

高中学生渴望选择合适的系科 大学生则关注今后的主攻方向 且听17位旅英博士怎么说

旅英学人 谈 科技热点

周午纵 主编

复旦大学出版社

图书在版编目(CIP)数据

旅英学人谈科技热点/周午纵主编. —上海:复旦大学出版社, 2001. 12

ISBN 7-309-03043-5

I. 旅… II. 周… III. 科学技术-文集 IV. N53

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2001)第 084812 号

出版发行 复旦大学出版社

上海市国权路 579 号 200433

86-21-65118853(发行部) 86-21-65642892(编辑部)

fupnet@fudanpress.com <http://www.fudanpress.com>

经销 新华书店上海发行所

印刷 上海长阳印刷厂

开本 850×1168 1/32

印张 11.875

字数 300 千

版次 2001 年 12 月第一版 2001 年 12 月第一次印刷

印数 1—3 000

定价 18.00 元

如有印装质量问题, 请向复旦大学出版社发行部调换。

版权所有 侵权必究

前 言

在英国的各个大学和科研机构活跃着一批从中国来的学者。他们或在旅英学人专业协会年会期间、或在全英和地方学联组织的论坛上、或在三三两两的私人聚会时,经常热烈地讨论自己所从事的科技前沿领域的有趣故事、中国科技发展的热点问题。1997年9月,当我受上海复旦大学出版社的委托以“21 世纪的科技与文明”为主题组织书稿时,很自然就想到如何将旅英学人平时口头聊侃的内容以笔会的形式介绍给国内的读者。

面对“21 世纪的科技与文明”这样一个大题目,我却又为难起来。对 21 世纪科技发展的预测,已经有大量的中文书籍出版,特别是一批老科学家们的议论更具权威性。作为旅英学人主体的年轻科技工作者毕竟经历有限,很难站得高,看得远。当时,我是抱着试试看的想法联系了 20 余位学者。他们都获有博士学位,目前在英国不同的大学和研究所有终身或长期的职位,属于活跃在科技前沿的骨干。令我不胜感叹的是,所有的人无一例外地对本书的组稿表示了极大的热情,明确表达了为中国科技事业做点实事的迫切愿望以及为本书撰写一个章节的意向。尽管他们中的一些人因为这样和那样的原因最后没有能为本书撰稿,但是他们仍然以不同的形式关心组稿过程,出谋划策。

1997 年 11 月 8 日,我们旅英学者近 20 人在剑桥召开了一个编写工作会议。中国驻英使馆公使王其良先生、教育参赞王百哲先生、一秘包同曾先生、二秘王永利和李晶平先生等到会表示对本书编写计划的支持,令与会者备受鼓舞。在组稿过程中,包同曾和王永利先生一直很关心组稿进展,并代表使馆教育处给了我们一

定的资助。在剑桥会议上,我们成立了一个由张杰、唐惠儒、徐耀忠、胡伟、黄泽文、周午纵组成的编委会,承担审稿工作。

当我读完全部稿件后,发现大部分稿子并没有涉及遥远的科技预测,而是更多地谈论作者所从事的领域正在发生的事。对于明天的科技发展,作者们无意引导读者去遨游“未来世界”的虚幻境地,而是从现实工作出发作一些令人信服的展望。这多少体现了长期在科技第一线工作养成的务实精神。于是,将书名改成《旅英学人谈科技热点》比较确切。书的内容涉及物理学、化学、材料科学、生命科学、资源与环境、计算机科学等等,但远远不是这些学科的全部。每篇文章只是一个范例,主要围绕作者本人的研究领域向读者展示科学的魅力。各篇文章之间不一定有关联,读者不必按顺序阅读,倒是可以把它放在茶几上,或者带在旅途中随意翻阅。所以,我们期望它成为一本“休闲”型的高级科普书。

尽管书稿的完成到出版间隔时间长了些,有些最新的研究成果未能包括进去,我们还是希望高中毕业班的学生能从中获得某种启示,萌生对某个科学领域的兴趣;希望大学生、研究生、教师和科研人员能通过这本书扩展自己的知识面,并了解科技发展的趋势;也希望对科技有兴趣的管理干部能从中获得科技前沿的一些信息,作为他们日常工作中的参考。受作者经验的限制,文中观点难免肤浅或片面。书中17位作者都提供了他们的联系地址,他们中的一些人在本书出版前已经回国服务。我代表所有作者在此欢迎读者来信批评指正,并讨论我们共同感兴趣的科技问题。

周午纵

2001年10月22日于英国圣安德罗斯大学

目 录

1. 超级计算机及计算技术 1
——英国 Daresbury 国家实验室 胡一凡
2. 信息时代的三个要素——神经元网、模糊系统、
人工智能 43
——英国西英格兰大学 朱全民
3. 计算机学习和归纳 67
——英国利物浦大学 吴青华
4. 强场物理 75
——英国 Rutherford Appleton 国家实验室 张 杰
5. 高分辨透射电子显微学与固体材料微结构 98
——英国圣安德罗斯大学 周午纵
6. 导电高分子和塑料发光器件 121
——英国剑桥大学 李晓常
7. 高性能结构材料与 21 世纪的航空航天飞机 160
——英国 Birmingham 大学高性能材料研究中心 黄泽文
8. 21 世纪空间推进技术的新概念 186
——英国剑桥大学工程系 徐力平

9. 饮食与癌症的预防	195
——英国食品研究院 暴永平	
10. 人体、营养和食品科学	215
——英国(BBSRC)食品研究所 唐惠儒	
11. 农业科技的发展与挑战	256
——英国大田作物研究所 祁爱明	
——国际应用生物科学中心 张巧巧	
12. DNA 研究和技术——及其对当前和未来人类 生活的影响	283
——英国开明大学 徐耀忠	
13. 胚胎是怎样形成的	302
——英国国立医学研究所 徐琦玲	
14. 也谈中国资源、环境与可持续发展 ——21 世纪的前景与挑战	326
——英国米德尔萨克斯大学 胡 伟	
15. 道路交通管理	335
——英国利兹大学交通研究所 刘蓉晖	
16. 城市怎样合理布局	359
——英国剑桥埃切尼克事务所 金 鹰	



超级计算机及计算技术

胡一凡*

一、引言

1997年5月,一架名为“深蓝”的IBM超级计算机,在举世瞩目的一系列比赛中,战胜了国际象棋超级大师盖里·卡斯帕罗夫(Garry Kasparov);1997年10月,受助于超级计算机设计的“推动力”超音速汽车,首次突破声障,打破了陆地行车时速的世界记录……“超级计算机”这个词已经常常出现在新闻媒介中,它对日常生活的影响也越来越大。那么,超级计算机究竟是什么,其历史和现状是怎样的呢?

简单地说,超级计算机是指在某一时代比大多数其他计算机能更快运算的通用计算机。此外,超级计算机的内存通常要比普通计算机大得多,因而它能够求解在普通的计算机上无法容纳的

* 胡一凡,博士,1963年生。1985年获上海交通大学应用数学学士,1988年获上海交通大学硕士。1988年至1989年任上海交通大学助教。1992年获英国 Loughborough 数学系博士学位。1992年至2001年任英国 Daresbury 国家实验室 Senior Scientific Officer。从事超级计算机及算法研究。2001年开始到美国 Wolfram Research Inc 工作,从事数值算法的研究及应用。胡一凡博士是数学及其应用学院院士、注册数学家。联系地址: 100 Trade Center Drive, Champaign, IL 61820, USA. Tel: 001-217-3980700; FAX: 001-217-3980747; E-mail: < yifanhu@wolfram.com >

大问题。“超级”这个词自然是相对的，计算机的速度平均每 18 个月翻一番，现在的普通个人计算机或工作站，若在 10 年前，就算是超级计算机了。

今天的超级计算机速度非常快。举例来说，其速度在每秒 10 亿至 1 000 亿次之间。若以每秒 10 亿次计，每一秒就能产生 10 亿个实数。如果每行 10 个，每页 50 行计，打在纸上堆起来能有 100 米高！而要打印这些数字，一台每分钟能打 10 页的打印机也要花 19 周才能打完！

超级计算机技术是当今信息时代一门非常重要的尖端技术，其发达程度是衡量一个国家国力的重要标志。它广泛应用于气象预报、地震预报、石油探测、飞行器与汽车设计、天文学、核物理、尖端武器的设计和模拟。

本文首先回顾计算机与超级计算机的发展历史，由此我们会了解计算机速度之所以发展那么快的原因；然后介绍一些当今世界上最强大的超级计算机，这些计算机都采用了并行技术。如果把(并行)超级计算机比作一个有很多工人的建筑队，那么要安排利用这些人力迅速地建立一座高楼，关键是要有一个合理的计划。对计算机来说，就要有一个有效的并行算法。本文将结合实例阐述并行算法的基本思想；最后介绍超级计算机的应用，并展望超级计算机技术未来的发展趋势。

二、超级计算机历史的回顾

1. 计算机的诞生

计算机究竟是什么时候产生的呢？这个问题比较难回答，因为一些特殊用途的计算装置在很早以前就有了，比如第二次世界大战中就使用了解密码的机器。但是，第一台能储存程序的通用

计算机却是 1948 年在英国的曼彻斯特大学诞生的。

这个“小规模实验器”，外号“小家伙”，于 1948 年 6 月 21 日第一次成功地运行了一个程序。当时运行的程序是求解整数的最大公因数，开始解的整数很小，但几天以后就尝试了 2^{18} ，并且在 52 分钟内得到了准确的答案。在这一运算过程中，“小家伙”执行了 210 万次指令和 350 万次内存提取。

“小家伙”是世界上第一个具备了一台计算机该具备的所有因素的装置，包括真正的随机存取存储器(RAM)。更重要的是，它是第一台不仅能储存数据，而且能够在电子化的内存中储存或提取任何短小的用户程序的计算机。由于“小家伙”的成功，设计者们决定设计建造更强大易用的“曼城一号”。“曼城一号”1949 年年底建成。1951 年 2 月又建成了其商业化版本——“费拉里一号”。1952 年建造的一台“费拉里一号”卖给了加拿大的多伦多大学。

“小家伙”的最重要部件是其数字化的内存装置，它使用了阴极管。其发明者，弗雷第·威廉(Freddie Williams)曾经于 1946 年 10 月成功地演示了用它作为一个“位”的内存装置。“位”(bit)是计算机内存的最基本的单位，代表二进制中的 0 或 1。这一个位以电荷的形式存储在阴极管管壁的硫上，并通过电子束更改，以表达“0”和“1”。虽然硫是绝缘体，但是电荷在一秒左右就会泄漏了。弗雷第·威廉采用了连续不断地读取再存写的办法，使得信息能永久地保存下去。“小家伙”的 RAM 内存有 2 048 个位，它不仅能储存与计算有关的数字，还能储存计算指令。这样一来指令可以被高速地读取。要运行一个不同的程序只要用键盘改变储存的程序就可以了，而不需花几天的时间去重新配置电子线路。

除了硬件，“小家伙”的另一个特色是它的指令，它只有 7 个指令。所谓指令就是中央处理器服从的命令。指令依次储存在内存之中，中央处理器除非读到了分叉的指令，否则将按照次序读

取并执行这些指令，分叉命令导致寄存器(register)被重新装载。“小家伙”的寄存器也是一个阴极管，当时称之为积累器，记作 A。“小家伙”的 7 个指令是：

- *) 如果 x 是内存某处存的值，将 x 的负值存入 A 中。
- *) 将 A 所存之值中减去 x。
- *) 将 A 所存之值存于某一指定的内存位置。
- *) 如果 A 是负的，跳过指令序列中的下一个指令。
- *) 分叉到某一指定的内存位置，并从那一新位置起重新读取和执行指令。
- *) 从现在的内存位置起前进(或后退)指定的距离，并从那一新位置起重新读取和执行指令。
- *) 停止执行。

有趣的是，用这 7 个指令就可以构筑任何程序。当然，对于大的程序，“小家伙”具备的内存是不够的。

值得一提的是，1947 年美国宾夕法尼亚大学建造了一台计算机 EDVAC，并于 1949 年 5 月首次运行。许多人误以为宾夕法尼亚大学是计算机的诞生地，其实这是不准确的。

2. 并行化：超级计算机的基本原则

早在 1842 年，就有人提出在计算机设计中使用并行化原理。在题为《查尔斯·巴贝(Charles Babbage)及所创之分析器简介》一文中，孟那布理将军(General L.F.Menabrea)写道：“当需要一系列类似的计算时，比如像制作数学用表所需之计算，可以用这个机器同时计算几个结果，从而缩短整个过程。”

近代计算机速度的不断提高，都要归功于并行化思想的运用。

3. 流水线并行化：精简指令系统处理器

当今的绝大多数工作站都采用精简指令系统处理器(RISC

processor)。要理解什么是 RISC, 首先要了解什么是复杂指令系统处理器(CISC processor)。

以前并没有 RISC 与 CISC 之分, 所有的计算机都采用复杂指令系统。复杂指令系统由众多强大的指令组成, 这些指令从功能上看接近于高级计算机语言(比如最常用的 C 或 FORTRAN)的语句, 所设计的硬件也能接受这些指令。因而从某种意义上说, 这是用硬件来实现软件可以做的事情。从 20 世纪 80 年代中期开始, 计算机开始转向使用精简指令系统。精简指令系统使用的指令要简单、基本得多, 指令的数目也要少得多。由于指令简单, 每条指令在硬件中执行的时间也要短得多。这一变化不仅可以增加计算机的时钟频率, 而且使得流水线并行化这一重要的并行化方式得以实现。

早期使用复杂指令系统也是有原因的, 那时计算机内存很小, 比如 IBM704(1956 年)只有 32 千字节(一个字节等于八位)。如果很复杂的运算都可以用一条指令来定义, 用户的程序就不需要占太多的内存。这样一来较多的内存就可以用来储存数据, 求解相对大一些的问题。复杂指令也显著减少了由提取指令引起的处理器和内存之间的通讯。比如, IBM704 只需用一条指令就可以将两个数字相加并存入内存。在现代的处理器上, 同样的操作可能需要 10 条简单的指令。

随着技术的发展, 当初采用复杂指令系统的原因变得无关紧要了, 内存变得越来越大, 也越来越便宜了, 内存的存取速度也越来越快。这一发展部分归功于数据和指令超高速缓存(CACHE)的使用。超高速缓存是在处理器与内存之间的快速存取装置, 从超高速缓存上存取数据或指令要比从内存上存取快得多。另一方面, 要提高采用复杂指令系统的计算机的速度越来越困难了。

计算机上的所有操作都由一个时钟发出的脉冲来同步, 每一

个指令都必须在一个时钟单位内完成。从这个意义上说,时钟的频率决定了计算机的速度。完成一个复杂的指令显然要比完成一个简单的指令时间长,因此复杂指令系统处理器的时钟频率受到了约束。

精简指令系统处理器用的指令简单,因此允许更高的时钟频率。然而时钟频率高并不等于处理器速度快:执行 1 个简单指令也许只要执行 1 个复杂指令十分之一的时间,但是如果需要 10 个简单指令才能完成和 1 个复杂指令同样的操作,那么前者并不比后者快。但是简单指令系统使得流水线这一很重要的并行化手段得以利用,这才是它的优点所在。

假想有许多运算要做,每一个运算可以分为 10 个简单的指令来完成。我们可以先做第一个运算,等其 10 个指令在处理器上完成后,再做下一个运算,等等。这样每一个运算要 10 个时钟单位。如果假设每一个运算都是类似的并且是互相独立的,那么另一种方法是执行第一个运算的第一条指令,然后同时执行第一个运算的第二条指令和第二个运算的第一条指令,如此等等,这样一来,从第十个时钟单位起,每一个时钟单位就可以完成一个运算。这要比前一种方法快 10 倍!

这就好像电视机装配线。整个装配过程分成许多简单的步骤(指令),每个步骤所需耗用的时间相当,并同时在装配线(流水线)上进行。当装配线刚启动时,线尾并无电视机产生。一旦装配线满载,每一个单位时间(时钟单位)就有一个电视机(运算结果)在线尾产生。装配一架电视机的时间只相当于完成一个简单步骤所需的时间,这要比一个人单独装配一台电视机所需时间少得多。图 1-1 给出了一个四级流水线。从空载开始,这一流水线自第四时钟单位起每一时钟就可以产生一个结果。在现代的处理器上,流水线通常分得更细。比如,DEC Alpha 21164 处理器的浮点运算流水线有九级。

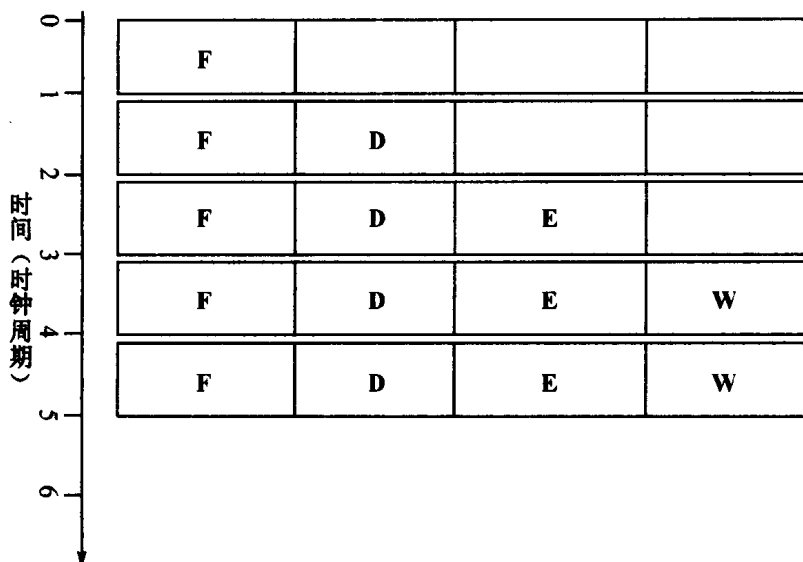


图 1-1 一个简单的四级流水线

F = 提取, D = 解码, E = 执行, W = 存写

要实现流水线的高效率,就必须让它总是满载。有时这是不现实的,比如所需提取的数据可能不在寄存器中(寄存器是极高速的存取装置,用于存放处理器可能重复使用的数据和指令,一个处理器通常有 10 至 100 个寄存器),也不在超高速缓存中,而必须从内存中去读取。由于从内存中读取要花几个甚至几十个时钟单位,在这段时间中流水线就会停滞或排空。一个高速的电视机装配线也有同样的问题:电视机零件必须快速不断地供给,装好的电视机也要迅速地运走入库。

如果能在需要某些数据之前就提前发出读取这些数据指令,那么因以上情况引起的停滞是可以避免的。这就需要有一个精明的编译程序来找到这种机会,充分利用流水线。

精简指令系统处理器的“极境”是每个时钟单位产生一个结

果。有两种方法可以进一步提高其速度,一是把已经简单的指令分成更简单的指令,从而可以提高时钟频率,进而提高流水线满负荷时的产率,这样的处理器称作超级流水线处理器。这种处理器的流水线很长,因而保持其满负荷尤其重要。MIPS/R4000 和 DEC Alpha 21064 就是这样的处理器;二是使用多个流水线,比如可以将一个浮点加法流水线和一個浮点乘法流水线放在一起,这样的处理器称作超级标量处理器(和向量处理器相对)。这种处理器每个时钟单位可以产生几个结果。IBM RS/6000 就是这样的处理器。这两种方法也可以结合在一起,产生的处理器时钟频率快,且每个时钟单位能出几个结果。

随着处理器速度的加快,储存装置(内存、超高速缓存及寄存器)的速度及其管理也越来越重要了。如果一个高速处理器不能被及时地“喂入”所需的数据和指令,或不能及时地存回产生的结果,那么它就不能达到设计的速度。然而,高速的储存装置是相当昂贵的。因此目前大多数处理器都有多级储存装置,包括寄存器、超高速缓存及内存。

4. 超级计算机: 向量机

理解了处理器、流水线的基本原理,我们就可以来了解一些诞生于七八十年代的向量超级计算机。为此不得不提到一个人,他的名字叫西莫·克雷(Seymour Cray)。

克雷生于 1925 年 9 月 28 日。电子工程学士及应用数学硕士毕业后,和约翰·冯·诺伊曼(John von Neumann)一起在工程研究有限公司(Engineering Research Associates, Inc.)工作,后来又 到数据控制公司(Control Data Corp.)工作。1972 年 4 月,这位“超级计算机之父”,创建了他自己的公司——克雷研究有限公司(Cray Research Inc.)。四年后的 1976 年 3 月,第一台 Cray-1 向量机交付劳 斯·阿兰姆斯国家实验室使用。从此,克雷的名字一直和超级计

算机紧密相联。

Cray-1 是一台向量机。向量机特别适用于解决有很多向量运算的问题。其主要特点是具有多个向量寄存器，并围绕这些向量寄存器进行高效的向量运算。在很多科学及工程计算中，绝大部分计算量都在于重复的向量或矩阵运算，向量机很适合这样的应用。

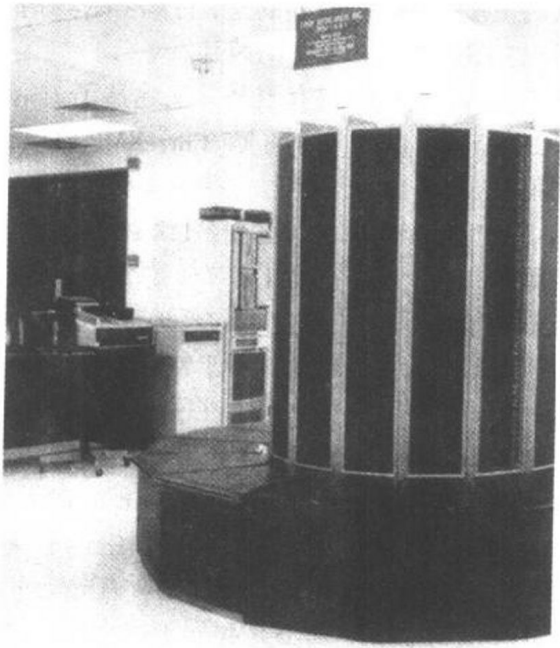


图 1-2 Cray-1 向量机

Cray-1 向量机的主要新颖之处是装备了 8 个向量寄存器，每个向量寄存器可以存放 64 个浮点数。它还有 32 个对向量进行操作运算的指令。有 3 个功能单元专门用于向量操作(移位、逻辑和加法运算)，另外 3 个功能单元与纯量操作合用(浮点加法、乘法和倒数运算)。所有的功能单元都是完全流水线化的。Cray-1 的

时钟单位是 12.5 纳秒($1 \text{ 纳秒} = 10^{-9} \text{ 秒}$)。由于其向量功能, Cray-1 在合适的问题(比如矩阵相乘)上常常达到 $1.3 \times 10^8 / \text{秒}$ (即 1 亿 3 千万次每秒浮点运算)。克雷研究有限公司至少建造了 16 台 Cray-1。1976 年时每台的售价是 70 万美元。您也许会以为, 造这么一台划时代的计算机, 西莫·克雷一定因此拥有很多专利。其实与 Cray-1 有关的专利只有冷却系统一项。Cray-1 的其他零件都是从电气店里能买到的。有趣的是, 订购 Cray-1 时, 您想要什么颜色都可以! 图 1-2 是 Cray-1 的照片。

紧接着 Cray-1, 克雷研究有限公司又建造了 Cray-XMP(1983 年 6 月)和 Cray-YMP(1988 年 6 月)。Cray-XMP 可以说是 Cray-1 的多处理器型号, 其时钟单位要短一些, 是 9.5 纳秒。带 4 个处理器的 Cray-XMP 有 2 米高, 占地直径 1.4 米。如果加上使用氟里昂的冷却系统, 整个机器占地 4.2 米^2 , 总重 5.25 吨! 每个处理器由寄存器和功能单元组成, 寄存器包括地址寄存器、纯量寄存器和向量寄存器; 功能单元有 13 个, 用于整数和浮点数的运算。两个处理器公用一个内存, 内存共有 4 兆字($1 \text{ 兆} = 10^6$, $1 \text{ 字} = 8 \text{ 字节}$, $4 \text{ 兆字} = 32 \text{ 兆字节}$), 分为 32 个贮存区。从内存到每个处理器上的向量寄存器的传输速度是 315 兆字/秒。由于每个浮点流水线在每个时钟单位里需要两个运算量并产生一个结果, 这个传输速度刚够支持一条流水线。要充分利用所有的流水线, 中间结果应存放于向量寄存器上, 而不是存回到内存去。利用这种“向量寄存器为主”的方法, 向量机可以达到较高的计算速度, 而又不增加编程的复杂性。

Cray-YMP 与 Cray-XMP 并无太大的差别。Cray-YMP 有 8 个处理器, 而不是 4 个。其时钟速度要快一些, 内存也要大一些。克雷研究有限公司现已被 Silicon Graphics 公司收购。它的产品也更广泛了, 包括向量机和多处理机并行系统。可惜的是, 西莫·克雷于 1996 年 10 月 5 日不幸死于车祸。

大约在 Cray-1 产生的同时,其他一些计算机公司也推出了向量机,包括 CDC 的 Cyber205 (1979 年)(基于其 STAR-100(1973 年)),IBM 公司的 IBM-370 (1985 年)。日本公司进入超级计算机领域相对晚一些。首先进入的是 Fujitsu VP-100 和 VP200,接着是日立的 Hitachi S-810 和 NEC 的 NEC SX-1、SX-2(1983 年)。但 10 多年后,他们却有了一系列非常强大的超级计算机产品。

5. 超级计算机:多处理器系统

随着计算机制造公司不断地改进单处理器的速度,人们开始认识到,进一步提高单处理器的速度所需的费用已日趋高昂。如今,建造一个新的计算机芯片厂,大约需要 100 亿美元。要收回这笔巨大的投资,只有卖出大量的处理器才行。由于超级计算机的市场相对比较小,对大多数计算机公司来说,为超级计算机而特别设计生产芯片,从商业上讲是不可行的。同时,高速的处理器还需要与高速的内存相匹配,后者同样也是很昂贵的。更重要的是,按现有技术设计的大规模集成电路,其所能容纳的元件数量也是有限的,计算机的时钟单位已接近 1 纳秒。在这么短的时间里,电子信号即使按真空光速 (3×10^5 千米/秒)也只能走 30 厘米!

1976 年的 Cray-1 的时钟单位是 12.5 纳秒,最高速度是 10^8 次/秒左右。今天的克雷高档机型, Cray-T90,其时钟单位是 2.2 纳秒,每个处理器的最高速度是 2×10^9 次/秒。这就是说,在这 20 年里,用于超级计算机的高档处理器的最高速度只提高了 20 倍。另一方面,用于大众市场的微处理器的速度,平均每 18 个月翻一番,这相当于 20 年里增加了 4 000 倍!今天的家用计算机中的处理器,其价格只是 1 000 美元左右,其性能却相当于当年的 Cray-1。即使不考虑通货膨胀,后者也要比前者贵 700 倍!

微处理器速度惊人的提高,要归功于并行化技术。这些并行