



编者按

数学是一门基础学科,它的水平关系其它领域科学研究的发展。随着电子计算机的快速发展,以数学为基础的科学计算已成为与理论和实验并驾齐驱的现代三大科学方法之一。

研究计划“高性能科学计算的基础算法与可计算建模”正式启动,2020年底结束评估。10年里,高性能科学计算与相关科学领域深度融合,紧紧抓住数学这个“牛鼻子”,为诸多科学难题的解决提供了强劲的驱动力。

十年一剑! 数学如何牵住科学计算的“牛鼻子”?

——记国家自然科学基金重大研究计划“高性能科学计算的基础算法与可计算建模”

当今,科学计算已成为与理论和实验并驾齐驱的现代三大科学方法之一,利用应用数学和计算机科学所提供的计算能力理解和解决科学与工程领域中的问题,成为了促进现代科学发现与科技进步的重要手段。

日前,我国首个以数学学科为主导的国家自然科学基金重大研究计划“高性能科学计算的基础算法与可计算建模”(以下简称重大研究计划)结束评估。10年里,我国科研人员以数学研究面向国家重大需求和国际科学前沿,将高性能科学计算应用在攻克数理科学、生命科学、地球科学、工程与材料科学、信息科学、医学科学等多个领域的科学难题中。

该重大研究计划专家组第一任组长(由于工作变动,该计划后两年由陈志明院士担任组长)、北京应用物理与计算数学研究所研究员、中国科学院院士江松告诉《中国科学报》:“在100多个团队和1000多名研究人员的共同努力下,我国高性能科学计算逐步向国际科学前沿靠拢。”

“架桥梁”需要几步?

数学是自然科学的基础,也是重大技术创新发展的基础,主要依靠可计算建模与基础算法发挥作用,解决实际问题。然而,长期以来,基础算法研究和实际问题解决的“两张皮”现象突出。许多专家明白,这一现象的背后实际上存在科研人员的惯性思想,导致各自为政开展研究。

江松回忆:“2011年前后,专家们和国家自然科学基金委员会(以下简称自然科学基金委)数理科学部管理者经过多次研讨一致认为,给基础算法研究和解决科学领域实际问题这两个环节‘架桥梁’已经迫在眉睫。”

正是在这样的背景下,2011年,自然科学基金委启动重大研究计划“高性能科学计算的基础算法与可计算建模”,组建了由10位科学计算领域的多学科专家和10位管理专家组成的指导专家组和管理工作组。

在“架桥梁”的共识基础上,专家组和管理组将“问题导向”视为实施该重大研究计划的首要落脚点。

“在核心科学问题的设计上,专家组和管理组把‘顶天和立地’作为目标。”江松告诉《中国科学报》,“在立足于国际学科前沿开展基础算法研究的同时,也要面向国家重大需求中的科学计算难题提出解决方案,进行可计算建模研究。”

具体实施过程中,“架桥梁”工程通过3步



2016年,杨超(左四)登上戈登贝尔奖领奖台。此后,在该重大研究计划的支持下,我国先后于2017年和2020年两次问鼎该奖。

进行。第一步,寻找“桥墩”。他们在数值计算的共性高效算法、基于机理与数据的可计算建模、问题驱动的高性能计算与算法评价3个层面广泛进行项目培育。第二步,“拧紧螺丝”,组合“结构”,即选取重点支持项目开展组合研究。第三步,建好“桥面”,通过集成基础算法、可计算建模、极端条件下的物理现象、生物信息与疾病、大气与反问题与共性算法的高效实现等6大项目群,以解决一大批实际问题。

正是在上述总体思路的指导下,该重大研究计划取得了许多解决“两张皮”问题的代表性成果。例如,围绕在实验室实现可控核聚变,科研人员设计多个有效算法并将其应用于我国神光III激光装置的腔内爆实验设计与分析等物理研究工作,实现算法模拟核聚变过程。围绕精准预测航天器回落点,科研人员开展巨型计算机高效计算实现航天器再入全流程超大规模计算与应用验证研究,成功应用在天宫一号、天宫二号等返回任务中,将位置预测的偏差降低到米量级,提前锁定解体残骸碎片落区散布范围。此外,研究成果还应用在致密油气藏地震资料、冷冻电镜技术、集成电路等领域,极大促进了相关领域的科学研究。

2020年底,该重大研究计划结题时,全体专家组和管理组成员欣慰地看到,重大研究计划实施的十年里,我国高性能科学计算研究取得了跨越式发展,有力推动解决了前沿科学研究和国家重大需求提出的计算难题,“两张皮”问题得以初步解决。

给科学家团队“做媒”

在重大研究计划实施的十年里,众多专家组成员跑遍全国各地100多个项目组,在进行监督考察、指导评价工作之外,为各课题组“做媒”成为他们工作的重中之重。

以数学为统筹解决实际科学问题中的计算难题,必须进行跨学科的深度交叉。得益于高性能科学计算的基础算法和可计算建模研究,在重大研究计划最终集成的6个项目群中,产生了从问题到算法的大批优秀成果。

从选取基于问题的项目培育开始,专家组就一直以“牵线搭桥”方式促进多个不同学科之间的交叉融合,在项目资助中广泛匹配,给互不相识但研究符合问题解决方向的课题组相互“介绍对象”。同时,管理组在基金政策和组织形式方面给予大力指导和支持,以保证交叉合作的顺利推进。

湖南师范大学刘红荣团队与上海交通大学和北京大学的图像处理算法团队的合作就有一段“佳话”。2015年,专家组发现,刘红荣团队在前期项目培育阶段已经在“静态生物体”相关研

究中取得具有国际领先水平的重要成果。在一次交流中,刘红荣向专家组表示,动态过程图像处理算法不足,限制了他们的进一步研究。

专家组“秒懂”了刘红荣的难处。他们马上联系到该重大研究计划资助的图像处理算法团队,将三个团队合并为集成项目。

最终,集成团队在冷冻电镜生物大分子活性动态三维重构算法基础研究与应用研究方面取得突出进展,形成了拥有自主知识产权的三维重构软件,初步发展了超大型生命分子机器的全原子动力学重建新方法。相关成果发表于《自然》《自然-通讯》等国际期刊上。

不仅如此,据江松介绍,专家组还把已经在“谈恋爱”、有相关合作的项目推进“婚姻殿堂”,甚至还推动不同大项目之间的“联姻”,共同集成大方向下的核心科学成果。

“冷板凳”怎么坐“热”?

数学是人类利用科学手段探索自然的基础工具,自由探索型基础数学研究和目标导向型应用数学研究是其两个主要研究类别。和快速做出成果的应用数学研究不同,基础数学研究往往意味着研究人员可能坐上了长期没有成果的“冷板凳”。

2018年以来,国家及相关部门陆续制定多份文件强调基础研究的重要性,将数学置于重要地位,明确指出“数学实力的提高往往意味着国家实力的增强”。

作为我国第一个数学学科的重大研究计划,以数学学科为引领的诸多研究成果实实在在地被用于多项科学问题的解决,让数学真正成为基础科学中的基础,成为把“冷板凳”坐“热”的典范。

在专家们看来,重大研究计划的实施也为应用数学学科发展提供了可参考的经验。江松认为,数学学科自由探索型的基础研究往往做出“从0到1”的突破,继而改变整个科学界的发展范式;而目标导向的应用型基础研究则是对突破后新范式的无限延伸发展,将新的基础研究成果广泛应用于科学研究和社会各行各业解决实际问题。“两手抓,两手硬。”他强调。

近年来,自然科学基金深化改革的重要举措之一是明确资助导向,将科学问题属性分为4类,即鼓励探索、突出原创;聚焦前沿、独辟蹊径;需求牵引、突破瓶颈;共性导向、交叉融通。在此基础上,对于不同科学问题属性的分类评审工作也逐步推进。

江松告诉《中国科学报》:“新的资助导向将改变对数学研究的评价,避免‘一刀切’,而评价将进一步作为开展数学研究的‘指挥棒’,引领科研工作。”例如,自由探索型的数学研究解决问题时间长、所需投入少,需要更持久、更有耐心的投入,而大工程式作业的应用型数学研究涉及不同学科的交叉融合,涉及人员多、投入大、问题明确、时间紧,则更需要大手笔、考核标准明确的科研投入和考核机制。

让优秀人才脱颖而出

该重大研究计划为我国高性能科学计算领域培养出一大批学术中坚力量。

从启动到落幕的十年里,经历过培育项目一重点支持项目一集成项目三轮资助的各项目群中诞生了一批突出/突破成果,高性能科学计算领域的学术新手们在这里和重大研究计划一起,走出了自己的学术成长之路。

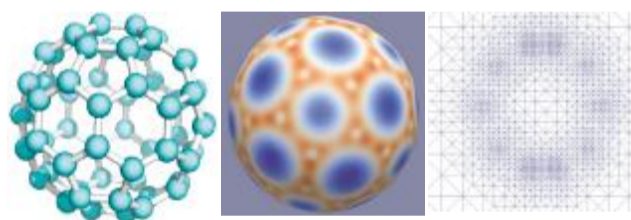
北京大学数学科学学院教授杨超就是代表之一。2011年,时任中国科学院软件研究所副研究员的杨超申请项目入选第一批培育项目,随后又进一步获得重大研究计划的集成项目支持。在重大研究计划的持续资助下,杨超与合作者在异构区域分裂算法领域持续取得突破,应用成果问鼎2016年的戈登贝尔奖。这是29年来国际高性能科学计算的“第一梯队”中,首次有了中国学者的身影。此后,在该重大研究计划的支持下,我国又先后于2017年和2020年两次问鼎该奖。

如今,杨超已成长为该领域的青年学术带头人。“重大研究计划围绕一个共同目标把研究人员集中起来,是一种有组织的基础研究,成效非常之好,这种模式对于应用基础研究有很强的推动作用,值得持续开展。”杨超告诉《中国科学报》。

据了解,在项目实施过程中,5名项目负责人被增选为中国科学院院士,11人获得国家杰出青年科学基金项目资助,通过重大研究计划“联姻”的许多课题组还在继续合作开展更进一步的研究,大批研究生进入相关院校和科研单位,众多年轻学者加入了高性能科学计算领域的研究……

未来,人工智能、机器学习、百亿次计算以及大气海洋环境模拟等前沿课题将成为高性能科学计算进一步发展的方向。“面向国家重大需求,抢占计算科学发展的国际制高点,在国际新形势下发展自主科学与工程计算软件是中国高性能科学计算不变的目标和希冀。”江松告诉《中国科学报》。

「自适应有限元算法」设计获突破



周爱辉团队碳60体系电子结构自适应有限元计算结果,从左至右分别为体系构型、密度图及网格截图。

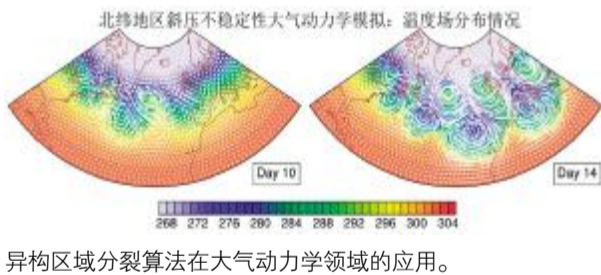
发展精度可控的数值计算共性高效算法是充分发挥高性能计算机巨大能力、满足大规模计算实际问题模拟精度和置信度要求的重要研究前沿。而在电子结构计算中,计算结果误差的可靠估计方法研究是其核心科学问题之一。

在重大研究计划的支持下,我国科学家证明了他们所设计的基于后验误差估计的“自适应有限元离散算法”具有最优收敛率与最优复杂度,完成了国际首个重要特征值问题自适应有限元收敛率与复杂度分析工作。

基于密度泛函理论的第一原理电子结构计算是探索与模拟物质微观系统的物理规律的基本手段,在微观世界的物理过程的研究与理解和先进材料的结构性质的预测上发挥了重要作用。在第一原理电子结构计算中,自适应有限元算法设计及其收敛性和复杂性分析是当今计算数学国际前沿课题。

自上世纪七十年代以来,微分方程源问题相关研究已取得非常深入系统的成果。但相比之下,特征值问题的自适应有限元算法工作不多。“重要特征值问题的自适

「全隐式求解器算法」获应用



异构区域分裂算法在大气动力学领域的应用。

偏微分方程的隐式求解器在大规模科学与工程计算中具有广泛应用,是提高不少具体应用问题实际计算效率的关键。近年来,随着高性能计算机计算能力的突飞猛进,硬件体系结构日趋复杂,传统并行隐式求解器已经难以适应新型体系结构的设计和应用遇到了前所未有的挑战。

在重大研究计划的资助下,北京大学数学科学学院杨超与合作者提出了一类具有数百上千万处理器核可扩展能力的全隐式求解器算法,在国产大型异构核超级计算机上取得了显著应用效果。

研究团队提出一类新型异构区域分裂算法,在经典区域分裂算法基础上设计了异构区域剖分策略,充分发挥了异构计算单元各自不同的计算能力,并有效减少了子区域之间的数据移动开销。此后研究团队进一步基于瀑布型多层区域分裂框架,设计了高效多层粗网格修正算法,提升了隐式求解器的收敛性。在此基础上,研究团队提出一套新型流水线并行不完全矩阵分解算法用于子区域间

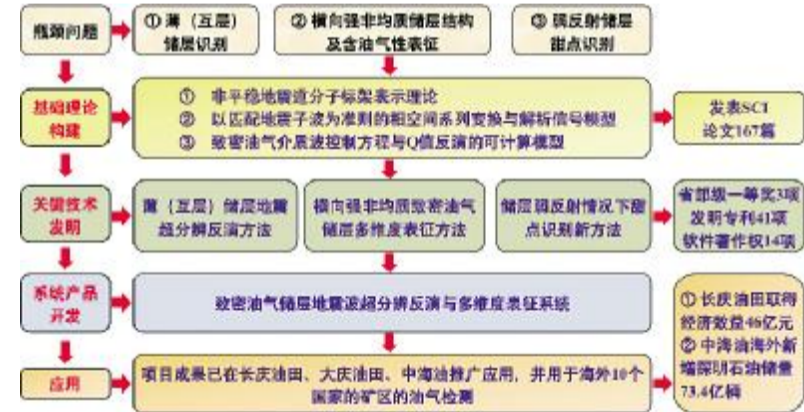
题求解,该算法巧妙利用了原始问题的几何信息,避免了非结构化数据索引,增强了并行度和数据局部性。

异构区域分裂算法被应用于HPCG基准测试,在“天河2号”超级计算机整机312万核上实现了623 Tflops性能,帮助“天河2号”取得2014年11月HPCG排名榜第一名。“天河”研制单位国防科技大学评价该工作“超越美国Intel公司提供的优化版软件,达到世界领先水平”。

随后,在国产“神威·太湖之光”超级计算机上,研究人员将该算法应用于非静力大气动力学全隐式模拟研究成果获2016年度美国计算机学会“戈登贝尔”奖,一举实现了我国在这一国际高性能计算应用最高奖项上零的突破,并入选了由两院院士评选的2016中国十大科技进展新闻。

“千万核可扩展非静力大气动力学全隐式模拟”研究成果得到了来自国内外多方面的积极评价,被评价为同领域“为数不多”“高度有效”的相关成果。“神威·太湖之光”研制单位评价该成果是“我国高性能计算领域跨单位、跨学科合作的结晶,对我国高性能计算应用与发展具有引领和示范意义,并对我国下一代高性能计算机的研制有重要启示”。

提升致密油气探测成功率



致密油气探测项目科学成果示意图。

致密油气属于非常规油气,约占近年来新发现油气藏的70%以上,是我国油气增储上产的主体。

在重大研究计划支持下,西安交通大学徐宗本、高静怀课题组在致密油气藏地震资料反演的建模和计算方面取得重要进展。他们创建了以适用于致密油气介质的地震波控制方程、以“匹配地震子波”为准则的系列相空间变换为核心的新理论,致密油气储层地震波超分辨率反演和多维度表征新方法的发明使得该理论实现了规模化应用,有力支撑了我国非常规油气勘探开发战略。

据我国油气产业发展与展望报告蓝皮书(2019-2020),2019年我国石油对外依存度高达70.8%,天然气对外依存度达43%,这严重威胁我国的能源安全。

作为非常规油气资源的致密油气是我国油气增储上产的主体,但其勘探极为困难,作为现有油气勘探最主要手段的地震波方法存在三个关键瓶颈问题:一是薄(互层)储层无法有效分辨;二是薄互层结构、储层边界、岩性及含油气性等难以有效表征;三是储层与围岩波阻抗差异小,反射信号弱,导致含油气储层甜点难以识别。

在研究团队的建模和计算中,科研人员突破了现有地震波探测时间分辨率1/4波长的极限,在应用目标区可达到1/10波长以下,分辨能力由现有方法的10米提高到5米,致密油气薄(互层)储层探测能力居国际领先水平。他们发明横向强非均质致密油气储层的多维度表征方法,使致密油气水平井储层钻遇率比常规方法提高了10%,成为国内外同类技术的领跑者,在长庆油田、大庆油田、中海油及海外10个国家区块共2825平方公里三维地震资料上成功应用,大幅度提升了致密油气储层探测成功率。

此外,研究团队发明了保真角道集生成、角度域相空间Q值计算、相控压缩系数含油气性预测等系列方法,攻克了与围岩波阻抗差异小的储层甜点无法识别的国际难题,使得探测识别成功率达到83%,比主流方法提高了15%以上。

在致密油气藏地震资料反演的混合建模与基础算法/致密油气储层地球物理表征与甜点检测的攻坚过程中,科研人员的新成果逐步在苏里格和神木气田、陇东地区实现了规模化应用,有力支撑了我国非常规油气勘探开发战略。

(本版图片均由研究团队提供,文字由本报记者甘晓、实习生蒋程撰写)