

· 科技事件 ·

突破超算软件开发瓶颈 须重视协同性

2014年6月23日,国际TOP500组织公布了最新的全球超级计算机500强排行榜,国家超级计算广州中心的“天河二号”超级计算机以比第2名美国“泰坦”超级计算机快近1倍的速度,连续第3次获得冠军。而就在此前几天,《中国科学报》要闻版刊发题为“驾驭‘超算’还缺‘好鞍’”一文指出,国内不少超算中心正面临着无相应配套软件,难以充分发挥作用的尴尬。一边是冠绝全球的运算速度,一边是受制于软件的应用现状,面对两者形成的反差,国家超级计算广州中心(以下简称广州中心)主任袁学锋在接受《科技导报》采访时表示,国外在超级计算机应用方面,特别是针对异构计算机的大规模并行计算,其实与国内面临同样的问题,我们不能盲目崇拜国外,但也必须承认,他们在软件开发的协同方面做得更好。而提高协同性正是突破软件开发瓶颈的关键因素。

软件缺乏:“国外其实和我们面临同样问题”

超级计算机可应用的领域非常广泛。

中国科学院软件研究所所长孙凝晖2011年曾在《信息快报》发表文章指出,目前中国的高性能计算应用主要集中在科学计算、能源、气象、工业仿真、金融等传统领域。除传统应用外,还存在着新兴应用领域,如医学、高级人机交互(如虚拟现实)、物流、影视动画、在线网络游戏等。

我国近年来一直在积极推动超级计算的发展,虽然运算速度越来越快,但超级计算机的应用效率也反复被提及。制约其应用推广的一个关键因素就是软件问题。

据《中国科学报》报道,中国科学院计算研究所研究员张云泉2014年6月在九三学社中央科技委员会首次科技沙龙上表示,中国计算机发展在硬件方面因得到政府有力支持而发展迅速,而由于重视和投入不够,与其相应的软件却未能与硬件发展匹配,这使得我国超级计

算机在实际应用中难以发挥出其最高效率。孙凝晖也曾在文章中指出,国外商业软件的昂贵价格和拥有自主知识产权软件的缺乏是中国高性能计算应用发展的主要障碍。

对此,袁学锋告诉《科技导报》,“近几年在软件方面,国内在构建超级计算机的软件生态环境方面投入了大量研究力量,不论是底层的HPC优化操作系统,还是混合编译技术,或是领域并行框架Jasmin,这些都能更好发挥超级计算机的效能,降低用户使用门槛。但也必须承认,即使获得较大进步,我国在超级计算机的软件和应用方面还是较国外有一定差距。”

不过袁学锋也表示,国外超级计算机的应用其实也与国内面临同样问题。“当然,国外经过40多年发展,经验要更丰富一些,但他们与我们在很多方面尚处同一阶段。国内外所面临的共同难题是建立一个超级计算系统研制和应用发展的所谓“协同设计”生态圈。在软件开发的协同性上,国外在协同机制和协同文化上确实比我们更顺畅些。”

加强协同性 打破软件开发瓶颈

据媒体报道,中国各地国家超级计算中心,目前只有两三家处于饱和和运行状态。尽管广州中心的建设期要持续到2015年底,为了考察“天河二号”的并行计算能力,在2014年对外试运行的70天内吸引了来自各行业的120多个用户,300多项典型应用。袁学锋说,“天河二号”的计算资源多,计算能力是“天河一号”的23倍,而目前推广应用的瓶颈确实在软件,但这是能够突破的”。广州中心计划构建集成化的软件研发生态圈,打通不同学科之间的壁垒,解决一些以前不能解决的问题,其背后的指导原则之一即注重软件开发的协同性。

袁学锋介绍说,当前的科技体制使得国内各学科处于孤立状态,研发文化呈简单重复和碎片化,但很多复杂科学和工程问题却需要多学科融合,必须依靠多学科知识和技术才能解决,这就需要在软件开发中注重协同创新——通过

整合碎片化的科研力量,提高资金投入效率。“广州中心在建立之初就考虑到这一点”,袁学锋介绍说,该中心由广东省政府、广州市政府、国防科学技术大学、中山大学四方共同建设,国防科学技术大学以工科见长,中山大学则是一所囊括文、理、医等多学科的综合院校,两校汇聚其他高校和企业的优势学科将联合建设“2011计划:高性能计算协同创新中心”,从组织机构上加强了软件开发环境的协同性。

具体到软件平台建设,袁学锋表示,不同领域的软件有很多共性,首先要针对国家的科技战略需求建造一个基础软件库,并基于此用户能够根据自身需求把个性化的应用软件开发出来。广州中心将联合国内外的科研力量,针对国家战略需求打造6个软件平台:材料科学与工程软件平台,囊括微观到宏观领域,从材料的分子设计到加工再到性能预估等各方面;医药和个性化治疗平台,囊括基因组学、转录组学、蛋白组学、代谢组学、生物化学、生物物理、生理学、健康管理、个性化医疗等从小分子到大生命体等多领域问题;基于第三次产业革命的数字制造软件平台;能源相关软件平台,包括传统能源以及可再生能源领域,比如建设数字化的核能工业全过程模拟平台等;地球物理与环境工程平台,包括模拟地球深部运动以及地表如海洋、大气运动规律等方面;智慧城市软件平台,包括城市的电子政务、电子教育、电子医疗、电子金融等领域。

“这些软件平台的建设将依靠强大的学科支撑,包括应用数学、信息科学与技术、物质科学与工程、生命科学和医学,还有社会科学等。这不只是一个超级计算平台,也是一个学科交叉平台、加速学科和产业信息化的平台、产业融合的平台、为智慧城市服务的平台,同时我们也把它作为一块科技体制改革的实验田”,袁学锋说,广州中心正在积极争取专项基金,力求实践这一新型创新模式。

文/李娜

(责任编辑 汤锡芳)