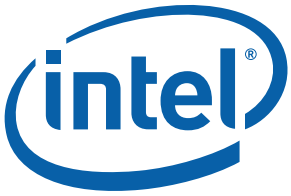


インテル® マス・カーネル・ライブラリー Linux* OS 版

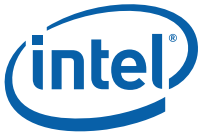
ユーザーズガイド

2010 年 1 月

資料番号 : 314774-010JA

Web サイト : http://www.intel.com/software/products/ (英語)

http://www.intel.co.jp/jp/software/products/ (日本語)



バージョン	バージョン情報	日付
-001	初版。インテル ® マス・カーネル・ライブラリー (インテル ® MKL) 9.0 gold リリースについて説明。	2006 年 9 月
-002	インテル ® MKL 9.1 beta リリースについて説明。「はじめに」、「LINPACK ベンチマークと MP LINPACK ベンチマーク」の章と「サードパーティー・インターフェイスのサポート」の付録を追加。既存の章を拡張。ドキュメントを再構成。例のリストを追加。	2007 年 1 月
-003	インテル ® MKL 9.1 gold リリースについて説明。既存の章を拡張。ドキュメントを再構成。ILP64 追加。「インテル ® MKL を Eclipse* IDE CDT でリンクする場合の構成」セクションを第 3 章に追加。クラスターに関する内容を 1 つの独立した第 9 章「インテル ® マス・カーネル・ライブラリー・クラスター・ソフトウェアの使用」に移動して再構成し、適切なリンクを追加。	2007 年 6 月
-004	インテル ® MKL 10.0 Beta リリースについて説明。レイヤーモデルについての記述を第 3 章に追加し、本書の内容をモデルに合わせて調整。スタートアップ時の環境変数の自動設定についての記述を第 4 章に追加。新しいインテル ® MKL スレッド化コントロールについての記述を第 6 章に追加。インテル ® MKL のユーザーズガイドとインテル ® MKL クラスター・エディションのユーザーズガイドを併合し、それぞれの製品の統合を反映。	2007 年 9 月
-005	インテル ® MKL 10.0 Gold リリースについて説明。インテル ® MKL を Eclipse CDT 4.0 でリンクする場合の説明を第 3 章に追加。互換 OpenMP* ランタイム・ライブラリー (libiomp) について記述。	2007 年 10 月
-006	インテル ® MKL 10.1 beta リリースについて説明。表「高レベル・ディレクトリー構造」のダミー・ライブラリーの情報をより詳細に変更。インテル ® MKL 構成ファイルの情報を削除。「Man ページのアクセス」セクションを第 3 章に追加。「Boost uBLAS 行列 - 行列乗算のサポート」セクションを第 7 章に追加。「Eclipse* IDE でのプログラミング」の章を追加。	2008 年 5 月
-007	インテル ® MKL 10.1 gold リリースについて説明。IA-32 アーキテクチャーのリンク例と「計算ライブラリーのリンク」セクションを第 5 章に追加。DSS/PARDISO のレイヤー構造への統合について説明。2 つの Fortran コード例を追加。	2008 年 8 月
-008	インテル ® MKL 10.2 beta リリースについて説明。BLAS/LAPACK 用の事前構築 Fortran 95 インターフェイス・ライブラリーとモジュールについて説明。インテル ® Advanced Vector Extensions (インテル ® AVX) のサポートについて説明。ダミー・ライブラリーとレガシー・リンク・モデルのサポート終了について説明。第 5 章の構成を変更。	2009 年 1 月
-009	インテル ® MKL 10.2 gold リリースについて説明。本書の構成を大幅に変更。第 2 章の内容を拡張。SP2DP インターフェイスの説明を第 3 章に追加。Web ベースのリンク・アドバイザーの説明を第 2 章および第 5 章に追加。	2009 年 3 月
-010	インテル ® MKL 10.2 update リリース 4 について説明。FFT スレッド化問題のリストを第 6 章に追加。	2010 年 1 月

本資料に掲載されている情報は、インテル製品の概要説明を目的としたものです。本資料は、明示されているか否かにかかわらず、また禁反言によるとよらずにかかわらず、いかなる知的財産権のライセンスを許諾するためのものではありません。製品に付属の売買契約書『Intel's Terms and Conditions of Sale』に規定されている場合を除き、インテルはいかなる責を負うものではなく、またインテル製品の販売や使用に関する明示または黙示の保証 (特定目的への適合性、商品性に関する保証、第三者の特許権、著作権、その他、知的所有権を侵害していないことへの保証を含む) にも一切応じないものとします。

インテルによる書面での同意がない限り、インテル製品は、インテル製品の停止を起因とする人身傷害または死亡を想定して設計されていません。

インテル製品は、予告なく仕様や説明が変更される場合があります。機能または命令の一覧で「留保」または「未定義」と記されているものがありますが、その「機能が存在しない」あるいは「性質が留保付である」という状態を設計の前提にしないでください。これらの項目は、インテルが将来のために留保しているものです。インテルが将来これらの項目を定義したことにより、衝突が生じたり互換性が失われたりしても、インテルは一切責任を負いません。この情報は予告なく変更されることがあります。この情報だけに基づいて設計を最終的なものとしないでください。

本資料で説明されている製品には、エラッタと呼ばれる設計上の不具合が含まれている可能性があり、公表されている仕様とは異なる動作をする場合があります。現在確認済みのエラッタについては、インテルまでお問い合わせください。

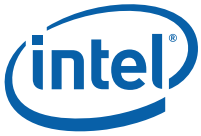
最新の仕様をご希望の場合や製品をご注文の場合は、お近くのインテルの営業所または販売代理店にお問い合わせください。

本書で紹介されている注文番号付きのドキュメントや、インテルのその他の資料を入手するには、1-800-548-4725 (アメリカ合衆国) までご連絡いただくか、インテルの Web サイトを参照してください。

インテル® プロセッサー・ナンバーはパフォーマンスの指標ではありません。プロセッサー・ナンバーは同一プロセッサー・ファミリー内の製品の機能を区別します。異なるプロセッサー・ファミリー間の機能の区別には用いません。詳細については、http://www.intel.co.jp/jp/products/processor_number/ を参照してください。

Intel、インテル、Intel ロゴ、Intel Core、Itanium、Pentium、Xeon は、アメリカ合衆国およびその他の国における Intel Corporation の商標です。

* その他の社名、製品名などは、一般に各社の表示、商標または登録商標です。



目次

例の目次

図の目次

概要 1

インテル® マス・カーネル・ライブラリー (インテル® MKL) は、最大限のパフォーマンスが求められる、科学、工学、金融アプリケーション向けに高度に最適化された、スレッドセーフな数値演算ルーチンを提供します。

テクニカルサポート

インテルでは、使い方のヒント、既知の問題点、製品のエラッタ、ライセンス情報、ユーザーフォーラムなどの多くのセルフヘルプ情報を含むサポート Web サイトを提供しています。詳細は、インテル® MKL サポート Web サイト (http://www.intel.com/software/products/support/) を参照してください。

本書について

この『インテル® MKL ユーザーズガイド』は、インテル® MKL のインストール後にお読みください。インストールが完了していない場合、『インテル® マス・カーネル・ライブラリー インストール・ガイド』(`Install.txt`) を参照してインストールを完了してください。

本書では、ライブラリーの*使用法*を説明します。この使用法には、インテル® MKL の構成、パフォーマンスおよび精度、混在言語プログラミングにおけるルーチン呼び出し、リンク、その他の情報が含まれています。

本書はインテル® MKL の OS 固有の使用法と OS に依存しない機能について説明します。表 A-1 (付録 A) ではインテル® MKL 関数ドメインをリストしています。

このガイドで提供する情報は以下のとおりです。

- ライブラリーを開始するために必要なインストール後の手順
- ライブラリーと開発環境を構成する方法
- ライブラリーの構造
- アプリケーションとライブラリーをリンクする方法と、簡単な使用法の例
- インテル® MKL 版を使用してアプリケーションを作成、コンパイル、および実行する方法

本書は、ソフトウェア開発の初心者から熟練者まで、幅広い Linux* プログラマーを対象としています。

関連情報

アプリケーションでライブラリーを使用する方法については、本書のほか、次のドキュメントも併せて参照してください。

- 『インテル® MKL リファレンス・マニュアル』は、ルーチンの機能、パラメーターの説明、インターフェイス、呼び出し構文と戻り値についての*リファレンス*情報を提供します。
- インテル® マス・カーネル・ライブラリー Linux OS リリースノート

本書の構成

本書は、以下の章と付録から構成されています。

第 1 章	「概要」。インテル® MKL の使用法を紹介します。また、本書の表記規則について説明します。
第 2 章	「はじめに」。インストール後の手順と、インテル® MKL を使用するために必要な情報を説明します。
第 3 章	「インテル® マス・カーネル・ライブラリーの構造」。インストール後のインテル® MKL ディレクトリーの構造について説明します。
第 4 章	「開発環境の構成」。インテル® MKL と開発環境を構成する方法を説明します。
第 5 章	「アプリケーションと インテル® マス・カーネル・ライブラリーのリンク」。特定のプラットフォーム用にアプリケーションとリンクするライブラリーを説明します。また、カスタム・ダイナミック・ライブラリーのビルド方法を説明します。
第 6 章	「パフォーマンスとメモリーの管理」。インテル® MKL のスレッド化について説明し、ライブラリーのパフォーマンスを向上するためのコーディング・テクニックとハードウェア構成を示します。また、インテル® MKL のメモリー管理機能の特徴について説明します。
第 7 章	「言語固有の使用法オプション」。混在言語プログラミングと言語固有のインターフェイスの使用について説明します。
第 8 章	「コーディングのヒント」。特定の用途に役立つコーディングのヒントを示します。
第 9 章	「インテル® マス・カーネル・ライブラリー・クラスター・ソフトウェアの使用」。ScaLAPACK とクラスター FFT の使用法について、C と Fortran 固有のリンク例を含む、関数ドメインを使用するアプリケーションのリンク方法を説明します。また、サポートしている MPI の情報も記載しています。
第 10 章	「Eclipse* IDE でのプログラミング支援機能」。Eclipse IDE でプログラミングする際に役立つインテル® MKL 機能について説明します。
第 11 章	「LINPACK ベンチマークと MP LINPACK ベンチマーク」。Intel® Optimized LINPACK Benchmark for Linux OS および Intel® Optimized MP LINPACK Benchmark for Clusters について説明します。
付録 A	「インテル® マス・カーネル・ライブラリー言語 インターフェイスのサポート」。ヘッダーファイルを含む、インテル® MKL で各関数ドメイン用に用意されている言語インターフェイス情報の要約です。
付録 B	「サードパーティー・インターフェイスのサポート」。インテル® MKL でサポートされているインターフェイスについて説明します。

本書の最後には、索引 も含まれています。

表記規則

本書では、オペレーティング・システムについて以下の用語を使用しています。

Linux OS	サポートしているすべての Linux オペレーティング・システムで有効な情報を指します。

インテル® MKL ディレクトリーは、以下のように表記しています。

<mkl ディレクトリー>	インテル® MKL がインストールされているメイン・ディレクトリー。構成、リンク、およびビルドの際には、この <mkl ディレクトリー> の代わりに実際のパス名を指定してください。詳細は、「はじめに」を参照してください。

< インテル® コンパイラー・プロフェッショナル・ディレクトリー >
インテル® C++ コンパイラー・プロフェッショナル・エディションまたはインテル® Fortran コンパイラー・プロフェッショナル・エディションのインストール・ディレクトリー。詳細は、「はじめに」を参照してください。

表 1-1 に、その他の表記規則を示します。

表 1-1 表記規則

斜体	強調を示します。
等幅小文字	ファイル名、ディレクトリー名およびパス名を示します。 例 : `libmkl_core.a , /opt/intel/mkl/10.2.0.004`

等幅小文字 / 大文字	コマンドおよびコマンドライン・オプションを示します。
	例 :
	`icc myprog.c -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE -lmkl -lguide -lpthread ;`
	C/C++ コードの一部を示します。
	例 :
	`a = new double [SIZE*SIZE];`

等幅大文字	システム変数を示します。 例 : `$MKLPATH`
等幅斜体	説明しているパラメーターを示します。 例 : *`lda`* (ルーチン・パラメーター)、*`functions_list`* (makefile パラメーター) など。 山括弧で囲まれている場合、識別子、式、文字列、記号、または値のプレースホルダーを示します。 例 : *`<mkl ディレクトリー>`*。プレースホルダーの代わりに、これらの項目のいずれかを用いてください。
[項目]	角括弧は、括弧で囲まれている項目がオプションであることを示します。
{ 項目 | 項目 }	波括弧は、括弧内にリストされている項目を 1 つだけ選択することを示します。垂直バー (|) は項目の区切りです。

2 はじめに

本章は、Linux* OS でインテル® マス・カーネル・ライブラリー (インテル® MKL) の使用を開始するために必要な基本的な情報とインストール後の手順を説明します。

インストールの確認

インテル® MKL をインストールした後に、ライブラリーが正しくインストールされ、設定されていることを確認します。

1. まず、インストール・ディレクトリーが作成されていることを確認します。デフォルトでは、インテル® MKL のインストール・ディレクトリーは以下のいずれかになります。
   - `/opt/intel/mkl/RR.r.y.xxx`
     (`RR.r` はバージョン番号、`y` はリリース番号、`xxx` はパッケージ番号。
     例: `/opt/intel/mkl/10.2.0.004`)
   - *< インテル® コンパイラー・プロフェッショナル・ディレクトリー >*`/mkl`
     (例 :`/opt/intel/Compiler/11.1/015/mkl`)
2. システムにインテル® MKL の複数のバージョンをインストールしている場合は、使用するバージョンを指定してビルドスクリプトを更新します。
3. 以下の 6 つのファイルが `tools/environment` ディレクトリーにインストールされます。
   `mklvars32.sh`
   `mklvars32.csh`
   `mklvarsem64t.sh`
   `mklvarsem64t.csh`
   `mklvars64.sh`
   `mklvars64.csh`
   これらのファイルを使用して、いつかの環境変数にインテル® MKL 固有の値を設定できます (詳細は「環境変数の設定」を参照してください)。
4. インテル® MKL のディレクトリー構成については、第 3 章を参照してください。

環境変数の設定

インテル® MKL Linux OS 版のインストールが完了したら、`tools\environment` ディレクトリーにあるスクリプトファイルのいずれか 1 つを使用して、コマンドシェルで `INCLUDE`、`MKLROOT`、`LD_LIBRARY_PATH`、`MANPATH`、`LIBRARY_PATH`、`CPATH`、`FPATH`、および `NLSPATH` 環境変数を設定します。表 2-1 に示すように、システムのアーキテクチャーとコマンドシェルに対応したスクリプトを使用してください。

表 2-1 環境変数を設定するスクリプト

アーキテクチャー	シェル	スクリプトファイル
IA-32	C	`mklvars32.csh`

表 2-1 環境変数を設定するスクリプト (続き)

アーキテクチャー	シェル	スクリプトファイル
IA-32	Bash および Bourne (sh)	mklvars32.sh
インテル® 64	C	mklvarsem64t.csh
インテル® 64	Bash および Bourne (sh)	mklvarsem64t.sh
IA-64	C	mklvars64.csh
IA-64	Bash および Bourne (sh)	mklvars64.sh

ライブラリーの構成についての詳細は、第 4 章を参照してください。

Web ベースのリンク・アドバイザーの使用

インテル® MKL リンク・アドバイザーを使用して、リンク行やコンパイル行で指定するライブラリーとオプションを特定できます。

http://software.intel.com/en-us/articles/intel-mkl-link-line-advisor (英語) にアクセスしてください。

システムとインテル® MKL の使用 (ダイナミック・リンク / スタティック・リンク、スレッド化モード / 逐次モードなど) に関する情報をリンク・アドバイザーに提供すると、アプリケーション用の適切なリンク行が自動生成されます。

インテル® MKL ライブラリーのリンクについては第 5 章を参照してください。非クラスターインテル® MKL ライブラリーは 表 5-1 にリストされています。

インテル® MKL コードサンプルの使用

インテル® MKL パッケージにはコードサンプルが含まれています。コードサンプルは、インテル® MKL インストール・ディレクトリーの examples サブディレクトリーにあります。サンプルを使用して、以下のような項目を確認できます。

- インテル® MKL がシステムで動作しているか
- ライブラリーの呼び出し方法
- ライブラリーのリンク方法

サンプルは、主にインテル® MKL 関数ドメインとプログラミング言語別にサブディレクトリーでグループ化されています。例えば、examples/spblas サブディレクトリーにはスパース BLAS のサンプル、examples/vmlc サブディレクトリーには VML の C のサンプルが含まれています。サンプルのソースコードは、sources サブディレクトリーにあります。

以下の項目も参照してください。

上位ディレクトリー構造

サポートするコンパイラー

インテル® MKL がサポートしているコンパイラーは、『リリースノート』に記述されています。しかし、ライブラリーはほかのコンパイラーでも動作することが確認されています。

インテル® MKL には、インクルード・ファイルのセットが用意されています。関数の列挙値とプロトタイプを指定することで、プログラム開発が単純化されます (インクルード・ファイルのリストは、表 A-2 を参照)。適切なインクルード・ファイルを使用せずにアプリケーションからインテル® MKL 関数を呼び出すと、関数が正しく動作しない場合があります。

開始前の準備

インテル® MKL の使用を開始する前に、表 2-2 で説明されているいくつかの重要な基本概念に目を通すようにしてください。

表 2-2　開始前に知っておくべき項目

ターゲット・プラットフォーム	ターゲットマシンのアーキテクチャーを特定します。 • IA-32 または IA-32 互換 • インテル® 64 またはインテル® 64 互換 • IA-64 (Itanium® プロセッサー・ファミリー) **理由 :** インテル® MKL ライブラリーは、使用するアーキテクチャー (「サポートしているアーキテクチャー」を参照) に対応するディレクトリーにあるため、リンク行で適切なパスを指定する必要があります (「リンクの例」を参照)。インテル® MKL を使用する開発環境を構成するには、使用するアーキテクチャーに対応するスクリプトを使用して環境変数を設定します (詳細は「環境変数の設定」を参照)。
算術問題	必要なインテル® MKL 関数ドメインをすべて特定します。 • BLAS • スパース BLAS • LAPACK • PBLAS • ScaLAPACK • スパース・ソルバー・ルーチン • ベクトル・マス・ライブラリー関数 • ベクトル・スタティスティカル・ライブラリー関数 • フーリエ変換関数 (FFT) • クラスター FFT • 三角変換ルーチン • ポアソン、ラプラス、およびヘルムホルツ・ソルバー・ルーチン • 最適化 (Trust-Region) ソルバールーチン • GMP* 数学関数 **理由 :** 使用する関数ドメインを特定することで、『インテル® MKL リファレンス・マニュアル』でルーチンを検索する項目が少なくなります。さらに、インテル® MKL クラスターを使用している場合、リンク行は関数ドメイン固有になります (「インテル® マス・カーネル・ライブラリー・クラスター・ソフトウェアの使用」を参照)。コーディングのヒントは、関数ドメインにより異なります (「パフォーマンスを向上するためのヒントと手法」を参照)。
プログラミング言語	インテル® MKL は Fortran と C/C++ プログラミングの両方をサポートしますが、すべての関数ドメインが特定の言語環境 (例えば、C/C++ または Fortran 90/95) をサポートするとは限りません。使用する関数ドメインでサポートされる言語インターフェイスを特定してください (「インテル® マス・カーネル・ライブラリー言語 インターフェイスのサポート」を参照)。 **理由 :** 関数ドメインが必要な環境を直接サポートしていない場合、混在言語プログラミングを使用することができます (「混在言語プログラミングとインテル® MKL」を参照)。 言語固有のインターフェイス・ライブラリーとモジュールの一覧、および使用例は、「言語固有インターフェイスとインテル® MKL の使用」を参照してください。
整数データの範囲	インテル® 64 または IA-64 アーキテクチャー・ベースのシステムの場合、アプリケーションで大規模なデータ配列 (2^{31}-1 以上の要素を含む配列) の計算を実行するかどうかを決定します。 **理由 :** 大規模なデータ配列を処理するには、ILP64 インターフェイス (整数が 64 ビット) を選択する必要があります。その他の場合は、デフォルトの LP64 インターフェイス (整数が 32 ビット) を使用します (「ILP64 プログラミングのサポート」を参照)。

表 2-2 開始前に知っておくべき項目 (続き)

スレッド化モデル	アプリケーションをスレッド化するかどうか、スレッド化する場合はその方法を決定します。 • インテル® コンパイラーを使用してスレッド化する • サードパーティー製のコンパイラーを使用してスレッド化する • スレッド化しない **理由 :** アプリケーションのスレッド化に使用するコンパイラーにより、アプリケーションとリンクするスレッド化ライブラリーが決まります。サードパーティー製のコンパイラーを使用してアプリケーションをスレッド化する場合、インテル® MKL を逐次モードで使用する必要があります (詳細は、「ライブラリーの逐次モード」および「スレッド化ライブラリーのリンク」を参照)。
スレッド数	インテル® MKL で使用するスレッド数を決定します。 **理由 :** インテル® MKL は、OpenMP* スレッド化をベースにしています。OpenMP ソフトウェアは、インテル® MKL が使用するスレッドの数を自動的に設定します。異なる数が必要な場合、プログラマーが数を設定する必要があります。詳細は、「インテル® MKL 並列処理の使用」を参照してください。
リンクモデル	アプリケーションとインテル® MKL ライブラリーをリンクする適切なリンクモデルを決定します。 • スタティック • ダイナミック **理由 :** スタティック・リンクとダイナミック・リンクでは使用するリンク行の構文とライブラリーが異なります。各リンクモデルのリンク・ライブラリーのリスト、リンクの例、その他のリンクに関する情報 (カスタム・ダイナミック・ライブラリーを作成してディスク容量を節約する方法など) は、「アプリケーションと インテル® マス・カーネル・ライブラリーのリンク」を参照してください。
使用する MPI	インテル® MKL クラスターで使用する MPI を決定します。インテル® MPI 3.x を使用することを強く推奨します。 **理由 :** アプリケーションと ScaLAPACK やクラスター FFT をリンクする際に、使用する MPI に対応するライブラリーをリンク行で指定する必要があるためです (「インテル® マス・カーネル・ライブラリー・クラスター・ソフトウェアの使用」を参照)。

インテル® マス・カーネル・ライブラリーの構造 3

本章は、インテル® マス・カーネル・ライブラリー (インテル® MKL) のディレクトリー構造、アーキテクチャー固有の実装、サポートしているプログラミング・インターフェイス、その他を含む、インテル® MKL の構造について説明します。

インテル® MKL は、バージョン 10.0 からレイヤーモデルを採用しています。この変更により、ライブラリーの構造が合理化され、サイズが減少し、使用法に柔軟性が増しました。

「レイヤーモデルの概念」も参照してください。

サポートしているアーキテクチャー

インテル® MKL Linux* OS 版では、3 つのアーキテクチャー固有の実装を提供しています。表 3-1 に、サポートしているアーキテクチャーと各アーキテクチャー固有の実装が含まれているディレクトリーを示します。

表 3-1　アーキテクチャー固有の実装

アーキテクチャー	場所
IA-32 または IA-32 互換	*<mkl ディレクトリー>*/lib/32
インテル® 64 またはインテル® 64 互換	*<mkl ディレクトリー>*/lib/em64t
IA-64	*<mkl ディレクトリー>*/lib/64

これらのディレクトリー構造の詳細は、表 3-6、表 3-7、および表 3-8 を参照してください。

「上位ディレクトリー構造」も参照してください。

上位ディレクトリー構造

表 3-2 は、インストール後のインテル® MKL の上位ディレクトリー構造を示しています。

表 3-2　上位ディレクトリー構造

ディレクトリー	内容
<mkl ディレクトリー>	インテル® MKL メイン・ディレクトリー。デフォルトのインストール・ディレクトリーについては、「インストールの確認」を参照してください。
<mkl ディレクトリー>/benchmarks/linpack	LINPACK ベンチマークの共有メモリー (SMP) バージョン
<mkl ディレクトリー>/benchmarks/mp_linpack	LINPACK ベンチマークの MPI バージョン
<mkl ディレクトリー>/doc	スタンドアロンのインテル® MKL のドキュメント
<mkl ディレクトリー>/examples	サンプルのディレクトリー。各サブディレクトリーにはソースとデータファイルが含まれます。

表 3-2　上位ディレクトリー構造 (続き)

ディレクトリー	内容
<*mkl ディレクトリー*>/include	ライブラリー・ルーチンとサンプルのテスト用のインクルード・ファイル
<*mkl ディレクトリー*>/include/32	IA-32 アーキテクチャー、インテル® Fortran コンパイラー用 BLAS95[1] および LAPACK95[2] .mod ファイル
<*mkl ディレクトリー*>/include/64/ilp64	IA-64 アーキテクチャー、インテル® Fortran コンパイラー、ILP64 インターフェイス用 BLAS95 および LAPACK95 .mod ファイル
<*mkl ディレクトリー*>/include/64/lp64	IA-64 アーキテクチャー、インテル® Fortran コンパイラー、LP64 インターフェイス用 BLAS95 および LAPACK95 .mod ファイル
<*mkl ディレクトリー*>/include/em64t/ilp64	インテル® 64 アーキテクチャー (旧称インテル® EM64T)、インテル® Fortran コンパイラー、ILP64 インターフェイス用 BLAS95 および LAPACK95 .mod ファイル
<*mkl ディレクトリー*>/include/em64t/lp64	インテル® 64 アーキテクチャー、インテル® Fortran コンパイラー、LP64 インターフェイス用 BLAS95 および LAPACK95 .mod ファイル
<*mkl ディレクトリー*>/interfaces/blas95	BLAS 用 Fortran 95 インターフェイスとライブラリー・ビルド用のメイクファイル
<*mkl ディレクトリー*>/interfaces/fftw2x_cdft	インテル® MKL クラスター FFT 用 MPI FFTW 2.x インターフェイス
<*mkl ディレクトリー*>/interfaces/fftw2xc	インテル® MKL FFT 用 FFTW 2.x インターフェイス (C インターフェイス)
<*mkl ディレクトリー*>/interfaces/fftw2xf	インテル® MKL FFT 用 FFTW 2.x インターフェイス (Fortran インターフェイス)
<*mkl ディレクトリー*>/interfaces/fftw3xc	インテル® MKL FFT 用 FFTW 3.x インターフェイス (C インターフェイス)
<*mkl ディレクトリー*>/interfaces/fftw3xf	インテル® MKL FFT 用 FFTW 3.x インターフェイス (Fortran インターフェイス)
<*mkl ディレクトリー*>/interfaces/lapack95	LAPACK 用 Fortran 95 インターフェイスとライブラリー・ビルド用のメイクファイル
<*mkl ディレクトリー*>/lib/32	IA-32 アーキテクチャー用のスタティック・ライブラリーと共有オブジェクト
<*mkl ディレクトリー*>/lib/64	IA-64 アーキテクチャー (インテル® Itanium® プロセッサー・ファミリー) 用のスタティック・ライブラリーと共有オブジェクト
<*mkl ディレクトリー*>/lib/em64t	インテル® 64 アーキテクチャー用のスタティック・ライブラリーと共有オブジェクト
<*mkl ディレクトリー*>/man/ja_JP/man3	インテル® MKL 関数の man ページ (スタンドアロンのインテル® MKL 用)
<*mkl ディレクトリー*>/tests	テスト用のソースおよびデータファイル
<*mkl ディレクトリー*>/tools/builder	カスタム・ダイナミック・リンク・ライブラリー作成用のツール
<*mkl ディレクトリー*>/tools/environment	ユーザーシェルで環境変数を設定するシェルスクリプト
<*mkl ディレクトリー*>/tools/plugins/com.intel.mkl.help	WebHelp 形式のインテル® MKL リファレンス・マニュアルと Eclipse* IDE プラグイン。詳細は、mkl_documentation.htm を参照してください。
<*インテル® コンパイラー・プロフェッショナル・ディレクトリー*>/documentation/ja_JP/mkl	インテル® C++ コンパイラー・プロフェッショナル・エディションまたはインテル® Fortran コンパイラー・プロフェッショナル・エディションに含まれているインテル® MKL のドキュメント。

表 3-2 上位ディレクトリー構造 (続き)

ディレクトリー	内容
<*インテル® コンパイラー・プロフェッショナル・ディレクトリー*>/man/ja_JP/man3	インテル® C++ コンパイラー・プロフェッショナル・エディションまたはインテル® Fortran コンパイラー・プロフェッショナル・エディションに含まれているインテル® MKL の man ページ。

1. Fortran 95 インターフェイス、BLAS
2. Fortran 95 インターフェイス、LAPACK

レイヤーモデルの概念

インテル® MKL は、バージョン 10.0 からレイヤーモデルを採用しています。

ライブラリーには 4 つのレイヤーがあります。

1. インターフェイス・レイヤー
2. スレッド化レイヤー
3. 計算レイヤー
4. コンパイラー・サポート・ランタイム・ライブラリー。

各レイヤーは複数のライブラリーから成り、個別のケースを処理します。次に例を示します。

- インテル® 64 または IA-64 アーキテクチャー・ベースのシステムの場合、インターフェイス・レイヤーの `libmkl_intel_lp64.a` ライブラリーは、32 ビット整数型の使用と、インテル® コンパイラーが関数値を返す手段に対応します。
- スレッド化レイヤーの `libmkl_intel_thread.a` ライブラリーは、インテル® コンパイラーで使用される OpenMP* 実装に対応し、`libmkl_sequential.a` ライブラリーは非スレッドモードに対応します。

計算レイヤーはインテル® MKL の大部分を占めます。このレイヤーのライブラリーには純粋な計算に必要なコードのみ含まれています。インターフェイスや OpenMP スレッド化への対応はありません。

このような構成で、インテル® MKL は異なるライブラリーにある同一コードの複製を防ぎ、大幅に容量を節約します。

ニーズに合わせて、各パートのレイヤーごとに 1 つのライブラリーをリンクし、インテル® MKL の個別ライブラリーを複数組み合わせることができます。いったんインターフェイス・ライブラリーが選択されると、スレッド化ライブラリーはそのインターフェイスを取得し、計算ライブラリーは最初の 2 つのレイヤーで選択されたインターフェイスと OpenMP 実装 (または非スレッドモード) を使用します。アプリケーションにリンクするライブラリーについては、第 5 章を参照してください。

表 3-3 に各レイヤーの詳細を示します。

表 3-3　インテル® MKL レイヤー

レイヤー	説明
インターフェイス・レイヤー	コンパイルされたアプリケーションのコードと、ライブラリーのスレッド化および計算部分を対応させます。このレイヤーは以下のインターフェイスと手段を提供します。 • LP64 および ILP64 インターフェイス (詳細は、「ILP64 プログラミングのサポート」を参照) • 異なる関数値を返すコンパイラーとの互換性 • Cray* 形式の名前を使用するアプリケーションの単精度名と倍精度名のマッピング (SP2DP インターフェイス)。 SP2DP インターフェイスは、インテル® 64 または IA-64 アーキテクチャー用の ILP64 インターフェイスを使用するアプリケーションで Cray 形式の名前をサポートしています。SP2DP インターフェイスは、アプリケーションの単精度名 (実数型および複素数型) とインテル MKL BLAS/LAPACK の倍精度名のマッピングを提供します。例えば、BLAS 関数 *GEMM の場合、関数名は以下のようにマップされます。 SGEMM -> DGEMM DGEMM -> DGEMM CGEMM -> ZGEMM ZGEMM -> ZGEMM 倍精度名は変更されません。
スレッド化レイヤー	このレイヤーは以下を行います。 • スレッド化されたインテル® MKL と異なるスレッド化コンパイラーをリンクします。 • ライブラリーのスレッド化モードまたは逐次モードでリンクできます。 このレイヤーは、異なる環境 (スレッド化または逐次) やコンパイラー (インテル® コンパイラー、GNU*、その他) 向けにコンパイルされます。
計算レイヤー	インテル® MKL の中心となる部分です。このレイヤーは、アーキテクチャーとサポートする OS の各組み合わせごとに 1 つのライブラリーのみ使用されます。計算レイヤーは、アーキテクチャーの機能を識別することで、実行時にさまざまなアーキテクチャー用に適切なバイナリーコードを選択します。
コンパイラー・サポート・ランタイム・ライブラリー (RTL)。	インテル® MKL はインテル® コンパイラー用のコンパイラー・サポート RTL のみを提供します (OpenMP 互換ランタイム・ライブラリー (`libiomp`) および OpenMP レガシー・ランタイム・ライブラリー (`libguide`))。サードパーティーのスレッド化コンパイラーを使用してスレッド化を行うには、スレッド化レイヤーのライブラリーまたは適切な互換ライブラリーを使用します (詳細は、「スレッド化ライブラリーのリンク」を参照)。

ライブラリーの逐次モード

インテル® MKL を逐次 (非スレッド) モードで使用できます。このモードでは、インテル® MKL は非スレッドコードを実行しますが、このコードはスレッドセーフ[1] なので、OpenMP コードの並列領域で使用できます。逐次モードでは、互換ランタイム・ライブラリーまたは OpenMP レガシー ランタイム・ライブラリーは不要で、`OMP_NUM_THREADS` 環境変数やインテル® MKL の等価な変数には応答しません。

インテル® MKL のスレッド化を使用しない特別な理由がある場合のみ、逐次モードでライブラリーを使用してください。この逐次モードは、インテル® MKL を、インテル以外のコンパイラーでスレッド化されたプログラムに使用する場合や、さまざまな理由によりライブラリーの非スレッドバージョンが必要な場合に役立ちます (例えば、一部の MPI など)。逐次モードを設定するには、スレッド化レイヤーで、`*sequential.*` ライブラリーを選択します。

`*sequential.*` ライブラリーは POSIX スレッド・ライブラリー (`pthread`) に依存するため、逐次モードのリンク行に `pthread` を追加してください。

1. LAPACK の古いルーチン (`?lacon`) を除きます。

以下の項目も参照してください。

詳細なディレクトリー構造

インテル® MKL 並列処理の使用

実行環境における競合の回避

リンクの例

ILP64 プログラミングのサポート

インテル® MKL ILP64 ライブラリーは、64 ビット整数型 (2^{31}-1 以上の要素を含む大規模な配列のインデックス処理に必要) を使用します。しかし、LP64 ライブラリーは 32 ビット整数型を使用して配列をインデックス処理します。

LP64 インターフェイスと ILP64 インターフェイスは、インターフェイス・レイヤーに実装されています (詳細は、「レイヤーモデルの概念」および「詳細なディレクトリー構造」を参照)。

ILP64 インターフェイスは次の機能とサポートを提供します。

- 大規模なデータ配列 (要素数 2^{31}-1 以上) のサポート
- `-i8` コンパイラー・オプションを使用して Fortran コードをコンパイルする

"LP64" はインテル® MKL のバージョン 9.1 以前に提供されていたインターフェイスの新しい名前です。LP64 インターフェイスは、以前のバージョンのインテル® MKL との互換性を提供します。アプリケーションやライブラリーで大規模なデータ配列の計算にインテル® MKL を使用する場合は、ILP64 インターフェイスを選択してください。

ILP64 インターフェイスと LP64 インターフェイスでは同じインクルード・ディレクトリーが使用されます。

LP64/ILP64 用のコンパイル

表 3-4 は、ILP64 および LP64 インターフェイス用のコンパイル方法を示しています。

表 3-4 ILP64 および LP64 インターフェイス用のコンパイル

Fortran	
`ILP64` 用のコンパイル	`ifort -i8 -I<mkl ディレクトリー>/include …`
`LP64` 用のコンパイル	`ifort -I<mkl ディレクトリー>/include …`
C/C++	
`ILP64` 用のコンパイル	`icc -DMKL_ILP64 -I<mkl ディレクトリー>/include …`
`LP64` 用のコンパイル	`icc -I<mkl ディレクトリー>/include …`

注意 : `-i8` または `-DMKL_ILP64` オプションを使用してコンパイルしたアプリケーションと LP64 ライブラリーをリンクすると、予測できない結果や誤出力が発生する場合があります。

ILP64 用のコーディング

ILP64 インターフェイスを使用していない場合、既存コードを変更する必要はありません。

ILP64 へ変更したり、ILP64 用に新しいコードを記述する場合は、インテル® MKL 関数とサブルーチンのパラメーターに適切な型を使用してください (表 3-5 を参照)。

表 3-5 整数型

	Fortran	*C/C++*
32 ビット整数	INTEGER*4 または INTEGER(KIND=4)	int
ILP64/LP64 のユニバーサル整数 : • 64 ビット (ILP64 の場合) • 32 ビット (その他の場合)	INTEGER KIND の指定なし	MKL_INT
ILP64/LP64 のユニバーサル整数 : • 64 ビット整数	INTEGER*8 または INTEGER(KIND=8)	MKL_INT64
ILP64/LP64 の FFT インターフェイス整数 :	INTEGER KIND の指定なし	MKL_LONG

インテル® MKL インクルード・ファイルの参照

『インテル® MKL リファレンス・マニュアル』では、ILP64 で 64 ビットになる整数パラメーターと 32 ビットのままのパラメーターは説明されていません。これを確認するには、ILP64 インターフェイスの詳細についてインクルード・ファイル、サンプル、およびテストを参照します。これらのファイルの場所については、表 3-2 を参照してください。最初に、表 A-2 にリストされているインクルード・ファイルを確認してください。

Fortran インターフェイスのみをサポートする一部の関数ドメイン (表 A-1 を参照) でも、インクルード・ディレクトリーに C/C++ 用のヘッダーファイルが提供されます。これらの *.h ファイルを使用すると、C/C++ コードから Fortran バイナリー・インターフェイスが利用可能になります。これらのファイルは、ILP64 の使用法を理解するために使用することもできます。

制限

すべてのインテル® MKL 関数ドメインは、以下の例外を除いて ILP64 プログラミングをサポートしています。

- インテル® MKL 用 FFTW インターフェイス :
  - FFTW 2.x ラッパーは ILP64 をサポートしていません。
  - FFTW 3.2 ラッパーは専用の関数セット plan_guru64 によって ILP64 をサポートしています。
- GMP* 数学関数は ILP64 をサポートしていません。

詳細なディレクトリー構造

次の表は、インテル® MKL のアーキテクチャー固有ディレクトリーの構造の詳細をリストしています。interfaces ディレクトリーのメイクファイルを使用してこれらのディレクトリーに生成できるインターフェイス・ライブラリーのリストは、「言語固有インターフェイスとインテル® MKL の使用」を参照してください。doc ディレクトリーの内容は、「ドキュメント・ディレクトリーの内容」を参照してください。benchmarks ディレクトリーのサブディレクトリーの内容は、「LINPACK ベンチマークと MP LINPACK ベンチマーク」を参照してください。インテル® MKL 10.2 では、インテル® MKL バージョン 9.x 以前とのリンク行の互換性のために提供されていたライブラリーが削除されました。

表 3-6 IA-32 アーキテクチャーのディレクトリー lib/32 の構造の詳細

ファイル	内容
スタティック・ライブラリー	
インターフェイス・レイヤー	
libmkl_blas95.a	インテル® Fortran コンパイラー用 Fortran-95 インターフェイス・ライブラリー (BLAS)
libmkl_gf.a	GNU Fortran コンパイラー用インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel.a	インテル® コンパイラー用インターフェイス・ライブラリー[1]
libmkl_lapack95.a	インテル® Fortran コンパイラー用 Fortran-95 インターフェイス・ライブラリー (LAPACK)
スレッド化レイヤー	
libmkl_gnu_thread.a	GNU Fortran および C コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_intel_thread.a	インテル® コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_pgi_thread.a	PGI* コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_sequential.a	逐次ライブラリー
計算レイヤー	
libmkl_cdft_core.a	FFT のクラスターバージョン
libmkl_core.a	IA-32 アーキテクチャー用カーネル・ライブラリー
libmkl_scalapack_core.a	ScaLAPACK ルーチン
libmkl_solver.a	(古いライブラリー) 下位互換性のための空のライブラリー
libmkl_solver_sequential.a	(古いライブラリー) 下位互換性のための空のライブラリー
RTL	
libguide.a	スタティック・リンク用 OpenMP レガシー・ランタイム・ライブラリー
libiomp5.a	スタティック・リンク用 OpenMP 互換ランタイム・ライブラリー
libmkl_blacs.a	以下の MPICH バージョンをサポートする BLACS ルーチン。 • Myricom* MPICH バージョン 1.2.5.10 • ANL* MPICH バージョン 1.2.5.2
libmkl_blacs_intelmpi.a	インテル® MPI 2.0/3.x および MPICH2 をサポートする BLACS ルーチン
libmkl_blacs_intelmpi20.a	lib/32/libmkl_blacs_intelmpi.a へのソフトリンク
libmkl_blacs_openmpi.a	OpenMPI をサポートする BLACS ルーチン

表 3-6 IA-32 アーキテクチャーのディレクトリー lib/32 の構造の詳細 (続き)

ファイル	内容
ダイナミック・ライブラリー	
インターフェイス・レイヤー	
libmkl_gf.so	GNU Fortran コンパイラー用インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel.so	インテル ® コンパイラー用インターフェイス・ライブラリー [1]
スレッド化レイヤー	
libmkl_gnu_thread.so	GNU Fortran および C コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_intel_thread.so[1]	インテル ® コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_pgi_thread.so	PGI コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_sequential.so	逐次ライブラリー
計算レイヤー	
libmkl_core.so	プロセッサー固有カーネル・ライブラリーのダイナミック・ロード用ライブラリー・ディスパッチャー
libmkl_def.so	デフォルト・カーネル・ライブラリー (インテル ® Pentium® プロセッサー、インテル ® Pentium® Pro プロセッサー、インテル ® Pentium® II プロセッサー、インテル ® Pentium® III プロセッサー)
libmkl_lapack.so	LAPACK および DSS/PARDISO ルーチンとドライバー
libmkl_p4.so	インテル ® Pentium® 4 プロセッサー用カーネル・ライブラリー
libmkl_p4m.so	インテル ® Core™ マイクロアーキテクチャー・ベースのプロセッサー用カーネル・ライブラリー (mkl_p4p.so が対応しているインテル ® Core™ Duo プロセッサーおよびインテル ® Core™ Solo プロセッサーを除く)
libmkl_p4m3.so	インテル ® Core™ i7 プロセッサー用カーネル・ライブラリー
libmkl_p4p.so	ストリーミング SIMD 拡張命令 3 (SSE3) 対応インテル ® Pentium® 4 プロセッサー用カーネル・ライブラリー (インテル ® Core™ Duo プロセッサーおよびインテル ® Core™ Solo プロセッサーを含む)
libmkl_scalapack_core.so	ScaLAPACK ルーチン
libmkl_vml_def.so	古いインテル® Pentium® プロセッサー用デフォルトカーネルの VML/VSL 部分
libmkl_vml_ia.so	新しいインテル ® アーキテクチャー・プロセッサー用 VML/VSL デフォルトカーネル
libmkl_vml_p4.so	インテル ® Pentium® 4 プロセッサー用カーネルの VML/VSL 部分
libmkl_vml_p4m.so	インテル ® Core™ マイクロアーキテクチャー・ベースのプロセッサー用 VML/VSL
libmkl_vml_p4m2.so	45nm Hi-k インテル ® Core™2 プロセッサー・ファミリーおよびインテル ® Xeon® プロセッサー・ファミリー用 VML/VSL
libmkl_vml_p4m3.so	インテル ® Core™ i7 プロセッサー用 VML/VSL
libmkl_vml_p4p.so	ストリーミング SIMD 拡張命令 3 (SSE3) 対応インテル ® Pentium® 4 プロセッサー用 VML/VSL
RTL	
libguide.so	ダイナミック・リンク用 OpenMP レガシー・ランタイム・ライブラリー
libiomp5.so	ダイナミック・リンク用 OpenMP 互換ランタイム・ライブラリー
libmkl_blacs_intelmpi.so	インテル ® MPI 2.0/3.x および MPICH2 をサポートする BLACS ルーチン
locale/en_US/mkl_msg.cat	インテル ® MKL メッセージカタログ (英語)
locale/ja_JP/mkl_msg.cat	インテル ® MKL メッセージカタログ (日本語)

1. Absoft* コンパイラーでのリンクにも使用されます。

表 3-7 インテル® 64 アーキテクチャーのディレクトリー lib/em64t の構造の詳細

ファイル	内容
スタティック・ライブラリー	
インターフェイス・レイヤー	
libmkl_blas95_ilp64.a	インテル® Fortran コンパイラー用 Fortran-95 インターフェイス・ライブラリー (BLAS)。ILP64 インターフェイスをサポート
libmkl_blas95_lp64.a	インテル® Fortran コンパイラー用 Fortran-95 インターフェイス・ライブラリー (BLAS)。LP64 インターフェイスをサポート
libmkl_gf_ilp64.a	GNU Fortran および Absoft コンパイラー用 ILP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_gf_lp64.a	GNU Fortran および Absoft コンパイラー用 LP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel_ilp64.a	インテル® コンパイラー用 ILP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel_lp64.a	インテル® コンパイラー用 LP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel_sp2dp.a	インテル® コンパイラー用 SP2DP インターフェイス・ライブラリー
libmkl_lapack95_ilp64.a	インテル® Fortran コンパイラー用 Fortran-95 インターフェイス・ライブラリー (LAPACK)。ILP64 インターフェイスをサポート
libmkl_lapack95_lp64.a	インテル® Fortran コンパイラー用 Fortran-95 インターフェイス・ライブラリー (LAPACK)。LP64 インターフェイスをサポート
スレッド化レイヤー	
libmkl_gnu_thread.a	GNU Fortran および C コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_intel_thread.a	インテル® コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_pgi_thread.a	PGI コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_sequential.a	逐次ライブラリー
計算レイヤー	
libmkl_cdft_core.a	FFT のクラスターバージョン
libmkl_core.a	インテル® 64 アーキテクチャー用カーネル・ライブラリー
libmkl_scalapack_ilp64.a	ILP64 インターフェイスをサポートする ScaLAPACK ルーチン・ライブラリー
libmkl_scalapack_lp64.a	LP64 インターフェイスをサポートする ScaLAPACK ルーチン・ライブラリー
libmkl_solver_ilp64.a	(古いライブラリー) 下位互換性のための空のライブラリー
libmkl_solver_ilp64_sequential.a	(古いライブラリー) 下位互換性のための空のライブラリー
libmkl_solver_lp64.a	(古いライブラリー) 下位互換性のための空のライブラリー
libmkl_solver_lp64_sequential.a	(古いライブラリー) 下位互換性のための空のライブラリー

表 3-7 インテル® 64 アーキテクチャーのディレクトリー lib/em64t の構造の詳細（続き）

ファイル	内容
RTL	
libguide.a	スタティック・リンク用 OpenMP レガシー・ランタイム・ライブラリー
libiomp5.a	スタティック・リンク用 OpenMP 互換ランタイム・ライブラリー
libmkl_blacs_ilp64.a	以下の MPICH バージョンをサポートする BLACS ルーチンの ILP64 バージョン。 • Myricom MPICH バージョン 1.2.5.10 • ANL MPICH バージョン 1.2.5.2
libmkl_blacs_intelmpi_ilp64.a	インテル® MPI 2.0/3.x および MPICH2 をサポートする BLACS ルーチンの ILP64 バージョン
libmkl_blacs_intelmpi_lp64.a	インテル® MPI 2.0/3.x、および MPICH2 をサポートする BLACS ルーチンの LP64 バージョン
libmkl_blacs_intelmpi20_ilp64.a	lib/em64t/libmkl_blacs_intelmpi_ilp64.a へのソフトリンク
libmkl_blacs_intelmpi20_lp64.a	lib/em64t/libmkl_blacs_intelmpi_lp64.a へのソフトリンク
libmkl_blacs_lp64.a	以下の MPICH バージョンをサポートする BLACS ルーチンの LP64 バージョン。 • Myricom MPICH バージョン 1.2.5.10 • ANL MPICH バージョン 1.2.5.2
libmkl_blacs_openmpi_ilp64.a	OpenMPI をサポートする BLACS ルーチンの ILP64 バージョン
libmkl_blacs_openmpi_lp64.a	OpenMPI をサポートする BLACS ルーチンの LP64 バージョン
libmkl_blacs_sgimpt_ilp64.a	SGI MPT をサポートする BLACS ルーチンの ILP64 バージョン
libmkl_blacs_sgimpt_lp64.a	SGI MPT をサポートする BLACS ルーチンの LP64 バージョン
ダイナミック・ライブラリー	
インターフェイス・レイヤー	
libmkl_gf_ilp64.so	GNU Fortran および Absoft コンパイラー用 ILP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_gf_lp64.so	GNU Fortran および Absoft コンパイラー用 LP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel_ilp64.so	インテル® コンパイラー用 ILP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel_lp64.so	インテル® コンパイラー用 LP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel_sp2dp.so	インテル® コンパイラー用 SP2DP インターフェイス・ライブラリー
スレッド化レイヤー	
libmkl_gnu_thread.so	GNU Fortran および C コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_intel_thread.so	インテル® コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_pgi_thread.so	PGI コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_sequential.so	逐次ライブラリー

表 3-7 インテル® 64 アーキテクチャーのディレクトリー lib/em64t の構造の詳細 (続き)

ファイル	内容
計算レイヤー	
libmkl_avx.so	インテル® Advanced Vector Extensions (インテル® AVX) 用に最適化されたカーネル
libmkl_core.so	プロセッサー固有カーネル・ライブラリーのダイナミック・ロード用ライブラリー・ディスパッチャー
libmkl_def.so	デフォルト・カーネル・ライブラリー
libmkl_mc.so	インテル® Core™ マイクロアーキテクチャー・ベースのプロセッサー用カーネル・ライブラリー
libmkl_mc3.so	インテル® Core™ i7 プロセッサー用カーネル・ライブラリー
libmkl_lapack.so	LAPACK および DSS/PARDISO ルーチンとドライバー
libmkl_scalapack_ilp64.so	ILP64 インターフェイスをサポートする ScaLAPACK ルーチン・ライブラリー
libmkl_scalapack_lp64.so	LP64 インターフェイスをサポートする ScaLAPACK ルーチン・ライブラリー
libmkl_vml_avx.so	インテル® Advanced Vector Extensions (インテル® AVX) 用に最適化された VML/VSL
libmkl_vml_def.so	デフォルトカーネルの VML/VSL 部分
libmkl_vml_mc.so	インテル® Core™ マイクロアーキテクチャー・ベースのプロセッサー用 VML/VSL
libmkl_vml_mc3.so	インテル® Core™ i7 プロセッサー用 VML/VSL
libmkl_vml_p4n.so	インテル® 64 アーキテクチャー対応インテル® Xeon® プロセッサー用 VML/VSL
libmkl_vml_mc2.so	45nm Hi-k インテル® Core™2 プロセッサー・ファミリーおよびインテル® Xeon® プロセッサー・ファミリー用 VML/VSL
RTL	
libguide.so	ダイナミック・リンク用 OpenMP レガシー・ランタイム・ライブラリー
libiomp5.so	ダイナミック・リンク用 OpenMP 互換ランタイム・ライブラリー
libmkl_intelmpi_ilp64.so	インテル® MPI 2.0/3.x および MPICH2 をサポートする BLACS ルーチンの ILP64 バージョン
libmkl_intelmpi_lp64.so	インテル® MPI 2.0/3.x、および MPICH2 をサポートする BLACS ルーチンの LP64 バージョン
locale/en_US/mkl_msg.cat	インテル® MKL メッセージカタログ (英語)
locale/ja_JP/mkl_msg.cat	インテル® MKL メッセージカタログ (日本語)

表 3-8 IA-64 アーキテクチャーのディレクトリー lib/64 の構造の詳細

ファイル	内容
スタティック・ライブラリー	
インターフェイス・レイヤー	
libmkl_blas95_ilp64.a	インテル® Fortran コンパイラー用 Fortran-95 インターフェイス・ライブラリー (BLAS)。ILP64 インターフェイスをサポート
libmkl_blas95_lp64.a	インテル® Fortran コンパイラー用 Fortran-95 インターフェイス・ライブラリー (BLAS)。LP64 インターフェイスをサポート
libmkl_intel_ilp64.a	インテル® コンパイラー用 ILP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel_lp64.a	インテル® コンパイラー用 LP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel_sp2dp.a	インテル® コンパイラー用 SP2DP インターフェイス・ライブラリー

表 3-8 IA-64 アーキテクチャーのディレクトリー lib/64 の構造の詳細 (続き)

ファイル	内容
libmkl_gf_ilp64.a	GNU Fortran コンパイラー用 ILP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_gf_lp64.a	GNU Fortran コンパイラー用 LP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_lapack95_ilp64.a	インテル® Fortran コンパイラー用 Fortran-95 インターフェイス・ライブラリー (LAPACK)。ILP64 インターフェイスをサポート
libmkl_lapack95_lp64.a	インテル® Fortran コンパイラー用 Fortran-95 インターフェイス・ライブラリー (LAPACK)。LP64 インターフェイスをサポート
スレッド化レイヤー	
libmkl_intel_thread.a	インテル® コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_gnu_thread.a	GNU Fortran および C コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_sequential.a	逐次ライブラリー
計算レイヤー	
libmkl_cdft_core.a	FFT のクラスターバージョン
libmkl_core.a	IA-64 アーキテクチャー用カーネル・ライブラリー
libmkl_scalapack_ilp64.a	ILP64 インターフェイスをサポートする ScaLAPACK ルーチン・ライブラリー
libmkl_scalapack_lp64.a	LP64 インターフェイスをサポートする ScaLAPACK ルーチン・ライブラリー
libmkl_solver_ilp64.a	(古いライブラリー) 下位互換性のための空のライブラリー
libmkl_solver_ilp64_sequential.a	(古いライブラリー) 下位互換性のための空のライブラリー
libmkl_solver_lp64.a	(古いライブラリー) 下位互換性のための空のライブラリー
libmkl_solver_lp64_sequential.a	(古いライブラリー) 下位互換性のための空のライブラリー
RTL	
libguide.a	スタティック・リンク用 OpenMP レガシー・ランタイム・ライブラリー
libiomp5.a	スタティック・リンク用 OpenMP 互換ランタイム・ライブラリー
libmkl_blacs_ilp64.a	以下の MPICH バージョンをサポートする BLACS ルーチンの ILP64 バージョン。 • Myricom MPICH バージョン 1.2.5.10 • ANL MPICH バージョン 1.2.5.2
libmkl_blacs_intelmpi_ilp64.a	インテル® MPI 2.0/3.x および MPICH2 をサポートする BLACS ルーチンの ILP64 バージョン
libmkl_blacs_intelmpi_lp64.a	インテル® MPI 2.0/3.x および MPICH2 をサポートする BLACS ルーチンの LP64 バージョン
libmkl_blacs_intelmpi20_ilp64.a	lib/64/libmkl_blacs_intelmpi_ilp64.a へのソフトリンク
libmkl_blacs_intelmpi20_lp64.a	lib/64/libmkl_blacs_intelmpi_lp64.a へのソフトリンク
libmkl_blacs_lp64.a	以下の MPICH バージョンをサポートする BLACS ルーチンの LP64 バージョン。 • Myricom MPICH バージョン 1.2.5.10 • ANL MPICH バージョン 1.2.5.2
libmkl_blacs_openmpi_ilp64.a	OpenMPI をサポートする BLACS ルーチンの ILP64 バージョン
libmkl_blacs_openmpi_lp64.a	OpenMPI をサポートする BLACS ルーチンの LP64 バージョン
libmkl_blacs_sgimpt_ilp64.a	SGI MPT をサポートする BLACS ルーチンの ILP64 バージョン
libmkl_blacs_sgimpt_lp64.a	SGI MPT をサポートする BLACS ルーチンの LP64 バージョン

表 3-8 IA-64 アーキテクチャーのディレクトリー lib/64 の構造の詳細 (続き)

ファイル	内容
ダイナミック・ライブラリー	
インターフェイス・レイヤー	
libmkl_gf_ilp64.so	GNU Fortran コンパイラー用 ILP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_gf_lp64.so	GNU Fortran コンパイラー用 LP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel_ilp64.so	インテル® コンパイラー用 ILP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel_lp64.so	インテル® コンパイラー用 LP64 インターフェイス・ライブラリー
libmkl_intel_sp2dp.so	インテル® コンパイラー用 SP2DP インターフェイス・ライブラリー
スレッド化レイヤー	
libmkl_gnu_thread.so	GNU Fortran および C コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_intel_thread.so	インテル® コンパイラー用スレッド化ライブラリー
libmkl_sequential.so	逐次ライブラリー
計算レイヤー	
libmkl_core.so	プロセッサー固有カーネル・ライブラリーのダイナミック・ロード用ライブラリー・ディスパッチャー
libmkl_i2p.so	IA-64 アーキテクチャー用カーネル・ライブラリー
libmkl_lapack.so	LAPACK および DSS/PARDISO ルーチンとドライバー
libmkl_scalapack_ilp64.so	ILP64 インターフェイスをサポートする ScaLAPACK ルーチン・ライブラリー
libmkl_scalapack_lp64.so	LP64 インターフェイスをサポートする ScaLAPACK ルーチン・ライブラリー
libmkl_vml_i2p.so	IA-64 アーキテクチャー用 VML カーネル
RTL	
libguide.so	ダイナミック・リンク用 OpenMP レガシー・ランタイム・ライブラリー
libiomp5.so	ダイナミック・リンク用 OpenMP 互換ランタイム・ライブラリー
libmkl_blacs_intelmpi_ilp64.so	インテル® MPI 2.0/3.x および MPICH2 をサポートする BLACS ルーチンの ILP64 バージョン
libmkl_blacs_intelmpi_lp64.so	インテル® MPI 2.0/3.x および MPICH2 をサポートする BLACS ルーチンの LP64 バージョン
locale/ja_JP/mkl_msg.cat	インテル® MKL メッセージカタログ (英語)
locale/ja_JP/mkl_msg.cat	インテル® MKL メッセージカタログ (日本語)

インテル® MKL ドキュメントへのアクセス

このセクションでは、インテル® MKL ドキュメント・ディレクトリーの内容とライブラリーの man ページへのアクセス方法を説明します。

ドキュメント・ディレクトリーの内容

表 3-9 は、インテル® MKL インストール・ディレクトリーの doc サブディレクトリーの内容をリストしています。

表 3-9 doc ディレクトリーの内容

ファイル名	内容
Install.txt	インテル® MKL インストール・ガイド

表 3-9 doc ディレクトリーの内容 (続き)

ファイル名	内容
mkl_documentation.htm	インテル® MKL ドキュメントの概要とリンク
mklEULA.txt	インテル® MKL の使用許諾契約書
mklman.pdf	インテル® MKL リファレンス・マニュアル
mklman90_j.pdf	インテル® MKL 9.0 リファレンス・マニュアル (日本語)
mklsupport.txt	テクニカルサポートで使用するパッケージ番号の情報
redist.txt	再配布可能ファイルのリスト
Release_Notes.pdf	インテル® MKL リリースノート
userguide.pdf	インテル® MKL ユーザーズガイド (本ドキュメント)

man ページの表示

インテル® MKL の man ページは、表 3-2 で示すディレクトリーにあります。man ページを使用するには、このディレクトリーを MANPATH 環境変数に追加してください。「はじめに」の「環境変数の設定」の手順を実行していれば、これは自動で行われます。

インテル® MKL 関数の man ページを表示するには、コマンドシェルで次のコマンドを入力します。

man < *関数ベース名* >

本リリースでは、< *関数ベース名* > にデータ型、精度、または関数ドメインを示す接頭辞を省略した関数名を入力してください。

例 :

- BLAS 関数 ddot の場合、man dot と入力します。
- ScaLAPACK 関数 pzgeql2 の場合、man pgeql2 と入力します。
- FFT 関数 DftiCommitDescriptor の場合、man CommitDescriptor と入力します。

メモ : man コマンドの関数名の大文字と小文字は区別されます。

開発環境の構成 4

本章は、インテル® マス・カーネル・ライブラリー (インテル® MKL) を使用するための開発環境の構成方法を説明します。

環境変数 INCLUDE、MKLROOT、LD_LIBRARY_PATH、MANPATH、LIBRARY_PATH、CPATH、FPATH、および NLSPATH の設定方法については、第 2 章を参照してください。これらの変数をスタートアップ時に自動的に設定する方法は、「環境変数の自動設定」セクションを参照してください。

スレッド化用に環境変数を設定する方法についての情報は、「OpenMP 環境変数を使用したスレッド数の設定」を参照してください。

環境変数の自動設定

環境変数 INCLUDE、MKLROOT、LD_LIBRARY_PATH、MANPATH、LIBRARY_PATH、CPATH、FPATH、および NLSPATH をスタートアップ時に自動的に設定するには、シェル・プロファイルに mklvars*.*sh を追加します。これを行うと、ログインするたびに適切なインテル® MKL ディレクトリーのパスが設定されます。ローカル・ユーザー・アカウントで以下のファイルを編集し、変数をエクスポートする直前のパスの設定セクションに適切なスクリプトを追加してください。

- bash:

  ~/.bash_profile、~/.bash_login または ~/.profile

  ```
  # bash の MKL 環境を設定します。
  .<MKL のインストール先の絶対パス>/tools/environment/mklvars<arch>.sh
  ```

- sh:

  ~/.profile

  ```
  # sh の MKL 環境を設定します。
  .<MKL のインストール先の絶対パス>/tools/environment/mklvars<arch>.sh
  ```

- csh:

  ~/.login

  ```
  # csh の MKL 環境を設定します。
  .<MKL のインストール先の絶対パス>/tools/environment/mklvars<arch>.csh
  ```

上記の mklvars<arch> は、mklvars32、mklvarsem64t または mklvars64 に置き換えてください。

スーパーユーザー権限がある場合、同じコマンドを /etc/profile (bash および sh の場合) または /etc/csh.login (csh の場合) のシステムファイルに追加してもかまいません。

インテル® MKL をアンインストールする前に、ログイン時の問題を回避するため、すべてのプロファイル・ファイルから上記のコマンドを削除してください。

インテル® MKL を Eclipse* IDE CDT でリンクする場合の構成

このセクションでは、インテル® MKL を Eclipse IDE C/C++ 開発ツール (CDT) 3.x および 4.0 でリンクする場合の構成を説明します。

ヒント : インテル® MKL を CDT とリンクすると、Eclipse が提供する *コードアシスト*機能を利用できます。*Eclipse ヘルプの コード / コードアシスト*の説明を参照してください。

Eclipse IDE CDT 4.0 でリンクする場合の構成

Eclipse IDE CDT 4.0 を構成する前に、自動メイクファイル生成を有効にします。

インテル® MKL を Eclipse CDT 4.0 でリンクするには、以下の手順を実行してください。

1. ツールチェイン / コンパイラーの統合でインクルード・パス・オプションをサポートしている場合、[C/C++ General] > [Paths and Symbols] > [Includes] を開いて、インテル® MKL インクルード・パス (*<mkl ディレクトリー>*/include) を設定します。
2. ツールチェイン / コンパイラーの統合でライブラリー・パス・オプションをサポートしている場合、[C/C++ General] > [Paths and Symbols] > [Library Paths] を開いて、ターゲット・アーキテクチャー用のインテル® MKL ライブラリーのパス (例えば、*<mkl ディレクトリー>*/lib/em64t) を設定します。
3. [C/C++ Build] > [Settings] > [Tool Settings] を開いて、アプリケーションとリンクするインテル® MKL ライブラリーの名前 (例えば、mkl_intel_lp64, mkl_intel_thread_lp64、mkl_core、および iomp5 を指定します。ライブラリー・ファイルの名前ではなく、ライブラリー名を指定するコンパイラーでは、"lib" 接頭辞と "a" 拡張子は省略してください。ライブラリーの選択方法は、「リンクするライブラリーの選択」を参照してください。ライブラリーを指定する際の項目設定の名前はコンパイラーの統合に依存します。

Eclipse IDE CDT 3.x の構成

インテル® MKL を Eclipse IDE CDT 3.x でリンクするには、以下の手順を実行してください。

- Standard Make プロジェクトの場合 :
  1. [C/C++ Include Paths and Symbols] プロパティー・ページを開いて、インテル® MKL インクルード・パス (*<mkl ディレクトリー>*/include) を設定します。
  2. [C/C++ Project Paths] > [Libraries] を開いて、アプリケーションとリンクするインテル® MKL ライブラリーを設定します (例えば、
     <mkl ディレクトリー>/lib/em64t/libmkl_intel_lp64.a、
     <mkl ディレクトリー>/lib/em64t/libmkl_intel_thread.a、および
     <mkl ディレクトリー>/lib/em64t/libmkl_core.a)。
     ライブラリーの選択方法は、「リンクするライブラリーの選択」を参照してください。

  Standard Make では、上記の設定は CDT の内部的な機能でのみ必要です。コンパイラー / リンカーはこれらの情報を自動的に取得しないため、メイクファイルで直接指定する必要があります。
- Managed Make プロジェクトの場合、特定のビルド用に設定を指定できます。次の操作を行ってください。

1. [C/C++ Build] > [Tool Settings] を開きます。指定する必要のある設定はすべて、このページに含まれています。特定の設定の名前はコンパイラーの統合に依存するため、ここでは明記していません。
2. コンパイラーの統合でインクルード・パス・オプションをサポートしている場合、インテル® MKL インクルード・パス (*<mkl ディレクトリー>*/include) を設定します。
3. コンパイラーの統合でライブラリー・パス・オプションをサポートしている場合、ターゲット・アーキテクチャー用のインテル® MKL ライブラリーのパス (例えば、*<mkl ディレクトリー>*/lib/em64t) を設定します。
4. アプリケーションとリンクするインテル® MKL ライブラリーの名前 (例えば、mkl_intel_lp64、mkl_intel_thread_lp64、mkl_core、および iomp5) を指定します。ライブラリー・ファイルの名前ではなく、ライブラリー名を指定するコンパイラーでは、"lib" 接頭辞と "a" 拡張子は省略してください。ライブラリーの選択方法は、「リンクするライブラリーの選択」を参照してください。

Out-of-Core (OOC) DSS/PARDISO* ソルバーの構成

OOC DSS/PARDISO ソルバーの構成ファイルを使用するときは、ファイルのパス行の最大長が 1000 文字であることに注意してください。

詳細は、『インテル® MKL リファレンス・マニュアル』の「スパース・ソルバー・ルーチン」の章を参照してください。

アプリケーションとインテル ® マス・カーネル・ライブラリーのリンク

5

本章は、アプリケーションとインテル ® マス・カーネル・ライブラリー (インテル ® MKL) Linux* OS 版のリンクについて説明します。アプリケーションとリンクするライブラリーの情報、およびリンク例が含まれます。また、カスタム共有オブジェクトの構築についても説明します。

インテル ® MKL をリンクするには、インターフェイス・レイヤーから 1 つのライブラリー、スレッド化レイヤーから 1 つのライブラリー、計算レイヤー・ライブラリーを選択します。必要な場合は、ランタイム・ライブラリーを追加します。表 5-1 に、アプリケーションでリンクする一般的なインテル ® MKL ライブラリーのセットのリストを示します。

表 5-1　リンク行にリストする一般的なライブラリー

	インターフェイス・レイヤー	スレッド化レイヤー	計算レイヤー	RTL
IA-32 アーキテクチャー、スタティック・リンク	libmkl_intel.a	libmkl_intel_thread.a	libmkl_core.a	libiomp5.so
IA-32 アーキテクチャー、ダイナミック・リンク	libmkl_intel.so	libmkl_intel_thread.so	libmkl_core.so	libiomp5.so
インテル ® **64** および **IA-64** アーキテクチャー、スタティック・リンク	libmkl_intel_lp64.a	libmkl_intel_thread.a	libmkl_core.a	libiomp5.so
インテル ® **64** および **IA-64** アーキテクチャー、ダイナミック・リンク	libmkl_intel_lp64.so	libmkl_intel_thread.so	libmkl_core.so	libiomp5.so

上記のライブラリーの例外および代替情報については、「リンクするライブラリーの選択」を参照してください。

以下の項目も参照してください。

リンク行のライブラリーのリスト

インテル® マス・カーネル・ライブラリー・クラスター・ソフトウェアの使用

リンク行のライブラリーのリスト

インテル® MKL ライブラリーをリンクするには、以下のようにリンク行にパスとライブラリーを指定します。

メモ : 以下の構文はダイナミック・リンク用のものです。スタティック・リンクの場合は、"-l" で始まるライブラリーをライブラリー・ファイルのパスに置換してください。例えば、-lmkl_core を $MKLPATH/libmkl_core.a ($MKLPATH は適切なユーザー定義環境変数) に置き換えます。「リンクの例」セクションの例を参照してください。

< *リンクするファイル* >

-L<*MKL パス* > -I<*MKL インクルード* >
[-I<*MKL インクルード* >/{32|em64t|{ilp64|lp64}|64/{ilp64|lp64}}]
[-lmkl_blas{95|95_ilp64|95_lp64}]
[-lmkl_lapack{95|95_ilp64|95_lp64}]

[< *クラスター・コンポーネント* >]

-lmkl_{intel|intel_ilp64|intel_lp64|intel_sp2dp|gf|gf_ilp64|gf_lp64}

-lmkl_{intel_thread|gnu_thread|pgi_thread|sequential}

[-lmkl_lapack] -lmkl_core

{-liomp5|-lguide} [-lpthread] [-lm]

この構文の使用法の詳細およびインテル® MKL の使用法に応じた推奨ライブラリーについては、「リンクするライブラリーの選択」を参照してください。

< *クラスター・コンポーネント* > ライブラリーのリンクについては、「インテル® マス・カーネル・ライブラリー・クラスター・ソフトウェアの使用」を参照してください。

スタティック・リンクでは、クラスター・コンポーネント、インターフェイス、スレッド化、および計算ライブラリーをグループ化シンボルで囲みます (例えば、-Wl,--start-group $MKLPATH/libmkl_cdft_core.a $MKLPATH/libmkl_blacs_intelmpi_ilp64.a $MKLPATH/libmkl_intel_ilp64.a $MKLPATH/libmkl_intel_thread.a $MKLPATH/libmkl_core.a -Wl,--end-group)。「リンクの例」セクションの例を参照してください。

リンク行でライブラリーをリストする順序は非常に重要です (グループ化シンボルで囲まれたライブラリーを除く)。

リンクするライブラリーの選択

このセクションでは、インテル® MKL の使用法に応じて、リンクするライブラリーを推奨します。リンクの詳細は、サブセクションで説明します。

Fortran 95 インターフェイス・ライブラリーのリンク

スレッド化ライブラリーのリンク

計算ライブラリーのリンク

コンパイラー・サポート RTL のリンク

Fortran 95 インターフェイス・ライブラリーのリンク

libmkl_blas95*.a および libmkl_lapack95*.a ライブラリーには、コンパイラーに依存する、BLAS と LAPACK 用の Fortran 95 インターフェイスがそれぞれ含まれています。インテル® MKL パッケージでは、これらのライブラリーは、インテル® Fortran コンパイラー用に事前に構築されています。異なるコンパイラーを使用する場合は、インターフェイスを使用する前に、これらのライブラリーを構築してください。詳細は、「Fortran 95 インターフェイス、LAPACK および BLAS」および「コンパイラー依存の関数と Fortran 90 モジュール」を参照してください。

スレッド化ライブラリーのリンク

インテル® MKL がサポートしているいくつかのコンパイラーは、スレッド化に OpenMP* テクノロジーを使用しています。インテル® MKL は、バージョン 10.0 から、これらのコンパイラーが提供する OpenMP の実装をサポートしています。このサポートを使用するには、スレッド化レイヤーとコンパイラー・サポート・ランタイム・ライブラリー (RTL) にある適切なライブラリーをリンクする必要があります。

スレッド化レイヤー: インテル® MKL スレッド化ライブラリーには、それぞれのコンパイラー (Linux OS 上のインテル、gnu および PGI* コンパイラー) によってコンパイルされた同一のコードが含まれています。

RTL: このレイヤーには、インテル® コンパイラーのランタイム・ライブラリー (OpenMP 互換ランタイム・ライブラリー libiomp および OpenMP レガシー・ランタイム・ライブラリー libguide) が含まれます。互換ライブラリー libiomp は libguide の拡張で、追加のスレッド化コンパイラー (Linux OS の場合 GNU) をサポートします。つまり、GNU コンパイラーを使用してスレッド化されたプログラムは、インテル® MKL および libiomp と安全にリンクすることができます。このため、libguide ではなく libiomp を使用することを推奨します。

表 5-2 は、使用されているスレッド化コンパイラーと状況別に、インテル® MKL を使用した場合に選択するスレッド化ライブラリーと RTL を示したものです (スタティックのみ)。

表 5-2 スレッド化ライブラリーの選択

コンパイラー	マルチスレッド?	スレッド化レイヤー	RTL を推奨	内容
Intel	問題になりません	libmkl_intel_thread.a	libiomp5.so	
PGI	○	libmkl_pgi_thread.a または libmkl_sequential.a	PGI が提供	libmkl_sequential.a を使用すると、インテル® MKL 呼び出しからスレッド化が削除されます。
PGI	×	libmkl_intel_thread.a	libiomp5.so	
PGI	×	libmkl_pgi_thread.a	PGI が提供	
PGI	×	libmkl_sequential.a	なし	
gnu	○	libmkl_gnu_thread.a	libiomp5.so または GNU OpenMP ランタイム・ライブラリー	libiomp5 は優れたスケーリング・パフォーマンスを提供します。
gnu	○	libmkl_sequential.a	なし	
gnu	×	libmkl_intel_thread.a	libiomp5.so	
その他	○	libmkl_sequential.a	なし	
その他	×	libmkl_intel_thread.a	libiomp5.so	

計算ライブラリーのリンク

一般的に、レイヤー・リンク・モデルでは、アプリケーションを 1 つの計算レイヤー・ライブラリーとリンクする必要があります。しかし、特定のインテル® MKL 関数ドメインでは複数の計算リンク・ライブラリーが必要です。

インテル® MKL 関数ドメイン別に、リンク行で指定する必要のある計算レイヤー・ライブラリーを表 5-3 にリストします。ScaLAPACK とクラスター FFT のリンクについては、「ScaLAPACK およびクラスター FFT とのリンク」も参照してください。

表 5-3　リンクする計算ライブラリー、関数ドメイン別

	IA-32 アーキテクチャー		インテル® 64 または IA-64 アーキテクチャー	
関数ドメイン	**スタティック**	**ダイナミック**	**スタティック**	**ダイナミック**
BLAS、CBLAS、スパース BLAS、LAPACK、VML、VSL、反復法スパースソルバー、Trust Region ソルバー、FFT、三角変換関数、ポアソン・ライブラリー	libmkl_core.a	libmkl_core.so	libmkl_core.a	libmkl_core.so
直接法スパースソルバー / PARDISO ソルバー	libmkl_core.a	libmkl_lapack.so libmkl_core.so	libmkl_core.a	libmkl_lapack.so libmkl_core.so
ScaLAPACK[1]	libmkl_scalapack_core.a libmkl_core.a	libmkl_scalapack_core.so libmkl_lapack.so libmkl_core.so	以下を参照	以下を参照
ScaLAPACK、LP64 インターフェイス[1]	n/a	n/a	libmkl_scalapack_lp64.a libmkl_core.a	libmkl_scalapack_lp64.so libmkl_lapack.so libmkl_core.so
ScaLAPACK、ILP64 インターフェイス[1]	n/a	n/a	libmkl_scalapack_ilp64.a libmkl_lapack.so libmkl_core.a	libmkl_scalapack_ilp64.so libmkl_lapack.so libmkl_core.so
クラスターフーリエ変換関数[1]	libmkl_cdft_core.a libmkl_core.a	n/a	libmkl_cdft_core.a libmkl_core.a	n/a

1. 使用されている MPI に対応する BLACS ルーチンのライブラリーも追加する。詳細は、「ScaLAPACK およびクラスター FFT とのリンク」を参照。

以下の項目も参照してください。

コンパイラー・サポート RTL のリンク

コンパイラー・サポート RTL のリンク

OpenMP 互換ランタイム・ライブラリー `libiomp` および OpenMP レガシー・ランタイム・ライブラリー `libguide` は、ダイナミックにリンクすることを強く推奨します。ほかのライブラリーがスタティックにリンクされている場合でも、`libiomp` および `libguide` はダイナミックにリンクします。

OpenMP ランタイム・ライブラリーのスタティック・リンクは、ライブラリーの複数のコピーにソフトウェアがリンクされるため、推奨しません。リンクすると、パフォーマンス問題 (多すぎるスレッド数) が発生し、複数のコピーが初期化されるときに正当性問題が発生します。

`libiomp/libguide` をスタティックにリンクする場合、リンクする `libiomp/libguide` のバージョンは使用するコンパイラーによって異なります。

- インテル® コンパイラーを使用する場合、コンパイラーに含まれているバージョンの `libiomp/libguide` を (`-openmp` オプションを使用して) リンクします。
- インテル® コンパイラーを使用しない場合、インテル® MKL に含まれているバージョンの `libiomp/libguide` をリンクします。

`libiomp/libguide` のダイナミック・バージョンをリンクする場合 (推奨)、つまり `libiomp5.so` または `libguide.so` を使用する場合、`LD_LIBRARY_PATH` が正しく定義されていることを確認してください。詳細は、「環境変数の設定」を参照してください。

システム・ライブラリーのリンク

インテル® MKL FFT、三角変換、またはポアソン、ラプラス、およびヘルムホルツ・ソルバー・ルーチンを使用するには、リンク行に "`-lm`" を追加して数学サポート・システム・ライブラリーをリンクします。

Linux OS では、`libiomp/libguide` はどちらもマルチスレッド用の標準 `pthread` ライブラリーに依存します。`libiomp/libguide` が必要な場合、リンク行の最後に `-lpthread` を追加する必要があります (ライブラリーをリストする順序は非常に重要です)。

リンクの例

このセクションでは、IA-32、インテル® 64、および IA-64 アーキテクチャー・ベースのシステムでインテル® コンパイラーを使用してリンクする場合の例を紹介します。

以下の例では、`.f` Fortran ソースファイルを使用しています。C/C++ ユーザーは、ソースファイルを `.cpp` (C++) または `.c` (C) に、`ifort` リンカーを `icc` に変更してください。

メモ :「はじめに」の「環境変数の設定」にある手順を実行した場合は、すべての例で `-I$MKLINCLUDE` と、ダイナミック・リンクの例で `-L$MKLPATH` を省略できます。

「ScaLAPACK およびクラスター FFT とのリンク例」も参照してください。

正しいリンク行を設定するために、Web ベースのリンク・アドバイザーが用意されています。http://software.intel.com/en-us/articles/intel-mkl-link-line-advisor (英語) にアクセスしてください。

IA-32 アーキテクチャー・ベースのシステムでのリンク

この例では、以下のように仮定しています。

```
MKLPATH=$MKLROOT/lib/ia32
MKLINCLUDE=$MKLROOT/include
```

1. myprog.f とインテル® MKL の並列バージョンのスタティック・リンク。
```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE
-Wl,--start-group $MKLPATH/libmkl_intel.a
$MKLPATH/libmkl_intel_thread.a $MKLPATH/libmkl_core.a -Wl,--end-group
-liomp5 -lpthread
```
2. myprog.f とインテル® MKL の並列バージョンのダイナミック・リンク。
```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE
-lmkl_intel -lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5 -lpthread
```
3. myprog.f とインテル® MKL の逐次バージョンのスタティック・リンク。
```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE
-Wl,--start-group $MKLPATH/libmkl_intel.a
$MKLPATH/libmkl_sequential.a $MKLPATH/libmkl_core.a -Wl,--end-group
-lpthread
```
4. myprog.f とインテル® MKL の逐次バージョンのダイナミック・リンク。
```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE
-lmkl_intel -lmkl_sequential -lmkl_core -lpthread
```
5. myprog.f、Fortran 95 LAPACK インターフェイス[1]、インテル® MKL の並列バージョンのスタティック・リンク。
```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE -I$MKLINCLUDE/32 -lmkl_lapack95
-Wl,--start-group $MKLPATH/libmkl_intel.a
$MKLPATH/libmkl_intel_thread.a $MKLPATH/libmkl_core.a -Wl,--end-group
-liomp5 -lpthread
```
6. myprog.f、Fortran 95 BLAS インターフェイス[1]、インテル® MKL の並列バージョンのスタティック・リンク。
```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE -I$MKLINCLUDE/32 -lmkl_blas95
-Wl,--start-group $MKLPATH/libmkl_intel.a
$MKLPATH/libmkl_intel_thread.a $MKLPATH/libmkl_core.a -Wl,--end-group
-liomp5 -lpthread
```

インテル® 64 および IA-64 アーキテクチャー・ベースのシステムでのリンク

この例では、以下のように仮定しています。
MKLPATH=$MKLROOT/lib/em64t (インテル® 64 アーキテクチャーの場合)
MKLPATH=$MKLROOT/lib/ia64 (IA-64 アーキテクチャーの場合)
MKLINCLUDE=$MKLROOT/include

1. myprog.f と LP64 インターフェイスをサポートしているインテル® MKL の並列バージョンのスタティック・リンク。
```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE
-Wl,--start-group $MKLPATH/libmkl_intel_lp64.a
$MKLPATH/libmkl_intel_thread.a $MKLPATH/libmkl_core.a -Wl,--end-group
-liomp5 -lpthread
```
2. myprog.f と LP64 インターフェイスをサポートしているインテル® MKL の並列バージョンのダイナミック・リンク。
```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE
-lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5 -lpthread
```
3. myprog.f と LP64 インターフェイスをサポートしているインテル® MKL の逐次バージョンのスタティック・リンク。

1. Fortran 95 LAPACK および BLAS インターフェイス・ライブラリーの構築方法については、「Fortran 95 インターフェイス、LAPACK および BLAS」を参照してください。

```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE
-Wl,--start-group $MKLPATH/libmkl_intel_lp64.a
$MKLPATH/libmkl_sequential.a $MKLPATH/libmkl_core.a -Wl,--end-group
-lpthread
```

4. myprog.f と LP64 インターフェイスをサポートしているインテル® MKL の逐次バージョンのダイナミック・リンク。

```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE
-lmkl_intel_lp64 -lmkl_sequential -lmkl_core -lpthread
```

5. myprog.f と ILP64 インターフェイスをサポートしているインテル® MKL の並列バージョンのスタティック・リンク。

```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE
-Wl,--start-group $MKLPATH/libmkl_intel_ilp64.a
$MKLPATH/libmkl_intel_thread.a $MKLPATH/libmkl_core.a -Wl,--end-group
-liomp5 -lpthread
```

6. myprog.f と ILP64 インターフェイスをサポートしているインテル® MKL の並列バージョンのダイナミック・リンク。

```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE
-lmkl_intel_ilp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5 -lpthread
```

7. myprog.f、Fortran 95 LAPACK インターフェイス[1]、LP64 インターフェイスをサポートしているインテル® MKL の並列バージョンのスタティック・リンク。

```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE -I$MKLINCLUDE/em64t/lp64
-lmkl_lapack95_lp64
-Wl,--start-group $MKLPATH/libmkl_intel_lp64.a
$MKLPATH/libmkl_intel_thread.a $MKLPATH/libmkl_core.a -Wl,--end-group
-liomp5 -lpthread
```

8. myprog.f、Fortran 95 BLAS インターフェイス[1]、LP64 インターフェイスをサポートしているインテル® MKL の並列バージョンのスタティック・リンク。

```
ifort myprog.f -L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE -I$MKLINCLUDE/em64t/lp64
-lmkl_blas95_lp64
-Wl,--start-group $MKLPATH/libmkl_intel_lp64.a
$MKLPATH/libmkl_intel_thread.a $MKLPATH/libmkl_core.a -Wl,--end-group
-liomp5 -lpthread
```

カスタム共有オブジェクトの構築

カスタム共有オブジェクトを使用すると、特定の問題を解くために必要な関数のコレクションをインテル® MKL ライブラリーから減らすことができるため、ディスク容量を節約できます。また、独自のダイナミック・ライブラリーを構築できます。

インテル® MKL カスタム共有オブジェクト・ビルダー

カスタム共有オブジェクトビルダーを使用すると、選択した関数を含むダイナミック・ライブラリー (共有オブジェクト) を作成できます。ビルダーは、tools/builder ディレクトリーにあります。ビルダーには、メイクファイルおよび定義ファイル (関数のリスト) が含まれています。

1. Fortran 95 LAPACK および BLAS インターフェイス・ライブラリーの構築方法については、「Fortran 95 インターフェイス、LAPACK および BLAS」を参照してください。

メモ : インテル® MKL スタティック・ライブラリーのオブジェクトは位置独立コード (PIC) であり、スタティック・ライブラリーでは一般的ではありません。カスタム共有オブジェクト・ビルダーは、スタティック・ライブラリーのオブジェクト・ファイルを使用して、インテル® MKL 関数のサブセットから共有オブジェクトを作成できます。

ビルダーの使用

カスタム共有オブジェクトを構築するには、次のコマンドを実行します。

`make target [<`*オプション*`>]`

`target` は次のいずれかです。

- `ia32` - IA-32 アーキテクチャー対応プロセッサー
- `em64t` - インテル® 64 アーキテクチャー対応プロセッサー
- `ipf` - IA-64 アーキテクチャー対応プロセッサー

<オプション> プレースホルダーは、メイクファイルで使用されるマクロを定義するパラメーターのリストです。

`interface = {lp64|ilp64}`

インテル® 64 または IA-64 アーキテクチャーで LP64 または ILP64 プログラミング・インターフェイスを使用するかどうかを定義します。デフォルト値は `lp64` です。

`threading = {parallel|sequential}`

インテル® MKL 関数の使用モード (スレッド化モードまたは逐次モード) を定義します。デフォルト値は `parallel` です。

`export = <`*file_name*`>`

共有オブジェクトに含まれるエントリーポイント関数のリストを含むファイルの完全な名前を指定します。デフォルト名は `user_list` (拡張子なし) です。

`name = <`*so_name*`>`

作成するライブラリーの名前を指定します。デフォルトでは、作成するライブラリーの名前は `mkl_custom.so` です。

`xerbla = <`*error_handler*`>`

ユーザーのエラーハンドラーを含むオブジェクト・ファイルの名前 `<`*user_xerbla*`>.o` を指定します。メイクファイルは、このエラーハンドラーをライブラリーに追加して、デフォルトのインテル® MKL エラーハンドラー `xerbla` の代わりに使用します。このパラメーターを省略すると、標準インテル® MKL エラーハンドラー `xerbla` が使用されます。独自のエラーハンドラーの開発方法は、『インテル® MKL リファレンス・マニュアル』の `xerbla` 関数の説明を参照してください。

`MKLROOT = <`*MKL_directory*`>`

カスタム共有オブジェクトの構築に使用するインテル® MKL ライブラリーの場所を指定します。デフォルトでは、インテル® MKL のインストール・ディレクトリーを使用されます。

上記のパラメーターはすべてオプションです。

最も単純なケースでのコマンドは `make ia32` です。残りのパラメーターの値はデフォルトになります。この場合、IA-32 アーキテクチャー対応プロセッサー用の `mkl_custom.so` ライブラリーが作成されます。`user_list` ファイルから関数のリストが取得され、標準インテル® MKL エラーハンドラー `xerbla` が使用されます。

以下は、より複雑なケースの例です。

```
make ia32 export=my_func_list.txt name=mkl_small xerbla=my_xerbla.o
```

この場合、IA-32 アーキテクチャー対応プロセッサー用の mkl_small.so ライブラリーが作成されます。my_func_list.txt ファイルから関数のリストが取得され、ユーザーのエラーハンドラー my_xerbla.o が使用されます。

インテル® 64 または IA-64 アーキテクチャー対応プロセッサーの場合も処理はほぼ同様です。

関数のリストの指定

インターフェイスに応じて、*user_list* ファイルにある関数リストの関数名を調整します。例えば、Fortran 関数の場合、接尾辞として名前に下線文字 "_" を追加します。

```
dgemm_
ddot_
dgetrf_
```

選択した関数に複数のプロセッサー固有のバージョンがある場合、すべてのバージョンが自動でカスタム・ライブラリーに追加され、ディスパッチャーによって管理されます。

関数ドメイン別の関数の一覧は、*<mkl ディレクトリー>*/tools/builder フォルダーを参照してください。

カスタム共有オブジェクトの配布

スレッドモードでカスタム共有オブジェクトを使用できるようにするには、カスタム共有オブジェクトと libiomp5.so を一緒に配布してください。

パフォーマンスとメモリーの管理 6

本章は、インテル® マス・カーネル・ライブラリー (インテル® MKL) を使用して最適なパフォーマンスを得るための方法を説明します。最初に、インテル® MKL の並列処理について説明した後、ライブラリーのパフォーマンスを向上するためのコーディング・テクニックとハードウェア構成を示します。また、インテル® MKL のメモリー管理についても説明し、デフォルトで使用するメモリー関数を独自の関数と置換する方法を示します。

インテル® MKL 並列処理の使用

インテル® MKL は広範囲にわたって並列化されており、次の関数ドメインがスレッド化されています。

- 直接法スパースソルバー。
- LAPACK
  - 線形方程式、計算ルーチン :
    - 因数分解 : `*getrf`[1]、`*gbtrf`、`*potrf`、`*pptrf`、`*sytrf`、`*hetrf`、`*sptrf`、`*hptrf`
    - 解法 : `*gbtrs`、`*gttrs`、`*pptrs`、`*pbtrs`、`*pttrs`、`*sytrs`、`*sptrs`、`*hptrs`、`*tptrs`、`*tbtrs`
  - 直交因数分解、計算ルーチン :
    `*geqrf`、`*ormqr`、`*unmqr`、`*ormlq`、`*unmlq`、`*ormql`、`*unmql`、`*ormrq`、`*unmrq`
  - 特異値分解、計算ルーチン : `*gebrd`、`*bdsqr`
  - 対称固有値問題、計算ルーチン :
    `*sytrd`、`*hetrd`、`*sptrd`、`*hptrd`、`*steqr`、`*stedc`
  - 一般化非対称固有値問題、計算ルーチン : `chgeqz/zhgeqz`

  スレッド化された LAPACK または BLAS ルーチンをベースとする多くの LAPACK ルーチン (`*gesv`、`*posv`、`*gels`、`*gesvd`、`*syev`、`*heev`、`cgges/zgges`、`cggesx/zggesx`、`cggev/zggev`、`cggevx/zggevx`) は、並列処理を効率的に利用します。

[1] アスタリスク (*) は、それぞれの関数のバリエーションのプリフィックスを表します。

- レベル 1 およびレベル 2 BLAS 関数 :
  - レベル 1 BLAS: `*axpy`、`*copy`、`*swap`、`ddot/sdot`、`drot/srot`
  - レベル 2 BLAS: `*gemv`、`*trmv`、`dsyr/ssyr`、`dsyr2/ssyr2`、`dsymv/ssymv`

  これらの関数は、以下の場合にのみスレッド化されます。
  - インテル® 64 アーキテクチャー
  - インテル® Core™2 Duo プロセッサーおよびインテル® Core™ i7 プロセッサー
- すべてのレベル 3 BLAS およびすべてのスパース BLAS ルーチン (レベル 2 スパース三角ソルバーを除く)
- VML
- FFT

  FFT 計算がスレッド化されるかどうかは、呼び出される関数ではなく、各問題によって決まります。

  ほとんどの FFT 問題がスレッド化されます。特に、1 つの呼び出しで複数の変換を行っている場合 (変換数が 1 よりも大きいとき) はスレッド化されます。各次元の変換のスレッド化については、以下で詳しく説明します。

  1 次元 (1D) 変換

  1D 変換は多くの場合にスレッド化されます。

  インターリーブされた複素数データレイアウトを持つサイズ *N* の 1D 複素数-複素数 (c2c) 変換は、それぞれのアーキテクチャーで以下の条件の場合にスレッド化されます。

表 6-1 インターリーブされた複素数データレイアウトを持つスレッド化された 1D c2c 変換

アーキテクチャー	条件
インテル® 64	*N* は 2 のべき乗で $log_2(N) > 9$。倍精度のアウトオブプレース変換で、入力 / 出力ストライドは 1。
IA-32	*N* は 2 のべき乗で $log_2(N) > 13$。単精度の変換。
	N は 2 のべき乗で $log_2(N) > 14$。倍精度の変換。
指定なし	*N* は複合で $log_2(N) > 16$。入力 / 出力ストライドは 1。

  1D 実数 - 複素数変換と 1D 複素数 - 実数変換はスレッド化されません。

  分割された複素数レイアウトを使用する 1D 複素数 - 複素数変換はスレッド化されません。

  素数サイズの 1D 複素数 - 複素数変換はスレッド化されません。

  分割された複素数レイアウトを使用する 1D 実数 - 複素数変換と 1D 複素数 - 実数変換は実装されていません。

  2 次元 (2D) 変換

  サイズ N × M の 2D 変換は、$N*M < 2048$ で複素数 - 複素数のインプレース変換または実数 - 複素数 / 複素数 - 実数のアウトオブプレース変換の場合を除いてスレッド化されます。

  分割された複素数レイアウトを使用する 2D 変換は実装されていません。

  多次元変換

  実装されているすべての多次元変換がスレッド化されます。

  分割された複素数レイアウトを使用する 3D 変換は実装されていません。4 次元以上の実数 - 複素数変換と複素数 - 実数変換も実装されていません。

インテル® MKL は*スレッドセーフ*です。すべてのインテル® MKL 関数[1] は、複数のスレッドで同時に実行される場合でも正常に動作します。データの共有部分へのアクセスが 1 つのスレッドに制限されている場合でも、スレッド化されたインテル® MKL のコードは、複数のスレッドから同じ共有データにアクセスできます。そのため、複数のスレッドからインテル® MKL を呼び出しても関数のインスタンスが干渉することを心配する必要はありません。

1. LAPACK の古いルーチン (`?lacon`) を除きます。

メモ： DftiComputeForward 関数と DftiComputeBackward 関数はスレッドセーフです。ただし、記述子が適切に設定されていなければなりません。FFT 関数で使用する記述子を複数のスレッド間で共有する方法については、『インテル® MKL リファレンス・マニュアル』(「FFT Functions」> 「Configuration Settings」> 「Number of User Threads」) を参照してください。

ライブラリーは、OpenMP* スレッド化ソフトウェアを使用します。スレッド数は、OMP_NUM_THREADS 環境変数で設定するか、等価の OpenMP ランタイム関数を呼び出して設定することができます。インテル® MKL では、MKL_NUM_THREADS のような OpenMP とは独立した変数と等価なインテル® MKL 関数をスレッド管理に使用できます。インテル® MKL 変数は常に最初に検査され、次に OpenMP 変数が検査されます。どちらの変数も使用されていない場合、OpenMP ソフトウェアはデフォルトのスレッド数を選択します。

インテル® MKL 10.0 以降は、OpenMP ソフトウェアがデフォルトのスレッド数を決定します。インテルの OpenMP ライブラリーでは、デフォルトのスレッド数はシステムの論理プロセッサーの数と同じです。

より高いパフォーマンスを得るには、「スレッド数を設定する手法」で説明されているように、スレッド数を実際のプロセッサー数または物理コア数に設定してください。

以下の項目も参照してください。

OpenMP 環境変数を使用したスレッド数の設定

ランタイムのスレッド数の変更

新しいスレッド化コントロールの使用

マルチコア・パフォーマンスの管理

スレッド数を設定する手法

次のいずれかの手法を使用して、インテル® MKL で使用するスレッド数を変更することができます。

- OpenMP またはインテル® MKL 環境変数のいずれかを設定します。
  - OMP_NUM_THREADS
  - MKL_NUM_THREADS
  - MKL_DOMAIN_NUM_THREADS
- OpenMP またはインテル® MKL 関数のいずれかを呼び出します。
  - omp_set_num_threads()
  - mkl_set_num_threads()
  - mkl_domain_set_num_threads()

手法を選択する場合、以下の規則を考慮してください。

- インテル® MKL スレッド化コントロールは OpenMP コントロールよりも優先されます。
- 関数呼び出しは環境変数よりも優先されます。ただし、OpenMP サブルーチン omp_set_num_threads() の呼び出しは例外で、インテル® MKL 環境変数 (MKL_NUM_THREADS など) が優先されます。詳細は、「新しいスレッド化コントロールの使用」を参照してください。
- 環境変数の読み取りはインテル® MKL を最初に呼び出したときに一度しか行われないため、ランタイム動作の変更には使用できません。

実行環境における競合の回避

特定の状況で、インテル® MKL でのスレッドの使用が問題となる競合が発生することがあります。このセクションでは、この問題の原因と回避方法について簡単に説明します。

OpenMP 宣言子を使用してプログラムをスレッド化し、インテル® コンパイラーを使用してプログラムをコンパイルした場合、そのプログラムとインテル® MKL はどちらも同じスレッド化ライブラリーを使用します。インテル® MKL はプログラムに並列領域が存在するかどうかを判断し、存在する場合、ユーザーが MKL_DYNAMIC で指定しない限り、その処理を複数のスレッド上では行いません。しかし、インテル® MKL が並列領域を認識できるのは、スレッド化プログラムとインテル® MKL が同じスレッド化を使用している場合のみです。プログラムがほかの手法でスレッド化されている場合、インテル® MKL はマルチスレッド・モードで動作しますが、リソースの浪費により適切なパフォーマンスが得られません。

使用するスレッド化モデル別に、推奨する競合の回避方法を説明します。

表 6-2　スレッド化モデル別の実行環境における競合の回避方法

スレッド化モデル	説明
OS スレッド (Linux* OS の場合 pthreads) を使用してプログラムをスレッド化する場合。	複数のスレッドがインテル® MKL を呼び出し、呼び出した関数がスレッド化されている場合、インテル® MKL のスレッド化をオフにする必要があります。利用可能な任意の手法を使用してスレッド数を設定します (「スレッド数を設定する手法」を参照)。
OpenMP 宣言子またはプラグマを使用してプログラムをスレッド化し、インテル以外のコンパイラーを使用してプログラムをコンパイルする場合。	環境変数 OMP_NUM_THREADS の設定がコンパイラーのスレッド化ライブラリーと libiomp (libguide) の両方に影響を与えるため、問題になる可能性がより高くなります。この場合、インテル® MKL と使用する OpenMP コンパイラーのレイヤーが一致するように、スレッド化ライブラリーを選択してください (詳細は、「リンクの例」を参照)。選択できない場合、インテル® MKL を逐次モードで使用してください。この際、適切なスレッド化ライブラリー (libmkl_sequential.a または libmkl_sequential.so) をリンクする必要があります (「上位ディレクトリー構造」を参照)。
例えば、マルチ CPU システムで、各プロセッサーをノードとして扱い、コミュニケーションに MPI を使用する複数の並列プログラムが動作している場合。	各プロセッサーで個別の MPI プロセスが実行されていても、スレッド化ソフトウェアはシステムに複数のプロセッサーが存在することを認識します。この場合、解決方法の 1 つは、利用可能な任意の手法を使用してスレッド数を設定することです (「スレッド数を設定する手法」を参照)。ハイブリッド (OpenMP + MPI) モードの場合の別の解決方法については、「Intel® Optimized MP LINPACK Benchmark for Clusters」を参照してください。

以下の項目も参照してください。

新しいスレッド化コントロールの使用

コンパイラー・サポート RTL のリンク

OpenMP 環境変数を使用したスレッド数の設定

OMP_NUM_THREADS 環境変数を使用してスレッド数を設定することができます。スレッド数を変更するには、プログラムを実行するコマンドシェルで適切なコマンドを入力します。以下に例を示します。

- bash シェルの場合 : export OMP_NUM_THREADS=< *使用するスレッド数* >
- csh または tcsh シェルの場合 : set OMP_NUM_THREADS=< *使用するスレッド数* >

インテル® MKL 環境変数 (例えば、MKL_NUM_THREADS) を使用してスレッド数を設定する方法は、「新しいスレッド化コントロールの使用」を参照してください。

ランタイムのスレッド数の変更

環境変数を使用してランタイム時にスレッド数を変更することはできません。しかし、プログラムから OpenMP API 関数を呼び出してランタイム時にスレッドの数を変更することはできます。以下のサンプルコードでは、omp_set_num_threads() ルーチンを使用してランタイム時にスレッドの数を変更しています。「スレッド数を設定する手法」も参照してください。

以下のサンプルは、C と Fortran コードの両方を示しています。C 言語でこのサンプルを実行するには、インテル® コンパイラー・パッケージの omp.h ヘッダーファイルを使用します。インテル® コンパイラーがない場合は、C バージョンではなく Fortran API の omp_set_num_threads() を使用してください。例えば、omp_set_num_threads_(&i_one); のように使用します。

例 6-1 スレッド数の変更

```
// ******* C 言語 *******

#include "omp.h"
#include "mkl.h"
#include <stdio.h>

#define SIZE 1000

void main(int args, char *argv[]){

   double *a, *b, *c;
   a = new double [SIZE*SIZE];
   b = new double [SIZE*SIZE];
   c = new double [SIZE*SIZE];

   double alpha=1, beta=1;
   int m=SIZE, n=SIZE, k=SIZE, lda=SIZE, ldb=SIZE, ldc=SIZE, i=0, j=0;
   char transa='n', transb='n';
   for( i=0; i<SIZE; i++){
       for( j=0; j<SIZE; j++){
           a[i*SIZE+j]= (double)(i+j);
           b[i*SIZE+j]= (double)(i*j);
           c[i*SIZE+j]= (double)0;
       }
   }
   cblas_dgemm(CblasRowMajor, CblasNoTrans, CblasNoTrans,
                   m, n, k, alpha, a, lda, b, ldb, beta, c, ldc);
   printf("row\ta\tc\n");
   for ( i=0;i<10;i++){
       printf("%d:\t%f\t%f\n", i, a[i*SIZE], c[i*SIZE]);
   }

   omp_set_num_threads(1);

   for( i=0; i<SIZE; i++){
       for( j=0; j<SIZE; j++){
           a[i*SIZE+j]= (double)(i+j);
           b[i*SIZE+j]= (double)(i*j);
           c[i*SIZE+j]= (double)0;
       }
   }
   cblas_dgemm(CblasRowMajor, CblasNoTrans, CblasNoTrans,
                   m, n, k, alpha, a, lda, b, ldb, beta, c, ldc);

    printf("row\ta\tc\n");
    for ( i=0;i<10;i++){
        printf("%d:\t%f\t%f\n", i, a[i*SIZE], c[i*SIZE]);
    }
    omp_set_num_threads(2);
```

例 6-1 スレッド数の変更 (続き)

```
        for( i=0; i<SIZE; i++){
            for( j=0; j<SIZE; j++){
                a[i*SIZE+j]= (double)(i+j);
                b[i*SIZE+j]= (double)(i*j);
                c[i*SIZE+j]= (double)0;
            }
        }
        cblas_dgemm(CblasRowMajor, CblasNoTrans, CblasNoTrans,
                        m, n, k, alpha, a, lda, b, ldb, beta, c, ldc);

        printf("row\ta\tc\n");
        for ( i=0;i<10;i++){
            printf("%d:\t%f\t%f\n", i, a[i*SIZE],
    c[i*SIZE]);
        }

        delete [] a;
        delete [] b;
        delete [] c;
    }


    // ******* Fortran 言語 *******

    PROGRAM DGEMM_DIFF_THREADS

    INTEGER    N, I, J
    PARAMETER  (N=1000)

    REAL*8     A(N,N),B(N,N),C(N,N)
    REAL*8     ALPHA, BETA

    INTEGER*8   MKL_MALLOC
    integer   ALLOC_SIZE

    integer   NTHRS

    ALLOC_SIZE = 8*N*N
    A_PTR = MKL_MALLOC(ALLOC_SIZE,128)
    B_PTR = MKL_MALLOC(ALLOC_SIZE,128)
    C_PTR = MKL_MALLOC(ALLOC_SIZE,128)

    ALPHA = 1.1
    BETA = -1.2

    DO I=1,N
    DO J=1,N
      A(I,J) = I+J
      B(I,J) = I*j
      C(I,J) = 0.0
    END DO
    END DO

    CALL DGEMM('N','N',N,N,N,ALPHA,A,N,B,N,BETA,C,N)

    print *,'Row          A          C'
    DO i=1,10
      write(*,'(I4,F20.8,F20.8)') I, A(1,I),C(1,I)
    END DO

    CALL OMP_SET_NUM_THREADS(1);

    DO I=1,N
    DO J=1,N
      A(I,J) = I+J
      B(I,J) = I*j
      C(I,J) = 0.0
    END DO
```

例 6-1　スレッド数の変更 (続き)

```
END DO

CALL DGEMM('N','N',N,N,N,ALPHA,A,N,B,N,BETA,C,N)

print *,'Row          A          C'
DO i=1,10
  write(*,'(I4,F20.8,F20.8)') I, A(1,I),C(1,I)
END DO

CALL OMP_SET_NUM_THREADS(2);

DO I=1,N
DO J=1,N
  A(I,J) = I+J
  B(I,J) = I*j
  C(I,J) = 0.0
END DO
END DO

CALL DGEMM('N','N',N,N,N,ALPHA,A,N,B,N,BETA,C,N)

print *,'Row          A          C'
DO i=1,10
  write(*,'(I4,F20.8,F20.8)') I, A(1,I),C(1,I)
END DO


STOP
END
```

新しいスレッド化コントロールの使用

インテル ® MKL では、OpenMP とは独立した環境変数とサービス関数からなる、オプションで利用可能なスレッド化コントロールが用意されています。これらのコントロールは OpenMP の等価な変数と似ています。ただし、MKL のスレッド化コントロールのほうが先に検証されるため、OpenMP 変数よりも優先されます。これらのコントロールを OpenMP 変数とともに使用することで、インテル ® MKL とライブラリーを互いに呼び出さないアプリケーションの部分をスレッド化することができます。

これらのコントロールを使用すると、OpenMP 設定とは無関係にインテル ® MKL のスレッド数を指定できます。インテル ® MKL は実際には推奨と異なるスレッド数を使用することがありますが、コントロールは呼び出しアプリケーションで使用されている数が利用できない場合、推奨するスレッド数を使用するようにライブラリーに指示します。

メモ : インテル ® MKL では、システムリソースなどの特定の理由により、スレッド数を常に選択できるとは限りません。

アプリケーションでインテル ® MKL スレッド化コントロールを使用するかどうかは任意です。コントロールを使用しない場合、ライブラリーは、デフォルトのスレッド数が異なることを除けば、スレッド化に関してはインテル ® MKL 9.1 と同じように動作します。

『インテル ® MKL リファレンス・マニュアル』の「Fourier Transform Functions」の章の「Number of User Threads」セクションに、インテル ® MKL スレッド化コントロールを使用して FFT 計算のスレッド数を設定する方法が説明されています。

表 6-3 は、スレッド化コントロール用のインテル ® MKL 環境変数とサービス関数、および等価な OMP 環境変数の一覧です。

表 6-3　スレッド化コントロール用の環境変数

環境変数	サービス関数	内容	等価な OpenMP 環境変数
MKL_NUM_THREADS	mkl_set_num_threads	使用するスレッド数を示します。	OMP_NUM_THREADS
MKL_DOMAIN_NUM_THREADS	mkl_domain_set_num_threads	特定の関数ドメイン用のスレッド数を示します。	
MKL_DYNAMIC	mkl_set_dynamic	インテル® MKL がスレッド数を動的に変更できるようにします。	OMP_DYNAMIC

メモ : 関数はそれぞれの環境変数よりも優先されます。
特に、アプリケーションで、インテル® MKL が指定されたスレッド数を使用し、アプリケーションのユーザーが環境変数を使用してスレッド数を変更しないようにするには、mkl_set_num_threads() を呼び出してスレッド数を設定します。この設定は、環境変数の設定よりも優先されます。

次の例は、インテル® MKL 関数 mkl_set_num_threads() を使用して 1 つのスレッドを設定する方法を示しています。

例 6-2　スレッド数を 1 に設定

```
// ******* C 言語 *******
#include <omp.h>
#include <mkl.h>
…
mkl_set_num_threads ( 1 );

// ******* Fortran 言語 *******
…
call mkl_set_num_threads( 1 )
```

この後のセクションでは、スレッド化コントロール用のインテル® MKL 環境変数について説明します。スレッド化コントロール関数、パラメーター、呼び出し構文、コードの例は、『インテル® MKL リファレンス・マニュアル』を参照してください。

MKL_DYNAMIC

MKL_DYNAMIC 環境変数は、インテル® MKL がスレッド数を動的に変更できるようにします。

MKL_DYNAMIC のデフォルト値は、OMP_DYNAMIC のデフォルト値が FALSE の場合でも、TRUE です。

MKL_DYNAMIC が TRUE の場合、インテル® MKL は、ユーザーが指定した最大値までの範囲で最良と見なすスレッド数を選択します。

例えば、MKL_DYNAMIC を TRUE に設定すると、以下のようなケースで最適なスレッド数が選択されます。

- 要求されたスレッド数が (ハイパースレッディングなどにより) 物理コアの数を超えていて、MKL_DYNAMIC がデフォルト値の TRUE から変更されていない場合、インテル® MKL はスレッド数を物理コアの数まで下げます。

- MPI が使用されていて、スレッドセーフ・モードで呼び出されているかどうか判断できない場合 (例えば、MPICH 1.2.x では検出不可) で、MKL_DYNAMIC がデフォルト値の TRUE から変更されていない場合、インテル® MKL は 1 つのスレッドを実行します。

MKL_DYNAMIC が FALSE の場合、インテル® MKL は、ユーザーが指定したスレッド数にできるだけ近い値を使用しようとします。ただし、MKL_DYNAMIC=FALSE を設定しても、必ず指定したスレッド数が使用されるわけではありません。例えば、システムリソースの不足などにより、要求されたスレッド数を使用できないことがあります。あるいは、問題を調査し、推奨値と異なるスレッド数を使用することもあります。例えば、8 つのスレッドでサイズ 1 の行列 - 行列乗算を行おうとすると、このイベントで 8 つのスレッドを使用することは実用的でないため、ライブラリーは代わりに 1 スレッドのみ使用します。

インテル® MKL が並列領域で呼び出された場合、デフォルトでは 1 つのスレッドのみを使用することにも注意してください。ライブラリーで入れ子の並列処理を使用し、並列領域内のスレッドをインテル® MKL が使用しているものと同じ OpenMP コンパイラーでコンパイルする場合、MKL_DYNAMIC を FALSE にして、スレッド数を手動で設定してください。

一般に、ライブラリーが並列セクションからすでに呼び出されていて入れ子の並列処理が望ましい場合など、インテル® MKL が検出できない状況でのみ、MKL_DYNAMIC を FALSE に設定してください。

MKL_DOMAIN_NUM_THREADS

MKL_DOMAIN_NUM_THREADS 環境変数は、特定の関数ドメイン用のスレッド数を示します。

MKL_DOMAIN_NUM_THREADS には、文字列値 *<MKL 環境文字列>* を以下の形式で指定します。

<MKL 環境文字列> ::= *<MKL ドメイン環境文字列>* { *<区切り文字>* *<MKL ドメイン環境文字列>* }

<区切り文字> ::= [*<スペース記号>**] (*<スペース記号>* | *<カンマ記号>* | *<セミコロン記号>* | *<コロン記号>*) [*<スペース記号>**]

<MKL ドメイン環境文字列> ::= *<MKL ドメイン環境名>* *<使用法>* *<スレッド数>*

<MKL ドメイン環境名> ::= MKL_ALL | MKL_BLAS | MKL_FFT | MKL_VML

<使用法> ::= [*<スペース記号>**] (*<スペース記号>* | *<等号記号>* | *<カンマ記号>*) [*<スペース記号>**]

<スレッド数> ::= *<正の整数>*

<正の整数> ::= *<10 進数>* | *<8 進数>* | *<16 進数>*

上記の構文で、MKL_BLAS は BLAS 関数ドメイン、MKL_FFT は非クラスター FFT、MKL_VML はベクトル・マス・ライブラリーを示します。

例 :

```
MKL_ALL 2 : MKL_BLAS 1 : MKL_FFT 4

MKL_ALL=2 : MKL_BLAS=1 : MKL_FFT=4

MKL_ALL=2,  MKL_BLAS=1,  MKL_FFT=4

MKL_ALL=2;  MKL_BLAS=1;  MKL_FFT=4

MKL_ALL  = 2  MKL_BLAS 1 ,  MKL_FFT  4

MKL_ALL,2: MKL_BLAS 1, MKL_FFT,4 .
```

グローバル変数 MKL_ALL、MKL_BLAS、MKL_FFT、MKL_VML、およびインテル® MKL スレッド化コントロール用のインターフェイスは、mkl.h ヘッダーファイルに記述されています。

表 6-4 は、MKL_DOMAIN_NUM_THREADS の値がどのように解釈されるかを示しています。

表 6-4 MKL_DOMAIN_NUM_THREADS の値の解釈

MKL_DOMAIN_NUM_THREADS の値	解釈
MKL_ALL=4	インテル® MKL のすべての部分で 4 つのスレッドを使用します。実際のスレッド数は、MKL_DYNAMIC の設定やシステムリソースの状況に応じて異なります。この設定は、MKL_NUM_THREADS = 4 と等価です。
MKL_ALL=1, MKL_BLAS=4	BLAS では 4 つのスレッドを使用し、インテル® MKL の残りの部分では 1 つのスレッドを使用します。
MKL_VML = 2	VML で 2 つのスレッドを使用します。設定は、インテル® MKL のほかの部分には影響しません。

ドメイン固有の設定は、ほかの設定よりも優先されます。例えば、MKL_DOMAIN_NUM_THREADS が "MKL_BLAS=4" に設定された場合、MKL_NUM_THREADS の設定に関係なく、BLAS で 4 つのスレッドを使用するように推奨します。関数呼び出し "mkl_domain_set_num_threads (4, MKL_BLAS);" も、mkl_set_num_threads() への呼び出しに関係なく、BLAS で 4 つのスレッドを使用するように推奨します。
しかし、"mkl_domain_set_num_threads (4, MKL_ALL);" のように関数の呼び出しで "MKL_ALL" を指定すると "mkl_set_num_threads(4)" と等価であるため、後の mkl_set_num_threads 呼び出しよりも優先されます。同様に、MKL_DOMAIN_NUM_THREADS が "MKL_ALL=4" に設定された場合、MKL_NUM_THREADS = 2 よりも優先されます。

例えば、MKL_DOMAIN_NUM_THREADS 環境変数では、"MKL_BLAS=4,MKL_FFT=2" のように複数の変数を一度に設定することができますが、対応する関数で文字列構文は使用できません。このため、関数呼び出しで同じことを行うには、以下のように複数の呼び出しを行う必要があります。

```
mkl_domain_set_num_threads ( 4, MKL_BLAS );
mkl_domain_set_num_threads ( 2, MKL_FFT );
```

スレッド化コントロール用の環境変数の設定

スレッド化コントロールで使用する環境変数を設定するには、プログラムを実行するコマンドシェルで、次のように使用するシェルに応じて export または set コマンドを入力します。例えば、bash シェルでは export コマンドを入力します。

```
export <変数名>=<値>
```

次に例を示します。

```
export MKL_NUM_THREADS=4
export MKL_DOMAIN_NUM_THREADS="MKL_ALL=1, MKL_BLAS=4"
export MKL_DYNAMIC=FALSE
```

csh または tcsh シェルでは、set コマンドを入力します。

```
set <変数名>=<値>
```

次に例を示します。

```
set MKL_NUM_THREADS=4
set MKL_DOMAIN_NUM_THREADS="MKL_ALL=1, MKL_BLAS=4"
set MKL_DYNAMIC=FALSE
```

インテル® Advanced Vector Extensions (インテル® AVX) のディスパッチ

インテル® MKL では、インテル® AVX 用に最適化されたカーネルが用意されています。インテル® AVX が有効なハードウェア (またはシミュレーション) でインテル® AVX 命令をディスパッチするには、インテル® MKL サービス関数 `mkl_enable_instructions()` を使用します。この関数を使用すると、*新しい*インテル® AVX 命令のディスパッチが有効になります。すべてのインテル® MKL 関数呼び出しの前に、この関数を呼び出してください。関数の説明は、『インテル® MKL リファレンス・マニュアル』を参照してください。

メモ : この関数が正常に実行されても、新しい命令がディスパッチされないことがあります。ハードウェアでインテル® AVX が有効で、この関数がその命令をディスパッチするためにすでに最適化されている場合のみディスパッチされます。この関数を呼び出さない場合、新しい命令はディスパッチされません。

インテル® AVX 命令セットは現在も改良されているため、`mkl_enable_instructions()` の動作は将来のインテル® MKL リリースで変更される可能性があります。関数の動作についてのリリース固有の情報は、『リリースノート』を参照してください。

パフォーマンスを向上するためのヒントと手法

このセクションでは、最適なパフォーマンスを得るための方法を説明します。

コーディング手法

インテル® MKL を使用して最適なパフォーマンスを得るため、ソースコードでデータが以下のようにアライメントされていることを確認してください。

- 配列が 16 バイト境界でアライメントされている。
- 2 次元配列のリーディング・ディメンジョンの値 (`n*element_size`) が 16 の倍数である。
- 2 次元配列のリーディング・ディメンジョンの値が 2048 の倍数ではない。

LAPACK 圧縮ルーチン

名前の行列の型と格納位置 (2 つめと 3 つめの文字) が `HP`、`OP`、`PP`、`SP`、`TP`、`UP` のルーチンは、圧縮形式で行列を処理します (『インテル® MKL リファレンス・マニュアル』の LAPACK の「ルーチン命名規則」セクションを参照)。これらの機能は、名前の行列の型と格納位置 (2 つめと 3 つめの文字) が `HE`、`OR`、`PO`、`SY`、`TR`、`UN` の非圧縮ルーチンの機能と厳密に等価ですが、パフォーマンスは大幅に低くなります。

メモリー制限があまり厳しくない場合は、非圧縮ルーチンを使用してください。この場合、それぞれの圧縮ルーチンで要求されるメモリーよりも $N^2/2$ 多いメモリーを割り当てる必要があります。*N* は問題サイズ (方程式の数) です。

例えば、エキスパート・ドライバーを使用して対称固有値問題を解く時間を短縮するには、次の非圧縮ルーチンを使用します。

```
call dsyevx(jobz, range, uplo, n, a, lda, vl, vu, il, iu, abstol, m, w, z,
ldz, work, lwork, iwork, ifail, info)
```

a は少なくとも N^2 の要素を含む次元 *lda* × *n* です。変更前の圧縮ルーチンは次のとおりです。

```
call dspevx(jobz, range, uplo, n, ap, vl, vu, il, iu, abstol, m, w, z,
ldz, work, iwork, ifail, info)
```

ap は次元 *N*(*N*+1)/2 です。

FFT 関数

追加の条件により FFT 関数のパフォーマンスを向上できます。

IA-32 またはインテル® 64 アーキテクチャー・ベースのアプリケーション :
2 次元配列の最初の要素のアドレスとリーディング・ディメンジョンの値 (`n*element_size`) が、以下のキャッシュ・ライン・サイズの倍数である必要があります。

- 32 バイト (インテル® Pentium® III プロセッサーの場合)
- 64 バイト (インテル® Pentium® 4 プロセッサーおよびインテル® 64 アーキテクチャー対応プロセッサー)

IA-64 アーキテクチャー・ベースのアプリケーション :
2 次元配列のリーディング・ディメンジョンの値 (`n*element_size`) が 2 の累乗であってはなりません。

ハードウェア構成のヒント

デュアルコア インテル® Xeon® プロセッサー 5100 番台のシステム :
デュアルコア インテル® Xeon® プロセッサー 5100 番台のシステムで最良のインテル® MKL パフォーマンスを得るには、このプロセッサーの *ハードウェア DPL (ストリーミング・データ) プリフェッチャー* 機能を有効にしてください。この機能を有効にするには、適切な BIOS 設定を使用します。詳細は、BIOS のドキュメントを参照してください。

ハイパースレッディング・テクノロジーの使用 :
ハイパースレッディング・テクノロジー (HT テクノロジー) は、各スレッドが異なる演算を実行している場合、またはプロセッサー上に十分に活用されていないリソースがある場合に特に有効です。しかし、インテル® MKL は、このどちらにもあてはまりません。ライブラリーのスレッド化された部分が利用可能なリソースの大半を使用して効率的に実行され、各スレッドで同一の演算を行っているためです。*HT テクノロジー* を無効にすると、より高いパフォーマンスを得られることがあります。デフォルトのスレッド数、スレッド数の変更、その他の関連情報は、「インテル® MKL 並列処理の使用」を参照してください。
HT テクノロジーを有効にして実行する場合、物理コアの数よりも少ないスレッド数で実行すると、特にパフォーマンスに影響があります。また、例えば、すべての物理コアに対して 2 つのスレッドがある場合、スレッド・スケジューラーは一部のコアに 2 つのスレッドを割り当て、ほかのコアを無視することがあります。インテル® コンパイラーの OpenMP ライブラリーを使用している場合、この状況を回避するために、ユーザーズガイドを参照して、スレッド・アフィニティー・インターフェイスの最適な設定を行ってください。インテル® MKL では、`KMP_AFFINITY=granularity=fine,compact,1,0` に設定することを推奨します。

マルチコア・パフォーマンスの管理

スレッドを処理するコアが変更されないようにすることで、マルチコア・プロセッサーのシステムで最良のパフォーマンスを得ることができます。このためには、スレッドにアフィニティー・マスクを設定し、スレッドと CPU コアをバインドします。以下のいずれかのオプションを使用します。

- OpenMP の機能 (利用可能な場合、例えば、インテルの OpenMP ライブラリーを使用して `KMP_AFFINITY` 環境変数を設定することを推奨)
- システム関数 (この後の説明を参照)

次のパフォーマンス問題について考えてみます。

- システムにそれぞれ 2 つのコアがある 2 つのソケットがある (合計 4 コア)。

- インテル® MKL FFT を呼び出す 2 スレッドの並列アプリケーションが 4 スレッドでは高速に実行されるが、2 スレッドではパフォーマンスが非常に不安定。

例 6-3 はこの問題を解決します。このコードサンプルは、システム関数 sched_setaffinity を呼び出して異なるソケットのコアにスレッドをバインドします。その後、インテル® MKL FFT 関数が呼び出されます。

インテル® コンパイラーで、以下のコマンドを使用してアプリケーションをコンパイルします。

```
icc test_application.c -openmp
```

test_application.c は、アプリケーションのファイル名です。

アプリケーションをビルドします。例えば、次のように環境変数を使用してスレッド数を設定し、ビルドしたアプリケーションを 2 スレッドで実行します。

```
env OMP_NUM_THREADS=2 ./a.out
```

例 6-3 インテル® コンパイラーを使用してオペレーティング・システムでアフィニティー・マスクを設定

```
#define _GNU_SOURCE //GNU の CPU アフィニティーを使用します。
                    // ( 適切なカーネルおよび glibc で動作します。)

// アフィニティー・マスクを設定します。
#include <sched.h>
#include <stdio.h>
#include <unistd.h>
#include <omp.h>

int main(void) {
  int NCPUs = sysconf(_SC_NPROCESSORS_CONF);

  printf("%i NCPUs のスレッド・アフィニティーを使用 \n", NCPUs);

#pragma omp parallel default(shared)
  {
    cpu_set_t new_mask;
    cpu_set_t was_mask;
    int tid = omp_get_thread_num();

    CPU_ZERO(&new_mask);

    // 2 パッケージ x 2 コア / パッケージ x 1 スレッド / コア (4 コア )
    CPU_SET(tid==0 ?0 : 2, &new_mask);

    if (sched_getaffinity(0, sizeof(was_mask), &was_mask) == -1) {
      printf(" エラー : sched_getaffinity(%d, sizeof(was_mask), &was_mask)\n",
tid);
    }
    if (sched_setaffinity(0, sizeof(new_mask), &new_mask) == -1) {
      printf(" エラー : sched_setaffinity(%d, sizeof(new_mask), &new_mask)\n",
tid);
    }
    printf("tid=%d new_mask=%08X was_mask=%08X\n", tid,
           *(unsigned int*)(&new_mask), *(unsigned int*)(&was_mask));
  }

  // インテル® MKL FFT ルーチンを呼び出します。

return 0;
}
```

上記の例で使用されている sched_setaffinity 関数の詳細については、Linux プログラマーズ・マニュアル (man ページ形式) を参照してください。

非正規化数の演算

IEEE 754-2008 規格「An IEEE Standard for Binary Floating-Point Arithmetic」では、浮動小数点形式で最も小さな正規化数よりも小さな非ゼロの数を、*denormal* (または *subnormal*) 数として定義しています。本書では、どちらも非正規化数として訳しています。非正規化オペランドと結果は、通常ハードウェアで直接処理されるのではなく、ソフトウェアで処理されるため、非正規化数の浮動小数点演算は正規化オペランドよりも遅くなります。このソフトウェア処理により、インテル® MKL 関数で非正規化数を使用する場合、正規化された浮動小数点数を使用する場合よりも実行が遅くなります。

このパフォーマンス問題に対応する方法として、MXCSR 浮動小数点制御レジスターの適切なビットフィールドを設定する方法があります。FTZ は非正規化数をゼロにフラッシュし、DAZ はメモリーからロードされた非正規化数をゼロに置換します。コンパイラーで FTZ および DAZ を制御するオプションが用意されているかどうかは、コンパイラーのドキュメントを参照してください。これらのコンパイラー・オプションを使用すると精度に影響する可能性があることに注意してください。

FFT 最適化基数

データベクトルの長さが最適化基数の累乗に因数分解できる場合、インテル® MKL FFT のパフォーマンスを向上させることができます。

インテル® MKL では、最適化基数は 2、3、5、7、および 11 です。

インテル® MKL メモリー管理の使用

インテル® MKL には、ライブラリー関数によって使用されるメモリーバッファーを管理するメモリー管理ソフトウェアが用意されています。アプリケーションが特定の関数 (レベル 3 BLAS または FFT) を呼び出すときにライブラリーが割り当てる新しいバッファーは、プログラムを終了するまで解放されません。メモリー管理ソフトウェアによって割り当てられたメモリー容量を取得するには、`mkl_mem_stat()` 関数を呼び出します。プログラムでメモリーを解放する必要がある場合は、`mkl_free_buffers()` 関数を呼び出します。メモリーバッファーが必要なライブラリー関数に別の呼び出しが行われると、メモリー・マネージャーはバッファーを再び割り当てます。このバッファーは、プログラムを終了するか、プログラムがメモリーを解放するまで割り当てられたままです。

この動作により、パフォーマンスが向上します。しかし、一部のツールではこの動作をメモリーリークとして報告することがあります。`mkl_free_buffers()` 関数を呼び出す以外に、環境変数を設定してプログラムのメモリーを解放することもできます。

メモリー管理ソフトウェアはデフォルトでオンになっているため、プログラムを終了するまでレベル 3 BLAS と FFT を呼び出して割り当てられたメモリーは解放されません。メモリー管理ソフトウェアの動作を無効にするには、`MKL_DISABLE_FAST_MM` 環境変数に任意の値を設定してください。メモリーは呼び出しごとに割り当てられ、呼び出しの後に解放されます。この機能を無効にすると、特に問題サイズの小さな、レベル 3 BLAS などのルーチンのパフォーマンスが低下します。

しかし、これらの方法を使用してメモリーを解放しても、メモリーリークが報告されなくなるとは限りません。実際、ライブラリーを複数回呼び出す場合、各呼び出しごとに新しいメモリーの割り当てが必要になり、報告される数は増えることもあります。上記の方法で解放されなかったメモリーは、プログラムの終了時にシステムによって解放されます。

メモリー関数の再定義

C/C++ プログラムでは、インテル® MKL がデフォルトで使用するメモリー関数を独自の関数に置換できます。置換を行うには、*メモリー関数名の変更*機能を使用します。

メモリー関数名の変更

デフォルトでは、インテル® MKL メモリー管理は、標準 C ランタイムメモリー関数を使用してメモリーの割り当てと解放を行います。これらの関数は、メモリー関数名の変更機能を使用して置換することができます。

インテル® MKL は、アプリケーション・レベルで確認可能な、ポインター i_malloc、i_free、i_calloc、i_realloc を使用してメモリー関数にアクセスしています。これらのポインターは、最初は標準 C ランタイムメモリー関数 malloc、free、calloc、realloc のアドレスをそれぞれ保持しています。これらのポインターの値がアプリケーションのメモリー管理関数のアドレスを指すように、プログラムで再定義できます。

ポインターのリダイレクトは、独自のメモリー管理関数を使用するための唯一の正しい方法です。ポインターのリダイレクトを行わずに独自のメモリー関数を呼び出すと、2 つのメモリー管理パッケージでメモリーが管理されることになり、予測できないメモリー問題が発生します。

メモリー関数の再定義方法

メモリー関数を再定義するには、以下の操作を行います。

1. i_malloc.h ヘッダーファイルをコードにインクルードします。
   ヘッダーファイルには、メモリー割り当て関数を置換するために必要な宣言がすべて含まれています。このヘッダーファイルでは、この機能をサポートするインテル® ライブラリーでメモリー割り当てを置換する方法も示しています。
2. インテル® MKL 関数への最初の呼び出しの前に、ポインター i_malloc、i_free、i_calloc、i_realloc の値を再定義します。

例 6-4 メモリー関数の再定義

```
#include "i_malloc.h"
   ...
   i_malloc  = my_malloc;
   i_calloc  = my_calloc;
   i_realloc = my_realloc;
   i_free    = my_free;
   ...
// ここでインテル® MKL 関数を呼び出すことができます。
```

言語固有の使用法オプション 7

インテル® マス・カーネル・ライブラリー (インテル® MKL) は、Fortran と C/C++ プログラミングを広範囲にサポートしています。しかし、すべての関数ドメインで Fortran と C インターフェイスの両方をサポートしているとは限りません (付録 A の「表 A-1」を参照)。例えば、LAPACK には C インターフェイスはありません。混在言語プログラミングを使用して、C からこれらのドメインを含む関数を呼び出すことは可能です。

Fortran 95 環境で、Fortran をサポートする LAPACK や BLAS を使用する場合でも、最初に、インテル® MKL で提供されているソースコードからコンパイラー固有のインターフェイス・ライブラリーとモジュールをビルドする作業が必要です。

本章は、混在言語プログラミングと言語固有のインターフェイスの使用について説明します。Fortran インターフェイスのみが提供されている関数ドメインで C 言語環境のインテル® MKL を使用する方法と、言語固有のインターフェイス、特に Fortran 95 インターフェイスを LAPACK および BLAS で使用する方法を説明します。また、コンパイラー依存の関数についても説明し、Fortran 90 のモジュールがソースで提供されている理由について明らかにします。別のセクションでは、Java* からインテル® MKL 関数を呼び出すサンプルを実行する過程を、順を追って説明します。

言語固有インターフェイスとインテル® MKL の使用

interfaces ディレクトリーにあるメイクファイルを使用して、以下のインターフェイス・ライブラリーとモジュールを生成できます。

表 7-1　インターフェイス・ライブラリーとモジュール

ファイル名	内容
ライブラリー (インテル® MKL のアーキテクチャー固有のディレクトリーに生成)	
libmkl_blas95.a[1]	IA-32 アーキテクチャー用の BLAS (BLAS95) 用 Fortran 95 ラッパー。
libmkl_blas95_ilp64.a[1]	LP64 インターフェイスをサポートする BLAS (BLAS95) 用 Fortran 95 ラッパー。
libmkl_blas95_lp64.a[1]	ILP64 インターフェイスをサポートする BLAS (BLAS95) 用 Fortran 95 ラッパー。
libmkl_lapack95.a[1]	IA-32 アーキテクチャー用の LAPACK (LAPACK95) 用 Fortran 95 ラッパー。
libmkl_lapack95_lp64.a[1]	LP64 インターフェイスをサポートする LAPACK (LAPACK95) 用 Fortran 95 ラッパー。
libmkl_lapack95_ilp64.a[1]	ILP64 インターフェイスをサポートする LAPACK (LAPACK95) 用 Fortran 95 ラッパー。
libfftw2xc_intel.a[1]	インテル® MKL FFT を呼び出す FFTW バージョン 2.x 用インターフェイス (インテル® コンパイラー用 C インターフェイス)。
libfftw2xc_gnu.a	インテル® MKL FFT を呼び出す FFTW バージョン 2.x 用インターフェイス (GNU* コンパイラー用 C インターフェイス)。
libfftw2xf_intel.a	インテル® MKL FFT を呼び出す FFTW バージョン 2.x 用インターフェイス (インテル® コンパイラー用 Fortran インターフェイス)。
libfftw2xf_gnu.a	インテル® MKL FFT を呼び出す FFTW バージョン 2.x 用インターフェイス (GNU コンパイラー用 Fortran インターフェイス)。
libfftw3xc_intel.a[2]	インテル® MKL FFT を呼び出す FFTW バージョン 3.x 用インターフェイス (インテル® コンパイラー用 C インターフェイス)。
libfftw3xc_gnu.a	インテル® MKL FFT を呼び出す FFTW バージョン 3.x 用インターフェイス (GNU コンパイラー用 C インターフェイス)。
libfftw3xf_intel.a[2]	インテル® MKL FFT を呼び出す FFTW バージョン 3.x 用インターフェイス (インテル® コンパイラー用 Fortran インターフェイス)。
libfftw3xf_gnu.a	インテル® MKL FFT を呼び出す FFTW バージョン 3.x 用インターフェイス (GNU コンパイラー用 Fortran インターフェイス)。
libfftw2x_cdft_SINGLE.a	インテル® MKL クラスター FFT を呼び出す MPI FFTW バージョン 2.x 用単精度インターフェイス (C インターフェイス)。
libfftw2x_cdft_DOUBLE.a	インテル® MKL クラスター FFT を呼び出す MPI FFTW バージョン 2.x 用倍精度インターフェイス (C インターフェイス)。
モジュール (インテル® MKL インクルード・ディレクトリーのアーキテクチャー / インターフェイス固有のサブディレクトリーに生成)	
blas95.mod[1]	BLAS (BLAS95) 用 Fortran 95 インターフェイス・モジュール。
lapack95.mod[1]	LAPACK (LAPACK95) 用 Fortran 95 インターフェイス・モジュール。
f95_precision.mod[1]	BLAS95 および LAPACK95 用精度パラメーターの Fortran 95 定義。
mkl95_blas.mod[1]	BLAS (BLAS95) 用 Fortran 95 インターフェイス・モジュール、blas95.mod と同一。将来のリリースで削除予定。
mkl95_lapack.mod[1]	LAPACK (LAPACK95) 用 Fortran 95 インターフェイス・モジュール、lapack95.mod と同一。将来のリリースで削除予定。
mkl95_precision.mod[1]	BLAS95 および LAPACK95 用精度パラメーターの Fortran 95 定義。f95_precision.mod と同一。将来のリリースで削除予定。

1. インテル® Fortran コンパイラー用に事前構築
2. FFTW3 インターフェイスはインテル® MKL と統合されます。ビルド方法を定義するオプションおよびラッパーとスタンダード・ライブラリーの配置場所は、*<mkl ディレクトリー>*/interfaces/fftw3x*/makefile を参照してください。

ライブラリーとモジュールの生成方法の例については、「Fortran 95 インターフェイス、LAPACK および BLAS」を参照してください。

FFTW ラッパーの詳細は、『インテル® MKL リファレンス・マニュアル』の付録 G を参照してください。

Fortran 95 インターフェイス、LAPACK および BLAS

Fortran 95 インターフェイスはコンパイラーに依存します。インテル® MKL には、インテル® Fortran コンパイラーを使用して事前に構築されたインターフェイス・ライブラリーとモジュールが用意されています。さらに、Fortran 95 インターフェイスとラッパーがソースで提供されています。(詳細は、「コンパイラー依存の関数と Fortran 90 モジュール」を参照)。異なるコンパイラーを使用している場合、そのコンパイラーを使用して適切なライブラリーとモジュールをビルドし、ライブラリーをユーザーのライブラリーとしてリンクしてください。

1. *<mkl ディレクトリー>*/interfaces/blas95 または *<mkl ディレクトリー>*/interfaces/lapack95 ディレクトリーに移動します。
2. 以下のいずれかのコマンドを入力します。

make lib32 INSTALL_DIR=*<user_dir>*	IA-32 アーキテクチャーの場合
make libem64t [interface=lp64|ilp64] INSTALL_DIR=*<user_dir>*	インテル® 64 アーキテクチャーの場合
make lib64 [interface=lp64|ilp64] INSTALL_DIR=*<user_dir>*	IA-64 アーキテクチャーの場合

メモ : パラメーター INSTALL_DIR は必須です。

コマンドを実行すると、ライブラリーとモジュールがビルドされ、ライブラリーは *<user dir>*/lib/*<arch>* ディレクトリーに、.mod ファイルは *<user dir>*/include/*<arch>*[/{lp64 | ilp64}] ディレクトリーにインストールされます。*<arch>* は、{32, em64t, 64} のいずれかです。

デフォルトでは、ifort コンパイラーが選択されています。make の FC=*< コンパイラー >* パラメーターを使用してコンパイラーのコマンド名を変更することもできます。

例えば、次のコマンド

```
make libem64t FC=pgf95 INSTALL_DIR=<user_pgf95_dir> interface=lp64
```

を実行すると、ライブラリーとモジュールがビルドされ、*<user_pgf95_dir>* のサブディレクトリーにインストールされます。

ビルド用ディレクトリーからライブラリーを削除するには、以下のコマンドを使用します。

make clean32 INSTALL_DIR=*<user_dir>*	IA-32 アーキテクチャーの場合
make cleanem64t INSTALL_DIR=*<user_dir>*	インテル® 64 アーキテクチャーの場合
make clean64 INSTALL_DIR=*<user_dir>*	IA-64 アーキテクチャーの場合
make clean INSTALL_DIR=*<user_dir>*	すべてのアーキテクチャーの場合

メモ : 上記のビルド / クリーンコマンドで INSTALL_DIR=../.. または INSTALL_DIR=*<mkl_directory>* に設定すると、インテル® MKL 事前構築 Fortran 95 ライブラリーおよびモジュールを置換または削除できます。この処理は管理者権限がある場合に可能ですが、必要な場合を除いて行わないでください。

コンパイラー依存の関数と Fortran 90 モジュール

コンパイラーがランタイム・ライブラリー (RTL) で解決されるオブジェクト・コード関数の呼び出しを行うと常に、コンパイラー依存の関数が使用されます。適切な RTL なしでこれらのコードをリンクすると、未定義シンボルになります。インテル® MKL は、RTL の依存関係を最小限に抑えるように設計されています。

依存関係が発生する場合、サポートする RTL がインテル® MKL とともに提供されます。インテル® MKL クラスター・ソフトウェアに関連するものを除くと、このような RTL の唯一の例は、インテル® コンパイラーでコンパイルされる OpenMP* コード用の `libiomp` および `libguide` です。`libiomp` と `libguide` は、インテル® MKL でスレッド化されたコードをサポートしています。

RTL 依存関係が発生する可能性がある場合、関数はソースコードで提供されます。アプリケーションで使用するコンパイラーでコードをコンパイルしてください。

特に、Fortran 90 モジュールは、RTL をサポートするコンパイラー固有のコード生成が必要になるため、インテル® MKL はこれらのモジュールをソースコードで提供しています。

混在言語プログラミングとインテル® MKL

付録 A は、各インテル® MKL 関数ドメインでサポートされているプログラミング言語の一覧です。しかし、インテル® MKL ルーチンを異なる言語環境から呼び出すこともできます。このセクションでは、混在言語プログラミングを使用してこの呼び出しを行う方法を説明します。

LAPACK、BLAS、および CBLAS ルーチンの C 言語環境からの呼び出し

すべてのインテル® MKL 関数ドメインで C と Fortran 環境の両方をサポートしているとは限りません。インテル® MKL Fortran 形式の関数を C/C++ 環境で使用するには、この後で説明されている LAPACK と BLAS の特定の規則に従う必要があります。

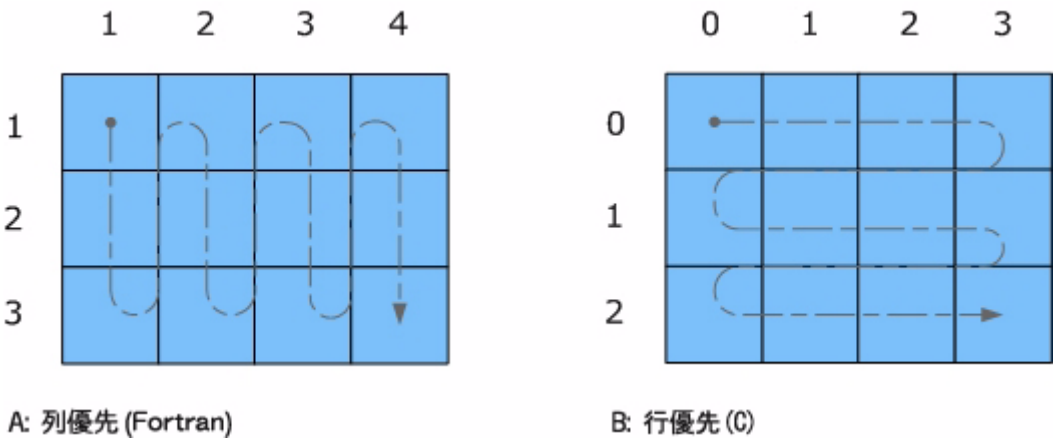
注意 : BLAS95/LAPACK95 を C/C++ から呼び出さないでください。この呼び出しを行うには、Fortran 90 型の遅延形状配列のディスクリプターを処理する知識が必要です。また、BLAS95/LAPACK95 ルーチンには Fortran RTL へのリンクが含まれています。

LAPACK および BLAS

LAPACK ルーチンと BLAS ルーチンは Fortran 形式のため、C 言語プログラムから呼び出す場合、以下の Fortran 形式の呼び出し規則に従う必要があります。

- 変数を *値* ではなく *アドレス* で渡します。
  例 7-2 および例 7-3 の関数呼び出しを参照してください。
- データを Fortran 形式、つまり行優先ではなく列優先で格納します。
  C で採用されている行優先で、配列が格納されているメモリーを全検索すると、最後の配列インデックスが最も速く変更され、最初の配列インデックスが最も遅く変更されます。Fortran 形式の列優先では、最後のインデックスが最も遅く変更され、最初のインデックスが最も速く変更されます (図 7-1 の 2D 配列を参照)。

図 7-1　列優先と行優先



例えば、サイズ m x n の 2 次元行列 A が 1 次元配列 B に格納されている場合、行列の要素は以下のようにアクセスされます。

C の場合 : `A[i][j] = B[i*n+j]` (`i=0, ... , m-1, j=0, ... , n-1`)

Fortran の場合 : `A(i,j) = B(j*m+i)` (`i=1, ... , m, j=1, ... , n`)

LAPACK ルーチンと BLAS ルーチンを C から呼び出す場合、Fortran 言語は大文字と小文字を区別しないことに注意してください。ルーチンの名前には大文字と小文字の両方を使用できます (末尾の下線の有無を含む)。例えば、次のような名前は同じであると見なされます。

- LAPACK: `dgetrf`、`DGETRF`、`dgetrf_`、`DGETRF_`
- BLAS: `dgemm`、`DGEMM`、`dgemm_`、`DGEMM_`

BLAS ルーチンを C から呼び出す方法は、例 7-2 を参照してください。

CBLAS

BLAS ルーチンを C 言語プログラムから呼び出す代わりに、CBLAS インターフェイスを使用することができます。

CBLAS は、BLAS ルーチンの C 形式のインターフェイスです。通常の C 形式の呼び出しを使用して CBLAS ルーチンを呼び出すことができます。CBLAS インターフェイスを使用する場合、ヘッダーファイル `mkl.h` によりすべての関数の列挙値とプロトタイプが指定されるため、プログラム開発は単純化されます。ヘッダーはプログラムが C++ コンパイラーでコンパイルされているかどうかを判断し、コンパイルされている場合、インクルード・ファイルは C++ コンパイル用に設定されます。例 7-3 は、CBLAS インターフェイスの使用例です。

C/C++ での複素数型の使用

インテル ® Fortran コンパイラーのアプリケーション構築ドキュメントで説明しているように、C/C++ では Fortran 型 `COMPLEX(4)` および `COMPLEX(8)` を直接実装していません。しかし、等価の構造を記述することはできます。型 `COMPLEX(4)` は、2 つの 4 バイト浮動小数点からなります。最初の浮動小数点は実数コンポーネントで、2 つめの浮動小数点は虚数コンポーネントです。型 `COMPLEX(8)` は、2 つの 8 バイト浮動小数点を含むことを除けば、`COMPLEX(4)` と同じです。

インテル ® MKL では、複素数型 `MKL_Complex8` および `MKL_Complex16` を提供しています。これらの構造は、Fortran 複素数型 `COMPLEX(4)` および `COMPLEX(8)` と等価です。これらの型は mkl_types.h ヘッダーファイルで定義されています。これらの型を使用して、複素数データを定義できます。`mkl_types.h` ヘッダーファイルをインクルードする前に、独自の型で型を再定義することも可能です。型を定義するときに必要なのは、Fortran 複素数レイアウトとの互換性を保つことです。つまり、複素数型は実部と虚部の値を含む実数のペアでなければなりません。

例えば、C++ コードで以下の定義を使用できます。

```
#define MKL_Complex8 std::complex<float>
```

および

```
#define MKL_Complex16 std::complex<double> .
```

詳細は、例 7-2 を参照してください。コマンドラインでこれらの型を定義することもできます。

```
-DMKL_Complex8="std::complex<float>"
-DMKL_Complex16="std::complex<double>"
```

C/C++ コードで複素数を返す BLAS 関数の呼び出し

C と Fortran では、関数によって返される複素数の制御方法が異なります。BLAS は Fortran 形式なので C から複素数を返す BLAS 関数への呼び出しを行う場合は注意が必要です。しかし、Fortran では、通常の関数呼び出しに加えて、関数が C プログラムから呼び出されたときに複素数の戻り値を返すように、関数をサブルーチンとして呼び出すことができます。Fortran 関数がサブルーチンとして呼び出された場合、戻り値は呼び出しシーケンスで最初のパラメーターになります。これを使用して、C から BLAS 関数を呼び出すことができます。

次の例は、サブルーチンとして呼び出される Fortran 関数を C から呼び出し、隠しパラメーター `result` を表示します。

通常の Fortran 関数呼び出し :	`result = cdotc( n, x, 1, y, 1 )`
関数をサブルーチンとして 呼び出す場合 :	`call cdotc( result, n, x, 1, y, 1)`
C から関数を呼び出す場合 :	`cdotc( &result, &n, x, &one, y, &one )`

メモ : インテル® MKL では、Fortran 形式の (大文字と小文字を区別しない) BLAS で大文字と小文字の両方のエントリーポイントを使用できます (末尾の下線の有無を含む)。このため、`cdotc`、`CDOTC`、`cdotc_`、`CDOTC_` はすべて等価です。

上記の例は、C/C++ アプリケーションから複素数を返すレベル 1 BLAS 関数を呼び出す方法の 1 つです。最も簡単な方法は、CBLAS を使用することです。例えば、以下のように CBLAS インターフェースを使用して、同じ関数を呼び出すことができます。

```
cblas_cdotu( n, x, 1, y, 1, &result )
```

メモ : この場合、複素数は引数リストの最後になります。

以下に、Fortran 形式の BLAS インターフェイスと CBLAS (C 言語) インターフェイスを C/C++ から使用する方法を示します。

次の例は、C プログラムから複素レベル 1 BLAS 関数 `zdotc()` を呼び出す方法を表しています。この関数は、2 つの倍精度複素ベクトルのドット積を計算します。

この例では、複素数型のドット積が構造体 `c` に返されます。

例 7-1　複素レベル 1 BLAS 関数の C からの呼び出し

```
#include "mkl.h"
#define N 5
void main()
{
    MKL_int n = N, inca = 1, incb = 1, i;
    MKL_Complex16 a[N], b[N], c;
    for( i = 0; i < n; i++ ){
    a[i].re = (double)i; a[i].im = (double)i * 2.0;
    b[i].re = (double)(n - i); b[i].im = (double)i * 2.0;
}
zdotc( &c, &n, a, &inca, b, &incb );
printf( "複素ドット積 : ( %6.2f, %6.2f)\n", c.re, c.im );
}
```

以下は C++ 実装です。

例 7-2　複素レベル 1 BLAS 関数の C++ からの呼び出し

```
#include <complex>
#include <iostream>
#define MKL_Complex16 std::complex<double>
#include "mkl.h"

#define N 5

int main()
{
int n, inca = 1, incb = 1, i;
std::complex<double> a[N], b[N], c;
n = N;
for( i = 0; i < n; i++ ){
a[i] = std::complex<double>(i,i*2.0);
b[i] = std::complex<double>(n-i,i*2.0);
}
zdotc(&c, &n, a, &inca, b, &incb );
std::cout << "複素ドット積 : " << c << std::endl;
return 0;
}
```

以下のサンプルは CBLAS を使用しています。

例 7-3 BLAS を C から直接呼び出す代わりに CBLAS インターフェイスを使用

```
#include "mkl.h"
typedef struct{ double re; double im; } complex16;

extern "C" void cblas_zdotc_sub ( const int , const complex16 *,
    const int , const complex16 *, const int, const complex16*);

#define N 5

void main()
{

int n, inca = 1, incb = 1, i;

complex16 a[N], b[N], c;
n = N;
for( i = 0; i < n; i++ ){

a[i].re = (double)i; a[i].im = (double)i * 2.0;
b[i].re = (double)(n - i); b[i].im = (double)i * 2.0;
}
cblas_zdotc_sub(n, a, inca, b, incb,&c );
printf( "複素ドット積 : ( %6.2f, %6.2f)\n", c.re, c.im );
}
```

Boost uBLAS 行列 - 行列乗算のサポート

uBLAS を使用する場合、Boost uBLAS 関数の代わりにインテル® MKL の関数を使って、C++ で BLAS 行列 - 行列乗算を実行できます。uBLAS は Boost C++ オープンソース・ライブラリーに含まれているライブラリーで、密行列、圧縮行列、およびスパース行列で BLAS の機能を利用できます。ライブラリーは式を関数の引数として渡すために式テンプレート方式を使用しており、1 つのパスで (一時行列を使用しないで) ベクトルと行列式を評価できます。uBLAS には 2 つのモードがあります。

- デバッグ (セーフ) モード (デフォルト)
  型と適合性のチェックを行います。
- リリース (高速) モード
  型と適合性のチェックを行いません。このモードを有効にするには、NDEBUG プリプロセッサー・シンボルを使用します。

Boost uBLAS のドキュメントは、http://www.boost.org/ (英語) から入手できます。

インテル® MKL には、uBLAS *dense* 行列 - 行列乗算をインテル® MKL gemm 呼び出しに置換するオーバーロードされた prod() 関数が用意されています。これらの関数は uBLAS 式テンプレートではなく一時行列を使用しますが、行列のサイズが小さくない (50 以上) 場合はパフォーマンスの向上が期待できます。

関数を使用するためにソースコードを変更する必要はありません。関数の呼び出し方法は以下のとおりです。

- コードに (インテル® MKL インクルード・ディレクトリーから) ヘッダーファイル mkl_boost_ublas_matrix_prod.hpp をインクルードします。
- 適切なインテル® MKL ライブラリーをリンク行に追加します (「アプリケーションと インテル® マス・カーネル・ライブラリーのリンク」を参照)。

以下に、置換される式のリストを示します。

```
prod( m1, m2 )
prod( trans(m1), m2 )
prod( trans(conj(m1)), m2 )
prod( conj(trans(m1)), m2 )
prod( m1, trans(m2) )
prod( trans(m1), trans(m2) )
prod( trans(conj(m1)), trans(m2) )
prod( conj(trans(m1)), trans(m2) )
prod( m1, trans(conj(m2)) )
prod( trans(m1), trans(conj(m2)) )
prod( trans(conj(m1)), trans(conj(m2)) )
prod( conj(trans(m1)), trans(conj(m2)) )
prod( m1, conj(trans(m2)) )
prod( trans(m1), conj(trans(m2)) )
prod( trans(conj(m1)), conj(trans(m2)) )
prod( conj(trans(m1)), conj(trans(m2)) )
```

これらの式は、*リリース*モードでのみ (NDEBUG プリプロセッサー・シンボルが定義されている場合のみ) 置換されます。サポートしている uBLAS のバージョンは、Boost 1.34.1、1.35.0、1.36.0、および 1.37.0 です。http://www.boost.org/ から入手できます。

<*mkl ディレクトリー*>/examples/ublas/source/sylvester.cpp ファイルのコードサンプルは、シルベスター方程式の特別なケースを解くインテル® MKL uBLAS ヘッダーファイルの使用例です。

インテル® MKL ublas サンプルを実行するには、BOOST_ROOT パラメーターを make コマンドで指定します。例えば、Boost バージョン 1.37.0 を使用する場合は、次のように指定します。

```
make lib32 BOOST_ROOT=<パス>/boost_1_37_0
```

インテル® MKL 関数の Java アプリケーションからの呼び出し

このセクションでは、インテル® MKL パッケージで提供されるサンプルとライブラリー関数を Java から呼び出す方法を説明します。

インテル® MKL の Java サンプル

インテル® MKL には、以下のディレクトリーにさまざまな Java のサンプルが含まれています。

<*mkl ディレクトリー*>/examples/java

以下のインテル® MKL 関数用のサンプルが提供されています。

- CBLAS の ?gemm、?gemv、および ?dot ファミリー
- 非クラスター FFT 関数の完全なセット
- 1 次元の畳み込み / 相関用 ESSL[1] 形式の関数
- ユーザー定義のものとファイル・サブルーチンを除く VSL 乱数生成器 (RNG)

- GetErrorCallBack、SetErrorCallBack、および ClearErrorCallBack を除く VML 関数

サンプルのソースは以下のディレクトリーにあります。

<mkl ディレクトリー>/examples/java/examples

サンプルは Java で記述されています。サンプルでは、以下の種類のデータを使用しています。

- 1 次元および 2 次元データシーケンス
- データの実数型と複素数型
- 単精度と倍精度

ただし、サンプルで使用されているラッパーは以下のことを行いません。

- 巨大な配列 (要素が 2 億以上) の使用
- ネイティブメモリー中の配列の処理
- 関数パラメーターの正当性の確認
- パフォーマンスの最適化

サンプルでは、インテル® MKL とバインドするために Java Native Interface (JNI 開発者フレームワーク) を使用しています。JNI のドキュメントは、http://java.sun.com/javase/6/docs/technotes/guides/jni/ から入手できます。

Java のサンプルには、バインドを行う JNI ラッパーも含まれています。ラッパーはサンプルに依存しません。独自の Java アプリケーションで使用することもできます。CBLAS、FFT、VML、VSL RNG、および ESSL 形式の畳み込み / 相関関数のラッパーは互いに依存しません。

ラッパーをビルドするには、サンプルを実行してください (詳細は、「サンプルの実行」を参照)。メイクファイルを実行すると、ラッパーのバイナリーがビルドされます。メイクファイルを実行した後、サンプルを実行して、ラッパーが正しくビルドされたかどうかを確認できます。サンプルを実行すると、*<mkl directory>*/examples/java に以下のディレクトリーが作成されます。

- docs
- include
- classes
- bin
- _results

docs、include、classes、および bin ディレクトリーには、ラッパーのバイナリーとドキュメントが含まれます。_results ディレクトリーには、テスト結果が含まれます。

Java プログラマーにとってラッパーは次のような Java クラスです。

- com.intel.mkl.CBLAS
- com.intel.mkl.DFTI
- com.intel.mkl.ESSL
- com.intel.mkl.VML
- com.intel.mkl.VSL

特定のラッパーとサンプルのクラスのドキュメントは、サンプルのビルドおよび実行中に Java ソースから生成されます。ドキュメントを参照するには、(ビルドスクリプトを実行すると作成される) docs ディレクトリーにある次のファイルを開いてください。

<mkl ディレクトリー>/examples/java/docs/index.html

CBLAS、VML、VSL RNG、および FFT 用の Java ラッパーは、基本となるネイティブ関数に直接対応するインターフェイスを確立します。機能とパラメーターについては、『インテル® MKL リファレンス・マニュアル』を参照してください。ESSL 形式の関数用のインターフェイスは、com.intel.mkl.ESSL クラス用に生成されたドキュメントで説明されています。

1. IBM ESSL (Engineering Scientific Subroutine Library)。

各ラッパーは、Java のインターフェイス部分と C で記述された JNI スタブで構成されています。ソースは以下のディレクトリーにあります。

<mkl ディレクトリー>/examples/java/wrappers

CBLAS と VML 用のラッパーの Java と C 部分はどちらも標準的なアプローチを採用しているため、追加の CBLAS 関数をカバーするために使用できます。

FFT 用のラッパーは、FFT ディスクリプター・オブジェクトのライフサイクルをサポートする必要があるため、より複雑です。単一フーリエ変換を計算するには、アプリケーションはネイティブ FFT ディスクリプターの同じコピーを使用して FFT ソフトウェアを複数回呼び出す必要があります。ラッパーは、仮想マシンが Java バイトコードを実行する間、ネイティブ・ディスクリプターを保持するハンドラークラスを提供します。

VSL RNG 用のラッパーは、FFT 用のラッパーと似ています。ラッパーは、ストリームステートのネイティブ・ディスクリプターを保持するハンドラークラスを提供します。

畳み込み / 相関関数用のラッパーは、" タスク・ディスクリプター " と同様のライフサイクルを仮定し、VSL インターフェイスの難易度を緩和します。ラッパーは、1 次元でより単純な、これらの関数の ESSL 形式の関数を使用します。JNI スタブは、C で記述された ESSL 形式のラッパーにインテル ® MKL 関数をラップし、ネイティブメソッドへの単一呼び出しにタスク・ディスクリプターのライフサイクルを " パック " します。

ラッパーは、JNI 仕様 1.1 および 5.0 を満たしているため、新しい Java のすべての実装で動作します。

サンプルとラッパーの Java 部分は、『The Java Language Specification (First Edition)』で説明されている Java 言語用に記述され、1990 年代後半に登場したインナークラスの機能が拡張されています。この言語バージョンのレベルは、Sun の JDK (Java 開発キット) のすべてのバージョンと、バージョン 1.1.5 以降の互換性のある実装をサポートしています。

C 言語レベルは、インテル ® MKL インターフェイスと JNI ヘッダーファイルで必要な、整数と浮動小数点データ型に関する追加の仮定を含む " 標準 C" (C89) です。つまり、ネイティブ `float` および `double` データ型は、JNI `jfloat` および `jdouble` データ型とそれぞれ同じである必要があります。また、ネイティブ `int` データ型は、4 バイト長でなければなりません。

サンプルの実行

Java のサンプルは、インテル ® MKL でサポートされている C/C++ コンパイラーをすべてサポートしています。メイクファイルを実行するには、Linux* OS ディストリビューションで提供される make ユーティリティーが必要です。

Java のサンプルを実行するには、Java コードのコンパイルと実行に JDK 開発者ツールキットが必要です。Java 実装はコンピューターにインストールされているか、ネットワーク経由で利用可能でなければなりません。JDK は、各ベンダーの Web サイトからダウンロードできます。

サンプルは、JDK のすべてのバージョンで動作するように作成されていますが、以下の Java 実装とサポートされているアーキテクチャでのみテストされています。

- Sun Microsystems 社 (http://sun.com) の J2SE* SDK 1.4.2、JDK 5.0 および 6.0
- Oracle 社 (http://oracle.com/) の JRockit* JDK 1.4.2 および 5.0

コンピューターに JRE (Java ランタイム環境) がインストールされている場合でも、以下のツールをサポートする JDK 開発者ツールキットが必要です。

- java
- javac
- javah
- javadoc

これらのツールをサンプルのメイクファイルで利用できるようにするには、例えば、bash シェルを使用して、`JAVA_HOME` 環境変数を設定し、`PATH` 環境変数に JDK バイナリーのディレクトリーを追加する必要があります。

```
export JAVA_HOME=/home/<user name>/jdk1.5.0_09
```

```
export PATH=${JAVA_HOME}/bin:${PATH}
```

JDK_HOME 環境変数に値が割り当てられている場合は、この環境変数をクリアしてください。

```
unset JDK_HOME
```

サンプルを開始するには、インテル® MKL の Java サンプルが含まれているディレクトリーにあるメイクファイルを使用します。

```
make {so32|soem64t|so64|lib32|libem64t|lib64} [function=...] [compiler=...]
```

ターゲット (例えば so32) を省略して make コマンドを実行すると、ターゲットとパラメーターを説明するヘルプ情報が表示されます。

サンプルのリストは、Java サンプルのディレクトリーにある examples.lst ファイルを参照してください。

既知の制限事項

このセクションでは、Java サンプルの制限事項について説明します。

機能 : インテル® MKL の Java サンプルのように、ラッパーを使用して Java 環境から呼び出された場合、一部のインテル® MKL 関数が正常に動作しない可能性があります。「インテル® MKL の Java サンプル」セクションにリストされている、CBLAS、FFT、VML、VSL RNG、および畳み込み / 相関関数は、Java 環境でテストされています。このため、独自の Java アプリケーションでは、これらの CBLAS、FFT、VML、VSL RNG、および畳み込み / 相関関数用の Java ラッパーを使用してください。

パフォーマンス : インテル® MKL 関数はピュア Java で記述された同様の関数よりも高速です。ただし、これらのラッパーの目的は、最大限のパフォーマンスを提供することではなく、コードサンプルを提供することです。このため、Java アプリケーションから呼び出されたインテル® MKL 関数は、C/C++ または Fortran で記述されたプログラムから呼び出された同じ関数よりも遅くなります。

既知の問題 : インテル® MKL には (『リリースノート』に示されている) 既知の問題があります。また、JDK の異なるバージョンでは互換性がないものがあります。サンプルおよびラッパーには、これらの問題の回避策が用意されています。サンプルおよびラッパーのソースコードに記述されている、回避策についてのコメントを参照してください。

コーディングのヒント 8

本章は、インテル® マス・カーネル・ライブラリー (インテル® MKL) を使用したプログラミングについて、数値計算の安定性など、特定の用途を満たすのに役立つコーディングのヒントを紹介します。一般的な言語固有のプログラミング・オプションは第 7 章を、パフォーマンスとメモリー管理に関連するコーディングのヒントは第 6 章を参照してください。

数値計算安定性のためのデータの整列

ビットレベルで同一の入力データセットに対して線形代数ルーチン (LAPACK, BLAS) を適用する際に、配列のアライメントが異なっていたり、異なるプラットフォーム上や異なるスレッド数で計算が行われると、計算結果は適切な誤差範囲に収まりますが同一にはなりません。バージョンによってルーチンの実装が異なる場合があるため、インテル® MKL のバージョンは計算結果の安定性に影響します。同じインテル® MKL バージョンで、以下の条件がすべて満たされる場合のみ、出力結果のすべてのビットが同じになります。

- 計算に使用されるプラットフォームが同じである
- 入力データがビットレベルで同一である
- 入力配列が 16 バイト境界でアライメントされている
- インテル® MKL が逐次モードで実行されている

最初の 2 つの条件はユーザーが制御できますが、配列のデフォルトのアライメントは制御できません。例えば、`malloc` を使用して動的に割り当てられた配列は、16 バイトではなく 8 バイト境界でアライメントされます。数値的に同じ出力が必要な場合、以下のように、`mkl_malloc()` を使用して正しくアライメントされたワークスペースを取得してください。

例 8-1　16 バイト境界でアドレスをアライメント

```
// ******* C 言語 *******
...
#include <stdlib.h>
...
void *darray;
int workspace;
...
// 16 ビット境界でアライメントされたワークスペースを割り当てる
darray = mkl_malloc( sizeof(double)*workspace, 16 );
...
// MKL を使用してプログラムを呼び出す
mkl_app( darray );
...
// ワークスペースを解放する
mkl_free( darray );

!******* Fortran 言語 *******
...
double precision darray
pointer (p_wrk,darray(1))
integer workspace
...
!16 ビット境界でアライメントされたワークスペースを割り当てる
p_wrk = mkl_malloc( 8*workspace, 16 )
...
!MKL を使用してプログラムを呼び出す
call mkl_app( darray )
...
! ワークスペースを解放する
call mkl_free(p_wrk)
```

インテル ® マス ・ カーネル ・ ライブラリー ・ クラスター ・ ソフトウェアの使用

9

本章は、インテル ® マス ・ カーネル ・ ライブラリー (インテル ® MKL) ScaLAPACK とクラスター FFT の使用法について説明します。

インテル ® MKL のディレクトリー構造の詳細と doc ディレクトリーに含まれるドキュメントについては、第 3 章を参照してください。

クラスター用の MP LINPACK ベンチマークに関する情報は、第 11 章を参照してください。

インテル ® MKL ScaLAPACK およびクラスター FFT は、『インテル ® MKL リリースノート』に記述されている MPI 実装をサポートしています。

ScaLAPACK およびクラスター FFT とのリンク

ScaLAPACK とクラスター FFT の両方またはいずれか一方を呼び出すプログラムをリンクするには、まず MPI アプリケーションのリンク方法を知っておく必要があります。

この操作には、*mpi* スクリプトを使用します。例えば、正しい MPI ヘッダーファイルを使用する *mpicc* (C スクリプト) や *mpif77* (FORTRAN 77 スクリプト) です。これらのスクリプトと MPI ライブラリーの場所は、使用している MPI 実装によって異なります。例えば、MPICH のデフォルト ・ インストールでは、コンパイラー ・ スクリプトは /opt/mpich/bin/mpicc および /opt/mpich/bin/mpif77 に、MPI ライブラリーは /opt/mpich/lib/libmpich.a になります。

特定の実装のリンクに関する詳細は、各 MPI 実装のドキュメントを確認してください。

インテル ® MKL ScaLAPACK とクラスター FFT の両方またはいずれか一方とリンクするには、以下の一般的な形式のを使用します。

```
<<MPI> リンカースクリプト > < リンクするファイル >                    \
        -L<MKL パス > [-Wl,--start-group] <MKL クラスター ・ ライブラリー > \
        <BLACS> <MKL コア ・ ライブラリー > [-Wl,--end-group]
```

説明 :

<MPI> は、MPI 実装 (MPICH、インテル ® MPI 2.x/3.x、...) のいずれか 1 つです。

<MKL クラスター ・ ライブラリー > は、表 3-6 、表 3-7 および表 3-8 にリストされている、該当アーキテクチャー用の ScaLAPACK またはクラスター FFT ライブラリーのいずれか 1 つです。例えば、IA-32 アーキテクチャーの場合、-lmkl_scalapack_core または -lmkl_cdft_core のいずれかです。

<BLACS> は、該当するアーキテクチャー、プログラミング ・ インターフェイス (LP64 または ILP64)、MPI バージョン用の BLACS ライブラリーです。表 3-6 、表 3-7 、および 表 3-8 にリストされています。例えば、IA-32 アーキテクチャーの場合、使用している MPI のバージョンにより -lmkl_blacs、-lmkl_blacs_intelmpi、または -lmkl_blacs_openmpi のいずれか 1 つを選択します (インテル ® MPI 3.x の場合は -lmkl_blacs_intelmpi を使用)。

<MKL コア ・ ライブラリー> は、ScaLAPACK の場合は *<MKL LAPACK & MKL カーネル ・ ライブラリー >*、クラスター FFT の場合は *<MKL カーネル ・ ライブラリー >* です。

<MKL カーネル ・ ライブラリー> は、「リンク行のライブラリーのリスト」に記述されているように、スレッド化をサポートするためにリンクされる、プロセッサー最適化カーネル、スレッド化ライブラリー、およびシステム ・ ライブラリーです。

<MKL LAPACK & カーネル ・ ライブラリー> は、LAPACK ライブラリーと *<MKL カーネル ・ ライブラリー>* です。

スタティック ・ リンクの場合は、グループ化シンボル `-Wl,--start-group` および `-Wl,--end-group` が必要です。

<<MPI> リンカースクリプト> は、MPI のバージョンに対応していなければなりません。例えば、インテル® MPI 3.x の場合、*<Intel MPI 3.x linker script>* を使用します。

例えば、インテル® MPI 3.x で ScaLAPACK の LP64 インターフェイスをスタティックに使用し、コアあたりの MPI プロセスが 1 つの場合 (つまり、スレッド化を行わない場合)、次のリンカーオプションを指定します。

```
-L$MKLPATH -I$MKLINCLUDE -Wl,--start-group
$MKLPATH/libmkl_scalapack_lp64.a $MKLPATH/libmkl_blacs_intelmpi_lp64.a
$MKLPATH/libmkl_intel_lp64.a $MKLPATH/libmkl_sequential.a
$MKLPATH/libmkl_core.a -static_mpi -Wl,--end-group -lpthread -lm
```

詳細は、「ScaLAPACK およびクラスター FFT とのリンク例」を参照してください。

ヒント : Web ベースのリンク ・ アドバイザーを使用して、適切な *<MKL クラスター ・ ライブラリー>*、*<BLACS>*、および *<MKL コア ・ ライブラリー>* を簡単に選択することができます。

インテル® MKL ライブラリーのリンクについては、「アプリケーションと インテル® マス ・ カーネル ・ ライブラリーのリンク」を参照してください。

スレッド数の設定

OpenMP* ソフトウェアは、`OMP_NUM_THREADS` 環境変数を使用します。インテル® MKL には、`MKL_NUM_THREADS` 環境変数や `MKL_DOMAIN_NUM_THREADS` 環境変数のような、スレッド数を設定するほかの方法も用意されています (「新しいスレッド化コントロールの使用」を参照)。

関連する環境変数がすべてのノードにおいて同じで正しい値になっていることを確認してください。インテル® MKL バージョン 10.0 以降では、デフォルトのスレッド数は 1 ではなく、コンパイラーとともに使用している OpenMP ライブラリーに応じて設定されます。インテル® コンパイラー ・ ベースのスレッド化レイヤー (`libmkl_intel_thread.a`) では、この値は OS の CPU の数です。

注意 : 例えば、ノードあたりの MPI ランクの数とノードあたりのスレッド数の両方が 1 よりも大きい場合、スレッド数が過剰に指定されないようにしてください。ノードあたりの MPI ランクの数とノードあたりのスレッド数の積が、ノードあたりの物理コア数を越えることはできません。

`OMP_NUM_THREADS` のような環境変数を設定する最良の方法は、ログイン環境です。`mpirun` はすべてのノードでデフォルトシェルを開始するため、ヘッドノードでこの値を変更してから実行しても、SMP システムのようにすべてのノードで変数の変更は反映されません。すべてのノードでスレッド数を変更するには、`.bashrc` で先頭に次の行を追加します。

```
OMP_NUM_THREADS=1; export OMP_NUM_THREADS
```

MPICH を使用してノードごとに複数の CPU を実行するは可能ですが、そのためには MPICH を構築する必要があります。特定の MPICH アプリケーションはスレッド化環境では正常に動作しない場合があることに注意してください (『リリースノート』の「既知の制限事項」セクションを参照)。MPICH で 1 よりも大きなスレッド数を設定したときに問題が発生した場合は、まずスレッド数を 1 に設定して問題が解消するかどうか確認してください。

共有ライブラリーの使用

ランタイム時にすべてのノードは、必要なすべての共有ライブラリーにアクセスできなければなりません。そのためには、 `.bashrc` ファイルで `LD_LIBRARY_PATH` 環境変数にこれらのライブラリーを指定します。

インテル® MKL が 1 つのノードにのみインストールされている場合は、インテル® MKL アプリケーションをビルドするときに共有ライブラリーを使用しないで静的にリンクしてください。

インテル® コンパイラーまたは GNU コンパイラーは、インテル® MKL を使用するプログラムをコンパイルすることができます。正しい組み合わせの MPI 実装とコンパイラーを使用してください。

ScaLAPACK テストのビルド

ScaLAPACK テストのビルド方法は次のとおりです。

- IA-32 アーキテクチャーの場合、リンクコマンドに `libmkl_scalapack_core.a` を追加します。
- IA-64 およびインテル® 64 アーキテクチャーの場合、目的のインターフェイスに応じて、`libmkl_scalapack_lp64.a` または `libmkl_scalapack_ilp64.a` を追加します。

ScaLAPACK およびクラスター FFT とのリンク例

インテル® MKL のアーキテクチャー固有のディレクトリー構造とリンクするクラスター ・ ライブラリーの名前の詳細は、「詳細なディレクトリー構造」を参照してください。

C アプリケーションのリンク例

これらの例は、以下の条件の場合に、メインモジュールが C のアプリケーションをリンクする方法を示します。

- MPICH2 1.0.7 以降が `/opt/mpich` にインストールされている。
- `$MKLPATH` が *<mkl ディレクトリー>*`/lib/32` を含むユーザー定義変数である。
- インテル® C++ コンパイラー 10.0 以降を使用している。

IA-32 アーキテクチャー ・ ベースのシステムのクラスターで ScaLAPACK をリンクするには :

以下のコマンドを使用します。

```
/opt/mpich/bin/mpicc <リンクするユーザーファイル>                    \
      -L$MKLPATH                                                    \
      -lmkl_scalapack_core                                          \
      -lmkl_blacs_intelmpi                                          \
      -lmkl_lapack                                                  \
      -lmkl_intel -lmkl_intel_thread -lmkl_lapack -lmkl_core        \
      -liomp5 -lpthread
```

IA-32 アーキテクチャー ・ ベースのシステムのクラスターでクラスター FFT をリンクするには :

以下のコマンドを使用します。

```
/opt/mpich/bin/mpicc < リンクするユーザーファイル > \
      $MKLPATH/libmkl_cdft_core.a                  \
      $MKLPATH/libmkl_blacs_intelmpi.a             \
      $MKLPATH/libmkl_intel.a                      \
      $MKLPATH/libmkl_intel_thread.a               \
      $MKLPATH/libmkl_core.a                       \
      -liomp5 -lpthread
```

Fortran アプリケーションのリンク例

これらの例は、以下の条件の場合に、メインモジュールが Fortran のアプリケーションをリンクする方法を示します。

- インテル® MPI 3.0 が `/opt/intel/mpi/3.0` にインストールされている。
- `$MKLPATH` が *<mkl ディレクトリー >*`/lib/64` を含むユーザー定義変数である。
- インテル® Fortran コンパイラー 10.0 以降を使用している。

IA-64 アーキテクチャー ・ ベースのシステムのクラスターで ScaLAPACK をリンクするには :

以下のコマンドを使用します。

```
/opt/intel/mpi/3.0/bin/mpiifort < リンクするユーザーファイル >          \
      -L$MKLPATH                                                      \
      -lmkl_scalapack_lp64                                            \
      -lmkl_blacs_intelmpi_lp64                                       \
      -lmkl_lapack                                                    \
     -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_lapack -lmkl_core      \
      -liomp5 -lpthread
```

IA-64 アーキテクチャー ・ ベースのシステムのクラスターでクラスター FFT をリンクするには :

以下のコマンドを使用します。

```
/opt/intel/mpi/3.0/bin/mpiifort < リンクするユーザーファイル >     \
      $MKLPATH/libmkl_cdft_core.a                                 \
      $MKLPATH/libmkl_blacs_intelmpi_ilp64.a                      \
      $MKLPATH/libmkl_intel_ilp64.a                               \
$MKLPATH/libmkl_intel_thread.a                                   \
      $MKLPATH/libmkl_core.a                                      \
      -liomp5 -lpthread
```

ScaLAPACK とリンクされたバイナリーは、ほかの MPI アプリケーションと同じ方法で動作します (詳細は、MPI 実装に含まれているドキュメントを参照してください)。例えば、スクリプト `mpirun` は MPICH 2 および OpenMPI の場合に使用され、MPI プロセスの数は `-np` で設定されます。MPICH 2.0 およびすべてのインテル® MPI の場合、アプリケーションを実行する前にデーモンを開始する必要があります。実行にはスクリプト `mpiexec` を使用します。

他のリンク例は、インテル製品のサポート Web サイト http://www.intel.com/software/products/support/ (英語) を参照してください。

Eclipse* IDE でのプログラミング支援機能

10

本章は、Eclipse* IDE でのプログラム作成を支援するインテル® マス・カーネル・ライブラリー (インテル® MKL) の機能について説明します。

- IDE 内でインテル® MKL リファレンス・マニュアルを表示
- Eclipse Help でインテルの Web サイトを検索
- Eclipse C/C++ Development Tools (CDT) の状況依存ヘルプ
- Eclipse CDT の Code/Content Assist

最初の 3 つの機能は、Eclipse Help 用のインテル® MKL プラグインにより提供されます (インストール後のプラグインの場所は、表 3-2 を参照)。プラグインを使用するには、Eclipse ディレクトリーの plugins フォルダーにプラグインをコピーしてください。

最後の機能は、Eclipse CDT 固有の機能です。Eclipse ヘルプの「Code Assist」セクションを参照してください。

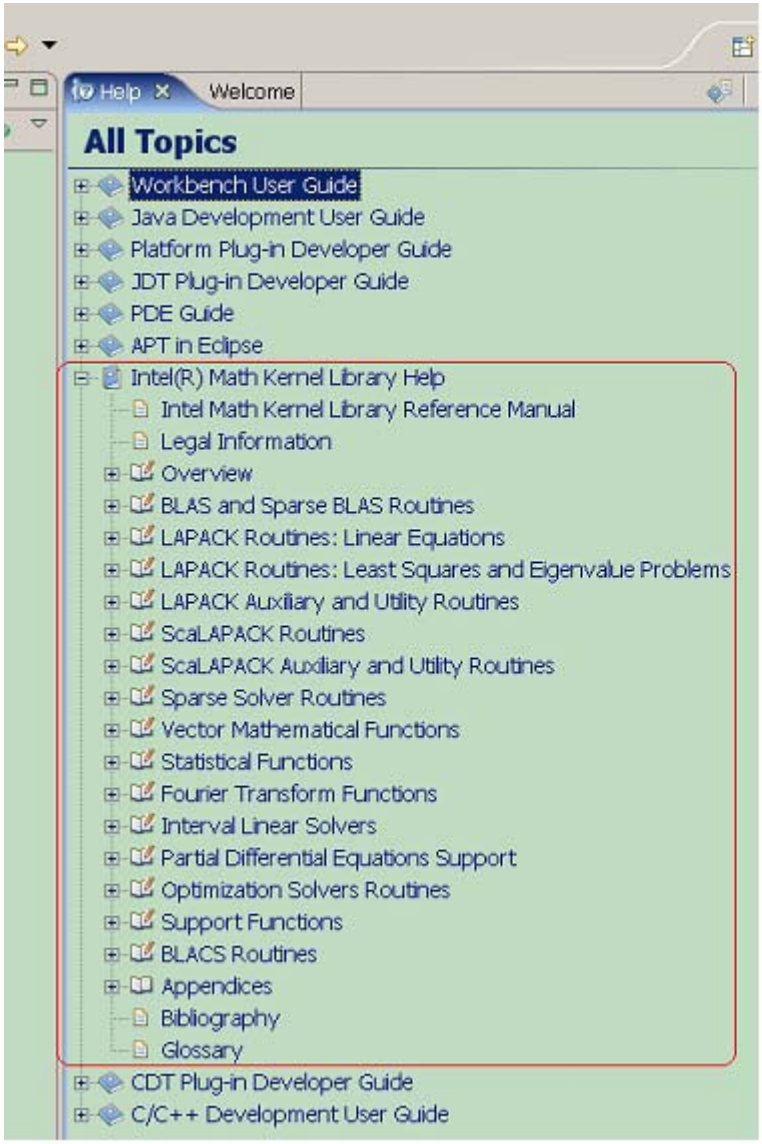
Eclipse IDE 内でインテル® MKL リファレンス・マニュアルを表示

Eclipse でリファレンス・マニュアルを表示するには、次の手順を行います。

1. メニューから [Help] > [Help Contents] を選択します。
2. [Help] タブの [All Topics] で、[Intel(R) Math Kernel Library Help] をクリックします。
3. [Help] ツリーを展開して、[Intel MKL Reference Manual] をクリックします (図 10-1 を参照)。

インテル® MKL ヘルプ索引が Eclipse で利用できます。リファレンス・マニュアルは Eclipse Help の検索に含まれます。

図 10-1 Eclipse IDE のインテル® MKL ヘルプ

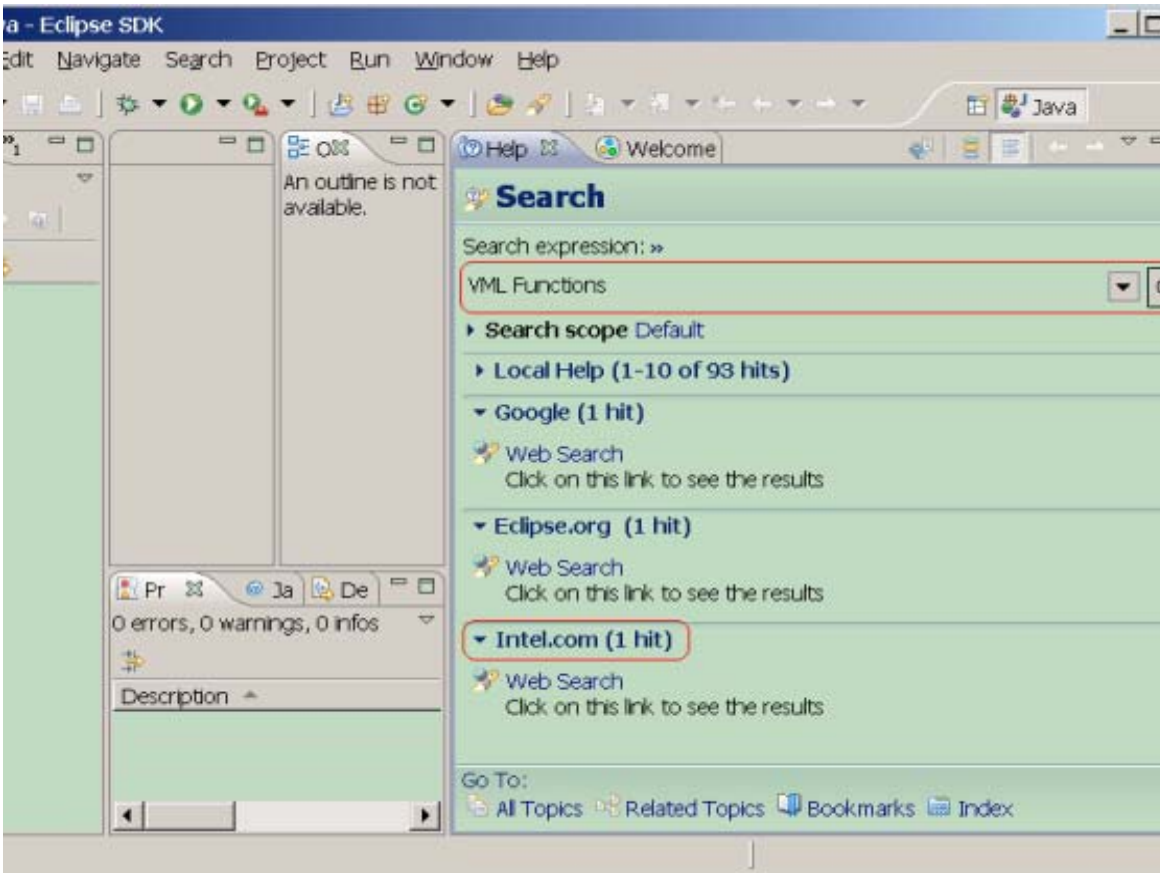


Eclipse IDE からインテルの Web サイトを検索

インテル® MKL プラグインにより、Eclipse Help で http://www.intel.com が検索されるようになります。Eclipse Help ペインで検索を行うと、サイトで見つかった数が別々のリンクで表示されます。図 10-2 は、Eclipse Help で "VML Functions" を検索した結果です。ここで、**1 hit** は各サイトでエントリーが 1 つ見つかったことを意味します。

"**Intel.com (1 hit)**" をクリックすると、インテルの Web サイトで見つかった項目のリストが表示されます。

図 10-2 Eclipse IDE Help の検索でインテルの Web サイトに見つかった数



Eclipse IDE CDT での状況依存ヘルプの使用

Eclipse CDT エディターで状況依存ヘルプ (Infopop ウィンドウおよび F1 ヘルプ) を表示することができます。

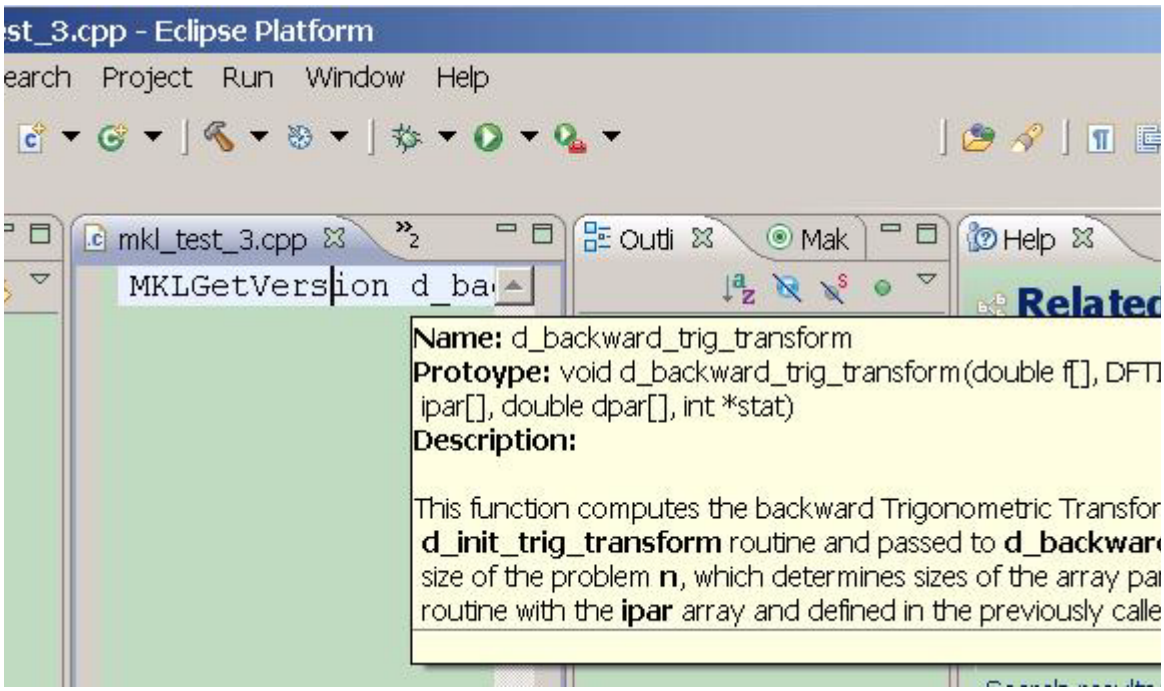
Infopop ウィンドウ

Infopop ウィンドウは、C の関数を説明するポップアップ・ウィンドウです。

メモ : 現在のリリースでは、Infopop ウィンドウは VML 関数でのみ利用できます。

エディターでインテル ® MKL 関数の説明を表示するには、マウスのポインターを関数名上に置きます。

図 10-3 Infopop ウィンドウに表示されたインテル® MKL 関数の説明



F1 ヘルプ

F1 ヘルプは、キーワードに関連するドキュメントのトピックのリストを表示します。

エディター・ウィンドウでインテル® MKL 関数の F1 ヘルプを表示するには、次の手順を行います。

1. マウスのポインターを関数名の上に置きます。
2. F1 を押すか、名前をダブルクリックします。
   2 つのリストが表示されます。
   - 製品ドキュメントの関連トピックへのリンクのリストが、[See also] の [Related Topics] ページに表示されます。インテル® MKL ヘルプ索引との関連性が設定されます (図 10-4 を参照)。通常、各関数のリストに 1 つのリンクが表示されます。
   - 関数名の検索結果のリストが [Dynamic Help] の [Related Topics] ページに表示されます (図 10-5 を参照)。
3. リンクをクリックすると、該当するヘルプトピックが表示されます。

図 10-4 Eclipse IDE の F1 ヘルプ

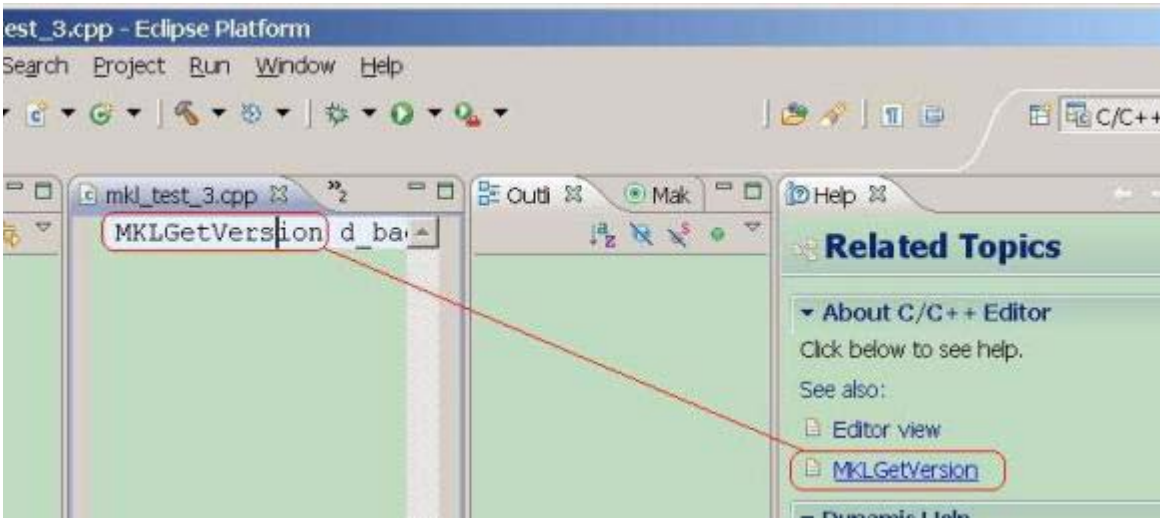
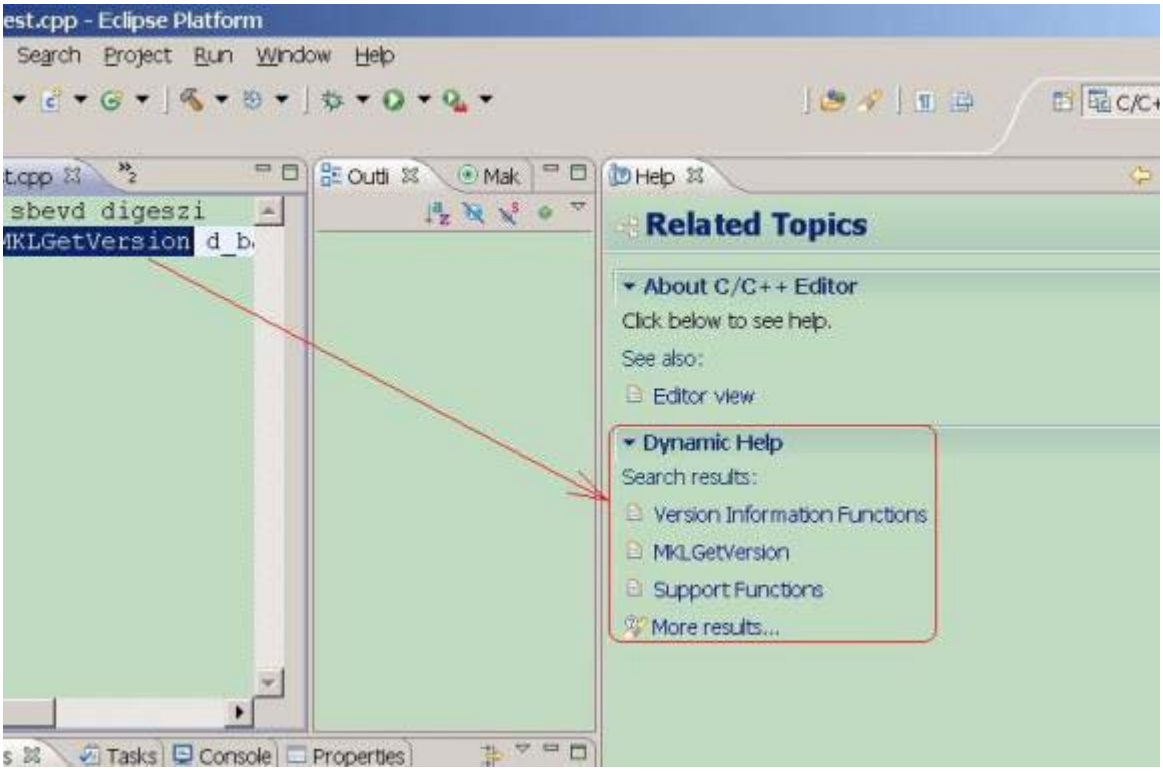


図 10-5 Eclipse IDE CDT での F1 ヘルプの検索



LINPACK ベンチマークと MP LINPACK ベンチマーク

11

本章は、Intel® Optimized LINPACK Benchmark for Linux* OS (共有メモリーシステム用) と Intel® Optimized MP LINPACK Benchmark for Clusters (分散メモリーシステム用) について説明します。

Intel® Optimized LINPACK Benchmark for Linux OS

Intel® Optimized LINPACK Benchmark は、LINPACK 1000 ベンチマークを一般化したものです。このベンチマークは、稠密な (`real`*8) 連立線形方程式 (*Ax=b*) を解き、因数分解して解くためにかかった時間を測定し、時間をパフォーマンス比率に変換して結果の精度をテストします。一般化により、1000 を超える方程式 (*N*) を解くことができます。正確な結果が得られるように、部分的なピボット演算を使用しています。

このベンチマークは、コンパイルされたコードのみを対象とするベンチマークであるため、LINPACK 100 のパフォーマンスのレポートとして使用しないでください。これは単一プラットフォーム上で実行する共有メモリー (SMP) 用の実装です。このベンチマークと以下の項目を混同しないでください。

- MP LINPACK - 同じベンチマークの分散メモリーバージョン。
- LINPACK - LAPACK ライブラリーで拡張されたライブラリー。

インテルでは、HPL (High Performance Linpack) ベンチマークよりも簡単にインテル ® プロセッサーを搭載するシステムで高い LINPACK ベンチマーク結果が得られる、LINPACK ベンチマークの最適化バージョンを提供しています。SMP マシンのベンチマークには、このパッケージを使用してください。

このソフトウェアの詳細は、http://www.intel.com/software/products/ (英語) を参照してください。

内容

Intel® Optimized LINPACK Benchmark for Linux OS には、以下のファイルが含まれています。ファイルは、インテル ® MKL ディレクトリーの `/benchmarks/linpack/` サブディレクトリーにあります (表 3-2 を参照)。

表 11-1 LINPACK Benchmark の内容

./benchmarks/linpack/	
linpack_itanium	インテル® Itanium® プロセッサー・ベースのシステム用 64 ビット・プログラム
linpack_xeon32	ストリーミング SIMD 拡張命令 3 (SSE3) 対応 / 非対応インテル® Xeon® プロセッサーまたはインテル® Xeon® プロセッサー MP ベースのシステム用 32 ビット・プログラム
linpack_xeon64	インテル® 64 アーキテクチャー対応インテル® Xeon® プロセッサー・ベースのシステム用 64 ビット・プログラム
runme_itanium	linpack_itanium 用に事前に定義された問題セットを実行するためのサンプル・シェル・スクリプト。OMP_NUM_THREADS は 8 プロセッサーに設定されます。
runme_xeon32	linpack_xeon32 用に事前に定義された問題セットを実行するためのサンプル・シェル・スクリプト。OMP_NUM_THREADS は 2 プロセッサーに設定されます。
runme_xeon64	linpack_xeon64 用に事前に定義された問題セットを実行するためのサンプル・シェル・スクリプト。OMP_NUM_THREADS は 4 プロセッサーに設定されます。
lininput_itanium	runme_itanium スクリプト用に事前に定義された問題の入力ファイル。
lininput_xeon32	runme_xeon32 スクリプト用に事前に定義された問題の入力ファイル。
lininput_xeon64	runme_xeon64 スクリプト用に事前に定義された問題の入力ファイル。
lin_itanium.txt	runme_itanium スクリプトを実行した結果。
lin_xeon32.txt	runme_xeon32 スクリプトを実行した結果。
lin_xeon64.txt	runme_xeon64 スクリプトを実行した結果。
help.lpk	標準ヘルプファイル。
xhelp.lpk	拡張ヘルプファイル。

ソフトウェアの実行

指定したシステムで事前に定義されたサンプル問題サイズの結果を得るには、次のいずれかのコマンドを入力します。

```
./runme_itanium
./runme_xeon32
./runme_xeon64
```

ほかの問題サイズでソフトウェアを実行する方法は、プログラムに含まれている拡張ヘルプを参照してください。拡張ヘルプは、以下のように -e オプションを指定してプログラムを実行すると表示されます。

```
./xlinpack_itanium -e
./xlinpack_xeon32 -e
./xlinpack_xeon64 -e
```

データ入力ファイル lininput_itanium、lininput_xeon32、および lininput_xeon64 は、単なる例として提供されています。プロセッサー数やメモリー容量が異なるシステムでは入力ファイルを変更する必要があります。入力ファイルを変更する適切な方法は、拡張ヘルプを参照してください。

各入力ファイルでは、少なくとも以下のメモリー容量が必要です。

lininput_itanium　16GB

`lininput_xeon32`	2GB
`lininput_xeon64`	16GB

システムのメモリー容量が上記のデータ入力ファイルで必要なメモリー容量よりも少ない場合、拡張ヘルプで説明されているように、既存のデータ入力ファイルを編集するか、新しいデータ入力ファイルを作成する必要があります。

各サンプルスクリプトでは、`OMP_NUM_THREADS` 環境変数を使用してターゲットのプロセッサー数を設定します。異なる物理プロセッサー数でパフォーマンスを最適化するには、該当する行を適切な値に変更してください。スレッド数を設定しないで Intel® Optimized LINPACK Benchmark を実行すると、OS に応じてデフォルトのコア数が設定されます。この環境変数の設定は、`runme_*` サンプルスクリプトで行われています。設定が使用している環境と一致しない場合、スクリプトを編集してください。

既知の制限事項

Intel® Optimized LINPACK Benchmark for Linux OS には、以下の既知の制限があります。

- Intel® Optimized LINPACK Benchmark は、複数のプロセッサーを使用して効率的にスレッド化されます。このため、ハイパースレッディング・テクノロジー対応のマルチプロセッサー・システムで最適なパフォーマンスを得るには、オペレーティング・システムが物理プロセッサーにのみスレッドを割り当てられるように、ハイパースレッディング・テクノロジーを無効にしてください。
- 不完全なデータ入力ファイルが指定されると、バイナリーはハングアップするか失敗します。正しいデータ入力ファイルの作成方法は、データ入力ファイルのサンプルまたは拡張ヘルプを参照してください。

Intel® Optimized MP LINPACK Benchmark for Clusters

Intel® Optimized MP LINPACK Benchmark for Clusters は、テネシー大学ノックスビル校 (UTK) の Innovative Computing Laboratories (ICL) が提供している HPL 2.0 をベースに修正、追加したものです。この Intel® Optimized MP LINPACK Benchmark for Clusters は、Top 500 (http://www.top500.org を参照) の実行に使用することができます。ベンチマークを使用するには、HPL ディストリビューションと使用法について熟知している必要があります。Intel® Optimized MP LINPACK Benchmark for Clusters は、HPL をより便利に使用できるように、追加の拡張とバグフィックスが行われています。パフォーマンスを向上するインテル ® MPI (Message-Passing Interface) 設定についても説明します。`./benchmarks/mp_linpack` ディレクトリーには、長時間の実行における検索時間を最小限に抑えるための手法が加えられています。

Intel® Optimized MP LINPACK Benchmark for Clusters は、HPL コードによる Massively Parallel MP LINPACK (LINPACK の超並列対応版) ベンチマークの実装です。このベンチマークは、ランダムで稠密な (`real`*8) 連立線形方程式 (*Ax=b*) を解き、因数分解して解くためにかかった時間を測定し、時間をパフォーマンス比率に変換して結果の精度をテストします。メモリーに収まる任意のサイズ (*N*) の連立方程式を解くことができます。ベンチマークは、正確な結果が得られるように、完全な行ピボット演算を使用しています。

Intel® Optimized MP LINPACK Benchmark for Clusters は、分散メモリーマシンで使用します。共有メモリーマシンでは、Intel® Optimized LINPACK Benchmark を使用してください。

インテルでは、HPL ベンチマークよりも簡単にインテル ® プロセッサー・ベースのシステムで高い LINPACK ベンチマーク結果が得られる LINPACK ベンチマークの最適化バージョンを提供しています。クラスターのベンチマークには、Intel® Optimized MP LINPACK Benchmark を使用してください。事前構築バイナリーを使用するには、クラスターにインテル ® MPI 3.x をインストールする必要があります。インテル ® MPI のランタイムバージョンは、www.intel.com/software/products/cluster からダウンロードできます。

このパッケージには、テネシー大学ノックスビル校の Innovative Computing Laboratories (ICL) で開発されたソフトウェアが含まれていますが、これはテネシー大学や ICL が本製品を推奨あるいは販促していることを意味するわけではありません。HPL 2.0 は特定の条件の下で再配布することができますが、このパッケージはインテル® MKL の使用許諾契約書に基づきます。

インテル® MKL の新しいバージョンでは、ハイブリッド・ビルドと呼ばれる新しい機能が MP LINPACK に追加されました。以前のバージョンも引き続きサポートしています。「ハイブリッド」とは、OpenMP*/MPI を組み合わせた並列処理を活用するために追加された特別な最適化のことを指します。

ノードあたり 1 つの MPI プロセスを使用して、OpenMP によるさらに高度な並列処理を行うには、ハイブリッド・ビルドを使用してください。一般に、ハイブリッド・ビルドはコアあたりの MPI プロセスの数が 1 未満の場合に適しています。MPI で並列処理を行い、コアあたり 1 つの MPI プロセスを使用する場合は、非ハイブリッド・ビルドを使用してください。

特定の事前構築ハイブリッド・ライブラリーに加えて、インテル® MKL では、OpenMP の最適化を活用するインテル® MKL 用の事前構築ハイブリッド・ライブラリーをいくつか提供します。

インテル® MPI 以外の MPI バージョンを使用する場合は、提供されている MP LINPACK ソースを使用してください。ソースからハイブリッド・モードで利用できる非ハイブリッド・バージョンをビルドすることもできますが、その場合、ハイブリッド・バージョンに追加される最適化の一部は含まれません。

提供されるソース・コード・メイクファイルのデフォルトは、非ハイブリッド・ビルドです。場合によっては、ハイブリッド・モードの利用が必要なことがあります。バージョンを選択できる場合、非ハイブリッド・コードのほうが高速です。非ハイブリッド・コードをハイブリッド・モードで利用するには、インテル® MKL BLAS のスレッド化バージョンを使用して、スレッドセーフな MPI とリンクし、`MPI_init_thread()` 関数を呼び出して、MPI がスレッドセーフである必要があることを示します。

インテル® MKL は、インテル® MPI ライブラリーに対してダイナミックにリンクされた事前構築バイナリーも提供しています。

メモ : スタティックにリンクされた事前構築バイナリーとダイナミックにリンクされた事前構築バイナリーのパフォーマンスは異なります。パフォーマンスは、使用するインテル® MPI のバージョンに依存します。
インテル® MPI の特定のバージョンに対してスタティックにリンクしたバイナリーをビルドすることができます。

内容

Intel® Optimized MP LINPACK Benchmark for Clusters (MP LINPACK Benchmark) には、HPL 2.0 ディストリビューションとその修正が含まれています。ファイルの一覧は、表 11-2 を参照してください。ファイルは、インテル® MKL ディレクトリーの `./benchmarks/mp_linpack/` サブディレクトリーにあります (表 3-2 を参照)。

表 11-2 MP LINPACK Benchmark の内容

./benchmarks/mp_linpack/	
`testing/ptest/HPL_pdtest.c`	HPL 2.0 コードに `ASYOUGO2_DISPLAY` (詳細は、「新機能」セクションを参照) で `DGEMM` 情報がキャプチャーされた場合に情報を表示する修正を加えたもの。
`src/blas/HPL_dgemm.c`	HPL 2.0 コードに `ASYOUGO2_DISPLAY` で指定された場合に `DGEMM` 情報をキャプチャーする修正を加えたもの。
`src/grid/HPL_grid_init.c`	HPL 2.0 コードに HPL 2.0 にない追加のグリッド試験を行う修正を加えたもの。

表 11-2 MP LINPACK Benchmark の内容 (続き)

./benchmarks/mp_linpack/	
src/pgesv/HPL_pdgesvK2.c	HPL 2.0 コードに ASYOUGO および ENDEARLY の修正を加えたもの。
src/pgesv/HPL_pdgesv0.c	HPL 2.0 コードに ASYOUGO、ASYOUGO2、および ENDEARLY の修正を加えたもの。
testing/ptest/HPL.dat	HPL 2.0 のサンプル HPL.dat を修正したもの。
Make.ia32	(新規) IA-32 アーキテクチャー対応プロセッサー・ベースの Linux OS システム用のサンプル・アーキテクチャー・メイクファイル。
Make.em64t	(新規) インテル ® 64 アーキテクチャー対応プロセッサー・ベースの Linux OS システム用のサンプル・アーキテクチャー・メイクファイル。
Make.ipf	(新規) IA-64 アーキテクチャー対応プロセッサー・ベースの Linux OS システム用のサンプル・アーキテクチャー・メイクファイル。
HPL.dat	testing/ptest/HPL.dat のコピー。
次の 6 つのファイルは、簡単なパフォーマンス・テストに利用できる、事前に構築された実行可能ファイルです。	
bin_intel/ia32/xhpl_ia32	(新規) IA-32 アーキテクチャーの Linux OS 用の事前構築ハイブリッド・バイナリー。インテル ® MPI 3.2 に対してスタティックにリンク。
bin_intel/ia32/xhpl_ia32_dynamic	(新規) IA-32 アーキテクチャーの Linux OS 用の事前構築ハイブリッド・バイナリー。インテル ® MPI 3.2 に対してダイナミックにリンク。
bin_intel/em64t/xhpl_em64t	(新規) インテル ® 64 アーキテクチャーの Linux OS 用の事前構築ハイブリッド・バイナリー。インテル ® MPI 3.2 に対してスタティックにリンク。
bin_intel/em64t/xhpl_em64t_dynamic	(新規) インテル ® 64 アーキテクチャーの Linux OS 用の事前構築ハイブリッド・バイナリー。インテル ® MPI 3.2 に対してダイナミックにリンク。
bin_intel/ipf/xhpl_ipf	(新規) IA-64 アーキテクチャーの Linux OS 用の事前構築ハイブリッド・バイナリー。インテル ® MPI 3.2 に対してスタティックにリンク。
bin_intel/ipf/xhpl_ipf_ dynamic	(新規) IA-64 アーキテクチャーの Linux OS 用の事前構築ハイブリッド・バイナリー。インテル ® MPI 3.2 に対してダイナミックにリンク。
次の 6 つのファイルは、事前に構築されたハイブリッドの実行可能ファイルです。	
bin_intel/ia32/xhpl_hybrid_ia32	(新規) IA-32 アーキテクチャーの Linux OS 用の事前構築ハイブリッド・バイナリー。インテル ® MPI 3.2 に対してスタティックにリンク。
bin_intel/ia32/ xhpl_hybrid_ia32_dynamic	(新規) IA-32 アーキテクチャーの Linux OS 用の事前構築ハイブリッド・バイナリー。インテル ® MPI 3.2 に対してダイナミックにリンク。
bin_intel/em64t/xhpl_ hybrid_em64t	(新規) インテル ® 64 アーキテクチャーの Linux OS 用の事前構築ハイブリッド・バイナリー。インテル ® MPI 3.2 に対してスタティックにリンク。
bin_intel/em64t/ xhpl_ hybrid_em64t_dynamic	(新規) インテル ® 64 アーキテクチャーの Linux OS 用の事前構築ハイブリッド・バイナリー。インテル ® MPI 3.2 に対してダイナミックにリンク。
bin_intel/ipf/xhpl_ hybrid_ipf	(新規) IA-64 アーキテクチャーの Linux OS 用の事前構築ハイブリッド・バイナリー。インテル ® MPI 3.2 に対してスタティックにリンク。
bin_intel/ipf/ xhpl_hybrid_ipf_dynamic	(新規) IA-64 アーキテクチャーの Linux OS 用の事前構築ハイブリッド・バイナリー。インテル ® MPI 3.2 に対してダイナミックにリンク。

表 11-2 MP LINPACK Benchmark の内容 (続き)

./benchmarks/mp_linpack/	
次の 3 つのファイルは、事前構築ライブラリーです。	
lib_hybrid/32/libhpl_hybrid.a	(新規) IA-32 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 用の MP LINPACK ハイブリッド・バージョン事前構築ライブラリー。
lib_hybrid/em64t/libhpl_hybrid.a	(新規) インテル® 64 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 用の MP LINPACK ハイブリッド・バージョン事前構築ライブラリー。
lib_hybrid/64/libhpl_hybrid.a	(新規) IA-64 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 用の MP LINPACK ハイブリッド・バージョン事前構築ライブラリー。
次の 18 のファイルは、実行スクリプトです。	
bin_intel/ia32/runme_ia32	(新規) IA-32 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 に対してスタティックにリンクされたピュア MPI バイナリー用のサンプル実行スクリプト。
bin_intel/ia32/runme_ia32_dynamic	(新規) IA-32 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 に対してダイナミックにリンクされたピュア MPI バイナリー用のサンプル実行スクリプト。
bin_intel/ia32/HPL_serial.dat	(新規) IA-32 アーキテクチャー、ピュア MPI バイナリー用の MP LINPACK ベンチマーク入力ファイルのサンプル。
bin_intel/ia32/runme_hybrid_ia32	(新規) IA-32 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 に対してスタティックにリンクされたハイブリッド・バイナリー用のサンプル実行スクリプト。
bin_intel/ia32/runme_hybrid_ia32_dynamic	(新規) IA-32 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 に対してダイナミックにリンクされたハイブリッド・バイナリー用のサンプル実行スクリプト。
bin_intel/ia32/HPL_hybrid.dat	(新規) IA-32 アーキテクチャー、ハイブリッド・バイナリー用の MP LINPACK ベンチマーク入力ファイルのサンプル。
bin_intel/em64t/runme_em64t	(新規) インテル® 64 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 に対してスタティックにリンクされたピュア MPI バイナリー用のサンプル実行スクリプト。
bin_intel/em64t/runme_em64t_dynamic	(新規) インテル® 64 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 に対してダイナミックにリンクされたピュア MPI バイナリー用のサンプル実行スクリプト。
bin_intel/em64t/HPL_serial.dat	(新規) インテル® 64 アーキテクチャー、ピュア MPI バイナリー用の MP LINPACK ベンチマーク入力ファイルのサンプル。
bin_intel/em64t/runme_hybrid_em64t	(新規) インテル® 64 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 に対してスタティックにリンクされたハイブリッド・バイナリー用のサンプル実行スクリプト。
bin_intel/em64t/runme_hybrid_em64t_dynamic	(新規) インテル® 64 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 に対してダイナミックにリンクされたハイブリッド・バイナリー用のサンプル実行スクリプト。
bin_intel/em64t/HPL_hybrid.dat	(新規) インテル® 64 アーキテクチャー、ハイブリッド・バイナリー用の MP LINPACK ベンチマーク入力ファイルのサンプル。
bin_intel/ipf/runme_ia64	(新規) IA-64 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 に対してスタティックにリンクされたピュア MPI バイナリー用のサンプル実行スクリプト。
bin_intel/ipf/runme_ia64_dynamic	(新規) IA-64 アーキテクチャー、インテル® MPI 3.2 に対してダイナミックにリンクされたピュア MPI バイナリー用のサンプル実行スクリプト。
bin_intel/ipf/HPL_serial.dat	(新規) IA-64 アーキテクチャー、ピュア MPI バイナリー用の MP LINPACK ベンチマーク入力ファイルのサンプル。

表 11-2 MP LINPACK Benchmark の内容 (続き)

./benchmarks/mp_linpack/	
bin_intel/ipf/runme_hybrid_ia64	(新規) IA-64 アーキテクチャー、インテル ® MPI 3.2 に対してスタティックにリンクされたハイブリッド・バイナリー用のサンプル実行スクリプト。
bin_intel/ipf/runme_hybrid_ia64_dynamic	(新規) IA-64 アーキテクチャー、インテル ® MPI 3.2 に対してダイナミックにリンクされたハイブリッド・バイナリー用のサンプル実行スクリプト。
bin_intel/ipf/HPL_hybrid.dat	(新規) IA-64 アーキテクチャー、ハイブリッド・バイナリー用の MP LINPACK ベンチマーク入力ファイルのサンプル。
nodeperf.c	(新規) クラスターの DGEMM 速度をテストするサンプル・ユーティリティー。

MP LINPACK の構築

サンプル・アーキテクチャー・メイクファイルがいくつか用意されています。使用している構成に合わせて、これらのファイルを以下のように編集することができます。

- TOPdir を MP LINPACK が含まれているディレクトリーに設定します。
- MPI 変数、MPdir、MPinc、および MPlib を設定します。
- インテル ® MKL の場所と使用するファイルの場所を指定します (LAdir、LAinc、LAlib)。
- コンパイラーおよびコンパイラー / リンカーオプションを調整します。
- make コマンドで次のようにバージョン・パラメーターを設定して、ビルドする MP LINPACK のバージョン (ハイブリッドまたは非ハイブリッド) を指定します。

  ```
  make arch=em64t version=hybrid install
  ```

インテル ® 64 アーキテクチャー・ベースの Linux システムなど、一部のサンプルケースでは、メイクファイルには一般的な値が含まれています。しかし、HPL の構築についてよく理解した上で、これらの変数に適切な値を設定する必要があります。

新機能

ツールセットは HPL 2.0 ディストリビューションと基本的に同一です。いくつかの変更は、オプションで指定してコンパイルしない限り無効です。以下の新機能があります。

ASYOUGO: 実行の進行に伴い、非侵入型のパフォーマンス情報を提供します。出力はわずかで、この情報はパフォーマンスに影響しません。情報を提供しなくても、多くの実行が長時間行われるため、特に役立つ機能です。

ASYOUGO2: すべての DGEMM 呼び出しを傍受することにより、わずかに侵入する付加的なパフォーマンス情報を提供します。

ASYOUGO2_DISPLAY: 実行内部の有効なすべての DGEMM のパフォーマンスを表示します。

ENDEARLY: いくつかのパフォーマンスのヒントを表示し、実行を早く終了します。

FASTSWAP: HPL のコードに LAPACK で最適化された DLASWP を挿入します。インテル ® Itanium® プロセッサーで役立ちます。この機能を使用して試験することで最良の結果を判断できます。

HYBRID: MP LINPACK のハイブリッド OpenMP/MPI モードを有効にして、スレッド化されたインテル ® MKL と MP LINPACK の事前構築ハイブリッド・ライブラリーを使用できるようにします。

警告 : このオプションは、インテル® コンパイラーとインテル® MPI ライブラリー・バージョン 3.1 以降を使用している場合にのみ使用してください。コンパイラーはバージョン 10.0 以降を使用することを推奨します。

クラスターのベンチマーク

クラスターのベンチマークを行うには、以下の手順に従ってください (一部の手順はオプションです)。ステップ 3. と 4. の繰り返しには特に注意してください。クラスターが最高のパフォーマンスを得られる HPL パラメーター (`HPL.dat` で指定) の検索が繰り返されます。

1. HPL をインストールして、HPL がすべてのノードで機能していることを確認します。
2. ディストリビューションに含まれている `nodeperf.c` を実行し、すべてのノードで `DGEMM` のパフォーマンスを確認します。

   MPI およびインテル® MKL を使用して `nodeperf.c` をコンパイルします。次に例を示します。

   ```
   mpiicc -O3 nodeperf.c -L$MKLPATH $MKLPATH/libmkl_intel_lp64.a \
   -Wl,--start-group $MKLPATH/libmkl_sequential.a                \
   $MKLPATH/libmkl_core.a -Wl,--end-group -lpthread .
   ```

   すべてのノードで `nodeperf.c` を起動することは、非常に大規模なクラスターでは特に有用です。`nodeperf` を使用すると、悪いノードを見つけるためにクラスターでさまざまな小さな MP LINPACK 実行を行うことなく、潜在的な問題のスポットを素早く識別することができます。検索はすべてのノードに対して 1 つずつ行われ、`DGEMM` のパフォーマンスに続けてホスト識別子が報告されます。このため、DGEMM のパフォーマンスが高いほど、ノードの実行が高速であったことになります。
3. 使用するクラスターに合わせて `HPL.dat` を編集します。

   詳細は、HPL のドキュメントを参照してください。ただし、少なくとも 4 つのノードを使用してください。
4. `ASYOUGO`、`ASYOUGO2` または `ENDEARLY` などのコンパイラー・オプションを使用して HPL を実行します。これらのオプションを使用することで、パフォーマンスに対する考察が、HPL から通常得られるよりも早く得ることができます。

   実行するときは、以下の推奨事項に従ってください。

   — 検索時間を短縮するため、MP LINPACK (HPL のパッチ済みバージョン) を使用してください。

   パフォーマンスに影響するすべての機能は、MP LINPACK All ではコンパイラー・オプションとして提供されています。そのため、「検索時間を短縮するためのオプション」セクションで説明されている新しいオプションを使用しない場合、これらの変更は無効になります。拡張の主な目的は、ソリューションを見つけるための支援です。

   HPL では、多くの異なるパラメーターの検索に長い時間がかかります。MP LINPACK では、最適な数を得ることが目標です。

   入力が固定でない場合、大きなパラメーター空間を検索する必要があります。あらゆる入力の全数検索は、強力なクラスターでもかなりの時間がかかります。MP LINPACK は、オプションで実行中のパフォーマンスの情報を出力します。また、指定された場合、実行を終了します。

   — `-DENDEARLY -DASYOUGO2` (「検索時間を短縮するためのオプション」セクションを参照) を使用してコンパイルし、負のしきい値を使用して時間を短縮できます (Top 500 に提出する最終的な実行で負のしきい値を使用しないでください)。HPL 2.0 入力ファイル `HPL.dat` の 13 行でしきい値を設定することができます。

   — 問題の完了まで実行する場合は、`-DASYOUGO` (「検索時間を短縮するためのオプション」を参照) を使用してください。

5. 迅速なパフォーマンス・フィードバックを使用し、最良のパフォーマンスが得られるまでステップ 3 と 4 を繰り返します。

検索時間を短縮するためのオプション

多くのノードで問題の完了まで実行すると、長い時間がかかります。MP LINPACK の検索空間も巨大です。実行する問題のサイズのみでなく、ブロックサイズの数、グリッドレイアウト、ステップの先読み、異なる因数分解方法の使用なども影響します。以前に得られた最良のパフォーマンスよりも、0.01% 遅くなったことを発見するためだけに大きな問題を最後まで実行しても、膨大な時間の浪費になります。

検索時間が短くなるオプションは 3 つあります。

- `-DASYOUGO`
- `-DENDEARLY`
- `-DASYOUGO2`

  限界パフォーマンスに影響を与えるため、`-DASYOUGO2` は慎重に使用してください。`DGEMM` の内部パフォーマンスを参照するには、`-DASYOUGO2` および `-DASYOUGO2_DISPLAY` を使用してコンパイルします。これらのオプションを使用することでパフォーマンスは約 0.2% 損なわれますが、多くの有用な `DGEMM` 情報が提供されます。

以前の HPL に戻すには、これらのオプションを定義せずに最初から再コンパイルします。"`make arch=<arch> clean_arch_all`" を実行してください。

-DASYOUGO: 実行の進行に伴い、パフォーマンス・データが提供されます。LU 分解が発生するため、パフォーマンスは常に開始時は高く、徐々に低くなります。[1] `ASYOUGO` パフォーマンス評価は通常 (LU 分解により遅くなるため) 高めに評価されますが、問題が進行するにつれて、より正確になります。ステップの先読みが多いほど、最初の数は正確でなくなります。`ASYOUGO` は MP LINPACK が実行する LU 分解を含めて評価しようとするため、実際に達成された `DGEMM` パフォーマンスを測定する `ASYOUGO2` と比較して高めに評価されます。`ASYOUGO` の出力は `ASYOUGO2` が提供する情報のサブセットであることに注意してください。このため、出力の詳細は、`-DASYOUGO2` オプションの説明を参照してください。

-DENDEARLY: いくつかのステップの後に問題を終了します。このため、モニターをせずに 10 から 20 程度の HPL をセットアップして実行し、最も速かった HPL のみを完了させることができます。`-DENDEARLY` は `-DASYOUGO` を想定します。両方を定義しても問題はありませんが、その必要はありません。早く終了する問題の残差のチェックを回避するには、`ENDEARLY` をテストする際、`HPL.dat` に含まれているのしきい値パラメーターを負の数にしてください。`-DENDEARLY` を使用する場合、`-DASYOUGO2` を使用してコンパイルしたほうが良い場合もあります。

`-DENDEARLY` の使用に関する注意 :

- `-DENDEARLY` は、ブロックサイズで `DGEMM` の反復を数回行った後、問題を停止します (ブロックサイズが大きいほど、得られる情報も多くなります)。5 または 6 のアップデートのみ出力します (`-DASYOUGO` は問題を完了する前に 46 程度の出力要素を出力します)。
- `-DASYOUGO` と `-DENDEARLY` のパフォーマンスは常に 1 つの速度で開始され、ゆっくり増加した後、終了に向かって速度が落ちます (LU 分解が行われるため)。`-DENDEARLY` は通常、速度が落ちる前に終了します。
- `-DENDEARLY` は、HPL エラーとともに問題を早く終了します。問題は完了していないため、見つからない (誤った) 残差を無視する必要があります。しかし、初期のパフォーマンスは確認できるため、パフォーマンスが良い場合は `-DENDEARLY` を指定しないで問題を最後まで実行します。エラーチェックを回避するには、`HPL.dat` に含まれている HPL のしきい値パラメーターを負の数にしてください。
- `-DENDEARLY` は早く終了するため、HPL は問題が完了したと解釈し、問題が完了したものとして Gflop 評価を計算します。この誤った高い評価は無視してください。

1. 行列を上三角行列 (U) と下三角行列 (L) の積に分解します。

— より大きな問題では、精度はより高くなります。-DENDEARLY が返す最後のアップデートは、問題を完了まで実行したときのアップデートに近くなります。-DENDEARLY は、小さな問題では近似が不十分です。この理由により、ENDEARLY は ASYOUGO2 と組み合わせて使用することを推奨します。ASYOUGO2 は実際の DGEMM パフォーマンスを報告するため、開始した問題への近似がより近くなります。

インテル® コンパイラーを使用した場合、最もよく知られているインテル® Itanium® プロセッサー用のコンパイルオプションは、次のようになります。

```
-O2 -ipo -ipo_obj -ftz -IPF_fltacc -IPF_fma -unroll -w -tpp2
```

-DASYOUGO2: 詳細な単一ノードの DGEMM パフォーマンス情報を提供します。すべての DGEMM 呼び出しをキャプチャーして (Fortran BLAS を使用している場合)、データを記録します。このため、ルーチンには侵入型のオーバーヘッドが存在します。非侵入型の -DASYOUGO とは異なり、-DASYOUGO2 は、パフォーマンスをモニターするため、DGEMM の呼び出しごとに中断します。たとえパフォーマンスへの影響が 0.1% 未満であっても、大きな問題ではこのオーバーヘッドに注意する必要があります。

次に、ASYOUGO2 出力のサンプルを示します (最初の 3 つの非侵入数は ASYOUGO および ENDEARLY の説明を参照してください)。

```
Col=001280 Fract=0.050 Mflops=42454.99 (DT= 9.5 DF= 34.1 DMF=38322.78)
```

問題サイズは *N*=16000 で、ブロックサイズは 128 でした。10 ブロック、つまり 1280 列を処理した後、出力は画面に送られました。ここで、完了した列の小数は 1280/16000=0.08 です。行列分解により、最大 40 の出力結果がさまざまな場所に出力されます : fractions
0.005 0.010 0.015 0.020 0.025 0.030 0.035 0.040 0.045 0.050 0.055 0.060 0.065 0.070 0.075 0.080 0.085 0.090 0.095 0.100 0.105 0.110 0.115 0.120 0.125 0.130 0.135 0.140 0.145 0.150 0.155 0.160 0.165 0.170 0.175 0.180 0.185 0.190 0.195 0.200 0.205 0.210 0.215 0.220 0.225 0.230 0.235 0.240 0.245 0.250 0.255 0.260 0.265 0.270 0.275 0.280 0.285 0.290 0.295 0.300 0.305 0.310 0.315 0.320 0.325 0.330 0.335 0.340 0.345 0.350 0.355 0.360 0.365 0.370 0.375 0.380 0.385 0.390 0.395 0.400 0.405 0.410 0.415 0.420 0.425 0.430 0.435 0.440 0.445 0.450 0.455 0.460 0.465 0.470 0.475 0.480 0.485 0.490 0.495 0.515 0.535 0.555 0.575 0.595 0.615 0.635 0.655 0.675 0.695 0.795 0.895.

しかし、ここでは比較のために問題サイズが非常に小さくブロック数が非常に大きいため、0.045 の値を出力するとすぐに、列の小数である 0.08 が見つかりました。非常に大きな問題では、小数の数はより正確になります。上記の 112 を超える数は出力れません。このため、アップデートの数はより小さな問題では 112 よりも少なく、より大きな問題では正確に 112 になります。

Mflops は、LU 分解が完了した 1280 列に基づく評価です。しかし、ステップの先読みが行われると、出力が行われるときに作業が実際に完了していない場合があります。しかし、これは同一の実行を比較するためには良い評価です。

括弧で囲まれている 3 つの数は、侵入型 ASYOUGO2 のアドインです。DT は、プロセッサー 0 が DGEMM で費やした合計時間 (単位は秒) です。DF は、1 つのプロセッサーによって DGEMM で実行された処理の数 (単位は 10 億) です。したがって、プロセッサー 0 の DGEMM でのパフォーマンス (Gflops) は常に DF/DT になります。LU flops の数の代わりに DGEMM flops の数を基本として使用し、DMF を調べることで、実行のパフォーマンスの下限がわかります (Mflops はグローバル LU 時間を使用しますが、HPL のノード (0,0) のみは任意の出力を返すため、DGEMM flops は問題がノード間で平等に分散されているという仮定の下で計算されます)。

上記のパフォーマンス監視ツールを使用して異なる HPL.dat 入力データセットを比較する場合、LU を使用したときのパフォーマンス低下のパターンは、一部の入力データの影響を受けやすいことに注意してください。例えば、非常に小さな問題を実行した場合、初期値から終了値までのパフォーマンス低下は非常に急速です。より大きな問題では、パフォーマンス低下はゆるやかになるため、最初のいくつかのパフォーマンス値を使用して問題サイズの違い (例えば、7000000 と 701000) を評価しても安全です。パフォーマンス低下に影響を与える別の要因は、グリッドの次元 (P および Q) です。大きな問題では、P と Q が値でほぼ等しい場合、最初の数ステップからのパフォーマンス低下が少なくなる傾向があります。ブロードキャスト型のような大量のパラメーターを利用するように変更することで、最終的なパフォーマンスに非常に近いパフォーマンスを最初の数ステップで特定することができます。

これらのツールを使用すると、さまざまな量のデータをテストすることが可能です。

インテル ® マス・カーネル・ライブラリー言語インターフェイスのサポート

A

表 A-1 は各関数ドメイン用にインテル ® マス・カーネル・ライブラリー (インテル ® MKL) が提供する言語インターフェイスを、表 A-2 はそれぞれのヘッダーファイルを示しています。ただし、インテル ® MKL ルーチンは混在言語プログラミングを使用してほかの言語から呼び出すこともできます。Fortran ルーチンを C/C++ から呼び出す方法は、「混在言語プログラミングとインテル ® MKL」を参照してください。

表 A-1　言語インターフェイスのサポート

関数ドメイン	FORTRAN 77 インターフェイス	Fortran 90/95 インターフェイス	C/C++ インターフェイス
Basic Linear Algebra Subprograms (BLAS)	○	○	CBLAS 利用
BLAS 形式の拡張転置ルーチン	○		○
スパース BLAS レベル 1	○	○	CBLAS 利用
スパース BLAS レベル 2 およびレベル 3	○	○	○
連立線形方程式を解くための LAPACK ルーチン	○	○	†
最小二乗問題、固有値ならびに特異値問題、およびシルベスター式を解くための LAPACK ルーチン	○	○	†
補助 LAPACK ルーチン	○		†
Parallel Basic Linear Algebra Subprograms (PBLAS)	○		
ScaLAPACK ルーチン	○		†
DSS/PARDISO* ソルバー	○	○	○
その他の直接法および反復法スパース・ソルバー・ルーチン	○	○	○
ベクトル・マス・ライブラリー (VML) 関数	○	○	○
ベクトル・スタティスティカル・ライブラリー (VSL) 関数	○	○	○
フーリエ変換関数 (FFT)		○	○
クラスター FFT 関数		○	○
三角変換ルーチン		○	○
高速ポアソン、ラプラス、およびヘルムホルツ・ソルバー (ポアソン・ライブラリー) ルーチン		○	○
最適化 (Trust-Region) ソルバールーチン	○	○	○
GMP* 数学関数			○
サービスルーチン (メモリー割り当てを含む)			○

† 混在言語プログラミング呼び出しをサポート。それぞれのヘッダーファイルは、表 A-2 を参照してください。

表 A-2 は、すべてのインテル® MKL 関数ドメインで利用可能なヘッダーファイルを示しています。

表 A-2 インクルード・ファイル

関数ドメイン	インクルード・ファイル	
	Fortran	C/C++
すべての関数ドメイン	mkl.fi	mkl.h
BLAS ルーチン	blas.f90 mkl_blas.fi	mkl_blas.h
BLAS 形式の拡張転置ルーチン	mkl_trans.fi	mkl_trans.h
BLAS に対する CBLAS インターフェイス		mkl_cblas.h
スパース BLAS ルーチン	mkl_spblas.fi	mkl_spblas.h
LAPACK ルーチン	lapack.f90 mkl_lapack.fi	mkl_lapack.h
ScaLAPACK ルーチン		mkl_scalapack.h
すべてのスパース・ソルバー・ルーチン	mkl_solver.f90	mkl_solver.h
• PARDISO	mkl_pardiso.f77 mkl_pardiso.f90	mkl_pardiso.h
• DSS インターフェイス	mkl_dss.f77 mkl_dss.f90	mkl_dss.h
• RCI 反復ソルバー • ILU 因数分解	mkl_rci.fi	mkl_rci.h
最適化ソルバールーチン	mkl_rci.fi	mkl_rci.h
ベクトル数学関数	mkl_vml.f77 mkl_vml.fi	mkl_vml.h
ベクトル・スタティスティカル関数	mkl_vml.f77 mkl_vsl.fi	mkl_vsl.h
フーリエ変換関数	mkl_dfti.f90	mkl_dfti.h
クラスターフーリエ変換関数	mkl_cdft.f90	mkl_cdft.h
偏微分方程式サポートルーチン		
• 三角変換	mkl_trig_transforms.f90	mkl_trig_transforms.h
• ポアソンソルバー	mkl_poisson.f90	mkl_poisson.h
GMP インターフェイス		mkl_gmp.h
サービスルーチン		mkl_service.h
メモリー割り当てルーチン		i_malloc.h
MKL サンプル・インターフェイス		mkl_example.h

サードパーティー・インターフェイスのサポート B

本付録では、インテル® マス・カーネル・ライブラリー (インテル® MKL) がサポートするサードパーティー・インターフェイスについて簡単に説明します。

GMP* 関数

インテル MKL に実装されている GMP 数学関数には、任意精度の整数演算が含まれています。これらの関数のインターフェイスは、GMP (GNU Multiple Precision) 演算ライブラリーと互換性があります。これらの関数の仕様は、http://www.intel.com/software/products/mkl/docs/gnump/WebHelp/ (英語) を参照してください。

GMP ライブラリーを現在使用している場合、`mkl_gmp.h` をインクルードするようにプログラムの `INCLUDE` ステートメントを修正する必要があります。

FFTW インターフェイスのサポート

インテル® MKL には、FFTW インターフェイス (www.fftw.org) 用の 2 つのラッパー・コレクションが用意されています。このラッパーは、FFTW インターフェイスの上部構造であり、インテル® MKL フーリエ変換関数の呼び出しに使用されます。それぞれ、FFTW バージョン 2.x と 3.x に対応しており、インテル® MKL バージョン 7.0 以降で利用できます。

これらのラッパーを使用することで、FFTW を使用しているプログラムのソースコードを変更することなく、インテル® MKL フーリエ変換を使用してパフォーマンスを向上できます。ラッパーの使用についての詳細は、『インテル® MKL リファレンス・マニュアル』の「FFTW Interface to Intel® Math Kernel Library」を参照してください。

索引

ら

り

れ

表の目次

例の目次

図の目次