

高性能计算的应用及战略地位

周毓麟* 沈隆钧

(北京应用物理与计算数学研究所 北京 100088)

摘要 文章介绍了高性能计算的概念及其应用领域,阐述了高性能计算在国家经济建设、国防建设和科技发展中的战略地位。

关键词 高性能计算,应用,战略地位

解决大规模科学与工程计算问题需要有强大的计算能力,这种能力称为高性能计算(High Performance Computing)。一般说来,高性能计算包含科学的建模、精密的参数、良好的计算方法和算法、高效的软件以及高性能计算机等,因而它是一种综合的能力。

1 高性能计算的应用

随着国民经济、国防建设和高科技的快速发展,越来越多的领域对高性能计算有强烈的需求,包括原子能、航空、航天、激光、气象、石油、海洋、天文、地震、生物、材料、医药、化工等。特别是全球气候变化和天气预报、生物分子结构探索、湍流研究、新材料探索以及不少国防研究课题,都迫切需要高性能的计算。

1.1 原子能

原子能科学,特别是核武器科学亟需要高性能计算。美国正是由于核武器研究的需要,发明了世界上第一台电子计算机,而且投入了大量人力财力从事高性能计算的研究。1996 年核禁试后,各主要核大国都在新的无核试验的条件下,开展核武器研究,使高性能计算的作用显得更加重要。美国制定了“加速战略计算创新”(Accelerate Strategic Computing Initiative)计划,致力于开发具有全物理、全系统、三维、高空间分辨能力的预研性程序,支持对武器性能的评估、事故分析和更新过程分析,维护核武库的安全、可靠,推进核武器的进一步研究。尽管美国目前已使用万亿次/秒的高性能计算机,仍远不能满足需要,他们计划在今后数年内使计算机的运算速度达到千万亿次/秒的水平。

1.2 航空航天

本世纪中叶以前,飞行器的设计主要通过风洞试验,而理论分析只能对简化模型作定性的研究。60 年代后期以来,科学家们对飞行器周围空气的动力特性进行流体力学的数值模拟,这就是所谓数值风洞。数值风洞可以在很大程度上代替传统的风洞实验,既降低了成本,又缩短

* 中国科学院院士
收稿日期:1998 年 9 月 23 日

了设计周期,有力地促进了先进飞行器的发展。

数值风洞需要进行三维的和高精度的流体力学计算,其难度和计算量是很大的。在复杂结构和不同尺度下网格的自适性是一难题。据估计,为使飞行器的数值模拟达到工程需要的精度,计算一个模型至少需要 10^{15} 次以上的运算。Lockheed 公司为设计先进战斗机 F-22,使用大型软件 TEAM 求解 Navier-stokes 方程,在当时的 CRAY 机上大约计算了 1 600 小时。

1.3 气象与天气预报

气象与天气预报是高性能计算的重要应用领域,且有它的复杂性和困难性。它的数值模拟不仅要求解三维非定常的大型方程组,而且求解过程受众多因素的影响。因为气候是大气、海洋、冰雪圈、陆地表面和生物圈等复杂系统的总体行为,各子系统内部及相互间的物理、化学和生物过程的相互作用均影响着气候。此外,气象与天气预报的数值模拟在时间尺度和空间尺度上均存在巨大的变化和差异。时间尺度,有时、日、月、年等预报之区别,空间尺度,有全球性、大范围 and 局部区域等的差异。这些复杂情况对数值模拟提出了很高的要求,在目前计算机的运算速度远不能满足需要的情况下,要求科学家们在建模和计算方法上深入开展工作。

1.4 石油工业

石油一般埋藏在地层下数千千米的地方,因此,研究工作需要对大范围三维地质模型数值求解油藏方程组。由地震数据以及其它手段形成的地质模型,一般在 10—20 米间就有一组约束条件(渗透率、孔隙度等)。这些信息利用率越高,数值模拟的精度就越高,所以在理论上一个地质模型的计算网格数是很大的。但由于受到计算机条件的限制,计算网格数不可能足够多。因而同许多其它数值模拟问题类似,对建模、参数和计算方法等提出了更高的要求,以弥补计算机条件的限制。

此外,石油射孔弹的设计需要采用聚能装置,通过聚能形成射流。这类设计的数值模拟,属于多介质大变形以及具有高空间分辨率的可压缩计算流体力学计算问题。在计算方法上有较大的难度,且有很大的计算量。

1.5 原子物理

原子物理过程的微观截面和传热系数是重要物理参数,在高科技领域有着重要科学意义。这些物理参数的计算,有惊人的计算量。例如元素金在典型温度、密度条件下,即使限制原子能级主量子数 $n \leq 10$,必须计算的离子组态跃迁数(称跃迁系)也可达 10^{15} 个,而且每个跃迁系内部包含成千上万单条跃迁线,假设一个最高主量子数 $n=4$,跃迁系就包含 3 万余条跃迁线。如果 n 再大,线的条数还要增加。所以 10^{15} 个跃迁系的跃迁线实际超过 10^{20} 条。若每条线对传热系数影响的计算需 100 次以上的运算,则算出全部跃迁线对传热系数的影响需 10^{22} 次以上的运算。现在实际算法都是采取各种近似方法,不少因素是科学家们所认识不到的,这就需要深入开展研究,以适应在限定的计算机条件下尽可能实现高性能计算。

1.6 材料科学

材料研究在国际上已成为热点。当科学家们深入研究由大量微观粒子组成的实际材料时,由于其复杂性,必须使用高性能计算的手段。一门新的学科——计算材料科学正在形成。

能带论是研究固体中电子运动的基本理论,其目的是计算电子的能级和波函数,在此基础上计算固体的各种可观测性质。能带论有两个基本近似:一是绝热近似,二是单电子近似。尽管如此,它的计算还是非常复杂。于是,科学家们针对各种特定的问题,在建模、近似处理和方

法改进上开展了很多工作,给出了不少计算的办法。高性能计算在材料科学中大有发展前景。

1.7 激光聚变

惯性约束聚变(Inertial Confinement Fussion)是利用高功率激光器产生的激光,实现聚变反应,这是一项高科技领域的重要研究。主要大国都拨巨款用于建造大型激光器,支持这一研究。

在这类研究中,需要在复杂的几何结构下计算大量微观物理过程、光子的输运以及大变形可压缩多介质流体力学问题,在建模、参数、计算方法等方面存在着种种难题。当前的最高性能计算机远不能满足该项研究的需要,高性能计算成为这一研究的关键之一。

1.8 环境问题

解决环境问题,除了控制环境恶化的因素外,必须对环境恶化的规律、污染传播的状况以及控制对策的效果等进行深入的了解和掌握,在这些方面,高性能计算是有力的手段。首先必须对不同类型的问题建立较完善的模型,这是一个很复杂的难题。例如测定空气污染,必须对几千公里范围内的所有物理、化学、生物和气象过程及其相互作用有完整的描述,还要包括大量地形地貌和地区状态与设施的信息。建立这样复杂的模型,需要有良好的计算方法和软件,以便在高性能计算机上进行数值模拟。研究这类问题,还必须应用先进的可视化技术,通过模拟直接了解污染系统的复杂性和非线性相互关系,并做出相应的评估。

2 高性能计算的战略地位

国际上的竞争以及我们自己的实践,均充分显示,高性能计算在国家的经济建设、国防建设和科技发展具有重要的战略地位。这方面,美国的认识与做法值得我们认真思索和借鉴。

1983年,美国国防部、国家科学基金会、能源部及国家宇航局联合组织了专门委员会向政府提出了发展大型科学计算的报告。报告认为:“大型科学计算具有关系到国家安全、科技进步与经济发展的特殊重要性,是现代科学技术的关键部分。从美国的国家利益出发,大型计算的绝对优势不容动摇。”

1993年,美国科学、工程和技术联邦协调理事会向国会提交了长篇报告“重大的挑战项目:高性能计算和通讯”(HPCC计划)。报告中写道:“正在蓬勃发展的美国高性能计算与计算机通讯能力为美国在关键性技术和国家安全方面处于世界领先地位做出了重大的贡献。”“HPCC是一项战略性计划。联邦政府决定投资处于尖端科学地位的高性能计算与计算机通讯技术。”

1996年,美国能源部提出了雄心勃勃的“加速战略计算创新”(ASCI计划)。该计划要建立美国强大的数值模拟能力,并称“这是一个巨大的挑战,这个挑战在许多方面与最初的曼哈顿计划相同……。这个挑战也需要与计算机工业界密切合作,以加速他们的商业计划,提供保障ASCI应用所需的计算平台。”

美国的这些计划与部署正是基于高性能计算具有重要战略地位的考虑。高性能计算的这种战略地位是由它所发挥的关键作用决定的,以下从三方面进一步阐述:

①计算已经成为与理论和实验相并列的三大研究手段之一。由于计算机的飞速发展,计算手段处在最活跃的上升和发展时期。实践表明,自觉与不自觉运用这一手段,在当今科学研究中会产生非常不同的后果。因此,计算,特别是高性能计算,在研究手段中具有重要的地位。

理论、实验和计算是相互联系、相互补充的关系,但不能相互替代。与理论和实验一样,计算可以发现新规律、新现象和新结果。很多问题的解决仅仅有理论和实验是不够的,非进行计算不可。有些项目不允许进行实验,或者规定禁止进行实验;有些项目具有破坏性、危害性,只能进行少量实验,计算手段在这些项目中的作用更是特别重要。尽管各种学科有着纷繁的数学描述和各种形式上的抽象性,其研究结果的具体落实还是要通过计算,特别是通过高性能计算。

②当今科学发展的主要趋势之一是各种学科向精密化和定量化方向发展,因而需要各种形式的大规模计算或超大规模计算,高性能计算成为解决这些问题的关键和瓶颈。周光召在《21 世纪初科学发展趋势》的序言中写道:“数学因自身发展和广泛地向其它领域渗透,将不断深入并一直成为整个科学和技术发展水平的带动因素……”。这一段话不仅把数学,同时也把计算和高性能计算对整个科学技术发展的重大作用阐述得非常清楚了。事实上,几十年来已出现了众多的计算性和交叉性学科,如计算物理、计算力学、计算化学、计算生物、计算材料、计算天文学、计算能源科学、计算环境科学、计算金融学和计算医学等。这些学科由于交叉性以及处在发展初期,往往是新概念、新思想和新技术生长点较多的领域,它们迫切需要高性能计算。

③高性能计算的水平是国家综合实力的重要标志之一。高性能计算是综合性学科和知识密集的创新研究领域。先进的应用软件包括各种问题的建模、参数、计算方法和算法以及软件的研制本身,就是综合科技水平的反映;高性能计算系统所包括的基本结构、元部件、互联技术以及系统软件和编译系统等,反映了设计技术能力,而且又强烈地依赖于工业发展水平;高性能计算需要研究所、大学、生产部门和政府部门的密切配合和联合攻关,要求高水平的管理。所有这些工作,必须建立在良好的基础研究之上。

美国等西方发达国家都不断加大投资,发展高性能计算,保持和发展优势,支持各种挑战性项目的研究与解决,以推动科学和技术的不断发展。

在迈向 21 世纪之际,我国政府正在大力推行“可持续发展”和“科教兴国”的战略,这对我国未来发展具有极其重要的意义。在实施这一战略过程中,大力发展高性能计算具有极其重要而深远的意义。

参考文献

- 1 Grand Challenges. High Performance Computing and Communications. The FY 1993 U. S. Research and Development Program. 1993.
- 2 Accelerate Strategic Computing Initiative Program. U. S. Department of Energy. 1996.