

一种典型的高性能计算:地球系统模拟^{*}

王 斌[†]

(中国科学院大气物理研究所 大气科学和地球流体力学数值模拟国家重点实验室 北京 100029)

摘 要 文章针对一种典型的高性能计算问题:地球系统模拟问题,简要回顾了地球系统模式发展的国际动态和国内现状,指出了中国在这方面存在的问题,分析了地球系统模式的国家需求,提出了中国地球系统模式发展的未来构想,介绍了地球系统模式中与高性能计算密切相关的关键科学问题和技术问题.通过介绍,作者希望有更多其他领域的科技工作者了解地球系统模式,并参与地球系统模式的发展;同时也希望文章能为中国地球系统模式的发展提供一些有益的帮助和参考.

关键词 大气科学,地球系统模拟,综述,地球系统模式,高性能计算

A typical type of high-performance computation: earth system modeling

WANG Bin[†]

(LASG, Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029, China)

Abstract Focusing on the issues of earth system modeling—a typical type of high-performance computation (HPC)—this paper reviews the developments of earth system modeling (ESM), analyzes the main problems and needs of China in this field, proposes a future design for ESM development in our country, and points out the major scientific and technological issues which are closely related to HPC. It is hoped that, through this review, scientists in other fields will obtain some basic knowledge of ESM, and will take part also in its future developments in China.

Keywords atmospheric science, earth system modeling, review, earth system model, high-performance computation

1 引言

地球系统模拟是基于地球系统中的动力学、物理学、化学和生物学过程,通过数值模拟方法,在高性能计算机上定量地描述大气圈、水圈、冰雪圈、岩石圈和生物圈等的性状、演变规律和它们之间的相互作用,预测地球系统未来演变的规律.地球系统非常复杂,不仅要考虑气候系统中各圈层之间的相互作用,还要考虑气候系统与生态环境系统、固体地球过程和近地空间环境之间的相互作用,因此,地球系统模拟是定量研究自然变化和人类活动影响,寻求解决一系列重大资源、环境与灾害问题(包括全球变化与区域响应问题)的不可或缺的重要途径,其作用是物理学、化学、生物学实验室的研究方法无法实现和替代的.地球系统模式是实现地球系统模拟的科学工具,它为地球系统科学中诸多分支学科相互融

合和交叉提供了有利的试验平台,是地球系统科学发展进程中的一个里程碑,其发展水平及模拟能力的高低已成为衡量一个国家地学综合水平的重要标志.地球系统模式涉及的学科领域非常广泛,不仅涵盖地球科学各领域,而且与计算科学密切相关.可以说,在现阶段,一个国家地球系统模式的有无及模拟性能的好坏,不仅仅是反映该国的当前地球科学研究能力,而且在一定程度上还体现了该国综合科学技术水平的高低^[1].

地球系统模式的核心部分是气候系统模式,气候系统模式已经成为研究气候变化的规律和机理,

^{*} 国家重点基础研究发展计划(批准号:2005CB321703)、国家自然科学基金(批准号:40821092)资助项目

2009-07-08 收到初稿,2009-07-15 收到修改稿

[†] Email: wab@lasg.iap.ac.cn

重现过去的气候变化,预测和预估未来气候变化的重要工具,也是近 20 多年来各国政府和科学家十分关注和重视的一个前沿课题.随着人们对气候系统认识的深入以及计算机技术的飞速发展,气候系统模式取得了长足的进步,从 20 多年前最基本的气候模式——大气环流模式^[2]和大洋环流模式^[3]开始,经历海—气^[4]、海—陆—气^[5]以及海—陆—气—冰^[6-9]耦合的物理气候系统模式的发展过程后,今天已经朝着同时考虑物理过程、生物地球化学过程以及固体地球和近地空间环境、人类活动影响等复杂过程的地球系统模式的方向发展.

地球系统非常复杂,要了解地球系统的演变规律,除了理论与观测实验是非常重要的基础外,数值模拟是全面、系统地研究地球系统中各种物理过程、化学过程和生物过程及其复杂相互作用的必不可少的手段.

尽管地球系统模式是未来发展的必然趋势,但到目前为止,物理气候系统模式的改进与完善仍然是各国科学家关注和工作的重心,因为这是地球系统模式的核心模块,而且还存在很多问题有待解决.例如对赤道辐合带降水的模拟,全世界大多数耦合气候系统模式都存在较大的偏差,其中虚假双赤道辐合带现象是一直没有得到很好解决的问题,其主要原因是产生这一现象的机理尚不清楚,对耦合模式系统不确定性的理解还远不够深入.因此,全面评估和理解现有的物理气候系统模式,并针对具体的科学问题深入研究模式物理过程,发展更加合理的参数化方案,不断改进和完善模式的综合性能,是地球系统模式发展的重要基础和必要前提.

为了进行地球系统模拟,往往需要将地球系统模式积分几十年、几百年乃至上千年.为了保障模式在数值模拟过程中的计算稳定性和准确性,所能选取的时间步长是较小的.针对不同的问题和不同的分辨率,其时间步长可能是几分钟,也可能是半小时或 1 小时,其计算步数一般是非常多的.此外,为了保证计算的精度,模式的分辨率又不能太低,针对不同的研究对象,可取的空间网格距可能是几公里、几十公里或几百公里,其计算量是十分巨大的.因此,除了逐步解决模式自身存在的关键物理问题以及飞速发展的计算机硬件技术以外,开展经济有效的数值方法研究也将是为我们排忧解难的一种不可忽视的途径.

近十年来,我国计算机技术取得了长足的发展,其计算能力已进入世界先进水平的行列.但相比之

下,地球系统模式发展步伐则相对迟缓,其性能与发达国家相比仍有相当大的差距.如何充分发挥现有计算机系统的效率,提高我国气候数值模拟水平,是摆在我们面前的挑战性问题.

地球系统模拟属于典型的高性能科学计算问题,它不仅需要提出越来越合理的物理学、化学和生物学参数化方案(属于物理建模中的一部分),发展越来越好的地球系统模式,而且要求有越来越大、越来越快的高性能计算机,要求越来越有效、越来越省时的数值方法(包括高效数值并行计算方案),还需要发展具有自己知识产权的高效支撑软件平台.在地球系统模式的物理过程参数化、数值方法和支撑软件平台的研发方面,我国科学家已经做了大量工作,但相比之下,相当多的工作主要集中在模式的数值方法研究方面,并取得了一些独具特色的成果,而在物理过程参数化、生物地球化学过程研究以及支撑软件平台方面的研究工作却非常少,一直是我国气候系统模式发展中最薄弱的环节.要想真正使中国的气候系统模式有长足的发展,就必须解决上述薄弱环节问题,必须致力于适合东亚区域物理过程参数化方案和生物地球化学过程的研究以及具有自主知识产权的高效支撑软件平台的开发.中国地球系统模式的发展,尤其需要先打好物理气候系统模式这一重要基础,这是决定中国地球系统模式前途的关键因素.

2 地球系统模式发展的国际动态

地球系统模式的雏形——耦合气候系统模式的发展是世界气候研究计划(WCRP)的重要基础和中心议题,其四大重要子计划之一——“气候变率与可预报性研究”(CLIVAR)的主要任务就是基于耦合气候系统模式,从季节、年际和年代际时间尺度上描述、模拟和预测全球气候变率及全球变化问题.为此,WCRP 联合科学委员会(JSC)和 CLIVAR 科学指导小组(SSG)联合建立了耦合模拟工作组(WGCM),其目的一方面是评估和支持耦合气候系统模式的发展,包括模式比较计划的组织(如耦合模式比较计划 CMIP),这是模式验证和缺陷诊断的基础;另一方面则是促进耦合模式的协同研究与试验,以获取更可信的气候系统对自然因子和人类活动的响应的预测.另外,全球变化四大核心研究计划:世界气候研究计划(WCRP)、国际地圈—生物圈计划(IGBP)、国际全球环境变化人文因素计划(IHDP)和生物多样性计划(DIVERSITAS)还于 2001 年组

成地球科学联盟(ESSP),以期通过多学科的交叉,研制地球系统模式(ESM).由此可见,国际上对耦合地球系统模式发展高度重视.

值得一提的是,以美国、欧洲和日本为代表的发达国家和地区在气候系统模式的发展方面投入了大量的人力和财力,并提出了围绕气候系统模式发展的各种研究计划.如美国国家大气研究中心(NCAR)在美国国家海洋和大气局、能源部、国家航空航天局等单位支持下,于2000年提出“共同体气候系统模式发展计划(CCSM)”(2001—2005)(详见<http://www.cesm.ucar.edu/>),美国各主要大学和研究单位的科学家都参加了共同体,美国国家科学基金会资助该项研究.为实施计划,建立了完整的管理机构和研究实体.该计划的具体目标是:尽可能地使用最好的气候系统各分量模式,并在一个灵活和协调的框架内实现耦合,从而发展出一个具有当代科学技术水平的气候模式;使共同体的科学家方便容易地参与模式发展,并使用模式或模式输出的资料,进行气候变率和全球变化的高水平科学研究;为国家(国内和国际政策)决策提供科学依据.与该计划有关的近两届工作年会均有200多人参加,可见其规模.尤其值得一提的是,美国在国家航空航天局、国防部和科学基金会的共同资助下,于2001年同时启动了“地球系统模拟框架(ESMF)”(详见<http://www.esmf.ucar.edu/>),有19个实力雄厚的研究机构投入到了这个计划的研究与实施中.

欧洲各国提出发展“欧洲地球系统模拟网络(ENES)”下属的“地球系统模拟集成(PRISM)”和“气候资料存储与分发”两个计划.PRISM(详见<http://www.prism.enes.org/>)是2000年向欧盟提出的,并于2001年12月启动.来自欧洲各国的22个研究机构投入了该计划的研究和实施.计划的目标是建立一个方便使用的高效的欧洲全球气候模拟系统和超级计算机设备(5—10万亿次).计划的一个特色是选用10个优秀的耦合气候模式进行集成模拟研究.

日本在科学技术厅、日本原子能研究所、日本国家空间发展署、日本海洋科学技术中心、物理化学研究所等单位支持下提出了两大气候研究计划.一是从1997年开始的“全球变化前沿研究系统(FRS-GC)”计划(详见<http://www.jamstec.go.jp/frgc/eng/>),目标是预测异常气候、全球变暖和生态破坏等灾害.与上述计划同步启动的是“地球模拟器(Earth Simulator)”计划(详见<http://www.jamstec.go.jp/es/en/index.html>),该计划一方面

于2001年研制成功当时世界上最快的、以“地球模拟器”命名的超级计算机系统,2002年正式投入使用;另一方面重点支持发展超高分辨率的气候系统模式,在该超级计算机上再现真实的地球并预测未来的变化.

3个有代表性的地球系统模式研究计划有几个共同的特点特别值得注意.首先,它们都十分重视发展一个可持续发展的地球系统模式总体体系结构的技术平台.该技术平台在上述计划的实施中起着十分重要的纽带作用,它是凝聚多个研究单位、多个研究人员共同为一个地球系统模式框架做贡献的枢纽.这正是这些研究计划的先进性所在.这样的技术平台的发展包括了最底层的支撑软件系统的发展以及总体算法的研究.在这种底层的技术平台支持下,地球科学不同领域的科学家可以针对不同的科学问题开展研究,对模式框架的发展起着重要的推动作用.其次,这些计划都是一种国家行为或地区性行为,有一个专门的机构来协调和组织计划的实施,有着持久、稳定的经费支持,并且有很多相关的研究机构或专家利用上述公共技术平台共同参与协作,这就有效地保障了对这些研究计划的人力和财力资源的投入,而且科学家们在这个公共平台上能够自由发挥自己的特长来对研究计划做贡献.另外,这些计划都把观测系统及其处理技术(资料同化)作为地球系统模拟的一个有机整体,并在公共技术平台的底层软件支持系统中考虑了资料的存贮、传输和共享等技术,使得参与计划的科学家们能够有效地获取相关的观测资料,这无疑对模式的发展非常有利.尤其重要的是,通过结合模式与观测对地球系统中重要物理过程、生物地球化学过程等作深入的研究,可以增加对这些过程的认识,从而达到改进模式、减少模式不确定性的目的.

由此可见,美国、欧洲和日本等发达国家和地区的科学家均致力于发展气候系统模式,其投资之巨,计算机之巨都是空前的.之所以这样,是因为他们充分认识到了发展气候系统模式的重要性.

3 我国地球系统模式的发展现状及问题

我国通过20多年的努力,在气候系统模式的发展与应用方面取得了可喜的成绩,譬如说,中国科学院大气物理研究所(IAP)大气科学和地球流体力学数值模拟国家重点实验室(LASG)的科学家已经在

20年的工作积累基础上,于2004年完成了第四代气候系统模式(见图1),即灵活性全球海—气—陆系统模式(FGOALS)及其大气、海洋分量模式,大气分量模式包括LASG/IAP格点大气模式(GAMIL)和LASG/IAP谱大气模式(SAMIL),其中,FGOALS和GAMIL分别参加了耦合模式比较计划(CMIP),大气模式比较计划(AMIP),季节预报模式比较计划(SMIP),CLIVAR 20世纪气候模拟计划(C20C)和古气候模拟比较计划(PMIP)等一系列国际模式比较实验,还参加了政府间气候变化委员会(IPCC)第四次评估报告(AR4)的气候变化模拟与预测实验。另外,气候系统模式的发展已越来越得到国家和部门的重视与支持,如在国家自然科学基金委员会(以下简称国家基金委)的支持和倡导下,我们于2002年协助国家基金委提出了加速发展中国气候系统模式的研究计划,并通过简报内参的形式上报到了国务院,得到国家领导人的重视。后来,我们在发展气候系统模式的过程中,得到国家创新研究群体科学基金、中国科学院创新团队基金,国家基金委重点基金以及国家重点基础研究发展计划等的大力资助,这是我国气候系统模式能够取得新的进展的重要保障。

战和低风险重复等问题,但到目前为止,这些现象并没有被消除,严重阻碍我国地球系统模式的发展。其次,对公共技术平台的不重视以及科学家与工程师有机结合的缺乏是阻碍我国气候系统模式发展的一个瓶颈。没有一个公共的技术平台,不同的单位和不同的个人就无法围绕一个共同的计划发挥自己的优势。没有软件工程师的支撑和合作,科学家必须花费大量精力去实现程序的规范、模式的并行和资料的共享等。由于缺乏统一的体系结构,各种模式的软件实现是形式多样,规范性差,最终严重影响着耦合和集成,影响总体进展。高效算法的研究也是地球系统模式发展的重要保障。国内地学领域不少专家对算法的重要性没有足够的认识,认为只要计算机速度提高了就什么问题都解决了。其实这是一种误解,如果对现有高性能超级计算机的特点有所了解,就容易知道,即使提供一台峰值速度高达百万或千万亿次的计算机系统,没有高效算法的实现,也无法发挥出这台计算机的效率,甚至用不到它的千分之一或万分之一。另外,模式分辨率的提高会带来很多计算稳定性问题,这些绝不可能依靠计算机性能的提高而得到解决。因此,重视和加强对公共技术平台和高效算法的研究和建设是未来地球系统模式可持续发展的重要保障。目前,我国由于在这方面非常薄弱,引进公共技术平台(如耦合器等)成为现阶段的主要手段,但这只能是一种过度形式,以后必须致力于发展自己的公共技术平台,否则我们将在这方面永远落后于发达国家,因为他们释放的平台不可能是他们最新的平台。而且,一旦发生战争或其他争端,这些技术都很可能被封锁。这是值得我们高度重视的问题。第三个主要障碍就是观测资料的封锁,这是导致我国模式物理过程和生物地球化学过程研究十分落后的根源,这也是为什么我们的模式物理过程模块、生物地球化学模块都是从国外引进的缘故。这一问题的解决,依赖于大家法律意识的增强,领导的重视与关注,以及相关政策和法律手段的制约。一旦这一问题得到解决,我国将在模式物理过程以及生物地球化学过程的研究方面得到突破性的发展。这是我国未来地球系统模式发展的重要基础。

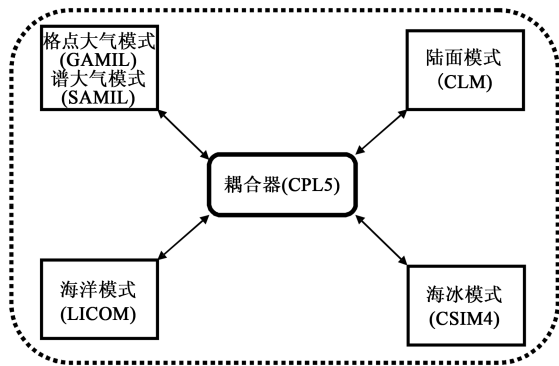


图1 LASG第四代气候系统模式(FGOALS)的结构示意图

然而,在看到成绩的同时,也看到了我们的严重不足。从总体实力和研究水平上讲,我国的气候系统模式与发达国家相比仍然存在相当大的差距,尤其是在物理过程和生物地球化学过程的研究方面以及可持续发展能力上差别更加显著,而且令人担忧的是,这种差距不仅没有通过我们的努力而得到缓解,反而有加大的趋势。究其原因,主要有如下几个方面:首先,国家没有一个有效的机构和机制来协调国内的主要相关研究单位或部门来共同发展我国的气候系统模式和未来的地球系统模式。尽管多年前就注意到中国在发展气候系统模式方面严重存在小作坊、各自为

4 地球系统模式的国家需求

进入新世纪,我国也进入全面推进小康社会建设,到本世纪中叶,基本实现现代化的新的发展阶段。为实现国家这个伟大的战略发展目标,我国既要保持经济快速和持续的增长,又要保障国家安全,维

护祖国统一. 因而无论从经济发展还是从国家安全的角度, 都向天气、气候研究提出更严峻的挑战:

我国每年由气象灾害引起的直接经济损失约在600—1800 亿之间, 但遗憾的是目前天气预报和短期气候预测的水平还比较低. 能否做出更准确的预报和预测以满足国家防灾减灾决策的需要?

为能给出更准确的各种时间尺度的天气、气候预测, 满足国家经济发展与国家安全短期和长期决策的需要, 当前全球变化研究的一个重要的战略部署就是加速发展耦合各圈层的气候系统模式, 这正是地球系统模式初始阶段. 地球系统模式的研究, 不仅可为国家的可持续发展提供具有实际意义的预测和参考依据, 而且对国家的军事部署和作战计划也有很重要的参考价值.

5 我国地球系统模式的未来构想

未来构想: 在5—15年内建成包括大气圈、水圈、岩石圈, 冰雪圈、生物圈、人文圈等主要子系统在内的标准化、模块化、并行化的地球系统模式, 并应用于我国的业务预报/预测、有关全球变化和东亚区域气候中关键科学问题的研究以及国家军事保障.

战略重点: (1) 近5年内把工作重心放在物理气候系统模式的改进与完善, 致力于模式物理过程(尤其是东亚区域的物理过程)的研究及其相应参数化方案的提出, 重视区域耦合气候系统模式的发展及其与全球气候系统模式的嵌套; (2) 在5—10年内, 完成生态环境系统模式(包括陆地与海洋生物化学循环模式、气溶胶与大气化学模式)的研制; (3) 在5—10年内, 完成社会经济决策模型的研制, 并实现物理气候系统模式、生态环境系统模式和社会经济决策模式的耦合, 建成我国的地球系统模式; (4) 在更远的未来, 在地球系统模式中, 考虑固体地球过程和近地空间环境的影响; (5) 重视加强地球系统模式公用高性能计算技术平台的自主研发能力; (6) 加强交叉学科领域专家间的精诚合作与有机结合; (7) 加强科学的管理, 尤其是要打破观测资料的封锁. 中国地球系统模式的光明前途不仅需要模式研究人员的艰辛努力, 也需要交叉学科领域专家的参与和支持, 更需要国家层面的协调与管理.

6 地球系统模拟中与高性能计算密切相关的科学技术问题

由于影响全球和东亚气候的季节、年际和年代际变化的物理因素非常复杂, 尤其是对东亚气候变化规律的掌握和理解, 还远远达不到科学上令人信服的程度. 东亚地区地形和周边海陆分布非常复杂, 有着特殊的地理条件和气候特征(季风), 给利用气候系统模式对东亚气候进行模拟、研究和预测带来了极大的困难, 对模式系统本身提出了更高的要求. 目前国内外通用的各种气候模式, 对东亚气候的模拟和预测能力都还非常有限^[10,11], 尤其是国外的模式, 它们不可能把东亚区域作为重点研究对象, 更不会去仔细考虑东亚区域的复杂物理过程和生物地球化学过程, 因此简单地引进使用国外模式来研究和预测东亚气候显然不是长久之计.

要改进气候系统模式对东亚, 尤其是对我国气候的模拟和预测能力, 就必须深入研究东亚区域的各种复杂的物理过程和生物地球化学过程, 发展适合于东亚区域的地球系统模式. 这样的重任责无旁贷地落到了我国科学家自己的肩上, 而且是迫在眉睫. 而发展我国自己的地球系统模式, 除了需要解决与大气、海洋、生态等地学和生物学相关的关键科学问题外, 还需要解决如下与高性能计算密切相关的科学问题和技术问题:

科学问题有: (1) 地球系统中各子系统之间的界面如何衔接是地球系统模式发展中需要解决的一个重要科学问题, 因为这是模式模拟诸如海气、陆气相互作用等重要过程的关键环节. 该问题的解决需要我们在正确理解各子系统之间相互作用的动力、物理和生物地球化学机理的基础上提出适定的边界条件, 并设计与之匹配的高性能数值求解方案, 使之具有物理上合理性和计算上的适定性. (2) 极地(指南极和北极)从数学上讲是地球流体力学方程的(可去)奇异点, 一直严重影响地球系统模式的稳定性和计算精度, 阻碍业务天气、气候预测水平的提高, 因此, 如何解决极地区的计算稳定性问题是地球系统模式发展中的又一个重要科学问题, 这需要我们探索新的有效数值求解方法来缓解甚至解决这一问题. (3) 地球系统是一个典型的多尺度系统, 既包含有快速传播的声波和重力波, 也包含有慢到一年、十年、百年、千年甚至万年出现一次的振荡, 如何正确地模拟和描述这些尺度不一的运动是地球系统模式发展需要解决的重要科学问题.

技术问题有: (1) 地球系统模式的各分量模式, 包括全球大气环流模式、全球海洋环流模式、全球陆面过程模式和全球海冰模式等, 均通过“串行模式并

行化”的传统技术途径来实现其并行计算,它们只能发挥数十至数百个处理器核峰值性能的几个百分点(包括并行效率、浮点计算效率),模块化程度较低,较难通过传统的技术改造直接扩展到数千至数万个处理器核.在当前的高性能计算机上,这些缺陷已经越来越明显,因此,如何在百万至千万亿次高性能计算机上使用数千至数万个处理器核来运行地球系统模式的各分量模式是当前亟待解决的一个重大技术问题.(2)地球系统模式是一个插拔式的模块化耦合系统,通过一个耦合器把各个子系统联系起来,地球系统模式的结构有点类似微机,耦合器扮演的角色就类似于微机中的主板,而对应各子系统的分量模式就类似于微机主板上的插件.因此,耦合器是地球模拟中最底层的软件平台.由于我们以往都是引进国外的耦合器,没有自己发展耦合器的经验和能力,所以,如何设计合理的体系结构来建成有自主知识产权的耦合器就成为发展我国地球系统模式急需解决的又一个重大技术问题.引进只是权宜之计,是在目前尚无能力开发这一技术的情况下不得已而采取的办法.引进不是目的,而只是途径,是通过引进来提高我国在这方面的能力,决不是永远引进.而技术

问题的解决主要不应该依靠模式专家,而应该依靠高性能计算科学家,应该通过他们与模式专家的精诚合作来解决这一关键技术问题.

参考文献

[1] 王斌,周天军,俞永强等. 气象学报,2009,66:857 [Wang B, Zhou T J, Yu Y Q *et al.* Acta Meteorologica Sinica, 2009, 66:857 (in Chinese)]
 [2] Zeng Q C, Zhang X H, Liang X Z *et al.* Documentation of IAP two-level atmospheric general circulation model. TR044: DOE/ER/60314-H1, 1989
 [3] Zhang X, Liang X. Adv. Atmos. Sci., 1989, 6: 43
 [4] Zhang X H, Bao N, Yu R C *et al.* Chinese J. Atmos. Sci., 1992, 16(2): 129
 [5] Guo Y, Yu Y, Chen K *et al.* Theor. and Appl. Climatol., 1996, 55: 99
 [6] 吴国雄,张学洪,刘辉等. 应用气象学报, 1997, 8(增刊): 15 [Wu G X, Zhang X H, Liu H *et al.* Journal of Applied Meteorological Science, 1997, 8(Suppl):15(in Chinese)]
 [7] 周天军,王在志,宇如聪等. 气象学报,2005, 63: 702 [Zhou T J, Wang Z Z, Yu R C *et al.* Acta Meteorologica Sinica, 2005, 63: 702 (in Chinese)]
 [8] Yu Y Q, Zheng W P, Wang B *et al.* Adv. Atmos. Sci., 2008, 25: 641
 [9] Zhou T J, Wu B, Wen X *et al.* Adv. Atmos. Sci., 2008, 25: 655
 [10] Zhou T J, Yu R C. Journal of Climate, 2006, 19: 5843
 [11] Zhou T J, Wu B, Wang B. Journal of Climate, 2009, 22: 1159



• 物理新闻和动态 •

高聚物的热扩散

高聚物是一串由相同分子单元组成的大分子,它们可以具有任意的长度,换句话说,它们可以有着不同的分子量,但却有着相同的性质.这类物质在不均匀温度的溶液中存在一些奇异的特性.这些奇异特性是分子量较小的短分子链聚集在高温区域,而分子量大的长分子链都处在温度较低区域.当系统中出现热扩散运动时,分子的空间密度分布会随温度变化,高聚物分子的这种行为是一个尚未能解释的物理问题.

最近,法国 Bordeaux 大学的 A. Würger 博士在实验与理论两方面对这个问题进行了研究.在实验上,他采用聚苯乙烯溶于甲苯溶液中,首先将甲苯溶液的两端保持不同的温度,这样在溶液中就存在着一个温度梯度.甲苯分子是一种球状分子,分子间主要是以范德瓦尔斯的短程作用力发生相互作用.对处于不同温度区域的分子来说,显然在高温处的分子具有较高的热运动速度,因此其扩散漂移较大,而在冷端的分子,它的热运动速度较低,它就会保持在原处且扩散漂移比较小,这样一来,溶液中的温度梯度就会转变为密度梯度的形式.接着再把聚苯乙烯高聚物加入到甲苯溶液中,聚苯乙烯分子间的每个单元苯乙烯分子间也是由范德瓦尔斯力相互作用.若高聚物分子的漂移速度是与它的分子量无关,则在苯乙烯分子间以及甲苯分子间受到作用力时,每个分子是无法区分出作用力是来自于长链分子还是来自于溶剂分子的,但实验显示出,甲苯分子却倾向于漂移到小于 100 的苯乙烯单元长度的高聚物链附近,而单个苯乙烯分子则比较倾向于运动到高温区域.

为了解释这个结果,A. Würger 博士又提出了他的理论设想,他认为应该考虑高聚物链的布朗运动,即苯乙烯分子将在它的平均位置附近作无规漫游,当分子移动到某一边时,它所空出的位置就迅速地被溶剂分子所填充.但这是一个不对称的运动,因为高聚物分子的运动是相互关联在一起而不能自由分散,所以整个分子将向较冷的区域蜿蜒移动.这个无规不稳定的漫步运动使高聚物分子在冷端与热端间存在一个密度差异.对于大分子的链来说,它包含大量的苯乙烯分子,这些分子间的无规运动将会相互抵消,所以比较长的链更不容易向热端移动. A. Würger 博士将聚苯乙烯分子与甲苯分子的各种参数应用到这个实验中,发现在高聚物分子量分布与温度的关系上,实验结果与理论计算非常吻合.所以这个理论将可以为高聚物按分子量进行连续分离提供极为重要的依据.

(云中客 摘自 Physics Review Letters, 20 February 2009)