

# 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/><sup>1</sup>) 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<sup>2</sup>。

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

<sup>1</sup>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。

<sup>2</sup>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 (*computational 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<sup>3</sup>。

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<sup>4</sup>。

## 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 `firt(/usr/lang/bin/firt)` 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<sup>5</sup>。

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<sup>6</sup>。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% firt sample.f90 -llapackvp -lblasvp
```

← 実行可能ファイルの作成

<sup>3</sup>計算の核の部分を作成する 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。

<sup>4</sup>こちら残念ながらソースプログラムは非公開です。

<sup>5</sup>“-l” はリンクオプションを意味します。

<sup>6</sup>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 routines for eigenvalue problems. LAPACK improves on the accuracy of the standard algorithms in EISPACK by including high accuracy 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’’ workstations, and shared-memory multiprocessors. A comprehensive testing 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(1)          LAPACK driver routine (version 2.0)      DGBSVX(1)
DGBSVX(1)          BLAS routine                             DGBSVX(1)

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,
                    :
```

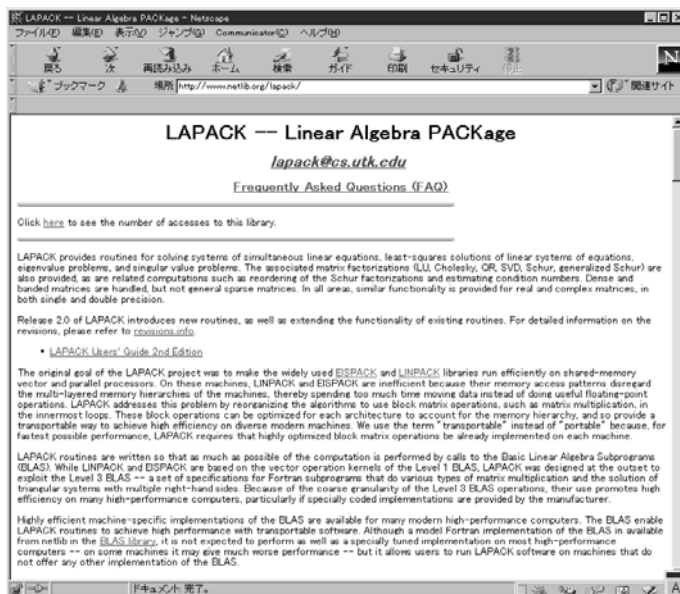
### 3.3 WWW ブラウザによる検索

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<sup>7</sup>。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)

<sup>7</sup> 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	SSYEV	CHEEV	DSYEV	ZHEEV
	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)	SSPEV	CHPEV	DSPEV	ZHPEV
	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)	SSBEV	CHBEV	DSBEV	ZHBEV
	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)	SSTEV		DSTEV	
	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  $Ax = \lambda Bx$ ,  $ABx = \lambda x$ ,  $BAx = \lambda x$  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 (圧縮形式)	SSYGV	CHEGV	DSYGV	ZHEGV
(バンド行列)	SSPGV	CHPGV	DSPGV	ZHPGV
	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	DGGSDV	ZGGSDV

## 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 分解を使って解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する 分解を使って逆行列を求める 方程式を均衡化する	SGETRF	CGETRF	DGETRF	ZGETRF
		SGETRS	CGETRS	DGETRS	ZGETRS
		SGECON	CGECON	DGECON	ZGECON
		SGERFS	CGERFS	DGERFS	ZGERFS
		SGETRI	CGETRI	DGETRI	ZGETRI
		SGEEQU	CGEEQU	DGEEQU	ZGEEQU
一般バンド行列	部分ピボット選択付き $LU$ 分解 分解を使って解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する 方程式を均衡化する	SGBTRF	CGBTRF	DGBTRF	ZGBTRF
		SGBTRS	CGBTRS	DGBTRS	ZGBTRS
		SGBCON	CGBCON	DGBCON	ZGBCON
		SGBRFS	CGBRFS	DGBRFS	ZGBRFS
		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 分解を使って解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する	SGTTRF	CGTTRF	DGTTRF	ZGTTRF
		SGTTRS	CGTTRS	DGTTRS	ZGTTRS
		SGTCON	CGTCON	DGTCON	ZGTCON
		SGTRFS	CGTRFS	DGTRFS	ZGTRFS
対称 /Hermite 正定値行列	Cholesky 分解 分解を使って解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する 分解を使って逆行列を求める 方程式を均衡化する	SPOTRF	CPOTRF	DPOTRF	ZPOTRF
		SPOTRS	CPOTRS	DPOTRS	ZPOTRS
		SPOCON	CPOCON	DPOCON	ZPOCON
		SPORFS	CPORFS	DPORFS	ZPORFS
		SPOTRI	CPOTRI	DPOTRI	ZPOTRI
		SPOEQU	CPOEQU	DPOEQU	ZPOEQU
対称 /Hermite 正定値行列 (圧縮形式)	Cholesky 分解 分解を使って解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する 分解を使って逆行列を求める 方程式を均衡化する	SPPTRF	CPPTRF	DPPTRF	ZPPTRF
		SPPTRS	CPPTRS	DPPTRS	ZPPTRS
		SPPCON	CPPCON	DPPCON	ZPPCON
		SPPRFS	CPPRFS	DPPRFS	ZPPRFS
		SPPTRI	CPPTRI	DPPTRI	ZPPTRI
		SPPEQU	CPPEQU	DPPEQU	ZPPEQU
対称 /Hermite 正定値バンド行列	Cholesky 分解 分解を使って解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する 方程式を均衡化する	SPBTRF	CPBTRF	DPBTRF	ZPBTRF
		SPBTRS	CPBTRS	DPBTRS	ZPBTRS
		SPBCON	CPBCON	DPBCON	ZPBCON
		SPBRFS	CPBRFS	DPBRFS	ZPBRFS
		SPBEQU	CPBEQU	DPBEQU	ZPBEQU
対称 /Hermite 正定値三重対角行列	$LDL$ 分解 分解を使って解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する	SPTTRF	CPTTRF	DPTRF	ZPTTRF
		SPTTRS	CPTTRS	DPTRRS	ZPTTRS
		SPTCON	CPTCON	DPTCON	ZPTCON
		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 分解を使って解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する 分解を使って逆行列を求める	SSYTRF SSYTRS SSYCON SSYRFS SSYTRI	CHETRF CHETRS CHECON CHERFS CHETRI	DSYTRF DSYTRS DSYCON DSYRFS DSYTRI	ZHETRF ZHETRS ZHECON ZHERFS ZHETRI
複素対称行列	LDL 分解 分解を使って解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する 分解を使って逆行列を求める		CSYTRF CSYTRS CSYCON CSYRFS CSYTRI		ZSYTRF ZSYTRS ZSYCON ZSYRFS ZSYTRI
対称 /Hermite (非正定値行列) (圧縮形式)	LDL 分解 分解を使って解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する 分解を使って逆行列を求める	SSPTRF SSPTRS SSPCON SSPRFS SSPTRI	CHPTRF CHPTRS CHPCON CHPRFS CHPTRI	DSPTRF DSPTRS DSPCON DSPRFS DSPTRI	ZHPTRF ZHPTRS ZHPCON ZHPRFS ZHPTRI
複素対称行列 (圧縮形式)	LDL 分解 分解を使って解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する 分解を使って逆行列を求める		CSPTRF CSPTRS CSPCON CSPRFS CSPTRI		ZSPTRF ZSPTRS ZSPCON ZSPRFS ZSPTRI
三角行列	解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する 逆行列を求める	STRTRS STRCON STRRFS STRTRI	CTRTRS CTRCON CTRRFS CTRTRI	DTRTRS DTRCON DTRRFS DTRTRI	ZTRTRS ZTRCON ZTRRFS ZTRTRI
三角行列 (圧縮形式)	解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する 逆行列を求める	STPTRS STPCON STPRFS STPTRI	CTPTRS CTPCON CTPRFS CTPTRI	DTPTRS DTPCON DTPRFS DTPTRI	ZTPTRS ZTPCON ZTPRFS ZTPTRI
三角バンド行列	解を求める 条件数を推定する 解の誤差限界を計算する	STBTRS STBCON STBRFS	CTBTRS CTBCON CTBRFS	DTBTRS DTBCON DTBRFS	ZTBTRS ZTBCON 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 ピボット選択なし分解 Q の作成 Q による行列の乗算	SGEQPF SGEQRF SORGQR SORMQR	CGEQPF CGEQRF CUNGQR CUNMQR	DGEQPF DGEQRF DORGQR DORMQR	ZGEQPF ZGEQRF ZUNGQR ZUNMQR
LQ 分解, 一般行列	ピボット選択なし分解 Q の作成 Q による行列の乗算	SGELQF SORGLQ SORMLQ	CGELQF CUNGLQ CUNMLQ	DGELQF DORGLQ DORMLQ	ZGELQF ZUNGLQ ZUNMLQ
QL 分解, 一般行列	ピボット選択なし分解 Q の作成 Q による行列の乗算	SGQLF SORGQL SORMQL	CGQLF CUNGQL CUNMQL	DGQLF DORGQL DORMQL	ZGQLF ZUNGQL ZUNMQL
RQ 分解, 一般行列	ピボット選択なし分解 Q の作成 Q による行列の乗算	SGERQF SORGRQ SORMRQ	CGERQF CUNGRQ CUNMRQ	DGERQF DORGRQ DORMRQ	ZGERQF ZUNGRQ 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-free $QR$ 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 標準固有値問題への変換	SPBSTF	CPBSTF	DPBSTF	ZPBSTF
		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.