

NAG Fortran Library, Mark 26
FLLUX26DCL - License Managed
Linux (x86-32), Intel Fortran, Double Precision

ユーザーノート

内容

1. イントロダクション	1
2. 追加情報	1
3. 一般情報	2
3.1. ライブラリのリンク方法	4
3.1.1. C または C++ からのライブラリの呼び出し	7
3.2. インターフェースブロック	8
3.3. Example プログラム	10
3.4. Fortran 型と強調斜体文字の解釈	12
3.5. メンテナンスレベル	13
4. ルーチン固有の情報	14
5. ドキュメント	18
6. サポート	19
7. コンタクト情報	19

1. イントロダクション

本ユーザーノートは、NAG Fortran Library, Mark 26 – FLLUX26DCL (ライブラリ) のご利用方法 (リンク方法) を説明します。

本ユーザーノートには、NAG Library Manual, Mark 26 (ライブラリマニュアル) には含まれない製品毎の情報が含まれています。ライブラリマニュアルに「ユーザーノート参照」などと書かれている場合は、本ユーザーノートをご参照ください。

ライブラリルーチンのご利用に際しては、ライブラリマニュアル (「5. ドキュメント」参照) の以下のドキュメントをお読みください。

- (a) How to Use the NAG Library and its Documentation
- (b) Chapter Introduction
- (c) Function Document

2. 追加情報

本ライブラリの動作環境やご利用方法についての最新の情報は、以下のウェブページをご確認ください。

<http://www.nag.co.uk/doc/inun/fl26/luxdcl/supplementary.html>

3. 一般情報

本製品では、Intel® Math Kernel Library for Linux (MKL) が提供する BLAS/LAPACK ルーチンを利用するスタティックライブラリ `libnag_mkl.a` および共有ライブラリ `libnag_mkl.so` と、NAG が提供する BLAS/LAPACK ルーチンを利用するスタティックライブラリ `libnag_nag.a` および共有ライブラリ `libnag_nag.so` を提供します。本ライブラリは、MKL version 11.3.3 を用いてテストされています。MKL version 11.3.3 は本製品の一部として提供されます。MKL の詳細については Intel 社のウェブサイト <https://software.intel.com/intel-mkl> をご参照ください。パフォーマンスの面からは、MKL を利用するバージョンの NAG ライブラリ `libnag_mkl.a` または `libnag_mkl.so` のご利用を推奨します。

本製品で提供される MKL version 11.3.3 はマルチスレッド化されており、環境変数 `OMP_NUM_THREADS` が設定されていない場合、複数のプロセッサまたはマルチコアチップを持つシステムでは、計算速度の向上のためにマルチスレッドで計算を行います。もし、MKL に複数のプロセッサまたはコアを使わせたくない場合は、環境変数 `OMP_NUM_THREADS` に “1”（もしくは、必要なスレッド数）を設定してください。なお、X06 ルーチンは MKL のスレッドの振る舞いに影響を与えません。例えば、

C シェルの場合：

```
setenv OMP_NUM_THREADS 1
```

Bourne シェルの場合：

```
OMP_NUM_THREADS=1
```

```
export OMP_NUM_THREADS
```

本ライブラリは MKL 10.3 よりも古いバージョンとは互換性がありません。

MKL には、条件付きビット単位の再現性 (Bit-wise Reproducibility (BWR)) オプションがあります。一定の条件 (<https://software.intel.com/en-us/node/528579> 参照) をユーザーコードが満たしていれば、環境変数 MKL_CBWR を設定することにより BWR が有効になります。詳細は MKL のドキュメントをご参照ください。しかしながら、多くの NAG ルーチンはこれらの条件を満たしていません。従って、MKL を利用するバージョンの NAG ライブラリの全ルーチンに対して、異なる CPU アーキテクチャに渡り MKL_CBWR による BWR を保証することはできません。BWR に関するより一般的な情報は、“How to Use the NAG Library and its Documentation” ドキュメントの「3.11.1 Bit-wise Reproducibility (BWR)」をご参照ください。

3.1. ライブラリのリンク方法

本セクションでは [INSTALL_DIR] に本ライブラリがインストールされていることが前提となります。

デフォルトの [INSTALL_DIR] は \$HOME/NAG/flux26dc1 となります。また、インストール時に [INSTALL_DIR] を指定することもできます。

MKL を利用するバージョンの NAG ライブラリを利用する場合は、以下のようにコンパイル・リンクを行ってください。（ここで driver.f90 がユーザープログラムです。）

スタティックライブラリを利用する場合：

```
ifort -I[INSTALL_DIR]/nag_interface_blocks driver.f90 \  
      [INSTALL_DIR]/lib/libnag_mkl.a \  
      -Wl,--start-group \  
      [INSTALL_DIR]/mkl_ia32_11.3.3/lib/libmkl_intel.a \  
      [INSTALL_DIR]/mkl_ia32_11.3.3/lib/libmkl_intel_thread.a \  
      [INSTALL_DIR]/mkl_ia32_11.3.3/lib/libmkl_core.a \  
      -Wl,--end-group \  
      [INSTALL_DIR]/rtl/ia32/libiomp5.a \  
      -lpthread -lm -ldl -lstdc++
```

共有ライブラリを利用する場合：

```
ifort -I[INSTALL_DIR]/nag_interface_blocks driver.f90 \  
      [INSTALL_DIR]/lib/libnag_mkl.so \  
      -L[INSTALL_DIR]/mkl_ia32_11.3.3/lib \  
      -lmkl_intel -lmkl_intel_thread -lmkl_core \  
      -L[INSTALL_DIR]/rtl/ia32 \  
      -liomp5 -lpthread -lm -ldl
```

MKL を利用しないバージョンの NAG ライブラリを利用する場合は、以下のようにコンパイル・リンクを行ってください。（ここで driver.f90 がユーザープログラムです。）

スタティックライブラリを利用する場合：

```
ifort -I[INSTALL_DIR]/nag_interface_blocks driver.f90 \  
      [INSTALL_DIR]/lib/libnag_nag.a -lstdc++
```

共有ライブラリを利用する場合：

```
ifort -I[INSTALL_DIR]/nag_interface_blocks driver.f90 \  
      [INSTALL_DIR]/lib/libnag_nag.so
```

共有ライブラリを利用する場合には、環境変数 LD_LIBRARY_PATH を正しく設定し、実行時のリンクが行えるようにしてください。

C シェルの場合：

```
setenv LD_LIBRARY_PATH [INSTALL_DIR]/lib:[INSTALL_DIR]/mkl_ia32_11.3.3
```

または、既存の設定がある場合には次のように拡張します。

```
setenv LD_LIBRARY_PATH \  
[INSTALL_DIR]/lib:[INSTALL_DIR]/mkl_ia32_11.3.3:${LD_LIBRARY_PATH}
```

Bourne シェルの場合：

```
LD_LIBRARY_PATH=[INSTALL_DIR]/lib:[INSTALL_DIR]/mkl_ia32_11.3.3  
export LD_LIBRARY_PATH
```

または、既存の設定がある場合には次のように拡張します。

```
LD_LIBRARY_PATH=[INSTALL_DIR]/lib:[INSTALL_DIR]/mkl_ia32_11.3.3:\  
${LD_LIBRARY_PATH}  
export LD_LIBRARY_PATH
```

場合に依っては（例えば、より新しいバージョンのコンパイラを使用する場合など）、その他のパス（例えば、コンパイラのランタイムライブラリなど）を LD_LIBRARY_PATH に設定する必要があるかもしれません。

また、異なるコンパイラ、もしくは Intel コンパイラの異なるバージョンを使用する場合は、[INSTALL_DIR]/rtl ディレクトリに提供される Intel コンパイラ（ifort）のランタイムライブラリをリンクする必要があるかもしれません。

3.1.1. C または C++ からのライブラリの呼び出し

本ライブラリは C または C++ 環境からご利用いただけます。

ご利用の支援として Fortran と C の間の型マッピング情報を持った C/C++ ヘッダーファイル `[INSTALL_DIR]/c_headers/nagmk26.h` が提供されます。ヘッダーファイルから必要な部分だけを（ファイルの先頭にある `#defines` など忘れずに）自身のプログラムにコピー&ペーストするか、もしくはヘッダーファイルを単純にインクルードしてご利用ください。

C または C++ から NAG Fortran Library を呼び出す際のアドバイスは、ドキュメント `[INSTALL_DIR]/c_headers/techdoc.html` をご参照ください。

3.2. インターフェースブロック

NAG Fortran Library インターフェースブロック（引用仕様宣言）はライブラリルーチンの型と引数を定義します。Fortran プログラムからライブラリルーチン呼び出す際に必ず必要という性質のものではありませんが（ただし本製品で提供される Example を利用するには必要となります）、これを用いることでライブラリルーチンが正しく呼び出されているかどうかのチェックを Fortran コンパイラに任せる事ができます。具体的にはコンパイラが以下のチェックを行うことを可能とします。

- (a) サブルーチン呼び出しの整合性
- (b) 関数宣言の型
- (c) 引数の数
- (d) 引数の型

NAG Fortran Library インターフェースブロックファイルはチャプター毎のモジュールとして提供されますが、これらをまとめて一つにしたモジュールが提供されます。

nag_library

これらのモジュールは、Intel Fortran コンパイラ用にプリコンパイルされた形式（*.mod ファイル）で提供されます。

コンパイル時に、-I"pathname" オプションを用いて、モジュールファイルが置かれているディレクトリのパス（[INSTALL_DIR]/nag_interface_blocks）を指定してください。

提供されるモジュールファイル（.mod ファイル）はインストールノートの「2.2. 開発環境」にあるコンパイラを用いて生成されています。モジュールファイルはコンパイラ依存のファイルであるため、ご利用のコンパイラとの間に互換性がない場合は、ご利用のコンパイラでモジュールファイルを生成する必要があります。（自身のプログラムでインターフェースブロックをご利用にならないのであれば、この限りではありません。ただし、Example プログラムはインターフェースブロックを利用しますので、Example プログラムをご利用になる場合は必要です。）

提供されるスクリプト `nag_recompile_mods` を用いて、モジュールファイルのセットを指定のディレクトリ（例えば `nag_interface_blocks_alt`）に生成することができます。

例)

```
[INSTALL_DIR]/scripts/nag_recompile_mods nag_interface_blocks_alt
```

このスクリプトは `PATH` 環境変数に設定された Intel Fortran コンパイラを使用します。

`[INSTALL_DIR]/scripts/nag_recompile_mods` を実行する前に、ご利用の Intel Fortran コンパイラの環境設定スクリプトを実行しておくとう安心です。

新しいモジュールファイルのセットをデフォルトのセットとして使用するには、元のモジュールファイルのセットを含むディレクトリ `[INSTALL_DIR]/nag_interface_block` の名前を `[INSTALL_DIR]/nag_interface_blocks_original` に変更し、新しいモジュールファイルのセットを含むディレクトリ `[INSTALL_DIR]/nag_interface_blocks_alt` の名前を `[INSTALL_DIR]/nag_interface_blocks` に変更してください。

3.3. Example プログラム

提供される Example 結果は、インストールノート「2.2. 開発環境」に記載されている環境で生成されています。Example プログラムの実行結果は、異なる環境下（例えば、異なるコンパイラ、異なるランタイムライブラリ、異なる BLAS または LAPACK ルーチンなど）で若干異なる場合があります。そのような違いが顕著な計算結果としては、固有ベクトル（スカラー（多くの場合 -1 ）倍の違い）、反復回数や関数評価、残差（その他マシン精度と同じくらい小さい量）などがあげられます。

提供される Example 結果は NAG スタティックライブラリ `libnag_mkl.a`（MKL 提供の BLAS／LAPACK ルーチンを使用）を用いて算出されています。NAG 提供の BLAS／LAPACK ルーチンを使用した場合、結果がわずかに異なるかもしれません。

Example プログラムは本ライブラリが想定する動作環境に適した状態で提供されます。そのため、ライブラリマニュアルに記載／提供されている Example プログラムに比べて、その内容が若干異なる場合があります。

以下のスクリプトを用いて Example プログラムを簡単に利用することができます。
（これらのスクリプトは、`[INSTALL_DIR]/scripts` ディレクトリに提供されます。）

- `nag_example_mkl`
NAG スタティックライブラリ `libnag_mkl.a` および本製品で提供される MKL をリンクします。
- `nag_example_shar_mkl`
NAG 共有ライブラリ `libnag_mkl.so` および本製品で提供される MKL をリンクします。
- `nag_example`
NAG スタティックライブラリ `libnag_nag.a` をリンクします。
- `nag_example_shar`
NAG 共有ライブラリ `libnag_nag.so` をリンクします。

これらのスクリプトは、Example プログラムのソースファイル（必要に応じて、データファイル、オプションファイルその他）をカレントディレクトリにコピーして、コンパイル／リンク／実行を行います。

ご利用の NAG ライブラリルーチンの名前をスクリプトの引数に指定してください.

例)

```
nag_example_mkl e04nrf
```

この例では, e04nrfe.f (ソースファイル), e04nrfe.d (データファイル), e04nrfe.opt (オプションファイル) をカレントディレクトリにコピーして, コンパイル／リンク／実行を行い e04nrfe.r (結果ファイル) を生成します.

3.4. Fortran 型と強調斜体文字の解釈

本ライブラリは 32-bit 整数を使用します.

ライブラリとライブラリマニュアルでは浮動小数点変数を以下のようにパラメーター化された型を用いて記述しています.

REAL (KIND=nag_wp)

ここで nag_wp は Fortran の種別パラメーターを表しています.

nag_wp の値は製品毎に異なり, その値は nag_library モジュールに定義されています.

これに加え, いくつかのルーチンで以下の型が使用されます.

REAL (KIND=nag_rp)

これらの型の使用例については, 各種 Example プログラムをご参照ください.

本ライブラリでは, これらの型は次のような意味を持っています.

REAL (kind=nag_rp) - REAL (単精度実数)
REAL (kind=nag_wp) - DOUBLE PRECISION (倍精度実数)
COMPLEX (kind=nag_rp) - COMPLEX (単精度複素数)
COMPLEX (kind=nag_wp) - 倍精度複素数 (e. g. COMPLEX*16)

上記に加え, ライブラリマニュアルでは強調斜体文字を用いていくつかの用語を表現しています. 詳細は "How to Use the NAG Library and its Documentation" の「4.4 実装依存情報」をご参照ください.

3.5. メンテナンスレベル

ライブラリのメンテナンスレベルは、ライブラリルーチン A00AAF の Example プログラムをコンパイル／リンク／実行することにより確認することができます。この時、スクリプト nag_example* を引数 a00aaf と共に用いれば、Example プログラムのコンパイル／リンク／実行を容易に行うことができます（「3.3. Example プログラム」参照）。ライブラリルーチン A00AAF はライブラリの詳細（タイトル、製品コード、使用されるコンパイラおよび精度、バージョン（Mark）など）を出力します。

4. ルーチン固有の情報

本ライブラリルーチン固有の情報を（チャプター毎に）以下に示します.

a. F06, F07, F08, F16

多くの LAPACK ルーチンは “workspace query” メカニズムを利用します. ルーチン呼び出し側にどれだけのワークスペースが必要であるかを問い合わせるメカニズムですが, NAG 提供の LAPACK と MKL 提供の LAPACK ではこのワークスペースサイズが異なる場合がありますので注意してください.

b. S07 – S21

これらのチャプターの関数の動作は, ライブラリ実装毎に異なります.

一般的な詳細はライブラリマニュアルをご参照ください.

本ライブラリ固有の値を以下に示します.

S07AAF $F_1 = 1.0E+13$
 $F_2 = 1.0E-14$

S10AAF $E_1 = 1.8715E+1$
S10ABF $E_1 = 7.080E+2$
S10ACF $E_1 = 7.080E+2$

S13AAF $x_{hi} = 7.083E+2$
S13ACF $x_{hi} = 1.0E+16$
S13ADF $x_{hi} = 1.0E+17$

S14AAF $IFAIL = 1$ if $X > 1.70E+2$
 $IFAIL = 2$ if $X < -1.70E+2$
 $IFAIL = 3$ if $abs(X) < 2.23E-308$
S14ABF $IFAIL = 2$ if $X > x_{big} = 2.55E+305$

S15ADF $x_{hi} = 2.65E+1$
S15AEF $x_{hi} = 2.65E+1$

S15AGF IFAIL = 1 if $X \geq 2.53E+307$
 IFAIL = 2 if $4.74E+7 \leq X < 2.53E+307$
 IFAIL = 3 if $X < -2.66E+1$

S17ACF IFAIL = 1 if $X > 1.0E+16$
 S17ADF IFAIL = 1 if $X > 1.0E+16$
 IFAIL = 3 if $0 < X \leq 2.23E-308$

S17AEF IFAIL = 1 if $\text{abs}(X) > 1.0E+16$
 S17AFF IFAIL = 1 if $\text{abs}(X) > 1.0E+16$

S17AGF IFAIL = 1 if $X > 1.038E+2$
 IFAIL = 2 if $X < -5.7E+10$

S17AHF IFAIL = 1 if $X > 1.041E+2$
 IFAIL = 2 if $X < -5.7E+10$

S17AJF IFAIL = 1 if $X > 1.041E+2$
 IFAIL = 2 if $X < -1.9E+9$

S17AKF IFAIL = 1 if $X > 1.041E+2$
 IFAIL = 2 if $X < -1.9E+9$

S17DCF IFAIL = 2 if $\text{abs}(Z) < 3.92223E-305$
 IFAIL = 4 if $\text{abs}(Z) \text{ or } FNU+N-1 > 3.27679E+4$
 IFAIL = 5 if $\text{abs}(Z) \text{ or } FNU+N-1 > 1.07374E+9$

S17DEF IFAIL = 2 if $\text{AIMAG}(Z) > 7.00921E+2$
 IFAIL = 3 if $\text{abs}(Z) \text{ or } FNU+N-1 > 3.27679E+4$
 IFAIL = 4 if $\text{abs}(Z) \text{ or } FNU+N-1 > 1.07374E+9$

S17DGF IFAIL = 3 if $\text{abs}(Z) > 1.02399E+3$
 IFAIL = 4 if $\text{abs}(Z) > 1.04857E+6$

S17DHF IFAIL = 3 if $\text{abs}(Z) > 1.02399E+3$
 IFAIL = 4 if $\text{abs}(Z) > 1.04857E+6$

S17DLF IFAIL = 2 if $\text{abs}(Z) < 3.92223E-305$
 IFAIL = 4 if $\text{abs}(Z) \text{ or } FNU+N-1 > 3.27679E+4$
 IFAIL = 5 if $\text{abs}(Z) \text{ or } FNU+N-1 > 1.07374E+9$

S18ADF IFAIL = 2 if $0 < X \leq 2.23E-308$

S18AEF IFAIL = 1 if $\text{abs}(X) > 7.116E+2$

S18AFF IFAIL = 1 if $\text{abs}(X) > 7.116E+2$

S18DCF IFAIL = 2 if $\text{abs}(Z) < 3.92223E-305$
 IFAIL = 4 if $\text{abs}(Z) \text{ or } FNU+N-1 > 3.27679E+4$

IFAIL = 5 if $\text{abs}(Z)$ or $\text{FNU}+\text{N}-1 > 1.07374\text{E}+9$
 S18DEF IFAIL = 2 if $\text{REAL}(Z) > 7.00921\text{E}+2$
 IFAIL = 3 if $\text{abs}(Z)$ or $\text{FNU}+\text{N}-1 > 3.27679\text{E}+4$
 IFAIL = 4 if $\text{abs}(Z)$ or $\text{FNU}+\text{N}-1 > 1.07374\text{E}+9$

S19AAF IFAIL = 1 if $\text{abs}(X) \geq 5.04818\text{E}+1$
 S19ABF IFAIL = 1 if $\text{abs}(X) \geq 5.04818\text{E}+1$
 S19ACF IFAIL = 1 if $X > 9.9726\text{E}+2$
 S19ADF IFAIL = 1 if $X > 9.9726\text{E}+2$

S21BCF IFAIL = 3 if an argument $< 1.583\text{E}-205$
 IFAIL = 4 if an argument $\geq 3.765\text{E}+202$
 S21BDF IFAIL = 3 if an argument $< 2.813\text{E}-103$
 IFAIL = 4 if an argument $\geq 1.407\text{E}+102$

c. X01

数学定数は以下のとおりです.

X01AAF (pi) = 3.1415926535897932

X01ABF (gamma) = 0.5772156649015328

d. X02

マシン定数は以下のとおりです.

浮動小数点演算の基本的なパラメーター :

X02BHF = 2

X02BJF = 53

X02BKF = -1021

X02BLF = 1024

浮動小数点演算の派生的なパラメーター :

X02AJF = 1.11022302462516E-16

X02AKF = 2.22507385850721E-308

X02ALF = 1.79769313486231E+308

X02AMF = 2.22507385850721E-308

X02ANF = 2.22507385850721E-308

コンピューター環境のその他のパラメーター :

X02AHF = 1.42724769270596E+45

X02BBF = 2147483647

X02BEF = 15

e. X04

エラーメッセージおよびアドバイスメッセージのデフォルトの出力先装置番号は 6 番となります.

5. ドキュメント

ライブラリマニュアルは本製品の一部として提供されます。

また、NAG のウェブサイトからダウンロードすることもできます。

ライブラリマニュアルの最新版は以下のウェブサイトをご参照ください。

<http://www.nag.co.uk/content/nag-fortran-library-manual>

ライブラリマニュアルは以下の形式で提供されます。

- HTML5 - HTML/MathML マニュアル（各ドキュメントの PDF 版へのリンクを含む）
- PDF - PDF マニュアル（PDF のしおり、または HTML 目次ファイルから閲覧する）

これらの形式に対して、以下の目次ファイルが提供されます。

nagdoc_fl26/html/frontmatter/manconts.html

nagdoc_fl26/pdf/frontmatter/manconts.pdf

nagdoc_fl26/pdf/frontmatter/manconts.html

また、これらの目次ファイルへのリンクをまとめたマスター目次ファイルが提供されます。

nagdoc_fl26/index.html

各形式の閲覧方法および操作方法については、以下のドキュメントをご参照ください。

http://www.nag.co.uk/numeric/fl/nagdoc_fl26/html/genint/essint.html

加えて、以下のドキュメントが提供されます。

- in.html - インストールノート（英語版）
- un.html - ユーザーノート（英語版）

6. サポート

製品のご利用に関してご質問等がございましたら、電子メールにて「日本 NAG ヘルプデスク」までお問い合わせください。その際、ご利用の製品の製品コード（FLLUX26DCL）並びに、お客様の User ID をご明記いただきますようお願い致します。
ご返答は平日 9：30～12:00, 13:00～17:30 に行わせていただきます。

日本 NAG ヘルプデスク

Email: naghelp@nag-j.co.jp

7. コンタクト情報

日本ニューメリカルアルゴリズムズグループ株式会社（日本 NAG）

〒104-0032

東京都中央区八丁堀 4-9-9 八丁堀フロンティアビル 2F

Email: sales@nag-j.co.jp

Tel: 03-5542-6311

Fax: 03-5542-6312

NAG のウェブサイトでは製品およびサービスに関する情報を定期的に更新しています。

<http://www.nag-j.co.jp/> （日本）

<http://www.nag.co.uk/> （英国本社）

<http://www.nag.com/> （米国）