NAG Fortran Library Mark 16

Auf den vom EDV-Zentrum betriebenen Rechnern ecx, ecxph, rsmb, fbma und fbch steht die neueste Version der NAG Fortran 77 Library (Mark 16) zur Verfügung.

Die Bibliothek beinhaltet jetzt 1134 dokumentierte Unterprogramme. Wie schon bei der vorherigen Version fand auch diesmal wieder eine Erweiterung der Bibliothek um 72 LAPACK-Routinen statt, die in das neue Kapitel F08 (Least Squares and Eigenvalue Problems) aufgenommen wurden. Um weitere 98 LAPACK-Routinen ist das Kapitel F07 (Linear Equations) erweitert worden. LAPACK (Linear Algebra Package) ist eine Sammlung von state-of-the-art Algorithmen zur effizienten Lösung von Problemen aus der Linearen Algebra. Durch Implementierung eines Großteils dieser Algorithmen mit Hilfe von BLAS (Basic Linear Algebra Subroutines) Level 2 und Level 3 (Matrix*Vektor- und Matrix*Matrix-Operationen) wurde eine beachtliche Performance-Verbesserung erreicht.

Beispiel Cholesky-Zerlegung:

erstmals 1979 auf einer CRAY I:	< 1 mflop
Mark 15, CRAY Y-MP:	> 2 gflops
Mark 16, CRAY Y-MP:	> 10 gflops

(Angaben von NAG Ltd.)

In das Kapitel F02 (Eigenvalues and Eigenvectors) wurden 8 neue black-box Unterprogramme, die die neuen Unterprogramme aus Kapitel F08 verwenden, aufgenommen.

In dem Bereich der Statistik wurden Unterprogramme aus den Kapiteln G01, G03, G04, G05, G07, G11 und G13 durch verbesserte Versionen ersetzt sowie ein neues Kapitel G10 (Smoothing) eingeführt.

Weitere Änderungen betreffen die Kapitel D02, D03, D05, E04 und H02.

Informationen über diese Veränderungen beinhalten die Dateien `news` und `replaced` in dem Verzeichnis `/usr/local/nag/mk_16/doc`.

Verwendung

Informationen über die Verwendung der Bibliothek enthält die Datei `readme` in dem Verzeichnis `/usr/local/nag/mk_16`.

Da die Hersteller der oben angeführten Rechner eigene Bibliotheken für BLAS-Routinen (VECLIB, AIX BLAS, ESSL, SGI COMPLIB) anbieten, stehen auf diesen Rechnern meist mehrere Versionen der NAG-Bibliothek zur Verfügung. Ob man die NAG-BLAS-Routinen oder die hochoptimierten herstellerspezifischen BLAS-Routinen verwenden soll, kann durch Laufzeituntersuchungen entschieden werden. Beispiele dazu befinden sich auch in der Datei `readme`.

Auf den Rechnern rsmb und fbma befinden sich Bibliotheksversionen, bei denen an die 'external-names' ein 'underscore' angefügt wurde, wie dies zur Verwendung von NAG-Unterprogrammen in anderen Programmpaketen öfters verlangt wird (z.B. ACSL).

Dokumentation

Die Online-Dokumentation (NAGHELP) wurde auch an die neue Version angepaßt. Eine Anleitung dazu befindet sich in `/usr/local/nag_online/users_note`.

Als Hilfsmittel zur leichteren Verwendung der Library stehen Beispielprogramme (inkl. Eingabedaten und Ergebnissen) zur Verfügung, die auch als Vorlage zur Programmerstellung dienen können. Die dazu benötigten Dateien befinden sich in den entsprechenden Unterverzeichnissen von `/usr/local/nag/mk_16/examples`. Es gibt eine Shellprozedur `nagexample` (mit dazugehöriger Manual-Page `man nagexample`) mit einem Parameter, der den Namen des Unterprogrammes angibt, dessen Beispielprogramm (inkl. dazugehöriger Daten, wenn notwendig) in das aktuelle Verzeichnis kopiert, übersetzt und anschließend auch ausgeführt wird.

Beispiel für die Verwendung des Beispielprogrammes zur Routine a02aaf:

```
nagexample a02aaf
```

Das aus 12 Ordnern bestehende NAG FORTRAN Library Manual liegt bei mir im Zimmer (EDV-Zentrum, Wiedner Hauptstraße 8-10, 2. Stock, gelber Bereich, DB02O20) zur Einsichtnahme auf.

Bei Fragen diese Produkte betreffend wenden Sie sich bitte an mich (Kl. 5603).

Walter Haider