Uso de Abstrações de Alto Nível em Bibliotecas Numéricas Paralelas*

Claudio Schepke, Nicolas Maillard

[1]Instituto de Informática – Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)
Caixa Postal 15.064 – 91.501-970 – Porto Alegre – RS – Brazil

{cschepke,nicolas}@inf.ufrgs.br

1. Introdução

O uso de bibliotecas de programação numérica têm sido recorrente para o desenvolvimento de aplicações computacionais. A biblioteca Linpack, desenvolvida no final da década de 1970, foi um dos primeiros esforços no sentido de padronizar o acesso a rotinas FORTRAN que envolvessem operações aritméticas entre escalares, vetores e matrizes, possibilitando, ainda, a execução eficiente em supercomputadores da época. Desde então, inúmeras outras bibliotecas (Eispack, Lapack, ScaLapack, ...) foram implementadas com o intuito de oferecer desempenho e reutilização de código. Atualmente, diversas bibliotecas possibilitam, também, o uso de paralelismo implícito para sistemas com memória compartilhada e distribuída, além de oferecer altos níveis de abstração de código.

Neste trabalho, é feita uma revisão de literatura, avaliando os recursos de algumas bibliotecas de programação numérica atuais. Com isso, além de apresentar o estado da arte da área, o objetivo do trabalho é determinar quais os níveis de abstração que as bibliotecas numéricas proporcionam ao programador. Nas próximas seções são relacionadas as características de algumas bibliotecas de programação e uma síntese dos resultados.

2. Bibliotecas de Programação Numérica

Neste trabalho foram avaliadas três bibliotecas:

- **Math Kernel Library** (MKL) implementa rotinas otimizadas para a computação científica, engenharias e aplicações financeiras, voltadas para as arquiteturas Intel (Itanium 2, Xeon, Pentium 4 e Multicore) [Intel 2008]. As rotinas desenvolvidas em Fortran incluem operações com vetores e matrizes, Transformada Rápida de Fourier e funções matemáticas vetoriais. A performance de MKL é obtida através de otimizações realizadas explorando as capacidades do processadores e das características do sistema em si. O desenvolvimento de aplicações pode ser feito em C ou Fortran explorando arquiteturas SMP.
- **Engineering and Scientific Subroutine Library** (ESSL) é uma biblioteca da IBM para aplicações científicas e de engenharia que executam em arquiteturas IBM POWER e Blade Center [Agarwal et al. 1989]. A biblioteca possui diversos recursos para a álgebra linear, além de funções de busca e ordenação, interpolação, geração de números aleatórios, entre outros, tanto para as versão seqüencial quanto paralela da biblioteca. Além do paralelismo em SMP, ESSL oferece recursos para a programação em *clusters*, utilizando como mecanismo de comunicação interprocessosMPI ou LAPI (padrão proprietário da IBM). A programação pode ser feita em Fortran, C e C++.

*Apoio: Capes

- **Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation** (PETSc) é uma biblioteca que prove um conjunto de estruturas de dados e rotinas para a implementação de soluções numéricas de equações diferenciais parciais (EDP) em Fortran, C e C++ [Balay et al. 2006]. Estes recursos permitem a programação de aplicações tanto para a execução serial quanto paralela (utilizando MPI para a comunicação interprocessos) de códigos em larga escala. A biblioteca é organizada hierarquicamente, possibilitando o usuário escolher o nível de abstração mais apropriado para um determinado problema. Além disso, PETSc oferece muita flexibilidade em termos de técnicas de programação através do uso de orientação a objetos.

3. Avaliação, Proposta e Conclusão

O encapsulamento dos diversos níveis de abstração necessários para o desenvolvimento de uma aplicação são essenciais para simplificar o processo de programação. Ao avaliar as bibliotecas numéricas vistas neste trabalho observou-se que existem diversos recursos agregados quando comparadas às primeiras bibliotecas que foram desenvolvidas. Bibliotecas como PETSc, por exemplo, oferecem diversas camadas de abstração, que incluem, nos níveis mais baixos, diversas implementações de bibliotecas mais antigas.

No entanto, para se programar uma aplicação são necessárias diversas outras etapas, que incluem, além da resolução numérica, conhecimentos específicos sobre modelagem, equações matemáticas e programação paralela. Observou-se que atualmente nenhuma biblioteca numérica oferece suporte completo para os processos de modelagem e discretização em conjunto com as etapas de resolução numérica, sendo esta feita em separado por diversas ferramentas.

Neste sentido, um aspecto que poderia simplificar o desenvolvimento de uma aplicação é fazer uso de uma linguagem de especificação. Em uma linguagem de especificação o código fonte do programa poderia ser gerado, de maneira que não houvesse uma preocupação com o funcionamento e controle do código em si, sendo necessário apenas descrever alguns parâmetros relacionados a execução.

Através desta abordagem o código poderia ser gerado a partir de um arquivo de configuração, o qual conteria informações a respeito do domínio a ser simulado, como as equações matemáticas que representam o problema, o domínio, a forma de geração das malhas, quais os métodos de precondicionamento e numérico que devem ser utilizados, bem como informações sobre o ambiente e forma de execução paralela. Tal proposta resume-se, portanto, em oferecer abstrações de alto nível em bibliotecas numéricas paralelas.

Referências

Agarwal, R. C., Gustavson, F. G., McComb, J., and Schmidt, S. (1989). Technical note—engineering and scientific subroutine library release 3 for IBM ES/3090 vector multiprocessors. *IBM Syst. J.*, 28(2):345–350.

Balay, S., Buschelman, K., Eijkhout, V., Gropp, W. D., Kaushik, D., Knepley, M. G., McInnes, L. C., Smith, B. F., and Zhang, H. (2006). Petsc users manual. ANL-95/11 Revision 2.3.2, Argonne National Laboratory, September.

Intel (2008). Intel Math Kernel Library for the Linux Operating System. Disponível em: <http://softwarecommunity.intel.com/isn/downloads/softwareproducts/pdfs/347460.pdf>. Acesso em ago. 2008.