

Современное состояние библиотеки программ JINRLIB

Л.В. Попкова, А.П. Сапожников, Т.Ф. Сапожникова
Лаборатория информационных технологий ОИЯИ, Дубна

JINRLIB (<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/>) - библиотека программ, создаваемых сотрудниками ОИЯИ и их коллаборантами и предназначенная для решения широкого круга математических и физических задач [1]. Основные пополнения в библиотеку, в основном, в виде автономных программ и программных пакетов, делают сотрудники Лаборатории Информационных Технологий.

Проведена большая работа по привлечению новых авторов и новых программ в библиотеку. Информация о новых поступлениях размещена в очередном Информационном бюллетене ЛИТ. В настоящий момент насчитывается более 60 программных пакетов, большинство которых решает задачи автоматизации обработки экспериментальных данных и вычислительной математики. Полная информация о JINRLIB регулярно размещается на сайте библиотеки.

Поддержка программирования в среде MPI

В последнее десятилетие происходит бурное развитие технологий программирования параллельных вычислений, в частности, MPI. Эта тенденция нашла свое отражение и в библиотеке JINRLIB.

Была сформулирована следующая стратегия распараллеливания: библиотечная программа, подготовленная для работы в среде MPI, должна успешно работать при любом количестве NP параллельных процессов, вовлекаемых в решение прикладной задачи, в частности, и при NP=1. Таким образом, возникает единый исходный текст библиотечной программы, равно пригодный к эксплуатации как на традиционных последовательных вычислительных системах, так и на современных кластерах, состоящих из большого числа процессоров. Необходимым условием для обеспечения такой унификации является наличие заранее подготовленных программ-заглушек (stubs) пакета MPI, что позволяет использовать библиотечные программы даже на тех машинах, где никакого MPI нет вообще. К счастью, базовые операции MPI сконструированы таким образом, что в качестве заглушек достаточно иметь пустые подпрограммы, лишь бы системный загрузчик смог реализовать все внешние ссылки. Эта идея, которая при работе на кластерах использует "настоящий" MPI, а при рабо-

те в однопроцессорной конфигурации - его заглушки, была успешно реализована при распараллеливании программ, описанных ниже.

Параллельная версия программы MINUIT - минимизации функции многих переменных

Предлагается версия программы минимизации функций многих переменных MINUIT [2] для широкого класса многопроцессорных вычислительных систем с использованием коммуникационного пакета MPI. На примере MINUIT обсуждаются проблемы распараллеливания больших вычислительных программ, разбираются типовые этапы работы при распараллеливании, приведены результаты тестирования, демонстрирующие реально достигнутый параллелизм.

Параллельная версия программы FUMILI

PFUMILI [3] - модификация известной программы FUMILI, допускающая ее эффективную эксплуатацию на современных вычислительных кластерах, объединяющих сотни однотипных процессоров. При этом интерфейс программы совершенно не изменился по сравнению с ее однопроцессорным вариантом. Это открывает возможности для распараллеливания более крупных вычислительных программ, использующих PFUMILI для выполнения отдельных этапов своей работы.

Clebsch2 - программа для вычисления простейшей формы коэффициентов Клебша-Гордана

Программа Real*8 function Clebsch2(k,n) [4] вычисляет коэффициент

$$(k, n) = k! * (n - k)! / n!$$

Программа свободна от типичных при вычислении факториалов "в лоб" случаев переполнения при умножении. Программа является коллективной операцией пакета MPI и прямым потомком операции *MPI_AllReduce*.

Программа Primus. Вокруг решета Эратосфена, или еще один опыт распараллеливания программ

Описывается программа Л.Александрова [5], реализующая классический алгоритм т.н. решета Эратосфена для генерации простых чисел. Авторский интерфейс был модифицирован А.П.Сапожниковым [6] для упрощения возмож-

ности использования нескольких процессоров в рамках технологии MPI. Исследована производительность этой программы. Показано, что она близка к оптимальной величине $O(N * \ln(N))$. Приведены все тексты на языке Fortran.

Profile - программный инструмент для исследования производительности программ

Измерение времени работы процессора (процессоров) при исполнении исследуемой программы является чрезвычайно важным. Оно позволяет, во-первых, оценить производительность программы в целом, определяя ее конкурентоспособность в ряду аналогичных программ. Во-вторых, выявить наиболее времязатратные места изучаемой программы, чтобы в дальнейшем сосредоточить свои усилия именно на них.

Программа Profile [7] предназначена для исследования производительности программ в определяемых пользователем интервалах. Программа пригодна для использования в традиционных (последовательных) фортранных программах, так и в распараллеленных с использованием технологии MPI.

Библиотеки объектных модулей JINRLIB

Также поддерживается и развивается часть JINRLIB, распространяемая в виде библиотек объектных модулей. При изменениях в аппаратном и/или программном обеспечении ЦИВК ОИЯИ, по мере появления новых программ или модернизации старых выполняется их полная пересборка. Библиотеки готовятся на компьютерах Центрального информационно - вычислительного комплекса (ЦИВК) ОИЯИ с операционной системой (ОС) Scientific Linux, а также на компьютерах с ОС Windows для всех доступных нам фортранных трансляторов. Библиотеки объектных модулей математических программ общего назначения готовятся на ЦИВК

для трансляторов GNU Fortran 77, GNU Fortran 95 и Intel Fortran Compiler. Библиотеки объектных модулей для ОС Windows подготовлены для трансляторов Compaq Visual Fortran 6.6, Fortran PowerStation 4.0, Microsoft Fortran 5.00, GNU Fortran 77.

WWW-сопровождение JINRLIB

Специализированный WWW - сайт <http://www.jinr.ru/programs/> обеспечивает электронный доступ к библиотеке JINRLIB, где можно найти каталог, исходные тексты, описания программ и программных пакетов, библиотеки объектных модулей. Ведется каталог вновь поступивших программ и программных пакетов. Для программных пакетов на странице с их описанием заведены счетчики обращений.

В настоящее время заканчивается реконструкция сайта: изменен дизайн, добавлен новый раздел для программ с использованием технологии MPI. Для улучшения качества статистики использования программ кроме счетчика посещений страницы добавлен счетчик количества скачиваний текстов программ.

Список литературы

- [1] <http://www.jinr.ru/programs/jinrplib/>
- [2] А.П.Сапожников. Опыт распараллеливания больших вычислительных программ. Параллельная версия программы MINUIT. P11-2003-216, Дубна, ОИЯИ, 2003.
<http://www.jinr.ru/programs/jinrplib/minuit/>
- [3] <http://www.jinr.ru/programs/jinrplib/pfumili/>
- [4] Scientific report 2010-2011, LIT JINR, Dubna.
<http://www.jinr.ru/programs/jinrplib/clebsch2/>
- [5] Lumomir Alexandrov, D. B. Baranov, Plamen Yotov Polynomial splines interpolating prime series. JINR-P5-2002-228.
<http://arxiv.org/abs/math/0212246v5>
- [6] <http://www.jinr.ru/programs/jinrplib/primus/>
- [7] <http://www.jinr.ru/programs/jinrplib/profile/>