

# 目次

<b>第1章 数値計算と PC Cluster</b>	<b>1</b>
1.1 何故, 大規模計算が必要なのか	1
1.2 移流拡散方程式の近似数値計算	2
1.3 PC Cluster へ至る経緯	3
1.4 MPI とは?	5
1.5 ネットワークの性能について	8
<b>第2章 IEEE754 standard と多倍長浮動小数点数</b>	<b>13</b>
2.1 PC の構成	13
2.2 IEEE754 倍精度	14
2.3 多倍長浮動小数点数: GMP と MPFR	16
2.4 MPFR の性能と現実的な多倍長精度の範囲	18
<b>第3章 UNIX でのプログラミング初歩</b>	<b>21</b>
3.1 最初の一步	21
3.2 数値計算プログラミングの基礎	23
3.3 多倍長計算プログラミング	25
<b>第4章 プログラムの時間計測方法</b>	<b>31</b>
4.1 時間計測について	31
4.2 並列プログラムの実行速度計測	32
<b>第5章 初歩の BNCpack プログラミング</b>	<b>35</b>
5.1 行列計算	35
5.2 数値積分	39
<b>第6章 MPI プログラミングの初歩</b>	<b>43</b>
6.1 MPI の動作原理	43
6.2 プロセス (ランク) 毎の動作	45
6.3 プロセス間での 1 対 1 通信	48

6.4	多倍長浮動小数点数を用いた MPI プログラム	50
<b>第 7 章</b>	<b>MPI の集団通信</b>	<b>57</b>
7.1	Bcast(ブロードキャスト)	57
7.2	Gather(ギャザ)	60
7.3	Scatter(スキヤタ)	64
7.4	Reduce(レデュース)	67
7.5	Allgather(オールギャザ)	70
7.6	Allreduce(オールレデュース)	74
7.7	Alltoall	77
<b>第 8 章</b>	<b>最初の MPIBNCpack プログラミング</b>	<b>85</b>
8.1	数値積分の並列化	85
8.2	BNCpack プログラムのスケルトン	88
8.3	ベクトルの数値計算	89
8.4	正方行列の数値計算	94
8.5	MPIBNCpack プログラムのスケルトン	99
8.6	ベクトルの数値計算の並列分散化	100
8.7	正方行列の数値計算の並列分散化	107
<b>第 9 章</b>	<b>行列の積への応用</b>	<b>115</b>
9.1	BNCpack による行列積	115
9.2	行列積の並列分散アルゴリズム	117
9.3	MPIBNCpack による行列積と時間計測方法	121
<b>第 10 章</b>	<b>Krylov 部分空間法への応用</b>	<b>127</b>
10.1	CG 法	127
10.2	逐次計算プログラム	128
10.3	並列プログラム	132
10.4	最小計算時間の探索	139
<b>第 11 章</b>	<b>DKA 法の実例</b>	<b>149</b>
11.1	DKA 法のアルゴリズム	149
11.2	逐次計算プログラム	151
11.3	並列計算プログラム	154

<b>第 12 章 補外法を用いた数値積分への応用</b>	<b>161</b>
12.1 逐次計算プログラム	163
12.2 並列計算プログラム	166
<b>付録 A LAPACK について</b>	<b>173</b>
A.1 LAPACK とは?	173
A.1.1 BLAS	173
A.1.2 LAPACK	174
A.1.3 LAPACK/CLAPACK のコンパイル	175
A.1.4 連立一次方程式を解く	175
A.1.5 実正方行列の固有値・固有ベクトルを求める	177
A.2 パフォーマンス計測	178
A.3 g77 用のプログラム例	179

