

力及海量数据存储方面都有着巨大的需求, 学校如果没有一个良好的高性能网格计算环境, 不能提供充足的计算力, 那么必然会在许多领域中失去很多机会, 在激烈的竞争中处于下风。

通过我们近年来对校内多个学科的接触和调查, 初步掌握了他们的一些典型应用的特点以及他们对高性能计算的需求, 以下仅以部分学科或学院为例。

(1) 数计学院。

数计学院在多个研究方向上都需要大量的计算力, 例如关于并行计算、程序并行化与数据相关性的研究; 涉及用数值计算方法直接求解流动主控方程的计算流体力学; 有关模拟大规模投资组合分析和风险价值计算的金融计算研究; 智能交通系统的大规模实时网络计算等等, 为此, 以陈仲英教授为首的学科带头人, 已向学校提出建立大规模快速反应计算中心的需求。

(2) 理工学院。

粒子物理和量子场论是探索物质世界的前沿科学, 格点 QCD 是粒子物理与凝聚态物理和计算科学之间相互交叉的学科。要了解 QCD 所包含的物理现象并且对点阵理论的预测进行精确地计算, 就必须进行大规模的数值模拟。我校承担的国家自然科学基金重点项目“格点规范理论的大规模数值模拟研究”, 以格点量子色动力学课题进行大规模数值运算, 要实现其科学目标, 必须要把校内、校外、国内甚至是国际上现有的高性能计算资源加以充分利用, 而网格计算是最有效的实现方法。

(3) 生命科学院。

生命领域的生物组织及其重建的计算模拟、生物信息学研究、模拟克隆人技术等对计算里有较高的需求。生物信息学(也即计算生物学)领域为研究机构共享计算与数据资源并进行复杂的计算工作, 如蛋白质结构分析等, 提供一个集成平台。基因测序工作需要的海量数据比对及处理必须利用超强的计算能力, 以便对基因的生物功能进行分析。生物学与生物系统模拟研究, 需要超强计算力带来原子级精度。可见高性能计算研究是生命科学不可缺少的重要手段。

(4) 医学、药学与公共卫生学。

在医学、药学与公共卫生学领域, 也有许多需要高性能网格计算的研究, 例如医学图像诊断、药物设计与新药开发、心血管血液流动仿真、数字化人及其医学应用, 流行疾病统计、分析与预测等等。医学图像诊断通过网格计算平台在创建一个跨

医院甚至跨地区的大型医学数字化“相册”, 存储各种典型的数字化医学图片, 便于患者、师生及医务工作者便捷地获取各种有价值的医学图片, 辅助疾病的早期发现与早期诊断。而各种人体的仿真, 疾病的统计分析与预测, 药物毒性比对分析等, 更是对高性能计算有非常大的需求。

(5) 气象科学研究。

气象的观测与预报, 需要对各种气候子系统进行综合的大规模数值模拟以及对各种不确定因素进行定量分析, 因此需要强大的并行计算系统。近几年来, 我校大气系承担了包括国家攀登 A 项目、国家自然科学基金重点项目等多个重大项目的研究。这些项目的研究都涉及到“大气数值模式的研制和数值试验”, 需要使用大容量、高速并行计算机。

(6) 环境与海洋研究。

环境领域的污染传播与防治的数值模拟, 海洋污染问题中的赤潮问题、珠江河水污染的问题, 地理信息系统都是高性能计算的重要选题。高性能计算环境的建成, 将完善广东颇具优势特色的海洋科技创新体系。

(7) 化工学院。

化学信息学是近几年发展起来的一个新的化学分支学科, 它利用计算机技术和网络技术, 对大量的化学信息进行表示、管理、分析、模拟和传播, 以实现化学信息的提取、转化与共享, 揭示化学信息的实质与内在联系, 促进化学学科的知识创新。另外, 理论化学中模拟各种化学反应的量子化学计算, 化工、医药和生物大分子结构的设计与计算, 以及结构功能预测和研究、药物分子的作用机理和大分子结构合成的途径等, 都需要大量的数值计算应用。

(8) 工程科学。

工业大规模设计计算问题, 不但单个作业计算量庞大, 而且需要不断调整和重复计算。在航空、航天、船舶、汽车等工业领域, 利用大规模并行计算进行反复设计、分析、优化, 已成为标准的必经步骤和手段。另外, 材料科学中, 模拟材料生长、条件、工艺的全过程, 从而定量分析材料的光电和结构及其演化问题, 也是高性能计算的应用。

以上几点仅是我们前期初步调查的部分典型应用, 但各应用计算力需求最高达 5000 亿次, 据初步调查结果预测, 我校在高性能计算上的计算力总需求约为 20000 亿次。

2 我校高性能网格计算环境的规划与建设

2.1 总体目标

(1) 建设我校高性能计算平台，为发展 ChinaGrid 进行必要的技术储备和铺垫，在 2005 年底前实现聚合计算力超过每秒 5 千亿次 (500GFlops)、存储力达到 30TB (其中 10TB 用于高性能计算与网格计算) 的高性能计算环境，使之成为我校建设高水平大学的重要基础设施和公共服务设施之一，同时成为中国教育科研网格 (ChinaGrid) 上的网格节点之一。

(2) 充分利用中山大学的学科优势和丰富信息资源，实现资金聚合与计算力聚合的统一，利用有限资金集中各种资源，有效防止各部门重复投资与资源闲置。优先扶持若干个应用，并为其他的学科和应用提供示范效应。

(3) 为高性能计算与网格计算学科建设提供必要的物质基础，并与各学科进行合作，培养一批高素质的高性能计算、网格研究及应用人才。

(4) 建立高性能计算应用的相关的管理制度，完善使用程序，规范操作行为，加强安全保障措施，促进高性能计算应用的良性发展。

(5) 为教育与科研网上的用户提供共享网格服务，为科学研究提供本节点的计算资源和存储资源共享，促进广东省及华南地区的计算网格、数据网格和服务网格等的研究和应用发展。

2.2 现有条件

建设我校高性能网格计算平台，除得到校领导及学校其他相关部门的大力支持以外，必须具备一定的条件。随着数字化校园建设项目的开展，信息与网络中心在一些基础设施方面，已能基本能满足我校高性能网格计算平台建设的需求。

在我校数字化校园一期建设中，我中心已规划

建设数据中心。数据中心既是数字化校园重要的基础环境设施，也是以后发展高性能网格计算平台的重要环境依托。目前数据中心精密机房建设已经基本完成，机房面积约为 170 m²，配备有 3 台 41 kW 的精密空调，2 台 160 kW 冗余三相 UPS 电源，按照不小于 2 万亿次计算能力的需求设计，动力电源输出可达 500 kW，具备先进的大屏幕监控系统设备，具备完善的机房环境恒温、恒湿控制，及完善的防雷、防静电、气体消防等保护设施，已可以满足我校未来一段时期内发展高性能网格计算的环境需要。

随着数据中心项目的完成，我中心已具备存储力达 10TB 的 EMC|DELL CX600 存储设备一套，计算力达高达每秒 1760 亿次的 IBM p690 服务器两台，以及曙光信息产业 (北京) 有限公司捐赠的一套小型“高性能 64 位集群服务器”一套，并建立“曙光 64 位应用示范基地”。我中心非常重视高性能网格计算方面的人员配备与培养问题，安排专人负责高性能计算的技术跟踪与调查，协助主管网格计算的中心副主任进行高性能网格计算的规划。并安排相关技术人员，在已有的计算环境下开展高性能网格计算方面的研究，进行必要的技术积累。

2.3 规划与实施

高性能计算的发展过程主要经历了以下几个阶段：初级阶段，向量机阶段，对称多处理器共享存储并行机 (SMP)、分布式共享存储并行机 (DSM)、大规模并行处理机 (MPP)、集群/机群 (Cluster) 及正在兴起的网格计算。在近几年来，集群系统在许多领域和机构 (特别是教育科研机构) 的高性能计算中被广泛使用，并成为正在兴起的大规模网格计算中的重要计算资源。从当前的高性能计算机 TOP500 排行榜可以看到，机群上榜率正在大幅增加 (表 1)。

表 1 TOP500 2005 年 6 月结构体系分布
Tab 1 Architectures distributing in TOP500 (Jun 2005)

Architectures	Count	Share/(%)	Rmax Sum (GF)	Rpeak Sum (GF)	Procs Sum
Cluster	304	60.8	764793	1347314	236354
Constellations	79	15.8	114445	186814	40052
MPP	117	23.4	807695	1098006	303930
All	500	100	1686933	2632133	580336

集群是多台 SMP 服务器或 PC 服务器，通过高速网络互联，每一台机器作为一个单独的结点，除满足要独立使用每个结点的协定任务之外，所有结点如

同一个整体一起协同工作。集群体系结构有着良好的可扩展性、易用性、可用性、性能/成本比：

(1) 可扩展性——集群是松耦合结构，从理论

上讲, 计算能力随结点的增加而增加;

(2) 易用性——集群的每一个结点都是传统的平台, 用户可以在熟悉和成熟的环境中开发和运行他们开发的应用程序;

(3) 可用性——集群有多个存储器和处理器, 单个的部件失效不会导致整个系统的崩溃。集群有多个系统映像, 单个的系统映像的损坏也不会导致整个系统的崩溃。系统使用商品化部件, 容易更换, 而且可使用开放性的技术如 RAID 提高系统可用性;

(4) 性能/成本比——传统的 PVP 超级计算机和 MPP 服务器由于其结构的特殊性, 成本往往会

很高, 而相同理论峰值运算能力的集群价格则要低 1—2 个数量级, 特别是 PC 集群, 由于大量采用工业标准部件, 其成本更低。考虑到充分利用现有资源, 根据我们的总体目标及目前的技缩发展趋势, 结合学校各学科的需求, 我们决定在第一期采用含支持 64 位计算的处理器 PC 服务器集群构建我校的高性能计算环境, 理论浮点运算峰值不低于 3000 亿次。经过招标, 我们采购了曙光公司的曙光 4000L 集群。该集群包括 3 个机柜、62 个计算结点、1 个管理结点、1 个访问结点、1 个存储结点。每个计算结点为配备 2 路支持 64 位的 Intel 至强 2.8G 处理器及 2GB 内存的 1U 服务器, 其余 3 个结点为配备 2 路支持 64 位的 Intel 至强 2.8G 处理器及 4GB 内存的 5U 服务器, 整个系统通过千兆以太网相连, 浮点运算理论峰值为 7280 亿次。经过安装调试, 该系统已投入试运行, 实测浮点运算峰值约为 4100 亿次。

在该系统的试运行期间, 我们就接到了来自理工学院、分子医学等院系的计算请求, 经过双方的努力, 他们的应用必将可以顺利在该平台上得以运行。下一步, 我们将要把该系统连进我校的校园网格平台, 作为重要的计算资源, 为全校师生及网格互联的其它院校提供服务。

参考文献:

[1] TOP500 List for June 2005[EB/OL] . [http: //www. top500. org](http://www.top500.org)
[2] BAKER Mark. Cluster Computing White Paper[M] . University of Portsmouth, UK, 2000
[3] Beowulf Introduction and Overview [EB/OL] . [http: //www. beowulf. org](http://www.beowulf.org)
[4] FOSTER I, KESSELMAN C. 网格计算 [M] . 北京电子工业出版社, 2004
[5] De ROURE D, NICHOLAS R. The semantic grid: past, present and future[EB/OL] . [http: //www. semanticgrid. org/ documents/semgrid2004/semgrid2004. html](http://www.semanticgrid.org/documents/semgrid2004/semgrid2004.html)

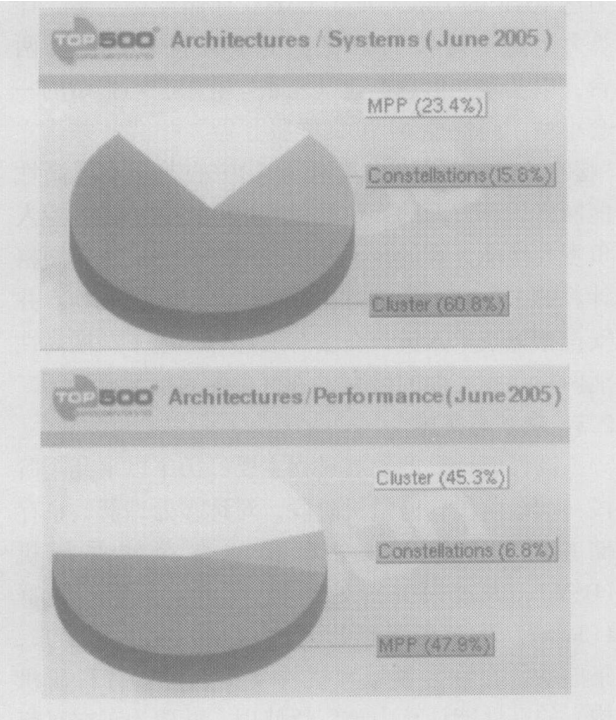


图 2 2005 年 6 月 TOP500 体系结构/系统及体系结构/性能的变化趋势
Fig. 2 Trend in the change of arch/sys and arch/perf in TOP500 (Jun, 2005)

The Plan of HPC Environment in Sun Yat-sen University

GUAN Wei hao, ZENG Hai biao

(The Information and Network Center of Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

Abstract: To overcome the shortcomings in the web technology and implement sharing information and cooperative teamwork, scientists are working toward the Grid which is one of the developmental trend in Internet. Establishment of the high performance computing environment of Sun Yat-sen University with the grid computing technology can improve the lack of campus divisions in the computational capability in scientific research now. It has great significance in improving the whole capability of innovation of scientific research in our school

Key words: HPC; Cluster; Grid