



人类对宇宙探索的好奇心以及对问题规模和精度的追求,决定了人们对超级计算能力的需求“不会止步”。在百P超算实现之后,E级超算,也就是百亿亿次超级计算机,将成为世界各国争夺的“下一项皇冠”。

E级超算,2020年见

■本报记者 赵广立

“新科”全球最快超级计算机“神威·太湖之光”亮相之后,全世界为之震惊。“全球第一快”有多快?国家超级计算无锡中心主任杨广文打了一个比方:“神威·太湖之光”1分钟的计算能力,相当于全球72亿人同时用计算器不间断计算32年。

这个速度就是93PFlops,浮点运算速度每秒9.3亿亿次——人类历史上第一次,将高性能计算机的运转速度记录接近至每秒十亿亿次这个数量级。

然而,人类对超级计算机性能的追求没有止境。“超算性能每提高1个数量级,人类对它们的需求可能提高1000倍,也就是3个数量级。”中科院计算所研究员、中国计算机学会高性能计算专委会秘书长张云泉在接受《中国科学报》记者采访时说,人类对宇宙探索的好奇心以及对问题规模和精度的追求,决定了人们对超级计算能力的需求“不会止步”。

“在百P超算实现之后,E级超算将成为世界各国争夺的‘下一项皇冠’,也就是百亿亿次超级计算机。”张云泉对记者说。

预计2020年左右实现

超算水平是一个国家综合国力和科技创新能力的重要标志,各国对E级超算的争夺,无不掺杂着国家战略的意味。

自“天河二号”于2013年11月正式登顶当时的超算TOP500榜首之后,美国这个头号超算强国已连续3年未曾染指这一宝座。然而,种种迹象表明,美国从未在“最快超算梯队”上掉队。

全球超算TOP500排行榜发起人、橡树岭国家实验室及田纳西大学教授杰克·唐加拉(Jack Dongarra)在接受《中国科学报》记者邮件采访时说,美国能源部通过国家战略计算计划(NSCI)以及和产业界和学术界的合作,正在推行能进行百亿亿次计算系统的开发。“该系统集成了硬件和软件能力,在一系列代表政府需求的应用中的表现将是目前10千万亿次系统的100倍。”

记者了解到,欧洲、日本也制定了自己的E级超算研发计划,并将相应计划的完成时间表设定在了2020年。

张云泉透露,中国也将百亿亿次超级计算机及相关技术的研究写入了国家“十三五”规划,同时也希望在2020年左右实现这一宏伟研究计划。出人意料的是,在几个制定了相关计划的国家中,只有美国相对“悲观”,他们预计百亿亿次超级计算机的建成或许需要到2022年。



在百P超算实现之后,E级超算将成为世界各国争夺的“下一项皇冠”。 图片来源:百度图片

业内人士认为,美国此举或许并非故弄玄虚,因为随着高性能计算机运算规模的增加,建造它的难度可能将是几何级数的提升。

E级超算的挑战

张云泉告诉记者,百亿亿次超级计算机的建造难度并不仅仅在于速度的提升,更在于对大规模超算设备的功耗要求。按照由美国倡导的国际公认标准,E级超算的功耗应低于20MW。按照这一功耗目标要求,未来的E级超级计算机的能效比要达到50GFlops/W。

这在张云泉看来,是一堵难以逾越的高墙,毕竟排在Green500第三位、创造了大规模高性能计算机能效比的最好成绩的“神威·太湖之光”每瓦性能只有6GFlops,仍相差一个数量级。

“功耗墙很难逾越,是各国都在面临的难题。”张云泉对记者说:“现在大家希望采用异构加速或异构综合的方式来降低功耗的要求,但由此带来的是编程的困难。因此,可以说研发E级超算实际上面临着编程墙、功耗墙、可靠性墙和存储墙几个‘大墙’的围堵,如何越过这几堵墙,面临很大的挑战。”

在被问及这一问题时,杰克·唐加拉给记者列出了一份“没有特定顺序”的百亿亿次计算实现之前的“TOP10挑战”名单,具体地描绘出了实现百亿亿次超级计算机之路上“拦路虎”的样子。

在这份名单里,关乎计算性能的挑战有2个,分别是研发更节能的电路、电源和冷却技术和增加数据流动的性能和能量效率;关乎计算硬件的更新升级的只有1个:集成先进的内存技术以提高容量和带宽;而关乎软件和开发环境方面的挑战则有不少,分别是开发可扩展更强的系统软件、发明适于大规模并行处理的新的编程环境、创建更优化的数据管理软件等。在这份列表中,杰克·唐加拉还提醒计算科学家们需要从系统或更高角度准备迎接E级计算的挑战,比如要重塑百亿亿次超算系统对科学问题的解决方案,提高用新的软件工具和环境的生产力、确保E级超算发生故障时科学计算的重要性等。

“E级应用”

“每秒执行百亿亿次计算,这可是我们今天所见机器计算速度的数十上百倍,这些未来的计算机将是一个全新的‘物种’。而且,它们不仅在于快,更在于它们可以以全新的方式处理大数据。”杰克·唐加拉说,“这将是至关重要的,E级超算未来将非常有用,比如它们或许能攻克癌症。”

“为了找到治疗癌症的方法,我们需要找出以前没有见过的模式。”杰克·唐加拉说,在癌症治疗方面,人们面临的挑战不是缺乏相关数据——现在比以往更多,而是如何“打开”这些数据,并找到合理的模式处理它,从而

告诉人们到底是什么原因导致癌症或者如何更有效地对抗它。“超级计算机是用于分析基因组和相关分子数据集、患者记录、家族史和与癌症相关的其他复杂信息优良的工具。随着超级计算机的发展,我相信我们可以找到答案。”

张云泉也指出,E级超算如此受“欢迎”,正在于它在解决人类共同面临的健康危机、能源危机、环境污染和气候变化等重大问题上将发挥巨大作用。“从目前来看,E级超算主要面对一些具有重大计算的需求,如全球气候变化模拟、天体物理大数据的处理、模拟宇宙的演化、新型材料验证及无库存核武器仿真等。”

此外,杰克·唐加拉指出,百亿亿次计算设备除对各个产业领域提速换挡有贡献、提高国家竞争力之外,还将“向下流动”促进产业发展,比如增强包括从智能手机到相机在内的消费电子产品的计算系统的软硬件性能等。

自主实现的曙光

在“神威·太湖之光”以自主芯片和操作系统获得接近十亿亿次的计算速度之后,中国看到了自主研发E级超算的希望和曙光。张云泉认为,“神威·太湖之光”的成功已经为我国向E级超算迈进打下了一个坚实的基础,只要做好人才、资源、经费和材料的储备,冲击E级超算指日可待。

按照一般科研规律,在类似大科学装置正式进入研发日程之前,原型系统等预研项目非常必要。

“从原型系统到大规模系统,难度是几何倍数增加的。所以原型系统不可能暴露所有的问题。”张云泉说,但预研项目可以验证一些关键技术设想,对一些关键技术难点进行测试和改进,“为最后建造全部的系统来扫清障碍,避免出现大的技术错误和难题。”

在最新公布的国家“十三五”高性能计算专项课题中可以看到,我国公示出了三个分别由中科曙光、国防科技大学以及江南计算技术研究所牵头的E级超算的原型系统研制项目。据消息人士透露,中科曙光牵头的E级超算原型系统研制项目将于近期举行的曙光技术创新大会(IDIC2016)上正式启动。

“我们国家发展E级超算是‘三头并进’——这代表着中国超算‘三足鼎立’——三家单位在超算技术领域均具有强大的研发实力。”张云泉告诉记者,我国在E级超算研制方面采取的是竞争机制,预计两年之后会对三家单位进行评估,最后吸取最好的方案来整合成最后国家的E级超算研发体系。

前沿点击

“超级细菌”的耐药性基因可遗传

本报讯 德国科学家日前发布的一项研究成果显示,让细菌具有耐药性的基因不仅能够跨越不同物种传播,还能通过接触染色体而遗传。

以某些大肠杆菌为代表的革兰氏阴性菌已对多种抗生素具有耐药性。目前,多粘菌素是对抗耐药性细菌的最后一道防线,但是一个名为MCR-1的基因会让细菌对多粘菌素也产生耐药性,变成“超级细菌”,使相关疾病的治疗更加困难。

2015年11月,中国首次报告在牲畜和人身上发现了带MCR-1基因的“超级细菌”,此后欧盟、加拿大和美国也相继发现人类感染带有这种基因的细菌,引发了人们对“超级细菌”的关注和忧虑。

德国感染研究中心的法尔根豪尔等人在新一期《新型传染病杂志》网络版上报告说,MCR-1基因有两个传播途径:一是通过细胞染色体外的质粒(很小的一段环状DNA)跨物种传播,另一个是通过染色体遗传。

“当这种基因‘跳’到染色体时,情况就变得特别危险。”法尔根豪尔说,对多粘菌素的耐药性会由此稳定地遗传给下一代。当这种具有耐药性的染色体接触到其他细菌时,又通过食物链在人畜间传播,相当于给“超级细菌”提供了“传宗接代”的温床。

研究人员表示,这种情况实际上已经发生,他们发现德国一种在人畜间传播的“ST410”大肠杆菌就带有MCR-1基因,而且这种基因能够遗传。(李木子)

TiN纳米颗粒实现太阳能利用新突破

本报讯 近日,日本国立研究所材料纳米构造中心纳米系统光子学组研究团队通过数值计算发现,过渡金属氮化物和碳化物纳米颗粒能有效吸收阳光。同时实验证实,当氮化物纳米颗粒分散于水中时,会迅速提升水温,通过有效利用阳光,这些纳米颗粒可能被应用于水的加热和蒸馏。

水和空气加热占家庭能源消耗的55%。如果阳光可以高效地转化为热量,那么无需使用电能来加热水和空气将成为可能,从而减少二氧化碳的排放量。利用常规的太阳能集热器和集热管吸收阳光的方法会由于热传导方式导致热量损失。由于纳米颗粒分散在介质中时可直接加热包括水在内的介质,因此备受关注。

最近,上述研究团队和日本国立研究所环境与能源材料部高级研究员Naoto Umezawa共同通过第一性原理计算来寻找适合光热转换的纳米颗粒材料,并估算其物理性能。研究团队发现,过渡金属氮化物和碳化物——陶瓷能够高效吸收阳光。

此外,在将氮化钛(TiN)从众多过渡金属氮化物中挑选出后,研究团队将TiN纳米颗粒分散进水中,并对水溶液进行光照。在这项实验中,研究团队证实TiN纳米颗粒能以接近90%的高效率将阳光转化为热量。由于TiN纳米颗粒表现出宽带等离子体共振,因此在每个纳米颗粒基TiN纳米颗粒的阳光吸收效率可能比金、碳纳米颗粒的更高。

在未来的研究中,该团队正计划将研究成果应用于地热、水热、污水和海水的蒸馏上。除了这个项目,该研究团队还致力于其他纳米颗粒的应用,诸如用于聚合物和纳米颗粒之间的高分子材料的发展、纳米颗粒介导的化学反应研究。(盛夏)

酷技术



一种具有生命的混凝土

图片来源:材料牛

会呼吸的混凝土

西班牙加泰罗尼亚理工大学的研究人员正在研究一种具有生命的混凝土,利用可以进行光合作用的有机生物,例如苔藓、地衣和其他微生物,生长在材料的身上,形成分层结构。

有机生物不仅使混凝土变得更加具有观赏性,而且还对排放在空气中的二氧化碳进行回收。有机生物附着在建筑物之上,有助于调节混凝土的导热系数,减少建筑物的能量需求。

研究人员设想,这种具有生命的混凝土嵌板可以附加在建筑物混凝土结构的表层。虽然这意味着嵌板不足以构建支撑结构,但它们能作为现有结构的一种配件。

建造和维护绿色屋顶都比较昂贵,相比之下,混凝土嵌板可以根据需求更加容易地进行安装和拆除。这种会呼吸的混凝土

共有三层,加起来的厚度约3~5cm;最内层的防水层是为了防止下面的结构层水分的渗出,多孔的中间层用来储存水分和提供水分,外层通过让水分只进不出,来保持水分充足。

研究者的试验测试表明,磷酸镁水泥是嵌板的最佳选择,与传统水泥和酸性波特兰水泥相比,它的pH值较高。磷酸镁水泥的pH值等于8,能更好地促进生物的生长。

根据该项目的一名研究员Sandra Manó Blanco说,团队已经确定这一概念的可行性。目前,他们已经完成了第一阶段,使其向市场化更进一步。现在他们正在准备启动该项目下一个阶段——将制造原型板并研究它们的性能。而关于混凝土板的使用寿命,科学家们也正在进行中试来研究它的长期行为。(盛夏整理)

科技解码

基因组学正在改变肿瘤研究,其最终目标是推进癌症的诊断、治疗、监控及最终的筛查方式。

基因组学推进肿瘤研究未来发展

——访亿明达肿瘤业务营销副总裁约翰·莱特

■本报记者 冯丽妃

癌症通常按照形态进行分类,这指的是病理学家在显微镜下看到的内容。“如今,癌症分类依据已经开始从形态特征转变为更有效的治疗方式,其中的主要转变在很大程度上归功于基因组研究。”美国生物技术公司亿明达(Illumina)肿瘤业务营销副总裁约翰·莱特(John Leite)近日在接受《中国科学报》记者采访时说。

他表示,基因组学正在改变肿瘤研究,其最终目标是推进癌症的诊断、治疗、监控及最终的筛查方式。

影响肿瘤学未来发展

在肿瘤诊断方面,亿明达的目标是提供体细胞变异的评估。与形态学相比,基因组学可以对疾病进行分类,并告知医生一名特定患者的疾病驱动因素是什么,从而实现更好的诊断。

以骨髓增生异常综合征(MDS,白血病的一种)为例。莱特表示,该病可根据奥氏小体或环形铁粒细胞等分为很多亚类。这些子分类对病理学家有用,因为他们可以在显微镜下看到小的亚结构,但其对主治医生的价值却有限。

“与之相对的是根据5号染色体部分缺失进行分类,这种分类对医生如何治疗患者很有意义。”莱特说。因为根据遗传组分,患者通常对药物来刺激反应良好。“随着可以对更多癌症进行遗传分类,人们可以看到这一趋势,即基因组学正帮助我们根据遗传标志物来定义疾病,这些标志物可能激发肿瘤恶变,可作为治疗靶点。”

目前,亿明达正在力争成为这一领域的领导者。“我们开发从试剂盒到仪器和软件的研究方案,以改善未来的肿瘤诊断、预后、治疗和监控。”莱特说。该公司目前还在参与一些临床试验,并与制药公司合作,以开发与其疗法相匹配的诊断

方式。

据介绍,该公司目前将总体目标放在转化研究市场,鼓励研究人员建立新一代的癌症干预、诊断工具和疗法。“我们的目标是研究人员提供解决方案,尽管研究人员今天仍在使用仅供临床研用的解决方案,但在不久的将来有望看到临床体外诊断检测方案。”莱特表示,该公司目前正在研究的TruSight Tumor 15试剂盒就旨在利用新一代测序技术对15个实体瘤中常发生突变的基因进行全面评估,以期未来将其推向临床。

聚焦免疫肿瘤学

体细胞变异是亿明达肿瘤学的基础。同时,该公司对免疫肿瘤学存在很大兴趣,正迅速地在这一新兴应用领域加强核心能力。

“最近一些侧重于不同免疫疗法的临床试验发现,一些原本预后较差的患者获得了有希望的治疗结果。”莱特表示,“在免疫肿瘤学方面,人们必须评估许多不同的参数,才能从整体上了解患者的免疫系统如何与癌症相互作用,确定他们是否适合免疫治疗。”

他举例说,新抗原检测或能表明一些患者是否适合接种疫苗或T细胞疗法,并可利用全外显子组测序(WES)确定。肿瘤浸润淋巴细胞则是另一个参数,可协助预测患者对治疗如何应答。“包含这些淋巴细胞(即渗透到肿瘤的免疫细胞)的肿瘤,通常意味着更积极的结果,因为它们的存在意味着患者的免疫系统在参与对抗癌症。而这个参数可通过基因表达评估。”

据介绍,亿明达的转录组或RNA-Seq方案可帮助研究人员开发诊断工具,用于上述分析过程。同时,肿瘤学问题还包括哪些炎症过程参与了个别病例,这也是基因表达的问题。该公司

产品线中的RNA-Seq或RNA Access可开展相关研究,而且这两种方法同样适用于一些免疫调控基因被癌症所利用、以“规避”个体免疫系统检测的病例。

为患者带来全方位福音

基因组学不仅能够更好地实现对肿瘤的分类和诊断,而且对于接下来的一个问题,即患者的整体风险状况怎样如何,是低风险、中等风险还是高风险的癌症也具有预后意义。

医生可利用临床因素组合以及检测到的突变,了解患者的整体风险状况。莱特表示,这些知识最终将带来更多个性化的治疗选择,从而快速准确地分配疗法与靶向药物。例如,在诊断出5号染色体部分缺失的情况下,MDS患者可根据遗传图谱选择使用药物Revlimid,再比如肺癌中多个基因(如EGFR、ALK)的突变可能需要选择特定的抑制剂。

同时,一旦患者接受治疗,医生还需要知道,这是否是依据患者的所有信息做出的适当疗法。据介绍,目前亿明达正在评估ctDNA,以监控治疗前后或手术后的干预。其目的是确定患者癌症的单个突变克隆,以及监控血液中的相同变异。“在连续治疗或干预后,我们期望变异被清除,不会再次出现,因为这可能与复发相关。如果再次看到变异,这也许是一个早期警告信号,提示人们改变疗法或以不同的方式干预。”莱特说。

此外,还有其他的问題,如能否实现癌症较早阶段筛查?病情可能如何发展?是否会复发?整体的生存概率如何?除了患者,其家人是否有风险?莱特表示,这些类型的问题目前只是基因组学潜在的研究方向,仍处于理论阶段,但有着巨大的社会意义。