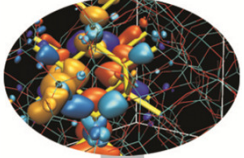
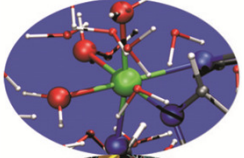
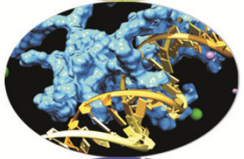
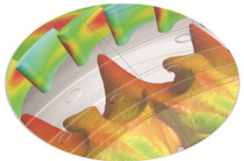
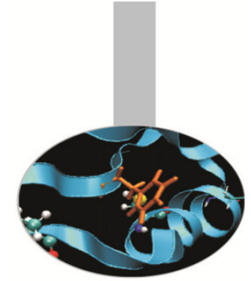


Librerie matematiche

Introduzione al calcolo parallelo



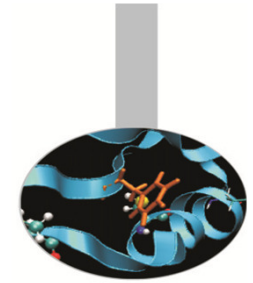


Librerie matematiche

Il termine *libreria matematica* indica usualmente un insieme di subroutine e funzioni che implementano algoritmi, a volte di basso livello, per calcolare numeri casuali, soluzioni di sistemi lineari, funzioni notevoli, FFT, ...

Considerando che alcuni algoritmi si ripetono spesso nei programmi tecnico-scientifici queste funzioni sono importanti perché evitano di riscrivere ogni volta lo stesso codice.

Per quanto riguarda il calcolo parallelo sono disponibili librerie matematiche che implementano algoritmi apparentemente banali ma in modo efficiente, soprattutto quando si ha la disponibilità di librerie prodotte appositamente dalle aziende che distribuiscono le piattaforme di calcolo.



Librerie matematiche

BLAS/CBLAS (Basic Linear Algebra Subprograms)

È tra le prime librerie scritte (1979), storicamente per calcolatori con architettura vettoriale. Comprende operazioni elementari tra vettori e matrici come il prodotto scalare e la moltiplicazione tra scalari, vettori, matrici, anche in forma trasposta. È utilizzata da numerose librerie di livello più alto, perciò ne sono state prodotte diverse versioni, ottimizzate per varie piattaforme di calcolo.

Linguaggio: FORTRAN, C

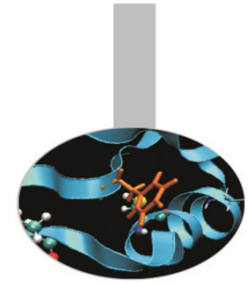
Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: Jack Dongarra, ORNL and Eric Grosse, Bell Labs

Distributore: NETLIB

Fonte: The University of Tennessee at Knoxville and Bell Laboratories

Librerie matematiche



BLACS (Basic Linear Algebra Communication Subprograms)

È una libreria di basso livello per distribuire operazioni elementari tra vettori e matrici secondo il paradigma a memoria distribuita. La libreria è portabile su diverse piattaforme e può utilizzare interfacce di comunicazione differenti, tra cui MPI. È utilizzata da altre librerie tra cui scaLAPACK.

Linguaggio: C, FORTRAN

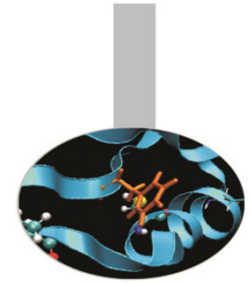
Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: Jack J. Dongarra and R. Clint Whaley

Distributori: NETLIB

Fonte: The University of Tennessee at Knoxville and Bell Laboratories

Librerie matematiche



LINPACK

Subroutine Fortran per la soluzione di sistemi di equazioni lineari e problemi ai minimi quadrati. Contiene subroutine specializzate per vari tipi di matrice, da quelle più generiche a quelle a banda e triangolari. Possono anche essere calcolati decomposizioni QR e singular value di matrici rettangolari per risolvere problemi ai minimi quadrati.

Linguaggio: FORTRAN

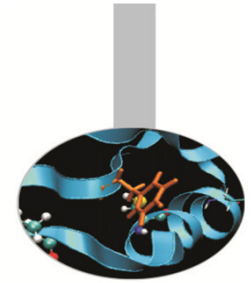
Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: Jack Dongarra, Jim Bunch, Cleve Moler and Pete Stewart

Distributori: NETLIB

Fonte: The University of Tennessee at Knoxville and Bell Laboratories

Librerie matematiche



LAPACK/CLAPACK

Subroutine FORTRAN / funzioni C per la soluzione di problemi di algebra lineare, tra cui sistemi di equazioni lineari, problemi di minimi quadrati, autovalori. Vorrebbe rappresentare un miglioramento prestazionale rispetto alle librerie LINPACK e EISPACK.

Linguaggio: FORTRAN, C

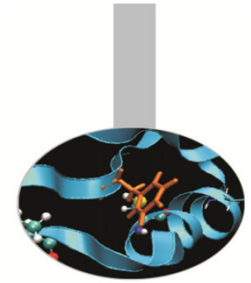
Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: Jack Dongarra, ORNL and Eric Grosse, Bell Labs

Distributori: NETLIB

Fonte: The University of Tennessee at Knoxville and Bell Laboratories

Librerie matematiche



PLASMA (Parallel Linear Algebra Software for Multi-core Architectures)

Funzioni FORTRAN e C per la soluzione di sistemi lineari disegnate per essere efficienti su processori multi-core. Ha funzionalità simili a LAPACK ma più limitate, ad esempio non contiene funzioni per autovalori e non supporta matrici a banda o sparse.

Linguaggio: FORTRAN, C

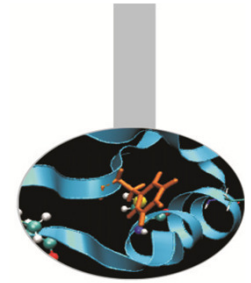
Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: Vari

Distributori: University of Tennessee

Fonte: Dep. Electrical Engineering and Computer Science, University of Tennessee at Knoxville

Librerie matematiche



LAPACK++

Funzioni C++ per la soluzione di sistemi lineari e problemi agli autovalori portabile con efficienza su diverse piattaforme di calcolo.

Include funzioni specializzate per diversi tipi di matrici: simmetriche, definite positive, triangolari, tridiagonali, a banda.

Linguaggio: C++

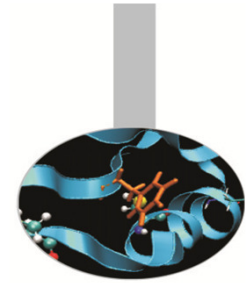
Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: Roldan Pozo, Mathematical and Computational Sciences Division, NIST

Distributori: NETLIB

Fonte: The University of Tennessee at Knoxville and Bell Laboratories

Librerie matematiche



SCALAPACK

Funzioni per la soluzione di problemi di algebra lineare portabile con efficienza su diverse piattaforme di calcolo parallelo a memoria distribuita. Contiene funzioni specializzate per matrici dense, tridiagonali, a banda.

Si basa sulle librerie di comunicazione MPI e PVM.

Linguaggi: FORTRAN, C

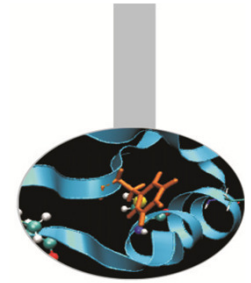
Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: vari

Distributori: NETLIB

Fonte: The University of Tennessee at Knoxville and Bell Laboratories

Librerie matematiche



EISPACK

Subroutine FORTRAN per il calcolo di autovalori e autovettori, con versioni specializzate per matrici di diversi tipi, reali e complesse, hermitiane, simmetriche, tridiagonali, ...

Linguaggio: FORTRAN

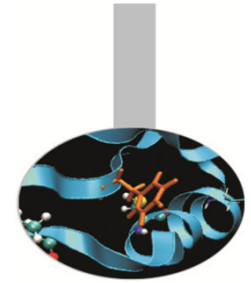
Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: B.T. Smith, J.M. Boyle, B.S. Garbow, Y. Ikebe, V.C. Klema, C.B. Moler, and J.J. Dongarra

Distributori: NETLIB

Fonte: The University of Tennessee at Knoxville and Bell Laboratories

Librerie matematiche



FFTPACK

Subroutine FORTRAN per trasformazioni fast Fourier di sequenze periodiche, reali e complesse, di diverso tipo.

Linguaggio: FORTRAN

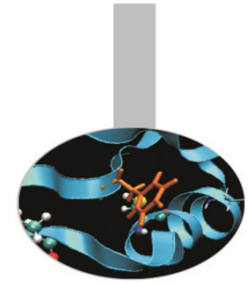
Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: Paul N. Swarztrauber, National Center for Atmospheric Research, Boulder, CO

Distributori: NETLIB

Fonte: The University of Tennessee at Knoxville and Bell Laboratories

Librerie matematiche



FFTW (Fastest Fourier Transform in the West)

Funzioni C per il calcolo di trasformate discrete di Fourier in una o più dimensioni, sia reali che complesse.

Linguaggio: C

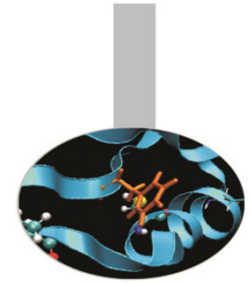
Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: Matteo Frigo and Steven G. Johnson.

Distributori: FFTW

Fonte: MIT

Librerie matematiche



ARPACK/PARPACK

Subroutine FORTRAN per la soluzione di problemi agli autovalori di grandi dimensioni. La versione parallela è un'estensione della libreria classica e usa le librerie BLACS e MPI.

Linguaggio: FORTRAN

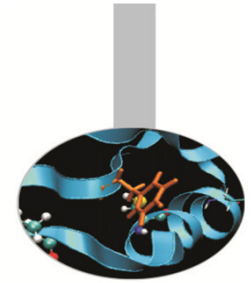
Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: Rich Lehoucq, Kristi Maschhoff, Danny Sorensen, Chao Yang

Distributori: Rice University

Fonte: Computational & Applied Mathematics, Rice University, Houston

Librerie matematiche



PDELIB

Subroutine FORTRAN per la soluzione di sistemi non lineari di equazioni differenziali in 1 o 2 dimensioni.

Linguaggio: FORTRAN

Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: J.M. Hyman, R.F. Sincovec, N. Madsen, and D.K. Melgaard

Distributori: National Institute of Standards and Technology

Fonte: National Institute of Standards and Technology (NIST), Gaithersburg, Maryland.



Librerie matematiche

SLATEC Common Mathematical Library

Subroutine FORTRAN per la soluzione di una grande varietà di problemi matematici. È stata sviluppata per fornire software matematico adatto a calcolatori paralleli a un consorzio di centri di ricerca sostenuti dal governo.

Include le librerie di base, BLAS, LINPACK, EISPACK, algoritmi di interpolazione, ottimizzazione, calcolo integrali, statistica e altro

Linguaggio: FORTRAN

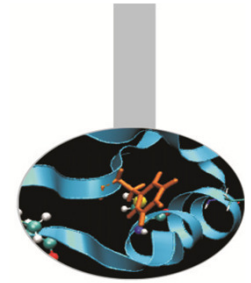
Disponibilità: pubblico dominio

Sviluppatori: vari

Distributori: NETLIB

Fonte: National Institute of Standards and Technology (NIST), Gaithersburg, Maryland.

Librerie matematiche



GSL (GNU Scientific Library)

Funzioni C/C++ per la soluzione di una grande varietà di problemi matematici: soluzione di sistemi lineari, FFT, statistica, numeri casuali, equazioni differenziali, integrali e altro.

Linguaggio: C/C++

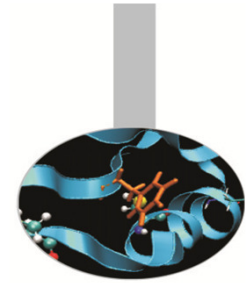
Disponibilità: GNU license

Sviluppatori: vari

Distributori: GNU

Fonte: GNU

Librerie matematiche



METIS

Funzioni e programmi C per generare, manipolare, partizionare grafi, griglie e matrici. È particolarmente adatta a partizionare griglie di calcolo per distribuirle a unità di calcolo parallelo.

Linguaggio: C

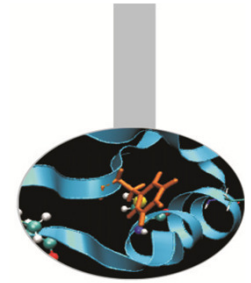
Disponibilità: libero per studio e ricerca

Sviluppatori: George Karypis Lab

Distributori: George Karypis Lab

Fonte: Department of Computer Science & Engineering, University of Minnesota

Librerie matematiche



PETSC

Strutture dati e funzioni per la soluzione su calcolatori paralleli di equazioni alle derivate parziali. Include solutori per equazioni lineari, non lineari e integratori ODE.

Utilizza MPI per realizzare il parallelismo e permette di sviluppare programmi che richiedono ingenti risorse computazionali.

Linguaggio: C, C++, Fortran, Python

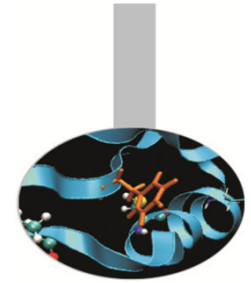
Disponibilità: open source

Sviluppatori: vari

Distributori: Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory

Fonte: Argonne National Laboratory

Librerie matematiche



UMFPACK

Funzioni C per la soluzione di sistemi lineari sparsi non-simmetrici $Ax = B$ utilizzando il metodo multi-frontale non simmetrico.

Linguaggio: C

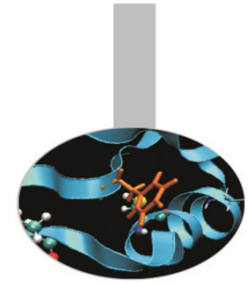
Disponibilità: GNU GPL license.

Sviluppatori: vari

Distributori: Computer & Information Science & Engineering, University of Florida

Fonte: University of Florida

Librerie matematiche



MKL

Libreria di funzioni altamente ottimizzate per applicazioni matematiche, scientifiche, ingegneristiche, finanziarie. Include BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, solutori sparsi, FFT e altro.

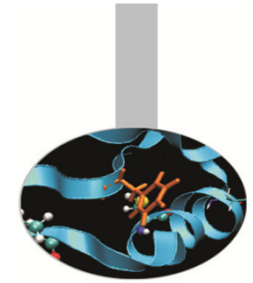
Linguaggio: Fortran, C, C++

Disponibilità: proprietaria

Sviluppatori: Intel

Distributori: Intel

Fonte: Intel



Librerie matematiche

Per utilizzare le librerie nei programmi è necessario innanzitutto che la sintassi di chiamata delle funzioni sia corretta. Inoltre in fase di generazione dell'eseguibile è indispensabile fornire tutte le indicazioni necessarie per l'individuazione della versione corretta della libreria.

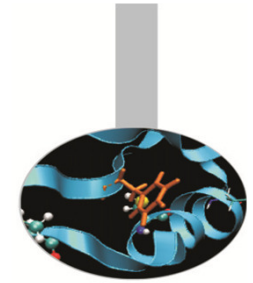
Spesso nel caso di librerie proprietarie esistono modalità di compilazione e linking specifiche. Di seguito vengono illustrate indicazioni esemplificative per linkare alcune librerie matematiche

BLAS/CBLAS

Intel: `ifort <programma> -L$MKLROOT/lib/intel64 -lguide -lpthread -lmkl`

PGI: `pgf77 <programma> -L$PGI_ROOT/lib -lacml`

GNU: `gfortran <programma> -L$BLAS_ROOT/lib -lblas`



Librerie matematiche

Indicazioni esemplificative per linkare alcune librerie matematiche

LINPACK

Intel: `ifort <programma> -L$MKLROOT/lib/intel64 -lguide -lpthread -lmkl`

PGI: `pgf77 <programma> -llapack -lblas`

GNU: `gfortran <programma> -L$LIB_ROOT/lib -llinpack`

ScaLAPACK

Intel: `mpif77 <programma> -L$MKLROOT/lib/intel64 -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_openmpi -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core -liomp5 -lpthread`

PGI: `pgf77 <programma> -Mmpi=mpich -Mscalapack`

GNU: `gfortran -L$LIB_ROOT/lib -lscalapack`