

УДК 519.688

БИБЛИОТЕКА ПРОГРАММ НИВЦ МГУ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ТИПОВЫХ ЗАДАЧ ЧИСЛЕННОГО АНАЛИЗА

О. Б. Арушанян¹, Н. И. Волченскова¹

В работе излагается структура и состав Библиотеки программ, разработанной в НИВЦ МГУ на языках Фортран и Си для решения типовых задач численного анализа. Приводятся основные характеристики Библиотеки, а также основные правила оформления документации и текстов программ. Рассмотрен систематический каталог Библиотеки, который отражает выбранную предметную систематику численного анализа. Описано Интернет-представление Библиотеки. Обсуждаются способы использования Библиотеки на вычислительном кластере НИВЦ МГУ.

Ключевые слова: библиотеки программ, численный анализ, стандартные программы, численные методы, обратные задачи, краевые задачи, документация, вычислительные платформы, автоматизация конструирования библиотек программ.

Введение. В настоящей работе рассматривается современное состояние проекта по созданию и развитию Библиотеки численного анализа НИВЦ МГУ [1].

Начатый во второй половине семидесятых годов под научным руководством В. В. Воеводина, проект успешно развивался первоначально для больших ЭВМ коллективного пользования (было выпущено в свет шесть изданий Библиотеки). Специально разработанные требования к оформлению подпрограмм на языке Фортран и их документации позволили обеспечить высокую степень автоматизированной переносимости Библиотеки. В результате были подготовлены версии Библиотеки для следующих типов вычислительных машин: БЭСМ-6, ЕС ЭВМ, СМ-1700, СМ-4, МВК Эльбрус, Эльбрус 1КБ и ЭВМ типа IBM PC. Эти версии Библиотеки были внедрены в учебные, научные и промышленные организации, общее число которых составило порядка 150.

В связи с широким распространением персональных компьютеров и системы Интернет естественным направлением в развитии библиотечного проекта НИВЦ стало обеспечение доступа к подпрограммам и другим материалам Библиотеки со стороны пользователей сети Интернет [2]. В указанном направлении проект начал развиваться в 1999 г. Информация, касающаяся Библиотеки численного анализа, стала основной частью научно-образовательного Интернет-ресурса НИВЦ МГУ по численному анализу (http://www.srcc.msu.ru/num_anal). В это же время была поставлена задача создания версии Библиотеки на языке Си. Данная задача была решена посредством автоматизированного перевода программ Библиотеки с языка Фортран на язык Си с использованием процедуры автоматического преобразования текстов f2c (<http://www.netlib.org/f2c/>).

После установки в НИВЦ МГУ высокопроизводительного вычислительного кластера [3] была также поставлена задача обеспечения доступа пользователей кластера к подпрограммам Библиотеки, представленным в виде объектных модулей. С этой целью были оттранслированы подпрограммы Библиотеки сначала на языке Фортран, а затем на языке Си и созданы две библиотеки объектных модулей для этих языков. Кроме того, непосредственно на кластере были сформированы два комплекта тестовых процедур к библиотечным подпрограммам на языках Фортран и Си.

1. Структура и состав Библиотеки.

1.1. Основные характеристики Библиотеки. Подпрограммы Библиотеки разбиты по разделам и подразделам в соответствии с подробно разработанной систематикой численного анализа. В настоящее время подпрограммы Библиотеки охватывают следующие основные разделы численного анализа:

- простейшие вычислительные операции;
- элементарные статистики, обработка данных;
- статистические критерии;
- алгебра полиномов;
- линейная алгебра;

¹ Научно-исследовательский вычислительный центр, Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова, 119992, Москва; e-mail: arush@srcc.msu.ru

- специальные функции;
- обыкновенные дифференциальные уравнения;
- численное интегрирование;
- интерполяция, аппроксимация, сглаживание, численное дифференцирование;
- анализ и синтез рядов, быстрые преобразования;
- решение систем и уравнений общего вида;
- математическое программирование;
- интегральные уравнения;
- генерация случайных чисел.

Кроме подробной предметной систематики для Библиотеки были разработаны единые правила оформления и документирования подпрограмм, обеспечившие согласованность Библиотеки. Сюда входят, в частности:

- единые правила наименований подпрограмм в соответствии с выбранной систематикой;
- единая форма представления и наименования математически сходных объектов (например, компактного представления матриц специального вида);
- общие способы сообщения об ошибках, обнаруженных в процессе счета.

Библиотека является двуязычной, т.е. ее подпрограммы (функции) представлены на двух языках программирования: стандарте языка Фортран [4] и стандарте языка Си [5].

Документация по Библиотеке, которая в настоящее время представлена в системе Интернет, содержит:

- описание общих правил и требований, принятых для подпрограмм и их документации;
- полный систематический каталог подпрограмм;
- материалы, служащие руководством по использованию подпрограмм (т.е. совокупность описаний всех подпрограмм, а также введения к ряду глав, помогающие выбрать необходимую подпрограмму).

При подготовке этой документации по Библиотеке не ставилась цель предоставить пользователям учебные материалы для изучения численного анализа, однако во многих случаях даются рекомендации по выбору методов (и соответствующих подпрограмм) при решении конкретных задач. В описаниях подпрограмм даются ссылки на литературу, содержащую подробное описание используемых методов.

1.2. Систематический каталог подпрограмм Библиотеки. Выбранная предметная систематика численного анализа отражена в систематическом каталоге подпрограмм. Приведем здесь структуру только одного раздела систематического каталога — “Линейная алгебра”.

Линейная алгебра

Векторная арифметика

Скалярное, векторное и смешанное произведения векторов

Нормирование векторов

Упорядочивание и выбор компонент векторов

Операции над векторами

Матричная арифметика

Нормирование матриц

Транспонирование матриц

Упорядочивание и выбор в матрицах

Сложение и вычитание матриц

Умножение матриц

Смешанные операции над матрицами

Представление матриц

Умножение матриц и векторов

Балансировка матриц

Вычисление определителей

Вычисление определителей симметричных и эрмитовых матриц

Вычисление определителей матриц общего вида

Вычисление определителей матриц специального вида

Обращение и псевдообращение матриц

Обращение симметричных и эрмитовых матриц

Обращение матриц общего вида

Обращение матриц специального вида

Приведение к специальному виду и разложение матриц

- Симметричные и эрмитовы матрицы
- Матрицы общего вида
- Матрицы специального вида
- Решение систем линейных алгебраических уравнений
 - Решение систем с симметричными или эрмитовыми невырожденными матрицами
 - Решение систем с невырожденными матрицами общего вида
 - Решение систем с невырожденными матрицами специального вида
 - Решение систем с прямоугольными матрицами полного ранга
- Проблема собственных значений
 - Линейная проблема собственных значений для симметричных и эрмитовых матриц
 - Линейная проблема собственных значений для матриц общего вида
 - Линейная проблема собственных значений для матриц специального вида
 - Обобщенная проблема собственных значений для симметричных и эрмитовых матриц
 - Обобщенная проблема собственных значений для матриц общего вида
 - Обобщенная проблема собственных значений для матриц специального вида
- Сингулярное разложение
 - Сингулярное разложение матриц общего вида
- Специальные задачи линейной алгебры

1.3. Документация и оформление подпрограмм. Каждая библиотечная подпрограмма снабжена руководством по ее использованию, называемым описанием подпрограммы. Точнее, составляется одно описание для нескольких версий подпрограммы, различающихся, как правило, типом обрабатываемых данных. В соответствии с едиными правилами документирования подпрограмм описание содержит несколько расположенных в определенном порядке друг за другом смысловых разделов, имеющих перечисленные ниже заголовки.

- Подпрограмма/функция (указывается имя основной версии)
- Назначение (краткая формулировка)
- Математическое описание (более подробное изложение алгоритма и ссылки на литературу)
- Использование (первый оператор со списком формальных параметров)
- Параметры
- Версии
- Вызываемые подпрограммы
- Замечания по использованию
- Пример использования

Эти описания составлялись для подпрограмм, написанных на языке Фортран, и поэтому содержат элементы или фрагменты текста, имеющие отношение к программам на этом языке. Например, текст в разделе “Пример использования”, представляющий собой фрагмент фортранной вызываемой программы, или оператор SUBROUTINE в начале раздела “Использование”.

С появлением в Библиотеке версий подпрограмм на языке Си новых описаний для них не составлялось и никаких добавлений в прежние описания не делалось. В связи с этим следует сделать некоторые общие пояснения для пользователей подпрограмм в версии на языке Си.

Все фортранные программные единицы (FUNCTION и SUBROUTINE) конвертировались в функции языка Си. Для возврата из Си-функции, полученной из фортранной SUBROUTINE, использовался оператор return 0, а в качестве спецификатора типа такой функции — int.

Поскольку параметры подпрограмм в языке Фортран передаются по ссылке (а не по значению), то перед идентификаторами формальных параметров библиотечных функций на языке Си ставится символ “*”. При указании аргументов в обращении к Си-функции перед идентификаторами переменных используется символ “&”.

Эти особенности при использовании версии Библиотеки на языке Си не вызывают трудностей, поскольку подпрограммы (функции) и тестовые программы к ним были получены автоматизированным образом с использованием конвертора f2c, а полученные Си-тексты доступны пользователям.

Некоторые пояснения следует сделать в отношении трансформации на язык Си подпрограмм-функций Фортрана, имеющих тип complex. Поскольку в языке Си для переменных нет базового типа complex, то этот тип вводится посредством описания структурного объекта, состоящего из двух членов вещественного типа:

```
typedef struct {real r, i;} complex;
```

Здесь переменные r и i соответствуют действительной и мнимой частям объекта типа `complex`.

Если же на Фортране комплексный тип имеет подпрограмма-функция, то она преобразуется конвертером `f2c` в функцию на Си, имеющую тип `void`, что означает отсутствие возвращаемого значения через оператор `return`. Однако при этом число параметров такой функции увеличивается на один: новый параметр помещается первым в списке параметров (это указатель с именем `ret_val` на структурный объект, имеющий тип `complex`). Данный параметр служит для возврата полученного значения комплексного типа.

При преобразовании вызова такой комплексной функции с Фортрана на Си генерируется соответствующее описание функции (со списком типов параметров, в котором на первом месте появляется дополнительный указатель типа `complex *`). Кроме того, генерируется новая переменная типа `complex`, адрес которой подается в качестве первого аргумента при вызове этой функции.

После автоматически полученных конвертером `f2c` текстов программ на языке Си наиболее существенной дополнительной обработке подверглись программы, содержащие операторы ввода/вывода. В Библиотеке численного анализа к ним относятся специальные служебные подпрограммы выдачи диагностических сообщений, а также программы, содержащие тестовые примеры. Необходимость дополнительной обработки связана с тем, что построенные при помощи `f2c` тексты с операторами ввода/вывода содержат не обычные для Си функции ввода/вывода (например, `printf(...)`), а обращения к другим функциям, специально разработанным для этих целей для конвертора `f2c`, что ухудшает читабельность текстов содержащих их программ. Все такие обращения были заменены в Библиотеке на обращения к обычным функциям Си.

В соответствии с выбранной систематикой численного анализа предусмотрены единые правила наименований библиотечных подпрограмм. При этом первые два символа идентифицируют главу (самый верхний раздел систематики), а также подраздел следующего уровня. Вторые два символа идентифицируют конкретную подпрограмму внутри соответствующих подразделов. Пятый символ предназначен для идентификации различных версий подпрограммы (прежде всего, в соответствии с основным типом обрабатываемых данных). Для пятого символа выбрана следующая мнемоника:

- R — вычисления проводятся с обычной точностью для вещественного случая;
- D — вычисления проводятся с удвоенной точностью для вещественного случая;
- C — вычисления проводятся с обычной точностью для комплексного случая;
- P — вычисления проводятся с удвоенной точностью для комплексного случая;
- I — вычисления определены для целочисленных данных;
- T — тестирование правильности задания входной информации.

В отличие от подпрограмм на Фортране, имена которых состоят из пяти символов, для подпрограмм (функций) на языке Си принята идентификация, при которой к указанным пяти символам в конце добавляются еще два символа “_c”. Такое добавление делается как к именам головных подпрограмм (функций) Библиотеки, так и к именам всех вызываемых из них вспомогательных подпрограмм (функций).

В соответствии с принятыми в библиотечном проекте едиными правилами составления и оформления вычислительные подпрограммы не должны содержать внутри себя операторов ввода/вывода. Такие операторы, содержащие, как правило, диагностические сообщения, выделялись в отдельные служебные подпрограммы, правила наименования которых отличаются от описанных выше. Имена таких подпрограмм начинаются с двух символов “UT”, следом за которыми идут два символа, идентифицирующих головной раздел и подраздел, к которым они относятся (например, “AE” — означает “Линейная алгебра” и подраздел “Линейная проблема собственных значений”). Следующие два символа состоят из двух цифр, идентифицирующих конкретную диагностическую подпрограмму в данном подразделе. При представлении этих подпрограмм (функций) на языке Си к шести упомянутым символам в конце также добавляются два символа “_c”.

Каждая библиотечная подпрограмма (функция) обязательно обеспечивается по крайней мере одним (стандартным) тестовым примером, оформленным в виде головной (PROGRAM, main) программы. Для идентификации файлов, содержащих такие примеры, было принято правило, по которому к имени соответствующей подпрограммы (функции) в качестве первого дополнительного символа добавляется буква “T”.

2. Интернет-представление Библиотеки. С главной WEB-страницы библиотечного сайта открывается доступ ко всем материалам, связанным с Библиотекой численного анализа. Эти материалы можно разделить на сведения общего характера и информацию, относящуюся к конкретным библиотечным подпрограммам.

К сведениям общего характера относится информация под заголовками: “Общая информация о Библиотеке”, “Пользователям Библиотеки”, а также под заголовками, входящими в раздел “Организация Биб-

лиотеки”: “О документации”, “Оформление подпрограмм”, “Способы представления матриц”, “Способы сообщения об ошибках”.

Сама информация становится доступной пользователям с переходом по соответствующей гиперссылке.

Доступ к информации, касающейся конкретных подпрограмм, может быть осуществлен с головной страницы сайта двумя способами.

Первый способ — перейти по гиперссылке с заголовка “Систематический каталог Библиотеки”. На открывшейся странице перечислены (также в форме гиперссылок) заголовки разделов и подразделов систематического каталога Библиотеки всех уровней. При переходе по ссылке подраздела самого нижнего уровня пользователь попадет на страницу каталога, содержащую список всех подпрограмм, входящих в выбранный подраздел.

Другой способ войти с головной страницы сайта на любую страницу со списком подпрограмм конкретного подраздела — начать переход по гиперссылкам прямо с заголовка одного из основных (верхних) разделов Библиотеки, которые перечислены на первой странице следом за фразой “Основные разделы” (см. п. 1.1).

Эти списки подпрограмм подразделов Библиотеки представлены в виде таблиц, состоящих из трех столбцов. В первом столбце перечисляются (в виде гиперссылок) имена подпрограмм и их версий. По каждой такой гиперссылке можно вызвать страницу, содержащую описание подпрограммы и ее версий.

Во втором столбце таблицы кратко сформулировано назначение каждой из подпрограмм.

Третий столбец содержит гиперссылки к текстам соответствующих подпрограмм и их версий на двух языках программирования: Фортране и Си. Гиперссылки представлены в виде двух букв F и C по обеим сторонам от имени конкретной версии подпрограммы. Нажатие на букву F вызывает zip-файл текста соответствующей версии подпрограммы на языке Фортран, а нажатие на букву C — на языке Си.

Кроме того, доступ как к текстам подпрограмм (функций) на языках Фортран и Си, так и к текстам тестовых примеров для них может быть осуществлен со страниц описаний подпрограмм, в верхней части которых содержатся соответствующие гиперссылки.

Для пользователей подпрограмм на языке Си необходимо сделать следующие пояснения.

Конвертор f2c, с помощью которого были получены тексты подпрограмм на языке Си, выдает эти тексты в “параметризованном” виде, вводя, например, новые наименования для типов данных (real вместо float, doublereal вместо double и т.п.). Для замены “параметров” на обычные конструкции языка Си предназначен include-файл с именем f2c.h, вызов которого вставлен в начало каждой Си-функции. Этот файл содержит препроцессорные инструкции #define и декларации typedef, с помощью которых выполняется необходимая макроподстановка и определение соответствующих типов.

Кроме того, этот конвертор определяет целый ряд встроенных функций (например, таких, которые содержатся в Фортранных текстах, но отсутствуют в стандарте языка Си). При трансформации текста с языка Фортран на язык Си конвертор производит замену вызовов стандартных функций Фортрана на вызовы своих Си-функций. Такие функции объединены в библиотеку с именем lf2c.lib.

Для того чтобы применять подпрограммы из Библиотеки численного анализа на языке Си, пользователям необходимо предварительно включить в раздел include-файлов своего Си-транслятора файл с именем f2c.h, а на стадии получения исполнимого модуля обеспечить подсоединение библиотеки с именем lf2c.lib, заказав ее в командной строке перед другими библиотеками транслятора.

Для получения f2c.h и lf2c.lib необходимо вызвать соответствующие файлы нажатием на гиперссылки, приведенные в разделе “О документации” Библиотеки численного анализа.

3. Представление Библиотеки на вычислительном кластере НИВЦ МГУ. Библиотека численного анализа представлена на вычислительном кластере в виде двух библиотек объектных модулей.

Библиотека с именем libnuml.a (объем около 7 мегабайт) содержит подпрограммы, оттранслированные с языка Фортран с помощью транслятора pgf77. Кроме того, имеются две вспомогательные библиотеки, содержащие служебные подпрограммы выдачи диагностических сообщений: в кодировке KOI-8, которая принята на кластере в системе Linux, а также в кодировке Windows. Эти библиотеки имеют соответственно имена libnlutkoi.a и libnlutwin.a.

Библиотека с именем libnumlc.a (объем около 8 мегабайт) содержит подпрограммы, оттранслированные с языка Си с помощью транслятора pgcc. Вспомогательная библиотека со служебными подпрограммами выдачи диагностических сообщений имеет имя libnlcutkoi.a. Пользователю библиотеки на языке Си необходимо также подсоединять библиотеку liblf2c.a.

Все эти библиотеки расположены на кластере НИВЦ МГУ в подкаталоге /usr/local/lib.

Тестовые процедуры для подпрограмм Библиотеки численного анализа доступны пользователям кла-

стера в подкаталогах /usr/local/examples/numl (Фортран) и /usr/local/examples/numlc (Си).

Там же находится пример скрипта для компиляции с именем build-test, которому в качестве параметра указывается имя файла с тестовым примером для конкретной библиотечной подпрограммы.

Для сборки пользовательских программ на Фортране с использованием подпрограмм Библиотеки численного анализа необходимо набрать, например, команду:

```
mpif77 -fast <prog.for> -lnuml -lnlutkoi
```

Аналогично, для языка Си:

```
mpicc -fast <main.c> -lmunlc -lnlcutkoi -llf2c
```

Здесь в < > указаны имена файлов с головными программами пользователя.

Поскольку пользователи кластера имеют доступ к системе Интернет, предполагается, что ознакомиться со всей документацией по Библиотеке численного анализа или получить в свое распоряжение подпрограммы Библиотеки в текстовом виде они могут через сеть Интернет, как и другие ее пользователи.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 01-07-90173.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Воеводин В.В., Арушанян О.Б.* Структура и организация Библиотеки численного анализа НИВЦ МГУ // Численный анализ на ФОРТРАНе. Вычислительные методы и инструментальные системы. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1979. 73–83.
2. *Арушанян О.Б., Волченкова Н.И.* Обеспечение доступа к Библиотеке численного анализа НИВЦ МГУ в системе Интернет // Вычислительные методы и программирование. 2000. 1. 113–120.
3. Вычислительный кластер НИВЦ МГУ (<http://parallel.ru>).
4. *Колдербэнк В.* Программирование на ФОРТРАНе. ФОРТРАН-66 и ФОРТРАН-77. М.: Радио и связь, 1986.
5. *Керниган Б., Ритчи Д.* Язык программирования Си. М.: Финансы и статистика, 1992.

Поступила в редакцию
15.05.2002
