面向大数据的科学软件技术与实践

田浩来,邹佳恒,林韬,李卫东,张俊荣

高能物理研究所

2013 年 7月 9日

第十六届全国科学计算与信息化会议暨科研大数据论坛
辽宁 大连

内容

1. 背景和挑战
2. 科学软件框架开发技术
3. 科学软件框架的实践

1 背景和挑战

2 科学软件框架开发技术

3 科学软件框架的实践

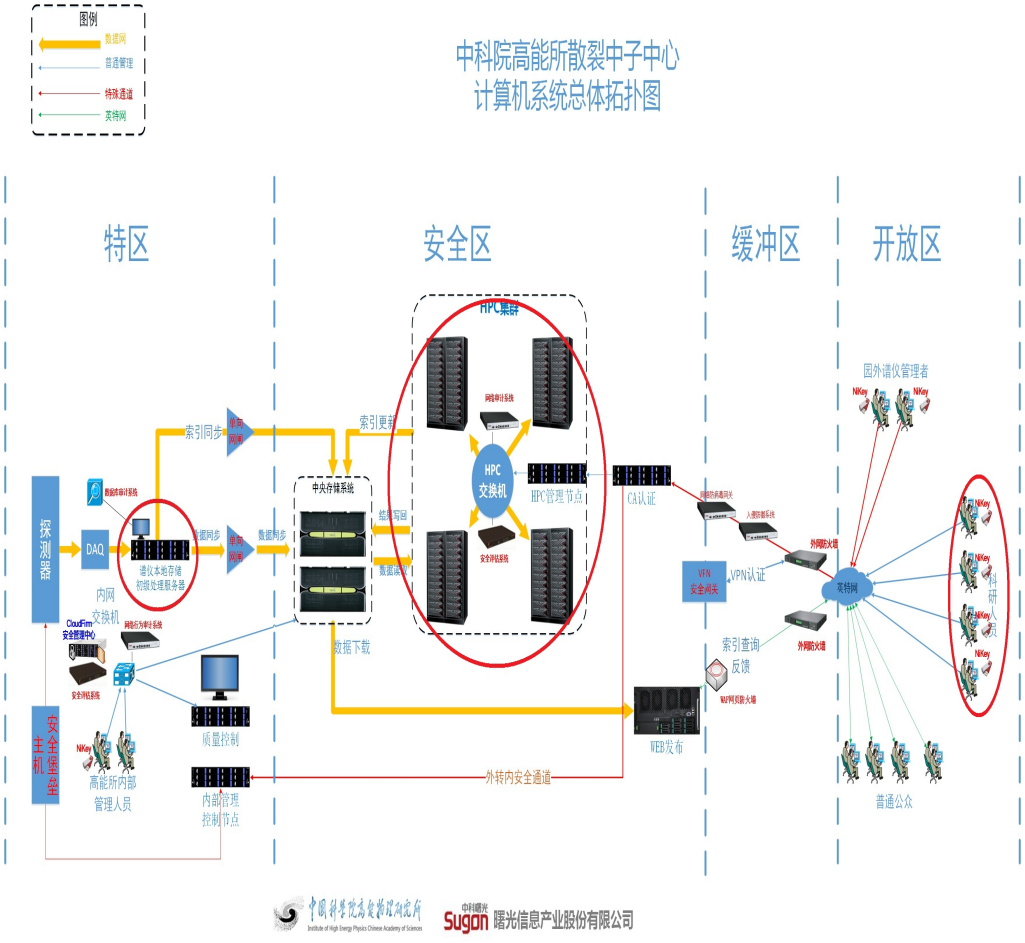
科学计算的应用场景

应用场景

- 离线数据处理
- 在线数据处理
- 交互式数据处理

科学计算的几种模式

- 事例循环
- 事件驱动
- 列表处理和矩阵运算



思路

复杂性、抽象与耦合

- 对功能的抽象带来耦合
- 解耦合带来复杂度
- 理解复杂需要抽象

解决方法

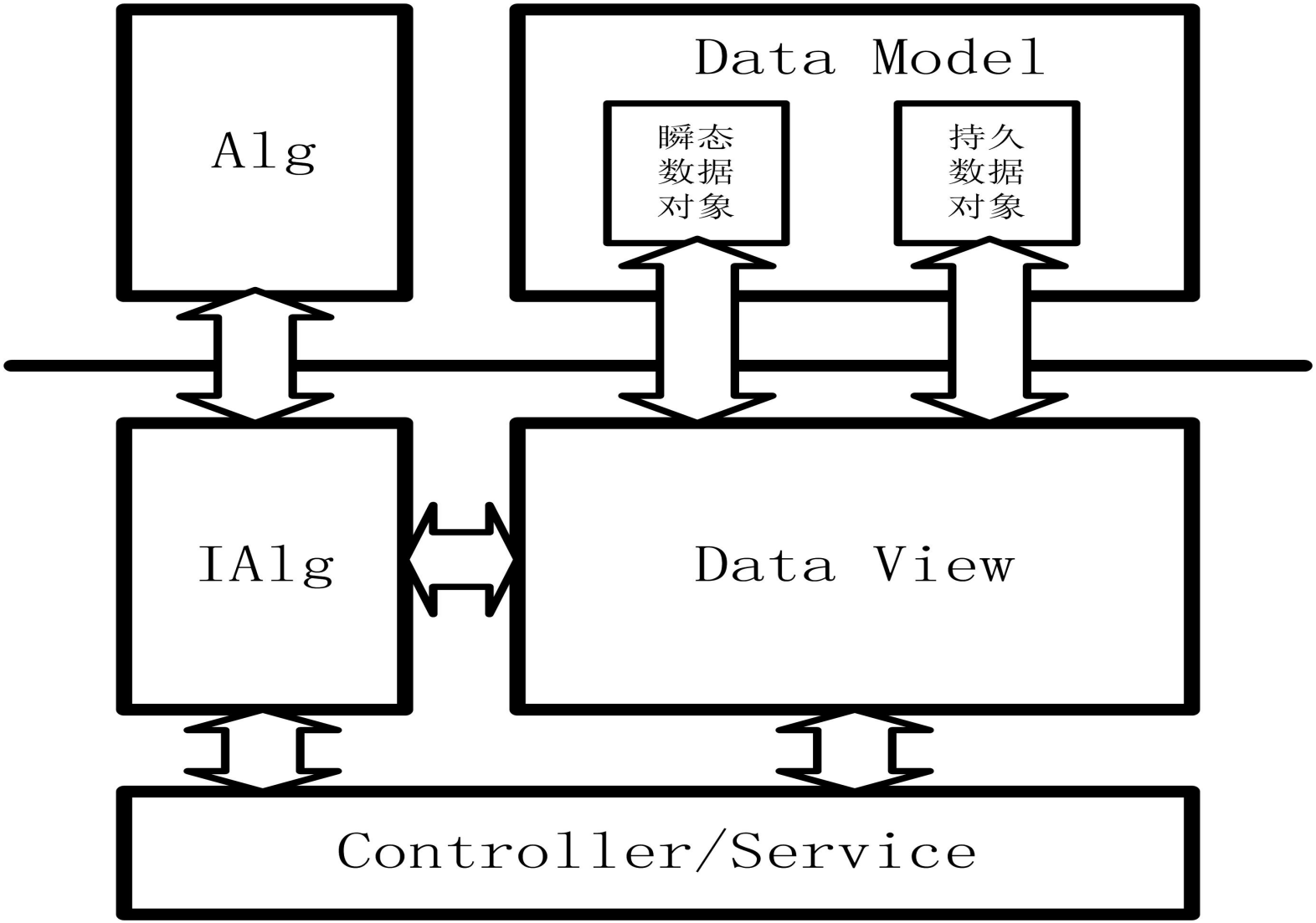
- 简洁轻量
- 面向接口编程
- 层次化模块化
- 插件式开发

以数据为中心算法与数据分离的软件架构

算法 + 数据结构 = 程序

算法 + 数据（瞬态数据对象、持久数据对象） = 科学计算程序

面向接口编程解除组件之间的耦合

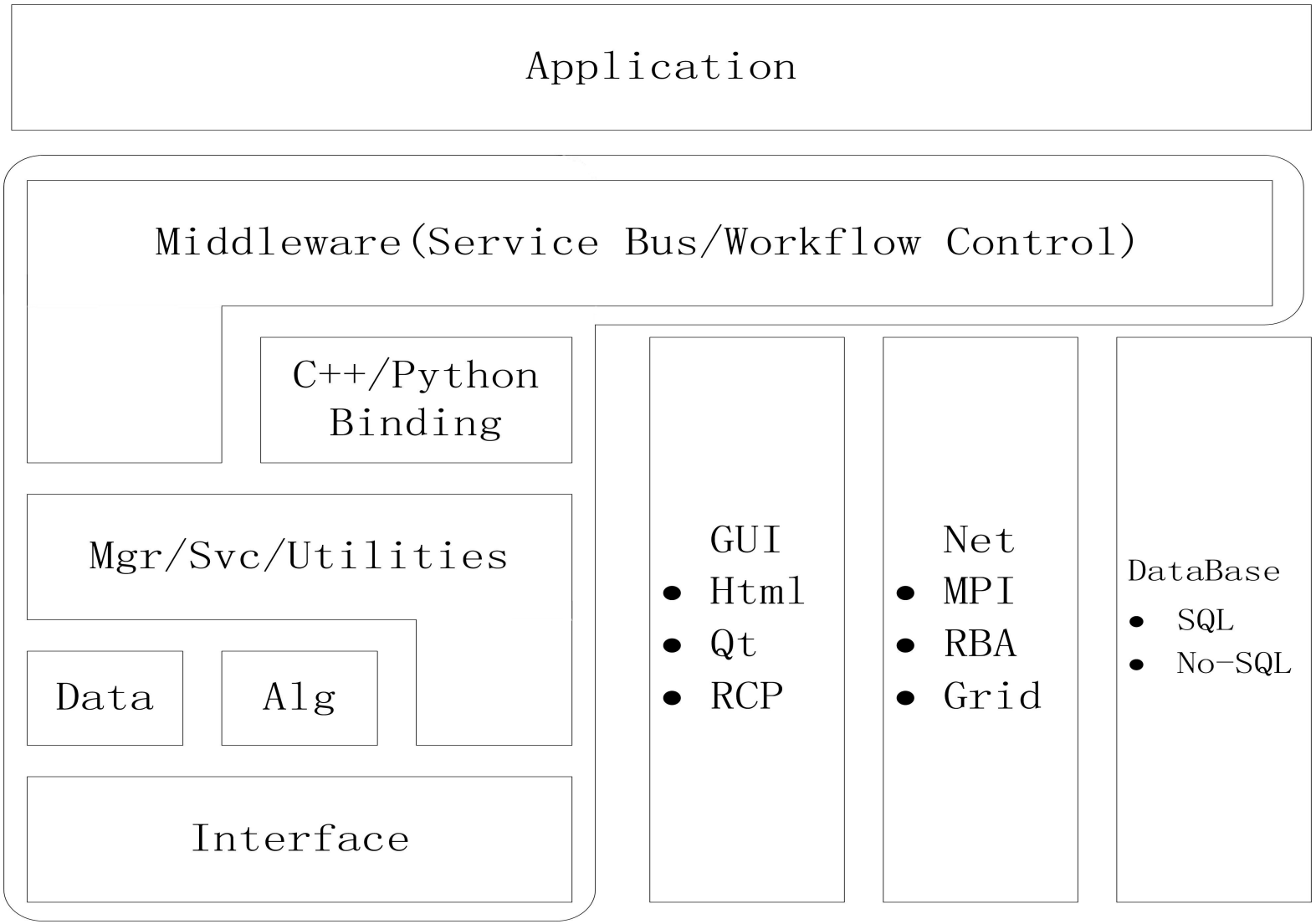


1 背景和挑战

2 科学软件框架开发技术

3 科学软件框架的实践

整体框架


Application
Middleware(Service Bus/Workflow Control)
C++/Python Binding
Mgr/Svc/Utilities
Data
Alg
Interface
GUI
Html
Qt
RCP
Net
MPI
RBA
Grid
DataBase
SQL
No-SQL

接口与接口管理

接口

- 一切皆为接口:所有对象的基类
- 编译时:类型与类型名注册
- 运行时:接口与接口名绑定，通过接口调用实例

接口管理

- 按Key-Value模式保存实例的名字和对应的指针
- 通过列表等数据结构管理实例
- 通过工厂模式创建实例

实例类型判断

- RTTI，运行时类型判断
- BOOST MPL 模版元编程，编译时类型计算判断

数据与算法

数据

- 树形结构
- Table/Matrix/List/Element 等简单数据类型
- 持久数据与瞬态数据的转换
  - 事例循环: 持续加载，持续运算，持续保存
  - 矩阵运算: 开始时一次性加载，结束后一次性保存

算法

- 算法模版: initialize(), execute(), finalize()
- 算法嵌套调用

公共模块

管理模块

负责算法、数据区、服务和应用等运行实例的创建和管理

服务模块

与数据处理算法相关，但不是算法和数据的其他运行组件

公用模块

Timing、Log和Message等独立公共应用集合

C++ vs. Python

C++

算法和数据区等内存和效率要求高的场合

Python

工作流引擎，调用接口，组件和应用配置等灵活的模块，性能要求不高的组件的快速开发。

BOOST_Python

C++和Python的绑定: 算法和数据区等C++模块的Python调用接口实现

中间层

总线

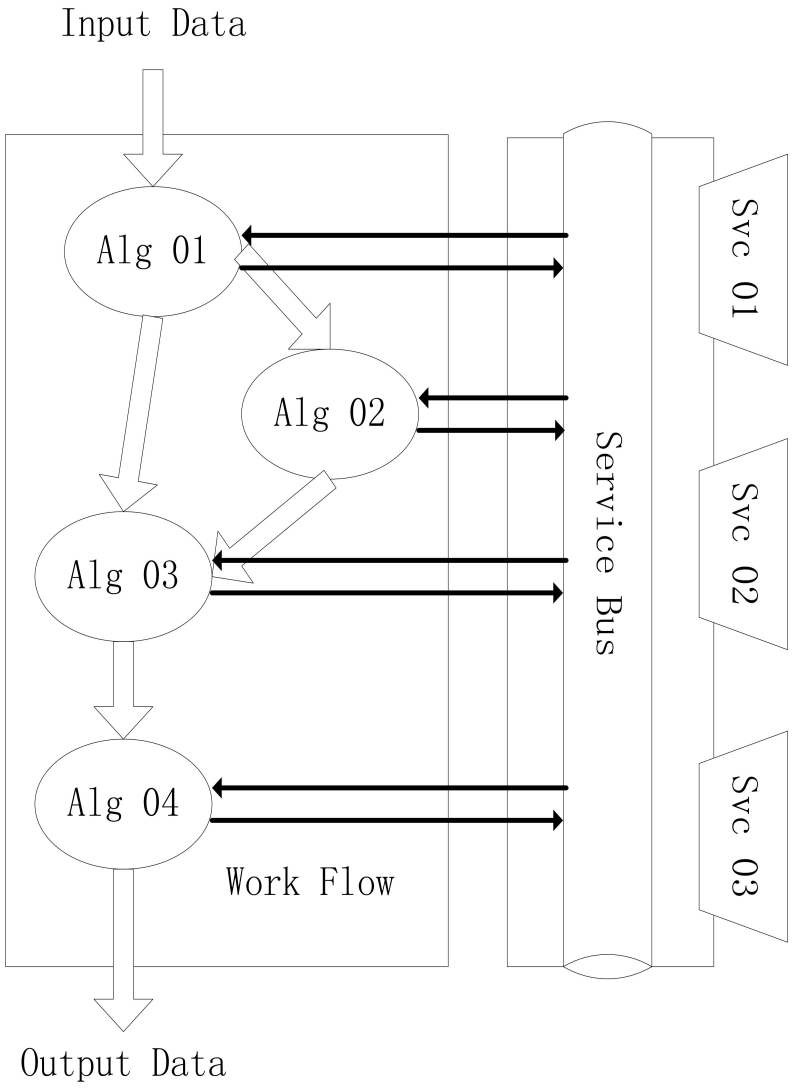
本进程，跨进程和跨主机的服务访问机制

- 按名访问
- 命名规则

工作流

对数据进行处理的算法调用序列

- 分支以及条件判断
- 继承以及组合



高性能计算

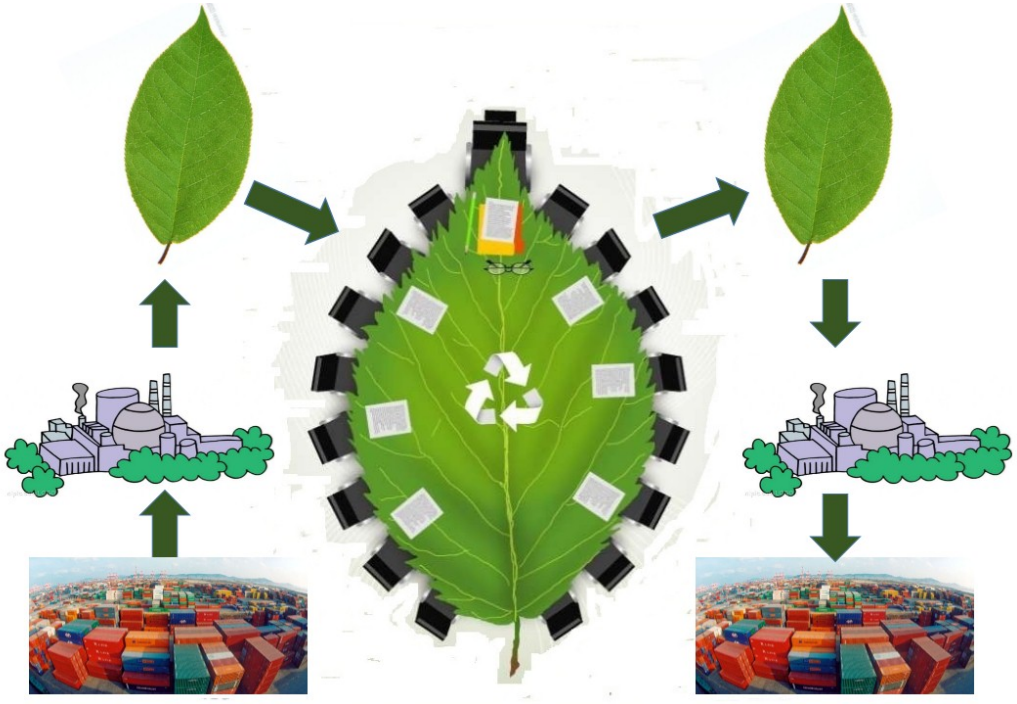
- Many Cores(GPUs) → OpenCL/CUDA → Data/Algorithm
- Multi Cores(CPUs) → Multi-thread → Mgr/Svc
- Multi Cores(CPUs) → Multi-process → Middle ware
- Distributed Computation → MPI/Grid/CORBA → Middle ware

1 背景和挑战

2 科学软件框架开发技术

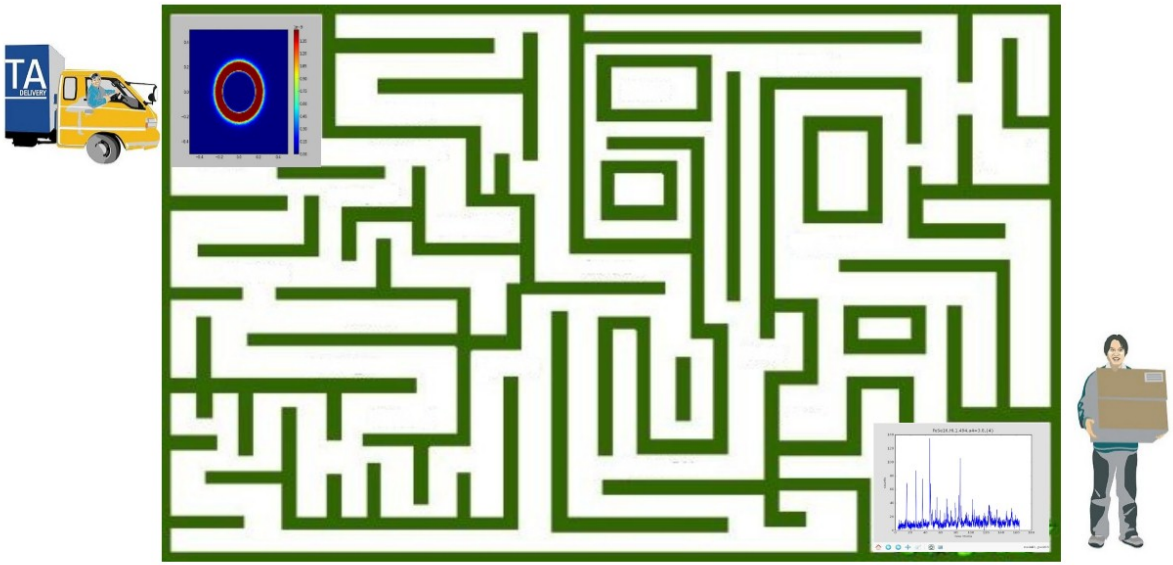
3 科学软件框架的实践

Gaudi: 对撞机物理实验数据处理框架



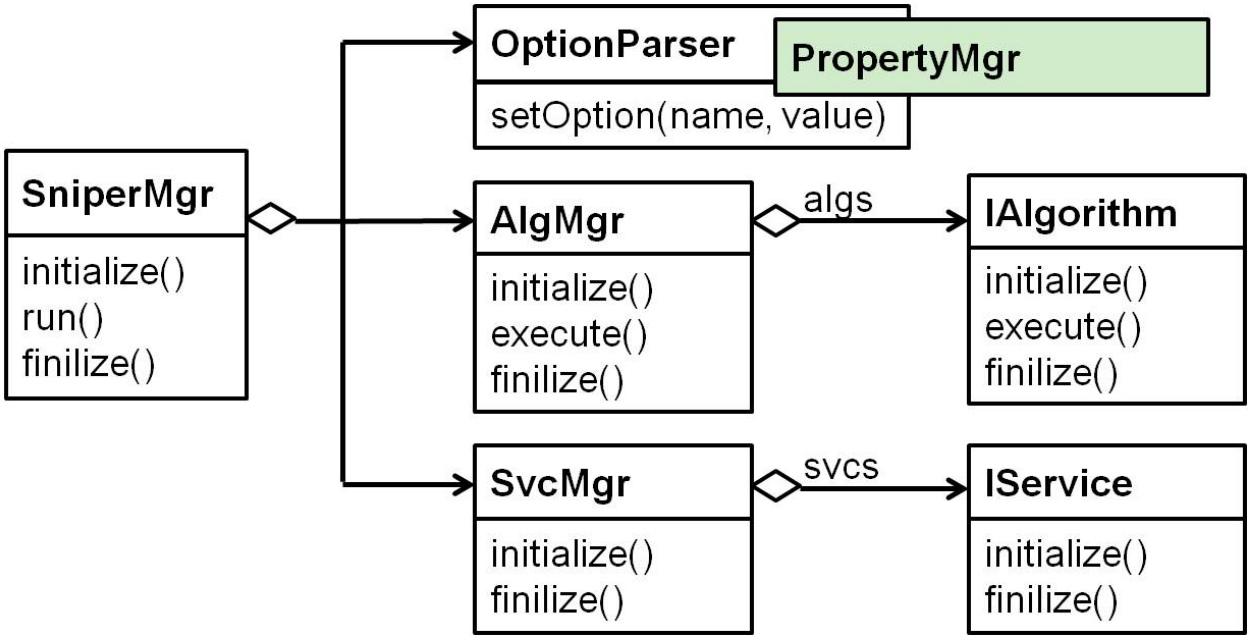
- 数据：树形结构
- 事例循环，事例相互独立
- 复杂的数据IO服务
- 简单的算法调用序列
- 业务焦点: 数据格式，算法实现
- 业务难点: 计算效率

Mantid: 中子散射实验数据处理框架



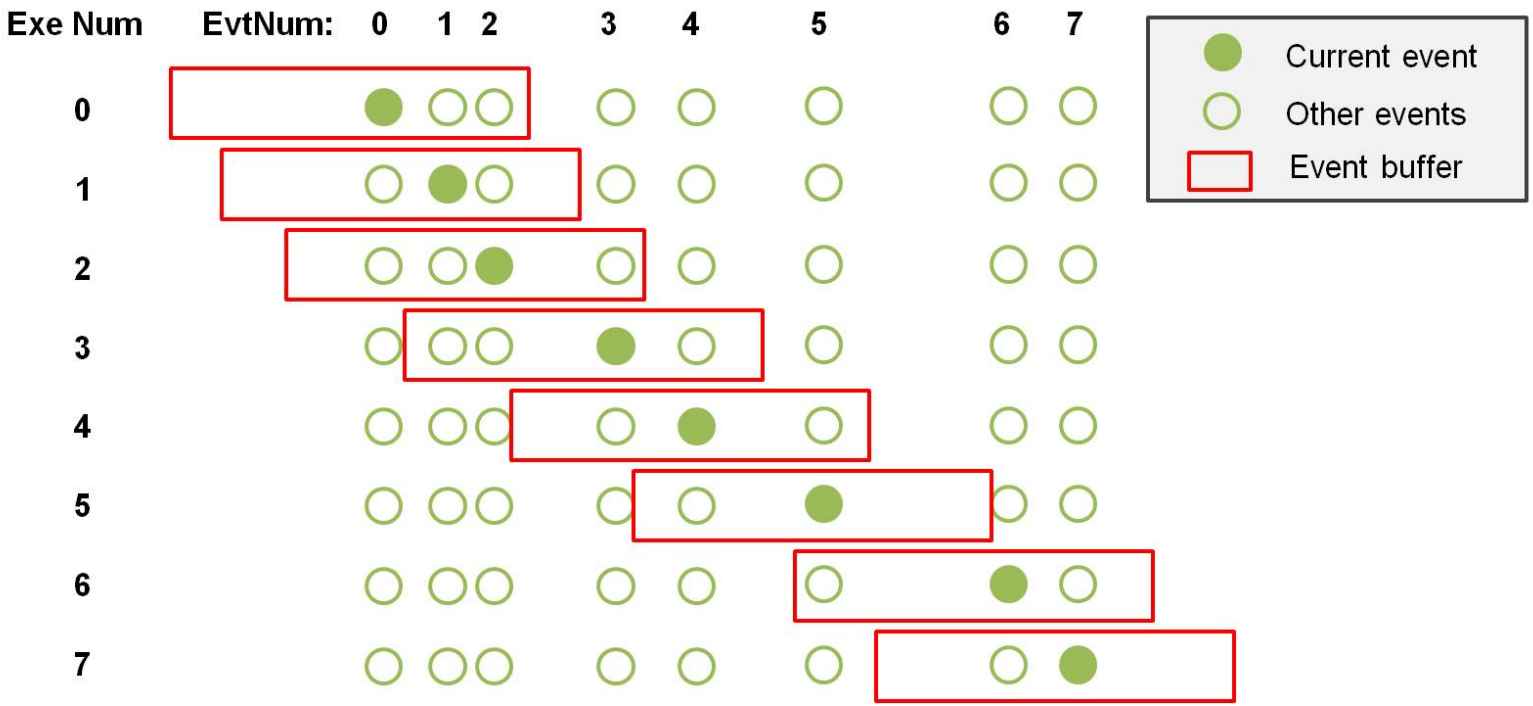
- 数据：列表和矩阵
- 列表处理和矩阵运算
- 通过Load/Save算法对数据进行IO
- 复杂的工作流引擎
- 业务焦点: 数据加载，工作流实现
- 业务难点: 内存占用

SNiPER: 非对撞机物理实验数据处理框架



- 基于开放架构，通过插件实现Gaudi和Mantid的大部分功能
- 支持事例循环、事件驱动、列表处理和矩阵运算
- 业务焦点: 组件管理，数据管理，框架的可扩展性
- 业务难点: 数据管理的灵活性

关联事例分析


Exe Num
EvtNum: 0 1 2 3 4 5 6 7
0
1
2
3
4
5
6
7
Current event
Other events
Event buffer

总结

谢谢!