

并行计算的延伸——纵深计算

Deep Computing: The Extension of Parallel Computing

姜 誉 胡铭曾 张宏莉 季振洲

(哈尔滨工业大学计算机科学与工程系 哈尔滨 150001)

Abstract Along with the development of information society, the requirement for computations in transaction area is getting an increasing trend. Supercomputer has been put to use in the field of transaction processing in a much broad way. In order to comply with this kind of need, after coming the concept of Pervasive Computing, IBM produces another concept as Deep Computing. This concept has drawn much more attention since then. Thus, in this paper, on the base of presenting the relevant aspects of Deep Computing, the relationship between deep computing and parallel computing is discussed in order that it can be further studied.

Keywords Deep computing, Parallel computing, Pervasive computing, E-Business

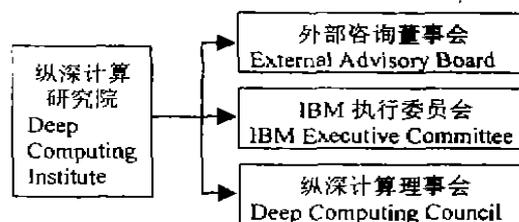
1 引言

目前,随着性能的不不断提高,超级计算机的应用已从科学计算领域进一步拓展到事务处理领域中。1991年美国在高性能计算与通信(HPCC)计划中提出了一系列“具有广泛经济和科学影响的基础性”重大挑战问题。这些挑战性问题促进了计算科学与计算工程交叉学科的发展,这就需要将计算机系统和计算求解技术更系统地应用于数学模型的研究,以描述和模拟科学与工程所关注的现象^[1]。1995年9月,美国在HPCC 1996年蓝皮书中进一步提出了一系列重大挑战性应用课题^[2],如合理药物设计、生物医学成像、蛋白质与核酸序列分析以及蛋白质折叠预测等。

1997年5月,IBM公司研制的超级计算机“深蓝”在与国际象棋大师加里·卡斯帕罗夫对弈中首次战胜了卡氏。这次比赛是计算历史的分水岭,在某种程度上,也是技术历史的分水岭。对计算机科学来说,下棋始终是巨大的挑战,直到1995年以前,计算机还不能达到挑战像卡氏这样的国际象棋大师的水平。“深蓝”是一台IBM RS/6000可扩展并行超级计算机,采用POWER3处理器,带有专门用于下棋的协处理器,在3分钟内可转换360亿步(而同一时间内,一般棋手只能走出一步)。在研制“深蓝”的过程中,IBM的研究人员深刻地体会到光有速度是远远不够的,因为1995年“深蓝”输给了卡氏。1997年,“深蓝”之所以能战胜卡

氏在于它是把处理器的计算能力与高度精确的、能够处理具有象棋大师级的下棋知识的评价函数相结合的产物。通过将人下棋的知识,包括上千万步象棋大师的走法,注入给“深蓝”,使它能够在模仿人脑的思考方式,计算出可能的位置,并从中选出最好的一步,从而战胜了卡氏。可以说,“深蓝”是已有的将超级处理速度与能够进行复杂分析的软件组合在一起的计算机系统的典范。

IBM的研究人员并没有停留在“深蓝”战胜卡氏的喜悦中,“深蓝”研究小组继续开辟新的研究领域,如计算金融学(Computational Finance)、数据挖掘等,并提出“纵深计算”(Deep Computing)这一概念^[3]。他们希望能在这些需要大量的搜索过程及评价过程的研究领域尤其是事务处理领域中应用研制“深蓝”时所采用的技术,如先进的搜索算法及大规模并行化等技术。1999年5月24日,IBM投资2900万美元的纵深计算研究院(Deep Computing Institute)宣布成立,院长由IBM研究中心数学科学研究院院长William R. Pulleyblank博士担任,其组织结构为:



姜 誉 博士研究生,研究方向为并行计算技术、分布式计算。**胡铭曾** 教授,博士生导师,研究领域为高性能计算机系统结构,并行计算技术,网络计算。**张宏莉** 博士,研究领域为并行计算技术,网络计算。**季振洲** 副教授,博士,研究领域为高性能计算机系统结构,计算机应用技术。

该研究院有以下三个目标:

(1)充分利用 IBM 公司在高端计算、数据存储和管理、算法、建模和仿真、可视化以及图形学方面的优势,开发针对以前难以处理的商务问题及科学问题的解决方案。

(2)实现已显露出来的超大规模计算、数据管理和通信在解决商务及科学关键性问题方面的潜能。

(3)在科学团体和企业界,带领 IBM 公司参与到纵深计算这个新的重要的计算领域。

下面我们先简要介绍一下纵深计算的有关方面内容,详细的介绍请参阅文[4]。

2 什么是纵深计算

纵深计算的出现其最重要的因素是价格相对便宜、速度极快、处理能力极强的系统的出现,如 IBM 的 RS/6000[®]SP 并行计算机。纵深计算是一类新计算,它把大规模计算能力及先进算法和高性能软件结合起来应用到解决科技及复杂商务环境中以前难以处理的、具有深远意义的挑战问题。可以说,纵深计算是并行计算的延伸。

纵深计算涉及可扩展硬件、能够和谐利用可扩展硬件的软件、专门设计的以便获得硬件最好性能的算法和相关的领域知识等四个方面。更确切地说,纵深计算包含以下四个要素:

要素一:超快计算。纵深计算最基本的要素是实际的超级计算机和并行处理。除了能够分享负载外,并行系统还要具有可扩展性:处理器能够象组件一样加进来以处理更大的任务,计算机本身也能够被聚集起来构成机群系统以增强处理能力。由于处理机速度及并行设计方面的进展,计算机处理速度在不断增加。

IBM 公司 1998 年 10 月交付给美国能源部用于加速战略性计算创新(ASCI: Accelerated Strategic Computing Initiative)计划的“蓝太平洋”(Blue Pacific)系统中有 5856 个微处理器,每秒能进行 3.88 万亿次运算,比“深蓝”快 50 倍,当时是世界上最快的超级计算机。它采用的是 IBM 最新研制的 POWER3 微处理器,每个时钟周期能进行 8 次运算。1999 年 12 月 6 日,IBM 宣布投资 1 亿美元研制每秒可进行 1P($=10^{12}$ 或 2^{30})次浮点运算(Petaflop)起名为“蓝基因”(Blue Gene)的超级计算机,通过以下 5 个步骤达到相应的性能:(1)研制每秒可进行 1G 次浮点运算(Gigaflop)的微处理器(Processor);(2)用 32 个 1Gigaflop 的微处理器构成一个 32Gigaflops 的芯片(Chip);(3)用 64 个这样的芯片构成一个 2 Teraflops 的板(Board);(4)用 8 个这样的板构成一个 16 Teraflops 的塔(Tower);(5)用 64 个这样的塔最终构成一个 1 Petaflop 的“蓝

基因”(见图 1)。

要素二:高级算法。算法给纵深计算以生命,没有算法,许多复杂问题超级计算机也处理不了。适当地设计算法能够在不需要大量资源的情况下获得较好的性能,比如搜索近优解而不是精确解。

Five Steps to a Petaflop Computer

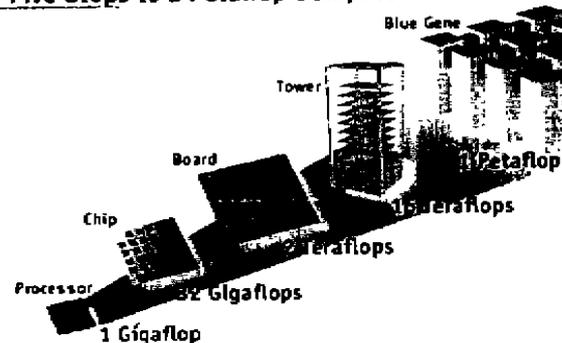


图 1 构造每秒千万亿次运算的计算机的五个步骤

要素三:高性能软件。这早已是超级计算的基本要求,对纵深计算来说则更为至关重要。要使超级计算机以最快的速度进行象快速傅立叶变换这样的计算,要求相应的软件是结构专用的(architecture-specific),编写优化利用超级计算机体系结构特点的高性能软件,使其成为纵深计算中创新算法功能的具体体现,使人能够集中于分析问题、设计算法来解决问题。

要素四:领域知识。没有特定问题领域中有关的专家知识,就不能形成纵深计算算法或该问题的解决方案。计算机的速度、软件或算法本身不能解决问题,没有对问题的理解,速度再快也仅是在原地打转。构造问题的纵深计算解首先要与该问题领域的专家一起工作,讨论。这并不是说所有纵深计算求解都必须根据个体的需求来定制。确切来说,定制应在领域一级,即一给定问题所要求的信息及专业知识集合。这样,一旦对一特定类型的问题构造出了解,就可以将它移植给有相同问题的其他用户,同时也可跨行业的类似的挑战问题奠定求解基础。

IBM 认为,纵深计算和普适计算(Pervasive Computing)是推动下一代电子商务(E-business)发展的两个基本技术发展趋势。

3 纵深计算术语及研究方向

下面是由纵深计算研究院所给出的目前纵深计算技术涉及到的一些术语。

计算流体力学(Computational Fluid Dynamics)

关于流体运动模拟的学科。最近,相应的知识更多地被应用于超过一种流体、在化学性质上相互作用的流体以及流经萌发孔(porus)材料的流体等情形。

数据挖掘(Data Mining) 从超大数据集中提取有用信息的技术,例如从购买模式(buying patterns)中发现购买倾向、识别分离的分组人口(separate sub-populations)以及在大数据库中查找特定信息等。

动力学系统(Dynamical Systems) 研究各种类型的运动,包括无序运动(chaotic motions)。从数学角度来说,该领域研究得比较完善,所观察到的现象具有很优美的几何学解释,已被应用到从行星的运动到股票市场的运行等各个方面。

插值与逼近(Interpolation and Approximation) 有些信息不是离散的,同时可能还具有信息太多而难以处理的特点,因此就要用较小的信息集近似表示,有时我们所知道的信息恰恰不是离散的,但我们有离散的样本,插值问题就是由离散样本重构连续信息的问题。

线性规划(Linear Programming) 由线性目标和线性约束组成的优化问题。

分子动力学(Molecular Dynamics) 我们把大型分子集合中分子的运动看作是气体、液体和固体的物理性质。分子动力学追踪这些个体运动,以便预测物质的大量物理性质。典型的模拟涉及数百万个相互作用的粒子,而且计算极为密集。

最优化(Optimization) 即由某些目标函数组成的问题的解,这些目标的值在受一系列约束条件的影 响下要取得最大或最小。数学优化即从满足给定约束条件的方案中选择收益最大化或费用最小化的方案。

模式发现(Pattern Discovery) 即在大量的信息串中寻找复现模式的技术。一种模式是一系列字符,比如 AA.[0-9]D,这里句点(.)可与任意字符匹配,而[0-9]是任意一位数字,模式发现技术被应用于遗传学中,以便在基因中寻找公共结构和预测蛋白质的三维结构。进行模式发现时,是通过浏览数据库,以便识别出经常出现的事物,所要搜索的东西事先并不知道,而实际是在搜索过程中才确定的。模式发现不同于模式匹配(pattern matching),在模式匹配过程中,事先知道要搜索的项。在数据集集中进行模式发现通常有两种方式来实现,一种是通过枚举和验证(enumeration and verification),另一种是先发现局部相似性,然后求解多重对准(a multiple alignment)问题。这两种方法都是 NP-难的问题^[5],因此,已提出的大多数求解方法都采用启发式或特定约束(ad hoc constraints)以便有效地发现模式。比如,概率算法是使可能性函数最大化,枚举算法则是限定已发现模式的最大规模,避免对系统内存的指数数量级需求,其他算法则是将精确模式限定在一个固定的字母表符号集上。

蛋白质折叠(Protein Folding) 蛋白质是特殊的

分子,包括酶和许多药物。它们是很长的链,但这个链紧叠在一起,使得只有分子的一部分与外界环境发生作用。蛋白质折叠研究哪一部分与外界环境发生作用,以及如何构造具有特殊性质的蛋白质。

纵深计算具有很强的跨学科特点,随着纵深计算技术应用领域的不断拓展,有关的术语必将得到不断的扩充和完善。

目前,IBM 正在进行的纵深计算研究不仅包括计算生物学(Computational Biology),计算化学(Computational Chemistry),数据挖掘以及最优化方面的活动,也包括蛋白质折叠、地区性的天气预报以及石油储藏建模等具体问题方面的工作。具体地说,研究方向有:

(1)计算生物学:如果说 20 世纪是物理学时代,那么 21 世纪将成为生物学时代。现在,在遗传控制、生物工程等方面新的基础性进展第一次使我们能够理解和处理(尽管仍然是以非常原始的方法)某些最本质的生物机器(biological machinery),在这种环境下,计算机越来越成为基本的挖掘和发现工具。

(2)生物信息学及模式发现(Bioinformatics and Pattern Discovery):生物信息学是一门新出现的交叉学科,它横跨传统的计算机科学、分子生物学、数学、化学、化学工程学等好几个领域。该领域的终极目标是理解给定有机体(或一类有机体)不同组成部分之间的相互关系,理解根本的生物机制及过程中的信息流,理解一种有机体的 DNA 组成与其外部可观察到的特征之间的关系。目前,生物信息及模式发现研究小组的工作集中于事件流(DNA、蛋白质、基因表示时间序列等)中的模式和关联发现,蛋白质/DNA 数据库中的同系搜索、多重序列对准、有结构的和无结构的生物数据库中的文本挖掘等一系列问题上,有关的研究项目见文[6]。

(3)计算材料科学(Computational Materials Science):主要是采用基于密度函数理论(DFT: density-functional theory)的分子动力学方法,在限定温度下进行模拟,计算绝缘分子结构的、电子的、振动的、光学的性质以及迁移性质,其目标是为新材料和新过程的综合与设计提供新线索。

(4)数据挖掘:有人称数据挖掘为商务智能(BI: Business Intelligence),即从大量信息中获取洞察力及发现以前不可见的关系与趋势的能力,它收集、管理和分析数据并将其转化为能够帮助作出智能决策及取得市场优势的信息,比如进入哪个市场或开发/提供什么产品和服务。商务智能中的各学科交叉程度很高,它采用统计学、可视化、在线分析处理(OLAP: On-Line Analytical Processing)、机器学习以及最优化的方法。

商务智能是应用数据资产更好地进行商务决策的方法学,它采用新系统和新技术来进行数据管理与访问、数据分析和知识发现。这些数据密集型分析技术可以用来识别数据中有效的、新的、潜在有用的和最终可理解的模式,这些模式对构造关于新数据的预测或分类、解释已有数据、概括大型数据库的内容以帮助决策、形象化数据以帮助发现非平凡模式等都是有用的。网络访问模式的数据挖掘则有可能揭示出非法使用网络的模式,较早地进行黑客检测。

(5)最优化:在经营研究和管理科学领域,最优化技术是很重要的求解和建模工具。许多最优化问题的决策变量代表任务或者活动,约束代表完成这些任务所需资源的有限性,而目标则是使收益最大化,新的计算能力允许我们求解更大的现实生活中的最优化问题。有关的研究项目见文[7]和[8]。

(6)可视化:可视化是一种计算方法,该方法使人类视觉系统(眼-大脑)的巨大带宽及处理能力变成从复杂数据中提取知识的系统的一部分,它不仅采用图形学及成像技术,也应用数据管理及人类视觉系统的知识。可视化通常是纵深计算分析中的关键成分。IBM的研究涉及图形学以及用于网络可视化、视觉感知科学和与CAD、医学成像、天气模拟、金融业等领域知识相关的可视化求解中的几何算法、软件基础设施(software infrastructure)。有关他们所开发的OpenDX数据可视化浏览器内容见文[9]。

(7)高性能计算:该短语已获得了自己的生命力并继续代表一系列确定了硬件边界和软件性能的挑战问题。IBM公司不但在研究某些重大挑战问题,而且正在建立高性能计算内核,并设计新的并行超级计算机。

(8)计算理论(Theory of Computing):IBM研究人员在理论计算机科学基础研究方面主要的研究领域包括近似算法、近似的难度(Hardness of approximation)、图论、组合优化、网络设计与路由以及调度等。其研究人员近两年在这方面发表的文章见文[10]。

4 纵深计算应用领域

正在进行中的大多数纵深计算研究项目直接来自于现实世界中的问题。一部分项目是众所周知的应用,但问题很大或者出现了新的变形,如航线优化问题;另一部分项目是由于出现了以前不存在的新的有效信息而直到最近几年才开始能进行计算的应用,如金融市场建模,构造全球天气模型,解决生物医学、基因学、臭氧耗损以及新药研制中的难题,也包括用于数据挖掘问题等。

目前,纵深计算的应用领域有:

(1)航线优化问题(Airline Optimization):在航班

分派问题上,IBM研究了该问题的结构并设计了改进的整数规划技术;在机组人员调度问题上,IBM首创了全局求解方法并开发了完整的机组人员管理决策支持系统。IBM在求解这些巨大综合模型方面所取得的成功很大程度上依赖于以前在核心优化方法如优化求解库(OSL:Optimization Solutions Library)、Volume算法、用于高性能并行计算机系统结构的Branch-and-Cut-Price(BCP)框架等所进行的投资。通过与金融业及公用事业单位的合作,IBM研究人员在随机优化(stochastic optimization)领域也取得显著进步。有关OSL的内容见文[11]。

(2)保险业收益率分析(UPA,Underwriting Profitability Analysis):IBM研究人员在开发财产与伤亡保险风险管理系统过程中,设计了一个新的基于概率估计(ProbE,Probabilistic Estimation)的数据挖掘框架,相应的算法解决了财产与伤亡保险中的风险管理问题。还在财产与伤亡保险单及索赔数据中发现了用于构造保险风险预报模型的同系风险组。UPA运用概率估计预报建模类库,通过分析有干扰的大型保险数据集,来发现风险描述规则,每一条规则定义了一个确定的风险组及相应的风险级别。为了满足规章的约束条件,风险组无遗漏并互斥。由ProbE所生成的规则从保险精算师的观点来看具有统计严格性、可解释性和可信性,ProbE类库本身是可伸缩、可扩充和可嵌入的。进一步内容可见文[12]。

(3)遗传学中的模式发现(Pattern Discovery in Genetics):现在,已有很多新获得的关于遗传基因和蛋白质方面的信息存储在公共数据库中,这些信息可以解决许多难题,但是从遗传基因级别上理解发生了什么,即哪个基因起什么作用、蛋白质如何起作用,需要极为复杂的方法来分析这么多的基因数据。与此有关的项目可见文[13]和[14]。

(4)Web搜索:在过去的几年中,万维网(WWW)的爆炸式增长使得通过桌上电脑很容易获得的信息量在以几个数量级的速度快速增长着。随之而来的是网络用户面临信息超载(information overload)问题。查找既具有高质量又与所需信息有关的内容变得极为困难,传统的查找方法很容易得到大量低质量而无关的内容,单纯的快速搜索并不好,因为返回上百万条信息可能只需两秒钟,但大多数信息实际却没有意义。对搜索结果适当增加一点分析和计算会得到质量更高的信息。因此,第二代搜索引擎必须具有能集中在最“权威”的文档上搜索的方法,隐含在Web文档中的超链接的丰富结构提供了一种简单有效的方法来处理这些问题。IBM开发的CLEVER搜索引擎组合了几个利用超链接结构的算法,其中的一个算法叫“超文本诱导

的主题搜索”(HITS: Hypertext-Induced Topic Search),以便在 Web 上查找高质量的信息^[2]。

(5) 人员调度(Personnel Scheduling),例如机组人员分派回拉。

(6) 生产计划与调度(Manufacturing Planning and Scheduling)。

(7) 精细范围的天气建模(Fine Scale Weather Modeling) IBM 研制的“雷霆”(Deep Thunder)是一个基于 IBM RS/6000 SP 的高解析度数字天气预报系统,可用于地区性天气预报。

(8) 复杂模型数据库中的相似性匹配(Similarity Matching in Complex Model Databases):许多不同领域的科学研究依赖于对存储在极大数据库中的信息的比较。IBM 研究人员开发的“闪电”(FLASH: Fast Look-up Algorithm for Structural Homology)算法能够对数百万位的信息进行快速排序,并能对相似而不必完全一样的数据进行比较。我们知道,计算机擅长于精确等式的快速判定,比如“ $a=b$ ”,但对于像“找一个类似于 x 的 q ”这样的相似性问题却陷入困境。以前,大多数数据库查询方法都是从数据库开始进行查询并比较每一项,对大型数据库来说这种方法很慢。在 FLASH 中,IBM 研究人员创造了一种叫做“概率索引”(probabilistic index-a algorithm)的算法,该算法只在很可能找到的地方进行匹配搜寻,比如,在字典中查找“xyi:phone”这个词,不是从字典的第一页的“A”节开始,而是直接转到字母“X”节。

此外,纵深计算算法的任何实现都必须具有健壮性和快速性,健壮性可使用户对结果感到可信,快速则使结果具有时效性,这就需要尽可能大的问题集进行测试。因此,IBM 公司搜集形成了从线性规划到快速傅立叶变换等领域的常见问题库,详见文[3]。

5 纵深计算展望

从以上的介绍我们可以看出,在纵深计算的四个要素中,超快计算的硬件是基础,高级算法是核心,高性能软件是保证,领域知识是关键,在解决挑战性应用问题时,四个要素缺一不可。受物理定律、工艺水平等因素的限制,目前,计算机系统性能的提高只能依赖于并行化,即,或者以多处理器系统为依托,或者以多计算系统为依托。近几年来,工作站网络(NOW)显示出很强的优势和发展潜力,机群技术受到广泛的重视和深入的研究,可以说,并行计算技术是研究纵深计算的前提,纵深计算则是并行计算的进一步延伸,在前述纵深计算的研究方向和应用领域中,数据挖掘,可视化、模式发现,相似性匹配以及高效的 Web 搜索等方面更值得并行计算研究人员给予关注和深入研究。

随着社会的发展,并行计算将史无前例地融入社会生活的各个方面,渗透到每一个应用领域,而纵深计算则是这一过程的具体体现。现在,科研人员与商务人员都要经常分析大量的数据,技术计算与商务计算的界限越来越模糊了,纵深计算把商务和科学计算中最好的技术组合在一起,以便发现埋藏在这类数据中的有价值的信息并应用这些信息解决现实世界中的问题。另外,电子商务正在为企业创造能够把大量数据转变为有竞争力的智能和知识的机会,这正是纵深计算的一个用武之地,以前超级计算机主要用于科学计算,今天世界上前 500 台超级计算机中的大多数是应用在商业领域,纵深计算是一类新计算,并且具有很强的跨学科特点,随着研究的广泛深入,纵深计算一定会具有强大的生命力。

参考文献

- 1 Hwang K. Advanced Computer Architecture-Parallelism, Scalability, Programmability. McGraw-Hill Companies, Inc 1993 王鼎兴,沈美明,郑纬民,温冬婵译. 高等计算机系统结构:并行性 可扩展性 可编程性. 北京:清华大学出版社,1995
- 2 FY 1996 Blue Book. September 1995. URL: http://www.hpc.gov/pubs/blue96/section_2_6.html
- 3 Deep Computing Institute. URL: <http://www.research.ibm.com/dci/>
- 4 姜誉,胡铭曾,方滨兴,张宏莉. 纵深计算. 高技术通讯, 2000, 增刊
- 5 IBM. SPLASH: Structural Pattern Localization Analysis by Sequential Histograms. URL: <http://www.research.ibm.com/topics/popups/deep/math/html/p2.html>
- 6 Bioinformatics and Pattern Discovery. URL: <http://www.research.ibm.com/bioinformatics/>
- 7 Journey Management. URL: <http://www.research.ibm.com/math/OpResearch/jml.html>
- 8 Production Resource Management. URL: <http://www.research.ibm.com/pdtr/prm.html>
- 9 Data Explorer. URL: <http://www.almaden.ibm.com/dx/>
- 10 Algorithms and Complexity. URL: <http://www.almaden.ibm.com/cs/k53/algo.html>
- 11 Overview of the IBM Optimization Solutions and Library. URL: <http://ism.boulder.ibm.com/es/oslv2/features/welcome.html>
- 12 Data Abstraction Research. URL: <http://www.research.ibm.com/dar/home.html>
- 13 IBM. Teresas. URL: <http://www.research.ibm.com/topics/popups/deep/math/html/teresias.html>
- 14 IBM. SPLASH. URL: <http://www.research.ibm.com/topics/popups/deep/math/html/pl.html>
- 15 IBM Clever. URL: <http://www.almaden.ibm.com/cs/k53/clever.html>