

高等院校计算机教材系列

并行计算 应用及实战

王鹏 吕爽 聂治 谢千河 等编著

为教师提供电子课件



机械工业出版社
China Machine Press

高等院校计算机教材系列

并行计算

应用及实战

王鹏 吕爽 聂治 谢千河 等编著



机械工业出版社
China Machine Press

本书全面讲述了从事并行技术研究及并行程序设计开发所需要的基本知识,包括并行系统的构建、并行程序的设计、并行系统的性能测试、机群监控系统的设计及并行算法设计。本书面向实际应用、贴近实战,使读者能够亲身感受并行计算技术的魅力。

本书可以作为从事并行技术研究、设计和开发的教师、研究人员和开发人员的重要参考书,也可以作为高等院校计算机及相关专业的高年级本科生及研究生的并行技术课程的教材。

版权所有,侵权必究。

本书法律顾问 北京市展达律师事务所

图书在版编目(CIP)数据

并行计算应用及实战/王鹏等编著. —北京:机械工业出版社, 2008.10
(高等院校计算机教材系列)

ISBN 978-7-111-24022-8

I. 并… II. 王… III. 并行算法—高等学校—教材 IV. TP301.6

中国版本图书馆CIP数据核字(2008)第144653号

机械工业出版社(北京市西城区百万庄大街22号 邮政编码 100037)

责任编辑:王 玉

北京慧美印刷有限公司印刷·新华书店北京发行所发行

2009年1月第1版第1次印刷

184mm×260mm·11.25印张

标准书号:978-7-111-24022-8

定价:32.00元

凡购本书,如有倒页、脱页、缺页,由本社发行部调换

本社购书热线:(010) 68326294

前 言

历史发展历程证明，人类总是在寻求最佳的问题解决方法。随着科学技术的发展，各科学及应用部门对计算机的依赖性越来越大，对计算机的性能也提出越来越高的要求，大规模的数值运算早已不再是科研部门的专利，银行、游戏娱乐行业等都成为大规模计算的重要客户。在这样的需求背景下，人们基于对下面两方面的认识，促成了并行计算技术的产生与发展。

第一，芯片技术近几十年的发展逐渐达到物理极限，芯片的量子效应也开始出现，想大幅度提高单个芯片的计算能力面临很大的技术困难，而使用多台处理机以一定方式连接起来共同求解一个问题的并行计算机是解决大规模计算问题的一个有效途径。通过采用并行计算技术，可以使我们在现有芯片制造技术的情况下快速提升计算能力，满足日益发展的大规模计算需求。第二，同时性与并行性是客观物质世界普遍存在的属性，很多计算问题都可以划分为能够并行计算的多个子任务。

并行计算是针对一个具体问题，利用它内在的并行性，设计并行算法，将其分解为相互独立、但彼此又有一定联系的若干个子问题，再分别交给各个处理机，由所有处理机按照并行算法完成初始应用问题的求解。这是一种达到高性能计算的手段，能够将计算能力从单个处理器扩展到多个处理器。在这里我们要和高性能计算这一概念相区别。高性能计算是指运算速度快、性能高、处理能力强的一类计算机，它提供当前最先进的计算能力，以支撑人们理解和解决复杂的计算问题。并行计算技术是实现高性能计算的一种主要方式。

并行计算技术从产生到现在，经历了几十年的发展，其应用领域从科学及工程应用的计算模拟，到商业应用的数据挖掘及事务处理等，并对这些领域产生了巨大的影响。并行计算技术高效的处理能力极大地增强了人们进行科学研究的能力，加快了把科学技术转化为生产力的过程，推动着当代科学计算技术向纵深发展。并行计算技术现在已成为计算机科学领域的一个重要研究方向，为国防建设和国民经济发展做出了重大贡献。通过本书的学习，读者将能够亲身感受并行计算技术的魅力。

从20世纪90年代开始，我国的并行计算专家先后出版了许多与并行计算相关的书籍，这些书籍介绍了并行机体系结构模型和并行算法设计，但很少对并行计算平台（例如机群）的具体搭建、测试和监控过程以及并行计算在其他先进技术领域的具体应用进行系统而详细的介绍。为此我们编写了本书。本书适合具备一定计算机技术基础知识、想在并行计算领域有所成就的读者，特别适合从事并行系统设计和开发的工程技术人员阅读。读者通过学习本书，不仅能够了解并行计算技术的基础知识，而且可以在有限的硬件条件下实现并行程序及并行系统的设计和开发。

全书从内容上分为两部分：基础篇与应用篇。

基础篇包括第1~6章，主要对并行计算技术的发展、应用以及并行计算机模型进行概述。作者根据多年在科研工作中的实际经验，在基础篇的第3~6章系统介绍MPI 并行编程环境的使用与机群的搭建、测试和监控过程，旨在帮助读者完成简单的并行程序设计，掌握并行计

算平台的搭建、测试与监控方法,为深入学习并行计算技术打下坚实的基础。本篇主要面向高年级本科学生,使其初步掌握基本的并行计算知识。

应用篇包括第7~10章,各章自成一体,读者可根据自己的兴趣和需要选读。在基础篇的基础上进行了拓展与深化,详细介绍并行计算技术在数据挖掘、遗传算法、迭代算法中的应用,并对并行技术的发展前沿进行了介绍,不仅使读者了解并行计算技术的应用方法,而且为读者深入学习和研究并行计算技术提供了有益的借鉴。本篇主要面向研究生及具备一定知识基础的并行系统开发人员,讲解并行计算的高级应用知识。

各章的主要内容介绍如下:

第1章 对并行计算的概念、发展及应用等方面进行概述。

第2章 介绍并行系统结构模型,特别是对Beowulf机群系统进行详细的介绍,使读者对并行计算机体系结构有一个初步的认识。

第3章 主要介绍机群并行计算环境的搭建过程,包括操作系统的配置及MPI的安装,以及采用VMware在单台PC机上建立并行实验环境的方法。

第4章 介绍MPI的基本功能和基本实现方法,从简单的例子入手,讲解MPI程序设计的基本过程和框架。本章内容对具有C语言串行程序设计经验的人员而言,很容易理解和接受。

第5章 从机器级、算法级、基准程序级三方面对Linux机群进行性能分析,详细分析加速比、效率、扩展性和浮点计算能力等机群性能指标。

第6章 简单介绍机群监控的原理,并详细分析Linux的/proc文件系统以及基于/proc文件系统的机群监控系统,向读者展示了机群监控系统的设计过程,为读者设计自己的监控系统提供借鉴。

第7章 介绍并行数据挖掘的基础理论,并在此基础上详细阐述关联规则挖掘与决策树挖掘方法中主要的串行与并行算法。

第8章 介绍遗传算法的基本概念和理论,作为一种重要的非数值并行算法,本章对遗传算法的并行化方法作了介绍,使读者能掌握基本的遗传算法和并行技术。

第9章 介绍迭代算法的一般性原理,对迭代算法中著名的雅可比迭代和高斯-赛德尔迭代进行详细阐述,并介绍了雅可比迭代、高斯-赛德尔迭代、J迭代与G-S迭代结合的串行与并行算法,最后给出以上算法在不同问题规模下的测试结果以及对结果的分析。

第10章 介绍并行计算技术中一些前沿技术,如量子计算机、隐含并行性和云计算等,可以为读者开拓视野。

致谢

本书在编写过程中得到了许多老师和学生的帮助,向令、黄松林、李惠君、李裕森、李庆波、伍国良、张成等同学参与了本书的编写以及书中研究项目的设计开发工作。本书的前期工作得到了中国科技大学高性能中心许胤龙教授、李春生老师,电子科技大学孙世新教授、李建平教授,成都信息工程学院陈高云副教授、安俊秀副教授、郭本俊讲师,国防科技大学霍志国博士、贾承丽博士,上海惠普Intel解决方案中心张涛工程师,中国电子科技集团第三十八研究所成像中心张长耀研究员、阮祥伟工程师、常庆利工程师、李英先工程师等同志的帮助。本书的编写参阅了大量的相关书籍和研究资料,在此一并向这些书籍和资料的作者表

示感谢，并向他们前期所做的工作表示敬意。本书的写作还得到以下基金的资助：国家自然科学基金（60702075）、中国博士后科学基金一等（20070410385）、四川省教育厅自然科学重点项目（07ZA014）、成都信息工程学院自然科学与技术发展基金（CSRF200701）。

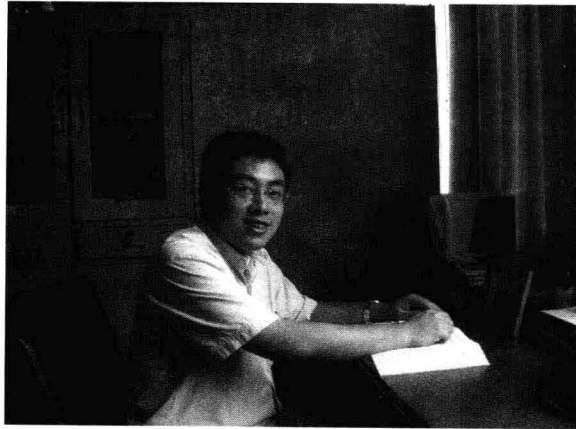
由于作者水平所限，书中难免有很多不足之处，希望读者批评指正。

王 鹏

成都信息工程学院并行计算实验室
电子科技大学计算机科学与工程学院

作者简介

王鹏，男，生于1975年，副教授、博士后、硕士研究生导师，中国计算机学会高级会员，高性能计算专委会委员，成都信息工程学院并行计算实验室主任。2004年于中国科学院获计算机软件与理论博士学位。2006年起在电子科技大学计算机科学与工程学院小波国际研究中心从事博士后研究工作，现作为项目负责人承担国家自然科学基金、中国博士后科学基金一等资助和四川省教育厅自然科学重点项目。主要研究方向为并行计算，量子计算，数据挖掘及移动搜索引擎。已发表论文50余篇，其中多篇被EI及SCI收录。





华章教育

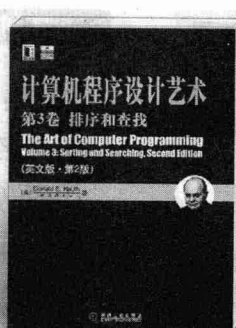
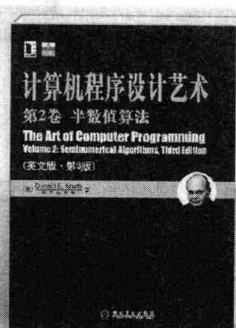
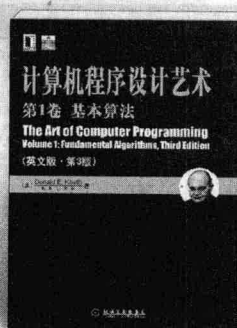
一本打开的书，
一扇开启的门，
通向科学圣殿的阶梯，
托起一流人才的基石。

计算机科学巨匠 Donald E. Knuth(高德纳) 经典巨著

《计算机程序设计艺术 第1卷
基本算法(英文影印版,第3版)》
ISBN: 978-7-111-22709-0
定价: 95.00

《计算机程序设计艺术 第2卷
半数值算法(英文影印版,第3版)》
ISBN: 978-7-111-22718-2
定价: 109.00

《计算机程序设计艺术 第3卷
排序和查找(英文影印版,第2版)》
ISBN: 978-7-111-22717-5
定价: 109.00



“它本来是作为参考书撰写的，但有人发现每一卷都可以饶有兴致地从头读到尾。一位中国的程序员甚至把他的阅读经历比做读诗。如果你认为你确实是一个好的程序员，读一读Knuth的《计算机程序设计艺术》吧，要是你真把它读通了，你就可以给我递简历了。”

—— Bill Gates



《计算机程序设计艺术：第1卷
第1册(双语版)
MMIX：新千年的RISC计算机》
ISBN: 7-111-18031-3
定价: 45.00



《计算机程序设计艺术：第4卷
第2册 生成所有元组和排列(双
语版)》
ISBN: 7-111-17773-8
定价: 45.00



《计算机程序设计艺术 第4卷
第3册 生成所有组合和分划(双
语版)》
ISBN: 7-111-17774-6
定价: 45.00



《计算机程序设计艺术(第4卷,
第4册,双语版)》
ISBN: 978-7-111-20825-9
定价: 42.00



多处理器编程的艺术（英文版）

ISBN: 978-7-111-24735-7

丛书名: The Art of Multiprocessor Programming

作者: Maurice Herlihy; Nir Shavit

出版日期: 2008-08

定价: 69.00

中文版由华中科技大学金海老师翻译



计算机体系结构：量化研究方法（英文版·第4版）

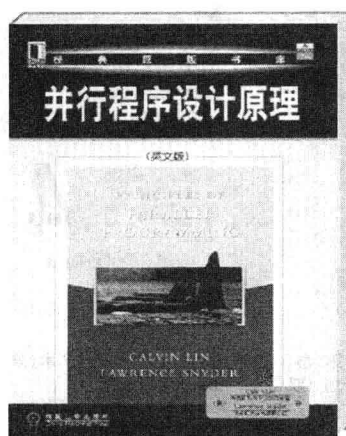
ISBN: 978-7-111-20378-X

丛书名: 经典原版书库

作者: John L. Hennessy; David A. Patterson

出版日期: 2006-12

定价: 78.00



并行程序设计原理（英文版）

ISBN: 978-7-111-24734-0

丛书名: 经典原版书库

作者: Calvin Lin ; Lawrence Snyder

出版日期: 2008-08

定价: 49.00

教师服务登记表

尊敬的老师:

您好!感谢您购买我们出版的_____教材。

机械工业出版社华章公司本着为服务高等教育的出版原则,为进一步加强与高校教师的联系与沟通,更好地为高校教师服务,特制此表,请您填妥后发回给我们,我们将定期向您寄送华章公司最新的图书出版信息。为您的教材、论著或译著的出版提供可能的帮助。欢迎您对我们的教材和服务提出宝贵的意见,感谢您的大力支持与帮助!

个人资料(请用正楷完整填写)

教师姓名	☐ 先生 ☐ 女士	出生年月	职务	职称: ☐ 教授 ☐ 副教授 ☐ 讲师 ☐ 助教 ☐ 其他	
学校	学院		系别		
联系电话	办公: 宅电: 移动:		联系地址及邮编		
			E-mail		
学历	毕业院校	国外进修及讲学经历			
研究领域					
主讲课程		现用教材名	作者及出版社	共同授课教师	教材满意度
课程: ☐ 专 ☐ 本 ☐ 研 人数: 学期: ☐ 春 ☐ 秋					☐ 满意 ☐ 一般 ☐ 不满意 ☐ 希望更换
课程: ☐ 专 ☐ 本 ☐ 研 人数: 学期: ☐ 春 ☐ 秋					☐ 满意 ☐ 一般 ☐ 不满意 ☐ 希望更换
样书申请					
已出版著作			已出版译作		
是否愿意从事翻译/著作工作 ☐ 是 ☐ 否 方向					
意见和建议					

填妥后请选择以下任何一种方式将此表返回:(如方便请赐名片)

地址:北京市西城区百万庄南街1号 华章公司营销中心 邮编:100037

电话:(010)68353079 88378995 传真:(010)68995260

E-mail:hzedu@hzbook.com markerting@hzbook.com 图书详情可登录<http://www.hzbook.com>网站查询

目 录

前言

基 础 篇

第1章 引言	1
1.1 并行计算的概念	1
1.2 并行计算的发展历程	2
1.3 并行计算的应用	2
1.4 并行计算面临的技术挑战	4
1.5 人类对高速计算的探索	5
第2章 并行计算机体系结构	6
2.1 并行计算机体系结构模型	6
2.2 Beowulf机群	7
2.3 并行机群网络互联拓扑结构实例	11
第3章 PC机群的搭建	13
3.1 安装和配置基本Linux系统	13
3.2 安装NFS文件系统	13
3.3 配置用户环境文件	14
3.4 配置ssh公钥认证	14
3.5 安装和配置MPICH	15
3.6 并行环境配置中的疑难解析	18
3.7 SHELL技巧在并行环境中的运用	18
3.8 采用VMware在单台PC机上建立并行环境	22
第4章 并行程序开发——MPI编程	27
4.1 MPI简介	27
4.1.1 MPI的定义和特点	27
4.1.2 MPI的发展过程	28
4.1.3 MPI的语言绑定	28
4.1.4 目前主要的MPI实现	28
4.1.5 Linux的程序编辑器vi	29
4.2 MPI并行编程知识	30
4.2.1 MPI程序的基本结构	30
4.2.2 MPI常用函数	33
4.2.3 MPI的错误码	36
4.2.4 MPI程序的一些惯例	37
4.3 MPI消息	37

4.3.1 MPI消息的概念	37
4.3.2 一个简单的MPI消息传递例子	39
4.4 MPI程序示例	40
4.4.1 获取数据传输时间	40
4.4.2 计算 π 值的MPI程序	41
4.4.3 MPI的错误退出方式	42
4.4.4 数据的循环传送	42
4.4.5 非阻塞通信程序	43
4.4.6 矩阵相乘的并行算法	45
4.5 MPI中的组通信	47
4.5.1 组通信概述	47
4.5.2 广播	48
4.5.3 收集	49
4.5.4 散发	50
4.6 MPI综合编程实例——快速 排序算法的并行化	51
4.6.1 串行程序的并行化方法	52
4.6.2 快速排序算法原理	53
4.6.3 快速排序法的并行化及MPI程序	54
第5章 并行机群的性能测试	60
5.1 机器级性能评测	60
5.1.1 CPU	60
5.1.2 存储器	60
5.1.3 通信开销	61
5.1.4 机群的规模可扩展性	61
5.2 算法级性能评测	62
5.2.1 机群加速比	62
5.2.2 机群效率	63
5.3 基准程序级性能评测	63
5.3.1 基准测试程序的分类	63
5.3.2 Linpack基准测试程序	64
5.3.3 其他基准测试程序	73
第6章 机群监控	75
6.1 机群监控介绍	75
6.1.1 本地化机群监控	75

6.1.2 网络化监控	75
6.1.3 Linux系统中常用的监控方式	76
6.2 /proc文件系统介绍	77
6.2.1 虚拟文件系统	78
6.2.2 /proc文件系统	79
6.2.3 /proc目录及文件内容	82
6.3 基于/proc的机群监控系统实例	85
6.3.1 系统总体结构	86
6.3.2 部分模块实现例程	87

应用篇

第7章 并行数据挖掘	91
7.1 并行数据挖掘概述	91
7.1.1 数据挖掘的定义及分类	91
7.1.2 数据挖掘的步骤	92
7.1.3 数据挖掘算法的并行化策略	92
7.1.4 并行挖掘算法中需解决的问题	93
7.2 关联规则概述	93
7.2.1 关联规则的基本概念	93
7.2.2 关联规则挖掘过程	94
7.3 串行关联规则算法	94
7.3.1 Apriori 算法	94
7.3.2 AprioriTid算法	97
7.4 并行关联规则算法	99
7.4.1 CD算法	100
7.4.2 DD 算法	102
7.4.3 FDM算法	103
7.5 决策树概述	107
7.5.1 决策树的构建	107
7.5.2 决策树的剪枝	108
7.5.3 决策树的测试	108
7.6 串行决策树算法	109
7.6.1 ID3算法	109
7.6.2 ID3算法的改进	111
7.7 并行决策树算法	112
7.7.1 SLIQ算法及其并行化处理	113
7.7.2 SPRINT算法及其并行化处理	114
第8章 并行遗传算法	120
8.1 遗传算法简介	120
8.2 遗传算法的数学理论	123

8.2.1 模式定理	123
8.2.2 收敛定理	125
8.3 基本遗传算法	125
8.3.1 基本遗传算法描述	125
8.3.2 基本遗传算法的实现技术	126
8.4 并行遗传算法	129
8.4.1 遗传算法的并行化	129
8.4.2 并行遗传算法的分类	129
8.5 函数极值问题的并行遗传算法	133
8.5.1 函数极值问题描述	133
8.5.2 传统求极值方法介绍	133
8.5.3 串行遗传算法计算函数极值	134
8.5.4 并行遗传算法计算函数极值	135

第9章 并行迭代算法	141
9.1 迭代算法的数学原理	141
9.1.1 迭代算法的一般性原理	141
9.1.2 雅可比迭代法	141
9.1.3 高斯-赛德尔迭代法	142
9.2 迭代算法的串行实现	143
9.2.1 雅可比迭代的串行算法	143
9.2.2 高斯-赛德尔迭代的串行算法	143
9.3 并行迭代算法及实现	144
9.3.1 初始化节点数据	144
9.3.2 雅可比迭代并行算法	145
9.3.3 高斯-赛德尔迭代并行算法	146
9.3.4 J迭代与G-S迭代的结合算法	147
9.4 并行迭代算法性能分析	148

第10章 并行计算前沿	150
10.1 量子并行计算	150
10.1.1 量子计算机的出现	150
10.1.2 量子计算机的指数并行能力	150
10.2 隐含并行计算	151
10.2.1 遗传算法的隐含并行性	151
10.2.2 隐含并行性的物理解释	152
10.2.3 量子算法与遗传算法的比较	154
10.3 云计算	155
10.3.1 云计算的基本原理	155
10.3.2 云计算的实现	156
10.3.3 云计算的应用	157

附录 PROC重要目录及文件细解	158
参考文献	169

基 础 篇

第1章 引 言

随着科学技术的发展与信息时代的到来,人们需要处理的数据量与日俱增,需要解决的问题也越来越复杂。人类对计算能力的需求远远快于摩尔定律所能提供的芯片发展速度,通过提高单个处理器的运算速度和采用传统的串行计算技术已难以胜任。因此,迫切需要功能更强大的计算机系统和计算技术来解决问题,并行计算机及并行计算技术应运而生,为我们提供了一种实现高速计算的方法。

本章将介绍并行计算的概念、发展、应用和未来所面临的技术挑战。

1.1 并行计算的概念

计算机处理技术从数据和信息处理、知识处理发展到今天的智能处理,每前进一步,都要求增强计算机的处理能力。计算机的发展史也表明,为了达到高效而快速计算的目的,除了提高计算机系统的CPU等元器件的速度外,计算机的体系结构也必须不断改进,特别是当元器件的速度达到极限时,设计新的计算机系统结构就成为问题的焦点,量子计算、生物计算和并行计算成为人们解决高速计算新的方案,但只有并行计算技术才是目前最为现实的大幅提高计算速度的方法。另一方面,随着科学技术的发展,许多科研工作者越来越清楚地认识到“计算”已经成为与理论分析和实验并列的第三种科学研究手段,许多科研工作已无法离开高性能计算机的支持,并行处理与并行计算技术是实现高性能计算的有效途径。

在详细讨论并行计算之前,我们先来了解几个重要概念。

- **并行处理技术**是指在同一时间间隔内增加操作数量的技术。我们可以形象地把并行技术看作由多个计算机共同完成同一个任务,从而提高完成任务的效率,缩短完成任务的时间。
- **并行计算机**(简称**并行机**)是为进行并行处理所设计的计算机系统。
- **并行计算**(Parallel Computing)是相对于串行计算来说的,简单地说,就是在并行计算机上求解问题。现代大多数高性能计算机和超级计算机都离不开并行技术。本书的主要内容就是研究如何在并行机上完成指定的任务,求解指定的问题。

并行算法可以分为**数值并行算法**和**非数值并行算法**。数值并行算法是研究基于代数关系运算的数值计算问题的并行算法,主要包括矩阵运算、方程组的求解和数字信号处理等;非数值并行算法是研究基于比较关系运算的符号处理问题的并行算法,主要包括图论问题、数据库操作和组合优化等问题。

并行算法的研究中存在算法复杂性的问题,并行复杂性理论中的NC类(Nick's Class)问题扮演着串行复杂性理论中的P类问题的角色。如果一个问题使用多项式数目的处理器、在对数多项式时间内可以求解,则称此问题是NC类的。NC类问题被认为是可并行化的,而非NC

类问题使用多项式数目的处理器是不可能在对数多项式时间内求解的。现在大量使用的高性能并行计算机系统对于指数复杂度的问题是无法实现有效求解的。对于这类问题,我们将希望寄托于未来新型的计算机系统,如量子计算机。

1.2 并行计算的发展历程

计算技术从中国古代的算盘、第一台电子计算机ENIAC再到现代个人电脑系统,经历了一千多年的发展历程,而计算技术发展到今天面临着进一步发展的挑战。人类对计算机性能的要求是无止境的,工程设计和自动化、能源勘探、医学、军事以及基础理论研究等领域都对计算提出了更高的要求。例如,在进行油田整体“油藏模拟”时,假定一个油田有上万口油井,模拟每口井至少要取3400个点,那么总的变量个数可达到千万量级,一般计算机难以实现。在现有的技术条件下,使计算速度进一步提高已十分困难,因此量子计算机、生物计算机、并行计算机将成为今后计算机发展的趋势。目前解决大规模计算最为现实的方法就是计算的并行化。

从1976年到20世纪90年代,向量并行是主流,第一台亿次高性能计算机是美国的向量计算机CRAY-1。中国在20世纪80年代初,研制成功了双向量阵列的向量计算机YH-1,是我国首台亿次计算机。其后,多处理机并行处理开始起步,处理机的数目达到4~8个。美国CRAY公司的紧耦合共享存储并行向量计算机CRAY-XMP成为典型代表。我国在20世纪80年代末期,研制成功了并行向量计算机YH-2,应用于数值天气预报领域。

从20世纪90年代开始,大规模并行处理开始发展并逐渐成为主流,采用商用微处理器技术,处理器数目达到1000量级。典型的大规模并行计算机系统如美国Thinking Machine公司的CM-5采用SPARC微处理器,处理器数据超过1000。我国在20世纪90年代中期,开始大规模并行计算机系统的研制,典型的有曙光1000并行计算机、神威I大规模并行计算机、银河III可扩展并行计算机。1996年,美国的ASIC RED大规模并行计算机突破了万亿次计算性能。我国在2000年研制成功了万亿次计算机。

20世纪90年代后期,机群技术逐渐成为主流。我国的机群系统也在快速发展,曙光、联想等公司开发了达到国际先进水平的机群系统,2004年曙光4000A系统突破10万亿次峰值运算能力。2007年我国首台采用国产高性能通用处理器芯片“龙芯2F”和其他国产器件、设备和技术的万亿次高性能计算机“KD-50-I”也在中国科学技术大学研制成功。

1.3 并行计算的应用

并行计算通过几十年的发展已经渗透到各行各业,并行计算的传统应用行业包括气象、石油、军事、科研等领域,随着应用的逐步发展,银行、电信、娱乐游戏等产业也成为并行计算的重要用户,并行计算技术不再是处于金字塔顶端的技术,而逐渐和我们日常生活越来越紧密地联系在一起。

1. 气象领域的应用

气象科学本质上是实验性科学,由于无法建造“真实大气实验室”,只能以“模式大气”替代“真实大气”。因此,数值模式就成了大气科学的重要实验手段,而数值模式的研究与业务应用离不开计算机。数值天气预报要不断提高水平,很大程度上依靠高性能计算机的发展应用。并行计算在气象领域的应用不仅非常必要,而且有着广阔的应用前景。它能使我们跳出以前仅在工作站、微机和一般大型机上进行业务和研究的格局,使工作模式不是简化物理

过程的模式,而是可以逐步采用更逼近真实大气复杂物理过程的模式。如目前最流行的中尺度数值预报模式并行处理软件MM5就是由美国宾夕法尼亚州立大学和University Corporation for Atmospheric Research(UCAR)共同开发完成的免费软件,它用MPI和OpenMP混合编程。

气象领域在我国一直是应用并行计算的主要领域。1999年中国国家气象中心安装了神威、银河-III E和IBM SP等高性能计算机,当年就分别应用于数值预报业务、科学试验和研究等方面。2000年7月25日高性能计算机应用中心在国家气象中心揭牌。我国的曙光公司还专门推出了一款采用机群架构的气象专用高性能计算机系统。图1-1是四川省气象局装备的SGI Altix 4700高性能并行计算系统,主要用于数值预报。

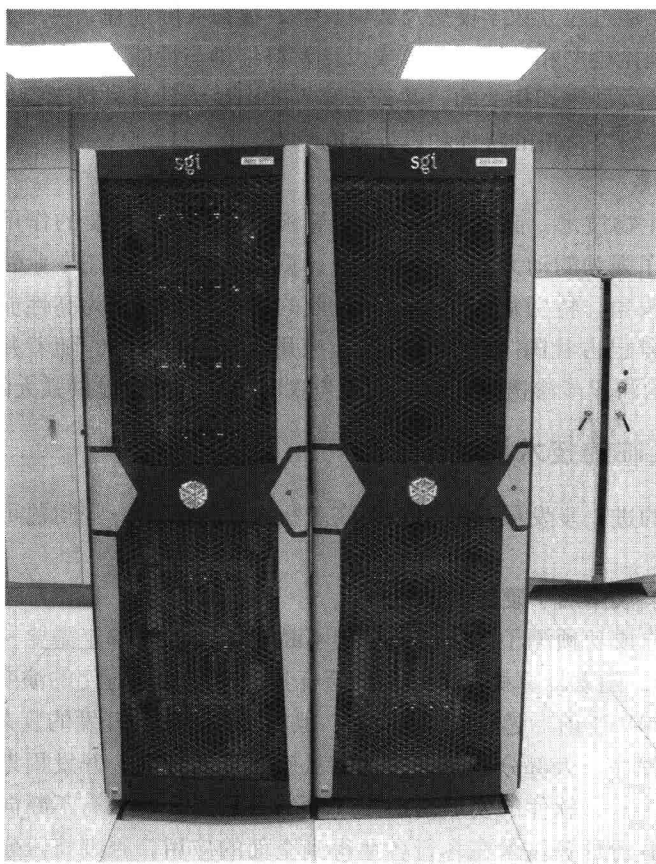


图1-1 四川省气象局SGI Altix 4700高性能并行计算系统

2. 石油勘探中的应用

石油是一种重要的战略物资,对石油储量的勘探是每个国家的一项重要工作。而地震数据处理是石油物探的关键环节之一,对计算机的存储能力、计算能力和I/O通信能力要求很高。随着近年来我国石油天然气勘探步伐的加快,对于地球物理勘探产生的庞大数据量,复杂数学模型应用的需求日益迫切。随着物探行业竞争的加剧,客户要求的数据处理周期也越来越短,而石油勘探领域的拓展和深入,也对处理的综合能力提出更高的要求。无疑,高性能并行计算机已成为全球陆地和海洋领域进行石油天然气勘探的基础支撑平台。物探拥有了高性能计算能力,如同具备了透视地壳的“火眼金睛”。近年来并行计算机系统在石油勘探领域得

到了广泛的应用，并行计算机的计算性能已成为石油行业的核心竞争力之一，具备了强大的计算能力就具有了强大的石油勘探能力。

3. 材料科学中的应用

随着计算机性能的发展，材料科学中出现了一个新的学科——计算材料学（Computational Materials Science）。从计算材料学家的角度看，所有的材料都是由原子构成的。计算材料学是材料科学与计算机科学的交叉学科，是一门正在快速发展的新兴学科，是关于材料组成、结构、性能的计算机模拟与设计的学科，是材料科学研究里的“计算机实验”。它涉及材料、物理、计算机、数学、化学等多门学科。计算材料学主要包括两个方面的内容：一方面是计算模拟，即从实验数据出发，通过建立数学模型及数值计算，模拟实际过程；另一方面是材料的计算机设计，即直接通过理论模型和计算，预测或设计材料结构与性能。计算材料学的发展是与计算机科学与技术的迅猛发展密切相关的，并行计算机的出现为计算材料学提供了更为强大的计算性能，使我们能快速研究材料的特性和设计新的材料。

4. 其他应用领域

并行计算机在生物技术、高能物理及化学等领域也发挥着重要的作用，并行计算机为现代科学的发展注入了强劲的动力。近年来并行计算机系统已突破在专业领域的应用，逐渐在商业应用领域崭露头角，特别是在游戏娱乐行业的应用现在已成为高性能并行计算主要的应用领域之一，2006年已占我国高性能计算行业应用近10%的份额。随着并行计算应用领域的逐渐扩展，这一技术将逐步渗透到各行各业，为我国的经济建设提供强大的动力。

1.4 并行计算面临的技术挑战

并行计算技术的进一步发展及应用也面临着极大的挑战，一些问题可能会制约并行计算技术的高速发展。

1. 并行软件的发展落后于硬件的发展

著名的摩尔定律成功预测了计算机性能的不断增长，在1972年需要一年完成的计算量今天只需要大约4秒钟。随着计算机体系结构从超标量、向量到并行化的演变，峰值性能也不断获得突破，有望在2010年前后超越Pflops大关。但由于并行软件开发的复杂性，并行程序的设计难度远大于串行程序，大部分并行程序均需从底层重新开发，开发周期长，许多小型公司无法承受。从总体上看，软件的发展落后于硬件的发展速度，只有不断向用户提供满足需要的软件产品才能使并行计算技术在各行各业得到全面的应用，否则将阻碍这一技术的进一步发展和普及。

2. “存储墙”问题

在计算机技术的发展历程中，计算和存储以及I/O的速度越来越不匹配所带来的“存储墙”问题一直是提高并行计算机系统总体效能的巨大障碍。这一问题随着技术的发展日益突出。“存储墙”的瓶颈问题是并行计算机研究需要解决的首要技术挑战。

3. 系统可扩展问题

现在的并行计算机系统节点数早已达到上千个。在系统节点数目逐渐增大的过程中，网络通信能力成为影响系统性能的首要问题。这一问题成为影响并行计算机系统可扩展性能的关键因素。

4. 能耗问题

根据热力学第二定律,对每比特进行操作的能量消耗下限为 $kT \ln 2$ 焦耳,其中 k 为玻尔兹曼常数($1.380\ 650\ 3 \times 10^{-23}$), T 为系统温度,而由于技术原因,现有计算机系统的能耗水平远远高于这一能耗下限。高性能计算和并行计算设备具有强大的计算能力,与此相对应,其“耗电能力”也是“首屈一指”,可谓是IT行业的耗电大户。随着高性能计算机使用范围的不断扩大,需要大量的能源供给。全球计算机使用大户都发现超级计算机信息装备已经慢慢变成一个名副其实的“电老虎”,其能耗趋势也在不断增加,人们不得不开始考虑高性能计算机的节能问题。如果任其发展,仅能源的消耗就会远远大于超级计算机自身的价值。因此,在下一代高性能计算机的设计和研发过程中,必须解决好节能降耗的问题。

1.5 人类对高速计算的探索

人类科学的发展对计算速度的需求是无止境的。从目前看来,并行计算技术只是人类解决计算需求问题的一种折衷方法。事实上从长远来看,目前的并行计算技术并不能从根本上满足人类的计算需求。量子计算等新的技术模式已在科学家的实验室建立起来,使我们看到了未来的希望,量子比特的强大信息储存能力和处理能力已经显现出来。传统计算机,包括并行计算机,在对NP问题进行处理时,仍然显得束手无策。因为问题复杂度的指数增长,使摩尔定律和并行技术所带来的计算能力增长的优势显得如此无力。量子计算机显现出的计算能力使我们看到了解决指数复杂度问题的曙光。

我们在谈论并行计算的时候,往往会忽略对算法的研究。人们总是在提高计算能力,还是提高算法效率上进行争论。通常,算法效率的提高所带来的计算速度的提高是最为有效的方法。随着问题规模的增大,算法优化带来的效果会远远高于采用并行计算技术所带来的效果。如图灵奖获得者Rabin等提出的检验素数的概率算法大大地提高了计算效率。遗传算法所采用的隐含并行计算也使我们实现了对庞大解空间的高速搜索。人类对算法的探索脚步一直没有停止过。一般的选择原则是,在能改进算法的情况下,优先对算法进行优化。当然,也可同时对算法进行优化,并采用并行计算技术。这是我们在学习并行计算时需要注意的一个问题。