

● 高等学校21世纪计算机教材

分布式 并行计算技术

李代平 张信一 罗寿文 方海翔 著

冶金工业出版社

本书受 广西壮族自治区自然科学基金项目 资助
广西壮族自治区攻关计划课题项目

分布式并行计算技术

李代平 张信一 罗寿文 方海翔 著

北 京

冶金工业出版社

2004

内 容 简 介

本书阐述在当前计算机网络的应用领域中,如何利用网络知识和技术进行并行计算。内容包括并行计算机系统及其结构模型,网络计算平台,消息传递环境 PVM,有限元法在电法勘探中的应用,线性方程组的分析,开发平台系统框架,机群计算的实现及工程算例。

本书内容详实、条理清晰、深入浅出,采用图文并茂的阐述手法,并引入许多计算程序的研究和源代码,让读者方便地学习和进行分布式并行计算的研究。

本书既可以作为高校计算机专业本科生、研究生的教材,也可以供计算机专业的高级人员参考之用。

图书在版编目(CIP)数据

分布式并行计算技术 / 李代平等著. —北京:冶金工业出版社, 2004.1

ISBN 7-5024-3412-7

I. 分... II. 李... III. 分布式计算机系统—并行算法 IV. ①TP301.6②TP338.8

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2003)第 111794 号

出版人 曹胜利(北京沙滩嵩祝院北巷 39 号,邮编 100009)

责任编辑 程志宏

湛江蓝星南华印务公司印刷;冶金工业出版社发行;各地新华书店经销

2004 年 1 月第 1 版, 2004 年 1 月第 1 次印刷

787mm×1092mm 1/16; 15.5 印张; 353 千字; 238 页; 1-2600 册

30.00 元

冶金工业出版社发行部 电话:(010) 64044283 传真:(010) 64027893

冶金书店 地址:北京东四西大街 46 号(100711) 电话:(010) 65289081

(本社图书如有印装质量问题,本社发行部负责退换)

前 言

一、关于本书

分布式并行计算就是利用一组由多种不同结构功能组成的、网络互连的计算机同时解决一个大型综合问题的计算。因为这种计算环境,分布式并行计算具有计算成本低,计算性能最佳,满足不断增长的计算需求,开发方便等优点。作为计算机研究的又一热点,PVM、Express 等就是在这样的背景下于上世纪八十年代末九十年代初出现的分布式并行计算环境。其中 PVM 由于其源代码可以免费得到,因而较其他环境得到更多研究人员的关注。

目前,我国一般的应用单位都具有局域网或广域网的结点,基本上具备分布式并行计算的硬件环境。同时,当前国际上有许多开放软件没有版权问题,可以从国际互联网上获取其代码及其相应的辅助工具程序,这也有利于分布式并行计算在我国的发展。这种计算环境也特别适合我国国情。因此,近几年我国的分布式并行计算应用理论和方法的研究取得了可喜的成绩。

本书正是介绍近几年我国专业人员从事分布式并行计算应用理论和方法研究的成果。特别是受到广西壮族自治区科技厅资助的省重点攻关计划课题分布式并行计算在物探数据处理中的应用研究和广西壮族自治区科技厅资助的自然科学基金项目可视化分布式并行计算的研究成果。以供后进读者用最短的时间了解这种计算在我国的发展情况,并迅速掌握分布式并行计算技能。

二、本书结构

本书共分为 8 章,每章的内容如下:

第 1 章:并行计算机系统及其结构模型。主要介绍了并行计算提出的背景、目前国内外的研究现状、并行计算、并行计算机系统互连、网络并行计算环境、高性能计算与并行计算、机群系统的组成、机群系统的特点、机群系统的可扩展性、机群系统设计中需考虑的因素。

第 2 章:消息传递环境 PVM。主要介绍了消息传递环境、PVM 的基础知识、PVM 组成和功能、PVM 的通信机制、PVM 程序设计、在 Master/ Slave 数据通信。

第 3 章:计算方法。主要介绍了乔勒斯基(Cholesky)分解法、共轭梯度法的基础知识、梯度法的基本思想、共轭梯度法的基本原理、共轭梯度法的 C++语言实现、网络并行平台构架。

第 4 章:网络并行计算在物探中的应用。主要介绍了电法勘探的基础知识、有限元法的基础知识、电法勘探问题域分析、线性方程组的分析。

第 5 章:并行程序设计。主要介绍了编程模式、主程序、从程序、物探数据处理系统部分源代码。

第 6 章:机群计算的实现及工程算例。主要介绍了建立机群计算环境、串行程序设计、窗口程序、数据录入窗口程序、工程算例、系统性能的评价。

第7章：任务描述器。主要介绍了任务描述器控件的属性与方法、接口设计、数据库设计、链表数据结构的设计、调用代码插入器、任务描述器的实现代码。

第8章：网络并行计算平台分析和设计。主要介绍了研究目标、创建自定义的基于PVM M/S模式的程序、系统平台框架、Visual C++环境开发、向导、代码生成器、代码插入器、任务分配和负载均衡、监控窗口的实现、关键字定义、PvmBuilder用户指南、监控窗口等。

本书最后并附有相应的参考答案以供读者学习参考。

三、本书特点

本书内容详实、条理清晰、深入浅出地介绍了并行计算的理论和算法。采用图文并茂的阐述手法，并引入许多计算程序的一般结构和源代码，让读者方便地学习和进行分布式并行计算的研究。

在每章的后面对本章的内容进行了总结之后给出了适量的综合练习，帮助读者进一步消化和吸收所学的知识。

四、适用对象

本书既可以作为高校计算机专业本科生、研究生的教材，也可以供计算机专业的高级人员参考之用。

本书的编写除作者外，章文、罗伟钢、王昌元、张伯泉参加了上述科研项目和本书的部分编写工作。本书在今天得以出版，首先要感谢广西壮族自治区科技厅的支持，再次要感谢广东工业大学计算机学院为我们提供了宽松自由的研究环境。

最后，希望各位读者对本书存在的错误和疏漏给予批评指正。特别是书中有许多思想、观点和研究心得属首次公开发表，若有不当之处，希望各位专家和同行不吝赐教。

读者在学习本书的过程中如遇到疑问或是有什么建议、意见和要求，可以发E-mail至 **service@cnbook.net**，也可以到相关网站寻求帮助或进行探讨，网址：**http://www.cnbook.net**。

由于时间仓促，作者水平有限，书中的错误和疏漏在所难免，恳请读者批评指正。

编 者

2003年11月

目 录

第 1 章 并行计算机系统及其结构模型	1
1.1 并行计算提出的背景	1
1.1.1 并行计算与计算科学	1
1.1.2 科学与工程计算需求	2
1.2 目前国内外的研究现状	3
1.3 并行计算	3
1.3.1 并行计算的概念	4
1.3.2 并行计算机类型	5
1.4 并行计算机系统互连	6
1.4.1 系统互连	6
1.4.2 静态互连	7
1.4.3 动态互连	9
1.4.4 宽带互连	9
1.5 网络并行计算环境	10
1.5.1 消息传递标准平台 MPI	11
1.5.2 异构编程环境 PVM	12
1.5.3 网络并行的优点	12
1.6 高性能计算与并行计算	13
1.6.1 对高性能计算的需求	13
1.6.2 并行计算的提出	14
1.6.3 并行计算体系结构	15
1.7 机群系统的组成	15
1.7.1 机群系统的概念	16
1.7.2 机群结点	17
1.7.3 互连网络	18
1.7.4 并行编程环境	19
1.8 机群系统的特点	19
1.9 机群系统的可扩展性	19
1.9.1 可扩展性系统结构	19
1.9.2 可扩展性编程	21
1.10 机群系统设计中需考虑的因素	22
1.10.1 通信技术	22
1.10.2 负载平衡	22
1.10.3 单一系统映像	23

1.10.4 利用现有的软硬件技术	24
1.10.5 其他因素	24
小结	24
练习一	25
一、选择题	25
二、填空题	25
三、简答题	25
第2章 消息传递环境 PVM	26
2.1 消息传递环境	26
2.1.1 消息传递环境的概念	26
2.1.2 基于消息传递的并行程序设计	26
2.2 PVM 简介	28
2.2.1 产生和发展	28
2.2.2 PVM 特点	28
2.3 PVM 组成和功能	29
2.3.1 组成	29
2.3.2 功能	29
2.4 PVM 的通信机制	30
2.5 PVM 程序设计	31
2.5.1 编程模式	31
2.5.2 Hello, World 示例	32
2.6 在 Master/ Slave 数据通信	33
2.6.1 主机上 Master 接受与返回发送数据	33
2.6.2 从属机上 Slave 接受与返回发送数据	37
小结	41
练习二	41
一、选择题	41
二、填空题	42
三、简答题	42
第3章 计算方法	43
3.1 乔勒斯基 (Cholesky) 分解法	43
3.1.1 应用乔勒斯基进行分解的分析	43
3.1.2 串行主要算法	45
3.1.3 并行处理	46
3.1.4 电阻率计算	47
3.2 共轭梯度法简介	48
3.3 梯度法的基本思想	49

3.3.1 算法原理	49
3.3.2 对称正定矩阵、向量的正交与共轭变换	50
3.4 共轭梯度法的基本原理	51
3.5 共轭梯度法的 C++ 语言实现	53
3.5.1 函数说明	53
3.5.2 函数定义	54
3.6 网络并行平台构架	56
3.6.1 函数说明	56
3.6.2 任务最大并行化	57
3.6.3 系统平台构架实现	59
3.6.4 平台特点	60
小结	61
练习三	61
一、选择题	61
二、填空题	62
三、简答题	62
第 4 章 网络并行计算在物探中的应用	63
4.1 电法勘探简介	63
4.2 有限元法简介	63
4.2.1 产生与发展	63
4.2.2 基本思想	64
4.3 电法勘探问题域分析	64
4.3.1 偏微分方程与边值问题	64
4.3.2 网格剖分	66
4.3.3 线性插值	69
4.3.4 变分问题离散化	74
4.3.5 合成	75
4.4 线性方程组的分析	77
4.4.1 求解单元刚度矩阵	77
4.4.2 求解总刚度矩阵	79
小结	80
练习四	81
一、选择题	81
二、填空题	81
三、简答题	81
第 5 章 并行程序设计	82
5.1 编程模式	82

5.2 主程序	83
5.2.1 算法	83
5.2.2 关键代码的实现	83
5.3 从程序	84
5.3.1 算法	84
5.3.2 关键代码的实现	84
5.4 物探数据处理系统部分源代码	85
5.4.1 Master 主程序	85
5.4.2 Slave 从程序	94
小结	109
练习五	109
一、选择题	109
二、填空题	110
三、简答题	110
第 6 章 机群计算的实现及工程算例	111
6.1 建立机群计算环境	111
6.1.1 系统结构——PC 机群	111
6.1.2 操作系统——Windows 2000	111
6.1.3 编程环境——PVM & C++	112
6.2 串行程序设计	112
6.3 窗口程序	113
6.4 数据录入窗口程序	127
6.5 工程算例	141
6.6 系统性能的评价	142
小结	142
练习六	142
一、选择题	142
二、填空题	143
三、简答题	143
第 7 章 任务描述器	144
7.1 任务描述器控件的属性与方法	144
7.2 接口设计	144
7.3 数据库设计	145
7.4 链表数据结构的设计	146
7.5 调用代码插入器	147
7.6 任务描述器的实现代码	148
小结	192

练习七	192
一、选择题	192
二、填空题	192
三、简答题	193
第 8 章 网络并行计算平台分析和设计	194
8.1 WPVM3.4 简介	194
8.1.1 PVM 计算环境的构建	194
8.1.2 WPVM3.4 存在的问题	194
8.1.3 PVM 计算环境中并行程序设计的特点	195
8.1.4 Win 32 平台上 PVM 开发环境现状	195
8.2 研究目标	196
8.3 创建自定义的基于 PVM M/S 模式的程序	197
8.4 系统平台框架	199
8.4.1 主要任务	199
8.4.2 系统接口图	199
8.5 Visual C++ 环境开发	200
8.5.1 Visual C++ 自动化编程接口	201
8.5.2 Developer Studio 对象关系模型	201
8.5.3 Visual C++ 自定义插件接口	201
8.5.4 创建 Visual C++ Add-in 的过程	202
8.6 向导	202
8.6.1 向导的功能	202
8.6.2 Visual C++ 中的向导建立	204
8.7 代码生成器	205
8.7.1 代码生成器的设计	205
8.7.2 代码生成器的实现	208
8.7.3 代码生成器源代码	208
8.8 代码插入器	211
8.8.1 DLL	211
8.8.2 代码插入器的需求分析	212
8.8.3 代码插入器的具体设计	213
8.8.4 代码插入器的实现流程图	214
8.8.5 代码生成器源代码	217
8.9 任务分配和负载均衡	219
8.9.1 二次均分策略	219
8.9.2 动态分配	220
8.10 监控窗口的实现	222
8.11 关键字定义	223

8.12 PvmBuilder 用户指南	224
8.12.1 向导	224
8.12.2 任务描述器	225
8.13 监控窗口	228
小结	229
练习八	229
一、选择题	229
二、填空题	230
三、简答题	230
参考答案	231
第 1 章	231
第 2 章	231
第 3 章	232
第 4 章	233
第 5 章	233
第 6 章	234
第 7 章	234
第 8 章	236
参考文献	237

第 1 章 并行计算机系统及其结构模型

本章首先向读者介绍并行计算产生的背景和目前国内外的研究现状，然后按步骤地对并行计算的基础知识进行详细地阐述，其中包括并行计算的类型，高端并行计算机，系统互连和系统结构等方面。

在科学技术的发展中，许多领域需要处理极其庞大的数据量。另一方面，通过规模式扩充的 Internet 连接数以万计的计算机，潜在着前所未有的计算能力。网络并行计算技术为利用这一巨大资源来满足计算需求提供了基础。然而，在开发这丰富资源的背后却隐含着涉足者的艰难。并程序对开发人员的要求很高，需要对并行软件非常熟悉。因此，研究网络并行计算具有十分重要的意义。

1.1 并行计算提出的背景

网络并行计算是近几年国际上并行计算新出现的一个重要研究方向，也是热门课题。网络并行计算就是利用互联网上的计算机资源实现其他问题的计算，这种并行计算环境的显著优点是投资少、见效快、灵活性强等。由于科学计算的要求，越来越多的用户希望能具有并行计算的环境，但是除了少数计算机大户（石油、天气预报）外，很多用户由于工业资金的不足而不能使用并行计算机。一旦实现并行计算，就可以通过网络实现超级计算的目的。因此，就不必购买昂贵的并行计算机。

目前，国内一般的应用单位都具有局域网或广域网的结点，所以基本上具备网络计算的硬件环境。其次，网络并行计算的系统软件 PVM 是当前国际上公认的一种消息传递标准软件系统。有了它，就可以在不具备并行机的情况下进行并行计算。由于该软件是美国国家基金资助的开放软件，没有版权问题。可以从国际互联网上获取其代码及其相应的辅助工具程序。这无疑是我们对计算大问题带来了一次良好的机遇。这种计算环境特别适合我国的国情。

因此，近几年国内一些高校和科研院所投入了一些力量来进行这种软件的应用理论和方法的研究，并取得了可喜的成绩。到目前为止，网络并行计算已在勘探地球物理、机械制造、计算数学、石油资源数字模拟计算等许多应用领域开展研究。这将在计算机的应用和各应用领域科学开创一个崭新的环境。

1.1.1 并行计算与计算科学

并行计算（Parallel Computing），简单地讲，就是在并行计算机上所作的计算，它和常说的高性能计算（High Performance Computing）、超级计算（Super Computing）是同义词，因为任何高性能计算和超级计算总离不开使用并行技术。

在并行计算中，又有数值算法与非数值算法。

（1）数值计算是指基于代数关系运算的计算问题。

如矩阵运算、多项式求值、线性代数方程组求解等。求解数值计算问题的算法称为数值算法（Numerical Algorithm）。

科学与工程中的计算问题如计算力学、计算物理、计算化学等一般是数值计算问题。

(2) 非数值计算是指基于比较关系运算。

诸如排序、选择、搜索、匹配等符号处理,相应的算法也称为非数值算法(Non-numerical Algorithm)。

非数值计算在符号类信息处理中获得广泛应用,如数据库领域的计算问题、海量数据挖掘等。

近年来广泛关注的生物信息学主要也是非数值计算。

1.1.2 科学与工程计算需求

在应用需求方面,人类对计算机性能的要求是无止境的,在诸如预测模型的构造和模拟、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中都对计算提出了极高的具有挑战性的要求。例如,在作数值气象预报时,要提高全球气象预报的准确性,据估计在经度、纬度和大气层方向上至少要取 $200 \times 100 \times 20 = 40$ 万个网格点。

高性能计算机产生和发展的目的就是为了满足日益增长的大规模科学与工程计算、事务处理与商业计算的需求。问题求解最大规模是并行计算机最重要的指标之一,也是一个国家高新技术发展的标志。

一般地,问题规模分解为输入输出规模、计算规模、内存需求、通信(同步)规模,分别表示问题求解所需要的 I/O 量、计算量、内存大小和通信量(包括通信次数与通信数据量)。根据在求解中所消耗资源程度,问题又相应分为 CPU 密集应用、memory 密集应用、disk 密集应用和网络密集应用。针对不同类型的问题,性能瓶颈也往往不同,并行算法就是要有针对性地消除相应的瓶颈,从而达到缩短计算时间的目的。

对高速并行计算的需求是广泛的,但归纳起来主要有三种类型的应用需求:

(1) 计算密集(Compute-Intensive)型应用,如大型科学与工程数值模拟。

(2) 数据密集(Data-Intensive)型应用,如数字图书馆、数据仓库、数据开采和计算可视化等。

(3) 网络密集(Network-Intensive)型应用,如协同工作、遥控和远程医疗诊断等。

在科学和工程计算中,许多应用领域都有挑战性的课题。在磁记录技术应用领域,研究静磁和交互感应以降低高密度磁盘的噪音的计算与模拟;在新药设计应用领域,通过抑制人的免疫故障病毒蛋白酶的作用来研制治疗癌症和艾滋病的药物的计算与模拟;在高速民航应用领域,用计算流体动力学来研制超音速喷气发动机的计算与模拟;在催化作用应用领域,仿生催化剂计算机建模,分析合成过程中的酶作用的计算与模拟;在燃料燃烧应用领域,通过化学动力学计算,提示流体力学的作用,设计新型发动机的计算与模拟;在海洋建模应用领域,对海洋活动与大气流的热交换进行整体海洋模拟的计算与模拟;在臭氧耗损应用领域,研究控制臭氧消耗过程的化学和动力学机制的计算与模拟;在数字解析应用领域,用计算机研究实时临床成像、计算层析术、磁共振成像的计算与模拟;在大气污染应用领域,对大气质量模型进行模拟研究,控制污染的传播,提示其物理与化学机理;在蛋白质结构设计应用领域,使用计算机模拟,对蛋白质组成的三维结构进行研究的计算与模拟;在图像理解应用领域,实时绘制图像或动画的计算与模拟;在密码破译应用领域,破译由长位数组成的密码,求找该数的两个乘积因子的计算与模拟。

1.2 目前国内外的研究现状

随着商品化微处理器、网络设备的发展,以及 MPI/PVM 等并行编程标准的发布,出现了机群架构的并行计算机。

IBM SP2 系列机群系统就是其中的典型代表。在这些系统中,各个节点都采用标准的商品化计算机,它们之间通过高速网络连接起来。

现在,越来越多的并行计算机系统采用商品化的微处理器加上商品化的互连网络构造,这种分布存储的并行计算机系统称为机群。一旦国内外所有的高性能计算机厂商都生产这种具有极高性价比的计算机,并行计算就进入了一个新的时代,它的应用达到了前所未有的广度和深度。

机群网络并行计算近几年成为国内外研究的热门课题。国际上,机群系统并行环境在进一步完善之中,不少国外大学推出了自己的机群系统,商业机群也逐渐成熟起来。在国内,中国科学院和国内一些大学投入了相当的力量对其应用理论和方法进行研究,如国家智能计算机研究开发中心的有关机群的在研项目,有机群系统 I/O 负载的收集与分析、面向机群和网络的分布式构件平台研究和集群服务器功能软件等。

随着科学技术的进步,高性能计算机的计算速度和容量的迅速增长,以前无法实现的大型计算问题得到了很好的解决。许多科技工作者在解释自己研究的科技领域中出现的物理现象时提出了一些现代复杂数学和计算技术问题,而这些理论和方法都要解决大问题的计算。最后归结到求解大型方程组等。不少应用软件,在求解方程组方面耗费的实际计算时间占 80% 以上,因而研究高效并行算法及其计算环境在国内外引起了许多科学家的注意。

预测模型的构造和模拟、工程设计和自动化、能源勘探、医学、军事、机械制造、计算数学、石油资源数字模拟问题,常常涉及到现代的复杂数学问题和计算方法,又具有很强的实用性。这些领域的许多现象的描述都是各种数学物理方程,从数学物理方程的求解方法导出大型稀疏线性方程组。近几年又有将分形、神经网络及遗传算法应用于这些领域的计算。

由此,许多数学科学家在这些领域上提出了许多高效的计算方法。这些计算方法都有一个共同的特点,那就是计算空间大。目前将这些高效的计算方法真正应用于解决实际问题,而且行之有效的则并不多见。分析其原因,主要是这类问题要求解大型线性方程组,许多用户又不具备并行机。一些优秀的算法在应用领域中借助于串行计算机计算,但其优越性不能充分反映出来,而且直接影响了这些领域科技应用的发展。网络并行计算是利用网络上的计算机资源实现大问题的并行计算,这使得许多优秀算法得以体现和广泛的应用,使得这些领域中应用高效数值计算成为可能。

因此,研究机群并行计算在这些领域中应用的计算方法,网络计算环境及其实现技术的应用软件具有十分重要的意义。

机群并行计算就是利用互联网上的计算机资源实现其大问题的计算。这就是并行计算环境的显著优点。由于科学计算的要求,越来越多的用户希望能具有并行计算的环境。

1.3 并行计算

从事网络并行计算,要对并行计算机类型和并行计算的概念有一个初步的了解。根据

指令流与数据流方式的不同, 计算机系统可以分为单指令流单数据流 (SISD, Single Instruction Stream & Single Data Stream)、单指令流多数据流 (SIMD, Single Instruction Stream & Multiple Data Stream)、多指令流单数据流 (MISD, Multiple Instruction Stream & Single Data Stream) 和多指令流多数据流 (MIMD, Multiple Instruction Stream & Multiple Data Stream)。

在计算机结构上, 向量计算机的特点是利用流水线的概念, 把一个计算部件拆成几段, 在流水线的每一部分操作一个子功能, 通过时间重叠实现并行加速。这样, 如果对于每个加法需要 5 个时钟周期, 对于流水线上的向量加法则几乎平均一个时钟周期出一个结果, 这样效率可提高五倍。当然, 为了充分利用流水线的效率, 必须把所需的数据及时充满流水线。为此向量机都提供若干基本向量操作指令, 如向量加法、标量乘向量、按分量乘法、除法等, 还有一些宏向量指令, 如向量的内积、开方, 向量单元的聚集、压缩、合并与累加等。

根据几十个常规应用软件的统计, 60~88%左右的标量计算可以被向量化, 这表明向量计算的加速比一般可达到 4~8。但是, 单纯依靠单机提高计算机性能的潜力毕竟有限。对于超大型计算问题, 人们想要追求的加速比是以数量级为单位的, 单纯的向量机不能满足要求。

并行化则是转向“多指令流多数据流”方向发展, 大规模并行机与网络并行机群可以克服向量机的局限。这就是在 90 年代中期讨论并行机的主要出发点。

1.3.1 并行计算的概念

1. 并行算法的定义与分类

算法是解题的精确描述, 是一组有穷的规则。它规定了解决某一特定类型问题的一系列运算。并行计算是可同时求解的诸进程的集合, 这些进程相互作用和协调动作, 并最终获得问题的求解。并行算法就是对并行计算过程的精确描述。

并行算法可以从不同的角度分类为:

- (1) 数值计算并行算法和非数值计算并行算法。
- (2) 同步并行算法和异步并行算法。
- (3) 共享存储并行算法和分布存储并行算法。

数值计算是指基于代数关系运算的计算问题。如矩阵运算、多项式求值、线性代数方程组求解等。求解数值计算问题的算法称为数值算法 (Numerical Algorithm)。科学与工程中的计算问题如计算力学、计算物理、计算化学等一般是数值计算问题。

非数值计算是指基于比较关系运算的一类诸如排序、选择、搜索、匹配等符号处理, 相应的算法也称为非数值算法 (Non-numerical Algorithm)。非数值计算在符号类信息处理中广泛应用, 如数据库领域的计算问题、海量数据挖掘等, 近年来广泛关注的生物信息学主要也是非数值计算。

2. 并行算法的复杂性

对算法进行分析时, 常要使用上界 (Upper Bound)、下界 (Lower Bound) 和紧致界 (Tightly Bound) 等概念。分别定义如下:

上界令 $f(n)$ 和 $g(n)$ 是定义在自然数集合 N 上的两个函数, 如果存在正常数 c 和 n_0 , 使

得对于所有 $n \geq n_0$, 均有 $f(n) \leq cg(n)$, 则称 $g(n)$ 是 $f(n)$ 的一个上界, 记做 $f(n) = O(g(n))$ 。

下界令 $f(n)$ 和 $g(n)$ 是定义在自然数集合 N 上的两个函数, 如果存在正常数 c 和 n_0 , 使得对于所有 $n \geq n_0$, 均有 $f(n) \geq cg(n)$, 则称 $g(n)$ 是 $f(n)$ 的一个下界, 记做 $f(n) = \Omega(g(n))$ 。

紧致界令 $f(n)$ 和 $g(n)$ 是定义在自然数集合 N 上的两个函数, 如果存在正常数 c_1 、 c_2 和 n_0 , 使得对于所有 $n \geq n_0$, 均有 $c_1g(n) \leq f(n) \leq c_2g(n)$, 则称 $g(n)$ 是 $f(n)$ 的一个紧致界, 记做 $f(n) = \Theta(g(n))$ 。

在分析算法时, 如果对算法的所有输入分析其平均性态时的复杂度, 则称之为期望复杂度 (Expected Complexity), 在某些输入时, 可以使得算法的时间、空间复杂度最坏, 此时的复杂度称为最坏情况下的复杂度 (Worst-Case Complexity)。

1.3.2 并行计算机类型

根据指令流和数据流的不同, 通常把计算机系统分为:

- (1) 单指令流单数据流 (SISD)。
- (2) 单指令流多数据流 (SIMD)。
- (3) 多指令流单数据流 (MISD)。
- (4) 多指令流多数据流 (MIMD)。

并行计算机系统绝大部分为 MIMD 系统, 包括:

- (1) 并行向量机 (PVP, Parallel Vector Processor)。
- (2) 对称多处理机 (SMP, Symmetric Multiprocessor)。
- (3) 大规模并行处理机 (MPP, Massively Parallel Processor)。
- (4) 机群 (Cluster)。
- (5) 分布式共享存储多处理机 (DSM, Distributed Shared Memory)。

1. SISD 型计算机

绝大多数串行计算机属于单指令流数据流 SISD 类型, 其 CPU 主要有:

- (1) CISC, 主要指通常的大型机、小型机及 PC 机。
- (2) RISC, 主要是工作站, 最主要的芯片有 Sparc、RS6000、HP PA-RISC、MIPS R-8000、Alpha、Power 等。

由少量向量处理器组成的向量并行机仍是当前国际上所谓超级计算机 (Supercomputer) 的主要模式之一。

2. SIMD 型计算机

这类机器的基本结构如图 1-1 所示。使用 SIMD 机器通常要通过一个前端机或是一台主机执行指令。

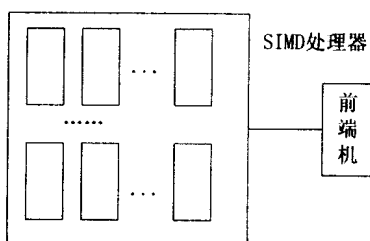


图 1-1 SIMD 型计算机基本结构

属于 SIMD 的机器有：

- (1) 阵列处理机。
- (2) 向量机。
- (3) SIMD 并行机。

3. 共享内存 MIMD 多处理机

共享内存 MIMD 多处理机特点是有一个每个处理器都能访问的统一的内存。早期的共享内存机器提供一条宽频带的总线访问内存，这条总线把所有的处理器以线性方式连接到内存，并使用交叉开关。这种共享内存多处理机的一个主要缺点是可扩展性较差，当多处理机需要同时访问共享主存时，由于产生内存争用现象而严重影响效率。为此，有的共享内存系统采用多总线结构。另一个途径是采用非均匀存储访问来缓解内存争用矛盾，以代替常规的均匀存储访问方式。

4. 分布式存储 MIMD 多处理机

在分布式存储 MIMD 中，每个处理机都有自己可直接访问的内存，称为局部存储器，每个处理器称为系统中的一个结点处理机。结点之间的拓扑结构有：总线结构（如图 1-2 所示）、环状结构、Mesh 结构（如图 1-3 所示）或超立方体结构。



图 1-2 总线结构

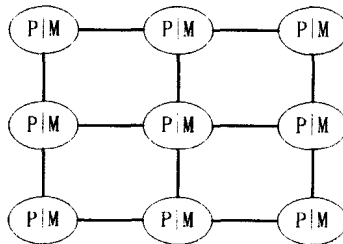


图 1-3 Mesh 结构、环状结构

分布式存储 MIMD 多处理机的结点机之间采用消息传递机制。这种消息传递机制型可扩展多计算机可以分为下面两类：

- (1) 大规模并行计算机（MPP 型），适合中等粒度并行。
- (2) 网络并行机群系统，适合粗粒度并行。这种类型的典型例子有：局域网连接的各种各样的工作站或 PC 机群以及由异步传输模式（ATM）连接的广域网络机群。

1.4 并行计算机系统互连

1.4.1 系统互连

机群节点通过使用标准网络协议（如 TCP/IP）或底层协议（如活动消息）来进行通信。从性能（延迟和带宽）来看，以太网连接并不能提供足够的性能，它的带宽和延迟不能和目前节点的计算能力很好地匹配，而其他如 SCI、Myrinet 等则提供比较好的性能。机群系统一般会有几套网络，各有不同功能，根据其功能并考虑性能价格的平衡，选用相应的网络。

10/100/1000Mb 以太网标准的以太网（10Mb/S）已很少用于作为机群系统的互连网络，目前快速以太网（100Mb/S）往往用于作为机群系统控制网络和监控网络，而许多机群系