

异构平台挑战软件设计

“现在要做一个好的软件工程师，与以前大不相同的是，你必须对硬件充分了解，这样才能设计出优秀的算法。”



周会群

南京大学地球科学系教授。毕业于南京大学地球化学专业，在南京大学获博士学位。曾在日本名古屋大学访问研究，进修和研究内容为：计算机断层扫描、地震勘探数据的三维可视化，随后在日本和美国的知名公司任职。目前任江苏省高性能计算专业委员会主任。

■文 / 本刊记者 王左利

南京大学地球科学系教授周会群对高性能计算的研究非常深入。他说，计算机可以帮助学科人员聪明地做实验，无论是“做不了”的实验，还是“做不起”的实验，计算机都可以帮助我们去做。作为一名在地球科学领域但每天都在跟高性能计算打交道的学者，他对当前高性能计算发展的一些观点更值得计算机学科的人去体会。

对于 GPU 的研究大量重复

《中国教育网络》：最近全球高性能 TOP500 排行榜中，排在首位的日本理化研究所的超级计算机 K 比其他计算机快了数倍，非常惊艳。您对日本高性能计算界相当了解，您觉得日本在高性能计算方面有哪些优点值得我们借鉴？

周会群：日本是一个做事情很有目标的民族。K 在设计之初，就有报道说，这是冲着 TOP500 榜首去的，志在重夺世界第一。它也确实做到了。

日本的超级计算机有一个特点，就是在硬件诞生的同时，就有庞大的软件开发计划。这从著名的地球模拟器的设计中就可以看到。

地球模拟器是由日本宇宙开发事业团、日本原子能研究所以及日本海洋科学技术中心共同研发的，在研发伊始，就有非常明确的应用目标。它要对整个地球的大气环流、全球变暖、地壳变动等活动进行预测与解析。比如，通过计算机模拟来预测厄尔尼诺的现象，解析全球变暖会对气候产生怎样的影响，或者是通过计算机模型来推测数万年以上的大气或者海洋的情况。

日本在建大型计算机设施时，往往都有明确的应用目标，他们希望以此来保持本国技术的先进性，这是一个很重要的战略。

对比国内，我们在应用与硬件的结合上做得很不够，往往缺乏典型应用的支持。甚至缺乏对硬件设施建好之后如何经济、有效地利用起来的考虑。

《中国教育网络》：现在 GPU 越来越热，您认为，异构平台将会是一个趋势吗？

周会群：是的，不过异构平台与其说是一个趋势，

不如说是我们不得不接受的选择。关于GPU,我所看到的是,很少有人做真正有意义的工作。虽然我们也可以看到,各个领域对GPU的应用正轰轰烈烈,类似“GPU在某某领域的应用”文章层出不穷,但其实质一样。因为科学计算万变不离其宗,大多数模型到最后都归结为求矩阵特征值与线性代数计算问题。

我觉得与其这样,不如由专门的人集中力量把两个常用的数学程序库BLAS与LAPACK在GPU上高效能并行化,其他程序只需连接这两个库,这样一切问题迎刃而解。现在的问题是,最本质的工作没有人做,却有大量重复的工作正在进行。

算法评判标准改变

《中国教育网络》:那么,在多核或者异构平台时代,您认为存在的软件挑战在于什么?

周会群:如何有效、协调地综合利用GPU,如何将现在在CPU上广泛使用的数学程序高效率地应用到GPU上,是一个巨大的软件挑战。如果没有好的算法,异构处理器往往会出现通讯时间很短,等待时间很长的问题。

在异构和多核时代,评断算法好坏的标准有了改变。我们必须重新审视既有的算法。过去我们认为一个好的并行算法应当符合:高度并行性,即算法能够将计算任务分解成尽量互不关联的部分;进程之间通信量尽可能少;内存的合理利用。而且往往强调的是前两个准则,比较忽略第三点。而现在,忽视第三个标准的算法往往表现不好。

例如,解线性方程组的Gauss-Seidel迭代法及其变种,常常用于为大型科学和工程问题的偏微分方程离散化后得到的线性/非线性方程组求解提供条件预优解。可以证明所谓的红黑迭代格式可以把原来相互关联、不利于并行计算的算法变为完全互不关联、具有最高并行度的算法。按列均衡分割迭代矩阵,分配给不同的CPU核,各核之间的通信量也很少,完全符合前述准则的前两条,按过去的标准是一个优良算法。可是,在一台两路八核的服务器上,我们发现虽然使用双核的加速倍率基本可以达到使用单核的近2倍,但当使用核数继续增加后,加速倍率基本上没有任何增长。在8个核上运行时每个核的并行效率仅30%左右,可以说是效率很低。

而过去一些表现不好的算法今天倒是有了用武之地。比如,天体物理学计算和材料科学、生命科学研究中所用的分子动力学模拟方法分别涉及计算N个粒子之间的万有引力和库仑力,其计算复杂性为N的平方,模拟中80%以上的时间都耗费在这两种力的计算上。最笨的算法是直接计算粒子两两之间作用的所谓的笨办法。过去也开发了大量优化算法,但是目前在GPU上计算最快的算法正是笨办法,比优化算法快数十倍。

现在要做一个好的软件工程师,与以前大不相同的是,你必须对硬件充分了解,这样才能设计出优秀的算法。过去,CPU有什么进展,程序就有什么进展。但多核处理器或者是异构平台并非如此,无论所使用的处理器比之前快多少倍,如果程序设计得不好,结果可能一倍都快不了。

对于高性能计算来说,现在一个理想的CPU要具备两个因素,第一,要有很大的Cache,第二,与其他CPU和内存的联系必须非常紧密,也就是link有足够的带宽,很低的时延。否则核再多都没用。

计算机教育要注重基础理论

《中国教育网络》:那么对高校培养计算机人才提出了哪些新挑战?

周会群:科学计算里涉及的软件开发不同于普通的软件开发,是一个复杂问题。碰到的很多问题,如果不懂其理论,根本没有办法做好。这就需要当前的课程进行改革,重视计算机基础理论。而计算机基础理论的教学是国内计算机教学中的软肋。

现在,中国的大学,包括一些顶尖的学校,计算机体系结构这门课早已不是重点。一方面,国内在此方面鲜有建树,体系结构几乎都是由别人所决定的;另一方面,在大多数学校作为选修课来供学生选择。这门课比较难,所以很少有学生选它。另外一门非常重要的课程是并行计算原理。要想解决实际计算中遇到的问题,这是很重要的基础理论。但同样遗憾的是,它在很多学校都不是必修课。课程设置的滞后性与不科学性,导致人才的缺失。

此外,计算机教学应当与其他学科进行紧密的结合。因为高性能计算是一门交叉学科,需要培养具备复合知识结构的人才,而中国的计算机教学比较忽略这一点。 GEN