

Библиотека программ JINRLIB.

Использование технологий параллельного программирования в прикладных программах

© Л.В. Попкова

© А.П. Сапожников

© Т.Ф. Сапожникова

Объединенный институт ядерных исследований

Дубна

lyuda@jinr.ru

sap@jinr.ru

tsap@jinr.ru

Аннотация

В статье содержится описание библиотеки компьютерных программ JINRLIB, создаваемых сотрудниками ОИЯИ. В зависимости от способа сопровождения и распространения библиотека делится на две части: одна часть распространяется в виде объектных модулей, другая — в виде автономных пакетов прикладных программ. Сформулирована стратегия создания параллельных программ с использованием технологии MPI. Приведено описание параллельных программ библиотеки.

1 Библиотека программ JINRLIB

JINRLIB (<http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/>) — библиотека программ, предназначенных для решения широкого круга математических и физических задач [1,2]. Пополнение библиотеки происходит в виде автономных программ и программных пакетов, создаваемых в основном сотрудниками ЛИТ ОИЯИ и их коллаборантами.

Программы объединяются в библиотеки объектных модулей или существуют в виде самостоятельных пакетов прикладных программ. Каждая программа идентифицируется уникальным индексом или именем. Для индексирования программ, включаемых в библиотеки объектных модулей, используется классификация, принятая в свое время в библиотеке ДУБНА. Для идентификации остальных программ используется имя программы и классификация, принятая в издательском отделе ОИЯИ.

Библиотеки объектных модулей готовятся на компьютерах Центрального информационно — вычислительного комплекса ОИЯИ с ОС Linux, а также на компьютерах с ОС Windows для всех доступных фортранных трансляторов.

Программы, которые по разным причинам не

могут распространяться в виде библиотек объектных модулей, также размещаются в JINRLIB. Вся информация, предоставленная автором (владельцем) программы, помещается на WWW-сайте [2]. Информация, размещаемая в этом разделе, регулярно обновляется и пополняется. В настоящий момент насчитывается более 60 программных пакетов, большинство которых решает задачи автоматизации обработки экспериментальных данных и вычислительной математики.

2 Поддержка программирования в среде MPI

В последнее десятилетие происходит бурное развитие технологий программирования параллельных вычислений, в частности, MPI [3]. 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 работе в однопроцессорной конфигурации — его заглушки, была успешно реализована при распараллеливании программ, описанных ниже.

MINUIT — параллельная версия программы минимизации функций многих переменных [4]. На примере MINUIT обсуждаются проблемы распараллеливания больших вычислительных программ, разбиваются типовые этапы работы при распараллеливании.

PFUMILI — модификация известной программы FUMILI, допускающая ее эффективную эксплуатацию на современных вычислительных кластерах, объединяющих сотни однотипных процессоров [5]. 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 $(k, n) = k!(n-k)!/n!$ [6]. Программа свободна от типичных при вычислении факториалов «в лоб» случаев переполнения при умножении.

PRIMUS — вокруг решета Эратосфена, или еще один опыт распараллеливания программ. Описывается программа Л. Александрова [7], реализующая классический алгоритм т.н. решета Эратосфена для генерации простых чисел. Авторский интерфейс был модифицирован [8] для упрощения возможности использования нескольких процессоров в рамках технологии MPI.

PROFILE — программный инструмент для исследования производительности программ в определяемых пользователем интервалах [9]. Программа пригодна для использования в традиционных (последовательных) фортранных программах, так и в распараллеленных с использованием технологии MPI.

3 WWW-сопровождение JINRLIB

Специализированный WWW-сайт [2] 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. По каталогу JINRLIB создана база данных авторов программ библиотеки, на основании

которой строится таблица авторов со списком программ. Также имеется возможность получить список программ нужного автора.

3 Заключение

Возможно, JINRLIB трудно конкурировать с профессиональными библиотеками. Но задача библиотеки видится в другом — представить результаты научной деятельности сотрудников ОИЯИ, в частности — ЛИТ, в виде готовых программ.

Литература

- [1] Попкова Л.В., Сапожников А.П., Сапожникова Т.Ф., Федорова Р.Н. Библиотека программ JINRLIB // Электронные библиотеки: перспективные методы и технологии, электронные коллекции: Труды десятой Всероссийской научной конференции, Дубна, 7–11 окт. 2008 г. — Дубна: ОИЯИ, 2008. — С. 284–289.
- [2] <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/>
- [3] MPI: The complete Reference. MIT Press, Cambridge, Massachusetts, 1997.
- [4] А.П. Сапожников. Опыт распараллеливания больших вычислительных программ. Параллельная версия программы MINUIT. P11-2003-216, Дубна: ОИЯИ, 2003. <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/minuit/>
- [5] <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/pfumili/>
- [6] Scientific report 2010–2011, LIT JINR, Dubna. <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/clebsch2/>
- [7] L.Alexandrov, D.B. Baranov, P. Yotov. Polynomial splines interpolating prime series. JINR-P5-2002-228. <http://arxiv.org/abs/math/0212246v5>
- [8] <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/primus/>
- [9] <http://www.jinr.ru/programs/jinrlib/profile/>

Program Library JINRLIB

Lyudmila V. Popkova, Alexander P. Sapozhnikov,
Tatiana F. Sapozhnikova

The article is devoted to JINRLIB — the library of computer programs created at JINR. Depending on the way of maintenance and distribution, this library is divided into two parts: the first part is distributed as a collection of object modules, second part is distributed as a set of standalone packages in their source form. The programs using MPI technology are described. The specialized WWW-site, where the library resides, is described. This site provides electronic access to JINRLIB.