

В. А. Ф и с у н

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ  
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ СИСТЕМ**

*В статье рассматривается структура и состав, генезис и тенденции развития математического обеспечения вычислительных систем.*

**E-mail: fis@a5.kiam.ru**

**Ключевые слова:** программное обеспечение, подпрограмма, пакет программ, библиотека программ, прикладное программирование.

ЭВМ состоит из “жесткого” аппаратного оборудования и “мягкого” оборудования — программного обеспечения, которое в свою очередь принято разделять на системное, прикладное и математическое обеспечение ЭВМ.

Системное программное обеспечение является неотъемлемой частью ЭВМ, без него машина просто не может работать.

Прикладное программное обеспечение предоставляет пользователю дружелюбный интерфейс общения с ЭВМ. Для составления программы ему достаточно знать правила по использованию ЭВМ в терминах своей предметной области — предметно-ориентированную среду программирования. Так, для экономистов предлагается среда программирования Кобол, для инженеров — Фортран, Си, для параллельного программирования разработаны свои среды программирования — MPI, OpenMP, Оккам, Фортран-GNS, Фортран-DVM, HOPMA и др. Ускорить программирование задач можно средствами математического обеспечения ЭВМ.

**Математическое обеспечение ЭВМ.** Математическое обеспечение — МО состоит из фонда программ вычислительных алгоритмов, в частности, фонд содержит решения типовых задач математической физики. Фонд непрерывно пополняется, на рынке программных продуктов идет конкуренция между разработчиками МО. При описании истории МО использованы некоторые данные из работы [1], а современное состояние обсуждается на примерах программ библиотеки НИВЦа МГУ.

Одна из классификаций математического обеспечения предполагает деление его на следующие разделы: подпрограммы, пакеты программ, библиотеки программ, системы математического обеспечения.

**Подпрограммы.** Это наиболее известный и часто используемый раздел математического обеспечения. Он состоит из отдельных подпрограмм или программ, содержащих небольшой набор подпрограмм. Первые численные модели на ЭВМ программировались в двоичных

кодах, эти подпрограммы были машинно-ориентированными. Мобильность подпрограмм — возможность их использования на различных ЭВМ появилась с внедрением универсальных языков программирования: Алгола и Фортрана. Другим эффектом внедрения алгоритмических языков высокого уровня было появление новой среды описания вычислительных алгоритмов, программа на таком языке может также служить формальным описанием алгоритма. Особенно ярко эта способность алгоритмического языка служить языком публикаций вычислительных алгоритмов проявилась у языка Алгол-60. В СССР и за рубежом был опубликован обширный спектр вычислительных алгоритмов на этом языке. С 70-х годов описания вычислительных алгоритмов публикуются на Фортране из-за широкого распространения этого языка. Набор алгоритмов, опубликованных в журнале “ACM Transactions on Mathematical Soft.”, охватывает почти все сферы численного анализа.

В настоящее время подпрограммы научно-технического характера публикуются в основном на языке Си. Язык Фортран сохраняет позиции как язык публикаций для описания вычислительных алгоритмов. Также известно, что тексты последовательных Фортран-программ удобнее для распараллеливания, чем тексты Си-программ.

**Пакеты программ.** Пакетом программ называют комплекс программ для решения серийных задач в конкретной области наук и техники. Пакет прикладных программ (ППП), частный случай пакетов, — это система взаимосвязанных программ и средств организации процесса вычислений. При помощи этих средств, в рамках реализованной в пакете стратегии организации вычислений, автоматически генерируется цепочка прикладных вычислительных программ для проведения конкретного вычислительного эксперимента. Примером ППП может служить пакет САФРА (Система Автоматизации Физических Расчетов) [2], разработанный в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН для решения класса задач математической физики. Программы, создаваемые при помощи пакета САФРА, используют программы из архивного фонда пакета, содержащего свыше тысячи программ. Системная часть пакета обеспечивает подбор оптимальной последовательности программ для решения общей задачи.

Техника ППП широко используются в системах программирования, предназначенных для решения задач линейной алгебры. Базовым уровнем пакетов этого класса служит пакет BLAS (Basic Linear Algebra Subroutine), реализующий основные операции нижнего уровня вычислительной линейной алгебры. Он входит в состав всех пакетов и библиотек линейной алгебры, обеспечивая низкоуровневый интерфейс между программами широкого класса библиотек и ЭВМ различных архитектур. Пакет разделяется на три уровня BLAS: Level 1 BLAS —

для векторных операций, Level 2 BLAS — для матрично-векторных операций, Level 3 BLAS — для матричных операций. Этот пакет был разработан еще в 70-ые годы, поэтому возникла необходимость разработки методологии автоматической генерации высокоэффективных подпрограмм для современных вычислительных машин.

Наиболее простой и широко используемый метод оптимизации программ пакета заключается в параметризации характеристик вычислителей и использовании этих данных на уровне трансляции приложений. Другим способом оптимизации программ пакета является разработка кодового генератора. Основой такой технологии является возможность генерации нескольких вариантов объектного кода, а адаптация пакета заключается в определении его наилучшей версии для конкретной архитектуры ЭВМ и может производиться с учетом времени счета эталонных задач. Эти технологии использовались в рамках проекта ATLAS (Automatically Tuned Linear Algebra Software) [3] — создание инструментальных систем разработки программного обеспечения для адаптации оптимального объектного кода пакета линейной алгебры на различные архитектуры ЭВМ.

Пакет PETS (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation — 1991 г.) для численного решения дифференциальных уравнений в частных производных (ДУЧП) реализован на широком классе последовательных и параллельных архитектур.

**Библиотеки программ.** Данный вид математического обеспечения состоит из набора пакетов программ (пакет пакетов), предназначенных для решения широкого круга задач, например задач численного анализа, математической статистики и др. Прототипами библиотек можно считать программы общего назначения, поставляемые производителями ЭВМ для своих машин. В СССР наиболее известна была библиотека такого класса — SSP (Scientific Subroutine Package) фирмы IBM. Она была адаптирована для ЭВМ серии ЕС и БЭСМ-6.

Библиотека программ ANSYS заявлена как многоцелевая конечно-элементная библиотека для проведения анализа в широкой области инженерных дисциплин (прочность, теплофизика, динамика жидкостей и газов и электромагнетизм). Она представляет собой набор свыше десяти специализированных пакетов, включая учебный. Пакеты сертифицированы по целому ряду международных стандартов, в том числе по стандартам Американской атомной промышленности и ГОСАТОМНАДЗОРа России. Разработчики ANSYSa также используют лицензионные программы для обеспечения интеграции с другими пакетами. Распределенные вычисления на вычислительных кластерах поддерживаются не на всех пакетах библиотеки.

**Системы математического обеспечения.** Система математического обеспечения — это библиотека программ широкого назначения с

проблемно-ориентированным языком, обеспечивающим дружественный интерфейс с пользователями.

Одной из старейших систем математического обеспечения ЭВМ является MATLAB. В расчетах допускается использования таких мощных типов данных, как многомерные массивы чисел, символов, структур, задаваемых пользователями. Область применения MATLABa — это построение математических моделей и разработка алгоритмов, программирование и проведение вычислений, использование научной и технической графики для визуализации и анализа данных.

**Математические библиотеки в прикладном программировании.** Прогресс технологии производства оборудования ЭВМ значительно опережает темпы роста производства программного обеспечения. В программировании не известен аналог закона Мура — удвоение производительности ЭВМ каждые полтора года. Поэтому очень велико значение систем математического обеспечения как элемента индустриальной технологии производства программ приложений.

Современное МО, кроме программ элементарных математических функций для вычисления синусов и логарифмов и др., содержит обширный набор стандартных программ для реализации массовых вычислительных алгоритмов. Техника сборки программы из готовых вычислительных компонент снижает трудоемкость программирования приложений. Значительное усложнение программирования из-за появления многопроцессорных кластеров и графических процессоров повышает роль такой техники. Для программирования библиотечных программ можно привлекать узких специалистов в прикладных областях и обеспечивать очень высокую эффективность реализации.

Библиотеки создаются как коммерческий продукт; причем, чем шире круг пользователей и, соответственно, более разнообразен диапазон удовлетворяемых запросов, тем выше цена продукта. Библиотечная программа для расширения области применения должна допускать широкую вариацию входных параметров, обеспечивать настройку на особенности исходных данных и аппаратной среды.

Наиболее впечатляющих успехов структуризация библиотечных программ достигла при программировании ППП для задач линейной алгебры. Особенностью данного класса задач является устойчивость большинства алгоритмов: эффективность вычислений зависит главным образом от особенностей размещения данных в памяти ЭВМ. Интеграция векторных — матрично-векторных — матричных операций BLASa до уровня решения систем линейных уравнений программами ATLASa была выполнена системными программистами так тщательно, что ручное программирование, например, задачи умножения матрицы любыми методами всегда будет пройгрышным делом.

Иначе обстоит дело с программами других вычислительных алгоритмов, устойчивость которых зависит от значений чисел — входных параметров. Показателен классический пример Дж. Форсайта [4] о проблеме выбора алгоритма для поиска корней квадратного уравнения при различных значениях коэффициентов. Для обеспечения эффективных и корректных вычислений вызов таких библиотечных программ должен сопровождаться заданием дополнительных параметров и указаний, например, о характере входных данных. Интеграция программ в пакетах прикладных программ требует согласования не только формальных и фактических параметров процедур, но также типов и видов таких дополнительных параметров. Поэтому формальная суперпозиция при построении цепочки вызовов библиотечных процедур с учетом и передачей только содержательных параметров будет недостаточно эффективна. Для выбора оптимального варианта цепочки вызовов программ нужен учет и согласование дополнительных неформальных признаков. Успех работы по построению оптимальной траектории вызовов процедур, выполняемых в ППП, зависит от уровня детализации неформальных характеристик процедур и алгоритмов их обработки. Эта обработка может производиться автоматически, как например, в ППП САФРА. Разработчики пакета PETS признают, что работа управляемого опциями автомата — солвера (решателя) не всегда может быть оптимальна и поэтому предусматривают возможность активного участия пользователя в формировании последовательности работ. Для этого в программах допускается явное описание векторов и матриц и задание их характеристик: степень разреженности матриц, разрешение параллельной обработки элементов векторов и т.д. Естественно, внесение в программы приложения соответствующих описателей лишает программы мобильности, они смогут работать только в PETS среде.

Библиотеки, классифицируемые как системы математического обеспечения, например MATLAB, обеспечиваются интерфейсом с языками Фортран и Си. Но системы программирования для этих языков, встроенные в библиотеку, не могут соревноваться по качеству объектного кода с кодом, продуцированным отдельными независимыми компиляторами с этих универсальных языков. Наконец, приложения, получаемые при помощи данной среды программирования, не отчуждаемы от среды и поэтому также не мобильны.

Конечно, библиотеки допускают использование своих математических подпрограмм и пакетов из независимых Фортран и Си-систем программирования, однако наибольший эффект от использования библиотеки получается при погружении в ее среду приложения целиком. Коммерческие мотивы в проблеме мобильности приложений несомненны.

Одним из главных критериев качества математического обеспечения считается надежность вычислений, которая обеспечивается, в частности, сертификацией библиотечных программ. Так как лицензия одной программы дешевле лицензии целой библиотеки, то на рынке математического обеспечения всегда будут востребованы пакеты программ, ориентированные под конкретные запросы пользователей.

Можно предположить, что будущее данного направления состоит в ускоренном развитии технологии “облачных пакетов” — генерация сертифицированных пакетов программ с открытым исходным кодом, настроенных на заданную предметную область и конкретную вычислительную среду.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Захаров А. Ю., Маркачев Ю. Е. Современные пакеты и библиотеки программ математического обеспечения // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша. 1987. № 126. 28 с.
2. Горбунов-Посадов М. М., Корягин Д. А., Мартынюк В. В. Системное обеспечение пакетов прикладных программ. М.: Наука, 1990. 208 с.
3. Whaley R. C., Petitet A., Dongarra J. Automated Empirical Optimization of Software and the ATLAS Project, UT-CS-00-448, September 2000.
4. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980. 277 с.

Статья поступила в редакцию 27.07.2012