# Temanummer om supercomputing

*Ole Holm Nielsen, UNI•C*

Dette nummer af Kvant giver nogle danske eksempler på, hvorledes anvendelsen af moderne computere, og specielt supercomputere, kan spille afgørende roller i forskellige forskningsgrene. Artiklerne understreger en klar tendens i moderne fysik: Simuleringer af komplicerede fysiske systemer på computere ("computer eksperimenter") er i mange felter blevet et afgørende værktøj til opnåelse af ny viden. De valgte eksempler stammer fra statistisk fysik, materialefysik, astrofysik, og klimatologi, felter hvor forfatterne viser hvilken enorm indvirkning computer–simuleringer har på moderne forskning; der kunne trækkes mange andre eksempler frem fra dansk og udenlandsk forskning, men der er ingen tvivl om at naturvidenskaben, udover eksperiment og teori, herved har fået et interessant "tredie ben". Dette er således vores tema.

Computeren er værktøjet i denne forskning. Det er særdeles tydeligt, at anvendelsen af computere generelt har grebet utroligt om sig, især i de seneste 5–10 år. Dette er båret af en teknologisk udvikling som bl.a. har gjort computeren til folkeeje, men som også har forsynet os med *workstations* og *supercomputere*, samt *software* der samtidig har gjort brugen af computere uendeligt meget lettere.

Computerteknologiens indvirkning på forskning og udvikling i almindelighed er enorm. I USA har man ligefrem defineret nogle vigtige områder, hvor supercomputing planlægges at give anledning til gennembrud i forståelsen af særdeles komplicerede problemer. Disse *Grand Challenges* omfatter bl.a. magnetisk informations–lagring, katalyse, protein–design, og tre–dimensionel (3D) digital anatomi. Også i Europa er der et program omkring High Performance Computing and Networking, som skal øge udbyttet af teknologien. Fysikere er traditionelt gode til at udnytte computere i deres arbejde, og vil kunne drage stor nytte af disse programmer.

Men hvad er de væsentligste tendenser i den rivende udvikling af computerteknologi, som vi bl.a. skal udnytte til ny forskning ? Det dominerende faktum er den eksponentielle vækst af CPU–kraft, hukommelses–størrelse, samt disk–kapacitet, som fås for et fast beløb. Fordoblingstiden for disse størrelser er 12-24 måneder, hvis man ser tilbage på de sidste godt 5 år, og denne rate forventes ikke at aftage i overskuelig fremtid.[1] Såvel PC'ere som workstations og supercomputere "rider" på denne bølge: Eksempelvis kan man i dag anskaffe en PC med en praktisk ydeevne på 1.5 MFLOPS for ca. 20.000 kr, mens en 40 MFLOPS workstation kan fås for ca. 150.000 kr. (MFLOPS står for millioner flydende–tals operationer/sekund).

Udover at disse tal for ydeevne fordobles som anført, er både PC'ere og workstations begyndt at kunne indeholde flere CPU–enheder, f.eks. 2 eller 4. For at anvende disse udvikles der multi–CPU operativsystemer og compilere. Det kan forventes, at en skrivebords–workstation med 1000 MFLOPS reel ydeevne vil kunne købes om en 3–4 år.

Supercomputing–begrebet kan defineres som brugen af den til enhver tid hurtigste computer–teknologi[1]. Gennembruddet kom i 1976 med CRAY-1 vektorprocessoren, som gennem årene satte tusinder af forskere i stand til at udføre numeriske beregninger på en helt uhørt skala. Nu om dage er denne vektorprocessor–teknologi velkendt af brugere og leverandører, og der findes megen anvendelses–software til at udnytte den store regnekraft. Disse computere anvender som regel den mest avancerede teknologi, og opnår derfor ekstremt høje MFLOPS–tal. Udover ved den hurtige elektronik (med typisk en cyklus–tid på 2–4 nanosek.), opnås hastigheden ved to former for parallel databehandling: Samme operation (f.eks. addition) udføres på en hel vektor af tal (f.eks. 64) ad gangen i en såkaldt pipeline, og der kan være et antal CPU'er der arbejder i parallel (for tiden op til 16).

Imidlertid er vektorprocessorer i dag ikke så unikke, som de var for 10 år siden, forstået på den måde at forholdet mellem deres regnehastighed og det som den enkelte forsker kan have til rådighed ved sit skrivebord er blevet formindsket drastisk: For 10 år siden kunne en CRAY-1 måske yde op til 50 MFLOPS, mens en VAX-11/780 kunne yde 0.1 MFLOPS, en faktor 500 til forskel. I dag kan en moderne vektorprocessor yde måske 500 MFLOPS (pr. CPU) mens en workstation kan yde 50 MFLOPS, hvilket kun er en faktor 10. Desuden gør masseproduktionen, at en workstation er langt billigere pr. MFLOPS ydeevne.

Parallelle supercomputere repræsenterer en teknologi, som i disse år er i færd med at revolutionere begrebet supercomputing, og atter frembringe supercomputere som distancerer "lokale" maskiner med en stor faktor. Ved at sætte hundreder eller tusinder af CPU'er sammen, oftest baseret på kommercielle workstation chips, kan der dels opnås en tilsvarende faktor i ydeevne, og dels er pris/ydeevne forholdet for en sådan supercomputer ikke er urimeligt meget højere end for den personlige workstation. Samtlige supercomputer–leverandører satser i dag på disse parallelle maskiner, som på langt sigt vil erstatte vektorprocessorerne fuldstændigt. Leverandørernes erklærede mål er at fremstille computere med ydeevne over 1 TeraFLOPS ($10^{12}$ operationer/sekund), hvilket antages at ville nås omkring 1995, og dermed forsyne *Grand Challenge* projekterne med den fornødne regnekraft. Den

[1] Man kan også foretrække andre definitioner.

største maskine der findes i dag kan teoretisk yde 0.128 TeraFLOPS.

Situationen i 1993 kan beskrives som en overgangsfase, hvor vektorprocessorerne i mange tilfælde stadig kan være de hurtigste. Men i "den lave ende" yder workstations jævnligt næsten lige så stor regnehastighed, for en langt lavere pris. I "den høje ende" bliver et stigende antal anvendelser omskrevet til parallelle supercomputere, og får derved en langt større regnehastighed. Imidlertid er overgangen til parallelisme blevet beskrevet som en "reinkarnation snarere end en evolution" af de nødvendige computer–programmer. Det at udtænke parallelle algoritmer er blevet en nødvendighed, hvis man ønsker at benytte fremtidens supercomputere. Uden tvivl vil også mange grene af fysikken blive påvirket af disse nye computere, og der forestår spændende udfordringer med at udnytte mulighederne optimalt og udtænke sine egne Grand Challenges.

**Referencer:**

1) R. W. Keyes, Physics Today, August 1992, p. 42.



*Ole Holm Nielsen,* er Ph. D. i fysik fra Århus Universitet, har været ansat hos Xerox i USA, samt ved NORDITA, Københavns Universitet og Danmarks Tekniske Højskole. Er nu seniorkonsulent i Scientific Computing enheden ved UNI•C.