

数値計算ライブラリの使用方法

「実習編」

Kobe HPC Spring School 2019

今村俊幸 理化学研究所 計算科学研究センター

Toshiyuki Imamura, RIKEN Center for Computational Science

2019/3/13～ 15

本日の講義(2)

- 代表的な3ソフトウェアを使った演習
 - ScaLAPACK
 - EigenExa
 - PETSc
- ScaLAPACK
 - 密行列・ベクトルの基本計算
 - 連立一次方程式・固有値計算
- EigenExa
 - 密行列固有値計算
- PETSc/SLEPc
 - 疎行列、連立一次方程式、固有値計算
 - 他に開発環境としても

ScaLAPACKの使用方法

ScaLAPACKサイトの例題より

- <http://www.netlib.org/scalapack/examples/>



```
for HPF example program calling HPF interface to PxGESV

# -----
# Example programs calling PBLAS and ScaLAPACK routines
# -----

file example1.f
for Simplest example program calling PDGESV!!!!
, (Example Program #1 in ScaLAPACK Users' Guide)

file scaex.tgz
for Example program solving linear system of equations (PDGESV)
, (Example Program #2 in ScaLAPACK Users' Guide)

file pdlaread.f
for More efficient version of PDLAREAD used in scaex.tgz

file pdlawrite.f
for More efficient version of PDLAWRITE used in scaex.tgz

file pdposvexample.f
for Simple example program calling PDPOSV!!!!

file pblas.tgz
for Example program calling PDNRM2, PDGEMV, and PDGEMM

file sample\_pssyev\_call.f
for Example program solving Symmetric Eigensystem (PSSYEV)

file sample\_pdsyev\_call.f
for Example program solving Symmetric Eigensystem (PDSYEV)

file sample\_pssyevx\_call.f
for Example program solving Symmetric Eigensystem (PSSYEVX)

file sample\_pdsyevx\_call.f
for Example program solving Symmetric Eigensystem (PDSYEVX)

file sample\_pcheevx\_call.f
for Example program solving Hermitian Eigensystem (PCHEEVX)

file sample\_pzheevx\_call.f
for Example program solving Hermitian Eigensystem (PZHEEVX)
```

sample_pdsyev_call.fをダウンロードする。

How to use ScaLAPACK

- Link方法, Intel compiler+MPIの環境で

```
% mpiifort -o exe Sample_pdsyev_call.f -I${MKLROOT}/include -  
L${MKLROOT}/lib/intel64 -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -  
lmkl_core -lmkl_blacs_intelmpi_lp64 -liomp5 -lpthread -lm -ldl
```

- 実行:

```
#!/bin/bash  
#PBS -q XXXX (S, SMP1, SMP2などから選ぶ)  
#PBS -l select=1:ncpus=4:mpiprocs=4  
#PBS -N job_MPI  
#PBS -o ex.out  
#PBS -j oe  
  
source /etc/profile.d/modules.sh  
module load intel intelmpi  
  
cd ${PBS_O_WORKDIR}  
mpirun dplace ./a.out
```

Let's learn the sample code

- 行列生成関数: PDLAMODHILB
- 固有値計算関数: PDSYEV
- 結果出力: PDLAPRNT

他に、初期化(BLACS_XXX)や終了(BLACS_EXIT)、行列データを扱うための descriptor の宣言(DESCINIT)などが必要。

BLACS: 通信回りの関数系、通常利用者からはプロセスの2次元配置の仕方などの管理系と思えばよい

PDSYEV: QR法による固有値計算ルーチン

他に、PDSYEVX, PDSYEVD, PDSYEVVRなど存在する

行列データはプロセス間で「2次元ブロック分割」されており、行列要素ごとに格納されるプロセスが決まっている。

行列設定関数を読む

- PDLAMODHILBを読んで分かるように

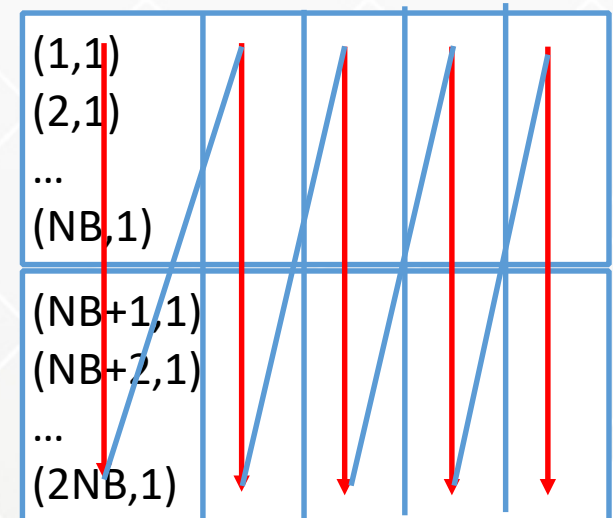
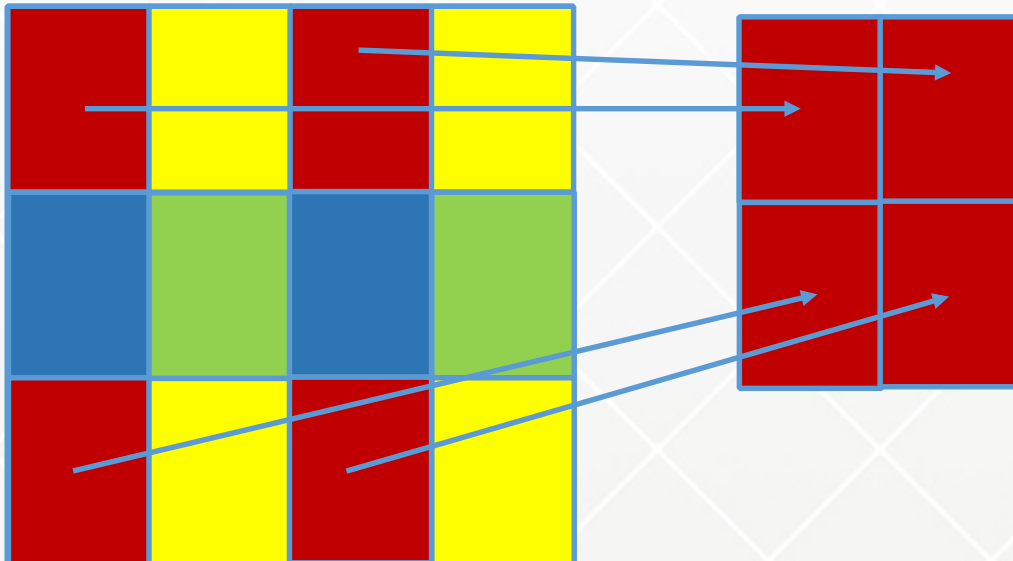
- 並列用の特別な変更は, 代入操作を関数呼び出しPDELSETにしている点。PDELSETはもし、呼び出しプロセスがオーナーであれば指定された値をローカルメモリ上の配列データにストアする

```
SUBROUTINE PDLAMODHILB( N, A, IA, JA, DESCA, INFO )  
DO 20 J = 1, N  
DO 10 I = 1, N  
IF( I.EQ.J ) THEN  
    CALL PDELSET( A, I, J, DESCA, ¥  
        ( DBLE( N-I+1 ) ) / DBLE( N )+ONE / ( DBLE( I+J )-ONE ) )  
ELSE  
    CALL PDELSET( A, I, J, DESCA, ONE / ( DBLE( I+J )-ONE ) )  
ENDIF  
  
END
```

さらなる活用法

- プロセスグリッドとデータ分割

- プロセスは2次元に配置 (MPIのrankと関連付けられる)
 - プロセスグリッド
- 基本データは2次元配列として、プロセスグリッド上に分散配置
 - ブロックサイズ(NB)を基本単位として、大きな行列の対応箇所のみ保有
 - FORTRANのC-Major方式に則って、同一列のブロックは1次元目が連続メモリアクセスとなるようにメモリ上に格納される



簡単な行列積

- これまで行列データは形状と開始インデックスで指定(A(1,1) or A(1,2))
 - 配列Aと分散情報を保持するデスク립タの組で

A(1,1) → A, 1, 1, descA

注意: プログラム上の配列Aはローカルに確保された配列を代表しているので A(1,1)は現在のプロセス上に分散格納されている部分成分の第1,1成分を示している。配列のA(1,1)をアクセスするにはownerを確認し, MPIに相当する通信でデータを前もって移動する必要がある。

Context: プロセスグリッドを管理するハンドラ

```
integer :: ICTXT
call BLACS_GET( -1, 0, ICTXT )
call BLACS_GRIDINIT( ICTXT, 'Row-major', NPROW, NPCOL )
call BLACS_GRIDINFO( ICTXT, NPROW, NPCOL, MYROW, MYCOL )
```

Descriptor: 行列情報を管理するハンドラ

行列のサイズ（行、列）、ブロックサイズなどの情報を格納する。
特に分散方法を固定するなら以下のものを1つ用意して利用する

```
integer, dimension(9) :: DESCA
call DESCINIT( DESCA, n, n, NB, NB, 0, 0, ICTXT, lda, INFO )
```

簡単な行列積

- 行列Aの設定を先のPDLAMODHILBを使わずに
 - $A(I,J)=(N+1)-\max(I,J)$

```
! Setup A
do jl=1,NQ
  do il=1,NP
    ib=(il-1)/NB
    jb=(jl-1)/NB
    i0=MOD(il-1,NB)
    j0=MOD(jl-1,NB)
    i=(ib*NPROW+MYROW)*NB+i0+1
    j=(jb*NPCOL+MYCOL)*NB+j0+1
    if(i<=n.AND.j<=n)then
      a(il,jl)=(n+1)-MAX(i,j)
    else
      a(il,jl)=0
    endif
  end do
end do
```

簡単な行列積

- 実際の行列積部分 (PDGEMM)

- $C=A*B$

```
call MPI_Barrier ( MPI_COMM_WORLD, ierr )  
z1 = MPI_Wtime()
```

```
CALL PDGEMM ( "N", "N", n, n, n, alpha, a, 1, 1, DESCA, &  
              b, 1, 1, DESCA, beta, c, 1, 1, DESCA )
```

```
call MPI_Barrier ( MPI_COMM_WORLD, ierr )  
z2 = MPI_Wtime()
```

- 並列版でないDGEMMを参考に
 - “N”, “N”は転置するかしないかを指定できる
 - 1,1を指定している部分は部分行列のとき開始インデックスを指定できる
 - 今回行列の形状は同じなのでDESCAをすべてで使用(それぞれ変更可能)

PETSc(SLEPC)の使い方

PETSc/SLEPC

公式Hands-on exercisesサイトを活用
+ サンプルの改良を目指す

<http://slepc.upv.es/handson/handson1.html>

Hands-On Exercises **SLEPc**

Exercise 1: Standard Symmetric Eigenvalue Problem

This example solves a standard symmetric eigenvalue problem. A is the matrix resulting from the discretization of the Laplacian operator in 1 dimension by centered finite differences.

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

Compiling

Copy the file [ex1.c \[plain text\]](#) to the working directory and add these lines to the makefile

```
ex1: ex1.o chkopts
```

ex1.cをダウンロードしてください

ex1 f .F をダウンロードしてください
(スクロールした下の方にあります)

コンパイル&リンク

Makefile

```
HOME=/home/guest39
ARCH = arch-linux2-c-debug
PETSC_DIR = $(HOME)/petsc
SLEPC_DIR = $(HOME)/slepc
INCPATH= -I$(PETSC_DIR)/include -I$(PETSC_DIR)/$(ARCH)/include ¥
        -I$(SLEPC_DIR)/include -I$(SLEPC_DIR)/$(ARCH)/include
LDFLAGS= -L$(SLEPC_DIR)/$(ARCH)/lib -lslepc ¥
        -L$(PETSC_DIR)/$(ARCH)/lib -lpetsc

all: ex1 ex1f
ex1: ex1.o
        mpiicc -o ex1 ex1.o $(LDFLAGS)
ex1f: ex1f.o
        mpiifort -o ex1f ex1f.o $(LDFLAGS)
ex1.o: ex1.c
        mpiicc -c ex1.c $(INCPATH)
ex1f.o: ex1f.F
        mpiifort -c ex1f.F $(INCPATH)
clean:
        ¥rm ex1 ex1.o ex1f ex1f.o
```

makeコマンドで
コンパイルする
→ ex1, ex1fが作成される

プログラムの実行

```
#!/bin/bash
#PBS -q XXXX (S, SMP1, SMP2などから選ぶ)
#PBS -l select=1:ncpus=4:mpiprocs=4
#PBS -N job_MPI
#PBS -o ex1.out
#PBS -j oe

source /etc/profile.d/modules.sh
module load intel intelmpi

export PETSC_DIR=/home/guest39/petsc
export SLEPC_DIR=/home/guest39/slepc
export PETSC_ARCH=arch-linux2-c-debug
#
export LD_LIBRARY_PATH=$PETSC_DIR/$PETSC_ARCH/lib:$SLEPC_DIR/$PETSC_ARCH/lib:$HOME/lib64:$LD_LIBRARY_PATH

cd ${PBS_O_WORKDIR}
mpirun dplace ./ex1 -n 100

cd ${PBS_O_WORKDIR}
mpirun dplace ./ex1f -n 100
```

C version

1-D Laplacian Eigenproblem, $n=100$

Number of iterations of the method: 19

Solution method: krylovschur

Number of requested eigenvalues: 1

Stopping condition: $\text{tol}=1\text{e-}08$, $\text{maxit}=100$

Number of converged eigenpairs: 2

k	$ Ax-kx / kx $

3.999033	4.02784e-09
3.996131	4.31174e-09

Cバージョンの結果

F90 version

1-D Laplacian Eigenproblem, $n=100$ (Fortran)

Number of iterations of the method: 19

Solution method: krylovschur

Number of requested eigenvalues: 1

Stopping condition: $\text{tol}=1.0000\text{E-}08$, $\text{maxit}=100$

Number of converged eigenpairs: 2

k	$ Ax-kx / kx $

3.9990E+00	4.0278E-09
3.9961E+00	4.3117E-09

F90バージョンの結果

Play with SLEPC

● チュートリアルページから

```
$ ./ex1 -n 400 -eps_nev 3 -eps_tol 1e-7
```

```
$ ./ex1 -n 400 -eps_nev 3 -eps_ncv 24
```

```
$ ./ex1 -n 100 -eps_nev 4 -eps_type lanczos
```

1-D Laplacian Eigenproblem, n=400

Number of iterations of the method: 100
Solution method: krylovschur

Number of requested eigenvalues: 3
Stopping condition: tol=1e-07, maxit=100
Number of converged eigenpairs: 1

k	$ Ax-kx / kx $
3.999939	9.48781e-08

1-D Laplacian Eigenproblem, n=400

Number of iterations of the method: 60
Solution method: krylovschur

Number of requested eigenvalues: 3
Stopping condition: tol=1e-08, maxit=100
Number of converged eigenpairs: 5

k	$ Ax-kx / kx $
3.999939	9.48494e-09
3.999754	7.19493e-09
3.999448	1.18552e-09
3.999018	6.43926e-10
3.998466	1.04213e-09

1-D Laplacian Eigenproblem, n=100

Number of iterations of the method: 62
Solution method: lanczos

Number of requested eigenvalues: 4
Stopping condition: tol=1e-08, maxit=100
Number of converged eigenpairs: 4

k	$ Ax-kx / kx $
3.999033	9.95783e-09
3.996131	1.97435e-09
3.991299	9.15231e-09
3.984540	3.55339e-09

Learn the sample code

```
SlepcInitialize( PETSC_NULL_CHARACTER, ierr )
```

```
MatCreate( PETSC_COMM_WORLD, A, ierr )
```

```
MatSetSizes( A, ..., n, n, ierr )
```

```
MatSetUp( A, ierr )
```

(行列やベクトルデータの宣言とデータ設定)

```
ESPCreate( PETSC_COMM_WORLD, eps, ierr )
```

```
ESPSetOperators( eps, A, PETSC_NULL_OBJECT, ierr )
```

```
EPSSetProblemType( eps, EPS_HEP, ierr )
```

```
EPSSolve( eps, ierr )
```

```
EPSGetEigenPair( eps, ..... )
```

```
EPSTDestroy( eps, ierr )
```

```
SlepcFinalize( ierr )
```

How to setup a matrix?

- PETScは内部データを柔軟に制御している。PETScが管理するため、使用者からは実態は見えない。行列ハンドラ変数 A を使ってアクセスする。内部フォーマットはいくつか存在する。

! Simple matrix format

Mat A

EPS eps

EPSType tname

PetscReal tol, error, values(:)

MatCreate(PETSC_COMM_WORLD, A , ierr)

MatSetSizes(A , PETSC_DECIDE, PETSC_DECIDE, M , N , ierr)

MatGetOwnershipRange(A , lstart, lend, ierr)

MatSetValues(A , m , idxm, n , idxn, values, INSERT_VALUES|ADD_VALUES, ierr)

MatAssemblyBegin(A , MAT_FINAL_ASSEMBLY, ierr)

MatAssemblyEnd(A , MAT_FINAL_ASSEMBLY, ierr)

How to setup a matrix?

- PETScは内部データを柔軟に制御している。PETScが管理するため、使用者からは実態は見えない。行列ハンドラ変数 A を使ってアクセスする。内部フォーマットはいくつか存在する。

! Simple matrix format

Mat A

EPS eps

EPSType tname

PetscReal tol, error, values(:)

行列データの形成

`MatCreate(PETSC_COMM_WORLD, A, ierr)`

`MatSetSizes(A, PETSC_DECIDE, PETSC_DECIDE, M, N, ierr)`

`MatGetOwnershipRange(A, lstart, lend, ierr)`

`MatSetValues(A, m, idxm, n, idxn, values, INSERT_VALUES|ADD_VALUES, ierr)`

`MatAssemblyBegin(A, MAT_FINAL_ASSEMBLY, ierr)`

`MatAssemblyEnd(A, MAT_FINAL_ASSEMBLY, ierr)`

How to setup a matrix?

- PETScは内部データを柔軟に制御している。PETScが管理するため、使用者からは実態は見えない。行列ハンドラ変数 A を使ってアクセスする。内部フォーマットはいくつか存在する。

! Simple matrix format

Mat A

EPS eps

EPSType tname

PetscReal tol, error, values(:)

MatCreate(PETSC_COMM_WORLD, A , ierr)

MatSetSizes(A , PETSC_DECIDE, PETSC_DECIDE, M , N , ierr)

MatGetOwnershipRange(A , lstart, lend, ierr)

MatSetValues(A , m, idxm, n, idxn, values, INSERT_VALUES|ADD_VALUES, ierr)

MatAssemblyBegin(A , MAT_FINAL_ASSEMBLY, ierr)

MatAssemblyEnd(A , MAT_FINAL_ASSEMBLY, ierr)

行列サイズの指定
グローバルサイズ
 $M \times N$

How to setup a matrix?

- PETScは内部データを柔軟に制御している。PETScが管理するため、使用者からは実態は見えない。行列ハンドラ変数 A を使ってアクセスする。内部フォーマットはいくつか存在する。

! Simple matrix format

Mat A

EPS eps

EPSType tname

PetscReal tol, error, values(:)

MatCreate(PETSC_COMM_WORLD, A , ierr)

MatSetSizes(A , PETSC_DECIDE, PETSC_DECIDE, M , N , ierr)

MatGetOwnershipRange(A , lstart, lend, ierr)

MatSetValues(A , m , idxm, n , idxn, values, INSERT_VALUES|ADD_VALUES, ierr)

MatAssemblyBegin(A , MAT_FINAL_ASSEMBLY, ierr)

MatAssemblyEnd(A , MAT_FINAL_ASSEMBLY, ierr)

mxnのブロック行列
に対して配列valuesを
セットする

How to setup a matrix?

- PETScは内部データを柔軟に制御している。PETScが管理するため、使用者からは実態は見えない。行列ハンドラ変数 A を使ってアクセスする。内部フォーマットはいくつか存在する。

! Simple matrix format

Mat A

EPS eps

EPSType tname

PetscReal tol, error, values(:)

MatCreate(PETSC_COMM_WORLD, A , ierr)

MatSetSizes(A , PETSC_DECIDE, PETSC_DECIDE, N, ierr)

MatGetOwnershipRange(A , lstart, lend, ierr)

MatSetValues(A , m, idxm, n, idxn, values, INSERT_VALUES|ADD_VALUES, ierr)

MatAssemblyBegin(A , MAT_FINAL_ASSEMBLY, ierr)

MatAssemblyEnd(A , MAT_FINAL_ASSEMBLY, ierr)

セットされた配列
データをアセンブル
する

少し複雑な問題にチャレンジ

● 2次元問題の固有値分析を

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

: 1次元の場合

$$A_0 = \begin{bmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & -1 & 4 & -1 & \\ & & & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

とおくと、2次元の場合は次のように
ただし I は対応する大きさの単位行列

$$A = \begin{bmatrix} A_0 & -I & & & \\ -I & A_0 & -I & & \\ & -I & A_0 & -I & \\ & & & -I & A_0 \end{bmatrix}$$

少し複雑な問題にチャレンジ

● 行列のsetup方法が変わる

```
MatGetOwnershipRange(A,&lstart,&lend);
for (i=lstart;i<lend;i++) {
  if (i>0) { MatSetValue(A,i,i-1,-1.0,INSERT_VALUES); }
  if (i<n-1) { MatSetValue(A,i,i+1,-1.0,INSERT_VALUES); }
  MatSetValue(A,i,i,2.0,INSERT_VALUES);
}
MatAssemblyBegin(A,MAT_FINAL_ASSEMBLY);
MatAssemblyEnd(A,MAT_FINAL_ASSEMBLY);
```



```
MatGetOwnershipRange(A,&lstart,&lend);
for (i=lstart;i<lend;i++) {
  ib=i/n; i0=i%n;
  if (ib>0) { MatSetValue(A,i,i-n,-1.0,INSERT_VALUES); }
  if (ib<n-1) { MatSetValue(A,i,i+n,-1.0,INSERT_VALUES); }
  if ( i0>0 ) { MatSetValue(A,i,i-1,-1.0,INSERT_VALUES); }
  if ( i0<n-1 ) { MatSetValue(A,i,i+1,-1.0,INSERT_VALUES); }
  MatSetValue(A,i,i,4.0,INSERT_VALUES);
}
MatAssemblyBegin(A,MAT_FINAL_ASSEMBLY);
MatAssemblyEnd(A,MAT_FINAL_ASSEMBLY);
```

【ポイント】

他に、
Mat Aのサイズを $(n*n) \times (n*n)$ に変更する
また、
長さ $n*n$ のベクトルだが必要に応じて
 (n,n) の2次元配列と処理する。

Play with SLEPC

● 変更したプログラム(出力部も変更済み)

```
$ ./ex1-2d -n 10 -eps_nev 3 -eps_tol 1e-7
```

```
$ ./ex1-2d -n 10 -eps_nev 3 -eps_ncv 24
```

```
$ ./ex1-2d -n 10 -eps_nev 4 -eps_type lanczos
```

2-D Laplacian Eigenproblem, n=10

Number of iterations of the method: 3
Solution method: krylovschur

Number of requested eigenvalues: 3
Stopping condition: tol=1e-08, maxit=100
Number of converged eigenpairs: 5

k	$ Ax-kx / kx $
7.837972	2.40527e-14
7.601493	1.39769e-13
7.365014	3.14186e-11
7.228707	6.57291e-11
6.992229	1.14673e-09

2-D Laplacian Eigenproblem, n=10

Number of iterations of the method: 10
Solution method: lanczos

Number of requested eigenvalues: 4
Stopping condition: tol=1e-08, maxit=100
Number of converged eigenpairs: 4

k	$ Ax-kx / kx $
7.837972	1.60317e-09
7.601493	1.72603e-10
7.601493	3.30641e-09
7.365014	2.12916e-09

2-D Laplacian Eigenproblem, n=10

Number of iterations of the method: 4
Solution method: krylovschur

Number of requested eigenvalues: 3
Stopping condition: tol=1e-07, maxit=100
Number of converged eigenpairs: 4

k	$ Ax-kx / kx $
7.837972	5.4621e-09
7.601493	6.44101e-08
7.365014	1.2931e-08
7.228707	1.40955e-08

上級編:Stencilを使う

- Stencilは反復法系統の解法で Ax のような計算を任意の場所で考えるとき

$$v(i,j)= \\ \text{Top}(i,j)*v(i,j+1)+\text{Center}(i,j)*v(i,j)+\text{Bottom}(i,j)*v(i,j-1) \text{ :5点ステンシル} \\ +\text{Left}(i,j)*v(i-1,j)+\text{Right}(i,j)*v(i+1,j)$$

行列の替わりに、「上記係数行列を渡す」か「上記計算を行うルーチンそのものを渡す」ことで Ax の計算は実現できる

PETScはstencil用の特別な計算手順が用意されている。

ただし、連立一次方程式を解く場合にのみ提供

固有値計算(SLEPc)の場合はShellという別の行列構造(MatCreateShell)と関数登録(MatShellSetOperation)の機構を利用する。

PETSc のKSP solverでStencil計算

- 何をすべきか

- サンプルコードをダウンロード

<http://www.mcs.anl.gov/petsc/petsc-current/src/ksp/ksp/examples/tutorials/ex50.c>

- コンパイル
- キーポイントは i) PETScの初期化過程と行列生成方法, ii) ソルバルーチンの呼び出し方

PETScはDMDA (distributed multi-dimensional array format)をサポートする

- 3つのコールバック関数と1ユーティリティ関数を用意する必要がある
 - **ComputeRHS,**
 - **ComputeStencil,**
 - **SetInitialGuess,** and
 - **GetComputedResult.**
- 必要に応じて DMハンドラに上記関数情報を登録.
- KSPSolve() によって連立一次方程式が解かれる

PETSc のKSP solverでStencil計算

1. ComputeStencil

- 2次元ヤコビ問題の場合5点ステンシル

$$u_{i,j}^{\text{new}} := au_{i-1,j} + bu_{i,j-1} + cu_{i,j} + du_{i+1,j} + eu_{i,j+1} + f_{i,j}$$

- 上記式を行列 x ベクトルの表現と考える.

2. ComputeRHS

- 反復法の中で右辺ベクトルを更新するときの手続き

3. SetInitialGuess

- 初期値を設定する

4. GetComputedResult.

- 結果を取り出す方法

Play with PETSc

● プログラム実行例

```
$ ./ex50 -ksp_monitor
```

```
./ex50 -da_grid_x 120 -da_grid_y 120 -ksp_type cg -pc_type  
e none -ksp_monitor
```

```
$ ./ex50 -da_grid_x 120 -da_grid_y 120  
-ksp_type gmres -pc_type mg -ksp_monitor
```

```
0 KSP Residual norm 4.166666666667e-03  
1 KSP Residual norm 1.397528003165e-15
```

```
0 KSP Residual norm 8.461650784989e-02  
1 KSP Residual norm 2.651391244119e-02  
2 KSP Residual norm 7.393505623135e-03  
3 KSP Residual norm 2.716741858701e-03  
4 KSP Residual norm 1.227939334146e-03  
5 KSP Residual norm 7.992911579280e-04  
6 KSP Residual norm 4.352343260567e-04  
7 KSP Residual norm 1.220838982121e-04  
8 KSP Residual norm 1.986831847167e-05  
9 KSP Residual norm 5.498079664434e-06  
10 KSP Residual norm 1.706579187483e-06  
11 KSP Residual norm 2.864431046042e-07
```

```
0 KSP Residual norm 3.644879484287e-02  
1 KSP Residual norm 2.829277489238e-02  
2 KSP Residual norm 1.108114249011e-02  
3 KSP Residual norm 4.923852014037e-03  
4 KSP Residual norm 2.675987120928e-03  
5 KSP Residual norm 1.645371666521e-03  
6 KSP Residual norm 1.078492505017e-03  
7 KSP Residual norm 7.453947736021e-04  
8 KSP Residual norm 5.348142516896e-04  
9 KSP Residual norm 3.896019613535e-04  
10 KSP Residual norm 2.853075689015e-04  
11 KSP Residual norm 1.950277383544e-04  
12 KSP Residual norm 6.674151272888e-05  
13 KSP Residual norm 1.247668851444e-05  
14 KSP Residual norm 9.491976417721e-06  
15 KSP Residual norm 7.982091088757e-06  
16 KSP Residual norm 6.666275824338e-06  
17 KSP Residual norm 5.576472192563e-06
```


まとめ

- 代表的な並列数値計算ライブラリ

- ScaLAPACK
- EigenExa (時間の都合で割愛)
- PETSc

他、逐次版でLAPACK, BLASなど

- ScaLAPACK (Fortranのみ説明)

- 2次元プロセスグリッド、ブロック分割された行列とベクトル
- ハンドラを使ってさまざまな情報を管理 (PETScも同様)

- PETSc

- 疎行列だけでなくstencil型データ構造にも対応
- 手続きが決まっているので、サンプルコードを参考にして必要な部分を追加拡張していく。
- 実行時の引数やプログラムコード内で設定変更可能