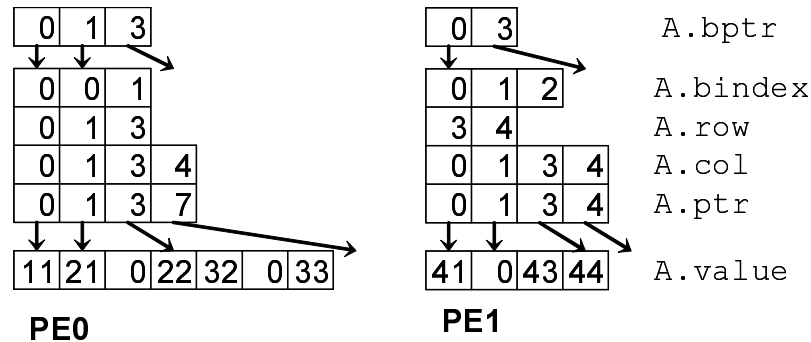


図 22: VBR 形式のデータ構造 (逐次・マルチスレッド環境)

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.

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

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.

0	1	1	3	2	2	3	3	A.row
0	0	1	0	1	2	2	3	A.col
11	21	22	41	32	33	43	44	A.value
PE0			PE1					

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 Dense (DNS)

DNS 形式では, データを 1 つの配列 (value) に格納する.

- 長さ $n \times n$ の倍精度配列 value は, 列優先で要素の値を格納する.

5.11.1 行列の作成 (逐次・マルチスレッド環境)

行列 A の DNS 形式での格納方法を図 25 に示す. 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.

$$A = \begin{pmatrix} 11 & & & \\ 21 & 22 & & \\ & 32 & 33 & \\ 41 & & 43 & 44 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|} \hline 11 & 21 & 0 & 41 & 0 & 22 & 32 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 33 & 43 & 0 & 0 & 0 & 44 \\ \hline \end{array} \quad A.Value$$

図 25: DNS 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;  
2: LIS_SCALAR   *value;  
3: LIS_MATRIX   A;  
4: n = 4;  
5: value = (LIS_SCALAR *)malloc( n*n*sizeof(LIS_SCALAR) );  
6: lis_matrix_create(0,&A);  
7: lis_matrix_set_size(A,0,n);  
8:  
9: value[0] = 11; value[1] = 21; value[2] = 0; value[3] = 41;  
10: value[4] = 0; value[5] = 22; value[6] = 32; value[7] = 0;  
11: value[8] = 0; value[9] = 0; value[10] = 33; value[11] = 43;  
12: value[12] = 0; value[13] = 0; value[14] = 0; value[15] = 44;  
13:  
14: lis_matrix_set_dns(value,A);  
15: lis_matrix_assemble(A);
```

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	
PE0				PE1				

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 を基準に記述している. 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, C での各関数のリターンコード, Fortran での `ierr` の値は以下のように定義している.

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

6.1 ベクトル操作

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

LIS_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.

[illegible]

入力

出力

global_n	ベクトルのグローバルな次数
----------	---------------

ierr	リターンコード
------	---------

逐次, マルチスレッド環境では, $local_n$ は $global_n$ に等しい.

```
C      LIS_INT lis_vector_get_range(LIS_VECTOR v, LIS_INT *is, LIS_INT *ie)
Fortran subroutine lis_vector_get_range(LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER is,
      LIS_INTEGER ie, LIS_INTEGER ierr)
```

入力

出力

is 部分ベクトル v の全体ベクトル中での開始位置

ie 部分ベクトル v の全体ベクトル中での終了位置+1

ierr	リターンコード
------	---------

逐次, マルチスレッド環境では, ベクトルの次数が n ならば, $is = 0$, $ie = n$ である.

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

i	取得する場所
v	値を取得するベクトル

出力

$value$	スカラ値
$ierr$	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。

6.1.9 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 $index[i]$ 行にスカラー値 $value[i]$ 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	代入するスカラー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	代入するスカラー値を格納する配列
v	ベクトル

出力

v	第 $index[i]$ 行にスカラー値 $value[i]$ 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

start	取得する場所の始点
count	取得するスカラ値の個数
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

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

6.1.13 lis_vector_copy

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

機能

ベクトルの要素の値を複製する.

入力

x 複製元のベクトル

出力

y 複製先のベクトル

ierr リターンコード

6.1.14 lis_vector_set_all

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

機能

ベクトルの要素にスカラ値を代入する.

入力

value 代入するスカラ値

v ベクトル

出力

v 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

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

ベクトル v が使用可能かどうかを調べる.

V ベクトル

ierr	LIS_TRUE 使用可能
	LIS_FALSE 使用不可

6.2 行列操作

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

LIS_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

```
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)
```

既存の行列と同じ情報を持つ行列を作成する。

Ain 複製元の行列

Aout 複製先の行列

ierr	リターンコード
------	---------

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。

[illegible]

行列のメモリ領域を確保する.

A 行列

nnz_row	平均非零要素数
---------	---------

nnz 各行の非零要素数の配列

ierr	リターンコード
------	---------

`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` で効率よく要素に値を代入できるように, あらかじめ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.

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しているのかを調べる.

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, $is = 0$, $ie = n$ である.

6.2.10 lis_matrix_set_type

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

機能

行列の格納形式を設定する.

入力

A	行列
matrix_type	行列の格納形式

出力

ierr	リターンコード
------	---------

注釈

行列作成時の A の matrix_type は LIS_MATRIX_CSR である. 以下に matrix_type に指定可能な格納形式を示す.

格納形式		matrix_type
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}

```
C      LIS_INT lis_matrix_get_type(LIS_MATRIX A, LIS_INT *matrix_type)
Fortran subroutine lis_matrix_get_type(LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER matrix_type,
      LIS_INTEGER ierr)
```

A 行列

matrix_type	行列の格納形式
-------------	---------

ierr	リターンコード
------	---------

```
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)
```

BSR, BSC, VBR 形式のブロックサイズ, 分割情報を設定する。

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

ierr	リターンコード
------	---------

6.2.13 lis_matrix_convert

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

機能

行列 A_{in} を指定した格納形式に変換し、行列 A_{out} に格納する。

入力

Ain 変換元の行列

出力

Aout 指定の格納形式に変換された行列

ierr リターンコード

注釈

変換先の格納形式の指定は lis_matrix_set_type を用いて A_{out} に対して行う。BSR, BSC, VBR 形式のブロックサイズ等の情報は、lis_matrix_set_blocksize を用いて A_{out} に対して設定する。

指定された格納形式への変換のうち、以下の表において丸印を付したものは、直接変換される。それ以外のものは、記載されている形式を経由した後、指定の格納形式に変換される。表に記載されていないものは、CSR 形式を経由した後、指定の格納形式に変換される。

元 \ 先	CSR	CSC	MSR	DIA	ELL	JAD	BSR	BSC	VBR	COO	DNS
CSR								CSC			
COO				CSR	CSR	CSR	CSR	CSC	CSR		CSR

6.2.14 lis_matrix_copy

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

機能

行列の要素の値を複製する。

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

```
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)
```

行列 A の対角部分をベクトル d に複製する.

A 行列

d 対角要素が格納されたベクトル

ierr	リターンコード
------	---------

6.2.16 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 row(),
                                     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。

6.2.17 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 row(),
                                     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。

6.2.18 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

nnz	非零要素数
ndz	対角部分の零要素数
index, value	MSR 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_msr を用いた後には, lis_matrix_assemble を呼び出さなければならない。

6.2.19 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。

6.2.20 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。

6.2.21 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 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。

6.2.22 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。

6.2.23 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。

6.2.24 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。

6.2.25 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。

6.2.26 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。

6.3 ベクトルと行列の計算

6.3.1 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

ベクトルの値を α 倍する.

入力

alpha	スカラ値
x	ベクトル

出力

x	αx (ベクトル x の値は上書きされる)
ierr	リターンコード

6.3.2 lis_vector_dot

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

機能

ベクトルの内積 $x^T y$ を計算する.

入力

x	ベクトル
y	ベクトル

出力

val	内積
ierr	リターンコード

```
C      LIS_INT lis_vector_nrm1(LIS_VECTOR x, LIS_REAL *val)
Fortran subroutine lis_vector_nrm1(LIS_VECTOR x, LIS_REAL val, LIS_INTEGER ierr)
```

ベクトルの 1 ノルムを計算する.

ベクトル

x

val ベクトルの1ノルム

ierr	リターンコード
------	---------

```
C      LIS_INT lis_vector_nrm2(LIS_VECTOR x, LIS_REAL *val)
Fortran subroutine lis_vector_nrm2(LIS_VECTOR x, LIS_REAL val, LIS_INTEGER ierr)
```

ベクトルの 2 ノルムを計算する.

x ベクトル

val ベクトルの2ノルム

ierr	リターンコード
------	---------

6.3.5 lis_vector_nrmi

```
C      LIS_INT lis_vector_nrmi(LIS_VECTOR x, LIS_REAL *val)
Fortran subroutine lis_vector_nrmi(LIS_VECTOR x, LIS_REAL val, LIS_INTEGER ierr)
```

機能

ベクトルの無限大ノルムを計算する.

入力

x ベクトル

出力

val ベクトルの無限大ノルム

ierr リターンコード

6.3.6 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

6.3.7 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

6.3.8 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	$x + \alpha y$
ierr	リターンコード

6.3.9 lis_matrix_scaling

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

機能

行列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

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

6.3.10 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

6.3.11 lis_matvect

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

機能

転置行列ベクトル積 $y = A^T x$ を計算する.

入力

A	行列
x	ベクトル

出力

y	$A^T x$
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を格納する構造体) 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_solver_set_option

```
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)
```

機能

線型方程式解法のオプションをソルバに設定する.

入力

text	コマンドラインオプション
------	--------------

出力

solver	ソルバ
ierr	リターンコード

注釈

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 ω ($0 < \omega < 2$)
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
MINRES	-i {minres 22}	

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_w [1.0]	緩和係数 ω ($0 < \omega < 2$)
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_w [1.5]	SOR の緩和係数 ω ($0 < \omega < 2$)
		-hybrid_ell [2]	BiCGSTAB(l) 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 α
		-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}	-ilut_drop [0.05]	ドロップ基準
		-ilut_rate [5.0]	最大フィルイン数の倍率
Additive Schwarz	-adds true	-adds_iter [1]	繰り返し回数

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]	残差の画面表示
	-print {none 0} 何もしない
	-print {mem 1} 収束履歴をメモリに保存する
	-print {out 2} 収束履歴を画面に表示する
	-print {all 3} 収束履歴をメモリに保存し、画面に表示する
-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} 与えられた値を使用
	-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} $\ b - Ax\ _2 \leq tol * \ b\ _2$
	-conv_cond {nrm2_b 1} $\ b - Ax\ _2 \leq tol * \ b - Ax_0\ _2$
	-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} 4 倍精度

6.4.4 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
ier	リターンコード

6.4.5 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。ソルバに与えられた出力は lis_solver_get_iters, lis_solver_get_time, lis_solver_get_residualnorm に格納する。

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
ier	リターンコード

6.4.6 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。ソルバに与えられた出力は `lis_solver_get_iters`, `lis_solver_get_time`, `lis_solver_get_residualnorm` に格納する。

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。

6.4.7 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

ソルバから状態を取得する.

入力

solver	ソルバ
--------	-----

出力

status	状態
ierr	リターンコード

6.4.8 lis_solver_get_iters

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

機能

ソルバから反復回数を取得する.

入力

solver	ソルバ
--------	-----

出力

iters	反復回数
ierr	リターンコード

6.4.9 lis_solver_get_itersex

```
C      LIS_INT lis_solver_get_itersex(LIS_SOLVER solver, LIS_INT *iters,  
                                     LIS_INT *iters_double, LIS_INT *iters_quad)  
Fortran subroutine lis_solver_get_itersex(LIS_SOLVER solver, LIS_INTEGER iters,  
                                          LIS_INTEGER iters_double, LIS_INTEGER iters_quad, LIS_INTEGER ierr)
```

機能

ソルバから反復回数に関する詳細情報を取得する。

入力

solver	ソルバ
--------	-----

出力

iters	総反復回数
iters_double	倍精度演算の反復回数
iters_quad	4 倍精度演算の反復回数
ierr	リターンコード

6.4.10 lis_solver_get_time

```
C      LIS_INT lis_solver_get_time(LIS_SOLVER solver, double *times)  
Fortran subroutine lis_solver_get_time(LIS_SOLVER solver, real*8 times,  
                                       LIS_INTEGER ierr)
```

機能

ソルバから経過時間を取得する。

入力

solver	ソルバ
--------	-----

出力

times	経過時間
ierr	リターンコード

6.4.11 lis_solver_get_timeex

```
C      LIS_INT lis_solver_get_timeex(LIS_SOLVER solver, double *times,
                                     double *itimes, double *ptimes, double *p_c_times, double *p_i_times)
Fortran subroutine lis_solver_get_timeex(LIS_SOLVER solver, real*8 times,
                                         real*8 itimes, real*8 ptimes, real*8 p_c_times, real*8 p_i_times,
                                         LIS_INTEGER ierr)
```

機能

ソルバから経過時間に関する詳細情報を取得する。

入力

solver	ソルバ
--------	-----

出力

times	itimes と ptimes の合計
itimes	線型方程式解法の経過時間
ptimes	前処理の経過時間
p_c_times	前処理行列作成の経過時間
p_i_times	線型方程式解法中の前処理の経過時間
ierr	リターンコード

6.4.12 lis_solver_get_residualnorm

```
C      LIS_INT lis_solver_get_residualnorm(LIS_SOLVER solver, LIS_REAL *residual)
Fortran subroutine lis_solver_get_residualnorm(LIS_SOLVER solver,
                                              LIS_REAL residual, LIS_INTEGER ierr)
```

機能

ソルバから解 x で再計算した相対残差ノルム $\|b - Ax\|_2 / \|b\|_2$ を取得する。

入力

solver	ソルバ
--------	-----

出力

residual	$b - Ax$ の 2 ノルム
ierr	リターンコード

6.4.13 lis_solver_get_rhistory

```
C      LIS_INT lis_solver_get_rhistory(LIS_SOLVER solver, LIS_VECTOR v)
Fortran subroutine lis_solver_get_rhistory(LIS_SOLVER solver,
      LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER ierr)
```

機能

ソルバから収束履歴を取得する.

入力

solver	ソルバ
--------	-----

出力

v	収束履歴が収められたベクトル
ierr	リターンコード

注釈

ベクトル v はあらかじめ関数 `lis_vector_create` で作成しておかなければならない. ベクトル v の次数 n が収束履歴の長さよりも小さい場合は収束履歴の最初から n 個までを取得する.

6.4.14 lis_solver_get_solver

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

機能

ソルバから選択されている線型方程式解法の番号を取得する.

入力

solver	ソルバ
--------	-----

出力

nsol	線型方程式解法の番号
ierr	リターンコード

6.4.15 lis_solver_get_precon

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

機能

ソルバから選択されている前処理の番号を取得する。

入力

solver	ソルバ
--------	-----

出力

precon_type	前処理の番号
ierr	リターンコード

6.4.16 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

6.4.17 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

esolver	ソルバ
ierr	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

esolver	メモリから破棄するソルバ
---------	--------------

出力

ierr	リターンコード
------	---------

```
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)
```

固有値解法のオプションをソルバに設定する.

text	コマンドラインオプション
------	--------------

esolver	ソルバ
ierr	リターンコード

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.

120

前処理に関するオプション (既定値: -p ilu)

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_w [1.0]	緩和係数 ω ($0 < \omega < 2$)
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_w [1.5]	SOR の緩和係数 ω ($0 < \omega < 2$)
		-hybrid_ell [2]	BiCGSTAB(l) 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 α
		-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}	-ilut_drop [0.05]	ドロップ基準
		-ilut_rate [5.0]	最大フィルイン数の倍率
Additive Schwarz	-adds true	-adds_iter [1]	繰り返し回数

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]	残差の画面表示
	-eprint {none 0} 何もしない
	-eprint {mem 1} 収束履歴をメモリに保存する
	-eprint {out 2} 収束履歴を画面に表示する
	-eprint {all 3} 収束履歴をメモリに保存し, 画面に表示する
-ie [ii]	Lanczos, Subspace の内部で使用する固有値解法の指定
	-ie {pi 1} Power (Subspace のみ)
	-ie {ii 2} Inverse
	-ie {aii 3} Approximate Inverse
	-ie {rqi 4} Rayleigh Quotient
-shift [0.0]	固有値のシフト量
-initx_ones [1]	初期ベクトル x_0
	-initx_ones {false 0} 与えられた値を使用
	-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 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} 4 倍精度

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
ier	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 eval, LIS_ESOLVER esolver)
Fortran subroutine lis_solve(LIS_MATRIX A, LIS_VECTOR x,
                             LIS_ESOLVER esolver, LIS_INTEGER ierr)
```

機能

指定された解法で固有値問題 $Ax = \lambda x$ を解く. ソルバに与えられた出力は lis_esolver_get_iters, lis_esolver_get_time, lis_esolver_get_evals, lis_esolver_get_evecs, lis_esolver_get_residualnorm に格納する.

入力

A	係数行列
x	初期ベクトル
esolver	ソルバ

出力

eval	-m[0] オプションで指定されたモードの固有値
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
ier	リターンコード

6.5.6 lis_esolver_get_status

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

機能

ソルバから状態を取得する.

入力

esolver	ソルバ
---------	-----

出力

status	状態
ierr	リターンコード

6.5.7 lis_esolver_get_iters

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

機能

ソルバから反復回数を取得する.

入力

esolver	ソルバ
---------	-----

出力

iters	反復回数
ierr	リターンコード

6.5.8 lis_esolver_get_itersex

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

機能

ソルバから反復回数に関する詳細情報を取得する.

入力

esolver	ソルバ
---------	-----

出力

iters	総反復回数
iters_double	倍精度演算の反復回数
iters_quad	4 倍精度演算の反復回数
ierr	リターンコード

6.5.9 lis_esolver_get_time

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

機能

ソルバから経過時間を取得する.

入力

esolver	ソルバ
---------	-----

出力

times	経過時間
ierr	リターンコード

6.5.10 lis_esolver_get_timeex

```
C      LIS_INT lis_esolver_get_timeex(LIS_ESOLVER esolver, double *times,
                                     double *itimes, double *ptimes, double *p_c_times, double *p_i_times)
Fortran subroutine lis_esolver_get_timeex(LIS_ESOLVER esolver, real*8 times,
                                     real*8 itimes, real*8 ptimes, real*8 p_c_times, real*8 p_i_times,
                                     LIS_INTEGER ierr)
```

機能

ソルバから経過時間に関する詳細情報を取得する。

入力

esolver	ソルバ
---------	-----

出力

times	固有値解法の経過時間
itimes	固有値解法中の線型方程式解法の経過時間
ptimes	固有値解法中の線型方程式解法前処理の経過時間
p_c_times	前処理行列作成の経過時間
p_i_times	線型方程式解法中の前処理の経過時間
ierr	リターンコード

6.5.11 lis_esolver_get_residualnorm

```
C      LIS_INT lis_esolver_get_residualnorm(LIS_ESOLVER esolver,
                                     LIS_REAL *residual)
Fortran subroutine lis_esolver_get_residualnorm(LIS_ESOLVER esolver,
                                     LIS_REAL residual, LIS_INTEGER ierr)
```

機能

ソルバから固有ベクトル x で再計算した相対残差ノルム $\|\lambda x - Ax\|_2/\lambda$ を取得する。

入力

esolver	ソルバ
---------	-----

出力

residual	$(\lambda x - Ax)/\lambda$ の 2 ノルム
ierr	リターンコード

6.5.12 lis_esolver_get_rhistory

```
C      LIS_INT lis_esolver_get_rhistory(LIS_ESOLVER esolver, LIS_VECTOR v)
Fortran subroutine lis_esolver_get_rhistory(LIS_ESOLVER esolver,
      LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER ierr)
```

機能

収束履歴をベクトルに格納する.

入力

esolver	ソルバ
---------	-----

出力

v	収束履歴が収められたベクトル
ier	リターンコード

注釈

ベクトル v はあらかじめ関数 `lis_vector_create` で作成しておかなければならない. ベクトル v の次数 n が収束履歴の長さよりも小さい場合は収束履歴の最初から n 個までを取得する.

6.5.13 lis_esolver_get_evalues

```
C      LIS_INT lis_esolver_get_evalues(LIS_ESOLVER esolver, LIS_VECTOR v)
Fortran subroutine lis_esolver_get_evalues(LIS_ESOLVER esolver,
      LIS_VECTOR v, LIS_INTEGER ierr)
```

機能

ソルバからすべての固有値を取得する.

入力

esolver	ソルバ
---------	-----

出力

v	固有値が納められたベクトル
ier	リターンコード

注釈

ベクトル v はあらかじめ関数 `lis_vector_create` で作成しておかなければならない.

6.5.14 lis_esolver_get_evector

```
C      LIS_INT lis_esolver_get_evector(LIS_ESOLVER esolver, LIS_MATRIX A)
Fortran subroutine lis_esolver_get_evector(LIS_ESOLVER esolver,
      LIS_MATRIX A, LIS_INTEGER ierr)
```

機能

ソルバからすべての固有ベクトルを取得し、行列 A に CSR 形式で格納する。

入力

esolver	ソルバ
---------	-----

出力

A	固有ベクトルが納められた行列
ierr	リターンコード

注釈

行列 A はあらかじめ関数 `lis_matrix_create` で作成しておかなければならない。

6.5.15 lis_esolver_get_esolver

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

機能

ソルバから選択されている固有値解法の番号を取得する.

入力

esolver	ソルバ
---------	-----

出力

nsol	固有値解法の番号
ierr	リターンコード

6.5.16 lis_esolver_get_esolvername

```
C      LIS_INT lis_esolver_get_esolvername(LIS_INT esolver, char *name)
Fortran subroutine lis_esolver_get_esolvername(LIS_INTEGER esolver, character name,
        LIS_INTEGER ierr)
```

機能

固有値解法の番号から解法名を取得する。

入力

nesol	固有値解法の番号
-------	----------

出力

name	固有値解法名
ierr	リターンコード

6.6 ファイル操作

6.6.1 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 を参照せよ.

6.6.2 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 を参照せよ。

6.6.3 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 を参照せよ。

6.6.4 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 (ファイルに書き込まない場合は NULL を代入する)
x	解ベクトル (ファイルに書き込まない場合は NULL を代入する)
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は付録 A を参照せよ.

6.6.5 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

v	ベクトル	
format	ファイル形式	
	LIS_FMT_PLAIN	PLAIN 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は付録 A を参照せよ。

6.6.6 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
------	---------

6.7 その他

6.7.1 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
------	---------

6.7.2 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
------	---------

6.7.3 lis_wtime

```
C      double lis_wtime()
Fortran function lis_wtime()
```

機能

経過時間を計測する.

入力

なし

出力

ある時点からの経過時間を double 型の値 (単位は秒) として返す.

注釈

処理時間を測定する場合は, 処理の開始時と終了時の時間を lis_wtime により測定し, その差を求める.

6.7.4 CHKERR

```
C      void CHKERR(LIS_INT ierr)
Fortran subroutine CHKERR(LIS_INTEGER ierr)
```

機能

関数が正常に終了したかどうかを判定する.

入力

ierr	リターンコード
------	---------

出力

なし

注釈

正常に終了していない場合は, lis_finalize を実行した後, プログラムを強制終了する.

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] 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.
- [6] 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.
- [7] 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.
- [8] 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.
- [9] 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.
- [10] 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.
- [11] 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.
- [12] 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.
- [13] 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.
- [14] 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.

- [15] 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.
- [16] C. F. Gauss. *Theoria Motus Corporum Coelestium in Sectionibus Conicis Solem*. Perthes et Besser, 1809.
- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] D. M. Young. *Iterative Methods for Solving Partial Difference Equations of Elliptic Type*. Doctoral Thesis, Harvard University, 1950.
- [20] 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.
- [21] Y. Saad. A Flexible Inner-outer Preconditioned GMRES Algorithm. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, Vol. 14, No. 2, pp. 461–469, 1993.
- [22] 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.
- [23] 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.
- [24] 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.
- [25] 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.
- [26] J. W. S. Rayleigh. Some General Theorems relating to Vibrations. *Proceedings of the London Mathematical Society*, Vol. 4, No. 1, pp. 357–368, 1873.
- [27] H. R. Rutishauser. Computational Aspects of F. L. Bauser’s Simultaneous Iteration Method. *Numerische Mathematik*, Vol. 13, No. 1, pp. 4–13, 1969.
- [28] 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.

- [29] 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.
- [30] 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.
- [31] O. Axelsson. A Survey of Preconditioned Iterative Methods for Linear Systems of Equations. *BIT*, Vol. 25, No. 1, pp. 166-187, 1985.
- [32] I. Gustafsson. A Class of First Order Factorization Methods. *BIT*, Vol. 18, No. 2, pp. 142-156, 1978.
- [33] Y. Saad. ILUT: A Dual Threshold Incomplete LU Factorization. *Numerical Linear Algebra with Applications*, Vol. 1, No. 4, pp. 387-402, 1994.
- [34] Y. Saad, et al. ITSOL: ITERATIVE SOLVERS Package.
<http://www-users.cs.umn.edu/~saad/software/ITSOL/>.
- [35] 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.
- [36] 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.
- [37] 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.
- [38] 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.
- [39] 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.
- [40] T. Chan and T. Mathew. Domain Decomposition Algorithms. *Acta Numerica*, Vol. 3, pp. 61-143, 1994.
- [41] 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.
- [42] 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.
- [43] 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.
- [44] D. H. Bailey. A Fortran-90 Double-Double Library. <http://crd-legacy.lbl.gov/~dhbailey/mpdist/>.

- [45] 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.
- [46] T. Dekker. A Floating-Point Technique for Extending the Available Precision. *Numerische Mathematik*, Vol. 18, No. 3, pp. 224–242, 1971.
- [47] D. E. Knuth. The Art of Computer Programming: Seminumerical Algorithms, Vol. 2. Addison-Wesley, 1969.
- [48] 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.
- [49] Intel Fortran Compiler for Linux Systems User’s Guide, Vol I. Intel Corporation, 2004.
- [50] 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.
- [51] R. Courant and D. Hilbert. *Methods of Mathematical Physics*. Wiley-VCH, 1989.
- [52] C. Lanczos. *The Variational Principles of Mechanics*, 4th Edition. University of Toronto Press, 1970.
- [53] J. H. Wilkinson. *The Algebraic Eigenvalue Problem*. Oxford University Press, 1988.
- [54] D. M. Young. *Iterative Solution of Large Linear Systems*. Academic Press, 1971.
- [55] G. H. Golub and C. F. Van Loan. *Matrix Computations*, 3rd Edition. The Johns Hopkins University Press, 1996.
- [56] 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.
- [57] Y. Saad. *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems*. Halsted Press, 1992.
- [58] R. Barrett, et al. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*. SIAM, 1994.
- [59] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. Second Edition. SIAM, 2003.
- [60] A. Greenbaum. *Iterative Methods for Solving Linear Systems*. SIAM, 1997.
- [61] Z. Bai, et al. *Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems*. SIAM, 2000.
- [62] J. H. Wilkinson and C. Reinsch. *Handbook for Automatic Computation*, Vol. 2: Linear Algebra. *Grundlehren Der Mathematischen Wissenschaften*, Vol. 186, Springer, 1971.
- [63] 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.
- [64] 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.

- [65] J. J. Dongarra, J. R. Bunch, G. B. Moler, and G. M. Stewart. LINPACK Users' Guide. SIAM, 1979.
- [66] J. R. Rice and R. F. Boisvert. Solving Elliptic Problems Using ELLPACK. Springer, 1985.
- [67] E. Anderson, et al. LAPACK Users' Guide. 3rd ed. SIAM, 1987.
- [68] 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.
- [69] 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.
- [70] Y. Saad. SPARSKIT: A Basic Tool Kit for Sparse Matrix Computations, Version 2, 1994. <http://www-users.cs.umn.edu/~saad/software/SPARSKIT/>.
- [71] A. Geist, et al. PVM: Parallel Virtual Machine. MIT Press, 1994.
- [72] R. Bramley and X. Wang. SPLIB: A library of Iterative Methods for Sparse Linear System. Technical Report, Department of Computer Science, Indiana University, 1995.
- [73] R. F. Boisvert, et al. The Matrix Market Exchange Formats: Initial Design. Technical Report NISTIR 5935, National Institute of Standards and Technology, 1996.
- [74] L. S. Blackford, et al. ScaLAPACK Users' Guide. SIAM, 1997.
- [75] 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.
- [76] R. S. Tuminaro, et al. Official Aztec User's Guide, Version 2.1. Technical Report SAND99-8801J, Sandia National Laboratories, 1999.
- [77] W. Gropp, E. Lusk, and A. Skjellum. Using MPI, 2nd Edition: Portable Parallel Programming with the Message-Passing Interface. MIT Press, 1999.
- [78] S. Balay, et al. PETSc Users Manual. Technical Report ANL-95/11, Argonne National Laboratory, 2004.
- [79] 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.
- [80] M. A. Heroux, et al. An Overview of the Trilinos Project. ACM Transactions on Mathematical Software, Vol. 31, No. 3, pp. 397–423, 2005.
- [81] 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.
- [82] B. Chapman, G. Jost, and R. van der Pas. Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming. MIT Press, 2007.

- [83] 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、本ライブラリで利用できるファイル形式について述べる。

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している。 $M \times N$ 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 非零数 (0 or 1) (0 or 1)
I1 J1 A(I1,J1)                  <--+
I2 J2 A(I2,J2)                  | 行番号 列番号 値
. . .                          | インデックスは 1-base
IL JL A(IL,JL)                  <--+
I1 B(I1)                        <--+
I2 B(I2)                        | B=1 の場合のみ存在する
. . .                          | 行番号 値
IM B(IM)                       <--+
I1 X(I1)                       <--+
I2 X(I2)                        | 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 (非対応)
          P Pattern only (非対応)
      第 2 列: S Symmetric
          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) 右辺が存在する場合
  1      右辺の種類
      F フルベクトル
      M 行列と同じ形式 (非対応)
  2      初期値が与えられているならば G
  3      解が与えられているならば X
  4 - 14 空白
  15 - 28 右辺の数
  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          3          6          9
      1      2      1      2      3      2      3      4      3      4
2.00000000000000000000E+00 1.000000000000000000E+00 1.000000000000000000E+00
2.00000000000000000000E+00 1.000000000000000000E+00 1.000000000000000000E+00

```

```

2.0000000000000000E+00  1.0000000000000000E+00  1.0000000000000000E+00
2.0000000000000000E+00
0.0000000000000000E+00  1.0000000000000000E+00  2.0000000000000000E+00
3.0000000000000000E+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 Matrix Market 形式の仕様を拡張している. 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
IN B(IN)      | インデックスは 1-base
               <--+

```

(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

```