



Title	『科学計算ライブラリ ASL/SX』のFFTを使う
Author(s)	西松, 毅
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1999, 112, p. 107-109
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/66336
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

『科学計算ライブラリ ASL/SX』のFFTを使う

大阪大学 産業科学研究所

西松 毅

nisimatu@cmp.sanken.osaka-u.ac.jp

1 目的

SX-4 のために最適化されているであろう『科学計算ライブラリ ASL/SX』[NEC96] のFFT (高速フーリエ変換) を利用して、(よく出自のわからない現在利用している FFT より) 計算時間を短縮することを目的とする。

この文章は大型計算機センターでの ASL/SX の利用方法の一例を示したものになる。

計算条件, 利用方法などは以下の通り

- $64 \times 64 \times 64$ 要素の3次元複素FFT.
- FFTの並列化はやりたかったのだが、よくわからなかったので、できなかった。FFTそのものを並列化するのではなく、例えば互いに独立な4つのデータがあれば、FFTを4本並列に走らせればよいのかもしれない。
- ccup02 のクロスコンパイラ環境でコンパイルする。
- GNU make[FSF95] を使う。

2 Makefile

Makefile の例を次に示す。GNU make を使っているので、とても簡単。

なお、ASL/SX の archive, libasl.a を `LIBDIR = /usr1/xxxxxxx/SUPER-UX/lib1/` にコピーして置いてある。

```
# Makefile for wf2real1999          -*- Makefile -*-
#                                  1999,03,17  NISHIMATSU Takeshi
##
srcdir = /usr1/xxxxxxx/f/cpgs1999/cpgs1999-0.09/src
VPATH = /usr1/xxxxxxx/f/cpgs1999/cpgs1999-0.09/src
LIBDIR = /usr1/xxxxxxx/SUPER-UX/lib1

CC = sxcc -hfloat1
CFLAGS =
CPPFLAGS = -I. -DSX=1 -DDEBUG=1 -DASL=1

FC = sxf90 -Ep -f3 -float1
FFLAGS = -DLANGUAGE_FORTRAN=1
```

```

WF2REAL_SOURCES=wf2real.F contour110.F autoka.F indx.F \
    skipper.F makecon.F struct.F tslatc-old.F ucvolm.F \
    kgroup.F skip-nit-anneal.F SetIEFDbyUser.F \
    calc-weight.F wf2ChargeDistPlot.F cptime.F
WF2REAL_OBJECTS=$(WF2REAL_SOURCES:.F=.o) wrapped-c-qsort.o
##

all: wf2real1999

indx.o wf2real.o contour110.o: cp.inc

autoka.o: PARAM

wrapped-c-qsort.o: wrapped-c-qsort.h

wf2real1999: $(WF2REAL_OBJECTS)
    $(FC) -L$(LIBDIR) -o $$ $^ -ltspace -lasl

clean:
    rm -f wf2real1999 *.o

```

3 コーディング

ライブラリを call している部分は次の通り. C プリプロセッサ [Nis98] を利用して, 以前のコーディングも残してある. CPTIME() は時間計測ルーチン.

```

        CALL CPTIME(IT01)
#ifdef ASL
        CALL FFT3(-1,ARE,AIE,ND,ND,ND,WK1,WK2,WR,WI,ND)
#endif
#ifdef ASL
        if (ilevel.eq.1) then
            call DFC3FB(NADIM,NADIM,NADIM, ARE,AIE, NADIM,NADIM,NADIM,
$                -1, IFAX, TRIGS, WK, IERR)
        else
            call DFC3BF(NADIM,NADIM,NADIM, ARE,AIE, NADIM,NADIM,NADIM,
$                -1, IFAX, TRIGS, WK, IERR)
        end if
#endif
        CALL CPTIME(IT02)

```

```
CALL TIMEPR(IT02-IT01,'FFT      ')
```

4 結果

計算時間が大幅に改善された.

	計算時間
よく出自のわからない現在利用している FFT	85msec
『科学計算ライブラリ ASL/SX』の FFT	35msec

5 センターへの要望

- 各マシンの時刻を合わせてほしい. 今 (1999 年 3 月) のところ, ccup02 で make すると, 次のエラーが出る.

```
ccup02 246% make wf2real1999
make: *** Warning: File 'Makefile' has modification time in the
future (921651428 > 921651360)
.
.
.
make: *** Warning: Clock skew detected. Your build may be
incomplete.
ccup02 247%
```

- SX-4 の ASL/SX, IMSL などのライブラリ (*.a) が格納されているディレクトリをクロスコンパイラ環境のある ccup02 にも NFS マウントしてほしい.

参考文献

- [FSF95] Free Software Foundation: info of GNU make (GNU make のオンラインマニュアル) (Free Software Foundation, Inc., Boston, USA, 1995).
- [NEC96] 日本電気株式会社: SX システム 科学計算ライブラリ ASL/SX 利用の手引, Tokyo, Japan (1996).
- [Nis98] 西松毅: f77 の機種依存性とその C プリプロセッサを用いた回避方法, 大阪大学大型計算機センターニュース 28, 72 (1998), 特集 3 スーパーコンピュータ SX-4 利用報告.