



ALN - Bibliotecas

In. Co.

Facultad de Ingeniería

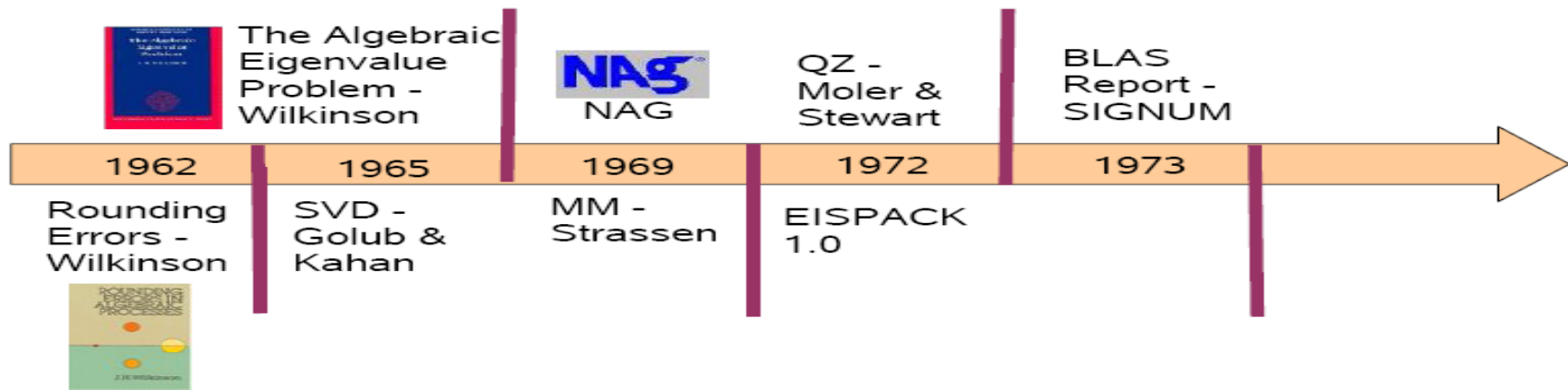
Universidad de la República



Agenda

- Historia
- BLAS
- LAPACK
- ScaLAPACK

Historia

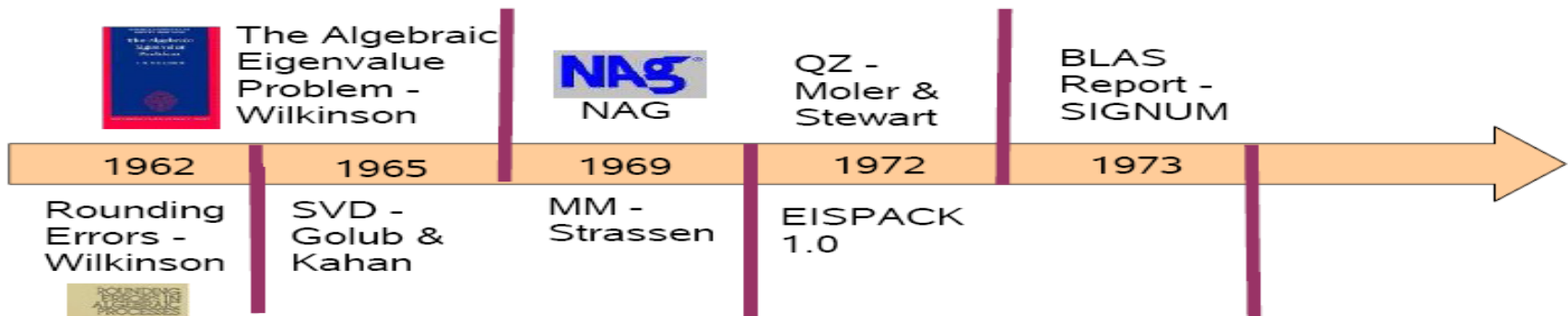


■ Wilkinson:

- matemático británico.
- Participó en la construcción de la primer computadora británica con programas almacenados en los 50s (la ACE)
- Ejecutó cálculos con matrices en la ACE y se transformó en el principal experto en álgebra lineal numérica de su época.



Historia

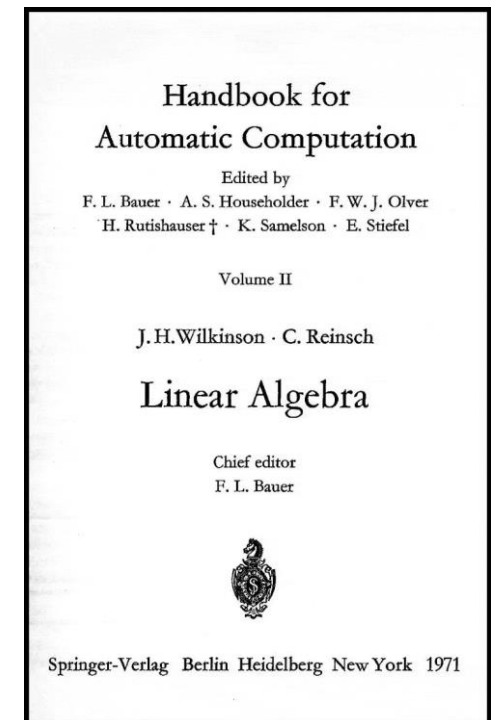


■ NAG:

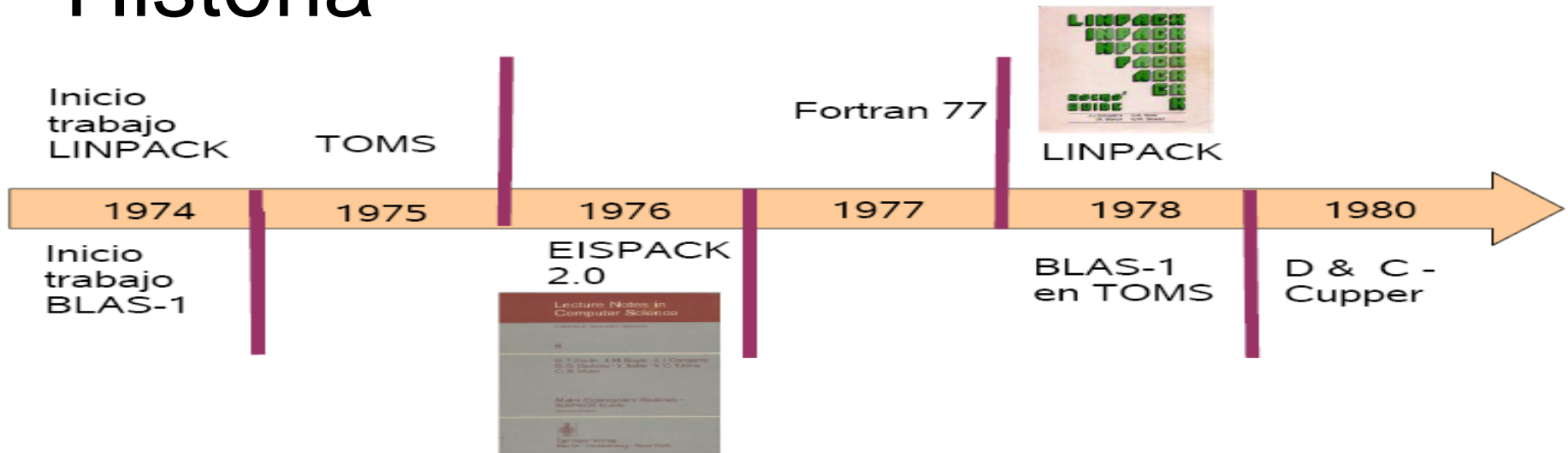
- Biblioteca de 98 rutinas numéricas escritas en Algol 60 y Fortran.

■ EISPACK

- Investigadores del Argonne National Laboratory (ej. Jack Dongarra, Cleve Moler...) tradujeron las rutinas numéricas del libro de Wilkinson a Fortran
- Predecesora de LINPACK y LAPACK

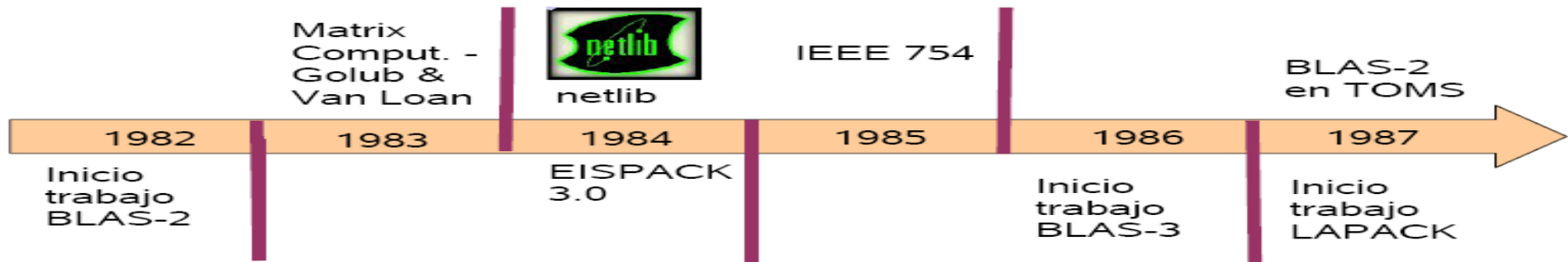


Historia



- TOMS: Transactions on Mathematical Software
 - Revista de la ACM especializada en publicar avances en software numérico.
- BLAS-1
 - Comienzo de los trabajos por estandarizar las operaciones de álgebra lineal numérica.

Historia



■ BLAS-2:

- Operaciones sobre matrices. $O(n^2)$
- Utilizan las rutinas de BLAS-1
- BLAS-3 utiliza las rutinas de BLAS-2/1. $O(n^3)$

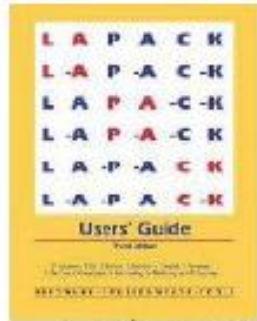
■ NETLIB

- Colección de software, artículos y bases de datos matemáticos

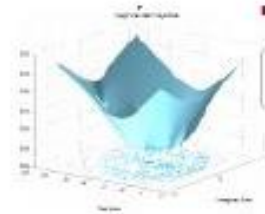
Historia

- ARPACK / UMFPACK

- Integradas en muchas herramientas actuales (MATLAB, SciPy, etc.)

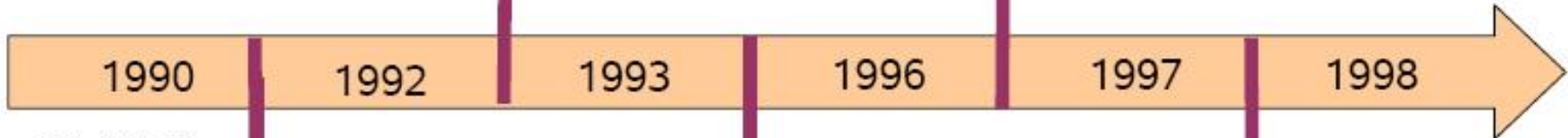


LAPACK
3.0



ARPACK

PLAPACK MUMPS



1990

1992

1993

1996

1997

1998

BLAS-3
en TOMS

Inicio
trabajo
ScaLAPACK

ScaLAPACK



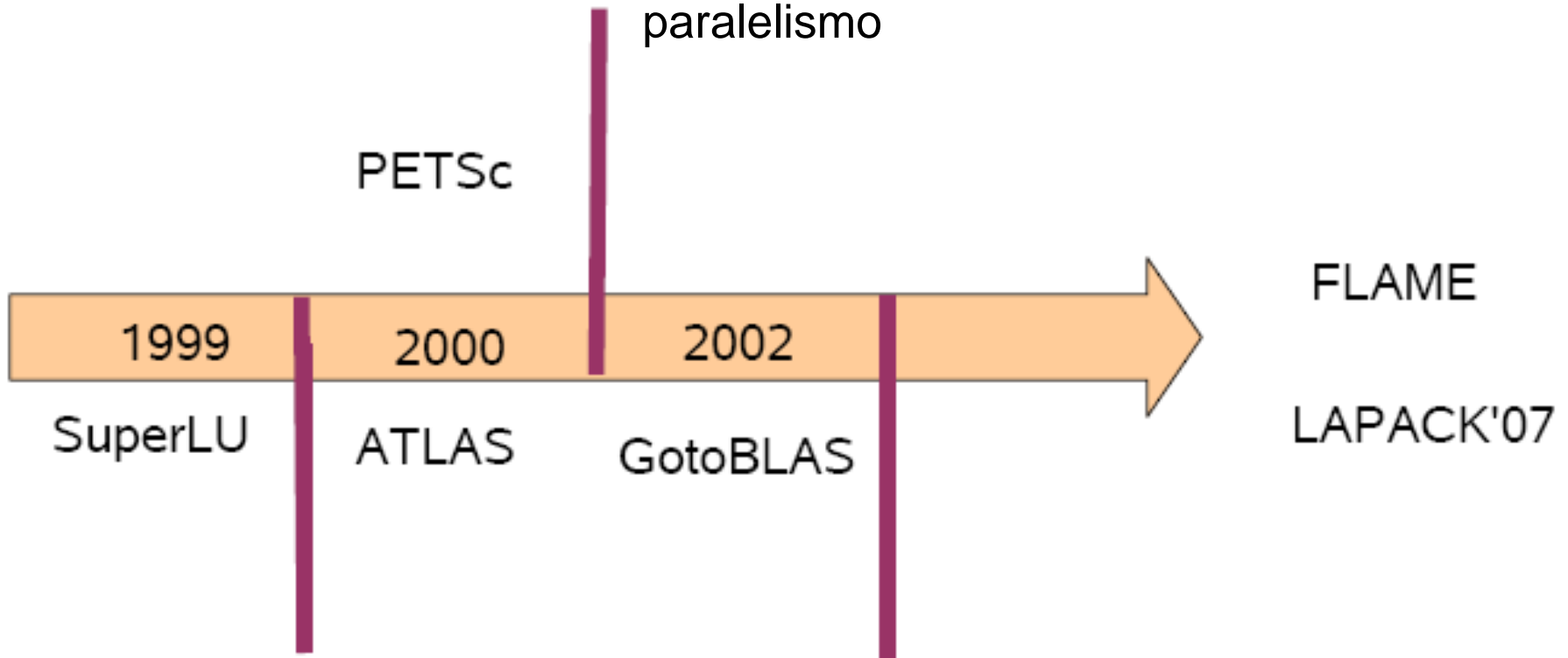
- SCALAPACK

- LAPACK para sistemas distribuidos (clusters)

Historia

- PETSc:

- Solución de EDPs, soporta distintos tipos de paralelismo



- SuperLU:

- Solución directa de sistemas lineales dispersos

- GotoBLAS:

- Variante optimizada de BLAS. Predecesora de OpenBLAS

Historia (presente)

- Seguimos utilizando implementaciones de BLAS y LAPACK
 - Optimizadas para distintos dispositivos de cómputo (procesadores multicore, plataformas distribuidas, GPU, FPGAs,...)
 - A veces desarrolladas por los mismos fabricantes de hardware (Intel Math Kernel Library, NVIDIA cuBLAS, cuSOLVER, etc.)

BLAS (Basic Linear Álgebra Subprograms)

- Es una especificación!
- Tres niveles
 - Cuanto mayor sea el nivel de las operaciones, mejores resultados de optimización se obtienen.
 - BLAS-1, BLAS-2 y BLAS-3
- Matrices generales y estructuradas (triangulares, banda)
- Mantienen una nomenclatura estándar.
 - 5 letras agrupadas en 3 bloques (TMMOO, tipo de datos, tipo de matriz, código de operación)

BLAS

■ Nomenclatura

	Real	Complejo
Simple Pre.	S	C
Doble Pre.	D	Z

	General	Simetrica/ Hermitiana	Triangular
Densa	GE	SY/HE	TR
Banda	GB	SB/HB	TB

BLAS

BLAS 1

- **Implementa operaciones tipo vector – vector y escalares.**
 - $O(n)$ datos y $O(n)$ operaciones.
 - Movimiento de Datos:
 - Copia, intercambio.
 - Operaciones vectoriales:
 - Escalado vectorial.
 - Operaciones de reducción:
 - Producto escalar, norma vectorial, sumatoria, máximos.
 - Nomenclatura operaciones:
 - xYYYYY.
 - x {S,C,D,Z}, Y: operación.
 - Ej:xCOPY(.....).

BLAS

BLAS 2

- **Implementa operaciones básicas tipo Matriz-Vector.**
 - $O(n^2)$ datos y $O(n^2)$ cálculos.
 - Producto matriz – vector.
 - Actualizaciones de rango 1 y 2.

BLAS

BLAS 3

- **Implementa operaciones básicas tipo Matriz-Matriz.**
 - $O(n^2)$ datos y $O(n^3)$ cálculos.
 - Producto matriz – matriz.
 - Actualizaciones de rango k y $2k$.

BLAS

- Distintas versiones según plataformas:
 - ACML de AMD.
 - ESSL de IBM.
 - MKL de Intel.
 - Sun Performance Library de SUN.
 - GotoBLAS para Intel Pentium, SPARC, IBM PowerPC (descontinuada)
 - OpenBLAS (basada en GotoBLAS2)
 - ATLAS (implementación portable)
 - cuBLAS (GPUs NVIDIA)
 - RocBLAS (GPUs AMD)

BLAS

- Algunas versiones proporcionan paralelismo a nivel de hilos para arquitecturas con memoria compartida.
 - Intel MKL
 - OpenBLAS
 - ATLAS, etc.
- Variantes para GPU (cuBLAS, rocBLAS)

BLAS

- MKL es la implementación de referencia en arquitecturas Intel.
 - Es la biblioteca de álgebra lineal utilizada por MATLAB
 - Últimamente renombrada OneMKL
- Desempeño de OpenBLAS comparable con MKL para algunas arquitecturas.

BLAS

- Algunas implementaciones de BLAS disperso
 - NIST S-BLAS
 - PSBLAS
 - SparseLib++
- cuSparse en GPUs NVIDIA
 - No implementa exactamente el standard BLAS, pero si algunas operaciones para distintos formatos dispersos.

LAPACK (Linear Algebra PACKage)

- Especificación de rutinas para implementar un gran número de algoritmos que resuelven problemas estándar de álgebra lineal.
- Incluye rutinas para resolver sistemas de ecuaciones lineales, problemas de mínimos cuadrados y problemas de valores propios y singulares. Descomposición matricial como: LU, QR, SVD, Cholesky. etc.
- Matrices densas y/o de banda.

$$\frac{1}{4} \begin{bmatrix} & & & & 1 & 1 & 1 & 1 \\ & & & & a & -a & a & -a \\ p & p & & & & & -p & -p \\ a & -a & & & & & -a & a \\ c & c & -c & -c & & & & \\ k & -k & -k & k & & & & \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} L & A & P & A & C & K \\ L & -A & P & -A & C & -K \\ L & A & P & A & -C & -K \\ L & -A & P & -A & -C & K \\ L & A & -P & -A & C & K \\ L & -A & -P & A & C & -K \end{bmatrix}$$

LAPACK (Linear Algebra PACKage)

Implementación de referencia

- Utiliza de estrategias de bloques.
- Implementación basada en llamadas a rutinas de BLAS.
- Código fuente disponible en FORTRAN y C (Proyecto CLapack)
(<http://www.netlib.no/netlib/lapack/>)

LAPACK - Diseño

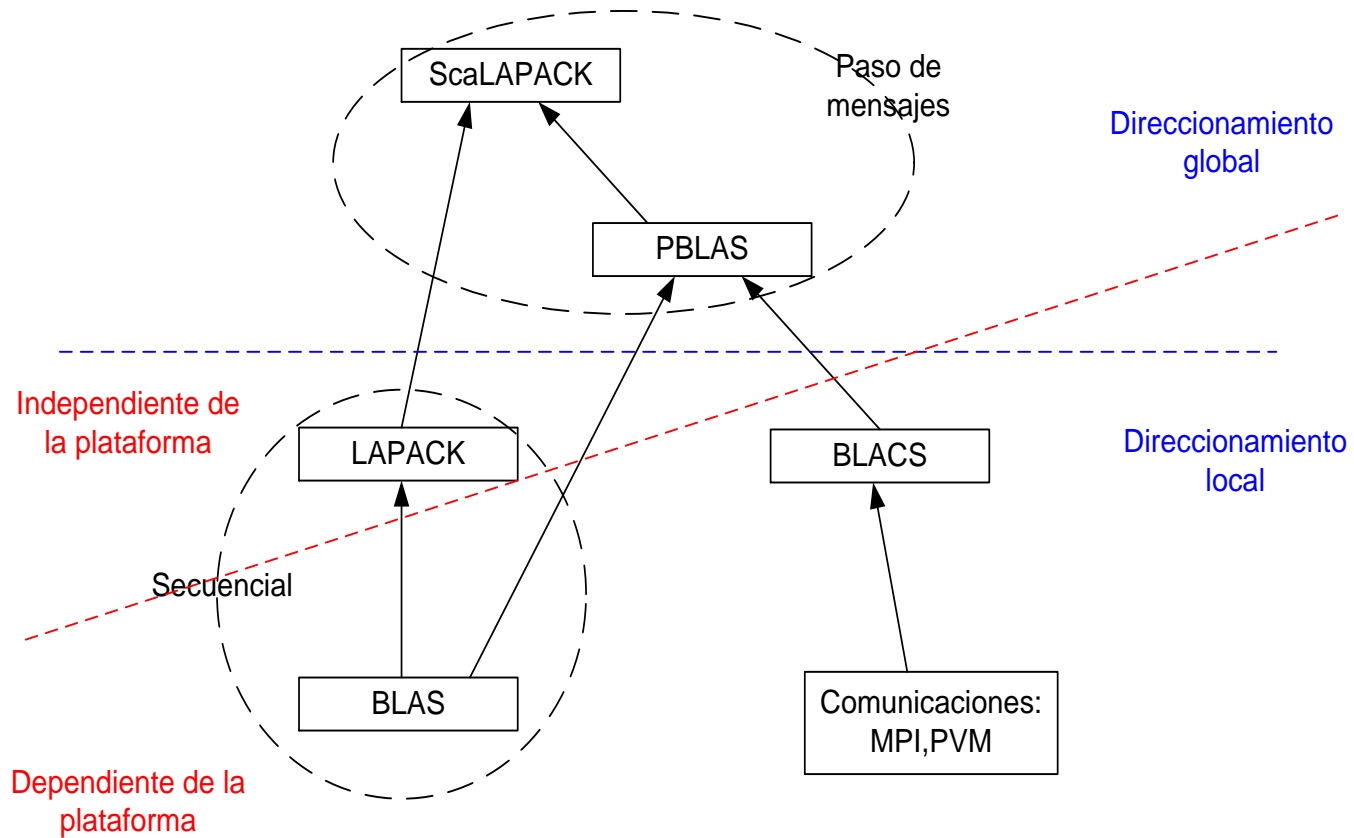
- **Rutinas drivers:** resuelven un problema completo (sistema de ecuaciones lineales, computar los valores propios de una matriz, etc.).
- **Rutinas computacionales:** cada una de las cuales realiza una tarea computacional distinta (factorización LU, llevar una matriz a su forma tridiagonal). Cada rutina driver, ejecuta un conjunto de rutinas computacionales.
- **Rutinas auxiliares:** realizan sub tareas o bloques de algoritmos; o realizan operaciones computacionales de bajo nivel (Escalar una matriz, norma de una matriz, etc.). Hacen llamados a BLAS.



ScaLAPACK

- Extiende LAPACK sobre arquitecturas de HPC distribuidas
- Utiliza varias componentes:
 - PBLAS (Parallel BLAS)
 - BLACS (Basic Linear Algebra Communication Subroutines)

ScaLAPACK



LAPACK en GPUs

- Algunas variantes recientes:
- cuSOLVER:
 - No implementa LAPACK exactamente. Soporta una o varias GPUs.
- MAGMA:
 - Implementación de LAPACK en GPUs desarrollada por el Innovative Computing Laboratory (Dongarra).
 - Rutinas dispersas agregadas más recientemente
- GINKGO:
 - Sucesor multiplataforma de MAGMA (mutlicore, GPU)
 - Soporte para matrices densas y dispersas
 - Proyecto todavía en desarrollo...

Algunas Lecturas

■ Sobre historia:

- <https://www.mathworks.com/company/newsletters/articles/the-origins-of-matlab.html>
- [http://history.siam.org/pdfs2/Dongarra%20returned SIAM copy.pdf](http://history.siam.org/pdfs2/Dongarra%20returned%20SIAM%20copy.pdf)

■ BLAS:

- https://netlib.org/utk/people/JackDongarra-20130-07-11/PAPERS/132_2002_an-updated-set-of-basic-linear-algebra-subprograms-blas.pdf



Dr. Jack Dongarra
Premio Turing 2021

https://amturing.acm.org/award_winners/dongarra_3406337.cfm