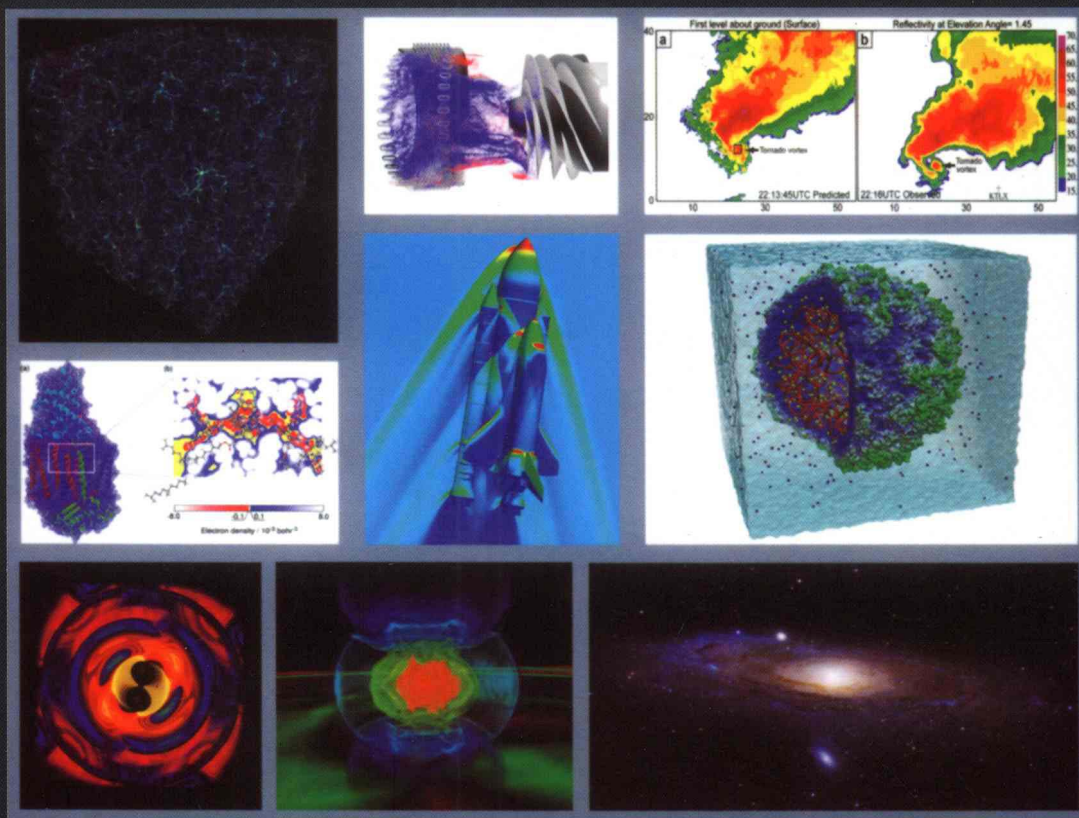


Petascale Computing
Algorithms and Applications

面向千万亿次计算 的算法与应用



David A. Bader 著 都志辉 等译

清华大学出版社



Petascale Computing
Algorithms and Applications

面向千万亿次计算 的算法与应用

David A. Bader 著 都志辉 等译

清华大学出版社
北京

Petascale Computing: Algorithms and Applications/by David A. Bader/ISBN: 9781584889090

Copyright© 2008 by CRC Press.

Authorized translation from English language edition published by CRC Press, part of Taylor & Francis Group LLC; All rights reserved; 本书原版由 Taylor & Francis 出版集团旗下 CRC 出版公司出版, 并经其授权翻译出版, 版权所有, 侵权必究..

Tsinghua University Press is authorized to publish and distribute exclusively the **Chinese(Simplified Characters)** language edition. This edition is authorized for sale throughout **Mainland of China**. No part of the publication may be reproduced or distributed by any means, or stored in a database or retrieval system, without the prior written permission of the publisher. 本书中文简体翻译版授权由清华大学出版社独家出版并仅限在中国大陆地区销售. 未经出版者书面许可, 不得以任何方式复制或发行本书的任何部分.

Copies of the book sold without a Taylor & Francis sticker on the cover are unauthorized and illegal.

本书封面贴有 Taylor & Francis 公司防伪标签, 无标签者不得销售.
版权所有, 侵权必究. 侵权举报电话: 010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

面向千万亿次计算的算法与应用/(美)巴德尔(Bader, D. A.)著;都志辉等译. —北京: 清华大学出版社, 2008. 8

书名原文: Petascale Computing: Algorithms and Applications

ISBN 978-7-302-17722-7

I. 面… II. ①巴… ②都… III. 电子计算机—算法理论 IV. TP301.6

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 075232 号

责任编辑: 龙啟铭

责任校对: 徐俊伟

责任印制: 王秀菊

出版发行: 清华大学出版社

地 址: 北京清华大学学研大厦 A 座

<http://www.tup.com.cn>

邮 编: 100084

社 总 机: 010-62770175

邮 购: 010-62786544

投稿与读者服务: 010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质 量 反 馈: 010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

印 刷 者: 北京市人民文学印刷厂

装 订 者: 三河市李旗庄少明装订厂

经 销: 全国新华书店

开 本: 185×260 印 张: 23.5

字 数: 572 千字

版 次: 2008 年 8 月第 1 版

印 次: 2008 年 8 月第 1 次印刷

印 数: 1~3000

定 价: 49.00 元

本书如存在文字不清、漏印、缺页、倒页、脱页等印装质量问题, 请与清华大学出版社出版部联系调换。
联系电话: 010-62770177 转 3103 产品编号: 029057-01

译者序

我们很荣幸能把这本关于千万亿次计算的第一本图书的翻译版奉献给广大的高性能研究和相关领域的朋友们。

本书有如下几个特点。

- 前沿：本书所提供的研究成果，是世界范围内长期从事高性能计算研究并且已经取得丰硕成果的组织 and 团体，针对千万亿次计算这一挑战性的新课题，从典型应用、体系结构、模型、算法、软件与工具、测试与分析等多个方面所取得的最新研究成果的集中展示。这些研究人员，活跃在本领域研究的最前沿，本书的内容，是他们最新相关研究成果的结晶。
- 具体：本书的内容虽然前沿，但是研究的问题，提出的方法和技术却非常具体，因为它是针对大量典型而重要的实际应用展开的，是基于大量实践工作得到的具体经验与成果的总结，因而对高性能计算及其相关领域的研究具有非常直接的指导和借鉴作用。
- 丰富：本书几乎涵盖了千万亿次计算研究的各个主要方面。应用需求是推动千万亿次计算迅速发展的主要动力，因此本书的不少章节从不同的应用领域介绍了对千万亿次计算的实实在在的需求，使我们可以切实感受到千万亿次计算将会给我们开辟出的美好前景。但是本书又不是仅仅局限于应用的层次，它还从千万亿次计算涉及到的各个技术层次，深入探讨了各种关键技术问题，这样就把千万亿次计算的研究推向了一个全面发展的新阶段。

希望本书的出版能够把我国千万亿次高性能计算及其相关领域的工作向深入和普及两个方向更推进一步，使得我国千万亿次计算方面的工作进入一个新的阶段。

本书能够在短时间内顺利出版，呈现在读者地面前，是和清华大学出版社、Taylor & Francis Group以及DAVID BADER教授几方面的全力支持分不开的。在我提出翻译该书的意向后，清华大学出版社具体负责的龙启铭编辑专门到我的办公室和我一起讨论关于翻译和出版的各种具体问题，并在整个翻译出版全过程中提供了不间断的支持和帮助；Taylor & Francis Group把与此书翻译出版相关的工作赋予了很高的优先级来处理，相关工作人员积极配合；DAVID BADER教授在合同签订之前，就精心整理了该书的全部电子版材料给我，使得我们的翻译工作和合同等相关程序的处理可以同步进行，并积极与美国方面的出版社联系解决出版过程中的各种问题，这些都大大加快了本书的出版进程。我们都清楚，越早出版本书，本书能够发挥的作用就越大，就可以更早地为相关领域和相关人员的工作提供帮助。本书的翻译工作还受到国家自然科学基金（No. 60773148和No.60503039）的资助，在此一并表示感谢！

都志辉全面负责本书的翻译工作，在具体分工上，都志辉翻译了第1章以及前言、内容介绍等；刘小康翻译了第2、10章；张天乐翻译了第3、4章；叶银翻译了第5、6、7章；程志力翻译了第8、9、11章；郝松翻译了第12、13、15章；王坤翻译了第14章；王曼翻译

了第16、17章；王晓英翻译了第18章；柴云鹏翻译了第19章；张伟翻译了第20、21章；钟锋翻译了第22、23、24章。参加本书翻译的人员比较多，叶银在大家翻译、校对的组织、协调方面做了大量的工作。

由于本书涉及的内容不仅很新，而且很广，这给翻译工作设置了不少障碍，有时为了准确、全面地把原意反映出来，常常需要查阅大量的相关文献，多次反复讨论，在准确的基础上力求通顺并符合中文表达习惯，虽然如此，由于译者水平有限，不当之处，恳请读者来信批评指正。

Chapman & Hall/CRC 出版社计算 科学系列图书介绍

计算科学通过在计算机上进行建模和仿真来科学地研究物理过程，它已成为继理论与实践之后，可以对理论与实践方法进行补充与扩展的第三种被广泛接受的支撑科学研究的支柱，这种观点大概首先出现在18世纪中期。在许多不同的领域，比如天体物理学，航空学，化学，气候建模，燃烧学，宇宙学，地震预测，透视影像，材料，纳米科学，石油开发，天气预测等，它逐渐取得了令人瞩目的成果。今天，我们已经进入21世纪第一个十年的中期，信息技术革新的步伐在加速前进，这就为计算科学与工程提供了很多机会。今天的计算科学与工程（CSE, Computational science and engineering）可以用于推进所有的科学与工程研究领域，而未来的许多领域，只有通过高级计算技术和平台才能有效地开展研究工作。

使用高性能计算平台进行研究所取得的进展，一方面和计算机硬件的进展密切相关，另一方面和软件与算法的发展密切相关，在研究人员通过使用这些技术取得研究成果的过程中，这两个方面具有同等重要的作用。随着90年代中期高度并行的计算平台的推出，在最后的十年内CSE的面貌发生了一些微妙的变化。由于大规模硬件系统的高复杂性和建模软件混杂度的提高，包括多物理和多尺度模拟，CSE 计算科学与工程逐渐成为一种团队的科学。今天CSE最成功的实践者是一些多学科的团队，它既包括数学家，也包括计算机科学家。这些团队已经建立起了一整套的软件基础设施，包括支撑基础设施，可以在原始开发者不参与的情况下，也可以对大量程序代码进行完善地维护与扩展。

计算科学与工程在未来研究成果的获取和经济增长的过程中的地位非常重要，“计算科学对于复杂问题每一部分的解决都是不可或缺的，从传统的科学与工程领域到比如国家安全，公共健康，经济革新等一些关键领域”。这是美国总统信息技术顾问委员会最近一个报告的主要观点（来自美国总统信息技术顾问委员会所著的，“计算科学：保证美国的竞争力”部分，阿林顿，弗吉尼亚，信息技术研究与发展国家协调办公室，2005年第二页）。

为了能够在专业领域活动中提供最新的研究和应用成果，随着计算科学与工程的快速发展，它变得越来越重要。因此我很高兴接受Chapman & Hall/CRC出版社的邀请作为这个系列的编辑来组织计算科学与工程系列图书的编撰工作。本系列图书的目的是通过广泛出版教科书、参考书和手册，来反映在计算科学领域新的发展和应用。通过集成数学，统计学，和计算方法与技术，本系列包括的内容对于学生、研究人员和专业人员以及交叉学科研究者和哪些使用计算技术与计算科学的实践者，将非常具有吸引力。我们非常鼓励在此系列图书中包括一些具体的例子和应用。这个系列图书的范围包括，但是又不局限于如下方面，它们是科学计算，并行与分布式计算，高性能计算，网格计算，集群式计算，异构计算，量子计算以及它们在科学领域，比如天体物理，航空学，生物，化学，气候模型，燃烧，宇宙学，地震预测，影像，材料，纳米科学，石油开采，天气预测等的应用。

带着这一目标，我很高兴地介绍本系列的第一本书《面向千万亿次计算的算法与应用》这本书，它是由我的同事与好朋友David Bader负责编辑的。2006年2月在Schloss Dagstuhl 召

开的一个研讨会导致了本书的酝酿与出版，使它不仅成为本系列图书的一个完美的开端，而且大概应该也是千万亿次计算方面研究的第一本书。高性能计算一个令人振奋的新阶段已经开始，当我们将要步入千万亿次计算时代的时候，本书的内容将会成为未来前沿性研究一个非常理想的开端。他们总结了2007年在算法和应用方面的最新知识，正好在第一个千万亿次系统出现之前出版。正如同千万亿次计算将会为计算科学开辟一个全新和史无前例的研究机会一样，我希望本书的出版，将会把这一新的系列对计算科学与工程方面的理解推向更加深入，让人们能够更加认识和欣赏计算科学与工程领域的研究成果。

伯克利，2007年5月

Horst Simon博士

系列编辑

LBNL实验室计算科学部副主任

前言

在过去的几十年内，在高性能计算应用、算法和体系结构的支持下，在科学、工程和社会领域发生了许多突破性的进展。这些强有力的工具为研究人员、教育工作者和实践工作者提供了这样的能力，就是通过计算，可以把从全球收集获得的数据，转换为解决我们社会最具有挑战性问题的解决方案。

持续推动高性能计算发展的一支重要的力量是针对“前沿性里程碑”问题产生的一些社团联盟，比如它们会提出代表这一领域下一阶段进展的技术目标。在19世纪90年代，高性能计算组织希望实现万亿次（每秒 10^{12} 的浮点操作）的计算能力，万亿次计算导致了一些新的发现，比如设计新的药物来对抗艾滋病和其他的疾病；对自然现象的仿真可以达到前所未有的精度，比如地震和飓风；对大系统，比如宇宙，和小系统，比如比细胞还小的一些系统有了更好的理解；现在我们将要在千万亿次（每秒 10^{15} 的浮点操作）级别的机器上进行计算。一些研究组织正在考虑亿亿次（每秒 10^{18} 的浮点操作）级别的计算将会是什么样子，他们处在这一研究的早期阶段。

在走向“下一个前沿计算”的过程中，一个假设就是高性能计算体系结构的下一个研究前沿将会提供新的极大的容量和能力，这将使得以前需要大量资源但是又得不到满足的用户直接受益，同时对其他的用户将带来长期的裨益。但是大规模高性能计算用户都知道，高效使用前沿超级计算系统能力，同不断增加系统容量和能力相比，如果不是同等重要，就是重要性更高，我们需要投入大量的时间、人力、软件和硬件基础设施来充分利用这些非同寻常的系统。经验表明，通过开发可扩展的算法，模型，仿真，分析，库和应用组件，可以充分利用这些前沿系统所提供的容量和能力，因此它与建造和部署该前沿系统本身一样，是非常具有挑战性的工作。

对于未来几年内可以支持千万亿次操作的应用程序代码，不管用什么样的处理器技术，将会需要几十万个甚至更多的处理器核心。目前，几乎还没有可以很容易扩展到这种规模的高性能计算程序代码，大量的程序代码开发工作对于挖掘新的千万亿次系统的潜能是非常重要的。扩展到千万亿次系统涉及的工作包括：提高物理模型，数学抽象，近似和其他的应用组件。我们需要提高各种解决方案的算法来增加结果的准确性。输入数据集需要在分辨率上进行提高（产生更多的数据），或者是用于测量的输入数据的精度需要提高。每一个应用或者算法的提高都会给开发千万亿次代码带来实质性的挑战，会在新应用执行得到的领域结果中推动新的计算机科学的发现。

本书是那些在千万亿次计算领域前沿性研究成果的结晶。作者试图通过汇集在高性能计算和计算科学领域最成熟和已积累丰富经验的应用的最新成果，来解决在开发千万亿次系统应用代码中的一些挑战性问题，这些应用能够在新的千万亿次系统产生和部署之前，就提前针对其体系结构的特点来进行开发。开发千万亿次应用将会需要丰富的关于千万亿次系统硬件和系统软件方面的知识，我们需要大量的时间来做扩展，测试，评估以及优化千万亿次代码、库、算法、系统软件的工作，所有这些工作都将基于即将构建的新系统来进行。

对于高性能计算来说，这是一个激动人心的时代，这个时代将会在一个新的规模和尺

度上产生大量史无前例的新发现，这些发现将会对科学和社会带来切实的好处。本书可以让你对千万亿次应用和算法前沿性挑战性研究工作的第一次浪潮有一个概观，为目前和未来的千万亿次研究提供非常必要的基础。

Francine Berman博士
圣地亚哥超级计算中心
2007年5月

概 述

科学通过理论与实验，综合了集体的智慧与知识，已经历了几个世纪的挑战与洗礼。但是，在上半个世纪，整个科学研究群体逐渐接受一种根本性的关于科学方法的改变，那就是除了理论与实验，计算被称为是支撑科学发现的第三个支柱。计算科学可以使我们的研究由于受经济或者其他条件的限制不能进行实验的现象，评估复杂的模型或者管理大量的数据集，进行跨学科的模式处理，支持各种商业与工程实践。高性能计算支撑的崭新平台——赛百基础设施（cyberinfrastructure）开始用于解决美国以及世界的重要难题，比如自然环境的持续发展问题，主要是通过降低二氧化碳的排放和对化石能源的依赖，提高人类健康和生活条件，理解生命从分子与系统到组织与人类的机制，阻止疾病的扩散和传播，预测并跟踪灾难天气，从自然和人为灾难中恢复过来，维护国家安全，掌握纳米技术。像宇宙的形成，生命的演化，物质的特性等这些最基本问题的回答都需要计算的支持。

认识到赛百基础设施对于研究创新和提高竞争力的重要性，一些国家现在开始了“以建造世界最强大计算机为目的的新一轮的军备竞赛”（John Marko, 纽约时报, 2005年8月19日）。据估计将在2008到2012年出现的千万亿次计算机，可以执行 10^{15} 次每秒运算，速度几乎比今天最快的超级计算机还要快一个数量级。实际上，已有几个国家正在进行一场更先进的竞争，看谁可以在最近的5年内研制出1亿亿次或者更高速度的高性能计算机系统。

千万亿次体系结构毫无疑问将成为工程技术领域的一个壮举，但是为这些领先的超级计算机系统设计具有很好扩展性的算法与应用，无疑将是更大的挑战。本书有24章，作者是世界上一些最早考虑并且已经从事千万亿次计算系统设计应用和软件的研究人员。本书的内容包括与此相关的几个重要领域：大规模并发扩展算法设计，计算科学与工程应用，千万亿次计算工具，编程方法论，性能分析，科学可视化等。

本书的一些想法来自于2006年2月在德国Schloss Dagstuhl 举办的一个长达一个星期的研讨会，讨论的题目是“千万亿次计算的体系结构与算法”，是由Ulrich Riide, Horst D. Simon和Peter Sloot组织的。这个研讨会重点讨论的是如何把高端模拟作为研究计算科学与工程应用的重要工具。为了能够成为科学研究的有用工具，这些模拟必须要基于准确的数据过程描述，因此它们一般从数学公式开始，比如偏微分方程组，积分方程组，图论或者组合优化。由于科学与工程问题的复杂性在不断增长，因此对计算的需求也在持续不断地增长。但是大多数目前可得的硬件、软件、系统和算法主要是集中在商业应用或者是小规模科学与工程问题，不能满足最先进的科学与工程工作中高端计算的需求。这个研讨会主要关注千万亿次科学应用中的关键问题，它们往往是高度计算与数据密集型的应用，其需求在今天典型的集群式环境下无法得到满足，即使是目前最大的超级计算机也不堪重负。

本书的一些章节是Dagstuhl研讨会的作者撰写的，另外的一些受邀编撰的章节则覆盖了更广泛的千万亿次应用。第1章让我们认识到有效使用千万亿次系统需要在应用中开发出很高度的并发性，并且考察了6个完整程序的性能特征，这6个应用程序可以作为第一代应用的绝佳候选对象，运行在早期的千万亿次系统上。第2章讨论了一些极具挑战性的计算科学与工程应用，它们肩负着美国航空航天局（National Aeronautics and Space Administration, NASA）的重要使命。第3章和第4章的重点是讨论多物理模拟，使用的是

在美国LLNL国家实验室目前最快的计算机来进行计算的。对于Uintah程序，结合了流体和材料点（粒子）的方法，分别采用了可扩展自适应的细分方法。第5章讨论了Enzo程序，它用于模拟宇宙演化，从单个的银河系到一组或者一簇银河群，甚至更大，对于两个最神秘物质：黑物质和黑能量，它提供了一个可以直接用于研究它们的例程。第6章描述了在中尺度和对流尺度进行数值天气预测的方法，用于捕捉天气事件，比如洪水，龙卷风，冰雹，强风，闪电，飓风，和冬天的风暴等。在第7章讨论了千万亿次天气科学研究中的CCSM（Community Climate System Model）天气系统模型与软件。第8章转到了千万亿次软件的领域，讨论了基于千万亿次规模的分布式系统网格计算模拟银河系的多物理应用。第9章、10章和11章从不同的方面，讨论了在千万亿次系统上进行分子动力学模拟的问题。第9章是基于很流行的NAMD程序，在高度并行的系统上用Charm++（在第20章提供了一个千万亿次的软件框架）模拟蛋白质和分子系统。第10章给出了用于专门目的的硬件方案，称为MD-GRAPE系统，该系统特意为解决该问题而进行了裁减。第11章考察了几个重要的候选程序，这些程序可以用于在千万亿次计算机上进行生物分子模拟，这些模拟可以在更长的时间尺度上预测蛋白质的结构、动力学特性和功能。大规模的组合算法可以解决许多不断涌现的计算挑战问题，在第12章给出了几个多线程图论算法，可以用于许多不同的应用领域。由于千万亿次系统会包括非常多的不同组件，第13章给出了许多重要的领域，可以从软件和算法上来提高应用的可靠性，比如无盘检查点和消息传递接口MPI库的容错实现等。第14章描述了一个新的超级计算机集群，称为TSUBAME（Tokyo-Tech Supercomputer and Ubiquitously Accessible Mass-storage Environment），安装在日本的东京技术研究所。考虑到大规模的系统是由许多SMP（symmetric multiprocessor）对称多处理器结点构建起来的，第15章给出了千万亿次计算机的编程方法论，比如把MPI与OpenMP结合起来使用等。一般来说，测试基准程序需要知道高性能计算系统的性能瓶颈，第16章讨论了APEX-Map，它可以用于评价当前和未来系统的性能与吞吐率。为了充分挖掘千万亿次系统的巨大能力，在编程人员的手边需要有一些不同类型的可以处理千万亿次问题的工具，可以通过这些工具来洞察千万亿次大型系统的内部情况。在第17章给出了几种类型可以用于千万亿次系统性能分析工具的详细总结。第18章和19章讨论了有限元方法，它是一种在超级计算机上求解偏微分方程组的非常流行的方法。第18章介绍了一个可扩展的多层次有限元求解器，被称为ParExPDE，它使用表达式模板为千万亿次计算系统产生高效的代码，但是19章描述的是产生高效有限元代码高级产品的软件框架。Charm++ 是一个并行编程系统，在第20章进行了总体介绍，其目标是提高编程人员在编写高度可扩展应用代码时的产出。该章也展示了Charm++支持的几个计算科学与工程应用。在第21章，描述了一个可以嵌入通用目标语言中提高科学应用编程人员性能与产出的标注语言。当我们使用千万亿次系统的时候，在并行编程中的局部性管理是一个非常值得关注的问题，第22章对一些新的高产出语言进行了讨论，比如Chapel，它可以通过具有全局视野，但是又局部感知的多线程编程模型来支持通用的并行计算。第23章给出了当我们随着体系结构加速器的使用和其他技术倾向转向千万亿次系统时关于体系结构和编程问题的历史回顾。最后，在第24章讨论了Cactus，它是一个数值相对论天体物理学框架，用于模拟从黑洞到伽马射线爆发的各种物理事件。

除了本书的直接撰写者，我还必须特别感谢这些人，他们给了我很大的影响，在完成此书的过程中发挥了很大的作用。首先需要感谢Uli R. Ude, Horst Simon, 和Peter Sloot，因

为他们组织了在Dagstuhl的研讨会，在该研讨会上大家花了整整一个星期的时间围绕千万亿次计算的挑战性问题进行了激烈的讨论，正是这一具有开创性的会议给了我完成此书的机会。我还要特别感谢Horst，他是Chapman & Hall/CRC计算科学系列图书的编辑，不仅帮助我使得此书成形，而且毫不保留地与我分享他在计算科学方面的深入理解和经验，给了我专业的帮助与指导，这种友情很让我感动。Horst在计算科学方面的贡献，在高性能计算方面丰富的知识以及在这一团体中的领导作用都给了我很大的启发和促进。

没有Randi Cohen 有力的支持与帮助，此书的出版是不可能的，她是Chapman & Hall/CRC 出版社计算机科学图书的专职编辑。在她的推动下，此书从概念变成了实在的图书，在这一过程中，她一直是一位非常好的同事和朋友。她承担了琐碎乏味的大量工作，使我的组织工作变得比较容易和简单，我感谢她。她友善的品质使得此书的撰写编辑工作变得很有趣，同时她的建议也大大提高了此书的质量。

我要深深感谢我在佐治亚理工学院研究组的成员（按照字母顺序）：Virat Agarwal、Aparna Chandramowlishwaran、Manisha Gajbe、Seunghwa Kang、Kamesh Madduri以及Amrita Mathuriya。他们是一组非常优秀的研究生团队，他们帮助我完成了此书的不少准备工作，比如组织章节，阅读不同章节的初稿，修改文字表达等。

最后，我要感谢我的妻子Sara Gottlieb还有我的女儿Sadie Rose Bader-Gottlieb，当我在准备此书的过程中不得不把工作引入并侵占了家庭活动时间的时候，感谢她们的理解。

高性能计算将会在21世纪支持科学与工程产生突破性的进展，希望此书能够激发大家去解决一些计算方法方面的重大挑战问题，通过有效地使用千万亿次计算，从根本上来帮助并改善社会，保护我们的环境，提高我们对世界的理解。

David A. Bader博士

佐治亚理工学院，2007年5月

目 录

第 1 章 千万亿次计算科学应用的性能特征.....	1
1.1 介绍.....	1
1.2 测试的各种体系结构.....	2
1.3 科学应用概述.....	4
1.4 GTC: Particle-in-Cell 磁融解.....	5
1.5 ELBM3D: 晶格玻耳兹曼流体动力学.....	9
1.6 Cactus: 通用的相对天体物理学.....	11
1.7 PARATEC: 材料科学的第一原理.....	14
1.8 HyperCLaw: 双曲 AMR 气体动力学.....	17
1.9 总结与结论.....	20
1.10 致谢.....	21
参考文献.....	22
第 2 章 千万亿次的计算对 NASA 未来使命的影响.....	24
2.1 介绍.....	24
2.2 Columbia 超级计算机.....	24
2.3 航空宇宙分析及计算.....	25
2.3.1 方法论.....	25
2.3.2 结果.....	26
2.3.3 NASA 使用千万亿次计算的好处.....	27
2.4 推进子系统分析.....	28
2.4.1 方法.....	28
2.4.2 结果.....	28
2.4.3 千万亿次计算给 NASA 带来的益处.....	30
2.5 飓风预测.....	30
2.5.1 方法.....	31
2.5.2 结果.....	32
2.5.3 千万亿计算对 NASA 的益处.....	32
2.6 瓶颈.....	33
2.7 总结.....	34
参考文献.....	34
第 3 章 多物理模拟与千万亿次计算.....	36
3.1 引言.....	36
3.2 下一代超级计算机.....	36
3.3 适用于大规模并行机的编程模型.....	37
3.3.1 新型并行语言.....	38
3.3.2 MPI-2.....	38

3.3.3	协作式并行	38
3.3.4	协作式并行的应用实例	39
3.4	多尺度算法	40
3.4.1	并行的多重网格方法	40
3.4.2	ALE-AMR 离散化	41
3.4.3	离散-连续统混合算法	42
3.5	目前及将来的应用	43
3.5.1	万亿次仿真的技术现状	43
3.5.2	通过协作并行进行多物理模拟	45
3.6	未来展望	46
3.7	致谢	46
	参考文献	46
第 4 章	针对 Uintah 多物理程序代码的可扩展并行 AMR 算法研究	48
4.1	前言	48
4.2	自适应格网优化	49
4.3	Uintah 程序框架	51
4.3.1	仿真组件	52
4.3.2	负载均衡器	52
4.3.3	调度器	52
4.4	格网重构器	53
4.5	提高性能	55
4.6	将来的工作	56
4.7	致谢	57
	参考文献	57
第 5 章	使用 Enzo 对宇宙进化进行仿真	59
5.1	宇宙结构的形成	59
5.2	Enzo 的编码	60
5.2.1	物理层建模和数值算法	60
5.2.2	自适应格网细化	61
5.2.3	实现	62
5.2.4	并行化	63
5.2.5	快速的邻居格网搜索	63
5.2.6	Enzo 的 I/O	64
5.3	在万亿次平台上的性能和可扩展性	65
5.3.1	单格网应用	65
5.3.2	AMR 应用	65
5.3.3	并行扩展	67
5.4	将 Enzo 运行在万亿次计算机平台上	69
5.4.1	新的 AMR 数据结构	69

5.4.2 混合型并行	69
5.4.3 天体运动和宇宙射线之间的隐性关联	70
5.4.4 内部数据关系分析工具	70
5.5 致谢	71
参考文献	71
第 6 章 重大影响天气现象数值预测：千万亿次计算的重要动力	73
6.1 引言	73
6.2 计算方法和工具	75
6.2.1 区域性天气预测模型	75
6.2.2 千万亿系统中的内存和性能问题	75
6.2.3 分布式内存并行和消息传递	76
6.2.4 负载均衡	78
6.2.5 时间消耗和可扩展性	78
6.2.6 NWP 系统中其他重要的组件	79
6.2.7 其他问题	80
6.3 NWP 实际应用例子	81
6.3.1 大规模的天气预报	81
6.3.2 高分辨率的龙卷风仿真	82
6.3.3 通过观测现象对龙卷风进行预测	82
6.4 数值天气预报的挑战和需求	83
6.5 总结	84
6.6 致谢	84
参考文献	84
第 7 章 千万亿次气象科学应用的软件设计	87
7.1 介绍	87
7.2 气象科学	88
7.3 千万亿次计算机的体系结构	88
7.4 区域气象系统模型 CCSM (Community Climate System Model)	90
7.4.1 当前 CCSM 概述	90
7.4.2 区域大气模型 CAM (Community Atmosphere Model)	91
7.4.3 并行海洋程序 POP (Parallel Ocean Program)	93
7.4.4 区域陆地模型	95
7.4.5 社区海洋冰川模型	96
7.4.6 模型的耦合	96
7.5 总结	97
7.6 致谢	98
参考文献	98
第 8 章 迈向分布式千万亿次计算	102
8.1 引言	102

8.2	网格计算.....	103
8.3	基于网格的千万亿次计算.....	104
8.4	虚拟银河.....	105
8.4.1	银河的多物理学模型.....	106
8.4.2	银河仿真的性能模型.....	108
8.4.3	千万亿次虚拟银河仿真.....	109
8.5	讨论与总结.....	110
	参考文献.....	111
第 9 章	千万亿次计算时代的生物分子建模.....	115
9.1	引言.....	115
9.2	NAMD 的设计.....	116
9.2.1	混合分解.....	116
9.2.2	动态负载平衡.....	117
9.3	面对千万亿次的挑战与所需的改进.....	117
9.3.1	目前的性能.....	118
9.3.2	在未来千万亿次机器上的性能.....	119
9.3.3	协处理器加速.....	119
9.4	生物分子应用.....	120
9.4.1	水通道蛋白.....	120
9.4.2	钾通道.....	121
9.4.3	病毒.....	122
9.4.4	核糖体.....	122
9.4.5	色素体.....	122
9.4.6	BAR 域囊泡.....	123
9.5	总结.....	123
9.6	致谢.....	123
	参考文献.....	124
第 10 章	用于分子动力学模拟的千万亿次计算机.....	126
10.1	介绍.....	126
10.2	MDGRAPE-3 的硬件.....	127
10.3	MDGRAPE-3 进行的计算.....	128
10.4	MDGRAPE-3 的芯片.....	129
10.4.1	力计算流水线.....	129
10.4.2	粒子 j 的内存和控制单元.....	130
10.4.3	芯片说明.....	132
10.5	系统结构.....	133
10.6	MDGRAPE-3 的软件.....	135
10.7	MDGRAPE-3 的性能.....	138
10.8	总结和展望.....	140

10.9 致谢.....	141
参考文献.....	141
第 11 章 在千万亿次超级计算机上进行生物分子仿真	144
11.1 引言.....	144
11.2 机遇.....	146
11.2.1 研究更大生物分子系统的能力	146
11.2.2 研究更长时间范围的能力	147
11.2.3 混合量子与经典仿真	149
11.2.4 更精确的仿真	150
11.3 挑战.....	150
11.3.1 在大于 100K 数量的处理器上扩大生物分子模拟代码的规模	150
11.3.2 适应硬件的变化	152
11.3.3 容错性	154
11.3.4 包含可配置计算的多范型硬件	154
11.3.5 千万亿次计算带来的新的仿真方法	155
11.4 总结和展望.....	155
11.5 致谢.....	156
参考文献.....	156
第 12 章 处理大规模图的多线程算法.....	159
12.1 引言.....	159
12.1.1 图运算中的问题	160
12.1.2 分布式存储图运算的扩展局限性	160
12.2 Cray MTA-2 平台	161
12.2.1 并行性表示	161
12.2.2 对细粒度同步的支持	162
12.3 案例分析：最短路径算法.....	162
12.3.1 初步分析	163
12.3.2 Δ -分步算法	164
12.3.3 Thorup 算法.....	165
12.3.4 实验结果	167
12.4 案例分析：连通分量.....	170
12.4.1 传统 PRAM 算法	171
12.4.2 Kahan 的多层次算法.....	171
12.4.3 性能比较	171
12.5 结论.....	172
12.6 致谢.....	173
参考文献.....	173
第 13 章 千万亿次计算中的灾难恢复算法研究	176
13.1 FT-MPI：一个实现容错功能的 MPI.....	177