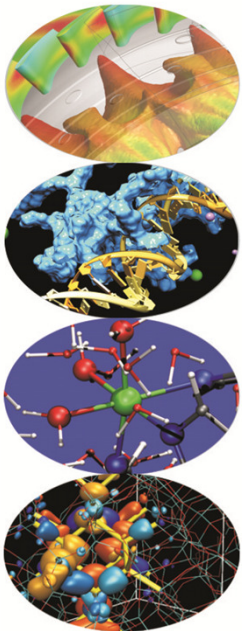
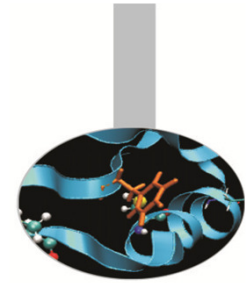


# Librerie matematiche e scientifiche

M.Cremonesi, F.Affinito, *CINECA*

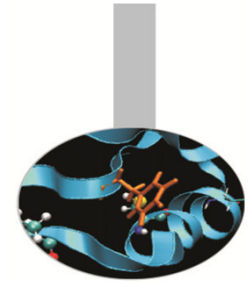
19 febbraio 2014





# Librerie matematiche

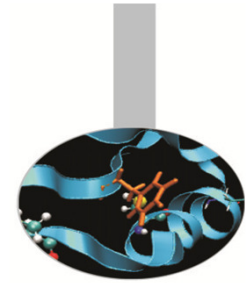
Le librerie sono insiemi di funzioni che implementano una varietà di algoritmi, spesso numerici. Queste possono includere operazioni aritmetiche di basso livello come il prodotto scalare tra vettori o sequenze di numeri casuali, ma anche algoritmi più complicati come le trasformate di fourier o problemi di minimizzazione.



# Librerie matematiche

Perché usare librerie nei programmi:

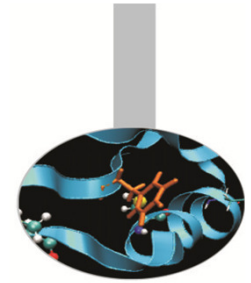
- Migliorare la modularità
- Standardizzazione
- Portabilità
- Efficienza
- Pronte all'uso



# Librerie matematiche

Svantaggi nell'uso delle librerie:

- I dettagli sono nascosti
- Spesso non si sa cosa si usa
- Troppa fiducia nell'implementazione



# Librerie matematiche

## BLAS/CBLAS

La *Basic Linear Algebra Subprograms* è tra le prime librerie scritte (1979), in origine 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.

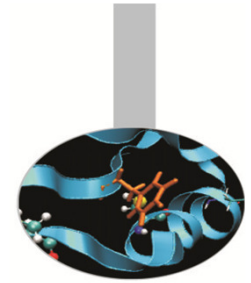
Language: FORTRAN, C

Availability: public domain

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

Distributors: NETLIB

Ref.: The University of Tennessee at Knoxville and Bell Laboratories



# Librerie matematiche

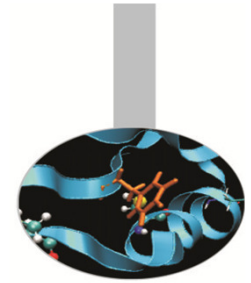
## BLAS/CBLAS

BLAS liv. 1 – subroutine Fortran per il calcolo di operazioni di base scalare-vettore. Sono la conclusione di un progetto terminato nel 1977.

BLAS liv. 2 – operazioni vettore-matrice. Scritte tra il 1984 e 1986.

BLAS liv. 3 – subroutine Fortran per operazioni matrice-matrice, disponibili dal 1988.

Le BLAS degli ultimi due livelli sono le più adatte a sfruttare le architetture dei computer moderni, perciò sono ampiamente usate, per esempio dalla libreria LAPACK.



# Librerie matematiche

## BLAS/CBLAS

Le suroutine BLAS si applicano a dati reali e complessi, in semplice o doppia precisione.

Operazioni scalare-vettore (  $O(n)$  )

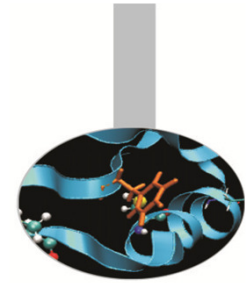
\*SWAP – scambio vettori

\*COPY – copia vettori

\*SCAL – cambio fattore di scala

\*NRM2 – norma L2

\*AXPY – somma:  $\underline{Y} + A * \underline{X}$



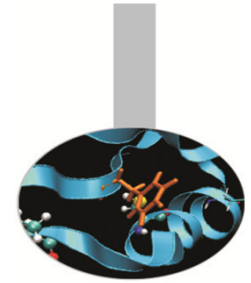
# Librerie matematiche

## BLAS/CBLAS

Operazioni vettore-matrice (  $O(n^2)$  )

- \* *GEMV* – prodotto vettore – matrice generica
- \* *HEMV* – prodotto vettore – matrice hermitiana
- \* *SYMV* – prodotto vettore – matrice simmetrica





# Librerie matematiche

## BLAS/CBLAS

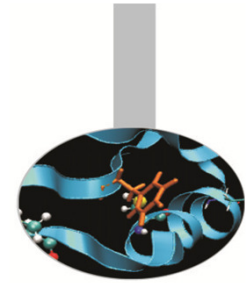
Operazioni matrice-matrice (  $O(n^3)$  )

- \* *GEMM* – prodotto matrice – matrice generica
- \* *HEMM* – prodotto matrice – matrice hermitiana
- \* *SYMM* – prodotto matrice – matrice simmetrica

L'asterisco qui e nelle slide precedenti sta per:

**S** – precisione semplice, **D** – precisione doppia,

**C** – complessi, **Z** – complessi precisione doppia



# Librerie matematiche

## BLACS

La *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.

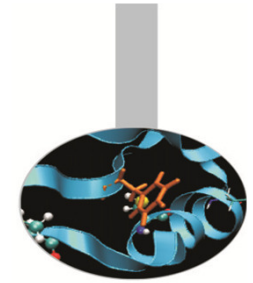
Language: C, FORTRAN

Availability: public domain

Developers: Jack J. Dongarra and R. Clint Whaley

Distributors: NETLIB

Ref.: 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.

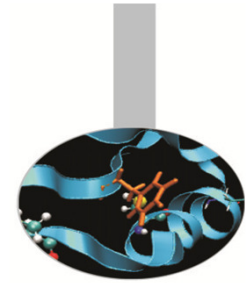
Language: FORTRAN

Availability: public domain

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

Distributors: NETLIB

Ref.: The University of Tennessee at Knoxville and Bell Laboratories



# Librerie matematiche

## LAPACK/LAPACKE

Subroutine FORTRAN e 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.

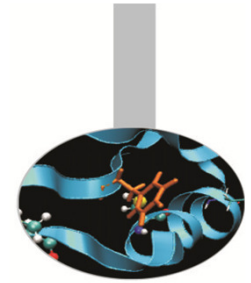
Language: FORTRAN, C

Availability: public domain

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

Distributors: NETLIB

Ref.: The University of Tennessee at Knoxville and Bell Laboratories



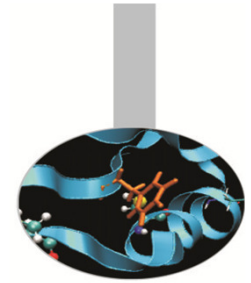
# Librerie matematiche

## LAPACK/LAPACKE

Le librerie LAPACK sfruttano per quanto possibile le librerie BLAS, preferibilmente del livello 3, per ottenere le migliori prestazioni possibili.

Per questo sulla macchina dovrebbero essere installate le librerie BLAS in versione ottimizzata. In alternativa, ATLAS può essere usato per installare una versione efficiente delle BLAS.

La versione di pubblico dominio delle BLAS non dovrebbe essere utilizzata per evidenti ragioni di ottimizzazione.



# Librerie matematiche

## ATLAS

Il tool Automatically Tuned Linear Algebra Software può essere utile per installare versioni ottimizzate delle librerie di base più diffuse. Al momento contiene le librerie BLAS e una parte delle LAPACK

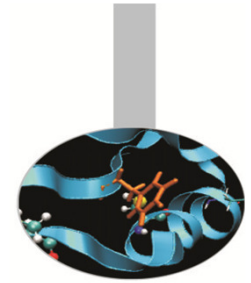
Language: FORTRAN, C

Availability: public domain / open source

Developers: R. Clint Whaley, Antoine Petit, Jack Dongarra

Distributors: [sourceforge.net](http://sourceforge.net)

Ref.: <http://math-atlas.sourceforge.net/>



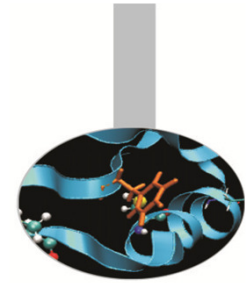
# Librerie matematiche

## GotoBLAS

Di importanza storica, queste librerie rappresentano l'impresa di Kazushige Gotō, un ricercatore del Texas Advanced Computing Center (University of Texas at Austin), che ha ottimizzato manualmente in assembler le subroutine BLAS per diversi supercomputer.

Il lavoro prosegue ancora con i progetti GotoBLAS2 e OpenBLAS.

Ref.: <http://www.tacc.utexas.edu/tacc-projects/gotoblas2>  
<http://xianyi.github.com/OpenBLAS/>



# 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.

Language: FORTRAN, C

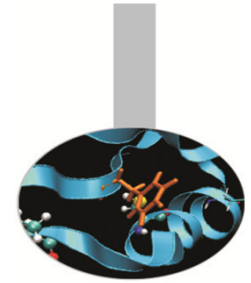
Availability: public domain

Developers: Vari

Distributors: University of Tennessee

Ref.: 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.

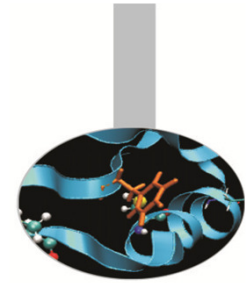
Language: C++

Availability: public domain

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

Distributors: NETLIB

Ref.: 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.

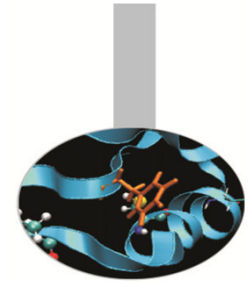
Linguaggi: FORTRAN, C

Availability: public domain

Developers: vari

Distributors: NETLIB

Ref.: The University of Tennessee at Knoxville and Bell Laboratories



# Librerie matematiche

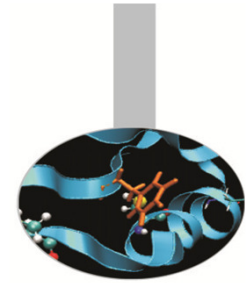
## SCALAPACK

Le ScaLAPACK sono (o dovrebbero essere):

- efficienti
- scalabili (al crescere del numero di processi e di dimensione del problema)
- affidabili (I risultati non dipendono dal numero di processi)
- portabili (in funzionalità e efficienza)

Le ScaLAPACK sono scritte in Fortran (con un poco di C).

Funzionalità e efficienza dell'implementazione sono basate sulle BLAS, LAPACK e BLACS.



# Librerie matematiche

## AZTEC

Libreria parallela di solutori iterativi con preconditionatori. Lo scopo è facilitare la manipolazione di strutture dati distribuite. Contiene tool per la conversione dei dati e interrogazione di strutture dati.

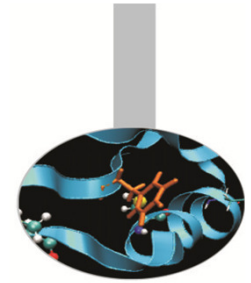
Language: FORTRAN, C

Availability: free

Developers: Ray S. Tuminaro, John N. Shadid, Mike Heroux

Distributors: Sandia National Laboratories

Ref.: Sandia National 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.

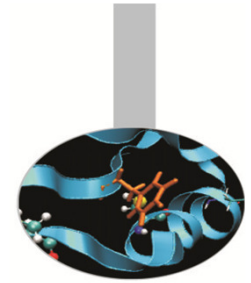
Language: FORTRAN

Availability: public domain

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

Distributors: NETLIB

Ref.: 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.

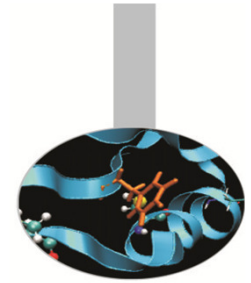
Language: FORTRAN

Availability: public domain

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

Distributors: NETLIB

Ref.: 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.

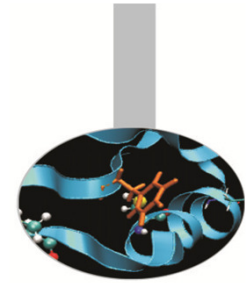
Language: C

Availability: public domain

Developers: Matteo Frigo and Steven G. Johnson.

Distributors: FFTW

Ref.: MIT



# Librerie matematiche

## ARPACK/PARPACK

(Arnoldi package)

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.

Language: FORTRAN

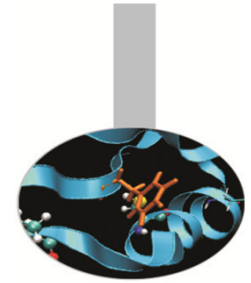
Availability: public domain

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

Distributors: Rice University

Ref.: Computational & Applied Mathematics, Rice University, Houston





# 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.

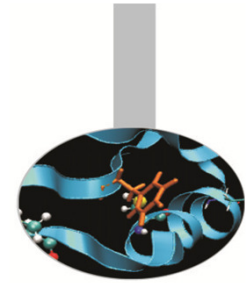
Language: FORTRAN

Availability: public domain

Developers: vari

Distributors: NETLIB

Ref.: 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.

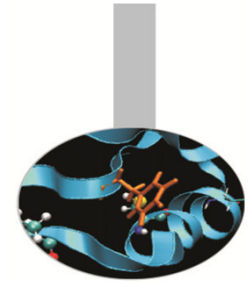
Language: C/C++

Availability: GNU license

Developers: vari

Distributors: GNU

Ref.: GNU



# Librerie matematiche

## LIS (Library of Iterative Solvers)

Libreria di algoritmi paralleli per la soluzione di sistemi lineari e autovalori con metodi iterativi.

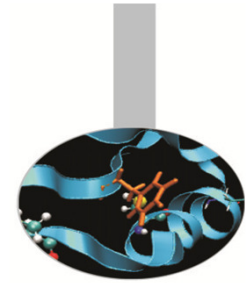
Language: C/Fortran

Availability: New BSD license

Developers: vari

Distributors: Japan Science and Technology Agency

Ref.: Scalable Software Infrastructure for Scientific Computing



# 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.

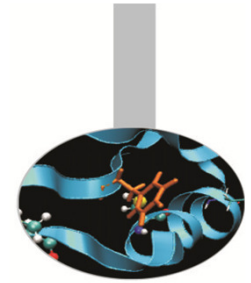
Language: C

Availability: libero per studio e ricerca

Developers: George Karypis Lab

Distributors: George Karypis Lab

Ref.: Department of Computer Science & Engineering, University of Minnesota



# Librerie matematiche

## ParMETIS

Libreria basata su MPI che estende le funzionalità di METIS e include funzioni adatte al calcolo parallelo di raffinamenti adattivi di mesh.

Language: C

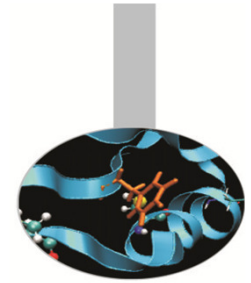
Availability: free for academy and research

Developers: George Karypis Lab

Distributors: George Karypis Lab

Ref.: Department of Computer Science & Engineering, University of Minnesota

<http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/views/metis>



# 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.

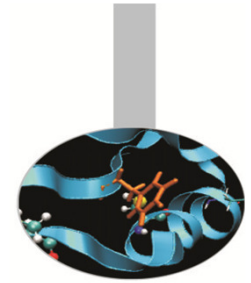
Language: C, C++, Fortran, Python

Availability: open source

Developers: vari

Distributors: Mathematics and Computer Science Division, Argonne National Laboratory

Ref.: Argonne National Laboratory



# Librerie matematiche

## UMFPACK

Funzioni C per la soluzione di sistemi lineari sparsi non-simmetrici utilizzando il metodo multi-frontale.

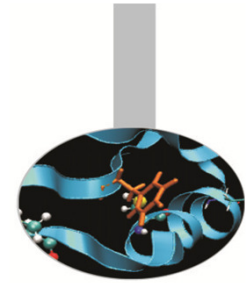
Language: C

Availability: GNU GPL license.

Developers: vari

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

Ref.: University of Florida



# Librerie matematiche

## HDF5

È un sistema di librerie e tool che permettono di gestire, manipolare, visualizzare e analizzare insiemi di dati anche molto complessi e grandi.

Comprende modelli rappresentativi che possono implementare una gran varietà di metadati e un formato file portabile e senza limitazioni di dimensioni.

Language: Fortran/C/C++/Java

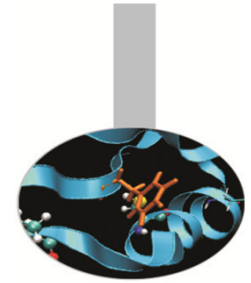
Availability: open source.

Developers: NCSA at the University of Illinois

Distributors: HDF Group

Ref.: <http://www.hdfgroup.org>





# Librerie matematiche

## MKL

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

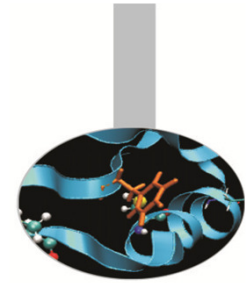
Language: Fortran, C, C++

Availability: proprietaria

Developers: Intel

Distributors: Intel

Ref.: Intel



# Librerie matematiche

## ACML

(AMD Core Math Library)

Libreria di funzioni altamente ottimizzate per processori AMD. Include tra l'altro BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, FFT.

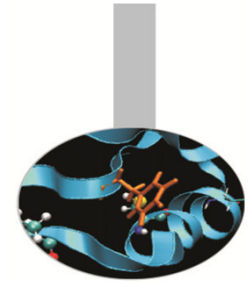
Language: Fortran, C, C++

Availability: proprietaria

Developers: AMD

Distributors: AMD

Ref.: AMD



# Librerie matematiche

## ESSL/PESSL

(Engineering and Scientific Subroutine library)

Libreria di funzioni altamente ottimizzate per applicazioni matematiche, scientifiche, ingegneristiche. Include BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, solutori sparsi, FFT e altro. La versione parallela utilizza MPI.

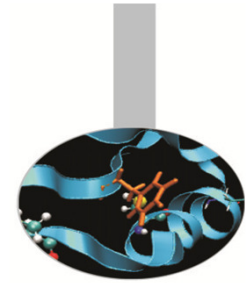
Language: Fortran, C, C++

Availability: proprietaria

Developers: IBM

Distributors: IBM

Ref.: IBM



# Librerie matematiche

## Nomi non risolti (name mangling)

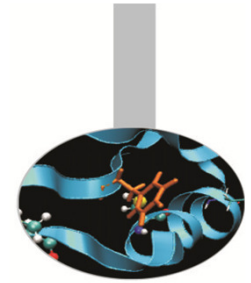
In alcuni ambienti di sviluppo i compilatori, usualmente quelli Fortran, appendono uno o più underscore ai nomi delle subroutine. Se in fase di link compaiono dei riferimenti non risolti ma si è sicuri della correttezza delle librerie linkate, si possono controllare i nomi con i comandi

`nm <libreria>`

`strings <libreria>`

In Fortran	In C
<code>CALL DROTG(...)</code>	<code>drotg_(...)</code>

Apposite opzioni permettono di aggiungere o togliere gli underscore



# Librerie matematiche

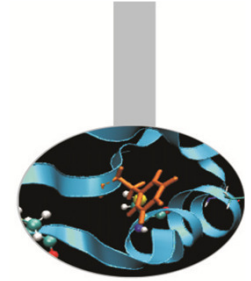
## Librerie statiche e dinamiche

**Statica:** il codice linkato diventa parte dell'eseguibile (*libreria.a*)

**Dinamica:** il codice di libreria viene caricato durante l'esecuzione (*libreria.so*)

Linkare una libreria staticamente permette di avere prestazioni migliori e di portare l'eseguibile su diverse macchine.

Viceversa un'eseguibile linkato dinamicamente è più snello.

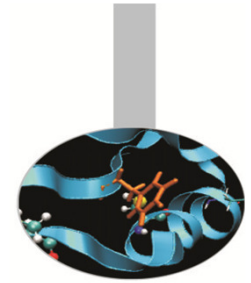


# Librerie matematiche

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



# Librerie matematiche

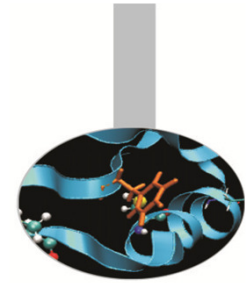
Indicazioni esemplificative Linux per linkare alcune librerie matematiche

## BLAS/CBLAS

```
Intel: ifort <programma> -L$MKLR00T/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 Linux per linkare alcune librerie matematiche

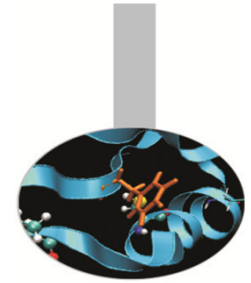
## LINPACK

```
Intel: ifort <programma> -L$MKLR00T/lib/intel64 \  
      -lguide -lpthread -lmkl
```

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

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





# Librerie matematiche

Indicazioni esemplificative Linux per linkare alcune librerie matematiche

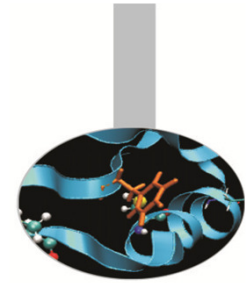
## ScaLAPACK

```
Intel: mpif77 <programma> -L$MKLR00T/lib/intel64 \  
    -lmkl_scalapack_lp64 -lmkl_blacs_openmpi \  
    -lmkl_intel_lp64 -lmkl_intel_thread -lmkl_core \  
    -liomp5 -lpthread
```

<http://software.intel.com/en-us/articles/intel-mkl-link-line-advisor/>

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

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



# Librerie matematiche

Indicazioni esemplificative per linkare le librerie su FERMI:

## ESSL

```
module load bgq-xl
```

```
module load essl
```

```
bgxlf90_r -qarch=qp -qtune=qp <programma> \
```

```
    -L$ESSL_LIB -lesslb
```

```
runjob --np <mpi-procs> --ranks-per-node 1 \
```

```
    --envs OMP_NUM_THREADS=<threads> \
```

```
    --exe  MatMult-f-xl
```