

高性能计算机发展概况

周玉林 吴春珍

(中国科学院高能物理所 北京 100039)

在过去的 20 年中,计算机的计算能力已经有了非常明显的提高,但随着科学研究的飞速发展,许多研究、设计、开发工作对计算机的计算能力提出了更高的要求,即便是当今计算机科学领域中最先进的技术也难以满足这种要求.尤其是在那些广泛应用数学模型的科学领域,如超导、海洋地理、量子色动力学、DNA 等,它们对计算能力的要求,是传统的冯诺伊曼机器无法满足的.

为了深刻地认识和再现这些巨大的复杂系统,以及在对它们的研究计算中能获得更高的精度,用数学模型来模拟物理现象,是一个最简单而且最重要的方法,为此,需要有许多新的计算工具和新的编程技术.大规模并行巨型计算机及相关技术正是解决这些问题的最合适的工具.

大规模并行巨型计算机所具有的高性能并不是传统意义上的电子数据处理系统的提高,而是对数据计算方法的一种新的突破.

现在高性能计算是指并行计算.在目前硅技术基础上制造的处理器,其运算能力似乎已达到了极限.相反,并行计算机的运算能力在不断地提高.因为并行计算机包含一个以上的处理器,有时甚至包含数千个处理器,这就突破了冯诺伊曼式的单处理器的体系结构.

传统的冯诺伊曼方法,即一条指令执行一个运算过程,这使得硬件和软件之间的概念和实际相分离,高级语言、编译器和大量应用代码的发展并不严格地依赖于特定的硬件平台,更重要的是使用者不需要对计算机结构有多深的了解.但对于并行计算机,其并行结构根据处理器之间的连接方式不同和如何协同计算衍生出了许多新的方法,如超立方体、二维、三维网络、树状分支.所以从设计的观点来看,并行计

算机可以看作一个特殊软硬件系统的应用.设计者把计算任务分为特殊硬件软件系统的应用和通用微处理器上运行的软件,在设计发展并行分布式计算机平台中,统一的硬件软件共同设计的方法是非常吸引人的.

个人计算机和工作站的性能不断提高,它们之间可以通过标准的硬件和软件设备很容易地联接起来,虽然这在事实上提供了一个通用并行计算机平台的替代品,如果需要并行化,这可以看作一个发展过程,并且容易被工作站用户接受.但另一方面,实验表明,随着处理器数目的增加,处理器之间相互传送信息时的通信和协作将使效率严重地下降.这证明升级一个工作站网络时通用处理器尽管是通常的选择,但在一台有几百个甚至上千个处理器必须非常高效地执行少数几个操作的并行计算机中,这并不是最佳的选择.这样一个通用处理器需要考虑大小、功耗,并不只使用其非常有限的部分用途,故而一般采用专用集成电路作为理解复杂系统的行为和结构的强有力方法.并行运算的需要出现在计算机模型中,这些典型系统有许多的自由度或由复杂的动力学方程来描述,在这种情况下,一个精确的解析解是不存在的或者该解非常复杂,对于理解方程所描述的现象,根本没有什么帮助.

计算机模拟的强有力的方法,已经开始在解一个系统的方程组中起重要作用.在模拟中不需要那些由实验来确定的量,比较计算机实验和实际实验结果就可以更严格地检验理论和模型.这些模型中的基本元素数目非常大,它们可能是碰撞星系中的星体或半导体中的原子.这样的模拟,需要对大量的元素来进行计算,这些计算即便对于今天的并行计算机也是可怕的.

这些计算中重复操作的特性导致了基于单指令多参数或单程序多数据并行结构的产生.这种并行结构以最小的成本提供最好的性能.这些方案,同向量计算机中多指令多数据结构相比,它减少了处理器间通讯电路的复杂性和成本,而且有可能用来探索数学模块结构和计

算结构之间的拓扑关系。

在美国,1991年国会通过了高性能计算和通讯法案(HPCC),该法案规定对四个主要进行超级计算机研究的机构提供逐年增加的资金。这四个机构为:高级研究计划署(ARPA)、能源部(DOE)、国家科学基金委员会(NSF)和国家航空航天局(NASA)。该法案规定了每个机构的领域和作用,如国家科学基金委员会负责网络工程,高级研究计划署负责硬件开发等。随着联邦高性能计算和通讯法案的建立,许多大学和国家实验室建立了相应的补充项目。

该项目于1991年在四个方面开始:国家研究和教育网、高级软件技术和算法、高性能计算机系统基础研究及人力资源。1993年后又增加了一个方面,即信息基础结构技术和应用以支持国家信息高速公路,其目的是向联邦和私人用户提供高性能计算和网络应用。

美国高级研究计划署领导着高性能计算系统的研究和发展,美国能源部研究并行计算机并负责其应用化、工业化,它们于1991年从Intel公司购买了512个节点的Touchstone DELTA系统,并把它升级为512节点的Intel Paragon,这成为其他开发组实现并行计算机的模式。在随后的三年中,还有其他的并行系统在美国生产并销售,它们包括Connection Machines、Cray研究中心的T3D,IBM的SP1和SP2机,Kendell Square的KSR1和nCVBE平的nCUBE-2机型,许多其他的开发正在进行之中。

HPCC项目的软件和算法致力于以下四个方面:大应答(grand challenges),软件集成及工具,高性能计算研究中心和计算技术,大应答集中了应用数学家和计算机学家,解决大规模计算问题,从量子色动力学到计算流体力学、材料学、全球气候模型,大约有35个大应答小组正致力于研究。当然,它们不局限于基础科学,也致力于工业应用的研究。

高性能计算研究中心也已经由能源部,国

家科学基金委员会巨型计算机中心和其他巨型计算机公司组建起来。他们的任务是建造多台并行机,为大应答小组提供服务,同时也尝试运行这些新造的系统。

能源部在发展HPCC中起着独一无二的作用。由于高能物理核武器与核能研究的需要,它比其他机构都更早开始巨型计算机的工作,并且可以随时使用巨型计算机,所以DOE能很成功地开发出一些新东西。这些东西已用于工业中,如为国家信息网开发的新软件基础结构,为制造工业和工业中的研究人员、工程师们提供的“国家试验台”(National test-bed)以及高性能可视和可移植计算等。

在欧洲,欧洲委员会的相关项目是ESPRIT。它主要着力于面向工业的信息技术的研究和开发,1993年4月,ESPRIT的高性能计算机网络组(HPCN)才开始这方面的研究和开发。近来HPCN开始致力于软件结构和并行机制中机器码的传送,意大利和西班牙致力于并行计算机的软件应用和服务。

探索并行计算机的科学和经济潜力是一场挑战,美国发动了这场挑战。欧洲正开始意识到了这一点,1992年,一位诺贝尔奖获得者、粒子物理学家鲁比亚(Carlo Rubbia)指出,高性能计算机对于科学和工业竞争,正是一项优先技术,并为之提出了一个十年工业发展计划。对于中国来说,工作站以上的高性能计算机几乎全部是国外产品,1995年我国进口计算机(主要是高性能计算机)总额达28.8亿美元,迄今我国各项“金字”工程采用的服务器几乎全部依赖进口产品。然而,国家智能计算机研究所开发中心与曙光信息产业有限公司推进曙光天演高性能服务器与工作站,其性能价格比远远优于国外同类产品,这就大大增强了国人对民族高性能计算机产品的信心,相信随着国家各方面实力的增强,我国的高性能计算机产业一定会蓬勃发展起来。