

Verwendung von Unterprogrammbibliotheken

LAPACK (*Linear Algebra Package*) ist ein frei verfügbares Softwarepaket von Fortran77-Unterprogrammen zur numerischen Linearen Algebra:

<http://www.netlib.org/lapack/>

LAPACK enthält Unterprogramme zur numerischen Lösung von linearen Gleichungssystemen, linearen Ausgleichsproblemen, Eigenwertproblemen, zur Faktorisierung von Matrizen und für Konditionsabschätzungen. Das Softwarepaket ist der de-facto Standard zur numerischen Linearen Algebra für dicht besetzte Matrizen und Bandmatrizen.

Benutzerhandbuch: http://www.netlib.org/lapack/lug/lapack_lug.html

LAPACK besteht aus 3 Programmgruppen:

- Treiberprogramme: Übernehmen den Aufruf geeigneter Rechen- und Hilfsprogramme.
- Rechenprogramme: Führen die eigentliche Berechnung durch.
- Hilfsprogramme: Skalierung von Matrizen, Berechnung von Matrixnormen usw.

Namensgebung:

- Der *erste* Buchstabe bezeichnet den Fortran77-Datentyp
 - s ... REAL (float)
 - d ... DOUBLE PRECISION (double)
 - c ... COMPLEX
- Der *zweite* und *dritte* Buchstabe bezeichnet den Typ der Matrix
 - ge ... allgemeine Matrix
 - gt ... allgemeine Tridiagonalmatrix
 - po ... symmetrische, positiv definite Matrix
- Die *letzten drei* Buchstaben bezeichnen die Art der durchzuführenden Rechnungen
 - sv ... Lösen von linearen Gleichungssystemen (*solve*)
 - svx ... Spezial-Treiberprogramme für lineare Gleichungssysteme (*solve expert*)

Fehlerbehandlung:

Jedes LAPACK-Unterprogramm hat den Ausgabeparameter `info`, der über den Erfolg eines Aufrufs informiert.

- `info = 0`: Algorithmus wurde erfolgreich beendet
- `info < 0`: unzulässige Eingabeparameter
- `info > 0`: Fehler während der Ausführung

Aufruf von Fortran-Unterprogrammen aus C

Viele (numerische) Softwarepakete (<http://www.netlib.org/>, <http://gams.nist.gov/>; <http://www.imsl.com/>, <http://www.nag.com/>) stehen als Fortran77-Unterprogramm-bibliotheken zur Verfügung. Unter Unix können diese direkt von C-Programmen aus verwendet werden, wenn man ein paar Grundregeln beachtet:

- Die Datentypen müssen einander entsprechen.

Fortran77	C
integer	int
real	float
double precision	double
complex	struct { float; float; }
character	char
character*n	char[n]
logical	unsigned int

- Bei Matrizen muß man beachten, daß diese von Fortran *spaltenweise*, von C jedoch *zeilenweise* jeweils linear im Speicher angeordnet werden. C-Matrizen sollten daher spaltenweise in ein 1-dimensionales Hilfs-Array kopiert werden; dieses kann dann an Fortran übergeben werden.
- Arrayindizes beginnen in C bei 0, in Fortran beliebig (die Voreinstellung ist 1).
- In Fortran werden Parameter an Unterprogramme in Form der *Adressen* der beteiligten Variablen übergeben. Beim Aufruf von Fortran-Unterprogrammen aus C müssen daher alle Argumente *Zeiger* sein, d.h. mit vorangestelltem *&*-Operator (es sei denn, die übergebene Variable ist selbst schon ein Zeiger, wie z.B. bei Arrays). Insbesondere dürfen Konstanten nicht direkt übergeben werden, also nicht `fsub_(1, &x, ...);`; sondern

```
n = 1;
fsub_( &n, &x, ... );
```

- Der Name des Fortran-Unterprogramms muß im C-Programm in Kleinbuchstaben angegeben werden.
- In den meisten Unix-Varianten muß im C-Programm an den Namen des Fortran-Unterprogramms ein Unterstrich „_“ angefügt werden.
- Beim Compilieren und Linken mit `cc` müssen alle verwendeten Unterprogramm-bibliotheken, sowie die Fortran-spezifischen Bibliotheken explizit angegeben werden, z.B. unter Linux bei Verwendung von LAPACK:

```
cc -o lineql lineql.c -L/usr/lib/lapack -llapack -lblas -lg2c -lm
```