

学科漫谈

让超算水平转化为生产力

■本报见习记者 赵广立



嘉宾:迟学斌

- 中国科学院计算机网络信息中心副主任
- 北京超级云计算中心主任
- 中国计算机学会高性能计算专业委员会副主任

日前,国际TOP500组织公布了最新的全球超级计算机500强排行榜,中国的“天河二号”超级计算机以比第二名美国“泰坦”超级计算机快近一倍的速度,再一次蝉联冠军。这标志着中国已经步入世界超级计算机前列。

拥有最高性能的超级计算机,理论上让中国可以处理其他国家处理不了的某些物理问题、科学发现,从而实现创新。而现实情况是中国在应用方面相对薄弱,还难以把超算的性能水平直接转化成生产力。

6月19日,由中科院计算机网络信息中心、曙光信息产业股份有限公司和北京北龙超级云计算有限责任公司共同主办的“北京超级云计算中心HPC研讨会暨新一代超级计算机‘元’上线开通仪式”上,《中国科学报》记者采访了中国科学院计算机网络信息中心副主任、北京超级云计算中心(以下简称超算中心)主任迟学斌。

“光提供基础设施是不行的,不跟科学家很好地合作(开发利用),机器就是一堆破铜烂铁。”迟学斌在接受采访时表示,计算机是“死”的,必须能够和实际的科技活动结合起来,才能发挥它的威力。

人才决定机器发挥多大作用

还记得“深蓝II”吗?它是科学家精心打造的一款32节点的IBM RS/6000 SP计算机,重达1.4吨。1997年,“深蓝II”与世界国际象棋冠军加里·卡斯帕罗夫展开较量,以2胜1负3平的成绩将其击败,成为计算机“战胜”人脑的经典案例。

“光靠机器能打败象棋大师吗?不能。是很多象棋高手和软件工程师一起,让机器具备了这样的能力,才得以与象棋冠军一较高下。”迟学斌指出,与象棋大师相比,高性能计算机只是具备计算速度快、程序记忆存储等优势,如果没有人的帮助,就算所有棋谱都装进它的“大脑”里,战胜卡斯帕罗夫也无从谈起。

“深蓝只不过是个‘傀儡’,科学家和象棋高手的智慧通过它展现了出来。”迟学斌据此为例,认为高性能计算机的应用同样面临这样的问题,“怎么样发挥计算机的作用,还是要看人。有什么样的人,机器发挥什么样的作用。在超算领域,我们一直强调人才是最重要的。”

中国在高性能计算(HPC)领域经过近20年的发展,在硬件上已经达到了国际先进水平,然而在超算应用技术、人才储备等软实力上却足足输美国一大截。美国HPC产业的强大不仅在于他们比中国多出20年的发展史,更在于他们在发展中并非只顾硬件性能,而是性能、应用两手抓。

迟学斌说,高性能计算的应用需要idea,而idea是人想出来的,机器只是帮人们去验证,去实现。“超级计算能够作出哪些科学发现,跟科学家的科



研活动密切相关。”

超算应用的天空其实很“蓝”

在北京超级云计算中心HPC研讨会上,中科院计算机网络信息中心主任黄向阳表示,超级云计算以云的方式架构、运营超级计算系统,并以云的方式向社会提供超级计算应用支持服务,是超级计算和云计算在当今时代的创新性结合。“云计算及其相关产业未来将是一个万亿元的大产业集群,超算云将在该产业中占据重要的份额。”

换言之,超算应用在当今时代,是一片待开发的蓝海。

实际上,北京超级云计算中心正在开发这片蓝海,迟学斌向记者列举了他们在高性能计算领域开展的一些案例。

迟学斌告诉记者,超算中心目前与北京市公安局刑侦总队联合建立实验室,致力于指纹比对效率的提升。当前,对比筛查每批次的比对计算大约需要40万次的计算资源,需要运行1周的时间才能完成。然而,在北京超级云计算中心,对比效率可以提升数倍乃至数十倍。

在气象预报方面,高性能计算机也派上了大用场。通过对多年气象变化数据的处理,配以适合地区区域变化的模型,再结合卫星图像等手段,共同服务于气象预测,使得预报准确率大幅提升。目前,超算中心与气象局联合开发出一款沙尘暴预测软件,已经投入到预报系统业务中。

周期冗长、过程复杂的新药研发领域,也需要高性能计算的帮忙。传统的药物筛选,需要做一系列的实验和求证,中间会产生大量的时间成本、经济成本、人力成本。而借助超级计算机,通过计算机模拟,就可以替代一部分实验,从而缩短药物研发周期。迟学斌说,尽管一些计算机数字模拟出来的结果可能还需要进一步验证,但已经把范围大大缩小了,就提高了实验的效率。

用到计算机模拟的地方还有很多,飞机的空气动力学实验即是一例。迟学斌说,飞机设计完成之

后,需要进行风洞试验,以检验各组件是否完美匹配。空气的影响有多大?用于模拟的高性能的计算机也许知道答案。在传热、传质、桥梁传递及燃烧、多相流和化学反应研究中,计算机模拟是其中不可或缺的一部分,目前已发展出一门专门的学科:计算流体力学。此外还有合金材料的计算机模拟,也大大节约了实验环节。

迟学斌介绍说,目前仅北京市就已有包括汽车、渲染等行业的企业与北京超算中心签约合作,共同开发超算的应用。

打铁还需自身硬

据悉,北京超级云计算中心将于近日对外提供超级云计算服务,一期提供每秒300万亿次计算能力,明年将达每秒2000万亿次,意味着计算效率将提升数倍至数十倍。

从百万亿次到千万亿次计算,这一进阶具有里程碑意义。北京超级云计算中心新一代超级计算机被命名为“元”,作为他们新起点的标志。

“如果我们将计算能力本身不是很强大的话,那其他那些计算能力强的地方,对我们留住人才也是一种压力。”迟学斌毫不讳言,如果不能保证计算能力的优势,那么在计算领域的优势终将式微。

“我们的计算能力,就算做不到最领先,也要做到与领先的差距不大。因为如果落后太多,那就等于不在同一个起跑线上。反过来讲,光有高性能机器,没有人才做高水平的服务,那效果是一样的,机器过5年就过时了。”迟学斌说,“一定是(计算能力与人才)相辅相成的。”

据了解,作为超级云计算中心首台机器,“元”融合了多种计算资源,包括NUMA架构大内存节点、Intel MIC和Nvidia GPU高性能加速处理器、远程可视化节点以及基于龙芯、申威国产CPU的异构环境,能够适应多学科应用需求,可实现高速计算,并能快捷处理和分析计算结果。根据未来应用需求,“元”将逐步建成千万亿次超级计算机。