

# 网格计算及其原型实现研究<sup>\*</sup>

Research on Grid Computing and Prototype Grid Implementation

都志辉 李三立 陈 渝 刘 鹏 黄震春 何 川 方 兴

(清华大学计算机系 北京 100084)

**Abstract** Some opinions and research results on grid computing are included in this paper. A simple introduction about grid computing and the related works are provided at first. The paper argues that the main problems to be resolved in grid computing are resource sharing, friendly interface, high performance computation and security. The features of grid computing are orientation to how to resolve challenging problems and how to employ all kinds of resources more easily, how to collaborate distribute and dynamic resources and how to deal with complex resource structure and multiple resource management. The paper presents a design of a prototype grid system and also describes the key technologies of the prototype grid system. The implemented function of the prototype system is briefly introduced and several typical applications based on the system are also given. Finally, a simple conclusion is given.

**Keywords** Grid computing, Grid middleware, Supercomputing from network page, Prototype grid, Resource encapsulation

## 一 简介

互联网的普及和高速网络成本的大幅度降低, 计算机计算能力的迅速增长, 使得在改变传统计算方式的同时, 也改变了人们对计算机的使用方式。将地理上分布的计算资源(包括数据库、贵重仪器等其它的各种资源)充分利用起来, 协同解决复杂的大规模问题, 这就是网格计算(Grid Computing)<sup>[1~3, 17]</sup>。近几年来, 网格计算已经逐渐成为超级计算发展的一个重要趋势, 它可以解决仅靠本地资源无法解决的复杂问题。

互联网络或网格是世界上计算能力最强的超级计算系统和最庞大的计算资源, 网格是互联网络深入发展的必然结果。电子技术推动了 20 世纪经济的发展, 人们预计互联网络或网格必将成为 21 世纪经济发展的重要推动力。随着网络和计算机技术的发展, 网络计算、元计算(meta computing)<sup>[4]</sup>和网格计算等一些概念也在发展变化并且已经逐步融合在一起, 本文对这些概念的细节不加区分。

网格计算是一个崭新而重要的研究领域, 它的出现是以大粒度资源共享, 高性能计算和创新性应用为主要特征。目前国内外网格计算的热点集中在网格的建立、网格系统软件的构造以及网格在专门领域的应用上面, 在教育部重点项目支持下建立起来的北京上海先进计算基础设施试点工程已经初步建成, 它是一个原型网格系统, 本文介绍这一项目在网格计算方面的研究结果。

## 二 相关工作

在世界范围内, 网格计算正处在迅速发展阶段。在美国由自然科学基金资助的 PACI (Partnership for Advanced Com-

putational Infrastructure) 项目, 包括两个重要的部分: NCSA (National Computational Science Alliance)<sup>[5]</sup> 和 NPACI (National Partnership for Advanced Computational Infrastructure)<sup>[6]</sup>。这一项目通过将学术界、政府部门和工业界的力量结合起来, 建立一个网格计算基础设施的伙伴联盟, 来促进科学发现和工程研究的发展, 这和本文网格系统的目标是十分相近的。美国的 NASA (National Aeronautics and Space Administration) 正在构造一个网格计算实验床, 称为 IPG (Information Power Grid)<sup>[7]</sup>, 它可以将 NASA 分布在各地的资源通过网络(包括无线通信手段)连接起来, 解决 NASA 目前无法解决的科学与工程计算与数据管理等问题, 这显然是一个行业专用网格, 与本文网格在具体实现和目标上有一定的不同, 我国目前还没有这样的行业网格出现。由美国能源部 (Department of Energy) 和美国三个国家重点实验室 Sandia、Livermore 与 Los Alamos 共同承担的 ASCI (Accelerated Strategic Computing Initiative) 计划<sup>[8]</sup>, 是一个主要用于军事目的高性能计算发展计划, 其目的是在不进行物理核试验的情况下, 通过计算模拟, 来开展核武器的全方位研究, 以维持其在军事领域的核威慑地位, 和本项目以科研和民用为主的目标是很不相同的。在欧洲有欧洲网格论坛<sup>[9]</sup>也在开展网格计算方面的研究。目前已经出现了不少在一定程度上支持网格计算的系统, 较著名的有 Globus<sup>[10, 18]</sup>, Legion<sup>[11]</sup>, Net-solve<sup>[12]</sup>, Condor<sup>[13]</sup>, Ninf<sup>[14]</sup>等。

国外的各种网格系统, 都有一个重要的特点是投入资金特别巨大, 这是国内目前还不具备的条件, 在超级计算系统的计算能力上和国外有相当大的差距, 但是以性能价格比较高的集群式系统来提供高性能计算能力, 在许多地方可以满足目前我们大多数的计算任务的需求, 可以开展各项研究, 这是

<sup>\*</sup> 本项目部分受教育部重点项目“先进计算基础设施北京上海试点工程”的资助。都志辉 博士后, 讲师, 研究方向为并行计算、网格计算; 李三立 中国工程院院士, 主要研究方向为计算机体系结构、高性能计算; 陈 渝 博士后, 主要研究方向为网络安全与容错; 刘 鹏 博士研究生, 主要研究方向为网络可视化; 黄震春 博士研究生, 主要研究方向为网格计算; 何 川 硕士研究生, 主要研究方向为网格管理中间件; 方 兴 硕士研究生, 主要研究方向为网格环境下的任务分配与管理。

本项目的优点之一。而且本项目开创的“网页超级计算”方式和 XML 等网络新技术的使用,在系统设计、实现以及使用等方面较国外的系统都有自己的特点,在不少地方还有优势,国外的 Globus 等网格工具和软件系统,已进行了长期的开发和应用实践,投入的开发费用是巨大的,功能也十分强大,由于它目前可以免费使用,这对我们十分有利,可以充分借鉴其已有的成果,大胆采用“拿来主义”,进一步完善和扩展自身系统的功能,相信可以在近期内开发出可以与世界最优秀的网格工具和软件系统相媲美的系统来。

在国内,网格计算也正处于快速发展时期,主要有中科院牵头的“国家高性能计算环境(National High Performance Computing Environment,简称 NHPCE)”项目<sup>[16]</sup>,NHPCE 的长期目标是提高计算网格系统的性能、可扩展性及可用性。目前包括北京、长沙、成都、合肥、上海、西安等几个试验结点。但目前它已实现的功能还比较有限,与最终的目标还有相当大的距离,特别是它所提供的计算方式还是传统的远程登录(telnet),这对于一般的用户来说是不方便的,在一定程度上不利于高性能计算的推广和普及。

国内另一个重要的项目是由清华大学牵头,教育部支持的重点项目“先进计算基础设施北京上海试点工程”<sup>[16]</sup>即本文介绍的研究项目,其目的是建立一个主要为教育系统各单位提供资源共享的科研、教育、培训等高性能计算基础设施,实现跨学科、跨地域合作与人才培养。它与 NHPCE 相比,目标更侧重于以教育系统为基础的研究与应用开发,更侧重于以先进计算能力为支撑的跨地域、跨学科、跨行业的重大基础研究和应用技术的开展,以性能价格比很高的集群式系统提供超级计算能力,以自发的广泛合作和大部分免费提供计算服务为主,促进我国的科研教育整体水平的提高,在研究开发和应用的同时培养大批的复合型高级技术人才,而且这一设施的基本计算方式是“网页超级计算”而不是传统的“远程登录”,这一计算方式的变革,对最终用户有重大影响,对推广高性能计算有重要的促进作用,也有利于使高性能计算真正成为科学研究和应用工作者手中的工具。

### 三 关于网格计算的探讨

什么是网格计算?这在国内外不同文章中有不同的定义,本文从网格计算需解决的问题和网格计算的特点以及网格计算与其它相关技术的对比几个方面来对网格计算进行探讨,以给出本文的观点。

#### 1 网格计算需要解决的问题

**资源共享** 这是网格计算需要解决的一个核心的问题,也是网格计算的主要目的,没有资源共享就没有网格计算。网格计算需要对不同地理位置的、随时间动态变化的、类型多种多样的、隶属不同组织和单位的网格资源实现有效共享。

**高性能与界面友好** 网格计算必须提供高质量的服务,这包括提供的计算性能要高,要能够使问题的合作求解具有很高的效率,合作的方式和方法要比传统的方式更方便、更有效。

**安全** 安全问题涉及到网格系统的方方面面,包括一次认证问题、授权问题、在实现资源共享的同时如何实现保密的问题、如何防止对整个网格或网格的部分资源进行有意/无意的攻击与破坏等等。

#### 2 网格计算的特点

**挑战性** 网格计算求解的问题一般规模大,难度高,需要

结合多方的资源和力量才能够完成,这是其挑战性的一个方面,而网格计算另一个挑战性的方面就是如何使这些资源的使用和协调更有效、更方便,即问题本身的挑战性和求解问题方式的挑战性。

**分布性** 网格计算必然是分布的,这主要是指网格计算所涉及的计算资源、进行网格计算的实体(各种组织以及单个用户)和其它的各种网格资源在地理位置上并不局限在一个很小的范围之内,这种地理位置的分散会引发其它各种问题,比如通信的延迟、资源的远程访问、远程任务提交以及由此带来的各种安全性方面的问题等等就必须解决。

**动态性(不确定性,扩展性)** 主要是指网格资源不是一成不变的,原来可以使用的资源随着时间的推移可能变得不再可用,而原来没有的资源也会逐渐加入进来。资源的动态发现机制和资源的“心跳”探测机制都是资源动态性的要求。不确定性是动态性的另外一种表现形式,而扩展性是网格资源逐步增加所必然遇到的问题。

**多样性** 网格资源是多种多样的,异构的计算资源就是多样性的具体体现,网格计算的使用者所在的领域是互不相同的,网格计算解决的问题也是千差万别的,这些都构成了网格计算多样性的不同表现。

**管理的多重性** 网格计算资源首先是隶属于某个具体单位的,因此该单位对它所拥有的资源具有最高级的管理和控制权限,但是,另一方面网格资源也是提供给整个网格的,因此网格系统也应该对该资源有相应的管理和控制权限,这样,就必须解决管理的多重性问题,实现各种管理的协调一致问题。

### 3 与相关技术的对比

网格计算需要网络技术支持,一切网络技术的成果都可以为网格计算服务,网格是建立在网络之上的,网格计算离不开网络技术,但是网格计算的问题仅仅靠网络技术是无法解决的,比如网格计算在性能、速度、安全等方面的新需求。分布式技术在许多方面和网格计算具有共同点,但网格计算更强调资源共享和不同资源之间的互操作性,而各种分布式技术更强调为用户提供一个逻辑或虚拟的集中环境。网格计算需要大量的软件中间件的支持,中间件技术是网格计算的核心技术之一,各种中间件技术和成果都可以为网格计算所使用。超级计算是网格计算的计算能力提供者,网格计算更强调如何实现超级计算能力的共享和网络化,充分协调和共享不同计算系统的计算能力,而传统的超级计算技术则强调如何提高特定系统本身的计算速度和性能,较少考虑如何与其它系统的协作。

### 四 一个原型网格系统 P-GRID 的设计与实现

基于对网格计算的研究,我们设计并实现了一个原型网格系统,并在该原型网格上进行了跨学科的合作研究,取得了较为满意的结果。

#### 1 P-GRID 体系结构

整个 P-GRID(Prototype-Grid)的体系结构如图 1 所示。P-GRID 的最上层是为用户提供的统一的 WEB 界面。以 WEB 页面作为对外提供服务的统一界面,具有如下优点:1)与平台无关,只要能够浏览 WEB 页面,就可以访问 P-GRID 提供的各种资源;2)与地理位置无关,使用者对 P-GRID 的使用和访问不会因为地理位置的不同而有所不同,只要能够访问 Internet,就可以使用 P-GRID 的资源;3)增加安全性,由于

这种访问方式避免了使用者直接对计算系统和其它资源的访问,因而可以有效避免各种无意的破坏或恶意的攻击,这种方式,也有助于建立一种统一的认证和授权机制,避免重复授权和重复认证;4)提高易用性,对大多数用户来说,基于 WEB 的操作方式比远程登录(telnet)要容易得多,因此容易被他们所掌握,也容易开展应用合作,有利于推广和普及高性能计算和相关的科研成果。

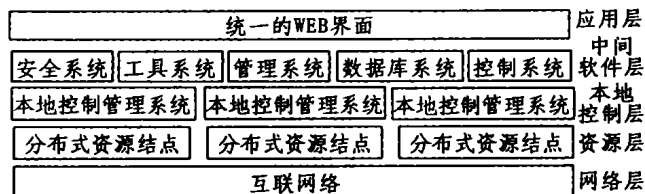


图1 P-GRID 的体系结构

在本地控制层的上面,覆盖着一层丰富的软件系统,可以称之为“网格中间件”,它们实现各种控制和管理功能,向下对不同的计算系统和其它的资源进行控制和管理,在不同的计算系统、仪器设备等资源之间进行资源的分配与协调;向上提供各种服务,对用户提出的各种要求进行支持。具体地,安全系统负责各种加密、认证、授权、监测和预防功能,既要维护使用者合法的使用,又要保证整个 P-GRID 系统的正常、有序运转。工具系统是为用户和系统管理人员提供的各种方便使用和管理的程序,实现对任务的分析、调试、监测和管理等功能。管理系统允许合法用户对自己拥有的信息、数据、任务、资源等进行操作和修改,这是功能最多最庞大的一个 P-GRID 中间件系统,我们把超级用户的各种管理功能也集成到这一系统中去,这样做的目的是统一管理界面和接口。数据库系统是 P-GRID 系统比较有特色的地方之一,P-GRID 不仅把用户的相关信息,而且把各种资源和任务信息,都通过数据库系统管理起来,这样做不仅管理上比较方便,而且有利于信息的共享和查询,为不同用户之间的信息交流与合作,为任务的灵活分配和调度提供有力的技术支持。控制系统是为整个 P-GRID 系统提供必需的资源控制服务。

本地控制系统可以直接对本地拥有的资源进行最大权限的控制,进行资源的分配和管理,同时,它也负责为整个 P-GRID 系统的控制提供支持,使本地控制和整个 P-GRID 的控制管理功能相一致,这是由本地控制系统保证的。

分布式资源结点包括计算资源和其它的精密仪器、大型数据库等信息和数据资源。计算资源结点是 P-GRID 系统计算能力的提供者,它可以包括各种异构、异构以及能力不同的计算系统,可以是集群式系统,也可以是 MPP 系统,还可以是高端服务器。这些计算系统在地理位置上可能是分布的,在系统配置上可能差别很大,在功能和适合求解的问题领域上当然也会有很大的不同,但是通过 P-GRID 的软件系统,将这些计算资源管理起来,统一为 WEB 用户提供各种计算服务,使用户感觉不到计算系统在位置上的不同,在能力上的差异,用户所能感觉到的只是一种来自于“网页”的计算能力即“网页超级计算”能力。数据库资源结点提供各种数据查询和更新等服务,特殊的仪器构成的结点可以使远地的使用者远程完成特定的实验,并为用户提供相应的实验结果等功能。

互联网络是 P-GRID 系统的基础,为了提供高性能和高质量的服务,必须为资源结点之间提供高性能的通信。

从该结构图可以看出,P-GRID 系统和一般的计算系统

最大的区别就在于它为用户提供的统一的 WEB 界面和覆盖在地理分布的不同的计算系统(或其它的资源)之上的中间件软件系统,正是这一中间件系统将各种计算资源虚拟为“网页超级计算”能力,使得不同的用户可以通过易于理解和方便使用的网页,进行地理位置无关和屏蔽计算系统差异的计算,使计算能力象电力一样,做到“即联即用”。

## 2 P-GRID 关键技术

P-GRID 的关键技术包括 5 个方面,即基于 WEB 的服务、管理与应用机制,基于数据库与 LDAP(Lightweight Directory Access Protocol)的任务与资源信息管理机制,基于 XML 的信息交换与控制机制,资源的统一封装与管理机制,标准高效应用软件库和工具库的开发,下面分别加以介绍。

**基于 WEB 的服务、管理与应用机制** 从以远程访问方式的计算到基于 WEB 的“网页超级计算”,是计算方式的变革,是一项开创性的工作,因此如何将原来远程访问方式的计算功能以更直接、更方便的“网页”方式来体现,同时提供原来远程访问无法提供的能力,是 P-GRID 系统的一个重要技术难点,P-GRID 设计并实现了一种基于“网页超级计算”的服务、管理与应用机制,直接方便了 P-GRID 系统的管理和使用。

**基于数据库与 LDAP 的任务与资源管理机制** 数据库作为信息管理是一种非常常见和直接的想法,但是用数据库和 LDAP 相结合来管理分布式的任务、计算资源及其它的各种资源,是本项目组经过多次讨论后得出的一种实现方案和 P-GRID 的重要技术。基于数据库和 LDAP 进行分布式和层次化的任务和资源管理,可以方便对任务的查询和控制,方便不同应用的信息交流,同时为不同地理位置计算系统之间的任务迁移、任务调度、负载均衡提供技术支持。

**基于 XML 的信息交换与控制机制** XML 是一种重要和崭新的信息交换手段,具有许多优点。由于 P-GRID 系统的异构性、分布性和动态性等因素的存在,需要找到一种统一的信息表示和信息交换方法,XML 正好可以满足这一需求。P-GRID 用 XML 实现了单个计算系统内部的信息查询、信息交流和信息控制,而且在不同的系统之间通过 XML 进行资源信息的交流和控制,有效解决了 P-GRID 系统各组成部分之间的信息表示、信息交换和信息控制的问题。

**P-GRID 中对资源的统一封装与管理机制** 为了实现对资源的安全管理和使用,统一管理与管理界面,在 P-GRID 中,不允许直接对资源进行操作,所有的资源申请、分配和使用都是在一个资源对象(Resource Object)的管理下进行的(见图 2)。

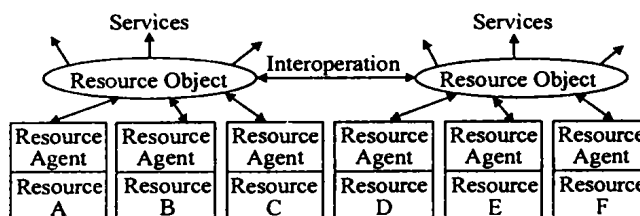


图2 资源封装与服务

其中 Resource Agent 可以直接对资源本身(比如机群系统的一个计算结点)进行操作,响应资源对象 Resource Object 的各种要求,根据不同的要求执行不同的操作,给出相应的返回信息。资源对象可以包括一个或者多个具体的资源。不

同的资源需要编写不同的 Agent,但是对外提供的接口格式是相同或相近的。资源对象是响应一切外来资源要求和资源分配的提供者,它同时负责和它的资源对象进行互操作。

**标准高效软件库和工具库的开发** 基于“网页”的计算必须提供丰富的标准高效的软件库和工具库供用户进行使用和二次开发,这是一件工作量大、难度大、性能要求高的任务,必须通过广泛的合作与交流,通过和不同领域的专家和科研人员的交流与集中攻关,探索与掌握开发标准高效软件库和工具库的基本方法和技术,P-GRID 系统已实现了一些基本的软件库和工具库。

### 3 P-GRID 的实现

①跨地域高性能计算环境的建立 在清华大学计算机系,本项目组研制了峰值速度为 1000 亿次/秒的集群式高性能计算系统 THNPSC-2,在这一系统上,已经进行了煤燃烧、分子动力学、CAD 布局设计、SPICE、定量电子晶体学、机械模具设计、高温高压超临界反应、水下目标强度预测等多个学科与领域的研究。

与上海大学计算机学院合作,峰值速度为 4500 亿次/秒的“自强 2000”超级计算系统于 2000 年底研制成功,它是目前经过鉴定的国内民口系统中峰值速度最高的集群式计算系统。世界前 500 位超级计算机权威网站 TOP500 也将它的研制成功作为头条消息进行报道,在“自强 2000”公布已经达到峰值速度为 4500 亿次/秒后的几天,美国总统克林顿宣布美国放松对其超级计算机的出口限制。

由于许多专用资源不可复制的或复制的代价非常昂贵,因此通过虚拟实验室,可以将一个地方的资源共享给其它需要的用户,使得用户在各自提供自己的资源优势的同时,充分利用其它地区或部门的资源,为高层次、高效率的合作与交流提供技术支持。目前针对不同的问题,本项目已经成功地将北京和上海的计算结点组织起来,多次召开网络视频会议,两边的科研和开发人员不必出差到对方的城市,直接在網上就可以面对面讨论问题,商讨问题的解决方案。P-GRID 环境已经实现了虚拟实验室的部分功能。

在 P-GRID 上,配备有并行求解环境 MPI 和 PVM,可以用来编写高效的并行程序,充分利用并行系统的计算资源,解决复杂的科学与工程计算问题。同时还配有数据并行语言 HPF 编译器,这样对于科学与工程计算中的数据并行问题,可以通过高级并行语言 HPF 来编写程序,提高并行程序的开发效率,有助于并行计算的推广和普及。P-GRID 上提供的语言还有跨平台的 WEB 语言 JAVA 及 JAVA 3D 运行与开发环境,可以充分利用 JAVA 的跨平台特性,实现开发一次,到处运行的目的。同时利用 JAVA 3D 可以实现复杂的三维动画功能,实现网上的三维可视化。最常使用的 FORTRAN 77/FORTRAN90 和 C/C++ 编译器,也是 P-GRID 环境的组成部分,使用这些语言和编译器可以方便地实现各种语言的应用程序开发。

在这样的运行与开发环境之上,配备的科学与工程计算库包括:基本的线性代数库 BLAS(Basic Linear Algebra Subprograms),具有通信功能的基本线性代数库 BLACS(Basic Linear Algebra Communication Subprograms),求解线性方程的 LINPACK 库(Linear Package),自动优化线性代数库 ATLAS(Automatically Tuned Linear Algebra Software),线性代数包 LAPACK(Linear Algebra PACKage)以及可扩展的并行 LAPACK 包 SCALAPACK(Scalable LAPACK),利

用这些科学与工程软件包,可以方便、高效地实现各种计算,不需要重新设计与编写各种复杂的求解程序。

②基于 WEB 界面的 P-GRID 管理系统 P-GRID 的管理系统分为两个部分,一是合法用户对自身资源信息和任务的管理,二是系统管理员对整个系统的管理。但二者都是基于 WEB 界面来进行的。

普通合法用户管理部分的功能包括:用户申请(要求用户提供各种自身信息和资源要求信息),确认后的用户对自身信息的修改(修改密码,联系方式等信息),通过 WEB 提交一个新任务并对任务运行的整个过程进行监控和管理(任务状态的查询,中间结果的显示,暂停任务的执行,重新启动该任务,强行中止任务等),通过 WEB 对已提交的任务以及任务运行的结果进行各种分析与查询功能(可用资源查询,CPU 负载和内存利用率的查询,程序的执行踪迹分析,相关领域和相关算法的查询等)。

系统管理员对系统的管理功能包括:对新用户申请的审批,合法用户的查询与管理(增加、删除整个用户或者增加、删除或修改用户的部分信息),对用户或者用户组权限的修改,对普通用户提交任务时使用的任务模板进行增加、删除与修改,对所有用户的任务进行监控以及强行中止,对学科分类树的管理,对整个系统资源的查询与管理等。

P-GRID 还实现了基于 LDAP 的资源管理系统,可以通过 WEB 界面查询资源状况,对资源信息进行添加和修改等。

安全防护是贯穿在整个 P-GRID 系统之中的,包括防火墙技术的使用,通过 https 的安全 WEB 访问,封闭不安全的访问模式(比如 telnet),开放安全的使用模式 SSH,以及在系统内部对任务提交的初始数据、执行过程进行检查,一旦发现恶意或破坏性行为,立即采取措施加以制止。

### 4 基于 P-GRID 的应用实例

在 P-GRID 平台上,已经成功地开展了多项跨学科的合作研究,它们是:1)定量电子晶体学的研究;2)机械模具设计的流场计算;3)高温高压超临界反应研究;4)高分子链与分子膜的模拟研究;5)潜艇等水下目标的探测计算研究。

①定量电子晶体学的研究 会聚束电子衍射是高分辨分析电子显微学的一个重要分支,已广泛应用于材料科学、物理学和晶体学等领域。利用定量会聚束电子衍射技术测量晶体电荷密度的整个过程分为会聚束衍射实验和计算机模拟两部分。

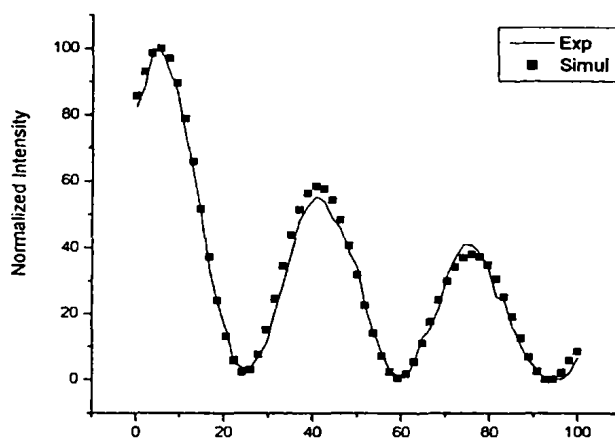


图 3 衍射盘线强度(Line Profile)的实验值和拟合值的对比  
在我们的计算中,目标函数采用 Hoffmann 提出的 NED

(Normalized Euclidean Distance)形式,该公式的特点是当实验值和理论值比较接近时,目标函数的值便会急剧收敛,所以能够很好地反应理论值和实验值之间的差别。图3给出的是一个实例的实验值和计算拟合值的对比。从图中可以看出二者是十分接近的。

通过跨学科合作,我们设计了高性能的 SPMD 模拟退火算法,和原来的串行计算相比,解决该问题的计算时间从原来的 40 个小时左右下降到 20 分钟至 1 个小时左右,而计算精度有所提高,即理论计算结果与实验测试结果的差从原来的 0.09 降低到 0.03。通过高性能计算,可以验证理论模型的正确性,弥补了实验手段的不足,从计算时间和计算精度上为问题的求解提供保证。

②机械模具设计的流场计算 压铸过程数值模拟技术是计算机在现代压铸生产过程中应用的最核心内容之一,充型过程流场温度场的模拟又是这一核心中的难点。数学模型建立后,如何使方程求解既迅速又准确,这是充型数值模拟中的重要问题。

基于该数值差分求解模型,我们合作设计了该应用的并程序,较原来的串程序,对于同样的问题,计算时间从原来的一个星期下降到三个小时,大大节省了对一次设计的模拟所需要的时间,从而为优化设计在时间上提供了保证。在此基础上,我们还设计了一种递归分割算法,可以进一步提高并行计算的效率,提高求解大数据量问题的能力,这一新的算法正在实现阶段。

③高温高压超临界反应研究 计算机分子模拟是近代统计物理和热力学中一种重要的研究手段,是在分子水平上研究流体结构及性质的一种强有力工具。

本合作研究利用分子模拟方法中的 Monte Carlo 法研究狭缝炭孔内吸附的临界特性。这一工作计算量大,需要消耗大量的机时。通过合作研究,我们采用并行化方法,将计算任务分摊在不同的 CPU 上计算,提高了计算速度,提高了工作效率和计算精度。最后得到的模拟系统的稳定性提高了,而且达到稳定状态后波动明显降低。

④高分子链 计算机分子模拟能够根据分子结构和分子之间相互作用直接模拟得到高分子系统的相分离和微相结构,可以排除实验中的许多不确定因素和实验系统选择的困难,同时又可以避免理论分析常常会碰到的数学分析上的困难。一方面我们采用了与③节相似的方法,使用独立的随机数序列,使用多个处理器的并行计算,另一方面我们采用区域分解的方法,使不同的结点计算不同的区域,从而可以成倍地扩大问题的规模,提高模拟效果。

⑤潜艇探测 建立一个精确的潜艇回声预报模型是现代声纳技术、潜艇隐身技术及水声对抗技术的急需。目前遇到的问题就是为了模拟实际的舰艇,计算网格将会非常大,这样从存储量到计算量,都不是一般的计算机能够胜任的。

经过合作开发,我们已经设计并完成了基于稠密矩阵的并行解决方法,通过计算和验证,说明该算法和程序是正确的。为了进一步提高效率,我们又合作设计开发了高效的带状矩阵求解方法,这一并行计算方法可以求解更大的问题规模,而且计算效率进一步提高。经过试验验证和理论分析,表明其计算结果是正确的。目前正在就规模为实艇大小的矩阵进行研究。

**结论** 网格计算还处在发展阶段,关于网格计算本身还

没有一个统一的明确定义。本文对网格计算的不同方面进行了一些探讨,给出了一个原型网格的设计与实现,并在该系统之上进行了跨学科的多项合作研究。这些实践与成果说明网格计算的确是一个充满希望的新兴研究领域,可以提供前所未有的计算能力和网络资源,促进更广泛更深层次的资源共享与跨地域跨学科的合作、研究与应用开发,使更多的人员以更容易的方式得到和使用更丰富、更强大的资源。目前虽然我们在整体上和国外在网格计算研究方面还有一定的差距,但是我们完全可以在网格计算的某些关键技术以及特定的网格应用方面取得与世界先进水平相同甚至是领先于世界水平的成果。

## 参考文献

- 1 Foster I. Internet Computing and the Emerging Grid. Nature Web Matters, 7 December 2000. <http://www.nature.com/nature/webmatters/grid/grid.html>
- 2 Foster I, Kesselman C. The Grid: Blueprint for a New Computing Infrastructure. Morgan Kaufmann, San Francisco, CA, 1999. <http://www.gridforum.org/>, <http://www.ccgrid.org/>
- 3 Foster I, Kesselman C. Computational Grids: The Future of High-Performance Distributed Computing. Morgan Kaufmann Publishers, 1998
- 4 Smarr L, Catlett C. Metacomputing. Communication of the ACM, 1992, 35(6): 44~52
- 5 NCSA Project. <http://www.ncsa.uiuc.edu/>
- 6 NPACI Project. <http://www.npaci.edu/>
- 7 Johnston W E, Gannon D, Nitzberg B. Information Power Grid Implementation Plan: Research, Development, and Testbeds for High Performance, Widely Distributed, Collaborative, Computing and Information Systems Supporting Science and Engineering. NASA Ames Research Center. <http://www.nas.nasa.gov/IPG>, 1999
- 8 ASCI Project. <http://www.lanl.gov/projects/asci/asci.html>, <http://www.llnl.gov/asci/>, <http://www.sandia.gov/ASCI/>, <http://www.sandia.gov/ASCI/>, <http://www.lanl.gov/asci/>, <http://www.lanl.gov/projects/asci/asci.html>
- 9 European Grid Forum. <http://www.egrid.org/>
- 10 Foster I, Kesselman C. Globus: A Metacomputing Infrastructure Toolkit. Intl. J. of Supercomputer Applications, 1997, 11(2): 115~128. The Globus project. <http://www.globus.org/>
- 11 Grimshaw A, Ferrari A, Knabe F, Humphrey M. Legion: An Operating System for Wide Area Computing. Dept. of Comp. Sci., U. of Virginia, Charlottesville, Va. Available at: <ftp://ftp.cs.virginia.edu/pub/techreports/CS-99-12.ps>. Z and The Legion Project. <http://legion.virginia.edu/>
- 12 Netsolve Project. <http://www.cs.utk.edu/netsolve/>
- 13 Litzkow M J, Livny M, Mutka M W. Condor-A hunter of idle workstations. 8th International Conference on Distributed Computing Systems, 1988. 104~111. <http://www.cs.wisc.edu/condor/>
- 14 Ninf. Network Infrastructure for global computing. <http://ninf.etl.go.jp/>
- 15 Chinese NHPCE Project. <http://www.grid.ac.cn>
- 16 Chinese ACI of MOE Project. <http://aci.cs.tsinghua.edu.cn>, <http://www.hpclab.shu.edu.cn>
- 17 Foster I. The anatomy of the grid: enabling scalable virtual organizations. CCGRID2001 (First IEEE/ACM International Symposium on Cluster Computing and the Grid), PP. 6~7
- 18 Foster I. The globus toolkit for grid computing. CCGRID2001 (First IEEE/ACM International Symposium on Cluster Computing and the Grid), PP. 2