数 値 解 析 18－1
（１９８６．１０．４）

数学ライブラリＮＵＭＰＡＣのスーパー・コンピュータ版

秦野甯世　　　　二宮市三
（中京大学・教養）（中部大学・経営情報）

数値計算ライブラリＮＵＭＰＡＣは、３００種類、延べ総数９００に及ぶ高性能副プログラムの一大集合体である。この中の線型計算の部分について、ベクトル計算機の処理能力を最大限に活用するよう改良し、高速度版を開発した。最新のスーパー・コンピュータＶＰ２００、Ｓ８１０、ＳＸ－１、ＳＸ－２の上で、従来の汎用大型計算機の１０～１００倍の速度がえられた。

The Supercomputer Version of the Mathematical Library NUMPAC

Yasuyo Hatano * and Ichizo Ninomiya **

* Faculty of Liberal Arts , Chukyou University
101 -2 Yagoto Honmachi ,Syouwa-Ku ,Nagoya-shi, 466,Japan
** Department of Management and Information Science ,Chubu University
1200 Matsumoto-cho , Kasugai-shi , 487,Japan

The mathematical library NUMPAC (Nagoya University Mathematical Package) has been constructed sice 1971 by cooperation of the members of the Nagoya Numerical Analysis Group represented by Ichizo Ninomiya. It is an all-round and general purpose numerical library consisting of 900 high quarlty subroutines and covering the vast field from linear algebra to special functions.

Recently , 7 representative subroutines for linear algebra has been rewritten to exploit the high speed of supercomputers. The performance tests of these subroutines have been conducted on the supercomputers VP200, S810, SX-1 and SX-2 . It turned out that they are 10 to 100 times faster than the original versions on the fastest scalar computers.

1．　まえがき

数値計算ライブラリＮＵＭＰＡＣは、初等関数、特殊関数、線型計算、数値積分、補間、ＦＦＴなど、数値計算の広い分野をカバーする、汎用的・基本的パッケージである。名古屋大学大型計算機センターにおいて十余年に亙り絶え間ない開発、改良、整備、普及の努力を重ねてきた。現在、日本国内の大学および研究所の計算機センターを中心に２８の施設に移植され広範囲の研究者により利用されている。

最近、国立７大学並びに研究所の計算機センターでは、スーパー・コンピュータが普及し、これを駆使しての大規模計算機実験による成果が注目されるようになってきた［１］。すでに、ＮＥＣ　ＳＸ－１，ＳＸ－２が実動を開始し世界最高速の計算が可能になった。ＮＵＭＰＡＣにおいても、これへの対応は、必須の情勢に至っている。

１９８３～８４にかけて、東大、京大にそれぞれＨＩＴＡＣ　Ｓ８１０、ＦＡＣＯＭ　ＶＰ１００が導入されたのを契機に、連立一次方程式、固有値解析のサブルーチンの中から最も基本的でベクトル化効果のも大きいものを選んで開発に着手した。その後、逆行列、非線型連立方程式、帯行列連立一次方程式、およびこれらの複素数版の開発に及んで現在に至っている。

本稿では、これまでに開発してきたＮＵＭＰＡＣスーパー・コンピュータ版について、ＨＩＴＡＣ　Ｓ８１０／１０、Ｓ８１０／２０、ＦＡＣＯＭ　ＶＰ１００、ＶＰ２００、ＮＥＣ　ＳＸ－１，ＳＸ－２の上での速度一覧を示す。

２．ＮＵＭＰＡＣスーパー・コンピュータ版のベクトル化技法

今回改良したプログラムに共通して、使用したベクトル化技法の主なものは，次の２点である。線型代数のプログラムによく出てくる行列の内積のような多重ＤＯループにおいて

外積型ＤＯループ方式

多重のアンローリング

を原則として採用している。

具体的には、次のようなことである。例えば、コレスキー分解の主要計算部分は次のような３重の内積型ループとして通常書かれる。

```
      DO 30 K=1,N
         :
      DO 20 J=K,N
      DO 10 I=1,K-1
10    A(K,J)=A(K,J)-A(I,K)*A(I,J)
20    CONTINUE
```

このループの、中側の二つのループの順番を入れ変えると

```
      DO  30  K=1, N
          :
      DO  10  I=1, K-1
      DO  20  J=K, N
20    A(K, J)=A(K, J)-A(I, K)*A(I, J)
10    CONTINUE
```

という、いわゆる外積型の計算に変えることができる。スーパー・コンピュータでは、後者の外積型式のループが効率がよいので、ＮＵＭＰＡＣでは外積型ループを採用している。ただし、外積型ループにおいてそのループ長が極度に短くなったときだけは、ループ長の長い内積型に切り替えている。たとえば上例で、最内側Ｊのループで、Ｋが大きい時、つまりＪについてのループ長が短くなったときは前者の内積型ループに切り替えている。ＮＵＭＰＡＣベクトル版では最内側ループ長がＮ／８～Ｎ／９以下になった時のみ内積型に切り替える。

アンローリングについては、並列に動きうるベクトル演算器を多く備えている計算機ほどその多重度を多くすることによって高速化される。

次に、各プログラムについての特徴を述べる。

（１）連立一次方程式

アンローリングの多重度は、ＶＰ１００、２００共通に2、Ｓ８１０／１０、２０では8、ＳＸ－１、ＳＸ－２では１２とした。ＳＸ－２用の改訂コレスキー分解では２４重まで施している。多重度１から２に上げた時には、いずれのコンピュータでも著しい高速化が得られるが、それ以上では僅かの改良である。

（２）固有値解析

６種のコンピュータ共通に４重のアンローリングを施した。

（３）逆行列

共通に、８重のアンローリングを施した。

複素数行列用のルーチンでは、４重とした。ピボット選択の時、組み込み関数ＣＡＢＳ使わずに、実数部、虚数部それぞれの絶対値和｜ｒ｜＋｜ｉ｜で代用することによりＣＡＢＳの約１．５倍の高速化が得られた。非線型連立方程式ルーチンでは計算の主要部分が逆行列の計算で占められる。

３．ＮＵＭＰＡＣスーパー・コンピュータ版の性能

今回改良したプログラムのうち、特に著しく効率の向上が見られた密行列ルーチンについて、各種のスーパー・コンピュータ上での処理速度の実験結果を以下に掲げる。

実験したサブルーチン名とその機能は表１の通りである。サブルーチン名の末尾一文字がＷのものは倍精度実数型、Ｙは倍精度複素数型のルーチンである。実験結果は倍精度ルーチンのものばかりである。このほかに末尾一文字がＶの単精度実数型、Ｘの単精度複素数型のルーチンも用意している。すべて東大、京大、東北大、名大の大型計算機センター・プログラム・ライブラリーに登録されている。

表１　サブルーチンの機能と手法の一覧

ルーチン名	内容
ＭＩＮＶＷ	行列の逆転（倍精度，ガウスの消去法）
ＭＩＮＶＹ	行列の逆転（倍精度複素数，ガウスの消去法）
ＢＲＯＹＤＷ	非線型連立方程式（倍精度，ブロイデンの方法）
ＬＥＱＬＵＷ	連立一次方程式（倍精度，ＬＵ分解）
ＣＨＯＬＦＷ	連立一次方程式（倍精度，コレスキー分解）
ＭＣＨＬＦＷ	連立一次方程式（倍精度，改定コレスキー分解）
ＨＯＱＲＶＷ	固有値解析（倍精度，ハウスホルダーＱＲ法）
ＨＯＢＳＶＷ	固有値解析（倍精度，ハウスホルダー・二分法）
ＨＱＲＩＩＷ	固有値解析（倍精度，ハウスホルダー・逆反復法）
ＨＥＱＲＶＷ	固有値解析（倍精度，ＱＲ法，実非対称行列）

表２は実験結果の一部である。数値は、各ルーチン毎に示したサイズの問題で要したＣＰＵ時間をミリ秒単位で示したものである。ＣＰＵ時間は、サブルーチンの前後で時間測定用サービスルーチンＣＬＯＣＫをコールして計った値を、目的のサブルーチンの所要時間として示した。この実験に用いたテスト問題について以下に述べる。

（１）連立一次方程式

フランク行列を用いた。ｎ次のフランク行列は、

ａ（ｉ，ｊ）＝ｎ＋１－ｍａｘ（ｉ，ｊ）　　ｉ，ｊ＝１，２，・・・，ｎ

である。右辺列は、解ベクトルの成分がすべて１になるように設定し、元数ｎは１００，２００，３００，・・・，１０００まで変化させた。

（２）固有値解析

上と同じフランク行列を用いた。ｎ次のフランク行列の固有値は，大きな方から順番に、

$$\lambda_k=\frac{1}{4\sin^2\frac{2k-1}{2n+1}\frac{\pi}{2}} \qquad k=1,2,\cdots,n$$

で表わされれる。

（３）逆行列

フランク行列を用いた。

（４）非線型連立方程式

次のようなｎ個の方程式

$f_1=2x_2-(3+\alpha x_1)x_1-\beta$

$f_i=x_{i-1}-(3+\alpha x_i)x_i+2x_{i+1}-\beta \quad ,i=2,..,n-1$

$f_n=x_{n-1}-(3+\alpha x_n)x_n-\beta$

$\alpha=-0.1,\beta=1.0, \quad x_i^0=-1$

について，初期値はすべて－１．０を与え、収束判定定数を１．Ｅ－１０とした時の、反復回数とＣＰＵ時間を測定する。ｎは５０，１００，１５０，・・・，３００まで変化させる。

表２　ＮＵＭＰＡＣベクトル版の性能
８６年９月５日
ＣＰＵ時間：ミリ秒

計算機システム名	次元数	M380	M680H	VP100	VP200	S810／10	S810／20	SX−1	SX−2
測定年月・場所 －－－－ ルーチン名		86．3 名大	86．2～6 分子研	85 京大	86．2 京大	86．2 分子研	86．5 東大	86．5～8 阪大	86．4 NEC中央研究所
MINVW	500	27331	20776	1298	879	1945	1063	860	406
MINVY	500	97296	−	−	4149	−	2282	4552	−
BROYDW	200	3180	2440	263	243	262	183	135	69
LEQLUW	500	11114	5504	404	264	556	349	264	141
CHOLFW	500	5251	3024	198	124	352	166	121	62
MCHLFW	500	5370	3167	199	128	351	164	122	59
HOQRVW *	300	5062	3199	562	400	652	606	311	191
HOQRVW**	300	17513	10499	1561	945	1567	1444	814	441
HOBSVW *	300	89790	5856	791	416	603	452	411	−
HOBSVW**	300	19554	12203	1890	1279	2277	1616	1359	−
HQRIIW *	300	5107	3272	564	397	642	595	310	−
HQRIIW**	300	15637	9469	1664	1250	2329	1751	1258	−
HEQRVW *	300	13527	79744	1733	1262	1781	1391	804	527
HEQRVW**	300	31400	20648	4709	3610	4624	3610	2019	1403

＊：　すべての固有値を求める。
＊＊：　すべての固有値と固有ベクトルを求める。

表２にはＣＰＵ時間のみを示した。精度は、通常のスカラー計算機の場合とほぼ同程度で十分満足なものである。

測定に使用した計算機システムは、前に述べた６種類のベクトル計算機のほかに、スカラー計算機ＦＡＣＯＭ　Ｍ３８０，ＨＩＴＡＣ　Ｍ６８０ＨでのＣＰＵ時間も比較のために添えた。測定の場所と機関についても表の中に示した。コンパイルのオプションは、各計算機

センターで設定されたものに加えて、次の表３のようなオプションを陽に指定した。

表３　　コンパイルオプション

システム名	コンパイル，リンク　オプション
M380	OPT (3)，AE，ITR
M680H	NOHAP，SOPT，DCOM，COMARY／ EX=EA，LD=ANY
S810／10	HAP，SOPT，DCOM，COMARY／ EX=EA，LD=ANY
S810／20	HAP，S，COMARY，ALC，OPT (3)，NODOCHK
VP100／VP200	VP，AE，NOMAP
SX－1	SOURCE
SX－2	NCLIST，FATAL，VECTOR= (NOMSG，VWORSZ=4M，MODEL=SX2)，MASK= (NOZDIV，NOFLOVF，NOFLUNF)，XAREA=64K

次に，ベクトル長と処理速度の関係を図１－１，１－２に示す。図の横軸は行列の次元数、縦軸はＭ３８０の速度を１とした時の速度の倍率を表わす。グラフ中のシンボルの意味は、図中のＮＯＴＥに示した通りであるが、ＳＸ－１，ＳＸ－２については、黒丸を結んだ線で示す。＋印のみの（結んでない）ものはＭ６８０のＭ３８０に対する速度比である。

３．むすび

連立一次方程式、固有値解析ルーチンに関する、最近のスーパー・コンピュータでの実験結果について報告した。各コンピュータのベクトル処理能力を十分引き出すことに成功したといえる。例えば、改訂コレスキー分解による１０００次元の連立一次方程式はＳＸ－２では０．４秒である。これはＭ３８０の１８０倍の１．４ＧＦＬＯＰＳの速度に相当する。これはピーク性能に達していると言ってもよい。

今後も、他の分野、例えば補間、微分方程式などについてもベクトル版の開発を行いたい。

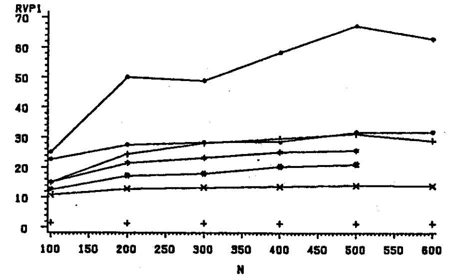
最後に、この実験および開発に当たってスーパー・コンピュータを使用させていただきました各機関の計算機センターの方方に、更にベクトル化技法やプログラミング相談に応じていただきました諸賢に対して謝意を表明致します。

参考資料

［１］京都大学大型計算機センター（１９８５，１９８６）
「ベクトル計算機応用シンポジウム－ベクトル計算機による超高速計算－論文集」

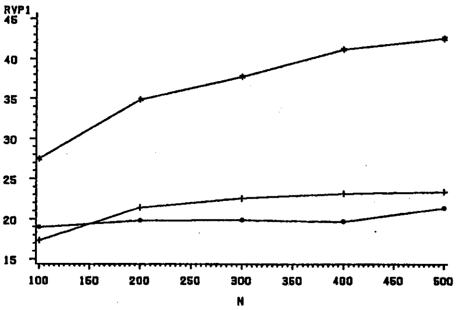
図１－１　　ベクトル版のＭ３８０に対する速度比

Matrix inversion. MINVW (ratio to M380)



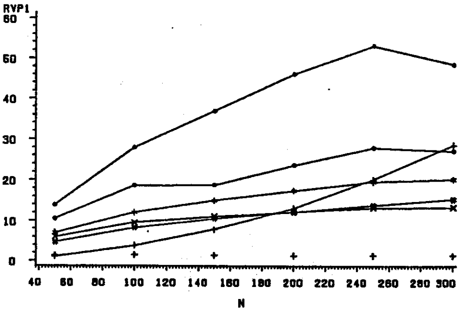
NOTE *=VP100 +=VP200 X=S810/10 *=S810/20 SX1.SX2

Matrix inversion. MINVY (ratio to M380)



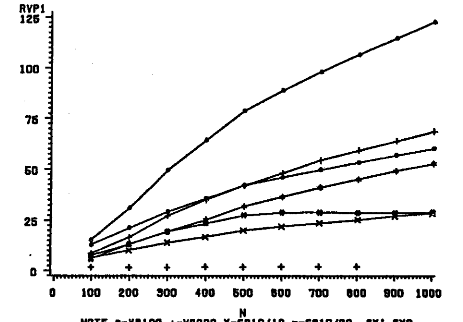
NOTE *=VP100 +=VP200 X=S810/10 *=S810/20 SX1.SX2

Nonlinear eqations BROYDW (ratio to M380)



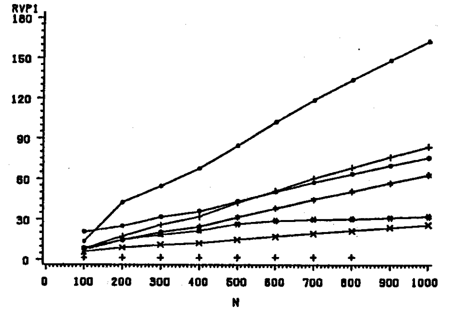
NOTE *=VP100 +=VP200 X=S810/10 *=S810/20 SX1.SX2

Linear equation prob. LEQLUW (ratio to M380)



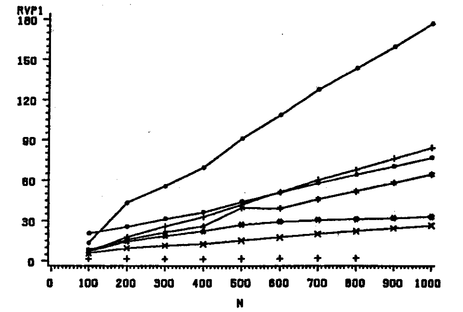
NOTE *=VP100 +=VP200 X=S810/10 *=S810/20 SX1.SX2

Linear equation prob. CHOLFW (ratio to M380)



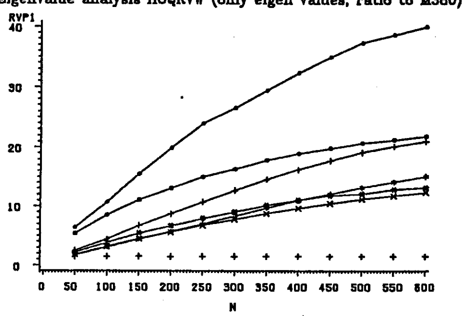
NOTE *=VP100 +=VP200 X=S810/10 *=S810/20 SX1.SX2

Linear equation prob. MCHLFW (ratio to M380)



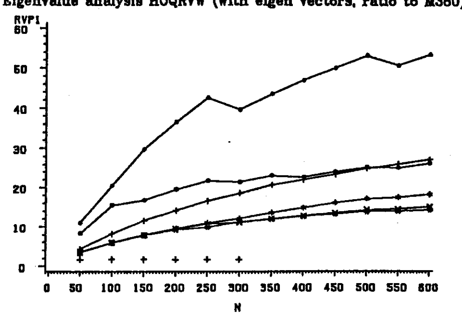
NOTE *=VP100 +=VP200 X=S810/10 *=S810/20 SX1.SX2

Eigenvalue analysis HOQRVW (only eigen values, ratio to M380)



NOTE *=VP100 +=VP200 X=S810/10 *=S810/20 SX1.SX2

Eigenvalue analysis HOQRVW (with eigen vectors, ratio to M380)



NOTE *=VP100 +=VP200 X=S810/10 *=S810/20 SX1.SX2

図１－２　　ベクトル版のＭ３８０に対する速度比