数理解析研究所講究録
第359巻 1979年 59-77

線形計算プログラムのベンチマーク・テスト

原研 東海研　　藤村統一郎

1. はじめに

日本原子力研究所（原研）では，原子力の分野における大型計算の要請が多く，これらはふつう大きなプログラム（コード）の開発を伴う。これらを支える数学的ソフトウェアは高精度・高能率であることが望ましい。この具体的な現物として科学計算用サブルーチン・ライブラリー（SSL）があるが，FACOM 230-75 計算機システムのもとに，

① 計算機についている FACOM の SSL[1)]

② 原研独自の問題を中心としたSSL[2)]

の2種類が活用されている。しかし，利用者のSSL に対する要望として，「ルーチンの数が充分でない」「類似するルーチンの使い分けが難しい」などがあり，グループを作ってSSL の拡充やベンチマーク・テストを行った。SSL で対象とする数値計算の分野は広いが，本稿では連立一次方

程式と固有値の問題をとり上げ，それらのテスト結果の一部を紹介する。

2．ルーチンの特徴

線形計算用のルーチンは，およそ次の4項により，プログラムとしての特徴づけがなされる。

① 対象とする系――系を定める数体や系の性質

② 機能――演算有効桁数や付属の機能

③ 数値解法――骨子となる解法および細かい技法

④ データの管理――入出力の方法や作業領域の必要性

これらがわずかでも異なれば特徴のあるルーチンということができるが，これらに違いの見当らない場合でも，プログラムの仕方により実際の計算結果に差が生じ得るのが現実である。このような事情もベンチマーク・テストを一層興味深いものにする。

3．ベンチマーク・テストの方針

テストは，類似するルーチンに同じ問題を解かせて，その計算効率を比較する形で行われるが，そのねらいは

① 汎用性――公的ルーチンと言えるか

② 標準性――普通の問題がそう困難なく解けるか

③ 特徴の明確化――長所と短所は何か

④ テストの指針――ユーザーが自らテストできないか

⑤　発見性　　　——新しい事実が見つからないか

などにおかれる。　また，テストに用いる問題は次の要領で選ばれる。

(i)　可能な限り実際問題を扱う

(ii)　それが無いときはテキストから

(iii)　特定の論文の問題は避ける

こゝに注意を要することは，これらが幾分自己矛盾的要因を持っていることである。　テストのねらいの主眼点は各ルーチンの優劣を比較するというよりも③の特徴の明確化にあるが，②の評価では多少その傾向が現れる。　また，問題の選び方の(ii)では，系の性質や解が分ったものを使ってより高次の場合の予想を立てようとするが，低次にしか成り立たない場合もある。　更に，特徴を明確にするには(iii)のような問題がむしろ必要な場合すらある。

4．　一次方程式のルーチンのテスト[3)]

まず，テストの実施方法を述べよう。

①　実係数，単精度のルーチンに限る

②　付属の機能はなるべく使わない

③　技法はできるだけ使う

こゝに，①は，複素数の系や倍精度計算の場合は容易に実係数，単精度の場合から予想できるし，テストを簡単化する

ためでもある。 ②では，方程式

$$\mathbb{A}\mathbb{x}=\mathbb{b} \quad ; \quad \mathbb{A}=(a_{ij}) \quad (i,j=1\sim n), \qquad (1)$$
$$\mathbb{x}=(x_1,\cdots,x_n)^t,\ \mathbb{b}=(b_1,\cdots,b_n)^t$$

を解く以外の機能が必然的に備わっている場合は止むを得ないが，選択できる場合は使わないようにする。 ③は逆に，軸選択やスケーリングが選択できる場合は使う。

(1)式では，厳密解 $\mathbb{x}=(1,2,\cdots,n)^t$ を予じめ与え，$\mathbb{A}\mathbb{x}$ によって $\mathbb{b}$ を与えるが，この計算の誤差は無視する。得られた結果は，計算遂行上関心の深い3つの要因について評価される。

(i) 記憶容量 ── 主プログラムでとる配列の大きさ ＋ ルーチンの大きさ ＋ 付属ルーチンの大きさ

(ii) 計算時間 ── ルーチンに入ってから出るまでの時間

(iii) 解の精度 ── 誤差の L_∞ ーノルム

このとき，(i)は計算に必要なプログラムの大きさを示すものであり，(iii)は目的によっては L_∞ ーノルム

$$\|\bar{\mathbb{x}}-\mathbb{x}\|_\infty=\max_{1\le i\le n}|\bar{x}_i-x_i| \qquad (2)$$

の代わりに L_2 ーノルムなどを用いてもよい。 これらは精度と計算コストの兼合いを示すものであり，例えば「解の精度は低く記憶容量も大きいが，計算時間だけは短い」などル

ーチンの特徴を表わす尺度にもなる。

実係数・単精度の一次方程式を解くルーチンは，1章で述べた2種類のSSLの中に多数含まれている。 また，これらのSSLはほゞ同時に開発されたゝめ，多くの類似するルーチンを含んでいる。 これらをテストのために8つに組分けし，255次の問題を最高次として計11件のテストがなされた。 こゝでは，そのうちの1件と別の例1件について述べる。

4．1 非対称・密な系を直接法で解く例

このテストは，合同法で可能な計算規模を調べるためにとり上げる。

<u>Problem 1</u> Lotkin の行列[4)]

$$a_{ij} = 1 \qquad (\text{for } i = 1)$$
$$= 1/(i+j-1) \qquad (\text{for } i \neq 1) \qquad (3)$$

は悪条件で有名である。 この問題では，スケーリングの効果をみるために，才3行と才3列に1/10を掛けるが，半数以上のルーチンが1桁以上の精度を出せる，次数nの限界はおよそ6であった。

既に述べた方法でテストした結果がTable 1であるが，こゝでは代表的な5件のルーチンのみが掲げられる。 この中で付属の機能があるのはEXACT[5)]のみであり，det A

や $\mathbb{A}^{adjoint}\mathbb{b}$ も計算する。 必要とする記憶容量のうち，配列の占める割合は明確でないが， LAX[1] や EXACT が大きいのはプログラム（命令）のためである。 計算時間は切り捨てのため GAUELS[1] のように 0 ミリ秒になっているものもあるが， SLINER[2] のように解の反復改良を行うルーチンは多少長くなる。 精度でみると，射影法の ODRPM[6] は 1 桁の精度も得られていないが，整数演算のあと，解を出すとき 1 回だけ除算を行う EXACT はほゞ単精度計算における最大有効桁まで求まっている。

EXACT は系 $\mathbb{A}$ と多ケースの場合の定数行列 $\mathbb{B}=(b_{ij})$ $(i=1\sim n,\ j=1\sim m)$ が整数のとき，一次方程式

$$\mathbb{A}\mathbb{X}=\mathbb{B} \qquad (\mathbb{X}=(x_{ij})) \quad (i=1\sim n,\ j=1\sim m) \tag{4}$$

を合同法で解く。 いま，計算機の最大整数を I_{max} とすれば，合同法で使われる素数 $p_1, \cdots, p_s$ に対し，

$$\begin{aligned} p_r &\leqq \sqrt{I_{max}} \quad (r=1\sim s), \\ \alpha &= 2\prod_{i=1}^{n}\Big(\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2\Big)^{\frac{1}{2}} \prod_{i=1}^{n}\prod_{j=1}^{m}|b_{ij}| \quad (\text{for } b_{ij}\neq 0), \\ \sigma &= \prod_{r=1}^{s} p_r, \\ \alpha &\leqq \sigma \end{aligned} \tag{5}$$

が計算可能な十分条件となる。 そのほか， $\mathbb{Y}=\mathbb{A}^{adjoint}\mathbb{B}$ $=(y_{ij})$ $(i=1\sim n,\ j=1\sim m)$ としたとき，

$$
\begin{aligned}
&|\det A| \leqq \prod_{r=1}^{s} p_r \quad (\text{for } \det A \not\equiv 0 \pmod{p_r}) \\
&\max_{ij} |y_{ij}| \leqq \prod_{r=1}^{s} p_r \quad (\text{for } y_{ij} \not\equiv 0 \pmod{p_r})
\end{aligned}
\tag{6}
$$

なども必要であるが，実際には素数の数はもっと少くて済む。

まず Problem 1について考察しよう。 この場合，$2772 \leqq a_{ij} \leqq 138600$, $419166 \leqq b_i \leqq 25363800$, $-\det A = 2282897925 \times 10^9 \leqq -y_i \leqq 1369738755 \times 10^{10}$ であり，$\alpha \fallingdotseq 10^{74}$ である。 現有機では $I_{max} = 2^{35}-1$ であり，素数は大きい順に 185363 からとられる。 この問題では $s=13$, $\sigma \fallingdotseq 10^{68}$ で解けている。 このときの記憶容量は 3077語であるが，配列によるものは 270語にすぎない。

次に，修正のない Lotkin の系について，最高何次まで解けるかを考察する。 現有機で遭遇する最初の障害は係数 a_{ij} が I_{max} より大きくなることであり，$n=10$ なら $\max a_{ij} \fallingdotseq 2.3 \times 10^8$, $b_i \fallingdotseq 1.3 \times 10^{10}$, $\alpha \fallingdotseq 10^{170}$ で，素数を Problem 1と同様にとっていくと $s=30$, $\sigma \fallingdotseq 10^{158}$ で解ける。 このとき，必要とする記憶容量は 3538語，計算時間は 1497ミリ秒で，解の精度は 2.4×10^{-7} である。

このような解法では記憶容量が最初の障害になる事が多く実用上の利用も少ない。 しかし，上のような例に関する限りその心配は殆んど無いので，整数係数の問題であれば予じ

め通分するとか，整数係数でない場合は許される範囲で丸めて整数にして解くとかの利用が考えられよう。

4．2　対角優勢な系を反復法で解く例

これは反復法の適応的加速法[7]が有効である例を示すためにとりあげる。

Problem 2　原子炉内の3次元中性子拡散問題を有限要素法で解く場合を考える[8]。円筒形における軸対称性を仮定して，その1/4炉心における節点配置がFig. 1のようになっているとする。ある中性子群 g に着目し，反復過程において前後の平面における中性子束は既知とする。このとき，平面 p における中性子束 ϕ_p^g の方程式は (x, y) 平面内の節点数を I として

$$\mathbb{A}_p^g \phi_p^g = \mathbb{b}_p^g, \quad \phi_p^g = (\phi_{p1}^g, \cdots, \phi_{pI}^g)^t \tag{7}$$

となる。こゝに $\mathbb{A}_p^g$ は I 次の実対称正定値帯行列であり，(7)式はふつう点対称SOR法で解かれる。こゝでは Table 2で与えられるように $I = 121$ であり，帯幅は $(2 \times 13 - 1)$ である。

一方，(1)式の反復法を

$$\mathbb{x}_{k+1} = (\mathbb{I} - \mathbb{C}\mathbb{A})\mathbb{x}_k + \mathbb{C}\mathbb{b} = \mu(\mathbb{x}_k, \mathbb{b}) \tag{8}$$

とするとき，その適応的加速法は

$$\tilde{\mathbb{x}}_1 = 0, \quad \mathbb{y}_k = \mu(\mathbb{x}_k, \mathbb{b}), \quad \tilde{\mathbb{x}}_k = \tilde{\mathbb{x}}_k + \mathbb{y}_k,$$

$$
\begin{aligned}
&\mathbb{x}_k = \mathbb{x}_k - \tilde{\mathbb{x}}_k, \quad \mathbb{y}_k = \mathbb{y}_k - \tilde{\mathbb{x}}_k, \quad \mathbb{b} = \mathbb{b} - \mathbb{A}\tilde{\mathbb{x}}_k, \\
&\mathbb{e}_k = \mathbb{y}_k - \mathbb{x}_k, \quad \mathbb{f}_k = \mu(\mathbb{e}_k, \mathbb{0}), \qquad (9) \\
&\alpha_k = \mathbb{e}_k^t(\mathbb{e}_k - \mathbb{f}_k)/\|\mathbb{e}_k - \mathbb{f}_k\|^2 \quad \text{or} \quad \|\mathbb{e}_k\|^2/\mathbb{e}_k^t(\mathbb{e}_k - \mathbb{f}_k), \\
&\mathbb{x}_{k+1} = \mathbb{y}_k + \alpha_k \mathbb{e}_k
\end{aligned}
$$

である。 この方法は加速因子 α_k が反復ごとに計算されるのが特徴で，特に反復行列 $(\mathbb{I} - \mathbb{C}\mathbb{A})$ が非負定値のとき効果的であると言われている。 このプログラムを適用するにあたり

① 原点移動の削除

② 加速因子の式の固定

③ 収束判定法の変更

などについての修正が行われた。 ①は主に反復を速く進めるためであり，②は経験に基づくもので，α_k は初めの方の式で計算される。 また，③は解 ϕ_p^g の要素が指数関数的に変わるため，原典とも L_∞ －ノルムとも異なる最大相対収束偏差

$$\max_{1 \le i \le n} \left| \phi_{pi}^{g,k+1} - \phi_{pi}^{g,k} \right| / \left| \phi_{pi}^{gk} \right| \qquad (10)$$

を用いる。

Fig. 2 は点対称 SOR 法の緩和因子が不適切 (1.7) にとられた場合に適応的加速法を応用した結果である。 この加速法の１回の反復は点対称 SOR 法の４回（２往復）の走査に

当るので，(10)式の評価でも後者の場合は4回おきの値が使れている。前者を応用するに当り，余分に2語の記憶容量を必要とするが，この図を見る限り，同程度の最大中性子束偏差を得るのに約半分の計算時間で得られている。

5．固有値問題のルーチンのテスト[9]

この部門でのテスト方法は，倍精度のルーチンのみを扱い，実係数や複素係数の系を対象とするところが一次方程式の場合と異なる。また，テスト結果の評価法も厳密解が分らないため，

$$A x_j = \lambda_j x_j \quad (j = 1 \sim n) \tag{11}$$

に対し，相対的な残差

$$\max_{1 \leq j \leq n} \| A x_j - \lambda_j x_j \|_1 / \|A\|_1 \|x_j\|_1 \tag{12}$$

などで評価される。一般問題

$$A x_j = \lambda_j B x_j \quad (j = 1 \sim n) \tag{13}$$

に対しても同様の評価式を使う。(12)式は，固有値 λ_j や固有ベクトル x_j 自身の精度を評価する場合違ったものになる。

原研のSSLには固有値問題のルーチンが少なかったため，既に評判の高いパッケージ EISPACK-2[10] を中心に整備した。各ルーチンはテストの便も考慮した形に整えられているが，二，三の誤りを訂正したほか，多少機能も追加されて

いる。　これらを含めた倍精度のルーチンは7つに組分けし，145次の問題を最高次として計 11 件のテストがなされた。こゝではそのうちの 2件について述べる。

5．1　実対称の系の標準問題を解く例

これは EISPACK-2 の問題点を指摘するうえで，Pei の行列が良いテスト問題となるという意味でとり上げる。

Problem 3　Pei の行列[4]は

$$
\begin{aligned}
a_{ij} &= 1+d \quad (\text{for } i=j) \\
&= 1 \quad\quad\ \ (\text{for } i \neq j)
\end{aligned}
\tag{14}
$$

で与えられる。　このとき $d>0$ ならば正定値で，大きい 1 個の固有値 $\lambda_n = d+n$ と小さい $(n-1)$ 個の固有値 $\lambda_j = d$ $(j = 1 \sim n-1)$ に分かれる。　一般に固有値問題の悪条件性は固有値の重複や大きさの不揃いにあるので，こゝでは故意に $d=10^{-5}$ としてある。　系の次数は $n=24$ である。

このテストの結果は Table **2** で示されるが，こゝでは代表的な6件のルーチンが掲げられる。　表の下の欄は対称性を考慮して，データを圧縮型で格納するルーチンである。また，EJSNEC[10]，DSEIG2[1]，EJSPEC[10] は特殊問題用であるが，こゝではすべての固有値と固有ベクトルが求められる。計算条件としては，収束判定因子を JACOBD[1]，EIGN1D[11] でそれぞれ 10^{-14}，10^{-18}，EJSNEC，EJSPEC では標準値が

用いられている。 また，後者の２つは正定値性を利用することが可能であるが，こゝでは使われていない。 特殊問題のルーチンでは，大きい順に固有値を求めようとしたが，EISPACK-2のEJSNECとEJSPECではうまく求まらなかったので小さい順に指定されている。

次に，Table 2で与えられる結果について検討してみよう。EIGN1Dはn^2語のみで固有ベクトルまで求めるルーチンであり，計算時間は144ミリ秒と長いが，記憶容量は他より小さくなっている。 JACOBDはJacobi法のためこの問題に特に有利であるが，一部精度を上げて計算しているDSEIG1[1)]とDSEIG2は精度も良く，最も速い。

EISPACK-2のルーチンはともに時間がかゝっており，EJSNECはEJSPECと同じアルゴリズムなのに解が求まっていない。 これはプログラムのわずかの違いが翻訳時の最適化の仕方に差を生ずるもので，その結果EJSNECの中の逆反復法が収束しなくなっている。 何れにせよ，DSEIG2に比べて時間がかゝり過ぎているので更に検討が必要であろう。

5．2 Hermiteの系の一般問題を解く例

この例では，大次元問題の解法を選ぶときの一つの留意点を指摘するためにとり上げる。

Problem 4　核融合におけるプラズマの安定性を調べる際，(13)式の特殊問題を解く必要がある[12)]。このとき $\mathbb{A}$, $\mathbb{B}$ はともに帯行列で，$\mathbb{A}$ は Hermite，$\mathbb{B}$ は実対称正定値である。こゝでは4つの小さい固有値と固有ベクトルを求めるが，系の次数は $n=46$ であり，帯幅は $(2\times 11-1)$ となっている。この問題では Table 3 に掲げられるように2つのルーチンについて議論する。CSIVI[13)] のプログラムはこの問題に適した型になっているが，EJGSEC[10)] は実対称のときのルーチンであり，対称性に関してすら圧縮型になっていない。それ故後者ではこのまゝでは解けないので，問題を実数部と虚数部に分けることにより92次の問題と想定して8つ（4組）の固有値と固有ベクトルを求めている。従って両者を直接比較するのは無理があるが，従来と同様に計算条件などを見て行こう。

CSIVI では，固有値の初期値を0，収束判定因子を 10^{-5}，計算機の精度を 10^{-16}，最大反復回数を20としてある。一方のEJGSECでは，標準の収束判定因子を用い，$\mathbb{B}$ の正定値性も既知とする。結果をみると，後者の方が多くの記憶容量を必要とするが，これは当然であろう。前者は作業用ファイルを用いているので計算時間に多少の加減が必要であるが，ほゞ同程度である。この場合の精度は，求める固有値と固

有ベクトルの数を l として

$$\max_{1 \leq j \leq l} \| A x_j - \lambda_j B x_j \|_1 \,/\, \|A\|_1 \|B\|_1 \|x_j\|_1 \qquad (15)$$

で評価されているが，後者の方が著しく良い。 従って後者をHermite，帯状用に改編したらよいことが容易に想像されよう。 しかし，実際には数千次の問題を解く必要があり，これを区画化して処理する場合は前者の解法が有利なので，CSIVI の方を改編して用いているのが現状である。

6. まとめ

今回のテストは所内で公開されているルーチンについて，利用者のことを考えて行った。 問題の設定や精度の評価についても，もう少し吟味が必要だつたろう。 既に度々言われていることではあるが，テスト全般を通して次のような点が指摘できると思う。

一次方程式のルーチンについては

① 消去法に基づいたものは，記憶容量，計算時間，解の精度とも難点が少なく，標準ルーチンとして適する。

② 射影法など変った解法によるものは，それなりの場合に使うか，あるいは改良が必要である。

③ 軸選択や反復改良などの技法は多少計算時間を要しても使う方が望ましい。

④ 合同法と適応的加速法はそれぞれ線形計画法や原子力

コードに積極的に応用したい。

一方，固有値問題のルーチンについては

(i) Householder法，逆反復法などに基づいている EISPACK-2 のルーチンは，評判通り信頼性が高かった。

(ii) Danilevsky 法，べき乗法などは，そのまゝのアルゴリズムで標準ルーチンとして使うには難点がある。

(iii) 低次の問題はEISPACK-2 のルーチンで事足りるが，大次元の問題についてはベクトル反復法を中心に開発を進めたい。

最後に，これらのテストのまとめに当たり，利用者，ライブラリー開発者，研究集会の参席者より多数の有益な御指摘をいたゞいたことを付記しておく。

参考文献

1) "FACOM FORTRAN SSLⅡ 使用手引書", 富士通 (1977) 2) 藤村他(編)：JAERI-M 7102 (1977) 3) 藤村：JAERI-M 7553 (1978) 4) Westlake J.R.："A Handbook of Numerical Matrix Inversion and Solution of Linear Equation", John Wiley & Sons (1968) 5) Howell J.A.：Comm. ACM, 14, 180 (1971) 6) Harms D.W., et al.：IS-3396 (1974) 7) 田辺：情報処理, 13, 263 (1972) 8) Ise T., et al.：JAERI 1256 (1978) 9) 藤村他：JAERI-M 8253 (1979) 10) Smith B.T., et al.："Matrix Eigensystem Routines - EISPACK Guide", Springer-Verlag (1974) 11) Dobosh P.A.：Comp. Chem., 1, 295 (1977) 12) Tsunematsu T., et al.：J. Comp. Phys., 28, 287 (1978) 13) Gruber R.：Comp. Phys. Comm., 10, 30 (1975)

Table 1 Computational results for Problem 1

Sub-routine	Storage requirement (words)	Time (msec)	Accuracy (Equation (2))	Method	Author
GAUELS[1]	694	0	3.3×10^{-1}	Gaussian elimination, partial pivoting	Fujitsu Ltd.
LAX[1]	1748	1	5.2×10^{-2}	Crout, Scaling, partial pivoting	〃
ODRPM[6]	1328	1	1.8×10^{2}	One-dimension reduction projection	D.W.Harms
SLINER[2]	1314	2	4.1×10^{-2}	Crout, iterative refinement, partial pivoting	JAERI
EXACT[5]	3077	162	1.2×10^{-7}	Congruence	J.A.Howell

Table 2 Computational results for Problem 3

Sub-routine	Storage requirement (Words)	Time (msec)	Accuracy (Equation (12))	Method	Author
JACOBD[1]	3780	30	7.4×10^{-19}	Threshold Jacobi	Fujitsu Ltd.
EIGN1D[12]	2810	144	1.6×10^{-17}	Householder, QR	P.A. Dobosh
EJSNEC[10]	5792	422	(Not obtained)	Orthogonal trans-formation, rational QR, inverse iteration	B.T. Smith, et al.
DSEIG1[1]	3752	21	3.3×10^{-18}	Implicit QL	Fujitsu Ltd.
DSEIG2[1]	5840	29	2.2×10^{-18}	Bisection, inverse iteration	〃
EJSPEC[10]	6262	467	1.2×10^{-18}	Orthogonal trans-formation, rational QR, inverse iteration	B.T. Smith, et al.

Table 3 Computational results for Problem 4

Subroutine	Storage requirement (words)	Time (msec)	Accuracy (Equation (15))	Method	Author
CSIVI[14]	8830	2420	1.3×10^{-11}	Simultaneous inverse iteration	R. Gruber
EJGSEC[10]	40620	2416	3.2×10^{-19}	Cholesky decomposition, orthogonal transformation, rational QR, inverse iteration	B.T. Smith, et al.

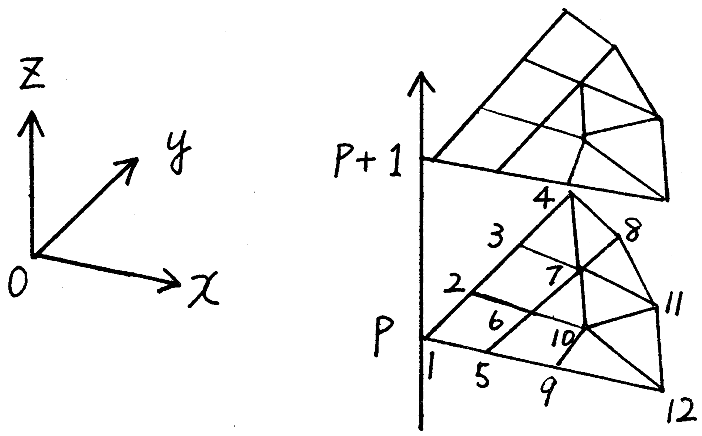

Fig. 1 Node arrangement in 1/4 reactor core

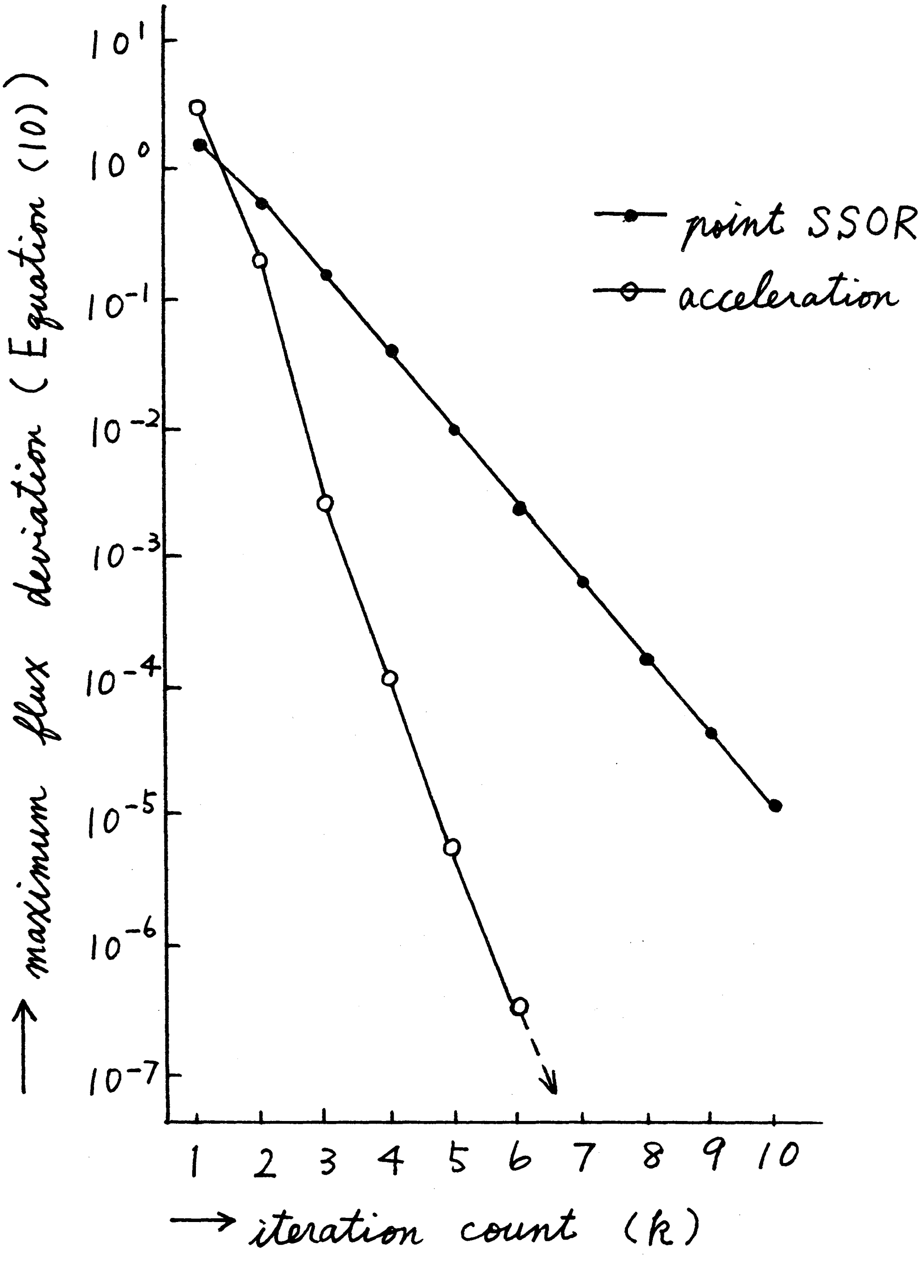

Fig. 2 Acceleration of point SSOR