

JAERI-Data/Code
97-051



原子力コードのVPP500におけるベクトル化,
並列化及び移植(ベクトル化編)
—平成8年度作業報告書—

1997年12月

根本俊行*・川井 渉*・川崎信夫*・渡辺秀雄*・田辺豪信*
鈴木信太郎*・原田裕夫・庄司 誠・久米悦雄・藤井 実

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の問合せは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越しください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1997

編集兼発行 日本原子力研究所
印 刷 株原子力資料サービス

原子力コードのVPP500におけるベクトル化、並列化及び移植（ベクトル化編）
— 平成8年度作業報告書 —

日本原子力研究所計算科学技術推進センター
根本 俊行*・川井 渉*・川崎 信夫*
渡辺 秀雄*・田辺 豪信*・鈴木信太郎*
原田 裕夫・庄司 誠・久米 悅雄
藤井 実

(1997年11月28日受理)

本報告書は、平成8年度に計算科学技術推進センター情報システム管理課で行った原子力コードのVPP500における高速化及び移植作業のうち、ベクトル化作業部分について記述したものである。

原子力コードのVPP500における高速化及び移植作業は、平成8年度に11件行われた。これらの作業内容は、同種の作業を行うユーザに有益な情報を提供することを意図して、「並列化編」、「ベクトル化編」、「移植編」の3冊にまとめられている。

本報告書の「ベクトル化編」では、中性子・光子輸送計算コードDORT-TORT、気体流動解析コードFLOWGR、相対論的ボルツマン・ウェーリング・ウーレンベック法によるシミュレーションコードRBUUに対して行ったベクトル化作業について記述されている。別冊の「並列化編」では、2次元相対論的電磁粒子コードEM2D、円筒座標系直接数値シミュレーションコードCYLDNS、ダイヤモンド型結晶を扱う分子動力学コードDGRに対して行ったベクトル並列化作業について記述されている。また、別冊の「移植編」では、軽水炉安全解析コードRELAP5/MOD3.2及びRELAP5/MOD3.2.1.2、原子核データ処理システムNJOY、2次元多群ディスクリート・オーディネーツ輸送コードTWOTRAN-IIに対して行った移植作業と汎用図形処理解析システムIPLOTに対して行ったUNIX OSへの移行調査作業について記述されている。

日本原子力研究所（東海駐在）：〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根2-4

* 外来研究員：富士通株式会社

* 富士通株式会社

Vectorization, Parallelization and Porting of Nuclear Codes
on the VPP500 System
(Vectorization)
— Progress Report Fiscal 1996 —

Toshiyuki NEMOTO*, Wataru KAWAI*, Nobuo KAWASAKI*,
Hideo WATANABE*, Hidenobu TANABE*, Shintaro SUZUKI*,
Hiroo HARADA, Makoto SHOJI, Etsuo KUME
and Minoru FUJII

Center for Promotion of Computational Science and Engineering
(Tokai site)
Japan Atomic Energy Research Institute
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received November 28, 1997)

Several computer codes in the nuclear field have been vectorized, parallelized and transported on the FUJITSU VPP500 system at Center for Promotion of Computational Science and Engineering in Japan Atomic Energy Research Institute. These results are reported in 3 parts, i.e., the vectorization part, the parallelization part and the porting part. In this report, we describe the vectorization.

In this vectorization part, the vectorization of two and three dimensional discrete ordinates simulation code DORT-TORT, gas dynamics analysis code FLOWGR and relativistic Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck simulation code RBUU are described. In the parallelization part, the parallelization of 2-Dimensional relativistic electromagnetic particle code EM2D, Cylindrical Direct Numerical Simulation code CYLDNS and molecular dynamics code for simulating radiation damages in diamond crystals DGR are described. And then, in the porting part, the porting of reactor safety analysis code RELAP5/MOD3.2 and RELAP5/MOD3.2.1.2, nuclear data processing system NJOY and 2-D multigroup discrete ordinate transport code TWOTRAN-II

* On leave from FUJITSU, Ltd

* FUJITSU, Ltd

are described. And also, a survey for the porting of command-driven interactive data analysis plotting program IPLOT are described.

Keywords: DORT-TORT, FLOWGR, RBUU, Vectorization, VPP500, Nuclear Codes

目 次

1.はじめに	1
2.DORT-TORT コードのベクトル化	2
2.1 インストール前の準備作業	2
2.2 VPP500へのインストール	4
2.3 ベクトル化について	7
2.4 ベクトル化効果	11
2.5 まとめ	11
3.FLOWGR コードのベクトル化	60
3.1 コード概要	60
3.2 オリジナル版コードの修正	60
3.3 動的挙動解析	61
3.4 ベクトル化	61
3.5 計算結果の評価及びベクトル化の効果	69
3.6 まとめ	70
4.RBUU コードのベクトル化	104
4.1 コード概要	104
4.2 ベクトル化	104
4.3 並列化調査	110
4.4 まとめ	113
5.おわりに	141
謝 辞	141
参考文献	142

Contents

1. Introduction	1
2. Vectorization of DORT-TORT Code	2
2.1 Arrangements of Installation	2
2.2 Installation to VPP500 from CRAY	4
2.3 Vectorization	7
2.4 Effects of Vectorization	11
2.5 Summary	11
3. Vectorization of FLOWGR Code	60
3.1 Overview of FLOWGR	60
3.2 Modification of Original Code.....	60
3.3 Examination of Dynamic Behavior	61
3.4 Vectorization	61
3.5 Evaluation of Calculated Results and Effects of Vectorization	69
3.6 Summary	70
4. Vectorization of RBUU Code	104
4.1 Overview of RBUU	104
4.2 Vectorization	104
4.3 Survey for Parallelization	110
4.4 Summary	113
5. Concluding Remarks	141
Acknowledgements	141
References	142

1. はじめに

計算科学技術推進センター情報システム管理課では、原子力コードをセンターが保有する各種のスーパーコンピュータ上に整備し、それぞれのスーパーコンピュータに最適な高速化を施す作業を実施している。この作業は、コンピュータ資源の効率的利用を図るとともにユーザの計算待ち時間の短縮を通じてユーザの仕事の効率化を図っている。

原子力コードのVPP500における高速化及び移植作業は、平成8年度に11件行われた。これらの作業内容は、同種の作業を行うユーザに有益な情報を提供することを意図して、「並列化編」、「ベクトル化編」、「移植編」の3冊にまとめられている。

本報告書の「ベクトル化編」では、中性子・光子輸送計算コードDORT-TORT、気体流動解析コードFLOWGR、相対論的ボルツマン・ウェーリング・ウーレンベック法によるシミュレーションコードRBUUに対して行ったベクトル化作業について記述されている。別冊の「並列化編」では、2次元相対論的電磁粒子コードEM2D、円筒座標系直接数値シミュレーションコードCYLDNS、ダイヤモンド型結晶を扱う分子動力学コードDGRに対して行ったベクトル並列化作業について記述されている。また、別冊の「移植編」では、軽水炉安全解析コードRELAP5/MOD3.2及び、RELAP5/MOD3.2.1.2、原子核データ処理システムNJOY、2次元多群ディスクリート・オーディネーツ輸送コードTWOTRAN-IIについてのVPP500への移植作業と汎用図形処理解析システムIPLOTのUNIX OSへの移行調査作業について記述されている。

第2章「DORT-TORTコードのベクトル化」では、中性子・光子輸送計算コードDORT-TORTコードに対して行った高速化作業について述べる。本コードは、配布されたファイルから使用する計算機に適合する部分を抽出してコードを作成するようになっている。これまでに使用されてきたコードは、SUN版を抽出していたものであるが、これは、ベクトル処理が考慮されていないため、VPP500上では高速性能が得られていなかった。そこで、ベクトル処理が考慮されているCRAY版を抽出し、VPP500向けのベクトル化を施した。この結果、オリジナル版のベクトル実行に比較して、約2倍の速度性能の向上が得られた。

第3章「FLOWGRのコードベクトル化」では、気体流動解析コードFLOWGRに対して行った高速化作業について述べる。本コードは、富士通製大型汎用計算機M780上で利用されていたもので、1ケースの実行につき30回のリスタートを行い、計30時間もの実行時間を要していた。このことから、VPP500上でのベクトル化を行った。この結果、VPP500上で、1PEスカラ実行に比較して、約4.3倍の速度性能の向上が得られた。

第4章「RBUUコードのベクトル化」では、相対論的ボルツマン・ウェーリング・ウーレンベック法によるシミュレーションコードRBUUに対して行った高速化作業について述べる。本コードは、IBM社製計算機向けに、ベクトル化及び並列化されていたが、VPP500上にインストールしたところベクトル化効率が低下し、速度低下を招いていた。このため、VPP500向けベクトル化チューニングを施した。この結果、VPP500上で1PEスカラ実行に比較して、約8.4～13.4倍の速度性能の向上を得た。

尚、本報告書の第2章の作業は根本が、第3章の作業は川井が、第4章の作業は川崎がそれぞれ担当した。

2. DORT-TORT コードのベクトル化

DORT-TORT(ver.2.8.14) コード [1] のベクトル化を行った。このコードはすでに富士通(株)製分散メモリ型ベクトル並列計算機 VPP500/42(以下 VPP500) 上にインストールされていたが、ベクトル化が施されていないために高速な処理ができなかった。このコードは米国・ORNL で開発され各機関に配布されている。オリジナルのコードには、何種類かの計算機に適応するコーディングが含まれており、ユーザが使用する計算機に合致するコーディング部分を抽出することでコードが完成する。既に原研で使用されているバージョンは、VPP500 の FORTRAN 仕様にもっとも近い Sun 版を抽出して使用している。しかし、これはベクトル処理が考慮されていないため、前述の通り VPP500 では高速性能がでない。そこで、今回のベクトル化にあたり、ベクトル化が考慮されている CRAY 版を抽出してベクトル化を図ることにした。ここでは CRAY 版の抽出、VPP500 へのインストール作業、および VPP500 用のベクトル化について報告する。

2.1 インストール前の準備作業

DORT-TORT コードは、いくつかのコード群から成り立っている。前処理用の gip, grtuncl, 中間処理用の torted, visa, 2 次元解析用の dort, 3 次元解析用の tort である。また、gip, grtuncl, torted, visa には専用のライブラリを使用する。これらのオリジナルコードはシェルスクリプト(正確にはいくつかのシェルスクリプトを含むファイル)に含まれている。このシェルスクリプトにはオリジナルコード以外に、ツール類、サンプル入力データ等も含まれている。また実行することによって、コード等の抽出と同時に、コンパイル・リンクも行われロードモジュールが作成される。

2.1.1 ソース抽出

CRAY 版のソースを抽出するために、このシェルスクリプトを東京・計算科学技術推進センターに設置してある CRAY-T94 に移し、ここで実行した。この実行は ORNL より送られてきたシェルスクリプト ‘d2p8p14.id’、および ‘t2p8p14.id’ の 2 つを使用する。これらに含まれるソースを Table 2.1 に示す。

これらのシェルスクリプトは、実行中にコンパイル・リンクも行う。DORT-TORT コードは CRAY 用のコーディングを含んでいるが、その仕様は、CRAY 計算機がいくつか採用しているコンバイラのひとつである C90 モードで書かれている。CRAY-T94 のコンバイラの仕様は C90 モードではなく T90 モードであるため、このままでは正常にコンパイル・リンクはできない。よって、C90 モードにするために、Fig. 2.1 の矢印のように、環境変数 TARGET に ‘cray-c90’ を定義する必要がある [2]。

シェルスクリプト ‘d2p8p14.id’ には、dort コードの他に gip, grtuncl, torted, visa コードが含まれている。これらのうち、dort, gip, grtuncl のコード抽出は Fig. 2.1 に示した一連のコマンド、およびシェルスクリプトの実行によってでき、しかも gip、および dort のサンプル問題、各種ツール類も抽出される。また、実行ロードモジュールも作成される。torted、お

および visa コードの抽出方法を Fig. 2.2 に示す。この実行は、dort のコードを抽出したディレクトリ上で実行する必要がある。これは、dort のコード抽出の際にできたライブラリ・ツール等を使用するためである。この実行によって、コード以外にサンプル問題、CRAY 用実行シェルスクリプト等が抽出される。

tort コードの抽出方法を Fig. 2.3 に示す。これには ‘t2p8p14.id’ を使用する。ただし、CRAY-T94 のコンパイラの障害か、仕様の違いか不明であるが、このシェルスクリプトを使用すると、正常に終了しない。現象として、tort コードのコンパイル処理が異常終了してしまう。詳しく調査してみたところ、tort のコンパイルに指定しているコンパイルオプション ‘-e mxz’ のうち ‘z’ をはずすと正常に動作することがわかった。‘z’ はデバッグツール等に利用されるデバッグ表の生成オプションであり、実行には影響が無いのではずしても問題はない。この修正した部分を Fig. 2.4 に示す。

これらの実行で個々のコードを抽出することができた。コードには、複数のソースから成り立つものがある。これらを Table 2.2 に示す。

実際の取り出し方として、dort コードの抽出 (Fig. 2.1) が終わった後、Table 2.2 に示してあるソースを別のディレクトリに複写する。同様にインクルードファイル、サンプル入力データも複写する。これは、torsed、visa の抽出、および tort の抽出の際、それぞれにおいて同名のインクルードファイル、サンプル問題等が作成されるためである。このうち抽出されたサンプル問題を Table 2.3 に示す。

2.1.2 CRAY-T94 上での実行確認

VPP500 での計算結果と比較するために、CRAY 上で実行を行った。2.1.1 で述べたように ‘d2p8p14.id’、および ‘t2p8p14.id’ を実行したことで、dort、tort 等の実行ロードモジュールは作成されている。また、実行シェルスクリプトも作成されている。この実行シェルスクリプトは TSS での実行を想定している。しかし、原研のシステムでは原則的にジョブは NQS によるバッチ方式を採用しているため、バッチ用のシェルを作成した。この例を Fig. 2.5 に示す。

バッチ用の実行シェルを使いサンプル問題を実行してみた。結果の確認は、ORNL より DORT-TORT コードに添付されてきた計算結果と比較することで行った。しかし、この計算結果は今回配布された DORT-TORT コードとは異なるバージョンで実行したものであったため、正確な比較ができなかった。このため、おおよその比較を行った。その結果を Table 2.4、および 2.5 に示す。

DORT-TORT コードの実行は、最初に gip によって前処理（断面積データライブラリの作成）を行い、その後 dort、または tort によって gip の結果を用いて本計算を行う。サンプル問題の結果は、dort に関してはほぼ一致しているが、2 ケースにおいて、gip が異常終了したため、dort の実行ができなかった。これはコードのエラーか、入力データのエラーか判断不明であり対策を行わなかった。一方、tort に関しては、gip、tort と連続して実行できるケースが 1 組しかなかったが正常に動作した。中間処理コードである torsed、visa に関しては、5 問のサンプル問題すべてにおいてエラーが発生している。これは、コードの内部を調査してみたところ、バージョンが dort、tort のものと異なっていることがわかった。このため、今回のバージョンでの導入を諦めた。gip、grtuncl、dort、tort については、サンプル問題によるテスト実行は

および visa コードの抽出方法を Fig. 2.2 に示す。この実行は、dort のコードを抽出したディレクトリ上で実行する必要がある。これは、dort のコード抽出の際にできたライブラリ・ツール等を使用するためである。この実行によって、コード以外にサンプル問題、CRAY 用実行シェルスクリプト等が抽出される。

tort コードの抽出方法を Fig. 2.3 に示す。これには ‘t2p8p14.id’ を使用する。ただし、CRAY-T94 のコンパイラの障害か、仕様の違いか不明であるが、このシェルスクリプトを使用すると、正常に終了しない。現象として、tort コードのコンパイル処理が異常終了してしまう。詳しく調査してみたところ、tort のコンパイルに指定しているコンパイルオプション ‘-e mxz’ のうち ‘z’ をはずすと正常に動作することがわかった。‘z’ はデバッグツール等に利用されるデバッグ表の生成オプションであり、実行には影響が無いのではずしても問題はない。この修正した部分を Fig. 2.4 に示す。

これらの実行で個々のコードを抽出することができた。コードには、複数のソースから成り立つものがある。これらを Table 2.2 に示す。

実際の取り出し方として、dort コードの抽出 (Fig. 2.1) が終わった後、Table 2.2 に示してあるソースを別のディレクトリに複写する。同様にインクルードファイル、サンプル入力データも複写する。これは、torsed、visa の抽出、および tort の抽出の際、それをおいて同名のインクルードファイル、サンプル問題等が作成されるためである。このうち抽出されたサンプル問題を Table 2.3 に示す。

2.1.2 CRAY-T94 上での実行確認

VPP500 での計算結果と比較するために、CRAY 上で実行を行った。2.1.1 で述べたように ‘d2p8p14.id’、および ‘t2p8p14.id’ を実行したこと、dort、tort 等の実行ロードモジュールは作成されている。また、実行シェルスクリプトも作成されている。この実行シェルスクリプトは TSS での実行を想定している。しかし、原研のシステムでは原則的にジョブは NQS によるバッチ方式を採用しているため、バッチ用のシェルを作成した。この例を Fig. 2.5 に示す。

バッチ用の実行シェルを使いサンプル問題を実行してみた。結果の確認は、ORNL より DORT-TORT コードに添付されてきた計算結果と比較することで行った。しかし、この計算結果は今回配布された DORT-TORT コードとは異なるバージョンで実行したものであったため、正確な比較ができなかった。このため、おおよその比較を行った。その結果を Table 2.4、および 2.5 に示す。

DORT-TORT コードの実行は、最初に gip によって前処理（断面積データライブラリの作成）を行い、その後 dort、または tort によって gip の結果を用いて本計算を行う。サンプル問題の結果は、dort に関してはほぼ一致しているが、2 ケースにおいて、gip が異常終了したため、dort の実行ができなかった。これはコードのエラーか、入力データのエラーか判断不明であり対策を行わなかった。一方、tort に関しては、gip、tort と連続して実行できるケースが 1 組しかなかったが正常に動作した。中間処理コードである torsed、visa に関しては、5 問のサンプル問題すべてにおいてエラーが発生している。これは、コードの内部を調査してみたところ、バージョンが dort、tort のものと異なっていることがわかった。このため、今回のバージョンでの導入を諦めた。gip、grtuncl、dort、tort については、サンプル問題によるテスト実行は

完全とは言えないが、実データによる実行でなんらかの障害が発生した場合は、その都度対応を行うことにして、作業を進めることにした。

2.2 VPP500へのインストール

2.1で述べたようにCRAY上においてソースの抽出ができた。これをVPP500に転送してインストール（変換）作業を行った。作業的には富士通製のプログラム変換支援パッケージSTREAM77[3]と手作業による変換を行った。

2.2.1 STREAM77の実行

CRAY計算機とVPP500のFORTRAN仕様の大きな違いは、1ワードの長さが異なることである。CRAYは整数・実数ともに単精度が64ビットであるのに対し、VPP500は32ビットである。今回のVPP500へのインストールの目的のひとつが、倍精度で計算することであるので、すべての実数型定数・実数型変数に対し、倍精度化する必要がある。DORT-TORTコードは、実数型変数・配列が整数型変数・配列とEQUIVALENCE、または副プログラムとの引数による共有をしているものがある。このため、これらの整数には、次元をひとつ上げて実数型変数・配列との整合性をとる必要がある。このイメージをFig. 2.6に示す。STREAM77の機能はこの倍精度化を含め次のような機能がある。

- CRAY特有の命令の富士通FORTRANの命令への置き換え
- 実数変数・配列の倍精度化
- 組込み関数の倍精度化

(1) STREAM77を実行するための準備

STREAM77は、コンパイラがFORTRAN77(V10)時代のツールであるため、M780上にしかない。このため、ソース群を東海研のM780に転送した。またSTREAM77において上で述べた変換を行うものはC-エンジンという部品である。これは、入力ソースが大文字であることを前提としている。そのため、DORT-TORTコードを構成するすべてのソースに対し大文字化した。

さらに、STREAM77がなるべく完全な変換を行うことができるよう、入力ソースにSTREAM77の変換制御行を挿入した。これは、次元上げすべき整数配列を、STREAM77は宣言文等から判断するが、STREAM77は完全に正しく判断することはできない。そのため、情報をSTREAM77に与える機能が用意されている。具体的には、(STREAM77が判断できない)次元上げすべき配列を入力ソース中に変換制御行を用いて宣言する。変換制御行には2種類あり、全副プログラムに対して有効な整数配列名と、各副プログラムのみに有効な整数配列名を指定するものがある。挿入したこれらの指示行をFig. 2.7～2.11に示す。これらのなかで、'STREAM77G'で始まるものは全副プログラムに対して有効なもので、'STREAM77L'で始まるものは宣言した副プログラムのみで有効なものである。

(2) STREAM77の実行

STREAM77はM780上ではJCLにて実行する。このJCLの例をFig. 2.12に示す。

2.2.2 手作業による変換作業

STREAM77 にて変換を行ったが、これで完全に変換が終わったわけではない。ルーチン間の関係等は STREAM77 では見ることができないため、これらに伴う変換は手作業にて行わなければならない。

(1) 領域合わせ

整数配列・変数が羅列している COMMON ブロックにおいて、先頭の配列を引数として副プログラムに渡し、副プログラムでは実数配列で受け、COMMON に含まれる配列・変数に値を代入するものがある。この例を Fig. 2.13 に示す。実数の倍精度化に伴い、COMMON の配列・変数とそれが生じるため、領域を合わせるようにした。合わせ方は、EQUIVALENCE 文を使い Fig. 2.14 に示すようにした。また、この例では、配列 loc1 を整数配列でも受け取っている。loc1 の次元を上げたことで、これら受け側の整数配列に関しては次元を上げる必要がある。このような例は、何箇所も存在する。この修正を行った整数配列を COMMON 毎に Table 2.6 に示す。

(2) 宣言の変更

サブルーチン wot3(bb.lib.f, dort) では、親ルーチン tape(gip) の実引数で直接文字を指定されたものを、仮引数では実数型変数で受け取っている。この変数はサブルーチン edit(bb.lib.f, dort) に引数で渡し、edit の中では、4 バイトの整数型変数で受け、実際の使用時には文字型として使用している。wot3 での実数変数を 4 バイトの文字型に変更し、edit で使用している変数も同様に 4 バイトの文字型に変更した。これについて、オリジナルを Fig. 2.15、倍精度化したもの Fig. 2.16 に示す。

これと同様なものが、wot4(bb.lib.f), edit 間であった。このため同様な処理をした。

(3) 整数の引き渡し

親ルーチンの実引数に直接整数、または整数型変数を指定し、子ルーチンの仮引数では実数型変数として指定しているものがいくつかあった。これは、倍精度化された実数の前半部に整数値が入ることになる。今回の変換では、整数と実数変数が共有する場合は、実数の後半部に整数を代入することにしているため、修正した。例としてオリジナルのサブルーチン tape, seqio を Fig. 2.17、修正したものを Fig. 2.18 に示す。ここに示すように、実数変数 ww とこれと共有する大きさ 2 の整数配列 iww を設け、iww の添字が 2 のエリアに渡すべき整数の値・変数を代入し、ww を実引数に指定した。これと同様なものが何箇所かある。これを Table 2.7 に示す。

また、実引数・仮引数は共に整数型であるが仮引数が次元上げの対象となっている整数配列の場合がある。このような場合は、親ルーチンで大きさ 2 の整数配列 iww を作成し、この整数配列の添字 2 のエリアに、実引数で指定してあった定数、または変数を代入して、iww を実引数に指定した。また '0' を実引数に指定している場合は、DATA 文でゼロクリアした大きさ 2 の整数配列 izero を作成し、これを実引数に指定した。Fig. 2.19 にオリジナルのサブルーチン vario, blkio を、Fig. 2.20 にこの修正例を示す。これらのようなところは何箇所か存在する。これらの gip, grtuncl, dort, tort のそれぞれ修正したものを Table 2.8 ~ 2.11 に示す。

(4) 組込み関数

サブルーチン timez(bb.lib.f, dort, tort) で、CPU 時間、および現在の時刻を取得するために CRAY 特有のサービスルーチンが使われていた。これを VPP500 に用意されているサブ

ルーチンに置き換えた。これを Fig. 2.21 に示す。

(5) 動的領域確保

CRAY 版の DORT-TORT コードは、コードが実行時に使用する領域を動的に確保する仕様になっている。VPP500 では動的領域確保の機能が無いため、静的に領域を確保しなくてはいけない。CRAY 版は動的領域確保をサブルーチン memorex、およびこのルーチンから呼ばれるいくつかのサービスルーチンで行っている。一方、Sun 版の DORT-TORT コードは、静的に領域を確保する仕様、すなわち、あらかじめ実際に使用する領域の大きさに係わらず、大きく領域を確保している。実際のコードの使用に影響がないので、Sun 版の(静的領域確保を行う)memorex を採用する。Sun 版のメインルーチンは単精度でコーディングされているので、倍精度化し VPP500 版のコードに組み込んだ。これは、gip, grtuncl, dort, tort のすべてで行った。

(6) 文字の取扱い

整数型の配列に対し、文字・整数の両方で使用するものがある。文字として使用する場合、正しい表示ができない。そのため、文字型の配列を設け、これを整数型配列と共有(EQUIVALENCE)させ、使い方によってこれらを選んで使うようにした。この処置をしたのはサブルーチン fidas, mapr(共に gip, dort, tort, unc)である。例としてオリジナルの mapr を Fig. 2.22、修正版を Fig. 2.23 に示す。

また、STREAM77 によって、(オリジナルでは)DATA 文にて文字が定義されていた整数型変数が、実数型に変更させられたものがある。この(実数型に変えられた)変数を使って、別の整数変数を定義してある箇所があった。VPP500 では実数以外のものを格納した実数型変数を使った計算式を実行すると、無効な演算を実行したというエラーが発生する。そのため、実数型の宣言文を正しい型である文字型に変更すると同時に、これと(EQUIVALENCE 文による)共有する整数型変数を設け、計算式の中では整数型変数を使用するようにした。この修正を行ったのは、サブルーチン loco(dort, tort) である。オリジナルを Fig. 2.24、修正版を Fig. 2.25 に示す。

(7) アセンブラーの取扱い

CRAY 版の DORT-TORT コードは、一部のサブルーチンでアセンブラーで記述されたものがある。これは、rowd と rowi というルーチンで、これらはサブルーチン rowc、および rowv から呼ばれている。(アセンブラルーチンも含めて)これらは、CRAY 用に作成されたベクトル化済のサブルーチンである。しかし、CRAY のアセンブラーについては変換ができない。プログラム中のコメント、および DORT-TORT のマニュアルには、ベクトル化版を採用しない場合は、これらのかわりに rowt というサブルーチンを使用することができる旨が記述されていた。実際、Sun 版では rowt が呼ばれている。ここで、ベクトル版、およびスカラ版のツリー構造図を Fig. 2.26 に示す。

サブルーチン row はコントロールフラックスを計算する親ルーチンである。row は解析内容によって、解法手法別にいくつか用意されているサブルーチンを選択して、実行する。これら解法手法別サブルーチンに中に rowv、および rowc が含まれている。

具体的には row では解析対象によって、変数 irow、および imode の値が決定される。irow の値は 1 から 7 までの値をとり、それぞれ解法手法別サブルーチンが対応している、imode

は、これ自身の値よって、1, もしくは2種類の irow の値をとることになっており、この値に基づいて呼び出す解法手法別サブルーチンが決定する。CRAY 版、および Sun 版におけるこの組合せを Table 2.12 に示す。これによると、imode=3, または 4 の時に CRAY 版では rowc, rowv が呼ばれているのに対し、Sun 版は rowt が呼ばれている。しかし、imode=5, または 9 の時は Sun 版も rowc を呼んでいる。これは、Sun 版用に CRAY 版とは異なる rowc が用意されているためであり、このルーチンからはアセンブラー語で呼んでいない。

これらのことより、VPP500 版では、Sun 版同様に imode=3, または 4 の時に rowt を呼ぶようにし、imode=5, または 9 の時に呼び出す rowc は、Sun 版のものを倍精度化して採用することにした。オリジナルの row の一部を Fig. 2.27, rowv, rowc の変わりに rowt を呼ぶように変更した row の一部を Fig. 2.28 に示す。

(8) 断面積ライブラリの読み込み部分の変更

DORT-TORT コードの grtuncl, dort, および tort の実行時に断面積ライブラリを読み込む。(原研で作成した) 断面積ライブラリは現在、単精度版のコードで作成したものしかないので、この読み込み部分を単精度対応にしなくてはいけない。読み込み部分はサブルーチン reed で行っている。断面積は grtuncl では論理機番 4 番、dort では同じく 8 番で読んでいる。論理機番は変数 lun を用いているので、lun が 4 (dort の場合は 8 番) の時だけ単精度のワーク配列 (sarray) を使って読み込み、その後、倍精度化して本来の読み込みに使用する配列 array に代入するようにした。修正例として grtuncl のオリジナルの reed を Fig. 2.29, 修正後の reed を Fig. 2.30 に示す。

2.2.3 VPP500 版の実行、および計算結果

STREAM77、および手作業によって変換を行った VPP500 版を実際に実行してみた。これを、すでにインストールされている Sun 版(単精度版)と比較してみた。計算結果の最終的な値は Sun 版と近い値であったが、異なる箇所もあった。これは、単精度計算と倍精度計算の違いによる要素が大きく影響している。dort, tort はいくつかの収束計算があり、その計算途中の値を出力する箇所があり、倍精度計算と単精度計算の違いがここで現れている。収束した値は同様な値となるが、その(収束)過程での値が異なるため出力結果が異なるのである。コード内部では、差分式の値がしきい値より小さくなつた場合に、収束計算を終了する箇所がある。IEEE 形式の場合は M 形式と比べて、単精度より倍精度が顕著に小さい値を表すことができるので、この違いが現れる。

2.3 ベクトル化について

STREAM77、および手作業による変換を行った後、ベクトル化を行った。DORT-TORT コードの中でベクトル化の対象としたのは dort、および tort である。

2.3.1 動的挙動解析

dort において入力データ ‘j175.jffnj’ の規模を小さくし、動的挙動解析ツール ANALYZER[4] を使用してコスト分布を計測した。ANALYZER は VPP500 システムの GSP で動作する。数

値形式がM形式であり IEEE 形式である VPP500 とは異なるために、挙動が VPP500 とは若干異なるが、コスト解析上ではあまり問題がない。この ANALYZER の解析結果を Table 2.13 に示す。

これによると一番コストが高いのが `rowt` で 84.8%，次が `wsol` が 9.0% である。よってこれらを中心にベクトル化を行っていくことにした。

2.3.2 ベクトル化のための変更

ここでは、ベクトル化を施した副プログラムについて、変更内容を述べる。

(1) サブルーチン `rowt(dort)`

サブルーチン `rowt` はコントロールフラックスを計算する一部である。このサブルーチンの ANALYZER によるループリスト（コスト分布）を Table 2.14 に示す。これによると、一番コストが高いのは `total` の 79.2% である。ループリストで `total` が高いということは、DO ループ以外の部分のコストが高いことを意味している。ベクトル処理の対象となるのは DO ループであり、このままでは `total` 以外の DO ループをいくらベクトル化しても高速化できない。そのため DO ループの無いところに DO ループを作成する必要がある。

`rowt` の DO ループの無い部分の構造図を Fig. 2.31 に示す。この構造図によると GO TO 文によるループがあることがわかる。これは、`i1` に関するループである。このループの中で割当て型 GO TO 文によるループの外への分岐があるが、分岐後の処理を行って再びループ内に戻ってくる。割当て型 GO TO 文に指定される変数 `initml` は、このループの中では不変である。ループは `i1` が変数 `imsblk` によって定義され、ループ 1 回につき 1 ずつ値が引かれてゆき、0 になったらループの後の処理に進むことになっている。これらのことより、割当て型 GO TO 文で飛び先の処理について、それぞれ分割して独立させた DO ループを構成することができる。この構成を Fig. 2.32 に示す。これらの DO ループをベクトル化の対象とする。

これらの DO ループをベクトル化するにあたり、ベクトル化非対象のものを外す必要がある。Fig. 2.31 のオリジナルの構成において、`i1` のループから `write` 文の処理に飛び (`if(nou.gt.0) go to 9900`)、再び戻ってくる (`go to 3900`) 間所がある。本来なら分割した DO ループにもこの `write` 文の処理を展開しなければならない。しかし、`write` 文はベクトル化できない。この `write` 文はループ内で計算された値を書き出すものだが、`write` 文の目的はデバッグ用のものであると思われる。この理由は、`if` 文で `write` 文を実行するかどうか決めていくことと、実際に `write` 文を実行すると、（実行回数が多いために）極めて莫大な出力量になり通常のディスクに書くことが困難になるからである。このため、この `write` 文を採用することをやめた。

ここで、`i1` のループのベクトル化について説明する。このオリジナルのループの一部を Fig. 2.33 に示す。また、割当て型 GO TO 文の飛び先の処理のひとつである `6030 continue` 以降の処理ブロックを Fig. 2.34 に示す。これらによると、変数 `i1` は、単にループの回転の数のカウンタとしてのみ使用されている。

ここで変数 `i` に着目する。`i` は初期値が変数 `istr` によって定義され、ループ 1 回ごとに増分値 `inc` が足しこまれていく。増分値 `inc` はループ実行中は不変である。また、ループの回転数は `i1` の初期値を定義している `imsblk` を使ってループ実行前に確定することができるので、終

値が決まる。*i* はループ中、および割当て GO TO 文の飛び先の処理ブロック内でも配列の添字として使用されている。よって、ベクトル化対象ループの DO 変数として *i* を採用することにした。ループの形は Fig. 2.35 のようになる。このループの中に、旧 i1 ループ内の処理、および割当て GO TO 文の飛び先の処理が入る。

このループに対してベクトル化を行う。旧 i1 のループ (Fig. 2.33) と旧 6030 continue の処理ブロックを例に説明する。これらをひとつのループに納めた場合、そのままではベクトル化できない。これは配列 fjo、および fmo は参照が先に、定義が後に現れることと、変数 fiom、および配列 fix が回帰計算を行っているためである。

前者の場合、コンパイラは「定義の前に参照がある」との理由でベクトル化を行わない。fjo、fmo を定義する際、(旧)fjo、fmo の値を使っていないので回帰計算にはなっていない。そこでベクトル化を行うために、ワーク配列を新規に設けて、このループ実行前に fjo、fmo の内容を複写しておく。DO ループ内では、参照部分に関してこのワーク配列を使用することにする。これだと fjo、fmo は定義にのみ使われることになるので、ベクトル化の条件を満たすことになる。このワーク配列の複写部分を Fig. 2.36 に示す。

一方後者の場合、fiom、fix についての回帰計算は回避することはできない。しかし、fiom とは関係のない処理もあるので、DO ループを fiom、fix に関する計算と、これ以外のベクトル計算の対象となる処理に分割した。なお、処理の都合上、ベクトル化 fiom、fix の計算の前後にベクトル化対象となる処理を配置した。この時点での構造について、Fig. 2.37 に示す。この DO ループ分割をしたため、DO ループをまたいで、定義・参照されるいくつかの変数については配列化した。このコーディング部分の例のとして旧 6030 continue ブロックのものを Fig. 2.38 に示す。

Fig. 2.38 に旧 6030 continue ブロックの処理内容を示したが、他のブロックについても同様な処置を行った。ここで、Fig. 2.36 に示した fjo、fix のワーク配列への複写はどのブロックでも必要な処理である。そこで、一連の処理群の先頭に、このワーク配列への複写部分を移動した。これで、rowt のベクトル化が完成した。

(2) サブルーチン rowb(tort)

tort コードにおいて、dort コードの rowt に相当するサブルーチンが rowb である。今回の tort に関する実入力データは無かったが、このサブルーチンのコストは高くなると予想される。このため、ベクトル化を行った。

tort の rowb は、rowt ほど複雑ではないが、構造的によく似ているため同様なベクトル化手法をとった。rowb の構造図を Fig. 2.39 に示す。これによると割当て型 GO TO 文による分岐先は 2 か所である。ここでは、変数 initmx の値によって文番号 3600、または 3700 に分岐する。文番号 3700 以降の処理は、文番号 3600 の処理の後に必ず実行されるので、rowt のように分岐先ごとに処理ブロックを作る必要はない。initmw の値の定義は initmw の値によって決定する。すなわち、initmw の値によって文番号 3600 の処理ブロックを実行するか否か決定がされる。割当て型 GO TO 文はベクトル化の対象となっていない。このために、割当て型 GO TO 文を廃止して、IF 文を使用して initmw の値によって、文番号 3600 の処理の実行を制御するようにした。これにより、rowt のように分岐先ごとに処理ブロック群を作る必要はなくなった。

また、Fig. 2.39 に示した構造図より、*i1*に関するループが存在する。このループは *rowt* 同様 *i* によるスカラ、およびベクトルの DO ループに分割することができる。オリジナルの *rowb* の *i1* のループの一部を Fig. 2.40 に示す。これを *rowt* 同様、*i* のループに変更しベクトル化を施す。ベクトル化の弊害となるのは、変数 *nvl* の値によって変数が定義される部分である。*nvl* の値によって、変数 *fjomi*, *atxifw* が定義される場合がある（されない場合もある）。この部分の後に、これら変数の参照があるため「定義の前の参照がある」ということでベクトル化できない。このために、*nvl* の IF 文を無くすることにする。*nvl* の値が 0 以外の時は、*fjomi* は配列 *fjo*, *atxia* は計算式 *dzxiz*at* によって定義され、*nvl* の値が 0 の時は定義されない。*fjomi*, および *atxia* は、*i* のループに入る前にそれぞれ 0.0 という値で初期化されている。また、*nvl* は *i* のループ実行中に値が変わることはない。このため、この IF 文による定義部分を *i* ループから独立させ、*i* ループの実行前に値を定義することにする。ただし、*fjomi* に関しては、(*nvl* が 0 以外の時) 配列 *fjo* によって定義される。*fjo* は、*rowt* 同様、*i* ループの後半で定義される。よって、*rowt* と同様な手法を採用した。すなわち、*fjo* 用のワーク配列 (*wfjo*) を用意し、*nvl* が 0 の時は 0.0, 0 以外のときは *fjo* の値を代入するようにした。*wfjo* は *i* ループ中で *fjomi* の定義に使用する。また *fjo* 同様、参照・定義の順序で現れる配列 *fko* がある。これもワーク配列 *wfko* を用意して、このループで代入する。このループを Fig. 2.41 に示す。

次に、*i* ループをベクトル化するが、これも変数 *fiom* に関して回帰計算が発生する。このため、*fiom* に関する部分と関係しない部分に分割し、関係しない部分はベクトル処理、関係する部分はスカラ処理を行うようにした。分割方法は *rowt* と同様である。ただし、*rowt* は割当て GO TO 文の分岐先ごとに処理ブロックを作成したが、*rowb* の場合は、1つの処理ブロック内で分岐先ごとの処理をできることは前述した。*initmw* の値によって割当て型 GO TO 文による分岐先が決まっていたので、処理ブロック内で *initmw* の値によって処理の制御を行うようにした。具体的には、IF 文を用いて、旧 3600 の処理の制御を行った。ベクトル化を施した *i* ループの一部を Fig. 2.42 に示す。

(3) サブルーチン *wsol(dort)*

5 重対角行列の解法の一部を行うサブルーチンである。5 重対角行列を変形して 3 重対角行列にし、ガウスの消去法で解いている。このサブルーチンは ANALYZER によると、*rowt* に続いて 2 番目にコストの高いものである。このサブルーチンのループリストを Table 2.15 に示す。

このサブルーチンはすでにベクトル化されている。コストの高い上位 3 つのループのコスト比率は全部で 78.5% であり、これをベクトル化の対象とする。これらのループは、スカラ処理されているが、これは、コンパイラがこのループ内の計算が独立である（回帰計算がない）と判断できないため、ベクトル化処理していない。これらのループは CRAY 版の独立を意味する最適化指示行 (*cdir\$ ivdep*) が挿入されている。よって、これに相当する VPP500 での最適化指示行 [5]*vocl loop,novrec を挿入することでベクトル化することができた。例として、DO 270 のループのオリジナルを Fig. 2.43、ベクトル化したこのループを Fig. 2.44 に示す。

(4) その他 (dort, tort)

dort, および *tort* はベクトル化されたサブルーチンがいくつか含まれている。今回のベク

トル化作業で使用した入力データでは実行されないサブルーチンにもいくつかベクトル化版があった。これには CRAY 版の最適化指示行 (`cdir$ ivdep`) 等が挿入されている。VPP500 の FORTRAN コンバイラでこれらの DO ループにおいてベクトル化がされていないものには、`*vocl loop,novrec` を挿入したり、ごく簡単な修正をしてベクトル化を行った。これらのサブルーチンを Table 2.16 に示す。

2.4 ベクトル化効果

ここでは、ベクトル化版の計算結果、および効果について述べる。

2.4.1 計算結果

作成したベクトル化版を用いて計算を行った。オリジナル版のスカラ実行の計算結果とベクトル化版のスカラ実行の計算結果は完全に一致した。また、オリジナル版のスカラ実行に対し、ベクトル化版のベクトル化実行の結果は若干異なるが総じて結果は合っていた。この違いは、ベクトル処理とスカラ処理は数値の丸めが異なることと、最適化の違いによるものである。

2.4.2 ベクトル化の効果

ベクトル化版に対し ANALYZER を用いてコスト分布を調査した。その結果を Table 2.17 に示す。この表の v-effect と Table 2.13 に示したオリジナルのコスト分布表の v-effect を比較すると、ベクトル化を施したサブルーチンは倍率が上昇していることがわかる。また、入力データ ‘j42.jffnj’、および ‘j175.jffnj’ について、オリジナル版のベクトル実行時間 (CPU)、およびベクトル化版のベクトル実行時間 (同) の比較を行った(最適化モードは共に OPT(E))。この結果を Table 2.18 に示す。これによると、約 2 倍の高速化が達成されている。高倍率が達成されなかった理由として、コストの高いサブルーチンにおいて回帰計算があったためベクトル化率が高くならなかつたことと、出力ファイルの書き出し量が多く(全部で 500MB 以上)、I/O に時間がかかったことが原因と思われる。

2.5 まとめ

今回の作業は CRAY 版の変換(倍精度化を含む)からベクトル化まで行ったため、作業量は多くなったが、CRAY 上でベクトル化してあるサブルーチンは、簡単に VPP500 上でベクトル化ができたので、この分作業は比較的スムーズに進めることができた。ただし、コストの高いルーチンで回帰計算があったために高倍率は達成できなかつたが、オリジナルが長時間ジョブのため、ベクトル化の効果はあると思われる。

また、コードの性質上書き出すファイルの量が多いため、ディスクを圧迫するところが多く、作業を進めていく上で多少の手間がかかつってしまった。CPU が高速になるにつれ、このようなことはこれから多くなっていくと思われる。よって、これからはジョブの実行環境について、総合的に考慮していく必要があると思う。

Table 2.1 DORT-TORT's shell-scripts

ファイル名	内 容
d2p8p14.id	gip, grtunc1, dort, torsed, visaのソース、サンプル入力データ、実行シェル、ツール等
t2p8p14.id	tortのソース、サンプル入力データ、実行シェル

Table 2.2 Composition of DORT-TORT code

コード名	構成するソース群
dort	bb.dor.f, bb.ccc.c(C言語), bb.cal.f(アセンブラー)
tort	bb.tor.f, bb.ccc.c(C言語), bb.cal.f(アセンブラー)
gip	bb.gip.f, bb.lib.f, bb.ccc.c(C言語)
grtunc1	bb.unc.f, bb.lib.f, bb.ccc.c(C言語)
torsed	bb.sed.f, bb.lib.f, bb.ccc.c(C言語)
visa	bb.vis.f, bb.lib.f, bb.ccc.c(C言語)

Table 2.3 Sample problems

コード名	入力データ
gip (dort 用)	probgi.F probg2.F probg3.F probg4.F probg5.F probgi6.F probg7.F probg8.F probg9.F probga.F probgb.F probgc.F probgd.F
dort	probpi.F probp2.F probp3.F probp4.F probp5.F probpi6.F probp7.F probp8.F probp9.F probpa.F probpb.F probpc.F probpd.F
gip (tort 用)	probgi8.F probgi20.F
tort	probpi.F probp2.F probp3.F probp4.F probp5.F probpi6.F probp7.F probp8.F
torsed, visa	yseddog.F yseddog2.F yseddog8.F yseddoga.F yseddogc.F

Table 2.4 Executed results of sample problems (gip, dort)

gip(dort用)		dort	
入力データ	結果	入力データ	結果
probg1.F	一致	probp1.F	一致
probg2.F	一致	probp2.F	一致
probg3.F	一致	probp3.F	一致
probg4.F	一致	probp4.F	一致
probg5.F	一致	probp5.F	一致
probg6.F	一致	probp6.F	一致
probg7.F	一致	probp7.F	一致
probg8.F	一致	probp8.F	一致
probg9.F	一致	probp9.F	一致
probga.F	エラー発生	probpa.F	未実行
probgb.F	エラー発生	probpb.F	未実行
probgc.F	一致	probpc.F	一致
probgd.F	一致	probpd.F	一致

Table 2.5 Executed results of sample problems (gip, tort)

gip(tort用)		tort	
入力データ	結果	入力データ	結果
prob8.F	一致	probp1.F	未実行
prob20.F	正常終了	probp2.F	未実行
		probp3.F	未実行
		probp4.F	未実行
		probp5.F	未実行
		probp6.F	未実行
		probp7.F	未実行
		probp8.F	一致

Table 2.6 Improved integer arrays

コード名	インクルード名	COMMON名	対象となる整数配列	補 足
gip	comdot	cmpar	l0cp, l0ce	
		comdot	loci	
	comflx	cmflx	locf	
	comin	comin	mult (imult)	名前を変更
	comio	iorec	iocm (iiocm)	名前を変更
	comloc	comloc	loc1	
vppbul	bulkbu	loc1		新規にインクルードファイルを作成
grtunc1	comdot	cmpar	l0cp, l0ce	
		comdot	loci	
	comflx	comflx	locf	
	comin	comin	mult (imult)	名前を変更
	comio	iorec	iocm (iiocm)	名前を変更
	comloc	comloc	loc1	
dort	comdot	cmpar	l0cp, l0ce	
		comdot	loci	
	comflx	comflx	locf	
	comin	comin	mult (imult)	名前を変更
	comio	iorec	iocm (iiocm)	名前を変更
	comloc	comloc	loc1	
comrow	comrow	nbfri		
tort	comdot	cmpar	l0cp, l0ce	
		comdot	loci	
	comflx	comflx	locf	
	comin	comin	mult (imult)	名前を変更
	comio	iorec	iocm (iiocm)	名前を変更
	comloc	comloc	loc1	
comrow	comrow	lpointv, 100		

Table 2.7 Improvements of argument (actual argument is integer constant or integer variable, and dummy argument is real variable)

コード名	サブルーチン名	CALL文	
gip	tape	修正前	call seqio(2, nt4, 777, 1,0)
		修正後	call seqio(2, nt4, ww , 1,0)
	wandr	修正前	call seqio(0, nunix, nunit, 0,0)
		修正後	call seqio(0, nunix, ww , 0,0)
grtunc1	wandr	修正前	call seqio(0, nunix, nunit, 0,0)
		修正後	call seqio(0, nunix, ww , 0,0)
tort	wandr	修正前	call seqio(0, nunix, nunit, 0,0)
		修正後	call seqio(0, nunix, ww , 0,0)

Table 2.8 Improvements of argument in gip (actual argument is integer constant or integer variable, and dummy argument is integer array)

コード名	サブルーチン名	CALL文	
gip	seqio	修正前	call dopc(-1,nt,0,jerr,0,0,0,0)
		修正後	call dopc(-1,nt,0,jerr,izero,0,0,0)
		修正前	call dopc(3,nt,nt,jerr,0,0,0,0)
		修正後	call dopc(3,nt,nt,jerr,izero,0,0,0)
	tape	修正前	call wot3(cx(1,i04),0,i05,4hpos.,4hmat.,..)
		修正後	call wot3(cx(1,i04),izero,i05,4hpos.,4hmat.,..)
	vario	修正前	call blkio(ii,lun,iary, ixx,irec,1d,nrecmx, ..)
		修正後	call blkio(ii,lun, iww, ixx,irec,1d,nrecmx, ..)
		修正前	call blkio(ii,lun,0,0,0,1d,0,0,0)
		修正後	call blkio(ii,lun,izero,0,0,1d,0,0,0)
		修正前	call blkio(ii,lun,0,0,0,1d,0,0,0)
		修正後	call blkio(ii,lun,izero,0,0,1d,0,0,0)
		修正前	call blkio(ii,lun,0,0,0,1d,nrecmx,nwblk,0)
		修正後	call blkio(ii,lun,izero,0,0,1d,nrecmx,nwblk,0)
		修正前	call blkio(ii,lun,ibuf,nwds,irec, ..)
		修正後	call blkio(ii,lun,iww ,nwds,irec, ..)

Table 2.9 Improvements of argument in grtunc1 (actual argument is integer constant or integer variable, and dummy argument is integer array)

コード名	サブルーチン名	CALL文	
grtunc1	seqio	修正前	call dopc(-1, nt, 0, jerr, 0,0,0,0)
		修正後	call dopc(-1, nt, 0, jerr, izero,0,0,0)
	tpface	修正前	call wrdso(im, iset, 0, d0, 0, d, igm, 0, jm, lm, im, ..)
		修正後	call wrdso(iww, iset, 0, d0, 0, d, igm, 0, jm, lm, im, ..)
unclf	blkio	修正前	call blkio(102, nbuf2, ixx, ijmn, 0, k, migmi, 0, 0)
		修正後	call blkio(102, nbuf2, iww, ijmn, 0, k, migmi, 0, 0)
	vario	修正前	call blkio(ii, lun, iary, ixx, irec, 1d, ..)
		修正後	call blkio(ii, lun, iww, ixx, irec, 1d, ..)
wott	blkio	修正前	call blkio(ii, lun, 0, 0, 0, 1d, 0,0,0)
		修正後	call blkio(ii, lun, izero,0,0, 1d, 0,0,0)
	blkio	修正前	call blkio(ii, lun, 0,0,0, 1d, nrecmx, ..)
		修正後	call blkio(ii, lun, izero,0,0, 1d, nrecmx, ..)
	blkio	修正前	call blkio(ii, lun, ibuf, nwds, irec, ..)
		修正後	call blkio(ii, lun, iww, nwds, irec, ..)
	blkio	修正前	call blkio(ii, lun, ibuf, nwds, irec, ..)
		修正後	call blkio(ii, lun, iww, nwds, irec, ..)
	wot3	修正前	call wot3(x, 0, ncol, -1tbl, top1, ..)
	wot3	修正後	call wot3(x, izero, ncol, -1tbl, top1, ..)

Table 2.10 Improvements of argument in dort (actual argument is integer constant or integer variable, and dummy argument is integer array) (1/2)

コード名	サブルーチン名	CALL文	
dort	actvy	修正前	call edit(act, 0, i1,-nreg, 4hrgn=, . .)
		修正後	call edit(act, 0, i1,-nreg, 4hrgn=, . .)
anfout	anfout	修正前	call edit(dirf, 0, mm, -im, 4h i=, . .)
		修正後	call edit(dirf, 0, mm, -im, 4h i=, . .)
grdsc1	grdsc1	修正前	call wot3(cban, 0, 6, -icmjcm, 'ij ', . .)
		修正後	call wot3(cban, 0, 6, -icmjcm, 'ij ', . .)
inpa	inpa	修正前	call ndxr(d(libis), ism, d(limbis), 0,-1,1)
		修正後	call ndxr(d(libis), ism, d(limbis), 0,-1,1)
	inpa	修正前	call ndxr(d(lmbms), msm, d(lmmbs), 0,-1,1)
		修正後	call ndxr(d(lmbms), msm, d(lmmbs), 0,-1,1)
	inpa	修正前	call ndxr(d(liljbg), igm, d(lnmbig), 0,1m, imsjm)
		修正後	call ndxr(d(liljbg), igm, d(lnmbig), 0,1m, imsjm)
input	input	修正前	call wot3(d(ljgsz), 0, -njszn, -niszn, . .)
		修正後	call wot3(d(ljgsz), 0, -njszn, -niszn, . .)
macmx	macmx	修正前	call edit(sig, 0, mtm, -ihp, 4hposn, . .)
		修正後	call edit(sig, 0, mtm, -ihp, 4hposn, . .)
nquadr	nquadr	修正前	call edit(msoms, 0, -msm,-msm, 4hmset, . .)
		修正後	call edit(msoms, 0, -msm,-msm, 4hmset, . .)
quad	quad	修正前	call edit(ilfrt, 0, -2*mnquad,-mma, . .)
		修正後	call edit(ilfrt, 0, -2*mnquad,-mma, . .)
	quad	修正前	call edit(snpl(i13), 0, mms,1-lm, . .)
		修正後	call edit(snpl(i13), 0, mms,1-lm, . .)
sbsrin	sbsrin	修正前	call wot3(intsr, 0, -ism,-nintsr, . .)
		修正後	call wot3(intsr, 0, -ism,-nintsr, . .)
	sbsrin	修正前	call wot3(intfx, 0, -ism,-nintfx, . .)
		修正後	call wot3(intfx, 0, -ism,-nintfx, . .)
seqio	seqio	修正前	call dopc(-1, nt, 0, jerr, 0,0,0,0)
		修正後	call dopc(-1, nt, 0, jerr, 0,0,0,0)

Table 2.10 Improvements of argument in dort (actual argument is integer constant or integer variable, and dummy argument is integer array) (2/2)

コード名	サブルーチン名	CALL文	
sorsum		修正前	call dopc(3, nt, nt, jerr, 0,0,0,0)
		修正後	call dopc(3, nt, nt, jerr, izero,0,0,0)
		修正前	call wot3 (flum(i1j+1), 0, lms, -ims, ..)
		修正後	call wot3 (flum(i1j+1), izero, lms, -ims, ..)
		修正前	call wot3 (sinm, 0, lms, -ims, 4h i=, ..)
		修正後	call wot3 (sinm, izero, lms, -ims, 4h i=, ..)
		修正前	call wot3 (sorm, 0, lms, -ims, 4h i=, ..)
		修正後	call wot3 (sorm, izero, lms, -ims, 4h i=, ..)
		修正前	call blkio(ii, lun, 0,0,0, 1d, 0,0,0)
		修正後	call blkio(ii, lun, izero,0,0, 1d, 0,0,0)
		修正前	call blkio(ii, lun, 0,0,0, 1d, nrecmx, ..)
		修正後	call blkio(ii, lun, izero,0,0, 1d, nrecmx, ..)
		修正前	call blkio (ii,lun, iary, ixx, irec, ..)
		修正後	call blkio (ii,lun, iww , ixx, irec, ..)
		修正前	call blkio(ii, lun, ibuf, nwds, irec, ..)
		修正後	call blkio(ii, lun, iww , nwds, irec, ..)
		修正前	call blkio(ii, lun,ibuf, nwds, irec, ..)
		修正後	call blkio(ii, lun, iww, nwds, irec, ..)

Table 2.11 Improvements of argument in tort (actual argument is integer constant or integer variable, and dummy argument is integer array) (1/2)

コード名	サブルーチン名	CALL文	
tort	inpa	修正前	call ndxr(1d(1,1ibis),ism,1d(1,1imbis),0, · ·)
		修正後	call ndxr(1d(1,1ibis),ism,1d(1,1imbis),izero, · ·)
		修正前	call ndxr (1d(1,1jbjs),jsm,1d(1,1jmbjs),0 , · ·)
		修正後	call ndxr (1d(1,1jbjs),jsm,1d(1,1jmbjs),izero, · ·)
		修正前	call ndxr (1d(1,1mbms),msm,1d(1,1mmbs),0, · ·)
		修正後	call ndxr (1d(1,1mbms),msm,1d(1,1mmbs),izero, · ·)
		修正前	call ndxr(d(1i1jbg), igm, 0, 0, · ·)
		修正後	call ndxr(d(1i1jbg), igm, izero, izero, · ·)
		修正前	call wot4(nou, sig, 0, 0, 0, · ·)
		修正後	call wot4(nou, sig, izero, 0, 0, · ·)
meshj		修正前	call wotv(npr, fjo, 0, 0, '0fjo before · ·)
		修正後	call wotv(npr, fjo, izero, izero, '0fjo before · ·)
		修正前	call wotv(npr, fjo, 0, 0, '0fjo after · ·)
		修正後	call wotv(npr, fjo, izero, izero, '0fjo after · ·)
meshk		修正前	call wotv(npr, fko, 0, 0, '0fko before · ·)
		修正後	call wotv(npr, fko, izero, izero, '0fko before · ·)
quad		修正前	call edit (snpl(i9), 0, mms,1-lms,4hmom., · ·)
		修正後	call edit (snpl(i9), izero, mms,1-lms,4hmom., · ·)
refog		修正前	call wotv(npr, d(1fres), ibjk, jbk, 0, · ·)
		修正後	call wotv(npr, d(1fres), ibjk, jbk, izero, · ·)
resps		修正前	call wot4(nou, znres, 0, · ·)
		修正後	call wot4(nou, znres, izero, · ·)
		修正前	call wot4(nou, znres, 0, · ·)
		修正後	call wot4(nou, znres, izero, · ·)
		修正前	call wot4(nou, fkres, 0, · ·)
		修正後	call wot4(nou, fkres, izero, · ·)
sbsfix		修正前	call wot4(nou, fii, 0, '0fii', 4, mma, ·)
		修正後	call wot4(nou, fii, izero, '0fii', 4, mma, ·)

Table 2.11 Improvements of argument in tort (actual argument is integer constant or integer variable, and dummy argument is integer array) (2/2)

		修正前	call wot4(nou, fio, 0, 'Ofio', 4, mma, . . .)
		修正後	call wot4(nou, fio, 0, 'Ofio', 4, mma, . . .)
		修正前	call wot4(nou, fji, 0, 'Ofji', 4, mma, . . .)
		修正後	call wot4(nou, fji, 0, 'Ofji', 4, mma, . . .)
		修正前	call wot4(nou, fjo, 0, 'Ofjo', 4, mma, . . .)
		修正後	call wot4(nou, fjo, 0, 'Ofjo', 4, mma, . . .)
		修正前	call wot4(nou, fko, 0, 'Ofko', 4, . . .)
		修正後	call wot4(nou, fko, 0, 'Ofko', 4, . . .)
sdisin	修正前	call wot4(npr, shapm(i8), 0, 'Odistr', . . .)	
	修正後	call wot4(npr, shapm(i8), 0, 'Odistr', . . .)	
seqio	修正前	call dopc(-1, nt, 0, jerr, 0, 0, 0, 0)	
	修正後	call dopc(-1, nt, 0, jerr, 0, 0, 0, 0)	
	修正前	call dopc(3, nt, nt, jerr, 0, 0, 0, 0)	
	修正後	call dopc(3, nt, nt, jerr, 0, 0, 0, 0)	
source	修正前	call wotv(npr, flij, ibjk, jbk, 0, . . .)	
	修正後	call wotv(npr, flij, ibjk, jbk, 0, . . .)	
vario	修正前	call blkio(ii, lun, iary, ixx, irec, 1d, . . .)	
	修正後	call blkio(ii, lun, iww, ixx, irec, 1d, . . .)	
	修正前	call blkio(ii, lun, ibuf, nwds, irec, . . .)	
	修正後	call blkio(ii, lun, iww, nwds, irec, . . .)	
	修正前	call blkio(ii, lun, ibuf, nwds, irec, . . .)	
	修正後	call blkio(ii, lun, iww, nwds, irec, . . .)	
	修正前	call blkio(ii, lun, 0, 0, 0, 1d, 0, 0, 0)	
	修正後	call blkio(ii, lun, 0, 0, 0, 1d, 0, 0, 0)	
wrdir	修正前	call wot4(nou, dirf, 0, ' ', 0, nip, . . .)	
	修正後	call wot4(nou, dirf, 0, ' ', 0, nip, . . .)	

Table 2.12 Values of "irow" and "imode" on CRAY and Sun version

imode	CRAY版	Sun 版	irowの値が 2の時、rowv 3の時、rowt 6の時、rowc を呼び出す。
	irow	irow	
≤ 1	1	1	
2	3 or 4	3 or 4	
3	2 or 4	3 or 4	
4	6 or 4	3 or 4	
5	6 or 4	6 or 4	
6	7	7	
7	4	4	
8	5	5	
9	6	6	

Table 2.13 Dynamic behaivor of original version of the dort code

name	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
ROWT	2400000	.2040E11	84.8	.6519E11	85.5	40	73.4	3.0-	3.3 0
WSOL	7842	.2168E10	9.0	.2880E10	3.8	24	27.3	1.3-	1.3 0
ROW	30001	.6266E09	2.6	.2561E10	3.4	42	80.7	3.8-	4.3 0
PLANE	158	.1835E09	0.8	.2465E09	0.3	105	26.4	1.3-	1.3 0
FLUX	12	.1520E09	0.6	.2762E09	0.4	4	73.0	1.2-	2.2 0
SOURCE	1	.1307E09	0.5	.2379E09	0.3	5	70.8	1.2-	2.2 0
CMSCLR	157	.1277E09	0.5	.2229E09	0.3	84	44.0	1.7-	1.8 0
REBAL	157	69004493	0.3	.3167E09	0.4	26	85.3	4.1-	4.9 0
VARIO	244932	42092621	0.2	40495935	0.1	1	3.0	0.9-	1.0 0
CRED	150506	41888580	0.2	.1727E10	2.3	442	99.8	35.8-	46.5 0
>CRIT	93682	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
WESOL	157	39833138	0.2	.1816E10	2.4	2964	99.9	39.4-	53.0 0
SORSUM	1	35798297	0.1	35801885	0.0	43	0.0	1.0-	1.0 0
TIMSUM	1	17846364	0.1	17846725	0.0	2	0.0	1.0-	1.0 0
>TIMON	55598	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
>TIMOFF	55593	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
CLEARX	148471	14426091	0.1	.5639E09	0.7	379	99.6	34.2-	43.8 0
BTFL0	300000	11172202	0.0	.1152E09	0.2	48	95.2	9.2-	11.5 0
REED	22355	1742010	0.0	7603236	0.0	26	78.8	4.3-	4.4 0
>RITE	1445	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----	-----
SEQIO	23798	1473884	0.0	1473884	0.0	1	0.0	1.0-	1.0 0
CMOVX	16443	891809	0.0	6710117	0.0	22	92.6	6.5-	8.3 0
CSETDM	316	670042	0.0	11750460	0.0	77	99.4	14.3-	21.6 0
SFLXIN	1	623924	0.0	623924	0.0	95	0.0	1.0-	1.0 0

Table 2.14 Loop-list of original subroutine rowt

vectorize - loop list ----- ROWT	do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
isn 00000001-00000352	total	v	24000000	.1615E11	79.2	.1615E11	24.8	1.0	0.0	1.0-	1.0
00000061-00000062	do	v	48000000	.1551E10	7.6	.2419E11	37.1	42	100.0	11.7-	19.5
00000197-00000198	do	v	43200000	.1396E10	6.8	.2177E11	33.4	42	100.0	11.7-	19.5
00000058-00000063	do	s	24000000	.6240E09	3.1	.6240E09	1.0	20	0.0	1.0-	1.0
00000194-00000199	do	s	21600000	.5616E09	2.8	.5616E09	0.9	20	0.0	1.0-	1.0
00000185-00000189	do	v	21600000	.7560E0000	0.4	.1179E10	1.8	42	100.0	11.7-	19.5
00000054-00000054	do	v	24000000	.4523E079	0.2	.7056E09	1.1	42	100.0	11.7-	19.5
00000068-00000070	do	v	0	0.0	0	0.0	0.0	0	0.0	0	0
00000179-00000179	4080	do	v	0	0	0	0.0	0	0.0	0	0
00000311-00000316	7060	do	v	0	0	0	0.0	0	0.0	0	0
00000320-00000321	7070	do	v	0	0	0	0.0	0	0.0	0	0
00000326-00000326	7110	do	v	0	0	0	0.0	0	0.0	0	0

Table 2.15 Loop-list of original subroutine wsol

vectorize - loop list ----- WSOL	do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	
isn 00000122-00000122	270	do	s	1323560	.6293E09	29.0	.6293E09	21.9	23	0.0	1.0-	1.0
00000136-00000137	320	do	s	1277804	.5665E09	26.1	.5665E09	19.7	23	0.0	1.0-	1.0
00000167-00000167	420	do	s	1277804	.5069E09	23.4	.5069E09	17.6	23	0.0	1.0-	1.0
00000085-00000093	220	do	s	35953	.1017E09	4.7	.1017E09	3.5	51	0.0	1.0-	1.0
00000105-00000124	280	do	s	15684	9000E2080	4.2	9000E2080	3.1	84	0.0	1.0-	1.0
00000185-00000188	540	do	v	1323560	75215337	3.5	.7822E09	27.2	24	100.0	7.8-	13.0
00000160-00000177	480	do	s	15684	52315040	2.4	.52315040	1.8	83	0.0	1.0-	1.0
00000129-00000147	380	do	s	15684	51007164	2.4	51007164	1.8	83	0.0	1.0-	1.0
00000181-00000190	542	do	s	15684	43677480	2.0	43677480	1.5	84	0.0	1.0-	1.0
00000141-00000146	350	do	s	30072	25882738	1.2	25882738	0.9	35	0.0	1.0-	1.0
00000171-00000176	450	do	s	30072	22401376	1.0	22401376	0.8	35	0.0	1.0-	1.0
00000080-00000094	230	do	M	471	1053699	0.0	1258355	0.0	76	17.1	1.2-	1.2
00000102-00000193	800	do	s	7842	846936	0.0	846936	0.0	2	0.0	1.0-	1.0
00000154-00000156	410	do	v	15684	437776	0.0	4539714	0.2	26	100.0	7.8-	13.0
00000069-00000077	210	do	v	471	416954	0.0	1024307	0.0	60	63.4	2.4-	2.5
00000001-00000195	total			7842	278874	0.0	278874	0.0	1	0.0	1.0-	1.0

Table 2.16 Vectorized subroutines

コード名	ベクトル化したサブルーチン
dort	csolswp, rowb, rowl, rown, rowv, rwoz, sorx
tort	csolswp, rown, rownv, rowy, rowsv

Table 2.17 Dynamic behavior of vector version of the dort code

name	ex-count	v-cost %	s-cost %	v-leng %	v-rate	v-effect	overhd
ROWT	2400000	.1605E11	88.3	.7672E11	87.4	40	84.5
WSOL	7842	.6290E09	3.5	.2880E10	3.3	24	86.5
ROW	30001	.6266E09	3.4	.2561E10	2.9	42	80.7
PLANE	158	.1835E09	1.0	.2465E09	0.3	105	26.4
FLUX	12	.1520E09	0.8	.2762E09	0.3	4	73.0
SOURCE	1	.1307E09	0.7	.2379E09	0.3	5	70.8
CMSCLR	157	.1277E09	0.7	.2229E09	0.3	84	44.0
REBAL	157	69004493	0.4	.3167E09	0.4	26	85.3
VARIO	244932	42092621	0.2	40495935	0.0	1	3.0
CRED	150506	41888580	0.2	.1727E10	2.0	442	99.8
>CRIT	93682	-----	-----	-----	-----	-----	-----
WWESEL	157	39833138	0.2	.1816E10	2.1	2964	99.9
SORSUM	1	35798297	0.2	35801885	0.0	43	0.0
TIMSUM	1	17846364	0.1	17846725	0.0	2	0.0
>TIMON	55598	-----	-----	-----	-----	-----	-----
>TIMOFF	55593	-----	-----	-----	-----	-----	-----
CLEARX	148471	14426091	0.1	.5639E09	0.6	379	99.6
BTFL0	30000	11172202	0.1	.1152E09	0.1	48	95.2
REED	22355	1742010	0.0	7603236	0.0	26	78.8
>RITE	1445	-----	-----	-----	-----	-----	-----
SEQIO	23798	1473884	0.0	1473884	0.0	1	0.0
CMOVX	16443	891809	0.0	6710117	0.0	22	92.6
CSETDM	316	6700442	0.0	11750460	0.0	77	99.4
SFLXIN	1	623924	0.0	623924	0.0	95	0.0

Table 2.18 Comparison between original version and vector version

入力データ	時間モード	オリジナル版	ベクトル化版
j42. jffnj	CPU時間	2h 19m 38.32s	1h 5m 49.41s
	VU 時間	11m 00.85s	19m 27.44s
	倍率	1.0	2.2
j175. jffnj	CPU時間	4h 10m 39.68s	2h 9m 41.04s
	VU 時間	22m 58.24s	37m 50.69s
	倍率	1.0	1.9

※コンパイルは共にVPP FORTRAN77/VP OPT(E) で行った。

```
setenv TARGET cray-c90    ↵
mv d2p8p14.id dorus
head -180 dorus > ufirst
csh -x ufirst dort cray cflag
csh -x jcldor dos
csh -x jcldor dort
```

Fig. 2.1 Installation method of dort, gip, and grtuncl codes

```
csh -x jcldor visa
```

Fig. 2.2 Installation method of visa, and torted codes

```
mv t2p8p14.id torus
csh -x ufirst tort cray cflag
csh -x jcitor tort
```

Fig. 2.3 Installation method of tort code

```
•
•
setenv parmc '-V -A fast -e mxz -o aggress' # -o off
•
cft77 $parmc -l bb.tor.1st -b bb.tor.o bb.tor.f
•
•
#
#setenv parmc '-V -A fast -e mxz -o aggress' # -o off
setenv parmc '-V -A fast -e mx -o aggress' # -o off
•
cft77 $parmc -l bb.tor.1st -b bb.tor.o bb.tor.f
•
•
```

Fig. 2.4 Modification of compiler option for t2p8p14.id

```

#!/bin/csh
#@$-eo
#@$-q cr004nss
#@$-lt 0:10:00
cd $QSUB_WORKDIR
../src/dort < ../input/dort/probpd.F >& ../output/dort/probpd.outlist

```

Fig. 2.5 Example of shell-script for execution on CRAY-T94

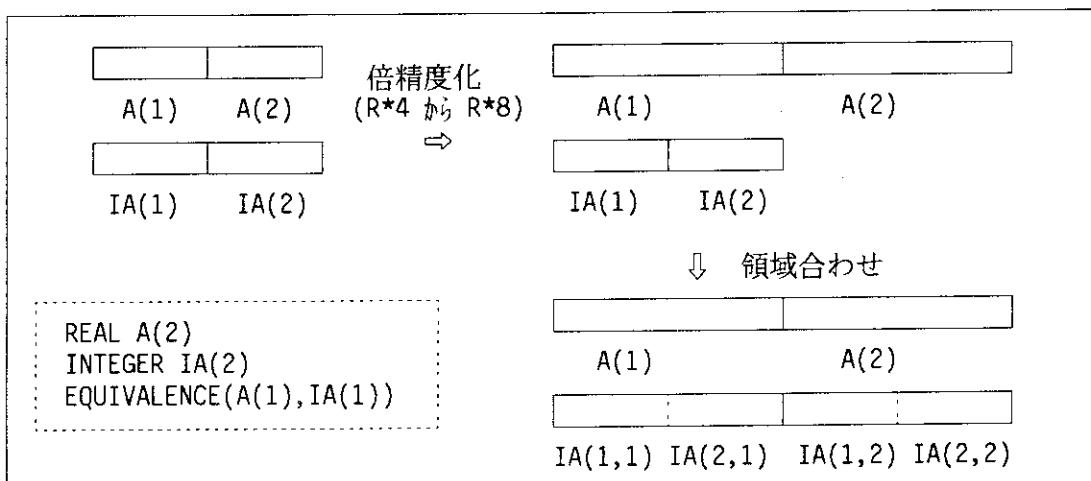


Fig. 2.6 Concept of change into the double precision

```

• ACTVY
  *STREAM77G ADJUST NEDUM,IMODD,LOCP,NBFNT,NBFII,LOCE,LOCI,NBFID,LOCV
  *STREAM77G ADJUST LOCF,LOCL,LOCDM1,LOCDM2,LOCDM3,LOCDM4,LOCDM5,LDMJL
  *STREAM77G ADJUST NBFRI
  *STREAM77L ADJUST ICMAT,ICPOS,IJZN,IZMT,MIXT,NUCL,IZNRG
• BALCAL
  *STREAM77L ADJUST IZNRG,IZMT,IBJ,IBIS,ISET,IJZN
• BTFL0
  *STREAM77L ADJUST ISET,MSETI,MBMS,MUNP,IBJ,IJZN,IZNRG,IBIS,MMDN
• CMSCLR
  *STREAM77L ADJUST ICBI,JCBJ,ISET,IBIS,MBMS,ILJBG,IJZN,IZMT,IBJ,
• COEF
  *STREAM77L ADJUST IZN,IMT,IZNRG,NSIG
• FLUX
  *STREAM77L ADJUST IBJ,IBIS,IJZN,ILJBG,ISET,IZMT,NSIG,NMBIG
• FLXPRT
  *STREAM77L ADJUST NMBIG,IBJ,ILJBG
• FSCON
  *STREAM77L ADJUST ISET,IBJ,ILJBG,IJZN,IZMT,NMBIG,IBIS
• GEOM
  *STREAM77L ADJUST IBIS,IZMT,ICBI,JCBJ,JSZBJ,ISZBI
• GRDCOR
  *STREAM77L ADJUST ICBI,JCBJ,ISET,IBIS,MBMS,ILJBG,IJZN,IZMT,IBJ
• GRDDIF
  *STREAM77L ADJUST ICBI,JCBJ,ISET,IBIS,MBMS,ILJBG,IJZN,IZMT,IBJ
• GRDSCL
  *STREAM77L ADJUST ICBI,JCBJ,ISET,IBIS,MBMS,ILJBG,IJZN,IZMT,IBJ
• INCHK
  *STREAM77L ADJUST LD,LOCP
• INPA
  *STREAM77L ADJUST LD,IBIS
• ISODIF
  *STREAM77L ADJUST IJZN,IZMT,ITMBG,IZNRG,MBMS,IBJ,ILJBG,NSIG
• JEOM
  *STREAM77L ADJUST IBIS,IZMT,ICBI,JCBJ,JSZBJ,ISZBI
• MACMX
  *STREAM77L ADJUST MIXT,NUCL,MATL,NSIG
• MAPR
  *STREAM77L ADJUST IJZN,IZMT,IBJ
• MAPX
  *STREAM77L ADJUST M1,M2,IBJ,ISET,IBIS
• MAP3
  *STREAM77L ADJUST M1,M2,JL,JU,IGZN,ISET,IBIS
• MAXI
  *STREAM77L ADJUST K
• MAXIJ
  *STREAM77L ADJUST K,L,M
• MESH
  *STREAM77L ADJUST ILFR, MUNP, MBMS, MSOMS
• MESHR
  *STREAM77L ADJUST MBMS, ISZNG, JSZBJ, ISZBI, IBIS, IJGSZ, MSOMS, MMDN, MSETI
• MINSA
  *STREAM77L ADJUST K
• MSUM
  *STREAM77L ADJUST K
• MSUMD
  *STREAM77L ADJUST K, L

```

Fig. 2.7 Conversion control lines in bb.dor.f (1/2)

```

• NDXR
  *STREAM77L ADJUST IPVT,IA1,IA2
• NNZRO
  *STREAM77L ADJUST K
• NQUADR
  *STREAM77L ADJUST MSOMS,IJGSZ
• PLANE
  *STREAM77L ADJUST IBJ,IBIS,ICBI,ILJBG,ISET,JCBJ,MBMS,MMDN,JNTFX
  *STREAM77L ADJUST MTETA,MTLVL,JNTSR,IZZN,IZMT,IZNRG
• QUAD
  *STREAM77L ADJUST MBMS,MMDN,MTEMU,MTETA,MTLVL
  *STREAM77L ADJUST NMBIG,ISCTG,ISNPN,MSOMS,ILFRT,MUNP
• REBAL
  *STREAM77L ADJUST ICBI,JCBJ,ISET,IBIS,MBMS,IBJ,ILJBG,KEYAJ,KEYAI
• ROW
  *STREAM77L ADJUST INTFX,MUMATE,INTSR,MSOMS,LFRT,MBMS,MSETI,MUNP
• SBABDO
  *STREAM77L ADJUST ISET,IBIS,MBMS
• SBSRIN
  *STREAM77L ADJUST ISET,IBJ,IBIS,MBMS,ICBI, JCBJ,IZNRG,INTSR,JNTSR
  *STREAM77L ADJUST INTFX,JNTFX,IZZN
• SDISIN
  *STREAM77L ADJUST IBJ,NMBIG,ILJBG
• SDISO
  *STREAM77L ADJUST ISET,IBIS,IBJ,ILJBG,IZZN,IZMT,NSIG,NMBIG
• SFLXIN
  *STREAM77L ADJUST IBJ,NMBIG,ILJBG
• SORSOR
  *STREAM77L ADJUST ISET,IBJ,ILJBG,NMBIG
• SORSUM
  *STREAM77L ADJUST ISET,IBJ,ILJBG,IZZN,IZMT,NMBIG,IBIS
• SORT
  *STREAM77L ADJUST IX
• SORX
  *STREAM77L ADJUST INDX,MBMS,MSETI,MMDN,IVM,IV1
• SOURCE
  *STREAM77L ADJUST IBJ,IZZN,IZMT,JBLK,NSIG,ILJBG,NMBIG,ITHYG,IBIS
  *STREAM77L ADJUST ISET,ITMBG,IZNRG
• SWEEP
  *STREAM77L ADJUST IZN,JMG,NZR
• SWEEQ
  *STREAM77L ADJUST IZN,JMG,NZR
• VLCAL
  *STREAM77L ADJUST IBJ,IBIS,ISET
• WRBNDI
  *STREAM77L ADJUST IC
• WRFOG
  *STREAM77L ADJUST IMBIS, ISET,NMBIG,LD
• WRSCL
  *STREAM77L ADJUST IZMT,IZNRG,IBIS,IMBIS,ISET,IC
• WSOL
  *STREAM77L ADJUST IFCNZ
• WWESOL
  *STREAM77L ADJUST IFCNZ
• ZLEAK
  *STREAM77L ADJUST IZN,NZR,

```

Fig. 2.7 Conversion control lines in bb.dor.f (2/2)

```
• AMINAF
*STREAM77G ADJUST LOCP,LUNDUM,IDU262, IDU632, IDU641, LOCE, LOCI, IXXX
*STREAM77G ADJUST LOCF,NBFLX,NEDUM,IMODD,LOCL,LUNIT,LOCDM1
*STREAM77G ADJUST LOCDM3,LOCDM4,LOCDM5,LOCDM6
*STREAM77G ADJUST LD,IBIS,JBJS,IJBK,JMBJS,JSET,IBJK,JBK,NSCTG,LMSBG
*STREAM77G ADJUST MBMS,MMDN,MTEMU,MTETA,MTLVL,NMBIG,NSCTG,ISNPN,ILFR
*STREAM77G ADJUST MUNP,MTXZI,MMDU,MSET,ICBI,JCBJ,JSZBJ,ISZBI
*STREAM77G ADJUST KCBK,KSZBK,ISET,JSET,KEYAI,KEYAJ,KEYAK
*STREAM77G ADJUST IJZN,IBJ,MSAV,MAP,N1,N2,IL,IU,JL,JU,KL,KU
*STREAM77G ADJUST IZNRG,ILJBG,IZMT,MMBMS,NSIG,ITHYG,ITMBG
*STREAM77G ADJUST MIXT,NUCL,MATL,KNTSR,KNTFX,IDX,IVM,IV1,LFRT
*STREAM77G ADJUST INTFX,MUMATE,INTSR,IMBIS,IC,IACOP,JNTFX,JNTSR
• CINC
*STREAM77L ADJUST I
• CMPRI
*STREAM77L ADJUST I,J
```

Fig. 2.8 Conversion control lines in bb.tor.f

```
• GIP
*STREAM77G ADJUST LOCL
• TAPE
*STREAM77L ADJUST MB,MC,MID,MIDS,MCO,MCOS
```

Fig. 2.9 Conversion control lines in bb.gip.f

```
• ALLOT
*STREAM77G ADJUST LIA,LIL,LOA,LWA,LCA,LOCP,NBFNT,NBFII,LOCE,LOCI,NBFID
*STREAM77G ADJUST NBFID,LOCF,NBFLX,NEDUM,IMODD,LOCL,LOCDM1,LOCDM2
*STREAM77G ADJUST LOCDM3,LOCDM4,LOCDM5,LDUML,LDTK,ISET,JSET
*STREAM77G ADJUST MO,M2,MB,MC,MTT
```

Fig. 2.10 Conversion control lines in bb.unc.f

```

• CSETX
  *STREAM77L ADJUST K
• DTFIN
  *STREAM77L ADJUST LDTK
• VARIO
  *STREAM77L ADJUST LD

```

Fig. 2.11 Conversion control lines in bb.lib.f

```

TWC(6 4 8 0 8) SRP
//*****
//**          STREAM77 ( C-ENGINE ) *
//*****
//JOBPROC DD DSN=J9127.PROCLIB.CNTL,DISP=SHR
//CENG      EXEC CENG,REGION,STRM77=,
// A='CONV,READ,NOT,NOTAB',INC='INCLUDE'
//FT05F001 DD *
SUP(0400)
/*
//FT06F001 DD DSN=J9127.BB.UNCF.OUTLIST,DISP=(NEW,CATLG),
//      DCB=(LRECL=137,BLKSIZE=19043,RECFM=FBA,DSORG=PS),
//      SPACE=(TRK,(50,10),RLSE),UNIT=TSSWK
//FT12F001 DD DSN=J9127.BB.UNCF.FORT77,DISP=(NEW,CATLG),
//      DCB=(LRECL=80,BLKSIZE=3200,RECFM=FB,DSORG=PO),
//      SPACE=(TRK,(30,10,30),RLSE),UNIT=D0340
//FT14F001 DD DSN=J9127.BB.UNCF.INCLUDE,DISP=(NEW,CATLG),
//      DCB=(LRECL=80,BLKSIZE=3200,RECFM=FB,DSORG=PO),
//      SPACE=(TRK,(10,10,20),RLSE),UNIT=D0340
//SYSIN   DD DSN=J9127.BB.UNCW.FORT77,
//      DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//SYSINC DD DSN=J9127.BB.Unc.INCLUDE,
//      DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//SYSPRINT DD SYSOUT=*
//
```

Fig. 2.12 JCL for STREAM77

```

program gip

common/bulkbu/loc1(1), lim1, lint, lenint, lmco, . . .
call fidos(3, nerr, nin, nou, loc1, loc1, loc1)
end

subroutine fidos(ii2,j3,n5,n6,d,ldtk,loco)
dimension d(1), ldtk(1), loco(1)

```

Fig. 2.13 An example of original common block

```

program gip
implicit real*8 (a-h,o-z)

common/bulkbu/loc1(2,36)
equivalence(loc1(2,2),lim1),(loc1(2,3),lint),(loc1(2,4),lenint),
1      (loc1(2,5),lmco), . . .

call fidos(3, nerr, nin, nou, loc1, loc1, loc1)
end

subroutine fidos(ii2,j3,n5,n6,d,ldtk,loco)
implicit real*8 (a-h,o-z)
dimension d(1), ldtk(2,1), loco(2,1)

```

Fig. 2.14 An example of common block and integer Array modification

```

subroutine tape

call wot3( crx(1,i04),0,i05,-ihp, 4hpos., 4hmat.,nou
1           , 0.d0, 0, 12h0)

end
subroutine wot3(x,ibj,jm,imi, ti, ti,nu,km,tk,tt,n)

1800 call edit( x(ijk+1),ibj,jm,im, ti, tj,nu)

end
subroutine edit(x,ifj,nxj,nxi,id1, id2, nou)
.
write(nou,9010) id1, (id2, j,j=i1,i2)

9010 format('0',1x,a4,3x,a4,i3,7(6x,a4,i3) )

end

```

Fig. 2.15 Original version of subroutine tape, wot3, and edit

```

subroutine tape
implicit real*8 (a-h,o-z)
.
call wot3( crx(1,i04),0,i05,-ihp,4hpos.,4hmat.,nou
1           , 0.d0, 0, 12h0)

end
subroutine wot3(x, ibj,jm,imi,ti,tj,nu,km,tk,tt,n)
implicit real*8 (a-h,o-z)
character*4 ti,tj

.
1800 call edit( x(ijk+1),ibj,jm,im,ti,tj,nu)

end
subroutine edit(x,ifj,nxj,nxi,id1,id2,nou)
implicit real*8 (a-h,o-z)
character*4 id1,id2
.
write(nou,9010) id1,(id2,j,j=i1,i2)

9010 format('0',1x,a4,3x,a4,i3,7(6x,a4,i3) )

end

```

Fig. 2.16 Double precision version of subroutine tape, wot3, and edit

```

subroutine tape

call seqio (2, nt4, 777, 1, 0)

end
subroutine seqio(io, nt,a, m, irec)
dimension a(1)

end

```

Fig. 2.17 Original version of subroutine tape and seqio

```

subroutine tape
implicit real*8 (a-h,o-z)
dimension iww(2)
equivalence (iww(1),ww)

iww(2) = 777
call seqio (2, nt4, ww, 1, 0)

end
subroutine seqio(io, nt, a, m, irec)
implicit real*8 (a-h,o-z)
dimension a(1)

end

```

Fig. 2.18 Double precision version of subroutine tape and seqio

```

subroutine vario

call blkio(ii,lun,iary,ixx,irec,ld,nrecmx,nwblk,ipax)

end
subroutine blkio(ii,nt,l,m,irec,ld,nrecmx,nwblk,lfenf)
dimension ld(1),l(1)

end

```

Fig. 2.19 Original version of subroutine vario and blkio

```

subroutine vario
implicit real*8 (a-h,o-z)
dimension iww(2),izero(2)
data iww/0,0/, izero/0,0/

iww(2) = iary
call blkio(ii,lun,iww ,ixx,irec,1d,nrecmx,nwb1km,ipax)

call blkio(ii,lun,izero,0,0,1d,nrecmx,nwb1km,ipax)

end
subroutine blkio(ii,nt,1,m,irec,1d,nrecmx,nwb1ki,1enf)
dimension 1d(2,1),1(2,1)

end

```

Fig. 2.20 Double precision version of subroutine vario and blkio

```

cpu = second(x)
chg = csecond(x)
if(chg.eq.0) chg = cpu
if(i.ge.1 .and. i.le.2 .and. xtime.eq.timh) go to 200
wal = -1.
wal = timef(x)*1.d-3

```

↓

```

cvpp  cpu = second(x)
      call clock(cpu,0,2)
cvpp> chg = csecond(x)
cvpp  if(chg.eq.0) chg = cpu
      chg = cpu
cvpp<
      if(i.ge.1 .and. i.le.2 .and. xtime.eq.timh) go to 200
c##  wal = -1.
      wal = -1.d0
cvpp  wal = timef(x)*1.d-3
      call time(ix)
      wal = real(ix)

```

Fig. 2.21 Improvement of service routine

```

subroutine mapr ( ijzn, izmt, ibj, jm, nout )
dimension ijzn(1), izmt(1), ibj(1), k(120), label(2), ia(35)
1 ia(35)

c
c ----- plots irregular 2-d map of zone/mat1
c
data ia(1), ia(2), ia(3), ia(4), ia(5), ia(6), ia(7), ia(8)
1 / 1h1, 1h2, 1h3, 1h4, 1h5, 1h6, 1h7, 1h8 /
.
.
1 , ia(33), ia(34), ia(35), iblnk,      ixr, label(1), label(2)
1 / 1hx, 1hy, 1hz, 1h ,      3hxrr, 4hzone, 4hmat1 /
data lline, ltable / 120, 35 /
.
.
25 do 11 l=m, ix
.
.
iia = mod(n-1, ltable)
11 k(iik+1) = ia(iia+1)           ⇔ 文字としての使用
c
write (nout, 4) j,(k(l), l=1, 1m)           ⇔ 文字としての使用
.
.
do 32 lop = 1, 3
do 33 l = m, ix
iik = l - m
33 k(iik+1) = mod(l/110, 10)           ⇔ 整数としての使用
write (nout, 31) ir, (k(i), i=1, 1m)           ⇔ 整数としての使用
ir = iblnk
.
.
32 continue
.
.
4 format ( 1x, i4, 4h..., 120a1)
66 format ( 5h yzt )
31 format ( 5x, a4, 120i1)
.
.
end

```

Fig. 2.22 Original subroutine mapr

```

subroutine mapr ( ijzn, izmt, ibj, jm, nout )
    implicit real*8 ( a-h,o-z )
    real*8      label

cvpp>>
    character*4 ia
    character*4 k
    integer ik(120)
    equivalence (k(1),ik(1))           ⇔ 文字型配列と整数型配列の
    character*4 iblnk,ir,ixr          ⇔ 共有

cvpp<<
c##   dimension ijzn(1), izmt(1), ibj(1), k(120),label(2), ia(35)
      dimension ijzn(2,1), izmt(2,1), ibj(2,1), k(120),label(2),
      1  ia(35)
c
c ----- plots irregular 2-d map of zone/mat1
c
    data ia(1), ia(2), ia(3), ia(4), ia(5), ia(6), ia(7), ia(8)
    1   /  1h1,   1h2,   1h3,   1h4,   1h5,   1h6,   1h7,   1h8   /
    .
    .
    1   ,ia(33),ia(34),ia(35), iblnk,      ixr, label(1), label(2)
    1   /  1hx,   1hy,   1hz,   1h ,      3hxrr, 4hzone, 4hmat1  /
c
25 do 11 l=m,ix
    .
    iia = mod(n-1,1table)
11 k(iik+1) = ia(iia+1)           ⇔ 文字型配列の使用
c
    write (nout, 4) j,(k(l),l=1, l)
    .
    .
    do 32 lop = 1,3
    do 33 l = m,ix
        iik = l - m
cvpp3 k(iik+1) = mod(l/110, 10)           ⇔ 整数型配列の使用
33 ik(iik+1) = mod(l/110, 10)
cvpp  write (nout,31) ir, (k(i),i=1, l)
      write (nout,31) ir, (ik(i),i=1, l)
      ir = iblnk
    .
    .
32 continue
    .
    4 format ( 1x, i4, 4h... , 120a1)
66 format ( 5h yzt )
31 format ( 5x, a4, 120i1)
    .
    .
end

```

Fig. 2.23 Improvement of subroutine mapr

```
subroutine loco
    implicit real*8 ( a-h,o-z )
    real*8    locl1
    real*8    locp1
    real*8    locv1
    real*8    locel
    real*8    locf1
    real*8    loci1
    .
    .
    character*18 compil
    data compil /'comdate  comtime '/
    data locl1,locp1,locv1,locel / 4hloc1, 4hlocp, 4hlocv, 4hlocel /
    data locf1,loci1 / 4hlocf, 4hloci /
    .
    .
c##    locl(1) = locl1
c##    locl(2,1)=locl1
c##    locp(1) = locp1
c##    locp(2,1)=locp1
c##    loce(1) = locel
c##    loce(2,1)=locel
c##    loci(1) = loci1
c##    loci(2,1)=loci1
c##    locv(1) = locv1
c##    locv(2,1)=locv1
c##    locf(1) = locf1
c##    locf(2,1)=locf1
    .
    .
    return
end
```

Fig. 2.24 Original subroutine loco (STREAM77 version)

```

subroutine loco
    implicit real*8 ( a-h,o-z )
    character*4    locl1
    character*4    locp1
    character*4    locv1
    character*4    locel1
    character*4    locf1
    character*4    loci1
    equivalence(locl1,ilocl1),(locp1,ilocp1),(locv1,ilocv1),
    1           (locel1,ilocel1),(locf1,ilocf1),(loci1,iloci1)
    cvpp<<
        .
        .
        .
        character*18 compil
        data compil /'comdate comtime'/
        data locl1,locp1,locv1,locel1 / 4hloc1, 4hlocp, 4hlocv, 4hlocel /
        data locf1,loci1 / 4hlocf, 4hloci /
        .
        .
c
c##   locl(1) = locl1
c##   locl(2,1)=ilocl1
c##   locp(1) = locp1
c##   locp(2,1)=ilocp1
c##   loce(1) = locel1
c##   loce(2,1)=ilocel1
c##   loci(1) = loci1
c##   loci(2,1)=iloci1
c##   locv(1) = locv1
c##   locv(2,1)=ilocv1
c##   locf(1) = locf1
c##   locf(2,1)=ilocf1
        .
        .
return
end

```

Fig. 2.25 Improvement of subroutine loco

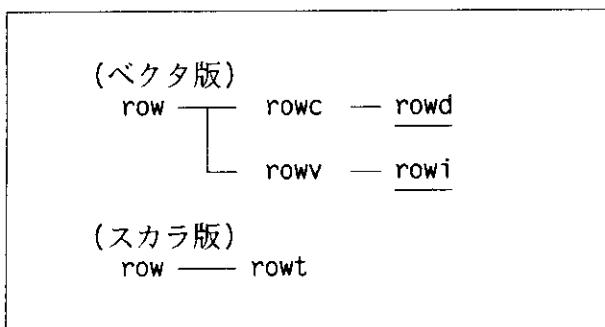


Fig. 2.26 Tree structures of vector version and scalar version

```

subroutine row (      dz,      imm,      lmx,      mmb,      imx,      cio,
.
.
.
imode = mod(mode,10)
irow = 1
.
.
.
c - - - - alternatives
go to (310, 310, 322, 325, 320, 355, 355, 355, 355), imode
c - - - - 1 in scl 0wt theta vec rown rowl rowb rowc
c imode=      1   2   3   4   5   6   7   8   9
c
c - - - - rowz rowv rowt rowl rowb rowc rown
c irow=      1   2   3   4   5   6   7
c - - - - 2= scalar weighted--rowt always
310 irow = 3
go to 330
c
c - - - - 5= vector weighted--rowc always
320 irow = 6
go to 330
c
c - - - - 3= zero weighted--rowv if vector; else rowt
322 irow = 2
pctwt = 0.d0
go to 327
c
c - - - - 4= theta weighted--rowc if vector; else rowt
325 irow = 6
327 continue
cnc
c irow = 3
cnc
c - - - - rowl - for all exceptional cases
330 if(mode.ge.10 .or. ingeom.ge.10) irow = 4
if(wmxx.ne.0.d0 ) irow = 4
go to 360
c
c - - - - 6=rown, 7=rowl, 8=rowb, 9=rowc
355 irow = imode - 3
if(imode.gt.6) go to 360
irow = 7
ifnndl = .true.
.
.
end

```

Fig. 2.27 Original subroutine row

```

subroutine row (      dz,      imm,      lmx,      mmb,      imx,      cio,
.
.
.
imode = mod(mode,10)
irow = 1
.
.
.
c - - - - alternatives
go to (310, 310, 322, 325, 320, 355, 355, 355, 355), imode
c - - - - 1 in scl Owt thet vec rown rowl rowb rowc
c imode=      1   2   3   4   5   6   7   8   9
c
c - - - - rowz rowv rowt rowl rowb rowc rown
c irow=       1   2   3   4   5   6   7
c - - - - 2= scalar weighted--rowt always
310 irow = 3
go to 330
c
c - - - - 5= vector weighted--rowc always
320 irow = 6
go to 330
c
c - - - - 3= zero weighted--rowv if vector; else rowt
322 irow = 2
pctwt = 0.d0
go to 327
c
c - - - - 4= theta weighted--rowc if vector; else rowt
325 irow = 6
327 continue
cnc
c.tn>>
c     irow = 3
     irow = 3           ⇔ rowtの呼び出し設定
c.tn<<
cnc
c - - - - rowl - for all exceptional cases
330 if(mode.ge.10 .or. ingeom.ge.10) irow = 4
     if(wmxx.ne.0.d0) irow = 4
     go to 360
c
c - - - - 6=rown, 7=rowl, 8=rowb, 9=rowc
355 irow = imode - 3
     if(imode.gt.6) go to 360
     irow = 7
     ifnodl = .true.
.
.
end

```

Fig. 2.28 Improvement of subroutine row

```

subroutine reed (lun, irec, array, nwds, mode)
    implicit real*8 ( a-h, o-z )
    dimension array(nwds)

    .
    .

c - - - - - read the record requested
80 continue
    if(io.eq.1) read (lun) array
    if(io.eq.2) write (lun) array
    .

9900 return
end

```

Fig. 2.29 Original subroutine reed

```

subroutine reed (lun, irec, array, nwds, mode)
    implicit real*8 ( a-h, o-z )
    dimension array(nwds)
c.tn>>
    real*4 sarray(10000)
c.tn<<

    .

c - - - - - read the record requested
80 continue
c.tn>> read for real*4 data (unit=4)
c.tn  if(io.eq.1) read (lun) array
      if(io.eq.1) then
          if(lun.eq.4) then
              read (lun) (sarray(ii),ii=1,nwds)
              do 3000 ii = 1, nwds
                  array(ii) = dble(sarray(ii))
3000      continue
          else
              read (lun) array
          end if
      end if
c.tn<<
      if(io.eq.2) write (lun) array
      .

9900 return
end

```

Fig. 2.30 Improvement subroutine reed

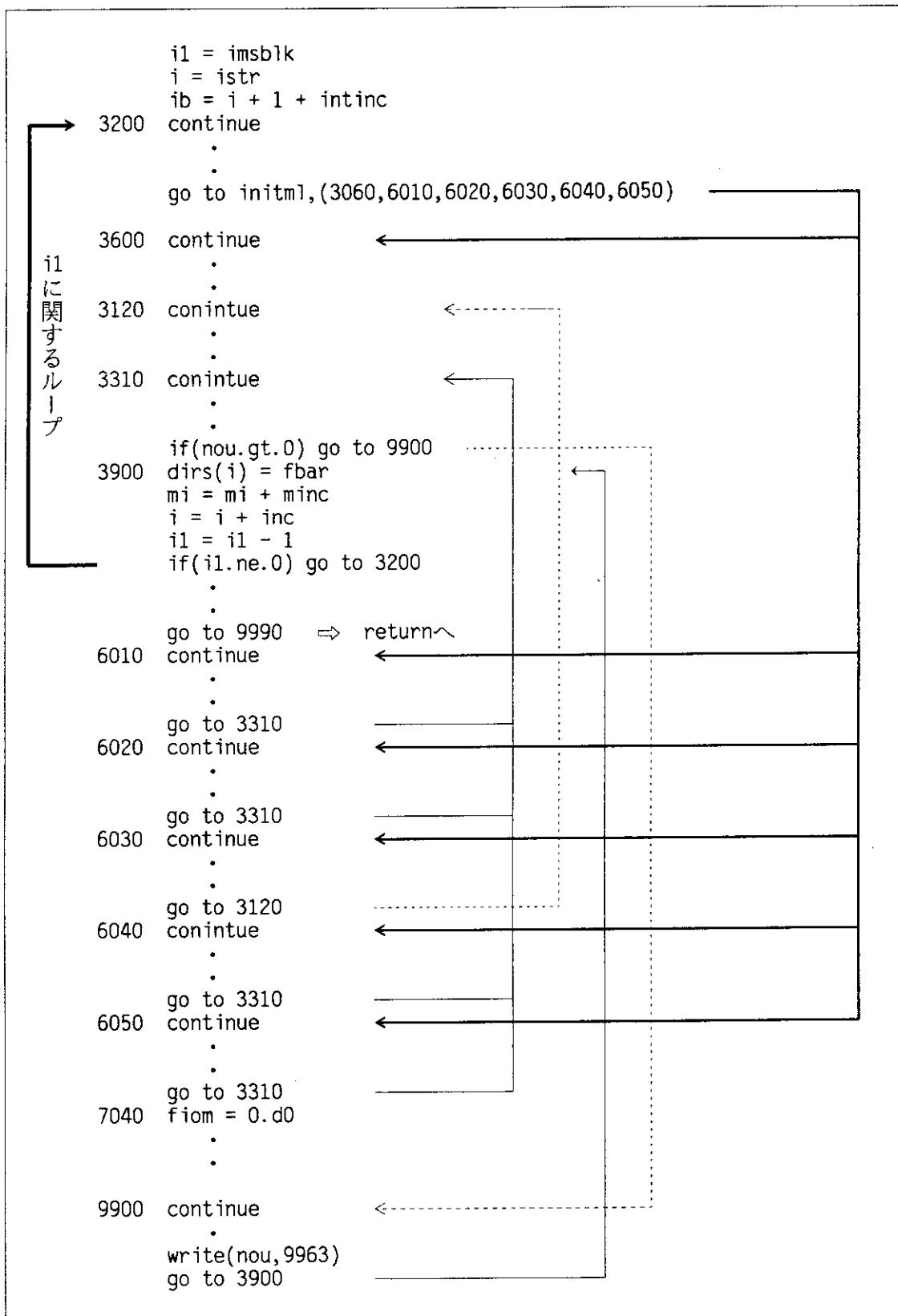


Fig. 2.31 Structure of subroutine rowt

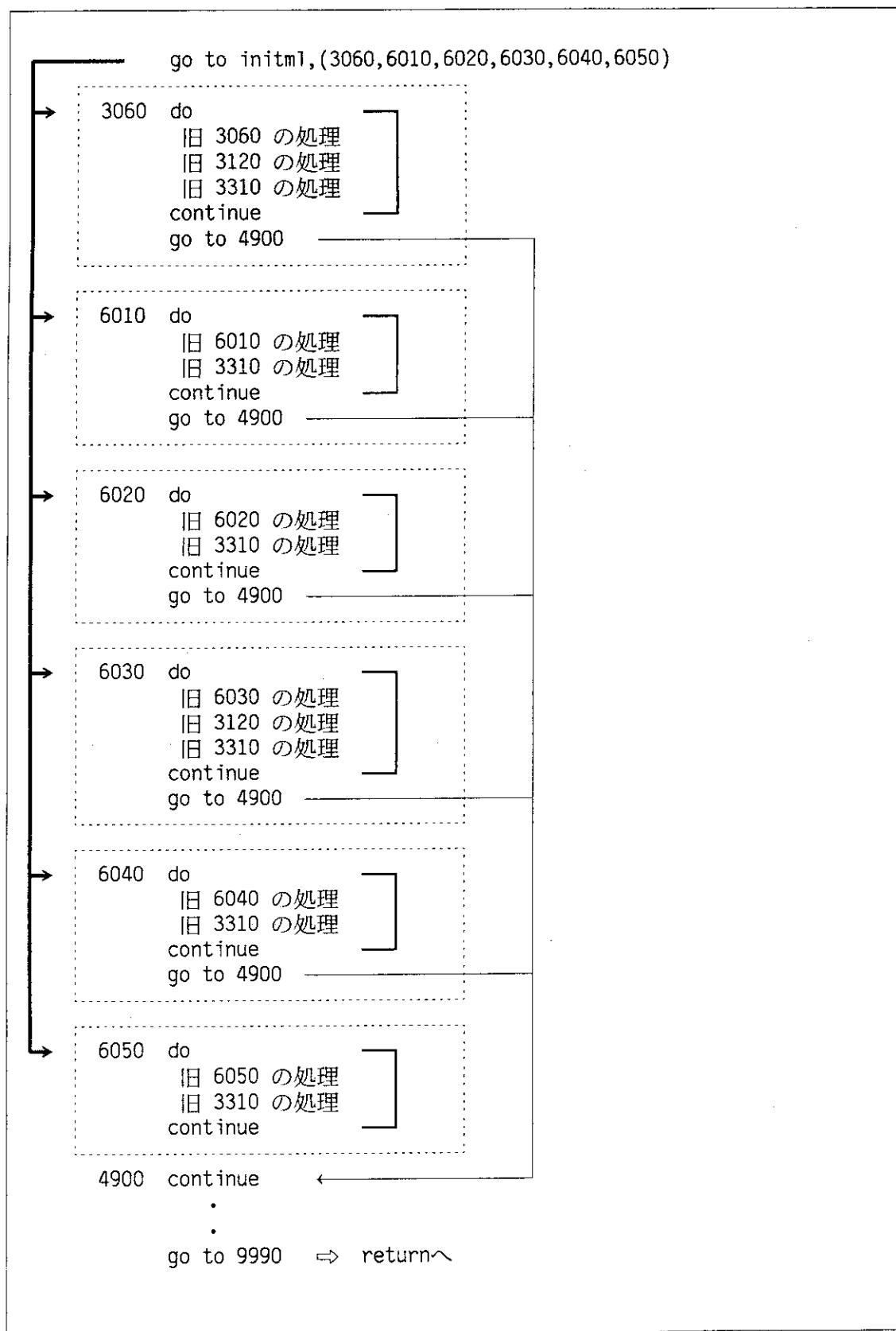


Fig. 2.32 Structure of subroutine rowt

```

c - - - - begin i loop
  i1 = imsblk
  i = istr
  ib = i + 1 + intinc
  avima = dzmua*av(ib)
3020 continue
  aheta = etama*ah(i)
  fmoi = fmo(i)
  wm = wmax
  wj = wmax
  wi = wmax
  fjomi = fjo(mi)
  go to initml,(3060,6010,6020,6030,6040,6050)
c - - - - not plane, not zero weight, theta weighted
3060 continue
  pclr(i) = pclr(i) - dzmuw*fiom*av(ib)
  e1 = av(i+1) - av(i)
  e2 = e1*dz2mu
  e1 = e1*bet2dz
  dav2 = e1 - e2
  dav3 = e2 + e2
  e1 = fmoi*(e1 + e2)
  e3=dirs(i)
  e1 = e1+e3
  fiom = fiom + fix(i)
  sorv = e3
  e4 = avima*fiom
  e3 = fjomi*aheta
  sorj = e4*pctwt + e3 +e1
  sori = e3*pctwt + e4 +e1
  sorm = (e3 + e4)*pctwt + e1
  ib = ib + inc
  avima = dzmua*av(ib)
3120 continue
c - - - - calculate m - space weighting coefficient
  if(fmoi.le.0.d0) go to 3238
  e1 = fmoi*(sgtv2(i) + avima + aheta)
  e2 = e1 + el - sorm
  if(e2.le.e1) go to 3238
  el = (el + e1)/e2
  wm = 1.d0
  if(wm.gt.el) go to 3238
  wm = el
3238 z = dav2*wm + dav3
c - - - - calculate j - space weighting coefficient
3310 continue
  dav2 = dav2 + sgtv2(i)
  if(fjomi.le.0.d0) go to 3328
  el = fjomi*(dav2 + avima)
  e2 = el + el - sorj
  if(e2.le.el) go to 3328
  el = (el + el)/e2
  wj = 1.d0
  if(wj.gt.el) go to 3328
  wj = el
3328 y = aheta*wj
c - - - - calculate i - space weighting coefficient

```

Fig. 2.33 Original il-loop in subroutine rowt (1/2)

```

if(fiom.le.0.d0) go to 3428
e1 = fiom*(dav2 + aheta)
e2 = e1 + e1 - sori
if(e2.le.e1) go to 3428
e1 = (e1 + e1)/e2
wi = 1.d0
if(wi.gt.e1) go to 3428
wi = e1
3428 x = avima*wi - dav3
c - - - - centered flux
fbar = sorv + x*fiom + y*fjomi + z*fmoi
fbar = fbar / (sgtv2(i) + sgtv2(i) + x + y + z)
c - - - - extrapolate
fix(i) = (fbar - fiom)*wi + fiom
fjo(mi) = (fbar - fjomi)*wj + fjomi
fmo(i) = (fbar - fmoi)*wm + fmoi
if(nou.gt.0) go to 9900
3900 dirs(i) = fbar
fiom = fix(i)
mi = mi + minc
i = i + inc
il = il - 1
if(il.ne.0) go to 3020
c - - - - end i loop

```

Fig. 2.33 Original il-loop in subroutine rowt (2/2)

```

c - - - - not plane, not zero weight, weighted
6030 continue
pclr(i) = pclr(i) - dzmuw*fiom*av(ib)
e1 = av(i+1) - av(i)
e2 = e1*dz2mu
e1 = e1*bet2dz
dav2 = e1 - e2
dav3 = e2 + e2
e2 = fmoi*(e1 + e2)
e1 = dirs(i)
sorv = e1
el = e1 + e2
sorm = el
fiom = fiom + fix(i)
sori = el + avima*fiom
sorj = el + fjomi*aheta
ib = ib + include
avima = dzmua*av(ib)
go to 3120
c

```

Fig. 2.34 Original '6030 continue' block in subroutine rowt

```

iend = max(imsblk*inc, 1)
do i = istr, iend, inc
    .
    .
    continue

```

Fig. 2.35 Do-loop of vector version (subroutine rowt)

```

c
i1 = imsb1k
i = istr
ib = i + 1 + intinc
cvp avima = dzmua*av(ib)
iend = max(imsblk*include,1)
if(abs(iend-istr)/abs(include)+1.gt.nn) then
    write(6,*) ' ## VECTOR WORK AREA IS LUCK !! in rowt '
    write(6,*) ' NN = ',abs(iend-istr)/abs(include)
end if
ibw = ib
miw = mi
n = 0
do 8000 i = istr, iend, inc
    n = n + 1
    wfjo(n) = fjo(mi)           ⇔ ワーク配列の定義(fjo)
    mi = mi + minc
    wfmo(n) = fmo(i)           ⇔ ワーク配列の定義(fmo)
8000 continue
go to initml,(3060,6010,6020,6030,6040,6050)

```

Fig. 2.36 Definition of work arrays 'wfjo' and 'wfmo'

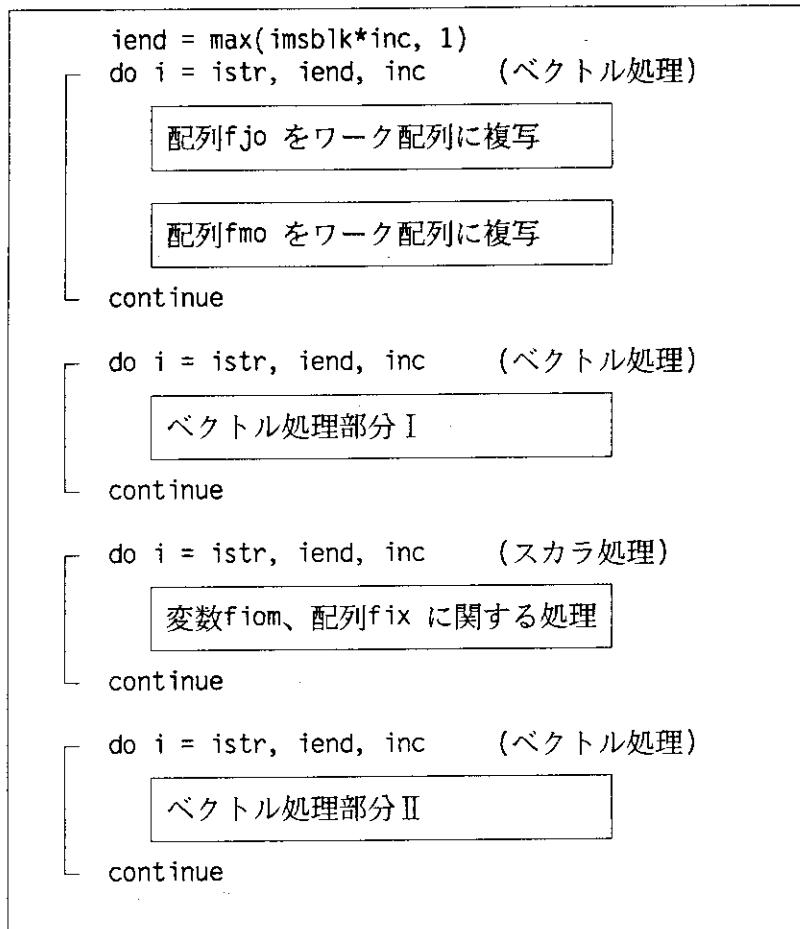


Fig. 2.37 Structure of vectorized do-loop

```

6030 continue
    mi = miw
    n = 0
v      do 8320 i = istr, iend, include
v      n = n + 1
v      aheta(n) = etama*ah(i)
v      fmoi = fmo(i)
v      wmw(n) = wmax
v      wjw(n) = wmax
v      fjomi = fjo(mi)
c ----- not plane, not zero weight, weighted
cvp  pclr(i) = pclr(i) - dzmuw*fiom*av(ib)
v      e1 = av(i+1) - av(i)
v      e2 = e1*dz2mu
v      e1 = e1*bet2dz
v      dav2w(n) = e1 - e2
v      dav3w(n) = e2 + e2
v      e2 = fmoi*(e1 + e2)
v      e1 = dirs(i)
v      sorv = e1
v      e1 = e1 + e2
v      elw(n) = e1
v      sorm = e1
cvp  fiom = fiom + fix(i)
v      avimaw(n) = dzmua*av(ib)
cvp  sori = e1 + avima*fiom
v      sorj = e1 + fjomi*aheta(n)
cvp  ib = ib + inc
v      avima2w(n) = dzmua*av(ib+include)
c
c ----- calculate m - space weighting coefficient
c##  if(fmoi.le.0.) go to 3238
v      if(fmoi.le.0.d0) go to 8318
v      e1 = fmoi*(sgtv2(i) + avima2w(n) + aheta(n))
v      e2 = e1 + e1 - sorm
v      if(e2.le.e1) go to 8318
v      e1 = (e1 + e1)/e2
v      wmw(n) = 1.d0
v      if(wmw(n).gt.e1) go to 8318
v      wmw(n) = e1
v      8318 zw(n) = dav2w(n)*wmw(n) + dav3w(n)
c
c ----- calculate j - space weighting coefficient
c3310 continue
v      dav2w(n) = dav2w(n) + sgtv2(i)
v      if(fjomi.le.0.d0) go to 8328
v      e1 = fjomi*(dav2w(n) + avima2w(n))
v      e2 = e1 + e1 - sorj
v      if(e2.le.e1) go to 8328
v      e1 = (e1 + e1)/e2
v      wjw(n) = 1.d0
v      if(wjw(n).gt.e1) go to 8328
v      wjw(n) = e1
v      8328 yw(n) = aheta(n)*wjw(n)
c3900 dirs(i) = fbar
cc   dirs(i) = fbar
cc   fiom = fix(i)

```

Fig. 2.38 Vector version of original '6030 continue' block in subroutine rowt (1/2)

```

v      mi = mi + minc
cvp   i = i + inc
v      i1 = i1 - 1
cvp   if(i1.ne.0) go to 3020
v      ib = ib + inc
v  8320 continue
      ib = ibw
      n = 0
s      do 8330 i = istr, iend, include
v      n = n + 1
v      wi = wmax
v      fmoi = wfmo(n)
v      fjomi = wfjo(n)
m      pclr(i) = pclr(i) - dzmuw*fiom*av(ib)
s      fiom = fiom + fix(i)
s      sori = elw(n) + avimaw(n)*fiom
c
c ----- calculate i - space weighting coefficient
s      if(fiom.le.0.d0) go to 8338
s      e1 = fiom*(dav2w(n) + ahetaaw(n))
s      e2 = e1 + e1 - sori
s      if(e2.le.e1) go to 8338
s      e1 = (e1 + e1)/e2
s      wi = 1.d0
s      if(wi.gt.e1) go to 8338
s      wi = e1
m  8338 x = avima2w(n)*wi - dav3w(n)
c ----- centered flux
m      fbarw(n) = dirs(i) + x*fiom + yw(n)*fjomi + zw(n)*fmoi
m      fbarw(n) = fbarw(n) / (sgtv2(i) + sgtv2(i) + x + yw(n) + zw(n))
c
c ----- extrapolate
s      fix(i) = (fbarw(n) - fiom)*wi + fiom
s      fiom = fix(i)
v      ib = ib + inc
v  8330 continue
      n = 0
      mi = miw
v      do 8340 i = istr, iend, include
v      n = n + 1
v      fmoi = wfmo(n)
v      fjomi = wfjo(n)
c ----- extrapolate
v      fjo(mi) = (fbarw(n) - fjomi)*wjw(n) + fjomi
v      fmo(i) = (fbarw(n) - fmoi)*wmw(n) + fmoi
c**
ccc   if(nou.gt.0) go to 9900
c**
c3900 dirs(i) = fbar
v      dirs(i) = fbarw(n)
v      mi = mi + minc
cvp   if(i1.ne.0) go to 3020
v  8340 continue
      go to 4900

```

Fig. 2.38 Vector version of original '6030 continue' block in subroutine rowt (2/2)

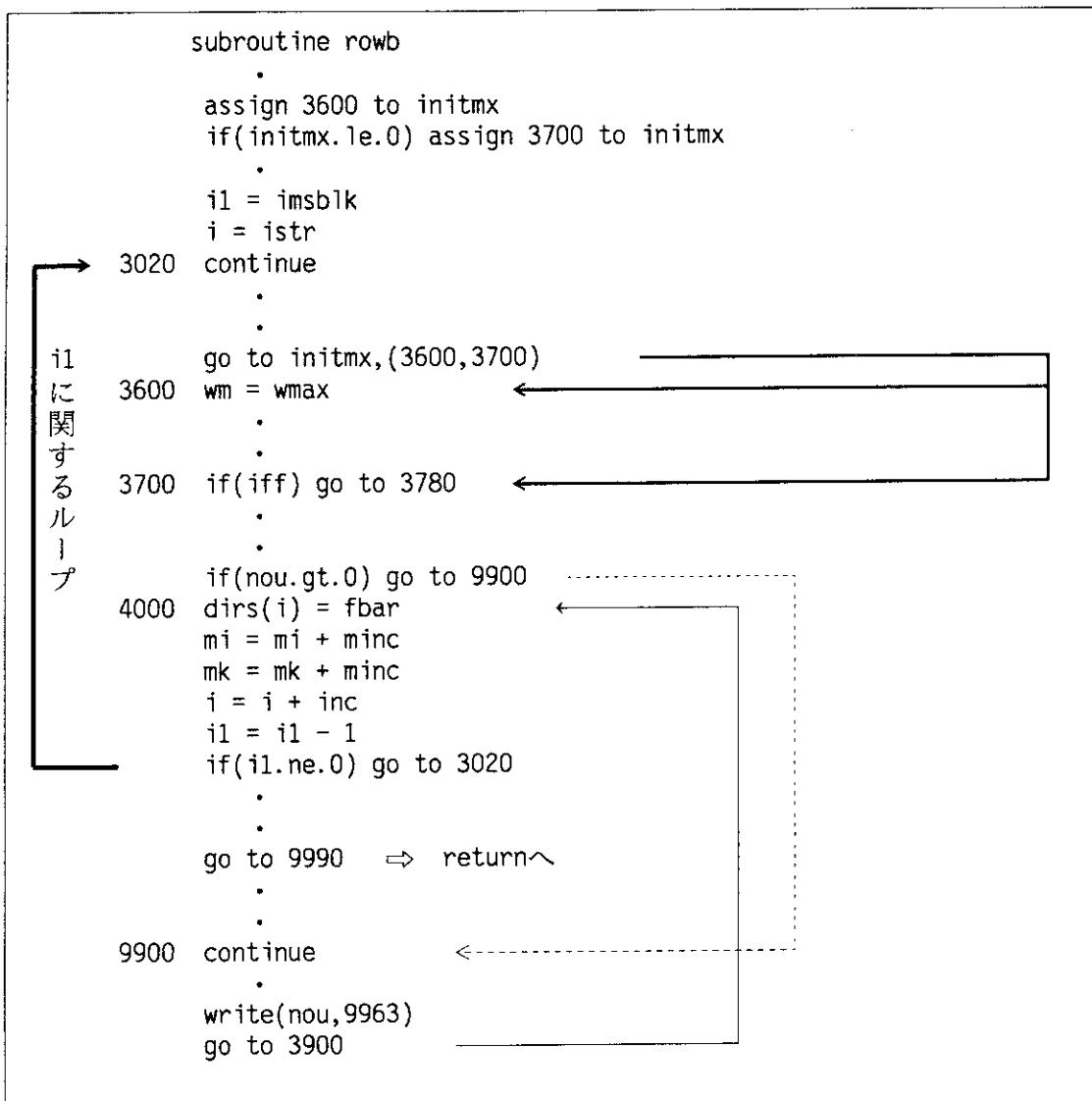


Fig. 2.39 Structure of subroutine rowb

```

c##  wm = 1.0
c##  wm = 1.0d0
c##  t = 0.0
c##  t = 0.0d0
c##  fjomi = 0.
c##  fjomi = 0.d0
c##  atxia = 0.
c##  atxia = 0.d0
c
c-----
c - - - - begin i loop
c
i1 = imsblk
i = istr
3020 continue
c
c - - - - calculate m,i dependent terms
c      fmo and bet2dx must be 0 for initial dir, cf. bet2dz
pclr(i) = pclr(i) - dzmuw*fiom*avib(i)
fiom = fiom + fix(i)
avima = dzmua*avia(i)
avimu = dzmua*avib(i)
avmufw = avimu*fiom*pctwt
if(nvl.eq.0) go to 3030
fjomi = fjo(mi)
atxia = dxxia*at(i)
3030 atxifw = atxia*fjomi*pctwt
fkomi = fko(mk)
aheta = etama*ah(i)
ahetfw = aheta*fkomi*pctwt
c
fmoi = fmo(i)
davi = av(i+1) - av(i)
davemu = davi*dz2mu
davbet = davi*bet2dx
dampm = davemu + davemu
dabmm = davbet - davemu
dabmms = dabmm + sgtv2(i)
fmois = (davbet + davemu)*fmo(i) + dirs(i)
c
wk = wmax
wj = wmax
wi = wmax
c
c - - - - calculate m-space weighting coefficient
go to initmx,( 3600, 3700)
3600 wm = wmax
if(fmoi.le.0.0d0.or. iff) go to 3640
e7 = (sgtv2(i) + avima + atxia + aheta)*fmoi
e9 = e7 + e7
e8 = e9 - fmois - avmufw - atxifw - ahetfw
if(e8.gt.e7) wm = dmax1(1.d0,e9/e8)
3640 t = dabmm*wm + dampm
3700 if(iff) go to 3780
c
c - - - - calculate k-space weighting coefficient

```

Fig. 2.40 Original il-loop in subroutine rowb (1/2)

```

if(fkomi.le.0.0d0) go to 3720
e5 = (dabmms + avima + atxia)*fkomi
e9 = e5 + e5
e6 = e9 - aheta*fkomi - fmois - avmufw - atxifw
if(e6.gt.e5) wk = dmax1(1.d0,e9/e6)
c
c - - - calculate j-space weighting coefficient
3720 if(fjomi.le.0.0d0) go to 3740
e3 = (dabmms + avima + aheta)*fjomi
e9 = e3 + e3
e4 = e9 - atxia*fjomi - fmois - avmufw - ahetfw
if(e4.gt.e3) wj = dmax1(1.d0,e9/e4)
c
c - - - calculate i-space weighting coefficient
3740 if(fiom.le.0.0d0) go to 3780
e1 = (dabmms + atxia + aheta)*fiom
e9 = e1 + e1
e2 = e9 - avimu*fiom - fmois - atxifw - ahetfw
if(e2.gt.e1) wi = dmax1(1.d0,e9/e2)
c
c - - - centered flux
3780 z = aheta*wk
y = atxia*wj
x = avima*wi - dampm
fbar = dirs(i) + x*fiom + y*fjomi + z*fkomi + t*fmoi
fbar = fbar / (sgtv2(i) + sgtv2(i) + x + y + z + t)
c
c - - - extrapolate
fmo(i) = (fbar - fmoi)*wm + fmoi
fko(mk) = (fbar - fkomi)*wk + fkomi
if(nvl.gt.0) fjo(mi) = (fbar - fjomi)*wj + fjomi
fix(i) = (fbar - fiom)*wi + fiom
c**
if(nou.gt.0) go to 9900
c**
4000 dirs(i) = fbar
fiom = fix(i)
mi = mi + minc
mk = mk + mink
i = i + inc
i1 = i1 - 1
if(i1.ne.0) go to 3020
c - - - end i loop

```

Fig. 2.40 Original il-loop in subroutine rowb (2/2)

```

    end if
    miw = mi
    mkw = mk
    n = 0
    do 8610 i = istr, iend, inc
    n = n + 1
*vocl stmt, if(0)
    if(nvl.eq.0) then
        wfjo(n) = 0.d0
        atxiaw(n) = 0.d0
    else
        wfjo(n) = fjo(mi)
        atxiaw(n) = dzxia*at(i)
    end if
    wfko(n) = fko(mk)
    mi = mi + minc
    mk = mk + mink
8610 continue

```

Fig. 2.41 Definition of work arrays 'wfjo', 'atxiaw' and 'wfko'

```

    mi = miw
    mk = mkw
    n = 0
    do 8620 i = istr, iend, inc
    n = n + 1
    c
    c - - - - calculate m, i dependent terms
    c          fmo and bet2dx must be 0 for initial dir, cf. bet2dz
    cvp  pclr(i) = pclr(i) - dzmuw*fiom*avib(i)
    cvp  fiom = fiom + fix(i)
    v    avimaw(n) = dzmua*avia(i)
    v    avimu(n) = dzmua*avib(i)
    cvp  avmufw = avimu*fiom*pctwt
    cvp  if(nvl.eq.0) go to 3030
    cvp  fjomi = fjo(mi)
    cvp  atxia = dzxia*at(i)
    c3030 atxifw = atxia*fjomi*pctwt
    v    fjomi = wfjo(n)
    v  8601 atxifww(n) = atxiaw(n)*fjomi*pctwt
    v    fkomi = fko(mk)
    v    ahetaaw(n) = etama*ah(i)
    v    ahetfww(n) = ahetaaw(n)*fkomi*pctwt
    c
    v    fmoi = fmo(i)
    v    davi = av(i+1) - av(i)
    v    davemu = davi*dz2mu
    v    davbet = davi*bet2dx
    v    dampmw(n) = davemu + davemu
    v    dabmmw(n) = davbet - davemu
    v    dabmmsw(n) = dabmmw(n) + sgtv2(i)
    v    fmoisw(n) = (davbet + davemu)*fmo(i) + dirs(i)

```

Fig. 2.42 Vector version of original il-loop in subroutine rowb (1/3)

```

c
v      wkw(n) = wmax
v      wjw(n) = wmax
v      wiw(n) = wmax
c
c -- - - - calculate m-space weighting coefficient
v      if(initmw.le.0) then
v          wmw(n) = 1.0d0
v      else
c3600  wm = wmax
v      wmw(n) = wmax
v      end if
v  8609 continue
v      mi = mi + minc
v      mk = mk + mink
cvp    i = i + inc
v      i1 = i1 - 1
cvp    if(i1.ne.0) go to 3020
v  8620 continue
cvp
      mi = miw
      mk = mkw
      n = 0
s      do 8630 i = istr, iend, inc
v      n = n + 1
m      pclr(i) = pclr(i) - dzmuw*fiom*avib(i)
s      fiom = fiom + fix(i)
m      avmufw = avimuw(n)*fiom*pctwt
v      fmoi = fmo(i)
v      fkomi = fko(mk)
v      fjomi = wfjo(n)
cvp
v      if(initmw.le.0) then
v          t = 0.0d0
v      else
v          if(fmoi.le.0.0d0 .or. iff) go to 8602
v          e7 = (sgtv2(i) + avimaw(n) + atxiaw(n) + ahetaaw(n))*fmoi
v          e9 = e7 + e7
m          e8 = e9 - fmoisw(n) - avmufw - atxifww(n) - ahetfww(n)
s          if(e8.gt.e7) wmw(n) = dmax1(1.d0,e9/e8)
c3640  t = dabmm*wm + dampm
m  8602 t = dabmmmw(n)*wmw(n) + dampmw(n)
v      end if
cvp
c3700 if(ifff) go to 3780
v      if(ifff) go to 8603
c
c -- - - - calculate k-space weighting coefficient
c##  if(fkomi.le.0.0) go to 3720
v      if(fkomi.le.0.0d0) go to 8604
v      e5 = (dabmmsw(n) + avimaw(n) + atxiaw(n))*fkomi
s      e9 = e5 + e5
m      e6 = e9 - ahetaaw(n)*fkomi - fmoisw(n) - avmufw - atxifww(n)
s      if(e6.gt.e5) wk(n) = dmax1(1.d0,e9/e6)
c
c -- - - - calculate j-space weighting coefficient

```

Fig 2.42 Vector version of original il-loop in subroutine rowb (2/3)

```

cvp20 if(fjomi.le.0.0) go to 3740
v 8604 if(fjomi.le.0.0d0) go to 8605
v      e3 = (dabmmsw(n)+ avimaw(n) + ahetaw(n))*fjomi
s      e9 = e3 + e3
m      e4 = e9 - atxiaw(n)*fjomi - fmoisw(n) - avmufw - ahetfww(n)
s      if(e2.gt.e3) wjw(n) = dmax1(1.d0,e9/e4)
c - - - - calculate i-space weighting coefficient
c3740 if(fiom.le.0.0) go to 3780
m 8605 if(fiom.le.0.0d0) go to 8603
s      e1 = (dabmmsw(n) + atxiaw(n) + ahetaw(n))*fiom
s      e9 = e1 + e1
s      e2 = e9 - avimu(n)*fiom - fmoisw(n) - atxifww(n) - ahetfww(n)
s      if(e2.gt.e1) wiw(n) = dmax1(1.d0,e9/e2)
c - - - - centered flux
c3780 z = aheta*wk
m 8603 z = ahetaw(n)*wk(n)
s      y = atxiaw(n)*wjw(n)
s      x = avimaw(n)*wiw(n) - dampmw(n)
s      fbarw(n) = dirs(i) + x*fiom + y*fjomi + z*fkomi + t*fmoi
m      fbarw(n) = fbarw(n) / (sgtv2(i) + sgtv2(i) + x + y + z + t)

cvp  fmo(i) = (fbar - fmoi)*wm + fmoi
cvp  fko(mk) = (fbar - fkomi)*wk + fkomi
cvp  if(nvl.gt.0) fjo(mi) = (fbar - fjomi)*wj + fjomi
s      fix(i) = (fbarw(n) - fiom)*wiw(n) + fiom
c4000 dirs(i) = fbar
s      fiom = fix(i)
v      mi = mi + minc
v      mk = mk + mink
v 8630 continue
      mi = miw
      mk = mkw
      n = 0
v      do 8640 i = istr, iend, inc
v      n = n + 1
v      fmoi = fmo(i)
v      fkomi = wfko(n)
v      fjomi = wfjo(n)
v      fmo(i) = (fbarw(n) - fmoi)*wmw(n) + fmoi
v      fko(mk) = (fbarw(n) - fkomi)*wk(n) + fkomi
v      if(nvl.gt.0) fjo(mi) = (fbarw(n) - fjomi)*wjw(n) + fjomi
v c4000 dirs(i) = fbar
v      dirs(i) = fbarw(n)
v      mi = mi + minc
v      mk = mk + mink
v 8640 continue
c - - - - end i loop

```

Fig 2.42 Vector version of original i1-loop in subroutine rowb (3/3)

```
cdir$ ivdep
cvocl loop,novrec
s   do 270 ij=ijb,ije,jnc2
s   270 fx(ij) = qq(ij) - cbanjb(ij)*fx(ij-jnc) - cbanjt(ij)*fx(ij+jnc)
```

Fig. 2.43 Original version of 'do 270' in subroutine wsol

```
cdir$ ivdep
*vocl loop,novrec
v   do 270 ij=ijb,ije,jnc2
v   270 fx(ij) = qq(ij) - cbanjb(ij)*fx(ij-jnc) - cbanjt(ij)*fx(ij+jnc)
```

Fig. 2.44 Vector version of 'do 270' in subroutine wsol

3. FLOWGR コードのベクトル化

FLOWGR コードは富士通(株)製大型汎用計算機 M780 上で利用されているものであるが、当計算機上では 30 回のリスタートによる平均 30 時間もの実行時間を要するため、年間約 30 ケースしか実行できなかった(メモリ使用量 3MB 未満)。そこで、富士通(株)製分散メモリ型ベクトル並列計算機 VPP500/42(以下 VPP500) 上でのベクトル化を行った。今回のベクトル化による速度性能の向上は、オリジナル版の VPP500 ベクトル実行に比較すると、ベクトル化版のベクトル実行では 4.3 倍であった。本報告書では、主にベクトル化の作業内容について述べる。

3.1 コード概要

FLOWGR コードは、高温ガス炉の一次冷却系破断事故時における炉内への空気の侵入挙動及び炉内における化学反応を伴う多成分気体の流動を解析する [6]。

原子炉系を破断孔、一次元流路、分岐から構成される一次元の流路網としてモデル化し、流路壁の空間温度分布及び時間変化や多成分気体を構成する気体の種類等を入力データで与える。気体の種類としてはヘリウム、窒素、酸素、一酸化炭素、二酸化炭素、アルゴンを考える。

解析の対象とする期間は、配管破断が生じてから流路網外の重い気体と炉内冷却気体の混合気体の自然対流が発生するまでの間で、混合気体及び成分気体の質量保存則、混合気体の運動量保存則、混合気体のエネルギー保存則に基づく支配方程式を一次元座標メッシュにより離散化し数値解を求める。この間、指定した流路においては化学反応による一酸化炭素及び二酸化炭素の発生を取り扱う。

3.2 オリジナル版コードの修正

M780 で利用されているオリジナル版コードには、サブルーチン間で引数として使用されている配列サイズの相違や初期化されていない変数等が存在していた。VPP500 上でデバッグオプション "-Dasu" [5, 8] を付けたコンパイル & 実行を行うと、これらが原因でアベンドする。デバッグオプションを付けない通常のコンパイル & 実行には差し支えないが、実行をより確実にするため、ベクトル化を行う前にこれらについて修正を行った。

(1) 配列 QS について

サブルーチン SET0 では COMMON ブロック VALNEW において COMMON 配列 QS(NSZ,7) が宣言されていた。この配列は、このルーチンから呼び出しているサブルーチン PCON へ渡されているが、PCON では DIMENSION により QS(NSZ,8) と宣言されていた。そこでサイズを揃えるため、サブルーチン SET0 の QS(NSZ,7) を QS(NSZ,8) とした。これに伴い他のサブルーチンで宣言されている COMMON ブロック VALNEW においても、ブロックサイズを合わせるために QS(NSZ,7) を QS(NSZ,8) に変更した。配列 QS についての変更内容を Fig. 3.1 に示す。

(2) サブルーチン OUT4 の変数 NMAX について

この変数は DO 4000 ループ内の IF 文が真にならない場合に未定義になるため、エラーが発生した。そこで、NMAX に値が定義されない場合の暫定処置として NMAX=1 を OUT4 に追加した。追加結果を Fig. 3.2 に示す。

(3) サブルーチン STEP, STEP2 の配列 QTMP, STMP について

この変数も初期化されていなかったために、エラーが発生した。そこで、これらについては、2 つのサブルーチンの先頭において DATA 文の追加により初期化することにした。追加結果を Fig. 3.3 に示す。

3.3 動的挙動解析

本コードのコスト分布を調査するため、入力データ TAKEDA と TAKEDAM を用いてオリジナル版コードについての動的挙動解析を行った。VPP500 上には動的挙動解析ツールとして SAMPLAR [7] が用意されているが、これはベクトル化を行う上で必要になる詳細な解析情報を得ることができない。そこで、解析には GSP 上に用意されている動的挙動解析ツール ANALYZER [4] を用いた。このツールを用いると GSP 上で実行した場合の、全体に対するサブルーチン毎の解析結果、各サブルーチンに対する DO ループ毎の解析結果と STATEMENT 毎の解析結果が得られる。全体に対するサブルーチン毎の解析結果について、TAKEDA を用いた場合を Table 3.1 に、TAKEDAM を用いた場合を Table 3.2 に示す。この解析結果より、PCON, SOLVE, SOR, CPMASS の 4 つのサブルーチンのコストが高い。よって、主にこれらのサブルーチンをベクトル化の対象とした。

3.4 ベクトル化

ここでは、PCON, SOLVE, SOR, CPMASS の 4 つのサブルーチンとこの他のサブルーチンに対して行ったベクトル化チューニングの内容について述べる。尚、TAKEDA, TAKEDAM の 2 つの入力データの違いによるコスト分布の差はほとんど無いので、以降の説明では、TAKEDA を用いた場合の各動的挙動解析結果を用いることにする。

3.4.1 サブルーチン PCON

このルーチンに対する DO ループ毎の動的挙動解析結果を Table 3.3 に示す。この情報を基に各ループに対してチューニングを行った。以下ではそのチューニング内容を述べる。

(1) DO 500 ループについて

Table 3.3 によると、DO 521, DO 510, DO 520 ループのコストが高い。これらのループを含んでいるオリジナル版の DO 500 ループを Fig. 3.4 に示す。このような多重ループにおいてコンパイラによる自動ベクトル化の対象になるのは基本的に最内ループである。また、ベクトル実行においてはループの回転数のことをベクトル長と呼ぶが、ベクトル化の対象となるループのベクトル長はおよそ 10 以上であればベクトル実行することによって効率良く速度向上を得ることができる。逆に 10 以下であればベクトル実行のためのオーバーヘッドが目立ち、スカラ実行よりも遅くなってしまうことが大部分である。これらの DO 521, DO 510, DO 520 ループはベク

トル化の対象となっておりベクトル長は NGAS である。しかし、TAKEDA, TAKEDAMにおいては NGAS=5 であり、ベクトル実行においてはベクトル長が短過ぎる。従って、これらのループについては外側ループの DO 500 ループのベクトル長である NCELL(セルの数:TAKEDA, TAKEDAMにおいて 85) を利用し、これを最内ループにするチューニングを行った。以降でそのチューニング過程を説明する。

- Fig. 3.4 から Fig. 3.5 への変更

Fig. 3.4において1行目～11行目の部分と12行目～26行目の部分の2つの部分にDO 500 ループを分割し、前の部分をDO 500 ループ、後の部分をDO 501 ループとした。Fig. 3.4の1行目～11行目の部分で定義されている一次元配列 ETAA は、12行目～26行目の部分で参照されているが、分割後の2つのループ間でも正しい定義参照関係になるように、Fig. 3.5ではETAAV という二次元配列を用意しそれを利用するようにした。このため、このルーチンの配列宣言部分で新たに ETAAV(NSZ,8) を宣言し、ETAA(8) の宣言はコメント化した。また、Fig. 3.4の2, 3行目で初期化を行っている配列 ETA, FLAM は、21行目以降まで使用されていないので、Fig. 3.5ではDO 501 ループへ移すこととした。

- Fig. 3.5 から Fig. 3.6 への変更

Fig. 3.5において11行目～28行目のDO 501 ループを11行目～22行目の部分と23行目～28行目の部分の2つの部分に分割し、前の部分をDO 501 ループ、後の部分をDO 502 ループとした。Fig. 3.5の11行目～22行目で定義参照している一次元配列 FMA と DENOM は、23行目～28行目で参照定義されているが、分割後の2つのループ間でも正しい定義参照関係になるように、Fig. 3.6ではFMAV と DENOMV という二次元配列を用意しそれを利用するようにした。このため、このルーチンの配列宣言部分で新たに FMAV(NSZ,8) と DENOMV(NSZ,8) を宣言した。また、Fig. 3.5の12, 13行目で初期化を行っている配列 ETA, FLAM は、23行目以降まで使用されないので、Fig. 3.6ではDO 502 ループへ移すこととした。尚、DO 502 ループの内側ループはDO 522とした。

- Fig. 3.6 から Fig. 3.7 への変更

Fig. 3.6において12行目～23行目のDO 501 ループを12行目～15行目の部分と16行目～23行目の部分の2つの部分に分割し、前の部分をDO 501 ループ、後の部分をDO 503 ループとした。尚、三重ループ DO 503 ループの外側から2番目のループはDO 523とした。

- Fig. 3.7 から Fig. 3.8 への変更

Fig. 3.7において28行目～37行目のDO 502 ループを28行目～30行目の部分と31行目～37行目の部分の2つの部分に分割し、前の部分をDO 502 ループ、後の部分をDO 504 ループとした。

- Fig. 3.8 から Fig. 3.9 への変更

Fig. 3.8において31行目～38行目のDO 504 ループを31行目～36行目の部分と37行目～38行目の部分の2つの部分に分割し、前の部分をDO 504 ループ、後の部分をDO 505 ループとした。

- Fig. 3.9 から Fig. 3.10 への変更

Fig. 3.9 における DO 500, DO 510 の二重ループ, DO 501, DO 520 の二重ループ, DO 503, DO 523, DO 521 の三重ループ, DO 504, DO 522 の二重ループの各最外ループを最内ループとした。これにより、ベクトル長 NCELL のループがコンバイラの自動ベクトル化の対象となり、高速化されることとなった。

(2) DO 300 ループについて

オリジナル版のこのループを Fig. 3.11 に示す。自動ベクトル化の対象となる最内ループの DO 310 ループのベクトル長は NGAS でありベクトル長が短く高速化には向かない。従って、DO 300 ループのベクトル長である NCELL を利用し、これを最内ループにするチューニングを行った。チューニング方法は DO 500 ループと同様である。次にチューニング過程を示す。

- Fig. 3.11 から Fig. 3.12 への変更

Fig. 3.11において1行目～2行目の部分と3行目～7行目の部分の2つの部分に分割し、前の部分を DO 300 ループ、後の部分を DO 301 ループとした。

- Fig. 3.12 から Fig. 3.13 への変更

Fig. 3.12において二重ループ DO 301 の最外ループを最内ループとした。これによりベクトル長 NCELL のループがコンバイラの自動ベクトル化の対象となり、高速化されることとなった。

(3) DO 10, DO 20 ループについて

オリジナル版のこの2つのループを Fig. 3.14 に示す。これら2つのループ共二重ループであり、ベクトル化の対象になる内側ループのベクトル長が短い。従って、内側ループと外側ループの入れ替えを行い、内側ループのベクトル長を NCELL にしてベクトル化させるようにした。変更後のこれらのループを Fig. 3.15 に示す。

(4) DO 200 ループについて

オリジナル版のこのループを Fig. 3.16 に示す。このループについても(3)と同様に、内側ループのベクトル長が短いため、外側ループとの入れ替えを行い内側ループのベクトル長を NCELL にしてベクトル化させるようにした。変更後のこのループを Fig. 3.17 に示す。

(5) ユーザ定義関数を呼び出している DO ループについて

このサブルーチンでは Fig. 3.13 の DO 310 ループ, Fig. 3.10 の DO 504 ループにおいてそれぞれユーザ定義関数 SHEAT, SCOND を呼び出している。このようにユーザ定義関数を呼び出しているループは VPP コンバイラの仕様によりベクトル化されない。これをベクトル化させるには、呼び出されている関数の上位ループへのインライン展開を行う。インライン展開とは、関数や副プログラムをそのままループ内へ展開することを言うが、このインライン展開は、関数 SHEAT, SCOND をサブルーチン PCON を格納しているファイルに結合し、コンパイル時にコンパイルオプション "-Of" を指定することで可能になる。この "-Of" は M780 での "OPT(F)" に相当するものである。

こうすることにより、関数 SHEAT, SCOND もベクトル化の対象となるが、この内、SHEAT は

コンバイラによってベクトル化されないコーディングがされていたため修正を加えた。オリジナル版の SHEAT を Fig. 3.18 に示す。SHEAT は IF-ELSEIF-ENDIF ブロックから成っているが、これらの条件に合致しない場合、SHEAT が未定義になるとコンバイラが判断するため、ベクトル化されなかった。そこで、このブロックに新たに ELSE ブロックを設けダミー処理として "SHEAT=0.0D0" を追加した。これにより、関数 SHEAT を呼び出している Fig. 3.13 の DO 130 ループがベクトル化されるようになった。関数 SHEAT の新たな IF-ELSEIF-ELSE-ENDIF ブロックを Fig. 3.19 に示す。

3.4.2 サブルーチン SOLVE

このルーチンに対する DO ループ毎の動的挙動解析結果を Table 3.4 に示す。また、オリジナル版のこのルーチンを Fig. 3.20 に示す。この情報を基に DO 130, DO 240 ループに対し施したベクトル化の内容について述べる。

(1) DO 130 ループについて

DO 130 ループのコストが高いのは、コンバイラが DO 130 ループはベクトル実行を行うと配列 A について回帰演算が発生すると判断したため、ベクトル化されていないことが原因である。しかし、ベクトル化の対象となるループの構造によっては、コンバイラは回帰演算が発生しない場合でも発生すると判断する場合があるため、ベクトル実行した場合に回帰演算が発生するかどうか調査した。

Fig. 3.20 の DO 130 ループにおいて、 $A(I,K)$ と $A(I,JJ)$ 、または $A(I,K)$ と $A(N,J)$ が同じアドレスをアクセスすると回帰演算が発生し、そうでなければ回帰演算は発生しない。尚、 $A(I,JJ)$ と $A(N,J)$ は参照されているだけなので同じアドレスをアクセスしても回帰演算とは言わない。

• $A(I,K)$ と $A(N,J)$ について

この 2 つの配列の一次元目の添字 I と K に注目する。I, K 共に DO 130 ループの処理中では固定の値を持つ。Fig. 3.20 において N は 7 行目で、I は 18 行目で決められる。I は " $I=N+L-1$ " という計算で決められ、L は N が固定の場合に 2 ~ MBAND まで変化する。これより、L は最低でも 2 であるため、" $I=N+L-1$ " より I は常に N より大きい値を取ることが分かる。よって、I と N は DO 130 ループにおいて常に異なる値を持つことから、 $A(I,K)$ と $A(N,J)$ は同じアドレスをアクセスすることは無いため、この 2 つの配列については回帰演算は発生しない。

• $A(I,K)$ と $A(I,JJ)$ について

この 2 つの配列については、二次元目の添字 K と JJ に注目する。K は DO 130 ループの DO 変数であり KI ~ KF まで変化し、JJ はループ処理中では固定の値を持つ。Fig. 3.20 において KI は 21 行目で KF は 22 行目で決められ、JJ は 17 行目で決められる。KI は " $KI=MBAND-L+2$ "、JJ は " $JJ=MBAND-L+1$ " という計算で決められる。これより、KI は JJ より大きい値を持ち、DO 130 ループにおいて DO 変数 K は JJ より常に大きい値を取ることが分かる。よって、 $A(I,K)$ と $A(I,JJ)$ は同じアドレスをアクセスすることは無いため、この 2 つ

の配列については回帰演算は発生しない。

以上より、DO 130 ループにおいて配列 A について回帰演算は発生しない。よって、コンバイラに対して回帰演算が発生しないことを判断させる最適化制御行 “*vocl loop,novrec(A)” を DO 130 ループの直前に指定し、ベクトル化させようとした。“(A)” は配列 A を意味する。指定した DO 130 ループを Fig. 3.21 に示す。

(2) DO 240 ループについて

このルーチンのコストが高いのも、DO 130 ループと同様にコンバイラが DO 240 ループはベクトル化を行うと配列 B について回帰演算が発生すると判断したため、ベクトル化されていないことが原因である。そこで、このループに対してもベクトル実行した場合に回帰演算が発生するかどうかを調査した。

Fig. 3.20 の DO 240 ループにおいて、B(N) と B(K) が同じアドレスをアクセスすると回帰演算が発生し、そうでなければ回帰演算は発生しない。

配列 B(N) の添字 N は DO 240 ループ処理中では固定の値を持ち、配列 B(K) の添字 K は DO 240 ループで変化する。K は 54 行目の “K=N+L-MBAND” という計算で決められているが、L は DO 240 ループにおいて LL ~ NCOLS まで変化する DO 変数である。この内、LL は DO 250 ループの外で “LL=MBAND+1” と定義されていることにより、DO 240 ループにおいて K の初期値は “K=N+MBAND+1-MBAND” より N+1 である。従って、このループにおいては K の値は常に N より大きいことにより、B(N) と B(K) は同じアドレスをアクセスすることは無いため、この 2 つの配列については回帰演算は発生しない。

以上より、DO 130 ループと同様にコンバイラに対して回帰演算が発生しないことを判断させる最適化制御行 “*vocl loop,novrec(B)” を DO 240 ループの直前に指定して、ベクトル化させようとした。指定した DO 240 ループを Fig. 3.22 に示す。

3.4.3 サブルーチン SOR

Table 3.1 の V-effect の情報よりこのルーチンはスカラ実行よりも逆に遅くなっている場合がある。このルーチンに対する DO ループ毎の動的挙動解析結果を Table 3.5 に示す。これによると DO 2101, DO 2201, DO 2102, DO 2202 ループがスカラ実行よりも遅い原因になっていることがわかる。更にオリジナル版のこのルーチンを Fig. 3.23 に示す。これらのループは三重ループである DO 2000 ループの最内ループであり、Table 3.5 からもわかるように平均ベクトル長が 1 である。このような短いベクトル長でベクトル実行を行うと、ベクトル実行のオーバーヘッドが大きくなりスカラ実行よりも遅くなってしまう。

これを回避するためのチューニングとしては、DO 2100, DO 2200 ループの回転数 NCELL を利用しこれを最内ループにするのが望ましい。また、このルーチンは全体に対してコストも高いため、チューニングを行うとベクトル化の効果が期待できる。しかし、チューニングを行うと配列 TMP について回帰演算が発生してしまい、正当な計算が行われなくなってしまう。そこで、速度向上を得られるようなチューニングは行わず、スカラ実行よりも遅くなることだけを回避することにした。これについては、上の 4 つの DO ループの直前に、ベクトル実行を抑止してスカ

ラ実行を行わせるための最適化制御行 “*vocl loop,scalar” の指定を行った。指定を行ったこのルーチンを Fig. 3.24 に示す。

3.4.4 サブルーチン CPMASS

Table 3.1 の V-effect の情報よりこのルーチンはスカラ実行よりも逆に遅くなっている場合がある。このルーチンに対する DO ループ毎の動的挙動解析結果を Table 3.6 に示す。更にオリジナル版のこのルーチンを Fig. 3.25 に示す。Table 3.6 より DO 1000 ループが最もコストが高いが、Fig. 3.25 から分かるように、これは最外ループであるためベクトル化されていないことが原因である。次に DO 1400, DO 1300 ループのコストが高い。これは、最内ループにもかかわらず、コンバイラがそれぞれのループにおいて定義参照されている二次元配列 FMAT について回帰演算が発生すると判断したため、ベクトル化されていないことが原因である。しかし、この回帰演算を回避し仮にこの 2 つのループについてベクトル化を行ったとしても、Table 3.6 からも分かるように平均ベクトル長が 1 であるため、ベクトル化の効果が望めずスカラ実行よりも逆に遅くなることが予想される。従って、DO 1000 ループの回転数 NCELL を利用してベクトル化できるようにこのループの大幅なチューニングを行った。

(1) DO 1000 ループの分割

Fig. 3.25 の DO 1000 ループを 21 行目～28 行目の部分、29 行目～43 行目の部分と 44 行目～63 行目の部分の 3 つの部分に分割した。ループ ID は順に DO 1000, DO 1001, DO 1002 ループとした。これを Fig. 3.26 に示す。

DO 1000 ループと DO 1001 ループ以降を分割したのは、DO 1000 ループを NCELL でベクトル化させるために行つたものである。また、DO 1001 ループと DO 1002 ループ以降を分割した理由は次のとおりである。

Fig. 3.25において29行目～43行目の部分は非境界セルについての計算で、44行目～63行目の部分は境界セルについての計算である。ここで入力データ TAKEDA の場合の流路ネットワークモデル図を Fig. 3.27 に示す (TAKEDAM の場合も同様)。これから分かるように、大部分が非境界セルであり、更にこのルーチンについての STATEMENT 每の動的挙動解析結果を Table 3.7 に示すと、true の情報 (IF 文の真率) からも分かるように、非境界セルについての計算が全体の 96.5% である。そこで、この非境界セルについての計算部分を NCELL でベクトル化するために分割を行った。

分割を行った結果、DO 1002 ループは全体の 3.5% しか実行されない。また、Fig. 3.27 からも境界セルは 3 つである。従って、DO 1002 ループを NCELL 回実行させる必要はないため、DO 1001 ループにおいて境界セルの場合をカウントし、そのカウント分を DO 1002 ループにおいて回転させるようにした。DO 1001 ループでの境界セルのカウント処理は、"IF(ICEL(I).EQ.0)" の ELSE として追加した。このカウント処理を行うため、境界セルの数 (DO 1002 ループの回転数) を格納する変数と境界セルの ID を格納する配列を新たに用意した。更に、境界セルが 3 つであることから DO 1002 ループのベクトル長は 3 になる。これをベクトル実行するとスカラ実行よりも遅くなるため、ベクトル実行を抑止する最適化制御行 “*vocl loop,scalar” を DO 1002 ループの直前に指定した。

(2) Fig. 3.26 の DO 1001 ループ

Fig. 3.26 の DO 1300 ループの DO 変数は $IPR(I) \sim IPR(I+1)-1$ まで回転する。FLOWGR コードにおいて、セル ID が I の時のプラス方向のセル ID またはジャンクション ID を得る場合は、それぞれの ID が格納されている配列に対しこの $IPR(I) \sim IPR(I+1)-1$ を添字にして得ている。すなわち、 $IPR(I) \sim IPR(I+1)-1$ はプラス方向のセル ID またはジャンクション ID を得るためのポインタである。従って、セル ID が I の時、DO 1300 ループはプラス方向のセル ID またはジャンクション ID の数だけ回転する。言い替えれば、プラス方向のセル ID またはジャンクション ID へのポイント数だけ回転する。入力データ TAKEDA によって作成される Fig. 3.27 の流路ネットワークモデルにおいては、大部分のセルに対するプラス方向のセル ID またはジャンクション ID の数は 1 つであり、流路が分岐している部分についてのみ複数個存在する。従って、DO 1300 ループは大部分が回転が 1 であるため、平均ベクトル長が 1 になっている。これと同様のことが DO 1400 ループについても言え、DO 1400 ループの回転範囲である $IPL(I) \sim IPL(I+1)-1$ はマイナス方向のセル ID またはジャンクション ID を得るためのポインタである。従って、Fig. 3.27においては DO 1400 ループも大部分が回転が 1 であるため、平均ベクトル長が 1 になっている。

以上の考察より、Fig. 3.26 における DO 1300, DO 1400 ループの大部分の回転が 1 あることを利用し、回転が 1 の時とそれ以外の時に処理を分けることにした。このようにするために、DO 1300, DO 1400 ループの回転数を予め求めておく必要がある。プラス方向またはマイナス方向のセル ID またはジャンクション ID を得るためのポインタは、サブルーチン NETWRK において作成される流路ネットワークモデルに依存する。そこで、NETWRK の最後の部分に DO 1300, DO 1400 ループの回転数を求める処理を追加した。追加した処理を Fig. 3.28 に示す。ここでは、セル ID が I の時の、プラス方向のセル ID またはジャンクション ID へのポイント数 (DO 1300 ループの回転数) を `ipr_loop(I)` に、マイナス方向のセル ID またはジャンクション ID へのポイント数 (DO 1400 ループの回転数) を `ipl_loop(I)` に格納している。この 2 つの配列は、サブルーチン NETWRK とサブルーチン CPMASS に既存の COMMON ブロック POINTR に COMMON 変数 `ipr_loop(NSZ)`, `ipl_loop(NSZ)` として追加し、サブルーチン CPMASS で参照できるようにした。

この配列を利用して、Fig. 3.26 における DO 1300, DO 1400 ループを IF-ELSE-ENDIF ブロックにすることにより、回転数が 1 の時とそれ以外の時に処理を分けた。これを Fig. 3.29 に示す。尚、COMMON ブロック POINTR はサブルーチン ENERGY, MXMASS, PRESMD, READWT, SET0, SET1, SOR, STEP, STEP2 にも存在するため、それぞれに対しても COMMON 変数 `ipr_loop(NSZ)`, `ipl_loop(NSZ)` を追加した。

(3) Fig. 3.29 の DO 1001 ループの分割

次に、Fig. 3.29 の DO 1001 ループにおいて 5 行目～9 行目の部分、10 行目～17 行目の部分、19 行目～23 行目の部分と 24 行目～31 行目の部分の 4 つの部分に分割した。1 番目のループを DO 1001, 2 番目のループを DO 1003, 3 番目のループを DO 1004, 4 番目のループを DO 1005 とした。これを Fig. 3.30 に示す。この内、DO 1003, DO 1005 ループはそれぞれポイント数が 1 以外の場合の計算であるため、極めて回転数が少ないので、この 2 つの

ループを NCELL 回実行する必要はないため、DO 1001, DO 1004 ループにおいてポイント数が 1 以外の場合をカウントし、そのカウント分だけ DO 1003, DO 1005 ループにおいて回転させるようにした。カウント処理はそれぞれ DO 1001, DO 1004 ループの "if(ipr_loop(I).eq.1)" と "if(ip1_loop(I).eq.1)" の ELSE として追加した。このカウント処理を行うため、ポイント数 1 以外のセル ID の数 (DO 1003, DO 1005 ループの回転数) を格納する変数とポイント数 1 以外のセル ID を格納する配列を新たに用意した。また、Fig. 3.27においてはポイント数が 1 以外の場合 (分歧している部分) はプラス方向マイナス方向共に 1 回である。この回数でベクトル実行するとベクトル長が短すぎてスカラ実行よりも遅くなってしまうため、ベクトル実行を抑止する最適化制御行 "*vocl loop,scalar" を DO 1003, DO 1005 ループの直前に指定した。以上、分割したことにより、DO 1001, DO 1003 ループは NCELL によってベクトル化されるようになった。

3.4.5 サブルーチン SET1 と STEP

この 2 つのルーチンは Table 3.1 によると全体に対してそれほどコストは高くない。このようなコストのあまり高くないルーチンに対してベクトル化を行うと、短時間ジョブでは効果は現れないが、ある程度の長時間ジョブになれば効果が現れて来る。そこで、FLOWGR コードのタイムステップを大きくして、この 2 つのルーチンのチューニング前とチューニング後の実行時間を比較したところ、約 6 時間かかるジョブが約 5 時間半に短縮された。よって、これらのルーチンに対して行ったチューニング内容も有効なものとした。その内容を以下に示す。尚、STEP よりコストの高いサブルーチン DIFFSN, ZERO はコンバイラの自動ベクトル化機能により効率良いベクトル化がされており、更にチューニングできる部分は無かった。

(1) サブルーチン SET1

このルーチンに対する DO ループ毎の動的挙動解析結果を Table 3.8 に示す。このルーチンでコンバイラによってベクトル化されていない箇所は DO 400 ループだけである。この他はすべてコンバイラの自動ベクトル化機能により効率良いベクトル化がされてるため、DO 400 ループについてのみチューニングを行った。オリジナル版の DO 400 ループを Fig. 3.31 に示す。このループは Fig. 3.26 の DO 1001 ループと構造が似ていて、DO 410 ループは Fig. 3.26 の DO 1300 ループに、DO 420 ループは Fig. 3.26 の DO 1400 ループに相当する。従って、この DO 400 ループについても Fig. 3.26 の DO 1001 ループと同様のチューニングを行った。Fig. 3.31 において 1 行目～2 行目の部分、3 行目～4 行目の部分、5 行目～6 行目の部分と 7 行目～8 行目の部分の 4 つの部分に分割し、順に DO 400, DO 401, DO 402, DO 403 ループとした。更に、DO 401, DO 402 ループを回転数が 1 の場合とそれ以外の場合に分け、それ以外の場合のループをそれぞれ DO 404, DO 405 ループとした。この 2 つのループの直前には "*vocl loop,scalar" を指定した。チューニング結果を Fig. 3.32 に示す。

(2) サブルーチン STEP

このルーチンに対する DO ループ毎の動的挙動解析結果を Table 3.9 に示す。これによるとコンバイラによってベクトル化されていない箇所は DO 600, DO 800 ループである。この内、DO

800 ループはベクトル実行すると回帰演算が発生するためベクトル化不可能である。また、この他はすべてコンバイラの自動ベクトル化機能により、効率良いベクトル化がされている。そこで、DO 600 ループについてのみチューニングを行った。オリジナル版の DO 600 ループを Fig. 3.33 に示す。このループは 2 重ループであり内側ループがベクトル化されているが、内側ループのベクトル長が短い。そのため、外側ループとのループの入れ換えを行い、ベクトル長 NCELL でベクトル化させるように変更した。変更結果を Fig. 3.34 に示す。尚、このルーチンと構造が似ているサブルーチン STEP2 の DO 600 ループについても同様の変更を行った。

3.4.6 サブルーチン MXMASS と PRESMD

これら 2 つのルーチンは、Table 3.1 の V-effect の情報からわかるように、ベクトル実行したことによりスカラ実行よりも逆に遅くなっている場合がある。これらのルーチンの DO ループ毎の動的挙動解析結果を MXMASS について Table 3.10 に、PRESMD について Table 3.11 に示す。これらより、MXMASS については DO 1200, DO 1100 ループの、PRESMD については DO 1200, DO 1100 ループのベクトル長が 1 であることが、スカラ実行よりも遅い原因であることが分かる。しかし、この 2 つのルーチンは全体に対しコストは高くないので、大幅なチューニングを行ってもベクトル化の効果は望めない。そこで、これらのループについては、ベクトル実行を抑止してスカラ実行を行わせるための最適化制御行 “*vocl loop,scalar” を各ループの直前に指定するのみに留めた。指定を行った MXMASS の DO 1100, DO 1200 ループを Fig. 3.35 に、PRESMD の DO 1100, DO 1200 ループを Fig. 3.36 に示す。

3.5 計算結果の評価及びベクトル化の効果

ここでは、ベクトル化版 FLOWGR コードの計算結果とベクトル化の効果について述べる。

3.5.1 計算結果について

VPP500において、入力データ TAKEDA と TAKEDAM を用いて、ベクトル化版コードのベクトル実行結果とオリジナル版コードのスカラ実行結果の比較を行った。この結果は完全には一致しない。そこで、VPP コンバイラでデフォルトの設定である演算評価方法の変更を抑止して、ベクトル化版コードのスカラ実行結果とオリジナル版コードのスカラ実行結果を比較したところ、全桁一致した。これより、ベクトル化版コードのベクトル実行結果とオリジナル版コードのスカラ実行結果が一致しないのは、VPP コンバイラによる演算評価方法の変更方法による違い、ベクトル実行するかスカラ実行するかで異なる最適化の違いと浮動小数点演算時の丸めの方法の違い（ベクトル計算では切捨て、スカラ計算では四捨五入）等、コンバイラと使用するハードウェアの影響が考えられる。また、ユーザよりこの計算結果の違いは問題無いとの評価をいただいた。よって、ベクトル化版コードのベクトル実行結果は妥当であることとした。

3.5.2 ベクトル化の効果について

ベクトル化の効果を知るために、入力データ TAKEDA と TAKEDAM を用いたベクトル化版コードについての動的挙動解析を行った。コード全体に対するサブルーチン毎の解析結果を TAKEDA については Table 3.12 に、TAKEDAM については Table 3.13 に示す。これによると、チューニ

ングを行ったサブルーチン PCON はベクトル化率が 92.8% から 99.1% に、ベクトル化効果が 1.4-3.4 倍から 13.7-20.2 倍に向上している。サブルーチン SOLVE はベクトル化率が 29.9% から 66.4% に、ベクトル化効果が 1.4-1.4 倍から 2.4-2.6 倍に向上している。サブルーチン SOR はベクトル実行を抑止したので、ベクトル化率が低下した代わりに、スカラ実行より遅くなることは無くなった。サブルーチン CPMASS はベクトル化率が 22.4% から 96.3% に、ベクトル化効果が 0.9-1.1 倍から 10.2-13.2 倍に向上し、コード全体に対してのこのサブルーチンのコストの割合が小さくなつた。

また、ベクトル化版コードの性能を測るため、VPP500 上でベクトル実行した場合の実行時間の測定を行い、M780 上での実行時間と比較した。実行時間は、プログラム終了直前の CPU 時間と開始直後の CPU 時間の差とし、終了直前と開始直後にそれぞれ CPU 時間を取得できるサービスルーチン "clock" を挿入して測定を行つた。測定結果を Table 3.14 に示す。尚、測定は入力データ TAKEDA, TAKEDAM の両方について行つた。この時の入力データによるタイムステップと CPU 制限時間は、TAKEDA ではそれぞれ 2500 回と 25 分、TAKEDAM ではそれぞれ 10000 回と 25 分で行つた。

Table 3.14 より、VPP500 上でのベクトル化版の実行時間を M780 と比較すると、約 8 倍強の速度性能の向上が得られたことがわかる。更に、TAKEDA についてタイムステップ 1000000 回、CPU 制限時間 6000 分とし、長時間ジョブにした場合のベクトル化版の実行時間を測定した。この結果は約 5 時間 36 分であった。従つて、VPP500 でベクトル化版コードを用いると、従来の M780 を利用する場合よりも充分に効率良い実行ができるようになったことが言える。

3.6 まとめ

今回のベクトル化では、係数行列を解くサブルーチン SOR はオリジナル版のアルゴリズムによりベクトル化不可能であった。また、SOLVE についても同様で、アルゴリズムにより充分な高速化が行えなかつた。しかし、従来の M780 上での実行に比べると、約 8 倍強の性能向上が得られたため、今までよりも多ケースの問題についての計算が可能になるものと考える。最後に、本コードはサブルーチン SOR, SOLVE にベクトル化向きのアルゴリズムを採用すれば更に充分に高速化できるコードであると考える。

Table 3.1 Dynamic behavior of original FLOWGR (TAKEDA)

vectorize - total list	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
name									
PCON	11626	.3217E10	38.9	.7926E10	34.5	8	92.8	1.4-	3.4
SOLVE	11605	.1692E10	20.5	.2319E10	10.1	27	29.9	1.4-	1.4
SOR	60721	.1134E10	13.7	.1132E10	4.9	2	46.7	0.9-	1.2
CPMASS	46420	.6888E09	8.3	.6658E09	2.9	2	22.4	0.9-	1.1
SET1	11626	.3256E09	3.9	.7255E09	3.2	3	83.2	1.6-	2.8
>SET1E	11605								
DIFFSN	186016	.2862E09	3.5	.5071E10	22.1	43	99.5	14.5-	21.9
ZERO	60721	.1796E09	2.2	.3166E10	13.8	83	99.4	14.4-	21.8
STEP	2510	.1741E09	2.1	.1024E10	4.5	36	96.7	3.5-	7.8
MXMASS	11605	.1487E09	1.8	.1399E09	0.6	2	40.8	0.8-	1.1
SCOND	4941050	.1393E09	1.7	.1393E09	0.6	1	0.0	1.0-	1.0
SHEAT	4941050	.1117E09	1.3	.1117E09	0.5	1	0.0	1.0-	1.0
PRESMD	11605	.8104E920	1.0	.7538E080	0.3	2	48.8	0.8-	1.1
ENERGY	2696	.3052E773	0.4	.3807E912	0.2	2	47.3	1.1-	1.4
TWX	428570	.1971E220	0.2	.1971E220	0.1	1	0.0	1.0-	1.0
NEWOLD	2500	.1255E2949	0.2	.3791E7500	0.2	7	97.1	1.6-	4.3
DEVMAX	72326	.1255E1825	0.2	.1282E09	0.6	43	95.1	9.1-	11.4
VELOC	11605	.7220E988	0.1	.1367E09	0.6	45	99.8	15.2-	23.8
REACT	11626	.7199E886	0.1	.9931E7298	0.4	43	97.8	11.8-	16.1
TIMELP	1	.3792E788	0.0	.3792E788	0.0	44	0.0	1.0-	1.0
DENSITY	14301	.1710E620	0.0	.2938E555	0.1	43	99.3	14.1-	21.1
SETO	1	.2090E70	0.0	.5471E37	0.0	6	90.8	1.5-	3.5
>SECTOR	20								
OUT3	11	.8140E2	0.0	.1297E34	0.0	6	60.5	1.2-	1.8
READWT	1	.7467E8	0.0	.1026E28	0.0	6	58.8	1.0-	1.6
OUT4	11	.6512E9	0.0	.7324E4	0.0	52	11.7	1.1-	1.1
NETWORK	1	.2744E0	0.0	.1283E10	0.0	14	88.2	4.1-	5.3
ROUT4	11	.2349E6	0.0	.2349E6	0.0	44	0.0	1.0-	1.0
DATAIN	1	.7681E0	0.0	.7681E0	0.0	32	0.0	1.0-	1.0
INPUT	1	.2285E0	0.0	.2795E0	0.0	6	30.6	1.1-	1.3
SEE	10	.1210E0	0.0	.1210E0	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
QUAD	2	.863E0	0.0	.5432E0	0.0	10	99.4	3.8-	8.7
SUMMARY	1	.142E0	0.0	.142E0	0.0	10	0.0	1.0-	1.0
MAIN	1	.37E0	0.0	.37E0	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
RESTART	1	.27E0	0.0	.27E0	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
BLOCDT	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OUT2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OUT5	0	0	0	0	0	0	0	0	0
RIN4	0	0	0	0	0	0	0	0	0
STEP2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
(total)		.8274E10	100.0	.2299E11	100.0		82.9	2.0-	3.3

Table 3.2 Dynamic behavior of original FLOWCR(TAKEDAM)

vectorize - total	1st	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
name									
PCON	21458	.5930E10	39.0	.1461E11	33.6	8	92.8	1.4-	3.4
SOLVE	21440	.3126E10	20.5	.4285E10	9.8	27	29.9	1.4-	1.4
SOR	107200	.2000E10	13.1	.1997E10	4.6	2	46.8	0.9-	1.2
CPMASS	85760	.1273E10	8.4	.1230E10	2.8	2	22.4	0.9-	1.1
SET1	21458	.5743E09	3.8	.1166E10	2.7	3	82.4	1.4-	2.6
>SET1E	21440								
DIFFSN	343328	.5282E09	3.5	.9360E10	21.5	43	99.5	14.5-	21.9
ZERO	107200	.3170E09	2.1	.5590E10	12.8	83	99.4	14.4-	21.8
STEP2	10008	.2751E09	1.8	.1694E10	3.9	36	97.3	3.6-	8.3
MXMASS	21440	.2748E09	1.8	.2585E09	0.6	2	40.8	0.8-	1.1
SCOND	9119650	.2572E09	1.7	.2572E09	0.6	1	0.0	1.0-	1.0
SHEAT	9119650	.2061E09	1.4	.2061E09	0.5	1	0.0	1.0-	1.0
PRESMD	21440	.1497E09	1.0	.1393E09	0.3	2	48.8	0.8-	1.1
DENSITY	872120	.1043E09	0.7	.1792E10	4.1	43	99.3	14.1-	21.1
TWX	1702975	.78336850	0.5	.78336850	0.2	1	0.0	1.0-	1.0
NEWOLD	10000	.50211795	0.3	.1517E09	0.3	7	97.1	1.6-	4.3
TIMELP	1	.24539858	0.2	.24539858	0.1	44	0.0	1.0-	1.0
DEVMAX	128640	.21927847	0.1	.2346E09	0.5	43	95.6	9.5-	12.0
VELOC	21440	.13340628	0.1	.2526E09	0.6	45	99.8	15.2-	23.8
REACT	21458	.13315303	0.1	.1838E09	0.4	43	97.8	11.8-	16.2
SETO	1	.186012	0.0	.483117	0.0	6	90.6	1.5-	3.5
>SECTOR	17								
OUT3	11	79963	0.0	125994	0.0	6	59.4	1.2-	1.8
READWT	1	71126	0.0	.94812	0.0	6	56.4	1.0-	1.5
OUT4	11	65148	0.0	.73064	0.0	52	11.4	1.1-	1.1
NETWORK	1	27440	0.0	.128310	0.0	14	88.2	4.1-	5.3
ROUT4	11	25366	0.0	.25366	0.0	44	0.0	1.0-	1.0
DATAIN	1	7681	0.0	.7681	0.0	32	0.0	1.0-	1.0
INPUT	1	2286	0.0	.2796	0.0	6	30.5	1.1-	1.3
SEE	10	1210	0.0	.1210	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
QUAD	2	863	0.0	.5432	0.0	10	99.4	3.8-	8.7
SUMARY	1	142	0.0	.142	0.0	10	0.0	1.0-	1.0
MAIN	1	37	0.0	.37	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
RESTRT	1	27	0.0	.27	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
BLOCDT	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ENERGY	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OUT2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OUT5	0	0	0	0	0	0	0	0	0
RIN4	0	0	0	0	0	0	0	0	0
STEP	(total)			.4351E11	100.0		83.4	2.0-	3.4

Table 3.3 Dynamic behavior of DO loops in subroutine PCON

vectorize - loop list	PCON	do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
isn		521	do	v	4941050	.2014E10	62.6	.5238E10	66.1	5	100.0	1.3- 3.9
00000089-00000093	510	do	v	988210	.5169E09	16.1	.1344E10	17.0	5	100.0	1.3- 3.9	
00000078-00000084	520	do	s	988210	.3113E09	9.7	.3113E09	3.9	5	0.0	1.0-	
00000086-00000097	310	do	s	988210	.1235E09	3.8	.1235E09	1.6	5	0.0	1.0-	
00000067-00000069	130	do	v	46504	.72975508	2.3	.1067E09	1.3	85	33.3	1.5-	
00000053-00000055	10	do	v	988210	.62713327	1.9	.1631E09	2.1	5	100.0	1.3- 3.9	
00000031-00000031	500	do	s	11626	.37551980	1.2	.37551980	0.5	85	0.0	1.0-	
00000075-00000099	200	do	v	988210	.25845492	0.8	.67198280	0.8	4	100.0	1.3- 3.9	
00000060-00000060	125	do	v	186016	.22703491	0.7	.4427E09	5.6	85	100.0	15.6- 24.7	
00000050-00000050	300	do	s	11626	.988210	0.3	.988210	0.1	85	0.0	1.0-	
00000065-00000070	200	do	v	11626	.5929260	0.2	.5929260	0.1	85	0.0	1.0-	
00000059-00000060	10	do	s	11626	.4941050	0.2	.4941050	0.1	85	0.0	1.0-	
00000030-00000031	120	do	s	46504	.2929752	0.1	.2929752	0.0	5	0.0	1.0-	
00000047-00000051	610	do	v	11626	.2027097	0.1	.39528400	0.5	85	100.0	15.6- 24.7	
000000106-00000114	110	do	v	46504	.1418968	0.0	.27669880	0.3	85	100.0	15.6- 24.7	
00000045-00000045	100	do	s	11626	.837072	0.0	.837072	0.0	4	0.0	1.0-	
00000044-00000056	total	1			11626	.825446	0.0	.825446	0.0	1	0.0	1.0-
00000001-00000118	20	do	s	0	0	0	0	0	0	0	0	0
00000034-00000035	20	do	v	0	0	0	0	0	0	0	0	0
00000035-00000035	20	do	v	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Table 3.4 Dynamic behavior of DO loops in subroutine SOLVE

vectorize - loop list	SOLVE	do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
isn		130	do	s	1613095	.6363E09	37.6	.6363E09	27.4	27	0.0	1.0- 1.0
00000025-00000028	140	do	s	986425	.4632E09	27.4	.4632E09	20.0	27	0.0	1.0- 1.0	
00000017-00000029	240	do	s	986425	.3406E09	20.1	.3406E09	14.7	27	0.0	1.0- 1.0	
00000053-00000056	220	do	v	986425	.90079126	5.3	.4664E09	20.1	27	89.3	4.5- 5.7	
00000039-00000044	110	do	v	963215	.75500121	4.5	.3266E09	14.1	27	85.1	3.9- 4.7	
00000012-00000014	150	do	v	11605	.41975285	2.5	.41975285	1.8	85	0.0	1.0-	
00000008-00000030	230	do	s	11605	.33143880	2.0	.33143880	1.4	85	0.0	1.0-	
00000035-00000045	250	do	s	11605	.10850675	0.6	.10850675	0.5	85	0.0	1.0-	
00000051-00000057	total	1			11605	.371360	0.0	.371360	0.0	1	0.0	1.0-

Table 3.5 Dynamic behavior of DO loops in subroutine SOR

vectorize - loop list		SOR										
isn	do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	
0000030-00000045	2200	do	S	60721	.3364E09	29.7	.3364E09	29.7	85	0.0	1.0-	1.0
0000015-00000028	2100	do	S	60721	.2632E09	23.2	.2632E09	23.2	85	0.0	1.0-	1.0
0000017-00000020	2101	do	V	5161285	.1322E09	11.7	.1146E09	10.1	1	99.8	0.7-	1.3
0000032-00000035	2201	do	V	5161285	.1322E09	11.7	.1146E09	10.1	1	99.8	0.7-	1.3
0000022-00000025	2102	do	V	5161285	.1316E09	11.6	.1141E09	10.1	1	99.9	0.7-	1.3
0000037-00000040	2202	do	V	5161285	.1316E09	11.6	.1141E09	10.1	1	99.9	0.7-	1.3
0000009-00000009	1000	do	V	60721	.1852E69	0.2	.36128995	3.2	85	100.0	15.6-	24.7
0000051-00000051	3000	do	V	60721	.1852E69	0.2	.36128995	3.2	85	100.0	15.6-	24.7
0000001-00000054	total			60721	16394E67	0.1	16394E67	0.1	1	0.0	1.0-	1.0
0000013-00000047	2000	do		60721	13965E33	0.1	13965E33	0.1	1	0.0	1.0-	1.0

Table 3.6 Dynamic behavior of DO loops in subroutine CPMASS

vectorize - loop list		CPMASS										
isn	do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	
0000022-00000063	1000	do	S	46420	.2953E09	42.9	.2953E09	44.4	85	0.0	1.0-	1.0
0000039-00000043	1400	do	M	3806440	.1968E09	28.6	.1849E09	27.8	1	41.7	0.8-	1.1
0000032-00000036	1300	do	M	3806440	.1944E09	28.2	.1833E09	27.5	1	39.4	0.8-	1.1
0000001-00000066	total			46420	22745E80	0.3	22745E80	0.3	1	0.0	1.0-	1.0

Table 3.7 Dynamic behavior of statements in subroutine CPMASS (1/2)

```

vectorize - statement list -- CPMASS
      ex-count    true      s-cost v o c-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7
      000000001   46420    1810380   1810380   SUBROUTINE CPMASS (KNUM, FMAT, ANS, NCELL, NWIDTH, ICH,
      000000002           >          WOLD, RHOLD, RHNEW, RHU, RDN, QNEW, QS)
      000000003
      000000004
      000000005
      000000006
      000000007
      000000008
      000000009
      000000010
      000000011
      000000012
      000000013
      000000014
      000000015
      000000016
      000000017
      000000018
      000000019
      000000020
      000000021
      000000022
      000000023
      000000024
      000000025
      000000026
      000000027
      000000028
      000000029
      000000030
      000000031
      000000032
      000000033
      000000034
      000000035
      000000036

      C*      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
      PARAMETER (NSZ=200)
      COMMON /CRPCON/ NO2, NCO, NC02
      COMMON /PARINT/ TI, TF, DELT, CHI
      COMMON /POINTR/ IPL(NSZ), ICP(NSZ), ICM(NSZ), IJP(NSZ),
      >          IJM(NSZ)
      COMMON /CELLJN/ NRVOI(NSZ), CLN(NSZ), CD(NSZ), CTHE(NSZ),
      >          NJL(NSZ), NJR(NSZ), NSI(NSZ), DSI(NSZ), ICEL(NSZ),
      >          DST(NSZ), XJ(NSZ), XC(NSZ), DJ(NSZ), LB(9), RAT(NSZ),
      >          GV(NSZ), AL(NSZ), COSR(NSZ), COSL(NSZ)
      DIMENSION WOLD(1), RHOLD(1), RHNEW(1),
      >          RHU(1), RDN(1), QNEW(1), QS(1), ICH(1)
      >          REAL*8 ANS(NCELL), FMAT(NCELL, 2*NWIDTH+1)

      C*      CALL ZERO(FMAT, ANS, NWIDTH, NCELL)
      C*      NWP = NWIDTH + 1
      DO 1000 I = 1, NCELL
      ANS(I) = VCEL(I)*WOLD(I)*RHOLD(I)+VCEL(I)*DELT*QNEW(I)
      FMAT(I, NWP) = VCEL(I)*RHNEW(I)
      IF (ICH(NSI(I)).NE.0) THEN
      IF (KNUM.EQ.NO2.OR.KNUM.EQ. NCO) THEN
      FMAT(I, NWP) = FMAT(I, NWP) - VCEL(I)*DELT*QS(I)
      ENDIF
      ENDIF
      IF (ICEL(I).EQ.0) THEN
      DO 1300 L = IPR(I), IPR(I+1)-1
      NWP = NWP+ICP(L)-1
      JP = IJP(L)
      FMAT(I, NWP) = -MAX(-RHU(JP), RDN(JP))-0.5*RHU(JP), 0, 0)
      FMAT(I, NWP) = FMAT(I, NWP)+RHU(JP)
      CONTINUE
      1300

```

Table 3.7 Dynamic behavior of statements in subroutine CPMASS (2/2)

```

00000037      3806440    41870840  M   DO 1400 L = IPL(I),IPL(I+1)-1
00000038      3852860    17782431  V   NWPM = NWP+ICM(L)-I
00000039      3852860    15411440  V   JM = IJM(L)
00000040      3852860    8891215   V   FMAT(I,NWPM) = -MAX(RHU(JM),RDN(JM)+0.5*RHU(JM),0.0)
00000041      3852860    74686209  M   FMAT(I,NWPM) = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPM)-RHU(JM)
00000042      3852860    73204340  S   CONTINUE
00000043      3852860    22228038  V   1400
00000044      139260    66.7     1114080 V   ELSEIF (ICEL(I).EQ.-1.OR.ICEL(I).EQ.1) THEN
00000045      92840     464200  M   C*BREAK POINT
00000046      92840     557040  M   FMAT(I,NWP) = 1.0
00000047      92840     185680  V   ANS(I) = WOLD(I)
00000048      46420     0.0      0     V   ELSEIF (ICEL(I).EQ.-2) THEN
00000049      0         0       0     V   C*CLOSED END (PLUS)
00000050      0         0       0     V   IPR1 = IPR(I)
00000051      0         0       0     V   JP = IJP(IPRI)
00000052      0         0       0     S   NWPP = NWP + 1
00000053      0         0       0     M   FMAT(I,NWPP) = -MAX(-RHU(JP),RDN(JP)-0.5*RHU(JP),0.0)
00000054      0         0       0     M   FMAT(I,NWP) = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPP)+RHU(JP)
00000055      46420    100.0    185680 V   ELSEIF (ICEL(I).EQ. 2) THEN
00000056      0         0       0     V   C*CLOSED END (MINUS)
00000057      46420     92840  V   IPLI = IPL(I)
00000058      46420     92840  V   JM = IJM(IPLI)
00000059      46420     46420  S   NWP = NWP - 1
00000060      46420     8355560 M   FMAT(I,NWPM) = -MAX(RHU(JM),RDN(JM)+0.5*RHU(JM),0.0)
00000061      46420     881980 M   FMAT(I,NWP) = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPM)-RHU(JM)
00000062      3945700   3945700 0     ENDIF
00000063      3945700   11837100 V   1000 CONTINUE
00000064      0         0       0     V   C*
00000065      46420     92840  0   RETURN
00000066      46420     92840  0   END

```

Table 3.8 Dynamic behavior of DO loops in subroutine SET1

vectorize - loop list			SET1		
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%
00000025-000000034	210	do	1023088	.1127E09	34.6
000000086-000000092	400	do	23231	.1047E09	32.1
000000088-000000088	410	do	1974635	.39644595	12.2
000000090-000000090	420	do	1974635	.39188910	12.0
000000022-000000051	200	do	11626	.12337869	3.8
000000080-000000083	300	do	23231	.11899037	3.7
000000095-00000113	500	do	23231	.4562977	1.4
00000001-00000116	total	v	23231	.615737	0.2
00000054-00000074	250	do	v	0	0.0
00000057-00000066	260	do	v	0	0.0

Table 3.9 Dynamic behavior of DO loops in subroutine STEP

vectorize - loop list			STEP		
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%
00000131-00000133	365	do	986425	.59185500	34.0
00000169-00000171	600	do	v	.57667923	33.1
00000120-00000122	310	do	v	.13611094	7.8
00000128-00000137	360	do	v	.8641857	5.0
00000058-00000058	110	do	v	.8114821	4.7
00000114-00000116	308	do	v	.7513749	4.3
00000168-00000171	600	do	s	.5918550	3.4
00000091-00000097	260	do	v	.2836626	1.6
00000214-00000219	800	do	s	.2444740	1.4
00000106-00000123	300	do	v	.11605	1.456212
00000047-00000180	8888	do	v	.2510	1.415913
00000069-00000074	200	do	v	.11605	1.331302
00000054-00000054	100	do	v	.11605	1.163476
00000082-00000082	250	do	v	.11605	1.163476
00000076-00000076	220	do	v	.11605	628455
00000064-00000064	120	do	v	.11605	354101
00000163-00000163	510	do	v	.11605	354101
00000001-00000222	total	v	2510	173544	0.1
00000153-00000153	410	do	v	2696	164525

Table 3.10 Dynamic behavior of DO loops in subroutine MXMASS

vectorize - loop list		MXMASS									
isn	do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-length	v-rate	v-effect
00000028-000000033	1200	do	M	951610	55570096	37.4	51050395	36.5	1	57.5	0.8- 1.2
00000021-000000026	1100	do	M	951610	53990031	36.3	49715820	35.5	1	55.9	0.8- 1.1
00000018-000000051	1000	do	S	11605	38888355	26.1	38888355	27.8	85	0.0	1.0- 1.0
00000001-000000054	total			11605	278520	0.2	278520	0.2	1	0.0	1.0- 1.0

Table 3.11 Dynamic behavior of DO loops in subroutine PRESMD

vectorize - loop list		PRESMD									
isn	do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-length	v-rate	v-effect
00000016-000000038	1000	do	S	11605	38366130	47.3	38366130	50.9	85	0.0	1.0- 1.0
00000023-000000025	1200	do	V	951610	22228038	27.4	19264300	25.6	1	100.0	0.7- 1.3
00000019-000000021	1100	do	V	951610	20246262	25.0	17546760	23.3	1	100.0	0.7- 1.3
00000001-000000041	total			11605	208890	0.3	208890	0.3	1	0.0	1.0- 1.0

Table 3.12 Dynamic behavior of tuned FLOWGR(TAKEDA)

vectorize - total	list	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
name	ex-count								
SQR	104795	.1876E10	29.7	.1994E10	4.9	2	6.3	1.1-	1.1
SOLVE	20412	.1630E10	25.8	.4080E10	9.9	27	66.4	2.4-	2.6
PCON	20433	.9189E09	14.6	.1527E11	37.2	71	99.1	13.7-	20.2
DIFFSN	326928	.5030E09	8.0	.8913E10	21.7	43	99.5	14.5-	21.9
ZERO	104795	.3099E09	4.9	.5465E10	13.3	83	99.4	14.4-	21.8
SET1	20433	.2722E09	4.3	.1282E10	3.1	13	97.1	2.7-	6.5
>SET1E	20412	-	-	-	-	-	-	-	-
MAXMASS	20412	.2461E09	3.9	.2461E09	0.6	2	0.0	1.0-	1.0
STEP	2510	.2041E09	3.2	.1785E10	4.3	62	97.5	5.6-	11.2
PRESMD	20412	.1326E09	2.1	.1326E09	0.3	2	0.0	1.0-	1.0
CPMASS	81648	.1033E09	1.6	.1201E10	2.9	30	96.3	10.2-	13.2
ENERGY	2735	.3096E8370	0.5	.3862E3670	0.1	2	47.3	1.1-	1.4
DEVMAX	125207	.2143E5589	0.3	.2268E09	0.6	43	95.4	9.4-	11.9
TWX	428570	.1971E4220	0.3	.1971E4220	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
VELOC	20412	.1270E974	0.2	.2405E09	0.6	45	99.8	15.2-	23.8
NEWOLD	2500	.1255E2949	0.2	.3791E7500	0.1	7	97.1	1.6-	4.3
REACT	20433	.9739E064	0.2	.1177E09	0.3	43	96.7	10.5-	13.8
TIMELP	1	.3792E788	0.1	.3792E788	0.0	44	0.0	1.0-	1.0
DENSITY	23147	.2768E737	0.0	.4756E7085	0.1	43	99.3	14.1-	21.1
SETO	1	.2090E70	0.0	.5471E37	0.0	6	90.8	1.5-	3.5
>SECTOR	20	-	-	-	-	-	-	-	-
OUT3	11	81402	0.0	129734	0.0	6	60.5	1.2-	1.8
READWT	1	74677	0.0	102627	0.0	6	58.8	1.0-	1.6
OUT4	11	65129	0.0	73244	0.0	52	11.7	1.1-	1.1
NETWRK	1	31032	0.0	131902	0.0	11	85.8	3.8-	4.7
ROUT4	11	23496	0.0	23496	0.0	44	0.0	1.0-	1.0
DATAIN	1	7681	0.0	7681	0.0	32	0.0	1.0-	1.0
INPUT	1	2285	0.0	2795	0.0	6	30.6	1.1-	1.3
SEE	10	1210	0.0	1210	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
QUAD	2	863	0.0	5432	0.0	10	99.4	3.8-	8.7
SUMARY	1	142	0.0	142	0.0	10	0.0	1.0-	1.0
MAIN	1	44	0.0	44	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
RESTRT	1	27	0.0	27	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
BLOCDT	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OUT2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OUT5	0	0	0	0	0	0	0	0	0
SHEAT	0	0	0	0	0	0	0	0	0
SCOND	0	0	0	0	0	0	0	0	0
RIN4	0	0	0	0	0	0	0	0	0
STEP2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
(total)	-	.6310E10	100.0	.4111E11	100.0	-	90.2	5.8-	7.1

Table 3.13 Dynamic behavior of tuned FLOWGR(TAKEDAM)

vectorize - total	list	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
name	ex-count								
SQR	119500	.2140E10	28.9	.2275E10	4.6	2	6.3	1.1-	0
SOLVE	23900	.1908E10	25.7	.4777E10	9.7	27	66.4	2.4-	2.6
PCON	23918	.1074E10	14.5	.1785E11	36.2	71	99.1	13.7-	20.2
DIFFSN	382688	.5888E09	7.9	.1043E11	21.2	43	99.5	14.5-	21.9
ZERO	119500	.3534E09	4.8	.6232E10	12.6	83	99.4	14.4-	21.8
SET1	23918	.2906E09	3.9	.1310E10	2.7	13	98.2	2.5-	6.4
>SET1F	23900								
MMASS	23900	.2882E09	3.9	.2882E09	0.6	2	0.0	1.0-	1.0
STEP2	10008	.1901E09	2.6	.1875E10	3.8	62	98.0	6.3-	12.7
PRESMD	23900	.1553E09	2.1	.1553E09	0.3	2	0.0	1.0-	1.0
CPMASS	95600	.1210E09	1.6	.1406E10	2.9	30	96.3	10.2-	13.2
DENSTY	874580	.1046E09	1.4	.1797E10	3.6	43	99.3	14.1-	21.1
TWX	1702975	.7833E6850	1.1	.7833E6850	0.2	1	0.0	1.0-	1.0
NEWOLD	10000	.5021E1795	0.7	.1517E09	0.3	7	97.1	1.6-	4.3
TIMELP	1	.24539858	0.3	.24539858	0.0	44	0.0	1.0-	1.0
DEVMAX	143400	.24054112	0.3	.2680E09	0.5	43	95.9	9.8-	12.6
VELOC	23900	.14871315	0.2	.2816E09	0.6	45	99.8	15.2-	23.8
REACT	23918	.10117535	0.1	.1128E09	0.2	43	95.9	9.8-	12.6
SETO	1	.186012	0.0	.483117	0.0	6	90.6	1.5-	3.5
>SETOR	17								
OUT3	11	79963	0.0	125994	0.0	6	59.4	1.2-	1.8
READWT	1	71125	0.0	94811	0.0	6	56.4	1.0-	1.5
OUT4	11	65148	0.0	73064	0.0	52	11.4	1.1-	1.1
NETWK	1	31032	0.0	131902	0.0	11	85.8	3.8-	4.7
ROUT4	11	25366	0.0	25386	0.0	44	0.0	1.0-	1.0
DATAIN	1	7681	0.0	7681	0.0	32	0.0	1.0-	1.0
INPUT	1	2286	0.0	2796	0.0	6	30.5	1.1-	1.3
SEE	10	1210	0.0	1210	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
QUAD	2	863	0.0	5432	0.0	10	99.4	3.8-	8.7
SUMMARY	1	142	0.0	142	0.0	10	0.0	1.0-	1.0
MAIN	1	37	0.0	37	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
RESTRT	1	27	0.0	27	0.0	1	0.0	1.0-	1.0
BLOCDT	0	0	0	0	0	0	0	0	0
ENERGY	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OUT2	0	0	0	0	0	0	0	0	0
OUT5	0	0	0	0	0	0	0	0	0
SHEAT	0	0	0	0	0	0	0	0	0
SCOND	0	0	0	0	0	0	0	0	0
RINA	0	0	0	0	0	0	0	0	0
STEP	0	0	0	0	0	0	0	0	0
(total)	—	.7418E10	100.0	.4932E11	100.0	—	90.5	5.9-	7.3

Table 3.14 Measured results of processing time

入力データ	M780	VPP500 (オリジナル版)	VP500 (ベクトル化版)
TAKEDA	900 sec	477 sec	111 sec
TAKEDAM	1091 sec	562 sec	132 sec

ENERGY, NEWOLD, OUT5, SETO, SET1, STEP, STEP2, TIMELP の各ルーチンにおいて
 COMMON /VALNEW/ TMNEW, TNEW(NSZ), VNEW(NSZ),

QNEW(NSZ,8),FCOFN(NSZ),CNEW(NSZ),QS(NSZ,7)
 ↑
 変更前

↓

COMMON /VALNEW/ TMNEW, TNEW(NSZ), VNEW(NSZ),

. . . .

QNEW(NSZ,8),FCOFN(NSZ),CNEW(NSZ),QS(NSZ,8)
 ↑
 変更後

Fig. 3.1 Modification of common block VALNEW

```

C. VPP-modify      ← 追加した初期化処理
  NMAX=1
C. VPP-modify
  VMAX = 0.0D0
  DO 4000 N = 1,NJUNC
    IF(ABS(V(N)).GT.VMAX) THEN
      VMAX = ABS(V(N))
      NMAX = N
    ENDIF
  4000 CONTINUE
  .
  .

```

Fig. 3.2 Modification of variable "NMAX" in subroutine OUT4

STEP, STEP2 の各ルーチンの先頭において

```

PARAMETER(NSZ=200,RLXT=0.1)
C. VPP-modify
  PARAMETER(NSZZ=NSZ*8)
C. VPP-modify
  .
  .
C. VPP-modify
  data qtmp /NSZZ*0.0d0/
  data stmp /NSZZ*0.0d0/
C. VPP-modify
  .
  .

```

Fig. 3.3 Modification of two variables "qtmp" and "stmp" in subroutine STEP and STEP2

```

1 m      DO 500 I = 1,NCELL
2 m      ETA(I) = 0.0
3 s      FLAM(I)= 0.0
4 v      DO 510 K = 1,NGAS
5 v          FMA   = FMS(KINDG(K))
6 v          EKA   = EK(KINDG(K))
7 v          SGA   = SIGMA(KINDG(K))
8 v          TASA  = T(I)/EKA
9 v          OMVA = AE/TASA**BE+CE*EXP(-DE*TASA)+EE*EXP(-FE*TASA)
10 v         ETAA(K)= 26.69E-7*SQRT(FMA*T(I))/SGA**2/OMVA
11 v 510  CONTINUE
12 s      DO 520 K = 1,NGAS
13 s          FMA   = FMS(KINDG(K))
14 s          DENOM = 0.0D0
15 v      DO 521 KK = 1,NGAS
16 v          FMB=FMS(KINDG(KK))
17 v          PAB  = (1.0+(ETAA(K)/ETAA(KK))**0.5*(FMB/FMA)**0.25)**2
18 v          >    / SQRT(8.0*(1.0+(FMA/FMB)))
19 v          DENOM = DENOM + X(I,KK)*PAB
20 v 521  CONTINUE
21 m      ETA(I) = ETA(I)+X(I,K)*ETAA(K)/DENOM
22 s      FLAMA = SCOND(FMA,CPX(I,K),R,ETAA(K),KINDG(K))
23 m      FLAM(I)= FLAM(I) + X(I,K)*FLAMA/DENOM
24 v 520  CONTINUE
25 m      ALPHA(I)= FNU(NSI(I))*FLAM(I)/CD(I)
26 v 500 CONTINUE

```

Fig. 3.4 DO 500 loop in subroutine PCON

```

C.ORG DIMENSION CPX(NSZ,8),ETAA(8),DAB(NSZ),FCOF(NSZ)
C.VPP
      DIMENSION CPX(NSZ,8),ETAAV(NSZ,8),DAB(NSZ),FCOF(NSZ) ← 新たな
C.VPP                                         配列宣言
1      DO 500 I = 1,NCELL
2          DO 510 K = 1,NGAS
3              FMA    = FMS(KINDG(K))
4              EKA    = EK(KINDG(K))
5              SGA    = SIGMA(KINDG(K))
6              TASA   = T(I)/EKA
7              OMVA   = AE/TASA**BE+CE*EXP(-DE*TASA)+EE*EXP(-FE*TASA)
8              ETAAV(I,K)= 26.69E-7*SQRT(FMA*T(I))/SGA**2/OMVA
9      510  CONTINUE
10     500 CONTINUE
11     DO 501 I=1,NCELL
12         ETA(I) = 0.0
13         FLAM(I)= 0.0
14         DO 520 K = 1,NGAS
15             FMA    = FMS(KINDG(K))
16             DENOM = 0.0D0
17             DO 521 KK = 1,NGAS
18                 FMB=FMS(KINDG(KK))
19                 PAB = (1.0+(ETAAV(I,K)/ETAAV(I,KK))**0.5*(FMB/FMA)**0.25)**2
20                 >           / SQRT(8.0*(1.0+(FMA/FMB)))
21                 DENOM = DENOM + X(I,KK)*PAB
22     521  CONTINUE
23         ETA(I) = ETA(I)+X(I,K)*ETAAV(I,K)/DENOM
24         FLAMA = SCOND(FMA,CPX(I,K),R,ETAAV(I,K),KINDG(K))
25         FLAM(I)= FLAM(I) + X(I,K)*FLAMA/DENOM
26     520  CONTINUE
27         ALPHA(I)= FNU(NSI(I))*FLAM(I)/CD(I)
28     501 CONTINUE

```

Fig. 3.5 Division of DO 500 loop in Fig. 3.4

```

C.VPP
  REAL*8 FMAV(NSZ,8),DENOMV(NSZ,8)      ← 新たな配列宣言
C.VPP
1   DO 500 I = 1,NCELL
2     DO 510 K = 1,NGAS
3       FMA    = FMS(KINDG(K))
4       EKA    = EK(KINDG(K))
5       SGA    = SIGMA(KINDG(K))
6       TASA   = T(I)/EKA
7       OMVA   = AE/TASA**BE+CE*EXP(-DE*TASA)+EE*EXP(-FE*TASA)
8       ETAAV(I,K)= 26.69E-7*SQRT(FMA*T(I))/SGA**2/OMVA
9   510  CONTINUE
10  500 CONTINUE
12  DO 501 I=1,NCELL
13    DO 520 K = 1,NGAS
14      FMAV(I,K)  = FMS(KINDG(K))
15      DENOMV(I,K) = 0.0D0
16      DO 521 KK = 1,NGAS
17        FMB=FMS(KINDG(KK))
18        PAB = (1.0+(ETAAV(I,K)/ETAAV(I,KK))**0.5*
19      >(FMB/FMAV(I,K))**0.25)**2 / SQRT(8.0*(1.0+(FMAV(I,K)/FMB)))
20      DENOMV(I,K) = DENOMV(I,K) + X(I,KK)*PAB
21  521  CONTINUE
22  520  CONTINUE
23  501 CONTINUE
24  DO 502 I=1,NCELL
25    ETA(I) = 0.0
26    FLAM(I)= 0.0
27    DO 522 K=1,NGAS
28      ETA(I) = ETA(I)+X(I,K)*ETAAV(I,K)/DENOMV(I,K)
29      FLAMA = SCOND(FMAV(I,K),CPX(I,K),R,ETAAV(I,K),KINDG(K))
30      FLAM(I)= FLAM(I) + X(I,K)*FLAMA/DENOMV(I,K)
31  522  CONTINUE
32      ALPHA(I)= FNU(NSI(I))*FLAM(I)/CD(I)
33  502 CONTINUE

```

Fig. 3.6 Division of DO 501 loop in Fig. 3.5

```

1   DO 500 I = 1,NCELL
2   DO 510 K = 1,NGAS
3       FMA    = FMS(KINDG(K))
4       EKA    = EK(KINDG(K))
5       SGA    = SIGMA(KINDG(K))
6       TASA   = T(I)/EKA
7       OMVA   = AE/TASA**BE+CE*EXP(-DE*TASA)+EE*EXP(-FE*TASA)
8       ETAAV(I,K)= 26.69E-7*SQRT(FMA*T(I))/SGA**2/OMVA
9   510  CONTINUE
10  500 CONTINUE
12  DO 501 I=1,NCELL
13      DO 520 K = 1,NGAS
14          FMAV(I,K) = FMS(KINDG(K))
15          DENOMV(I,K) = 0.0D0
16  520  CONTINUE
17  501 CONTINUE
18  DO 503 I=1,NCELL
19      DO 523 K=1,NGAS
20          DO 521 KK = 1,NGAS
21              FMB=FMS(KINDG(KK))
22              PAB = (1.0+(ETAAV(I,K)/ETAAV(I,KK))**0.5*
23 >(FMB/FMAV(I,K))**0.25)**2 / SQRT(8.0*(1.0+(FMAV(I,K)/FMB)))
24              DENOMV(I,K) = DENOMV(I,K) + X(I,KK)*PAB
25  521  CONTINUE
26  523  CONTINUE
27  503 CONTINUE
28      DO 502 I=1,NCELL
29          ETA(I) = 0.0
30          FLAM(I)= 0.0
31          DO 522 K=1,NGAS
32              ETA(I) = ETA(I)+X(I,K)*ETAAV(I,K)/DENOMV(I,K)
33              FLAMA = SCOND(FMAV(I,K),CPX(I,K),R,ETAAV(I,K),KINDG(K))
34              FLAM(I)= FLAM(I) + X(I,K)*FLAMA/DENOMV(I,K)
35  522  CONTINUE
36          ALPHA(I)= FNU(NSI(I))*FLAM(I)/CD(I)
37  502 CONTINUE

```

Fig. 3.7 Division of DO 501 loop in Fig. 3.6

```

1      DO 500 I = 1,NCELL
2      DO 510 K = 1,NGAS
3          FMA    = FMS(KINDG(K))
4          EKA    = EK(KINDG(K))
5          SGA    = SIGMA(KINDG(K))
6          TASA   = T(I)/EKA
7          OMVA   = AE/TASA**BE+CE*EXP(-DE*TASA)+EE*EXP(-FE*TASA)
8          ETAAV(I,K)= 26.69E-7*SQRT(FMA*T(I))/SGA**2/OMVA
9      510 CONTINUE
10     500 CONTINUE
11     DO 501 I=1,NCELL
12         DO 520 K = 1,NGAS
13             FMAV(I,K)    = FMS(KINDG(K))
14             DENOMV(I,K)  = 0.0D0
15     520 CONTINUE
16     501 CONTINUE
17     DO 503 I=1,NCELL
18         DO 523 K=1,NGAS
19             DO 521 KK = 1,NGAS
20                 FMB=FMS(KINDG(KK))
21                 PAB = (1.0+(ETAAV(I,K)/ETAAV(I,KK))**0.5*
22 >(FMB/FMAV(I,K))**0.25)**2 / SQRT(8.0*(1.0+(FMAV(I,K)/FMB)))
23                 DENOMV(I,K) = DENOMV(I,K) + X(I,KK)*PAB
24     521 CONTINUE
25     523 CONTINUE
26     503 CONTINUE
27     DO 502 I=1,NCELL
28         ETA(I) = 0.0
29         FLAM(I)= 0.0
30     502 CONTINUE
31     DO 504 I=1,NCELL
32         DO 522 K=1,NGAS
33             ETA(I) = ETA(I)+X(I,K)*ETAAV(I,K)/DENOMV(I,K)
34             FLAMA = SCOND(FMAV(I,K),CPX(I,K),R,ETAAV(I,K),KINDG(K))
35             FLAM(I)= FLAM(I) + X(I,K)*FLAMA/DENOMV(I,K)
36     522 CONTINUE
37     ALPHA(I)= FNU(NSI(I))*FLAM(I)/CD(I)
38     504 CONTINUE

```

Fig. 3.8 Division of DO 502 loop in Fig. 3.7

```

1 DO 500 I = 1,NCELL
2   DO 510 K = 1,NGAS
3     FMA    = FMS(KINDG(K))
4     EKA    = EK(KINDG(K))
5     SGA    = SIGMA(KINDG(K))
6     TASA   = T(I)/EKA
7     OMVA   = AE/TASA**BE+CE*EXP(-DE*TASA)+EE*EXP(-FE*TASA)
8     ETAAV(I,K)= 26.69E-7*SQRT(FMA*T(I))/SGA**2/OMVA
9   510 CONTINUE
10 500 CONTINUE
11  DO 501 I=1,NCELL
12    DO 520 K = 1,NGAS
13      FMAV(I,K)    = FMS(KINDG(K))
14      DENOMV(I,K)  = 0.0D0
15  520 CONTINUE
16 501 CONTINUE
17  DO 503 I=1,NCELL
18    DO 523 K=1,NGAS
19      DO 521 KK = 1,NGAS
20        FMB=FMS(KINDG(KK))
21        PAB = (1.0+(ETAAV(I,K)/ETAAV(I,KK))**0.5*
22        >(FMB/FMAV(I,K))**0.25)**2 / SQRT(8.0*(1.0+(FMAV(I,K)/FMB)))
23        DENOMV(I,K) = DENOMV(I,K) + X(I,KK)*PAB
24  521 CONTINUE
25 523 CONTINUE
26 503 CONTINUE
27  DO 502 I=1,NCELL
28    ETA(I) = 0.0
29    FLAM(I)= 0.0
30 502 CONTINUE
31  DO 504 I=1,NCELL
32    DO 522 K=1,NGAS
33      ETA(I) = ETA(I)+X(I,K)*ETAAV(I,K)/DENOMV(I,K)
34      FLAMA = SCOND(FMAV(I,K),CPX(I,K),R,ETAAV(I,K),KINDG(K))
35      FLAM(I)= FLAM(I) + X(I,K)*FLAMA/DENOMV(I,K)
36  522 CONTINUE
37 504 CONTINUE
38  DO 505 I=1,NCELL
39    ALPHA(I)= FNU(NSI(I))*FLAM(I)/CD(I)
40 505 CONTINUE

```

Fig. 3.9 Division of DO 504 loop in Fig. 3.8

```

1 S      DO 510 K = 1,NGAS
2 V      DO 500 I = 1,NCELL
3 V          FMA     = FMS(KINDG(K))
4 V          EKA     = EK(KINDG(K))
5 V          SGA     = SIGMA(KINDG(K))
6 V          TASA    = T(I)/EKA
7 V          OMVA   = AE/TASA**BE+CE*EXP(-DE*TASA)+EE*EXP(-FE*TASA)
8 V          ETAAV(I,K)= 26.69E-7*SQRT(FMA*T(I))/SGA**2/OMVA
9 V      500 CONTINUE
10 S     510 CONTINUE
11 S     DO 520 K = 1,NGAS
12 V     DO 501 I=1,NCELL
13 V         FMAV(I,K)   = FMS(KINDG(K))
14 V         DENOMV(I,K) = 0.0D0
15 V     501 CONTINUE
16 S     520 CONTINUE
17 S     DO 523 K=1,NGAS
18 S     DO 521 KK = 1,NGAS
19 V     DO 503 I=1,NCELL
20 V         FMB=FMS(KINDG(KK))
21 V         PAB = (1.0+(ETAAV(I,K)/ETAAV(I,KK))**0.5*
22 >(FMB/FMAV(I,K)**0.25)**2 / SQRT(8.0*(1.0+(FMAV(I,K)/FMB)))
23 V         DENOMV(I,K) = DENOMV(I,K) + X(I,KK)*PAB
24 V     503 CONTINUE
25 S     521 CONTINUE
26 S     523 CONTINUE
27 V     DO 502 I=1,NCELL
28 V         ETA(I) = 0.0
29 V         FLAM(I)= 0.0
30 V     502 CONTINUE
31 S     DO 522 K=1,NGAS
32 V     DO 504 I=1,NCELL
33 V         ETA(I) = ETA(I)+X(I,K)*ETAAV(I,K)/DENOMV(I,K)
34 V         FLAMA = SCOND(FMAV(I,K),CPX(I,K),R,ETAAV(I,K),KINDG(K))
35 V         FLAM(I)= FLAM(I) + X(I,K)*FLAMA/DENOMV(I,K)
36 V     504 CONTINUE
37 S     522 CONTINUE
38 V     DO 505 I=1,NCELL
39 V         ALPHA(I)= FNU(NSI(I))*FLAM(I)/CD(I)
40 V     505 CONTINUE

```

Fig. 3.10 Tuned DO 500 loop in Fig. 3.4

```

1 S      DO 300 I = 1,NCELL
2 S          CP(I) = 0.0DO
3 S          DO 310 K = 1,NGAS
4 S              CPX(I,K) = SHEAT(T(I),KINDG(K))
5 V          CP(I) = CP(I) + X(I,K)*CPX(I,K)
6 V 310    CONTINUE
7 S 300 CONTINUE

```

Fig. 3.11 DO 300 loop in subroutine PCON

```

1      DO 300 I = 1,NCELL
2      CP(I) = 0.0DO
3 300 CONTINUE
4      DO 301 I=1,NCELL
5      DO 310 K = 1,NGAS
6          CPX(I,K) = SHEAT(T(I),KINDG(K))
7          CP(I) = CP(I) + X(I,K)*CPX(I,K)
8 310    CONTINUE
9 301 CONTINUE

```

Fig. 3.12 Division of DO 300 loop in Fig. 3.11

```

1 V      DO 300 I = 1,NCELL
2 V          CP(I) = 0.0DO
3 V 300 CONTINUE
4 S          DO 310 K = 1,NGAS
5 V          DO 301 I=1,NCELL
6 V              CPX(I,K) = SHEAT(T(I),KINDG(K))
7 V              CP(I) = CP(I) + X(I,K)*CPX(I,K)
8 V 301 CONTINUE
9 S 310    CONTINUE

```

Fig. 3.13 Tuned DO 300 loop in Fig. 3.11

```

1      IF(IMOL.EQ.0) THEN
2 S       DO 10 I = 1,NCELL
3 V       DO 10 K = 1,NGAS
4 V   10     X(I,K) = W(I,K)*FM(I)/FMS(KINDG(K))
5 ELSE
6 S       DO 20 I = 1,NCELL
7 V       DO 20 K = 1,NGAS
8 V   20     W(I,K) = X(I,K)*FMS(KINDG(K))/FM(I)
9 ENDIF

```

Fig. 3.14 DO 10 and DO 20 loops in subroutine PCON

```

1      IF(IMOL.EQ.0) THEN
2 S       DO 10 K = 1,NGAS
3 V       DO 10 I = 1,NCELL
4 V   10     X(I,K) = W(I,K)*FM(I)/FMS(KINDG(K))
5 ELSE
6 S       DO 20 K = 1,NGAS
7 V       DO 20 I = 1,NCELL
8 V   20     W(I,K) = X(I,K)*FMS(KINDG(K))/FM(I)
9 ENDIF

```

Fig. 3.15 Tuned DO 10 and DO 20 loops in subroutine PCON

```

1 S       DO 200 I =1,NCELL
2 V       DO 200 K = 1,NGAS-1
3 V   200     DIF(I,K) = FCOF(I)*DIF(I,K)

```

Fig. 3.16 DO 200 loop in subroutine PCON

```

1 S       DO 200 K = 1,NGAS-1
2 V       DO 200 I =1,NCELL
3 V   200     DIF(I,K) = FCOF(I)*DIF(I,K)

```

Fig. 3.17 Tuned DO 200 loop in subroutine PCON

```

1      FUNCTION SHEAT(TT,II)
2  C*
3  C*SPECIFIC HEATS FOR CONSTANT PRESSURE IN UNIT OF JOULE/KG/KELVIN
4  C*   KIND=1:AR, =2:HE, =3:AIR, =4,CO, =5:CO2, =6:N2, =7:O2
5  C*
6      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
7      DATA AN2,BN2,CN2,DN2
8      > /0.938314D+3,2.95732D-1,-7.31507D-5,5.81796D-9/
9      DATA A02,B02,CO2,D02
10     > /0.817026D+3,3.87124D-1,-1.41476D-4,1.99678D-8/
11     DATA AAIR,BAIR,CAIR,DAIR
12     > /0.905673D+3,3.10391D-1,-8.59483D-5,8.56212D-9/
13     DATA ACO,BCO,CCO,DCO
14     > /0.929207D+3,3.43656D-1,-1.00711D-4,1.01493D-8/
15     DATA AC02,BC02,CC02,DC02
16     > /0.619542D+3,9.43157D-1,-3.92290D-4,5.44078D-8/
17  C*
18      IF(II.EQ.1) THEN
19          SHEAT = 0.5218E+3
20      ELSEIF(II.EQ.2) THEN
21          SHEAT = 5.193E+3
22      ELSEIF(II.EQ.3) THEN
23          SHEAT = AAIR+BAIR*TT+CAIR*TT**2+DAIR*TT**3
24      ELSEIF(II.EQ.4) THEN
25          SHEAT = ACO+BCO*TT+CCO*TT**2+DCO*TT**3
26      ELSEIF(II.EQ.5) THEN
27          SHEAT = AC02+BC02*TT+CC02*TT**2+DC02*TT**3
28      ELSEIF(II.EQ.6) THEN
29          SHEAT = AN2+BN2*TT+CN2*TT**2+DN2*TT**3
30      ELSEIF(II.EQ.7) THEN
31          SHEAT = A02+B02*TT+CO2*TT**2+D02*TT**3
32      ENDIF
33  C*
34      RETURN
35  END

```

Fig. 3.18 Function SHEAT

```

IF(II.EQ.1) THEN
    SHEAT = 0.5218E+3
ELSEIF(II.EQ.2) THEN
    SHEAT = 5.193E+3
ELSEIF(II.EQ.3) THEN
    SHEAT = AAIR+BAIR*TT+CAIR*TT**2+DAIR*TT**3
ELSEIF(II.EQ.4) THEN
    SHEAT = ACO+BCO*TT+CCO*TT**2+DCO*TT**3
ELSEIF(II.EQ.5) THEN
    SHEAT = AC02+BC02*TT+CC02*TT**2+DC02*TT**3
ELSEIF(II.EQ.6) THEN
    SHEAT = AN2+BN2*TT+CN2*TT**2+DN2*TT**3
ELSEIF(II.EQ.7) THEN
    SHEAT = A02+B02*TT+CO2*TT**2+D02*TT**3
C.VPP-modify
    ELSE
        SHEAT = 0.0D0
C.VPP-modify
    ENDIF

```

Fig. 3.19 Modification of IF-BLOCK in function SHEAT

```

1      SUBROUTINE SOLVE(NEQ,NCOLS,MBAND,A,B,IPUNT)
2      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
3      REAL*8 A(NEQ,NCOLS),B(NEQ)
4*
5      IPUNT = 0
6      KMIN = MBAND + 1
7      DO 150 N = 1,NEQ
8          IF(A(N,MBAND).EQ.0.0D0) GO TO 999
9          IF(A(N,MBAND).EQ.1.0D0) GO TO 120
10         C = 1.0D0 / A(N,MBAND)
11         V      DO 110 K = KMIN, NCOLS
12         V          IF(A(N,K).EQ.0.0D0) GO TO 110
13         V          A(N,K) = C*A(N,K)
14         V      110 CONTINUE
15         V      120 CONTINUE
16         S      DO 140 L = 2,MBAND
17         V          JJ = MBAND - L + 1
18         V          I = N + L - 1
19         V          IF(I.GT.NEQ) GO TO 140
20         V          IF( A(I,JJ).EQ.0.0D0) GO TO 140
21         V          KI = MBAND + 2 - L
22         V          KF = NCOLS + 1 - L
23         V          J = MBAND
24         S          DO 130 K = KI, KF
25         V              J = J + 1
26         V              IF( A(N,J).EQ.0.0D0) GO TO 130
27         M          A(I,K) = A(I,K) - A(I,JJ)*A(N,J)
28         V      130 CONTINUE
29         V      140 CONTINUE
30      150 CONTINUE
31      C*
32      C*REDUCTION OF A LOAD VECTOR B
33      C*
34      S      DO 230 N = 1, NEQ
35      V          IF( A(N,MBAND).EQ.1.0D0) GO TO 210
36      M          B(N) = B(N) / A(N,MBAND)
37      210 CONTINUE
38      V      DO 220 L = 2, MBAND
39      V          JJ = MBAND - L + 1
40      V          I = N + L - 1
41      V          IF(I.GT.NEQ) GO TO 220
42      V          IF( A(I,JJ).EQ.0.0D0) GO TO 220
43      V          B(I) = B(I) - A(I,JJ)*B(N)
44      V      220 CONTINUE
45      V      230 CONTINUE
46      C*
47      C*BACK-SUBSTITUTION
48      C*
49      S      LL = MBAND + 1
50      S      DO 250 M = 1, NEQ
51      S          N = NEQ + 1 - M
52      S          DO 240 L = LL,NCOLS
53      V          IF( A(N,L).EQ.0.0D0) GO TO 240
54      V          K = N + L - MBAND
55      S          B(N) = B(N) - A(N,L)*B(K)
56      V      240 CONTINUE
57      S      250 CONTINUE
58      RETURN
59      C*
60      999 CONTINUE
61      IPUNT = 1
62      WRITE(6,*) '+++++ SET OF EQUATIONS ARE SINGULAR +++++'
63      C*
64      STOP
65      END

```

Fig. 3.20 Subroutine SOLVE

```
*vocl loop,novrec(A)
V      DO 130 K = KI, KF
V          J = J + 1
V          IF( A(N,J).EQ.0.0D0) GO TO 130
V          A(I,K) = A(I,K) - A(I,JJ)*A(N,J)
V 130    CONTINUE
```

Fig. 3.21 Tuned DO 130 loop in subroutine SOLVE

```
*vocl loop,novrec(B)
V      DO 240 L = LL, NCOLS
V          IF( A(N,L).EQ.0.0D0) GO TO 240
V          K = N + L - MBAND
V          B(N) = B(N) - A(N,L)*B(K)
V 240    CONTINUE
```

Fig. 3.22 Tuned DO 240 loop in subroutine SOLVE

```

SUBROUTINE SOR(FMAT,ANS,PRE,NCELL,NWIDTH)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER(NSZ=200,ITER=100,OMEGA=1.0D0,EPS=1.0D-3)
COMMON /POINTR/ IPL(NSZ),IPR(NSZ),ICP(NSZ),ICM(NSZ),IJP(NSZ),
>                 IJM(NSZ)
REAL*8 ANS(NCELL),PRE(NCELL),TMP(NSZ),FMAT(NCELL,2*NWIDTH+1)
C*
V      DO 1000 N =1,NCELL
V 1000  TMP(N) = PRE(N)
C*
NWP = NWIDTH + 1
DO 2000 LOOP = 1,ITER,1
    DEVMAX = 0.0
S      DO 2100 I = 1, NCELL
S      WORK = ANS(I)
V      DO 2101 L = IPR(I),IPR(I+1)-1
V      IF(ICP(L).EQ.0)GO TO 2101
V      IP = ICP(L)+NWP-I
V      WORK = WORK-FMAT(I,IP)*TMP(ICP(L))
V 2101  CONTINUE
V      DO 2102 L = IPL(I),IPL(I+1)-1
V      IF(ICM(L).EQ.0)GO TO 2102
V      IM = ICM(L)+NWP-I
V      WORK = WORK-FMAT(I,IM)*TMP(ICM(L))
V 2102  CONTINUE
S      WORK = WORK/FMAT(I,NWP)
S      TMP(I) = OMEGA*(WORK-TMP(I))+TMP(I)
S 2100  CONTINUE
S      DO 2200 I = NCELL,1,-1
S      WORK = ANS(I)
V      DO 2201 L = IPR(I),IPR(I+1)-1
V      IF(ICP(L).EQ.0)GO TO 2201
V      IP = ICP(L)+NWP-I
V      WORK = WORK-FMAT(I,IP)*TMP(ICP(L))
V 2201  CONTINUE
V      DO 2202 L = IPL(I),IPL(I+1)-1
V      IF(ICM(L).EQ.0)GO TO 2202
V      IM = ICM(L)+NWP-I
V      WORK = WORK-FMAT(I,IM)*TMP(ICM(L))
V 2202  CONTINUE
S      WORK = WORK/FMAT(I,NWP)
S      TMP(I) = OMEGA*(WORK-TMP(I))+TMP(I)
S      IF(ABS(WORK).LE.1.0D-50)GO TO 2200
M      DEVMAX = MAX(ABS(TMP(I)/WORK-1.0D0),DEVMAX)
V 2200  CONTINUE
IF(DEVMAX.LE.EPS) GO TO 2001
2000 CONTINUE
2001 CONTINUE
C*
V      DO 3000 N = 1,NCELL
V 3000  ANS(N) = TMP(N)
C*
      RETURN
END

```

Fig. 3.23 Subroutine SOR

```

SUBROUTINE SOR(FMAT,ANS,PRE,NCELL,NWIDTH)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
PARAMETER(NSZ=200,ITER=100,OMEGA=1.0D0,EPS=1.0D-3)
COMMON /POINTR/ IPL(NSZ),IPR(NSZ),ICP(NSZ),ICM(NSZ),IJP(NSZ),
> IJM(NSZ)
REAL*8 ANS(NCELL),PRE(NCELL),TMP(NSZ),FMAT(NCELL,2*NWIDTH+1)
C*
V   DO 1000 N =1,NCELL
V   1000 TMP(N) = PRE(N)
C*
      NWP = NWIDTH + 1
      DO 2000 LOOP = 1,ITER,1
         DEVMAX = 0.0
S   DO 2100 I = 1, NCELL
S   WORK = ANS(I)
*vocl loop,scalar           ← 指定
      DO 2101 L = IPR(I),IPR(I+1)-1
         IF(ICP(L).EQ.0)GO TO 2101
         IP = ICP(L)+NWP-I
         WORK = WORK-FMAT(I,IP)*TMP(ICP(L))
2101 CONTINUE
*vocl loop,scalar           ← 指定
      DO 2102 L = IPL(I),IPL(I+1)-1
         IF(ICM(L).EQ.0)GO TO 2102
         IM = ICM(L)+NWP-I
         WORK = WORK-FMAT(I,IM)*TMP(ICM(L))
2102 CONTINUE
S   WORK = WORK/FMAT(I,NWP)
S   TMP(I) = OMEGA*(WORK-TMP(I))+TMP(I)
S   2100 CONTINUE
S   DO 2200 I = NCELL,1,-1
S   WORK = ANS(I)
*vocl loop,scalar           ← 指定
      DO 2201 L = IPR(I),IPR(I+1)-1
         IF(ICP(L).EQ.0)GO TO 2201
         IP = ICP(L)+NWP-I
         WORK = WORK-FMAT(I,IP)*TMP(ICP(L))
2201 CONTINUE
*vocl loop,scalar           ← 指定
      DO 2202 L = IPL(I),IPL(I+1)-1
         IF(ICM(L).EQ.0)GO TO 2202
         IM = ICM(L)+NWP-I
         WORK = WORK-FMAT(I,IM)*TMP(ICM(L))
2202 CONTINUE
S   WORK = WORK/FMAT(I,NWP)
S   TMP(I) = OMEGA*(WORK-TMP(I))+TMP(I)
S   IF(ABS(WORK).LE.1.0D-50)GO TO 2200
M   DEVMAX = MAX(ABS(TMP(I)/WORK-1.0D0),DEVMAX)
V   2200 CONTINUE
      IF(DEVMAX.LE.EPS) GO TO 2001
2000 CONTINUE
2001 CONTINUE
C*
V   DO 3000 N = 1,NCELL
V   3000 ANS(N) = TMP(N)
C*
      RETURN
END

```

Fig. 3.24 Tuned subroutine SOR

```

1      SUBROUTINE CPMASS(KNUM,FMAT,ANS,NCELL,NWIDTH,ICH,
2      >          WOLD,RHOLD,RHNEW,RHU,RDN,QNEW,QS)
3      C*
4      IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
5      PARAMETER (NSZ=200)
6      COMMON /CRPCON/ NO2,NCO,NC02
7      COMMON /PARINT/ TI,TF,DELT,CHI
8      COMMON /POINTR/ IPL(NSZ),IPR(NSZ),ICP(NSZ),IJP(NSZ),
9      >          IJM(NSZ)
10     COMMON /CELJUN/ NRVOL(NSZ),NLVOL(NSZ),CLN(NSZ),CD(NSZ),CTHE(NSZ),
11     >          NJL(NSZ),NJR(NSZ),NSI(NSZ),DSI(NSZ),IJUN(NSZ),ICEL(NSZ),
12     >          DST(NSZ),XJ(NSZ),XC(NSZ),DJ(NSZ),VCEL(NSZ),LB(9),RAT(NSZ),
13     >          GV(NSZ),AL(NSZ),COSR(NSZ),COSL(NSZ)
14     DIMENSION      WOLD(1),RHOLD(1),RHNEW(1),
15     >          RHU(1),RDN(1),QNEW(1),QS(1),ICH(1)
16     REAL*8 ANS(NCELL),FMAT(NCELL,2*NWIDTH+1)
17     C*
18     CALL ZERO(FMAT,ANS,NWIDTH,NCELL)
19     C*
20     NWP = NWIDTH + 1
21     S      DO 1000 I = 1, NCELL
22     V      ANS(I) = VCEL(I)*WOLD(I)*RHOLD(I)+VCEL(I)*DELT*QNEW(I)
23     M      FMAT(I,NWP) = VCEL(I)*RHNEW(I)
24     V      IF(ICH(NSI(I)).NE.0)THEN
25     V          IF(KNUM.EQ.NO2.OR.KNUM.EQ.NCO)THEN
26     M          FMAT(I,NWP) = FMAT(I,NWP) - VCEL(I)*DELT*QS(I)
27     V          ENDIF
28     V      ENDIF
29     V      IF(ICEL(I).EQ.0) THEN
30     C*PLUS   DO 1300 L = IPR(I),IPR(I+1)-1
31     M          NWPP = NWP+ICP(L)-I
32     V          JP    = IJP(L)
33     V          FMAT(I,NWPP) = -MAX(-RHU(JP),RDN(JP)-0.5*RHU(JP),0.0)
34     M          FMAT(I,NWP) = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPP)+RHU(JP)
35     S      CONTINUE
36     V 1300
37     C*MINUS  DO 1400 L = IPL(I),IPL(I+1)-1
38     M          NWPM = NWP+ICM(L)-I
39     V          JM    = IJM(L)
40     V          FMAT(I,NWPM) = -MAX(RHU(JM),RDN(JM)+0.5*RHU(JM),0.0)
41     M          FMAT(I,NWP) = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPM)-RHU(JM)
42     S      CONTINUE
43     V 1400
44     V      ELSEIF(ICEL(I).EQ.-1.OR.ICEL(I).EQ.1) THEN
45     C*BREAK POINT
46     M          FMAT(I,NWP) = 1.0
47     V          ANS(I) = WOLD(I)
48     V      ELSEIF(ICEL(I).EQ.-2) THEN
49     C*CLOSED END (PLUS)
50     V          IPRI = IPR(I)
51     V          JP   = IJP(IPRI)
52     S          NWPP = NWP + 1
53     M          FMAT(I,NWPP) = -MAX(-RHU(JP),RDN(JP)-0.5*RHU(JP),0.0)
54     M          FMAT(I,NWP) = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPP)+RHU(JP)
55     V      ELSEIF(ICEL(I).EQ. 2) THEN
56     C*CLOSED END (MINUS)
57     V          IPLI = IPL(I)
58     V          JM   = IJM(IPLI)
59     S          NWPM = NWP - 1
60     M          FMAT(I,NWPM) = -MAX(RHU(JM),RDN(JM)+0.5*RHU(JM),0.0)
61     M          FMAT(I,NWP) = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPM)-RHU(JM)
62     V      ENDIF
63     V 1000 CONTINUE
64     C*
65     RETURN
66     END

```

Fig. 3.25 Subroutine CPMASS

```

C.DEBUG-start
    integer border_list(NSZ)      ← 境界セルIDを格納する配列
C.DEBUG-end

1 V      DO 1000 I = 1, NCELL           ← DO 1000 ループ
2 V      ANS(I) = VCCEL(I)*WOLD(I)*RHOLD(I)+VCCEL(I)*DELT*QNEW(I)
3 V      FMAT(I,NWP) = VCCEL(I)*RNEW(I)
4 V      IF(ICH(NSI(I)).NE.0)THEN
5 V          IF(KNUM.EQ.NO2.OR.KNUM.EQ.NCO)THEN
6 V              FMAT(I,NWP) = FMAT(I,NWP) - VCCEL(I)*DELT*QS(I)
7 V          ENDIF
8 V      ENDIF
9 V 1000 CONTINUE

10
11      iborder=0
12 S      do 1001 I=1,NCELL           ← DO 1001 ループ
13 V      IF(ICEL(I).EQ.0) THEN
14 C*PLUS   DO 1300 L = IPR(I),IPR(I+1)-1
15 M          NWPP = NWP+ICP(L)-I
16 V          JP = IJP(L)
17 V          FMAT(I,NWPP) = -MAX(-RHU(JP),RDN(JP)-0.5*RHU(JP),0.0)
18 M          FMAT(I,NWP) = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPP)+RHU(JP)
19 S
20 V 1300  CONTINUE
21 C*MINUS
22 M      DO 1400 L = IPL(I),IPL(I+1)-1
23 V      NWPM = NWP+ICM(L)-I
24 V      JM = IJM(L)
25 M      FMAT(I,NWPM) = -MAX(RHU(JM),RDN(JM)+0.5*RHU(JM),0.0)
26 S      FMAT(I,NWP) = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPM)-RHU(JM)
27 V 1400  CONTINUE
28 V      ELSE                      ← 境界セルカウント処理
29 M          iborder=iborder+1
30 M          border_list(iborder)=I
31 V          ENDIF
32 V 1001 CONTINUE

33
34 *vocl loop,scalar
35     DO 1002 k=1,iborder           ← DO 1002 ループ
36     IF(ICEL(border_list(k)).EQ.-1.OR.ICEL(border_list(k)).EQ.1) THEN
37 C*BREAK POINT
38         FMAT(border_list(k),NWP) = 1.0
39         ANS(border_list(k)) = WOLD(border_list(k))
40         ELSEIF(ICEL(border_list(k)).EQ.-2) THEN
41 C*CLOSED END (PLUS)
42         IPRI = IPR(border_list(k))
43         JP = IJP(IPRI)
44         NWPP = NWP + 1
45         FMAT(border_list(k),NWPP) = -MAX(-RHU(JP),RDN(JP)-
46             &0.5*RHU(JP),0.0)
47         FMAT(border_list(k),NWP) = FMAT(border_list(k),NWP)-
48             &FMAT(border_list(k),NWPP)+RHU(JP)
49         ELSEIF(ICEL(border_list(k)).EQ. 2) THEN
50 C*CLOSED END (MINUS)
51         IPLI = IPL(border_list(k))
52         JM = IJM(IPLI)
53         NWPM = NWP - 1
54         FMAT(border_list(k),NWPM) = -MAX(RHU(JM),RDN(JM)-
55             &0.5*RHU(JM),0.0)
56         FMAT(border_list(k),NWP) = FMAT(border_list(k),NWP)-
57             &FMAT(border_list(k),NWPM)-RHU(JM)
58         ENDIF
59 1002 CONTINUE

```

Fig. 3.26 Division of DO 1000 loop in Fig. 3.25

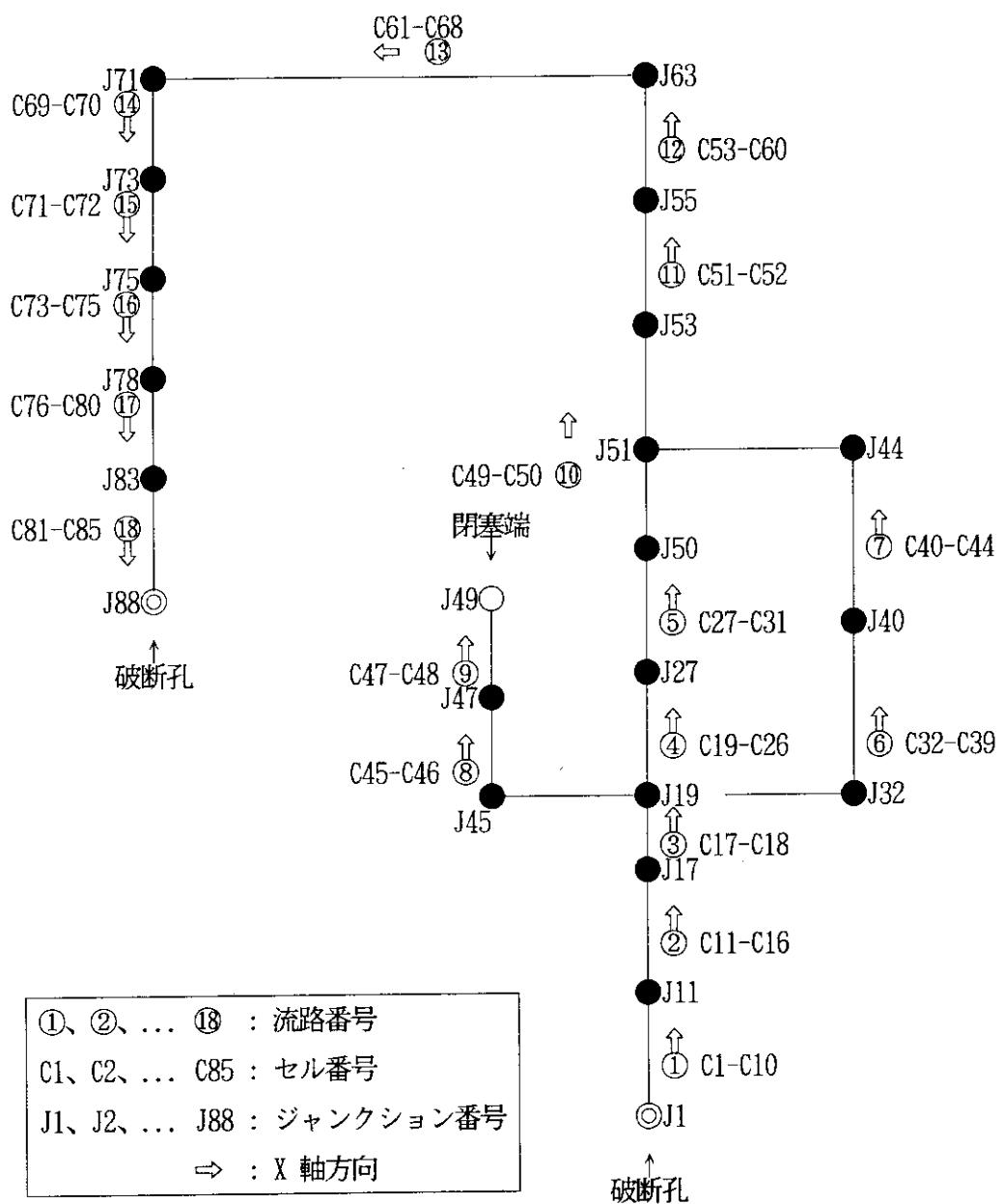


Fig. 3.27 Stream network model of FLOWGR(TAKEDA)

```

COMMON /POINTR/ IPL(NSZ),IPR(NSZ),ICP(NSZ),ICM(NSZ),IJP(NSZ),
> IJM(NSZ),ipr_loop(NSZ),ipl_loop(NSZ)
    ↑
    ↑
    追加したCOMMON変数

```

```

C.VPP
do 10 i=1,NCELL
  icount=0
*voct loop,scalar
  do 11 l=IPR(I),IPR(I+1)-1
    icount=icount+1
  11 continue
    ipr_loop(I)=icount
  10 continue

  do 20 i=1,NCELL
  icount=0
*voct loop,scalar
  do 21 l=IPL(I),IPL(I+1)-1
    icount=icount+1
  21 continue
    ipl_loop(I)=icount
  20 continue
C.VPP

```

Fig. 3.28 Transaction of counting for plus or minus pointer about cells

```

1      iborder=0
2      do 1001 I=1,NCELL
3          IF(ICEL(I).EQ.0) THEN
4      C*PLUS
5          if(ipr_loop(I).eq.1) then
6              NWPP = NWP+ICP(IPR(I))-I
7              JP   = IJP(IPR(I))
8              FMAT(I,NWPP) = -MAX(-RHU(JP),RDN(JP)-0.5*RHU(JP),0.0)
9              FMAT(I,NWP)  = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPP)+RHU(JP)
10         else
11             DO 1300 L = IPR(I),IPR(I+1)-1
12                 NWPP = NWP+ICP(L)-I
13                 JP   = IJP(L)
14                 FMAT(I,NWPP) = -MAX(-RHU(JP),RDN(JP)-0.5*RHU(JP),0.0)
15                 FMAT(I,NWP)  = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPP)+RHU(JP)
16             1300 CONTINUE
17         endif
18     C*MINUS
19         if(ipl_loop(I).eq.1) then
20             NWPM = NWP+ICM(IPL(I))-I
21             JM   = IJM(IPL(I))
22             FMAT(I,NWPM) = -MAX(RHU(JM),RDN(JM)+0.5*RHU(JM),0.0)
23             FMAT(I,NWP)  = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPM)-RHU(JM)
24         else
25             DO 1400 L = IPL(I),IPL(I+1)-1
26                 NWPM = NWP+ICM(L)-I
27                 JM   = IJM(L)
28                 FMAT(I,NWPM) = -MAX(RHU(JM),RDN(JM)+0.5*RHU(JM),0.0)
29                 FMAT(I,NWP)  = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPM)-RHU(JM)
30             1400 CONTINUE
31         endif
32     ELSE
33         iborder=iborder+1
34         border_list(iborder)=I
35     ENDIF
36 1001 CONTINUE

```

← 境界セルカウント処理

Fig. 3.29 Modification of DO 1300 and DO 1400 loops

```

C.VPP      integer p1_else(NSZ)           ← ポイント数1以外のセルIDを
C.VPP
V          ip1_else=0
V          do 1001 I=1,NCELL               ← DO 1001 ループ
V          IF(ICEL(I).EQ.0) THEN
V              if(ip1_loop(I).eq.1) then
C*PLUS
V                  NWPP = NWP+ICP(IPR(I))-I
V                  JP   = IJP(IPR(I))
V                  FMAT(I,NWPP) = -MAX(-RHU(JP),RDN(JP)-0.5*RHU(JP),0.0)
V                  FMAT(I,NWP)  = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPP)+RHU(JP)
V
V          else
V              ip1_else=ip1_else+1
V              p1_else(ip1_else)=I
V          endif
V          ENDIF
V 1001 continue
*vocl loop,scalar           ← DO 1003 ループ
    do 1003 k=1,ip1_else
        DO 1300 L=IPR(p1_else(k)),IPR(p1_else(k)+1)-1
            NWPP = NWP+ICP(L)-p1_else(k)
            JP   = IJP(L)
            FMAT(p1_else(k),NWPP) = -MAX(-RHU(JP),RDN(JP)-
&0.5*RHU(JP),0.0)
            FMAT(p1_else(k),NWP)  = FMAT(p1_else(k),NWP)-
&FMAT(p1_else(k),NWPP)+RHU(JP)
1300    CONTINUE
1003 continue
    ip1_else=0
    iborder=0
V    do 1004 I=1,NCELL               ← DO 1004 ループ
V    IF(ICEL(I).eq.0) THEN
V        if(ip1_loop(I).eq.1) then
C*MINUS
V            NWPM = NWP+ICM(IPL(I))-I
V            JM   = IJM(IPL(I))
V            FMAT(I,NWPM) = -MAX(RHU(JM),RDN(JM)+0.5*RHU(JM),0.0)
V            FMAT(I,NWP)  = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,NWPM)-RHU(JM)
V
V        else
V            ip1_else=ip1_else+1
V            p1_else(ip1_else)=I
V        endif
V        ELSE
V            iborder=iborder+1
V            border_list(iborder)=I
V        ENDIF
V 1004 continue
*vocl loop,scalar           ← DO 1005 ループ
    do 1005 k=1,ip1_else
        DO 1400 L=IPL(p1_else(k)),IPL(p1_else(k)+1)-1
            NWPM = NWP+ICM(L)-p1_else(k)
            JM   = IJM(L)
            FMAT(p1_else(k),NWPM) = -MAX(RHU(JM),RDN(JM)-
&0.5*RHU(JM),0.0)
            FMAT(p1_else(k),NWP)  = FMAT(p1_else(k),NWP)-
&FMAT(p1_else(k),NWPM)-RHU(JM)
1400    CONTINUE
1005 continue

```

Fig. 3.30 Tuned DO 1001 loop in Fig. 3.26

```

1 S      DO 400 N = 1,NCELL
2 S      UIN(N) = 0.0
3 V      DO 410 L = IPR(N),IPR(N+1)-1
4 V      UIN(N) = UIN(N)+XJ(IJP(L))*VNEW(IJP(L))
5 V      DO 420 L = IPL(N),IPL(N+1)-1
6 V      UIN(N) = UIN(N)+XJ(IJM(L))*VNEW(IJM(L))
7 S      UIN(N) = UIN(N)/2.0/XC(N)
8 S 400 CONTINUE

```

Fig. 3.31 DO 400 loop in subroutine SET1

```

C.VPP integer p1_else(NSZ)
C.VPP
      ip1_else=0
V      DO 400 N = 1,NCELL
V      UIN(N) = 0.0
V 400 continue
V      do 401 N=1,NCELL
V      if(ipr_loop(N).eq.1) then
V          UIN(N) = UIN(N)+XJ(IJP(IPR(N)))*VNEW(IJP(IPR(N)))
V      else
V          ip1_else=ip1_else+1
V          p1_else(ip1_else)=N
V      endif
V 401 continue
*vocl loop,scalar
      do 404 k=1,ip1_else
          DO 410 L = IPR(p1_else(k)),IPR(p1_else(k)+1)-1
410      UIN(p1_else(k)) = UIN(p1_else(k))+XJ(IJP(L))*VNEW(IJP(L))
404 continue
V      do 402 N=1,NCELL
V      if(ipr_loop(N).eq.1) then
V          UIN(N) = UIN(N)+XJ(IJM(IPL(N)))*VNEW(IJM(IPL(N)))
V      else
V          ip1_else=ip1_else+1
V          p1_else(ip1_else)=N
V      endif
V 402 continue
*vocl loop,scalar
      do 405 k=1,ip1_else
          DO 420 L = IPL(p1_else(k)),IPL(p1_else(k)+1)-1
420      UIN(p1_else(k)) = UIN(p1_else(k))+XJ(IJM(L))*VNEW(IJM(L))
405 continue
V      do 403 N=1,NCELL
V      UIN(N) = UIN(N)/2.0/XC(N)
V 403 CONTINUE

```

Fig. 3.32 Tuned DO 400 loop in subroutine SET1

```

S      DO 600 J = 1,NCELL
V      DO 600 K = 1,NGAS-1
V          QNEW(J,K) = (1.0-RLXQ)*QNEW(J,K)+ RLXQ*QTMP(J,K)
V          QS (J,K) = (1.0-RLXQ)*QS(J,K) + RLXQ*STMP(J,K)
V 600 CONTINUE

```

Fig. 3.33 DO 600 loop in subroutine STEP

```

S      DO 600 K = 1,NGAS-1
V      DO 600 J = 1,NCELL
V          QNEW(J,K) = (1.0-RLXQ)*QNEW(J,K)+ RLXQ*QTMP(J,K)
V          QS (J,K) = (1.0-RLXQ)*QS(J,K) + RLXQ*STMP(J,K)
V 600 CONTINUE

```

Fig. 3.34 Tuned DO 600 loop in subroutine STEP

```

.
.
*vocl loop,scalar
DO 1100 L = IPR(I),IPR(I+1)-1
    JP = IJP(L)
    IP = ICP(L)+NWP-I
    FMAT(I,IP)= BETA(JP)*RHM(JP)*XJ(JP)
    ANS(I) = ANS(I)-GAMM(JP)*RHM(JP)*XJ(JP)
    FMAT(I,NWP) = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,IP)
1100    CONTINUE
*vocl loop,scalar
DO 1200 L = IPL(I),IPL(I+1)-1
    JM = IJM(L)
    IM = ICM(L)+NWP-I
    FMAT(I,IM)= BETA(JM)*RHM(JM)*XJ(JM)
    ANS(I) = ANS(I) + GAMM(JM)*RHM(JM)*XJ(JM)
    FMAT(I,NWP) = FMAT(I,NWP)-FMAT(I,IM)
1200    CONTINUE
.
.
```

Fig. 3.35 Tuned DO 1100 and DO 1200 loops
in subroutine MXMASS

```

.
.
*vocl loop,scalar
DO 1000 I = 1, NCELL
    ANS(I) = ANS(I) + VCEL(I)*QNEW(I)
    IF(ICEL(I).EQ.0) THEN
        DO 1100 L = IPR(I),IPR(I+1)-1
            JP = IJP(L)
            ANS(I) = ANS(I)-GAMM(JP)*RHM(JP)*XJ(JP)
1100    CONTINUE
*vocl loop,scalar
DO 1200 L = IPL(I),IPL(I+1)-1
    JM = IJM(L)
    ANS(I) = ANS(I) + GAMM(JM)*RHM(JM)*XJ(JM)
1200    CONTINUE
.
.
```

Fig. 3.36 Tuned DO 1100 and DO 1200 loops
in subroutine PRESMD

4. RBUU コードのベクトル化

富士通(株)製分散メモリ型ベクトル並列計算機 VPP500/42(以下 VPP500)において、相対論的ボルツマン・ウェーリング・ウーレンベック法によるシミュレーション・コード RBUU のベクトル化、及びその並列化の調査を行った。本コードは、一度 IBM マシン用にベクトル化、及び並列化の高速化チューニングが施されていたが、VPP500 にインストールしたところベクトル化率が落ち速度低下を招いていた。また、並列化処置された箇所は VPP500 ではコメント扱いされていた。従って、第1段階では VPP500 上でベクトル化チューニングを行い、次いで並列化の可能性について調査した。以下にこれらの作業内容について報告する。

4.1 コード概要

RBUU コードは、2つの原子核の衝突反応における RBUU 方程式 [9, 10, 11] を、テスト粒子を用いたシミュレーションにより解くコードである。各時間ステップ毎に粒子生成の確率を計算し観測量を与えると共に、テスト粒子を原子核の分布に従うように配置し、その配置から密度分布を計算して場を与える。その場から粒子に働く力を計算し、運動方程式を解く。これを繰り返しながらテスト粒子の時間発展を追うものである。

4.2 ベクトル化

ベクトル化を進めるにあたりユーザより4つの入力データが提供された。それをテスト・ケース 1～4 として、各ケースごとに動的挙動解析を行い、高速化のためのチューニングを行った。各テスト・ケースの一覧を Table 4.1 に、対応する入力データを Fig. 4.1 に示す。

4.2.1 動的挙動解析

計算コストの分布状況、及び自動ベクトル化の状況を調査するため、動的挙動解析ツールである SAMPLAR、及び ANALYZER を利用した。

SAMPLAR は、VPP500 上で動作するツールであり、実行可能プログラムを対象にしている。これによりルーチン単位の計算コスト分布を得ることができる。一方、ANALYZER の方は GSP 上で動作するツールであり、ソースプログラムを対象にしている。ルーチン単位、ループ単位、文単位の計算コスト、実行回数、及びループの回転数等の情報が得られる。ルーチン単位の計算コスト分布に関しては、RBUU が実際に動作するのが VPP500 上であるため、VPP-500 上の解析結果である SAMPLAR のものの方がより実情に近い値を示している。

これらツールを利用するに際し、ANALYZER の制約により DO ループの変更を行った。RBUU コードの中で使用されている DO ループは、殆どが DO ~ END DO の構文のものであり、ANALYZER ではエラー扱いされてしまった。ANALYZER が DO ~ END DO の構文を許していない FORTRAN77 EX/VP を使用しているためである。そこで、これらの DO ループを DO ~ CONTINUE の構文に変更した。動的挙動解析で使用した実行用シェル・スクリプト (SAMPLAR

実行, SAMPLAR の対象とした実行可能プログラム生成, ANALYZER 実行)を Fig. 4.2 ~ 4.4 に示す。

各テスト・ケースにおける、ベクトル化対応前の SAMPLAR の出力結果を Fig. 4.5 に示す。各ケースの上位 6 ルーチンは、それぞれ 3% 以上のコスト比率を占めており、全体で 84 ~ 91% を占めている。特に DENS ルーチンにコストが集中(40 ~ 49%)している。そこでベクトル化チューニングの対象ルーチンとして、少なくともいざれかのケースで上位 6 ルーチンの 1 つになっている DENS, SMEAR, ITERAT, XSORT, ABSOR, PERMUT, RCDELT の 7 ルーチンを選択した。各テスト・ケースにおける、上記 7 ルーチンのベクトル化対応前の ANALYZER の出力結果(抜粋: routine list, loop list)を Fig. 4.6 ~ 4.12 に示す。各ルーチンの計算コストの分布状況、ベクトル化状況は以下のとおりであった。

(1)DENS ルーチン (Fig. 4.6)

DO 1331 ~ 1341 の二重ループにルーチン全体の 76 ~ 80% の計算コストが集中している。内側ループは回転数が小さく、つまりベクトル長が短く、外側のループはベクトル化されていない。また、ルーチン全体としてのベクトル化率は 62 ~ 76% とあまり高くない。

(2)SMEAR ルーチン (Fig. 4.7)

ルーチン全体としてのベクトル化率は 99.6% と高く、ベクトル化効果も 34 ~ 44 倍と高い性能が出ている。ただ 15.8% のコスト比率を占める DO 2511 がベクトル化されていない。

(3)ITERAT ルーチン (Fig. 4.8)

全体の約 86 ~ 88% の計算コストを占めている DO 1831 は自動ベクトル化されており、ベクトル長も 102541 と長い割りには、ベクトル化率 35.5%, ベクトル化効果 1.5 と性能が出ていない。

(4)XSORT ルーチン (Fig. 4.9)

全体の約 75 ~ 86% の計算コストを占めている DO 2861, DO 2821, DO 2851, DO 2811, 及び DO 2791 の各 DO ループ内では、ベクトル化、非ベクトル化の文が入り混ざっており、自動ベクトル化が不十分である。

(5)ABSOR ルーチン (Fig. 4.10)

全体の約 96 ~ 100% の計算コストを占めている DO 1141, DO 1171 内の自動ベクトル化が不十分である。

(6)PERMUT ルーチン (Fig. 4.11)

ベクトル化率、ベクトル化効果共に、約 20%, 1.0 ~ 1.2 と低い。また、ベクトル長がテスト・ケース 3, 4 において短くなっている。

(7)RCDELT ルーチン (Fig. 4.12)

DO 2111 ~ 2121 の二重ループは、テスト・ケース 1 ~ 3 において、約 50 ~ 70% のコスト比率を占めており、内側ループの回転数が外側のものに比べて極端に小さい。また外側ループはベクトル化されていない。

4.2.2 チューニング

動的挙動解析により得たデータを参考にして、高速化のためのチューニングを実施した。以下にその作業内容を記述する。

4.2.2.1 DENS ルーチン

DENS ルーチンは計算コストに関して言えば、2つの二重ループ DO 1331・1341, DO 1371・1381 により約 98～99% が占められている。それぞれ 76～80%, 18～23% である。本作業では、この2つの二重ループのチューニングを行った。

(1) 二重ループ (DO 1331・1341) の変更

RBUU コードの計算コスト中では DENS ルーチンの占める比率が高く、中でも DO 1331・1341 の比率が高い。従って、本二重ループのコスト・ダウンが RBUU コードの高速化の鍵を握っている。

本二重ループにおいては、外側ループの DO 1331 にコストが偏っており、その中の IF 文はベクトル化されておらずその真率は低い(テスト・ケース 1～4 で 1.0, 1.6, 11.9, 17.0%) ことが判った。また、DO 1341 の平均ベクトル長が短い(テスト・ケース 1～4 で 15, 6, 3, 4) ことも判った。そこで、変更の第1ステップとして、DO 1331 のコスト・ダウンを図るため、NGP(I) .GT. 0 を満たす I を抽出する処理を独立させた。そして、この条件を満たす I について、DO 1341 を実施するよう変更した。この抽出処理をベクトル化(ベクトル長：102541)することによりコスト・ダウンを図った。第1ステップにおける変更前、及び変更後のソース・コードを対比して Fig. 4.13 に示す。

変更の第2ステップとして、DO 1341 のコスト・ダウンを図るため $\text{FAC} * \text{XMEFF}(J) / P(0, J)$ の項の計算を集中化してベクトル処理できるようにした。この時の J の範囲は、Fig. 4.13 における NG1(I) の最小値～NG2(I) の最大値である。これは IGP(I) が増加関数であること、及び NGP(I) が非負であるということを利用している。 $\text{FAC} * \text{XMEFF}(J) / P(0, J)$ の計算では対象外の J についても計算するが、ベクトル処理(平均ベクトル長： $\text{NX} * \text{NX} * \text{NZ} \times \text{IF 文の真率}$)することによりコスト・ダウンを図った。第2ステップの変更後のソース・コードを Fig. 4.14 に示す。

第3ステップとして、NGP(I) .GT. 0 を満たす I の抽出処理と $\text{FAC} * \text{XMEFF}(J) / P(0, J)$ を集中計算する時の NG1(I) の最小値、NG2(I) の最大値の計算処理を XSORT ルーチンの中で実施するように変更した。IGP(I), NGP(I) の値は XSORT ルーチンで定義され、他のルーチンでは変更されないこと、及び XSORT ルーチンと DENS ルーチンの実行回数の比が約 1:6～7 であることから、コスト・ダウンが期待できる。第3ステップの変更後のソース・コードを Fig. 4.15 に示す。Fig. 4.15 では、更に NGP(I) .eq. 1 の抽出処理も行っている。

(2) 二重ループ (DO 1371・1381) の変更

DO 1371・1381 の二重ループは、構造的に(1)の DO 1331・1341 と同じであり、変更方法も同じである。変更前、及び変更後のソース・コードを Fig. 4.16 に対比して示す。

4.2.2.2 SMEAR ルーチン

本ルーチンにおいては、 DO 2511 のベクトル化、及び処理の簡略化を行った。

(1) DO 2511 のベクトル化

DO 2511 がベクトル化されていない理由は、「配列 VTAR におけるデータの定義引用が回帰的参照の可能性があるためベクトル化できない」というものであった。実際は、配列 VTAR の第1次元の添字式 $1 + (\text{MAXX}+\text{IY}) * \text{NX}$ と $\text{NX} + (\text{MAXX}+\text{IY}) * \text{NX}$ とはそのとり得る値が重ならずベクトル化可能であった。そのため、 *VOCL LOOP,NOVREC(VTAR) 文を挿入してベクトル化した。

(2) 処理の簡略化

次の 2 つの処理に関して、簡略化した。

- 配列 VSRC の値を配列 VTAR に代入する際、配列 RANDX を中継している処理(DO 2491)
- IBM 版の並列化対処のための変数 ITASK による DO ループ(DO 2411, DO 2461)

配列 RANDX については中継せず、直接代入しても結果は同じため、直接代入するように変更した。結果として DO 2491 が不要となった。ITASK の方は、意味がないため対応する DO ループを削除した。(1), (2) の変更内容を Fig. 4.17 に示す。

4.2.2.3 ITERAT ルーチン

本ルーチンにおいては、ANALYZER の結果の中でベクトル化効果の出ていない 2 つの DO ループ DO 1771, DO 1831 内の IF 文の構造を変更した。いずれの場合も、条件が互いに排反となる 2 つの IF 文が続けて記述されており、真率が一方に偏っているにもかかわらず、どちらもマスク操作による方法でベクトル化されていた。このためベクトル化率、ベクトル化効果、共に小さくなっていた。排反条件を利用して、2 つの IF 文を IF ~ THEN ~ ELSE ~ END IF の構造に変更した。変更内容を Fig. 4.18 に示す。

4.2.2.4 XSORT ルーチン

XSORT ルーチンはグリッド上の空間位置情報を元にテスト粒子の並べ替えを行うルーチンであり、グリッドのある範囲の外に飛び出したものは粒子列の後方に移動し、シミュレーションの対象から外している。ここでは、シミュレーション対象の粒子に対する処理と対象外の粒子に対する処理を分けることにより、全体の処理を簡略化すると共に部分ベクトル化されている DO ループ(DO 2791, DO 2851) の分割を行った。これにより、ベクトル化率、及びベクトル化効果の向上を狙った。変更内容を Fig. 4.19 に示す。

4.2.2.5 ABSOR ルーチン

ABSOR ルーチンは、概略 DO 1141, DO 1151, DO 1171 の三重ループで構成されている。ANALYZER の結果 (Fig. 4.10) よりベクトル長は DO 1141 が 102541 と長く、DO 1151 は 0 に近い値である。DO 1171 のベクトル長はテスト・ケース 1～4 で 0, 7, 17, 12 である。また、計算コストについて言えば、DO 1141 がテスト・ケース 1, 2 において約 80% 以上を占めており、DO 1171 がテスト・ケース 3, 4 において約 70% を占めている。そこで、ここでは、2 つの対応を行った。1 つは DO 1151 以下が実際に実行される時の I, つまり NGPA(I) .GT. 0 を満たす I を抽出する処理を独立させた。これにより、ベクトル化率の向上を図り、DO 1141 のコスト・ダウンを図った。2 つめは、DO 1171 をベクトル化可能部分とベクトル化不可能部分とに分割し、ベクトル化率、及びベクトル化効果の向上を図った。処理の順序性を考慮して DO 1171 を DO 1171, DO 1172, DO 1173, DO 1174, DO 1175 の 5 つに分割し、各ループ間のデータ引き継ぎのために作業用の配列を導入した。例えば以下のような変更を行った。変更内容を Fig. 4.20 に示す。

$$PXCM=BETAX*TRAFO+PP(1) \Rightarrow XCMa(IB)=BETAXa(IB)*TRAFOa(IB)+PP(1,IB)$$

4.2.2.6 PERMUT ルーチン

ANALYZER の結果 (Fig. 4.11) より、本ルーチンのベクトル長が短いことが判ったため、ルーチン全体をスカラ化した。スカラ化するため、*VOCL TOTAL,SCALAR 文を本ルーチンの先頭に挿入し、これにより、ベクトル実行のオーバヘッドに対応した。

4.2.2.7 RCDELT ルーチン

DO 2111・2121 の二重ループは、DENS ルーチンの DO 1331・1341 と同じように、内部の IF 文の真率が低く (テスト・ケース 1～4 で 0.7, 0.7, 5.1, 9.7%), 内側ループのベクトル長も短い (テスト・ケース 1～4 で 11, 6, 3, 3)。このため、DENS ルーチンの場合と同じように NGP(I).GT.1 を満たす I を抽出することによりコスト・ダウンを図った。DO 2111・2121 の変更内容を Fig. 4.21 に示す。

4.2.2.8 その他

TPCORRA ルーチン内で実行されている SIGMA、及び OMEGA のスマア処理 (CALL SMEAR) は冗長な処理であることが判ったため、実行しないよう対処した。TPCORRA ルーチンは MAIN ルーチンから呼ばれるが、その直前で呼ばれる TPPREDA ルーチンの中で SIGMA、及び OMEGA のスマア処理が行われている。その後、TPCORRA ルーチンが呼ばれるまでスマア結果は更新されないため、TPCORRA ルーチン内のスマア処理が冗長になっていた。

4.2.3 計算結果の評価及び効果

4.2.3.1 計算結果の評価

VPP500 上で FORTRAN プログラムを実行する場合、同じソース・コードを用いたとしても、スカラ演算とベクトル演算との丸め方法の違い、コンバイラによる最適化方法の違いにより計算の出力結果に違いが生じる。従って、ベクトル化の変更等、何らかの変更により計算の出力結果に違いが生じるのは一般的である。今回の変更作業においても、変更前のオリジナル版コードと変更後のベクトル化版コードとを、同じコンパイル・オプションによりコンパイルしても、その出力結果に違いが生じていた。この出力結果の違いが今回の変更によるものなのか、丸め方法・最適化方法等の計算環境によるものなのかの確認を行った。

確認方法は、基本的には、計算環境を同じくするため、オリジナル版、ベクトル化版共に最適化抑止したスカラー・コンパイルを行いその計算結果を比較するのであるが、ここでは計算時間短縮のため、以下のような簡単な方法で行った。

- 丸め方法を合わせるためにオリジナル版、ベクトル化版共にスカラー演算の丸め方法を切り捨てモードにするため MAIN ルーチンの先頭に CALL CHROUND(3) を挿入した。
- オリジナル版、ベクトル化版共に最適化を抑止するが、オリジナル版の方はスカラー・コンパイルを行い、ベクトル化版の方はベクトル・コンパイルを行った。

オリジナル版のコンパイル・オプション : -Oe,-PE -Wv,-sc

ベクトル化版のコンパイル・オプション : -Oe,-PE

本確認作業で対象とした出力結果は、テスト・ケース 1～4 の summry.dat、及び output.dat である。diff コマンドにより出力結果を比較したが、いずれの場合も summry.dat のタイム・スタンプの値を除き、オリジナル版とベクトル化版のものが全桁一致した。以上のことから、今回の変更作業が計算の誤りを引き起こしていないことが確認できた。

4.2.3.2 効果

オリジナル版、及びベクトル化版の実行時間を測定した。測定対象としたのは、テスト・ケース 1～4 であり、測定値を Table 4.2 に示す。また各ケースのベクトル化版の SAMPLAR の結果を Fig. 4.22 に示す。この Fig. 4.22 と Fig. 4.5 とから、ルーチン単位のコスト・ダウンがおよそどの程度のものか判る。テスト・ケース 1～4 における各変更ルーチン毎のコスト・ダウン率を Table 4.3 に示す。

今回の変更により、ベクトル化版ベクトル実行は、オリジナル版ベクトル実行に比べて 1.85～2.08 倍、オリジナル版スカラ実行に比べて 8.4～14 倍の高速化を実現することができた。ルーチン単位にみると DENS ルーチンのコスト・ダウンが大きく貢献しているのが判る。反面、ITERAT ルーチンの変更はあまり効果を上げていない。ANALYZER の結果では、変更後はベクトル化率 100%，ベクトル化効果約 40～55 倍と向上しているが、VPP500 と GSP という走行環境の差が数値に現れたものと思われる。実際 ITERAT ルーチンは変更前でも、高速化されていたものと思われる。

DENS ルーチンの次にコスト・ダウンに貢献しているのが ABSOR ルーチンである。それが顕著に現れるのは、Table 4.4 に示すテスト・ケース 5 の場合であった。これは、実際に使うテスト・ケースの中で最大級のものである。

今回の変更の中で ABSOR ルーチンだけ変更していない ABSOR 対応未のコードと ABSOR ルーチンも対応した ABSOR 対応済コードの 2 つを用いてテスト・ケース 5 の実行、及び SAMPLAR の実行を行った。Table 4.5 にその測定値を示す。ABSOR の対応により、ABSOR ルーチン単独では 79% のコスト・ダウン、実行時間で 19% の削減効果があった。

4.3 並列化調査

本コードの高速化を更に進めるため、並列化の可能性について検討を行った。

4.3.1 コード調査

RBUU コードの機能的な構成は、以下のようになっている。

(1) 初期化処理

テスト・データ (input.cfg) 等の入力を行い、各種変数等の初期化を行っている。

(2) 時間ステップ処理

1 ~ NTMAX の時間ステップ・ループを形成し、各ステップ毎にテスト粒子法により運動方程式を解き、時間経過のシミュレートを行っている。ここで NTMAX は入力データである。

(3) 終了処理

RBUU コードの構造図を Fig. 4.23 に示す。

4.3.2 並列性の調査

並列化を進める場合、その分割対象の候補として時間・粒子・領域が挙げられる。これらについて並列性の調査を行った。

4.3.2.1 時間分割による並列化

時間ステップ $NT = n+1$ ($n > 0$) の計算をする場合、前の時間ステップ n のデータ、例えば、 $R(1 \sim 3, I)$, $P(0 \sim 3, I)$, $XMEFF(I)$ 等を必要としており、各時間ステップの間で計算の独立性が保たれていない。時間に関する並列性を見出すことはできない。

4.3.2.2 粒子分割による並列化

計算対象の粒子には、陽子・中性子であれば 1 ~ NTOTAL まで、反陽子であれば 1 ~ NANTOT までの番号が割り振られて、それぞれの位置、運動量、質量等が対応付けられている。各時間ステップにおいて、粒子の運動に伴いその空間の位置が変わることにより、この番号は変わる。粒子順番の並べ替え処理、グリッド外に飛び出した粒子を計算対象外にする処理等が行われる。

番号変更の処理は、陽子・中性子の場合、RCDELT, TPSORT, XSORT の各ルーチンで行っており、反陽子の場合、RCDELT, XSORTA の各ルーチンで行っている。粒子分割する場合、こうした番号変更の処理が行われるまでの区間を並列化の対象にできる。この区間が並列化の1単位となり、この単位ごとに各PE間のデータ整合をとらなければならない。

RBUU コードのメインルートに関して、DO ループを最小単位とした処理関連図を Fig. 4.24 に示す。これは、Fig. 4.23 をさらに詳細化したものであり、DO ループの繰り返し属性、及びテスト・ケース 5 における 1 処理単位の時間を載せている。ここでの時間は、実測値ではなく、SAMPLAR、及び ANALYZER の結果を元に計算により算出した概略平均値である。

各 PE 間のデータ整合のオーバヘッドを考慮すると、Fig. 4.24 の中では、TPPRED, TPCORR, TPSORT, XSORT の各ルーチンが粒子分割の候補として考えられる。TPPRED, TPCORR は処理構造が似ており、並列化の対象はそれぞれ DO2661, DO 2621 である。1 処理時間はそれぞれの DO ループで 206.2 ms, 186.6 ms であり、いずれの場合も、各 PE 間でデータの整合が必要となるのは配列 P(0:3, MAXPAR) である。ここで、MAXPAR には式 (4.1) の関係がありテスト・ケース 5 では、416000 である。

$$(標的粒子の質量 + 入射粒子の質量) \times 粒子数 \leq MAXPAR \quad (4.1)$$

TPSORT ルーチンの場合、並列化対象となるのは、計算コストが集中している DO 2711 と DO 2751 である。DO 2711 の 1 処理時間は 39.5 ms であり、各 PE 間でデータの整合が必要となるのは配列 IGP(NX*NZ) である。ここで、 $NX * NX * NZ = 102541 (= 41 * 41 * 61)$ である。DO 2751 は、粒子番号 I に関して計算の順序性があり並列化できない。XSORT ルーチンは TPSORT ルーチンと処理構造が似ており、同じ理由により、並列化候補は DO 2811 となる。1 処理時間は 39.8 ms、データ整合が必要なのは配列 IGP(NX*NZ) である。

4.3.2.3 領域分割による並列化

オリジナル・コードの SMEAR ルーチンの中に IBM 版の並列化対応の箇所がある。Z 方向を分割した並列化である。SMEAR に関しては、例えば、ITERAT ルーチンの中で SMEAR ルーチンを呼び出した直後に以下の (4.2) のような処理が行われている。IIZ(I) により他 PE のデータを引用している。VPP500 の並列化方式は分散メモリ方式であり、こうした引用がある場合には、各 PE 間でデータ整合等の対応が必要となる。SMEAR ルーチンの処理時間は数ミリ秒であり、SIGMS 等を各 PE 間でデータ転送するオーバヘッドを考慮すると、VPP500 では IBM 版のような対応はとれない。

$$XEMEFF(I) = XMREST(I) - GS * SIGMS(IIIX(I), IIY(I), IIZ(I)) \quad (4.2)$$

このような引用は、この他に以下の箇所で行われている。並列化のオーバヘッドを考慮すると、Fig. 4.24 の中では、ABSOR, DENS のルーチンと RCDELT ルーチンの DO 2111・2121 ループが領域分割の対象として考えられる。

ITERAT:DO 1841,1891	RCDELT:DO 2131,2161
TPCORR:DO 2621	TPC00A:DO 2641
TPPRED:DO 2661	TPPREDA:DO 2681 等

ABSOR ルーチンの場合、計算コストは DO 1141・1151・1171 の三重ループに集中している。DO 1141 は、DO 1151 の処理がグリッドのセル位置番号 LG に関して計算の順序性を保つ必要があるため、分割できない。従って、並列化する場合 DO 1151 を分割することになるが、平均ベクトル長は 2.67 と短い。DO 1151 以下の 1 処理時間は、197.5ms であり、データ整合が必要となるのは、配列 PROB(MAXANT) と NDENS(0:200) である。ここで、MAXANT = 30000 である。DENS ルーチンの場合、並列化候補は DO 1342・1343、及び DO 1382・1383 の二重ループである。1 処理時間はそれぞれ 24.0ms、69.8ms であり、データ整合が必要となるのは、それぞれ配列 RHSVEI(NX*NX*NZ) と RHVVEI(NX*NX*NZ,0:3) である。RCDELT ルーチンの場合、二重ループ DO 2111・2121 の 1 処理時間は 134.8ms であり、データ整合が必要となる配列は IPART1(MAXPAR/2), IPART2(MAXPAR/2), LASTCOL(MAXPAR) である。

4.3.3 並列化効果の予測

最大級のテスト・ケース 5(Fig. 4.24) をモデルにして、その並列化効果について記述する。

4.3.3.1 オーバヘッドの測定

粒子番号の変更、他 PE のデータに対する引用により各 PE 間でデータの整合をとる必要性が生じる。このような場合、グローバル関数 SUM により整合をとることができ、並列化の可能性を検討するため、「4.3.2 並列性の調査」で整合の対象となった配列またはその大きさが同じ配列に関して、この関数のオーバヘッドを実測した。測定方法は、DENS, TPPRED, XSORTA の各ルーチンの中で対象とする配列を更新している DO ループを選択し、この DO ループの処理時間を 2 つの方法で測定した。1 つは対応箇所を SPRED DO ~ END SPREAD で括り、その箇所の走行時間を測定する。もう 1 つは SPRED DO ~ END SPREAD SUM() に変えてその箇所の走行時間を測定する。この 2 つの差を RBUU 環境下でのオーバヘッドと想定した。実際、テスト・ケース 5において、時間ステップ 1 ~ 10 までを PE 数 = 2, 4, 8, 16 で測定した。実測値を Table 4.6 に示す。

4.3.3.2 並列化効果

グローバル関数 SUM によるオーバヘッドの程度は、データ量、PE 数、その他諸々の計算環境により異なる。ここでは、「4.3.3.1 オーバヘッドの測定」で得た実測値を RBUU 走行環境下におけるオーバヘッドと想定してテスト・ケース 5 における並列化の効果を求めた。その結果を Table 4.7 に示す。

Table 4.7 におけるコスト比率は、各並列化対象箇所の計算コストが全体の中で占める割合を百分率で示している。並列化効果欄の数値は、全体の中での並列化による想定コスト・ダウン率

(CD_T) であり、式 (4.3) ~ (4.5) により求めた。

$$CD_T = (C_W/100) \times CD_R \times 100 \quad (4.3)$$

$$CD_R = (T_O - T_P)/T_O \quad (4.4)$$

$$T_P = O_V + T_O/npe \quad (4.5)$$

ここで、

$C_W(\%)$: コスト比率

CD_R : 並列化対象箇所内のコスト・ダウン率

$T_O(ms)$: 並列化対象箇所の走行時間 (1 処理単位)

$T_P(ms)$: 並列化対象箇所の並列化後の想定走行時間 (1 処理単位)

$O_V(ms)$: オーバヘッド時間

npe : PE 数

以上のように、RBUU は全体を通じた並列化はできないし、一連の固まった処理群さえも並列化の対象にできない。計算コストの大きいところを小刻みに並列化する方法しか見出せない。

Table 4.7 から判るように、最大級のテスト・ケースであるテスト・ケース 5 の場合でさえ、4 PE で高々 10% のコスト・ダウン、倍率にして 1.1 倍の効率しか見込まれない(実測値は、CPU TIME:49:56.73、倍率:1.1 倍であった)。そして、PE 数を上げてもオーバヘッドによりこれ以上の効率向上は期待できないことが判る。

4.4 まとめ

今回変更対象とした RBUU コードは、これまでに IBM マシン用にベクトル化・並列化の対応がとられたものであった。変更前のオリジナル・コードを最適化オプション -Oe でベクトル・コンパイルしたもので、ベクトル化率が 89.8 ~ 92.3%，スカラ実行比 4.53 ~ 7.16 倍であった。従って、ベクトル化による高速化は、当初あまり望めないのではないかと思われた。しかし、実際には今回の変更により、ベクトル化率は 93.9 ~ 98.0%，スカラ実行比 8.4 ~ 13.4 倍、実行時間で変更前のものより 1.85 ~ 2.08 倍の処理速度の向上を図ることができた。

これは、主に DENS ルーチンのチューニング効果による。処理ロジックの見通しが悪くなつたが、全体で 33 ~ 38% のコスト・ダウンに寄与している。倍率にして 1.5 ~ 1.6 倍に相当する。またテスト・ケース 1 ~ 4 ではコスト比率が高くなかった ABSOR ルーチンが、最大級のテスト・ケース 5 では 20.6% を占めていた。ABSOR ルーチンのベクトル化チューニングによりテスト・ケース 5 で 19% のコスト・ダウンを図ることができた。これにより、実際に利用する範囲内におけるベクトル化チューニングは、概ね終了したものと考える。

一方、並列化に関しては、有効な並列化方法を見出すことができなかった。計算コストの大きい箇所を並列化する小刻みな並列化方式では、コストの集中度がテスト・ケースや時間ステッ

ブにより異なるため、汎用的な並列化を実現できない。例えば、ABSORルーチンに関して言えば、テスト・ケース5において1処理時間が200ms以上であったのは、900ステップのうち、時間ステップ149～574であった。時間ステップ132までは10ms以下であった。最大級のテスト・ケースにおいてさえ、ベクトル化版は約1時間で実行可能であり、この点で並列化の必要性は高いものとは言えなくなった。今後、粒子数、グリッドの大きさを大きくとることにより、長時間のテスト・ケースが現れることも考えられる。その場合でも、並列化対象部の計算コスト比率が高くないため、本処理方式を踏襲する限り、1倍強程度の並列化効果しか期待できない。

Table 4.1 Test cases

	テスト・ケース1	テスト・ケース2	テスト・ケース3	テスト・ケース4
標的原子	—	C	Si	Bu
標的原子の質量	—	12	28	197
標的原子の陽子数	—	6	14	63
入射原子	Ca	H	Si	Bu
入射原子の質量	40	1	28	197
入射原子の陽子数	20	1	14	63
テスト粒子数	400	800	800	200
時間ステップ数	900	500	500	500

Table 4.2 Execution time of original version and vectorized version

	テスト・ケース1	テスト・ケース2	テスト・ケース3	テスト・ケース4
(1)オリジナル版(スル) *1	1:20:10.67	42:49.63	1:03:17.84	1:28:23.43
(2)オリジナル版(バトル) *2	11:12.14 (5:00.29)	6:21.40 (2:43.97)	13:30.99 (7:02.62)	19:30.80 (10:29.73)
(3)ベクトル化版(バトル) *3	5:58.00 (4:24.17)	3:03.08 (2:14.02)	6:30.18 (3:36.97)	10:33.22 (5:18.57)
倍率	(1) → (2)	7.16	6.74	4.68
	(2) → (3)	1.88	2.08	2.08
	(1) → (3)	13.4	14.0	9.7

(備考) 測定値はCPU 時間、VU時間であり、時：分：秒である。() 内がVU時間。
倍率は、CPU 時間の比である。

* 1 ~ 3 のコンパイラ・オプションは以下のとおりである。

* 1 : -Oe -Wv, -SC

* 2 : -Oe

* 3 : -Oe

* 3 : -Oe

Table 4.3 Cost down ratios in updated routines

	テスト・ケース1	テスト・ケース2	テスト・ケース3	テスト・ケース4
DBNS ルーチン	85 %	89 %	77 %	70 %
SMBAR ルーチン	11 %	13 %	14 %	13 %
ITERAT ルーチン	14 %	5 %	2 %	2 %
XSORT ルーチン	13 %	25 %	25 %	30 %
ABSOR ルーチン	95 %	89 %	80 %	71 %
PERMUT ルーチン	68 %	77 %	83 %	82 %
RCDELT ルーチン	78 %	86 %	50 %	30 %

(備考) コスト・ダウン率(%) = $(C_{oe} - C_{vec}) \div C_{oe} \times 100$

C_{oe} : Table 4.1 におけるオリジナル版(バトル)のサンプラのカウント値
 C_{vec} : Table 4.1 におけるベクトル化版(バトル)のサンプラのカウント値

Table 4.4 Test case 5

	標的側			入射側			テスト 粒子数	時間 ステップ数
	原子	質量	陽子数	原子	質量	陽子数		
テスト・ケース 5	Pb	208	82	Pb	208	82	1000	900

※他のデータはテスト・ケース 4 と同じ

Table 4.5 Execution time and result of SAMPLER in test case 5

	ABSOR 対応未コード	ABSOR 対応済コード
実行時間	CPU Time 1:07:38.48 VU Time 23:38.24	CPU Time 54:55.98 VU Time 25:26.62
サンプラの結果	Count Percent ABSOR : 85802 20.6% 1位 (DBNS 17.9% 2位)	Count Percent ABSOR : 17830 5.3% 6位 (DBNS 23.0% 1位)

Table 4.6 Execution times of global function SUM

測定配列	PE 数	2	4	8	16
RHSVBI(NX*NX*NZ) 要素数： 102541		8.1	12.6	20.1	36.7
RHVVBI(NX*NX*NZ, 0:3) 要素数： 410164		20.6	44.6	77.3	145.4
Rw(MAXPAR) 要素数： 416000		39.1	53.8	83.7	150.4
Pw(0:3, MAXPAR) 要素数： 1664000		153.7	214.0	334.5	597.6
IVA(MAXANT) 要素数： 30000		3.2	4.9	5.8	10.4
NDENS _w (0:200) 要素数： 201		0	0	0.1	0.2

(単位：ミリ秒)

Table 4.7 Effect of parallelization

並列化 対象箇所	コスト比率 (%)	走行時間 (1処理単 位) (ms)	並列化効果 (%)			
			PE = 2	PE = 4	PE = 8	PE = 16
TPPRED DO 2661	5.2	206.2	×	×	×	×
TPCORR DO 2621	4.7	186.6	×	×	×	×
TPSORT DO 2711	1.1	39.5	△ 0.3	△ 0.5	△ 0.4	— 0.0
XSORT DO 2811	4.3	39.8	△ 1.3	△ 1.9	△ 1.6	△ 0.1
ABSOR DO 1511	5.3	197.5	△ 2.0	△ 3.2	—	—
DENS	DO 1342・1343	14.8	24.0	△ 2.3	△ 3.3	△ 0.6
	DO 1382・1383	7.5	69.8	△ 1.5	△ 0.8	×
RCDELT DO 2111・2121		3.6	134.8	×	×	×

△：数%程度のコスト・ダウンしか期待できない

×：オーバヘッドの方が大きく並列化の対象にできない

7. 97, 6. 808, 2. 79, 3. 97, 51. 674, -14. 659	: K=200, M=0. 83, RH0=0. 17 ML2
0. 17, 0. 83	RH0, XMSTAR : RHO , BPF. MASS (REAL)
40, 40	MASSTA, MASSPR : TARGET/PROJECTILE MASS (INT)
20, 20	MSTAPR, MSPPR : NUMBER OF PCUT80TONS (INT)
00. 0	ELAB : KIN. ENERGY OF PROJECTILE (REAL)
0., 0., 0. 00	ZOTA, ZOPR, B : DISPLACEM. OF PROJ., IMPACT P. (REAL)
0. 1, 1. 0, 1. 0	DT, DX, DZ : SPACE AND TIME STEP SIZE (REAL)
0. 25	ALPHA : PING PARAM. (REAL)
1	ICOLIN : -1 CASC., 0 VLAS., 1 ALL (INT)
0	JPART : PARTICLE PRODUCTION
1	NNUCL : # OF NUCLEI (=1 ONLY PROJ.) (INT)
2	INSYS : =0 LAB SYSTEM, ELSE CM (INT)
2	INITD : 1: BOX 2: WOODS-SAXON (INT)
25	ISEED : ODD !! RANDOM NUMBER (INT)
9990	LIMIT : ALLOWED CPU TIME (INT)
900	NTMAX : NUMBER OF Timesteps (INT)
400	NUM : NUMBER OF CUT80PARTICLES (INT)
0, 50	IVSAM, ITSTEP : =0 NO VSAM; # OF VSAM Timesteps (INT)
100	IPSKIP : FRACTION OF Timestep. FOR VSAM (INT)
100	NFRSUM : SUMMARY AFTER NFRSUM Timesteps (INT)
100	NFRPRI : PRINTOUT AFTER NFRPRI Timestep (INT)
1. 0	CSFAC : SCALING FACTOR FOR X-SECTION (REAL)
0. 0	FACGS : SCALING FACTOR FOR GSBAR (REAL)
0. 0	FACGV : SCALING FACTOR FOR GVBAR (REAL)

Fig. 4.1 Input data for test case 1 (1/4)

7. 97, 6. 808, 2. 79, 3. 97, 51. 674, -14. 659	: K=200, M=0. 83, RH0=0. 17 ML2
0. 17, 0. 83	RH0, XMSTAR : RHO , BPF. MASS (REAL)
12, 1	MASSTA, MASSPR : TARGET/PROJECTILE MASS (INT)
6, 1	MSTAPR, MSPPR : NUMBER OF PCUT80TONS (INT)
4000, 0	ELAB : KIN. ENERGY OF PROJECTILE (REAL)
5., -10., 0. 00	ZOTA, ZOPR, B : DISPLACEM. OF PROJ., IMPACT P. (REAL)
0. 1, 0. 8, 0. 8	DT, DX, DZ : SPACE AND TIME STEP SIZE (REAL)
0. 25	ALPHA : PING PARAM. (REAL)
1	ICOLIN : -1 CASC., 0 VLAS., 1 ALL (INT)
0	JPART : PARTICLE PRODUCTION
2	NNUCL : # OF NUCLEI (=1 ONLY PROJ.) (INT)
2	INSYS : =0 LAB SYSTEM, ELSE CM (INT)
2	INITD : 1: BOX 2: WOODS-SAXON (INT)
25	ISEED : ODD !! RANDOM NUMBER (INT)
9990	LIMIT : ALLOWED CPU TIME (INT)
500	NTMAX : NUMBER OF Timesteps (INT)
800	NUM : NUMBER OF CUT80PARTICLES (INT)
0, 50	IVSAM, ITSTEP : =0 NO VSAM; # OF VSAM Timesteps (INT)
100	IPSKIP : FRACTION OF Timestep. FOR VSAM (INT)
100	NFRSUM : SUMMARY AFTBR NFRSUM TIMESTEPS (INT)
100	NFRPRI : PRINTOUT AFTER NFRPRI Timestep (INT)
1. 0	CSFAC : SCALING FACTOR FOR X-SECTION (REAL)
0. 0	FACGS : SCALING FACTOR FOR GSBAR (REAL)
0. 0	FACGV : SCALING FACTOR FOR GVBAR (REAL)

Fig. 4.1 Input data for test case 2 (2/4)

7. 97, 6. 808, 2. 79, 3. 97, 51. 674, -14. 659	:K=200, M*=0. 83, RH00=0. 17	ML2
0. 17, 0. 83	RH00, XMSTAR	: RHO , EFF. MASS (REAL)
28, 28	MASSTA, MASSPR	: TARGET/PROJECTILE MASS (INT)
14, 14	MSTAPR, MSPRPR	: NUMBER OF PCUT80TONS (INT)
2100. 0	BLAB	: KIN, BNBRGY OF PROJCTILE (RBAL)
8., -8., 0. 00	ZOTA, ZOPR, B	: DISPLACEM. OF PROJ., IMPACT P. (RBAL)
0. 1, 0. 8, 0. 8	DT, DX, DZ	: SPACE AND TIME STEP SIZE (RBAL)
0. 25	ALPHA	: PING PARAM. (RBAL)
1	ICOLIN	: -1 CASC., 0 VLAS., 1 ALL (INT)
0	JPART	: PARTICLE PRODUCTION
2	NNUCL	: # OF NUCLEI (=1 ONLY PROJ.) (INT)
1	INSYS	: =0 LAB SYSTEM, ELSB CM (INT)
2	INITD	: 1: BOX 2: WOODS-SAXON (INT)
25	ISEBD	: ODD !! RANDOM NUMBER (INT)
9990	LIMIT	: ALLOWED CPU TIME (INT)
500	NTMAX	: NUMBER OF Timesteps (INT)
800	NUM	: NUMBER OF TEST-PARTICLES (INT)
0, 50	IVSAM, ITSTEP	: =0 NO VSAM; # OF VSAM TIMESTEPS (INT)
100	IPSKIP	: FRACTION OF TIMESTP. FOR VSAM (INT)
100	NFRSUM	: SUMMARY AFTER NFRSUM TIMESTEPS (INT)
100	NFRPRI	: PRINTOUT AFTER NFRPRI TIMESTEP (INT)
1. 0	CSFAC	: SCALING FACTOR FOR X-SECTION (REAL)
0. 0	FACGS	: SCALING FACTOR FOR GSBAR (REAL)
0. 0	FACGV	: SCALING FACTOR FOR GVBAR (REAL)

Fig. 4.1 Input data for test case 3 (3/4)

7. 97, 6. 808, 2. 79, 3. 97, 51. 674, -14. 659	:K=200, M*=0. 83, RH00=0. 17	ML2
0. 17, 0. 83	RH00, XMSTAR	: RHO , EFF. MASS (REAL)
197, 197	MASSTA, MASSPR	: TARGET/PROJECTILE MASS (INT)
63, 63	MSTAPR, MSPRPR	: NUMBER OF PCUT80TONS (INT)
2000. 0	ELAB	: KIN, BNBRGY OF PROJECTILE (REAL)
13., -13., 0. 00	ZOTA, ZOPR, B	: DISPLACEM. OF PROJ., IMPACT P. (REAL)
0. 1, 0. 8, 0. 8	DT, DX, DZ	: SPACE AND TIME STEP SIZE (REAL)
0. 25	ALPHA	: PING PARAM. (REAL)
1	ICOLIN	: -1 CASC., 0 VLAS., 1 ALL (INT)
0	JPART	: PARTICLE PRODUCTION
2	NNUCL	: # OF NUCLEI (=1 ONLY PROJ.) (INT)
2	INSYS	: =0 LAB SYSTEM, ELSB CM (INT)
2	INITD	: 1: BOX 2: WOODS-SAXON (INT)
13	ISEBD	: ODD !! RANDOM NUMBER (INT)
99990	LIMIT	: ALLOWED CPU TIME (INT)
500	NTMAX	: NUMBER OF Timesteps (INT)
200	NUM	: NUMBER OF CUT80PARTICLES (INT)
0, 50	IVSAM, ITSTEP	: =0 NO VSAM; # OF VSAM TIMESTEPS (INT)
100	IPSKIP	: FRACTION OF TIMESTP. FOR VSAM (INT)
100	NFRSUM	: SUMMARY AFTER NFRSUM TIMESTEPS (INT)
100	NFRPRI	: PRINTOUT AFTBR NFRPRI TIMESTEP (INT)
1. 0	CSFAC	: SCALING FACTOR FOR X-SECTION (REAL)
0. 0	FACGS	: SCALING FACTOR FOR GSBAR (REAL)
0. 0	FACGV	: SCALING FACTOR FOR GVBAR (REAL)

Fig. 4.1 Input data for test case 4 (4/4)

```
#!/bin/csh -f
#@$-eo
#@$-q vppm
#@$-C exsampler
cd $QSUB_WORKDIR
setenv F7PARASAMP file:samp.data, interval:1, type:vtime
echo 'running RBUU/vpp-vector -Oe Test'
timex -H .../xrbuu.vec.Oe < input.cfg
echo 'RBUU/vpp-vector finished'
parasamp .../xrbuu.vec.Oe
```

Fig. 4.2 Shell script for execution of SAMPLER

```
#!/bin/csh -f
#@$-q gspc
#@$-eo
#@$-C DCNJOY
cd $QSUB_WORKDIR
frtpx -o xrbuu.vec.Oe -Z CMP.vecoe -Bpe -Si *.f
```

※最適化オプション：-Oe
(省略時解釈値)

Fig. 4.3 Shell script for compiling and linking

```
#!/bin/csh -f
#@$-eo
#@$-q gsps
#@$-1M 200mb
#@$-1T 1:00:00
#@$-C exanalze
cd $QSUB_WORKDIR
echo 'running analyzer for RBUU.Oe'
afrt -px240 -e -f analyze.out srbuu.org.f < input.cfg
echo 'analyzer for RBUU finished'
```

※srbuu.org.f：
対象ソースプログラムを
1本化したファイル

Fig. 4.4 Shell script for execution of ANALYZER

JAERI-Data/Code 97-051

<テスト・ケース 1>		
Synthesis Information		
Name	Count	Percent
dens	3	40.0
27682	24	38.0
17063	10	15.0
6905	1	1.5
5845	1	1.5
2330	1	1.5
2212	1	1.5
1265	1	1.5
1203	1	1.5
552	1	1.5
1564	1	1.5
1559	1	1.5
2088	1	1.5
706	1	1.5
xsort	1	1.5
tpcorr	1	1.5
matri2	1	1.5
init	1	1.5
cdns	1	1.5
tpblk	1	1.5
cross	1	1.5
MAIN	1	1.5
rauf	1	1.5
ran	1	1.5
rset	1	1.5
pboo	1	1.5
start	1	1.5
optime	1	1.5
efot	1	1.5
pdens	1	1.5
smrini	1	1.5
summary	1	1.5
angutn	1	1.5
asigin	1	1.5
absout	1	1.5
r3	1	1.5
merj	1	1.5
smrini	1	1.5
summary	1	1.5
antion	1	1.5
TOTAL	1381	100.0
606866	1	1.0
11	1.0	1.0
2048	1	1.0
11	1.0	1.0
2026	1	1.0
tpblkin	1	1.0
absout	1	1.0
rcount	1	1.0
twist	1	1.0
tpblkin	1	1.0
absout	1	1.0
TOTAL	39210	100.0

<テスト・ケース 2>		
Synthesis Information		
Name	Count	Percent
dens	43	43.1
24	33	33.2
1588	1	1.0
1673	1	1.0
1974	1	1.0
606	1	1.0
xsort	1	1.0
tpcorr	1	1.0
tpred	1	1.0
tsort	1	1.0
rodeit	1	1.0
permuit	1	1.0
resel	1	1.0
tpcorr	1	1.0
tpred	1	1.0
tsort	1	1.0
suraf	1	1.0
xsorta	1	1.0
suraf	1	1.0
sigra	1	1.0
r4	1	1.0
init	1	1.0
matri2	1	1.0
rauf	1	1.0
MAIN	1	1.0
rset	1	1.0
cross	1	1.0
cdns	1	1.0
ran	1	1.0
tpblk	1	1.0
cross	1	1.0
cdns	1	1.0
ran	1	1.0
start	1	1.0
optime	1	1.0
efot	1	1.0
pdens	1	1.0
smrini	1	1.0
summary	1	1.0
angutn	1	1.0
asigin	1	1.0
absout	1	1.0
TOTAL	1395	100.0

<テスト・ケース 3>		
Synthesis Information		
Name	Count	Percent
dens	49	49.3
27682	12	12.0
1588	1	1.0
1673	1	1.0
1974	1	1.0
606	1	1.0
xsort	1	1.0
tpcorr	1	1.0
tpred	1	1.0
tsort	1	1.0
rodeit	1	1.0
permuit	1	1.0
resel	1	1.0
tpcorr	1	1.0
tpred	1	1.0
tsort	1	1.0
suraf	1	1.0
xsorta	1	1.0
suraf	1	1.0
sigra	1	1.0
r4	1	1.0
init	1	1.0
matri2	1	1.0
rauf	1	1.0
MAIN	1	1.0
rset	1	1.0
cross	1	1.0
cdns	1	1.0
ran	1	1.0
tpblk	1	1.0
cross	1	1.0
cdns	1	1.0
ran	1	1.0
start	1	1.0
optime	1	1.0
efot	1	1.0
pdens	1	1.0
smrini	1	1.0
summary	1	1.0
angutn	1	1.0
asigin	1	1.0
absout	1	1.0
TOTAL	1395	100.0

<テスト・ケース 4>		
Synthesis Information		
Name	Count	Percent
dens	55	46.9
27682	2039	15.0
1588	1035	10.35
1673	1180	9.94
1974	8233	8.233
606	4807	4.807
xsort	3000	3.000
tpcorr	2744	2.744
tpred	2656	2.656
tsort	1691	1.691
rodeit	1621	1.621
permuit	1549	1.549
resel	1208	1.208
tpcorr	919	0.919
tpred	560	0.560
tsort	477	0.477
suraf	1743	0.1743
xsorta	1743	0.1743
suraf	86	0.086
sigra	710	0.0710
r4	1743	0.01743
init	733	0.00733
matri2	1960	0.001960
rauf	200	0.000200
MAIN	1960	0.0001960
rset	258	0.000258
cdns	243	0.000243
ran	108	0.000108
tpblk	68	0.000068
cross	124	0.000124
cdns	133	0.000133
ran	104	0.000104
start	54	0.000054
optime	34	0.000034
efot	30	0.000030
pdens	15	0.000015
smrini	19	0.000019
summary	8	0.000008
angutn	8	0.000008
asigin	4	0.000004
absout	5	0.000005
r3	5	0.000005
merj	3	0.000003
smrini	1	0.000001
summary	1	0.000001
antion	1	0.000001
TOTAL	1395	100.0

Fig. 4.5 Computational cost distributions in RBUU original version

* TEST-CACB 1 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd	
DBNS	21708	.1796E11	18.9	.4617E11	3.3	254	65.5	2.4-	2.6	0

vectorize - loop list

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
1331	do	S	18088	.1325E11	73.8	.1325E11	28.7	102541	0.0	1.0- 1.0
1371	do	S	3620	.2652E10	14.8	.2652E10	5.7	102541	0.0	1.0- 1.0
1341	do	V	19309914	.1024E10	5.7	.6656E10	14.4		100.0	3.9- 9.1
1381	do	V	3864018	.6059E09	3.4	.3938E10	8.5		100.0	3.9- 9.1
1311	do	V	14480	.2221E09	1.2	.1039E11	22.5	102541	100.0	40.3- 54.6
1321	do	V	18088	.1982E09	1.1	.9274E10	20.1	102541	100.0	40.3- 54.6

* TEST-CASE 2 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd	
DBNS	12161	.1068E11	20.2	.2377E11	3.1	160	62.1	2.0-	2.3	0

vectorize - loop list

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
1331	do	S	10131	.7508E10	70.3	.7508E10	31.6	102541	0.0	1.0- 1.0
1371	do	S	2030	.1504E10	14.1	.1504E10	6.3	102541	0.0	1.0- 1.0
1341	do	V	16875181	.9013E09	8.4	.2343E10	9.9		100.0	1.3- 3.9
1381	do	V	3377137	.5336E09	5.0	.1387E10	5.8		100.0	1.3- 3.9
1311	do	V	8120	.1245E09	1.2	.5828E10	24.5	102541	100.0	40.3- 54.6
1321	do	V	10131	.1110E09	1.0	.5194E10	21.9	102541	100.0	40.3- 54.6

* TEST-CASE 3 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd	
DBNS	13010	.1793E11	24.3	.3889E11	4.3	24	70.2	1.6-	2.5	0

vectorize - loop list

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
1331	do	S	10980	.9763E10	54.5	.9763E10	25.1	102541	0.0	1.0- 1.0
1341	do	V	.1344E09	.3953E10	22.1	.1028E11	26.4		100.0	1.3- 3.9
1381	do	V	26121859	.2142E10	11.9	.5568E10	14.3		100.0	1.3- 3.9
1371	do	S	2030	.1823E10	10.2	.1823E10	4.7	102541	0.0	1.0- 1.0
1311	do	V	8120	.1245E09	0.7	.5828E10	15.0	102541	100.0	40.3- 54.6
1321	do	V	10980	.1203E09	0.7	.5630E10	14.5	102541	100.0	40.3- 54.6

* TEST-CASE 4 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd	
DBNS	14180	.2572E11	27.0	.5645E11	5.3	19	75.9	1.5-	2.6	0

vectorize - loop list

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
1331	do	S	12150	.1168E11	45.4	.1168E11	20.7	102541	0.0	1.0- 1.0
1341	do	V	.2114E09	.7921E10	30.8	.2059E11	36.5		100.0	1.3- 3.9
1381	do	V	35248963	.3910E10	15.2	.1017E11	18.0		100.0	1.3- 3.9
1371	do	S	2030	.1951E10	7.6	.1951E10	3.5	102541	0.0	1.0- 1.0
1321	do	V	12150	.1391E09	0.5	.6229E10	11.0	102541	100.0	40.3- 54.6
1311	do	V	8120	.1245E09	0.5	.5828E10	10.3	102541	100.0	40.3- 54.6

Fig. 4.6 Dynamic behavior of DBNS routine in RBUU original version

* TEST-CASE 1 * -De

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
SMEAR	47000	.2696E11	28.4	.1043E13	75.4	764	99.6	34.0- 44.0	0
vectorize - loop list SMEAR									
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-rate	v-effect
2501	do	V	4052002	.1037E11	38.5	.4853E12	46.5	1597	100.0
2441	do	V	4189358	.8577E10	31.8	.4014E12	38.5	1597	100.0
2511	do	S	4052002	.4267E10	15.8	.4267E10	0.4	39	0.0
2451	do	V	4189358	.3145E10	11.7	.1472E12	14.1	1597	100.0
2491	do	V	4052002	.4103E09	1.5	.4267E10	0.4	39	100.0
2431	do	S	2867000	.79597802	0.3	.79597802	0.0	1	0.0

* TEST-CASE 2 * -De

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
SMEAR	26298	.1508E11	28.5	.5832E12	77.0	764	99.6	34.0- 44.0	0
vectorize - loop list SMEAR									
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-rate	v-effect
2501	do	V	2266485	.5801E10	38.5	.2715E12	46.5	1597	100.0
2441	do	V	2343315	.4798E10	31.8	.2245E12	38.5	1597	100.0
2511	do	S	2266485	.2387E10	15.8	.2387E10	0.4	39	0.0
2451	do	V	2343315	.1759E10	11.7	.8233E11	14.1	1597	100.0
2491	do	V	2266485	.2295E09	1.5	.2387E10	0.4	39	100.0
2431	do	S	1604178	.44522985	0.3	.44522985	0.0	1	0.0

* TEST-CASE 3 * -De

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
SMEAR	27996	.1575E11	21.4	.6090E12	67.6	761	99.6	34.0- 44.0	0
vectorize - loop list SMEAR									
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-rate	v-effect
2501	do	V	2366667	.6057E10	38.5	.2835E12	46.5	1597	100.0
2441	do	V	2446893	.5010E10	31.8	.2345E12	38.5	1597	100.0
2511	do	S	2366667	.2492E10	15.8	.2492E10	0.4	39	0.0
2451	do	V	2446893	.1837E10	11.7	.8597E11	14.1	1597	100.0
2491	do	V	2366667	.2396E09	1.5	.2492E10	0.4	39	100.0
2431	do	S	1707756	.46490967	0.3	.46490967	0.0	1	0.0

* TEST-CASE 4 * -De

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
SMEAR	30336	.1666E11	17.5	.6445E12	60.0	757	99.6	34.0- 44.0	0
vectorize - loop list SMEAR									
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-rate	v-effect
2501	do	V	2504727	.6410E10	38.5	.3000E12	46.5	1597	100.0
2441	do	V	2589633	.5302E10	31.8	.2481E12	38.5	1597	100.0
2511	do	S	2504727	.2637E10	15.8	.2637E10	0.4	39	0.0
2451	do	V	2589633	.1944E10	11.7	.9098E11	14.1	1597	100.0
2491	do	V	2504727	.2536E09	1.5	.2637E10	0.4	39	100.0
2431	do	S	1850496	.49203027	0.3	.49203027	0.0	1	0.0

Fig. 4.7 Dynamic behavior of SMEAR routine in RBUU original version

* TEST-CASE 1 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd			
		ITERAT	3614	.4230B11	44.6	.2304B12	16.7	2999	83.4	5.4-	5.5	0
<hr/>												
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect		
1831	do	V	10846	.3712B11	87.8	.5672B11	24.6	102541	35.3	1.5-	1.5	
1771	do	V	220454	.1750B10	4.1	.1372B11	6.0	1681	89.1	7.7-	8.0	
1861	do	V	661606	.1283B10	3.0	.6006B11	26.1	1681	100.0	40.3-	54.6	
1811	do	V	440908	.8552B09	2.0	.4002B11	17.4	1681	100.0	40.3-	54.6	
1911	do	V	14456	.4751B09	1.1	.2224B11	9.6	102541	100.0	40.3-	54.6	
1841	do	V	10846	.3263B09	0.8	.1527B11	6.6	16000	100.0	40.3-	54.6	

* TEST-CASE 2 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd			
		ITERAT	2021	.2355B11	44.4	.1236B12	16.3	2943	82.7	5.2-	5.3	0
<hr/>												
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect		
1831	do	V	6068	.2077B11	88.2	.3173B11	25.7	102541	35.3	1.5-	1.5	
1771	do	V	123281	.9763B09	4.1	.7669B10	6.2	1681	89.2	7.7-	8.0	
1861	do	V	370148	.7179B09	3.0	.3360B11	27.2	1681	100.0	40.3-	54.6	
1811	do	V	246562	.4782B09	2.0	.2238B11	18.1	1681	100.0	40.3-	54.6	
1911	do	V	8084	.2657B09	1.1	.1243B11	10.1	102541	100.0	40.3-	54.6	
1881	do	V	370148	.1462B09	0.6	.6844B10	5.5	1681	100.0	40.3-	54.6	

* TEST-CASE 3 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd			
		ITERAT	2021	.2723B11	36.9	.1642B12	18.2	3173	85.2	5.9-	6.1	0
<hr/>												
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect		
1831	do	V	6917	.2367B11	86.9	.3617B11	22.0	102541	35.3	1.5-	1.5	
1771	do	V	123281	.9774B09	3.6	.7670B10	4.7	1681	89.2	7.7-	8.0	
1861	do	V	421937	.8184B09	3.0	.3830B11	23.3	1681	100.0	40.3-	54.6	
1841	do	V	6917	.5322B09	2.0	.2491B11	15.2	40916	100.0	40.3-	54.6	
1811	do	V	246562	.4782B09	1.8	.2238B11	13.6	1681	100.0	40.3-	54.6	
1791	do	V	4042	.3069B09	1.1	.1436B11	8.7	40384	100.0	40.3-	54.6	

* TEST-CASE 4 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd			
		ITERAT	2021	.3227B11	33.9	.2176B12	20.2	3414	87.0	6.6-	6.9	0
<hr/>												
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect		
1831	do	V	8087	.2768B11	85.8	.4228B11	19.4	102541	35.3	1.5-	1.5	
1841	do	V	8087	.1121B10	3.5	.5247B11	24.1	73726	100.0	40.3-	54.6	
1771	do	V	123281	.1006B10	3.1	.7698B10	3.5	1681	88.8	7.5-	7.8	
1861	do	V	493307	.9568B09	3.0	.4478B11	20.6	1681	100.0	40.3-	54.6	
1791	do	V	4042	.5604B09	1.7	.2623B11	12.1	73734	100.0	40.3-	54.6	
1811	do	V	246562	.4782B09	1.5	.2238B11	10.3	1681	100.0	40.3-	54.6	

Fig. 4.8 Dynamic behavio of ITERAT routine in RBUU original version

* TEST-CASE 1 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
XSORT	3624	.2308E10	2.4	.2818E11	2.0	35977	93.8	11.7- 12.7	0

vectorize - loop list

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
2861	do	S	3620	.1043E10	45.2	.1043E10	3.7	16000	0.0	1.0- 1.0
2821	do	S	3620	.6950E09	30.1	.6950E09	2.5	16000	0.0	1.0- 1.0
2791	do	M	3624	.83009471	3.6	.3885E10	13.8	16000	100.0	40.3- 54.6
2841	do	V	3624	.79402769	3.4	.3716E10	13.2	102540	100.0	40.3- 54.6
2831	do	V	3624	.55582481	2.4	.2601E10	9.2	102541	100.0	40.3- 54.6
2801	do	V	3624	.39701772	1.7	.1858E10	6.6	102541	100.0	40.3- 54.6

* TEST-CASE 2 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
XSORT	2036	.9431E09	1.8	.1174E11	1.6	29318	94.0	12.0- 12.9	0

vectorize - loop list

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
2861	do	S	1855	.3368E09	35.7	.3368E09	2.9	10086	0.0	1.0- 1.0
2821	do	S	1855	.2245E09	23.8	.2245E09	1.9	10086	0.0	1.0- 1.0
2851	do	S	181	.79828190	8.5	.79828190	0.7	9590	0.0	1.0- 1.0
2811	do	S	181	.65948428	7.0	.65948428	0.6	9590	0.0	1.0- 1.0
2841	do	V	2036	.44609282	4.7	.2088E10	17.8	102540	100.0	40.3- 54.6
2831	do	V	2036	.31226802	3.3	.1461E10	12.4	102541	100.0	40.3- 54.6

* TEST-CASE 3 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
XSORT	2036	.3593E10	4.9	.3339E11	3.7	63159	91.2	9.0- 9.5	0

vectorize - loop list

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
2861	do	S	1790	.1318E10	36.7	.1318E10	3.9	40895	0.0	1.0- 1.0
2821	do	S	1790	.8784E09	24.4	.8784E09	2.6	40895	0.0	1.0- 1.0
2851	do	S	246	.4085E09	11.4	.4085E09	1.2	36134	0.0	1.0- 1.0
2811	do	S	246	.3375E09	9.4	.3375E09	1.0	36134	0.0	1.0- 1.0
2791	do	M	2036	.1176E09	3.3	.5500E10	16.5	40320	100.0	40.3- 54.6
2901	do	V	2036	.49114701	1.4	.2299E10	6.9	161280	100.0	40.3- 54.6

* TEST-CASE 4 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
XSORT	2036	.6442E10	6.8	.5713E11	5.3	100347	90.7	8.6- 9.1	0

vectorize - loop list

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
2861	do	S	1808	.2417E10	37.5	.2417E10	4.2	74268	0.0	1.0- 1.0
2821	do	S	1808	.1611E10	25.0	.1611E10	2.8	74268	0.0	1.0- 1.0
2851	do	S	228	.7153E09	11.1	.7153E09	1.3	68247	0.0	1.0- 1.0
2811	do	S	228	.5910E09	9.2	.5910E09	1.0	68247	0.0	1.0- 1.0
2791	do	M	2036	.2145E09	3.3	.1004E11	17.6	73594	100.0	40.3- 54.6
2901	do	V	2036	.89646008	1.4	.4195E10	7.3	294375	100.0	40.3- 54.6

Fig. 4.9 Dynamic behavior of XSORT routine in RBUU original version

* TEST-CASE 1 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
ABSOR	900	.1569E10	1.7	.1569E10	0.1	1	0.0	1.0-	1.0
<hr/>									
vectorize - loop list		ABSOR							
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-rate	v-effect
1141	do	S	900	.1569E10	100.0	.1569E10	100.0	102541	0.0
total			903	18938	0.0	18938	0.0	1	0.0
1221	do	S	1	1005	0.0	1005	0.0	201	0.0
1211	do	S	1	755	0.0	755	0.0	151	0.0
1191	do	V	2	55	0.0	1510	0.0	151	100.0
1201	do	V	2	55	0.0	2010	0.0	201	100.0
									19.5- 35.1
									28.6- 42.9

* TEST-CASE 2 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
ABSOR	500	.1122E10	2.1	.1137E10	0.2	1	2.2	1.0-	1.0
<hr/>									
vectorize - loop list		ABSOR							
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-rate	v-effect
1141	do	S	500	.8716E09	77.7	.8716E09	76.7	102541	0.0
1171	do	S	82808	.2360E09	21.0	.2360E09	20.8	7	0.0
1181	do	V	611385	8465331	0.8	22009860	1.9	4	100.0
1151	do		51270500	4328297	0.4	4328297	0.4	0	0.0
1161	do	V	82808	1146572	0.1	2981088	0.3	4	100.0
total			503	10538	0.0	10538	0.0	1	0.0
									1.0- 1.0

* TEST-CASE 3 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
ABSOR	500	.3644E10	4.9	.3804E10	0.4	1	6.8	1.0-	1.1
<hr/>									
vectorize - loop list		ABSOR							
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-rate	v-effect
1171	do	S	390653	.2637E10	72.4	.2637E10	69.3	17	0.0
1141	do	S	500	.8716E09	23.9	.8716E09	22.9	102541	0.0
1181	do	V	6832497	94603805	2.6	.2460E09	6.5	4	100.0
1151	do		51270500	34663926	1.0	34663926	0.9	0	0.0
1161	do	V	390653	5409042	0.1	14063508	0.4	4	100.0
total			503	10538	0.0	10538	0.0	1	0.0
									1.0- 1.0

* TEST-CASE 4 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd
ABSOR	500	.3305E10	3.5	.3448E10	0.3	1	6.7	1.0-	1.1
<hr/>									
vectorize - loop list		ABSOR							
do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-rate	v-effect
1171	do	S	513165	.2290E10	69.3	.2290E10	66.4	12	0.0
1141	do	S	500	.8716E09	26.4	.8716E09	25.3	102541	0.0
1181	do	V	5932975	82148885	2.5	.2136E09	6.2	4	100.0
1151	do		51270500	53734626	1.6	53734626	1.6	0	0.0
1161	do	V	513165	7105362	0.2	18473940	0.5	4	100.0
total			503	10538	0.0	10538	0.0	1	0.0
									1.0- 1.0

Fig. 4.10 Dynamic behavior of ABSOR routine in RBUU original version

* TEST-CASE 1 * -De

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd	
PERMUT	650822	.2658B09	0.3	.3295B09	0.0	15	21.4	1.2-	1.2	0

vectorize - loop list

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	
1951	do	S	650822	.2395B09	90.1	.2395E09	72.7	22	0.0	1.0-	1.0
	total		650822	19524660	7.3	19524660	5.9	1	0.0	1.0-	1.0
1941	do	V	650822	6773646	2.5	70445915	21.4	22	100.0	7.8-	13.0

* TEST-CASE 2 * -De

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd	
PERMUT	369783	92483835	0.2	.1119B09	0.0	9	20.5	1.2-	1.2	0

vectorize - loop list

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	
1951	do	S	369783	77866953	84.2	77866953	69.6	12	0.0	1.0-	1.0
	total		369783	11093490	12.0	11093490	9.9	1	0.0	1.0-	1.0
1941	do	V	369783	3523392	3.8	22902045	20.5	12	100.0	3.9-	9.1

* TEST-CASE 2 * -De

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd	
PERMUT	2634184	.3892B09	0.5	.4397B09	0.0	4	18.6	1.0-	1.2	0

vectorize - loop list

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	
1951	do	S	2634184	.2787B09	71.6	.2787E09	63.4	6	0.0	1.0-	1.0
	total		2634184	79025520	20.3	79025520	18.0	1	0.0	1.0-	1.0
1941	do	V	2634184	31524598	8.1	81963955	18.6	6	100.0	1.3-	3.9

* TEST-CASE 4 * -De

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd	
PERMUT	4990136	.7786B09	0.8	.8809B09	0.1	5	18.9	1.0-	1.2	0

vectorize - loop list

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	
1951	do	S	4990136	.5650B09	72.6	.5650E09	64.1	7	0.0	1.0-	1.0
	total		4990136	.1497B09	19.2	.1497E09	17.0	1	0.0	1.0-	1.0
1941	do	V	4990136	63915375	8.2	.1662E09	18.9	7	100.0	1.3-	3.9

Fig. 4.11 Dynamic behavior of PERMUT routine in RBUU original version

* TEST-CASE 1 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd	
RCDELT	900	.1156E10	1.2	.2509E10	0.2	160	56.1	2.1-	2.2	0

vectorize - loop list ----- RCDELT

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
2111	do	S	900	.6590E09	57.0	.6590E09	26.3	102541	0.0	1.0- 1.0
2131	do	V	900	.4045E09	35.0	.1572E10	62.6	7661	75.9	3.8- 3.9
2161	do		900	60452325	5.2	60452325	2.4	87	0.0	1.0- 1.0
2121	do	V	650822	25458096	2.2	.1655E09	6.6	11	100.0	3.9- 9.1
2141	do	V	900	3491618	0.3	45398789	1.8	134	95.8	11.0- 14.5
2231	do	S	900	999306	0.1	999306	0.0	87	0.0	1.0- 1.0

* TEST-CASE 2 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd	
RCDELT	500	.5280E09	1.0	.9444E09	0.1	147	47.2	1.7-	1.8	0

vectorize - loop list ----- RCDELT

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
2111	do	S	500	.3663E09	69.4	.3663E09	38.8	102541	0.0	1.0- 1.0
2131	do	V	500	.1280E09	24.2	.5024E09	53.2	4424	76.2	3.9- 4.0
2121	do	V	369783	20416772	3.9	53083608	5.6	6	100.0	1.3- 3.9
2161	do		500	10829159	2.1	10829159	1.1	28	0.0	1.0- 1.0
2141	do	V	500	851225	0.2	8241970	0.9	44	95.8	8.1- 11.0
2171	do		141	519108	0.1	519108	0.1	11	0.0	1.0- 1.0

* TEST-CASE 3 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd	
RCDELT	500	.1132E10	1.5	.2580E10	0.3	26	62.9	2.2-	2.3	0

vectorize - loop list ----- RCDELT

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
2131	do	V	500	.4553E09	40.2	.1770E10	68.6	15525	75.9	3.8- 3.9
2111	do	S	500	.4116E09	36.4	.4116E09	16.0	102541	0.0	1.0- 1.0
2121	do	V	2634184	.1433E09	12.7	.1863E09	7.2	3	100.0	1.0- 1.6
2161	do		500	.1069E09	9.4	.1069E09	4.1	276	0.0	1.0- 1.0
2341	do	S	500	4100205	0.4	4100205	0.2	139	0.0	1.0- 1.0
2141	do	V	500	3730964	0.3	55897338	2.2	298	96.0	13.5- 15.9

* TEST-CASE 4 * -0e

vectorize - routine list

routine	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect	overhd	
RCDELT	500	.2108E10	2.2	.5430E10	0.5	18	65.1	2.4-	2.6	0

vectorize - loop list ----- RCDELT

do-id	kind	v	ex-count	v-cost	%	s-cost	%	v-leng	v-rate	v-effect
2131	do	V	500	.9194E09	43.6	.3576E10	65.8	31378	75.9	3.8- 3.9
2161	do		500	.5296E09	25.1	.5296E09	9.8	1366	0.0	1.0- 1.0
2111	do	S	500	.4587E09	21.8	.4587E09	8.4	102541	0.0	1.0- 1.0
2121	do	V	4990136	.1448E09	6.9	.3765E09	6.9	3	100.0	1.3- 3.9
2341	do	S	500	18496854	0.9	18496854	0.3	627	0.0	1.0- 1.0
2141	do	V	500	16565628	0.8	.2724E09	5.0	1452	96.0	15.6- 17.3

Fig. 4.12 Dynamic behavior of RCDELT routine in RBUU original version

(変更前)

```

s      DO 1331 I = 1, NX*NX*NZ
s          IF( NGP(I) .GT. 0) THEN
v              DO 1341 J = IGP(I)+1, IGP(I)+NGP(I)
v                  RHSVEI(I) = RHSVEI(I) + FAC * XMEFF(J) / P(0,J)
v 1341      CONTINUE
s          END IF
s 1331 CONTINUE

```



(変更後)

```

JX = 0
v      DO 1330 I = 1, NX*NX*NZ
v          IF( NGP(I) .GT. 0) THEN
v              JX = JX + 1
v              NV(JX) = I
v              NG1(JX) = IGP(I) + 1
v              NG2(JX) = IGP(I) + NGP(I)
v          END IF
v 1330 CONTINUE
s      DO 1340 I = 1, JX
v          DO 1341 J = NG1(I), NG2(I)
v              RHSVEI(NV(I)) = RHSVEI(NV(I)) + FAC * XMEFF(J) / P(0,J)
v 1341 CONTINUE
s 1340 CONTINUE

```

Fig. 4.13 Modification of DENS routine (1-st step)

```

JX = 0
v      DO 1330 I = 1, NX*NX*NZ
v          IF( NGP(I) .GT. 0) THEN
v              JX = JX + 1
v              NV(JX) = I
v              NG1(JX) = IGP(I) + 1
v              NG2(JX) = IGP(I) + NGP(I)
v          END IF
v 1330 CONTINUE
    ngmin = NG1(1)
    ngmax = NG2(1)
v      do 10 I = 2, JX
v          ngmin = MIN(ngmin, NG1(I))
v          ngmax = MAX(ngmax, NG2(I))
v 10 continue
v      do 20 I = ngmin, ngmax
v          pw0(I) = FAC * XMBFF(I) / P(0,I)
v 20 continue
s      DO 1340 I = 1, JX
*VOCL LOOP, SCALAR
    DO 1341 J = NG1(I), NG2(I)
    RHSVEI(NV(I)) = RHSVEI(NV(I)) + pw0(J)
2 1341 CONTINUE
s 1340 CONTINUE

```

Fig. 4.14 Modification of DENS routine (2-nd step)

(DENSルーチン)

```

v      do 20 I = ngmin, ngmax
v          pw1(I) = FAC * XMEFF(I) / P(0, I)
v 20 continue
v      do 1340 I = 1, NX0
v          RHSVEI(NV0(I)) = pw1(NG0(I))
v 1340 continue
s      DO 1341 I = 1, NX1
*VOCL LOOP, SCALAR
2          DO 1342 J = NG1(I), NG2(I)
2          RHSVEI(NV1(I)) = RHSVEI(NV1(I)) + pw1(J)
2 1342 CONTINUE
s 1341 CONTINUE

```

(XSORT ルーチンへの追加処理)

```

      .
      .
      .
NX0 = 0
NX1 = 0
do 2965 I = 1, NX*NX*NZ
    if(NGP(I) .gt. 0) then
        if(NGP(I) .eq. 1) then
            NX0 = NX0 + 1
            NV0(NX0) = I
            NG0(NX0) = IGP(I) + 1
        else
            NX1 = NX1 + 1
            NV1(NX1) = I
            NG1(NX1) = IGP(I) + 1
            NG2(NX1) = IGP(I) + NGP(I)
        end if
    end if
2965 continue
ngmin = MIN(NG0(1), NG1(1))
ngmax = NG0(NX0)
do 2966 I = 1, NX1
    ngmax = MAX(ngmax, NG2(I))
2966 continue

```

Fig. 4.15 Modification of DENS routine (3-rd step)

(変更前)

```

s      DO 1371 I = 1, NX*NX*NZ
s          IF( NGP(I) .GT. 0) THEN
v              DO 1381 J=IGP(I)+1, IGP(I)+NGP(I)
v                  RHVVEI(I, 0) = RHVVEI(I, 0) + FAC
v                      RHVVEI(I, 1) = RHVVEI(I, 1) + FAC * P(1,J) / P(0,J)
v                          RHVVEI(I, 2) = RHVVEI(I, 2) + FAC * P(2,J) / P(0,J)
v                              RHVVEI(I, 3) = RHVVEI(I, 3) + FAC * P(3,J) / P(0,J)
v      1381 CONTINUE
s          END IF
s      1371 CONTINUE

```



(変更後)

```

v      do 1380 I = ngmin,ngmax
v          pw1(I) = FAC * P(1,I) / P(0,I)
v          pw2(I) = FAC * P(2,I) / P(0,I)
v          pw3(I) = FAC * P(3,I) / P(0,I)
v      1380 continue
v      do 1381 I = 1, NX0
v          RHVVEI(NV0(I),0) = FAC
v          RHVVEI(NV0(I),1) = pw1(NG0(I))
v          RHVVEI(NV0(I),2) = pw2(NG0(I))
v          RHVVEI(NV0(I),3) = pw3(NG0(I))
v      1381 CONTINUE
s      DO 1382 I = 1, NX1
*VOCL LOOP,SCALAR
2      DO 1383 J = NG1(I), NG2(I)
2          RHVVEI(NV1(I),0) = RHVVEI(NV1(I),0) + FAC
2          RHVVEI(NV1(I),1) = RHVVEI(NV1(I),1) + pw1(J)
2          RHVVEI(NV1(I),2) = RHVVEI(NV1(I),2) + pw2(J)
2          RHVVEI(NV1(I),3) = RHVVEI(NV1(I),3) + pw3(J)
2      1383 CONTINUE
s      1382 CONTINUE

```

Fig. 4.16 Modification of DO 1371-1381 in DEN\$ routine

(変更前)

```

s      DO 2411 IT = 1, ITASK
s      DO 2421 IZ = MINIZ1(IT), MAXIZ1(IT)
s      DO 2431 I = 0, IDIMS
v
:
v
s      2431 CONTINUE
s      2421 CONTINUE
s      2411 CONTINUE
s      DO 2461 IT=1, ITASK
s      DO 2471 IZ = MINIZ(IT), MAXIZ(IT)
s      DO 2481 I = 0, IDIMS
v          DO 2491 IY = -MAXX+1, MAXX-1
v              RANDX( IY, 0, IT) = VSRC( 1 + (MAXX+IY) * NX, IZ, I)
v              RANDX( IY, 1, IT) = VSRC( NX + (MAXX+IY) * NX, IZ, I)
v
s      2491 CONTINUE
v
:
v
s 3      DO 2511 IY = -MAXX+1, MAXX-1
s 3          VTAR( 1 + (MAXX+IY) * NX, IZ, I) = RANDX( IY, 0, IT )
s 3          VTAR( NX + (MAXX+IY) * NX, IZ, I) = RANDX( IY, 1, IT )
s 3      2511 CONTINUE
s      2481 CONTINUE
s      2471 CONTINUE
s      2461 CONTINUE

```



(変更後)

```

C      DO 2411 IT = 1, ITASK
s      DO 2421 IZ = MINIZ1(IT), MAXIZ1(IT)
s      DO 2431 I = 0, IDIMS
v
:
v
s      2431 CONTINUE
s      2421 CONTINUE
C2411 CONTINUE
C      DO 2461 IT=1, ITASK
s      DO 2471 IZ = MINIZ(IT), MAXIZ(IT)
s      DO 2481 I = 0, IDIMS
C          DO 2491 IY = -MAXX+1, MAXX-1
C              RANDX( IY, 0, IT) = VSRC( 1 + (MAXX+IY) * NX, IZ, I)
C              RANDX( IY, 1, IT) = VSRC( NX + (MAXX+IY) * NX, IZ, I)
C
s      2491 CONTINUE
v
:
v
*VOCL LOOP, NOVREC(VTAR)
v      DO 2511 IY = -MAXX+1, MAXX-1
v          VTAR( 1 + (MAXX+IY) * NX, IZ, I)
v              = VSRC( 1 + (MAXX+IY) * NX, IZ, I)
v          VTAR( NX + (MAXX+IY) * NX, IZ, I)
v              = VSRC( NX + (MAXX+IY) * NX, IZ, I)
v
s      2511 CONTINUE
s      2481 CONTINUE
s      2471 CONTINUE
C2461 CONTINUE

```

Fig. 4.17 Modification of SMEAR routine

(変更前)

```

S      DO 1761 IZ = -MAXZ, MAXZ
V      DO 1771 I = 1, NX * NX
V          IF( SIGMAT(I, IZ, T1(0)) .LE. BOUND ) SITMAT(I, IZ, 1) = 0.0
V          IF( SIGMAT(I, IZ, T1(0)) .GT. BOUND )
V              > SITMAT(I, IZ, 1) = SIGMAT(I, IZ, T1(0)) - BOUND
V              SITMAT(I, IZ, 2) = SIGMAT(I, IZ, T1(0)) + BOUND
V      1771 CONTINUE
S      1761 CONTINUE

V      DO 1831 I = 1, NX * NX * NZ
V          TDIFF = FT1VEC(I, IREL2) - FT1VEC(I, IREL1)
V          ADIFF = ABS( TDIFF )
V          IF( ADIFF .GT. EPS )
+            SITVEC(I, IREL3) = SITVEC(I, IREL2) -
+                ( SITVEC(I, IREL2) - SITVEC(I, IREL1) ) / TDIFF
+                * FT1VEC(I, IREL2)
V          IF( ADIFF .LE. EPS ) SITVEC(I, IREL3) = SITVEC(I, IREL2)
V      1831 CONTINUE

```



(変更後)

```

S      DO 1761 IZ = -MAXZ, MAXZ
V      DO 1771 I = 1, NX * NX
V          IF( SIGMAT(I, IZ, T1(0)) .LE. BOUND ) THEN
V              SITMAT(I, IZ, 1) = 0.0
V          ELSE
V              SITMAT(I, IZ, 1) = SIGMAT(I, IZ, T1(0)) - BOUND
V          END IF
V          SITMAT(I, IZ, 2) = SIGMAT(I, IZ, T1(0)) + BOUND
V      1771 CONTINUE
S      1761 CONTINUE

V      DO 1831 I = 1, NX * NX * NZ
V          TDIFF = FT1VEC(I, IREL2) - FT1VEC(I, IREL1)
V          ADIFF = ABS( TDIFF )
V          IF( ADIFF .GT. EPS ) THEN
V              SITVEC(I, IREL3) = SITVEC(I, IREL2) -
+                ( SITVEC(I, IREL2) - SITVEC(I, IREL1) ) / TDIFF
+                * FT1VEC(I, IREL2)
V          ELSE
V              SITVEC(I, IREL3) = SITVEC(I, IREL2)
V          END IF
V      1831 CONTINUE

```

Fig. 4.18 Modification of ITERAT routine

(変更後)

```

M DO 2791 I = 1, NTOTAL,
V   IX(1) = INT(R(1,1) * X0X + 50.5) - 50
V   IY(1) = INT(R(2,1) * X0X + 50.5) - 50
V   IZ(1) = INT(R(3,1) * X0Z + 50.5) - 50
M   IF(IX(1) .GT. MAXX2 .OR. IX(1) .LT. -MAXX2) WARNING = .TRUE.
M   IF(IY(1) .GT. MAXX2 .OR. IY(1) .LT. -MAXX2) WARNING = .TRUE.
M   IF(IZ(1) .GT. MAXX2 .OR. IZ(1) .LT. -MAXX2) WARNING = .TRUE.
V   IV(1) = 1 + (MAXX1*IX(1)) + NX*(MAXX1*IY(1))
V   + NX*NZ*(MAXX1*IZ(1))
V 2791 CONTINUE
V

IFC(WARNING) THEN
M   DO 2811 I = 1, NTOTAL,
V     IF( IX(1) .LE. MAXX2 .AND. IX(1) .GE. -MAXX2 .AND.
V     + IY(1) .LE. MAXX2 .AND. IY(1) .GE. -MAXX2 .AND.
V     + IZ(1) .LE. MAXX2 .AND. IZ(1) .GE. -MAXX2)
V     + IGP(IV(1)) = IGP(IV(1)) + 1
V 2811 CONTINUE
V

ELSE
M   DO 2821 I = 1, NTOTAL,
V     IGP(IV(1)) = IGP(IV(1)) + 1
V 2821 CONTINUE
END IF

IFC(WARNING) THEN
M   DO 2851 I = 1, NTOTAL,
V     IF( IX(1) .LE. MAXX2 .AND. IX(1) .GE. -MAXX2 .AND.
V     + IY(1) .LE. MAXX2 .AND. IY(1) .GE. -MAXX2 .AND.
V     + IZ(1) .LE. MAXX2 .AND. IZ(1) .GE. -MAXX2) THEN
V       ICOPY(1) = IGP(IV(1))
V       IGP(IV(1)) = IGP(IV(1)) - 1
EELSE
V       ICOPY(1) = NLAST
V       NLAST = NLAST - 1
BND IF
V 2851 CONTINUE
V

ELSE
M   DO 2861 I = 1, NTOTAL,
V     ICOPY(1) = IGP(IV(1))
V     IGP(IV(1)) = IGP(IV(1)) - 1
V 2861 CONTINUE
END IF

```

(変更前)

```

JX = 0
DO 2791 I = 1, NTOTAL,
V   IX(1) = INT(R(1,1) * X0X + 50.5) - 50
V   IY(1) = INT(R(2,1) * X0X + 50.5) - 50
V   IZ(1) = INT(R(3,1) * X0Z + 50.5) - 50
V
V   IF(IX(1) .GT. MAXX2 .OR. IX(1) .LT. -MAXX2) JX = IX(1) * MAXX2 / OR.
V   + IY(1) * MAXX2 / OR. IZ(1) * MAXX2 / OR.
V   + IZ(1) * MAXX2 / OR. IX(1) * MAXX2 / OR.
V   + IY(1) * MAXX2 / OR. IZ(1) * MAXX2 / OR.
V   + IZ(1) * MAXX2 / OR. IX(1) * MAXX2 / OR.
V   + IY(1) * MAXX2 / OR. IZ(1) * MAXX2 / OR.
V
V   JX = JX + 1
V   IX(1W) = 1
V   IY(1W) = 0
V
V   else
V     IV(1) = 1 + (MAXX1*IX(1)) + NX*(MAXX1*IY(1))
V     + NX*NZ*(MAXX1*IZ(1))
V   end if
V 2791 CONTINUE
V

S 2   DO 2811 I = 1, NTOTAL
M 2   ICOPY(1) = IGP(IV(1)) - IGP(IV(1)) + 1
V 2   2811 CONTINUE
V

S 2   DO 2851 I = 1, NTOTAL
M 2   ICOPY(IV(1)) = IGP(IV(1))
V 2   2851 CONTINUE
V   DO 2861 J = 1, JX
V     ICOPY(IV(1)) = IGP(IV(1))
V     NLAST = NLAST - 1
V 2861 CONTINUE
V

```

Fig. 4.19 Modification of XSORT routine

後更變

前更變

```

S DO 1141 LG = 1, NV, * NV, * NZ
V DO 1151 LA = 1, GPA(LG) + 1, GPA(LG) + NGPA(LG)
V DO 1161 PA(1,LA) = 0,3
V PA(1,LA) = PA(1,LA)
V CONTINUE
V EMAP = XMAPFAC(LA)
V SUM = 0.0
V VECDEN = 0.0
V DO 1171 LB = 1, GP(LG) + 1, GP(LG) + NGP(LG)
V DO 1181 I = 0,3
V PA(I,LB) = PA(I,LB)
V CONTINUE
V EMPP = YMAPFCL(B)
V TOTU = PA(1,0) + PA(0,0) / TOTU
V BETAV = PA(1,1) + PA(0,1) / TOTU
V BETAZ = PA(2,2) + PA(3,3) / TOTU
V BETAY = PA(2,3) + PA(3,2) / TOTU
V BETAZ = 1.0 - BETAX**2 - BETAY**2 - BETAZ* *
V GAMMA = 1.0 / SORT(1.0 - BETAX**2 + BETAY**2)
V TRAU = GAMMA * ( GAMMA +
V (PA(1)*BETAX + PA(2)*BETAY + PPCD)*BTRAU )
V PXCM = ( GAMMA + 1.0 ) / PP(0)
V PXCM = BETAX * TRAU0 + PP(1)
V PYCM = BETAY * TRAU0 + PP(2)
V PYCM = BETAZ * TRAU0 + PP(3)
V PRCM = SORT( PYCM**2 + PRCM**2 + PYCM**2 )
V PRCM = SORT( EMP**2 + PRCM**2 + PRCM**2 )
V EA = SORT( EMAP**2 + PRCM**2 )
V SKT = EA + EP
V S = SRT + SRT
V PNEW = -SGAS * MFP, EMAP)
V INDEX = NINT(PNEW)
V MUSIC(INDEX) = MUSIC(INDEX) + 1
V PLUS = PRCM / EP + PRCM/EA
V PNEW = -PNEW * PLUS / 10.0
V SUM = SUM + PNEW
V VICDEN = VECDEN + PAC
V CONTINUE
V [17]

```

Fig. 4.20 Modification of ABSOR routine

(変更前)

```

S      DO 2111 I = 1, NX*NX*NZ
S      IF( NGP(I) .GT. 1 ) THEN
S          CALL PERMUT( NGP(I), ICR, SBED)
V          DO 2121 J = 1, NGP(I) / 2
V              ICNT = ICNT + 1
V                  IPART1(ICNT) = IGP(I) + ICF( 2*j - 1 )
V                  IPART2(ICNT) = IGP(I) + ICF( 2*j )
V                  LASTCOL(ICNT) = NGP(I)
V 2121      CONTINUE
S      END IF
S 2111 CONTINUE

```



(変更後)

```

V      jx = 0
V      do 2110 i = 1, NX*NX*NZ
V          if(NGP(i) .gt. 1) then
V              jx = jx + 1
V              ix(jx) = i
V          end if
V 2110 continue

S      do 2111 i = 1, jx
S          call PERMUT( NGP(ix(i)), ICR, SBED)
*vocl loop, scalar
2          do 2121 J = 1, NGP(ix(i)) / 2
2              ICNT = ICNT + 1
2                  IPART1(ICNT) = IGP(ix(i)) + ICF( 2*j - 1 )
2                  IPART2(ICNT) = IGP(ix(i)) + ICF( 2*j )
2                  LASTCOL(ICNT) = NGP(ix(i))
2 2121      CONTINUE
S 2111 CONTINUE

```

Fig. 4.21 Modification of DO 2111-2121 in RCDELT routine

<テスト・ケース 1> Synthesis Information			
Name	Count	Percent	Vl
dens	15116	41.2	1594
smear	15929	16.3	1594
iterat	16959	13.1	1594
xsort	1695	11.1	1594
dens	2016	11.1	1594
tpcorr	5556	5.55	1594
tppred	550	5.50	1594
reseed	-	-	1594
suraf	5363	2.16	1627
rcdelt	277	1.67	1627
tpsort	240	1.67	1627
xsorta	1916	1.67	1627
absor	1085	1.67	1627
rcdelt	251	1.67	1627
permut	-	-	1627
r4	45	1.67	1627
matr12	41	1.67	1627
cdns	-	-	1627
init	109	1.14	1627
absor	102	1.14	1627
MAIN	180	1.14	1627
cross	189	1.14	1627
tpblk	86	1.14	1627
inset	63	1.14	1627
ran	21	1.14	1627
optline	19	1.14	1627
pdens	11	1.14	1627
start	11	1.14	1627
etot	41	1.14	1627
sumry	376	1.14	1627
absout	-	-	1627
anoutn	-	-	1627
tpcorr1	-	-	1627
TOTAL	1492	100.0	1627
36663	1	1.00	1627

<テスト・ケース 2> Synthesis Information			
Name	Count	Percent	Vl
smear	8259	44.1	1594
iterat	3050	16.3	1594
xsort	2391	12.7	1594
dens	1829	10.7	1594
tpcorr	560	3.2	1594
tppred	386	2.16	1594
reseed	363	2.16	1594
suraf	277	1.67	1594
rcdelt	240	1.67	1594
tpsort	195	1.67	1594
xsorta	189	1.67	1594
absor	162	1.67	1594
rcdelt	160	1.67	1594
permut	109	1.14	1594
r4	41	1.14	1594
matr12	-	-	1594
cdns	-	-	1594
init	102	1.14	1594
sigaf	86	1.14	1594
ranf	57	1.14	1594
MAIN	41	1.14	1594
cross	41	1.14	1594
tpblk	37	1.14	1594
inset	34	1.14	1594
ran	16	1.14	1594
optline	13	1.14	1594
pdens	12	1.14	1594
start	11	1.14	1594
etot	41	1.14	1594
sumry	376	1.14	1594
absout	-	-	1594
anoutn	-	-	1594
tpcorr1	-	-	1594
TOTAL	1492	100.0	1594
36663	1	1.00	1594

<テスト・ケース 3> Synthesis Information			
Name	Count	Percent	Vl
dens	93016	23.3	2031
smear	86641	21.6	2031
iterat	5624	14.7	2031
xsort	5273	13.6	2031
dens	1385	12.7	2031
reseed	1333	12.7	2031
tpcorr	573	12.7	2031
tppred	573	12.7	2031
rcdelt	213	12.7	2031
tpsort	289	12.7	2031
suraf	-	-	2031
sigaf	-	-	2031
permut	-	-	2031
cross	-	-	2031
ranf	-	-	2031
init	294	1.67	2031
resel	-	-	2031
sigaf	-	-	2031
ranf	-	-	2031
tpblk	-	-	2031
cdns	-	-	2031
inset	-	-	2031
MAIN	-	-	2031
cdns	-	-	2031
ran	-	-	2031
optline	-	-	2031
pdens	-	-	2031
start	-	-	2031
etot	-	-	2031
sumry	-	-	2031
absout	-	-	2031
anoutn	-	-	2031
tpcorr1	-	-	2031
TOTAL	1380	100.0	2031
39962	1	1.00	2031

<テスト・ケース 4> Synthesis Information			
Name	Count	Percent	Vl
dens	16780	25.9	2031
smear	9203	14.7	2031
iterat	9040	13.6	2031
xsort	8321	12.7	2031
dens	603	12.7	2031
tpcorr	2679	12.7	2031
tppred	2590	12.7	2031
rcdelt	458	12.7	2031
tpsort	2039	12.7	2031
suraf	88	12.7	2031
sigaf	-	-	2031
permut	-	-	2031
cross	-	-	2031
ranf	-	-	2031
init	-	-	2031
resel	-	-	2031
sigaf	-	-	2031
ranf	-	-	2031
tpblk	-	-	2031
cdns	-	-	2031
inset	-	-	2031
MAIN	-	-	2031
cdns	-	-	2031
ran	-	-	2031
optline	-	-	2031
pdens	-	-	2031
start	-	-	2031
etot	-	-	2031
sumry	-	-	2031
absout	-	-	2031
anoutn	-	-	2031
tpcorr1	-	-	2031
TOTAL	2048	100.0	2031
39962	1	1.00	2031

Fig. 4.22 Computational cost distributions in RBUU vectorized version

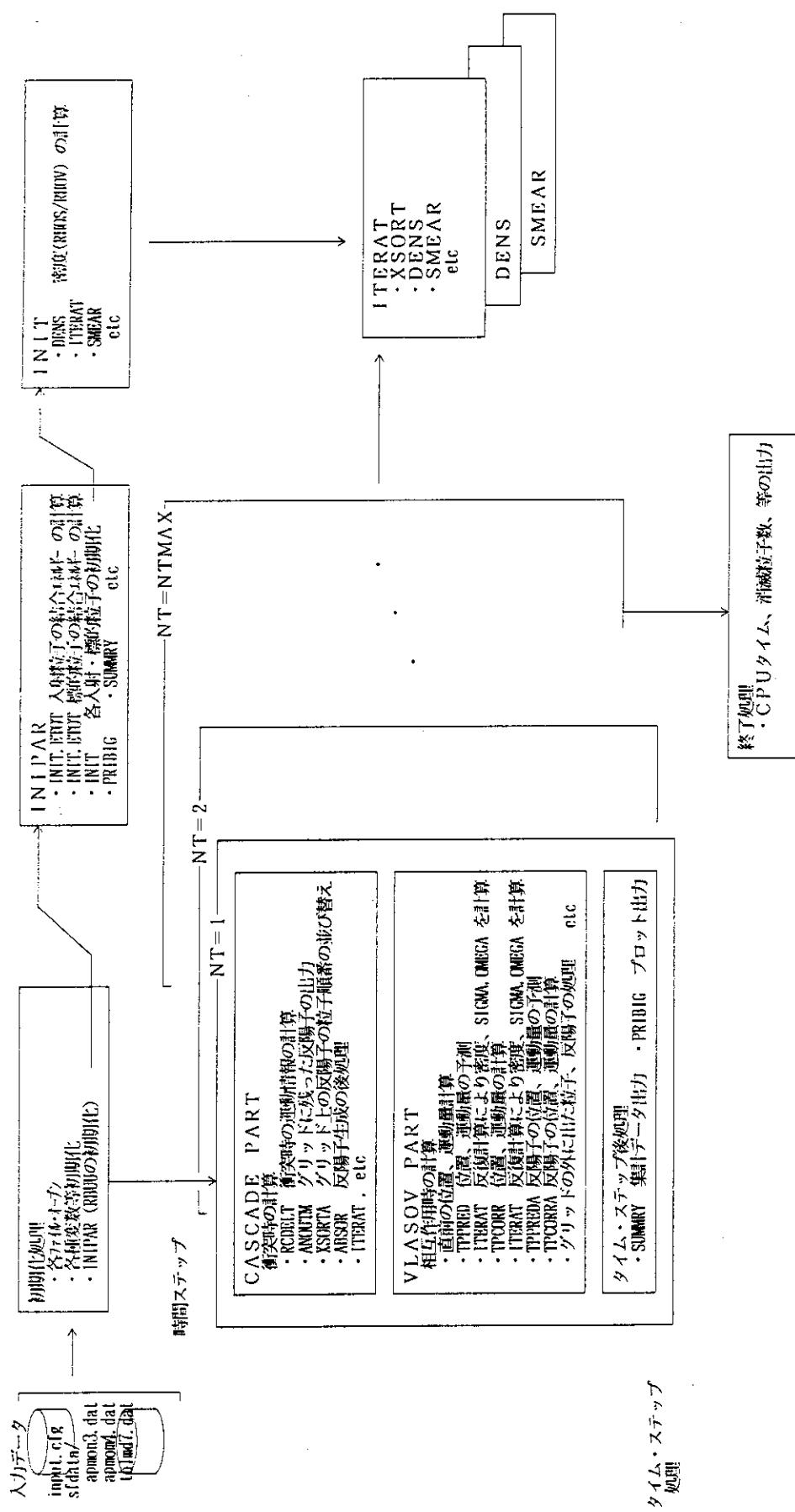


Fig. 4.2.3 Configuration of RRU code

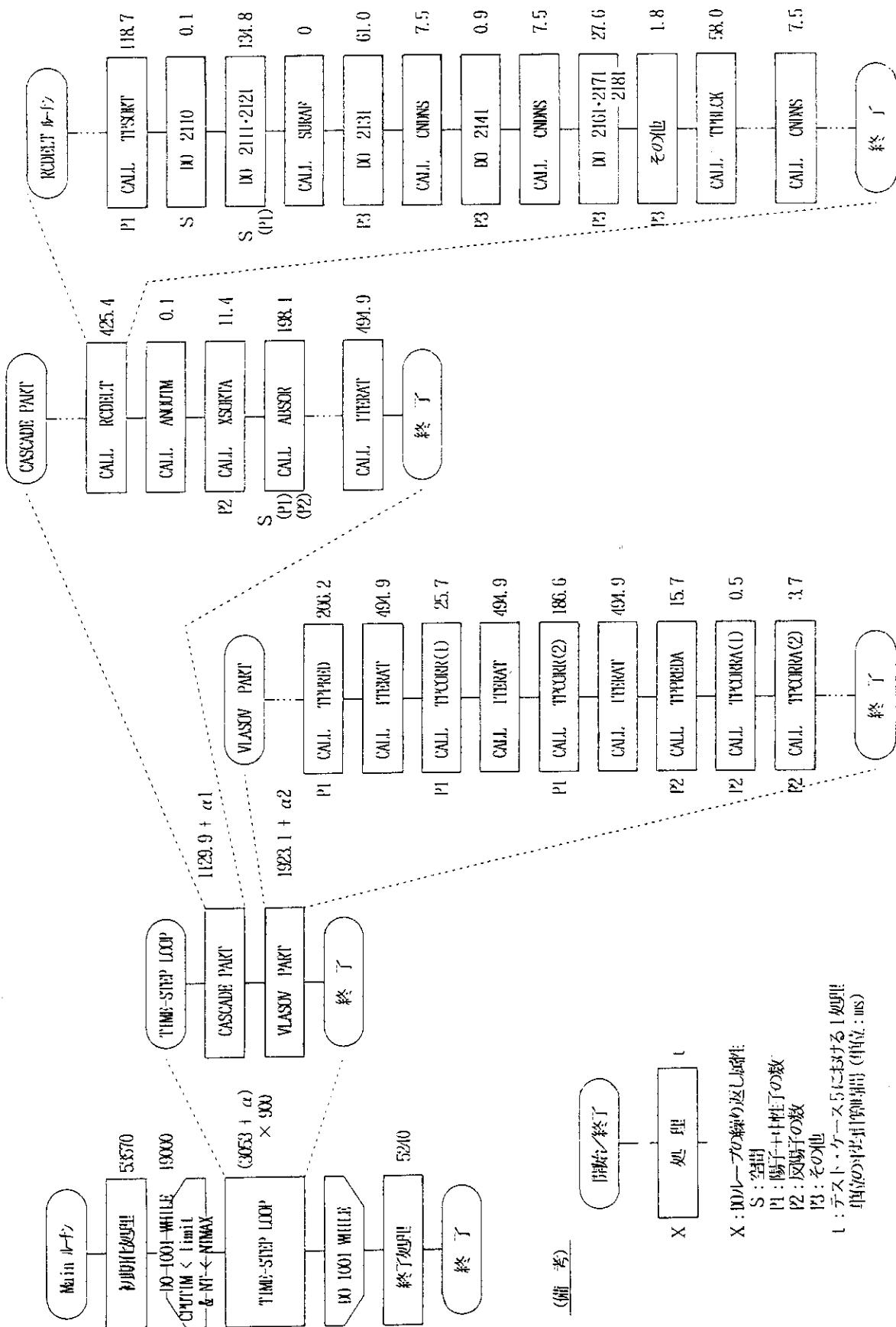


Fig. 4.2.4 Process flow in KELU code (1/2)

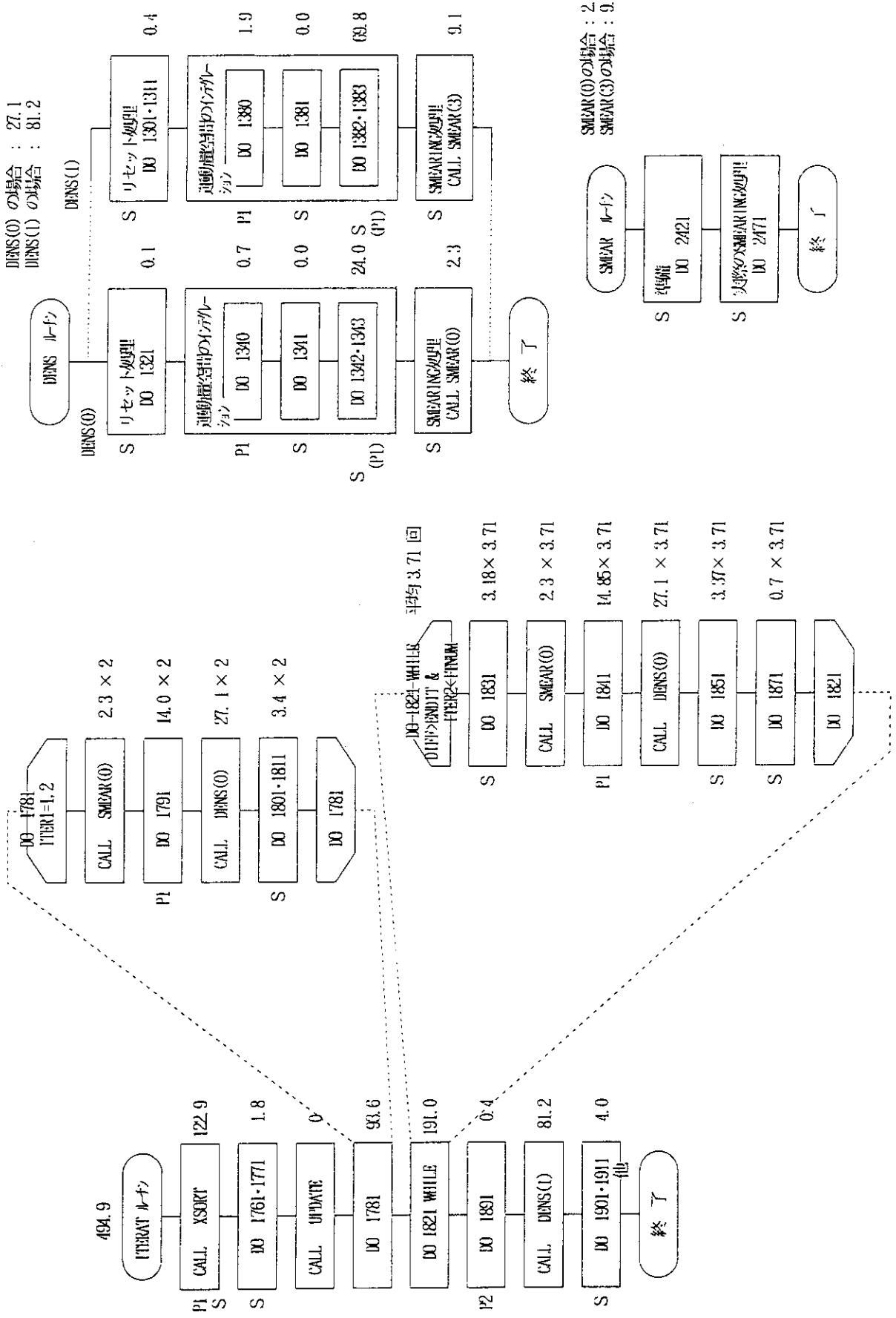


Fig. 4.2.4 Process flow in RMU code (2/2)

5. おわりに

平成 6 年度末に、VPP500 が導入されて、丸 2 年が経過した。この間、利用者数も順調に増加し、実行される原子力コードも多数に及んでいる。計算科学技術推進センター情報システム管理課では、ユーザからの依頼に応じて、これらの原子力コードを VPP500 向けに最適なベクトル化、並列化を施すチューニングを行ってきており、この作業は、大規模シミュレーション・ジョブの計算時間を短縮するだけでなく、单一プロセッサ上ではメモリ不足から実行できないジョブを並列化により可能にするなど、計算機のスループットの向上、ユーザの仕事時間の短縮のみならず、計算可能なジョブの範囲を拡大するなど、非常に意義のある仕事と考えている。

本報告書で記述した原子力コードのベクトル化については、その効果が顕著に表れているものが多いが、一方では VPP500 のベクトル並列計算機としての能力を十分に引き出せない原子力コードも数多く存在することが分かっている。このようなコードについては、平成 9 年度から導入された、1 プロセッサの処理能力の高いスカラ並列型の AP3000 計算機システムへの移行も現在進めている。原子力コードの性格に応じて、計算機を使い分けていくことが、計算機資源の効率的利用、ユーザの仕事の効率化の観点から重要であると考えている。本報告書が、これらの仕事に関係する人々に多少とも参考になれば幸いである。

謝 辞

本作業を行う上で、作業を依頼された原子炉工学部高エネルギー中性子研究室の今野力氏(2 章)、元高温工学部熱利用システム研究室の菱田誠氏(3 章)、先端基礎研究センターハドロン輸送研究グループの丸山智幸氏(4 章)には、コード内容の把握について御協力頂きました。また、VPP500 システムのハードウェア、ソフトウェアに関する相談については(株)富士通 R&D システム部石附茂氏に、本作業を円滑に遂行するための各種事務処理については山田圭子氏に御協力を頂きました。ここにこれらの方々に感謝の意を表します。

最後に、本報告書を執筆する機会を与えて下さいました計算科学技術推進センター長浅井清氏、前次長秋元正幸氏(現原子炉安全工学部部長)、(株)富士通 R&D システム部前部長橋本道夫氏及び現部長平沢健一氏に感謝致します。

5. おわりに

平成 6 年度末に、VPP500 が導入されて、丸 2 年が経過した。この間、利用者数も順調に増加し、実行される原子力コードも多数に及んでいる。計算科学技術推進センター情報システム管理課では、ユーザからの依頼に応じて、これらの原子力コードを VPP500 向けに最適なベクトル化、並列化を施すチューニングを行ってきており、この作業は、大規模シミュレーション・ジョブの計算時間を短縮するだけでなく、單一プロセッサ上ではメモリ不足から実行できないジョブを並列化により可能にするなど、計算機のスループットの向上、ユーザの仕事時間の短縮のみならず、計算可能なジョブの範囲を拡大するなど、非常に意義のある仕事と考えている。

本報告書で記述した原子力コードのベクトル化については、その効果が顕著に表れているものが多いが、一方では VPP500 のベクトル並列計算機としての能力を十分に引き出せない原子力コードも数多く存在することが分かっている。このようなコードについては、平成 9 年度から導入された、1 プロセッサの処理能力の高いスカラ並列型の AP3000 計算機システムへの移行も現在進めている。原子力コードの性格に応じて、計算機を使い分けていくことが、計算機資源の効率的利用、ユーザの仕事の効率化の観点から重要であると考えている。本報告書が、これらの仕事に関係する人々に多少とも参考になれば幸いである。

謝 辞

本作業を行う上で、作業を依頼された原子炉工学部高エネルギー中性子研究室の今野力氏(2 章)、元高温工学部熱利用システム研究室の菱田誠氏(3 章)、先端基礎研究センターハドロン輸送研究グループの丸山智幸氏(4 章)には、コード内容の把握について御協力頂きました。また、VPP500 システムのハードウェア、ソフトウェアに関する相談については(株)富士通 R&D システム部石附茂氏に、本作業を円滑に遂行するための各種事務処理については山田圭子氏に御協力を頂きました。ここにこれらの方々に感謝の意を表します。

最後に、本報告書を執筆する機会を与えて下さいました計算科学技術推進センター長浅井清氏、前次長秋元正幸氏(現原子炉安全工学部部長)、(株)富士通 R&D システム部前部長橋本道夫氏及び現部長平沢健一氏に感謝致します。

参考文献

- [1] RSIC COMPUTER CODE COLLECTION TORT-DORT Two- and Three-Dimensional Discrete Ordinates Transport Version 2.8.14 Oak Ridge National Laboratory , March 1994
- [2] CRAY T94/4128 newblock 利用者講習会資料日本クレイ株式会社, 1996年3月
- [3] 「FACOM OS IV/F4 MSP STREAM77 説明書」, 富士通(株), 1992年5月.
- [4] 「UXP/M アナライザ 使用手引書 (FORTRAN,VP 用) V10L20 用」, 富士通(株), 1992 年 2 月.
- [5] 「UXP/M VPP FORTRAN77 EX/VP 使用手引書 V12 用」, 富士通(株), 1994 年 9 月.
- [6] 一次冷却系配管破断事故時の多成分気体流動解析コードの整備, (財)原子力データセンター, 1994 年 3 月.
- [7] 「UXP/M VPP アナライザ 使用手引書 V10 用」, 富士通(株), 1994 年 1 月.
- [8] 「原研 VPP500/42 システム利用手引 第2版」, 日本原子力研究所 計算科学技術推進センター 情報システム管理室, 1995 年 7 月.
- [9] S.Teis,W.Cassing,T.Maruyama and U.Mosel, Phys. Lett. B319 (1993) 47
- [10] A.Lang,W.Cassing,U.Mosel and K.Weber, Nucl. Phys. A541 (1992) 507
- [11] B.Blättel,V.Koch,W.Cassing and U.Mosel Phys. rev. C38(1988) 1767