

## Fortran対応 - 高度な数値計算・統計解析用ライブラリ

# IMSL Fortran ライブラリ

アプリケーションに組み込み可能な数値計算・統計解析関数の包括的なセットです。幅広い分野の科学者、研究者、技術者の皆様にご利用いただいている業界標準のライブラリです。

### 製品概要

IMSL Fortranライブラリに含まれる1500以上の数値計算、特殊関数、統計解析用の関数は、常に厳しいテストが施されているため精度が高く非常に安定しています。並列処理においては、OpenMPやMPIをサポートしており、共有メモリや分散メモリのシステム環境で高度な並列計算が可能です。また、ScaLAPACK の使用を容易にするユーティリティや、MPIによる分散並列プログラミングをサポートするユーティリティを備えています。

### 主な関数

#### 数学関数:

線形方程式、固有値解析、補間と近似、微分と積分  
微分方程式、変換、非線形方程式、最適化  
基本的な行列とベクトル演算  
線形代数演算子とジェネリック関数、ユーティリティ

#### 数学特殊関数:

初等関数、三角関数と双曲線関数、指数積分関数  
ガンマ関数、誤差関数、Bessel関数、Kelvin関数  
Airy関数、楕円関数、楕円積分、確率分布関数と逆関数  
Mathieu関数、その他の関数

#### 統計関数:

基本統計、回帰、相関、分散分析  
カテゴリと離散データ解析、ノンパラメトリック統計  
適合度とランダム度検定、時系列分析と予測  
共分散構造と因子分析、判別分析、クラスタ分析  
標本分析、生存解析、多次元尺度構成法、  
密度関数とハザードの推定  
確率分布関数と逆関数、乱数生成、ユーティリティ

[※詳細は関数カタログをご参照下さい。]

### 特長

#### 高度な数値計算アルゴリズムの包括的なパッケージ

Fortran2003, F90, F77, OpenMP および MPI対応の並列処理機能を統合した包括的なライブラリです。BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, SuperLUおよびARPACKを統括し、ユーザが使い易いようにインターフェイスを整備してあります。

#### 多くの機能を持つ幅広い数値計算・統計解析用ルーチン

線形方程式、微分方程式、最適化などの数値計算機能に加え、多変量解析、実験計画法、時系列解析、乱数発生などの統計関数まで1500以上の幅広い機能を備えています。

#### 経験と実績に基づく高い信頼性と安定性

世界各国の様々な分野で使用されており、45年以上にわたり改良されてきた機能や精度は常に進化し続けています。信頼性や安定性を追及するために、各ルーチンやアルゴリズムには厳しい検査が行われています。

#### 幅広い分野で利用される世界標準のライブラリ

IMSL Fortran ライブラリは、主要な大学、研究所、大手企業などで利用されています。利用されているアプリケーションの分野は、環境・流体・材料などの分野での研究から金融工学まで多岐にわたっています。

#### 利便性

分かりやすいルーチン名を採用しているので直感的なプログラミングが可能です。さらに、ルーチンの使用方法はもちろん、多くの例題が載っている充実したマニュアル類が用意されています。

#### アプリケーションの開発や保守にかかる時間を短縮、費用を削減

複雑な数学・統計アルゴリズムのコードを一から書く必要がなくなるため、開発時間を大幅に短縮することができます。また、アプリケーションの設計、開発、文書化、テスト、保守にかかる費用を大幅に削減することができます。

#### PCからスーパーコンピュータまで、幅広いプラットフォームに対応

IMSL Fortran ライブラリは、ほとんどのコンピュータシステムで稼働します。また、最新のハードウェア、OSやコンパイラに対応しています。

### 並列処理サポート

複数のCPUあるいはコアを搭載した共有メモリあるいは分散メモリのシステムでは、核になる数値計算を並列処理することにより大幅な性能向上が得られます。今日では数値計算のための基本ルーチンを集めたBLAS、LAPACKやScaLAPACKが多くのシステムに最適化されて広く利用されています。

IMSL Fortranライブラリでは、BLAS、APACK、ScaLAPACK、SuperLUなどを統括し、ベンダーのライブラリにリンクすることで性能を向上させることが可能になり、使いやすい形でこれらのアルゴリズムを利用することができます。

### 時系列アルゴリズム

IMSL Fortran ライブラリの時系列アルゴリズムには、統計数理研究所殿が開発された TIME Series Analysis and Control(TIMESAC) パッケージの一部が組み込まれています。IMSLライブラリには時系列データの欠測値の推定などの前処理ルーチンもあり、時系列解析は、経済、金融工学、気候解析、データマイニングなど多くの分野で使われています。

### 高度な乱数生成アルゴリズム

豊富な乱数生成アルゴリズムが含まれています。IMSLライブラリの標準の乗算合同法やGFSR法による擬似乱数は精度が高いことで定評があり、長い間広く利用されています。また、一般化 Faure列による準乱数に加えて、松本-西村のメルセンヌツイスタによる最新の乱数生成アルゴリズムも利用でき、金融工学などでのモンテカルロ法によるシミュレーションに利用されています。

### 高精度演算

IMSL Fortran ライブラリを用いることによって多くの計算機環境でコンシステントな結果を得ることができます。IMSLの動作を確認するテストプログラム集“EIAI(Environment and Installation Assurance tests)”には約2000題の問題があり、結果の検証が常に行われております。

IMSLのルーチン自身でも積和や残差の計算など精度が求められるところでは高精度演算を行っています。例えば線型方程式  $Ax = b$  を反復改良法で解くルーチンでは、次のように残差の計算のところだけを高精度で行います：

```


$$x_0 = A^{-1}b$$

For  $i = 1, 50$ 
     $r_i = Ax_{i-1} - b$            ! この演算は高精度で行う
     $p_i = A^{-1} r_i$ 
     $x_i = x_{i-1} - p_i$ 
    if ( $\|p_i\|_{\infty} \leq \epsilon \|x_i\|_{\infty}$ ) Exit
End for
    
```

ここで残差  $r$  の計算は高精度での演算を(単精度の場合は倍精度で、倍精度の場合は4倍精度で)行います。

### サポート環境

CPU	Intel EM64T(X86-64), AMD Opteron(X86-64)
OS	Red Hat Enterprise Linux, SuSE Linux, Windows
コンパイラ	Intel Fortran 等

## OpenMP、MPI および ScaLAPACK の性能例

図1は Intel Xeon CPU の Linux クラスタで大きさの異なる係数行列の線形方程式を解いた例で、経過時間(対数スケール)を表示しています。

横軸にスレッド数、グラフは2000x2000, 4000x4000, 8000x8000, 16000x16000の係数行列の場合をプロットしています。

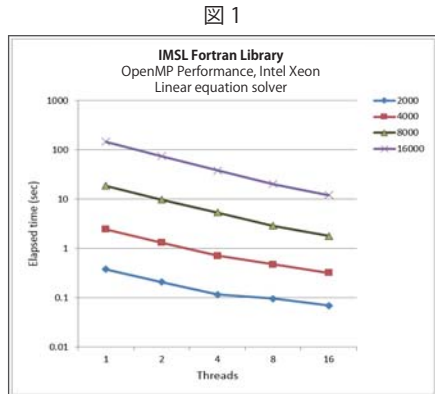


図2は ScaLAPACK の性能の例として、行列のサイズを変えた場合の線形方程式解法ルーチンの性能を Intel Xeon クラスタで測り、その経過時間を対数スケールで示しています。

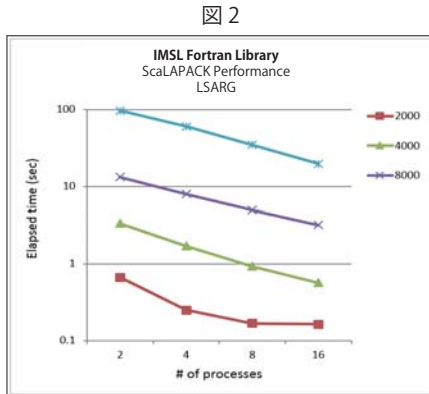


図3は Intel Xeon CPU の Linux クラスタで MPI による特異値分解(svd)と固有値計算(eig)を行い、その経過時間(秒)を比較しています。

