

中国高校数学和统计软件库 (CUMSS)

数值软件的研究与开发

“数学软件研究与开发”课题组

施吉林 胡德焜 於崇华 编著

复旦大学出版社

中国高校数学和统计软件库 (CUMSS)

数值软件的研究与开发

“数学软件研究与开发”课题组

施吉林 胡德焜 於崇华 编著

复旦大学出版社

内 容 提 要

本书通过对我国第一个正式出版的大型数值软件系统“中国高校数学和统计软件库(CUMSS)”2.0版的总体介绍,细致地分析了数值软件工程开发的各阶段中相对于管理信息软件工程的许多特殊性及其进行处理的基本原则、技术手段和具体方法,同时系统地论述了这一大型综合性数值软件库的基本内容与特色、开发过程、算法分析设计和编程技巧、软硬环境、应用领域与方法等

本书可供组织开发、研制、学习、使用和维护数值软件库(尤其是使用CUMSS)的教学工作者、科学研究和工程技术人员、计算技术和软件领域的专门人员及有关专业的师生阅读和参考。

(沪)新登字 202 号

中国高校数学和统计软件库(CUMSS)

数值软件的研究与开发

施吉林 胡德焜 於崇华 编著

复旦大学出版社出版

新华书店上海发行所发行 同济大学印刷厂印刷

开本 787×1092 1/32 印张 4 字数 101,000

1992 年 7 月第 1 版 1992 年 7 月第 1 次印刷

印数 1 - 2,000

ISBN 7-309-00807-3/T·36

定价 16.00 元

《中国高校数学和统计软件库 (CUMSS) 》

编 审 委 员 会

(按姓氏笔画为序)

李水根 易大义 周仲良 於崇华

胡德焜 施吉林 徐萃薇 蒋尔雄

谢如彪 熊西文

序 言

“中国高校数学和统计软件库”(CUMSS)是国家教委(原教育部)重点研究项目“数学软件研究与开发”的主要成果。其二期工程又是国家教委科技管理中心资助的博士点联合基金项目。由大连理工大学、北京大学、复旦大学、西安交通大学、浙江大学和上海交通大学六校联合研制。1985年至1987年完成第一期工程,研制成CUMSS 1.0版,并于1987年12月通过了国家教委组织的专家委员会的验收,专家们认为:CUMSS“与国际先进的同类产品相比,在适应范围、功能、性能等方面有所提高,算法上具有我国特色,已达到近代国际先进水平”。第一期工程的成果获得了1988年国家教委科技进步二等奖。

自1988年开始的二期工程,增加了许多新的算法,并将原有的29个软件包调整成13个软件包、一个测试系统和一个管理系统,于1990年完成了CUMSS 2.0版。

CUMSS 2.0版是我国独立研制的大型数学和统计软件库,可用于科学计算、工程计算、数据处理、计算机辅助设计和管理决策等方面。功能较齐全,使用方便,便于移植。特别在算法上有不少新内容,是其他同类软件包(库)中很少见到的。本软件库对提高大型应用软件系统的质量,减少重复劳动,支持有关学科的研究,开发高、新技术产品,提高计算机使用的效率等方面均有较大的经济和社会效益。

CUMSS 2.0版包括矩阵特征系统分析、大型线性方程组求解系统、非线性方程(组)的数值解法、插值逼近曲线和曲面拟合、数值积分和微分、常微分方程数值解,数值代数基础、

数学和统计学中的特殊函数、多元分析、时间序列分析、快速变换、最优化、统计基础等13个软件包，共1979个子程序（包括仅供用户调用的子程序451个），16万1千余行标准FORTRAN源程序。本库的微机版可在DOS 3.0和MS-FORTRAN 4.0的支持下在IBM-PC兼容机种上直接运行，也能方便地移植到各种大中小型机或其他系列的微机上实现等价运行，还可根据需要随意组合生成新的软件包。

CUMSS是前后一百多位研究人员克服了工作量、时间长、人员分散且流动性大、经费不足和经验不足等种种困难而完成的成果，是国家教委组织大型联合攻关项目的范例，是软件工程实践的范例。组织如此多单位和人员进行长期联合攻关且取得了良好的效果，这在国家教委组织的项目中是少有的。并且，在完成项目的过程中还锻炼和造就了高校系统中一支实力雄厚的、能攻坚的、有学术层次的数值软件队伍，因而也是科研与培养人才相结合的范例。

在CUMSS 2.0版正式出版之际，研制组向热情支持、关怀和帮助我们开展和完成研制工作的有关专家、领导和朋友们表示衷心感谢和崇高的敬意，并希望在今后的推广和完善中能继续得到他们以及广大用户的帮助、配合和支持，为发展我国的数值软件事业而共同努力。

因CUMSS是一个大型软件库，2.0版的运行时间又不长，难免存在一些问题乃至错误，恳请广大用户和同行指正，以便对其进一步维护和完善。

CUMSS 研制组

1992年3月

目 录

序 言

第一章	绪 论	(1)
§ 1	引 言	(1)
§ 2	数值软件发展概况	(3)
§ 3	软件工程和数值软件的开发	(7)
第二章	CUMSS 的开发和需求分析	(23)
§ 1	CUMSS 的开发过程	(23)
§ 2	需求分析	(28)
§ 3	文档格式与编写要求	(34)
第三章	总体设计	(43)
§ 1	通用数值软件和管理信息系统的工程比较	(43)
§ 2	CUMSS 的设计目标	(46)
§ 3	总体设计和结构简述	(48)
§ 4	设计技术要点	(51)
§ 5	软件的组成与功能	(60)
第四章	算法设计与实现	(65)
§ 1	数值软件的算法的特点	(65)

§ 2	算法设计技术	(70)
§ 3	算法实现技术	(81)
§ 4	接口与界面技术	(89)
§ 5	软件包的技术说明书	(92)
第五章	测试、组装、使用	(99)
§ 1	CUMSS 的测试	(99)
§ 2	最小测试包	(108)
§ 3	大型软件库的组装	(114)
§ 4	CUMSS 的使用	(119)

后 记

第一章 绪 论

§ 1 引 言

国家教育委员会(原教育部)于 1985 年 4 月正式确立由大连理工大学、北京大学、复旦大学、西安交通大学、浙江大学、上海交通大学等校联合研究与开发数值软件并成立“数学软件研究与开发”课题组,至今已有七年多了,在这七年多时间里,我们课题组前后共召开了学术、经验交流和工作协调会议 20 次左右,由于人员调动,实际参加课题组的人员涉及 10 个学校的 18 个单位近 110 人,其中具有高级职称的就有 40 多人,还有讲师、工程师、助教、博士生和硕士生等,在国家教委科技管理中心、科技司以及参加本项目的高校的有关领导的大力支持和帮助下,课题组成员团结奋斗,共同努力,相互取长补短,充分发挥了各个参加单位的优势,获得了较大的成果,完成了我国独立研制的大型数学和统计软件库,为发展我国的数值软件作出了一定的贡献。

“数学软件的研究与开发”项目所完成的主要成果是“中国高校数学和统计软件库(CUMSS)” (这里 CUMSS 是 China University Mathematics and Statistics Software 的缩写),到目前为止,已先后形成了三个版本。

1985 到 1987 年间完成的 CUMSS 1.0 版包括 29 个软件包,共 1800 多个模块,程序量达 22 万余个标准 FORTRAN 行,还配有完整的文档资料,其中技术说明书和使用说明书

就有 57 本之多。国家教委科技管理中心于 1987 年 12 月组织专家进行了验收。专家们认为，CUMSS “与国际先进的同类产品相比，在适应范围、功能、性能等方面均有所提高，算法上具有我国特色，已达到近代国际先进水平。”嗣后，本项目获得了 1988 年国家教委科技进步二等奖。

当时由于受硬环境的影响，CUMSS 1.0 版主要被考虑和设计为在 HONEYWELL DPS8 机上运行，因而其应用的广泛性受到一定的限制。鉴于此，我们从 1988 年开始在 1.0 版的可移植性方面进行了改进，并于 1990 年完成了 CUMSS 1.1 版。1.1 版的诞生使 CUMSS 库能在微机上实现与中型机（宿主环境）上等效的运作，因而使用面一下子拓广了许多，增加了大型通用软件所产生的经济效益和社会效益。与此同时，我们将本库的全部使用说明书都录制在微机的软盘上，供用户在需要时随意调看和打印其全文或任意一部分。1.1 版还解决了课题组和用户在维护和使用 CUMSS 1.0 版的过程中业已发现的问题。

为了使 CUMSS 的结构更完善、性能更可靠、使用更方便，我们在改进软件库移植性的同时，还对整个库的结构、功能、算法和软包装进行了较大的更改，通过增删、合并和调整，将全库重新组合成 13 个软件包、1 个管理系统和 1 个最小测试系统，这就是目前已商品化的 CUMSS 2.0 版。

2.0 版包括的 13 个软件包如下（括号中列出的为相应程序名的前两个字母）：

《矩阵特征系统分析》(ME)

《大型线性方程组求解系统》(ML)

《非线性方程（组）的数值解法》(MN)

《插值、逼近、曲线与曲面拟合》(MI)

《数值积分与微分》(MA)

《常微分方程数值解》(MD)

《数值代数基础》(BM)

《数学和统计学中的特殊函数》(SP)

《多元分析》(SM)

《时间序列》(ST)

《快速变换》(MF)

《最优化》(MO)

《统计基础》(BS)

与此同时，我们还取得了计算数学和应用软件方面的一系列理论成果。据 1991 年初统计，课题组成员发表在国内外各种刊物和被学术会议接受的与本项目有关的论文达 40 多篇，并编写了四种有关数值软件的教材或讲义(需要说明的是，迄今我国尚无这方面的正式出版物)。另外，课题组将研究和开发与教学和培养人才紧密结合，在七年多的时间里造就了一批能从事数值软件研究与教学的青年骨干，他们有希望成为发展我国数值软件事业的一支中坚力量。

§ 2 数值软件发展概况

第一台电子计算机 ENIAC 问世至今还不到半个世纪，但它自身发展速度之快和对人类影响的程度之深是以往任何一种新技术所无法比拟的。现在它已进入科学技术、工农业生产、文化教育乃至日常生活等各个领域，成为人类不可或缺和无法替代的最重要的工具。

计算机发展得如此之快，原因是多方面的，如：物理、化学、材料、电子等学科的理论进展，工业技术的进步，需求的刺激，等等，而其中非常重要的一个因素，乃是数学理论的巨大贡献。计算机科学是吮吸着数学的乳汁而诞生和成长起来的。德国数学家 Leibniz 在研究组合数学时发现的二进制编码是目前一切电脑得以存在的基础，布尔代数原理则为计算机工业的崛起插上了翅膀，从矩阵论中引出的概念、记号和技术为计算机高级语言的创立奠定了基石，图论中的许多理论和思想更是编译程序优化设计的有力工具。数学家对计算机理论发展的功绩不胜枚举，例如，只是在 Von Neumann 于 1947 年提出了用流程图描述计算机的运行过程后，软件的开发研究才得以崭露头角并发展到现在这种遍地开花的局面。再如，追本溯源，目前流行的结构化程序设计的基础是 Bohm 和 Jacopini 在 1966 年证明的一条数学原理：任何单入口和单出口，且没有“死循环”的程序，都能由三种最基本的控制结构构造出来。数学还为算法分析提供了大量组合的、分析的、代数的、概率的、数论的方法和技术，在计算机科学领域里寻找最优或近乎最优算法的有关研究中，这些方法和技术居有重要的地位。数理逻辑、近世代数、概率统计、组合数学等数学分支都对计算机科学的发展起过重要的作用。

另一方面也应指出，计算机科学对数学的发展同样产生了不可估量的影响，数值分析领域就是一个极好的例子。我们可以说，正是计算机科学的发展才使数值分析产生了根本性的革命。借助于计算机，许多原来令人一筹莫展的数学问题可以得到满意的数值解。这样，计算数学逐渐发展壮大，成为一门着重研究和分析如何在计算机上使用数值方法来计算和求解数学问题的学科，进而产生了数值软件并形成了数值软件产业。

数值软件的发展大体可分为三个阶段。第一阶段大致从 1947 年至 60 年代初，其特点是：程序用机器指令编写，产品由个体生产方式完成，程序与硬件关系密切，用户需求比较单一。从 60 年代末起，一批高级语言如 FORTRAN-1, ALGOL 60 相继问世，人们要求程序的规模越来越大，功能越来越强，于是，这种生产方式由于无法适应新的情况而日趋没落，终于完成了它的历史使命。

1964 年，人们首次提出了“软件”这一概念，它标志着数值软件的发展进入了第二个阶段。这一阶段约从 60 年代初至 70 年代初，其主要特点是：人们改用高级语言编制实用程序，并通过多人合作的“作坊式”生产方式来协同完成规模较为庞大的产品。为了使合作者间能沟通思想、相互理解、便于维护，还出现了各种说明书，即文档。

人们始料不及的是，这一时期程序的规模以前所未有的惊人速度急剧膨胀，迅速地超越了这种落后的生产方式所能承受的能力，出现了软件开发投资不断增大、但质量却很难保证这种普遍的现象，于是产生了所谓的“软件危机”。为了渡过这片沼泽地，北大西洋公约组织在 1968 年和 1969 年两次召开学术会议研究对策，会上提出的“软件工程”的思想是软件发展跨入第三个阶段的里程碑。

这一阶段从 70 年代初一直到现在，其最大特点是将软件的研制过程作为一个系统工程来综合地全面地考虑。这一做法利用了人们在组织、管理社会化的大生产中取得的成功经验，因而一诞生便显示出巨大的生命力。经过二十多年的发展和完善，在这一领域已形成了一整套行之有效的研制和开发软件的工作方法，同时还产生了诸如“软件工程学”、“软件方法

学”等许多分支学科。我们的 CUMSS 就是以软件工程的思想为指导研制而成的大型综合性数值软件库。

能够独立研制大型综合性数值软件库的国家还不多。从70年代后期开始，世界上先后出现了一些颇有影响、使用面较广的综合性数值软件库。IMSL (International Mathematics and Statistics Library) 是美国IMSL公司研制的大型数学和统计软件库，自研制至今已更新了十多个版本，用户达一千多个单位，是目前世界上流传最广、影响最大的数值软件库。这个库在我国也有相当的影响，是目前使用最多的数值软件库之一。

NAG (Numerical Algorithm Group) 是英国的政府研究机构联合几所大学共同研制成功的大型综合性数值软件库。它用多种语言写成，可移植性非常好，普遍流行于欧洲，但我国的 NAG 用户不多。

STYR (分别为“数学”、“统计”、“应用”、“软件”的汉语拼音的首字母) 是中国科学院计算中心等单位在“七五”期间联合开发的综合性数值软件库。这是我国开发的第一个大型数值软件库，在国内有一定影响，目前还在继续完善和更新版本。

综合性的数值软件库内容丰富，适用性广，可用于科学研究、工程设计、经济管理、过程控制、计算机辅助设计中各种数学问题的求解。在开发各类应用软件的过程中使用成熟的、优质的综合性数值软件库作为基本支撑之一，不但有助于缩短开发周期，减少重复劳动，而且有利于提高所开发软件的质量，因此，在许多科技发达的国家里，这种做法已为人们普遍采用。在我国，软件工作者和其他科研人员直接使用商品化的综合性数值软件库的意识也在逐渐形成和增强，我们希望 CUMSS

2.0版的出版有助于这一趋势的发展。

§ 3 软件工程和数值软件的开发

“软件工程”是应用有关科学理论和工程上的技术来指导软件开发、用较小的代价获得高质量软件的科学。软件工程的发展与软件内在质量评价标准的发展紧密相关。目前，软件的质量评定在国际上虽然尚无完全统一的规范，但不同体系的质量定义中的许多方面是共同的，在数值软件方面尤为如此。

这些较为共同的标准是：

(1) 可靠性。它有两个含义，即正确性和健壮性。对于任何软件来说，可靠性都是衡量质量好坏的头等重要的标准。正确性意味着在系统为正常的情况下，软件能得到预期的满意结果；健壮性意味着在系统或环境发生意外偏差时，软件也能适当地工作，并对异状作出有效的处理。例如，当有不合理的数据输入时，软件能察觉、修正并阻止破坏作用扩展，产生出错信息，保留已经算得的中间结果，从而能最大限度地阻止错误对整个系统的不良影响。软件可靠性的基础是选择可靠的算法和设计可靠的程序实现方案。

(2) 易维护性。通常它包括易阅读、易发现和纠正错误、易修改扩充等含义。易维护的关键是易阅读和理解，这就像一篇条理清楚的文章容易被修改润色，而一篇结构含混、逻辑不强、丢三拉四的文章使人无从下笔改动一样。因此，如何保证程序的可读性，也是软件工程中的重要内容之一。在研制数值软件的过程中，为了使程序便于理解和阅读，设计时必须掌握算法的结构，合理地划分模块并明确它的功能，还应具有良好

的程序设计风格，如符号的命名、注释行的内容和写法、语句结构、各种说明和信息处理等，均应有统一而明确的规定和要求。

(3) 效率。通常是指运算时间少和占用机器的内存空间少。

尽管硬件的高速发展使人们对效率的要求不再像过去那么重视，但对数值软件而言，尤其是求解大型问题，效率仍然是一个引人注目的质量标准。80年代初期，美国使用当时最快的Cray-1并行计算机进行数值天气预报的研究，开始时把从地球表面至平流层以长、宽、高各1公里作剖分，再用有限元求解流体力学的Navier-Stokes方程以预测第二天的天气情况。这样，从数据输入至结果输出共花了100分钟。后来发现这么做精度较低，于是把剖分改为长、宽、高各0.5公里，结果花了近1400分钟，即23小时才算得结果，从时效性上考虑，这样的预报已经没有任何意义了。由此可见，软件的效率是极其重要的。

(4) 可移植性。这是指程序系统能较方便地从其研制时所在的软、硬环境（称为该软件的“宿主环境”）转移至其他的软、硬环境并实现等价运算。可移植性对软件的推广使用至关重要，特别是基础性的大型数值软件，在进行系统设计时就应对最后产品可移植性的好坏予以相当多的考虑。

以上四个方面是评价软件质量的主要标准，并不包括用户对软件的全部要求，显然，对所开发的软件在内容、范围、维护、代价等方面的具体要求是随着用户的不同和用途的差异而有所差别的。

如何用较小的代价来完成具有上述质量的软件是软件工程所要解决的根本问题。以软件工程中的结构化方法为指导，以软件的生命周期为依据，并结合开发CUMSS的经验，我们将

软件开发过程划分为以下六个阶段：

1. 制定计划

这一阶段的主要任务是确定开发软件的总目标和功能、性能等方面的设想；进行完成任务的可行性分析；设计解决问题的方案；对可使用的资源（如计算机硬环境和软环境、人力、资金等）以及代价、效益和进程作出估计。这一阶段产生的文档是课题申报计划、意向书、招标书等，供主管部门或用户审定。对于开发人员来说，这是争取任务的“第一炮”，能否打好它事关重大。要完成这一工作必须做初步然而广泛的调查，而且在调查和编制文档的过程中必须有知识面广、经验丰富的高级专家参加。

这个阶段可以说是软件开发的准备阶段，一般软件工程并未将它列入软件开发的周期之中，但我们认为这个阶段相当重要，必须明确地列入开发过程。

2. 需求分析

需求分析阶段的主要任务是理解和调查用户的要求，确定用户究竟要求软件系统“做什么”，并将这些要求用书面表达出来，形成软件的需求规格书。这个阶段也称为系统的定义阶段。

需求规格书也叫系统说明书，是整个软件开发中最重要的的一份文档。它明确地描述了用户的要求，同时也是双方充分讨论后达成的协议，因而成为以后各阶段工作的基础。在确立系