

► 圣地亚和橡树岭国家实验室开始^[6]，预计2018年面世。

超级计算机的性能每隔十年便提高一千倍，每一次性能突破都带来了科学前沿问题的解决，进而提出了更深入的问题。在19世纪90年代后期，万亿次计算的实现推动着天体物理与宇宙学、航空航天、大气、生物、医药、纳米材料、化学、量子色动力学、地震、石油开采、流体力学等领域的探索，人们得以设计新药来对抗艾滋病和其它疾病，对地震、飓风等自然现象开展空前精度的大规模仿真，通过粒子模拟手段，对大至宇宙小至细胞的复杂系统有了更好的理解。

即使是千万亿次计算仍不能满足前沿科学研究对计算能力的

渴求。以天文为例，目前望远镜可以观测到约700万亿颗恒星，如果以恒星为单位进行N体模拟，将远超千万亿次计算能力。又如在生物分子动力学模拟中，目前万亿次计算机大概可以模拟1万个原子规模的酶催化反应；千万亿次计算机，可以模拟10万个原子规模的新陈代谢过程；即使计算能力再翻1000倍，达到每秒一百亿次，也刚刚能模拟DNA蛋白质折叠的初级阶段，不到1个微秒的物理过程^[7]。

千万亿次计算将给应用带来新的冲击。其中，能耗和算法的可扩展性是千万亿次计算应用所面临的巨大挑战。降低能耗的需求使得多核、众核、异构计算成为趋势，而这又加剧了软件设计

者在算法可扩展性和可编程性方面的压力。千万亿次计算意味着软件研发者要面对数万或数十万个计算核，要实现如此高的并发度，无疑对软件各个环节提出了更严苛的要求。

1.2 TOP500与GREEN500

能耗正在改变着计算，IDC表示IT组织的能耗花费将会占硬件花费的四分之一。对于千万亿次这样庞大的计算系统，能效（性能与功耗之比）成为最受青睐的指标。近来有组织以能效为衡量推出了GREEN500^[9]的排名。表1是Top500与Green500的数据综合。其中，表格第一列给出的是TOP500的排名，第二列是对应的GREEN500的排名。第五列指计算

表1 TOP500与Green500的排名数据综合

Rank	Green	Site	Cores	Rmax (T)	Power(KW)	Mflops/W	Processor
1	7	DOE/NNSA/LANL	129600	1105	2483.47	444.94	Cell+AMD Dual
2	80	ORNL	150152	1059	6950.6	152.36	AMD Quad
3	22	NASA/ARC/NAS	51200	487	2090	233.02	Intel Quad 54xx
4	44	DOE/NNSA/LLNL	212992	478.2	2329.6	205.27	Dual 440
5	16	ANL	163840	450.3	1260	357.38	Quad 450
6	30	TACC/UT	62976	433.2	2000	216.6	AMD Quad
7	23	NERSC/LBNL	38642	266.3	1150	231.57	AMD Quad
8	118	ORNL	30976	205	1580.71	129.69	AMD Quad
9	197	NNSA/SNL	38208	204.2	2506	81.48	AMD Dual
10	163	上海超算	30720	180.6	1728	104.51	AMD Quad

系统在LINPACK测试达到的最大性能，单位是万亿次。第八列给出了处理器的信息，其中Dual 440指PowerPC 440（双核），Quad 450为PowerPC 450（四核），而Intel Quad和AMD Quad指的是这两个公司的四核产品。

Roadrunner，在GREEN500中排名第7，从能效的角度说是非常好的成绩。这是因为它采用了异构的结构，即每个计算节点除配备两颗AMD Opteron™双核处理器外，还使用四个PowerXCell 8i™处理器进行计算加速。加速器拥有比通用处理器更低的能耗，目前流行的加速器主要是GPU、Cell、ClearSpeed、FPGA等。但高能效的获得并非没有代价，加速技术也存在如下局限性：

● 降低系统的通用性。Intel或AMD的处理器属于X86体系，由于历史原因，这种CISC（复杂指令集）架构已成为主流，是目前很多应用软件的基础，可高效支持多种操作系统、中间件和应用。加速器通常采用RISC（精简指令集）架构，较通用处理器而言，在设计中使用了更大比例的晶体管用于计算单元，先天上在通用性方面逊色于X86处理器。

● 降低可编程性。加速器与通用处理器组成的异构体系为

软件开发引入了新的复杂度，降低了系统的可编程性。而加速器厂商由于资金人力方面的原因，在基础软件库支持、调试等方面还略显滞后，即使较有实力的厂商也只是对最基本的数值计算库（如BLAS和FFT）提供支持，这大大增加了软件的开发周期。

● 并非所有的应用都能通过加速器获得加速。一方面，加速器的加速原理主要得益于向量化操作，可以使用多个计算核对数据进行同时的处理（SIMD或SPMD）。实际应用往往存在多种计算模式，如果向量化操作所占比重较小，其加速效果必然大打折扣。另一方面的瓶颈在于内存上的限制。加速器的众多计算核都带有本地的存储器，最大亦只有数百KB（Cell的本地存储是256KB）。势必要与容量更大的主存进行数据的交换。对于内存需求较大的计算，一旦应用算法无法实现细粒度的数据分割和计算/通信的重叠，这种模式将举步维艰。

为适应千万亿次计算的要求，Intel和AMD正研发更高能效的多核处理器，这将与加速技术一道降低未来千万亿次计算系统的能耗。目前主流的看法是应以通用的X86处理器为基础，辅

以计算加速，如果能将能效提高到1GFlops/Watt，同时具有很好

的通用性和可编程性，则相当理想。日本的TSUBAME 2.0计划提出要“追求人人可用的FLOPS”^[10]，值得我们借鉴。

2. 国外千万亿次计算的应用概述

2.1 美、日、欧千万亿次计算的应用领域

美国NSF针对千万亿次计算提出了34个挑战性课题，分布在空间天气与天文、材料与化学、大气、海洋与生态系统、物理、流体力学、生物与医药等领域：

空间天气与天文领域有：恒星的辐射、动力学和核物理；超新星物理、伽玛射线爆发、双黑洞系统和 neutron 星之间的碰撞；地球、巨型气体行星（gas giants）、恒星的电磁场如何产生和演化？日冕物质抛射（coronal mass ejections）及其对地球电磁场的影响，包括磁重联（magnetic reconnection）和地磁场次暴（geo-magnetic sub-storms）的模拟；银河系的形成与演化；低马赫数天体物质流（Low Mach-number astrophysical flows），例如形成行星云（planetary nebula）的恒星外壳的爆炸；早期宇宙结构的演化；分子云（molecular clouds）和前恒星核（pre-stellar cores）的形成；