

常用数学库的编译与链接

编译科学计算的软件，时常要用到一些数学库，最常用的是：blas, lapack, blacs, scalapack。

下面讲一下在 Unix/Linux 下如是编译链接这些库。

BLAS(Basic Linear Algebra Subprograms)是基本线性代数子程序库，它提供实现基本矢量和矩阵操作的标准构件。它分3个Level：Level 1，实现 标量-矢量 和 矢量-矢量 操作；Level 2 执行 矢量-矩阵 计算；Level 3 实现 矩阵-矩阵 操作。它被LAPACK和SCALAPACK使用。

LAPACK (Linear Algebra PACKages) 线性代数程序包，解矩阵时常用。

BLACS(Basic Linear Algebra Communication Subprograms)目的是创建一个能够在很广范围内的分布式内存平台上有效一致实现的面向线性代数的消息传递接口。随着新并行机的不断出现，每一次都要重写有效的分布式内存算法的代码需要太长的时间，是不现实的。于是出现了BLACS，它使得并行机上的线性代数程序的编写变得更容易并且更具可移植性。正是由于这个原因，它被用做SCALAPACK的通讯层，是使用SCALAPACK必不可少的先决条件。

SCALAPACK (SCALable LAPACK) 是一个并行线性代数计算软件包,适用于分布存储的MIMD并行机.ScaLapack提供若干线性代数求解功能,具有高效、可移植、可伸缩,高可靠性的优点,利用它的求解库可以开发出基于线性代数运算的并行应用程序。

这些库的源码包都可以从 <https://www.netlib.org> 网站免费下载到。下面用到的包都是从这里下载的。

编译

BLAS:

```
mkdir blas; cd blas #首先建一个目录并进入这个目录
tar xzf blas.tgz #解压源码包，出来一堆.f 源文件
<FC> <_OPTS> -c *.f #<FC>代表fortran编译器, <_OPTS>代表编译选项
ar cr libblas.a *.o #生成库文件
ranlib libblas.a #给库文件建立索引，到此 libblas.a 库编译完毕
```

LAPACK:

```
tar xzf lapack.tgz ; cd LAPACK
```

从INSTALL中选择符合自己所用平台及编译器的make文件，复制到LAPACK下并命名为 make.inc。编辑这个文件，对编译器及编译选项以及路径等做适合自己情况的修改。

进入LAPACK/BLAS/SRC，运行make，产生编译lapack所需的blas库。

回到LAPACK目录下，执行 make，等待编译结束，便会在LAPACK目录下产生一个lapack库文件(.a)。

BLACS:

```
tar xzf mpiblas.tgz ; cd BLACS #这里我使用MPI版本的blacs
```

从BMAKES目录下选择符合自己所用平台及编译器的make文件，复制到BLACS下并命名为Bmake.inc。编辑这个文件，修改相应的编译器及编译选项以及BTOPdir和MPI相关的路径等。这还没改完，暂时保存退出，有一些选项需要下面的步骤来确定。主要是 INTERFACE、SYSERRORS、TRANSCOMM 如何设置。

进入INSTALL目录，执行 make help 查看帮助。执行 make xintface; make xsyserrors; make xtc_CsameF77，会在EXE目录下产生相应可执行文件，运行之，则分别告诉你 Bmake.inc 中的INTERFACE、SYSERRORS、TRANSCOMM 怎么设置，然后再此修改 Bmake.inc 设置这些值。

回到BLACS目录下，执行 make mpi 等待编译结束后，则产生的库文件放在 LIB 目录下(3个)。

SCALAPACK:

```
tar xzf scalapack.tgz ; cd SCALAPACK
```

从INSTALL目录中择符合自己所用平台及编译器的make文件，复制到SCALAPACK下并命名为SLmake.inc。编辑这个文件，修改编译器及选项，修改路径（包括SCALAPACK的路径home，以及BLACS的路径，blas和lapack的路径，MPI的路径等），设置 CDEFS 为与BLACS中的INTERFACE相同的值。

执行make，等待编译结束就产生了libscalapack.a库。

这个scalapack库中已经包含了PBLAS库。

注：编译SCALAPACK一定要在编译完BLAS、LAPACK、BLACS之后才行！

链接

链接这些库时一定要注意顺序，顺序很重要！由于LAPACK要用到BLAS，SCALAPACK要用到BLAS和BLACS，而被用到的库必须放在用它的库之后，所以BLAS必须放在LAPACK和SCALAPACK之后，BLACS要放在SCALAPACK之后。可用的一种顺序是：

SCALAPACK LAPACK BLAS BLACS

链接时只要按上述顺序指定相应库文件的全路径即可。如果不是编译MPI并行程序则用不到SCALAPACK和BLACS。

注意：从编译库到编译应用程序，最好使用同一套的编译器及编译选项，否则很容易出错。

除了以上数学库外，还有好多别的库。如 libgoto 的BLAS库，效果很好。对PGI的编译器，针对不同平台的ACML库，主要包含BLAS和LAPACK程序。对Intel的编译器，有MKL的数学库，MKL8完整实现了上面提到的四个库。