

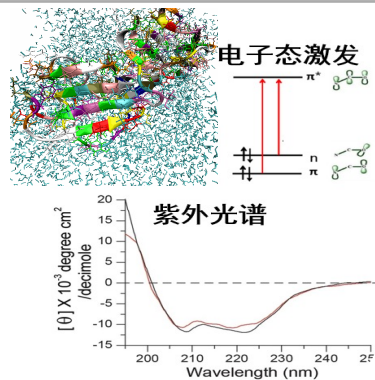


面向科学智能的智能超算关键问题

谭光明

中国科学院计算技术研究所

科学研究在向更基本、更复杂问题的突破上挑战巨大



Nature 2019, 566, 131

生物：中心法则的机理模型
极难建立



灯丝的10年
试错开发
1600种矿石
3000种植物
3000种金属

新材料举步维艰：发动机、光刻
胶、电阻、催化剂...

材料开发：沿用试错模式
上百年

Chemistry=Chem is try



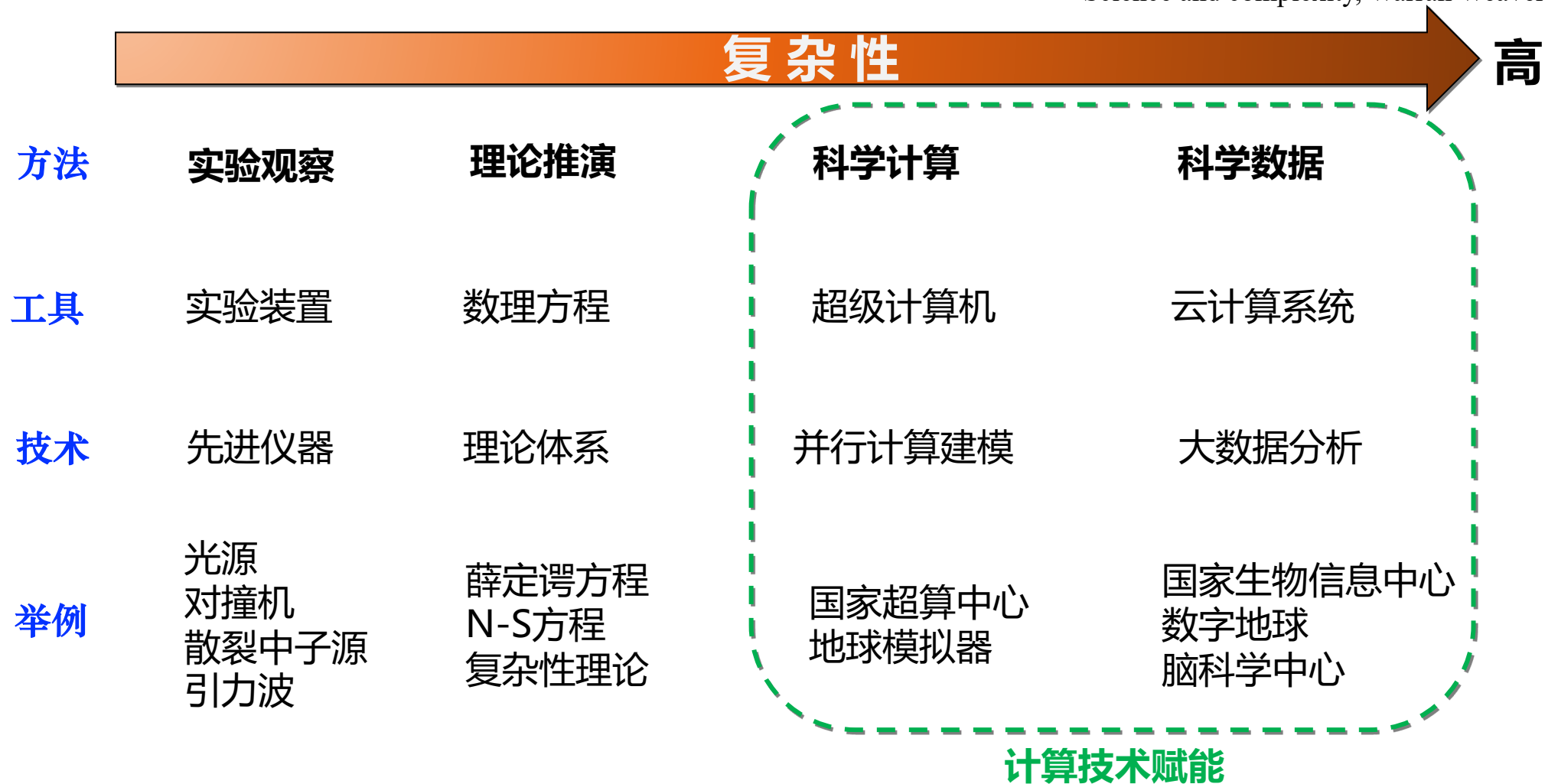
Chem. Soc. Rev. 2018, 47, 7867

化学合成：劳动密集在迷宫
中穷举路径

- 应用基本规则的方程导致模型过于复杂而无法求解
- 摆脱不了低效的“试错”和“穷举”研究模式

计算技术 “使解决原本过于复杂、难以处理的问题成为可能”

--Science and complexity, Warran Weaver, 1948



科研范式的演变

第一范式

第二范式

第三范式

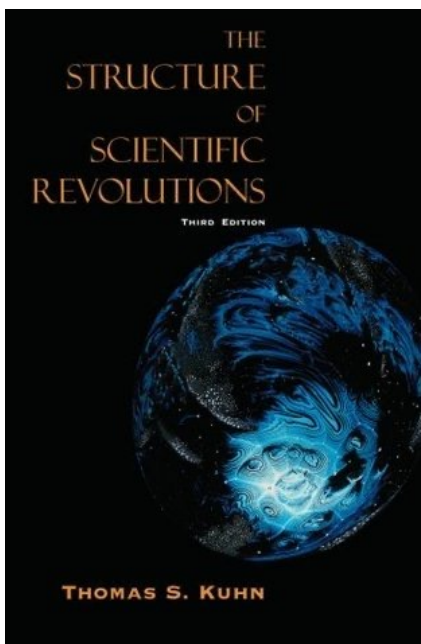
第四范式

实验科学

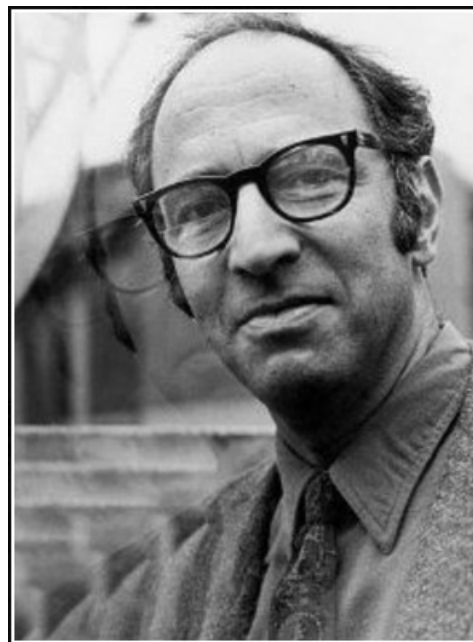
理论科学

计算科学

数据科学

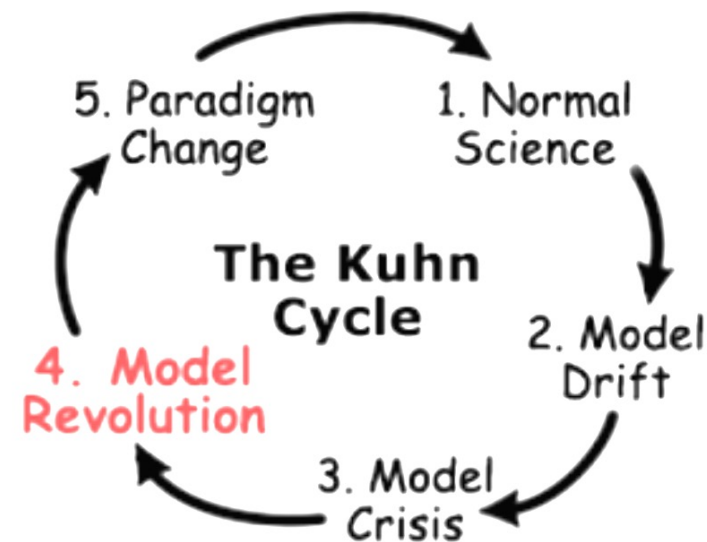


托马斯-库恩
科学革命的结构



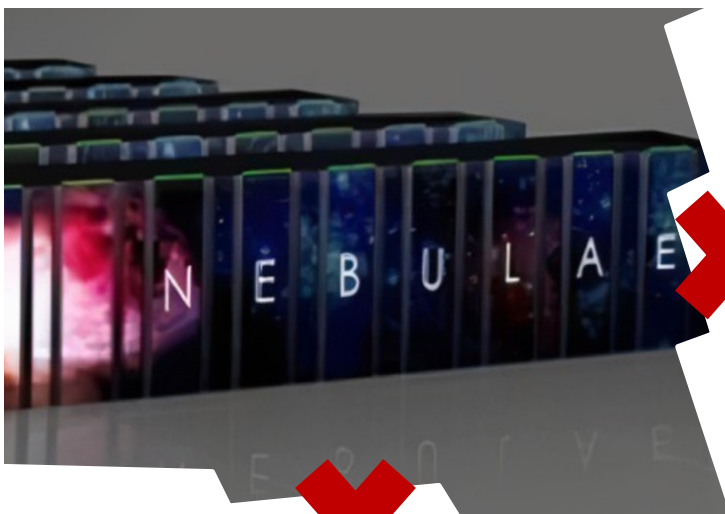
All significant breakthroughs are break-“ withs” old way of thinking

The Kuhn Cycle



科研活动的危机：人-机-物同床异梦

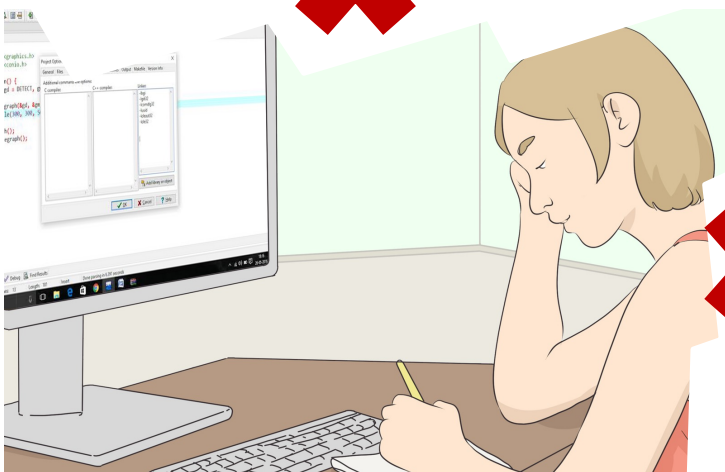
超级计算机
第三范式



大科学装置
第四范式



理论科学家
第二范式

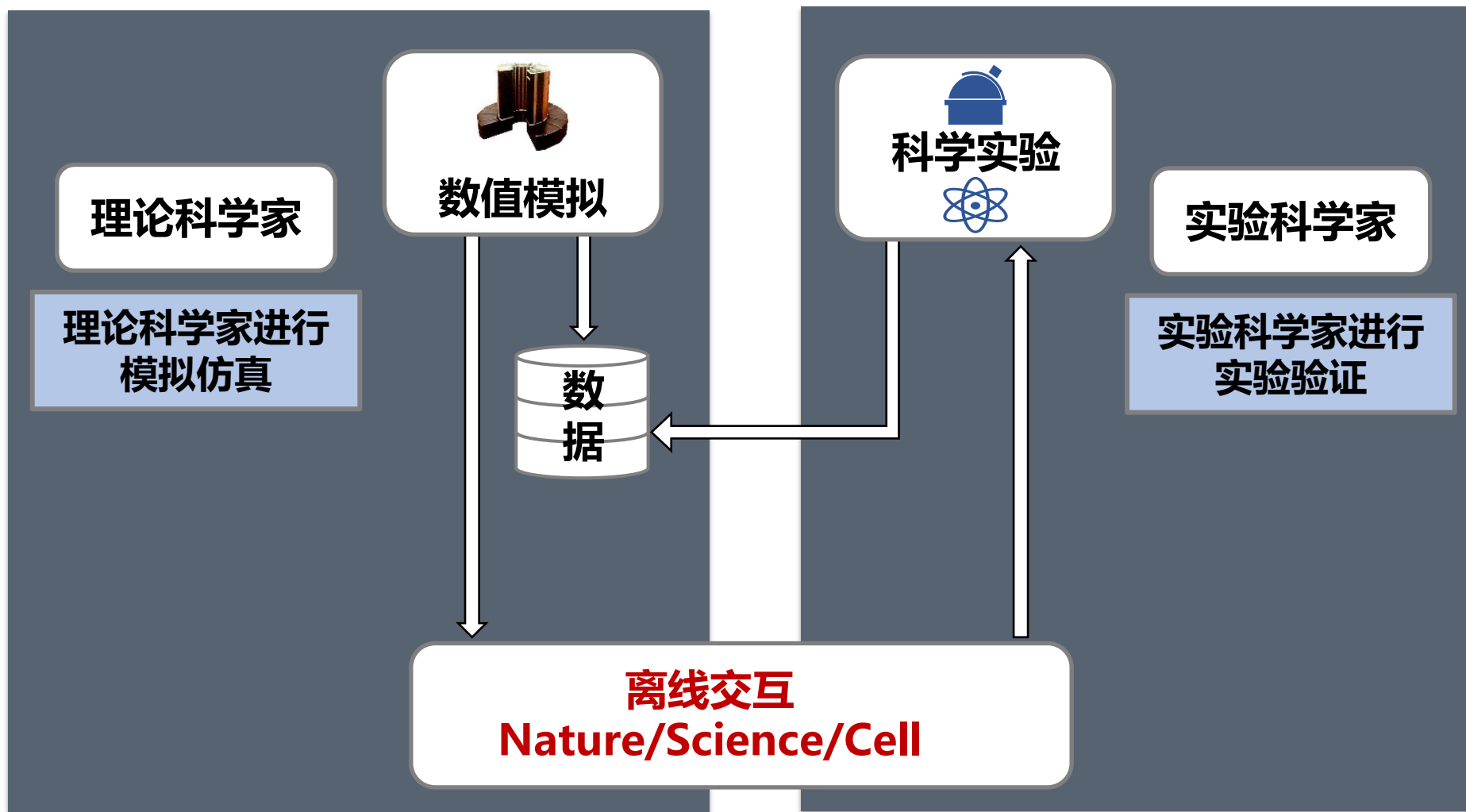


实验科学家
第一范式



表象：人-人

本质：人-机（超算）、人-物（大装置）、机-物（网络）



理论和实验的相互促进的平台是期刊



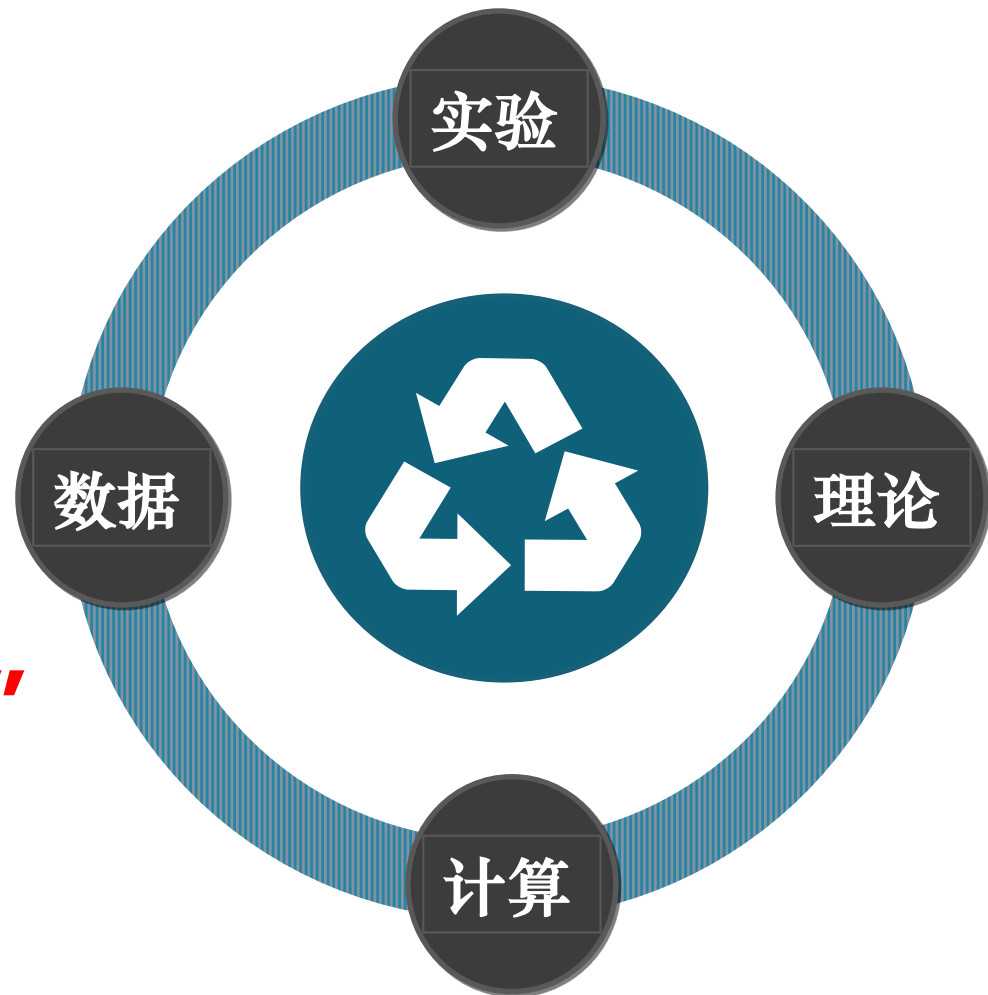
同床异梦的根源



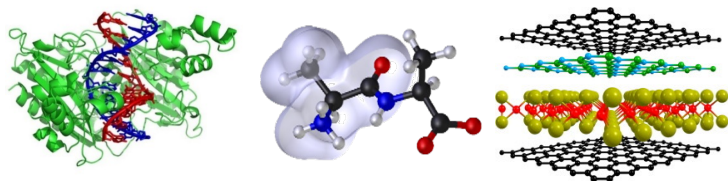
沟通交流不畅



打通“信息流”



人-机之间的信息流联系：超级计算

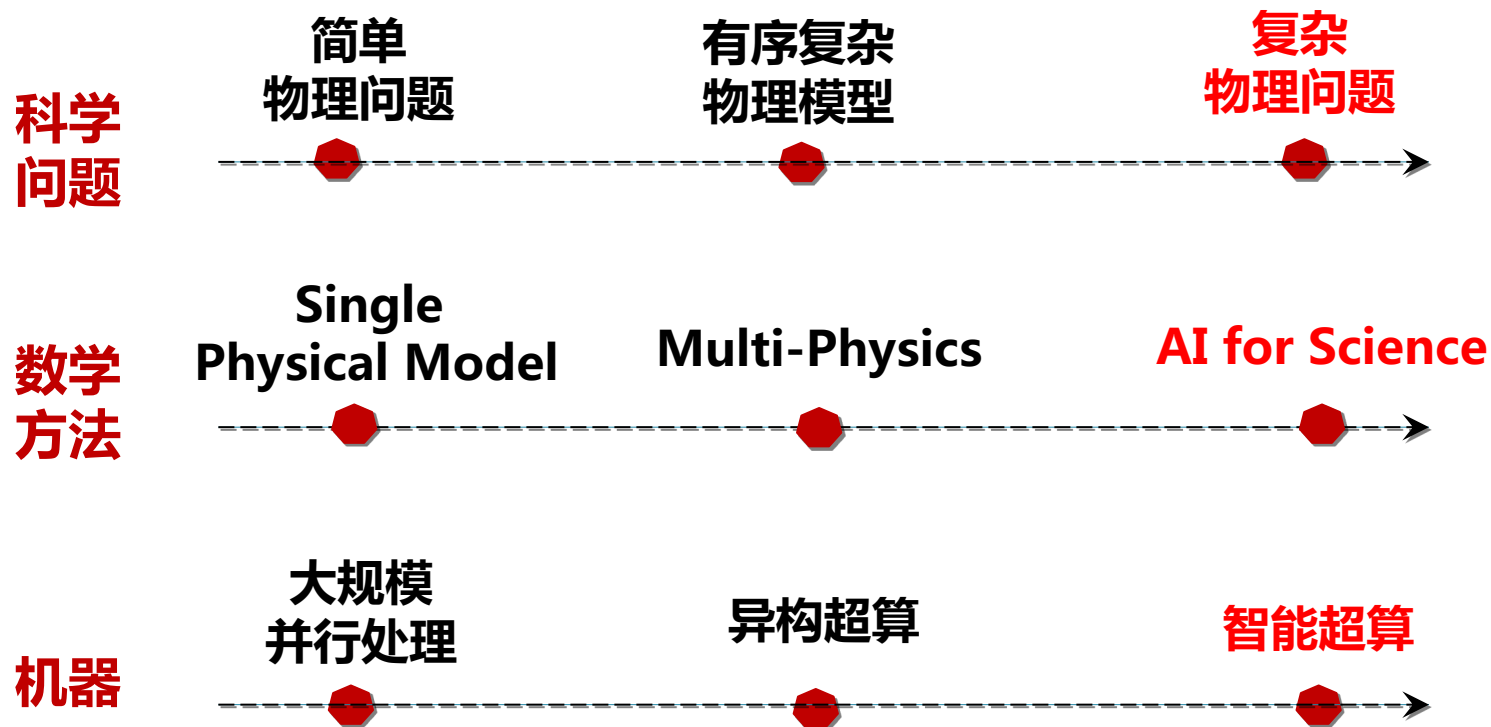


算法是科学家与计算硬件
交互的“共同语言”

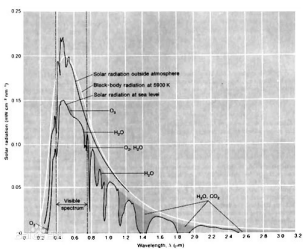


把人的科学思想表达成机器
可大规模求解的模型

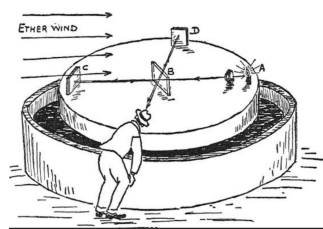
超算推动了科学研究问题走向复杂



人-物之间的信息流联系：大科学装置



黑体辐射



“以太”说

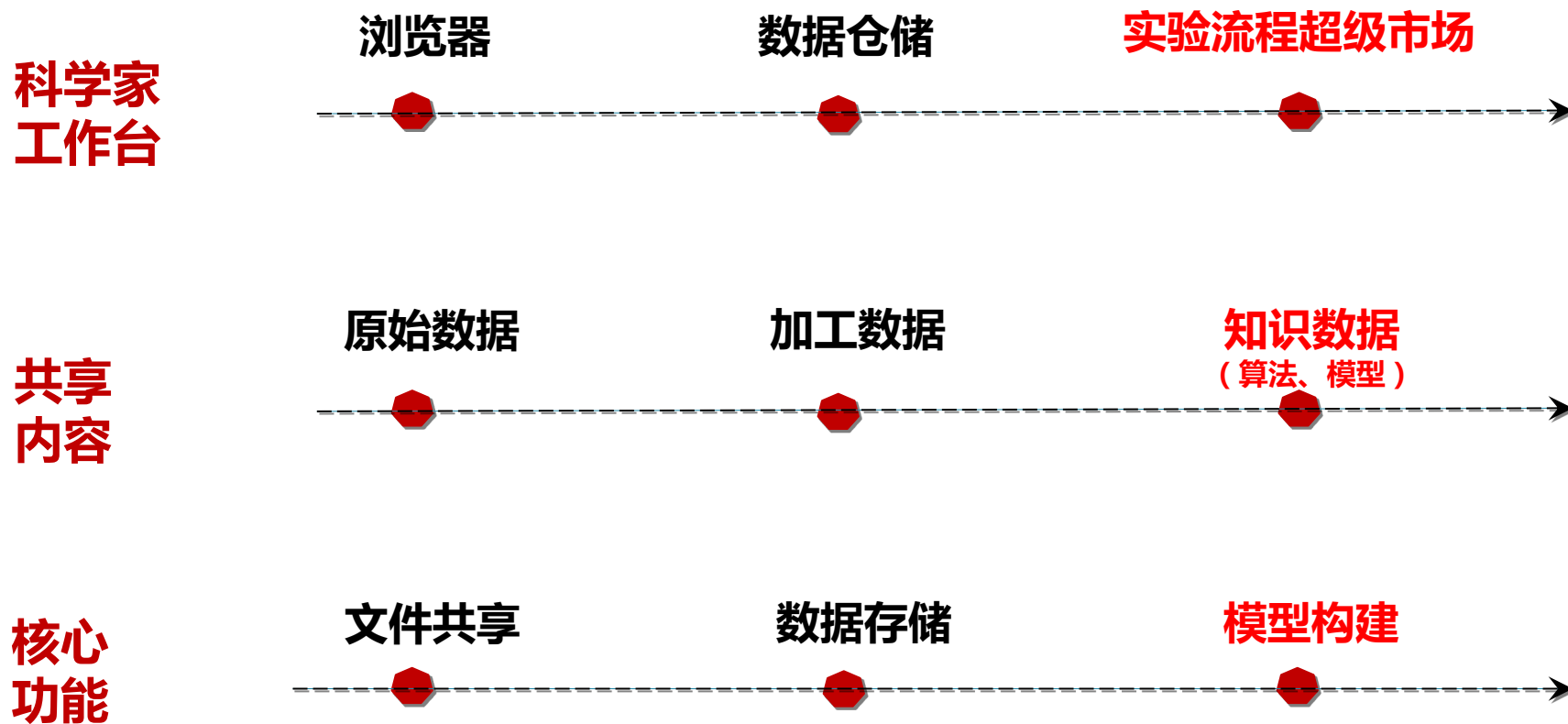


大科学装置是科研数据产生的“源头”



把人的科学思想表达成装置
上可开展的实验

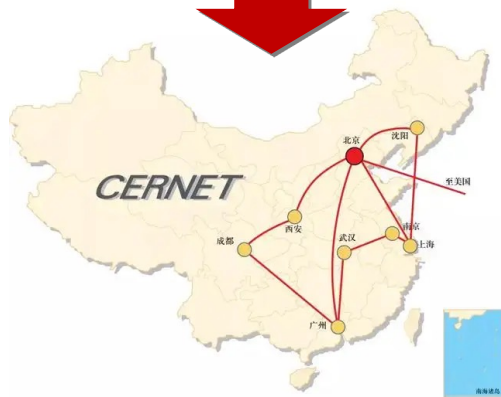
海量数据推动了科学实验设计走向开放



机-物之间的信息流联系：网络

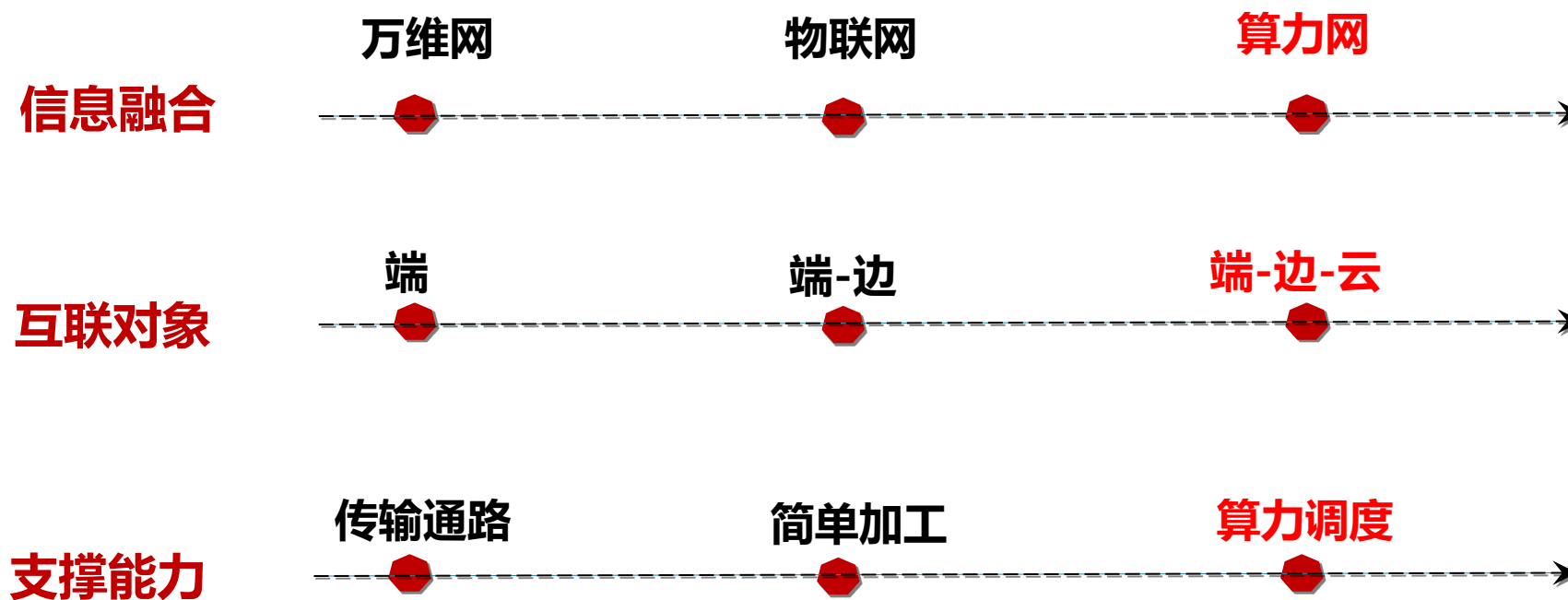


网络是不同时空的科研协
同的“信使”

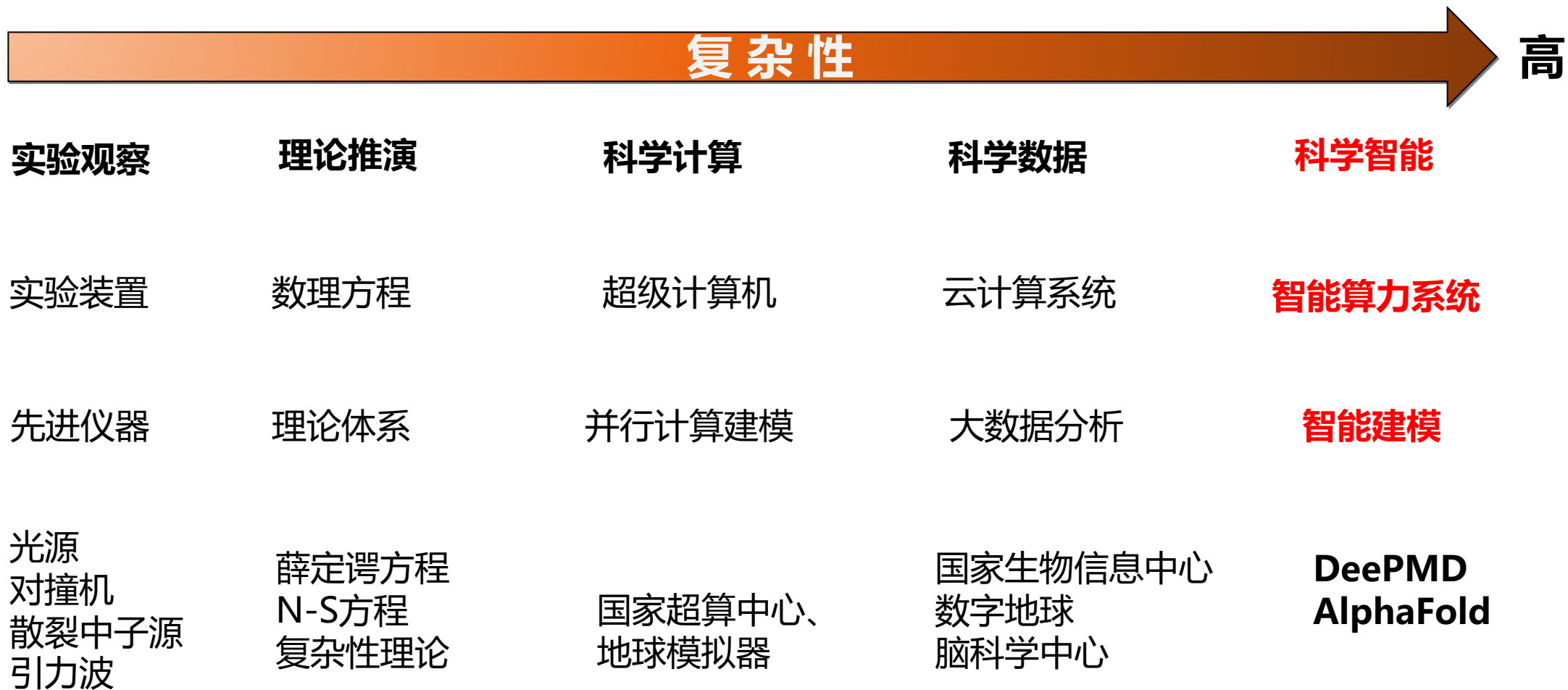


把人的科学思想表达成跨平
台上可调控的信息

网络融合推动了科研基础设施走向**一体**



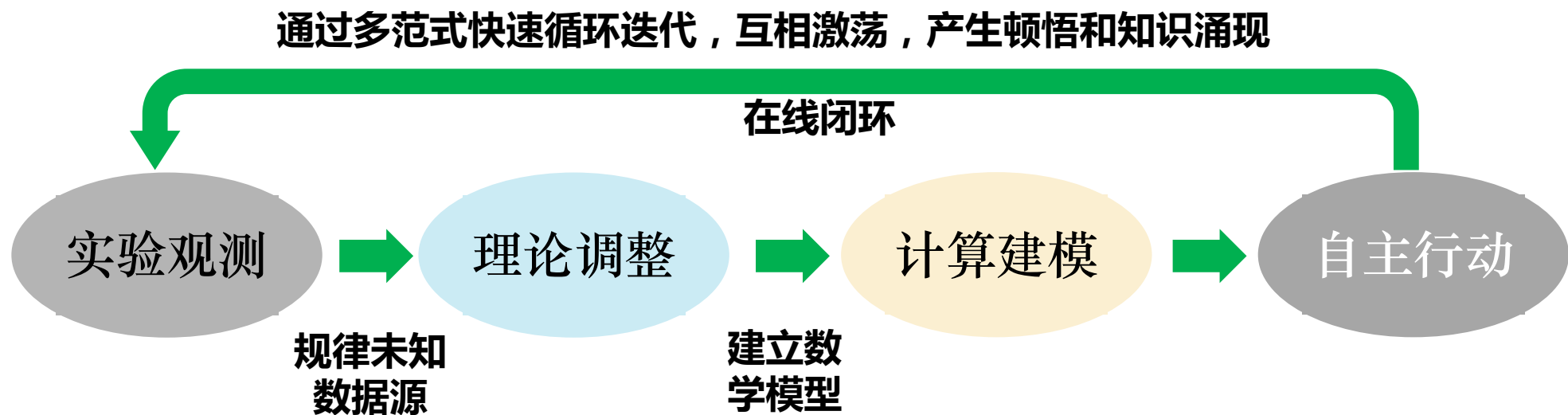
大科学时代的学科交叉正在孕育科学智能的新范式



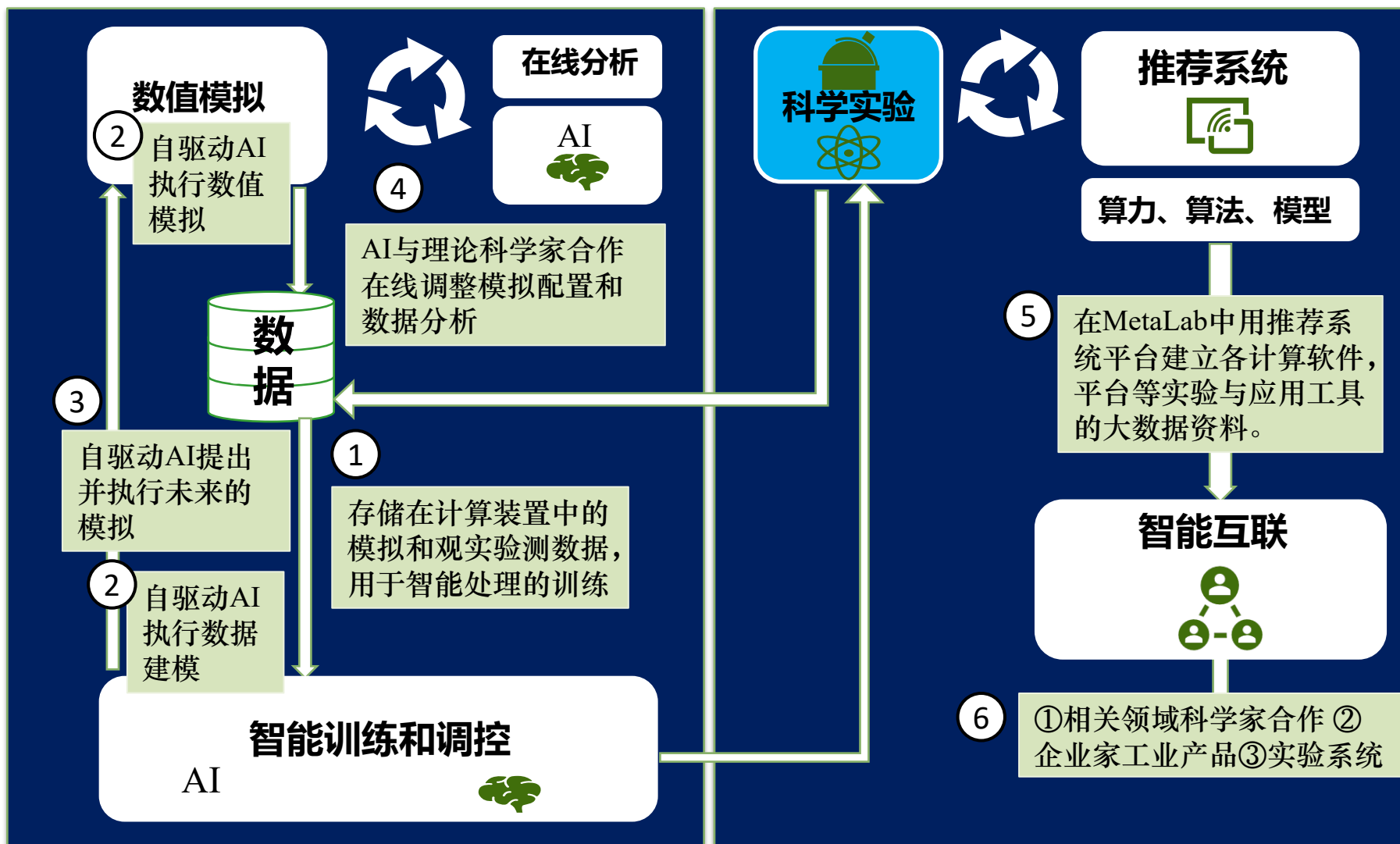
科学智能：利用智能加速模型求解及其建模过程

区别于以计算和数据为中心的科学计算和科学数据方法，科学智能方法以智能为中心：

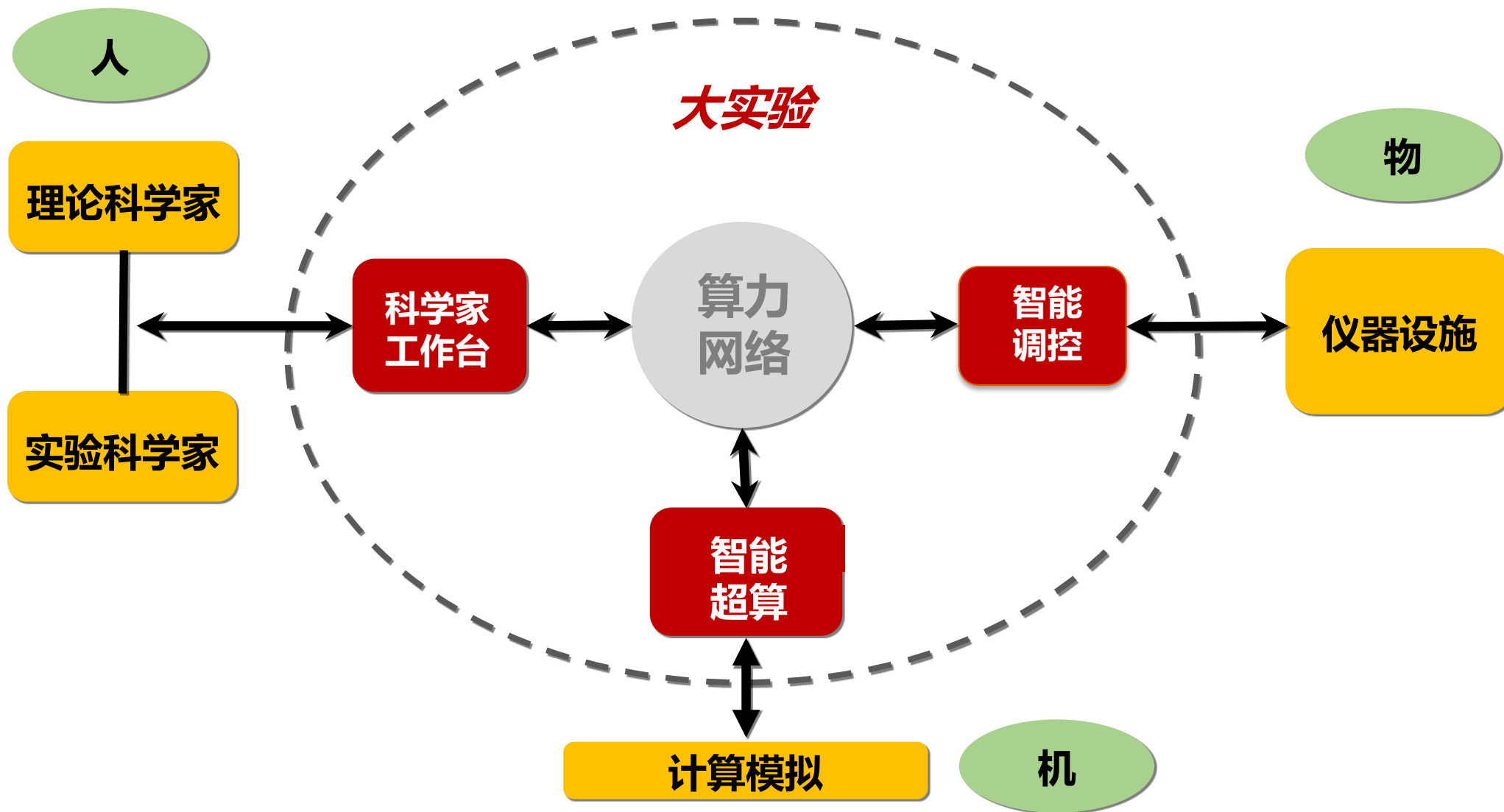
- ① AI降维：利用数百年发展和积累的大量理论知识结合海量数据构建学习模型
- ② AI端到端：科学活动实现从计划、推测、实验、确认和分析过程的智能化



最有潜力实现理论-实验在线迭代而改变“试错”科研模式



新一代科学研究范式试验场



美国在应对最前沿科学问题挑战上积极探索新范式

DOE National Virtual Biotechnology Laboratory (NVBL)

目标

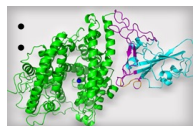
利用科学基础设施包括光源/中子源、纳米科学中心、测序和生物特征设施、高性能计算机的集成联合来应对新冠肺炎威胁的关键挑战

功能

- ① 确立满足紧急生产需求的“**按需供应链**”：国家实验室的材料/制造专业设施及其自动化
- ② 提升**药物发现的速度和鲁棒性**：集成国家实验室的实验和计算设施
- ③ 保护公众健康：新测试协议和仪器**迅速检测**病原体和监控其他生物威胁
- ④ 提供决策的**实时数据分析**：新的人工智能和大数据分析工具

范式

光源/中子源
分子结构



JGI：
基因组测序



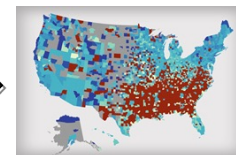
计算建模/模拟



知识发现



传播/物流分析



供应链决策



临床实验

科学智能核心工具和关键技术将是新一轮大国竞争的战略支撑

白宫

美国白宫发布《开拓未来的先进计算生态系统战略计划》提出：应建立可为保持美国在科学、工程、经济和国家安全方面领导地位奠基的未来先进计算生态系统：先进计算是**分布式边缘-云联邦的计算和数据资源**，而不仅仅是集中的计算资源(超级计算机)

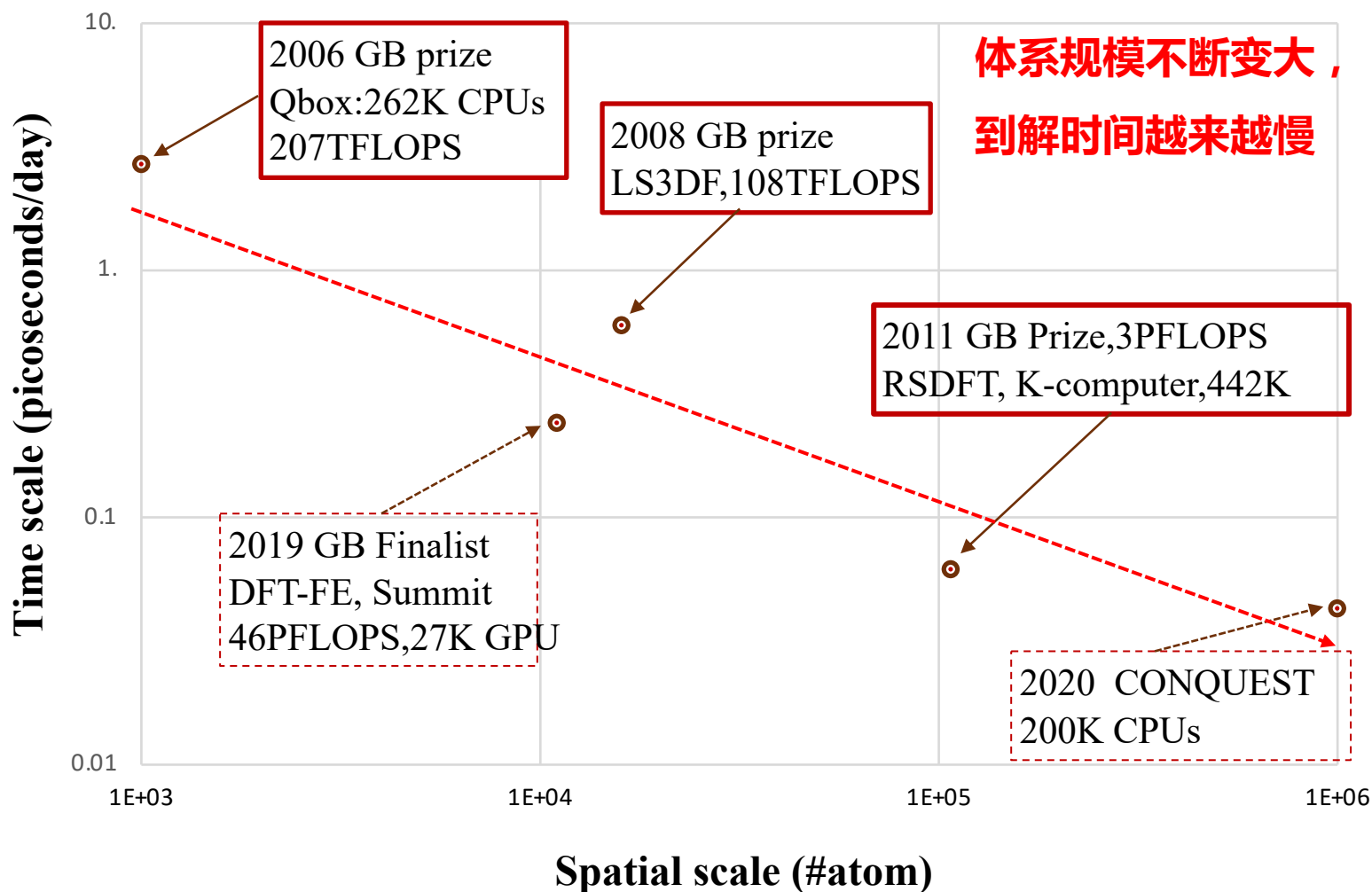
DOE

未来10年超算规划：下一代超算需具备可集成到先进计算生态以**支撑耦合多个大科学设施的自动化工作流的能力**，从而减少从实验和观察到科学洞见的时间

NSF

牵头组织组织美国国土安全部、美国农业部等国家部门和谷歌、亚马逊、英特尔等科技巨头在人工智能技术和基础设施领域基础研究布局，建设 18 个 NSF 国家人工智能研究所，**聚焦人工智能和先进的网络基础设施**，投资总金额超过 3 亿美元

挑战一、计算建模能力如何超越摩尔定律

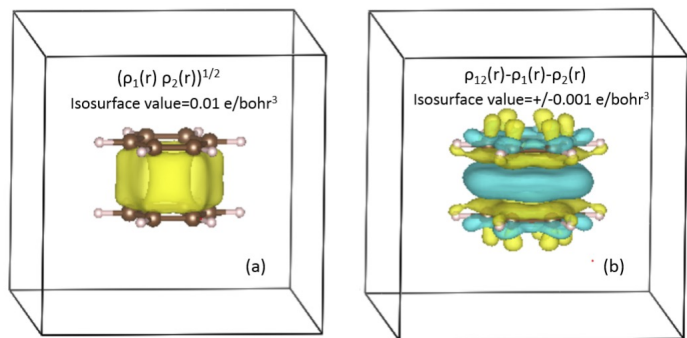


传统超算技术的限制

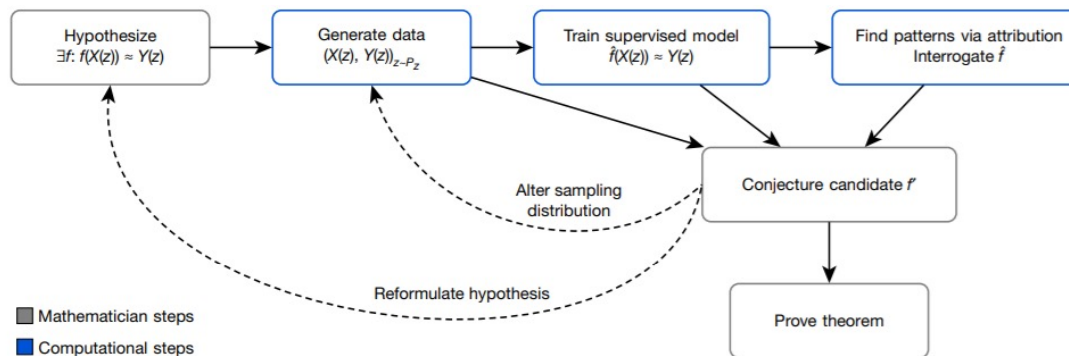
- ① 只能解决体系规模扩展性问题
- ② 硬件规模扩展受限（功耗、空间）

过去15年获得戈登贝尔奖的第一性原理计算的应用

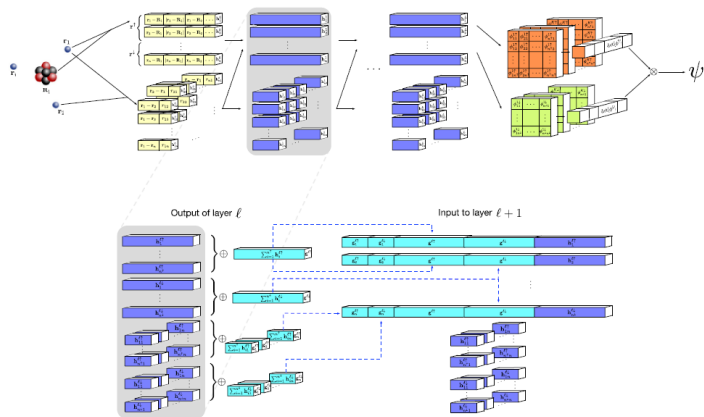
最新进展 (1)



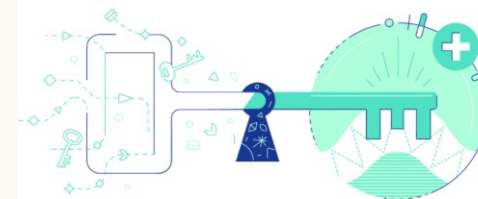
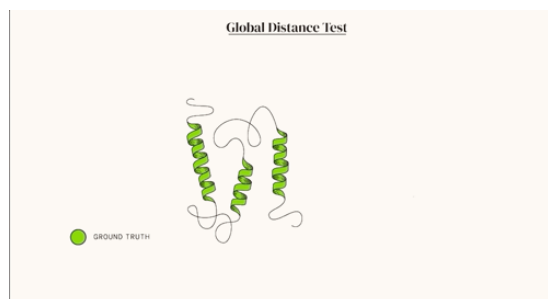
DeePMD: 第一性原理精度分子动力学



AI辅助数学研究 (Nature 2021.12)

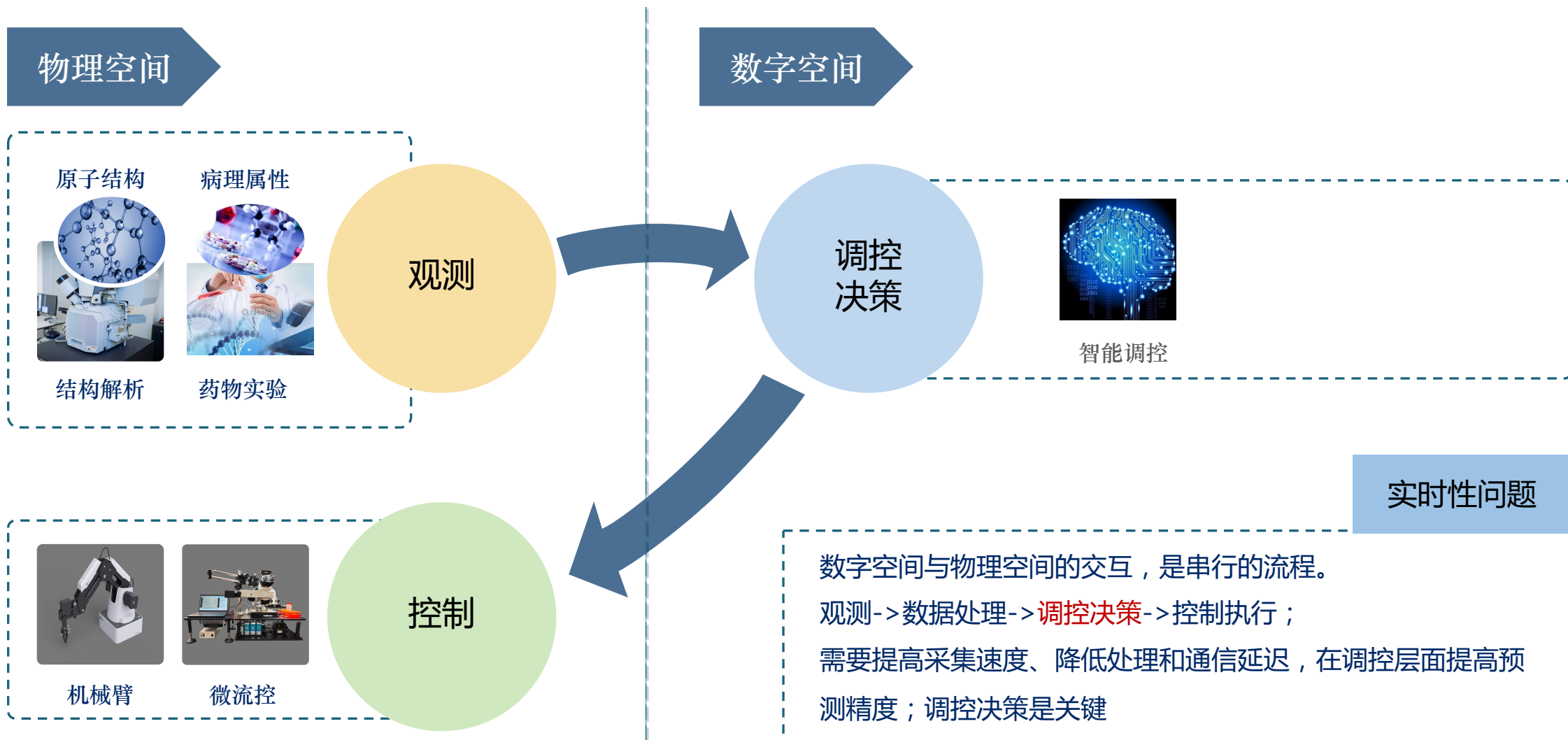


FermiNet: 求解多电子体系Schrödinger方程



AlphaFold2: 基于深度学习的蛋白质折叠预测

挑战二、数字物理空间如何实现实时交融



最新进展 (2)

- ✓ 升级实验室的长期支柱--大科学装置，增强仪器的实时性、分辨率和灵敏度
- ✓ 加速科研发现的端到端的迭代，逼近科学过程的预测和实验之间迭代反馈

【Applications and Techniques for Fast Machine Learning in Science , 2021】

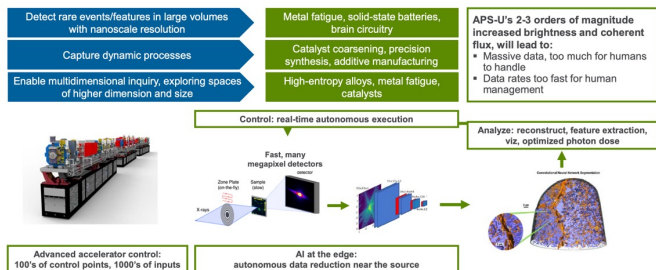
Table 3. Classification of domains and their system requirements with respect to real-time needs.

Domain	Real-time data reduction	Real-time analysis	Closed-loop Control
Detection/Event Reconstruction			
LHC	Yes	Yes	No
Nuclear Physics	Yes	No	No
Dark Matter - Neutrino	Yes	No	No
Image Processing			
Material Synthesis	Yes	Yes	Yes
Scanning Probe Microscopy	Yes		
Electron Microscopy	Yes		
Biomedical Engineering	Yes		
Cosmology	Yes	No	No
Astrophysics	Yes	No	No
Signal Processing			
Gravitational Waves	Yes	No	No
Health Monitoring	Yes	Yes	Yes
Communications	Yes	Yes	Yes
Control Systems			
Accelerator Controls	Yes	Yes	Yes
Plasma Physics	Yes	Yes	Yes

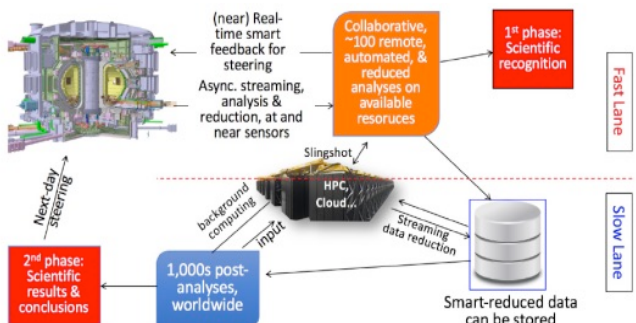
Photon Source

Advanced Photon Source Upgrade

AI can drive the scientific and measurement motifs enabled by APS-U

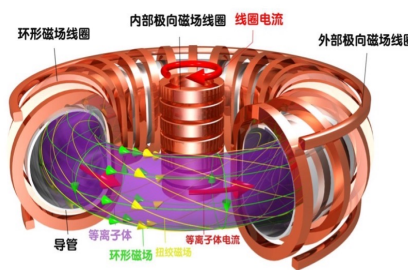


Nuclear Fusion



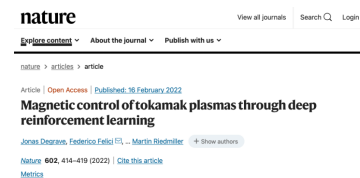
案例

AI控制核聚变反应设计

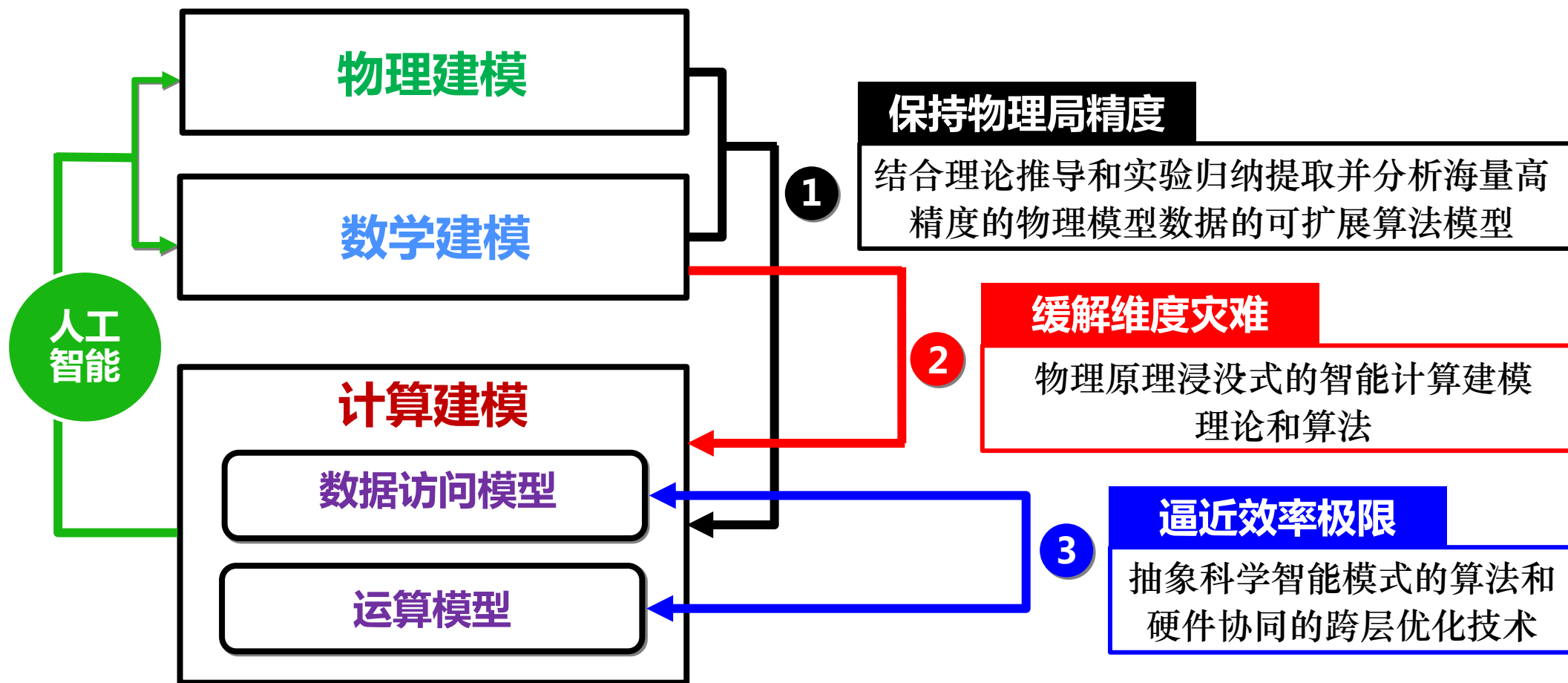


✓ 准确捕获真实装置中存在的所有变量

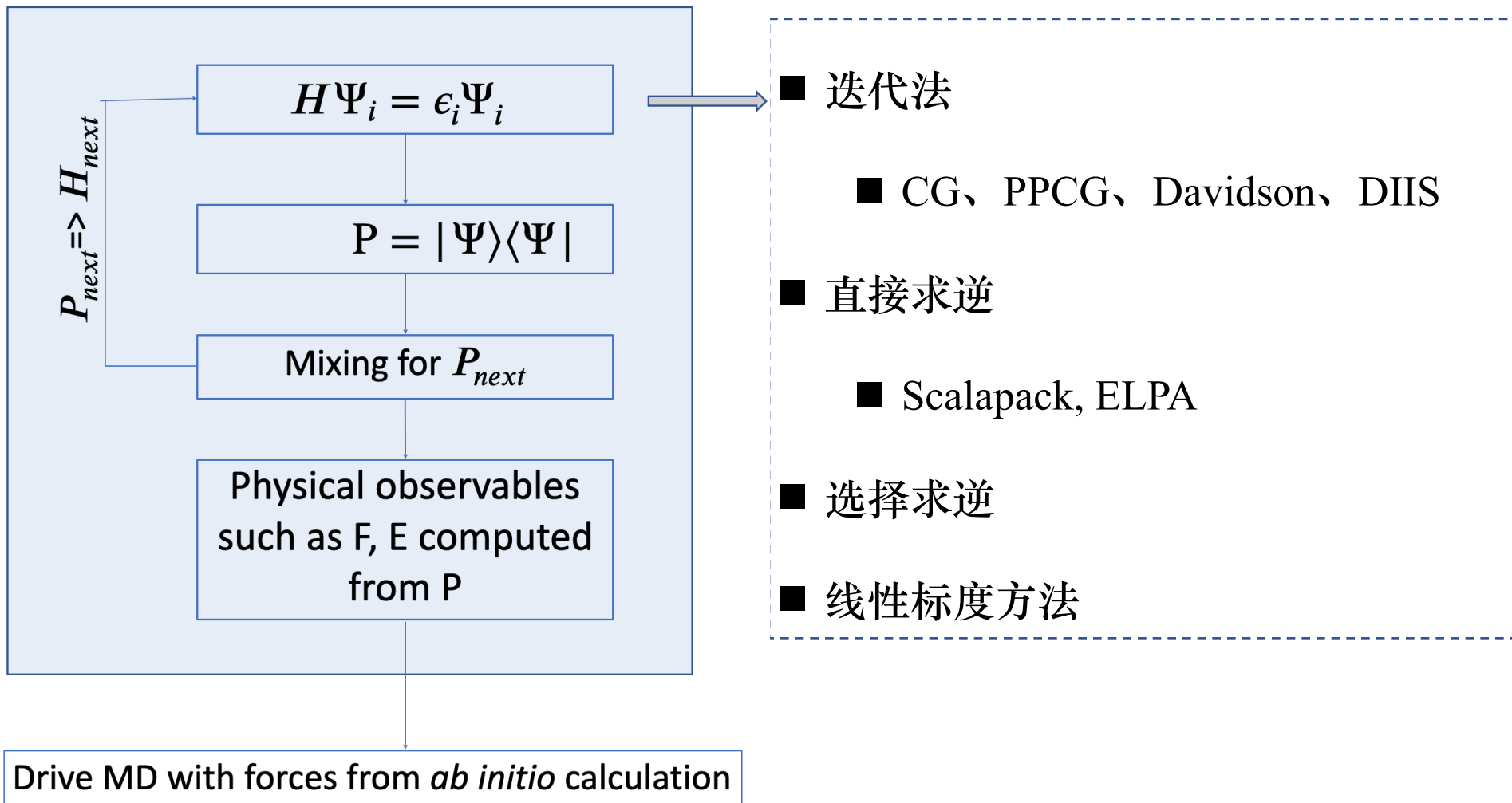
✓ 不到50微秒（5000万分之一秒）时间内做出决定



智能超算的关键问题



传统第一性原理的计算速度为何难以提高？



计算复杂度过高而无法快速暴力求解

$$H\Psi_i = E_i\Psi_i$$
 H是10N-1000N阶的矩阵
 计算复杂度为 $O(N^3)$

100万原子体系

单次解方程代价
 超过 10^{18} FLOPs

计算量

百万原子问题($N=10^6$) :
 单步 ($\sim 1\text{fs}$) 计算量 $O(N^3)$:
 10^{18} FLOPs (E级)
 纳秒 (10^6 fs) 模拟计算量 :
 10^{24} FLOPs (Y级)

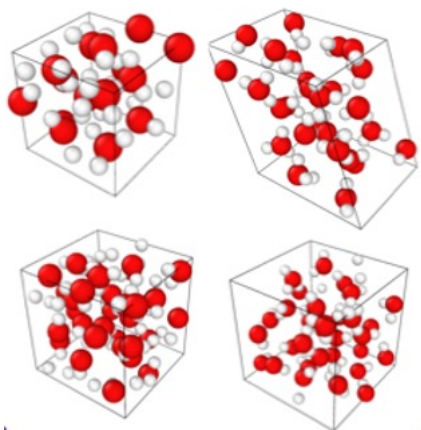
挑战



直接“暴力求解”
 的超算无法完成

基于科学智能的第一性原理分子动力学模拟

保持物理精度

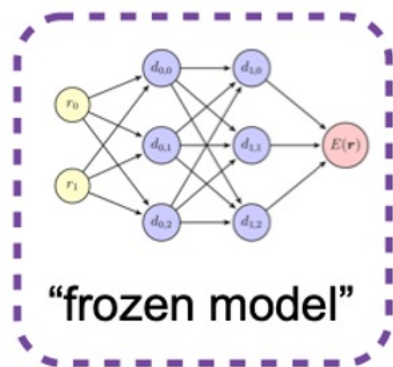


第一性原理计算

海量数据

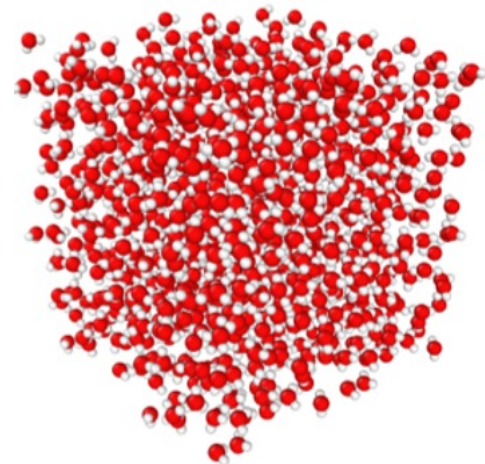
训练

缓解维度灾难



推理

逼近效率极限

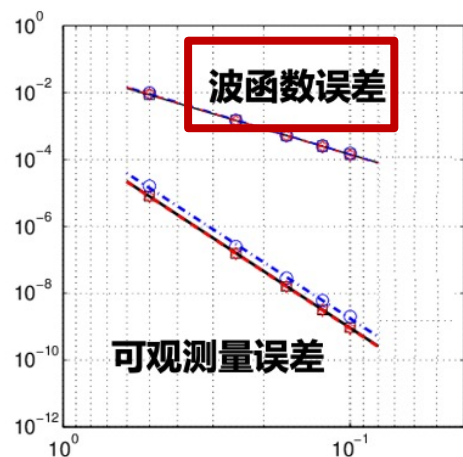


超大规模体系模拟

>100亿原子

1. 快速产生高精度数据的并行混合精度算法

核心技术：混合精度算法



$$E = \langle \Psi | \hat{H}_{QM} + \hat{H}_{QM/MM}^{el} | \Psi \rangle + E_{QM/MM}^{vdw} + E_{MM}$$

变分法的误差精度

波函数误差：O(e)：低精度

可观测量误差：O(e²)：高精度



匹配现代异构平台



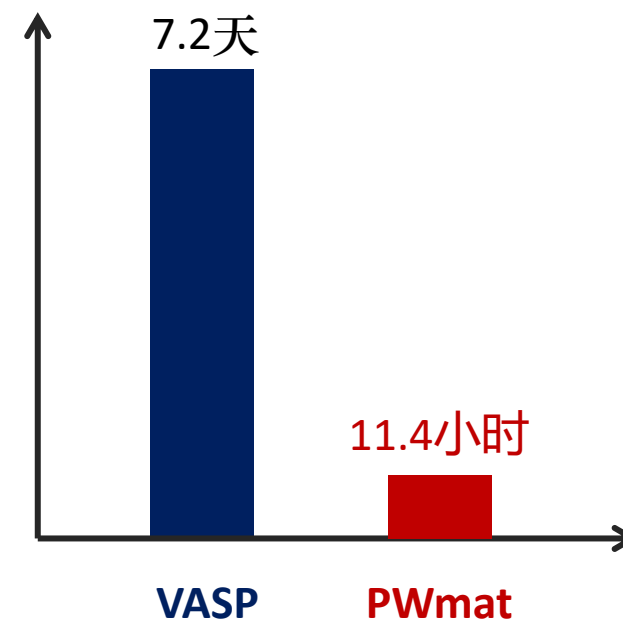
单-双精度混合算法



保证物理模型的关键精度

创新：保物理精度的算法

500原子HSE计算

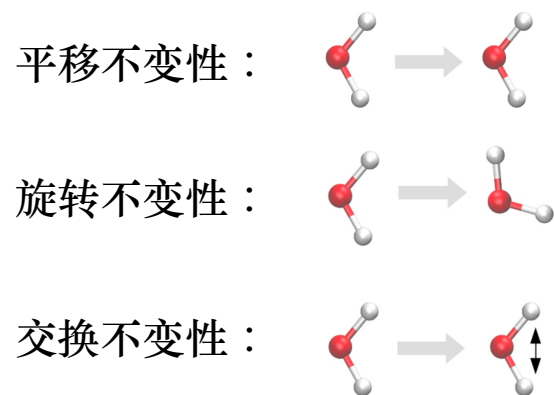


效果：唯一可用的国产DCU平面波软件
速度超越国际同类软件VASP

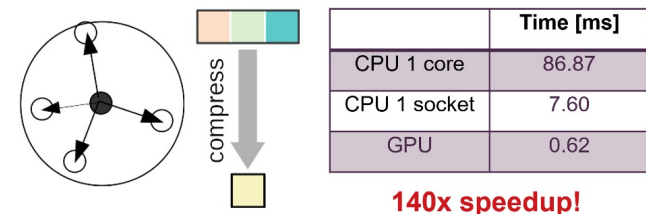
2. 物理原理约束的AI驱动第一性原理分子动力学

核心技术：物理原理约束的混合精度AI模型和压缩技术

关键创新1：物理原理耦合的混合精度AI模型

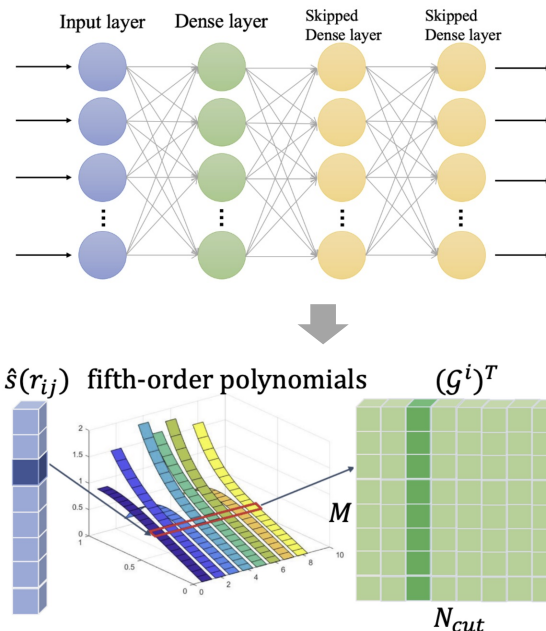


$$D_i = (G_i^<)^T R_i (R_i)^T G_i$$



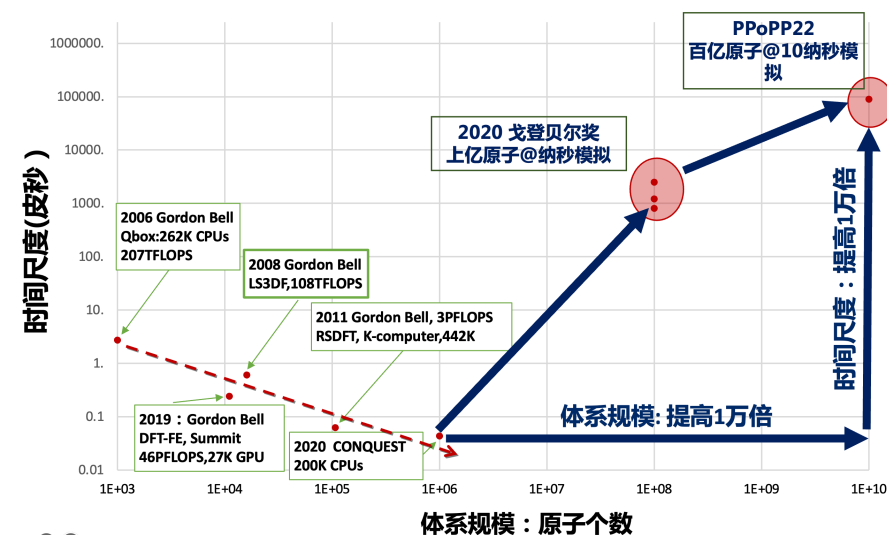
核心数据结构的压缩操作

关键创新2：保证精度的AI模型压缩技术



减少95%的计算量
减少95%内存占用

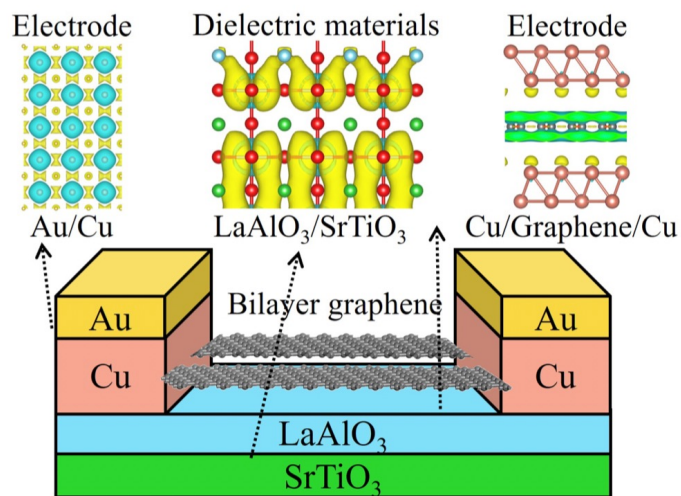
效果：引领性智能科学计算软件DeePMD-kit



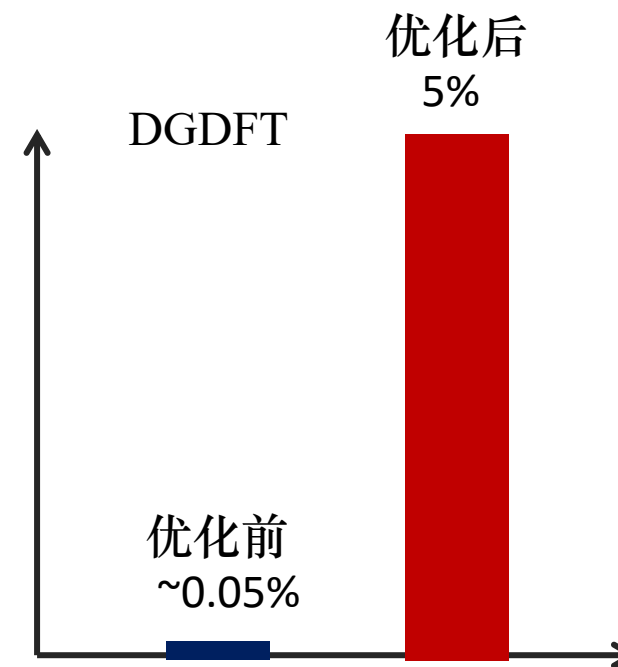
计算速度、体系规模超过国际
同类软件4个数量级

3. 大幅提升众核浮点效率的百万原子的大规模并行计算

核心技术：分块稀疏的矩阵格式匹配现代超算架构：(a)计算合并(b)访存避免(c)间接访存转为直接访存



	0	1	2	3	4	5	6
0	P0	P1	P0	P1	P0	P1	P0
1	P2	P3	P2	P3	P2	P3	P2
2	P0	P1	P0	P1	P0	P1	P0
3	P2	P3	P2	P3	P2	P3	P2
4	P0	P1	P0	P1	P0	P1	P0
5	P2	P3	P2	P3	P2	P3	P2
6	P0	P1	P0	P1	P0	P1	P0

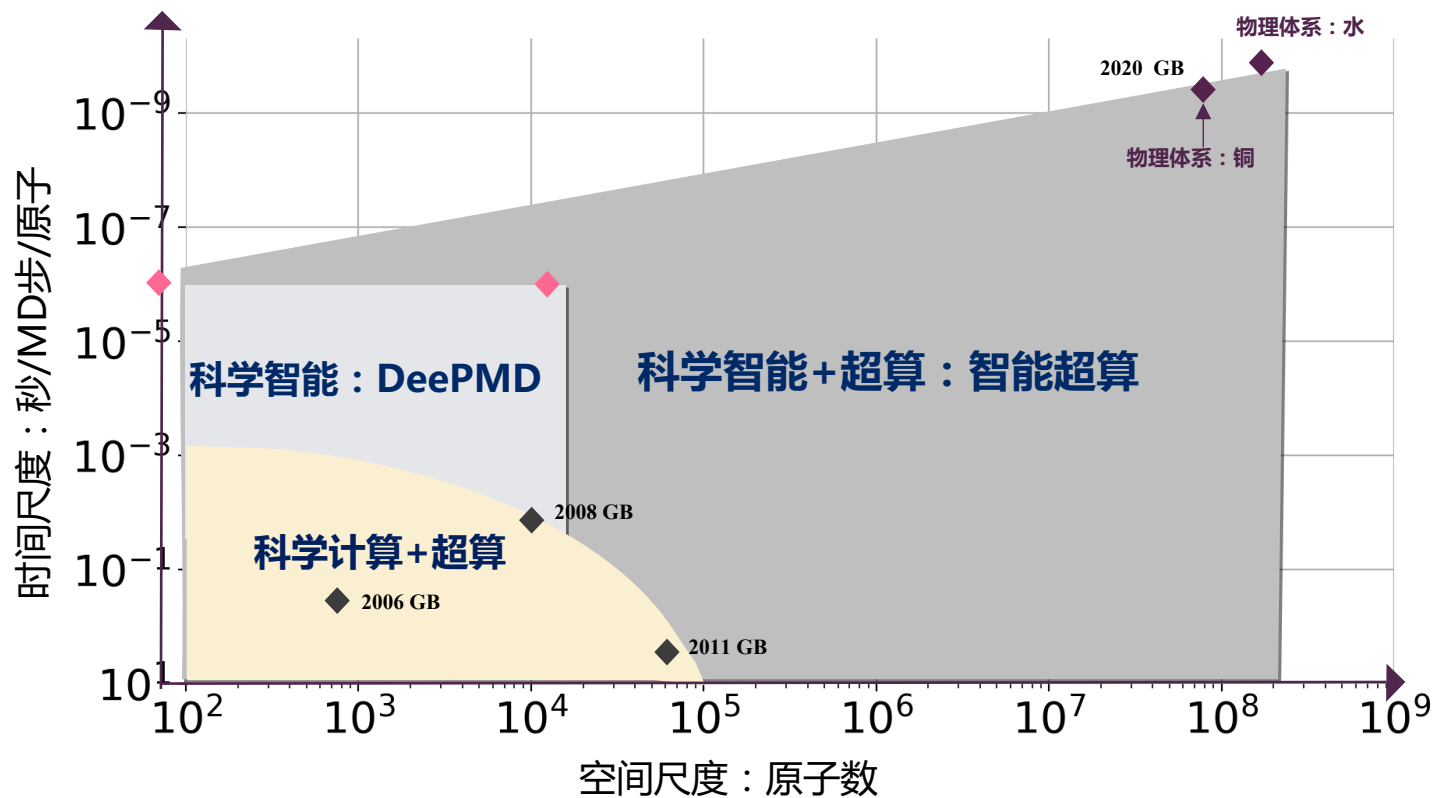


科学问题：从量子力学出发的大规模计算问题，瞄准新器件模拟软件Atomic TCAD，化学催化等

关键创新：分块稀疏的哈密顿矩阵(a)计算合并(b)访存避免(c)间接访存转为直接访存

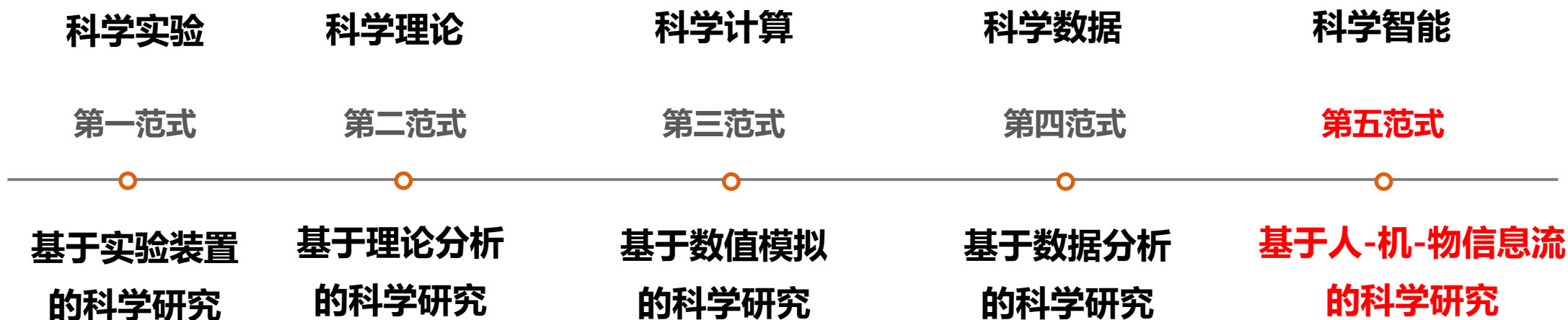
效果：在神威海洋之光上达到64PFLOPS，峰值性能5%，相比同类软件计算尺度提高100倍，等效计算速度提高2054倍。

小结：智能超算对基础科学研究中建模能力的提升潜力巨大

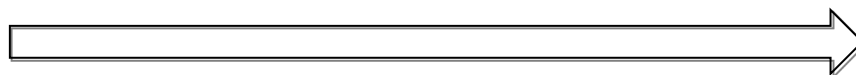


第一性原理分子动力学的时间和空间尺度

科学智能，推动科学研究走向民主

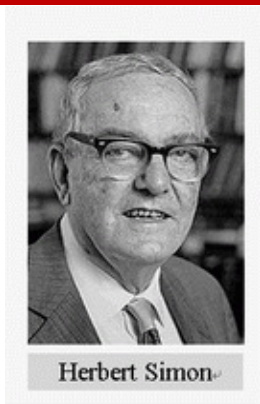


天才的“独裁”



大众的“狂欢”

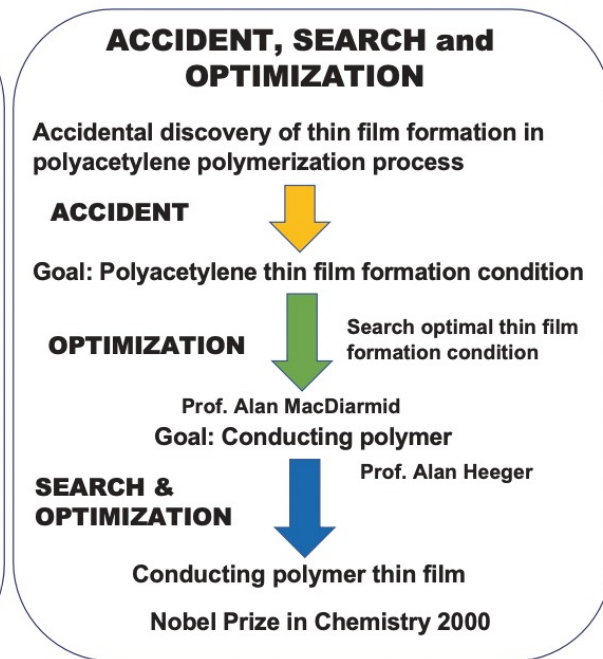
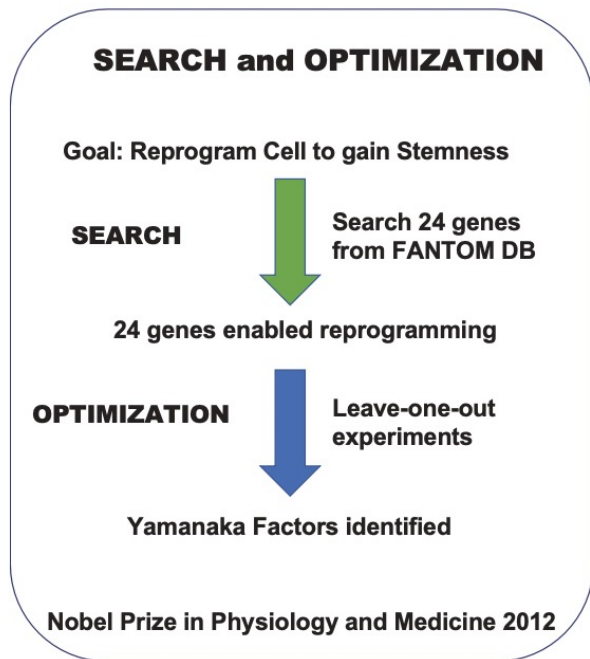
The Scientist as Problem Solver



希尔伯特·西蒙：诺贝尔奖、图灵奖

Scientists set themselves tasks of solving significant scientific problems. Defining the problem and strategy and tactics to solve these problems is the essence of scientific discoveries.

体细胞重编程技术



导电聚合物的发现

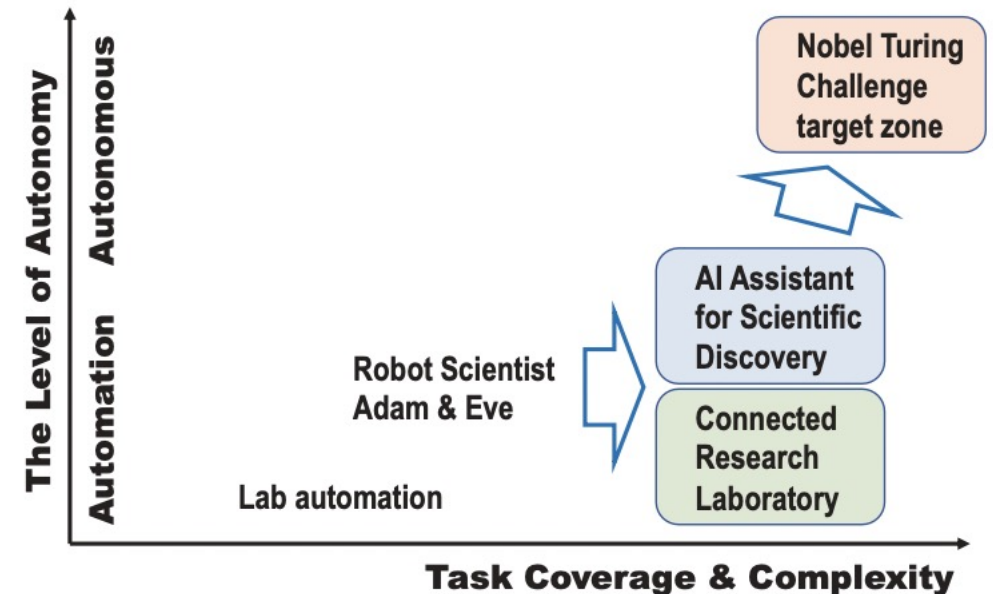
Nobel Turing Challenge

Nobel Turing Challenge

A grand challenge for artificial intelligence that aims at “developing AI Scientists capable of autonomously carrying out research to make major scientific discoveries and win a Nobel Prize by 2050” – Hiroaki Kitano, 2021

- (1) to develop an AI Scientist that performs scientific research highly autonomously enabling scientific discoveries at scale
- (2) to develop an AI Scientist capable of making strategic choices on the topic of research, that can communicate in the form of publications and other means to explain the value, methods, reasoning behind the discovery, and their applications and social implications.

A possible path towards the Nobel Turing Challenge



请批评指正，谢谢！