

浅谈科学计算^{*}

朱少平[†]

(北京应用物理与计算数学研究所 北京 100088)

摘 要 科学计算是指利用计算机再现、预测和发现客观世界运动规律和演化特性的全过程。在实际应用牵引下,依托高性能计算机的发展,近年来科学计算得到了快速的发展。与传统的理论研究和实验研究一起,科学计算已经成为推动科技创新的重要研究手段。文章首先介绍了作者对科学计算的认识:科学计算的本质是求真,置信度是科学计算的核心;做好科学计算,需要以应用为牵引,需要物理、数学与计算机等方面人才的合作,需要多学科交叉融合。文章还讨论了影响科学计算置信度的几个环节。最后就如何做好科学计算发表了看法。

关键词 科学计算, 置信度, 物理建模, 计算方法与算法, 应用程序, 高性能计算机

A brief report on scientific computing

ZHU Shao-Ping[†]

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

Abstract Scientific computing is a process wherein the laws and properties of the objective world are represented, predicted and discovered by the computer. With the development of high performance computers, scientific computing has forged rapidly ahead to meet the needs of new applications, and has matured as the third approach to propel scientific discovery and technological innovation alongside traditional theory and experiment. I present my understanding of scientific computing that its essence is to seek the truth, and the degree of confidence is its kernel. It is emphasized that the requirements of the application problem, collaboration among physicists, mathematicians and computer scientists, and the fusion of physics, mathematics and computer disciplines, are needed to accomplish good scientific computing. I also discuss how to heighten the confidence, with some comments on how to improve scientific computing in general.

Keywords scientific computing, confidence, physical modeling, mathematical method and algorithm, application code, high performance computer

1 引言

科学计算是以实际应用为牵引、以高性能计算机为依托而快速发展的一门交叉学科,已经在科学研究与大科学工程等方面发挥了重要的作用,并将发挥更大的作用。科学计算已经与传统的理论研究和实验研究一起,成为推动与实现科技创新的重要研究手段。2005 年 6 月,美国总统信息技术咨询委员会报告《计算科学:确保美国竞争力》认为^[1],在迅猛发展的高性能计算技术推动下,计算科学将是 21 世纪确保国家核心竞争能力的战略技术之一,而科学计算是计算科学中最主要的内容。

2 科学计算的作用与地位

什么是科学计算?粗略地说,科学计算是指利用计算机再现、预测和发现客观世界运动规律和演化特性的全过程,包括建立物理模型,研究计算方法,设计并行算法,研制应用程序,开展模拟计算和分析计算结果等过程^[2,3]。图 1 是一幅表示科学计算过程的流程图,用这个图来说明作者对科学计算的理解。要做科学计算,首先需要确定一个研究对象。

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10775019)资助项目
2009-05-12 收到初稿,2009-06-04 收到修改稿

[†] Email: zsp@iapcm.ac.cn

有了研究对象,要针对其主要特征,抓住主要矛盾,建立物理模型。所谓物理模型就是描述研究对象的一组方程以及约束方程组的初边值条件,还有相应的物理参数。有了物理模型,需要采用与物理模型相适应的计算方法与算法,研制应用程序。所谓应用程序,形象一点说就是计算机语言编写的小说。对于科学计算,经常使用的计算机语言有 FORTRAN 语言和 C 语言。应用程序在计算机上进行运行,也就是利用计算机进行计算、求解方程组,获得方程组在特定约束条件下的解。与解析理论得到的方程或方程组的解不同,计算机求得的解不是一个表达式或一组表达式,而是一个数据集——海量数据集。有了数据,需要对数据进行分析 and 评估,判断结果的正确性,发现新的现象,总结新的规律,认识新的机制,再现和预测研究对象的运动规律和演化特性,进而进行真实实验或产品的理论设计,产生新的知识、新的成果、新的生产力。我们经常听到计算机仿真这个说法,实际上,科学计算的本质不是仿真而是求真。在科学计算的流程中,应用程序研制之前的工作主要依靠研究人员,是“人脑”的事情。应用程序之后的工作不仅仅依靠研究人员,还需要有计算机硬件作为基础与前提,是“人脑”加“电脑”的事情。高性能的计算机系统和数据分析处理系统是做好科学计算的必要条件,是科学计算的重要组成部分。特别要强调的一点是,对于科学计算来说,电脑是不可或缺的,但是只有充分发挥了人脑的作用,才能最大限度地发挥电脑的作用,才能做好科学计算,达到科学计算的根本目的。从流程图 1 的分析,我们还可以看到,科学计算需要物理、数学与计算机等方面人才的合作,需要多学科交叉融合。只有物理建模、计算方法、并行算法、程序研制和高性能计算机等方面有机结合,物理、数学与计算机等学科的人员真正融合,才能做好科学计算。

传统的理论研究是以解析分析的方法为主,它在科学原理与体系的建立过程中发挥了重要的作用,并可以解决相对简单的问题,例如线性问题、平衡问题。但是,随着问题复杂性的增加,理论研究的局限性也越来越明显。很多问题,如强非线性问题、非平衡问题、实际应用中发生的问题等,传统的理论研究已经无能为力。与理论研究相比,科学计算不仅能够处理线性问题、平衡问题,更重要的是能够处理强非线性问题、非平衡问题等,能够把科学的原理应用于解决更多、更复杂的实际问题^[4]。科学计算经常也被称为计算机虚拟实验。与实验研究相比,科学计

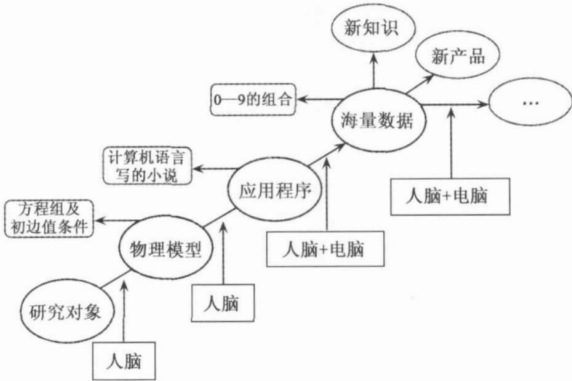


图 1 科学计算流程图^[2,3]

算至少有以下三个特点:一是无损伤,也就是说,科学计算不会对环境等产生大的影响,这一优点使得科学计算能够承担真实实验不能完成的事,例如要研究海啸的破坏、地震的破坏、核爆炸的破坏,人类不可能进行真实实验,但可以进行科学计算,进行计算机虚拟实验。二是全过程、全时空诊断。真实的实验,无论用多少种方法、多少种仪器,获得的系统演化的信息是非常有限的,难以做到全过程、全时空诊断。而全过程、全时空的信息对于人们认识、理解与控制研究对象极为关键。与真实实验不同,科学计算完成可以做到全过程、全时空诊断。只要在应用程序中加入相关的输出程序,在进行科学计算时,研究人员就可以根据需要获得任何一个时刻、任何一个地点研究对象发展和演化的全部信息,使得研究人员可以充分了解和细致认识研究对象的发展与演化。三是科学计算可以用相对低成本的方式,短周期地反复细致地进行,获得各种条件下研究对象的全面、系统的信息。

3 科学计算的置信度

科学计算有许多特点,但是特点不是优点。科学计算的特点要成为优点,需要一个前提,就是科学计算要有置信度^[2,3]。置信度也是科学计算能够处理复杂问题、解决实际问题的前提。什么是科学置信度?科学计算的置信度是科学计算逼近研究对象真实程度的度量。对于科学计算,置信度是最关键、最重要的,是其核心与根本。没有置信度的计算没有科学价值,仅仅是一种计算机游戏。科学计算是利用计算机再现、预测和发现客观世界运动规律和演化特性的全过程,其中“再现”主要是为了检验科学计算的置信度,而“预测和发现”的基础是科学计算的置信度。对于一个复杂系统或者实际应用问题,提高科

学计算的置信度是一个挑战性的课题,是科学计算的核心研究内容之一.对于许多实际问题,定量评估科学计算的置信度非常重要,同时也是一件非常困难、复杂的工作.科学计算置信度的定量评估是许多大科学工程研究中的重要内容.这里我们不对置信度如何评估做讨论,而是定性分析影响科学计算置信度的几个环节.上面已经提到,科学计算涉及几个关键环节,如研究对象、物理模型、应用程序、数值计算等.物理模型是科学计算的基础与出发点,物理模型是否真实地反映客观是关键.如果物理模型的置信度很差,那么基于这个物理模型的计算就没有置信度可言.建立物理模型是基于对研究对象的观测、分析与比较,更确切一点是,基于对表征研究对象的一些特征量的观测、分析与比较.这些特征量是通过实验获得的.而我们说物理模型正确,也是通过比较物理模型给出的特征量与实验获得的特征量来判断.显然,在物理模型与研究对象之间存在两个过程要引入不确定度:一是在获得特征量实验数据过程中存在不确定度,简单地说,这是实验不确定度;二是基于特征量构建物理模型过程中存在不确定度.这两个过程中的置信度问题属于物理模型置信度范畴.有了物理模型,要利用计算方法与算法,要通过程序研制技术形成可供计算机执行的应用程序才能进行计算机运算,获得数据和结果.在这个环节中,也有两个过程要引入不确定度:一是将物理模型变为应用程序时要引入不确定度,最主要的是离散化过程引入的不确定度;二是大规模计算时,计算机的舍入误差导致的不确定度.这两个过程中的置信度问题属于计算置信度范畴.图2是一个科学计算不确定度产生的流程图,是上面文字叙述的图形化.从研究的角度分析,降低过程①中的不确定度需要提高实验、诊断的水平,提供系统的更多的表征研究对象的实验数据,并降低数据的不确定度;降低过程②中的不确定度需要理论与实验的有效结合,需要理论—实验—再理论—再实验的反复循环;降低过程③中的不确定度需要理论研究人员的努力;降低过程④中的不确定度需要理论研究人员与计算机研制者的努力.从这个意义上说,科学计算不仅仅需要物理、数学与计算机等方面人才的合作,还需要从事理论、实验等研究人员的合作.

美国的科学计算是全世界最先进的.特别是美国的核武器研究实验室——Lawrence Livermore 实验室、Los Alamos 实验室和 Sandia 实验室,对科学计算均非常重视.从1996年开始,这三个实验室

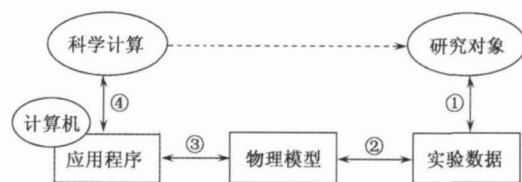


图2 存在不确定度的四个过程

就一直致力于建立高科学置信度的核武器数值模拟能力,也一直在从事科学计算的置信度定量评估工作.他们有一项工作称为 Validation and Verification(简称“V &V”).国内把它翻译成为“确认与验证”.美国人^[5]把 Validation 定义为“A process applied to the model of a phenomenon, wherein it is determined to what degree the model accurately represents that phenomenon”;把 Verification 定义为“A process applied to an application code, wherein it is determined that the computer calculation for a particular problem accurately represents the solution of the mathematical model”.对比一下就知道, Validation 就是研究物理模型对客观事物表征的置信度, Verification 就是研究计算机得到的解对物理模型表征的置信度.

做科学计算时,除了要重视上面谈到的两个方面的置信度问题外,还需要注意科学计算置信度和研究对象本身与计算规模的依赖关系.

什么是置信度与研究对象本身的关系?下面以强辐射在物质中传播为例.当辐射在一个重介质中传播时,由于辐射与物质之间有充分的相互作用,可以采用辐射热传导近似来建立物理模型,辐射用一个随时空变化的温度就可以描述.在这样的物理建模基础上,采用合适的计算方法与算法,我们可以研制出一个应用程序,开展数值计算,获得研究成果.但是,当我们讨论辐射在一个轻介质中传播时,如果还是利用上述应用程序做数值计算,得到的结果就有问题了.因为在轻介质中传播时,辐射与物质相互作用比较弱,热传导近似不成立.同样的应用程序,研究对象变了,其置信度也变了,甚至从高置信度变为无置信度.置信度的对象依赖提醒我们在做科学计算时,一定要搞清楚应用程序的使用范围,特别是物理建模的适用范围与物理参数的使用范围.不搞清楚应用程序的适用范围就做计算,其置信度很难保证,用于实际问题存在风险.

下面讨论科学计算置信度与计算规模的依赖关系.原则上,计算的规模由物理问题的主要特征决

定. 在科学计算中经常使用的计算方法是差分方法. 利用差分方法把微分方程离散化, 这个过程的本质是将微商用差商代替. 例如, 热传导近似下的辐射流方程如下:

$$F = -\kappa \frac{\partial T_\gamma}{\partial x}, \tag{1}$$

其中 κ 为辐射热传导系数, T_γ 为辐射温度, x 为空间坐标. 离散化后, (1)式变为

$$F(x_{n+1/2}) = -\kappa(x_{n+1/2}) \frac{T_\gamma(x_{n+1}) - T_\gamma(x_n)}{\Delta x}, \tag{2}$$

这里 n 为网格的编号, Δx 为网格宽度. 从离散的置信度来说, 网格的宽度应该非常小. 小到何种程度? 网格的宽度要远远小于辐射温度的空间变化尺度, 这是保证计算结果物理上可信的要求. 这样一个要求就决定了科学计算的网格规模. 有了应用程序, 不分析研究对象主要特征量的大小就做计算也是不可取的. 网格粗了, 计算规模小, 但是置信度不高, 重要的物理信息得不到, 计算的结果甚至会误导研究人员的判断与认识; 网格细了, 计算规模大, 需要的计算资源多, 现有的计算机难以承受. 所以在做科学计算时, 一定要认真分析研究对象, 确定适当的网格数量也就是计算规模. 在保证置信度的同时又兼顾高性能计算机资源. 这里再举一个例子来说明如何确定计算的规模. 从物理的角度, 空间网格的规模决定于系统的特征长度. 对于流体力学界面不稳定性模拟, 有两个重要的空间特征长度: 一是系统的尺度 L , 一是最大增长率对应的波长 λ . 从计算的角度, 要保证求解方程的正确性, 一个波长内的网格数 N 应该远远大于 1. 这样, 对于一个三维的计算, 我们就可以估计出系统的总的网格数量约为 $(LN/\lambda)^3$. 要获得流体力学界面不稳定性的发展规律, 系统的特征长度应该远远大于波长 λ , 例如 100 倍, 即 $L/\lambda=100$. 取 $N=10$ 也就是一个波长有 10 个网格, 这不是一个苛刻的要求. 这样对于一个三维问题, 空间网格数就需要 10 亿个. 我们希望有规模越来越大、性能越来越高的计算机. 这个希望的背后是科学计算置信度的规模依赖, 是复杂问题的科学计算需要高性能的计算机.

4 科学计算需要的计算机

科学计算的硬件基础是计算机, 要做好科学计算, 需要有高性能的计算机. 从每年更新的世界高性能计算机 TOP500 排行榜^[6], 我们可以了解到全球最快的 500 台计算机. 同时也可以发现 TOP500 中

的前 10 名的计算机大多应用于科学计算. 例如, 2008 年世界排名第一的计算机 Roadrunner, 主要应用于核武器、航天、能源等方面的科学计算. 这台计算机的理论峰值速度突破了千万亿次, 安装在美国 Los Alamos 实验室.

高性能计算机非常复杂. 简要地说, 一台高性能计算机包含很多的结点, 结点间由互网络连接. 一个结点由内存和多个处理器组成, 一个处理器又由缓存器与若干个核组成. 图 3 是高性能计算机系统的示意图, 图中有两个结点, 每个结点包含 2 个处理器, 每个处理器里有 2 个核. 在操作系统和开发环境的支持下, 用户通过编写和运行程序, 指挥高性能计算机进行大规模计算或海量数据处理. 在实际计算中, 用户总是希望计算机在最短的时间内完成这些工作. 这就要求计算机具有较高的综合性能, 即运算速度要快, 存储容量要大, 访存速度与网络传输速度要高.

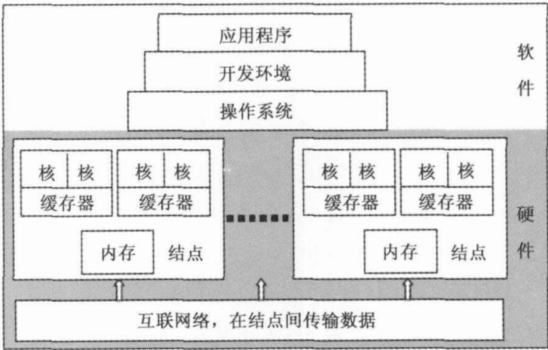


图 3 高性能计算机系统的示意图

谈到高性能计算机的性能, 首先会想到理论峰值性能(速度). 我们经常说这台计算机是 30 万亿次, 那台计算机是 120 万亿次. 这里的 30 万亿次或 120 万亿次指的是计算机的理论峰值性能. 理论峰值性能等于计算机处理器核总数与单个核的理论峰值性能之乘积. 而单个核的理论峰值性能等于处理器核主频和单核每个时钟周期执行浮点运算次数的乘积. 一个处理器核的主频是 1.9G, 单核每个时钟周期执行 4 次浮点运算, 于是单核理论峰值性能就是 7.6G flops, 这里 flops 是英文 float operation per second 的缩写, 意为每秒浮点运算次数. 浮点运算一次就是做一次加法或乘法. Gflops 就是 10^9 次 flops, 也就是 10 亿次浮点运算. 2008 年, 我国理论峰值性能最高的计算机有 30720 个处理器核, 单核主频是 1.9G, 单核每个时钟周期执行 4 次浮点运算, 理论峰值性能是 233.472 万亿次. 从理论峰值性能的计算公式可看出, 单个处理器的性能一定, 处理

器个数越多, 计算机的理论峰值性能也就越高. 仅仅为了理论峰值性能达到某个指标, 增加处理器个数是最简单的办法.

但是, 理论峰值性能只是计算机理论上能完成的浮点运算速度, 而不是计算机实际执行程序时的速度. 通俗地说, 理论峰值性能是计算需要的数据在无条件的、无成本和充分保证的情况下, 计算机 1 秒钟执行简单的浮点操作的总次数. 在实际的科学计算中, 获得理论峰值性能需要的前提是不可能存在的. 首先, 实际问题中的计算需要获取充分的信息, 这些信息需要从缓存器或内存中获得, 甚至要通过互联网从其他的结点中获得. 也就是说, 用于实际问题中的计算机不可能仅仅是做加法或乘法运算, 还有访存. 而计算机的访存速度远远低于运算速度. 其次, 实际问题的科学计算包含比做加法或乘法复杂得多的操作(如除法、指数等)或条件判断, 这就使得计算机不可能连续不断地执行简单的浮点运算. 还有, 理论峰值性能是计算机处理器核总数与单个核的理论峰值性能之乘积. 换言之, 要达到理论峰值性能, 每个处理器核必须等工作量地工作. 实际应用问题的计算非常复杂, 做不到让每个处理器核等工作量地工作, 总有一些处理器核在某个阶段处于空闲等待状态, 专业的说法是“负载不平衡”.

对于科学计算, 真正关心的性能是计算机实际执行程序时的速度, 即实际浮点性能. 实际浮点性能是应用程序的浮点运算总次数和程序执行时间的比值^[7]. 实际浮点性能和理论峰值性能的比值称为发挥理论峰值性能的比率, 简称为计算效率. 计算效率既依赖于计算机硬件性能, 又与应用程序的性能密切相关. 我们经常听到“Linpack 速度”这个名词. 所谓 Linpack 速度是在计算机运行 Linpack 测试程序中获得的实际浮点性能. Linpack 测试程序采用主元高斯消去法, 并行求解 N 阶双精度稠密线性代数方程组, 其浮点运算总次数为 $(2/3 \times N^3 - 2 \times N^2)$. 在测试得到执行时间 t 后, 由浮点运算总次数除 t 就可达到实际浮点性能, 也就是 Linpack 速度. 目前, 国际上一般把 Linpack 值作为衡量计算机综合性能的标准. 由于 Linpack 测试程序主要是浮点加法和浮点乘法操作, 数据结构相对简单, 而且由计算机厂商针对特定计算机进行了充分的优化, 所以 Linpack 测试程序的计算效率一般大于 60%.

实际应用程序, 由于在算法和数据结构方面与高性能计算机体系结构没有很好匹配以及程序代码未很好优化等原因, 其计算效率是很低的, 一般小于

10% 甚至更低. 针对应用程序, 改进算法和数据结构, 对程序进行性能优化, 提高实际浮点性能, 是科学计算最关心的问题之一. 提高应用程序计算效率方面有一些成功的做法. 例如, 在国际超级计算机会议上获得 Gordon Bell 奖的应用程序, 这些程序由物理、数学、计算机学家相互协作研制而成, 采用最先进的计算方法和并行实现技术, 在高性能计算机上进行充分优化, 代表相关领域应用程序的最高性能. 这些程序的计算效率一般为 10% 至 50%. 例如, 计算机 Roadrunner 的理论峰值性能是 1.456 千万亿次, 在该机上, VPIC 程序模拟包含 1 万亿个粒子的激光等离子相互作用模型, 获得的实际浮点性能为 0.374 千万亿次, 计算效率为 25%. 该程序获得了 2008 年度的 Gordon Bell 奖. 作者所在单位原有一个分子动力学程序, 其计算效率只有 3%. 在进行了编译选项优化、数据结构优化、通信计算重叠以及动态负载平衡等工作后, 计算效率提高到了 32%.

一台大规模高性能计算机由 20000 个处理器组成, 每个处理器的峰值性能是 60 亿次, 我们说这台计算机的理论峰值性能是 120 万亿次. 另一台大规模高性能计算机由 5000 个处理器组成, 每个处理器的峰值性能也是 60 亿次, 我们说这台计算机的理论峰值性能是 30 万亿次. 简单比较理论峰值是 4 比 1, 直观上会说前一台计算机性能高, 水平先进. 但如果对于同样的应用问题, 前者的计算效率是 2%, 后者是 10%, 那么后者在解决实际问题时的作用要大、效果要好. 事实上, 理论峰值性能很高, 但计算效率较低、实际应用效果不佳, 是科学计算面临的一个挑战性的、亟需解决的问题. 要解决这个问题, 需要计算机的使用者与计算机的研制者融合互动, 用科学计算的实际需求来牵引计算机的研制, 用计算机的发展来推动科学计算的进步. 作者在数年前的一次关于科学计算的研讨会上有过一个报告, 针对理论峰值性能之事写了四句话: “理论峰值诚可贵, 实际性能价更高; 科学计算要做好, 软硬兼顾最重要”, 这里的“软”是指应用程序等软件, “硬”是指计算机.

5 科学计算的协调发展

要做好科学计算, 有几个层面的问题必须协调、做好. 一是物理模型问题. 一个好的物理模型首先要反映客观真实. 物理模型的真实程度是科学计算置信度的基础, 是必要的条件. 如果物理模型不能正确反映客观问题的真实, 这样的计算就不是科学计算, 而仅仅是一个计算机游戏. 同时, 一个好的物理模型

还要能够降低对计算机性能的要求,或者说通过物理建模降低计算的复杂程度与规模.第一点是好理解的,第二点需要做一点说明.还是以辐射与物质相互作用问题为例.我们知道,描述辐射行为的函数依赖时间、位置、光子能量和光子运动方向 $f(t, r, E, \Omega)$, 是一个有 7 个自变量的函数.如果空间每个维度分布 100 个网格数,能量分群为 50,方向离散为 80,于是总的网格数为 40 亿个.这种网格规模的计算不是现在的计算机能够承受的,必须通过物理建模降低对计算规模的要求.如何降低对计算规模的要求?如果实际问题有对称性,这样问题就不是三维的而是二维的甚至一维的,于是计算量大幅降低.如果是二维问题,同样的空间网格与能群分布方法,网格数可以从 40 亿个降到 0.2 亿个(空间维数降一维,网格数从 40 亿个降到 0.4 亿个;同时由于空间维数为二维,方向离散数降低一半).这是简单直观的降低计算规模的途径.更重要的是,需要从辐射与物质相互作用的性质出发去建立物理模型,降低计算规模.我们知道,当辐射与物质有强烈的相互作用时,辐射的平均自由程很短.这时可以用辐射温度 $T_r(t, r)$ 来描述辐射的行为,也就是辐射热传导近似.辐射温度 $T_r(t, r)$ 仅仅是时间与位置的函数,求解它比求解 $f(t, r, E, \Omega)$ 要简单得多.有时,虽然用一个辐射温度难以很好地描述辐射的行为,但是辐射场的各向异性不是很严重,可以采用多群扩散近似来描述辐射的行为.这样,我们只需要求解 $f(t, r, E)$ 而不是 $f(t, r, E, \Omega)$, 计算的规模也是大幅度下降.在实际的辐射与物质相互作用问题中,有的区域可以用热传导近似,有的区域可以用多群扩散近似,有的区域只有认真真求解辐射输运问题.这就需要在建立物理模型时认真分析与研究,既保证物理模型的置信度,又要降低计算的复杂程度与规模.

做好科学计算,第二个重要问题是**计算方法与高效算法**.方法与算法的好坏不仅关系到求解物理模型的置信度,同时也直接决定求解问题的效率.对于计算方法与高效算法研究,关键的一点是要立足于实际问题的科学计算开展研究,不能远离实际问题闭门造车.能够解决实际问题的计算方法与高效算法才是有生命力的.顺便提一下:方法与算法有什么差异.对于有周期性边界条件的偏微分方程,数值求解时可以用差分方法,也可以用 Fourier 谱方法.采用差分方法还是采用 Fourier 谱方法这是计算方法范畴的问题.我们知道:通常的 Fourier 谱方法,其计算规模与模数量 N 的平方成正比.当模数量增

加时,其计算规模快速增长.为了降低 Fourier 谱方法的计算量,人们发明了快速 Fourier 方法,其计算规模与模数量的关系为 $N\log N$.当模数量增加时,其计算规模的增长速度大幅下降.从 Fourier 谱方法到快速 Fourier 方法属于算法研究的范畴.

应用程序是物理模型、计算方法与算法的集成,是做好科学计算的第三个重要问题.现在的高性能计算机由数千上万个处理器组成,并行应用程序的性能是能否使用好这类计算机的关键.如果不能使用好计算机,高性能计算机的高性能就无法体现,物理建模、计算方法与算法提高带来的好处与成果就难以获得.高性能计算机,一般的生命周期只有 6 年左右,每年的运行维护费用数百万甚至上千万人民币.为了使用好这样的计算机,必然要求在计算机的生命期内,快速研制或发展高效使用数千上万处理器的并行应用程序.面对高性能计算机的发展,面对应用研究的需要,如何保持并行应用程序研制的高效率与可持续发展是科学计算一项挑战性的研究内容.对于我国科学计算而言,自主知识产权的并行应用程序缺乏已经是制约发展的一个瓶颈问题.“软件硬件求人可硬一时却软一世,硬件软件靠己或软一时但硬一世”,这也是作者在数年前参加关于科学计算研讨会时的感慨.在这里加上一条横批:自主创新.

6 高性能计算机的稳定运行

现在的百万亿次计算机、千万亿次计算机由数万至十几万个处理器组成.高性能计算机 BlueGene/L 由 131072 个处理器组成.研制这些计算机的根本目的是为了**满足科学计算的实际需要**.但是要用好这样的计算机不是一件容易的事情.举一个例子,131072 个处理器运行 10 分钟等于一个处理器运行两年半^[8].换句话说,由于电子元器件等原因引起一个处理器发生故障的平均间隔是两年半,那么像 BlueGene/L 这样的计算机发生局部故障的间隔就是 10 分钟.而实际的复杂问题的计算,需要利用计算机的全部能力,同时还需要运行足够长的时间,例如十几个小时甚至数天.

计算机的稳定运行是一个关键的问题,是一个制约计算机能力发挥的瓶颈问题.解决这个问题,需要计算机硬件、软件与程序运行模式等方面的共同努力.首先,计算机硬件稳定性水平提高是关键.稳定性差的计算机难以承担科学计算之重任.其次,要提高应用程序的执行效率,缩短并行应用程序的运行时间,这就需要科学计算各个环节的共同努力.最

后,要研究高性能计算机的运行与管理模式.我国的科学计算近年来进步很快,高性能计算机研制的步伐更快.我国已经有理论峰值速度为百万亿次量级的计算机.如何用好这些计算机,真正解决应用问题,发挥计算机的价值,是当前我们面临的最重要的问题之一.由于我国许多应用程序计算规模还较小,每次运行需要的处理器个数有限,所以计算机稳定性问题还不是特别突出.但是,一旦应用程序需要使用数千个处理器时,计算机稳定运行就是一个不可回避的问题.这个问题不解决,高性能计算机就难以完全发挥其能力.

7 结束语

近年来,国际科学计算领域的发展快速,我国科学计算研究的进步也非常可喜.在我国,从事科学计算的研究机构与研究人员越来越多,研究的水平也在逐步提高.但是与先进国家相比,我国长期系统地针对实际应用问题从事科学计算工作的机构与人员不多.而科学计算很重要的特点是应用牵引,实践性强.可以预见,科学计算将在科学发现、经济建设与国防研究等方面发挥越来越重要的作用.要做到这点,需要一大批年轻有为的学者投入到科学计算这个丰富多彩的研究领域.作者特别希望这篇短文对我们的大学、研究生认识和理解科学计算有所帮助.

致谢 在撰写本文过程中,与莫则尧、裴文兵、袁光伟和曹小林四位研究员的讨论使作者获益匪浅.特别是在撰写第四节“科学计算需要的计算机”时,曹小林研究员给予作者很多的帮助与指正,图3也是请他绘制的.在此,向上述4位研究员表示衷心的感谢.

· 物理新闻和动态 ·

深入审视大爆炸的回波

在大爆炸之后45万年,氢离子与自由电子复合,宇宙开始变得透明.我们往宇宙的深处看,最远所能看到的,就是从从不透明变成透明的交界面(称为最后散射面).所谓宇宙微波背景(CMB)辐射,正是上述交界面状态的反映.威尔金森微波各向异性探测器(Wilkinson microwave anisotropy probe, WMAP)自2001年夏发射升空以来,已经完成了近7个回合的全天球探测.它所收集到的数据为我们了解早期宇宙提供了可靠的实验依据.

CMB光子与自由电子之间频繁散射(称为Thomson散射),由于投向一个电子的光辐射强度是各向异性的,结果导致了散射光子的偏振.类似的过程也发生在恒星第一次形成(根据对WMAP数据的最新分析,恒星第一次形成的时间大约是在大爆炸之后的4亿年),进而重新电离周围的气

参考文献

- [1] President's information technology advisory committee. Computational Science: Ensuring America's Competitiveness. Report to the President, June 2005 (这份报告可以从网上下载,网址: www.parallel.ru/computational.pdf)
- [2] 朱少平. 科学计算: 基于应用的认识. 香山科学会议第329次学术讨论会邀请报告, 北京, 2008; 朱少平. 对科学计算的认识. 全国青年计算物理会议邀请报告, 青岛, 2008
- [3] 朱少平, 莫则尧. 科学计算: 一条曲折的必有之路. “高性能计算战略”研讨会, 上海, 2005; 朱少平. 高能量密度物理中的科学计算. “高性能计算战略”第二次研讨会, 北京, 2006
- [4] 佐藤哲也. 未来を予測する技術. ソフトバンククリエイティブ株式会社, 2007 (此为日文书, 其中文译名为预测未来的技术. Softbank Creative 股份公司出版, 2007)
- [5] Dimitri F K. Advanced Simulation & Computing: The Next Ten Years. In: A Publication of the Office of Advanced Simulation & Computing, NNSA Defense Programs, 2004 (这份报告可以从网上下载, 网址: asc.llnl.gov/publications/asc_strategy_aug04.pdf)
- [6] <http://www.top500.org/>
- [7] 张林波, 迟学斌, 莫则尧等编. 并行计算导论. 北京: 清华大学出版社, 2006 [Zhang L B, Chi X B, Mo Z Y *et al.* Introduction to Parallel Computing. Beijing: Tsinghua University Press, 2006 (in Chinese)]
- [8] Glosli J N *et al.* Extending Stability Beyond CPU Millennium. In: Proceedings of the 2007 ACM/IEEE conference on Supercomputing, Nevada, 10—16 November 2007 (这份报告可以从网上下载, 网址: asc.llnl.gov/computing_resources/bluengel/pdf/kelvin-helmholtz.pdf)
- [9] Jack Dongarra 等编著, 莫则尧等译. 并行计算综论. 北京: 电子工业出版社, 2005 [Jack Dongarra *et al.* Sourcebook of Parallel Computing. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2005 (in Chinese)]

体之后. 关于CMB中的光偏振,一方面可以借助于WMAP测得“E-modes”表征(它是某种局地偏振坐标系的平行分量,反映物质密度的涨落);但另一方面,WMAP却难于测量所谓“B-modes”(它表征偏振强度矢量的涡度,与引力波对时空度规的张量扰动相关).

最近,一台旨在搜索CMB中引力波信号的天文望远镜(属于Quijote计划,造价150万欧元)将在西班牙坦纳利佛岛Teide山天文台落成启用.虽然它不直接探测引力波,但可以描绘出真实的CMB光子偏振图,剔除污染CMB中引力波信号的某些噪声(例如,带电粒子在银河系磁场中的轨道运动所产生的污染).预计在未来几年中,Quijote计划将绘制1000幅北部天球的CMB图(在10—30GHz范围内选择5个光波频率).Quijote计划与欧洲空间署(ESA)普朗克卫星计划是互补的,后者将于2009年4月发射.

(戴闻 编译自 Physics World, 2008 年第12期第11页)