

高等院校信息与计算科学专业系列教材

# 并行计算导论

张林波 迟学斌 编著  
莫则尧 李 若



清华大学出版社

## 内 容 简 介

本书是并行计算，特别是分布式并行计算环境和消息传递并行编程的入门教材，目的是促进并行计算技术在我国的应用。书中介绍了并行计算的基础知识、Linux/UNIX的基本使用、基于Linux机群的并行计算平台的建立、并行算法的设计和MPI消息传递并行编程的基本概念与方法。书中还提供了大批典型科学计算问题的并行算法与程序设计实例，介绍了一些当前国际上流行的科学计算软件工具及平台。本书力求从简单入手，循序渐进，读者在逐步学习使用的过程中学会利用并行计算解决自己学习和工作中的问题。

本书侧重介绍高性能计算的实用技术，可作为信息技术与计算专业的基础课教材，也可作为其他理工科非计算机专业的并行计算课程教材。此外，本书还可作为有关Linux机群建造、MPI消息传递并行算法设计与编程及常用高性能科学计算软件的参考书使用。

版权所有，翻印必究。举报电话：010-62782989 13501256678 13801310933

本书封面贴有清华大学出版社防伪标签，无标签者不得销售。

本书防伪标签采用特殊防伪技术，用户可通过在图案表面涂抹清水，图案消失，水干后图案复现；或将表面膜揭下，放在白纸上用彩笔涂抹，图案在白纸上再现的方法识别真伪。

### 图书在版编目(CIP)数据

并行计算导论/张林波等编著. —北京：清华大学出版社，2006.7

(高等院校信息与计算科学专业系列教材)

ISBN 7-302-12760-3

I. 并… II. 张… 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(2006)第026693号

出版者：清华大学出版社 地 址：北京清华大学学研大厦

<http://www.tup.com.cn> 邮 编：100084

社总机：010-62770175 客户服务：010-62776969

责任编辑：范素珍

印刷者：北京四季青印刷厂

装订者：三河市金元印装有限公司

发行者：新华书店总店北京发行所

开 本：140×203 印张：16 字数：436千字

版 次：2006年7月第1版 2006年7月第1次印刷

书 号：ISBN 7-302-12760-3/TP·8132

印 数：1~3000

定 价：22.00元

# 高等院校信息与计算科学专业系列教材

---

---

## 编辑委员会名单

主编 张平文

编委 (按姓氏笔画排序)

白峰杉 (清华大学数学科学系)

张平文 (北京大学数学科学学院)

张林波 (中国科学院数学与系统科学研究院)

张兆田 (国家自然科学基金委信息学部)

姜 明 (北京大学数学科学学院)

查红彬 (北京大学信息科学技术学院)

责任编辑 范素珍

## 序 言

数学科学不仅是自然科学的基础，也是一切重要技术发展的基础。电子计算机的发明及计算技术的发展都以数学为其理论基础。计算机技术的发展使得数学的应用更加直接和广泛，同时也正在改变人们对数学的传统认识。数学素质已成为今天培养高层次创新人才的重要基础。

计算数学是一门随着计算机发展而形成的学科，研究如何应用计算机有效地求解各类计算问题的方法和理论，其中涉及的计算问题主要来源于科学研究和工程设计，因此人们又称这门学科为科学计算。今天，计算和实验、理论分析一起成为当今科学活动的主要方式。在物理、化学、力学、材料科学、环境科学、信息科学和生物科学等领域，计算方法和技术已经成为被广泛接受的科学研究手段，这一系列计算性的分支学科统称为计算科学。现在，计算在科学研究和工程设计中几乎无处不在，对科技的发展起到举足轻重的作用。由于计算数学的发展已有 50 多年的历史，在教学科研方面有着深厚的积累，传统的教材建设也相对比较规范。伴随着计算机技术突飞猛进的发展，特别是超大规模计算机平台的建立和使用，以及科学研究中不断增长的对计算方法和技术的需求，传统的计算数学教材已不能满足教学的需要。

信息化已成为当今世界发展的重要趋势，也是衡量一个国家现代化水平的重要标志。信息科学可以理解为信息获取、传输、处理与控制的科学。我国信息科学发展的时间相对较短，但发展迅猛。发展信息科学需要数学基础，当然也离不开计算机科学。由于信息科学的多学科交叉的特点，在不同院校和专业，信息科学都得

到了一定的发展。但也正是这些原因,使得信息科学的学科定位,尤其是教材建设百家争鸣,缺乏统一的规范,为教学带来了很大的实际困难。

教育部 1998 年颁布的普通高等院校专业目录中,“信息与计算科学专业”被列为数学类下的一个新专业。这一新专业的设置很好地适应了新世纪以信息和计算技术为核心的数学人才的培养。然而,作为一个新专业,对其专业内涵、专业规范、教学内容与课程体系等有一个认识与探索的过程。教育部数学与统计学教学指导委员会经过多年艰苦细致的工作,对一些问题有了比较明确的指导意见,发表了《关于信息与计算科学专业办学现状与专业建设相关问题的调查报告》及《信息与计算科学专业教学规范》(讨论稿)(见《大学数学》第 19 卷 1 期(2003))。按照新的教学规范,信息与计算科学专业是以信息技术和计算技术的数学基础为研究对象的理科类专业。其目标是培养具有良好的数学基础和数学思维能力,掌握信息与计算科学基础理论、方法与技能,能解决信息技术和科学与工程计算中实际问题的高级专门人才。

近年来在教育部领导下,高等院校每年大量扩大招生,从而使得我国的高等教育从精英化向大众化转变。现在全国大约有 400 所高校开办了“信息与计算科学专业”,每年招收 3 万名左右的本科生。其中大部分学校缺乏从事该领域教学科研经验的教师,对专业的定位和课程设置也不明确。即使是全国一流的高校,也是偏向于单一学科,新专业没有一个完整的切实可行的教学大纲,适合交叉学科专业的教材极其匮乏。

“信息与计算科学专业”属于数学类,前两年的课程基本上是明确的,教材也很多。本套系列教材重点建设后两年的专业课。由于重点高校大部分有自己的课程体系和教材建设,本系列教材主要针对普通高等院校开办的该专业。依据教育部“强基础,宽口径,重实际,有侧重,创特色”的办学指导思想,清华大学出版社《高

等院校信息与计算科学专业系列教材》编委会成员对专业定位、课程设置、教材内涵等进行了深入的探讨，并邀请有多年教学和科研经验的教师编写系列教材。特别是北京大学姜明教授等对涉及信息科学的教材建设花费了大量心血，在此对他们表示感谢。

为适应不同类型院校和不同层次要求的课程需求，教材建设也需要多样化、层次化。我们相信，该系列教材的出版对缓解本专业教材的紧缺局面，逐步形成专业定位与课程设置，推动信息与计算科学的发展，培养适应时代发展的交叉学科人才，提高中国数学教育水平会起到一定的作用。

张平文

2005年9月6日

# 前 言

随着高性能并行计算机,尤其是 Linux 微机机群在我国应用部门、大学和科研机构的普及,并行计算已经成为许多科研和工程技术人员亟待掌握的一项研究开发手段。但是,在我国,对并行计算的基本原理、并行算法设计、并行程序的设计与实现、并行性能优化,以及一些成熟的科学计算软件工具箱、库等的普及教育和推广应用还明显不够,大大制约了并行计算技术在科学研究与工程设计中应有作用的发挥。本书是并行计算,特别是分布式并行计算环境及消息传递并行编程的入门教材。它侧重于介绍利用现有的微机条件建立并行计算的软硬件环境,以及并行算法设计、MPI 消息传递并行编程的基本概念与方法。作者希望通过本书,一方面加强和规范普通高校的并行计算课程,另一方面在科学研究与工程应用领域普及并行计算技术,推进高性能计算技术的应用。

全书分为 3 部分,共包括 9 章和 2 个附录。

第 1 部分包括第 1 章至第 4 章,主要介绍并行计算的基础知识。第 1 章讲述并行计算机的发展历史、并行计算机体系结构以及并行计算、并行算法设计的基本名词和概念。第 2 章介绍 Linux 操作系统的安装、Linux 操作系统的基本命令和工具,以及 Linux 操作系统中的程序开发、调试。第 3 章讲述标准消息传递并行编程接口 MPI,并介绍如何利用目前流行的免费 MPI 软件 MPICH 和 Linux 系统在局域网上建立实用的并行计算平台。考虑到本书的篇幅限制,并鉴于国内已有一些专门关于 MPI 编程的书,本书中关于 MPI 编程部分仅限于讲述 MPI 编程的基本概念和介绍一些 MPI 的重要函数,同时在附录 B 中提供 MPI 变量和函数的完

整参考,方便读者查询。第4章讲述程序性能评价与优化方面的有关知识。

第2部分包括第5章至第9章。在这部分中,通过一些典型并行算法设计及并行程序实现的实例,介绍并行算法设计的基本思想与MPI并行程序实现的基本技巧。第5章介绍一个自适应数值积分算法的并行算法设计与MPI并行程序实现。第6章介绍矩阵计算的并行算法与程序。第7章介绍快速傅里叶变换(FFT)的并行算法及在消息传递并行环境中的实现方法。第8章以二维Poisson方程5点差分格式的点Jacobi迭代算法为例,介绍基于区域分解方法的并行算法设计与并行程序编制。第9章通过二维热传导方程的ADI格式介绍基于流水线方法的并行算法设计的基本思想及实现方法。

第3部分由2个附录构成。附录A介绍一些重要的高性能计算、并行计算的工具和平台,包括BLAS, LAPACK, ScaLAPACK, FFTW和PETSc。附录B是一个为方便读者速查而整理的较完整的MPI参考手册。

本书最后是MPI函数、变量索引和名词、概念索引。大部分章后面附有习题,一部分习题是为了巩固、加深对该章内容的理解,而另一部分习题则是对正文内容的扩充。

本书可作为一本课堂使用或者自学使用的教材,在编写过程中考虑了适应尽可能广的读者群体,以便读者不需要很多的预备知识,就能够在逐步的使用过程中掌握利用并行计算技术解决自己学习和工作领域中的计算问题的知识和技术。本书的特点是:注重实效性,使读者能够学到具体有用的知识和技术,而不必首先建立对整个知识系统结构的认识;强调实践性,读者应该一边学习一边操作,认真分析和重复书中提供的具体例子,将介绍的知识应用于各自的专业领域中;强调普适性,侧重于科学计算领域面临的一些共性问题的并行计算方法与技术,并注意介绍一些国际流行的



库、软件和工具箱。希望读者能够结合自己的实际情况，练习简单微机机群环境建立的实际操作及 Linux 系统的管理和使用，与自己的工作领域相结合，编写具体模型问题的例子程序，举一反三，学以致用。通过本书的学习，迅速掌握并行计算机的使用与编程，并且能够利用已有条件采用微机机群技术自行建立实验性或实用的并行计算环境，用于解决实际问题。

本书的目的是介绍运用高性能并行计算机，深入解决科学计算问题所必须掌握的并行计算原理、并行算法设计、并程序设计和性能优化等方面的基本知识和技术手段。鉴于此，本书写作过程中尽量避免枯燥的系统介绍，而是侧重于培养读者解决实际问题的能力，并注意介绍编著者在这方面的经验。限于作者的学识以及时间，书中错误与片面之处在所难免，恳请读者不吝指正。

在本书的作者中，张林波（中国科学院数学与系统科学研究院）编写了第 3 章、第 5 章、第 9 章和附录 B，以及第 2 章、第 4 章和附录 A 中的部分内容；迟学斌（中国科学院计算机网络信息中心）编写了第 6 章、第 7 章及附录 A 中的部分内容；莫则尧（北京应用物理与计算数学研究所）编写了第 1 章、第 4 章和第 8 章；李若（北京大学数学科学学院）编写了第 2 章。

本书中的程序实例可以从下面的网址下载：

<ftp://ftp.cc.ac.cn/pub/home/zlb/bxjsbook/code/>

下述人员提供了附录 A 中的部分内容：程强 (A.5)、陈江 (A.3)、赵韬 (A.2)、谷同祥 (A.4)，在此一并致谢。

作 者

2006 年 3 月 8 日于北京

# 目 录

第 1 部分 基础知识	1
第 1 章 预备知识	3
1.1 并行计算的主要研究目标和内容	3
1.1.1 什么是并行计算	4
1.1.2 并行计算的主要研究目标和内容	4
1.1.3 推动并行计算发展的主要动力	6
1.2 并行计算机发展历史	9
1.2.1 应用需求的推动作用	9
1.2.2 20 世纪 70 年代	10
1.2.3 20 世纪 80 年代早期	10
1.2.4 20 世纪 80 年代中期	10
1.2.5 20 世纪 80 年代后期	11
1.2.6 20 世纪 90 年代早期	12
1.2.7 20 世纪 90 年代中后期	13
1.2.8 2000 年到当前	17
1.3 并行计算机体系结构	20
1.3.1 结点	21
1.3.2 并行计算机互联网络拓扑结构	22
1.3.3 多级存储体系结构	33
1.3.4 访存模型	40
1.3.5 并行计算机分类	41
1.4 操作系统与并行编程环境	46

---

1.4.1	进程、进程间通信与线程	47
1.4.2	并行编程环境	51
1.5	并行算法	56
1.5.1	并行算法的分类	56
1.5.2	并行算法的发展阶段	57
	习题	59
<b>第 2 章</b>	<b>Linux 操作系统与程序开发环境</b>	<b>60</b>
2.1	Linux 安装与使用入门	60
2.1.1	Linux 系统的安装	60
2.1.2	基本使用与管理	64
2.2	Linux 基本命令和概念	74
2.2.1	一些基本命令	74
2.2.2	shell	94
2.2.3	文本文件处理	122
2.3	程序开发环境	131
2.3.1	第一个程序 (C 程序)	131
2.3.2	FORTRAN 程序的开发	141
2.3.3	软件开发	146
<b>第 3 章</b>	<b>消息传递编程接口 MPI</b>	<b>164</b>
3.1	MPICH 安装与程序编译、运行、调试	165
3.1.1	单机环境下 MPICH 的安装	165
3.1.2	机群环境下 MPICH 的安装	171
3.2	MPI 编程	177
3.2.1	MPI 编程的基本概念	177
3.2.2	程序基本结构	179
3.2.3	MPI 的原始数据类型	181

---

3.2.4	点对点通信函数与通信模式	181
3.2.5	聚合通信与同步	187
3.2.6	自定义数据类型	189
3.2.7	进程组与通信器	194
3.2.8	进程拓扑结构	195
3.2.9	文件输入输出	196
3.3	MPI 程序主要结构	203
	习题	207
<b>第 4 章</b>	<b>程序性能评价与优化</b>	<b>210</b>
4.1	并行程序执行时间	210
4.2	并行加速比与效率	211
4.3	并行程序性能评价方法	212
4.3.1	浮点峰值性能与实际浮点性能	212
4.3.2	数值效率和并行效率	213
4.4	可扩展分析	216
4.5	程序性能优化	217
4.5.1	串行程序性能优化	217
4.5.2	并行程序性能优化	223
	习题	225
<b>第 2 部分</b>	<b>并行算法设计与实现实例</b>	<b>229</b>
<b>第 5 章</b>	<b>自适应数值积分</b>	<b>231</b>
5.1	梯形积分公式	231
5.2	局部二分自适应区间加密	232
5.3	串行程序	235
5.4	基于简单区域分解的并行算法	239
5.5	基于主从模式的并行算法	243

---

5.5.1	基于非阻塞通信的并行程序	249
5.5.2	基于散发/收集通信的并行程序	252
5.6	基于动态负载调度的并行算法	256
	习题	259
<b>第 6 章</b>	<b>矩阵并行计算</b>	<b>261</b>
6.1	并行矩阵乘法	263
6.1.1	串行矩阵乘法	263
6.1.2	行列划分算法	263
6.1.3	行行划分算法	264
6.1.4	列列划分算法	265
6.1.5	列行划分算法	266
6.1.6	Cannon 算法	267
6.2	线性代数方程组并行求解方法	268
6.2.1	分布式系统的并行 LU 分解算法	269
6.2.2	三角方程组的并行解法	271
6.3	对称正定线性方程组的并行解法	273
6.3.1	Cholesky 分解列格式的并行计算	273
6.3.2	双曲变换 Cholesky 分解	275
6.3.3	修正的双曲变换 Cholesky 分解	277
6.4	三对角方程组的并行解法	279
6.5	经典迭代算法的并行化	282
6.5.1	Jacobi 迭代法	282
6.5.2	Causs-Seidel 迭代法	283
6.6	异步并行迭代法	284
6.6.1	异步并行迭代法基础	284
6.6.2	线性迭代的一般收敛性结果	285

---

6.7 代数特征值问题的并行求解	286
6.7.1 对称三对角矩阵特征值问题	287
6.7.2 Householder 变换	289
6.7.3 化对称矩阵为三对角矩阵	289
习题	290
<b>第 7 章 FFT 算法与应用</b>	291
7.1 一维串行 FFT 算法	292
7.2 二维串行 FFT 算法	297
7.3 并行 FFT 算法	298
7.4 FFT 应用示例	305
7.4.1 多项式相乘	305
7.4.2 循环矩阵方程组的求解	306
<b>第 8 章 二维 Poisson 方程</b>	308
8.1 并行算法设计	310
8.2 MPI 并行程序设计	312
8.3 并行效率分析	317
8.4 MPI 并行程序的改进	319
习题	323
<b>第 9 章 二维热传导方程</b>	325
9.1 空间离散与区域划分	325
9.2 时间离散: 显式格式	326
9.3 时间离散: 隐式/半隐式格式	331
9.4 时间离散: ADI 方法	332
9.5 分块流水线方法	334
9.5.1 模型问题	334
9.5.2 模型问题的并行效率分析	337

---

9.5.3 二维热传导方程的分块流水线算法程序实例	340
习题	351
<b>第 3 部分 附 录</b>	<b>353</b>
<b>附录 A 并行程序开发工具与高性能程序库</b>	<b>355</b>
A.1 BLAS	355
A.1.1 Level 1 BLAS	357
A.1.2 Level 2 BLAS	357
A.1.3 Level 3 BLAS	359
A.2 LAPACK	360
A.2.1 LAPACK 软件包组成	361
A.2.2 LAPACK 程序文档	364
A.2.3 LAPACK 参数设计	364
A.2.4 LAPACK 使用示例	367
A.3 ScaLAPACK	376
A.3.1 ScaLAPACK 体系结构	377
A.3.2 ScaLAPACK 程序介绍	380
A.3.3 ScaLAPACK 安装	384
A.3.4 ScaLAPACK 编程指南	388
A.4 FFTW	392
A.4.1 复型变换	393
A.4.2 实型变换	396
A.4.3 并行 FFTW	397
A.4.4 FFTW 计算实例	397
A.5 PETSc	400
A.5.1 PETSc 的系统结构	401
A.5.2 PETSc 的基本特色	402

---

A.5.3	PETSc 的基本功能 .....	404
A.5.4	PETSc 计算实例 .....	406
A.5.5	PETSc 小结 .....	419
<b>附录 B</b>	<b>MPI 参考手册</b> .....	<b>421</b>
B.1	MPI 函数、变量速查表 .....	421
B.2	MPI 预定义的变量及类型 .....	426
B.2.1	C 语言 MPI 原始数据类型 .....	426
B.2.2	FORTRAN 77 语言 MPI 原始数据类型 .....	427
B.2.3	预定义的通信器与进程组 .....	428
B.2.4	用于归约函数的预定义的二目运算 .....	428
B.2.5	C 变量类型及预定义函数 .....	429
B.2.6	空对象 .....	430
B.2.7	MPI 常量 .....	430
B.2.8	进程拓扑结构 .....	431
B.2.9	通信状态信息 .....	431
B.2.10	错误码 .....	432
B.2.11	MPI-2 用于文件输入输出的常量与类型 .....	432
B.3	初始化、退出与错误处理函数 .....	434
B.4	点对点通信函数 .....	436
B.4.1	阻塞型通信函数 .....	436
B.4.2	非阻塞型通信函数 .....	438
B.4.3	持久通信函数 .....	442
B.5	数据类型与打包函数 .....	444
B.6	同步与聚合通信函数 .....	448
B.7	进程组与通信器操作 .....	453
B.7.1	进程组操作 .....	453
B.7.2	域内通信器操作 .....	455



B.7.3 进程拓扑结构 .....	457
B.7.4 域间通信器操作 .....	462
B.8 时间函数 .....	462
B.9 MPI-2 文件输入输出函数 .....	463
<b>参考文献</b> .....	<b>475</b>
<b>MPI 函数、变量索引</b> .....	<b>479</b>
<b>名词索引</b> .....	<b>483</b>