



南开大学
Nankai University

南 开 大 学

计 算 机 学 院

并行程序设计课程作业

并行体系结构调研

姓名：姚知言

年级：2022 级

专业：计算机科学与技术

指导教师：王刚

2024 年 3 月 14 日

摘要

本文首先根据超算的发展历史以中国和国际两方面展开了对比调研。其次，根据超算的发展现状从不同角度进行了调研，其中重点分析了天河和 Aurora 的概况，并着重讨论了并行体系结构的发展情况。最终，结合调研结果，对超算对国家发展的价值，并行体系结构和并行编程的发展趋势等重要问题给出了展望。

关键字：超算；并行；对比；展望

目录

一、超算的历史	1
(一) 中国的超算发展历史	1
1. 研究背景	1
2. 起源——银河一号	1
3. 首个千万亿次超算——天河一号	1
4. 近年来的进一步发展	1
(二) 国际的超算发展历史	2
1. 起源	2
2. 并行概念问世及超算的发展	2
二、超算的现状	3
(一) 超算分析：天河二号/天河-2A（中国）	3
1. 概述	3
2. 硬件配置	3
3. 软件配置	4
(二) 超算分析：Aurora（美国）	4
1. 概述	4
2. 硬件配置	5
3. 软件配置	6
(三) 超算发展现状总览	6
1. 从国家层面来看	6
2. 从应用领域来看	7
3. 从并行发展来看	7
三、超算的未来	7
(一) 超算对国家发展的价值与展望	7
(二) 并行体系结构的发展趋势	8
(三) 并行编程发展的概述与展望	8

一、超算的历史

(一) 中国的超算发展历史

1. 研究背景

改革开放前,由于没有高性能的计算机,我国勘探的石油矿藏数据和资料不得不用飞机送到国外去处理,不仅费用昂贵,而且受制于人。当我国向发达国家寻求计算机进口帮助时,却遭到“卡脖子”的困境。

1978年3月,全国第一次科学大会在北京召开。此后,中央在重要会议上,正式下决心研制巨型计算机,以解决我国现代化建设中的大型科学计算问题。邓小平同志将这一任务交给了国防科委,由国防科大承担研制任务。[13]

2. 起源——银河一号

1983年12月26日,我国第一台命名为“银河”的亿次巨型计算机正式通过国家技术鉴定,这是改革开放初期在科技领域取得的一个重大成果。[13] 银河一号的研发使我国成为继美、日之后世界上第三个能研制巨型机的国家。

银河一号电子计算机系统由主机、海量存储器、维护诊断计算机、用户计算机、电源系统、各种外部设备及系统软件构成。它是当时中国运算速度最快、存储容量最大、功能最强的电子计算机系统,具有强大的数值计算能力和数据处理能力。它的向量运算速度为每秒一亿次以上,存储容量可达几百万字节,软件系统内容丰富,使用方便。它是石油和地质勘探、中长期天气数值预报、卫星图像处理、计算大型科研项目 and 国防建设的重要手段,对现代化建设具有重要的作用。[9]

3. 首个千万亿次超算——天河一号

第一台国产千万亿次超级计算机——天河一号于2009年10月29日在湖南长沙亮相,作为算盘这一古老计算器的发明者,中国拥有了历史上计算速度最快的工具。

每秒钟1206万亿次的峰值速度和每秒563.1万亿次的Linpack实测性能,使这台名为“天河一号”的计算机位居同日公布的中国超级计算机前100强之首,也使中国成为继美国之后世界上第二个能够研制千万亿次超级计算机的国家。这个速度意味着,如果用“天河一号”计算1天,当时的一台主流微机得算160年。“天河一号”的存储量,则相当于4个国家图书馆藏书量之和。

在现代科学发展中,计算已经成为与理论和实验并行的第3大引擎。“天河一号”将在资源勘探、生物医药研究、航空航天装备研制、金融工程、新材料开发等方面得到广泛应用。[11]

4. 近年来的进一步发展

“星云”由中国科学院计算技术研究所研制、曙光公司天津产业基地制造,完全实现国内自主研发。其系统峰值为每秒3000万亿次,实测最大浮点性能每秒1271万亿次,是我国第一台、世界第三台实测双精度浮点计算超过千万亿次的超级计算机,相当于20万台个人电脑运算能力的总和。在2010年5月发布的第35届全球超级计算机500强排名中名列世界第二。此外,“星云”还是绿色超级计算机,每瓦能耗实测性能4.8亿次。[12]

2010年11月,在天河一号基础上进一步升级的二期系统超级计算机——天河-1A超级计算机占据了TOP-500的头把交椅,实现了每秒计算量2.57千亿次的计算水平。同时,在该次榜单中星云超级计算机排名第三位。中国强大的科技实力逐渐被世界所注意到。[6]2012年初,神威蓝

光超级计算机成功投入应用，标志着中国继美国、日本之后，成为世界第三个能够采用自主 CPU 构建千万亿次计算机的国家。[10]

如今，我国超级计算机的计算水平仍在不断提高，硬件软件也在不断国产化。

（二） 国际的超算发展历史

1. 起源

1929 年，“超级计算 (Supercomputing)”这一名词首次在《纽约世界报》关于“国际商业机器公司 (IBM) 为哥伦比亚大学建造大型报表机 (tabulator)”的报道中出现。此后的 30 多年，IBM 公司逐步成为计算机行业的霸主。

超级计算机之父——西蒙·克雷 (Seymour Cray) 带着他 34 个人的研究团队，于 1963 年 8 月研制出了第一台真正意义上的超级计算机——CDC6600，也成为了世界超算的开端。

从此，超级计算机进入了“克雷时代”。克雷离开 CDC 公司后独立门户，成立了克雷研究公司 (Cray Research, Inc.)。1976 年，克雷公司研发出新一代超级计算机——Cray-1，可以实现每秒 1.6 亿次浮点运算。[2] 这台被公认为是超级计算机历史上最成功的计算机首次使用了向量处理器，可以在特定工作环境中极大地提升性能，成为了当时超级计算机设计的主导方向。克雷研究公司凭借这一新设计，在 20 世纪 70 年代到 90 年代期间称霸整个超级计算机市场，并占据巅峰位置长达五年 (1985 年—1990 年)。[14]

2. 并行概念问世及超算的发展

由于时钟周期已接近物理极限，向量计算机的发展也进入了瓶颈。此时，大规模并行处理 (MPP) 的概念问世，超级计算机市场重新洗牌，英特尔、IBM、SGI、日立等美国和日本的大型企业开始成为超级计算机的行业新贵。

1992 年，英特尔推出 Paragon 超级计算机成为历史上第一台突破万亿次浮点计算屏障的超级计算机；1996 年，SGI 为美国国家实验室研制出一台具有 256 个处理器的超级计算机，这个系统的处理器后来的运算速度达到了 3 万亿次。此外，IBM 的 SP2、日立公司的 SR2201 和 SGI 公司的 Origin2000 超级计算机皆有不俗的表现。[14] 在此之后，如图1所示，超算性能持续呈指数增长。



图 1: 1990-2025 年超级计算机性能发展趋势 [6]

二、超算的现状

(一) 超算分析：天河二号/天河-2A（中国）

1. 概述

天河二号超级计算机系统是国家 863 计划和核高基重大专项的标志性成果，是新一代银河高性能计算机关键技术突破的成功应用，由国防科学技术大学研制。广东省和广州市提供了研制经费配套支持，采用天河二号作为广州超级计算中心业务主机 [5]。

天河二号超级计算机自 2013 年问世以来，就一举获得了 TOP500 榜单上的第一名，并保持领先优势长达三年，才被同为中国的超算神威太湖之光超越。天河二号由 170 个机柜组成，包括 125 个计算机柜、8 个服务机柜、13 个通信机柜和 24 个存储机柜，占地面积 720 平方米。内存总容量 1.4PB，存储总容量 12.4PB，最大运行功耗 17.8 兆瓦。天河二号峰值计算速度每秒 5.49 亿亿次、持续计算速度每秒 3.39 亿亿次、能效比每瓦特 19 亿次双精度浮点运算 [5]。

2018 年，天河二号进行了一次技术升级，并更名为天河-2A，极大提高了峰值计算速度和持续计算速度，较先前的性能提升了将近两倍 [6]。根据国家超级计算广州中心的数据，“天河-2A”一期系统峰值计算速度达到每秒 10.07 亿亿次、持续计算速度达到每秒 6.14 亿亿次、总内存容量约 3PB，全局存储总容量约 19PB。“天河二号”峰值计算速度、持续计算速度以及综合技术水平处于国际领先地位，是我国超级计算技术发展取得的重大进展 [7]。

在 2023 年 11 月最新一期的 TOP500 排行中，天河-2A 排名第 14 位，中国第 2 位，仅次于神威太湖之光（全球第 11 位）[6]。

该超算在大气海洋环境，天文地球物理，工业设计制造，新能源新材料，生物医药健康，智慧城市云计算等各个领域均有应用，为国家各个领域赋能。

以下硬件配置数据除特殊说明之处外，均为初代天河二号数据。

2. 硬件配置

天河二号搭载的硬件系统为 TH-IVB-FEP Cluster, Intel Xeon E5-2692 12C 2.200GHz, TH Express-2, Intel Xeon Phi 31S1P（天河 2A 替换为 Matrix-2000）[6]。

如图2所示，天河二号硬件系统由计算阵列、服务阵列、存储子系统、互连通信子系统、监控诊断子系统等五大部分组成。

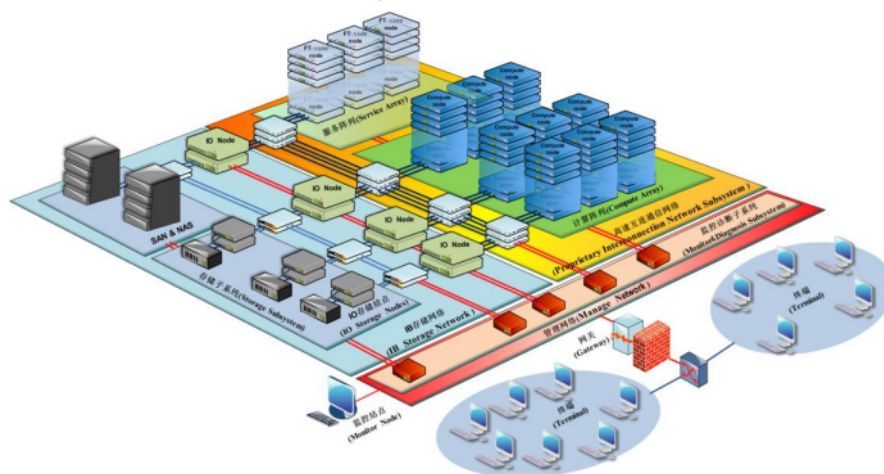


图 2: 天河二号硬件系统组成图 [5]

- 登录结点 LN0-5

LN0-5 登录结点，主要作用是实现用户登录，程序开发，提交任务等工作。LN0-5 登录结点由 4 路 8 核 Xeon E5-4640 服务器构成，登录结点硬件配置如下：4 块 Intel Xeon E5-4640 CPU 组成，核心数量 32 核，CPU 主频 2GB；内存 128GB；

- 计算结点

计算阵列包含 16,000 个计算结点。每个计算结点包含 2 个 Xeon E5 12 核心的多核中央处理器和 3 个 Xeon Phi 57 核心的众核加速器，共 312 万个计算核心。每个结点拥有 64GB 主存，而每个 Xeon Phi 协处理器板载 8GB 内存，故每结点共 88GB 内存，整体总计内存 1.408PB。

- 互连系统

互连通信子系统为自主定制的高速互连系统，采用光电混合技术、胖树拓扑结构、点点带宽 160Gbps，可高效均衡扩展 [5]。

3. 软件配置

天河二号具有许多中国开发的组件，包括 TH Express-2 互连网络、操作系统和软件工具。天河二号使用麒麟 Linux 操作系统。麒麟于 2006 年正式获准使用，由国防科技大学开发，兼容其他主流操作系统，支持多种不同架构的微处理器和计算机。此外，NUDT 还开发了 OpenMC，这是一种基于指令的节点内编程模型，类似于 Open-MP 和 CUDA、OpenACC 或 OpenCL [6]。

天河二号软件系统采用高性能计算软件栈架构，由操作系统、文件系统、资源管理系统、编译系统、并行开发工具、应用支撑框架和自治管理系统等构成，形成了系统操作环境、应用开发环境、运行支撑环境和综合管理环境等四大环境，如图3所示 [5]。

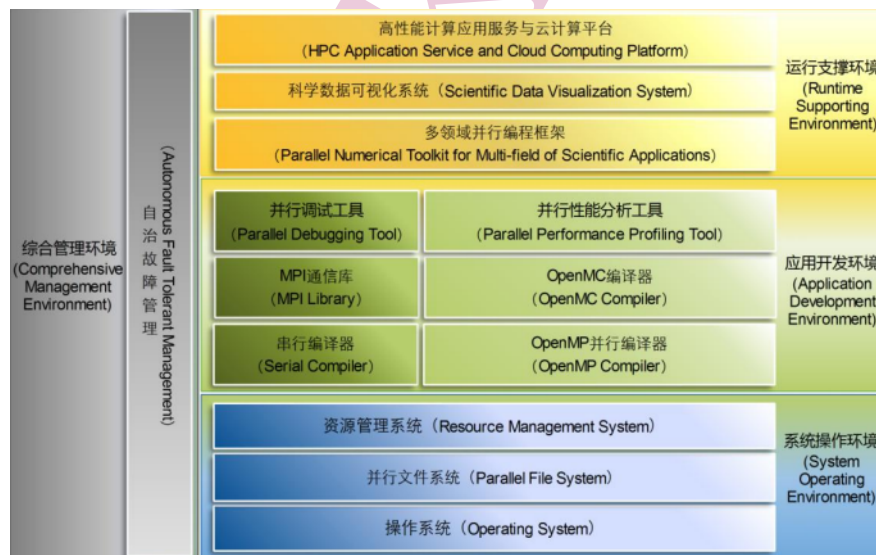


图 3: 天河二号高性能计算软件栈架构图 [5]

（二）超算分析：Aurora（美国）

1. 概述

作为美国 Intel 公司在 2023 年刚刚推出的超级计算机，一经问世便受到大家关注。在 Intel 官方网站上，称其为百万兆级高性能计算和人工智能 [3]，这一点也在 TOP500 榜单的傲人成绩上得到了印证——其峰值计算速度达到 1059.33PFlop/s，是截至目前为止全球唯二计算速度

可以做到 1Elop/s 的超级计算机（另一款是来自美国 HPE 公司的 Frontier 超算），在 2023 年 11 月的 TOP500 榜单中也以 585.34 PFlop/s 的 HPL 得分获得了第二名的好成绩，仅次于 Frontier。需要注意的是，Aurora 的数据是在计划的最终系统的一半的测量中提交的。Aurora 目前正在调试中，据报道，完成后将超过 Frontier，峰值性能为 2 EFlop / s [6]。

Aurora 融合了高性能计算和人工智能。根据 Intel 官网给出的用例，其在推动清洁能源聚变研究，提供催化剂研究，推进航空航天研究，进行神经科学研究，推进宇宙研究等多领域的工作中，做出了自己的贡献，为我们展示出其性能的无穷潜力 [3]。

Aurora 搭建在美国阿贡国家实验室，这是一个历史悠久，成果丰富的实验室。根据 TOP500 上已有的记录，该实验室中诞生的超算有十余个，最早可追溯到 1993 年的 9076-005 SP1 超算，其中也不乏在当下非常有竞争力的 Polaris, Mira, Theta 超算 [6]。



图 4: Aurora [1]

2. 硬件配置

• CPU

Aurora 搭载 2 个 Intel Xeon CPU Max 9470 系列处理器：该处理器具有 52 个内核和 104 个线程，处理器基本频率为 2GHz，最大内存大小为 4TB，最大内存通道数为 8，同时搭载众多 Intel 加密技术支持，保障安全性和可靠性。[8]

每个处理器具有 64GB HBM(高带宽内存, High Bandwidth Memory), 和 512GB DDR5。[1]。

• GPU

Aurora 搭载 6 个英特尔数据中心 GPU Max 系列，该系列具有 128GB HBM 和 RAMBO 缓存。采用基于 tile 的小芯片，Foveros 3D 集成，大小仅为 7nm [1]。

• 存储

其具有 230 PB，31 TB/s，1024 结点的 (DAOS) 高性能存储，拥有 10.9 PB 的聚合系统内存 [1]。

• 其他属性

其搭载 HPE Cray EX 超级计算机，具有跨 CPU 和 GPU 的统一内存架构，通过 PCIe 和 Xe Link 实现 CPU 和 GPU 的系统互联，拥有 8 个 SlingShot 和 11 个结构端点 [6] [1]。

3. 软件配置

- 操作系统：Aurora 搭载 SUSE Linux Enterprise Server 15 SP4
- 编程模型：英特尔 oneAPI、MPI、OpenMP、C/C++、Fortran、SYCL/DPC++
- 数学库：Intel Math Kernel Library 2023 update 2
- MPI(Message Passing Interface,信息传递接口):aurora-mpich/51.2/icc-all-pmix-gpu; MPICH Version 4.1A1 [6]。

更好的契合了并行体系结构的发展和以及异构计算的推进。

(三) 超算发展现状总览

1. 从国家层面来看

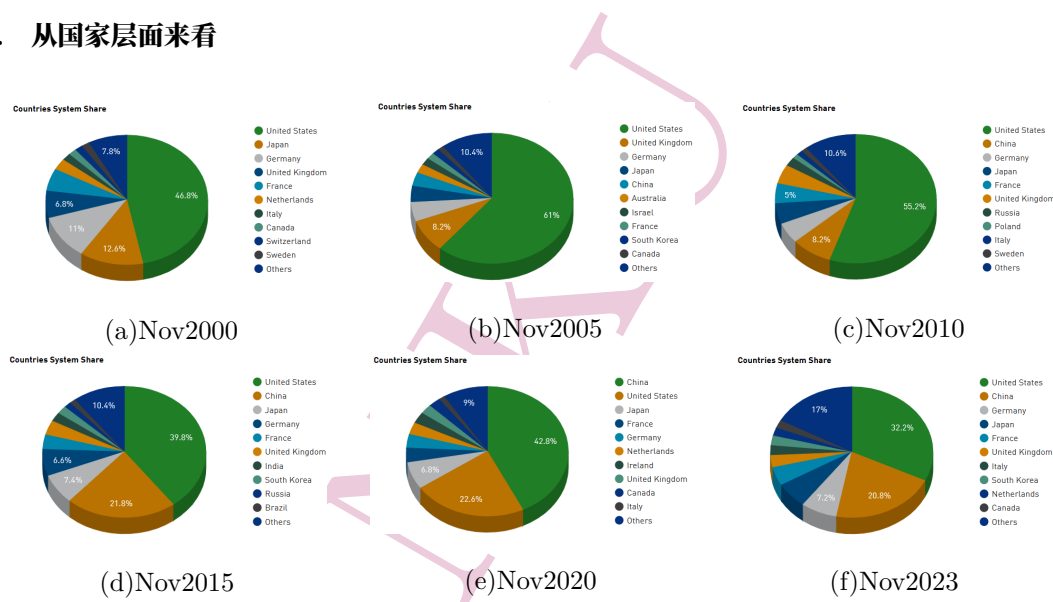


图 5: Top500 榜单中各国家超算数量所占比例 [6]

从上图中我们可以看出，自 2000 年至今，中国超算在 TOP500 榜单上逐渐上升，在 Nov2000 和 Nov2005 的评选中，中国上榜数量未能进入世界前十国家中。然而，在 Nov2010 的评选中，中国就以微弱优势战胜德国，位居上榜第二多的国家。在此之后，中国上榜超算数量进一步提升，最终在与美国水平接近后达到动态平衡，以较大优势稳稳占据全球前二多上榜超算数量国家的位置，也曾在部分榜单中超越美国，成为上榜超算数量最多的国家（如 Nov2020）。

在中国超算兴起之前，美国在超算上一直以来处于一家独大的领先地位，甚至最多的时候一度在榜单上占据了一半以上的席位。然而 10 年代以后，中国和其他国家都逐渐重视起了超算的发展，很多国家都建立起了自己的超算，从 Nov2023 的数据图中，也可以很明显看出 Other 的比重是六幅图中最多的。这也能够从侧面表示超级计算机的建设对于国家发展的重要性与必要性。

2. 从应用领域来看

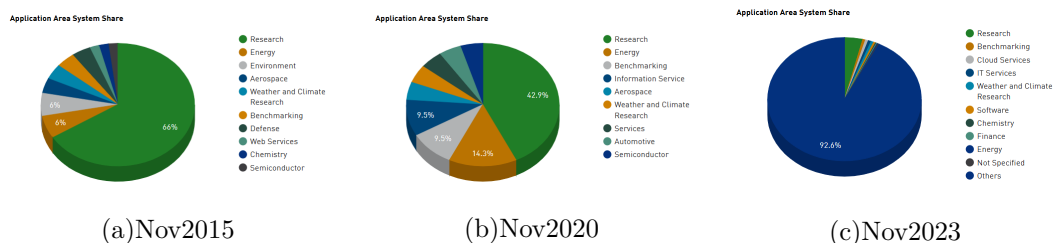


图 6: Top500 榜单中超算应用领域所占比例 [6]

超算近十年以来的应用变迁令人非常意外。在上图 (a) 中, Research 还占有相当大的比重, 这一情况在上图 (b) 2020 年的统计中就发生了一定改变。而在上图 (c) 2023 年的统计中, 应用领域 Other 占比高达 92.6%。

这一数字向我们表明, 当前超算的应用领域早已不局限于研究中, 超级计算机的发展将会之间向各个传统领域赋能, 超级计算机将会真正走入我们生活的方方面面, 为我们的社会做出其贡献。

3. 从并行发展来看

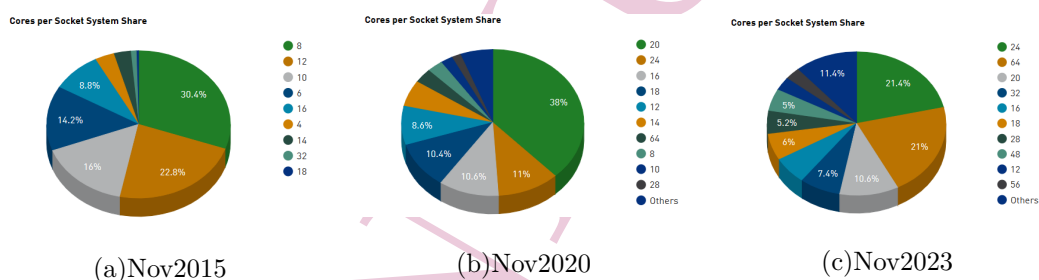


图 7: Top500 榜单中每个 CPU 中核心数量分布 [6]

在 2002 年以前, 超级计算机采用的还全部是单核 CPU。从 2002 年双核 CPU 首次出现在 TOP500 榜单上之后, 并行化的计算机设计浪潮就越发兴盛。

从上图中我们可以看出, 近年来 CPU 核心数量的发展变化是巨大的。在上图 (a) 2015 年的统计中, 8 核/10 核/12 核还是主流超算类型, 然后在上图 (b) 2020 年的统计中, 20 核/24 核以及占据了主要地位, 64 核的 CPU 也逐渐登上历史舞台。再看上图 (c), 我们会发现短短三年间 64 核的 CPU 已经逐渐占据了主导地位。

三、超算的未来

(一) 超算对国家发展的价值与展望

从应用领域中我们可以看出, 超算的应用领域相当广泛, 而且时至今日还呈现不断扩展的趋势。结合天河和 Aurora 的应用场景, 我们可以看出无论是传统领域——气象地理、生物医学、化学工业中, 还是在新兴工业领域——人工智能、云计算、软件, 或是在前沿研究领域——宇宙研究等, 均有良好的应用前景。

可以说，有了超算赋能各行各业发展，就如虎添翼，对国家的总体发展有莫大的意义。然而，超算的研究是一个不断推陈出新，各国家各公司你追我赶，现在仍然处于高速发展的领域。虽然中国在研制出神威太湖之光和天河-2A 后，暂时没有什么新兴研究成果，但我相信中国科研人从来不会让人失望，中国一定能够在这个超算进入百万兆级的新时代，展现中国智造，并推进国家各大重要研究领域的发展。

(二) 并行体系结构的发展趋势

结合天河和 Aurora 的软硬件配置，我们不难看出，整体上超算设备在不断向更多的核心数量，更多的通道、接口、线程，异构计算的发展，更好的体系结构，以及各部件之间的互联协同的发展前进。从软件上来说，无论是操作系统，编译器还是数学库，都在向并行体系结构进行创造和优化，MPI 的发展更是为并行计算领域如虎添翼。

同时，随着近年来 green500 榜单的建立，越来越多的超算聚焦到了性能功耗比的考量，从 green500 上榜超算上 (GFlops/watts) 的指标快速提升 (如下图所示)，我们也看出现在超算对于节能指标的决心。

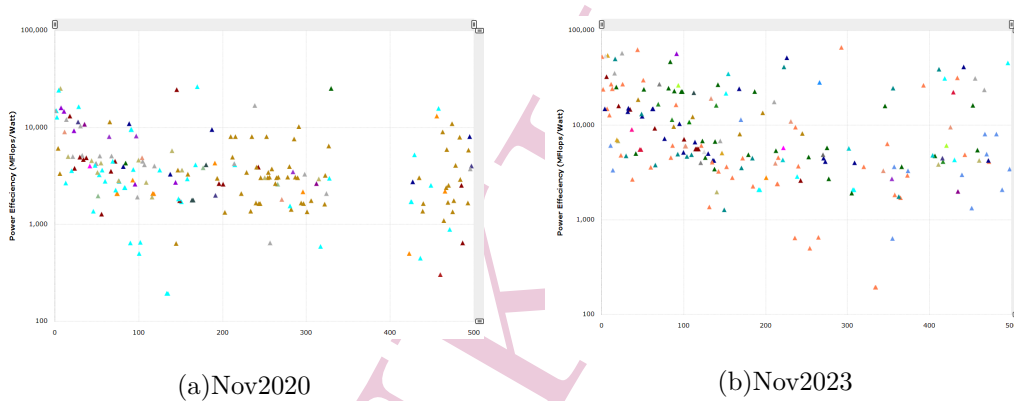


图 8: Top500 榜单排名与 GFlops/watts 的关系 [6]

相信，随着并行体系结构的发展，在上述方面也将会有进一步的突破。

(三) 并行编程发展的概述与展望

以 Aurora 支持的编程模型 Intel oneAPI 的建立与发展为例进行分析：

oneAPI 是一种开放的、跨行业、基于标准的、统一的、多架构的、多供应商的编程模型，可跨加速器架构提供通用的开发人员体验，从而实现更快的应用程序性能、更高的生产力和更大的创新能力。oneAPI 计划鼓励在整个生态系统中就 oneAPI 规范和兼容的 oneAPI 实现进行协作 [4]。

事实上，随着并行体系结构的不断发展，并行的编程程序也越来越冗杂，这大大增加了程序员的学习成本，并随之限制了行业的快速发展进步。随着 AI、机器学习和以数据为中心的应用程序的发展，该行业需要一种编程模型，使开发人员能够利用处理器架构的快速创新。为了编程程序的兼容性和可移植性，舍弃较少的性能，在一般情况下是可以被允许的。

相信随着并行体系结构的接续发展，并行编程也将会变得越来越规范化，统一化，从而进一步促进并行性能与算法的快速发展。

参考文献

- [1] Aurora 官方页面.
- [2] Hewlett packard enterprise 官网.
- [3] Intel 官网.
- [4] oneapi 官方页面.
- [5] Th-2 用户手册 v1.1.
- [6] top500.
- [7] 国家超级计算广州中心.
- [8] 英特尔® 至强® cpu max 9470 处理器官方页面.
- [9] CCF 中国计算机学会. “银河-1” 亿次计算机, 2017.
- [10] 操秀英. “神威蓝光” 显神威. Technical report, 科技日报, 2012-06-27.
- [11] 新华社. 中国成功研制千万亿次超级计算机“天河一号”, 2009.
- [12] 新华社. 我国首台性能超千万亿次计算机“星云” 开通运营, 2011.
- [13] 王握文 and 司宏伟. “银河一 ” 巨型计算机研制成功. Technical report, 解放军报, 2008-10-08.
- [14] 高洁. 中国超级计算机再次跑赢世界, 这些内容你应该知道! , 2017.