行列計算パッケージ LAPACK/VP の紹介

渡部 善隆 *

Fortran から利用できる行列計算パッケージ LAPACK/VP (正式名称:UXP/V LAPACK/VP V10) をスーパーコンピュータ VPP700/56 上で公開しました．本稿では LAPACK/VP の特徴、具体的な利用方法、オンラインマニュアルの参照方法などについて説明します。

なお、LAPACK/VP の使用方法の説明では VPP700/56 についての基礎的な知識を前提としています。VPP700/56 の利用方法の詳細は [1] を御覧ください。

1 LAPACK/VP の概要

1.1 LAPACK/VP

LAPACK/VP は，スーパーコンピュータ VPP700/56 (ホスト名: kyu-vpp, IP アドレス: 133.5.9.70) の単一 PE 上で動作する行列計算パッケージです．利用者は Fortran プログラムから各ルーチンを CALL 文によって呼び出します．

1.2 LAPACK

LAPACK(Linear Algebra PACKage) は，数学ソフトウェア，スーパーコンピュータの性能評価データなどの情報を提供する *netlib* (`URL: http://www.netlib.org/`[1]) で公開されている線形計算ライブラリです．各ルーチンは FORTRAN 77 で記述されています[2]．

LAPACK/VP は LAPACK 2.0 を VPP700/56 の単一 PE で高速に実行されるようにベクトルチューニングしたものです．残念ながら，ベクトルチューニング後のソースプログラムは非公開です．

1.3 主な機能

LAPACK/VP には，約 300 種類，各精度を合計すると約 1,100 本のルーチンが用意されています．主な機能は以下の通りです:

- 連立 1 次方程式 (一般密行列，バンド行列，対称 /Hermite 行列など)
- 線形最小二乗問題 (最小ノルム解，一般化線形モデル問題など)
- 固有値問題 (対称 / 非対称固有値問題，一般化固有値問題など)
- 特異値分解 (特異値，特異ベクトルなど)

* 九州大学大型計算機センター・研究開発部; E-mail: `watanabe@cc.kyushu-u.ac.jp`

[1] 有名な LINPACK ベンチマークによる “Top500 Supercomputer Sites” も，ここで公開されています．

[2] もちろん現在センターでサポートしている Fortran 90 から呼び出すことができます．Fortran 90 規格は FORTRAN 77 規格を完全に包含しています．

1.4 LAPACK/VP の構成

LAPACK/VP は，一般に問題を解くための機能を提供するドライバルーチン (*driver routines*)，個々の問題を解くための機能を提供する計算ルーチン (*comutational routines*)，および，補助的な計算や共通に使用される手続きを提供する補助ルーチン (*auxiliary routines*) で構成されています．ドライバルーチンと計算ルーチンの詳細は 4章をご覧ください．

LAPACK/VP は，ベクトル演算や行列演算などの『核』となる部分で BLAS/VP(正式名: UXP/V BLAS/VP V10) ライブラリを呼び出します[3]．

BLAS/VP も LAPACK/VP と同様，*netlib* で公開されているライブラリ BLAS(Basic Linear Algebra Subprograms) をベクトルチューニングしたものです[4]．

1.5 LINPACK, EISPACK との関係

LAPACK は 1970 年代に開発，提供された連立 1 次方程式の解法パッケージ LINPACK と固有値問題の解法パッケージ EISPACK を統合したものです．LINPACK, EISPACK から LAPACK への詳しい移行方法がマニュアル [2], [3] に記述されています．

2 LAPACK/VP の利用方法

ここでは，翻訳・結合によって実行可能ファイルを作成するまでの手順を説明します．翻訳・結合による実行可能ファイルの作成，実行はバッチ処理でも行なうことができます．バッチ処理を行なう場合のシェルスクリプトの書き方，バッチリクエストの投入方法，処理コマンドのオプションの詳細は [1] を御覧ください．

○実行可能ファイルの作り方

LAPACK/VP のルーチンは，利用者の Fortran プログラムに CALL 文で記述します．LAPACK/VP のライブラリは `frt(/usr/lang/bin/frt)` コマンドにリンクオプション `-llapackvp` を指定することにより結合されます[5]．

また，LAPACK/VP は BLAS/VP を使用します．そのため，リンクオプション `-lblasvp` もあわせて記述します．

リンクオプションは，必ずソースプログラムファイル名やオブジェクトファイル名よりも後ろに

```
-llapackvp -lblasvp
```

の順番に記述してください[6]．以下は，ソースプログラム `sample.f90` を翻訳・結合して実行可能ファイルを作成する例です:

```
kyu-vpp% frt sample.f90 -llapackvp -lblasvp ↵        ←── 実行可能ファイルの作成
```

[3]計算の核の部分を構成する BLAS を，搭載する計算機にあわせて「ギンギン」にチューニングすることによって，LAPACK ソースの移植性を保ったまま高速化が実現できます．さらに，すべてのソースを公開した上で利用者の意見を真摯に受け入れる (格好いい) 姿勢によって，LAPACK は世界的な名声を獲得しました．厳密には LAPACK と BLAS は別のライブラリです．しかし *netlib* で入手できる LAPACK のソースには BLAS のソースプログラムがついてきます．

[4]こちらも残念ながらソースプログラムは非公開です．

[5]“-l” はリンクオプションを意味します．

[6]順番に LAPACK/VP ライブラリ (`liblapackvp.a`)，BLAS/VP ライブラリ (`libblasvp.a`) を呼び出しています．

結合処理が無事に終わると，実行可能ファイル a.out が作成されます．実行可能ファイル名を任意の名前に変更するには -o オプションに続けて適当なファイル名を入力します．以下は実行可能ファイル名を “example.ex” に変更する例です．

```
kyu-vpp% frt -o example.ex sample.f90 -llapackvp -lblasvp ↵
```

3 マニュアル

ここでは，LAPACK/VP マニュアルの参照方法について説明します．

3.1 書籍

公式マニュアルとして書籍 [2] が販売されています．日本語訳 [3] もあります．

3.2 man コマンド

kyu-vpp では man(/usr/uxp/man) コマンドによる検索が可能です．ただし英語のみです．
LAPACK の概要は “man lapack” で調べることができます．

```
kyu-vpp% man lapack ↵           ←—LAPACK の概要を見る

LAPACK(1)        LAPACK FORTRAN LIBRARY ROUTINES        LAPACK(1)

WHAT IS LAPACK?
  LAPACK is a transportable library of Fortran 77 subroutines for
  solving  the  most common problems in numerical linear algebra:
  systems of linear equations,  linear  least  squares  problems,
  eigenvalue  problems,  and singular value problems. It has been
  designed to be efficient  on  a  wide  range  of  modern  high-
  performance computers.

  LAPACK is intended to be the successor to LINPACK and  EISPACK.
  It  extends  the  functionality  of these packages by including
  equilibration, iterative refinement, error bounds,  and  driver
  routines  for  linear  systems,  routines for computing and re-
  ordering the Schur factorization, and condition estimation rou-
  tines for eigenvalue problems.  LAPACK improves on the accuracy
  of the standard algorithms in EISPACK by including  high  accu-
  racy  algorithms for finding singular values and eigenvalues of
  bidiagonal and tridiagonal matrices respectively that arise  in
  SVD  and  symmetric  eigenvalue  problems.  The algorithms and
  software have been restructured to achieve high  efficiency  on
  vector  processors,  high-performance  ‘‘superscalar’’ worksta-
  tions, and shared-memory multiprocessors. A comprehensive test-
  ing  and  timing  suite  is  provided  along  with  the  LAPACK
  software.

HOW TO GET LAPACK
  The entire LAPACK package is available via xnetlib and NAG,  or
  specific  routines  can  be  obtained  via  netlib.   To  see a
  description  of  the  contents  of  LAPACK,   send   email   to
  netlib@ornl.gov  and  in the mail message type: send index from
  lapack.
                     :
```

man に続けて各ルーチンの名前を指定することにより，機能・引数などを調べることができます．なお，ルーチン名は小文字で入力してください．

```
kyu-vpp% man dgbsvx  ←—DGBSVX を検索

DGBSVX(l)      LAPACK driver routine (version 2.0)      DGBSVX(l)

DGBSVX(l)                 BLAS routine                  DGBSVX(l)

NAME
     DGBSVX - use the LU factorization to compute the solution to
     a  real  system of linear equations A * X = B, A**T * X = B,
     or A**H * X = B,

SYNOPSIS
     SUBROUTINE DGBSVX( FACT, TRANS, N, KL, KU, NRHS,  AB,  LDAB,
                        AFB, LDAFB, IPIV, EQUED, R, C, B, LDB, X,
                        LDX, RCOND, FERR, BERR, WORK, IWORK, INFO
                        )

         CHARACTER      EQUED, FACT, TRANS

n         INTEGER        INFO, KL, KU, LDAB, LDAFB, LDB,  LDX,  N,
                   :
```

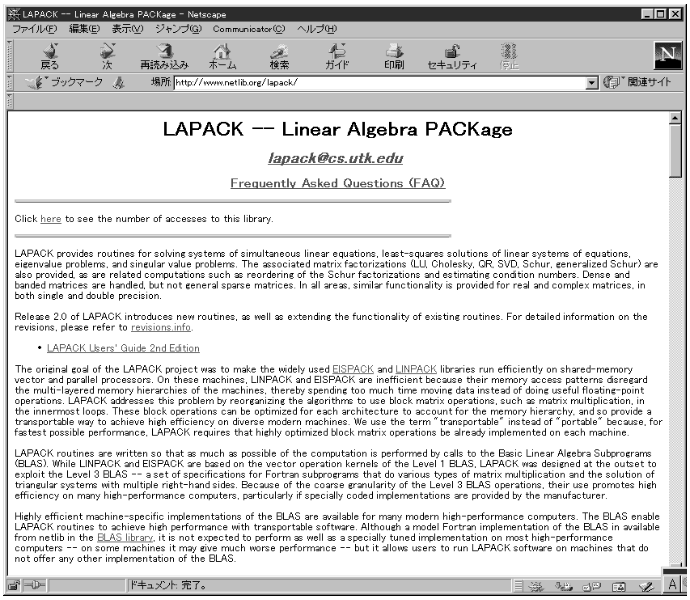
3.3 WWW ブラウザによる検索

netlib の

http://www.netlib.org/lapack/

に LAPACK の公式ホームページがあります．

ここではマニュアル [2] の HTML 版を参照することができます[7]．また，個別のソースプログラムのダウンロード，テクニカル・ノート，並列版・C 版・Fortran 90 版 LAPACK など，最新の情報を入手することができます．



LAPACK ホームページ (1999 年 1 月現在)

[7] latex2html で機械的に変換したものです．

4　ドライバルーチン，計算ルーチン一覧

LAPACK/VP で利用できるドライバルーチン，計算ルーチンの一覧です．

4.1　ドライバルーチン

ドライバルーチン (driver routines) は，それぞれが 1 つの完全な問題を解くルーチンです．各ドライバルーチンは，ふつう一連の計算ルーチンを呼び出す構造になっています．

•連立 1 次方程式

連立 1 次方程式のドライバルーチンには，通常の単純ドライバ (simple driver) に加えて，幾つかの機能を追加したエキスパート・ドライバ (expert drive) があります．エキスパート・ドライバは，条件数の算定，行列の特異性のチェック，解の反復改良，誤差解析などの機能をサポートします．ただしエキスパート・ドライバを実行するためには，単純ドライバの約 2 倍の記憶容量が必要です．

行列の型と格納形式	ドライバ	単精度		倍精度	
		実数	複素数	実数	複素数
一般行列	単純	SGESV	CGESV	DGESV	ZGESV
	エキスパート	SGESVX	CGESVX	DGESVX	ZGESVX
一般バンド行列	単純	SGBSV	CGBSV	DGBSV	ZGBSV
	エキスパート	SGBSVX	CGBSVX	DGBSVX	ZGBSVX
一般三重対角行列	単純	SGTSV	CGTSV	DGTSV	ZGTSV
	エキスパート	SGTSVX	CGTSVX	DGTSVX	ZGTSVX
対称 /Hermite 正定値行列	単純	SPOSV	CPOSV	DPOSV	ZPOSV
	エキスパート	SPOSVX	CPOSVX	DPOSVX	ZPOSVX
対称 /Hermite 正定値行列 (圧縮形式)	単純	SPPSV	CPPSV	DPPSV	ZPPSV
	エキスパート	SPPSVX	CPPSVX	DPPSVX	ZPPSVX
対称 /Hermite 正定値バンド行列	単純	SPBSV	CPBSV	DPBSV	ZPBSV
	エキスパート	SPBSVX	CPBSVX	DPBSVX	ZPBSVX
対称 /Hermite 正定値三重対角行列	単純	SPTSV	CPTSV	DPTSV	ZPTSV
	エキスパート	SPTSVX	CPTSVX	DPTSVX	ZPTSVX
対称 /Hermite 非正定値行列	単純	SSYSV	CHESV	DSYSV	ZHESV
	エキスパート	SSYSVX	CHESVX	DSYSVX	ZHESVX
複素対称行列	単純		CSYSV		ZSYSV
	エキスパート		CSYSVX		ZSYSVX
対称 /Hermite 非正定値行列 (圧縮形式)	単純	SSPSV	CHPSV	DSPSV	ZHPSV
	エキスパート	SSPSVX	CHPSVX	DSPSVX	ZHPSVX
複素対称行列 (圧縮形式)	単純		CSPSV		ZSPSV
	エキスパート		CSPSVX		ZSPSVX

•線形最小二乗問題

機能	単精度		倍精度	
	実数	複素数	実数	複素数
QR 分解，LQ 分解を用いて線形最小二乗問題を解く	SGELS	CGELS	DGELS	ZGELS
完全直交分解を用いて線形最小二乗問題を解く	SGELSX	CGELSX	DGELSX	ZGELSX
特異値分解を用いて線形最小二乗問題を解く	SGELSS	CGELSS	DGELSS	ZGELSS

●一般化線形最小二乗問題

機能	単精度		倍精度	
	実数	複素数	実数	複素数
一般化 QR 分解を用いて線形等式制約最小二乗問題を解く	SGGLSE	CGGLSE	DGGLSE	ZGGLSE
一般化 QR 分解を用いて一般線形モデル問題を解く	SGGGLM	CGGGLM	DGGGLM	ZGGGLM

●標準固有値問題，特異値分解

対称固有値問題の単純ドライバルーチンは，固有値すべてと選択された固有ベクトルを計算します．divide and conquer ドライバルーチンは，単純ドライバに比べ高速な代わりに記憶容量を多く使用する手法を用いています．エキスパート・ドライバは指定した範囲の固有値と対応する固有ベクトルが計算できます．

非対称固有値問題のエキスパート・ドライバは単純ドライバルーチンに行列の均衡化，条件数の計算などの機能が追加されています．

型	機能と格納形式	単精度		倍精度	
		実数	複素数	実数	複素数
対称	単純ドライバ	SSYEV	CHEEV	DSYEV	ZHEEV
	divide and conquer ドライバ	SSYEVD	CHEEVD	DSYEVD	ZHEEVD
	エキスパート・ドライバ	SSYEVX	CHEEVX	DSYEVX	ZHEEVX
	単純ドライバ (圧縮型)	SSPEV	CHPEV	DSPEV	ZHPEV
	divide and conquer ドライバ (圧縮型)	SSPEVD	CHPEVD	DSPEVD	ZHPEVD
	エキスパート・ドライバ (圧縮型)	SSPEVX	CHPEVX	DSPEVX	ZHPEVX
	単純ドライバ (バンド行列)	SSBEV	CHBEV	DSBEV	ZHBEV
	divide and conquer ドライバ (バンド行列)	SSBEVD	CHBEVD	DSBEVD	ZHBEVX
	エキスパート・ドライバ (バンド行列)	SSBEVX	CHBEVX	DSBEVX	ZHBEVX
	単純ドライバ (三重対角行列)	SSTEV		DSTEV	
	divide and conquer ドライバ (三重対角行列)	SSTEVD		DSTEVD	
	エキスパート・ドライバ (三重対角行列)	SSTEVX		DSTEVX	
非対称	単純ドライバ (Schur 分解)	SGEES	CGEES	DGEES	ZGEES
	エキスパート・ドライバ (Schur 分解)	SGEESX	CGEESX	DGEESX	ZGEESX
	単純ドライバ (固有値 / 固有ベクトル)	SGEEV	CGEEV	DGEEV	ZGEEV
	エキスパート・ドライバ (固有値 / 固有ベクトル)	SGEEVX	CGEEVX	DGEEVX	ZGEEVX
特異値	特異値分解による特異値 / 特異ベクトル	SGESVD	CGESVD	DGESVD	ZGESVD

●一般化固有値問題，一般化特異値分解

対称または Hermite 行列 A と正定値対称行列 B に対しては $A\boldsymbol{x} = \lambda B\boldsymbol{x}$, $AB\boldsymbol{x} = \lambda x$, $BA\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$ を選択できます．

機能	単精度		倍精度	
	実数	複素数	実数	複素数
A: 対称 /Hermite 行列，B: 正定値対称行列の一般化固有値問題	SSYGV	CHEGV	DSYGV	ZHEGV
(圧縮形式)	SSPGV	CHPGV	DSPGV	ZHPGV
(バンド行列)	SSBGV	CHBGV	DSBGV	ZHBGV
非対称行列の一般化固有値問題 (Schur 分解)	SGEGS	CGEGS	DGEGS	ZGEGS
非対称行列の一般化固有値問題 (固有値 / 固有ベクトル)	SGEGV	CGEGV	DGEGV	ZGEGV
一般化特異値分解 (特異値 / 特異ベクトル)	SGGSVD	CGGSVD	DGGSVD	ZGGSVD

4.2 計算ルーチン

計算ルーチンは LU 分解，実対称行列の三重対角化など，個々の計算を実行します．ドライバルーチンは一連の計算ルーチンを呼び出す構成になっています．利用者はこれらの計算ルーチンを組み合わせてドライバルーチンでは実行できない処理を実行することができます．

"LDL" 分解とは，対角行列 D および上三角行列 U または下三角行列 L を用いて行列を $LDL^T, UDU^T, LDL^H, UDU^H$ の形に分解する総称とします．ただし "T" は行列の転置，"H" は行列の共役転置をそれぞれ表します．

•連立 1 次方程式 (1)

行列の型と格納形式	演算	単精度		倍精度	
		実数	複素数	実数	複素数
一般行列	部分ピボット選択付き LU 分解	SGETRF	CGETRF	DGETRF	ZGETRF
	分解を使って解を求める	SGETRS	CGETRS	DGETRS	ZGETRS
	条件数を推定する	SGECON	CGECON	DGECON	ZGECON
	解の誤差限界を計算する	SGERFS	CGERFS	DGERFS	ZGERFS
	分解を使って逆行列を求める	SGETRI	CGETRI	DGETRI	ZGETRI
	方程式を均衡化する	SGEEQU	CGEEQU	DGEEQU	ZGEEQU
一般バンド行列	部分ピボット選択付き LU 分解	SGBTRF	CGBTRF	DGBTRF	ZGBTRF
	分解を使って解を求める	SGBTRS	CGBTRS	DGBTRS	ZGBTRS
	条件数を推定する	SGBCON	CGBCON	DGBCON	ZGBCON
	解の誤差限界を計算する	SGBRFS	CGBRFS	DGBRFS	ZGBRFS
	方程式を均衡化する	SGBEQU	CGBEQU	DGBEQU	ZGBEQU
一般三重対角行列	部分ピボット選択付き LU 分解	SGTTRF	CGTTRF	DGTTRF	ZGTTRF
	分解を使って解を求める	SGTTRS	CGTTRS	DGTTRS	ZGTTRS
	条件数を推定する	SGTCON	CGTCON	DGTCON	ZGTCON
	解の誤差限界を計算する	SGTRFS	CGTRFS	DGTRFS	ZGTRFS
対称 /Hermite 正定値行列	Cholesky 分解	SPOTRF	CPOTRF	DPOTRF	ZPOTRF
	分解を使って解を求める	SPOTRS	CPOTRS	DPOTRS	ZPOTRS
	条件数を推定する	SPOCON	CPOCON	DPOCON	ZPOCON
	解の誤差限界を計算する	SPORFS	CPORFS	DPORFS	ZPORFS
	分解を使って逆行列を求める	SPOTRI	CPOTRI	DPOTRI	ZPOTRI
	方程式を均衡化する	SPOEQU	CPOEQU	DPOEQU	ZPOEQU
対称 /Hermite 正定値行列 (圧縮形式)	Cholesky 分解	SPPTRF	CPPTRF	DPPTRF	ZPPTRF
	分解を使って解を求める	SPPTRS	CPPTRS	DPPTRS	ZPPTRS
	条件数を推定する	SPPCON	CPPCON	DPPCON	ZPPCON
	解の誤差限界を計算する	SPPRFS	CPPRFS	DPPRFS	ZPPRFS
	分解を使って逆行列を求める	SPPTRI	CPPTRI	DPPTRI	ZPPTRI
	方程式を均衡化する	SPPEQU	CPPEQU	DPPEQU	ZPPEQU
対称 /Hermite 正定値バンド行列	Cholesky 分解	SPBTRF	CPBTRF	DPBTRF	ZPBTRF
	分解を使って解を求める	SPBTRS	CPBTRS	DPBTRS	ZPBTRS
	条件数を推定する	SPBCON	CPBCON	DPBCON	ZPBCON
	解の誤差限界を計算する	SPBRFS	CPBRFS	DPBRFS	ZPBRFS
	方程式を均衡化する	SPBEQU	CPBEQU	DPBEQU	ZPBEQU
対称 /Hermite 正定値三重対角行列	LDL 分解	SPTTRF	CPTTRF	DPTTRF	ZPTTRF
	分解を使って解を求める	SPTTRS	CPTTRS	DPTTRS	ZPTTRS
	条件数を推定する	SPTCON	CPTCON	DPTCON	ZPTCON
	解の誤差限界を計算する	SPTRFS	CPTRFS	DPTRFS	ZPTRFS

●連立 1 次方程式 (2)

行列の型と格納形式	演算	単精度		倍精度	
		実数	複素数	実数	複素数
対称 /Hermite 非正定値行列	LDL 分解	SSYTRF	CHETRF	DSYTRF	ZHETRF
	分解を使って解を求める	SSYTRS	CHETRS	DSYTRS	ZHETRS
	条件数を推定する	SSYCON	CHECON	DSYCON	ZHECON
	解の誤差限界を計算する	SSYRFS	CHERFS	DSYRFS	ZHERFS
	分解を使って逆行列を求める	SSYTRI	CHETRI	DSYTRI	ZHETRI
複素対称行列	LDL 分解		CSYTRF		ZSYTRF
	分解を使って解を求める		CSYTRS		ZSYTRS
	条件数を推定する		CSYCON		ZSYCON
	解の誤差限界を計算する		CSYRFS		ZSYRFS
	分解を使って逆行列を求める		CSYTRI		ZSYTRI
対称 /Hermite 非正定値行列 (圧縮形式)	LDL 分解	SSPTRF	CHPTRF	DSPTRF	ZHPTRF
	分解を使って解を求める	SSPTRS	CHPTRS	DSPTRS	ZHPTRS
	条件数を推定する	SSPCON	CHPCON	DSPCON	ZHPCON
	解の誤差限界を計算する	SSPRFS	CHPRFS	DSPRFS	ZHPRFS
	分解を使って逆行列を求める	SSPTRI	CHPTRI	DSPTRI	ZHPTRI
複素対称行列 (圧縮形式)	LDL 分解		CSPTRF		ZSPTRF
	分解を使って解を求める		CSPTRS		ZSPTRS
	条件数を推定する		CSPCON		ZSPCON
	解の誤差限界を計算する		CSPRFS		ZSPRFS
	分解を使って逆行列を求める		CSPTRI		ZSPTRI
三角行列	解を求める	STRTRS	CTRTRS	DTRTRS	ZTRTRS
	条件数を推定する	STRCON	CTRCON	DTRCON	ZTRCON
	解の誤差限界を計算する	STRRFS	CTRRFS	DTRRFS	ZTRRFS
	逆行列を求める	STRTRI	CTRTRI	DTRTRI	ZTRTRI
三角行列 (圧縮形式)	解を求める	STPTRS	CTPTRS	DTPTRS	ZTPTRS
	条件数を推定する	STPCON	CTPCON	DTPCON	ZTPCON
	解の誤差限界を計算する	STPRFS	CTPRFS	DTPRFS	ZTPRFS
	逆行列を求める	STPTRI	CTPTRI	DTPTRI	ZTPTRI
三角バンド行列	解を求める	STBTRS	CTBTRS	DTBTRS	ZTBTRS
	条件数を推定する	STBCON	CTBCON	DTBCON	ZTBCON
	解の誤差限界を計算する	STBRFS	CTBRFS	DTBRFS	ZTBRFS

●直交分解と線形最小二乗問題

行列の型と分解	演算	単精度		倍精度	
		実数	複素数	実数	複素数
QR 分解，一般行列	ピボット選択付き分解	SGEQPF	CGEQPF	DGEQPF	ZGEQPF
	ピボット選択なし分解	SGEQRF	CGEQRF	DGEQRF	ZGEQRF
	Q の作成	SORGQR	CUNGQR	DORGQR	ZUNGQR
	Q による行列の乗算	SORMQR	CUNMQR	DORMQR	ZUNMQR
LQ 分解，一般行列	ピボット選択なし分解	SGELQF	CGELQF	DGELQF	ZGELQF
	Q の作成	SORGLQ	CUNGLQ	DORGLQ	ZUNGLQ
	Q による行列の乗算	SORMLQ	CUNMLQ	DORMLQ	ZUNMLQ
QL 分解，一般行列	ピボット選択なし分解	SGEQLF	CGEQLF	DGEQLF	ZGEQLF
	Q の作成	SORGQL	CUNGQL	DORGQL	ZUNGQL
	Q による行列の乗算	SORMQL	CUNMQL	DORMQL	ZUNMQL
RQ 分解，一般行列	ピボット選択なし分解	SGERQF	CGERQF	DGERQF	ZGERQF
	Q の作成	SORGRQ	CUNGRQ	DORGRQ	ZUNGRQ
	Q による行列の乗算	SORMRQ	CUNMRQ	DORMRQ	ZUNMRQ
RQ 分解，台形行列	ピボット選択なし分解	STZRQF	CTZRQF	DTZRQF	ZTZRQF

●一般化直交分解と線形最小二乗問題

演算	単精度		倍精度	
	実数	複素数	実数	複素数
行列 A の QR 分解，行列 B の QTZ 分解	SGGQRF	CGGQRF	DGGQRF	ZGGQRF
行列 A の RQ 分解，行列 B の ZTQ 分解	SGGRQF	CGGRQF	DGGRQF	ZGGRQF

●対称固有値問題

行列の型と格納形式	演算	単精度		倍精度	
		実数	複素数	実数	複素数
密対称 /Hermite 行列	三重対角化	SSYTRD	CHETRD	DSYTRD	ZHETRD
密対称 /Hermite 行列 (圧縮形式)	三重対角化	SSPTRD	CHPTRD	DSPTRD	ZHPTRD
バンド対称 /Hermite 行列	三重対角化	SSBTRD	CHBTRD	DSBTRD	ZHBTRD
直交 / ユニタリ行列	三重対角化後の行列作成	SORGTR	CUNGTR	DORGTR	ZUNGTR
	三重対角化後の行列の乗算	SORMTR	CUNMTR	DORMTR	ZUNMTR
直交 / ユニタリ行列 (圧縮形式)	三重対角化後の行列作成	SOPGTR	CUPGTR	DOPGTR	ZUPGTR
	三重対角化後の行列の乗算	SOPMTR	CUPMTR	DOPMTR	ZUPMTR
対称三重対角行列	固有値 / 固有ベクトル (QR 法)	SSTEQR	CSTEQR	DSTEQR	ZSTEQR
	固有値 (root-freeQR 法)	SSTERF		DSTERF	
	固有値 / 固有ベクトル (性能優先)	SSTEDC	CSTEDC	DSTEDC	ZSTEDC
	固有値 (bisection 法)	SSTEBZ		DSTEBZ	
	固有ベクトル (逆反復法)	SSTEIN	CSTEIN	DSTEIN	ZSTEIN
対称三重対角正定値行列	固有値 / 固有ベクトル (準対角 QR 法)	SPTEQR	CPTEQR	DPTEQR	ZPTEQR

●非対称固有値問題

行列の型	演算	単精度		倍精度	
		実数	複素数	実数	複素数
一般行列	Hessenberg 変換	SGEHRD	CGEHRD	DGEHRD	ZGEHRD
	行列の均衡化	SGEBAL	CGEBAL	DGEBAL	ZGEBAL
	逆変換	SGEBAK	CGEBAK	DGEBAK	ZGEBAK
直交 / ユニタリ行列	Hessenberg 変換後の行列作成	SORGHR	CUNGHR	DORGHR	ZUNGHR
	Hessenberg 変換後の行列の乗算	SORMHR	CUNMHR	DORMHR	ZUNMHR
Hessenberg 行列	Schur 分解	SHSEQR	CHSEQR	DHSEQR	ZHSEQR
	固有ベクトル (逆反復法)	SHSEIN	CHSEIN	DHSEIN	ZHSEIN
(準) 三角行列	固有ベクトル	STREVC	CTREVC	DTREVC	ZTREVC
	Schur 分解の並べ換え	STREXC	CTREXC	DTREXC	ZTREXC
	Sylvester 行列方程式を解く	STRSYL	CTRSYL	DTRSYL	ZTRSYL
	固有値 / 固有ベクトルの条件数の計算	STRSNA	CTRSNA	DTRSNA	ZTRSNA
	固有値群 / 固有ベクトル群の条件数の計算	STRSEN	CTRSEN	DTRSEN	ZTRSEN

●特異値分解

行列の型	演算	単精度		倍精度	
		実数	複素数	実数	複素数
一般行列	準対角変換	SGEBRD	CGEBRD	DGEBRD	ZGEBRD
一般バンド行列	準対角変換	SGBBRD	CGBBRD	DGBBRD	ZGBBRD
直交 / ユニタリ行列	準対角変換後の行列作成	SORGBR	CUNGBR	DORGBR	ZUNGBR
	準対角変換後の行列の乗算	SORMBR	CUNMBR	DORMBR	ZUNMBR
準対角行列	特異値 / 特異ベクトル	SBDSQR	CBDSQR	DBDSQR	ZBDSQR

●対称正定値一般化固有値問題

行列の型と格納形式	演算	単精度		倍精度	
		実数	複素数	実数	複素数
対称 /Hermite 行列	標準固有値問題への変換	SSYGST	CHEGST	DSYGST	ZHEGST
対称 /Hermite 行列 (圧縮形式)	標準固有値問題への変換	SSPGST	CHPGST	DSPGST	ZHPGST
対称 /Hermite バンド行列	分割 Cholesky 分解	SPBSTF	CPBSTF	DPBSTF	ZPBSTF
	標準固有値問題への変換	SSBGST	CHBGST	DSBGST	ZHBGST

●一般化固有値問題

行列の型と格納形式	演算	単精度		倍精度	
		実数	複素数	実数	複素数
一般行列	Hessenberg 変換	SGGHRD	CGGHRD	DGGHRD	ZGGHRD
	行列の均衡化	SGGBAL	CGGBAL	DGGBAL	ZGGBAL
	逆変換	SGGBAK	CGGBAK	DGGBAK	ZGGBAK
Hessenberg 行列	Schur 分解	SHGEQZ	CHGEQZ	DHGEQZ	ZHGEQZ
(準) 三角行列	固有ベクトル	STGEVC	CTGEVC	DTGEVC	ZTGEVC

●一般化特異値分解

演算	単精度		倍精度	
	実数	複素数	実数	複素数
行列 A と B の三角形式への変換	SGGSVP	CGGSVP	DGGSVP	ZGGSVP
2 つの三角形式の一般化特異値分解	STGSJA	CTGSJA	DTGSJA	ZTGSJA

●その他

演算	単精度		倍精度	
	実数	複素数	実数	複素数
実対称 /Hermite 行列の固有値または一般行列の左・右特異ベクトルについての条件数を計算	SDISNA		DDISNA	

参考文献

[1] VPP700/56 利用の手引 (第 2 版), 九州大学大型計算機センター, 1998.

[2] Anderson, E., Bai, Z., Bischof, C., Demmel, J., Dongarra, J., Du Croz, J., Greenbaum, A., Hammarling, S., McKenney, A., Ostrouchov, S., and Sorensen, D.: *LAPACK Users' Guide, Second Edition*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, ISBN 0-89871-345-5, 1995. (http://www.netlib.org/lapack/)

[3] Anderson, E., Bai, Z., Bischof, C., Demmel, J., Dongarra, J., Du Croz, J., Greenbaum, A., Hammarling, S., McKenney, A., Ostrouchov, S., and Sorensen, D., 小国 力 訳: 行列計算パッケージ LAPACK 利用の手引, 丸善, ISBN 4-621-04076-6, 1995.