中国科学院"十二五"科研信息化应用推进工程基于 CPU 的大规模并行应用软件研发项目指南

一、指南说明

为落实中国科学院"十二五"信息化发展规划,执行科技云总体实施方案,全面实施科研信息化应用推进工程,中国科学院院信息化工作领导小组办公室(以下简称"院信息办")在"面向云服务的超级计算环境建设与应用"项目中设立了"基于 CPU 的大规模应用软件研发"课题,旨在遴选和培育一批万核/十万核级应用示范,开展满足重点应用领域发展需求的应用软件研发,以点带面地推动超级计算在各学科领域的应用研究,力争取得数个具有国际先进水平的应用成果,并为进一步的百亿亿次计算建立储备。项目由院信息办采取"指南申报、专家评审、择优立项"的方式组织实施。

本指南面向中国科学院"十二五"信息化专项科研信息 化应用推进工程中的"基于 CPU 的大规模应用软件研发"项 目,遴选确定基于 CPU 的重点应用示范及项目承担单位。

二、注意事项

- 1. 本指南仅面向院内单位公开发布。
- 2. 项目申请必须针对本指南的任务整体,针对部分任务将视为无效申请。
- 3. 项目申请单位必须是院内法人单位。如联合申请,牵头申请单位应与协作单位之间签订联合申请协议,协作单位

原则上不超过3家。

- 4. 对项目负责人的有关要求
- (1) 具备相应的超级计算应用经验及科研水平。
- (2) 对本项目内容有较全面的基础理论知识,在国际或全国性学术期刊上发表过以本人为主、与申请课题内容有关的论文或有与项目内容有关的专利产品或技术。
- (3) 必须具有中华人民共和国国籍,具有副高级及以上 技术职称的在职人员,并在所申报课题的技术方面有两年以 上的研究或工程工作经历。
 - 5. 对项目申请单位的有关要求
- (1) 接受院信息办的领导、管理与监督,满足院超级计算环境建设项目的总体要求,确保"基于 CPU 的大规模并行应用软件研发"课题的推进。
- (2) 签订任务书的同时,与院信息办、院超级计算中心 签订"基于 CPU 的大规模并行应用软件研发"的三方协议, 以确定各自的责任、权利与义务。
- (3) 如需与外单位联合申请或与院超级计算中心联合开发,应明确分工,相互配合,确保课题的顺畅进行。
 - (4) 已获得院信息化专项支持的单位原则上不再资助。
 - 6. 申报程序
- (1) 申请单位必须按照院信息化专项项目课题申请书模板填写申请书,否则不予受理。申请书一式五份(加盖单位公章),同时以电子邮件方式提交申请书的电子版。
- (2) 申请单位须在申请截止日期前送达。(邮寄以寄出日期邮戳为准。封面注明:项目申请书。)
 - 7. 受理截止日期:

2013年4月15日。

8. 申请书送达地址

北京市西城区三里河 52 号中国科学院办公厅信息化工作处(院机关 5 层 554 房间)

邮编: 100864

联系人: 褚大伟

电话: 010-68597554 Email: dwchu@cashq.ac.cn

三、指南内容

1. 项目建设目标

在全院建设 5-10 个上万计算核的超级计算重点应用示范项目,其中包括 1-2 个可运行至十万计算核规模的并行计算应用。通过高可扩展并行软件建设,突破学科计算瓶颈,提高全院超级计算应用水平,为进一步的百亿亿次计算打下坚实基础。

- 2. 项目支持原则
- (1)重点优先原则:同等条件下,优先支持与国家、院重大项目相结合或导致重大科学发现的申请课题。
- (2) 具备前期基础:申请者应具有高性能计算方面扎实可靠的基础,课题研究应建立在申请者已有工作基础之上,而不是全新的研究开发。同时,申请者需说明其计算问题具备良好的可扩展潜力,以确保万核/十万核级应用目标的达成。将优先考虑在"十一五"期间千核应用项目的入选者,以及在院超级计算中心的超级计算机上实现了 5000 核级并行计算的应用申请。
- (3) 平衡学科、地域布局原则:为推动超级计算在各学科和各地区应用的全面发展,对超级计算需求迫切的学科和地区予以适度倾斜。

- (4) 鼓励自主软件原则: 鼓励学科交叉与协作,以促进自 主软件的产出及合作研发,提升全院大规模计算软件的研发 能力。
- (5)应用优先原则:同等条件下,优先支持针对实际应用问题的大规模计算突破,以不断加强大规模计算手段在整个科研探索和应用研究中的直接推动作用。
- (6) 可持续发展原则:结合国际超级计算研究趋势,鼓励基础应用数值模型与基础应用算法的软件研发,为全院超级计算的可持续发展奠定基础。

上述原则, 院信息办统筹考虑。

- 3. 项目主要建设内容
- (1)将支持若干领域的计算问题(但不限于这些领域): 大气、生物药物、天文、化学、海洋、地震、地理环境、物理(包括高能物理、QCD、凝聚态物理、等离子体物理、纳米材料与半导体、金属等)、空间天气、生物(包括生物信息、计算神经学等)、高可扩展性基础应用算法及软件(如计算流体、粒子模拟、并行自适应等)、大型矩阵求解器等。
- (2) 应立足已有基础,综合利用最新模型与参数选取成果,建立适用于万核级/十万核级计算规模的高分辨率数值模型。
- (3)应在已有应用软件(开源软件或自有软件)基础上,针对高分辨率模型,结合院超算中心近千万亿次计算机的体系结构特点,综合各种计算技术和性能分析手段,开发和优化软件的并行模块,使其达到万核级/十万核级计算规模。
- (4) 凝练出具有普适性的学科算法成果,带动相关研究问题的大规模计算,并为进一步计算和优化打下基础。

- 4. 项目主要考核指标
- (1)申请者最终需提供可在院超级计算中心近千万亿次 计算机上进行上万核/十万核级计算的应用软件及相关使用 文档。
- (2)万核应用或十万核应用的申请者,需依据软件在院千万亿次计算机上的实际计算时间,证明该软件在大规模计算中获得了实际的、可被接受的计算效率。一般而言,并行效率应在50%以上,十万核级应用的并行效率可放宽到30%。
- (3)申请者需提交大规模计算成果的相关材料,如发表文章、计算图片、重大项目成果说明等,以证明该计算问题的显示度。
 - 5. 项目支持年限 2013年7月1日—2015年7月1日
 - 6. 项目经费来源及构成

院信息化专项经费资助的经费总额为1000万元,用于资助不多于4个的十万核级应用项目,每个项目资助上限为150万;资助不多于6个的万核级应用项目,每个项目资助上限为80万元。专项经费主要用于大规模计算的机时费和补贴部分研发费用。机时费不得低于项目总额的40%。项目具体资助个数及额度将根据实际申请情况酌情调整。原则上申请单位自筹经费与院信息化专项经费比例不低于1:1,鼓励申请单位自筹或从国家、地方等其它渠道获取经费。