



加拿大安大略省皇后大学采用并行算法

为何使用 NAG 多核算法库？

加拿大安大略省皇后大学的高性能计算虚拟实验室 (HPCVL) 目前提供所有使用者使用 [NAG 多核算法库](#)。研究股票市场的经济学家可以使用 NAG 函数建立全球资本流动影响模型，大气科学家能够透过函数分析全球气候暖化模型，心理学家可用来建立脑部活动与记忆连动模型，生物工程与计算化学家可以设计复杂的分子模型来开发新的药物，工程师们能够使用这些函数建立人工心脏中的血流模型。这些各种各样的研究类型，都需要一个合适的并行数值算法库，提供大量的数据分析以及繁杂的数学计算。

多核处理

现今多核的计算机已经相当普遍，程序的编写也随之改变。虽然原来串行的程序依然可以在多核的环境中运行，但是这样是很没效率的，而且并不会增快求解的时间。所以调试程序与算法、或者选择不同的算法、又或者找寻更适合多核的算法就变的越来越为重要了。

例如 OpenMP 这样的应用程序开发界面 (API)，就适合在多核环境的共享内存架构中采用，我们可以利用它在多核的环境中进行并行程序的开发。

[NAG 多核算法库](#)全面采用 OpenMP 进行并行函数的开发，并提供完整详实的并行函数手册。

多核计算使用的范畴

多核计算机的程序开发应用已经延伸到桌上计算机了。在小机器上可以透过调用并行函数提升运行的性能，虽然比不上大型集群环境上能够获得的性能，然而我们还是可以取得相对性能的提升。即使是您的笔记本电脑具有多核的环境，若您没有考虑并行处理的程序设计，那么您并未充分运用到您的计算资源。现行的分布式集群环境上采用的都是多核的计算节点，使用者依然能够透过标准的 MPI 接口开发节点内部的多线程计算，调用 NAG 多核函数。也就是说只要 NAG 多核算法库可以被应用在共享内存的环境中，就能够获得并行计算的能力。

应用领域

NAG 的并行函数能够在各种不同程序或应用系统中提升其运行性能，应用的数值领域相当广泛，例如：稠密与稀疏线性代数、快速傅立叶变换、随机数生成、积分、偏微分方程、插值、曲线与曲面拟合、相关性与回归分析、多变量方法、时间序列分析、选择权定价等等。

硬件厂商相继推出多核系统

各资讯厂商总是持续不同领域的发展，从芯片生产到开发超级计算机，如今多核处理器的设计已然是他们至为重要的部分。多核的程序设计方法对以 Intel 及 AMD 处理器为架构的系统，或者是高端的 Sun、Cray、HP 或者是 IBM 的机器都将会带来具体的运行成效。

皇后大学中的并行算法库

皇后大学的研究人员与程序设计人员目前可以同时使用串行与并行版本的 NAG 函数。计算虚拟实验室计算支持组的 Hartmut Schmider 博士说道：“NAG 算法库在多核的架构下运行的非常好。这当然是基于值得信赖的并行算法。也由于串行与并行函数有一致的接口，让用户能够在多核的环境中不需任何额外的程序开发时间就能直接转换为并行程序。总而言之，当面临复杂的计算问题时，使用 NAG 函数总能够获得相当显著的速度优势。”

NAG 算法库的未来及其它并行研究

[英商纳格资讯](#)未来仍将持续 NAG 算法库的开发，尤其针对多核与多处理器的架构，将一直会开发最为合适的算法。除此之外，NAG 目前正积极进行寻找下一世代的并行技术研究计划，例如：[通用图形处理器 \(GPGPU\)](#) 的研究。