

# 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 посещения 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/>