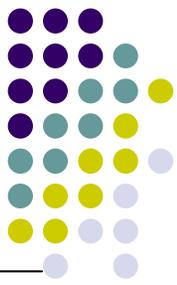


Fortran Builder を使った数値計算

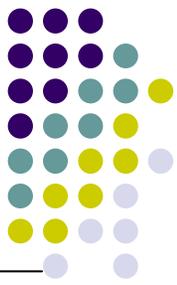
筑波大学 図書館情報メディア研究科
長谷川 秀彦





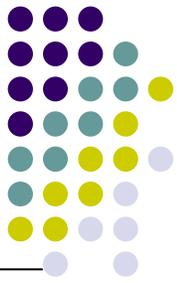
あらすじ

- はじめに – 計算環境の特徴
- LAPACK とは
- Fortran Builder (learning Ed.) を使う
 - * 新規作成
 - * 自分のコードに LAPACK
 - * 自分のコードを更新 & LAPACK 使用
 - * 数値実験ツール
- まとめ



はじめに – 計算環境の特徴

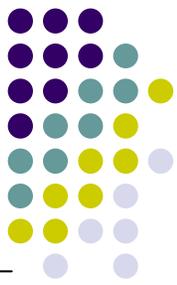
- メインフレーム：
すべての機能が1社によって提供される
- UNIX サーバ：
管理者が存在し、ふつうは使うだけ
- Linux パソコン：
自分でインストール、自分で設定・管理
- Windows パソコン：
個性の強い多様なソフトウェアの寄せ集め



計算環境の変遷



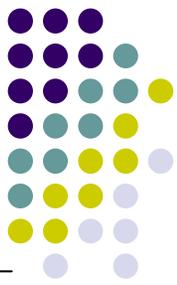
山本、榊原、野寺、長谷川。これだけは知っておきたい数学ツール(インターネット時代の数学 1)、共立出版、1999



LAPACK とは

- エルエーパック、レイパック
- Linear Algebra PACKage
- 連立一次方程式、最小自乗法、固有値、特異値
- 密行列と帯行列(疎行列は含まず)
- Single, Double, Complex, Double Complex
- ブロック(行列-行列積ベースの)アルゴリズム
- 性能は Level 3 BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms) に依存
- USA の研究プロジェクトの成果
- Fortran77

決まりごとと DGESVX



(1) Type:

C: Complex, D: Double, S: Single, Z: Double Complex

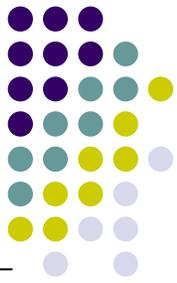
(2) Matrix Type:

GEneral, General Band, General Tridiagonal, SYmmetric, Positive Definite, Pos. def. Packed

(3) Function:

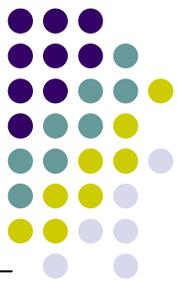
Solve, Least Square, EigenValue, Singular Value Decomposition, Generalized eigenValue Decomposition, eXpert driver

LAPACK の歴史

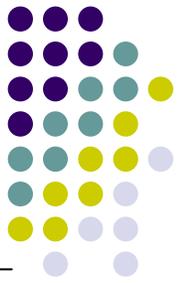


- LINPACK
- EISPACK
- LAPACK Ver. 1 Feb. 1992
- LAPACK Ver. 2 Sep. 1994
- LAPACK Ver. 3 June 1999
- LAPACK Ver. 4

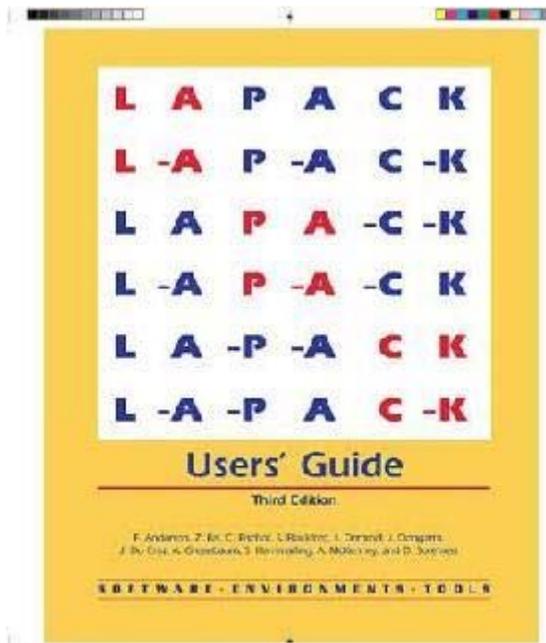
LAPACK Family



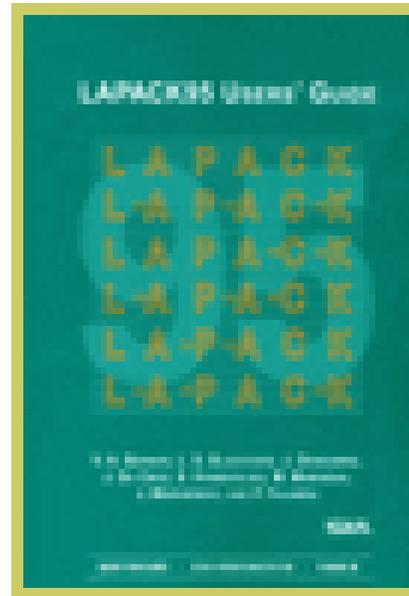
- ScaLAPACK: 分散並列コンピュータ用
(スケーラパック)
- LAPACK95: Fortran95 インターフェース
- CLAPACK: C インターフェース(f2c)
- LAPACK++: C++ インターフェース
- JLAPACK: Java インターフェース



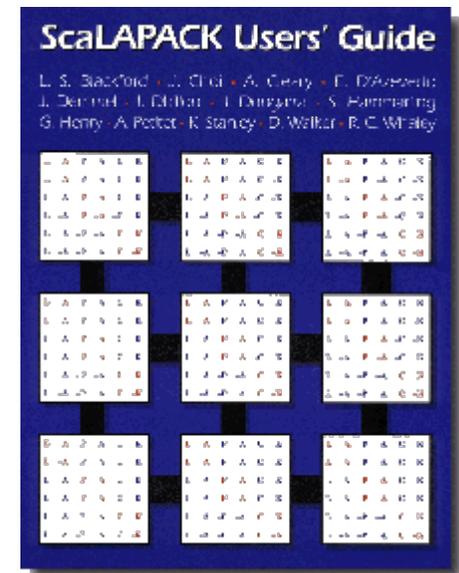
SIAM: Society for Industrial and Applied Mathematics



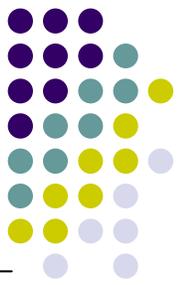
LAPACK:
Basic



Fortran95 Interface

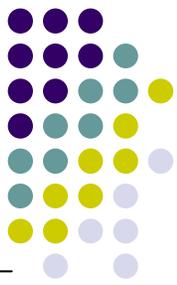


ScaLAPACK:
Distributed Parallel



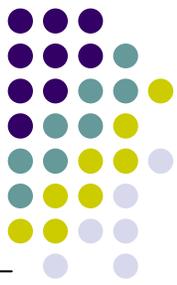
LAPACK on Unix

- www.netlib.org からダウンロード (free)
- BLAS: ベンダ提供 or ソースコードからコンパイル
- make で済むが、作業はたくさん
- LAPACK Ver. 3 のインストール方法:
「数値計算ライブラリ」 in これだけは知っておきたい数学ツール、共立出版、1999
phase.hpcc.jp/phase/lapack-j/LAPACK3.0/lapack3.0_howto.html



LAPACK on Windows

- www.netlib.org にコンパイル済みライブラリがある(約 8MB)
- 圧縮を解除して使うだけ？
- 使い方？
- 自分に合ったコンパイル方法？
(経験がないので不明)

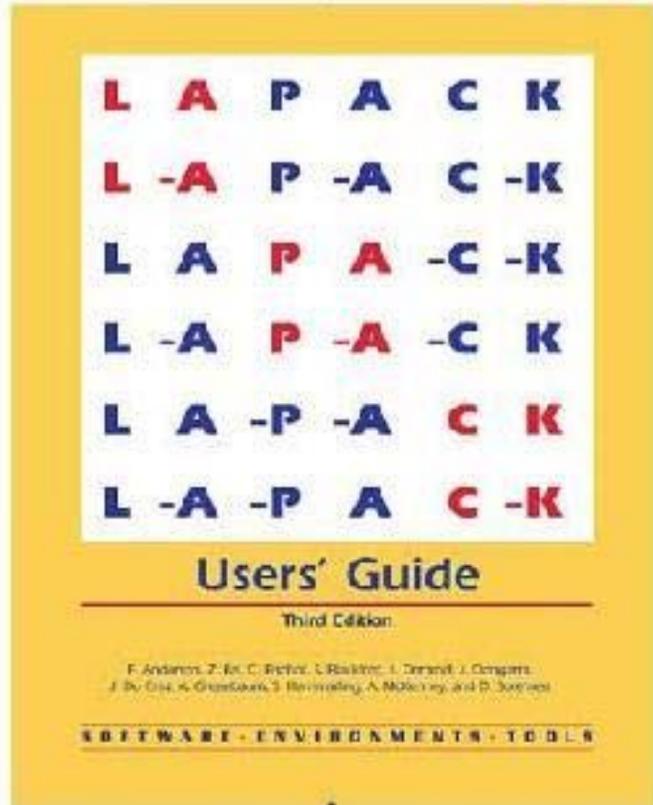
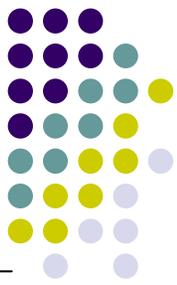


Fortran Builder には

- LAPACK の Double と Double Complex
- 基本的なドライバルーチンすべてを含む
- テストプログラムと 10×10 程度のテストデータ
- テストデータに関する簡単な文書

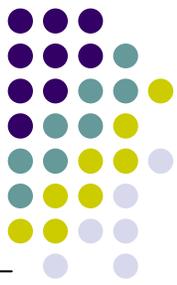
LAPACK Users' Guide

Third Edition

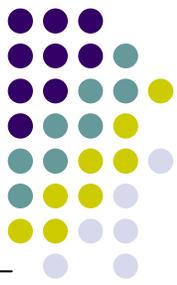


- SIAM 刊、\$46.00
- 概念、仕様あり
- インターフェース、アルゴリズムの理解に必要
- Web 版あり:
www.netlib.org/lapack/lug/
- 日本語訳は Second Edition

LAPACK Users' Guide の著者

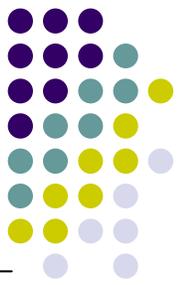


- E. Anderson (*University of Tennessee, Knoxville*)
- Z. Bai (*University of Kentucky and University of California, Davis*)
- C. Bischof (*Institute of Scientific Computing, Technical University Aachen, Germany*)
- L. S. Blackford (formerly L. S. Ostrouchov) (*University of Tennessee, Knoxville*)
- J. Demmel (*University of California, Berkeley*)
- J. Dongarra (*University of Tennessee, Knoxville and Oak Ridge National Laboratory*)
- J. Du Croz (*Numerical Algorithms Group Ltd. (retired)*)
- A. Greenbaum (*University of Washington*)
- S. Hammarling (*Numerical Algorithms Group Ltd.*)
- A. McKenney
- D. Sorensen (*Rice University*)



NAG 関係者

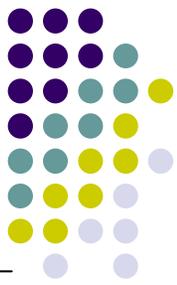
- E. Anderson (*University of Tennessee, Knoxville*)
- Z. Bai (*University of Kentucky and University of California, Davis*)
- C. Bischof (*Institute of Scientific Computing, Technical University Aachen, Germany*)
- L. S. Blackford (formerly L. S. Ostrouchov) (*University of Tennessee, Knoxville*)
- J. Demmel (*University of California, Berkeley*)
- J. Dongarra (*University of Tennessee, Knoxville and Oak Ridge National Laboratory*)
- **J. Du Croz** (*Numerical Algorithms Group Ltd. (retired)*)
- A. Greenbaum (*University of Washington*)
- **S. Hammarling** (*Numerical Algorithms Group Ltd.*)
- A. McKenney
- D. Sorensen (*Rice University*)



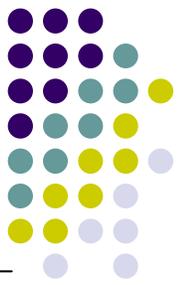
Fortran Builder (learning Ed.) をどう使う

- 性能・サイズにこだわらない！
- 開発環境
ソフトウェアのテスト・デバッグに用いる
完成したソースコードを別の環境で使う
(大規模問題、高速なマシン、実データ)
- 開発・実行環境
パソコンを充実した研究・開発ツールに

LAPACK on Fortran Builder



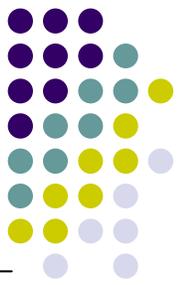
- A. 新規作成
- B. 自分のコードに LAPACK を
- C. 自分のコードを更新 & LAPACK 使用
- D. 数値実験ツール



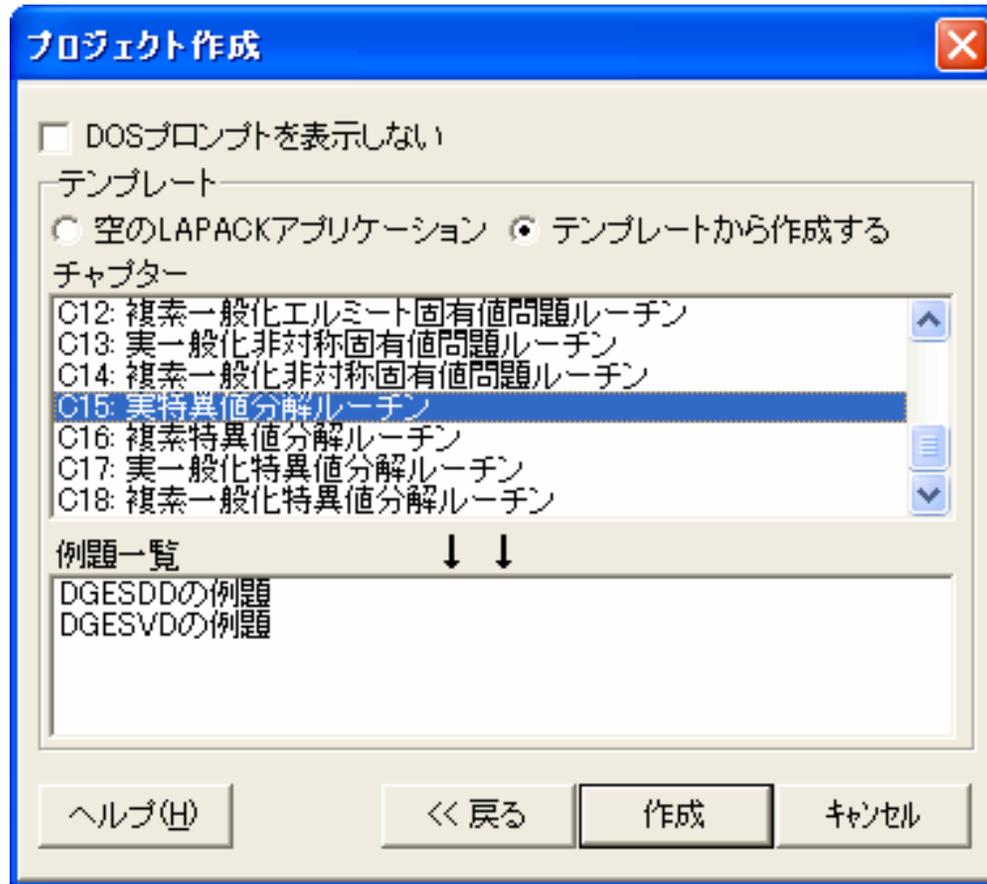
A. 新規作成

- サンプル & データを試してみればよい
- 問題に合うルーチンの認識が必要
→ それには LAPACK Users' Guide

- 例: 「特異値分解 $A = UDV$;
(U, V : 直交行列, D : 対角行列)」を求める



LAPACK を用いたプロジェクトの指定



ヘルプ(H) で機能のヘルプへ



Fortran Builderヘルプ

非表示 戻る 進む ホーム 印刷

目次(C) キーワード(W) キーワードを入力してください

LAPACKアプリケーションプロジェクト

LAPACKアプリケーションプロジェクト
 LAPACKテンプレートプログラム
 Lapackドライバルーチン
 Lapackドライバルーチン利用方
 LAPACKプロジェクトを作成する
 LBOUND
 LBPLLOT
 Lessonの演習問題を解く
 Lessonを選択する
 Lesson内のプログラム例を実行
 LINEIN
 LIST01
 LISTBX
 LOGICAL
 LSTBOX
 MATMUL
 MATTIN
 MAXLOC
 MAXVAL
 MERGE
 MFILES
 MINLOC
 MINVAL
 MODULE
 MODULE PROCEDURE
 MTPLLOT
 NAMELIST
 NML
 NULLIFY
 OFILES
 ONLY
 OPEN
 OPENER
 OPTIONAL
 PACK
 PALETT
 PARAMETER
 PATCH1
 PATCH2
 PAUSE
 PCPLOT

表示(D)

LAPACKアプリケーションプロジェクトの新規作成

プロジェクトの新規作成でコンソールアプリケーションを選択して[次へ >>]ボタンを押しLAPACKアプリケーションプロジェクトの作成を行います。LAPACKアプリケーションプロジェクトの作成に必要な以下の情報を指定後に[作成]ボタンを押してプロジェクトを作成します。

- ・現在保存されていないプロジェクトが開いている場合には現在のプロジェクトを保存するかどうか入力する必要があります。保存する指定を行った場合には現在のプロジェクトが保存された上で指定のプロジェクトが作成されます。保存する指定を行わなかった場合には現在のプロジェクトの変更は保存されずに、指定のプロジェクトが作成されます。

DOSプロンプトを表示しない	実行時にDOSコマンドプロンプトを表示したくない場合に指定して下さい。この設定は後からでもプロジェクト プロジェクトの設定 リンク オプション コマンドプロンプトを表示しないから変更できます。
空のLAPACKアプリケーション	LAPACKプログラムサンプルを用いないでプログラムの作成を行う場合に指定します。LAPACKライブラリのリンクが自動的に行われますが、スケルトンプログラムは作成されません。
テンプレートから作成する	LAPACKプログラムサンプルを用いたプログラムの作成を行う場合に指定します。スケルトンプログラムが生成されてLAPACKライブラリが自動的にリンクされるようになります。この指定を行った場合にはLAPACKの中からサンプルを1つ選択する必要があります。指定はチャプターの指定に続いて例題一覧の中から1つサンプルプログラムを選択することにより行います。
チャプター	LAPACKサンプルプログラムのグループを指定します。グループには実線形方程式ルーチン、複素線形方程式ルーチンなど全部で18グループあります。
例題一覧	チャプターで指定されたグループに属するサンプルプログラムの中から1つ選択します。

関連項目

- [プロジェクトの新規作成](#)
- [コンソールアプリケーションプロジェクトの新規作成](#)
- [Simdemアプリケーションプロジェクトの新規作成](#)
- [スタティックライブラリプロジェクトの新規作成](#)
- [Fortran Builderを用いた最初のプログラム \(Hello Fortran Builder!\)](#)
- [数値計算ライブラリ\(LAPACK\)を用いたプログラム](#)
- [プロットライブラリ\(Simdem\)を用いたプログラム](#)
- [プロジェクトを開く](#)
- [プロジェクトの設定](#)

DGESVD を選択



The screenshot shows the Fortran Builder - SVD application window. The title bar reads "Fortran Builder - SVD". The menu bar includes "ファイル(F)", "編集(E)", "検索(S)", "表示(V)", "プロジェクト(P)", "実行(R)", "ラーニング(L)", "ツール(T)", and "ヘルプ(H)". The toolbar contains various icons for file operations and execution. The left sidebar shows a project tree with "SVD" フォルダ外, Source Files, dgesvd-ex.f, and 依存ファイル. The main editor window displays the source code for "dgesvd-ex.f" with line numbers 1 through 30. The code includes parameter declarations, local scalars, local arrays, external functions, and executable statements. The status bar at the bottom shows "28: 1 挿入".

```
1  * DGESVD Example Program Text
2  * NAG Copyright 2005.
3  * .. Parameters ..
4  INTEGER          NIN, NOUT
5  PARAMETER       (NIN=5, NOUT=6)
6  INTEGER          MMAX, NB, NMAX
7  PARAMETER       (MMAX=10, NB=64, NMAX=8)
8  INTEGER          LDA, LDVT, LWORK
9  PARAMETER       (LDA=MMAX, LDVT=NMAX,
10                LWORK=MMAX+4*NMAX+NB*(MMAX+NMAX))
11 * .. Local Scalars ..
12 DOUBLE PRECISION EPS, SERRBD
13 INTEGER          I, IFAIL, INFO, J, LWKOPT, M, N
14 * .. Local Arrays ..
15 DOUBLE PRECISION A(LDA, NMAX), DUMMY(1,1), RCONDU(NMAX),
16                RCONDY(NMAX), S(NMAX), UERRBD(NMAX),
17                VERRBD(NMAX), VT(LDVT, NMAX), WORK(LWORK)
18 * .. External Functions ..
19 DOUBLE PRECISION DLAMCH
20 EXTERNAL         DLAMCH
21 * .. External Subroutines ..
22 EXTERNAL         DDISNA, DGESVD, X04CAF
23 * .. Executable Statements ..
24 WRITE (NOUT,*) 'DGESVD Example Program Results'
25 WRITE (NOUT,*)
26 * Skip heading in data file
27 READ (NIN,*)
28 READ (NIN,*) M, N
29 IF (M.LE.MMAX .AND. N.LE.NMAX) THEN
30 *
```

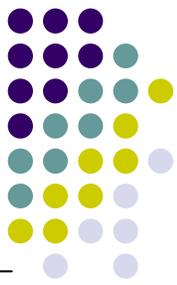


ビルド (終わったとは表示されないが)

The screenshot shows the Fortran Builder - SVD interface. The main window displays the source code for 'dgesvd-ex.f'. The code includes parameter declarations, local scalars, arrays, and executable statements. The status bar at the bottom indicates the current operation is 'コンパイル' (Compile) and '挿入' (Insert).

```
1  * DGESVD Example Program Text
2  * NAG Copyright 2005.
3  * .. Parameters ..
4  INTEGER          NIN, NOUT
5  PARAMETER       (NIN=5,NOUT=6)
6  INTEGER          MMAX, NB, NMAX
7  PARAMETER       (MMAX=10,NB=64,NMAX=8)
8  INTEGER          LDA, LDVT, LWORK
9  PARAMETER       (LDA=MMAX,LDVT=NMAX,
10                 LWORK=MMAX+4*NMAX+NB*(MMAX+NMAX))
11 * .. Local Scalars ..
12 DOUBLE PRECISION EPS, SERRBD
13 INTEGER          I, IFAIL, INFO, J, LWKOPT, M, N
14 * .. Local Arrays ..
15 DOUBLE PRECISION A(LDA,NMAX), DUMMY(1,1), RCONDU(NMAX),
16                 RCONDV(NMAX), S(NMAX), UERRBD(NMAX),
17                 VERRBD(NMAX), VT(LDVT,NMAX), WORK(LWORK)
18 * .. External Functions ..
19 DOUBLE PRECISION DLAMCH
20 EXTERNAL         DLAMCH
21 * .. External Subroutines ..
22 EXTERNAL         DDISNA, DGESVD, X04CAF
23 * .. Executable Statements ..
24 WRITE (NOUT,*) 'DGESVD Example Program Results'
25 WRITE (NOUT,*)
26 * Skip headings in data file
27 READ (NIN,*)
28 READ (NIN,*) M, N
29 IF (M.LE.MMAX .AND. N.LE.NMAX) THEN
30 *
```

コンパイル 検索結果
28: 1 挿入



DOS 窓に結果が (動いた!)

```
C:\> C:\WINDOWS\system32\cmd.exe

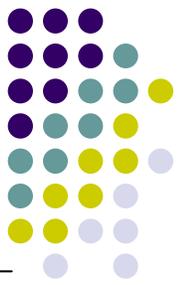
Left singular vectors (first n columns of U)
      1      2      3      4
1 -0.2774 -0.6003 -0.1277  0.1323
2 -0.2020 -0.0301  0.2805  0.7034
3 -0.2918  0.3348  0.6453  0.1906
4  0.0938 -0.3699  0.6781 -0.5399
5  0.4213  0.5266  0.0413 -0.0575
6 -0.7816  0.3353 -0.1645 -0.3957

Right singular vectors by row (V*T)
      1      2      3      4
1 -0.1921  0.8794 -0.2140  0.3795
2 -0.8030 -0.3926 -0.2980  0.3351
3  0.0041 -0.0752  0.7827  0.6178
4 -0.5642  0.2587  0.5027 -0.6017

Error estimate for the singular values
      1.1E-15

Error estimates for the left singular vectors
      1.8E-16      4.8E-16      1.3E-15      2.2E-15

Error estimates for the right singular vectors
      1.8E-16      4.8E-16      1.3E-15      1.3E-15
Press ENTER to continue--
```



MATLAB と比較すると

```
>> [U,S,V] = svd(A)

U =

-0.2774 -0.6008 -0.1300 0.1274 0.6367 0.3516
-0.2020 -0.0301 0.2787 0.7122 0.1280 -0.5974
-0.2921 0.3310 0.6459 0.1844 -0.0474 0.5931
0.0937 -0.3708 0.6781 -0.5345 0.1079 -0.3107
0.4213 0.5268 0.0432 -0.0553 0.7326 -0.0578
-0.7815 0.3370 -0.1627 -0.3921 0.1665 -0.2605

S =

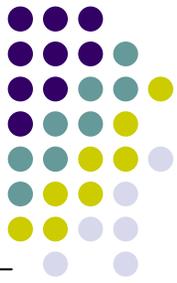
|
9.9978 0 0 0
0 3.6778 0 0
0 0 1.3570 0
0 0 0 0.4979
0 0 0 0
0 0 0 0

V =

-0.1927 -0.8022 0.0066 -0.5650
0.8793 -0.3932 -0.0772 0.2575
-0.2140 -0.2995 0.7792 0.5073
0.3794 0.3349 0.6219 -0.5976

>>
```

説明はヘルプの LAPACK利用ガイドから



The screenshot shows the Fortran Builder Help window with the following content:

Fortran Builderヘルプ

非表示 戻る 進む ホーム 印刷

目次(C) キーワード(N) |<|>

Next Up Previous

次へ: [イントロダクション](#)

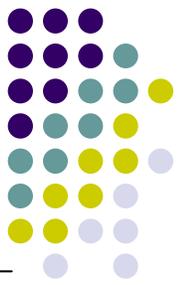
LAPACKドライバルーチンの例題プログラム

このセクションでは [LAPACKドライバルーチン](#)の例題プログラムを参照する事ができます。まず最初に [イントロダクション](#)をお読み下さい。

- [イントロダクション](#)
- [実線形方程式ルーチン](#)
- [複素線形方程式ルーチン](#)
- [実線形最小二乗ルーチン](#)
- [複素線形最小二乗ルーチン](#)
- [実一般化線形最小二乗ルーチン](#)
- [複素一般化線形最小二乗ルーチン](#)
- [実対称固有値問題ルーチン](#)
- [複素対称固有値問題ルーチン](#)
- [実非対称固有値問題ルーチン](#)
- [複素非対称固有値問題ルーチン](#)
- [実エルミート固有値問題ルーチン](#)
- [複素エルミート固有値問題ルーチン](#)
- [実一般化対称固有値問題ルーチン](#)
- [複素一般化対称固有値問題ルーチン](#)
- [実一般化非対称固有値問題ルーチン](#)
- [複素一般化非対称固有値問題ルーチン](#)
- [実特異値分解ルーチン](#)
- [複素特異値分解ルーチン](#)
- [実一般化特異値分解ルーチン](#)
- [複素一般化特異値分解ルーチン](#)
- [このドキュメントセクションについて](#)

ATOK あ 連 R 漢 般 英小

Sven Hammarling 2005-11-14



こんな例題

[Next](#) [Up](#) [Previous](#)

次へ: [複素特異値分解ルーチン](#) 上へ: [実特異値分解ルーチン](#) 前へ: [DGESDDの例題](#)

DGESVDの概要

6x4の行列の特異値と左および右特異ベクトルを求めます。

$$A = \begin{pmatrix} 2.27 & -1.54 & 1.15 & -1.94 \\ 0.28 & -1.67 & 0.94 & -0.78 \\ -0.48 & -3.09 & 0.99 & -0.21 \\ 1.07 & 1.22 & 0.79 & 0.63 \\ -2.35 & 2.93 & -1.45 & 2.30 \\ 0.62 & -7.39 & 1.03 & -2.57 \end{pmatrix},$$

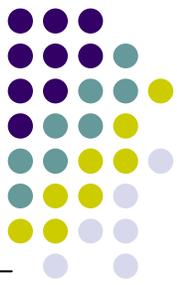
計算された特異値と特異ベクトルの誤差限界近似値も合わせて求めます。

DGESDDの例題プログラムは $m \leq n$ の場合の特異値分解を示します。

[例題プログラム](#)

[例題結果](#)

Sven Hammarling 2005-11-14



サンプルデータの結果(正解)

DGESVD Example Program Results

Singular values

9.9966 3.6831 1.3569 0.5000

Left singular vectors (first n columns of U)

	1	2	3	4
1	0.2774	0.6003	0.1277	-0.1323
2	0.2020	0.0301	-0.2805	-0.7034
3	0.2918	-0.3348	-0.6453	-0.1906
4	-0.0938	0.3699	-0.6781	0.5399
5	-0.4213	-0.5266	-0.0413	0.0575
6	0.7816	-0.3353	0.1645	0.3957

Right singular vectors by row (V**T)

	1	2	3	4
1	0.1921	-0.8794	0.2140	-0.3795
2	0.8030	0.3926	0.2980	-0.3351
3	-0.0041	0.0752	-0.7827	-0.6178
4	0.5642	-0.2587	-0.5027	0.6017

Error estimate for the singular values

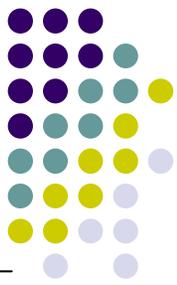
1.1E-15

Error estimates for the left singular vectors

1.8E-16 4.8E-16 1.3E-15 2.2E-15

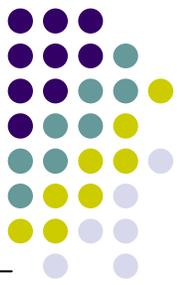
Error estimates for the right singular vectors

1.8E-16 4.8E-16 1.3E-15 1.3E-15



LAPACK は簡単に使えた

- 所要時間 10 分？
- テストプログラム、テストデータ、模範解答
- ノート PC でもあっという間
- DGESDD, DGESVD とはどこが違う？
 - × 関数についてのヘルプはないの？
 - × どこをどのように直せばいいの？LAPACK Users' Guide が必要！
- DOS 窓の表示は見にくい？

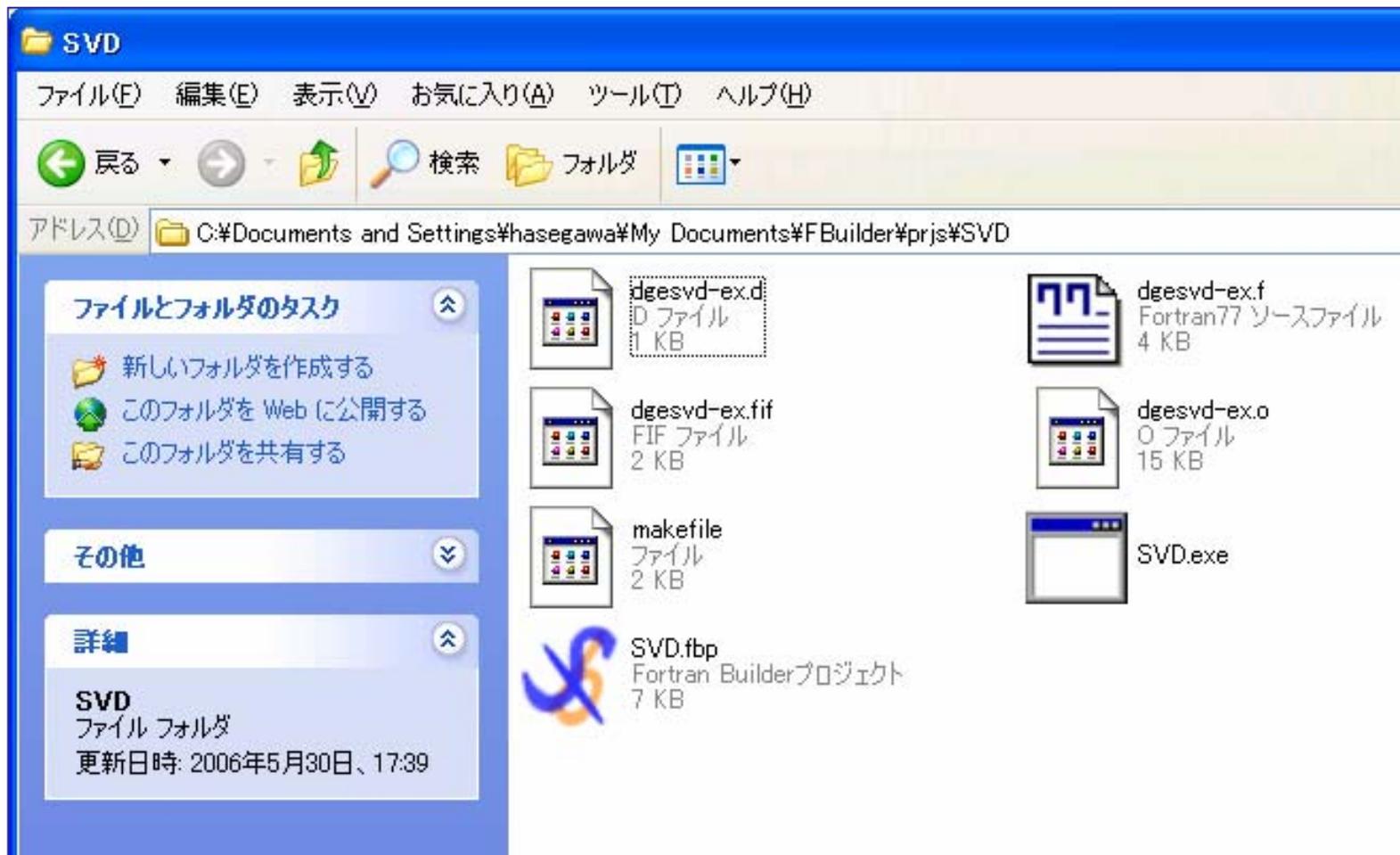


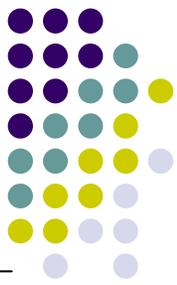
コードを修正するために

- 関数の仕様 (LAPACK Users' Guide)
- ソースプログラムはどこ？
- テストプログラム & テストデータ
- ユーザにはどんな修正が許されているか？



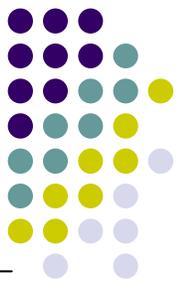
どんなファイルから構成されているか





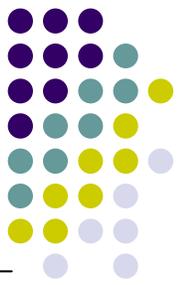
d: テストデータ

```
dgesvd-ex.d - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
DGESVD Example Program Data↑ 6 4 :Values of M and N↑ 2.27 -
1.54 1.15 -1.94↑ 0.28 -1.67 0.94 -0.78↑ -0.48 -3.09 0.99 -0.21↑ 1.07 1.22
0.79 0.63↑ -2.35 2.93 -1.45 2.30↑ 0.62 -7.39 1.03 -2.57 :End of matrix A↑
```



d: テストデータ(変換後)

```
dgesvd-ex.d - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
DGESVD Example Program Data
  6      4              :Values of M and N
 2.27  -1.54   1.15  -1.94
 0.28  -1.67   0.94  -0.78
-0.48  -3.09   0.99  -0.21
 1.07   1.22   0.79   0.63
-2.35   2.93  -1.45   2.30
 0.62  -7.39   1.03  -2.57 :End of matrix A
```



fif: 呼び出している関数のリスト？

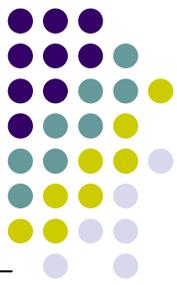
```
dgsvd-ex.fif - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
P :main
V EPS,eps_,Real(Kind=2),double,,0,#t("dgsvd-ex.f",12)
V SERRBD,serrbd_,Real(Kind=2),double,,0,#t("dgsvd-ex.f",12)
V I,i_,Integer,int,,0,#t("dgsvd-ex.f",13)
V IFAIL,ifail_,Integer,int,,0,#t("dgsvd-ex.f",13)
V INFO,info_,Integer,int,,0,#t("dgsvd-ex.f",13)
V J,j_,Integer,int,,0,#t("dgsvd-ex.f",13)
V LWKOPT,lwkopt_,Integer,int,,0,#t("dgsvd-ex.f",13)
V M,m_,Integer,int,,0,#t("dgsvd-ex.f",13)
V N,n_,Integer,int,,0,#t("dgsvd-ex.f",13)
V A,a_,Real(Kind=2),double,,2,f(1:10,1:8),#t("dgsvd-ex.f",15)
V DUMMY,dummy_,Real(Kind=2),double,,2,f(1:1,1:1),#t("dgsvd-ex.f",15)
V RCONDU,rcondu_,Real(Kind=2),double,,1,f(1:8),#t("dgsvd-ex.f",15)
V RCONDV,rcondv_,Real(Kind=2),double,,1,f(1:8),#t("dgsvd-ex.f",15)
V S,s_,Real(Kind=2),double,,1,f(1:8),#t("dgsvd-ex.f",15)
V UERRBD,uerrbd_,Real(Kind=2),double,,1,f(1:8),#t("dgsvd-ex.f",15)
V VERRBD,verrbd_,Real(Kind=2),double,,1,f(1:8),#t("dgsvd-ex.f",15)
V VT,vt_,Real(Kind=2),double,,2,f(1:8,1:8),#t("dgsvd-ex.f",15)
V WORK,work_,Real(Kind=2),double,,1,f(1:1194),#t("dgsvd-ex.f",15)
EP
```

makefile 前半



```
makefile - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
#Makefile generated by Fortran Builder 1.0
#The following macros are machine specific
fblib = "../../../../../Program Files/FBuilder/lib"
NI_F95_Compiler = f95
NI_F95_CompOpts = -g -dcfuns -ieee=full
NI_F95_F95Info = -W0,-gfb,
NI_F95_CompOnly = -c
NI_F95_IFLAGS =
NI_C_Compiler = mingw32-gcc.exe
NI_C_CompOpts = -g -O0 -Wall
NI_C_CompOnly = -c
NI_IFLAGS =
NI_CPP_Compiler = mingw32-gcc.exe
NI_CPP_CompOpts =
NI_ALLOPTS =
NI_Link = f95
NI_LibPath = -L$(fblib)
NI_LDFLAGS =
NI_RM = fbrm
NI_DEPENDENCE = depinf.df
# *** Do not edit this line or above ***

#File extensions used in this Makefile
#INCLUDE DEPENDENCE
-include $(NI_DEPENDENCE)
.SUFFIXES : .f .o
```



makefile: 後半

```
makefile - メモ帳
ファイル(E) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
NI_OBJS =      ¥
           dgesvd-ex.o

#Source files
NI_SRCS =      ¥
           dgesvd-ex.f

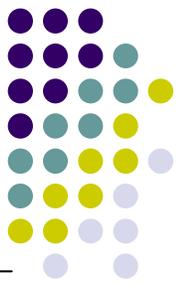
#Library files
NI_LIBS = -lnagex -llapack -lblas -lg2c

#Rule for building F95 files
dgesvd-ex.o:dgesvd-ex.f
    @echo @f95 dgesvd-ex.f
    f95 $(NI_IFLAGS) $(NI_F95_CompOpts) $(NI_F95_F95Info)dgesvd-ex.fif -c dgesvd-ex.f
#Default make target rule
all:clean $(NI_OBJS)
    @echo @link
    $(NI_Link) -o $(NI_TARGET) $(NI_LibPath) $(NI_OBJS) $(NI_LDFLAGS) $(NI_LIBS)
$(NI_TARGET):$(NI_OBJS)
    @echo @link
    $(NI_Link) -o $(NI_TARGET) $(NI_LibPath) $(NI_OBJS) $(NI_LDFLAGS) $(NI_LIBS)
#Clean rule
clean:
    $(NI_RM) $(NI_OBJS) $(NI_TARGET) $(NI_DEPENDENCE)
```

fbp: コンパイラオプション(前半)?

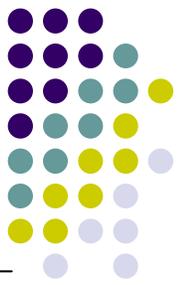


```
SVD.fbp - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
[ProjectDef]
PAUSEEXIT=1
ProjectName=SVD
ProjectType=0
ExeFile=SVD.exe
CommandLine=<dgesvd-ex.d
CLOPTMODE=0
[DBGDEF]
english=0
OPTIMIZE=0
FDEFINESTRING=
DEBUGOPT=1
F77OPT=0
free=0
double=0
nan=0
float_store=0
dryrun=0
fpp=0
fixed=0
hollerith_io=0
hpf=0
dcfuns=1
thread_safe=0
u=0
ieee=1
```



fbp: コンパイラオプション(後半)?

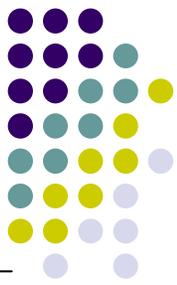
```
SVD.fbp - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
symbolic=0
mwindows=0
f95link_gc=0
f95link_thread_safe=0
unsharedf95=0
-lstdc++=0
ext_simdem=0
ext_lapack=1
PAUSEEXIT=0
IncludePath=
LibPath=$(fblib)
LibFiles=
LinkOption=
[ProjectFiles]
FileNum=1
PFile001=dgesvd-ex.f
[ProjectLibFiles]
LibFileNum=0
[BREAKPOINTS]
BPNUM=0
[RECONSTRUCTION]
FILENUM=1
FILE001=27,C:¥Documents and Settings¥hasegawa¥My Documents¥FBuilder¥prjs¥SVD¥dgesvd-ex.f,0
ACTIVEP=C:¥Documents and Settings¥hasegawa¥My Documents¥FBuilder¥prjs¥SVD¥dgesvd-ex.f
BPNUM=0
```



修正の方針

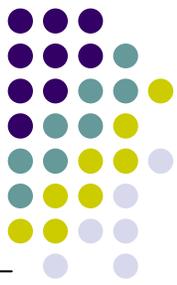
- テストプログラムとテストデータを読む
- 必要ならばコピーを作成
- Fortran Builder で修正
or 修正して Fortran Builder に持ち込み
- 実行環境は Fortran Builder を！

- データまわり(入力データ、出力)が少し不便



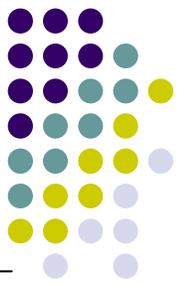
DGESVD と DGESDD

- DGESVD
一般的な方法による特異値分解
信頼できるアルゴリズム
- DGESDD
Divide and Conquer (分割統治法)による
高速
万能かどうかはわからない (Aggressive)



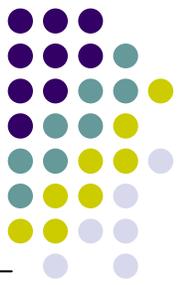
B. 自分のコードに LAPACK を

- 性能メリット
- 互換性
 - 別の計算環境
 - 将来
- テストプログラムをラッパーとして利用する
オーバーヘッドより生産性を！
- ただし、自分の問題の認識は必要
→ LAPACK Users' Guide

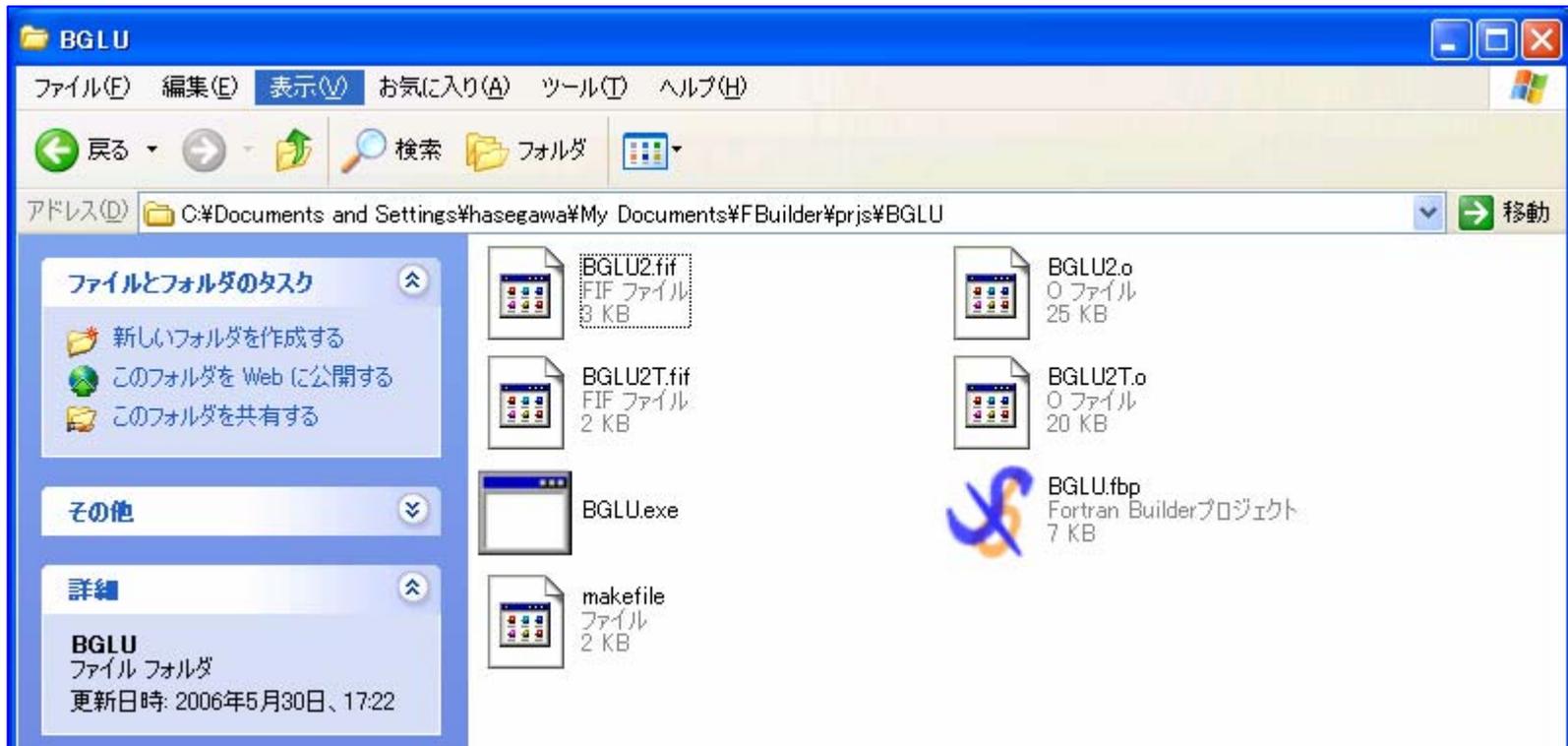


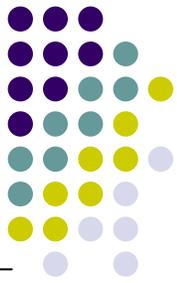
C. 自分のコードを更新 & LAPACK 使用

- 新しい言語機能を活用
- 性能メリット・互換性
- f77 → f95 変換機能を利用
(どれくらいうまくいくか？微修正可能？)
- テストプログラムをラッパとして利用
- 例: 「帯行列を係数とする連立一次方程式
 $Ax = b$, A : 帯行列」を解く
小国力他. 行列計算ソフトウェア, 丸善, 1991

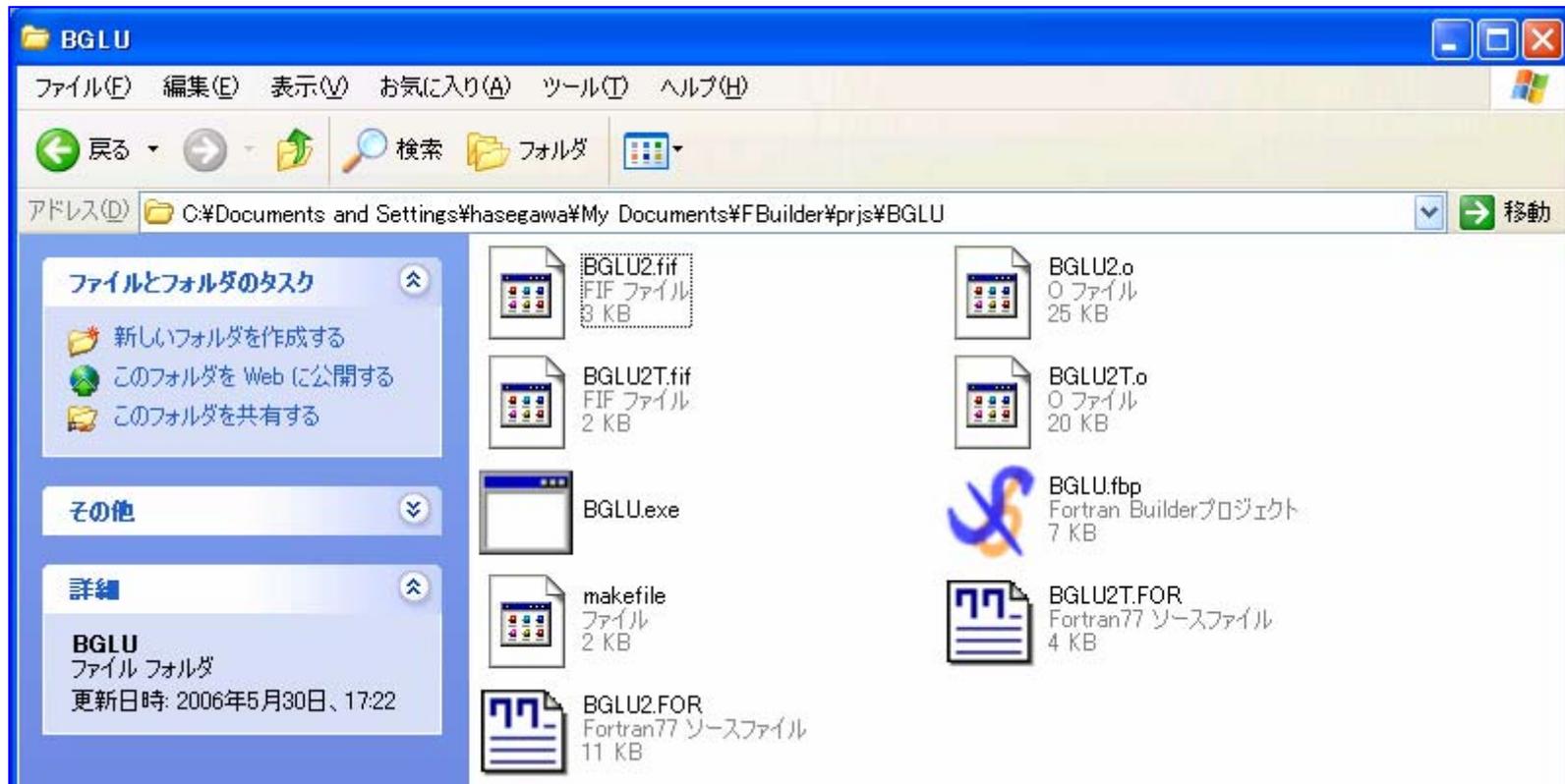


どんなファイルから構成されているか

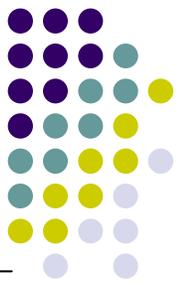




f95 に変換するためコピー



変換設定



Fortran77→95コンバート

Fortran77ソースファイル
C:\Documents and Settings\hasegawa\My Documents\FBuilder\prjs\BGLU\F

コンバート後Fortran95ソースファイル
C:\Documents and Settings\hasegawa\My Documents\FBuilder\prjs\BGLU\F

コンバート設定

<p>フォーマット設定</p> <p>一行当たりの桁数(78~130) <input type="text" value="78"/></p> <p>インデント幅(0~16) <input type="text" value="2"/></p> <p>左マージン幅(0~16) <input type="text" value="4"/></p> <p><input checked="" type="checkbox"/> ENDステートメント名の設定</p>	<p>文番号の設定</p> <p><input type="checkbox"/> 使われない文番号の保持</p> <p><input type="checkbox"/> 文番号の再設定</p> <p>開始文番号 <input type="text" value="100"/></p> <p>文番号ステップ <input type="text" value="10"/></p> <p><input type="checkbox"/> FORMAT文の文番号を別にする</p> <p>開始文番号 <input type="text" value="9000"/></p> <p>文番号ステップ <input type="text" value="10"/></p>
---	---

大文字、小文字変換

識別子 大文字 小文字

キーワード 大文字 小文字

ヘルプ(H) OK キャンセル

残念!



Fortran Builder - BGLU

ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) プロジェクト(P) 実行(R) ラーニング(L) ツール(T) ヘルプ(H)

“BGLU” プロジェクト

- Source Files
 - BGLU2T.FOR
 - BGLU2.FOR
- 依存ファイル

BGLU2T.FOR BGLU2.FOR

```
1
2
3      BGLU2T : SAMPLE PROGRAM OF BGLU2 AND BGSLV4
4      H.HASEGAWA, OCT. 4 1991
5
6
7
8
9
10
11
12
13
14
15
16
17
18
19
20
21
22
23
24
25
26
27
28
29
30
```

Fortran77→95コンバート

Fortran77ソースファイル
C:\Documents and Settings\hasegawa\My Documents\FBuilder\prjs\BGLU\F

コンバート後Fortran95ソースファイル
C:\Documents and Settings\hasegawa\My Documents\FBuilder\prjs\BGLU\F

コンバート設定

フォーマット設定 文番号の設定

一行当たりの桁数(8) 番号の保持

インデント幅(0~16) 100

左マージン幅(0~16) 10

ENDステートメント

大文字、小文字変換

識別子 大文字 小文字

キーワード 大文字 小文字

開始文番号 9000

文番号ステップ 10

ヘルプ(H) OK キャンセル

Fortran Builder

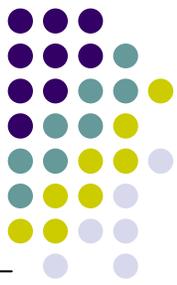
コンバージョンに失敗しました。

OK

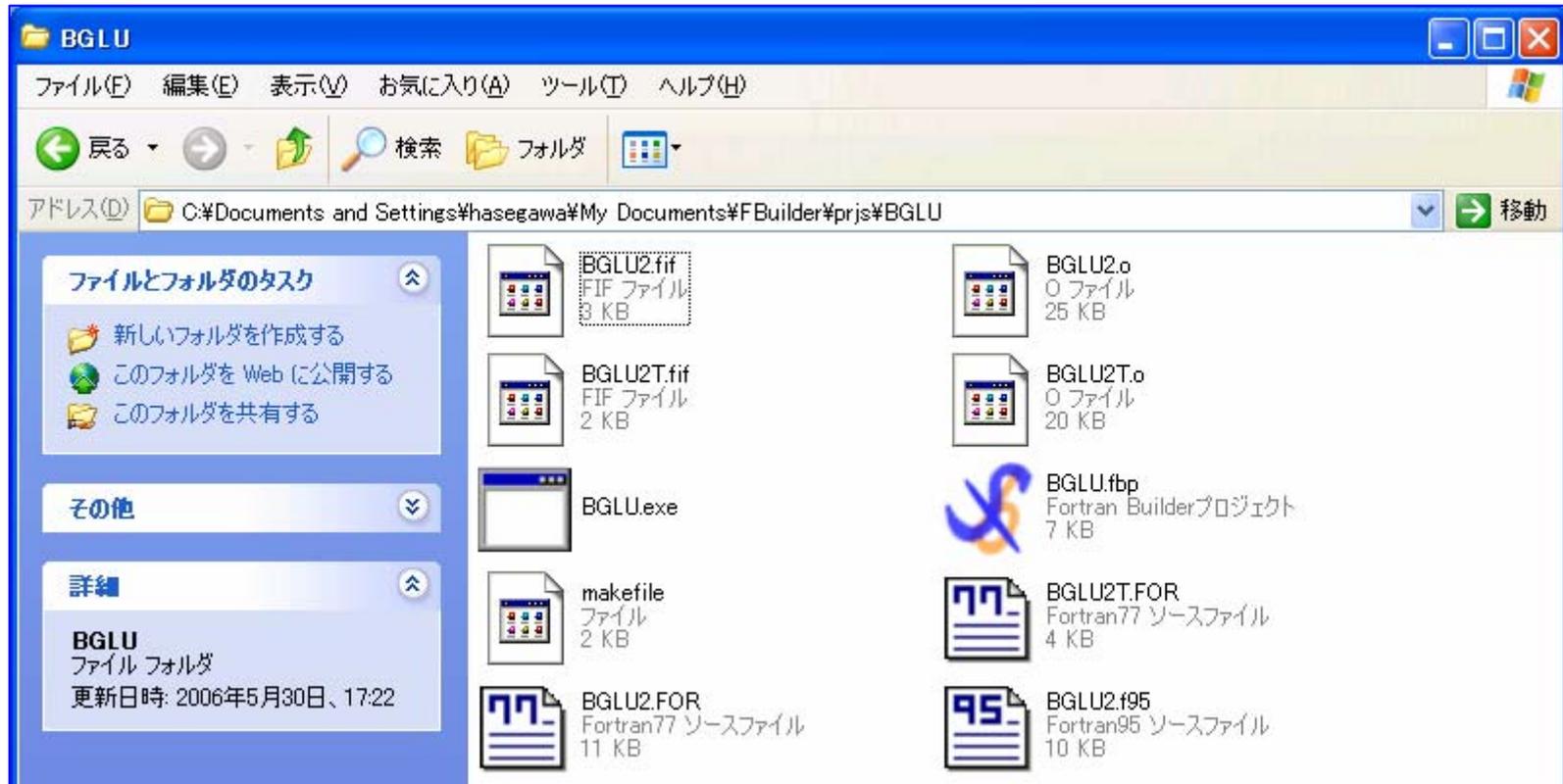
この問題点に関しましては、下記ウェブページのQ&Aにて対応しておりますので、ご参照ください。
<http://www.nag-j.co.jp/fbrelease.htm>

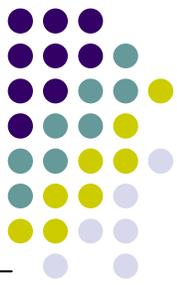
日本ニューメリカルアルゴリズムズグループ株式会社

コンパイル 検索結果



f95 ソースファイルがある！

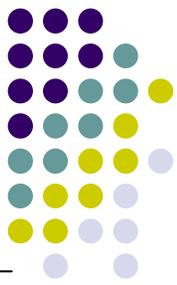




f95 ソースファイル(前半)

```
BGLU2.f95 - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
|
*
SUBROUTINE bglu2(a,n,ml,mu,eps,wk1,wk2,ip,ier)

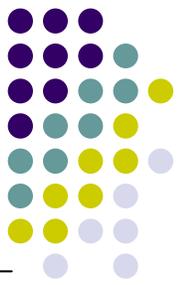
*
*bglu2
*copyright : h.hasegawaoct.41991v.1
*
*solvessimultaneouslinearequations
*bygaussianeliminationmethodforgeneralbandmatrix .
*
*input - -
*a(-ml-1:mu+ml+1,n+1)
*r*8 : 2 - dim . arraycontainingrealbandmatrix .
*ni*4 : orderofmatrix .
*mi*4 : lowerbandwidth .
*mu*4 : upperbandwidth .
*eps*8 : parametertochecksingularityofthe
*matrix . (standardvalue3.52D-15)
*output - -
*a(-ml-1:mu+ml+1,n+1)
*: resultofgaussianelimination .
*ip(n+1) i*4 : pivotnumber .
*ieri*4 : = 0, fornormalexecution .
* = 1, forsingularmatrix .
* = 3, forinvalidarguement .
*working -
```



f95 ソースファイル(後半)

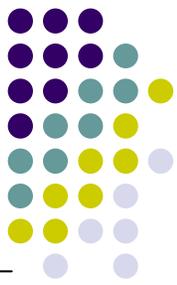
```
BGLU2.f95 - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

t = b(k)
t1 = b(k1)
DO i = k1 + 1, min(k1+m1,n)
  b(i) = b(i) + a(k-i,i)*t + a(k1-i,i)*t1
END DO
END DO
*backwardssubstitutionprocess
IF (mod(n,2)/=0) THEN
  nend = n
ELSE
  nend = n + 1
  b(n+1) = 0.0D0
END IF
DO k = nend, 1, -2
  s1 = -b(k)
  s0 = -b(k-1)
  DO j = k + 1, min(k+mu+m1,n)
    s1 = s1 + a(j-k,k)*b(j)
    s0 = s0 + a(j-k+1,k-1)*b(j)
  END DO
  b(k) = -s1/a(0,k)
  b(k-1) = (-s0-a(1,k-1)*b(k))/a(0,k-1)
END DO
RETURN
END SUBROUTINE bgs1v4
```



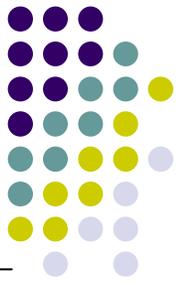
f77 ソースファイル(前半)

```
BGLU2.FOR - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
*
SUBROUTINE BGLU2( A, N, ML, MU, EPS, WK1, WK2, IP, IER )
*
*   BGLU2
*   COPYRIGHT : H.HASEGAWA, OCT.  4 1991 V.1
*
*   SOLVES SIMULTANEOUS LINEAR EQUATIONS
*   BY GAUSSIAN ELIMINATION METHOD FOR GENERAL BAND MATRIX.
*
*   INPUT - -
*   A(-ML-1:MU+ML+1,N+1)
*       R *8 : 2-DIM. ARRAY CONTAINING REAL BAND MATRIX.
*   N       I *4 : ORDER OF MATRIX.
*   ML      I *4 : LOWER BAND WIDTH.
*   MU      I *4 : UPPER BAND WIDTH.
*   EPS     R *8 : PARAMETER TO CHECK SINGULARITY OF THE
*               MATRIX. ( STANDARD VALUE 3.52D-15 )
*
*   OUTPUT - -
*   A(-ML-1:MU+ML+1,N+1)
*       : RESULT OF GAUSSIAN ELIMINATION.
*   IP(N+1) I *4 : PIVOT NUMBER.
*   IER     I *4 : = 0, FOR NORMAL EXECUTION.
*               = 1, FOR SINGULAR MATRIX.
*               = 3, FOR INVALID ARGUMENT.
*
*   WORKING -
*   WK1(N), WK2(N)
```



f77 ソースファイル(後半)

```
BGLU2.FOR - メモ帳
ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)
      B(K1) = B(K1)+A(-1,K1)*B(K)
*      GAUSSIAN ELIMINATION FOR K-TH AND K+1'TH PROCESS.
      T = B(K)
      T1 = B(K1)
      DO 110 I = K1+1, MIN(K1+ML,N)
110      B(I) = B(I)+A(K-I,I)*T+A(K1-I,I)*T1
100 CONTINUE
*      BACKWARD SUBSTITUTION PROCESS
      IF( MOD(N,2).EQ.0 ) THEN
        NEND = N
      ELSE
        NEND = N+1
        B(N+1) = 0.0D0
      END IF
      DO 200 K = NEND, 1, -2
        S1 = -B(K)
        S0 = -B(K-1)
        DO 210 J = K+1, MIN(K+MU+ML,N)
          S1 = S1+A(J-K,K)*B(J)
210      S0 = S0+A(J-K+1,K-1)*B(J)
          B(K) = -S1/A(0,K)
          B(K-1) = (-S0-A(1,K-1)*B(K))/A(0,K-1)
200 CONTINUE
      RETURN
      END
```



f95 ソースをコンパイル

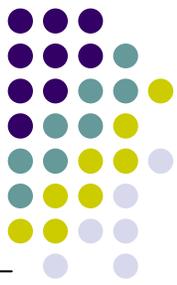
The screenshot shows the Fortran Builder - BGLU interface. The main window displays the source code for BGLU2.f95, which is a subroutine for solving simultaneous linear equations using Gaussian elimination. The code includes comments in Japanese and Fortran 95 syntax. The error window at the bottom lists several compilation errors, all of which are related to unrecognized characters or symbols in the code.

```
1  *
2  SUBROUTINE bglu2(a,n,ml,mu,eps,wk1,wk2,ip,ier)
3
4  *
5  *bglu2
6  *copyright : h.hasegawaoct.41991v.1
7  *
8  *solvesimultaneouslinearequations
9  *bygaussianeliminationmethodforgeneralbandmatrix .
10 *
11 *input - -
12 *a(-ml-1:mu+ml+1,n+1)
13 *r*8 : 2 - dim . arraycontainingrealbandmatrix .
14 *ni*4 : orderofmatrix .
15 *mi*4 : lowerbandwidth .
16 *mui*4 : upperbandwidth .
17 *epsr*8 : parametertochecksingularityofthe
18 *matrix . (standardvalue3.52D-15)
19 *output - -
20 *a(-ml-1:mu+ml+1,n+1)
21 *: resultofgaussianelimination .
22 *ip(n+1) i*4 : pivotnumber .
23 *ieri*4 : = 0, fornornalexecution .
24 * = 1, forsingularmatrix .
25 * = 3, forinvalidarguement .
26 *working -
27 *wk1(n), wk2(n)
28 *r*8 : 1 - dim . array .
29 *
30 TMPI TCIT RF&I *R (A-H 0-7)
```

ATOK あ 連 R 漢 股 英 小

コンパイル 検索結果

- F95エラー: BGLU2.f95(12): 認識できない文があります
- F95エラー: BGLU2.f95(13): 認識できない文があります
- F95エラー: BGLU2.f95(13): 予期せぬ " " が見つかりました
- F95エラー: BGLU2.f95(13): 予期せぬ " " が見つかりました
- F95エラー: BGLU2.f95(14): 認識できない文があります
- F95エラー: BGLU2.f95(14): 予期せぬ " " が見つかりました
- F95エラー: BGLU2.f95(15): 認識できない文があります
- F95エラー: BGLU2.f95(15): 予期せぬ " " が見つかりました
- F95エラー: BGLU2.f95(16): 認識できない文があります



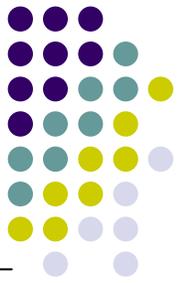
修正の方針

- f77 ソースプログラムを f95 へ変換
- 変換がうまくいくように f77 ソースを修正
- Fortran Builder で修正
- 実行環境は Fortran Builder を！
- f95/f77, LAPACK の共存が可能

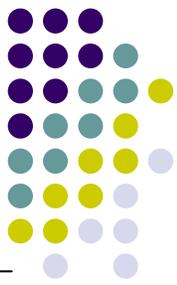
- 多少の労力 & 忍耐は必要

D. 数値実験ツール

プログラム作成から、プログラムの活用に

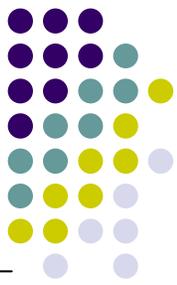


- ほぼ完成版のプログラムが存在
- データを変えて実行
- プログラムを拡張(理論を検証)



Fortran Builder (learning Ed.) のよいところ

- (Almost of) All in One
- 安価 (コンパイラ、ツール、サンプル)
- 教育的
- ヘルプ (そこそこ?)
- USB ライセンスキー
- 社会人の使える Student Edition



たとえばこんな使い方は？

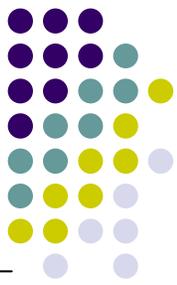
目標： 自宅の PC でプログラムを作成させる

案1) 学生に購入させる

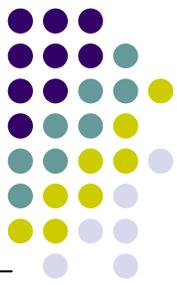
案2) 履修者に USB キーを貸与

- * 成果物(ソースコード)はどこでも使用可能
- * 成果物は将来に渡って使用可能
- * 安価な開発環境としても有用

私の疑問 (昔のプログラマの思いこみ)

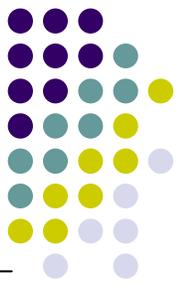


- データを見るためのツールは？
- Windows ふうの環境での動作の仕組みは？
- Fortran95 へのコンバージョンは容易？
- 出力はどうする？ (DOS 窓は不便では？)



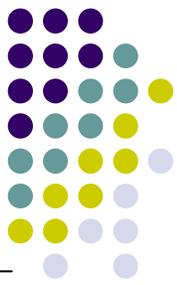
Fortran Builder (learning Ed.) の制約

- マニュアル・チュートリアル
(ヘルプはあるが、体系的な説明は。。。)
- 紙に出力して読む必要性は？
(PDF のマニュアルでもあれば。。。)
- Size 10MB (1000 lines)
密行列 1000×1000 はOK
帯行列 $N=5300$, 帯半幅=51 は OK



Fortran Builder まとめ

- (Compiler, LAPACK, 開発環境) は手軽なツール
Simple and Easy
- ヘルプ、教育コンテンツも有用 Educational
- 一通りのことができる All in one
- 個人環境向けの新しいツール Anywhere
- スムース Less trouble, less stress
- 体系的マニュアル、アルゴリズムについての理解が必要 Knowledge are recommended



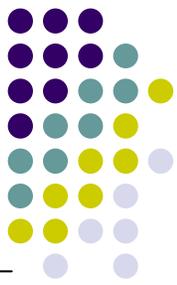
参考文献

Web ページ: google で !

- www.netlib.org
- phase.hpcc.jp

文献:

- Andersen, E. et. al. LAPACK Users' Guide, SIAM, 1999
- 山本、榊原、野寺、長谷川. これだけは知っておきたい数学ツール (インターネット時代の数学 1)、共立出版、1999
<http://www.slis.tsukuba.ac.jp/~hasegawa/MathTool/>
- 大石進一. Linux 数値計算ツール、コロナ社、2000
- 小国力他. 行列計算ソフトウェア, 丸善, 1991



蛇足用語集

- LINPACK: Top500 というコンピュータの性能競争に使われているが、本来は Gauss の消去法による連立一次方程式の解法
- BLAS: DGEMM (ZGEMM) さえ高速なら LAPACK は高速になる。その意味で LAPACK はマシン独立である
- NAG, IMSL: 著名な数学ライブラリ。内部で LAPACK を使っていることがある