常用数学函数库简介

Xinming Wu

Institute of Computational Mathematics
Academy of Mathematics and Systems Sciences, CAS

xmwu@lsec.cc.ac.cn

Outline

1. Lapack-Blas 简介
   - Introduction of LAPACK and BLAS
   - Contents of LAPACK
2. 一个简单例子
   - A simple example
   - LAPACK subroutine
   - Some explanation
3. BLAS 及LAPACK 函数命名规则
4. LAPACK 安装

Outline

1. Lapack-Blas 简介
   - Introduction of LAPACK and BLAS
   - Contents of LAPACK
2. 一个简单例子
   - A simple example
   - LAPACK subroutine
   - Some explanation
3. BLAS 及LAPACK 函数命名规则
4. LAPACK 安装

Outline

1. Lapack-Blas 简介
   - Introduction of LAPACK and BLAS
   - Contents of LAPACK
2. 一个简单例子
   - A simple example
   - LAPACK subroutine
   - Some explanation
3. BLAS 及LAPACK 函数命名规则
4. LAPACK 安装

Outline

1. Lapack-Blas 简介
   - Introduction of LAPACK and BLAS
   - Contents of LAPACK
2. 一个简单例子
   - A simple example
   - LAPACK subroutine
   - Some explanation
3. BLAS 及LAPACK 函数命名规则
4. LAPACK 安装

Outline

1. Lapack-Blas 简介
   - Introduction of LAPACK and BLAS
   - Contents of LAPACK
2. 一个简单例子
   - A simple example
   - LAPACK subroutine
   - Some explanation
3. BLAS 及LAPACK 函数命名规则
4. LAPACK 安装

LAPACK: Linear Algebra PACKage

LAPACK 是用Fortran 77 编写的,求解数值线性代数中基本问题的一个数学函数库.

包括线性代数方程组,线性最小二乘问题,特征值问题,奇异值问题等.

BLAS: Basic Linear Algebra Subprograms

BLAS 是用Fortran 77 编写的,求解基本的矩阵和向量运算的一个数学函数库. 包括:

- Level 1 BLAS: 向量和向量运算
- Level 2 BLAS: 矩阵和向量运算
- Level 3 BLAS: 矩阵和矩阵运算

Outline

1. Lapack-Blas 简介
   - Introduction of LAPACK and BLAS
   - Contents of LAPACK
2. 一个简单例子
   - A simple example
   - LAPACK subroutine
   - Some explanation
3. BLAS 及LAPACK 函数命名规则
4. LAPACK 安装

Relationship between LAPACK and BLAS

LAPACK 子例程的设计尽量调用BLAS 子例程,BLAS 对不同的计算机都提供了高效的算法,也就为LAPACK 提供了一个很好的接口.

但是严格来说, BLAS 不是LAPACK 的一部分, 只是LAPACK 可以调用BLAS 的子例程.

Problems that LAPACK can Solve

- *driver routines*
  标准线性代数问题：线性代数方程组,线性最小二乘问题,特征值问题,奇异值问题等.
- *computational routines*
  中间计算问题：LU分解,Cholesky分解,QR分解等.
- *auxiliary routines*
  辅助性问题：其他子问题.

Problems that LAPACK can Solve

- *driver routines*
  标准线性代数问题：线性代数方程组,线性最小二乘问题,特征值问题,奇异值问题等.
- *computational routines*
  中间计算问题：LU分解,Cholesky分解,QR分解等.
- *auxiliary routines*
  辅助性问题：其他子问题.

Problems that LAPACK can Solve

- *driver routines*
  标准线性代数问题：线性代数方程组,线性最小二乘问题,特征值问题,奇异值问题等.
- *computational routines*
  中间计算问题：LU分解,Cholesky分解,QR分解等.
- *auxiliary routines*
  辅助性问题：其他子问题.

Outline

1. Lapack-Blas 简介
   - Introduction of LAPACK and BLAS
   - Contents of LAPACK
2. 一个简单例子
   - A simple example
   - LAPACK subroutine
   - Some explanation
3. BLAS 及LAPACK 函数命名规则
4. LAPACK 安装

A simple example

当我们用C语言编程,已知矩阵A和向量x,

- 求矩阵与向量的乘积$b = A\,x$;
  LAPACK Subroutine DGEMV(TRANS, M, N, ALPHA, A, LDA, X, INCX, BETA, Y, INCY)
- 求解线性代数方程组$A\,y = b$.
  LAPACK Subroutine DGESV(N, NRHS, A, LDA, IPIV, B, LDB, INFO)

A simple example

当我们用C语言编程,已知矩阵A和向量x,

- 求矩阵与向量的乘积$b = A\,x$;
  LAPACK Subroutine DGEMV(TRANS, M, N, ALPHA, A, LDA, X, INCX, BETA, Y, INCY)
- 求解线性代数方程组$A\,y = b$.
  LAPACK Subroutine DGESV(N, NRHS, A, LDA, IPIV, B, LDB, INFO)

Outline

1. Lapack-Blas 简介
   - Introduction of LAPACK and BLAS
   - Contents of LAPACK
2. 一个简单例子
   - A simple example
   - LAPACK subroutine
   - Some explanation
3. BLAS 及LAPACK 函数命名规则
4. LAPACK 安装

Subroutine: dgemv

- Matrix-vector product y := beta * y + alpha * A * x

```
extern void dgemv_(const char *trans,/* Trans? */
        const int *m,          /* Rows of A */
        const int *n,          /* Columns of A */
        const double *alpha,/* Alpha */
        const double *a,       /* Matrix A */
        const int *lda,        /* Columns of A */
        const double *x,       /* Vector x */
        const int *incx,       /* Increment for x */
        const double *beta,    /* Beta */
        double *y,             /* Result vector y */
        const int *incy);      /* Increment for y */
```

Subroutine: dgesv

- Solve the system A * X = B of linear equations

```
extern void dgesv_(const int *n,/* Dimension */
       const int *nrhs,/* Number of rhs */
       double *a,      /* Matrix A */
       const int *lda, /* Columns of A */
       int *ipiv,      /* Pivot indices,>= n */
       double *b,      /* Right hand sides B */
       const int *ldb, /* Columns of B */
       int *info);     /* Result code */
```

Makefile

```
LIBS = -llapack -lblas -lg2c -lm
CC = gcc

clean:
        rm -f solve
        rm -f *~ core.*

solve: solve.o lapack.o
        $(CC) $(CFLAGS) $(LDFLAGS) -o solve
          solve.o lapack.o $(LIBS)

.c.o:
        $(CC) $(CFLAGS) $(LDFLAGS) -c $<
```

Outline

1. Lapack-Blas 简介
   - Introduction of LAPACK and BLAS
   - Contents of LAPACK
2. 一个简单例子
   - A simple example
   - LAPACK subroutine
   - Some explanation
3. BLAS 及LAPACK 函数命名规则
4. LAPACK 安装

Some explanation

- 在Fortran 中,函数调用传实参地址,而在C 中, 函数调用传实参的值,因此用C 调用Fortran 子函数时,形参须改成相应类型的指针型.

- 如果LAPACK 库不在\usr\lib或\usr\local\lib,并且没有指明,则可以用绝对路径代替.比如将−llapack改成\home\xmwu\LAPACK\lapack_LINUX.a.

Some explanation

- 在Fortran 中,函数调用传实参地址,而在C 中, 函数调用传实参的值,因此用C 调用Fortran 子函数时,形参须改成相应类型的指针型.
- 如果LAPACK 库不在\usr\lib或\usr\local\lib,并且没有指明,则可以用绝对路径代替.比如将−llapack改成\home\xmwu\LAPACK\lapack_LINUX.a.

Some explanation

- 由于LAPACK 可能会调用BLAS ,所以需将blas 库写在lapack 库之后.
- 由于编译中存在C 与Fortran 混合编程,须加上*–lg2c*参数.

Some explanation

- 由于LAPACK 可能会调用BLAS ,所以需将blas 库写在lapack 库之后.
- 由于编译中存在C 与Fortran 混合编程,须加上*–lg2c*参数.

Naming Scheme

在BLAS 及LAPACK 中,函数命名格式为*XYYZZZ*,其中*X*取值为

- S Real
- D Double Precision
- C Complex
- Z Double Complex

Naming Scheme

*YY*代表矩阵的类型,比如

- GE General
- DI Diagonal
- HE Hermitian
- SY Symmetric
- TR Triangular

Naming Scheme

*ZZZ*代表具体的运算,比如

- MV matrix-vector(blas)
- MM matrix-matrix(blas)
- SV simple driver
- SVX expert driver
- TRF factorize
- TRS solve using factorization
- CON estimate condition number
- TRI invert using factorization

举例如下,求矩阵向量乘积$b = Ax$,选择函数DGEMV;
求解线性代数方程组$Ay = b$,选择函数DGESV.

Installing

- 下载源程序(www.netlib.org)
- 修改Makefile.in 文件
- 运行Makefile 编译,归档
- 安装结束,形成*lapack.a*库文件

Installing

- 下载源程序(www.netlib.org)
- 修改Makefile.in 文件
- 运行Makefile 编译,归档
- 安装结束,形成*lapack.a*库文件

Installing

- 下载源程序(www.netlib.org)
- 修改Makefile.in 文件
- 运行Makefile 编译,归档
- 安装结束,形成*lapack.a*库文件

Installing

- 下载源程序(www.netlib.org)
- 修改Makefile.in 文件
- 运行Makefile 编译,归档
- 安装结束,形成*lapack.a*库文件

谢 谢!