

加强高性能科学与工程计算 应用软件的研制

最近几年,中国计算机硬件发展迅速,国产超级计算机已多次排名世界第一,但在超级计算机上运行的科学与工程计算应用软件水平离国际先进水平还有不少差距,适用于国产硬件的科学工程软件更是匮乏,国外大型科学与工程计算应用软件的许多功能对中国都属于“卡脖子”问题。例如,用于芯片设计的大型EDA软件都掌握在美国和欧洲的大公司中,而EDA软件对中国信息产业的基础性和重要性大大超过高科技公司生产的芯片。

1 发展历史

20世纪50年代,美国波音公司开展了利用有限元方法在计算机上进行结构应力分析的研究,这是现代有限元方法工程应用的肇始。在多年研究的基础上,1965年美国国家航空航天局(NASA)提出了研制通用型有限元分析软件的NASTRAN计划,这是计算机辅助工程(CAE)的开端。半个多世纪以来,利用计算机模拟结构、流体、电磁、量子等各种物理过程的科学与工程计算应用软件得到了巨大的发展。在CAE方面,形成了以Altair、ANSYS、MSC和达索等用于结构、流体和电磁场分析,Cadence、Synopsys和Mentor Graphics(已归属西门子公司)等用于芯片设计为代表的大型应用软件开发公司。在量子化学和材料物性计算方面,以密度泛函理论为基础的Gaussian、VASP和ABINIT等软件包得到了广泛应用,密度泛函理论的提出者W. Kohn和Gaussian系列程序的创始人J.A.Pople曾获得1998年诺



陈志明,中国科学院院士,中国科学院数学与系统科学研究院研究员。主要研究领域为数值分析与科学计算。

贝尔化学奖。波音、空客和西门子等欧美公司及美国各大国家实验室各自研发了大量的非公开(in-house)科学与工程计算应用程序。

2 软件研制过程及特点

研制科学与工程计算应用软件包括建立模拟物理过程的数学模型、提出数学模型的计算方法和编写计算方法的计算机程序3个部分。数学模型的正确性需要通过不断的物理实验和工程实践验证和修正,数学模型的计算方法需要利用数学方法控制计算精度和提高计算效率,编写计算方法的计算机程序则需要结合计算机的体系结构优化设计数据结构和底层算法。以EDA软件为例,随着半导体器件和集成电路的尺寸越来越小,以前EDA工具采用的数学模型的准确度越来越低,需研究新的数学模型和相应的新的计算方法;另一方面,当代数学方法研究的深入,使得现有EDA软件中的计算方法在精度控制和计算效率上存在很大提升空间。

长期以来,由于科学与工程

计算应用软件研制周期长,其研制涉及应用领域、数学、信息科学等多个学科,同时又面临国外大型应用软件的先发优势和垄断,科学与工程计算应用软事业在中国没有得到很好的发展。近年来,中国科技部高性能计算重点研发专项支持的项目侧重于围绕机器和具体应用进行研制,对数学模型的基础计算方法重视不够,在整体上中国高性能科学与工程计算应用软件与国际先进水平仍有不小差距。

3 建议

发展自主的科学工程计算应用软件,需要充分发挥中国应用领域、数学和信息科学各方面专家优势,寻找合适的交叉融合机制,得到国家的持续支持,以期取得突破。

1) 通过中国科技部和国家自然科学基金委员会的重点或重大项目,结合中国实际需求,有针对性地研究大型科学与工程计算应用软件涉及的数学模型和计算方法,引导和鼓励更多数学工作者研究科学与工程计算应用软件涉及的数学问题。

2) 在中国科技部高性能计算重点研发专项的项目中,更加注重数学模型的计算方法的基础研究,在高水平的数学模型计算方法的基础上,再提高计算方法在高性能计算机上程序实现的效率,以充分发挥中国高性能计算机的硬件能力,提高中国在高性能科学与工程计算应用软件上的国际竞争力。

陈志明

(中国科学院数学与系统科学研究所,
北京 100190)