

► 千万亿次计算机对其科学和经济发展的重要意义，并确定了五个主要的应用方向^[6]。在气象、气候学和地球科学方面，该计划关注于气候变化、海洋学和海洋业预报、气象学、水文地理学和空气质量以及地球科学等方面的研究；在天体物理学、高能物理学和等离子体物理学方面，这些领域的一些极其耗时、十分昂贵或低性能计算机不足以完成的仿真实验将得到超级计算机的有力支持，而近几年在这些领域的科学突破都是借助于超级计算机实现的，该计划希望能够利用高性能计算机对将来的空间实验进行研究；在材料科学、化学和纳米科学方面，计算机仿真不仅在传统的材料科学、物理和化学领域，同时在纳米科学、表面科学电子工程、生物学和药物研制等领域都起着至关重要的作用；在生命科学方面，该项计划主要致力系统生物学、染色体动力学、大尺

度蛋白质动力学、蛋白质联结和聚合、超分子系统、医学等领域的研究；在工程学方面，当前的仿真任务和将来的发展趋势对计算资源的需求更是永无止境的，其应用领域涉及直升机的完全仿真、生物学流体动力学、燃气轮机和内燃机引擎、森林火灾、绿色飞行器、虚拟发电厂等。高性能计算机在这些应用的成功应用将会对科学和社会的方方面面产生深远的影响。



参考资料



- [1] Distributed European Infrastructure for Supercomputing Applications (DEISA), <http://www.deisa.eu/>
 [2] Enabling Grids for E-science (EGEE), <http://www.interactions.org/cms/?pid=1026186>
 [3] DutchGrid, <http://www.dutchgrid.nl/>
 [4] Grid5000, <https://www.grid5000.fr/mediawiki/index.php/Grid5000:Home>
 [5] The Scientific Case for a European Super Computing Infrastructure. Petascale Computing in Europe. <ftp://ftp.cordis.europa.eu/pub/ist/docs/rn/changes-060511-DD-event-supercomp-report.pdf>
 [6] 王龙, 千万亿次计算: 趋势与需求, 千万亿次计算能力前沿科学研讨会, 2008-7-25. <http://math.xtu.edu.cn/myphp/math/image/qianwan.ppt>

编译: 曾琳

来稿时间: 2008年10月20日

日本高性能计算机发展动态

Recent Development of High Performance Computing in Japan

2006年, 日本政府启动“下一代超级计算机工程”(The Next Generation Supercomputer project), 并由RIKEN作为该项目的实施主体^[1]。在日本政府宣布的第三个科学技术基本计划(Science and Technology Basic Plan, 2006-2010)中, 生命科学、信息通信、环境科学和纳米技术与材料四个研究领域仍然是政府的重点支持领域, 同时下一代超级计算机被列为国家性的关键技术, 以增强日本在科学技术领域的竞争力。迄今为止, 日本共有三个主要的超级计算机工程, 分别是: 1993年由日本国家宇航实验室开发的“数字风洞”(Numerical Wind Tunnel)系统、1996年由筑波大学开发的CP-PACS和2002年由日本海洋科学技术中心(JAMSTEC)开发的著名的地球模拟器, 上述三个系统峰值分别为208Gflops、614Gflops和41Tflops, 并且上述工程中应用的新技术由富士通、日立和NEC进行商业化并在世界范围的研究机构和高校中广泛使用。与上述工程不同, 日本政府希望“下一代超级计算机工程”是不仅仅是个暂

时性的工程, 此项工程将随着超级计算机的发展而得到延续。

“下一代超级计算机工程”的持续时间从2006年到2012年, 其目标是: 发展、建立并应用先进的高性能超级计算机系统, 并将其作为国家的关键技术和基础设施。该工程预期达到以下结果: 1) 开发先进的高性能计算机系统, 该系统具有可执行多于千万亿次的仿真能力, 并在2011年底投入运营; 2) 开发可运行于下一代超级计算机的应用代码并广泛使用; 3) 提供灵活的计算环境共享下一代超级计算机的计算资源; 4) 建立一个先进的计算科学与技术中心作为日本的计算科学基地。全部项目预算约为10亿美元。目前该工程已由计算机系统的基础设计阶段转向计算机芯片的详细设计阶段, 同时面向一些重要应用(纳米科学和生命科学)的程序也在开发之中, 这些程序的开发可以用来评价超级计算机的硬件性能, 同时也可以促进日本计算科学的发展。

在计算机系统的基础设计方面, 由RIKEN向MEXT提交的建议已经得到认可: 1) 硬件系统由标

量和矢量处理器单元组成; 2) 基于Linpack测试的目标性能将在10千万亿次; 3) 富士通、日立和NEC将成为该项目的硬件开发商。

在主要的应用方面, 上文提到第三个科学技术基本计划中已将生命科学、信息通信、环境科学和纳米技术与材料四个重点发展的研究领域。在政策的支持下, 生命科学以及纳米技术和材料被选为下一代超级计算机的主要应用领域。由于下一代超级计算机的系统是高度并行的, 为这些领域所设计的计算机代码也应该适应这种新的高度并行的结构, 因此在发展硬件的同时, 也需要将现有应用代码设计为下一代超级计算机所要求的模式。分子科学研究所(Institute of Molecular Science, IMS)和RIKEN分别负责纳米科学和生命科学的应用软件工程开发工作。

在由IMS负责开发的纳米科学方面的应用软件需要满足如下几个主要应用: 1) 对酶的化学反应进行仿真: 这项工程的主要目的是制造出具有比自然酶更高反应效率的人造酶, 这样的酶可以从木材中制造氢气; 2) 对与生命有

关的物质进行仿真：该工程的主要目标之一是在分子的层次上理解这些物质（如蛋白质、细胞隔膜等）在生物环境中的工作机制；3) 对纳米材料的仿真。在由RIKEN负责开发生命科学方面的应用软件需要满足下列应用：1) 对蛋白质和配合基组成的联合体进行分子仿真；2) 对系统生物学的细胞仿真；3) 对人类器官和身体进行仿真；4) 从生物信息学的角度将DNA

与其对应生物功能相结合，从而为不同的患者定制更加有效和安全的药物。图1展示了日本下一代超级计算机开发的进度表。

在日本“下一代超级计算机工程”展开的同时，日本还成立了相应的工业论坛（Industrial Forum for Super Computing Promotion），该论坛有160多个日本公司参加，旨在研究如何应用超级计算机来满足工业界的发

展需求。此外，在网格研究方面，由MEXT发起的国家网格研究计划（National Research GRID Initiative, NAREGI）着重于网格中间件的研究和开发，为广泛分布的、高级研究和教育目的实现大规模的计算环境，其目标是使网格最高运算速度达到100TFLOPS，并且于2008年发布了其网格中间件1.0版^[2]。其它知名的网格中间件还有Ninf-G^[3]等。



FY	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012
Operation					Start Operation	Full Operation	
R&D							
Software	System Software	DS/Tools/GRID middleware Design & Production		Evaluation			
		Next Generation Nano-Science Simulation, Design & Production		Evaluation			
	Grand Challenge Application Software	Next Generation Life Science Simulation, Design & Production				Evaluation	
Hardware	Basic Design	Detail Design	Production		Enhancement		
File Systems and others			Design	Production		Enhancement	
Geographical investigation, Construction	Investigation	Design	Construction				

图1 日本下一代超级计算机开发的进度表

参考资料

[1] Toichi Sakata, High Performance Computing beyond the Peta Scale in Japan, Journal of Physics: Conference Series, 78 (2007) 012059.
 [2] Center for GRID Research Development, http://www.naregi.org/index_e.html.
 [3] Ninf-G, <http://ninf.apgrid.org/>.
 [4] 王龙, 千万亿次计算: 趋势与需求, 千万亿次计算能力前沿科学研讨会, 2008-7-25. <http://math.xtu.edu.cn/myphp/math/image/qianwan.ppt>

编译: 曾琳

来稿时间: 2008年10月20日

CONTENTS

e-Science Forum

- 1 Suggestions on Accelerating Development of High-Performance Computing in China
- 8 Should Pay More Attention to Applied and Fundamental Study for High-Performance Computing

e-Science Technology

- 12 Massive Parallel Simulation of Gas-solid Suspension with Macro-scale Particle Method

e-Science Application

- 20 Petascale Computing:Trends and Needs
- 32 A Study on the Influence of the Computational Uncertainty on the IAP-AGCM Model
Subject—Computational Chemistry Virtual Laboratory
- 46 A Virtual Research Organization Based on Network Cooperation – “Computational Chemistry Virtual Laboratory”
- 55 Applications of the Parallel Computing for Attosecond Dynamics
- 62 GridMol: a Highly-Efficient Application System Designed for Computational Chemists

News & View

- 71 Analysis of 2008 China HPC TOP100 Rank List and Perspectives
- 79 PetaApps Project in USA: Accelerating Discovery in Science and Engineering through Petascale Simulations and Analysis
- 81 Recent Development of High Performance Computing in Europe
- 83 Recent Development of High Performance Computing in Japan

