

Библиотека программ JINRLIB.  
Использование библиотек фортранных программ  
с современными языками программирования (Python).

**Попкова Л.В., Сапожникова Т.Ф.**

*Лаборатория информационных технологий им. М.Г.Мещерякова  
Объединенный институт ядерных исследований*



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

[switch to english](#)



ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ  
БИБЛИОТЕКИ ПРОГРАММ



### Библиотека программ JINRLIB:

- О библиотеке JINRLIB
- Новые программы, новые версии
- Каталог пакетов прикладных программ JINRLIB
- Программы с использованием технологии MPI
- Список авторов прикладных программ

### Библиотека программ CPC:

- О библиотеке CPC
- Каталог программ

### Библиотека программ CERNLIB:

- О библиотеке CERNLIB

### Наши публикации

### Новые программы, новые версии программ библиотеки JINRLIB

|                            |                                                                                                                                                                             |
|----------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <a href="#">FITTER WEB</a> | Программа для фитирования экспериментальных данных, полученных на спектрометре малоуглового рассеяния нейтронов, реализованная в виде Web-приложения<br>09.11.2022          |
| <a href="#">INQSIM</a>     | Программа преобразования полностью симметричных квадратурных правил типа PI на 2-, ..., 6-симплексах из компактного вида в развернутый<br>05.05.2022                        |
| <a href="#">NXV4</a>       | Флеш-алгоритмы в полиморфном C++<br>(проект по созданию библиотеки научного ПО открытого доступа)<br>03.05.2022                                                             |
| <a href="#">RK4-MPI</a>    | Параллельная реализация численного решения задачи Коши методом Рунге-Кутты 4 порядка с использованием технологии MPI<br>23.03.2021                                          |
| <a href="#">SIR-model</a>  | Простейшая модель эпидемического процесса<br>20.05.2020                                                                                                                     |
| <a href="#">Split</a>      | Параллельная реализация численного решения системы алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей с использованием алгоритма разбиений и технологии MPI<br>27.04.2020 |
| <a href="#">EORP 2020</a>  | Программа расчёта замкнутых равновесных орбит<br>06.04.2020                                                                                                                 |
| <a href="#">DFM-POTM</a>   | Параллельная реализация расчета ядро-ядерного потенциала в рамках модели двойного фолдинга<br>22.04.2019                                                                    |
| <a href="#">PSD2SAS</a>    | Программа для преобразования данных позиционно-чувствительного детектора спектрометра малоуглового рассеяния нейтронов в случае изотропно рассеивающего образца             |

# Состав библиотеки JINRLIB



**JINRLIB**

➤ Программы с использованием технологии MPI

## **Математические программы JINRLIB -**

программы на языке Фортран из популярной в прошлом библиотеки программ DUBNA, а также из библиотек MATHLIB и KERNLIB - ядра программного обеспечения CERNLIB.

## **Пакеты прикладных программ - ППП (~80):**

- Теоретическая физика низких энергий
- Физика тяжелых ионов
- Ускорители
- Автоматизация обработки экспериментальных данных
- Вычислительная математика и техника

# Математические программы JINRLIB

---



JINRLIB - библиотека программ, предназначенных для решения широкого круга математических и физических задач. Основу библиотеки составляют программы на языке Фортран из библиотек **ДУБНА** и **CERNLIB**.

Каждая программа идентифицируется уникальным **индексом** и **именем**. Для индексирования программ, включаемых в библиотеки объектных модулей, используется классификация, принятая в свое время в библиотеке ДУБНА.

C - Полиномы и специальные функции

D - Операции над функциями и решение дифференциальных и интегральных уравнений

E - Интерполяция и аппроксимация

F - Действия над матрицами, векторами, решение систем линейных уравнений

V - Генераторы случайных чисел, комбинаторика

Z - Сервисные и вспомогательные программы

Программы объединяются в библиотеки **объектных модулей**. Все программы работают с 64-разрядным представлением чисел с плавающей запятой.

Библиотеки создаются для доступных нам фортранных компиляторов для ОС Linux и Windows.

Размещение – на компьютерах ЦИВК и на сайте «Библиотеки программ».

# Пакеты Прикладных Программ (ППП)

---



Пополнение библиотеки происходит в виде автономных программ и программных пакетов, создаваемых в основном сотрудниками ЛИТ ОИЯИ и их коллаборантами.

Для идентификации программ используется имя программы и классификация, принятая в издательском отделе ОИЯИ.

В настоящее время насчитывается около 80 программных пакетов из разделов:

- Теоретическая физика низких энергий (3)
- Физика тяжелых ионов (2)
- Ускорители (2)
- Автоматизация обработки экспериментальных данных (19)
- Вычислительная математика и техника (50)

# Поддержка программирования в среде MPI

---



В последнее время происходит бурное развитие технологий программирования параллельных вычислений, в частности, MPI. Эта тенденция нашла свое отражение и в библиотеке JINRLIB.

- Стратегия распараллеливания MPI программ:
- Библиотечная программа, подготовленная для работы в среде MPI, должна успешно работать при любом количестве NP параллельных процессов, в частности, и при  $NP=1$ .
- Возникает единый исходный текст библиотечной программы, пригодный к эксплуатации как на последовательных вычислительных системах, так и на кластерах, состоящих из большого числа процессоров.
- Необходимым условием для обеспечения такой унификации является наличие программ-заглушек, что позволяет использовать библиотечные программы и без MPI.

Эта идея, которая при работе на кластерах использует "настоящий" MPI, а при работе в однопроцессорной конфигурации - его заглушки, была успешно реализована при распараллеливании ряда программ библиотеки.

# Программы с использованием технологии MPI

---



**MINUIT** - параллельная версия программы минимизации функций многих переменных. На примере MINUIT обсуждаются проблемы распараллеливания больших вычислительных программ, разбираются типовые этапы работы при распараллеливании.

**PFUMILI** - модификация известной программы FUMILI, допускающая ее эффективную эксплуатацию на современных вычислительных кластерах, объединяющих сотни однотипных процессоров.

**CLEBSCH2** - программа для вычисления простейшей формы коэффициентов Клебша-Гордана  $(k,n)=k!(n-k)!/n$ . Программа свободна от типичных при вычислении факториалов "в лоб" случаев переполнения при умножении.

**PRIMUS** - параллельная версия программы Л.Александрова, реализующая классический алгоритм решета Эратосфена для генерации простых чисел.

**DFM-POTM / DFM-POTM\_MPI** - параллельная реализация расчета ядро-ядерного потенциала в рамках модели двойного фолдинга. Параллельная версия, разработанная с использованием технологии MPI, обеспечивает значительное ускорение по сравнению последовательной версией.

**RK4-MPI** - параллельная реализация численного решения задачи Коши методом Рунге-Кутты 4 порядка с использованием технологии MPI.

**Split** - параллельная реализация численного решения системы алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей с использованием алгоритма разбиений и технологии MPI.

# Список авторов программ библиотеки



**ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ**[switch to english](#)

**ЛАБОРАТОРИЯ ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ**  
**БИБЛИОТЕКИ ПРОГРАММ**

**Библиотека программ JINRLIB:**

- [О библиотеке JINRLIB](#)
- [Новые программы, новые версии](#)
- [Каталог пакетов прикладных программ JINRLIB](#)
- [Программы с использованием технологии MPI](#)
- [Список авторов прикладных программ](#)

**Библиотека программ CPC:**

- [О библиотеке CPC](#)
- [Каталог программ](#)

**Библиотека программ CERNLIB:**

- [О библиотеке CERNLIB](#)

**Наши публикации**  
**Полезные ссылки**

**Список авторов программ библиотеки JINRLIB**

Число прикладных программ: 80, количество авторов прикладных программ : 157

| Автор            | Название              | Описание программы                                                                                                                         |
|------------------|-----------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| James F.         | MINUIT                | MINUIT- параллельная версия программы MINUIT - минимизации функции многих переменных                                                       |
| Абрашкевич А.Г.  | ASYMPT                | ASYMPT- программа вычисления асимптотик гиперсферических потенциальных кривых и адиабатических потенциалов                                 |
|                  | KANTBP                | KANTBP- пакет программ для решения методом Канторовича (адиабатическим методом) двумерных краевых задач дискретного и непрерывного спектра |
| Акишин П.Г.      | 3DFEMMesh             | 3DFEMMesh - программа для автоматической генерации трехмерных сеток                                                                        |
| Александров Е.И. | H-Utils               | H-Utils - пакет программ для работы на вычислительном кластере с гибридной архитектурой                                                    |
| Алтайский М.В.   | WASP                  | Программа для анализа угловых распределений вторичных частиц с помощью вейвлет-преобразования                                              |
| Амирханов И.В.   | EORP 2020             | EORP 2020 - программа расчёта замкнутых равновесных орбит                                                                                  |
|                  | SNIDE                 | SNIDE- пакет программ для решения задач на собственные значения для интегро-дифференциального уравнения на основе HAMN                     |
| Афанасьев О.А.   | BioDosimetry          | BioDosimetry- программа для оценки дозы облучения                                                                                          |
| Басиос Б.        | GITA                  | GITA- программа на языке REDUCE для нормализации полиномиальных гамильтонианов                                                             |
| Батгэрэл Б.      | NINE                  | NINE- программа численного решения граничных задач для нелинейных дифференциальных уравнений методом HAMN                                  |
| Башахин М.В.     | DFM-POTM/DFM-POTM_MPI | DFM-POTM/DFM-POTM_MPI - параллельная реализация расчета ядро-ядерного потенциала в рамках модели двойного фолдинга                         |
| Беззаботнов В.Ю. | SAS-1x                | Программа для первичной обработки спектров малоуглового рассеяния                                                                          |
| Бззуни С.А.      | LATTICE               | LATTICE- программа для расчета параметров мишеней с гетерогенной (решеточной) структурой                                                   |
| Богданова Н.Б.   | OPeM2                 | OPeM2- метод разложения по ортонормированным полиномам от двух переменных и его реализация в виде пакета программ OPeM2                    |
| Бояджиев Т.      | NLEVSD                | NLEVSD- решение нелинейной задачи на собственные значения для системы дифференциальных уравнений первого порядка                           |
| Васин Р.Н.       | SKAT2MAUD             | Программа подготовки данных с нейтронных дифрактометров SKAT и ФСД                                                                         |
| Виницкий С.И.    | INQSIM                | Программа преобразования полностью симметричных квадратурных правил типа PI на 2-,..., 6-симплексах из компактного вида в развернутый      |
|                  | KANTBP 4M             | KANTBP 4M - программа решения краевых задач для самосопряженной системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка            |

# Статистика скачиваний программ библиотеки

---



## Число скачиваний файлов библиотеки JINRLIB

| Название программы    | Количество скачиваний |
|-----------------------|-----------------------|
| 3DFEMMesh             | 223                   |
| BIBasis               | 377                   |
| BiCubic               | 328                   |
| BioDosimetry          | 1204                  |
| Clebsch2              | 570                   |
| COBRAM                | 413                   |
| CONTIN-NLIN           | 780                   |
| CTLOOK                | 349                   |
| DFM-POTM/DFM-POTM_MPI | 89                    |
| DISCAPESM             | 1900                  |
| DOSE                  | 451                   |
| F2F-technology        | 771                   |
| FUMILIM               | 2036                  |
| FUNINT                | 405                   |
| GaussDLL              | 389                   |
| GridCom               | 664                   |
| Hea                   | 1160                  |
| IntroMPI              | 752                   |



# Использование библиотек фортранных программ, с современными языками программирования (Python)

**Python** – интерпретируемый язык, и для многих типов вычислительных задач часто невозможно избежать дополнительного замедления и увеличения потребления памяти. Поэтому одной из наиболее распространенных потребностей является вызов из кода Python быстрой процедуры машинного кода (например, скомпилированной с использованием C / C ++ или Fortran).

Существует два основных подхода к вызову скомпилированного кода: написание модуля расширения, который затем импортируется в Python с помощью команды `import`, или вызов подпрограммы общей библиотеки непосредственно из Python с использованием модуля `ctypes` (`ctypes` - Python библиотека внешних функций, позволяет вызывать функции из DLL или разделяемых библиотек).

## Проблемы:

- при передаче большого числа параметров ( $>2$ );
- передача имени функции как параметр ("функция пользователя");
- и др...

**Заключение.** Необходимо существенные изменения текста программы, в первую очередь в организации передачи параметров, что может быть имеет смысл для отдельно взятой программы, но не для библиотеки программ. Создание общей динамической библиотеки из фортранных программ для вызова ее из Python'a вряд ли оправдано.

## Парадоксальный рост популярности Python в научных вычислениях

<https://habr.com/ru/companies/piter/articles/665102/>

Благодарю за внимание!

---

