国家高性能计算环境发展报告

二〇一八年一月

《报告》参与单位

中国科学院计算机网络信息中心

上海超级计算中心

国家超级计算天津中心

国家超级计算济南中心

国家超级计算深圳中心

湖南大学国家超级计算长沙中心

中山大学国家超级计算广州中心

国家超级计算无锡中心

清华大学

西安交通大学

中国科学技术大学

北京应用物理与计算数学研究所

山东大学

中国科学院深圳先进技术研究院

华中科技大学

甘肃省计算中心

吉林省计算中心

上海交通大学

香港大学

中央财经大学

《高性能计算环境发展水平评价体系》专家顾问名单

(按姓氏拼音首字母顺序)

陈明奇	董小社	杜云飞	冯圣中	高 亮	金 海	李根国
李 京	李隽	李肯立	刘晓东	卢宇彤	陆忠华	栾钟治
罗红兵	王斌	王卓立	魏宇杰	肖海力	肖景发	杨广文
张林波	张云泉	者建武	朱维良			

《报告》编写组

(按姓氏拼音首字母顺序)

组　　长：迟学斌

副 组 长：王彦棡 刘利萍

统　　稿：刘利萍

报告撰写：邓笋根 杜云飞 付昊桓 郭 猛 胡永宏 冷 灿 李根国
刘国罡 刘利萍 菅晓东 秦 晨 王小宁 王彦棡 张 鉴

数据采集：

柴芳姣　邓笋根　冯景华　和 荣　寇大治　刘 芳　牛 铁　陈 健

杜云飞　龚斌　郭猛　金能智　冷灿　李根国　李会民　林 皎

刘 军　刘利萍　罗红兵　王多强　王彦棡　王 洋　韦建文　魏彦杰

邬 鸿　袁 良　张 健　张武生　张兆瑞　赵 毅　赵芸卿　朱正东

报告摘要

本报告回顾了我国高性能计算环境发展历程，介绍了国家高性能计算基础设施，主要包括北方主结点、南方主结点和六个国家级超级计算中心。报告中描述了当前国家高性能计算环境中的六个关键技术突破及近年来 49 个高性能计算典型应用案例，并简要分析了高性能计算应用成果。开创性地建立了国家高性能计算环境发展水平综合评价指标与指数体系，该体系共计 69 个评价指标，对国家高性能计算环境及超级计算应用综合评价进行了量化分析，通过调研国外部分超级计算中心，进行了对比分析，最后总结分析了国家高性能计算环境发展过程中存在的问题，并针对性地提出了一些建议。

截止目前，中国国家网格结点单位达到 19 家，聚合计算资源超过 200PFlops，总存储资源超过 167PB。中国已连续五年 10 届（2013 年-2017 年）领跑世界 TOP500 榜单，广泛应用于宇宙探索、核能与新能源、新材料、气象与气候变化、航空航天、新药研发与生物信息、工业仿真计算、动漫渲染和重大科学发现等国民经济各个领域。

从超级计算应用成果统计分析表明：（1）应用最大并行核数达到 300 万 CPU 核，超过 60%的结点单位达到千核规模应用，超过 30%的结点单位达到万核规模应用；（2）从近三年的服务项目来看，最多的是国家自然科学基金项目，三年占比均接近 50%；（3）我国实现了戈登・贝尔奖设立以来中国零的突破；（4）在超级计算应用发展的过程中得到了国家和地方政府的大力支持，科技部、国家自然科学基金委和地方政府近三年总资金投入超过 10 亿元；（5）用户发表论文情况是超级计算应用成果很重要的组成部分，近三年共发表各类论文 11287 篇。

国家高性能计算环境发展水平综合评价指数研究表明：2015-2017 年间我国高性能计算环境发展水平综合评价指数呈现上升趋势，稳步增长。2016 年增长快些，增长率为 34.69%，2017 年增长率为 10.57%，有所下降。2017 年高性能计算环境发展水平综合评价指数为 113.58，说明 2017 年当期高性能计算环境发展水平相比基期提高了 13.58%。

针对目前存在的问题，就未来发展提出建议如下：制定高效能计算机及应用发展的长期战略规划；保证国家层面对高性能计算的持续投入；落实促进高性能计算可持续发展的长效机制；加大高性能计算应用的研发力度，促进我国高性能计算环境均衡发展；加大对超级计算相关关键技术的研究支持力度；加强自主应用软件研发和改善高性能计算软环境；加强超级计算相关人才队伍建设，加大超级计算人才培养和储备的力度；面向云计算、大数据、人工智能等，深入研究，发展适应多种需要的、开放性的国家高性能计算环境。

前　言

1986 年 3 月，邓小平对光学专家王大珩、核物理专家王淦昌、信息技术陈芳允、空间技术专家杨嘉墀四位科学家提出的“关于跟踪世界战略性高技术发展的建议”迅速做出批示：“此事宜速作决断，不可拖延”，短短 11 个字启动了我国高技术研究发展计划（863 计划）。

30 年后，根据国家科技计划体制的改革，将科技部管理的国家重点基础研究发展计划（973 计划）、国家高技术研究发展计划（863 计划）、国家科技支撑计划、国际科技合作与交流专项，发改委、工信部共同管理的产业技术研究与开发资金，农业部、卫计委等 13 个部门管理的公益性行业科研专项等，整合形成一个国家重点研发计划，863 计划完成历史使命，退出历史舞台。

正是在 863 计划及国家重点研发计划的一直以来的大力支持下，经过 20 多年几代人的努力拼搏，国家高性能计算环境才能发展到今天崭新的阶段，取得一定的成绩，实现聚合计算资源超过 200PFlops，总存储资源超过 167PB，总内存资源超过 104TB；实现中国超级计算机连续 5 年 10 届问鼎世界 TOP500 排行榜第一；实现被誉为高性能计算应用领域的诺贝尔奖——戈登 •贝尔奖自设立该奖项 29 年来零的突破并蝉联！

本报告包含综述篇、成果篇和分析篇一共八章，其中前三章为综述篇，中间一章为成果篇，后面四章为分析篇。具体结构安排如下：

第一章 从探索期、成长期和完善期系统概述了我国国家高性能计算环境的发展历程。

第二章 就国家高性能计算环境中的核心组成部分-超级计算基础设施进行了介绍，重点是北方主结点、南方主结点和六个国家级超级计算中心。

第三章 重点讲述了国家高性能计算环境中的关键技术突破，包括突破高性能计算服务量化评价技术、突破作业时长预测技术、突破支持多模式运行的环境管理多项技术、突破核心系统软件信息服务优化技术等六个方面。

第四章 概要介绍国家高性能计算环境用户的不同作业规模的 49 个典型应用成果，应用领域广泛，包括物理、化学、材料、天文、地球科学、生命科学、航空航天、动漫渲染和工业制造等领域。

第五章 从六个方面统计分析了超级计算应用成果，包括平台应用能力、HPC 应用获奖、服务科研项目、国家级地方资金投入、用户发表论文和社会效益。

第六章 高性能计算环境发展水平综合评价，主要包括指数体系及编制方法、发展分指数计算、发展指数计算以及 2015-2017 年指数走势分析等。

第七章 重点调研了国外部分知名超级计算中心，并进行了应用及投入方面的分析。

第八章 立足发展现状，结合发展指数和投入与产出分析结果，以国内外超级计算发展状况为参照，总结和分析了国家高性能计算环境发展过程中存在的问题，并针对性地提出了一点建议。

致谢部分，对报告撰写过程中给予帮助的领导和专家等表示衷心的感谢。

报告的最后是正文引用的一些附件，以方便读者查阅相关信息。

本报告的撰写，虽经各方多次修订，但因时间仓促，难免存在疏漏之处，恳请各位领导、专家和读者见谅并反馈意见和建议！。

目　　录

报告摘要.....I

前　　言.....II

目　　录.....V

图 目 录.....VII

表 目 录.....XI

综 述 篇.....1

第一章 国家高性能计算环境发展历程.....1

1.1 探索期，试验床，聚合计算资源十八万亿次（2001-2005）.....1

1.2 成长期，厚积薄发，聚合计算资源超过 1.2 亿亿次（2006-2015）.....2

1.3 完善期，砥砺奋进，聚合计算资源超过 20 亿亿次（2016-至今）.....8

1.4 小结.....11

第二章 国家超级计算基础设施.....13

2.1 中国科学院计算机网络信息中心.....13

2.2 上海超级计算中心.....16

2.3 国家超级计算天津中心.....18

2.4 国家超级计算济南中心.....19

2.5 国家超级计算深圳中心.....24

2.6 湖南大学国家超级计算长沙中心.....26

2.7 中山大学国家超级计算广州中心.....28

2.8 国家超级计算无锡中心.....30

第三章 国家高性能计算环境关键技术突破.....32

3.1 突破高性能计算服务量化评价技术，初步建立环境资源准入和分级标准体系形成《国家高性能计算环境资源评价标准白皮书》.....32

3.2 突破作业时长预测技术，建立环境作业历史数据库并分析建立典型应用作业预测模型.....33

3.3 突破支持多模式运行的环境管理多项技术，构建可高效运行的国家高性能计算环境运行支撑业务系统.....35

3.4 突破核心系统软件信息服务优化技术、索引一致性技术等，精细打磨计算服务用户交互环境 40

3.5 突破日志模式分析技术快速过滤输出事件，构建环境事件流处理与分发平台.....45

3.6 多维度多层次构建高性能计算环境安全体系.....47

3.7 小结.....48

成 果 篇.....49

第四章 超级计算典型应用成果.....51

4.1 百核规模.....51

4.2 千核规模.....63

4.3 万核规模.....79

4.4 十万核及以上规模.....96

4.5 入围“戈登·贝尔”奖应用 109
4.6 小　结 113
分 析 篇 114
第五章 超级计算应用成果统计分析 116
5.1 平台应用能力 116
5.2 HPC 应用获奖 119
5.3 服务科研项目 120
5.4 国家及地方资金投入 121
5.5 用户发表论文 123
5.6 社会效益 124
5.7 小　结 126
第六章 高性能计算环境发展水平综合评价 128
6.1 高性能计算环境发展水平综合评价指标与指数体系 128
6.2 高性能计算环境发展水平综合评价指数体系设计 129
6.3 国家高性能计算环境发展水平综合评价 132
第七章 国外部分知名超级计算中心调研情况 136
7.1 已公开年度报告的调研 136
7.2 应用情况对比与分析 137
7.3 投入对比与分析 140
第八章 问题与建议 145
8.1 发展过程中存在的问题 145
8.2 未来发展的一些建议 146
参考文献 149
致　　谢 153
附　　件 155
附件 1 报告术语界定与英文缩略词 157
附件 2 高性能计算环境发展水平评价指标重要性调查问卷 158

图 目 录

图 1 深腾 6800 及 TOP500 证书 1
图 2 曙光 4000A 及 TOP500 证书 1
图 3 中国国家网格运行管理中心揭牌仪式 2
图 4 中国国家网格获得科技进步二等奖证书 3
图 5 曙光 5000A 及 TOP500 证书 3
图 6 深腾 7000 及 TOP500 证书 3
图 7 曙光星云高效能计算机及 TOP500 证书 4
图 8 时任胡锦涛主席亲笔为系统题名“天河” 4
图 9 时任温家宝总理视察国家超级计算天津中心 4
图 10 “天河一号”高效能计算机及 TOP500 证书 5
图 11 “高效能计算机及网格服务环境” 重大项目成果发布会合影 5
图 12 神威蓝光高效能计算机 5
图 13 “天河二号”超级计算机及 TOP500 证书 6
图 14 超级计算创新联盟成立大会合影 6
图 15“国家高性能计算服务环境关键技术与应用”成果鉴定会 7
图 16 国家网格服务环境示范专网开通仪式 7
图 17 神威·太湖之光及 TOP500 证书 9
图 18 “国家高性能计算环境服务化机制与支撑体系研究”启动会 9
图 19 中国国家网格合肥运行中心挂牌仪式 10
图 20 国家高性能计算环境资源分布图 10
图 21 中科院计算机网络信息中心“元”超级计算系统 14
图 22 资源拓扑结构图 21
图 23 湖南大学国家超级计算长沙中心 26
图 24 长沙中心超级计算系统 28
图 25 IRPA 预测模型结构 34
图 26 各模型不同范围内作业运行时长预测结果 RCC 对比 35
图 27 环境可视化大屏幕展示效果 36
图 28 环境监控分析 36
图 29 计费规则分析 37
图 30 运行异常检测与分析 38
图 31 预测训练模型 39
图 32 部件亚健康的快速检测与定位 39
图 33 资源信息同步模式的信息传输流程图 41
图 34 二级索引一致性分析测试结果 42
图 35 基于命令行的用户程序编译环境管理示意图 43
图 36 PORTAL2.0 体系结构 44
图 37 面向 PORTAL2.0 的资源搜索和推荐框架 45
图 38 环境事件流处理与分发系统结构图 46
图 39 高性能计算环境安全体系建设 47

图 40 具有强层间相互作用和高迁移率的新型贵金属硫属化物 52
图 41 边界修饰的磷烯纳米层 53
图 42 抗冻蛋白的冰结合面和非冰结合面对冰核形成的“JANUS”效应 54
图 43 晶体结构揭示 TET 蛋白介导的氧化反应底物偏好性机制 56
图 44 C919 大型飞机数值仿真 57
图 45 某电站某重要核级管道热分层分析 57
图 46 基于某车型侧面碰撞的优化分析 58
图 47 船-桥碰撞过程数值模拟 58
图 48 溶液中铁基材料缔合与吸附性能的影响因素-湖南大学 59
图 49 水溶液相中离子团簇特征与生物矿化微观机制-湖南大学 60
图 50 COOCCURNET 包的计算原理与工作流程-湖南大学 61
图 51 对所有高致病性禽流感 H5N1 病毒的抗原进化模拟 61
图 52 吸入纳米颗粒与肺表面活性剂发生相互作用 62
图 53 不同表面电荷的疏水颗粒与肺表面活性剂的作用 62
图 54 调控表面原子结构制备优异电催化剂 63
图 55 耦合预报模拟 64
图 56 预报结果处理 65
图 57 二维材料宽带光学性质的逆蒙特卡罗程序 66
图 58 高压下新型 NA-HE 化合物 67
图 59 新能源新材料 2-北京高压科学研究中心 67
图 60 基于深度学习的 RNA 编辑位点的识别及应用 69
图 61 大规模壳模型计算研究原子核结构-1 70
图 62 大规模壳模型计算研究原子核结构-2 71
图 63 石油勘探数据处理平台 72
图 64 功能材料设计-1 72
图 65 功能材料设计-2 73
图 66 功能材料设计-3 74
图 67 航空发动机设计 74
图 68 KCNQ2 与 ZTZ240 结合模式研究 75
图 69 白鹤滩拱坝-坝肩体系在超设计地震作用下的变形示意图（放大后） 76
图 70 白鹤滩在超设计地震作用下的拱坝应力 76
图 71 溪洛渡拱坝坝体精细网格 77
图 72 不同级别地震下坝体损伤破坏情况 77
图 73 2018 年《熊出没·变形记》及 2017 年《熊出没之奇幻空间》 78
图 74 2016 年《熊出没之熊心归来》及 2015 年《熊出没之雪岭熊风》 78
图 75 2014 年《熊出没之夺宝熊兵》 78
图 76 三维湍流磁重联磁岛形成过程 80
图 77 三维湍流磁重联磁岛形成过程 80
图 78 雷暴尺度集合预报系统 81
图 79 起伏地表叠前时间偏移剖面 82
图 80 盐丘构造深度偏移剖面对比 82
图 81 加速比测试及 8075 至 80750CPU 核加速比曲线 84
图 82 三维模拟区域海底地形 85
图 83 M2 分潮驱动下 96.5H 时的海面高度梯度 85

图 84 M2 分潮驱动下 96.5H 时 B2 断面流场与温度分布.....85
图 85 96.5 时 B1 断面 2D 与 3D 模拟结果对比.....86
图 86 断面 C 时间-距离坐标轴下温度填色图与断面 C 处的地形.....86
图 87 初始纬向温度分布情况（单位：℃）.....86
图 88 M2 分潮驱动下 95H 时海面高度地图分布.....87
图 89 4KM 确定性预报区域图.....88
图 90 集合预报产品图.....88
图 91 HYBRID 集合同化 0612 预报（提前 36H 起报）.....88
图 92 WRF 同时次的预报.....89
图 93 山东省重点城市 PM2.5 预报图.....91
图 94 济南市 PM2.5 预报图.....91
图 95 拟筛选重大地下工程灾害孕育演化模拟的万核级并行有限元软件研发.....92
图 96 (A) 压入过程的实验和模拟结果对比; (B) 压入模拟得到的位错演化图.....92
图 97 沿单晶铁的[110]晶向冲击，相变波前的位错传播过程.....94
图 98 TH-1A 上 GTC WEAK SCALING 的性能测试 TH-1A 上 GTC WEAK SCALING 的加速比.....95
图 99 海洋温度、盐度、海平面高度随季节的变化.....95
图 100 暗物质晕在宇宙大尺度结构'贫'中微子区域和'富'中微子区域中的分布.....96
图 101 冷暗物质和中微子结构的二维可视化结果.....97
图 102 GRAPES 高分辨率数值天气预报业务模式.....98
图 103 不同规模计算结果.....99
图 104 高升力外形模拟结果（天河星光绘图）.....99
图 105 并行效率.....99
图 107 76KM 高度飞行绕流结构 图 108 110KM 高度飞行绕流结构.....100
图 109 高分辨率海气耦合模式研究组合图.....102
图 110 金融风险分析应用领域-山东大学数学院.....103
图 111 催化残基 ASP214 N 原子与纤维二糖分子 453 C1 原子的距离.....105
图 112 128 个温度下距离的统计分布.....106
图 113 复杂电磁环境数值模拟.....107
图 117 晶体硅的分子动力学模拟.....108
图 118 三维叠前逆时偏移成果剖面.....109
图 119 2016 戈登・贝尔奖-可扩展全隐式求解器.....110
图 120 2016 戈登・贝尔奖证书及现场.....110
图 121 2017 戈登・贝尔奖-非线性地震模拟.....111
图 122 2016 戈登・贝尔奖提名-合金微结构演化相场模拟.....112
图 123 千核/万核规模结点单位统计（2015-2017）.....116
图 124 科研教育应用软件数（2015-2017）.....117
图 125 企业应用软件数（2015-2017）.....117
图 126 政府应用软件数（2015-2017）.....118
图 127 国外开源软件所占比例（2015-2017）.....118
图 128 作业完成情况（2015-2017）.....119
图 129 HPC 应用获奖统计图（2015-2017）.....120
图 130 服务科研项目数量统计（2015-2017）.....121
图 131 服务项目分布图（2015-2017）.....121

图 132 国家及地方政府资金投入统计 1 122
图 133 国家及地方政府资金投入统计 2 123
图 134 用户发表论文统计（2015-2017） 124
图 135 社会效益统计 125
图 136 国内超算大赛及超级计算创新联盟成员数量 126
图 137 高性能计算环境发展水平综合评价指数体系框架图 128
图 138 超级计算应用水平分指数体系框架图 129
图 139 高性能计算环境发展水平综合评价指数走势（2015-2017 年） 133
图 140 高性能计算环境发展水平综合评价分指数走势（2015-2017 年） 134
图 141 超级计算应用水平各子指数走势（2015-2017 年） 135
图 142 SUMMIT 与 TITAN 的对比情况 140
图 143 2017 年美国国家计算科学中心（NCCS）应用领域分布图 141
图 144 2016-2017 年美国国家超级计算应用中心（NCSA）应用领域分布图 142
图 145 2016 年美国国家能源研究科学计算中心（NERSC）应用领域分布图 142
图 146 2017 年 JÜLICH 超级计算中心应用领域分布图 143
图 147 ACCC 计算机时应用分布情况 144

表 目 录

表 1 环境结点单位基本信息.....7
表 2 硬件资源.....20
表 3 软件资源.....21
表 4 科学计算软件.....22
表 5 高性能计算环境发展水平综合评价指数及评价指标的计量方法与权重.....131
表 6 超级计算应用水平分指数各评价指标的计量方法与权重.....131
表 7 戈登.贝尔奖最高性能奖的获奖情况（1988-2017）.....138

综 述 篇

第一章 国家高性能计算环境发展历程

1.1 探索期，试验床，聚合计算资源十八万亿次（2001-2005）

我国国家高性能计算基础设施的建立要追溯到 20 世纪九十年代后期。1998 年，国家高技术研究发展计划（863 计划）“**智能计算机系统”主题（306 主题）**将研究重点从研制单台高性能计算机转向从技术上支持我国高性能计算基础设施的构建。这个项目支持建立了 5 个高性能计算中心构成的国家高性能计算环境，形成了我国高性能计算基础设施的雏形。

“十五”期间，高性能计算方向的研发得到了国家 863 计划的进一步支持，2002 年启动了**“高性能计算机及核心软件”重大专项**，该专项的主要任务是研制每秒 4 万亿次的高性能计算机系统，研究和突破网格关键技术，建立聚合计算能力 5-7 万亿次的高性能计算环境（即中国国家网格），开发一批网格示范应用。从“十五”863 计划开始，高性能计算机的研发打破了过去定向委托一家承担的做法，引入了竞争机制，注意发挥用户的作用。通过竞争和用户参与的遴选，中科院计算技术研究所和联想集团分别赢得了高性能计算机的研发任务，通过竞争促进了研发，提高了效率。

2003 年，联想集团成功研制了深腾 6800 超级计算机系统，系统峰值速度达到每秒 5.3 万亿次浮点运算，Linpack 速度每秒 4.183 万亿次浮点运算，该系统在 **2003 年 11 月世界超级计算机 TOP500 中排在第 14 位**。

图 1 深腾 6800 及 TOP500 证书

2004 年，曙光 4000A 研制成功，系统峰值速度每秒 11.2 万亿次浮点运算，Linpack 速度每秒 8.06 万亿次，在 **2004 年 6 月的世界超级计算机 TOP500 中名列第十**。这是中国超级计算机得到国际同行认可的最好成绩。这标志着中国已成为继美国、日本之后第三个能制造和应用十万亿次级商用高性能计算机的国家。

图 2 曙光 4000A 及 TOP500 证书

这两台机器都超过了 863 重大专项规定的指标。联想深腾 6800 装备在中科院计算机网络信息中心，曙光 4000A 装备在上海超级计算中心。这两个中心分别成为重大专项建立的中国国家网格

的北方主结点和南方主结点。

2005 年 12 月 21 日，中英开放中间件基础架构研究所与中国国家网格运行管理中心揭牌仪式在中国科学院计算机网络信息中心举行，时任科技部徐冠华部长等为中英开放中间件基础架构研究所与中国国家网格运行管理中心揭牌，这标志着中国国家网格正式开通。

图 3 中国国家网格运行管理中心揭牌仪式

同时，完成了支持网格环境运行和网格应用示范的网格软件 CNGrid GOS，并投入实际运行。该网格软件提供了网格资源的管理与任务调度、网格资源的共享与协同机制、网格系统管理和监控、网格数据管理和服务、网格系统的安全机制、网格用户管理和服务、网格应用开发与使用环境等功能。

同时，成功研制了“国家地质调查网格”、“航空制造网格”、“中国气象应用网格”、“科学数据网格”、“新药发现网格”、“生物信息应用网格”等 10 种重要的行业应用网格，在应用领域取得一批重要的应用成果。具体包括：以计算机模拟进行化合物筛选支持糖尿病新药的研制、支持GRAPES数值气象预报新模式协同研究的平台、支持飞机异地设计、模拟、制造的航空制造网格平台、地下水资源评价和固体矿产资源评价服务、分布式异构科学数据库集成共享及宇宙射线数据预处理等应用、基于网格技术的石油地震勘探软件、支持退耕还林工程和森林资源监测分析的数字林业网格、提供基因排序、标注和基因数据资源共享等功能的生物信息应用网格、复杂产品仿真、上海市智能交通信息服务等。

经过积极努力与探索，中国国家网格环境在网格资源集成和共享、网格服务技术等方面得到重大突破，它将多种分布异构的高性能计算资源、存储资源和软件资源集成起来，形成一个统一的、易于使用的共享资源空间。依托国产高性能计算机所建立的中国国家网格试验床包含了分布在全国各地的 8 个结点（中国科学院计算机网络信息中心、上海超级计算中心、国防科学技术大学（现更名国防科技大学）、清华大学、西安交通大学、中国科技大学、北京应用物理和计算数学研究所和香港大学），**聚合计算能力达到 18 万亿次**，总存储容量 200TB，共享软件 50 多个，数据库约 150 个。**当时中国国家网格的资源能力居世界国家级同类网格的第二位**。

1.2 成长期，厚积薄发，聚合计算资源超过 1.2 亿亿次（2006-2015）

2006 年，国家启动科技部 863 计划 “高效能计算机及网格服务环境” 重大项目，专项经费 92,355 万元，项目围绕战略目标和重点任务，设置了高效能计算机、网格服务环境和高性能计算与网格应用三方面的 41 个研究课题，项目共有参研单位 59 个，其中大学 22 个，科研院所 19 个，企业科研机构 4 个，企业 7 个，应用单位 7 个。该重大项目将研制千万亿次高效能计算机列为主

要目标之一。从高性能到高效能，一字之差，体现了研究路线的转变。高效能意味着衡量计算机系统的能力和水平不仅要看峰值性能，更要看应用所获得的实际性能，要强调应用程序开发的效率和程序编写的容易程度，要强调现有程序的可移植性，强调系统的鲁棒性。重大项目的另一主要目标是提升中国国家网格的资源能力和服务水平，将其从试验床升级为网格服务环境，从而更好地支持应用。

2007 年 12 月 11 日，由中国科学院计算机网络信息中心等参与完成的“中国国家网格”项目荣获 2007 年国家科学技术进步二等奖。

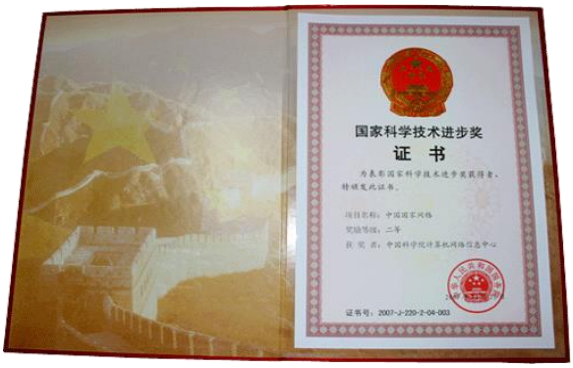


图 4 中国国家网格获得科技进步二等奖证书

2008 年，中科院计算技术研究所和联想集团分别研制完成 233 万亿次的“曙光 5000A”（魔方）和 157 万亿次的“联想深腾 7000” 百万亿次高效能计算机；

图 5 曙光 5000A 及 TOP500 证书

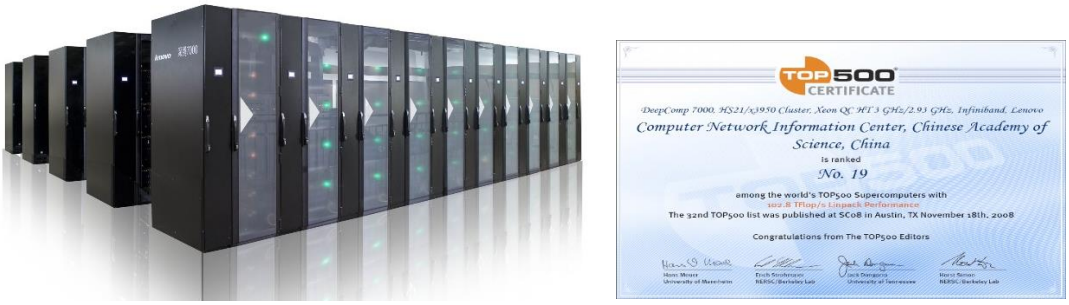


图 6 深腾 7000 及 TOP500 证书

2009 年，重大项目部署了 3 台千万亿次高效能计算机的研制：由中科院计算技术研究所和曙光公司为国家超级计算深圳中心研制“曙光 6000”系统，由国防科技大学和浪潮公司为国家超级计算天津中心研制“天河一号”系统，由江南计算技术研究所为国家超级计算济南中心研制“神威蓝光”系统。

2010 年 5 月，曙光 6000 即曙光星云系统研制成功，在 2010 年 5 月 31 日发布的第 35 届 TOP500

排行榜上，**以 1.271PFlops 的 Linpack 实测值排名第二，这是我国的高性能计算机系统在该排行榜上的历史最好成绩。**

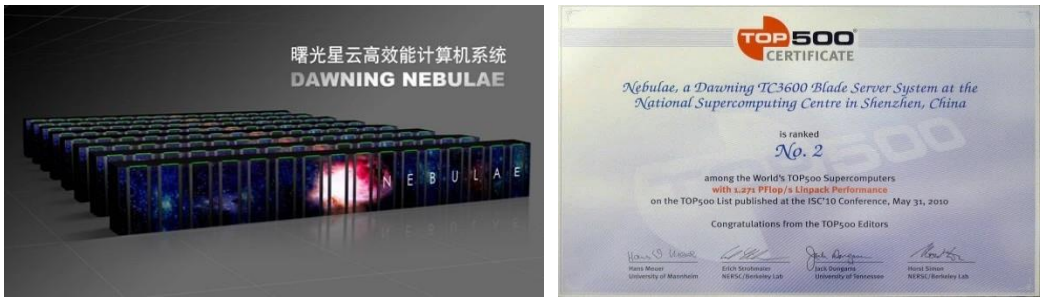


图 7 曙光星云高效能计算机及 TOP500 证书

2010 年 8 月，“天河一号”系统研制成功；2010 年 10 月 28 日，“天河一号”高效能计算机系统正式对外发布；**2010 年 11 月 17 日，在世界超级计算机 TOP 500 排名中，“天河一号”以峰值速度 4700 万亿次、持续速度 2566 万亿次每秒浮点运算速度夺得世界第一。**

图 8 时任胡锦涛主席亲笔为系统题名“天河”

图 9 时任温家宝总理视察国家超级计算天津中心

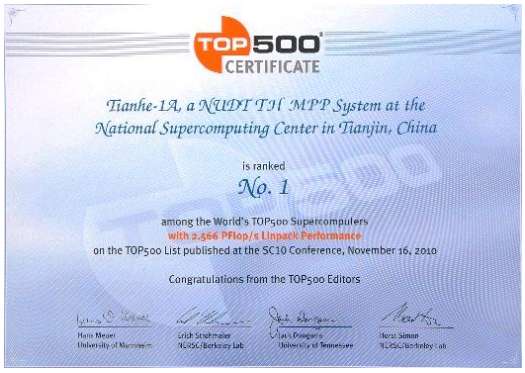


图 10 “天河一号”高效能计算机及 TOP500 证书

2010 年 11 月 2 日，科技部在北京召开了国家 863 计划“高效能计算机及网格服务环境”重大项目成果发布会。时任科技部党组书记李学勇同志和发改委、教育部、中科院、国家自然科学基金委有关领导出席了会议。我国信息技术领域知名专家金怡濂院士、沈绪榜院士、李国杰院士、陈左宁院士等出席了会议。本次发布会集中展示了“十一五”期间国家 863 计划“高效能计算机及网格服务环境”重大项目在千万亿次高效能计算机研制、网格服务环境建设、高性能计算及网格应用等方面取得的重大进展。重大项目总体专家组组长钱德沛教授发布了峰值速度达到每秒 4700 万亿次、持续性能达到每秒 2500 万亿次的“天河一号”高效能计算机，国家网格应用环境及其在飞机设计、铁路运输、气象预报、新药研制，水利信息、天体物理研究等应用领域取得的重大成果。

图 11 “高效能计算机及网格服务环境” 重大项目成果发布会合影

2010 年 12 月，第三台千万亿次高效能计算机 “神威蓝光”研制成功，并安装在国家超级计算济南中心。

神威 SUNWAY

图 12 神威蓝光高效能计算机

到 2010 年年末，在“高效能计算机及网格服务环境”这个重大项目支持下，我国建成了 14 个结点的国家级高性能计算服务环境，聚合计算能力**超过 3000 万亿次，是 2005 年的 167 倍**，存储能

力超过 15PB，部署了 450 多个软件与服务，支持了 1100 多项国家与地方科技项目。

2013 年，在科技部“十二五”863 计划信息技术领域“高效能计算机研制”重大项目的支持下，天河二号超级计算机系统研制成功。 6 月 17 日，世界超级计算机 TOP500 组织在德国莱比锡举行的２０１３国际超级计算大会上，正式发布了第 41 届世界超级计算机５００强排名，天河二号超级计算机系统以峰值计算速度每秒 5.49 亿亿次、持续计算速度每秒 3.39 亿亿次双精度浮点运算的优异性能位居榜首。这是继 2010 年国防科大研制的天河一号首次夺冠后，我国超级计算机再次登上世界超算之巅。中共中央总书记、国家主席、中央军委主席习近平对国防科技大学研制成功天河二号超级计算机系统做出重要批示，对取得这一成绩表示热烈祝贺，向参加系统研制任务的全体同志致以诚挚的问候。习近平指出，天河二号超级计算机系统研制成功，标志着我国在超级计算机领域已走在世界前列。

特别值得一提的是，“天河二号”超级计算机以每秒 33.86 千万亿次**连续 3 年六届（2013 年-2015 年）位列世界超级计算机 TOP500 排名榜首位，这标志着我国在超级计算机领域已走在世界前列。**

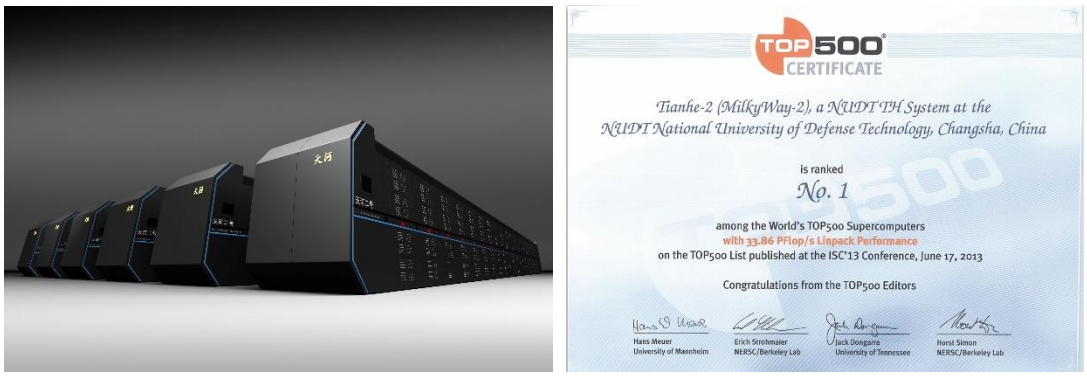


图 13 “天河二号”超级计算机及 TOP500 证书

2013 年 9 月 25 日，在科技部的指导与支持下，我国超级计算创新联盟正式成立。联盟将造机器、管机器、用机器三个群体有机联合起来，共同探索构建超级计算创新平台，促进行业技术进步和应用发展，更好地服务社会与广大用户，壮大我国超级计算事业。

图 14 超级计算创新联盟成立大会合影

2014 年 2 月 20 日，“十一五”国家 863 计划“高效能计算机及网格服务环境”重大项目成果“国家高性能计算服务环境关键技术与应用”在京顺利通过了成果鉴定。鉴定结论意见是：“该项目设计思想先进，系统复杂、规模大，参研单位多，研制难度很大。在具有新型服务形态的国家高性能计算服务环境、支持环境运行和应用服务的网格服务软件、万核级大规模并行计算技术和高性能

计算与网格应用等方面有重大创新，促进了我国高性能计算基础设施与高性能计算应用的跨越式发展，**整体技术水平处于世界领先行列**。鉴定委员会一致同意通过成果鉴定。”

图 15“国家高性能计算服务环境关键技术与应用”成果鉴定会

2014 年 9 月 25 日，在超级计算创新联盟成立一周年暨年度全体会议上，国家网格服务环境示范专网开通仪式正式启动，北京（中科院超级计算中心）、天津（国家超级计算天津中心）和济南（国家超级计算济南中心）三个示范节点的超级计算资源通过专网连接实现资源共享，并对外提供服务。

图 16 国家网格服务环境示范专网开通仪式

截止到 2015 年年末，国家高性能计算环境包含 15 个结点单位资源，聚合计算资源超过 12PFLops，聚合存储资源 34PB。具体信息如下表：

表 1 环境结点单位基本信息

序号	结点单位	资源概况
1	中国科学院计算机网络信息中心	计算资源 2300TFlops，存储资源 6000TB
2	上海超级计算中心	计算资源 400TFlops，存储资源 1000TB
3	国家超级计算天津中心	计算资源 4700TFlops，存储资源 4000TB
4	国家超级计算济南中心	计算资源 1100TFlops，存储资源 2000TB
5	国家超级计算深圳中心	计算资源 1271TFlops，存储资源 17200TB

6	国家超级计算长沙中心	计算资源 1372TFlops，存储资源 1280TB
7	清华大学	计算资源 104TFlops，存储资源 1000TB
8	香港大学	计算资源 31TFlops，存储资源 130TB
9	山东大学	计算资源 20Tlops，存储资源 20TB
10	西安交通大学	计算资源 15TFlops，存储资源 100TB
11	华中科技大学	计算资源 240TFlops，存储资源 500TB
12	中国科学技术大学	计算资源 288TFlops，存储资源 200TB
13	中国科学院深圳先进技术研究院	计算资源 210TFolps，存储资源 500TB
14	北京应用物理与计算数学研究所	计算资源 40TFlops，存储资源 100TB
15	甘肃省计算中心	计算资源 40TFlops，存储资源 50TB

1.3 完善期，砥砺奋进，聚合计算资源超过 20 亿亿次（2016-至今）

根据国家科技计划体制的改革，将科技部管理的国家重点基础研究发展计划（973 计划）、国家高技术研究发展计划（863 计划）、国家科技支撑计划、国际科技合作与交流专项，发改委、工信部共同管理的产业技术研究与开发资金，农业部、卫计委等 13 个部门管理的公益性行业科研专项等，整合形成一个**国家重点研发计划**。该计划针对事关国计民生的重大社会公益性研究，以及事关产业核心竞争力、整体自主创新能力和国家安全的战略性、基础性、前瞻性重大科学问题、重大共性关键技术和产品，为国民经济和社会发展主要领域提供持续性的支撑和引领。

2016 年 2 月 16 日，国家重点研发计划首批重点专项指南正式发布，这标志着整合了多项科技计划的国家重点研发计划从即日起正式启动实施。

2016 年，国家重点研发计划“高性能计算”重点专项经形式审查、预评审、正式申报、视频答辩评审、项目预算评估及项目任务书签订等环节，科技部高技术中心顺利完成了“高性能计算”重点专项首批 19 个项目的立项工作，对 10 个重点研究任务进行了部署。本重点专项的总体目标是突破 E 级计算机核心技术，依托自主可控技术，研制满足应用需求的 **E 级（百亿亿次级）高性能计算机系统**，使我国高性能计算机的性能在“十三五”末保持世界领先水平。研发一批关键领域/行业的高性能计算应用软件，建立国家级高性能计算应用软件中心，构建高性能计算应用生态环境。建立具有世界一流资源能力和服务水平的国家高性能计算环境，促进我国计算服务业发展。围绕 E 级高性能计算机系统研制、高性能计算应用软件研发、高性能计算环境研发 3 个技术方向，专项共设置了 21 个重点研究任务，实施时间至 2020 年底。

2016 年 6 月 20 日，在法兰克福世界超算大会上，国际 TOP500 组织发布的榜单显示，**“神威·太湖之光”超级计算机系统以 93PFlops 登顶榜单之首**。

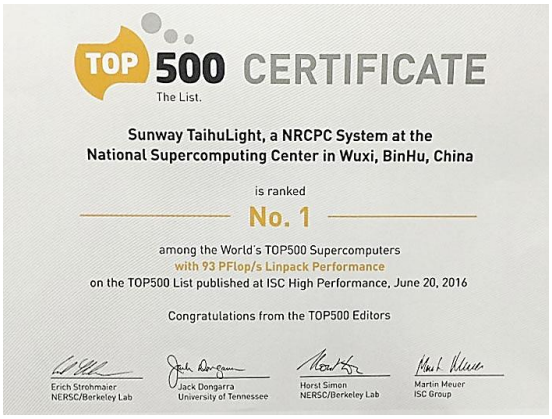


图 17 神威 太湖之光及 TOP500 证书

2016 年 10 月 19 日，中科院计算机网络信息中心牵头，国家重点研发计划“高性能计算”重点专项项目“国家高性能计算环境服务化机制与支撑体系研究”启动会顺利召开。国家高性能计算环境聚合国内优秀的高性能计算资源，面向用户提供便捷的高性能计算服务。该项目在“十二五”项目工作基础上预计将从资源接入评价和标准、核心服务优化、运行管理支撑体系完善、基础设施提升、综合评价体系等几方面开展服务化全面升级工作，预期构建具有基础设施形态、支持服务化模式运行的国家高性能计算环境，达到 E 级计算资源服务承载水平，提供用户个性化高性能计算服务，全面推动环境服务化建设迈上新台阶。该项目预期将突破高性能计算环境发展的几类技术和机制体制重大问题，激励各类超级计算中心加入环境共享计算资源，吸引更多应用领域的用户，促进产生更多的应用成果，推进行业应用发展，并促使从高性能计算机运维到用户应用服务形成良好的生态环境。

图 18 “国家高性能计算环境服务化机制与支撑体系研究”启动会

2017 年 3 月 16 日，在上海举行了中国国家网格合肥运行中心授牌仪式，宣布中国国家网格合肥运行中心正式启用。至此，高性能计算环境拥有北京/合肥双运行中心，数据可异地备份，服务更加可靠有保障。

图 19 中国国家网格合肥运行中心挂牌仪式

2017 年 9 月 15 日，超级计算创新联盟（以下简称“联盟”）在江苏无锡顺利召开年度全体会议。会议期间，举行了中国国家网格本年度新加入结点授牌仪式。迟学斌研究员对吉林省计算中心和上海交通大学授牌，加上之前加入的国家超级计算广州中心和国家超级计算无锡中心，**中国国家网格结点单位达到 19 家**。

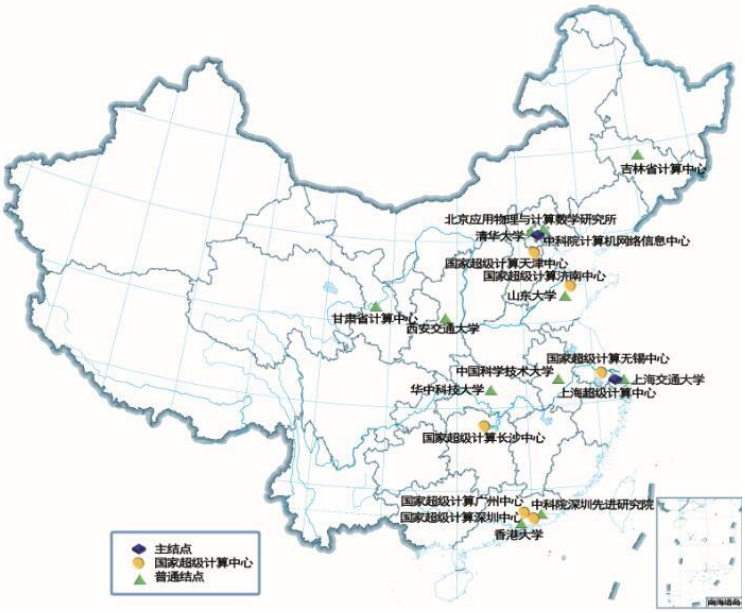


图 20 国家高性能计算环境资源分布图

2017 年 11 月，第 50 届全球超算 TOP500 榜单在美国丹佛的全球超算大会（SC17）上揭晓，排在榜首的仍然是来自中国的**“神威 太湖之光”**，**实现“四连冠”**；昔日冠军“天河二号”紧随其后。加上此前“天河二号”创造的“六连冠”记录，**中国已经连续五年 10 届（2013 年-2017 年）实现对该榜单的领跑。**此外，在这份榜单中，中国超算跻身全球 500 强的席位数由 6 个月前的 160 套升至 202 套，美国由 169 套降至 143 套。这也是继 2016 年 6 月中国超算份额首次以微弱优势（167 套：165 套）超越美国后，中国再次超越美国（202 套：143 套），不过此次中国超算远远超出。

截止目前，根据国家网格运行管理中心统计的数据，**聚合计算资源超过 200PFlops，总存储资源超过 167PB，总内存资源超过 104TB。**

1.4 小结

经过 20 多年坚持不懈的奋斗与努力，国家高性能计算环境建设进入了一个崭新的阶段，从基础设施建设到用户服务将全方位进一步提升，将更加高效地支撑领域应用，助力科技创新，加快行业科研成果的产业化应用。

第二章 国家超级计算基础设施

国家高性能计算环境（http://www.cngrid.org/）聚合了国内优秀的高性能计算资源和丰富的应用软件资源，通过资源共享面向全国科学研究、工程设计、产品开发和信息化建设等多个领域的用户提供了各类高性能计算与数据处理服务，支持了千余项国家各类科技计算和重要工程项目研究工作，初步形成了基础设施形态，已经成为我国经济、社会发展中不可或缺的组成部分。

中国国家网格环境目前包括 19 个结点单位，即：中国科学院计算机网络信息中心、上海超级计算中心、国家超级计算天津中心、国家超级计算济南中心、国家超级计算深圳中心、国家超级计算长沙中心、国家超级计算广州中心、国家超级计算无锡中心、清华大学、北京应用物理与计算数学研究所、西安交通大学、中国科学技术大学、山东大学、中国科学院深圳先进技术研究院、华中科技大学结点、上海交通大学、香港大学、甘肃省计算中心和吉林省计算中心。截止目前，环境聚合计算资源 200PF，聚合存储资源 167PB。

本章重点介绍北方主结点、南方主结点和六家国家超级计算中心的基础设施，以更全面了解国家高性能计算环境。

2.1 中国科学院计算机网络信息中心

2.1.1 中心简介

中国科学院计算机网络信息中心成立于 1995 年 3 月，是中国科学院科研信息化与管理信息化的系统集成、运行和服务保障机构，信息化应用技术的研发和示范基地。1994 年 4 月 20 日，一条 64K 的国际专线从计算机网络中心连入 Internet，实现了中国与 Internet 的全功能连接，从此中国成为第 77 个真正拥有全功能 Internet 的国家。二十余年来，计算机网络信息中心立足支撑与服务全院科研信息化和管理信息化，汇聚管理信息化资源，发挥了科研应用的信息化、学科交叉开放融合、科学思想传播和科研 信息化理念传播的先遣队作用，成为中国科学院信息化基础设施建设、运维和信息化基础服务的一支中坚力量，成为引领中国科研信息化建设和运行服务的一流信息中心。

计算机网络信息中心运行和管理我国最早的互联网骨干网之一的中国科技网（CSTNET），是国际学术网络的重要成员，与国内各互联网骨干网和欧美主要学术网络高速互联，承担着国家下一代互联网示范工程任务，在未来网络、云计算等前沿技术领域是国内一支重要力量。**在我国最早提供超级计算服务，是中国国家网格运行管理中心和北方主节点，是中国超级计算创新联盟的发起单位和中国首家英特尔并行计算中心**，在高性能计算领域的算法、软件与应用研发及人才培养方面发挥着重要作用。牵头中国科学院科学数据库的建设、运行和服务，已建成国内最大的科研存储设施和学科最广的基础数据资源，成为服务科技创新的数据资源中心和存储备份中心。同时还承担着国家物联网标识管理公共服务平台、中国科普博览、中国科学院网站群、中国科学院资源规划系统（ARP）、中国科学院重大科技基础设施共享服务平台、中国科学院大型科研仪器共享管理平台、中国科学院继续教育网等的建设、运行、服务与安全保障工作。

“十三五”期间，计算机网络信息中心将紧密围绕中国科学院“十三五”信息化发展规划，充分发挥信息化对中国科学院科技创新和科技管理的支撑保障作用，加强信息化技术研发与示范应用，

汇聚科技和管理信息化资源，促进科研模式转变和科学思想传播，大力培养信息化应用交叉学科领军人才，成为信息化基础设施建设、系统集成、运行管理和服务保障的一流信息中心，引领中国科研信息化发展。

2.1.2 超级计算基础设施介绍

目前中心对外服务的是最新一代千万亿次“元”超级计算机系统，分期建设运行，统一管理、调度。

图 21 中科院计算机网络信息中心“元”超级计算系统

一期计算系统总体计算能力303.4Tflops,其中CPU峰值152.32Tflops，MIC和GPU协处理器峰值151.08Tflops，具体分布如下：

- 刀片计算系统共有270台曙光CB60-G16双路刀片，CPU整体峰值性能达到120.96Tflops。每台刀片计算节点配置2颗Intel E5-2680 V2（Ivy Bridge | 10C | 2.8GHz）处理器，64 GB DDR3 ECC 1866MHz内存。
- GPGPU计算系统共有30台曙光I620-G15，GPU双精度浮点峰值达到83.64Tflops，其中CPU峰值13.44Tflops，GPU协处理器峰值70.2Tflops。每台GPGPU计算节点配置2块Nvidia Tesla K20 GPGPU卡，2颗Intel E5-2680 V2（Ivy Bridge | 10C | 2.8GHz）处理器，64 GB DDR3 ECC 1866MHz内存。支持CUDA、OpenACC、OpenCL，支持GPU Direct。
- MIC计算系统共有40台曙光I620-G15，MIC双精度浮点峰值达到98.8Tflops，其中CPU峰值17.92Tflops，MIC协处理器峰值80.88Tflops。每台MIC计算节点配置2块Intel Xeon Phi 5110P（8GB内存）卡，2颗Intel E5-2680 V2（Ivy Bridge | 10C | 2.8GHz）处理器，64 GB DDR3 ECC 1866MHz内存。支持对Xeon Phi的Offload卸载、Symmetric、Native原生模式调用。
- SGI UV2000计算系统共有32颗Intel Xeon E5-4620 八核处理器，主频2.60GHz，系统共享内存4TB，采用NUMA结构，单一系统映像，系统峰值约5Tflops。
- 系统配置1套采用56Gb FDR InfiniBand，全线速互连。
- 系统配置4台登陆节点，通过均衡负载实现单IP登录。

二期系统主要基于曙光 TC4600E 刀片平台和 W760-G20 机架式服务器搭建，总 CPU 计算能力为

550Tflops。具体参数如下：

270台刀片节点，279台MIC节点，16台GPU节点。

都采用Intel Xeon E5-2680V3处理器（2.5GHz、12核），单节点CPU计算能力0.96Tflops。

刀片节点配备256GB内存、机架服务器节点配备128GB内存。

采用100Gb EDR Infiniband高速交换网络互联。

“元”超级计算系统具有统一的文件系统，用户数据在两期节点都可访问。系统采用Stornext并行文件系统做用户HOME和公共软件区存储，可靠性高，用户可用容量165TB；采用曙光Parastor200做高性能工作区存储系统，I/O带宽高，用户可用容量为2.8PB。

2.2 上海超级计算中心

2.2.1 中心简介

上海超级计算中心（以下简称上海超算）是上海市经济和信息化委员会直属事业单位，是2000年上海市一号工程——上海信息港主体工程之一，是由政府投资，具有较高公信力的第三方高性能计算公共服务平台。上海超算是国内率先建立的首家集高性能计算应用、科研开发与创新、技术支持与咨询、人才培养和科普教育等多功能为一体的公共服务平台，面向全社会开放，资源共享，设施一流，成为我国在国际高性能计算领域的代表和上海科研创新能力的“名片”，有着广泛的国际影响力并初步具备国际竞争力。通过集约化建设、专业化服务、市场化运营，上海超算有力地支撑了基础科学和工业工程领域的原始创新，促进了重大成果的产出和关键问题的解决。近年来上海超算通过转型发展，开展了云计算、大数据、人工智能等业务，将新兴技术与高性能计算技术进行了有机融合，开辟了更广阔的应用领域。

上海超算的高性能计算服务立足上海，辐射华东，面向全国，用户遍及全国所有的省市自治区，建立起了符合行业特点并广受用户好评的运维和服务体系，支撑了一大批国家和地方政府的重大科学研究、工程和企业新产品研发，促进了国家重大装备、关键设备、能源安全、核心技术等一系列工程问题的解决，在航空、航天、汽车、船舶、钢铁、微电子、核电工程、装备制造、土木工程、环境气候、药物设计、生命科学、新材料、新能源、天文、物理、化学等等数十个重大工程和基础科学领域催生了一批重大成果，充分发挥了公共服务平台的支撑作用，产生了巨大的社会和经济效益。其用户和应用范围广、成果多、水平高。

一是支撑了上海工业转型升级，提高了企业的自主研发和协同创新能力。在解决国家重大工程问题和工业转型创新方面起到了重要支撑作用，促进了上海支柱性工业企业新产品的创新研发，应用的领域和方向在全球超级计算中心中具有鲜明的特色。用户单位主要是上海地区的重要大型企业和工程研究机构，包括中国商飞、中航商发、国家核电、上汽集团、沪东重机、上海电气、中船工业、宝钢集团等。

二是支持了国防科技的自主创新，加快了国防项目研发进展。支持了一批重大国防科技预研项目，包括预警机研制、航母相关设备和部件、空间站与飞船对接结构设计、卫星部件和材料设计等，解决了项目预研过程中发现的重大问题，为后续的项目实质实施和生产制造奠定了基础。

三是服务了重大基础设施工程建设，提升了工程设计能力与实施安全。支持了上海及周边地区的多项重大工程设计，包括上海外环线隧道、上海复兴路双层隧道、上海崇明越江隧道、上海青草沙水源市政工程、上海同步辐射光源地下工程整体建筑抗震设计、上海闵浦二桥、南京长江隧道工程等，预先优化和调整了设计缺陷，消除了安全隐患，确保了工程顺利实施和安全使用。

四是促进了基础科学的创新研究，催生了大量具有国际影响力的科研成果。支持了973、863、国家支撑计划、自然科学基金等多种科研计划，帮助用户产生了近三千篇 SCI 论文和两百多篇国际顶级学术期刊论文（国际顶级学术期刊包括《科学》、《自然》、《物理评论快报》、《美国化学会志》、《美国科学院院刊》，所有论文均在致谢部分说明使用上海超算资源或受上海超算支持）。用户单位主要是国内著名的大专院校和研究机构，包括清华大学、北京大学、中国科学技术大学、南京大学、复旦大学、上海交通大学、浙江大学、中科院上海药物研究所、中科院上海应用物理

研究所、中科院上海技术物理研究所、中科院物理研究所、中科院力学研究所等等。

五是满足了公益事业服务需求，提高了公益服务的质量和能力。为气候、气象、海洋、环境等领域提供了数值模拟分析服务，解决了精确天气预报、污染扩散、海洋潮汐预报、汛期减灾防灾等的计算需求，主要用户单位包括上海市气象局、上海市水务局、上海市环境监测中心、中国海洋大学等。

此外，上海超算还通过独立或联合承接了不少国家和地方科研任务。其中，国家 863 和自然科学基金项目近十项，上海市科研项目十余项，用户单位的横向合作项目数十项。十多年来获得多个国家和地方科技奖项，包括国家科技进步一等奖一项，二等奖三项，上海科技进步一等奖三项，二等奖四项。

2.2.2 超级计算基础设施介绍

上海超算自 2000 年建立以后，先后运行六台大型超级计算机，“神威 I”、“神威 64P”、“曙光 4000A”、“魔方（曙光 5000A）”，“魔方 2”和“蜂鸟”系统，由于老化原因，前四台系统已下电。其中“神威 I”是 2000 年国内最大规模的自主研发的超级计算机，峰值 3840 万次/秒； “曙光 4000A”超级计算机系统是“十五”期间“863”项目研究成果，峰值为 10 万亿次/秒，2004 年 11 月在 TOP500 中排名第十；“魔方（曙光 5000A）”是“十一五”期间“863”项目研究成果，峰值为 230 万亿次/秒，2008 年 11 月世界超级计算机 TOP500 第十，亚洲第一。目前上海超算在线运行的超级计算机是“魔方 2”系统和“蜂鸟”系统，“魔方 2”峰值为 400 万亿次/秒，主要用于科学计算；“蜂鸟”系统峰值为 30 万亿次/秒，专用于工业计算服务。

上海超算的超级计算机上的程序设计语言包括：并行 HPF、Fortran90、MPI、PVM 和 OpenMP；数学库包括：BLAS 基本线性代数库、PVM / MPI 科学计算库 ScaLAPACK、PETSc 等等。在丰富的系统软件环境的基础上，装备了大量的大规模的工程计算商业软件及前/后处理软件：Fluent、CFX、Star-CD、LS-DYNA、PAM-CRASH、ANSYS Multiphysics、MSC/Nastran、MSC/Marc、ABAQUS、FEKO、HyperWorksICEM-CFD、AI*Environment、GAMBIT、I-DEAS、Medina 等。科学计算类软件面向多个领域，主要有计算化学、纳米材料、晶体、分子动力学领域，计算生物学、大分子领域，气象、海洋、天文、环境模拟领域，流体力学、结构分析领域，数学、统计和系统应用程序等。典型应用软件有：ABINIT、CPMD、CP2K、NAMD、NWCHEM、SIESTA、EGO、GROMACS、LAMMPS 等。

上海超算拥有多种接入方式的高速网络传输平台，与中国科技网上海主结点光缆专线联结，与教育网上海交通大学主结点光缆专线联结，以及与企业用户的专网互联，用户访问超级计算机资源的网络得到充分的保障，系统支持外部 IPv6 高速互联。

2005 年 8 月上海超算正式成为中国国家网格南方主结点，是国家高性能计算环境的重要组成部分，承担了多项国家及地方网格建设项目，为高性能计算环境贡献了计算资源，与其他中国国家网格结点联合构成了开放的网格平台，有力地支撑网格环境的运行和应用网格的开发建设。

2.3 国家超级计算天津中心

2.3.1 中心简介

国家超级计算天津中心是 2009 年 5 月批准成立的首家国家级超级计算中心，部署有 2010 年 11 月世界超级计算机 TOP500 排名第一的“天河一号”超级计算机，构建有超算中心、云计算中心、电子政务中心和大数据研发环境,为全国的科研院所、大学、重点企业提供了广泛的高性能计算、云计算、大数据等高端信息技术服务。2013 年 10 月，天津超算中心也被国家发改委正式批准成立“大数据处理技术与应用国家地方联合工程实验室”，该实验室是国内首家在大数据领域的联合实验室。2016 年 7 月，“E 级计算机关键技术验证系统”已经通过国家科技部立项支持，启动研制，将在 2018 年上半年部署天津超算中心，并同步争取新一代“天河系列”百亿亿次整机系统研制，预计在 2020 年前后完成。

2.3.2 超级计算基础设施介绍

“天河一号”超级计算机采用 CPU 和 GPU 相结合的异构融合体系结构。硬件系统主要由计算处理系统、互连通信系统、输入输出系统、监控诊断系统与基础架构系统组成。软件系统主要由操作系统、编译系统、并行程序开发环境和科学可视化系统组成。峰值性能 4.7PFlops，持续性能 2.566PFlops（LINPACK 实测值）。计算处理系统包含 7168 个计算结点，每个计算结点包含 2 个 CPU 和 1 个 GPU，内存总容量 262TB，磁盘存储总容量 4PB，互连通信系统链路单向带宽 80Gbps。输入输出系统采用 Lustre 全局分布共享并行 I/O 结构;操作系统采用 64 位 LINUX;编译系统支持 C、C++、Fortran77/90/95、Java 语言，支持 OpenMP、MPI 并行编程，支持异构协同编程框架，高效发挥 CPU 和 GPU 的协同计算能力。

2.3.3 2017 年度里程碑事件

- 2017 年 6 月 29 日至 30 日，国家超级计算天津中心参展首届世界智能大会。天津市委书记李鸿忠,市委副书记、市长王东峰陪同全国政协副主席、科技部部长万钢视察了世界智能科技展专业展并莅临国家超级计算天津中心展台，高度认可天津超算中心取得的成绩。国家超级计算天津中心将以首届世界智能大会为契机，重点开展超级计算、云计算、物联网、大数据与人工智能的深度融合，全面支撑互联网、大数据、人工智能与实体经济的深度融合。
- 2017 年 7 月 9 日，滨海新区政府联合国防科技大学在国家超级计算天津中心组织召开了“百亿亿次超级计算机‘天河三号’建设方案”论证会。论证专家组由来自军委科技委、中科院、国家基金委、军事科学院、国家“高性能计算专项”专家组、南开大学、中石油、华大基因等单位的 15 位专家组成，其中有 6 位院士，军委科技委卢锡城院士任组长，科技部主管部门领导也参加本次论证。专家们充分肯定了天津超算中心和“天河一号”运行以来，在为国家重大科技创新和国家重点产业发展服务等方面取得的突出成就。大家一致认为，新一代天河系列超级计算机的建设实施，对推动国家重大发展战略和天津区域综合创新能力，提升国家高性能计算领域的核心竞争力意义重大。
- 2017 年 8 月 18 日，“京津冀大数据协同处理中心”启动会在国家超级计算天津中心召开，这

标志着“京津冀大数据综合试验区”建设又迈上一个新的台阶。 以国家超级计算天津中心为基础打造的“京津冀大数据协同处理中心”，是以“京津冀大数据综合试验区”建设为背景，重点建设面向大数据处理的超级计算与云计算融合的一体化基础设施。该设施以“天河一号”平台和正在研制的新一代“天河系列”平台为基础，实现数据处理能力达到每秒百亿亿次，数据存储能力超 EB（1,000,000TB）级，构建具备 E 级计算能力和 EB 级数据管理能力的自主大数据系统融合创新平台；依托融合创新平台部署面向行业大数据应用开发的基础创新环境，探索大数据处理、展示、安全等共性技术研究，协同解决大数据应用关键技术，实现大数据技术研发和创新应用环境的服务能力提升。通过协同创新研发合作机制和融合创新平台支撑，依托协同处理中心面向能源、交通、矿业、钢铁、医疗健康、智慧港口等行业领域提供大数据产业应用服务，提升产业发展和应用水平，将综合试验区建设成国际一流的大数据创新与应用领航区。

- 2017 年 11 月 22 日上午，国家超级计算天津中心正式发布“天津滨海工业云”2.0 版上线发布会在国家超级计算天津中心召开。“天津滨海工业云”2.0 版是在国家工信部、天津市工信委、滨海新区工信委的指导与支持下，由国家超级计算天津中心研发，为企业规划、产品设计和研发、生产、销售、服务等提供全流程的一站式综合云服务。该平台基于国家超级计算天津中心已有技术和资源基础，底层整合高性能计算、云计算和大数据框架，提供包括多个行业云平台、供需对接、企业展示、工业库、基础云服务、新闻资讯、产业联盟七大核心功能，涵盖装备制造、模具设计、汽车工业等十大行业领域，通过整合优势资源、打造智能生态环境，以降低企业的信息化使用门槛，加快制造业转型升级步伐为目标。

2.4 国家超级计算济南中心

2.4.1 中心简介

国家超级计算济南中心（以下简称为"济南中心"）是科技部批准成立的六个千万亿次国家超级计算中心之一，总投资 6 亿元。济南中心于 2011 年 3 月正式启动建设，当年 10 月 27 日落成揭牌并对外提供计算服务。济南中心的建设成功，标志着我国已成为继美国、日本后第三个能够采用自主处理器构建千万亿次超级计算机系统的国家。2011 年 10 月，经国家权威机构测试，济南中心的神威蓝光超级计算机系统持续性能为 0.796PFlops（PetaFlops，千万亿次浮点运算/秒），LINPACK 效率为 74.4%，性能功耗比超过 741MFlops/W（百万次浮点运算/秒•瓦），存储容量为 2PB。本单位拥有计算节点 9000 多个，近 15 万计算核心，组装密度和性能功耗比居世界先进水平，系统综合水平处于当今世界先进行列，完美实现了国家大型关键信息基础设施核心技术的“自主可控”目标。

神威蓝光超级计算机具有以下特点：一是全部采用国产 CPU，是我国首台全部采用国产 CPU 的千万亿次超级计算机；二是先进环保，采用板上冷却系统——通过水在冷板内部的封闭循环带走主板热量，几乎不损耗水且无噪音；三是高密度封装，一个机仓可装入 1024 个 CPU，千万亿次规模仅需 9 个机柜。神威蓝光超级计算机在 2011 年至 2012 年发布的中国高性能计算机 TOP100 排行榜中位居第二名；在 2013 年发布的中国高性能计算机 TOP100 排行榜中位居第三名。2015 年济南中心获得 GJB9001B 国军标资质，并在同年通过了武器装备科研生产单位三级保密资格的审查认证。

自运行以来，神威蓝光超级计算机已在天气预报、海洋环境预报、信息安全、电磁仿真、飞船

返回舱流体模拟、金融大数据分析、新材料分析等应用方面大显身手，成为促进基础科学创新和重大技术攻关的重要手段、加速企业科技创新的重要工具、凝聚高端技术人才的重要基地、“大众创业、万众创新”的载体平台。

2.4.2 超级计算基础设施介绍

国家超级计算济南中心位于济南高新开发区齐鲁软件园，机房建设在齐鲁软件园大厦 B 区，约 2300 余平方米，主要功能区域：主机房、前端机房、外围机房、高低压配电室、UPS 室和水泵房。其中包括国产主机系统、商用集群系统、存储系统、制冷系统、配电系统、显示系统等相关设备。

表 2 硬件资源

国产计算节点	8704 个申威 SW1600 处理器，每处理器配置：64 位 16 核心，主频 1.0-1.1GHz，作为 4 个节点使用，峰值性能 128GFlops，内存 16GB，访存带宽达到 102.4GB/s
商用计算节点	至强计算节点：700 个刀片节点，每节点配置：2 颗 64 位 Intel Xeon X5675 六核处理器，主频 3.06GHz，36GB DDR3 内存
	至强 v3 计算节点：30 个刀片节点，每节点配置：2 颗 Intel Xeon E5-2690 V3 十二核处理器，主频 2.6GHz，128GB DDR3 内存
	至强 v4 计算节点：34 个刀片节点，每节点配置：2 颗 Intel Xeon E5-2680 V4 十四核处理器，主频 2.4GHz，128GB DDR4 内存
登录节点	10 台，每节点配置：2 颗 64 位 Intel Xeon X5650 六核处理器，36G DDR3 内存
存储系统	在线 582TB，近线 1.57PB
I/O 聚合带宽	200GB/s
计算和存储网络	InfiniBand QDR/FDR，链路速率 40/56Gbps，聚合带宽 69.6TB/s 管理网络：以太网，链路速率 10G/1Gbps
操作系统	国产“神威睿思”并行操作系统
文件系统	高性能并行文件系统 SWGFS
系统管理	高性能并行文件系统 SWGFS
编程语言及环境	C、C++、Fortran、MPI、OpenMP
互联网接入	联通 200M 和教育网 100M 专线

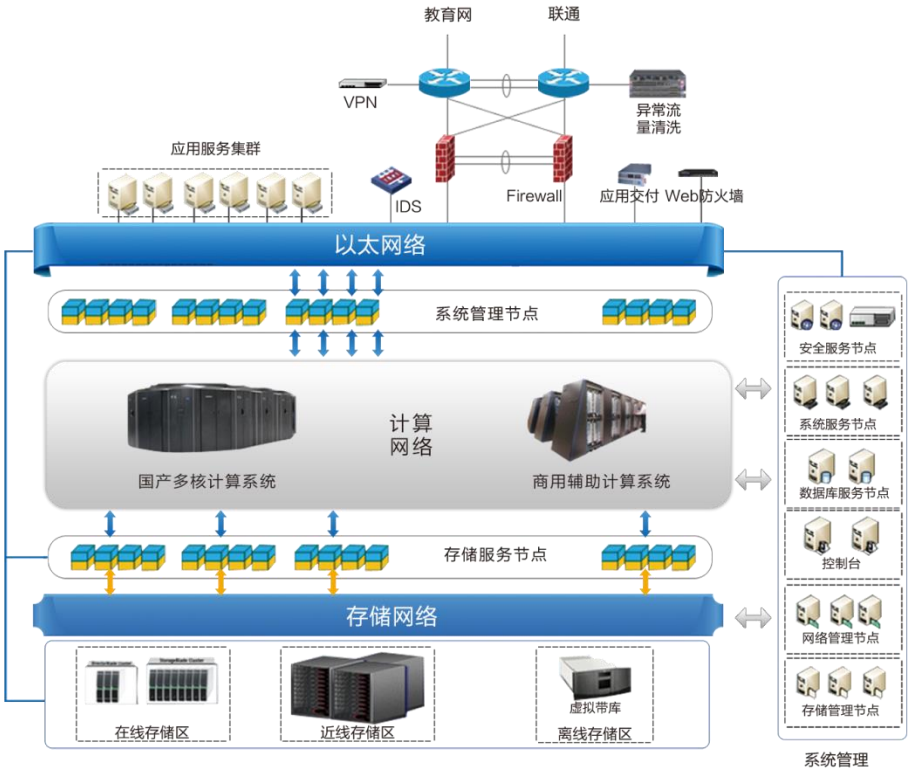


图 22 资源拓扑结构图

（2）软件资源

软件系统由基础/并行操作系统、基础编程环境、并行语言工具、并行应用开发平台、并行应用解算平台等部分组成，并可按需扩展应用软件，能够满足各领域大规模计算处理的需要。

1) 商用软件

表 3 软件资源

建模与数据处理	ANSYS ICEM CFD	结构分析	Abaqus/Standard (128核并行)
	ANSYS Mechanical PrePost		Abaqus/Explicit (128核并行)
	ANSYS CFD PrePost		ANSYS Mechanical (512核并行)
	Abaqus/CAE		MSC Nastran (推荐8-16)
	MSC Patran		MSC Marc (220核并行)
	Ls prepost		MSC Dytran (推荐8-16)
	Hypermesh		MD Nastran (推荐8-16)
	HyperView		Radioss (32核并行)
计算流体力学	ANSYS Fluent (512核并行)	安全碰撞、跌落	LS-DYNA (256核并行)
	ANSYS CFX (512核并行)		MSC Nastran (SOL700)
	Xflow (256核并行)		Radioss (32核并行)
多体动力学	MSC ADAMS	虚拟样机仿真	MSC EASY5
耐久性与疲劳	MSC Fatigue	材料库	MSC Mvision
结构优化	OptiStruct	热分析	MSC Sinda

2) 科学计算软件

表 4 科学计算软件

类 别	软件名称
生物医药软件	GROMACS、NAMD、DOCK、BLAST 、AUTODOCK、DL、ROLX、
	CPMD、XMD、CP2K、EGO、CELLILASE、HTseq、Plink、impute
材料科学软件	VASP、WIEN2K、CP2K、CPMD、Quantum espresso、SIESTA、
	SMEAGOL 、ALCMD、PSSP、PDIP、LAMMPS、multiscatter、
	OpenMX、vesta、dacapo
计算化学软件	ABINIT、GAMESS、NWChem、PSI Molpro、ACES II、Q-Chem
	CPMD、TINKER、GROMACS、NAMD、polvrate、Quantum
	espresso、DL_poly、Xian_CI、fhi-aims、dftd3
航空航天软件	MPCCFD、GKUES、OPENCED、OnenFOAM、Palabos
	Code_Saturne、gerris、superLBM
海洋环境软件	FOAM、HYCOM、FVCOM、POP、MOM、MITqcm、ROMS SIS
	GOCTM-UM、MSNUM-NWAM、CESM、ARWPOST
气候气象软件	MM5WRF、WPS、GRAPES、ARPS、CESM、CCSM3
	GCCESM、RegCM3、SWE
天体物理软件	CosmoMC、Gadget2
分子对接软件	DOCK、AutoDock
流体力学软件	OpenFOAM、Code、Saturne、Palabos
环保领域软件	SMOKE、CMAQ
金融分析软件	MCPRICE、Feynman-Kac
开源CAE软件	Code Aster、CAElinux、OpenFOAM、Palabos、Code_Saturne
大数据与人工智能	Hadoop、Hbase、Spark、Nutch、Solr、Caffe、TensorFlow、MXNet、Keras

注：以上表格所列软件仅为部分与国家超级计算济南中心软硬件资源相兼容的代码，用户如有其它软件的移植、安装、兼容性测试、可直接联系我们。对于需要购买、或/和注册、或/和签署协议获取使用许可的代码，如果用户需要在国家超级计算济南中心的超级计算机上使用这些代码，仅能在用户自己的目录下安装，并仅限于该用户自己使用，且用户须对合法性负责。

2.4.3 2017 年度里程碑事件

2.4.3.1 国家超级计算济南中心平台项目建设合作方面

（1） E 级原型机配套建设

2016 年 6 月，“E 级计算机关键技术验证系统”项目立项，2017 年完成了前端电源、冷却系统等方案的设计和机房改造，为 2018 年 E 级原型验证机落户于济南超算中心做好了准备。

（2）大数据与人工智能实验室

大数据与人工智能实验室针对海洋、医疗健康、智能制造等领域面临的数据融合、深度分析等共性问题，开展大数据智能、跨媒体智能、人机混合增强智能、自主智能等理论研究，围绕智能感知、智能决策、多源时空数据分析、跨媒体分析等方面开展关键技术攻关，研发自主智能柔性生产线系统、高端智库信息系统、慢病筛查系统、心血管智能诊疗系统、健康预警与指导系统、药物活性智能筛选系统等典型大数据及人工智能系统。基础环境平台建设包括云计算管理平台、云安全软件、大数据处理平台、人工智能平台；应用系统建设包括科教融合实训平台、科技智库信息平台、图像云标注平台、遥感数据应用集市、政务外网信息安全态势感知系统。

（3）山东省计算中心（国家超级计算济南中心）成功入围第一批《国家绿色数据中心名单》

12 月 20 日，工信部、国家机关事务管理局、能源局三部委印发《关于公布国家绿色数据中心试点地区名单的通知》，山东省计算中心（国家超级计算济南中心）成功入围第一批《国家绿色数据中心名单》。国家绿色数据中心试点认证不仅包含了 PUE（能源效率指标）评测，也将管理水平、技术应用能力等纳入考核指标，能够更加全面地体现数据中心的绿色节能管理水平。在绿色节能技术上，国家超算济南中心机房采用的先进技术包括：节能照明、冷水机组双模式自然冷却、气流组织优化设计、机柜冷热通道封闭、Dcups 供配电系统、智能电力监测系统、高性能运算冷板技术等，通过采用上述节能技术使国家超级计算济南中心本年度能效指标平均提高 8%以上，更好的保障了超算机房稳定、可靠、高效的运行。国家绿色数据中心试点的推进和实施，将有效推进数据中心绿色节能技术的创新和应用，助力我国数据中心产业健康、可持续发展。

2.4.3.2 战略合作与联合会议方面

（1）智能超算与大数据联合实验室

11 月 18 日，智能超算与大数据联合实验室在青岛海洋科学与技术国家实验室启动。该实验室将以构建国际一流海洋智能超算与大数据中心为核心目标。海洋国家实验室与北京大学、清华大学、山东大学、国家超级计算济南中心和浪潮集团等五家单位共同签署《共建“智能超算与大数据联合实验室”合作协议》，组建智能超算与大数据联合实验室。智能超算与大数据联合实验室以海洋战略性前沿技术体系构建和自主可控性重大软硬件系统研发为关键任务，以构建国际一流海洋智能超算与大数据中心为核心目标，是支撑透明海洋、深海极地、蓝色生命和智慧海洋等大科学计划的重要平台。智能超算与大数据联合实验室将承载一系列科研和产业化任务，推动大数据产业化，充分发挥海洋国家实验优势，实现多单位资源整合，高效服务于海洋强国战略。海洋国家实验室与国家超级计算无锡中心、国家超级计算济南中心签署共同构建超算大科学装置群战略协议，构建国际超算大科学网络基础设施，有效整合各高性能计算中心服务能力，共同服务于国际超大规模协同计算任务。立足已建成的 P 级超算，面向 E 级超算建设基础应用支撑体系，为海洋科学研究提供高弹性、高可用性的计算资源保障。

（2）第一届国产 CPU 并行应用挑战赛初赛评审会在济南成功举办。

8 月 25 日-8 月 27 日，由教育部高等学校计算机类专业教学指导委员会、中国计算机学会、中国计算机学会高性能计算专业委员会主办，国家并行计算机工程技术研究中心、国家高性能集成电路（上海）设计中心单位协办，中国计算机学会无锡分部、国家超级计算无锡中心、国家超级计算济南中心、北京并行科技股份有限公司承办的第一届国产 CPU 并行应用挑战赛初赛评审会在济南成功举办。国产 CPU 并行应用挑战赛旨在建设完善国产 CPU 的并行应用软件生态系统，激励学术和产业界开发国产 CPU 应用的积极性、创新性，将理论与实践相结合，硬件与软件共一体，从而发掘典型应用，培养创新人才。本届大赛共收到全国各地 21 个省、81 个单位 146 支报名队伍，16

支强队入围决赛！各参赛队在算法优化方面开展了众多尝试，有将计算数据加载到从核阵列上进行高效的加速计算，有使用众核加速线程库进行细力度众核优化，通过 SIMD、汇编指令重排、通信优化等手段，进一步提升效率，获得了数十倍到两百倍不等的加速比。

（3）11 月 2 日，2017（第五届）中国超级计算中心 CEO 联席会议在济南举行。

为了进一步加强国内超级计算中心之间的合作与交流，共同研讨超级计算中心持续性发展规划，经科技部高新技术发展及产业化司批准，由山东省计算中心（国家超级计算济南中心）主办的 2017（第五届）中国超级计算中心 CEO 联席会议与 11 月 2 日在济南举行。出席本次会议的有科技部高新技术发展及产业化司杨咸武副司长、信息与空间处问斌处长、尉迟坚处长、山东省科技厅高新处房德山处长、齐鲁工业大学（山东省科学院）崔雷副院（校）长、国内各大超算中心主任等。参会代表围绕“合作交流、可持续发展、典型应用”的主题开展交流。各超算中心 CEO 分别介绍了各自的运营和发展情况，并就中国超级计算应用、未来 E 级超算的发展之路、超算中心资源共享与协同发展、国家高性能计算生态系统建设、利用高性能计算促进人工智能和大数据的发展等问题展开了热烈讨论，达成了共识。本次超算 CEO 联席会议的召开，让“超级大脑”们组成一支“超级战队”，深入讨论并发挥协同作用，进一步提高我国超级计算中心的效能，提升超算中心的服务能力，拓展超级计算机应用领域，增强超级计算中心的核心竞争力，促进超算中心合作与交流，推动我国的科学研究和技术开发，促进经济和社会全面发展，并对优化国家科技战略布局、建设创新型国家产生深远的影响。

（4）12 月 14 日，2017 齐鲁国际计算医学暨医疗大数据论坛在济南举行

为促进我省大数据与新一代信息技术和医疗康养产业的协同发展，由山东省科学院主办，山东省计算中心（国家超级计算济南中心）等单位共同承办的“2017 齐鲁国际计算医学暨医疗大数据论坛”于 2017 年 12 月 14 日在济南成功召开。中国科学院贺贤土院士，英国和新西兰皇家学会 Peter Hunter 院士，科技部国际合作司庄嘉处长，山东省科学院党委书记王英龙，山东省科技厅科技合作处处长梁恺龙，济南市卫生和计划生育委员会副主任齐先文，美国石溪大学工学院院长 Fotis Sotiropoulos 教授，美国布朗大学和麻省理工学院 George Karniadakis，美国石溪大学邓越凡教授等来自国内外 60 余个相关机构，300 余名超算、大数据、生物医学等领域的专家、学者参加会议。会上，中国科学院院士贺贤土和齐鲁工业大学（山东省科学院）党委书记王英龙共同为齐鲁工业大学（山东省科学院）人工智能研究院揭牌，山东省内首家人工智能研究院成立。山东省计算中心（国家超级计算济南中心）主任杨美红研究员代表中方和美国石溪大学工学院院长 Fotis Sotiropoulos 教授代表美方共同签署了《共建“中美计算医学创新中心”合作协议》，组建中美计算医学创新中心

2.5 国家超级计算深圳中心

2.5.1 中心简介

国家超级计算深圳中心（深圳云计算中心）于 2009 年由科技部批准成立，是深圳市科技创新委员会归口管理的企业化管理事业单位。目前是全国计算机资源利用率最高的单位，自 2015 年以来计算机利用率达到一直在 80%以上。中心占地面积 1.2 万平方米，建筑面积 4.34 万平方米，其中机房楼 1.2 万平方米，科研楼 3.14 万平方米。

中心配置国产曙光 6000 超级计算机系统，世界超级计算组织实测曙光 6000 超级计算机持续运

算速度为 1,271 万亿次/秒，2010 年排名世界第二。中心创造性地将超算资源应用于云计算服务，使计算机资源既满足高性能计算需求，又能提供强大的云计算服务能力，获得了 2013 年国家科技进步二等奖；中心接入电信、联通、教育三线网络，预留了 20G 的出口带宽；中心基础设施条件居全国各超算中心之首，并被工信部评为全国首批 5A 级机房;深圳市政府投资 1 亿元为中心购置各类软件，使中心成为国内目前商业软件种类与数量最多的超算中心。

中心在应用与推广方面成绩突出，效果显著。中心与相关单位合作开发的工业云平台，实现了高性能计算的云服务模式。高性能计算业务实施三个层次的差异化发展战略，坚持“有所为、有所不为”的市场策略：重点发展科学计算、图形图像领域业务；大力培育生物、医药、海洋、石油等领域业务；积极开拓工程计算、大数据分析、人工智能等业务。中心良好的技术支持与服务，吸引了北大、清华、复旦、香港中文大学、中山大学以及中科院各研究院所等著名大学及科研机构成为中心科学计算的忠实用户。重点发展优势学科，特别是在动漫渲染领域，由中心支持完成的 3D 动画电影《熊出没》，连续四年高居国产动画片票房榜首位，预计 2018 年将持续保持该记录；云计算业务实施自主、联合、委托的多元化开发模式，以承担国家重点云计算示范项目—深圳市云计算公共服务平台为突破口，以 PaaS 技术为支撑，纳入 DaaS 相关技术，联合企业快速集成优秀产品搭建城市云公共服务平台，已形成教育云、健康云、工业云、政务云、警务云、渲染云、气象云、档案云、测试云、招标云、血液云、备份云、工程大数据云以及电子账单、应用商店的“十三云一单一店”格局，使该平台成为行业覆盖面广、服务功能齐全、用户数量众多的城市云公共服务平台。

中心累计申请中华人民共和国专利和知识产权 36 项，发表论文 32 篇，承担国家和省市级科研项目 37 项。2013 年—2015 年，深圳市政府采购中心计算资源服务费用为 1.6 亿元，中心实际为全市行政事业单位提供了 2.55 亿元的免费服务。中心经营收入年均达 1.3 亿元以上，其中仅 0.7P 规模的高性能计算资源创造了年均 2800 多万元的收益，是全国经营效果最好的超算中心。

2.5.2 超级计算基础设施介绍

国家超级计算深圳中心（深圳云计算中心）购置的曙光 6000“星云”超级计算机，具有丰富的计算资源、海量的存储资源；另外，超算中心还接入了充裕的网络资源，并建立了可靠的信息安全管理体系。

2.5.3 2017 年度里程碑事件

1. 健康云正式上线并提供服务，包含深圳市 1500 万市民健康数据、68 家市属医院及 600 多家社康医院数据。健康云平台已经实现了一系列便民惠民的互联网服务，平台集成了业内优秀厂商的软件及服务，充分展现出目前国内唯一的“第三方医疗健康服务平台”特有的服务功能与性能，同时实现了医疗健康信息“建设模式与盈利模式”双创新。
2. 被深圳市 2016 年纳入的十三五规划的超算中心 E 级机项目，由深圳市科技创新委员会邀请院士及行业专家完成需求评测。
3. 超算中心扩容升级项目已通过深圳市发改委审批。通过购置机架服务器，释放云计算业务所占的全部超级计算机资源，使超级计算机的全部资源（1.2P）为高性能计算资源，并使超算中心具备 1000 台以上机架服务器的云计算资源。

4. 深圳市工业设计云服务平台通过专家验收。

2.6 湖南大学国家超级计算长沙中心

2.6.1 中心简介

图 23 湖南大学国家超级计算长沙中心

国家超级计算长沙中心是继天津和深圳之后国家科技部正式批准建立的第三家国家超级计算中心，由湖南大学负责全面运营管理。

国家超级计算长沙中心位于湖南大学校区内，占地 43.25 亩，主体建筑面积 26254 平方米，工程总投资约 8.6 亿元；建有设施一流的超大型机房，具有良好的升级拓展和构建大型云计算中心的能力。采用“天河一号”高性能计算机，各项技术指标处于国内先进水平。该系统突破了多阵列可配置协同并行体系结构、高速率可扩展互连通信、高效异构协同计算、基于隔离的安全控制、虚拟化的网络计算支撑、多层次的大规模系统容错、系统能耗综合控制等一系列关键技术。具有高性能、高能效、高安全和易使用等显著特点，综合技术水平进入世界前列。

长沙超算中心定位为服务湖南及全国经济社会建设的公益性、公共服务平台，以政府支持为主、技术收益为辅。建设目标是立足湖南、辐射周边、面向全国，积极拓展服务领域，为社会和公众提供高性能计算应用服务；建设成为集科技研发、技术创新、人才培养为一体的数字基础平台，面向全社会提供开放共享服务的公共服务平台。一是为高校和科研院所的基础科学研究、科学计算和重大科学发现提供高性能计算服务；二是为气象、国土、水利、卫生、安全、交通、社保、文化、教育等政府部门提供自然灾害预警分析、气象预测、地质勘探、医疗卫生信息共享等大数据计算与存储、电子政务应用服务；三是为装备制造业、生物制药、材料科学、计算纳米技术、数字媒体和动漫制作等工业与信息领域企业提供专业软件资源与云计算服务。

自 2011 年，超算中心已经为气象、国土、水利、卫生、安全、交通等公共服务部门提供了高性能的计算平台服务，涉及科学研究、公共服务、工业产业和文化产业等领域。主机系统平均利用率处于国内超算中心的中上水平。中心与国内高性能计算、云计算和动漫渲染领域机构建立了战略合作关系。中心还建立了国内一流的先进装备制造仿真设计平台，已在省内外一些大型企业平台进行试用，中心面向全国装备制造企业提供大规模仿真设计公共服务。

2.6.2 超级计算基础设施介绍

长沙中心的天河一号系统中配置了 3 个管理结点、128 个存储处理与服务结点组成的服务阵列、64 个可视化结点构成的可视化阵列、4 个四路登陆服务结点、4 个八路服务结点及 26 个 I/O 结点。

主要技术指标如下：

- 全系统峰值计算性能 1372 万亿次，其中，全系统 CPU 峰值计算性能 317.3 万亿次，GPU 峰值计算性能 1054.7 万亿次；全系统内存容量 108.5TB，共享磁盘总容量 1.28PB。
- 全系统共包括 4586 个 CPU，其中 8 路 8 核 CPU 32 个，2 路 6 核和 8 核 CPU 4538 个，4 路 6 核 CPU 16 个，全系统共包括 2048 个 GPU。
- 系统配置 2048 个刀片结点组成计算阵列。结点采用 2 路 6 核 Intel Xeon Westmere EP 高性能处理器，主频 2.93GHz，内存 48GB，每个结点配置 1 个 Nvidia M2050 GPU，单个计算结点 CPU 峰值性能 140.64GFlops，GPU 峰值性能 515GFlops。
- 系统配置 128 个存储处理与服务结点组成服务阵列。结点采用 2 路 6 核 Intel Xeon Westmere EP 高性能处理器，主频 2.93GHz，内存 48GB，单个计算结点峰值性能 140.64GFlops。
- 系统配置 64 个可视化结点构成可视化阵列。结点采用 2 路 6 核 Intel Xeon Westmere EP 高性能处理器，主频 2.93GHz，内存 48GB，单个计算结点峰值性能 140.64GFlops;结点配置 Nvidia M2050 图形加速卡，峰值计算性能 515GFlops。
- 系统配置 4 个八路服务结点，采用 8 路 8 核结构，配置 8 个 Intel Xeon Nehalem EX 高性能处理器，主频 2.27GHz，内存 256GB，单个计算结点峰值性能 578.56GFlops。
- 计算阵列采用 THNI 定制高性能通信互连专网，双向通信带宽 160Gb/s，提供高带宽低延迟通信。
- 系统高速互连网络采用无阻塞线速千/万兆以太网交换结构，核心交换机提供 288 个千兆端口和 24 个万兆端口，连接登录管理结点、数据处理与服务结点、可视化结点、网络存储设备等。
- 系统由 26 个 I/O 结点组成大规模科学计算存储，采用对象存储体系结构，采用超高速专用网络和计算系统互连，共享磁盘容量 384TB；海量数据处理存储采用分布散列存储架构结合 SAN 和 NAS 存储结构，采用高性能互连网络与处理系统互连，共享磁盘容量为 892.8TB；全系统磁盘存储总容量为 1.28PB。
- 全系统功耗 1.212MW。
- 操作系统采用银河麒麟 Linux 操作系统，符合国际标准和规范，与 Linux 二进制兼容，提供安全隔离、用户登录控制等安全功能。
- 编译系统支持 C、C++、Fortran77/90/95；支持 MPI 3.0，OpenMP 3.0，支持 MPI/OpenMP 嵌套并行。
- 提供大规模分布共享并行文件系统 THGPFS 和 HDFS，支持 T 级文件数量和 P 级的数据存储，支持在线扩容，支持文件系统容错，为全系统提供统一文件系统视图。
- 资源管理系统功能强，提供作业运行状态的统计分析、作业调度、分区管理、调度策略定制、记账管理等功能；支持应用按需调度；提供全系统的自适应容错管理和能耗管理，稳定有效。
- 监控管理系统提供统一的系统管理、开关机、故障监控和诊断功能，对系统环境进行实时监测和安全监护，并为系统提供方便实用的调试、诊断、维护工具和手段。
- 系统支持多种容错和高可用技术，包括全系统监控诊断、部件热插拔、故障结点隔离、系统级检查点支持等。
- 系统提供实用的并行程序开发环境、Hadoop 分布编程框架、数据库服务、可视化服务，

以及多种应用服务软件，支持广泛的第三方应用软件。

- 系统配置 4 个登录服务结点，采用 4 路 6 核 Intel Xeon Nehalem EX CPU，主频 2.0GHz，内存 64GB，300GB SAS 硬盘×2, 高速互连接口，2 个千兆以太网。

图 24 长沙中心超级计算系统

2.7 中山大学国家超级计算广州中心

2.7.1 中心简介

国家超级计算广州中心是国家在“十二五”期间部署的重大科技创新平台，在国家科技部的支持下，由广东省人民政府、广州市人民政府、国防科技大学和中山大学共同建设，是支撑国家实施创新驱动战略和服务地方产业发展的重大科技基础设施，是中山大学面向学术前沿、面向国家重大战略需求、面向区域经济社会发展的需要，开展重大科学研究、服务国家和区域经济社会发展的重要支撑平台，围绕“天河二号”超级计算机推进高性能计算与大数据深度融合，打造科学研究、学科建设、交流合作、技术创新以及人才培养五大支撑平台，提倡“开放、合作、协同、创新”，力争取得一系列标志性成果，创建具有中国特色的世界一流超算中心。

2.7.2 超级计算基础设施介绍

国家超级计算广州中心业务主机“天河二号”超级计算机系统是国家十二五 863 计划重大项目的标志性成果。“天河二号”一期系统峰值计算速度每秒 5.49 亿亿次、持续计算速度每秒 3.39 亿亿次、能效比每瓦特秒 19 亿次双精度浮点运算。“天河二号”二期系统“天河二号 A”采用了国产加速器 Matrix 2000 来替代 Intel Xeon Phi 完成升级，“天河二号 A”系统峰值运算速度 9.50 亿亿次，总内存容量约 3.4PB，全局存储总容量约 19PB，同时还升级了国产网络系统至 14G，启用全新的并行编程环境。“天河二号”峰值计算速度、持续计算速度及综合技术水平处于国际领先地位，是我国超级计算技术发展取得的重大进展。

2.7.3 2017 年度里程碑事件

1) 2017 年 3 月 21-23 日，“中国—挪威超级数据国际合作项目启动会”在超算中心召开，广东省科技厅、广州市科创委、挪威驻穗领事馆、斯塔凡格大学、挪威 Simula 国家实验室、超算中心等各单位代表共聚超算中心，共同开启超级数据项目，对相关领域技术进行了深入研讨。

2) 2017 年 4 月 19 日，香港特别行政区行政长官梁振英一行考察国家超级计算广州中心。中央政府驻港联络办副主任仇鸿、广东省港澳办主任廖京山、广州市政府副秘书长刁爱民、广州市科创委副主任刘泉宝、番禺区区长陈德俊、副区长谭斌陪同考察。中山大学校党委书记陈春声、校长罗俊、粤港澳发展研究院院长郑德涛、超算中心主任卢宇彤等接待了代表团一行。

3) 2017 年 5 月 22 日，由英国驻广州总领事馆、广东省大数据局、国家超级计算广州中心联合举办的“2017 年中英（广州）大数据合作大会”在国家超级计算广州中心隆重召开，来自中英两国近 200 名政府、企业和科研机构代表出席本次大会，共同分享在大数据应用领域的创新成果，探讨多领域深化合作、实现共赢。

4) 2017 年 6 月 19 日，国家超级计算广州中心代表团赴德国法兰克富参加 ISC 2017，大会开幕式上，“天河二号”副总设计师、超算中心主任卢宇彤教授当选 ISC Fellow，成为中国首位获此殊荣的学者，全球唯一一位女性 ISC Fellow。

5) 2017 年 6 月 30 日至 7 月 4 日，国家超级计算广州中心成功组织实施了由国家人力资源社会保障部重点资助的国家专业技术人才知识更新工程 2017 高级研修项目《“天河二号”云超算技术与大数据处理技术高级研修班》，共吸引了高性能计算、云计算、大数据等相关领域的百余位高层次专业技术人才及高级管理人才积极参与。

6) 2017年9月，“天河二号”二期系统“天河二号A”采用了国产加速器Matrix 2000来替代Intel Xeon Phi 完成升级，“天河二号 A”系统峰值运算速度 9.50 亿亿次，总内存容量约 3.4PB，全局存储总容量约 19PB，同时还升级了国产网络系统至 14G，启用全新的并行编程环境。

7) 2017 年 9 月 19-20 日，“2017 国际高性能计算论坛”（IHPCF 2017）在广州大学城南国会国际会议中心隆重拉开帷幕，该论坛由国防科技大学高性能计算国家重点实验室主办，国家超级计算广州中心承办，国家科技部、教育部、国家自然科学基金委赞助支持。来自美、日、德、俄、中等国内外从事超级计算机研制、超算技术及超算应用技术研究的 150 名专家、学者出席了本次大会。本次大会是国家超级计算广州中心进一步融入国际超算大家庭，代表中国超算进行国际交流合作的重要举措，为全球协同创新奠定了良好的基础。

8) 2017 年 10 月，中山大学国家超级计算广州中心四楼机房建设启动预计 18 年 2 月启用，将为超算中心提供 718 个标准机柜，提供大于 180PB 存储容量的安装条件，提供集群式服务器云平台的安装能力。

9) 2017 年 11 月 2 日下午，国家超级计算广州中心走进广州市人大常委会从 2012 年起开设的大型系列讲座——“羊城代表学堂”，超算中心主任卢宇彤教授作“超级计算与科技创新”的专题讲座，广东省、广州市人大代表，市科创委、市科协以及市人大常委会机关干部等约 120 人聆听了讲座，共同探讨超算的技术、应用与发展。

10) 2017 年 11 月 14 日，第 50 届 TOP500 榜单发布，天河二号成为全球唯一一台 TOP500、HPCG 两个权威榜单都进前三的系统，体现其平衡系统设计的优势。

11) 2017 年 12 月 8 日，超算中心主任卢宇彤教授应邀出席 2017 年《财富》全球论坛“智能制造与万物互联”分论坛，与参会的各财富论坛 500 强企业代表等畅谈智能制造、物联网新格局对全球科技、经济和社会发展带来的改变与未来发展趋势和新要求。

12) 2017 年 12 月 15 日，国家超算广州中心 2017“天河二号”用户年会在广州华金盾大酒店隆重召开。科技部、中山大学、国防科学技术大学和广东省、广州市主管部门领导出席本次会议，还有来自全国各地高校、科研院所和企业的 320 多位用户代表齐聚一堂。

13) 2017 年 12 月 24 日，国家自然基金委-广东省联合基金大数据科学中心重大专项 2017 年度学术交流会在国家超算广州中心召开，国家自然基金委副主任高文院士、广东省科技厅基础处钟自然处长等出席会议。

2.8 国家超级计算无锡中心

2.8.1 中心简介

国家超级计算无锡中心经国家科技部批准成立，由国家科技部、江苏省和无锡市三方共同投资建设。中心坐落在风景秀丽的江苏省无锡市蠡园经济开发区，拥有世界上首台峰值运算性能超过每秒十亿亿次浮点运算能力的超级计算机——“神威·太湖之光”。该系统是我国“十二五”期间“863 计划”的重大科研成果，由国家并行计算机工程技术研究中心研制，运算系统全面采用了由国家高性能集成电路设计中心通过自主核心技术研制的国产“申威 26010”众核处理器。“神威·太湖之光”也是我国第一台全部采用国产处理器构建的世界排名第一的超级计算机。

国家超级计算无锡中心是无锡市政府直属事业单位，由清华大学与无锡市政府共同建设，并委托清华大学管理运营。国家超级计算无锡中心依托“神威·太湖之光”计算机系统，根植江苏、覆盖长三角、拓展全国、放眼全球，与国内外专家、应用单位等进行密切合作。面向生物医药、海洋科学、油气勘探、气候气象、金融分析、信息安全、工业设计、动漫渲染等领域提供计算和技术支持服务，承接国家、省部等重大科技或工程项目，为我国科技创新和经济发展提供平台支撑。

国家超级计算无锡中心将利用中心的优势资源， 结合江苏省“十三五"规划提出着力建设具有全球影响力的产业科技创新中心和具有国际竞争力的先进制造基地的战略新定位，建成具有明确应用背景的高性能计算技术重大应用研究与支撑中心，充分展示高性能计算作为科技创新核心竞争力和强力引擎的价值，成为国内高性能计算人才聚集地和国内外重要并行应用软件研发基地，实现超算中心的可持续发展。

2.8.2 超级计算基础设施介绍

神威·太湖之光高效能计算机由 40 个运算机柜和 8 个网络机柜组成。每个运算机柜比家用的双门冰箱略大，打开柜门，4 块由 32 块运算插件组成的超节点分布其中。每个插件由 4 个运算节点板组成，一个运算节点板又含 2 块“申威 26010”高性能处理器。一台机柜就有 1024 块处理器，整台“神威·太湖之光”共有 40960 块处理器。每个单个处理器有 260 个核心，主板为双节点设计，每个 CPU 固化的板载内存为 32GBDDR3-2133。

- 系统峰值性能：125.436Pflops
- 实测持续运算性能：93.015Pflops

- 处理器型号："申威 26010" 众核处理器
- 整机处理器个数：40960 个
- 整机处理器核数：10649600 个
- 系统总内存：1310720 GB
- 操作系统：Raise Linux
- 编程语言：C、C++、Fortran
- 并行语言及环境：MPI、OpenMP、OpenACC 等
- SSD 存储：230TB
- 在线存储：10PB，带宽 288GB/s
- 近线存储：10PB，带宽 32GB/s

同时配置商用辅助计算系统，主要指标如下：

- 运算性能：1Pflops
- 内存容量：160TB
- 980 个普通计算节点：2 路 12 核心、主频 2.5GHz、内存 128GB
- 32 个胖计算节点：8 路 16 核心、主频 2.2GHz、内存 1TB
- 64 个 IO 服务节点：对计算节点提供高速 I/O 资源扩展和共享服务

第三章 国家高性能计算环境关键技术突破

在国家十三五重点研发项目支持下，国家高性能计算环境将重点突破环境资源准入和分级标准、基于应用的全局资源优化调度、环境运行管理支撑、环境构建与资源提升等关键技术,构建具有基础设施形态、支持服务化模式运行的国家高性能计算环境，提升环境资源能力，提供用户个性化高性能计算服务。

3.1 突破高性能计算服务量化评价技术，初步建立环境资源准入和分级标准体系形成《国家高性能计算环境资源评价标准白皮书》

针对国家高性能计算环境在计算服务化模式运行对服务水平和资源评价体系量化的需求，在确定评价集群计算服务水平、网络服务水平的可量化指标的基础上，定义资源评价综合指标并建立计算综合指标的方法，建立环境资源的准入、分级标准，构建支持服务水平量化的软件系统，支持和引导用户合理使用资源，形成全局统筹的资源布局。目前相关研究已初步形成《国家高性能计算环境资源评价标准白皮书》。

在环境服务水平的可量化指标研究方面，针对国家高性能计算环境中资源种类的复杂多样性，研究可用于描述资源服务水平的可量化指标，在对高性能环境中现有各超级计算中心进行大量网络和计算测试的基础上，分别研究网络服务水平和集群计算服务水平的量化指标。对于网络服务水平的研究，综合考虑资源的网络出口带宽，不同地域的响应速度、连通性和稳定性，进行全方面的网络测试。对于集群计算服务水平的研究，充分考虑不同系统、不同架构、不同算法、不同应用对资源计算性能的影响。通过研究高性能计算环境中的现有应用状况，进行典型应用测试。在大量的测试数据集上， 取可用于表达环境服务水平的特征量，进而形成网络服务水平和集群计算服务水平的可量化指标，同时为定义资源评价综合指标、探索综合指标的计算方法提供信息和支持。

环境资源的软硬件条件是高性能计算环境对外提供服务的基础，针对高性能计算环境中的计算、存储和网络资源研究制定一整套指标体系，用于评测环境中现有的和今后要加入到环境中的各类资源，其目的在于评估资源的服务能力，为环境建设提供指导，为用户使用环境资源提供参考。

高性能计算环境中的主要资源是高性能计算集群。评价指标体系围绕高性能计算集群的性能、可用性、服务质量等方面进行设计，以表征高性能计算资源各方面特性及其相互的联系。指标体系包含的各个指标将构成具有内在结构的有机整体。设计原则如下：系统性原则，典型性原则，科学性原则，可比、可操作、可量化原则，动态性原则，综合性原则。依据评价指标的设计原则和评测高性能计算环境资源的要求，资源评价指标体系将由性能指标、可用性指标、可靠性指标、安全性指标、需求管理指标、技术支持和服务响应指标等组成,构成一套完整的体系,不仅反映高性能计算集群软硬件的性能、可用性、可靠性，也反映出环境资源服务质量的好坏和应用水平的高低，为高性能计算环境的建设和发展提供依据。

性能指标用于评估高性能计算环境中高性能计算集群系统的计算性能，是评价体系的核心。白皮书对于规格指标制定了规格指标说明表来明确每一个规格指标的定义、指标值和类型；对于重要的测试指标，不但有指标的说明，还明确了三种基本的测试场景（SP、EP、GP）；对一些复杂的基

准测试，如“浮点计算性能基准测试”进行了详细的说明，不但阐述了其基本算法特点，还对测试过程中的指标评测过程进行了说明，达到了制定的“可比、可操作、可量化原则”。白皮书根据典型性和科学性原则来确立应用测试的评价方式，并选取了一套基本的应用测试程序。对于可用性指标，白皮书中细分为软件配置、资源服务来进行评价。

在资源评价综合指标的计算方法研究方面，针对国家高性能计算环境服务化运行下对不同资源定价收费的需求，在环境服务水平量化指标研究的基础上，综合考虑计算环境中最重要的计算系统和应用两大因素，根据系统规模、系统功能、系统性能、系统可用性以及典型应用的实际运行效果，建立综合评价的数学模型，定义资源评价综合指标。通过建立标准测试程序集和测试规范，开展综合指标的计算方法研究，用于系统、规范地计算资源服务水平和有效评估资源服务质量。在此基础上研究资源准入、资源分级的标准与规范，进而确定资源的准入门槛，并为资源的定价收费供基本依据。

目前在白皮书中对资源评价中使用到的方法的原理和技术进行说明，基本完成了测试程序集和测试规范的建立。针对具体的评价指标，如“理论浮点峰值”，在白皮书中详细说明了计算方法。对于需要测试的评价指标，白皮书中列出了可供参考的基准测试包和计算测试方法，对于一些测试，在白皮书中还提供了优化方法和参考的测试参数。

在支持服务水平量化的软件系统方面，我们建立了面向服务指标的软件系统,支持资源服务水平的量化评测，通过软件系统的结果实现对资源的服务量化分级，支持和引导用户合理使用资源，形成全局统筹的资源布局。目前软件的开发工作已经开展，已经完成了初步的软件框架设计，并完成了基本测试集的选择和运行。对于测试集，综合了 HPCC、HPCG、NPB、SHOC 等个国际主流测试程序，能够对高性能计算系统的浮点计算性能、整数计算性能、内存性能、通信性能、磁盘 IO 性能等多个维度进行评测。选取的测试应用集则涵盖了材料计算、有限元计算、LBM 计算、基因组组装计算等多种主流的算法模型和应用特征，能够有效评测系统在面对不同应用场景下的表现。

3.2 突破作业时长预测技术，建立环境作业历史数据库并分析建立典型应用作业预测模型

将高性能计算环境中两个结点单位的三个超级计算机上的作业数据根据“并行作业负载资料库整理为 SWF 格式并发布。 PWA 所使用的 SWF 为开放的任务记录格式，其中将可能涉及用户隐私的敏感信息用数字代替，保护了用户的信息安全。该资料库积累了从 1993 年以来 38 个系统的数据，为业界广泛使用，近年来相关文献每年有 2000 余篇，在超级计算任务调度等研究工作中起到了重要的作用。但该资料库中数据较老（最新数据为 2015 年捷克 MetaCentrum 系统的数据），也没有中国的超算系统的数据。因此建立我国自己的超算任务负载资料库，为超算研究提供更新更全的基础数据。截止 2017 年 10 月 24 日，已收集高性能计算环境中两个结点单位共计超过 143 万条作业日志。这些日志的主要字段是对作业描述和机器描述两部分：对这些作业数据进行一般性分析，发现一些规律，例如：

1）时长分布规律：针对所有作业以及分用户、分应用的作业统计了运行时间的分布，发现对于作业数足够多的统计结果显示，其作业时长分布为幂律分布。

2）用户提交作业的时间具有成团聚集的性质，而且距离时间较长的两团作业，其运行时间的差距也较大。

3）相同用户作业具有前后相关性。

选取应用最广泛的开源软件 VASP 为典型应用，选取运行作业数据库中 3.5 万个数据对作业输入参数进行分析。建立针对 VASP 的作业特征的模型，选取作业描述特征参数：（I）CORENUM：作业所占 CPU 核心数；（II）EXETIME：作业运行时长；（III）KPOINTS：表示晶粒内部原子数；（VI）VOLUME：表示晶粒的体积。对数据进行规范化处理。然后，建立预测系统结构,定义了基于随机森林（RF）的二次预测模型 IRPA。第一步，对三个子模型分别训练；第二步，从子模型训练结果得到四元组[preVal1,preVal2,preVal3,label]，前三个值为三个模型的预测值，label 为最佳模型标记；对这个四元组训练一个 RF 分类器；第三步，对新作业，预测出每个适用模型的概率；第四步，使用三个模型分布预测时长，然后加权平均得到最终预测结果。如下图所示：

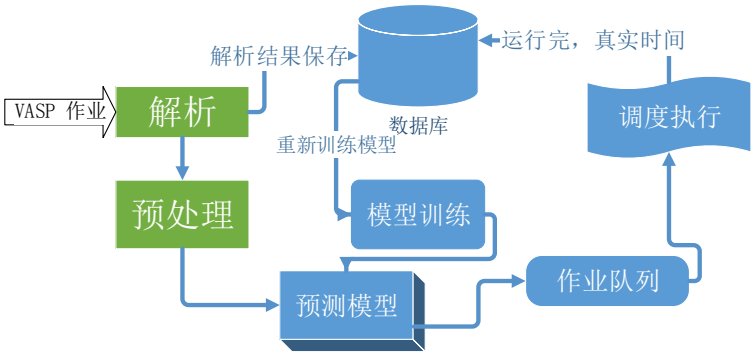


图. VASP 作业时间预测系统结构

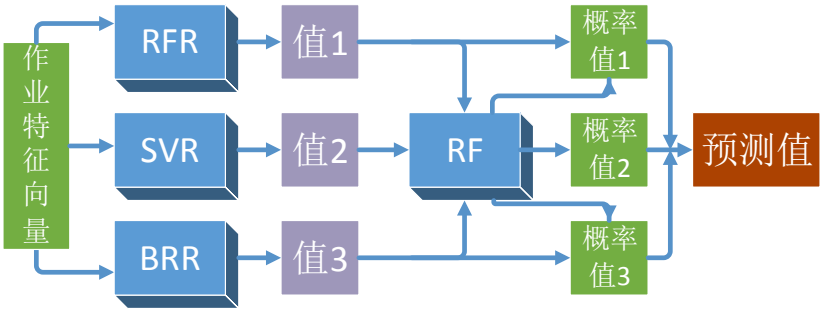


图 25 IRPA 预测模型结构

采用二次预测模型 IRPA 对已有的 VASP 作业进行模型训练，前 80%作为训练集，后 20%作为测试集。预测评价的标准是衡量预测的准确率（ACC）：预测作业运行时间在 T 范围内正确的比例和召回率（REC）：真实作业运行时间在 T 范围内被找到的比例。T 是指定时间范围。作业运行时间结果如下图。

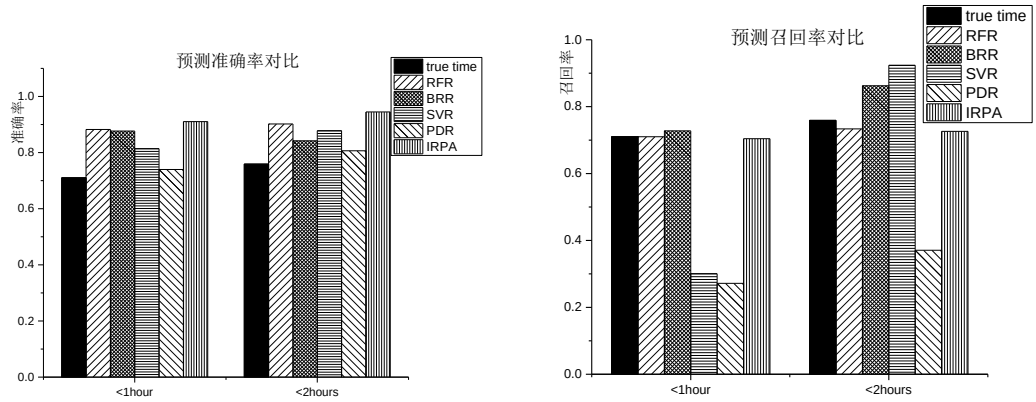


图 26 各模型不同范围内作业运行时长预测结果 RCC 对比

在作业执行预测研究基础上，我们开展了多中心之间的自适应任务迁移机制的探索工作。由于任务迁移的源中心与目标中心之间，无论是硬件配置和软件环境，往往存在较大差异，有可能导致任务迁移后没有按照预期运行。因此，我们在计算材料学、流体力学等领域，选择若干典型应用，如 Lammps、Quantum ESPRESSO、Fluent 等，以实验验证的方式，观察这些软件在源中心和目标中心迁移后的运行状态，并记录原始数据。目前已经积累了 Lammps，Fluent 应用多个算例，在不同的编译环境，不同的并行库等条件下的实验数据。今后还将继续对其它常见典型应用进行测试，希望探索出任务迁移后是否能够正常运行做出合理预期的方法论。

同时，我们开发一个可使用的任务迁移模块。不同类型的应用具有不同的作业运行方式和参数设置选项造成了迁移任务恢复的复杂度。根据多中心之间的任务迁移机制，不同类型的应用需要提供相应的运行脚本和数据源信息。超算中心运行的迁移任务 Agent 运行环境需要对提交任务状态信息、运行脚本、源数据这些信息封装、打包。目前正在开发基于 Torque 任务调度器的迁移模块原型，可实现了 Lammps，Fluent 任务迁移。

3.3 突破支持多模式运行的环境管理多项技术，构建可高效运行的国家高性能计算环境运行支撑业务系统

针对国家高性能计算环境在资源高效利用和服务化运营对运行管理支撑技术和平台的需求，在研究支撑多模式运行的国家高性能计算运行管理支撑平台架构和实现方法的基础上，通过解决多维度监控与可视化、环境资源优化配置管理、多粒度计费和服务结算、环境系统日志安全分析、问题分发和追踪等平台运营关注的重点问题，构建保障多模式运营的国家高性能计算环境运行支撑业务系统。

（1）多维度监控和环境状态可视化方法研究

针对国家高性能计算环境中的多层次、多维度的资源分布和状态变化，结合用户和业务行为的不同特征，重点研究节点、集群、中心和环境多层次，资源、用户和业务多维度监控数据采集以及数据信息的高密度展示和业务状态的动态可视化方法与技术，进而形成较为完善的多维度、可视化监控管理能力，同时，为环境资源优化与配置、计算业务分配与调度、异常事件的诊断与追溯、用户状态管理与分析等功能提供信息和支持。

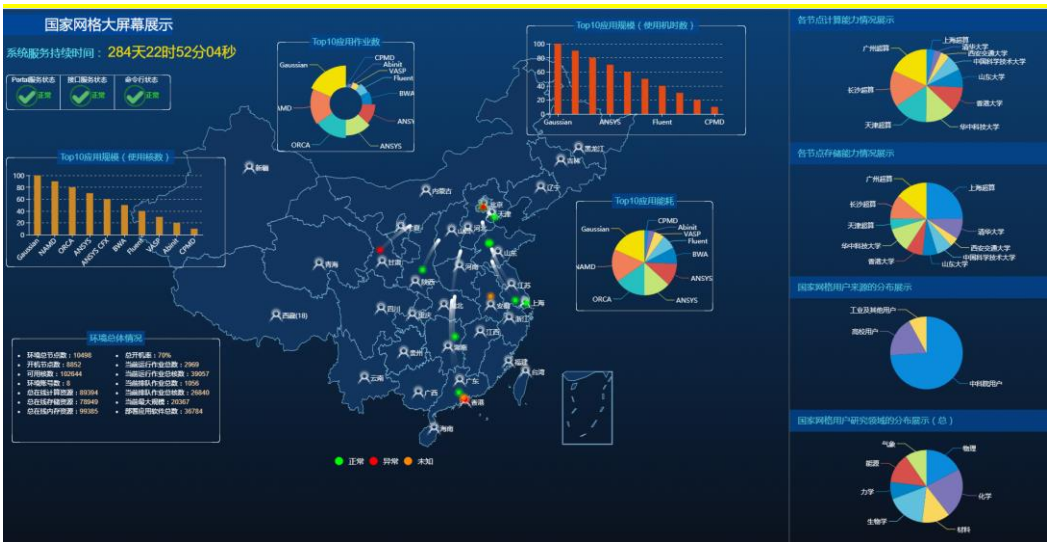


图 27 环境可视化大屏幕展示效果

基于节点、集群、中心和环境多层次，资源、用户和业务多维度的监控数据获取，实现面向不同人群的监控信息展示，重点研究实现整个环境运行状态的统计数据和实时变化的可视化方法，并在运管中心的大型展示设备上完成环境运行情况的动态效果展示，和主要统计数据的显示，同时，用滚动的方式展示各结点相关数据，通过数据图表展示、评价各结点情况和贡献。

高性能计算应用服务环境用户关注自身应用的运行情况，希望应用可以高效运行，需要信息全面、响应速度快的应用监控系统，以辅助了解当前系统各种软硬件的使用情况。通过实时分析应用程序的运行性能瓶颈，基于对各种行业应用特征的捕捉和专家系统设定，可以在行业应用运行发生性能问题时及时发出报警，并给出优化建议辅助用户优化软硬件系统以提高整体系统的利用率。在监控结点和环境机群系统性能状态的同时，将性能数据保存为应用性能特征文件，实时保存应用运行现场，供离线性能分析使用。

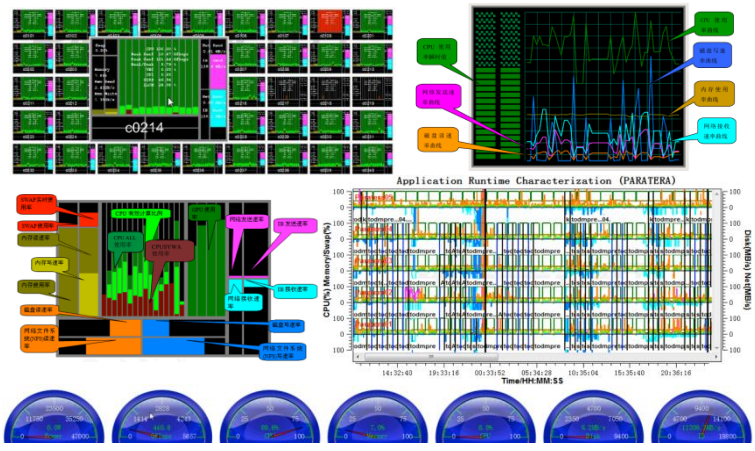


图 28 环境监控分析

应用运行时的特征分析可以分析应用运行特征文件，显示应用运行时各结点中处理器、内存、网络和磁盘的性能数据，重构结点及环境中的应用运行过程，高效、准确地描述应用的运行特征。硬件厂商的方案设计人员根据用户应用运行特征图，可以清楚的了解应用在运行的各个阶段，对硬件设备处理器、内存、网络和磁盘等各部分的需求情况，基于这样准确的数据分析，方案设计人员可以提供有针对性、真正符合用户应用需求的设计方案。应用软件优化人员根据用户应用运行特征图，可以准确了解用户应用程序的运行状态，了解程序运行热点段对各种硬部件的依赖程度，快速

定位系统性能瓶颈，找到应用优化的空间和方向。

（2）多粒度计算管理机制与方法研究

在通过监控用户对资源的使用情况并实现细粒度记账的基础上，充分考虑环境中资源的多样性、差异性、分布特点，设计合理的定价机制和多类别记账策略，支撑国家高性能计算环境服务化方式的运行。通过统计用户对资源的使用情况实现细粒度记账，记录资源的使用状况，包括机时、存储、网络等硬件的使用和软件核时数的使用等用户使用资源的信息、频率以及能耗的数据等。在记账的基础上为不同资源定义不同的计费标准和策略，提供可定制的定价机制和多类别计费策略，根据合适的经济模型动态设定、调整和加入计费策略。由系统运维人员按需为不同的用户提供不同的服务级别，并生成针对不同人群、不同服务质量和不同等级的计费规则，为多模式运行管理提供多样化的结算功能。提供在记录资源使用状况的基础上进行收费的能力，从而支持国家高性能计算应用服务环境资源的合理优化管理，为环境的服务质量和服务级别管理提供保障。

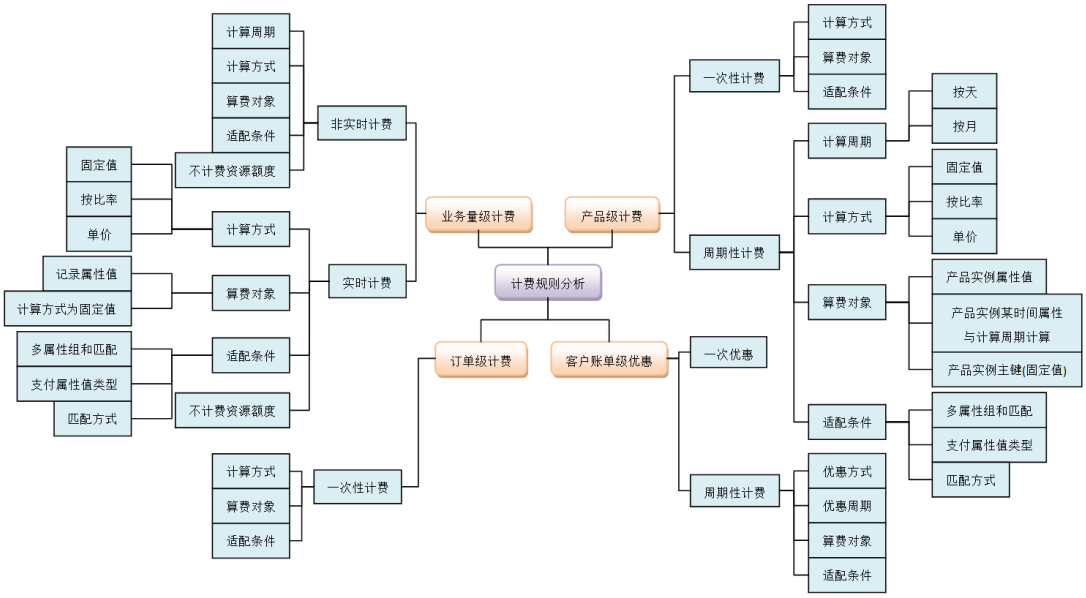


图 29 计费规则分析

（3）环境日志综合分析和数据挖掘方法研究

针对环境中资源的状态变化、业务流程中的计算服务状态、节点之间数据交互的网络流量状态、用户访问环境的行为模式等关键要素，提出海量日志信息的组织与预处理方法，研究基于日志信息的环境运行状态分析与预测、用户行为分析与建模以及业务特征分析和挖掘的方法和技术，为进一步支持国家高性能计算环境多模式、高效、可靠运行提供支撑。

开发海量日志信息压缩、备份和同步工具，在运管中心不同结点之间存储、组织和管理相关数据。同时，基于深度学习等方法分析挖掘海量数据中隐含的行为模式，通过与当前环境数据的匹配与比对，分析环境运行行为走势，预测未来环境的运行趋势。

在日志信息压缩与同步方面，在环境日志数据持续增加并定期同步到其他结点的场景下，进行跨域数据访问技术与科学数据处理技术的研究。通过临时性网络连接、降低单次访问日志数据规模等策略，实现轻量级高效、稳定和平滑的跨域数据访问，并使用经典的网络连接加密算法与数据一致性检测算法，保证数据访问的安全性与正确性。通过提取数据中的有效信息或添加描述性信息，降低单次科学数据处理规模、合理的数据整合与存储等策略，实现有效、稳定与便捷的日志数据处理，从而大幅度降低数据的体积，提高环境运维对日志数据的使用效率。

日志同步工具的访问端功能包括发起数据访问，在获取数据后对数据的正确性进行验证，并对原数据进行更新。数据源端功能主要是在接收到访问请求后，从所有的数据中进行查找，提取出访问端所需的数据。两端在传输过程中需要实现的功能包括建立轻量级的网络连接和对网络连接过程进行加密，以保证连接的安全性。最后日志同步工作将以有向无环图的形式提交给执行引擎，引擎负责对同步工作进行调度与负载均衡控制，并对访问端与数据源端建立连接的过程进行协调。

在基于深度学习方法分析挖掘海量数据中隐含的行为模式方面，通过对海量的监控与日志数据的形式化表达，以快照的图形化方式刻画每一个时刻的环境状态，并通过图随时间的变化和环境行为与图的映射，得到历史局部与全局的信息和特征记录及图形库。在环境的实时运行监控过程中，基于获取的监控数据和日志信息，生成实时状态图，与图形库中的历史信息进行匹配与比对，判断当前环境行为的状况，分析环境运行行为走势，重放环境行为的演化过程，进而预测未来环境的运行趋势。

（4）支持多模式的性能评估、预测和异常诊断方法与工具研制

在环境监控和日志分析挖掘的基础上，研究对环境中业务、资源和用户状态的多层次多角度分析评估的方法，研发通过分析和预测环境性能状况和发展趋势，反向调节资源配置、计费策略等机制的技术和工具，以最大化环境资源利用率、降低环境运维成本、提升用户的性能价格体验。同时，研究环境安全运行、关键信息可靠备份、异常发现和追踪等相关方法和机制，实现环境异常诊断工具，保障国家高性能计算环境的可靠运行。

基于监控的历史数据预测环境资源利用率的变化，评估环境运行性能、计费策略的合理性等。实现单维度和多维度的环境行为异常检测分析，不需要人工干预，能捕捉监控数据的变化。开发部件亚健康的快速检测与定位、操作系统行为分析以及通信网络性能的建模等系统行为异常检测分析工具，对系统中的软硬件和 I/O 的软性故障进行分析定位。通过代码段分析判断良性故障的发生和可能的原因，实现应用运行异常检测与分析功能。

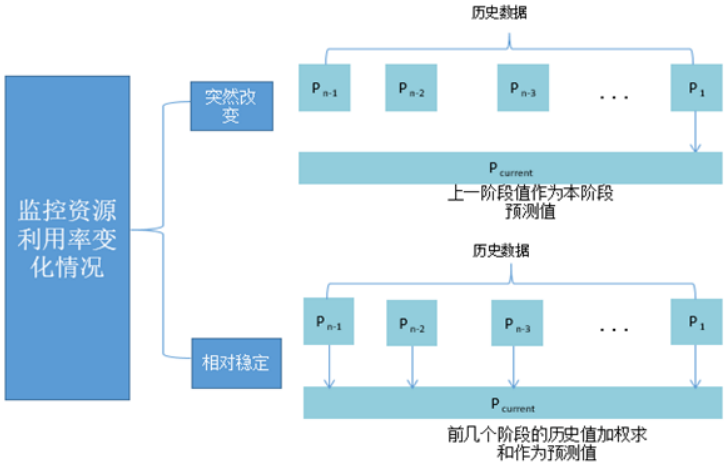


图 30 运行异常检测与分析

在基于资源利用率变化情况的资源利用预测算法方面，目前使用最为普遍的资源利用率预测方法有两种，第一种方法是使用前一阶段的资源利用率的值作为预测值的方法来说，比较适用于资源利用率变化较大的场景，不适用于资源利用率变化不大的场景，因为可能受局部波动的影响，降低准确率；第二种方法是将前 k 次资源利用率的历史值进行加权求和作为下一阶段的预测值的方法，比较适用于资源利用率变化不大的场景，对于资源利用率变化较大的场景则会降低预测的准确率。

基于以上的不足设计了基于资源利用率变化情况的预测算法，通过对资源利用率的错误率进行监控，当错误率大于某一个给定的阈值时将历史数据个数设置为 1，并不断地对个数进行增加，直到增加到指定的最大值。对于用户交互型应用来说应用资源利用率有的时候变化大有的时候比较稳定，使用我们设计的预测方法将更加合适。

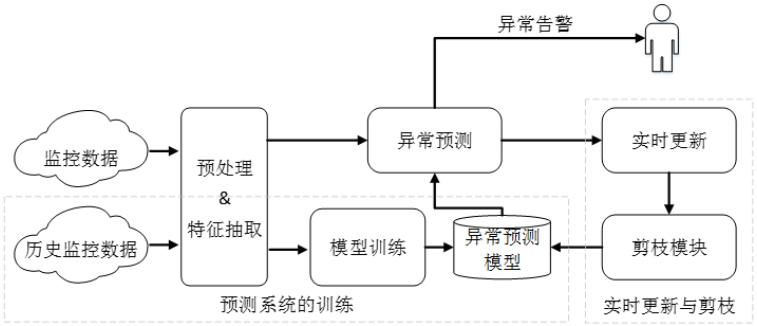


图 31 预测训练模型

在监控系统中单维度和多维度异常预测方面，设计单维度的异常预测模型，采用无监督聚类算法，在不需要人工标注的情况下，自动发现和预测单维度上的异常情况。同时针对监控任务通过保留核心点的机制将聚类模型转化为分类模型，提高异常预测的效率，并完成模型实时更新。针对多维度的监控任务，提出上下文相关的异常预测模型和周期相关的异常预测模型。面对应用监控环境多维度复杂的系统行为，异常预测模型通过循环神经网络的结构完成对系统的刻画和异常预测。由于预测到的异常或者警告其严重程度不同，异常分析模型可以在未标注的数据上进行分析，避免人工标注数据、训练模型，减少人工维护成本。

在部件亚健康的快速检测与定位方面，改变传统的基于实际负载的检测方法，采用离线观察计算部件和通信部件等手段，能够获得定位准确（可精确到“端口”）、监控状态少、监控开销小以及对作业无干扰等优势，更方便、准确地定位亚健康部件。

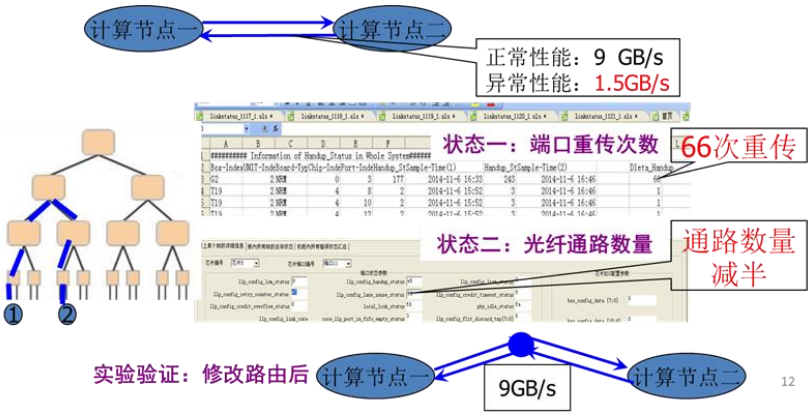


图 32 部件亚健康的快速检测与定位

在系统软件噪声定位分析方面，采用“固定工作量”、“固定时间量”及“噪音序列”等三种测量手段，实现全节点、单 CPU、单核三个测量流程，预期可获得良好的可扩展性，并研发出系统优化的有力工具，发现至少两类操作系统噪音，有效解决由系统软件噪音引发的并行程序性能波动现象。

在代码段性能和行为分析方面，针对应用程序的结构与迭代执行等特点，提出面向应用程序的性能分析方法，基于堆栈采样合成总体调用关系图，统计函数消耗的 CPU 时间比例，根据用户对代码的开发层次对性能占用量与传递量进行聚合，进而得出各代码段或函数的性能分析结果，并在该方法的基础上设计实现性能监控和异常分析工具。性能分析工具通过反映应用程序的执行情况，

发现异常的程序执行行为，表示出代码段或函数的性能占用与传递关系，满足应用的良性故障调试与分析需求。

（5）国家高性能计算环境运行管理支撑平台软件系统研发

基于上述研究的模型、方法和工具，在现有国家高性能计算环境运行管理系统的基础上，构建高效、灵活支持服务化运营的国家高性能计算环境运行管理支撑平台，包含环境监控、资源管理、安全运维、服务结算等子系统，具备多维度环境监控和可视化、环境资源动态配置、多粒度计费、多模式环境性能评估和异常诊断分析等支撑能力，支持国家高性能计算环境的基础设施形态和多样化服务运营。

实现支撑平台提供日常环境运维的全方位功能，包括用户和资源管理、作业和文件管理、记账管理、环境运行监控与报警、用户技术支持交互与统计以及环境运维月报/年报自动生成等，使支撑平台具备足够的灵活可配置性，同时具备一定的稳定性、容错性和安全性。

3.4 突破核心系统软件信息服务优化技术、索引一致性技术等，精细打磨计算服务用户交互环境

（1）环境资源信息服务优化

目前，高性能计算环境系统软件 SCE 中资源信息服务的信息传输方式为逐条汇报模式。前端服务器定时查询高性能计算机资源信息状态，与本地数据库进行对比，发现状态有更新，则向中央服务器汇报；中央服务器接收到汇报信息，更新数据库，返回状态码；前端服务器接收到正确的状态码，更新本地数据库。在 E 级资源聚合情况下，需要聚合的资源信息将剧增，高性能计算环境的资源信息服务将面临着资源信息传输性能提升的瓶颈问题。本项工作研究资源信息服务建设与优化方案，优化后的系统达到以下几个目标：

- ✧ 短延迟时间。环境中运行的作业较多时，中央服务器与前端服务器作业状态信息保持一致的延迟时间稳定在 1s 以内。
- ✧ 低系统负载。当系统中运行的作业量大时，降低由信息传输引起的系统负载。
- ✧ 低网络连接数。创建较少的 TCP 连接进行信息传输，占用较少带宽，提高系统效率。

在高性能计算环境中，资源信息服务现有的信息逐条汇报模式的延迟时间主要分为三部分，其中查询资源信息状态延迟时间和汇报资源信息状态延迟时间所占比重较大。以作业状态汇报为例，查询作业当前状态占用了 30%的延迟时间，将作业状态信息从前端服务器汇报至中央服务器分别占用了 60%的延迟时间，其他部分占用了 10%的延迟时间。当汇报多条作业状态信息时，每条作业状态均要查询一次、汇报一次，延迟时间较长。因此本工作重点优化将作业状态信息从前端服务器汇报至中央服务器部分，缩短该部分的延迟时间。

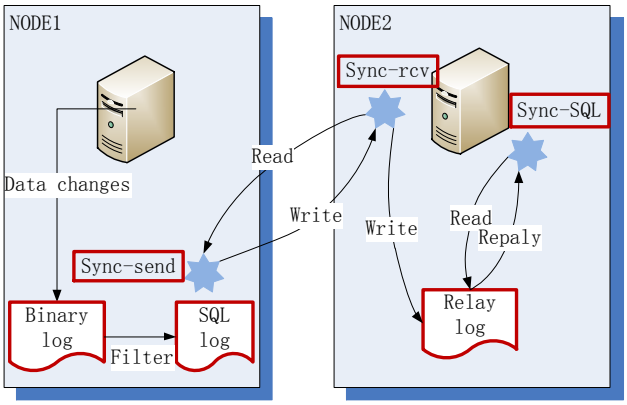


图 33 资源信息同步模式的信息传输流程图

在优化后的资源信息同步模式方案设计中，省去了汇报这一繁琐、耗时的关键步骤。资源信息同步模式结构如图所示，前端服务器定时查询高性能计算机状态，与本地数据库进行对比，发现状态有更新，则更新本地数据库。资源信息同步模块检测到前端服务器的数据库发生变化，将变化的信息经过提取 SQL 语句、过滤标记，加载至中央服务器的数据库。中央服务器的数据库发生的变化也可经过提取 SQL 语句、过滤标记，加载至前端服务器的数据库。资源信息同步模块实现了双向同步，满足了 SCE 系统软件未来高可扩展性的需求，系统内的数据处理不用再全部提交至中央服务器，前端服务器也可以提供数据处理服务，处理后将资源信息变化同步至系统内其他节点，减轻了中央服务器的压力。前端服务器的数据库与中央服务器的数据库结构不同，采用异库异表的同步方式，将前端服务器的数据同步到中央服务器的指定数据表中。

通过对信息汇报模式和信息同步模式在延迟时间、系统 1 分钟平均负载和网络连接数三方面测试结果的对比，可以看出，信息同步模式优化效果明显，在需要传输的资源信息量为 2000 时，延迟时间缩短 50%，系统 1 分钟平均负载降低 60%，网络连接数减少 90%，使系统性能得到较大提升，有效的优化了高性能计算环境系统软件 SCE 中信息汇报模式的资源信息传输方式在延迟时间、系统负载、网络连接数方面的性能，提高了环境利用率。

（2）二级索引一致性分析

近年来传统关系型数据库管理系统在面临大数据的存储以及查询的时候面临了新的挑战，已经在可扩展性遇到了严重的瓶颈，所以出现了一些像 Google BigTable、Yahoo PNUTS、Apache HBase、Cassandra 和 Amazon’s Dynamo 等为代表的典型的 NoSQL 数据库。为了提升这些 NoSQL 的查询能力。学术界和工业界已经产生了很多的索引方案，像 IHBase, ITBase, CCIndex, HIndex, Apache Phoneix, Diff-Index, LCIndex, CMIndex 等等。这些索引方案从不同的角度提高 NoSQL 非主键查询的能力。但是它们都忽略了索引表和数据表之间的一致性问题。为了研究索引的一致性问题，我们给出一些索引模型相关的定义和解释，以及强一致性、读写一致性、最终一致性的定义。

索引模型：索引模型上面提供两个操作，分别为读操作 C(v)和写操作 S(k,v)。读操作 C(v) 表示根据 V 读取索引表的主键，并通过主键读取数据表中的记录得到 V’，然后将 V’和 V 进行比较，如果 V’ =V，C(v)返回成功，否则返回失败。一个写操作 S(k,v)表示写一条记录到数据表中，并更新索引表，索引系统将根据写成功与否返回成功或失败。

执行图(DAG)：一个执行序列是一个有向无环图 H，包含一组读写操作的顶点集合，用来表示一组读写操作，在这些顶点上施加一个偏序→H。一条从 v1→H v2 的边暗示着操作 v1 发生在操作 v2 之前。接下来，我们将给出三种一致性的定义，即强一致性，读写一致性，最终一致性。

强一致性：对于任何一个执行序列 DAG，有一个线性化结果序列 S 保持 DAG 中的顺序，这意味着，在 DAG 中如果操作 O1 发生在 O2 之前，那么在结果序列 S 中 O1 发生在 O2 之前。换句话说，如果一个写操作 S(k,v)返回成功，并且在该操作之后没有其他写操作，那么下一个读操作 C(v)必须返回成功，即 C(v)必须能够得到正确的记录。

最终一致性：有一个操作延迟 Δ> 0，对于任何的执行序列 DAG,存在一个线性化的结果序列 S，使得其不一致窗口小于 Δ。

不一致性窗口：给定任何操作 O，考虑那些在执行序列 DAG 中在 O 之前的操作集合 O'，而这些操作在结果序列 S 中却是在 O 之后。则定义结果序列的不一致窗口为$\max_{O \in S}|Lag(O)|$。

读写一致性：对于任何执行序列 DAG，存在一个线性化结果序列的不一致窗口小于 Δ，并且对于同一个 client，结果序列保持跟 DAG 中的顺序一致。

有了上述一致性模型为基础，我们根据索引进行了分类。纵向上把索引分为 global 二级索引和 local 二级索引，横向上根据索引更新的步骤，把索引技术分为 4 类分别为 sync、async-insert、async-compact 以及 async-simple。

我们使用 YCSB 进行测试。测试场景为 50%扫描和 50%更新，性能以及不一致窗口如下图所示：

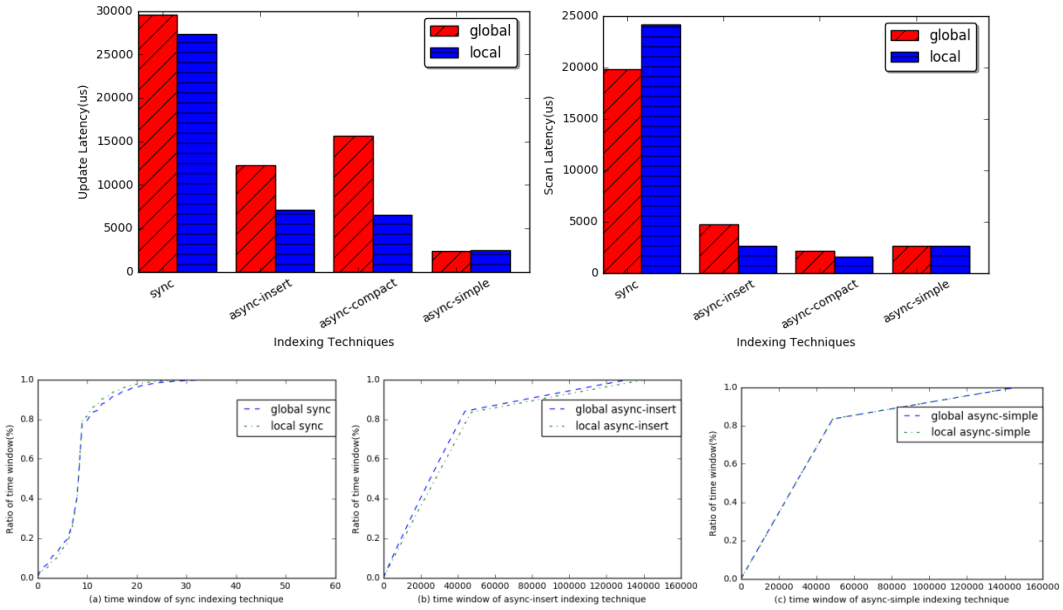


图 34 二级索引一致性分析测试结果

从上图可以看出来同步索引技术性能最差，异步索引技术效果最好，async-insert 和 async-compact 索引技术具有类似的性能。Async-simple 的延迟最低，吞吐量最高。

对于一致性，从 CDF 图中可以看出，每种索引技术在 local 和 global 索引技术中表现出相似的一致性。对于不同的索引技术，同步索引技术具有最高的一致性，而 async-insert 和 async 索引技术都显示较低的一致性。

异步索引技术比同步索引技术的性能要高；对于同是异步索引技术来讲，async-simple 的性能要比 async-insert 的性能要高，但是它们却有相似的一致性；跟 global 索引技术相比，由于 local 索引技术没有 RPC 时间，所以数据传输要快。

本项研究工作重点关注 NoSQL 之间的一致性和性能之间的关系。我们首先对强一致性，读写一致性和最终一致性进行定义，然后提出不一致性窗口来衡量索引表和数据表的一致性程度。我们

根据索引的实施方式对现有的索引技术进行分类。实验表明：异步索引技术具有比同步索引技术更好的性能，但一致性更差。Async-simple 索引技术的性能是 sync 索引技术的 10 倍；async-simple 索引技术具有比 async-insert 索引技术更好的性能，但是却具有相似的一致性；对于同一种索引技术下的大量更新的操作场景，local 二级索引的性能优于 global 二级索引的性能。

（3）面向命令行用户的程序编译环境管理优化

基于命令行的用户程序编译环境管理优化的目标在于支持用户个性化部署所需应用软件，尤其是开源应用软件。以 Lammps 为例，软件版本更新很快，同时用户需要根据需求安装软件模块包，因此往往用户需要自己部署安装应用软件。基于集群部署软件的过程中，编译环境变量的设置往往起到十分关键的作用。

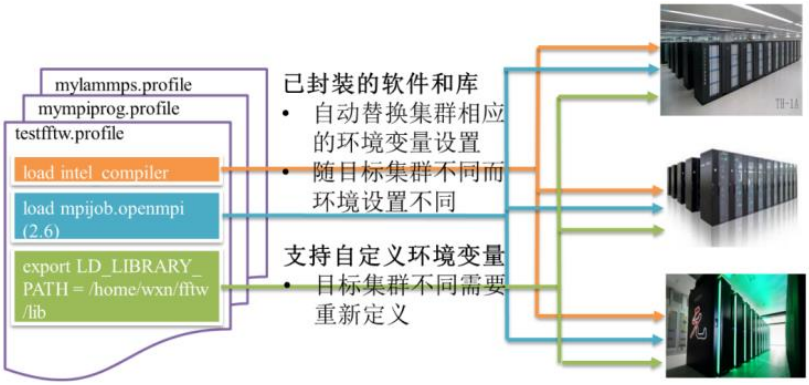


图 35 基于命令行的用户程序编译环境管理示意图

在集群管理中，modules 是常用环境变量管理工具，管理员通过 modules 组织公共应用软件的命名、版本和环境变量设置要求。本项工作借鉴 modules 的思路，在跨集群环境中，借助原本环境应用定义的编译变量封装，支持用户自定义环境变量，从而可以根据用户需求灵活配置用户在目标集群的环境变量设置。

在新型用户编译环境管理工具中，用户可以针对某一类应用软件部署自定义一套环境变量，称为 profile。在 profile 中，用户可以加载并管理公共应用封装的 MPI 环境，或者编译器环境，或者公共基础编程库的相关环境设置，用户也可以根据需要自定义环境变量。当用户在目标集群上有不同类别应用软件部署需求时，可以根据需要定义多个 profile，灵活应用。

Profile 支持在不同集群之间迁移定义。例如在集群 A 中针对某类软件定义了一个 profile，当需要使用集群 B 时，如果 profile 中加载的应用封装定义在集群 B 中均可以得到满足，则无需重新定义 profile 即可使用。通过高性能计算环境命令行客户端的程序编译管理工具，可去除不同集群手册学习的烦恼，同时实现与在集群中编译部署应用软件几乎相同的交互体验。

在性能方面，课题也针对交互的编译命令执行交互体验进行了优化，解决了当编译命令大多输出信息较大量时命令执行卡顿明显的问题。主要优化方法是调整了数据中转消息体大小，以编译输出信息 126k 为测试对象，编译命令首次输出响应时间从 35s 优化至不到 600ms，用户体验接近直接操作集群。

（4）Portal2.0 建设与服务

Portal2.0 是新一代高性能计算环境通用计算用户界面，实现了从部署管理到用户体验的全新蜕变。Portal2.0 采用了微服务理念，多实例部署，拟定实现资源标签化管理、智能搜索，以及资源关联推荐。

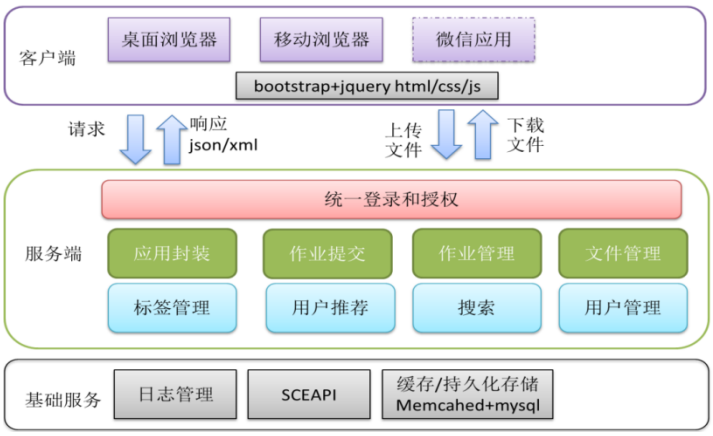


图 36 Portal2.0 体系结构

Portal2.0 目前已经实现了基本的作业提交和管理的功能模块，在原有工作基础上，优化了细节实现，便捷了用户交互过程。主要体现在如下几个方面：

- 作业提交页面默认进入上一次使用过的应用页面，常用应用作业提交可方便切换
- 作业提交页面梳理作业提交参数，不常用参数设置为高级参数，并且默认隐藏不显示
- 作业提交时如需选择资源，支持搜索
- 资源选择可展开显示包括不可用的全部资源，并可提示不可选择的原因
- 作业列表中支持多维度作业条件查询，支持多种条件组合查询
- 针对作业状态给出说明，比如提交出错列出具体原因，比如作业完成提示耗时时间，排队/运行提示排队/运行时长，如果排队时间过长，主动提示可能原因
- 针对作业状态给出相关操作，比如完成的作业可删除，排队/运行的作业可终止，删除的作业可恢复。
- 在作业列表页面，点击作业条目的应用信息可直接进入作业提交页面

Portal2.0 中新增了资源搜索和推荐的功能。资源搜索与推荐功能主要应用于 Portal2.0 的用户交互界面，针对用户给定的任意搜索词汇，检索到系统中相关的计算资源、软件资源、作业资源、以及其他页面，并将检索结果页面链接呈现在搜索结果中，供进一步获取详情。资源搜索和推荐基于 ElasticSearch 实现，整体架构主要包含三个部分：前端 Portal 网站的相关功能、资源搜索推荐访问接口、后端 ES 服务器，如下图所示。

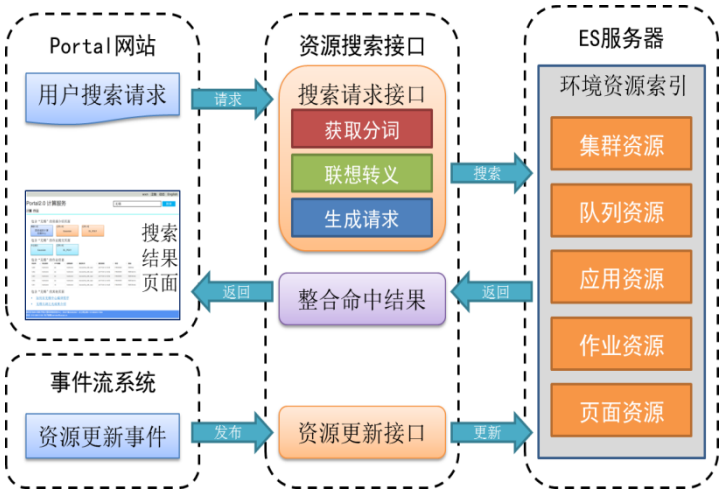


图 37 面向 Portal2.0 的资源搜索和推荐框架

Portal2.0 中接受搜索字符串的输入有两个地方：一个是在页面公共头部右侧增加一个搜索输入框；另一个在 Portal2.0 的首页，支持不登录的情况下的搜索。页面头部目前在 Portal2.0 结构中是一个共性的部分，仅在此一处增加搜索框，所有页面均可用。

Portal2.0 的搜索结果主要如下：

- 包含关键字的资源介绍页面，包括集群介绍页面和应用介绍页面，每个页面呈现形式是词贴形式，一个类别一个颜色，每个词贴，包括其中每个词汇都是一个超级链接，可点击进入对应的页面。
- 包含关键字的作业提交页面，每个页面呈现形式是词贴形式，一个类别一个颜色，每个词贴，包括其中每个词汇都是一个超级链接，可点击进入对应的页面。
- 包含关键字的作业信息，展现形式同作业信息，最多显示 5 条记录，超出在区域右下角给出上一页和下一页的选择。每条记录可选择点击，进入作业详细页面。
- 包含关键字的其他页面，呈现的是每一个页面的标题，通过链接点击可进入页面。

资源搜索接口由前后两部分构成：前端接口服务和后端搜索服务。前端接口服务采用环境统一接口框架，增加资源搜索相关 URL，共享环境统一的登录、权限验证等功能，接受来自客户端的搜索请求，转发至后端搜索服务，然后将搜索服务返回的结果转发至客户端。前端接口服务接收客户端请求，增加登录用户信息（如果用户尚未登录，给定关键字 any），向后端搜索服务发起请求。后端搜索服务以 tomcat+servlet 的形式提供服务。网站服务器通过 POST 方式向搜索接口服务器发送请求并将参数写入 request 对象中，接口服务器则通过 response 对象写入搜索结果。后端搜索服务核心功能是将搜索请求按照 ElasticSearch 定义的访问格式，其中需要特别定义对资源对象用户名属性的值匹配：(u | any)，其搜索结果将包括所有公共资源和该用户提交的作业资源。ElasticSearch 服务器执行搜索命令后会返回搜索结果，访问接口将分解结果并形成一个包含资源所有分段信息的命中数组，并返回给前端接口服务，然后转发至客户端。

3.5 突破日志模式分析技术快速过滤输出事件，构建环境事件流处理与分发平台

环境事件流处理与分发系统作为国家高性能计算环境中对于事件的专用处理系统，其基本功能即消息数据的传输、存储与分发功能。我们采用 Apache Kafka 作为系统的基本数据分发平台，在此之上建立事件工厂模块，针对环境中几种主要的事件内容格式进行解析、筛选、处理分析和格式转换。此外我们使用 Logstash 作为系统的数据采集工具。图为国家高性能计算环境事件流处理与分发系统的基本架构图。

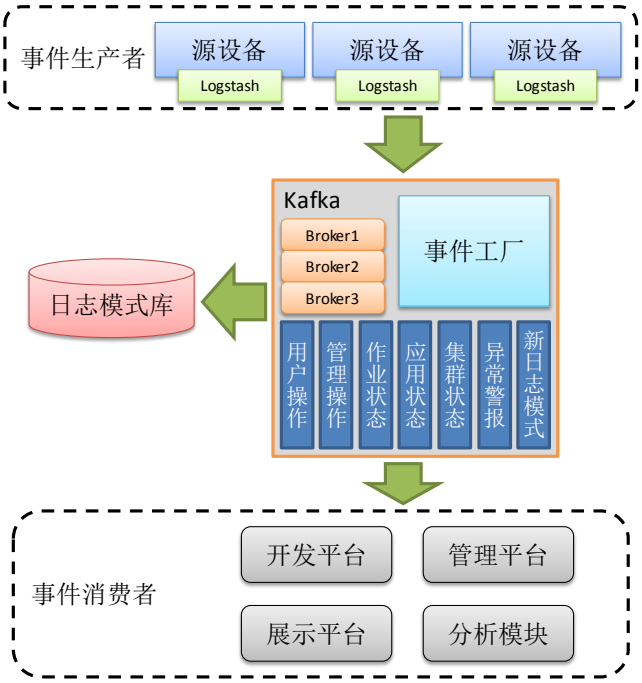


图 38 环境事件流处理与分发系统结构图

在环境各组件发生事件时，是由相应组件程序分别记录自己的事件日志，其中包含了所有可能产生的事件类型。然而在实际应用时，相关维护人员或应用程序往往只关心某一种到几种类型的事件。因此建立事件分类是环境事件流处理与分发系统所必须实现的环节。根据环境实际运行情况和使用需求，我们初步将事件划分为以下七种大类：

用户操作：表示用户在环境客户端执行了一种操作或请求，包括查询环境资源、提交作业、传输文件等；

管理操作：该类事件为仅有管理权限的用户才能执行的操作的记录，包括建立用户组、修改用户权限等；

作业状态：这类事件表示用户作业发生了状态变更，例如作业准备、作业运行、作业完成，以及提交产生错误、作业运行失败、作业被终止等异常事件，相关应用可以通过事件消息中记录的作业号来追溯相应作业；

应用状态：主要表示集群中的应用程序的变更情况，主要包括安装、升级或版本变更、卸载等；

集群状态：对于计算集群的当前状态的报告，可能是一种服务器与目标集群间的周期性通讯的事件，记录了集群的运行状态、当前作业数等相关参数；

警报事件：这种类型的事件代表环境中产生了需要注意或及时处理的问题，例如密码攻击、磁盘已满、内存溢出、CPU 过热、程序运行出现段错误等等，对实时性有一定要求；

新日志模式：在进行事件处理时，系统日志将根据已经定义的日志模式库中的记录进行格式匹配，而日志模式则是对于过往日志的类别总结，然而当系统日志出现了不存在于过往日志的新模式记录时，系统无法判断是否需要针对该模式制定新的环境警报规则和策略，因此需要将其内容作为一种事件发布给制定警报规则的维护人员处。

相关应用程序在订阅事件时，将以上七种类型为对象。对于每种类型事件还可以具体划分子类的情况，各应用需要自行定义相应的处理办法。在未来实际运行过程中如果出现新的需求，我们也可以在以上六种事件类型以外增添更多的基础事件类型对象。

在国家高性能计算环境中，环境中间件的组件和集群程序以及操作系统都可能成为环境事件的产生源，这些程序记录事件的方式各不相同，也就难以使用一种通用的方法获取其中信息。出于此种需求，我们在环境事件流处理与分发系统中增加了事件工厂模块。事件工厂主要用于接收各种类型格式的事件，并使用各自的解析方法对其中主要内容进行提取，然后筛选可能含有重要内容的事件进行统一处理，最终将这些事件信息封装成为符合事件工厂统一接口的格式发布成为各种事件类型。当相关应用接收到订阅的事件时，只需要按照事件工厂的统一接口进行解析就可以获取其中的关键信息。

根据原始日志格式的不同，事件工厂内存在多个工作车间，每个车间都包含两个模块的步骤，分别为解码模块和过滤模块。事件流系统需要收集多少种格式的日志，事件工厂就需要相应数量的车间用于处理相应日志格式。解码模块的主要工作就是根据车间对应的日志格式进行解码，将原始的一行数据分解为若干个字段，每个字段是一个(key, value)的值对，key 代表字段标识，同时也表示了字段含义，value 是字段值，也即内容信息。例如一个几乎必需存在的标识就是事件时间，基本上所有种类的日志记录都需要记录发生时间，但记录格式可能不同。而该值将在解码模块被分解出来并形成时间戳的统一格式。

目前我们初步实现了环境事件流处理与分发系统的各个模块基本功能，并将其部署到了国家高性能计算环境中进行效果测试。测试结果表明事件处理和发布平均延时小于 100 毫秒，可以满足我们对事件时效性的要求。

3.6 多维度多层次构建高性能计算环境安全体系

安全是高性能计算环境建设不容忽视的一项重要工作。我们主要从软件研发、环境运维、制度管理三个维度重点建设环境安全。

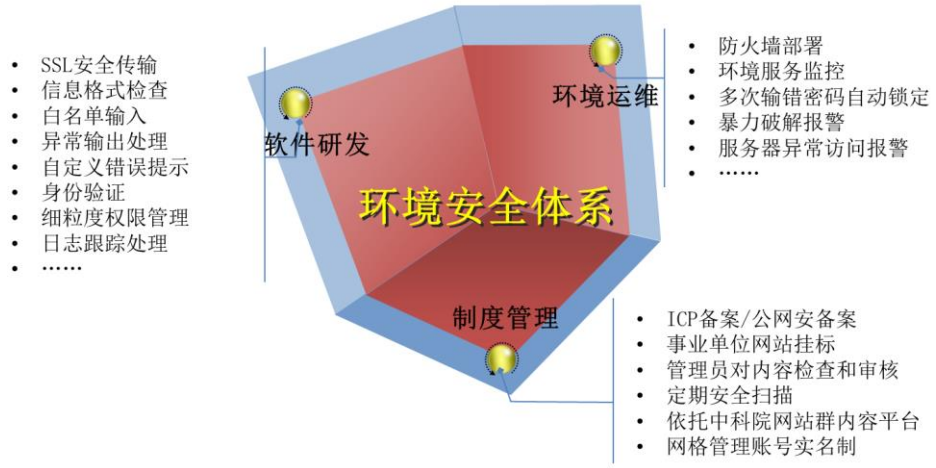


图 39 高性能计算环境安全体系建设

在软件研发方面，安全编程将渗透到系统软件栈的各个层面，包括支持 SSL 安全传输，对用户输入的信息进行安全格式检查，白名单输入，异常输出处理，自定义系统错误提示，细粒度权限管理、日志跟踪和异常处理等等。

在环境运维方面，通过在各结点集群外围部署防火墙，对相关服务器和服务进行监控，对系统

异常行为检测和报警等措施增强环境安全防范，避免被攻击，以及攻击在高性能计算环境中资源之间的扩散。

在制度管理方面，对外服务网站实施 ICP 备案/公网安备案，事业单位网站挂标等措施，并依托中国科学院网站群内容平台执行管理员定期对内容检查和审核，定期安全扫描。高性能计算环境账号实名制实现了用户行为和信息的可追溯。

3.7 小结

国家高性能计算环境在资源准入和分级标准、基于应用的全局资源优化调度、环境运行管理支撑、环境构建与资源提升等方面开展了深入的研究工作，完成了国家高性能计算环境资源评价标准白皮书的初版；建立作业运行历史数据集，并通过深度学习方法对典型应用运行时间进行预测，取得了较好的预测准确率和召回率测试结果；完成了面向环境整体运行状态监控展示的可视化方法研究，实现了大屏幕展示；优化了系统核心服务，打磨计算服务用户交互环境，进一步提升了用户交互的便捷性；构建环境事件流处理与分发平台，实时输出环境各类事件并展示；并多维度多层次构建了高性能计算环境安全体系。

成 果 篇

第四章 超级计算典型应用成果

本章遴选了百核规模、千核规模、万核规模、十万核规模案例以及入围“戈登·贝尔”奖的 5 个应用共计 49 个超级计算典型应用进行了介绍。这些应用成果的取得全部由国家高性能计算环境的结点单位提供计算支撑。

4.1 百核规模

4.1.1 具有强层间相互作用和高迁移率的新型贵金属硫属化物

用户姓名：季威
用户单位：中国人民大学
应用领域：物理
软件来源：自由软件
计算规模：百核
成果简介：

二维层状材料具有原子层厚度和表面无悬挂键等特点，被视为纳米电子学最有希望的材料之一。近年来科学家们高度关注的石墨烯，过渡金属硫属化物，黑磷等二维半导体材料不断取得新进展，为找寻高性能的纳米电子学和光电子学材料打下坚实的基础。此前人们认为在黑磷中，层间电子耦合引起电子结构的强烈层数依赖是其特有的性质。然而，近来发现的一类全新化合物，10B族的贵金属硫属化合物中普遍存在显著层数依赖的电子结构特性和特殊的层间振动耦合特性。同时，该类材料在室温下有着较高的电子迁移率，并在空气中具有很好的稳定性，是相当有潜力的新兴二维材料。

上海超级计算中心用户中国人民大学物理学系季威教授与合作者通过实验测量和理论预测对贵金属硫族化合物的代表材料二硫化铂（PtS2）和二硒化铂（PtSe2）进行了系列研究。研究发现不仅PtS2的间接带隙在1.6-1.8 eV (单层)到0.25-0.48 eV (体相)之间可调（如图a），单层到体相PtSe2更是发生了从具有1.17 eV带隙的半导体到半金属的转变。该类材料显示出如此强的层数依赖的电子结构特性，主要是由于Pt上 d 轨道电子富集，使得层内Pt-S (Se)间采用八面体构型，S (Se)原子中留下的未参与杂化的 pz 轨道，产生层间轨道交叠引起的。同时，这样强的杂化作用导致了材料的剪切模和呼吸模的振动频率相近(如图b)，可认为这两种材料具有各项同性的振动性质，这在二维材料中是相当特别的性质。同时，研究还讨论了从 d 轨道电子数目和轨道能量差异出发，预测这类材料层间相互作用和层数依赖物性的一般原则。接下来，作者进一步研究了这种新奇的二维材料的电学性质和稳定性，发

现该类材料具有高的电子迁移率并在空气中能保持很好的结构稳定性。多层 PtS2 和 PtSe2 的迁移率在室温下分别能达到 ~100 cm2V-1s-1 和 210 cm2V-1s-1，该数值与多层黑磷的迁移率相当且高于一般过渡金属硫族化合物（如图c）。同时，与多层黑磷材料在空气中性能退化严重不同，这类材料不易被 O2 氧化且疏水，在空气中放置较长时间（约1年，如图d）样品形貌亦无明显退化。这些优良的性质为该类材料的应用奠定了坚实基础。

该系列工作不仅激发了一类新材料及其物理特性的研究，深化了对二维材料层间耦合的认识。同时发现了该类材料的高电子迁移率和优良的结构稳定性，使其成为相当有潜力的纳米电子学和光电子学材料。

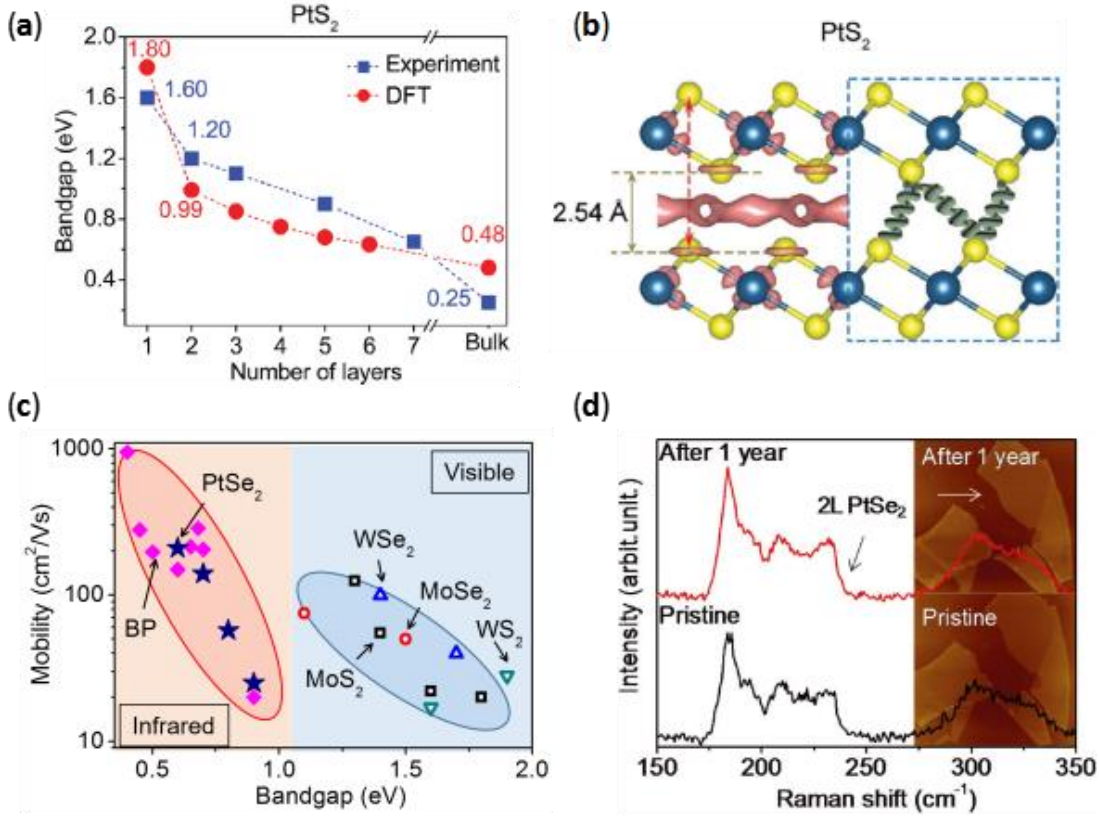


图 40 具有强层间相互作用和高迁移率的新型贵金属硫属化物

4.1.2 边界修饰的磷烯纳米层

用户姓名：杨金龙
用户单位：中国科学技术大学
应用领域：化学
软件来源：自由软件
计算规模：百核
成果简介：

高效太阳能电池设计和实现的核心是异质结模型。通过选取合适的施主和受主两种不

同半导体材料，可以有效地分离和收集异质结中的载流子。这些半导体材料必需满足合适的能隙（1.2-1.6 eV）和高电子迁移率等等以便于太阳光吸收和电子输运。其中，很多二维材料（如石墨烯、二硫化钼和磷烯）由于具有极高的光吸收表面和可调控的光电性质，广泛地应用于太阳能电池异质结中。

上海超级计算中心用户中国科学技术大学的杨金龙教授与合作者根据经典的电偶层理论和第一性原理密度泛函理论计算，设计出不需要选择两种不同半导体材料，仅仅由氢化（施主材料）和氟化（受主材料）磷烯纳米层即可构成的新型太阳能异质结模型，对太阳能量的转换效率高达 20%。该异质结模型可以广泛的应用到其它二维材料太阳能电池上，为未来在实验上和理论上设计和实现新型高效太阳能电池提供了新思路。

成果照片：

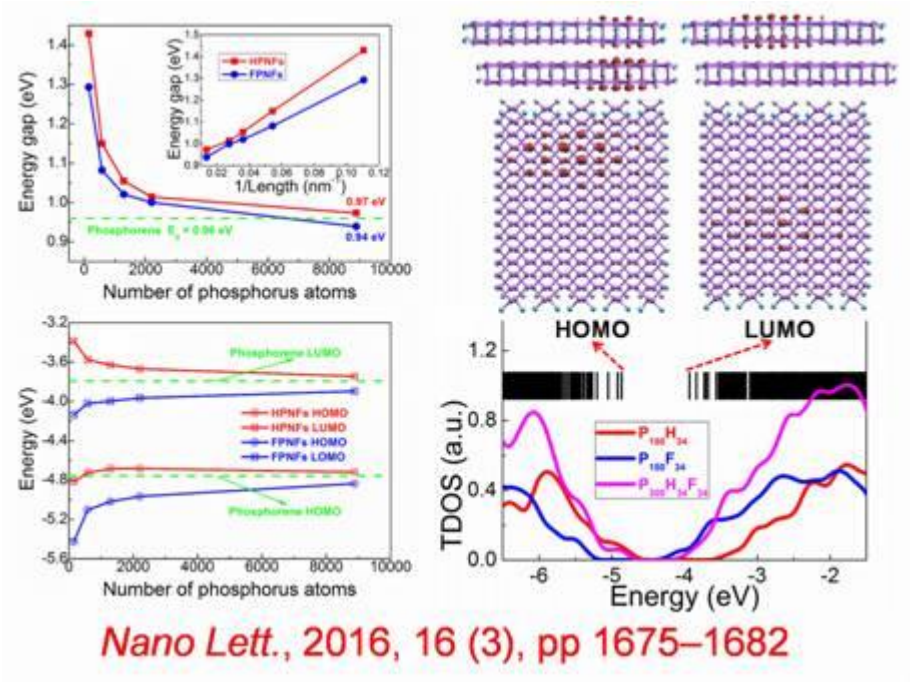


图 41 边界修饰的磷烯纳米层

4.1.3 抗冻蛋白的冰结合面和非冰结合面对冰核形成的“Janus”效应

用户姓名：方海平
用户单位：中国科学院上海应用物理所
应用领域：生物
软件来源：自由软件
计算规模：百核
成果简介：

抗冻蛋白是生活在寒冷区域的生物经过长期自然选择进化产生的一类用于防止生物

体内结冰而导致生物体死亡的功能性蛋白质。对于抗冻蛋白抗冻机制的研究有助于揭开冰晶成核、生长和冰晶形貌调控的分子层面的机理。因而，自上世纪 60 年代首次发现抗冻蛋白以来，科研人员对这类蛋白的抗冻机制进行了近半个世纪的研究。但是，科研人员对抗冻蛋白在调控冰晶成核的机制一直有争议，即有些科研人员认为抗冻蛋白能促进冰核的形成，而另一些科研人员认为抗冻蛋白可以抑制冰核的生成。

上海超级计算中心用户中国科学院上海应用物理所方海平研究员与合作者根据抗冻蛋白的冰结合面 (ice-binding face)和非冰结合面 (non-ice-binding face)具有截然不同官能团的特性，将抗冻蛋白定向固定于固体基底，选择性地研究了抗冻蛋白冰结合面与非冰结合面对冰核形成的影响。研究表明抗冻蛋白的不同面对冰核的形成表现出完全相反的效应：冰结合面促进冰晶成核，而非冰结合面抑制冰晶成核。

本文通过分子动力学模拟进一步研究了抗冻蛋白的冰结合面和非冰结合面界面水的结构，发现了冰结合面上羟基和甲基有序间隔排列使得冰结合面上形成类冰水合层，从而促进冰核生成；而非冰结合面上存在的带电荷侧链及疏水性侧链，使得非冰结合面上的界面水无序，从而抑制冰核形成。揭示了抗冻蛋白对冰成核“Janus”效应分子层面的机制。

该研究大大加深了人们对抗冻蛋白分子层面防冻机制的理解，同时对仿生合成防覆冰材料和低温器官保存材料有着重要的指导意义。

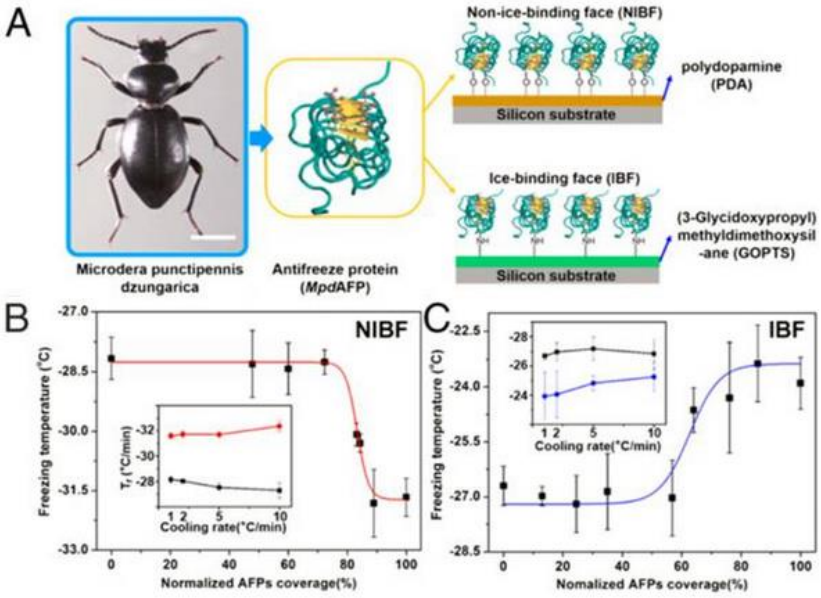


图 42 抗冻蛋白的冰结合面和非冰结合面对冰核形成的“Janus”效应

4.1.4 晶体结构揭示 TET 蛋白介导的氧化反应底物偏好性机制

用户姓名：蒋华良
用户单位：中国科学院上海药物研究所
应用领域：药物
软件来源：自由软件
计算规模：百核
成果简介：

上海超级计算中心用户中国科学院上海药物研究所蒋华良研究院和罗成研究员与合作单位首次报道了 TET 蛋白底物偏好性机制，尤其对血液肿瘤（如髓系白血病）治疗性药物开发有重大意义。该研究论文于 2015 年 10 月 29 日在线发表于国际顶级学术期刊《自然》。

DNA 双螺旋结构中包含 4 种经典碱基：腺嘌呤、鸟嘌呤、胸腺嘧啶和胞嘧啶。哺乳动物基因组的胞嘧啶上会产生甲基化修饰，称为 5-甲基胞嘧啶(5mC, 即第 5 种碱基)。近期研究发现，TET 蛋白将 5-甲基胞嘧啶连续氧化为 5-羟甲基胞嘧啶(5hmC, 第 6 种碱基)，5-醛基胞嘧啶(5fC, 第 7 种碱基)，5-羧基胞嘧啶(5caC, 第 8 种碱基)。5-甲基胞嘧啶诱导基因沉默，在生命发育过程和疾病发生过程中起重要作用。由 TET 蛋白修饰而产生的新碱基既是去甲基化过程的中间状态，也可能作为基因组的重要“标记物”，具备特定的生物学功能。这些“标记物”的异常，与众多恶性肿瘤的发生相关。值得注意的是，TET2 蛋白丧失活性会导致血液肿瘤。

基因组中 5hmC 稳定存在，且其含量远远高于 5fC 和 5caC。但这一现象一直没有合理的生物学解释。该研究团队综合利用结构生物学，生物化学和计算生物学等研究方法，揭开了这一谜底。生化实验表明，TET 蛋白对 5mC 具备很高活性(产生 5hmC)，而对 5hmC(产生 5fC)和 5fC(产生 5caC)的活性很低。TET 蛋白就如同连续的三个扶梯，在转化不同碱基的情况下，其转化速度明显不同(如图所示)。结构研究发现，5mC 在 TET 蛋白催化口袋中的取向使得它很容易被催化活性中心俘获并被氧化为 5hmC。5hmC 和 5fC 由于已经有氧的存在，其在催化口袋中被限制住，不容易发生进一步的氧化反应，导致 TET 蛋白对这两种碱基活性降低。在这样的催化能力差异下，TET 会很顺利将 5mC 产生 5hmC，一旦 5hmC 产生，TET 将不容易使其进一步氧化为 5fC 和 5caC，导致细胞内 5hmC 相对稳定，并且其含量远远高于 5fC 和 5caC。在特定的基因中区域，TET 蛋白可能被特定的调控因子激活，会跨越能垒阻碍产生高活性的 TET，连续氧化为 5fC 和 5caC。这一发现解决了困扰表观遗传学领域的一个难题，也为揭示其他蛋白质逐步催化反应的分子机制提供了新思路和新方法。

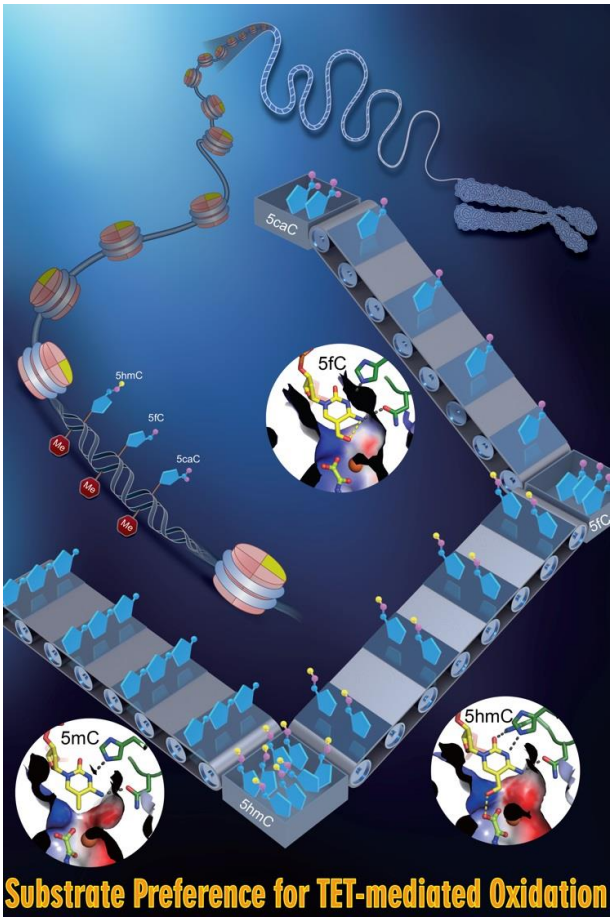


图 43 晶体结构揭示 TET 蛋白介导的氧化反应底物偏好性机制

4.1.5 C919 大型飞机数值仿真

用户单位：中国商用飞机有限公司上海飞机设计研究院
应用领域：航空
软件来源：商业软件
计算规模：百核
成果简介：

航空工业是高端装备制造业的典型代表，是国家工业基础、科技水平和综合实力的集中表现。C919总装下线是中国航空工业史上具有里程碑意义的重要一页。根据工程发展阶段计划安排，后续还将开展一系列的确认和验证方面的工作。中国商飞气动设计专业在上海超算主要进行了全机复核计算和方案论证阶段的全机高速构型CFD计算等分析工作。高性能计算在飞机设计各环节都有非常重要的应用，是先进飞机研制的核心技术手段之一。上海超算中心一直以来为我国的大飞机事业贡献着自己的力量。

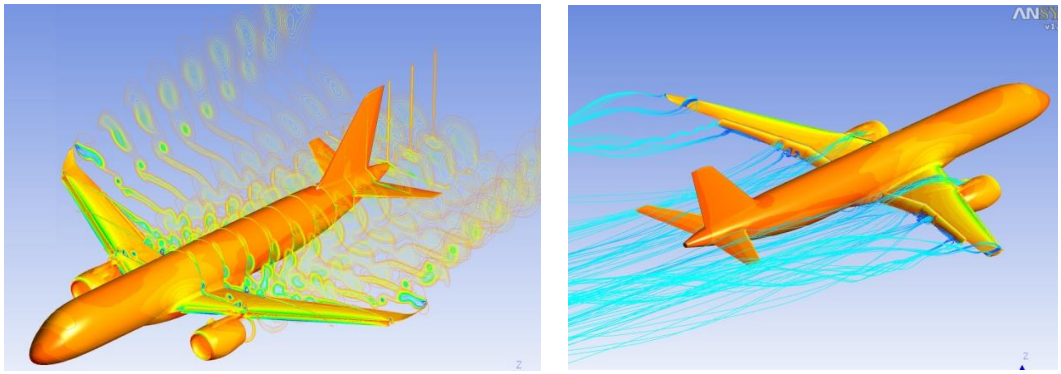


图 44 C919 大型飞机数值仿真

4.1.6 某电站某重要核级管道热分层分析

用户单位：上海核工程研究设计院
应用领域：核电
软件来源：商业软件
计算规模：百核
成果简介：

热分层现象是热疲劳产生的一个重要原因，温差的大幅度震荡运动给反应堆容器和容器内部构件造成严重的热应力。在重要核级管道的应力和疲劳分析中，需要考虑运行热瞬态所导致载荷作用，即需要考虑热分层的影响。这一过程采用 CAE 的方法进行模拟，能够快速直观的获知管线内的热分层现象，从而优化设计，既节约时间又省去了昂贵的实验成本。数值计算过程借助上海超算中心的计算资源，大大缩短了分析的计算时间，实现多个复杂算例的并行推进。

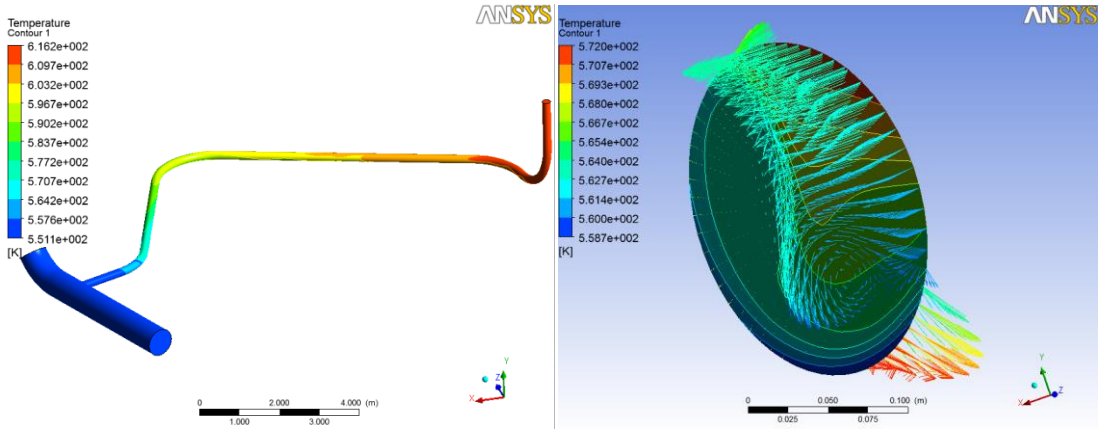


图 45 某电站某重要核级管道热分层分析

4.1.7 基于某车型侧面碰撞的优化分析

用户单位：上海世科嘉车辆技术研发有限公司
应用领域：汽车
软件来源：商业软件
计算规模：百核
成果简介：

侧面碰撞在 E-NCAP 的基础上要求更高，台车使用 AE-MDB V3.9，但是台车质量增加 100kg，台车高度提高 50mm。因此要达到 2018 年五星标准，需要优化车型结构。通过 CAE 分析，车身结构变形合理，B 柱和车门侵入量小，而且适当减重，假人伤害值较小，为企业缩减成本，提高效益。几乎所有 CAE 分析都是在上海超算中心完成，上海超算中心软件齐全、计算速度快，为模拟分析计算提供便利。

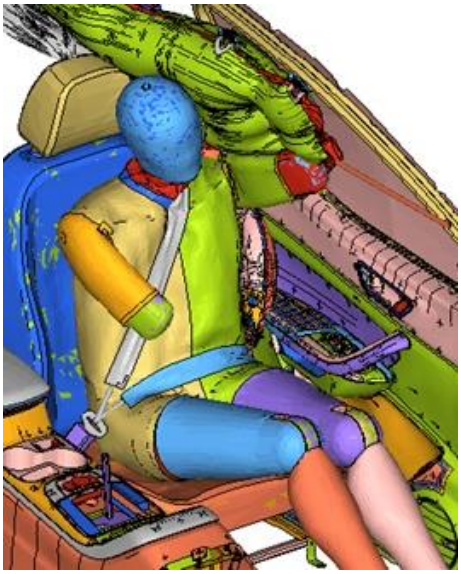


图 46 基于某车型侧面碰撞的优化分析

4.1.8 船-桥碰撞过程数值模拟

用户单位：上海交通大学机械系统与振动国家重点实验室
应用领域：土木市政
软件来源：商业软件
计算规模：百核
成果简介：

基于有限元模态分析和参数优化的等效及多尺度建模方法，在时域内采用基于显式中心差分子循环算法求解系统方程，将船、桥结构的有限元模型进行装配、整合，并设置合理的初始条件和边界条件进行有限元分析。结果显示船-桥碰撞中桥梁各精细建模位置的应力集中主要在腹杆与弦杆的交叉处。仿真结果能够为桥梁的健康监测和关键位置的疲劳分析提供依据。计算采用上海超算中心“蜂鸟”工业计算机群，有力的保证了计算效率。

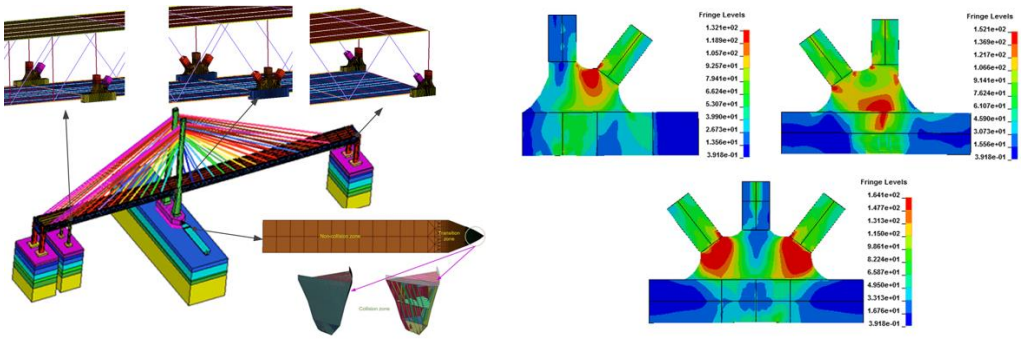


图 47 船-桥碰撞过程数值模拟

4.1.9 超算资源在功能材料设计与化工领域的应用

用户姓名：易海波
用户单位：湖南大学
应用领域：生物矿化、化工阻垢、水相除砷
软件来源：自购软件、免费软件
计算规模：20 节点以上（~300 核）
成果简介：

砷环境污染与饮用水中砷污染带来严重危害，但是除砷技术与除砷方法的综合效率不高，且在某些条件下除砷效果不稳定。铁盐除砷是最常用也是除砷效果较好的方法。然而实际工艺过程，冶炼和工业废水中排放的砷（污酸）酸度高，且有其他共存离子等因素使得除砷方法存在很多困难，需要进一步改善铁盐除砷的工艺改善。为了从分子水平揭示除砷过程的微观机制，项目采用量子化学方法与分子动力学模拟研究了溶液中铁砷的物种形态、不同形态的铁材料与砷酸根物种的缔合作用与微观吸附机制。从理论计算的角度探讨铁盐除砷的沉淀机制与吸附机制，以及铁盐沉淀过程中的主要沉淀物种，并讨论在不同 pH 值条件下，铁盐沉淀除砷的效果。研究了影响不同形态铁材料与砷酸根物种之间缔合的微观因素，并分析了对于不同 pH 值条件下铁材料对砷酸根物种的吸附情况(图 1)。铁氢氧化物胶体对砷的最优吸附条件应限于中性 pH 环境，碱性条件将不利于铁氢氧化物胶体复合物对砷酸根物种的吸附。铁盐除砷通常是沉淀机制和吸附机制共同作用的结果。因此，对于工业上污酸废水的除砷，要注意 pH 的调节，应尽可能地在中性环境下，这样才能使铁盐除砷达到较高的去除效率。钙元素大量的存在于矿物资源和天然水资源中，并且由于在 50 ℃ 以上硫酸钙溶解度随着温度的升高而降低，在盐湖资源开发、海水淡化、制盐、石油开采、湿法冶金过程、工业上水循环利用等领域常常遇到硫酸钙结垢的问题。分子动力学模拟表明单齿缔合结构是 CaSO4 水溶液中的主要物种(图 2)。研究结果还显示，中性 CaSO4 团簇可能是 CaSO4 水溶液中预成核或者 CaSO4 结晶过程的初级构建单元。研究结果揭示了在温度大于 120 ℃ 时普通盐溶液结晶方法才能够获得纯的无水硫酸钙。因此，水溶液中离子缔合和水化并不一定是竞争的关系，这也是 CaSO4 水溶液结晶得到是含水晶体，而不是无水 CaSO4 晶体。CaSO4 水溶液中预成核团簇的一系列新发现有助于 CaSO4 水溶液中热力学性质、过饱和现象、成核结晶机制以及不同硫酸钙相之间的转变相关研究，并且对预防循环水的结垢问题的解决具有借鉴意义。

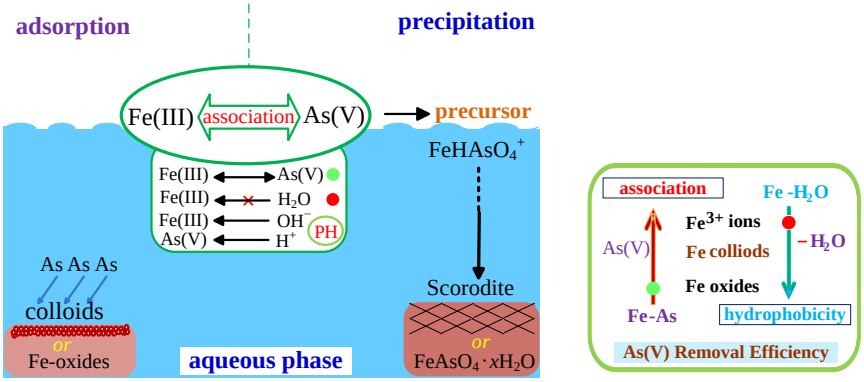


图 48 溶液中铁基材料缔合与吸附性能的影响因素-湖南大学

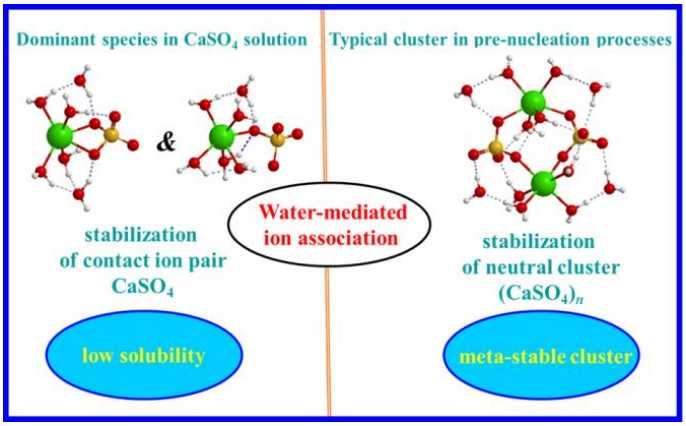


图 49 水溶液相中离子团簇特征与生物矿化微观机制-湖南大学

4.1.10 基于超算的传染病抗原进化计算模拟研究

用户姓名：彭友松
用户单位：湖南大学
应用领域：传染病预测预警，基因组数据挖掘
软件来源：自编 Perl 脚本，R 语言脚本
计算规模：20 个节点（约 200 个核）
成果简介：

基于超算主要做了两个方面的研究。第一个是对核苷酸/氨基酸位点共进化算法 RCOS 及其 R 软件包 cooccurNet 进行大规模测试。共进化是生物进化的重要驱动力，共进化信息可以反映生物的重要结构和功能约束。本研究基于之前发展的共进化网络算法，提供了新的度量位点间共进化的算法 RCOS（Residue Co-Occurrence Score），并且把该算法与共进化网络算法开发为 R 软件包 cooccurNet （见下图 1）。RCOS 算法主要用来计算 DNA 或者蛋白序列中位点之间的共进化程度，对于给定长度为 M，序列数为 N 的数据集，其计算复杂度为 N*M^2。该算法涉及到多个参数，包括位点的保守程度的阈值 c1，判断共进化与否的阈值 c2，位点的编码方式（根据核苷酸或者氨基酸的物化属性有多种编码方式）。该算法测试的数据集包括 150 个蛋白家族的多序列比对，每个多序列比对的序列数分布从 511 到 74836，序列长度分布从 50 到 200。基于超算资源，我们需要测试各个参数对于该算法的影响，最终确定该算法在该数据集上的最佳参数。此外，为了确定 RCOS 的统计显著性，需要对于每个多序列比对进行扰动 1000 次，建立 RCOS 在零假设下的分布。最终我们得到了该算法在各个参数下的结果，可以帮助用户在使用该算法时根据自身的数据选择最佳的参数。

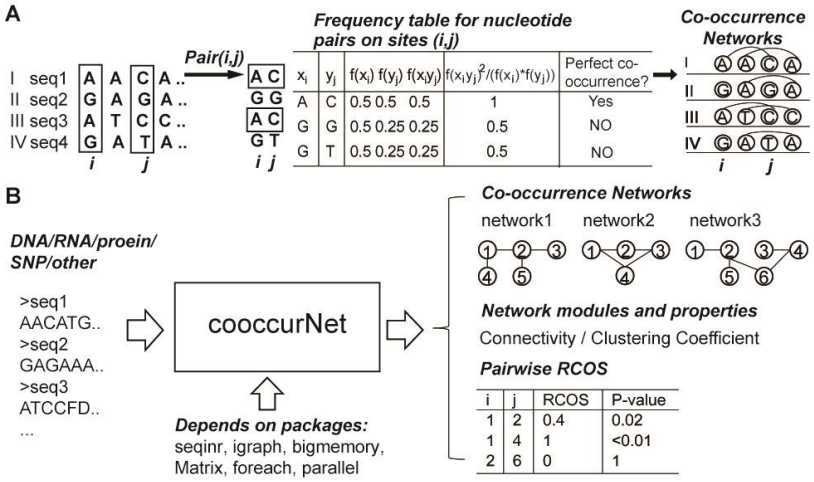


图 50 cooccurNet 包的计算原理与工作流程-湖南大学

第二个研究是基于超算对高致病性禽流感 H5N1 病毒的抗原变异预测模型进行测试以及对该病毒进行抗原进化模拟。系统地理解高致病性禽流感 H5N1 病毒的抗原进化规律对于合理准确地推荐流感疫苗进而提高疫苗的效果非常重要。从该病毒的主要抗原蛋白的序列出发，通过发展计算模型对该病毒进行了系统的抗原分类（如下图 2 所示），然后基于该抗原分类在该病毒完整进化历史的尺度上研究它的抗原进化模式及其与时空关联规律，发现该病毒的抗原进化呈现分化式的进化模式，其流行具有明显的区域流行和多抗原类共流行的特点。这对于合理地制定疫苗政策提供一定的科学依据。

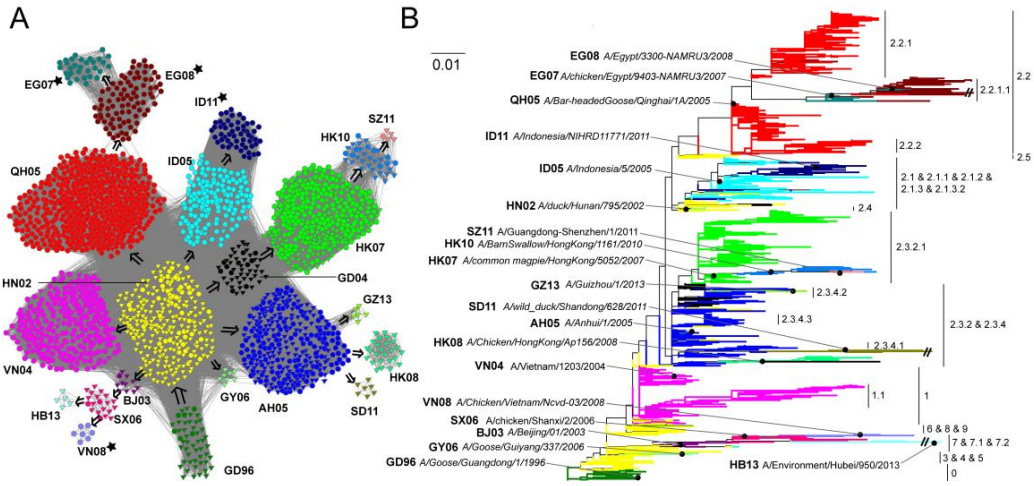


图 51 对所有高致病性禽流感 H5N1 病毒的抗原进化模拟

4.1.11 揭示纳米颗粒与肺表面活性剂相互作用新机理

用户姓名：胡国庆
用户单位：中科院力学研究所
应用领域：计算力学
软件来源：开源软件
计算规模：480 核
成果简介：

作为呼吸免疫系统的第一道防线，肺表面活性剂分子膜与可吸入细颗粒物的相互作用代表了肺部最初始的生物-纳米作用。这类相互作用决定了吸入颗粒的最终归宿、毒性效应及

潜在的药物用途。由于其细小尺度，很大部分吸入纳米颗粒将沉积到肺泡附近，并与肺表面活性剂发生相互作用。其复杂作用机制与纳米颗粒的物理化学特性密切相关，也依赖于肺表面活性剂的分子组成、动态表面相变行为、单层膜生物力学特性等因素。

中科院力学研究所非线性力学国家重点实验室研究员胡国庆、博士研究生焦豹、副研究员施兴华与美国夏威夷大学教授Zuo Yi课题组开展合作，结合分子动力学模拟和实验测量，深入研究了不同亲水性及表面电荷对纳米颗粒/天然肺表面活性剂单层膜相互作用的影响机理。研究表明，纳米颗粒与肺表面活性剂的相互作用及其脂蛋白冕的形成，不仅影响肺表面活性剂单层膜的生物物理特性，还将对随后的颗粒表面生物分子交换、与肺细胞的相互作用、颗粒进入不同组织和器官等过程产生影响。研究进一步建议，在评估纳米颗粒毒性以及设计以纳米颗粒为载体的吸入式给药方式时，应考虑纳米颗粒-肺表面活性剂脂蛋白复合体的特性。

该研究获得科技部973计划、国家自然科学基金以及美国自然科学基金的大力资助。相关研究成果已发表于ACS Nano (Guoqing Hu, Bao Jiao, Xinghua Shi, Russell P. Valle, Qihui Fan, and Yi Y. Zuo. Physicochemical Properties of Nanoparticles Regulate Translocation across Pulmonary Surfactant Monolayer and Formation of Lipoprotein Corona. ACS Nano, 2013, 7, 10525－10533)。

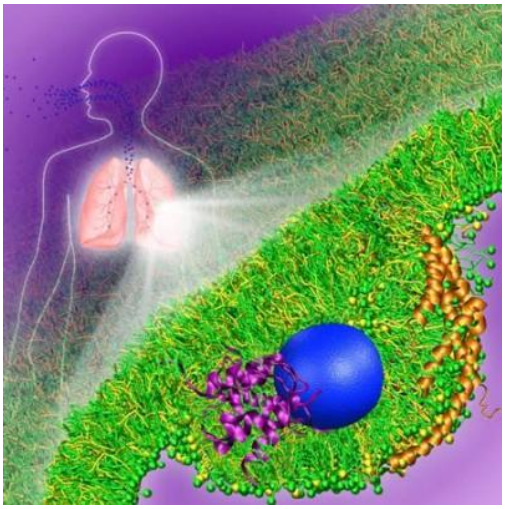


图 52 吸入纳米颗粒与肺表面活性剂发生相互作用

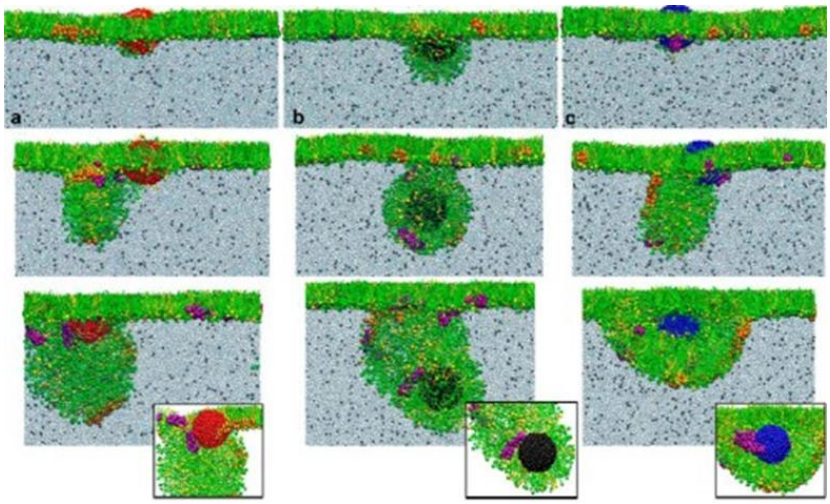


图 53 不同表面电荷的疏水颗粒与肺表面活性剂的作用

4.1.12 表面暴露金字塔结构的氧化物纳米线阵列应用于高效电催化

用户姓名：凌涛
用户单位：天津大学
应用领域：新材料
软件来源：商业软件
计算规模：120 核
成果简介：

控制催化剂表面原子结构是提高催化剂性能的有效途径。对于金属氧化物，表面电子结构可控制备及原子尺度结构与催化性能关系研究仍然具有巨大挑战。采用动力学控制的气相离子交换策略，在高导电碳纤维基底上可控制备了长度及直接可控的 CoO 纳米线阵列。原子分辨率球差电镜实验及模拟分析表明 CoO 纳米线表面暴露织构化的金子塔结构，这种特殊的结构由两个{100}面和两个高表面能的{111}面组成。X 射线近边吸收结果表明 CoO 纳米线表面富集氧空位。DFT 计算表明在{111}表面氧空位的生长能比{100}面和{110}面低 3 eV，因此这种特殊的金字塔结构表面易于富集氧空位。上述特殊的表面原子结构使 CoO 纳米线阵列获得了优异的 ORR/OER 催化活性，其氧还原性能（ORR）的开启电压及 ORR 饱和电流已经逼近贵金属 Pt；其氧析出性能（OER）已经优于商用 RuO2 催化剂；其 ORR-OER 双功能催化的 ΔE=0.71 V 是所有材料中最好的。

通过“天河一号”计算表明 CoO 纳米线优异的电催化性能与其表面原子结构密切相关，在金字塔{111}表面引入氧空位后能实现有效的反应物 O2 活化；在 ORR/OER 催化反应过程中，所有反应中间体获得最适合的吸附能变化；另外，在{111}表面引入氧空位后能在 CoO 能带中增加新的电子态，大大提高氧化物的导电性，实现电催化过程中快速的电荷转移。该工作发表于 Nature Communications, 2016, 7, 12876。

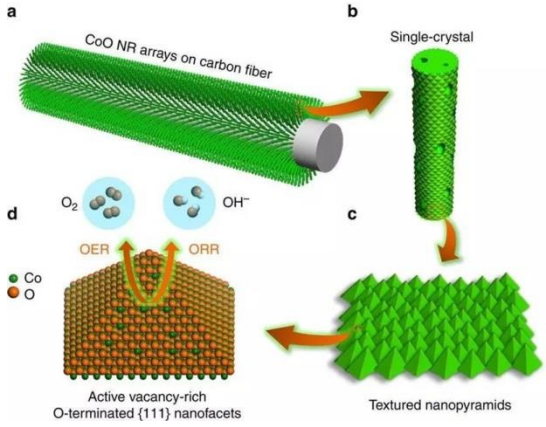


图 54 调控表面原子结构制备优异电催化剂

4.2 千核规模

4.2.1 区域超高分辨率多圈层耦合数值预报系统

用户单位：青岛海洋科学与技术国家实验室

应用领域：海洋领域

软件来源：WRF、ROMS

计算规模：3960 核心

成果简介：

“两洋一海”聚焦西太平洋-南海-印度洋这一关键海区，通过实时或准实时地获取这一海区不同尺度的海洋环境综合信息，研究其多尺度变化的机理，构建我国特色的海洋动力系统数值模式体系，建立海洋环境和气候变化的预报和预测系统，从而实现海洋的状态、过程和变化透明。“两洋一海”区域超高分辨率多圈层耦合数值预报系统采用青岛科学与技术国家实验室、德州农工大学、美国国家大气研究中心联合研发的 CRESM 模式，主要针对两洋一海区域做高分辨率耦合数值预报，目前对该区域的研究处于国际前沿水平。选取的 CRESM 模式的大气和海洋分量分别是 WRF 和 ROMS 模式，此外还有海浪模式 SWAM，陆地模式，化学等分量也在不断补充和完善，这些分量用耦合器使其有机的运转起来。目前实现实时预报的大气分量的分辨率为 27km，海洋分量分辨率为 9km。测试运行版本将大气分量分辨率提高到 9km，海洋分量提高到 3km。

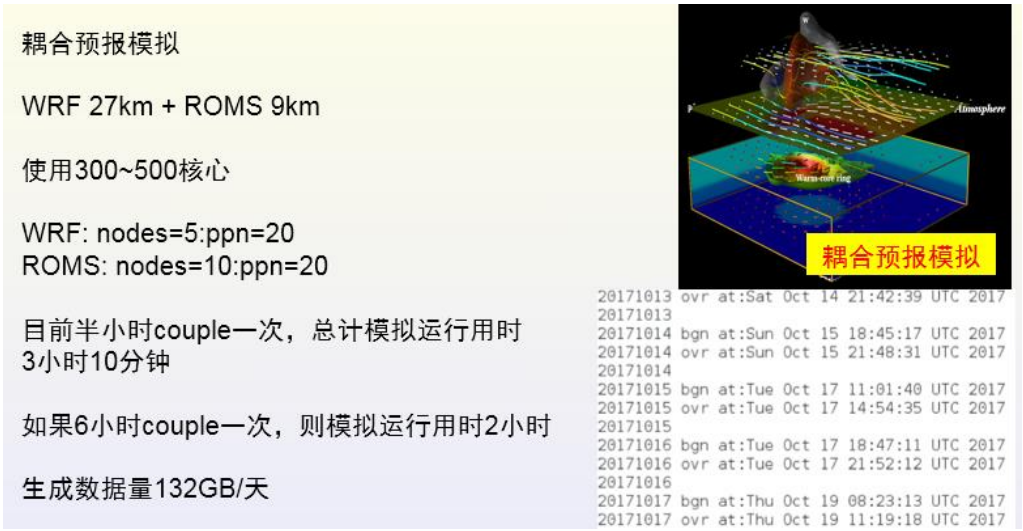


图 55 耦合预报模拟

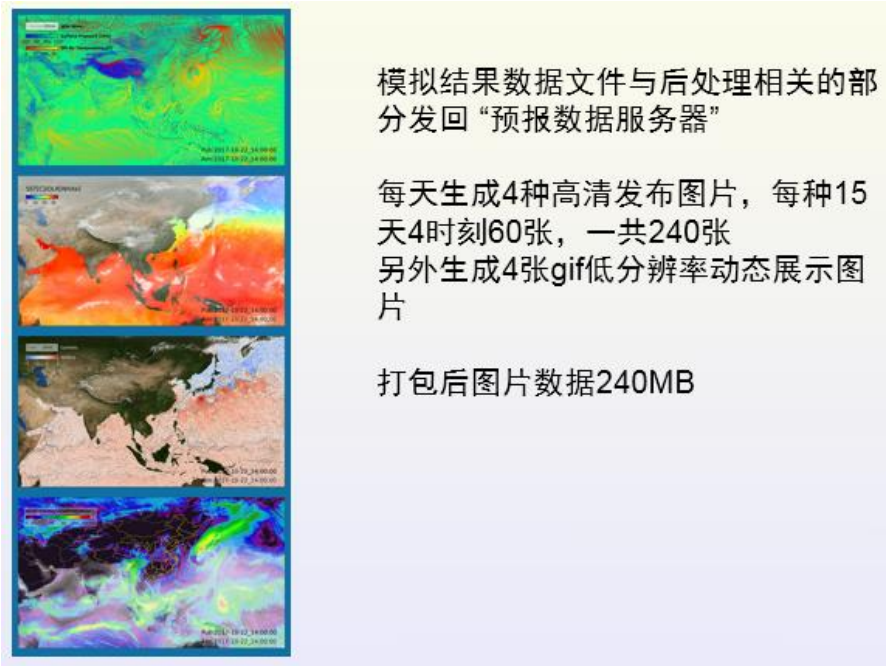


图 56 预报结果处理

4.2.2 二维材料宽带光学性质的逆蒙特卡罗程序

用户姓名：丁泽军

用户单位：中国科学技术大学

应用领域：新能源新材料

软件来源：自编程序

计算规模：1536 核

成果简介：

自主开发了电子束和材料的相互作用模拟软件，实现了利用反射电子能量损失谱获得块材及纳米薄膜的光学常数。该方法具有通用性好、测量范围广、测量结果准确等优点。目前我们实现了部分过渡金属和镧系金属材料的相关测量并发表了相关学术论文，还有一部分文章也在审稿中。后续我们将加入衬底模块，以期实现有衬底的薄膜（如石墨烯、MoS_2 等）的物性测量。

目前采用椭偏仪测量材料光学常数已经发展到非常成熟的阶段，多数实验室能够利用商用设备和相应的内置模型进行材料的光学性质表征。然而美中不足的是，和多数光学测量一样，椭偏测量具有能量范围小（通常不大于 6 eV）、普遍不具备超高真空测量条件（不利

于表征和污染控制）等缺点。为了弥补光学测量的不足，我们采用电子束作为探针，利用电子和材料的相互作用测量材料的光学性质。其操作模式和光学测量方案一致：1、收集和材料作用后的电子能谱 2、建立电子在材料中的输运模型，从而搭建材料光学常数和测量能谱之间的关系。3、利用逆蒙特卡洛反演算法，从测量谱中得到材料的光学常数。我们采用电子输运的蒙特卡洛模拟方法，可以完整地保留实验能谱数据的绝对强度、峰位等信息。在国家自然科学基金委员会-广东省政府联合基金前期资助中，我们陆续完成了对铁、钴、镍、钯等材料的计算，部分成果已发表。

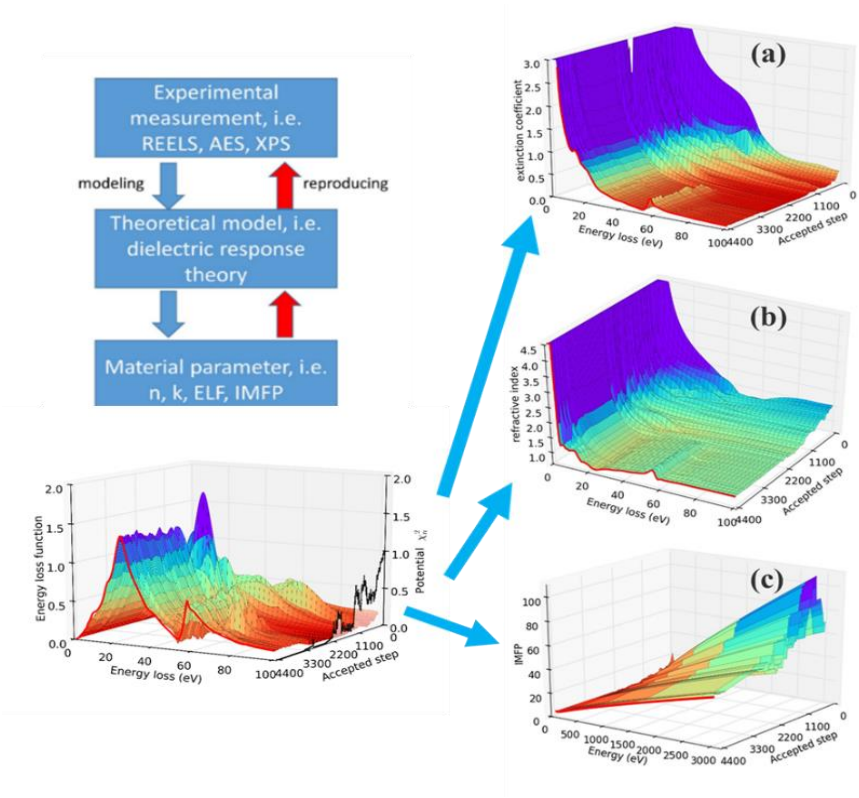


图 57 二维材料宽带光学性质的逆蒙特卡罗程序

4.2.2 高压下新型 Na-He 化合物

用户姓名：李阔
用户单位：北京高压科学研究中心
应用领域：新能源新材料
软件来源： 商业软件、自编程序
计算规模： 720 核
成果简介：

本研究组主要关注材料计算，新型能带结构和极端条件下出现的新的物理和化学现象。通过结构预测，相变路径预测和分子动力学等方法探究新型材料在极端条件下的行

为，并通过能带结构计算等手段预测其用途。

元素周期表上第二个元素 He 是一个非常神奇的元素。它是是六种稀有气体元素之一。He 拥有所有元素中最大的电离能，这意味着 He 是所有元素里面最难以给电子的。同时 He 的亲和能几乎观测不到，这就意味着 He 也难以得到电子。所以研究 He 的化合物对基础化学和高压凝聚态物理学具有重要意义。

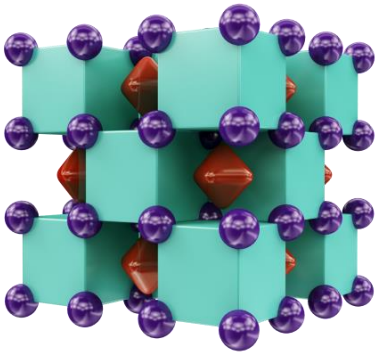


图 58 高压下新型 Na-He 化合物

我们发现 He 在高压下能够得到部分电子，说明 He 在高压下具有一定的化学活性，该工作被评价为改变教科书的工作。当我们分析这里面 He 的特殊成键方式的时候，意外发现高压下的电子结构被外力所扭曲，导致我们在常压下的很多常识和化学理论不再适用。我们尝试了不同的成键描述方法，结果发现采用不同近似的方法会得到完全不同的结果，即我们应该重新审视基本化学理论和定义在高压下是否适用。

我们认为 Na 将在高压下成为最强的单质还原剂。而与此同时，同族的 K，Rb，Cs 等随着 s-d 跃迁的发生，而变得不那么活泼。同时与 Na 相邻的 Ne 变成高压下最惰性的元素。

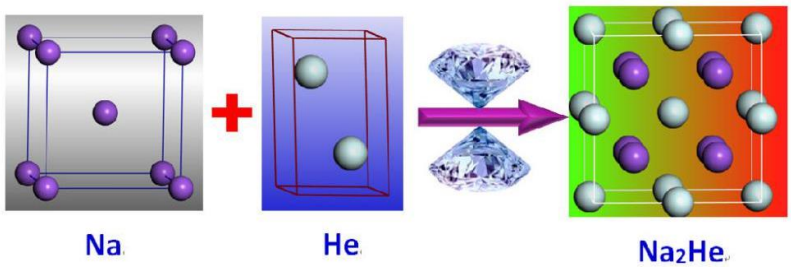


图 59 新能源新材料 2-北京高压科学研究中心

4.2.3 基于深度学习的 RNA 编辑位点的识别及应用

用户姓名：舒文杰

用户单位：军事科学院军事医学研究院

应用领域：生物医药健康

软件来源：开源软件、自编程序

计算规模： 1440 核

成果简介：

该研究团队提出一种基于深度学习的 RNA 编辑识别算法，DeepRed。DeepRed 采用 TensorFlow 的框架，直接从训练样本的原始序列中提取和学习 RNA 编辑的特征，不需要任何基于先验知识的过滤步骤，也不需要 SNP 注释信息，使得 RNA 编辑的识别变得简单、省时，且可以应用于 SNP 信息不全的物种中。在训练集和测试集的评估中，DeepRed 取得了高达 97.81%和 97.50%的 AUC；基于 U87 细胞系实验数据及大型转录组计划的 RNA-seq 数据，对 DeepRed 和现有的方法进行比较，DeepRed 具有更高的准确率、敏感性和特异性，显示出 art-of-the-state 性能。

在此基础上，该团队将 DeepRed 应用于 SEQC 计划的数据，从识别准确率及重复率的角度系统评估了实验室、建库方法、测序深度、测序平台，以及序列比对软件和变异位点识别软件等因素对 RNA 编辑识别的影响。

同时，该团队应用 DeepRed 研究了人和小鼠早期胚胎的 RNA 编辑发育模式，以及灵长类谱系和果蝇物种的 RNA 编辑进化模式，发现 RNA 编辑在人和小鼠的胚胎早期呈现阶段性特异发育，在谱系相近的灵长类和果蝇中呈现进化保守性特点。

进一步，该团队将 DeepRed 应用于 GEUVADIS 计划的数据，首次构建出了人类种群的 RNA 编辑景观图。从人群结构、共享性和大洲差异三个方面分析 RNA 编辑，共识别出 146,175 个 A-to-I 编辑位点，并从转录组的层面分析了人类种群的共性和特异性，说明了 RNA 编辑能够刻画人类种群内部结构和变化规律，可以用来探究人群迁徙等问题。

最后，该团队利用 DeepRed 可适用于多物种的特性，收集了来自 ENCODE、Roadmap、modENCODE、TCGA 等大型研究计划中包含人、小鼠、大鼠、果蝇、线虫、灵长类动物等近二十个物种的超过一万个 RNA-seq 样本数据，并对这些样本进行 RNA 编辑的识别和注释，采用 django-Mysql 的框架，构建了千万条 RNA 编辑位点及近 200T 注释信息的 dbRed 数据库，dbRED 旨在为大家提供更方便的 RNA 编辑资源及功能注释服务。

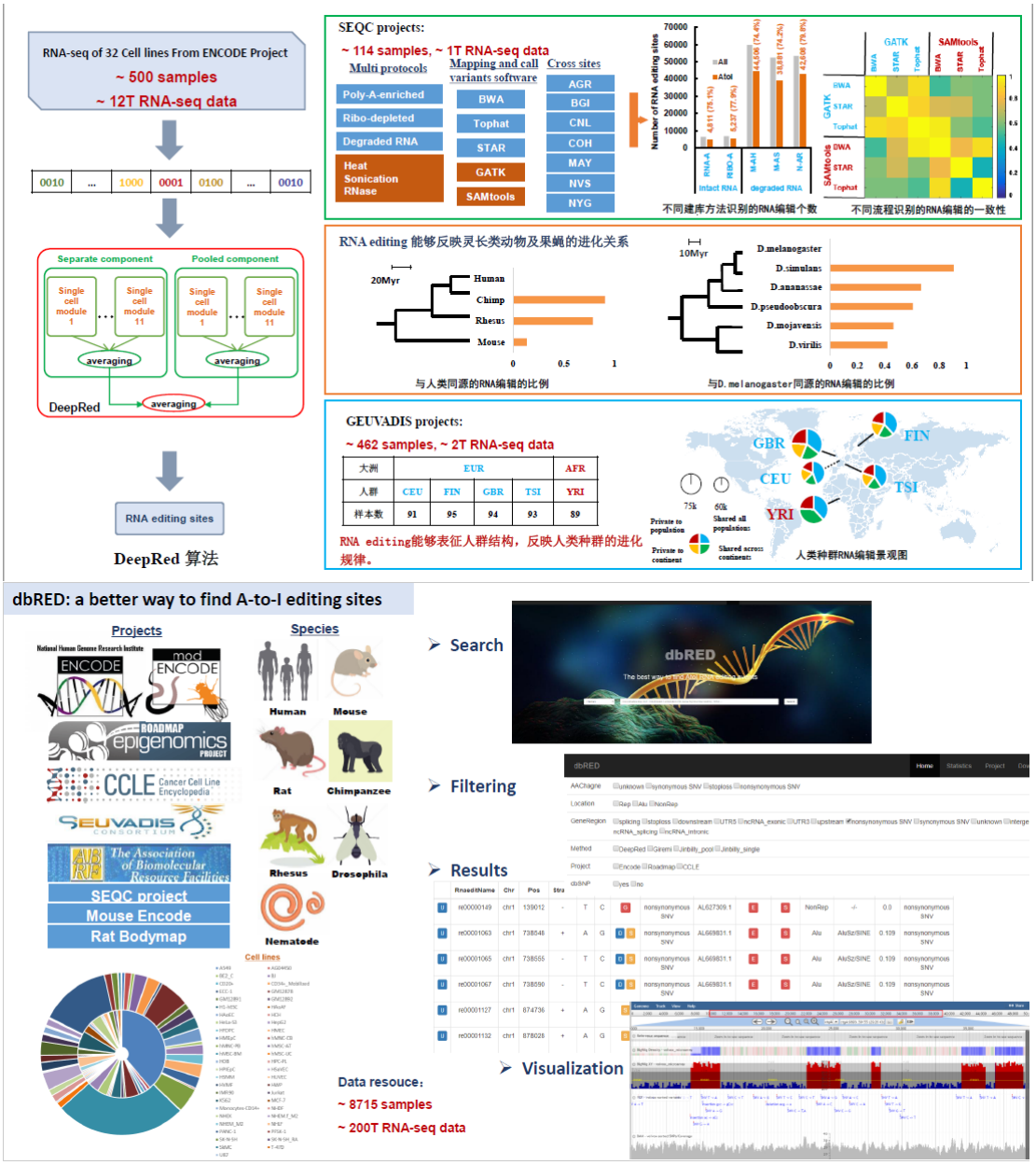


图 60 基于深度学习的 RNA 编辑位点的识别及应用

4.2.4 大规模壳模型计算研究原子核结构

用户姓名：袁岑溪

用户单位：中山大学

应用领域：天文地球物理

软件来源：自编程序

计算规模： 3000CPU 核

成果简介：

每种元素有多少同位素？这些同位素的性质是什么？这些问题仍有很多未知。壳模型能同时描述基态和激发态，非常适合研究这些问题，但需要较大规模的计算量，有些需要求解 107-30 维矩阵。本成果借助天河 2 的计算能力，广泛探索核结构性质(以下 5 个及其他工作致谢 NSFC 超算项目)：

1、预言 132Sn 附近的同核异能态并预言了 129Pd 的 19/2+态通过中子放射性衰变。同核异能态是寿命较长的激发态，包含丰富的物理信息。中子放射性一般寿命非常短，有可能存在寿命较长的衰变态，对研究中子放射性规律很有价值，但尚未发现。

2、解决了 14C 能谱、衰变、电磁跃迁等性质理论描述困难的问题。下图可以看到只有 YSOX 相互作用(负责人于 12 年提出)在 4hw 或更大的模型空间才能同时描述好 14C 的这些性质。大的模型空间需要较大的计算量，可在天河 2 以其他类似核为对象延续研究。

3、原子能院张焕乔院士、林承键研究员团队 17 年发表了 ^{22}Si 质量的首次测量，邀请负责人理论分析，负责人用 14 年提出的包含弱束缚效应的相互作用计算，在实验误差内完全符合测量值。

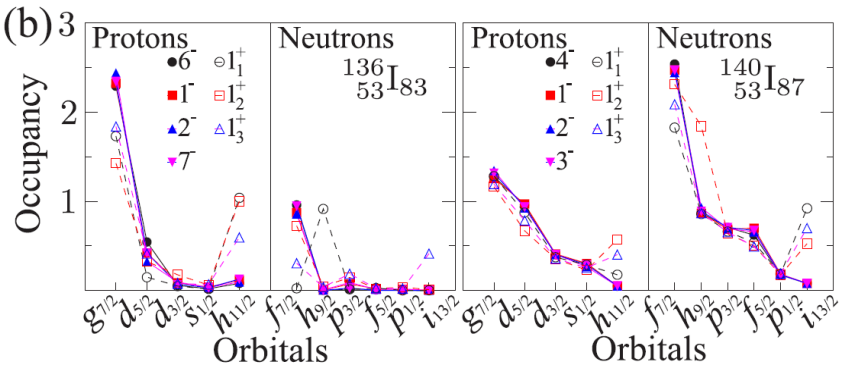


图 61 大规模壳模型计算研究原子核结构-1

4、日本理化学研究所 RIBF 装置 EURICA 合作组 17 年发表了 ^{140}I 的 GT 强度的首次测量，发现与 ^{136}I 的 GT 强度差别巨大，邀请负责人理论分析，发现两个核的核子所占据轨道变化巨大。

5、中科院近代物理研究所刘忠研究员团队 17 年发表了 ^{223}Np 基态自旋宇称的首次测量，邀请负责人理论分析。在论文审稿过程中，审稿人指出从实验数据分析 ^{223}Np 基态自旋宇称可能是 $9/2^-$或 $7/2^-$，但大规模壳模型计算给出 $9/2^-$，所以 $9/2^-$是合理的。

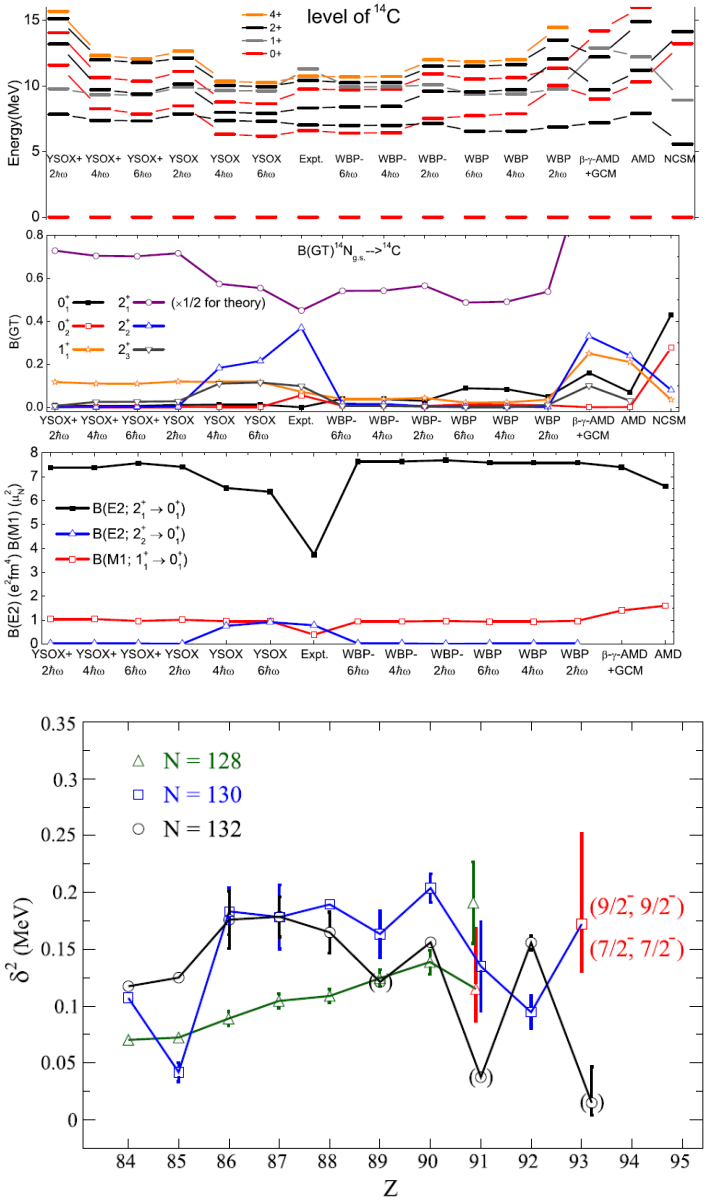


图 62 大规模壳模型计算研究原子核结构-2

4.2.5 石油勘探数据处理平台

用户单位：某石油发展公司
应用领域：石油勘探
软件来源：用户自行安装
计算规模：3072 核
成果简介：

基于国家超级计算深圳中心强大的计算平台，通过更精细化的勘探及其更大规模的数据处理，大幅提高勘探分辨率，发现更多有开采价值的油田，在继续寻找中深油层的同时，向深层底层要油，进一步提高石油及天然气的探明率 50%以上，有效提升石油勘探过程的投入产出比。

图 63 石油勘探数据处理平台

4.2.6 功能材料模拟与设计

用户姓名：江俊
用户单位：中国科学技术大学
应用领域：功能材料设计
软件来源：超算中心提供商业软件、自主开发软件
计算规模：100 节点以上（~900 核）

太阳能光解水－安全制氢储氢材料的设计：太阳能光解水制氢具有广阔的前景，也是光化学研究的重点方向。长久以来光解水制氢的发展停滞不前，其原因在于氢气生成后很难与氧气分离，二者混合容易发生逆反应并带来安全风险。基于复杂体系的电子动力学演化模拟，我们设计了一种“三明治”结构材料体系：石墨烯-碳氮-石墨烯。该设计有效抑制了太阳能制氢和氧的逆反应发生，实现了氢气的有效提纯，获得了首个安全制氢与储氢一体化的设计(Nat. Commun. 2017, 8: 16049)。该工作引起巨大社会反响，被新华社、中科院、南方日报等媒体广泛报道。

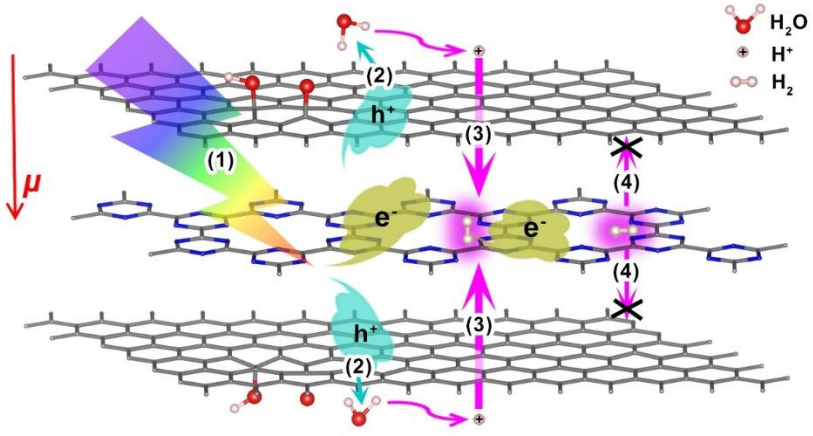


图 64 功能材料设计-1

功能材料的多态相变调控：对材料进行相变操纵是广泛应用的手段，我们近期的模拟工作揭示了少量的氢原子掺杂或氧缺陷能够使得室温下的绝缘态二氧化钒晶体金属化，而进一步的氢强掺杂会使得金属化的二氧化钒重新变成绝缘态。通过原位的 R-T 电输运测试实现了二氧化钒晶态薄膜中氢原子或缺陷的逐步析出，得到氢注入掺杂调控 VO2 相变的整个过程。我们的实验和理论证实了这样一个相变机理：氢原子或氧缺陷修饰诱导固体材料产生电荷极化，引起电子填充能级的移动导致电子相变(J. Phys. Chem. Lett. 2017, 8: 3129； Phys. Rev. B 2017, 96: 125130)。同时，传统的热退火或压力诱导相变的方法存在目标结构控制困难的问题，我们创新提出利用光辐照来驱动晶体材料发生智能相变，选取了二维材料 MoTe2 和三维体材料 NaYF4 晶体，在第一性原理层次进行相变模拟和电子结构计算。模拟结果表明，晶格局域加热产生缺陷，驱动原子非均匀重排，重排后的结构将很可能具有电声耦合极弱的优点，因而能够在激光的持续辐照下稳定下来，而未达成弱电声耦合的晶格会被光辐照驱动继续运动。因此光诱导的非均匀相变具有产物选择性和抑制电声耦合的优点 (Appl Mater Interfaces. 2017, 9:23309)。

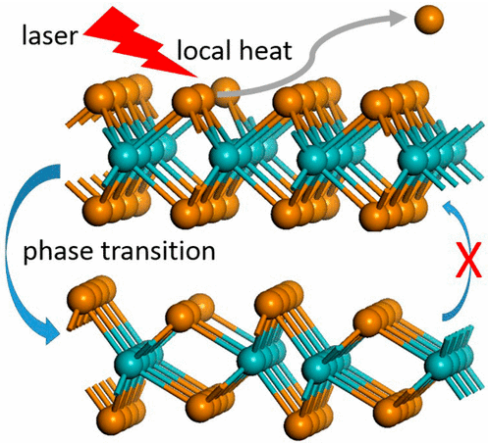


图 65 功能材料设计-2

二维线二色光谱识别蛋白二级结构：作为生命基石，蛋白质的动态结构信息对理解生命行为至关重要。如何实时跟踪蛋白质动态结构，尤其是膜蛋白、纤维化蛋白、离子通道蛋白的分子取向，是蛋白质结构研究的前沿问题。当前极受关注的冷冻电镜技术，就依赖于对不同取向的蛋白结构信息进行二维分类。我们从激子耦合对偶极子取向的依赖关系出发，结合新型二维紫外光谱和线二色光谱的优点，创新提出了二维线二色光谱的概念，并论证了信号与蛋白二级结构的取向角度 θ 之间的 cos4 θ 依赖关系，相对传统的线二色光谱的 cos2 θ 依赖提高了一倍分辨率（J. Phys. Chem. Lett., 2017, 8: 1031）。

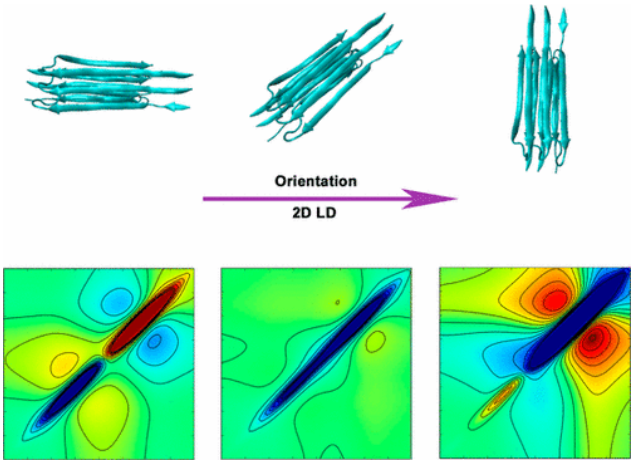


图 66 功能材料设计-3

4.2.7 航空发动机设计

用户姓名：陈敏敏
用户单位：中国航空动力研究所（株洲 608 所）
应用领域：工程仿真设计
软件来源：长沙超算采购的商业软件计算规模：200 个节点以上（~2000 核）
成果简介：

500 万以上网格密度的精细仿真是工程设计的必须，优化设计要求 3000 万以上网格密度，进一步考虑增加边界条件，计算量几何级增长，该所原有平台单个部件每一个模型约需计算 1 周，工程上不可接受，企业自身平台无法承载，在中心约 5 小时完成计算，共建“航空装备仿真设计研究平台”以快速提升我国航空装备制造业整体创新水平。

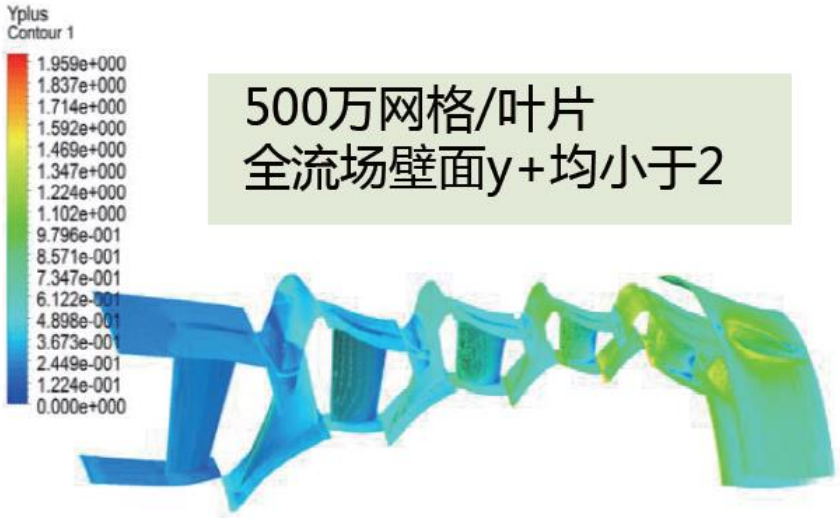


图 67 航空发动机设计

4.2.8 首次实现基于结构的电压门控钾离子通道激动剂发现

用户姓名：阳怀宇
用户单位：中科院上海药物研究所
应用领域：生物医药
软件来源：开源
计算规模：2048 核
成果简介：

中科院上海药物研究所药物发现与设计中心，通过“天河一号”超级计算机运用分子对接、动力学模拟方法，从 20 万个化合物中挑选出 25 个候选分子，经电生理测试确认 9 个 KCNQ2 新激动剂，其中两个在两类动物模型中表现出优异的抗癫痫活性。国际顶级期刊 Cell Research 在线发表了该研究结果。

成果照片：

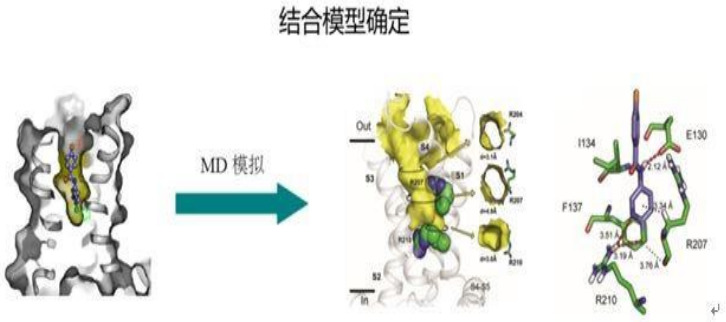


图 68 KCNQ2 与 ztz240 结合模式研究

4.2.9 白鹤滩与溪洛渡水电站的抗震安全模拟分析

用户姓名：郭胜山

用户单位：中国水利水电科学研究院

应用领域：大坝抗震安全模拟

软件来源：自主研发软件 PSDAP

计算规模：数百万自由度的多重非线性耦合时程计算

成果简介：

案例 1：

白鹤滩水电站是国家"十三五"能源发展规划建设中最具代表性的重大清洁能源工程，总装机容量 1600 万千瓦，建成后将成为仅次于三峡的中国第二大水电站，世界第三大水电站。白鹤滩拱坝坝高 289m，在 300m 级高坝中抗震参数最高，中国水利水电科学研究院利用自主研发的高性能并行计算软件 PSDAP 运用“天河一号”超级计算机平台开展了白鹤滩拱坝抗震安全模拟分析，通过构建自由度规模达 250 多万的大坝三维模型模拟大坝在地震作用下的变形、应力、稳定性，

为大坝抗震设计提供依据。

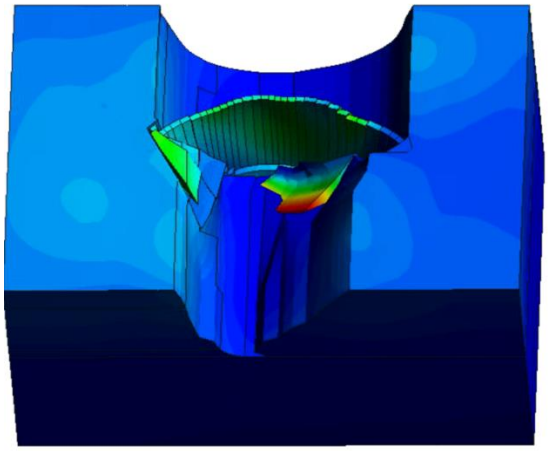


图 69 白鹤滩拱坝-坝肩体系在超设计地震作用下的变形示意图（放大后）

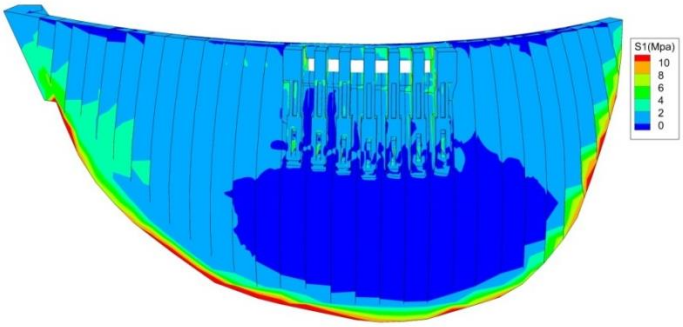


图 70 白鹤滩在超设计地震作用下的拱坝应力

案例 2：

溪洛渡水电站是我国投产电站中装机规模仅次于三峡的特大型水电站，工程规模巨大，大坝高达 285.5m，地震设防烈度高达 9 度，大坝抗震安全是影响工程安全运行的关键问题。为研究大坝地震损伤机理及抗震能力，大坝坝体网格尺寸在 2m 左右，并按大坝实际横缝布置模拟了所有横缝，总自由度达 350 多万，建立了能够考虑地基辐射阻尼影响、横缝接触非线性、坝体损伤材料非线性的大坝抗震多重非线性耦合分析模型。中国水利水电科学研究院利用自主研发的高性能并行计算软件 PSDAP 运用“天河一号”超级计算机平台开展了模拟分析，研究了不同级别地震下坝体损伤破坏情况，为大坝抗震设计和安全运行提供依据。

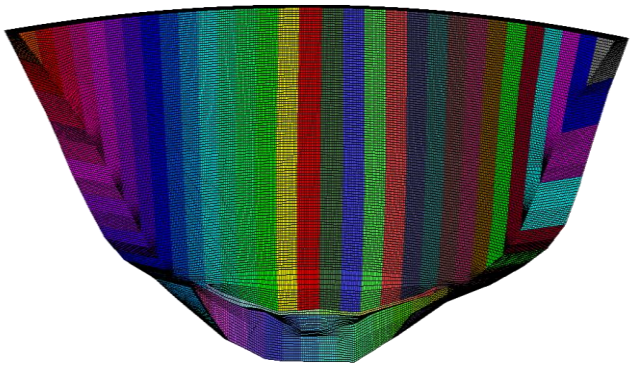


图 71 溪洛渡拱坝坝体精细网格

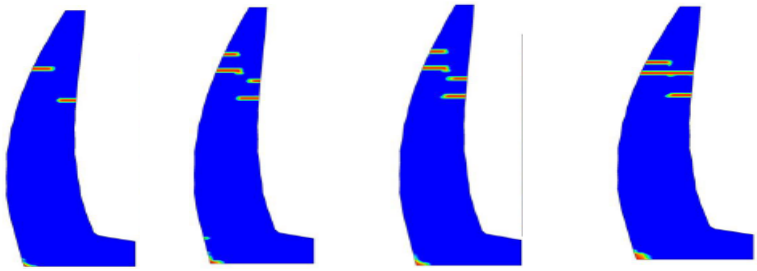


图 72 不同级别地震下坝体损伤破坏情况

4.2.10《熊出没》系列 3D 大电影计算渲染

用户单位：某动漫公司
应用领域：文化创意
软件来源：商业图形图像软件
计算规模：4000 核
成果简介：

国家超级计算深圳中心为多家知名企业的动漫、电影提供渲染服务，解决电影中所使用的大量计算处理特效制作、高端的三维技术等大量图像处理工作，大大节省了其制作成本及制作周期，使项目整个工期缩短了 50%以上。依托“星云”超级计算机强大的硬件资源及技术服务支撑，国家超级计算深圳中心连续 5 年成功助力动漫有限公司《熊出没之夺宝熊兵》、《熊出没之雪岭熊风》、《熊出没之熊心归来》、《熊出没之奇幻空间》、《熊出没 变形记》等 5 部国产 3D 动画大电影如期生产完成，并屡次突破国产三维动画电影的票房纪录，前四部累计票房已突破 14 亿元，2018 年最新电影《熊出没 变形记》也已顺利完成制作，将于正月初一全国上映。

图 73 2018 年《熊出没·变形记》及 2017 年《熊出没之奇幻空间》

图 74 2016 年《熊出没之熊心归来》及 2015 年《熊出没之雪岭熊风》

图 75 2014 年《熊出没之夺宝熊兵》

4.3 万核规模

4.3.1HPIC-LBM 及其在大时空湍流磁重联磁能耗散及带电粒子加速研究中的应用

用户姓名：朱伯靖

用户单位：中国科学院云南天文台 / 中国科学院天文大科学研究中心

应用领域：天文地球物理

软件来源：商业软件、自编程序

计算规模：24,000 核

成果简介：

太阳大气湍流磁重联中磁能转化为等离子体热能和动能是导致太阳爆发的根本原因，同时太阳爆发产生的日冕物质抛射高能粒子又是影响日地空间电磁环境最主要因素。现在已知，太阳耀斑、爆发日珥、以及 CME 是一个典型太阳爆发过程的三个结果，而磁重联电流片是将三者有机地连接在一起的重要结构，也是爆发过程中能量转换的核心区域。

本研究基于波尔兹曼控制方程，通过拓展(广义)分布函数，把波尔兹曼(LB)中的 Lattice Grid 模型与粒子云(PIC)YEE Grid 模型结合，同时对 LTSMR 中的等离子体湍流运动(plasma bubbles)、磁场拓扑结构的湍动变化(magnetic islands)、及两者间相互作用三个方面湍流过程进行研究。

物理图像上：实现对 Kinetic-Dynamic-Hydro 耦合尺度完整爆发过程湍流磁重联过程分析。结果显示，Dynamic-Hydro 尺度模拟结果与已有理论研究和观测结果吻合良好，在 Kinetic-Dynamic 尺度可以定量描述非理想等离子体区内电流片精细演化过程、磁岛与等离子体团相互作用引起不稳定性、及随演化时间增加‘级联’和‘逆级联’过程中磁能与等离子体能相互转化机制，实现了跨尺度耦合分析，达到同时分析大时空湍流磁重联问题宏观大尺度 dynamic 属性和微观小尺度 kinetic 属性目的。

计算效率上：通过与美国洛斯阿拉莫斯国家实验室(LANL)VPIC 程序比较和相互借鉴，现有 HPIC-LBM 在二维问题方面对 Hydro-Dynamic-Kinetic 耦合大时空湍流磁重联进行数值模拟研究由于 VPIC; 在三位问题方面对磁岛产生和演化精细结构方面优于 VPIC。

总之，HPIC-LBM 对 VPIC 的方法进行移植和改造，对 HPIC-LBM 算法和程序，在同时兼顾太阳大气微观小尺度精细结构与宏观大尺度结构前提下，为我国太阳物理及空间物理

领域，研究跨尺度级联分形湍流磁重联机理及应对 2020 年国际开源软件最后使用期限提供了解决方案。

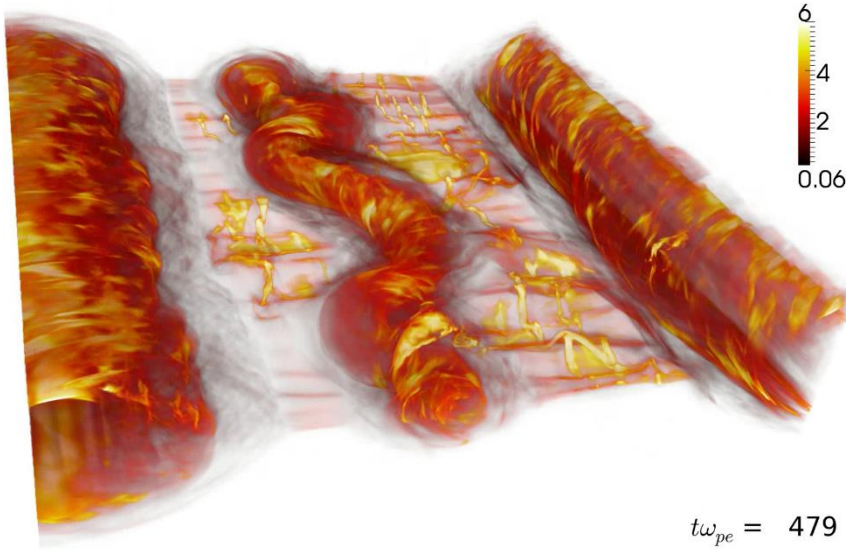


图 76 三维湍流磁重联磁岛形成过程

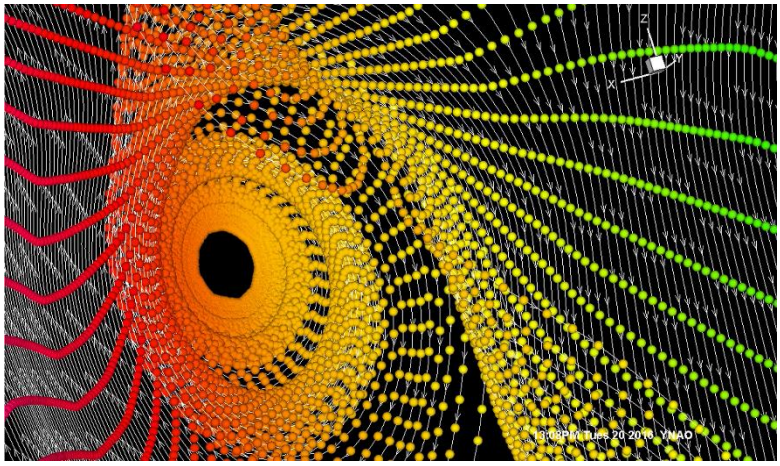


图 77 三维湍流磁重联磁岛形成过程

4.3.2 深圳雷暴尺度集合预报系统

用户单位：深圳市气象局
应用领域：气象
软件来源：开源+自主开发
计算规模：10000 核
成果简介：

深圳市气象局自2013年开始基于国家超级计算深圳中心曙光6000超级计算机在国内首个建立并投入业务运行的对流尺度集合预报系统——深圳雷暴尺度集合预报系统。该系统覆

盖泛华南地区，包含 11 个集合预报成员，最高分辨率为 4 公里，逐 3 小时运行一次，每天运行共 8 次，每次预报未来 24 小时的天气状况，逐小时提供暴雨、大风等集合预报产品供预报人员在业务中应用，为提高我市暴雨、强对流等灾害性天气的预报准确率和能力提供技术支撑。高水平分辨率和先进的雷达资料同化技术，使得雷暴尺度集合预报系统在预报强对流天气时有较大优势，研究和业务应用表明在降水特别是对流系统降水预报方面，对流尺度集合预报系统可以更好的用于预报雨强和落区。目前雷暴尺度集合预报系统产品不仅用于支撑深圳天气预报业务，也共享给国家气象中心进行使用。

成果照片：

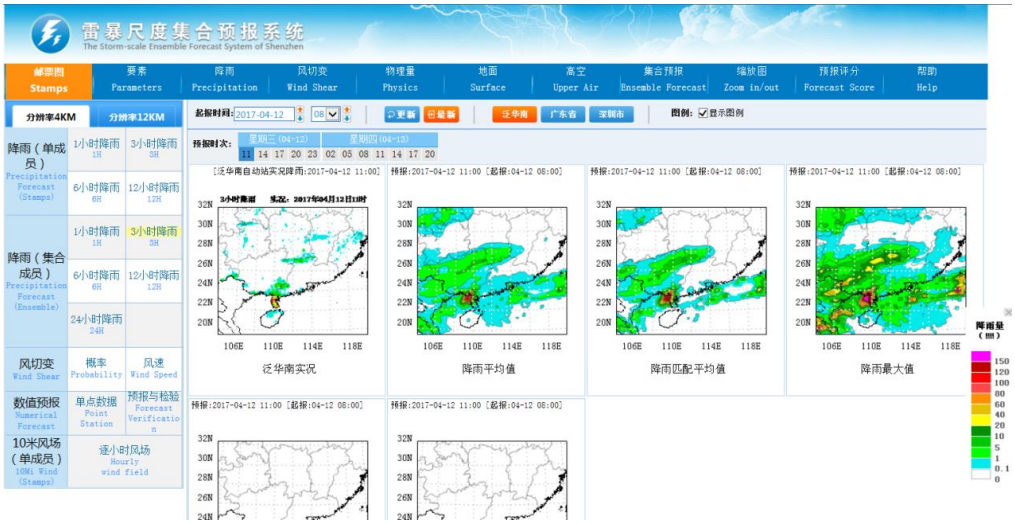


图 78 雷暴尺度集合预报系统

4.3.3 石油地震勘探叠前深度偏移处理的大规模生产应用

用户单位：中国石化石油物探技术研究院

计算单位：国家超级计算天津中心、国家超级计算济南中心

计算规模：10,240CPU 核（天河 1 号）、 31,727CPU 核（神威蓝光）

成果简介：

针对石油地震勘探技术发展需求，系统开展了地震叠前时间偏移与深度偏移处理算法的研究与大规模并行计算软件的研发与性能优化，形成了包括 K-PSTM、K-PSDM、SSF-PSDM、GB-PSDM、RTM 等算法在内的先进地震成像技术系列，部分算法支持 CPU-GPU 异构并行计算平台，在“天河 1 号 A”和“神威蓝光”国产千万亿次高性能计算机系统实现了大规模应用测试和生产性应用，并行计算测试规模超过 10,000 核（最大达到 30,000 多核），测试表明软件具有较好的实用性和良好的并行加速比。研发的软件已经在我国南方、西北、东部等复杂探区的地震资料处理中得到生产应用，其成像精度和计算效率达到并部分超越国际主流软件产品，在我国山前带、隐蔽油气藏、海相碳酸盐岩等复杂地区的油气勘探中发挥了积极作用。

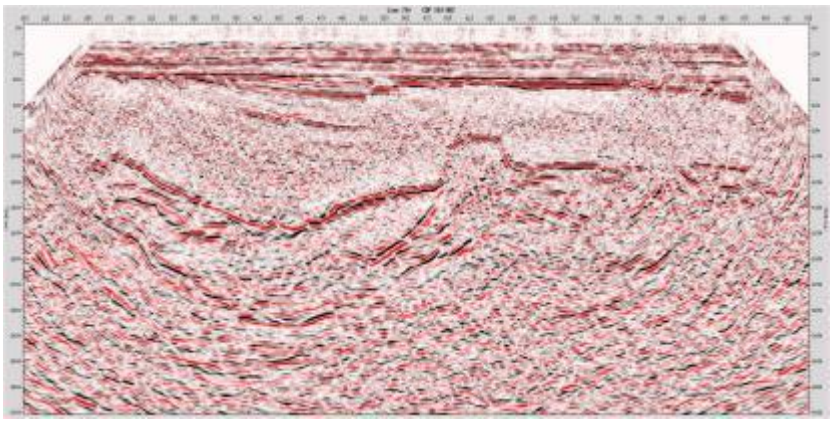


图 79 起伏地表叠前时间偏移剖面

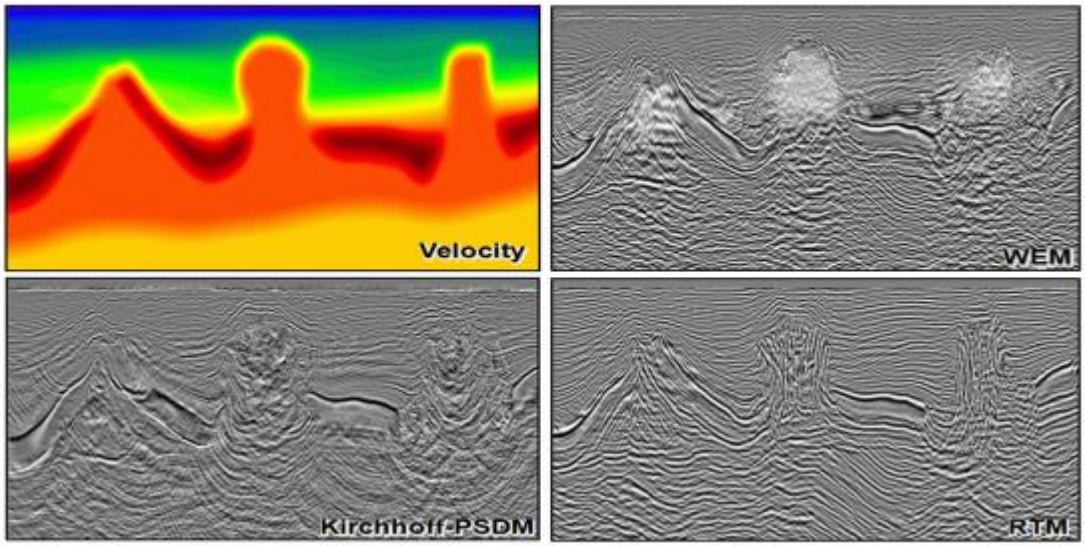


图 80 盐丘构造深度偏移剖面对比

4.3.4 稀薄流到连续流气体运动论统一算法研究

用户姓名：李志辉
用户单位：北京航空航天大学
应用领域：航天领域
软件来源：自研软件
计算规模：24225 核心
成果简介：
（1）应用领域，应用的重要性，解决国家什么重要问题

本应用成果属于航天领域。

研究发展适应连续流到稀薄流、准确模拟各流域复杂飞行器再入空气动力学特征的一体化计算方法，可以应用于大规模并行计算与型号工程研制。本应用结合从事稀薄气体动力学 DSMC 方法与计算流体力学有限差分方法研究基础，将计算流体力学有限差分法引入基于

时间、位置空间和速度空间的气体分子速度分布函数方程数值求解，建立起从稀薄流到连续流的气体运动论统一算法理论与系列计算技术。率先在国际上提出了基于 Boltzmann 模型方程求解各流域复杂高超声速绕流问题的气体运动论大规模并行算法研究方向。

（2）技术难关

1) 解决万核以上并行规模；

2) 实现应用级保留恢复功能；

3) 优化大规模 I/O 数据处理。

（3）应用成果描述

通过在国产神威蓝光千万亿次高效能计算机系统上移植与优化，实现用 2048、8000、16000、24225 个 CPU 核开展近地空间机动飞行器再入 110 公里到 70 公里高度飞行绕流大规模并行计算，计算结果表明：飞行器跨流区飞行高超声速绕流流场密度与马赫数流线结构，以及再入飞行关注点的绕流驻点线密度、温度分布并行计算结果与参考实验数据吻合很好。

（4）应用效果

基于我国神威蓝光系统建立了我国自主创新研究特色的 Boltzmann 方程求解航天飞行器跨流域空气动力学问题应用研究体系；应用系统能够解决我国航天领域依靠传统流体力学研究方法难以解决的空气动力学问题。

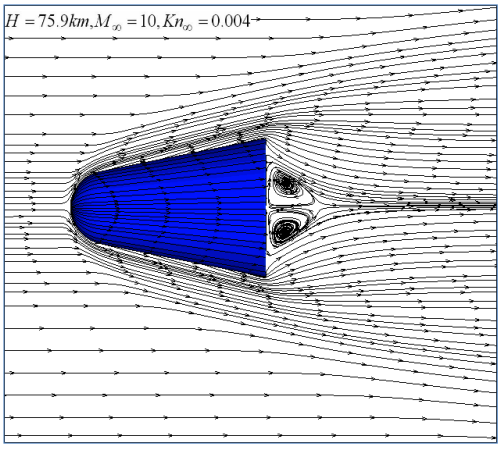


图1 76KM高度飞行绕流结构

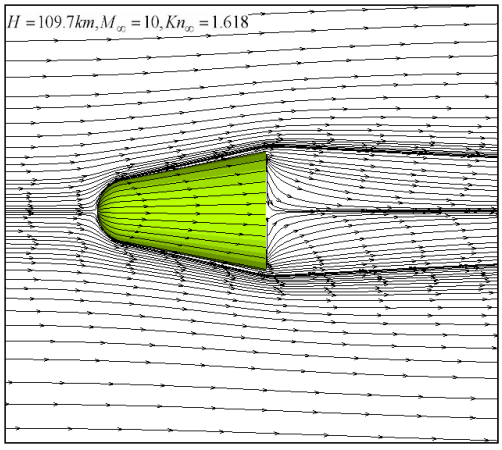


图2 110KM高度飞行绕流结构

并行规模	单步时间	测试加速比	理论加速比
8075	186.26	1.00	1.00
16150	97.94	1.90	2.00
24225	62.65	2.97	3.00
32300	56.86	3.28	4.00
40375	45.32	4.11	5.00
48450	39.32	4.74	6.00
64600	47.55	3.92	8.00
80750	36.68	5.08	10.00
96900	64.40	2.89	12.00

表 1

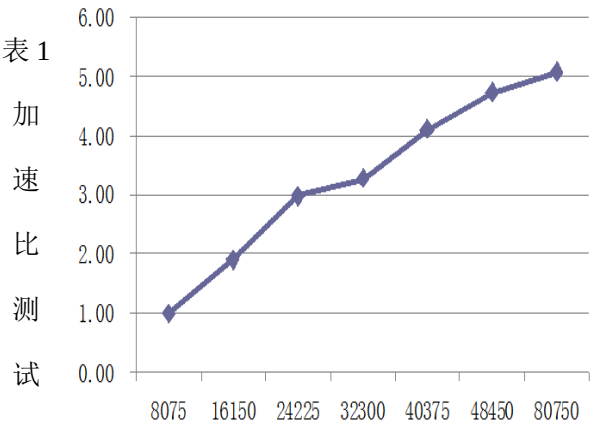


图 3 8075 至 80750CPU 核加速比曲线

图 81 加速比测试及 8075 至 80750CPU 核加速比曲线

4.3.5 南中国海内孤立波预报系统

用户姓名：陈学恩
用户单位：中国海洋大学
应用领域：海洋科学应用领域
软件来源：MITgcm
计算规模：28000 核心
成果简介：
（1）应用领域，应用的重要性，解决国家什么重要问题

本应用成果属于海洋科学应用领域。

内孤立波的研究对海洋科学的理论研究，尤其是海洋内部动力学方面的研究举足轻重，对海洋表面波谱、海气相互作用、遥感科学、浅海声学等学科有很大的影响，对海洋资源的开发，海洋生态环境的保护，海洋军事和海洋工程等方面都有重要的意义。建立基于实际地形和温盐层结的全南海海域的内孤立波数值模型，对南海区域内孤立波的生成、发展、演变和消衰进行全过程模拟，在数值结果可行性验证基础上进行内海内孤立波的预报，填补此研究的国内外空白，在南海内孤立波的数值模拟和业务化预报研究领域确立我国科学家的话语权。

（2）技术难关

1) 重构南海 2006-2010 的温盐场，并提供相应温盐演示系统；

2) 建立水平分辨率 500 米*500 米，垂直分层 100 层的南海全海域内孤立波数值模型和预报系统，内孤立波的生成验证达到 50%以上；

3) 高分辨率物理及参数化方案的调试；

4) 大规模 I/O 数据处理优化；

5) 海量数据结果分析；

6) 大规模并行业务系统构建。

（3）用成果描述

完成对包括完整吕宋海峡的南海北部、南海西北部、台湾岛北部进行了初步的高分辨率内孤立波三维数值模拟。

（4）应用效果

最大并行度达到 28000 核心，实现系统业务化运行，为进一步深入研究提供数值模拟平台支撑。

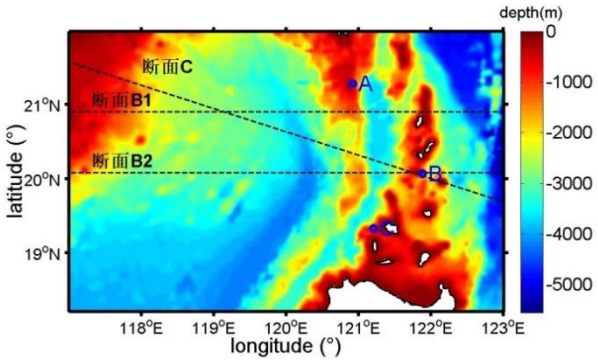


图 82 三维模拟区域海底地形

（A） M2 分潮驱动下的内孤立波数值模拟（初始场水平方向温盐均匀分布）

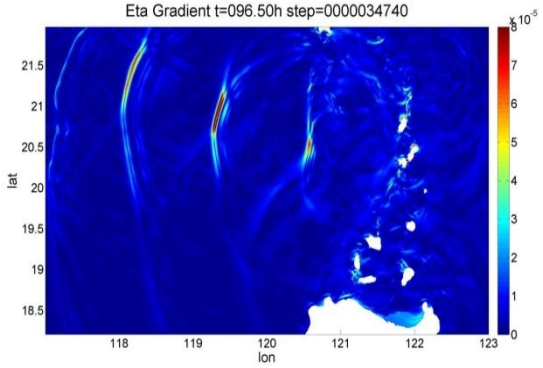


图 83 M2 分潮驱动下 96.5h 时的海面高度梯度

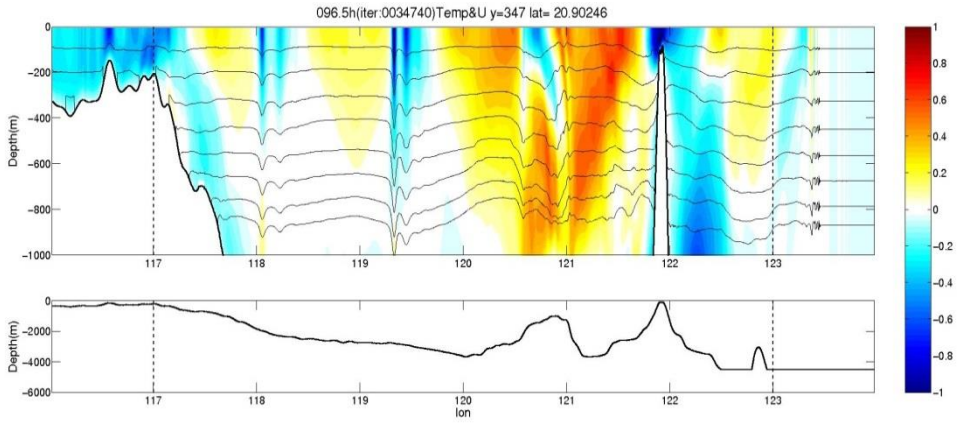


图 84 M2 分潮驱动下 96.5h 时 B2 断面流场与温度分布

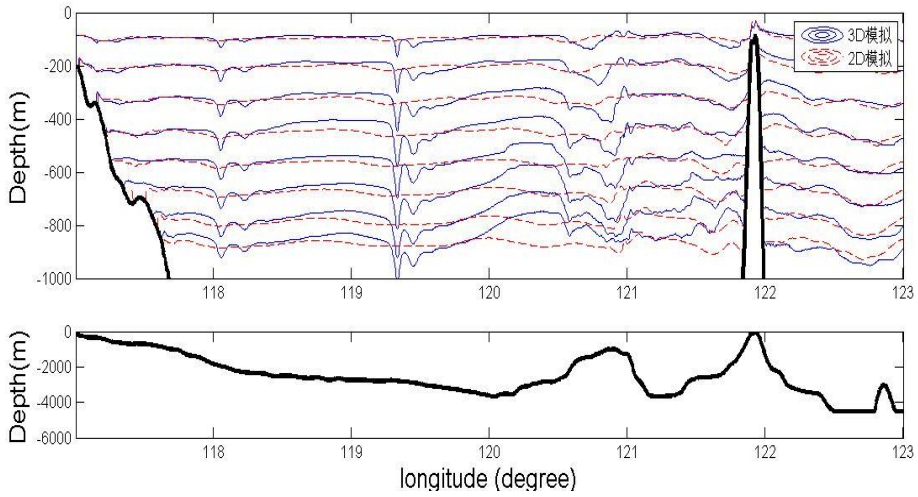


图 85 96.5 时 B1 断面 2D 与 3D 模拟结果对比

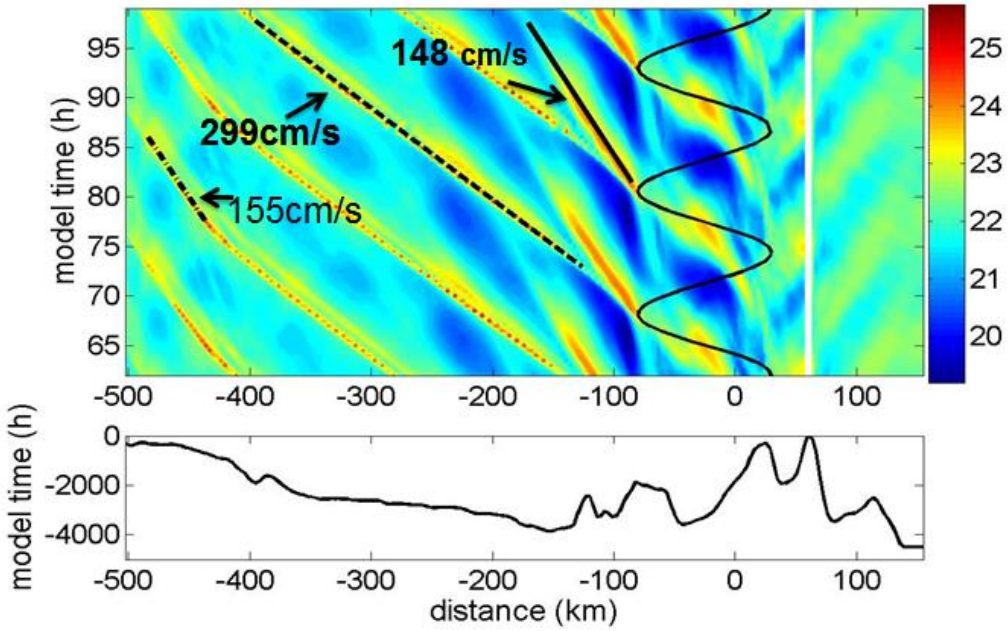
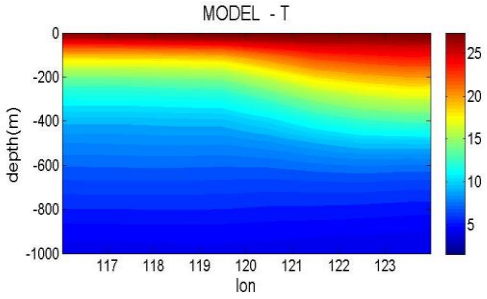


图 86 断面 C 时间-距离坐标轴下温度填色图与断面 C 处的地形



（B）

图 87 初始纬向温度分布情况（单位：℃）

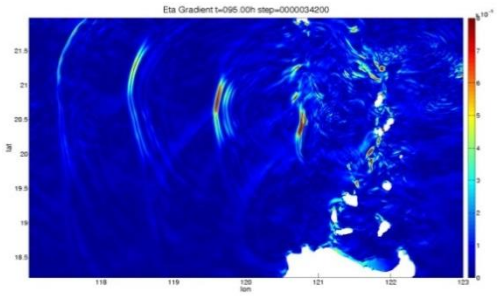
（C） 

图 88 M2 分潮驱动下 95h 时海面高度地图分布

4.3.6 山东省精细化集合数值天气预报系统

用户单位：山东省气象科学研究院
应用领域：气象应用领域
软件来源：WRF
计算规模：12288 核心
成果简介：

（1）应用领域，应用的重要性，解决国家什么重要问题

本应用成果属于气象应用领域。

开展精细到街区预报预警、优化城市积水风险等级预报技术、完善气象预报系统，是面对城市的运行管理和城市公众对气象服务提出的新需求。基于国家超级计算济南中心的软硬件环境，研发了高分辨率的数值预报关键技术，建成集合数值天气预报平台，为山东省天气预报及灾害性、关键性、转折性重大天气的精确预报提供技术支撑。

（2）技术难关

1) 中尺度集合预报业务系统的建设；

2) 不同中尺度模式数据融合，模式移植与优化，实现全国 5 公里、山东省 4 公里分辨率的 WRF、MM5 集合模式运行；

3) 使用资源：每天两次运行，最大并行规模 12288 核。

（3）应用成果描述

业务系统运行，并实现水平分辨率实现 4KM 山东省覆盖，并提供每天两个时次的预报产品。

（4）应用效果

目前属于业务中试运行阶段，效果良好。

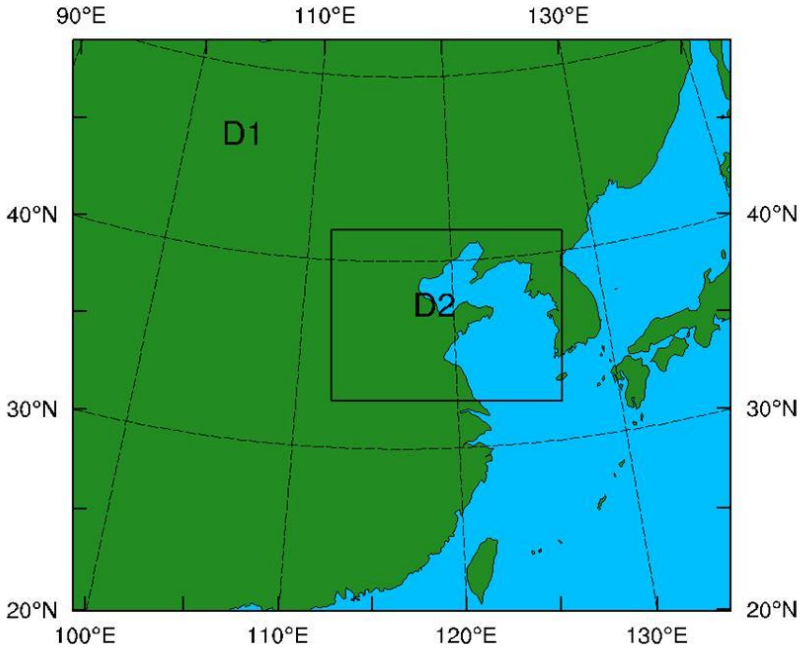


图 89 4km 确定性预报区域图

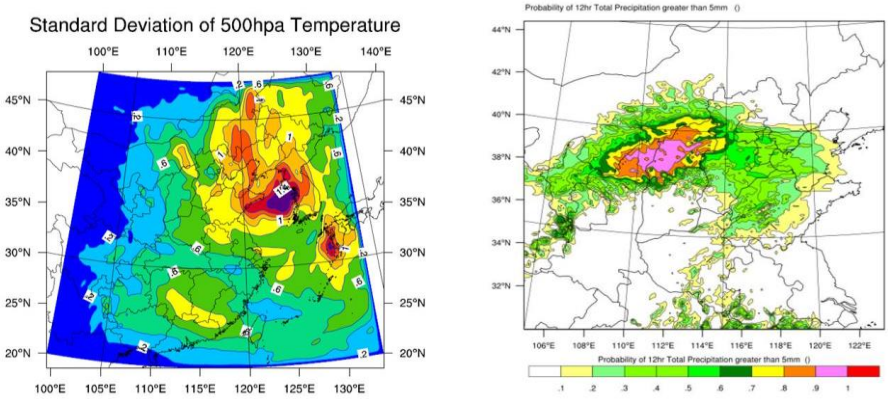


图 90 集合预报产品图

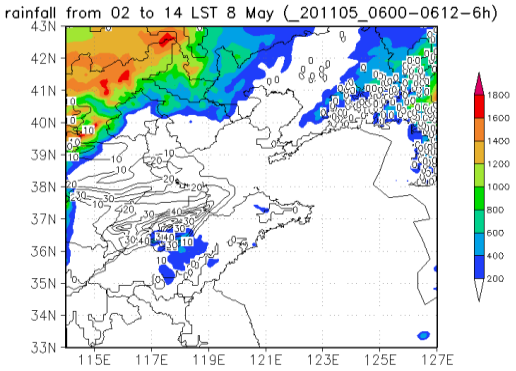


图 91 HYBRID 集合同化 0612 预报（提前 36H 起报）

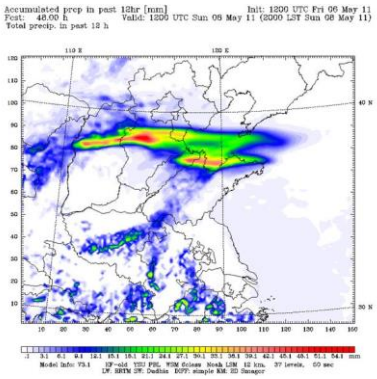


图 92 WRF 同时次的预报

4.3.7 空气质量数值预报系统

用户单位： 国家超级计算济南中心
应用领域： 环境科学应用领域
软件来源： WRF、SMOKE、CMAQ
计算规模： 8000 核心
成果简介：

（1）应用领域，应用的重要性，解决国家什么重要问题

本应用成果属于环境科学应用领域。

伴随着环境污染问题的日益凸显，如何提高大气质量成为社会焦点问题。本应用成果旨在利用激光雷达的纵向多层次监测数据，将目前国际主流的空气质

量计算及预报模型移植到国产神威蓝光系统,并最终实现空气质量数据和污染物扩散、迁移的可视化。本项目的实施，聚焦目前社会普遍关心的PM2.5问题，在国际上首先实现针对一个特定区域的污染颗粒物的迁移模式及可视化研究， 为未来大气质量改善决策提供必要的技术支撑。

（2）技术难关

完成WRF+SMOKE+CMAQ在国产机上的并行化移植和优化

针对济南等地市进行中尺度的大气污染物迁移模式研究

针对大气污染物迁移模式进行可视化

结合激光雷达的对多种污染物的立体监测功能

对区域空气质量的预报和大气污染污染治理提供决策支持

（3）应用成果描述

系统可提供全国及重点区域AOD、PM10、NO2、SO2等指标的逐时预报结果，预报未来72小时有利（不利）目标区域污染扩散的气象条件，定量预报未来3天目标区域各种大气污染物浓度的分布情况，并对污染物的来源及贡献率进行定量分析，为空气质量保障提供有利的技术支撑。

（4）应用效果

处于应用推广阶段，能够提供1-3天气象要素和空气质量的精细预报，以及减排规划模拟。

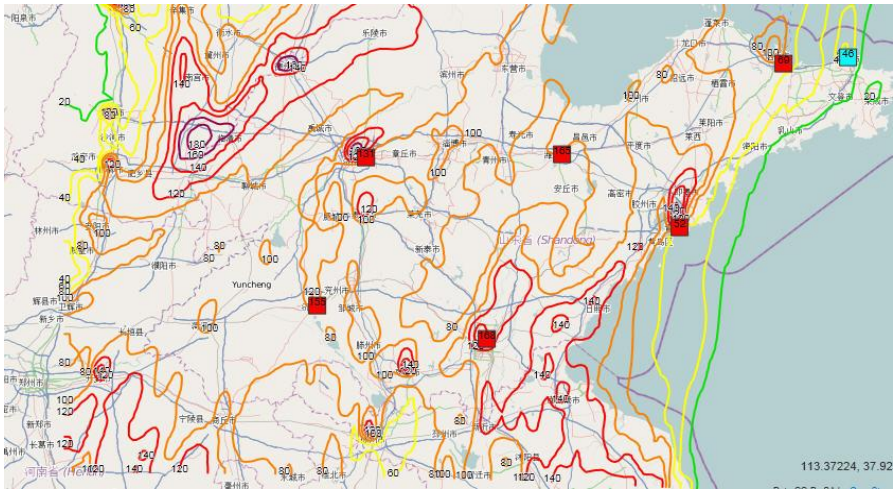


图 93 山东省重点城市 PM2.5 预报图

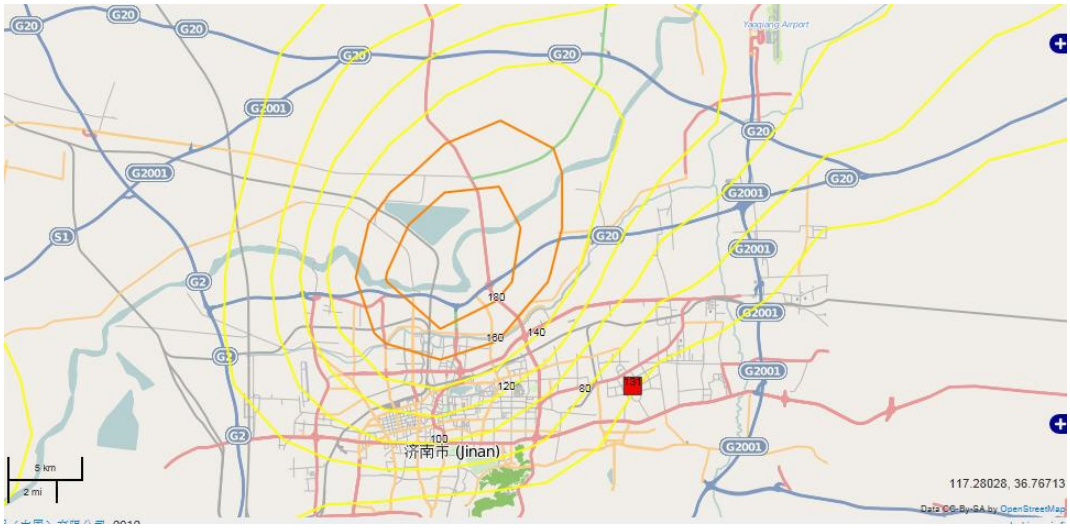


图 94 济南市 PM2.5 预报图

4.3.8 拟筛选重大地下工程灾害孕育演化模拟的万核级并行有限元软件研发

用户姓名：张友良研究员
用户单位：中国科学院武汉岩土力学研究所
应用领域：工程计算
软件来源：基于其它软件改造的软件
计算规模：万核 CPU（“元”超级计算机）
成果简介：

该工作发挥高性能计算技术在国家重大岩土工程数值仿真中的作用，提高数值模拟效率、规模和精度。在自主开发的岩土三维并行有限元程序基础上，完善与优化了一种高度并行、可扩展的对偶原始有限元撕裂内联算法（FETI-DP 算法），采用 Newton-Raphson 算法求解材料非线性问题，并编制了对应程序。对程序在 MIC 构架上进行了优化，主要对其中计算量较大的函数模块进行优化，效果不理想，主要原因是数据高度关联，且进程间数据传输频繁。对某水利工程边坡大规模三维模型，采用万核核并行计算，得到较好的并行效率（78%）。

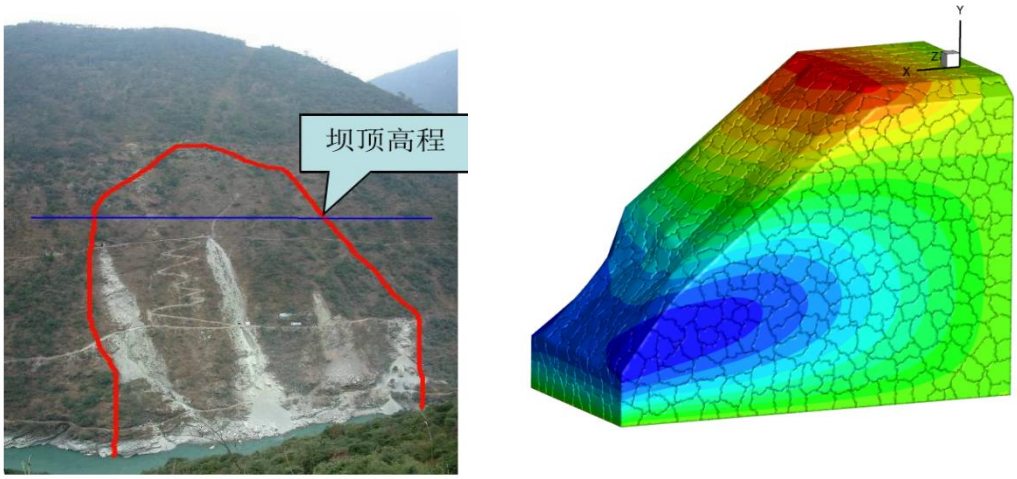


图 95 拟筛选重大地下工程灾害孕育演化模拟的万核级并行有限元软件研发

4.3.9 分子/集团统计热力学方法的并行软件研发及应用

用户姓名：宋凡研究员
用户单位：中国科学院力学研究所
应用领域：力学
软件来源：基于其它软件改造的软件
计算规模：万核 CPU（“元”超级计算机）
成果简介：

航空、航天材料和结构的破坏往往耦合了多个空间、时间尺度上的非线性物理过程。而现有的有限元方法难以刻画破坏过程中的微观细节、分子动力学方法又难以计算大尺寸体系的准静态过程，因此，发展能耦合原子/连续介质表象的新型多尺度计算方法具有重要的现实意义。项目以分子/集团统计热力学（MST/CST）多尺度理论为基础，完成了 MST/CST 耦合并行多尺度计算软件和后处理可视化软件的研发。在“元”并行环境中的测试表明，MST/CST 并行计算程序的万核并行效率为 66.8%，达到考核指标。基于此，对材料的压入破坏过程进行了大规模数值模拟，结合精细的纳米压入实验解决了硬度测量中尺寸效应的来源和机理问题。项目的研究为材料和结构的多尺度力学性能研究提供了高效、可靠的计算工具。

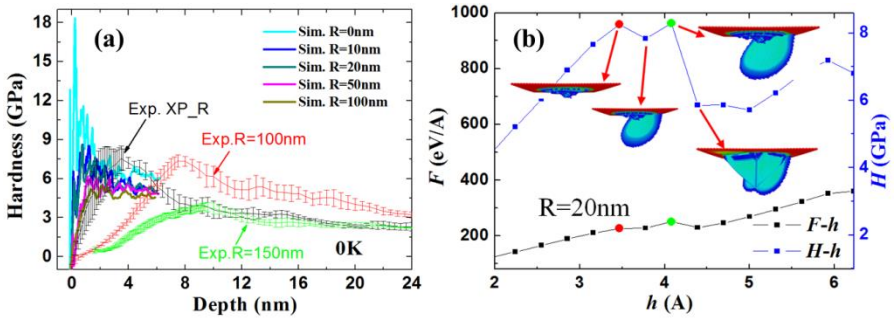


图 96 (a) 压入过程的实验和模拟结果对比; (b) 压入模拟得到的位错演化图

4.3.10 材料的高压冲击响应模拟研究

用户姓名：胡望宇 (hnu_hwy)
用户单位：湖南大学材料科学与工程学院
应用领域：材料的高压冲击响应模拟研究
软件来源：美国 Sandia 国家实验室的开源分子模拟软件 LAMMPS
计算规模：10 亿个原子的模拟体系，12000 个以上的 CPU 核计算
成果简介：

自上世纪五十年代第一个高压相变——铁的 α→ε 相变被发现以来，以揭示该相变在冲击下的转变过程和机理为主要目标的研究一直是高压领域关心的一个热点问题。由于该相变发生的时间极其短暂而且过程是可逆的，当前的实验技术仍难以做到对冲击下整个相变过程进行直接的观察。课题组利用超大规模并行非平衡分子动力学方法研究了单晶铁相变对斜波加载准等熵性的影响，发现相变是造成温度显著升高、破坏加载的准等熵性的主要原因，其引起的温升随斜波上升时间的增大而减小，随最终加载速率的增大而增大。另外，利用非平衡分子动力学方法研究了单晶铁与纳米多晶铁中的冲击塑性、相变和两者间的微观耦合机制，分别从塑性机制及相变机制角度研究了它们之间的微观相互作用。发现在单晶铁中仅会出现应力援助的相变耦合模式，而在多晶铁中可以同时出现应力援助和应变诱导的相变耦合模式。对这两种相变耦合模式在原子层次上分别从运动学和动力学角度进行了比较与分析，结果表明，作为区别不同物理过程的一个重要标志——相转变路径，它在这两种相变耦合模式下表现出截然不同的特征。在应力援助相变耦合模式中，整个相转变过程总是以沿<001> BCC 晶向的压缩开始，以相邻{110} BCC 面间的穿插运动结束，其中第一步的压缩过程以积累应变能的形式为后续相变提供力学驱动力，促使相变的发生。在应变诱导相变耦合模式中，整个相转变过程可以看成是先由 BCC 铁沿[110] BCC 和[1-10] BCC 压缩形成一个类似 FCC 的晶格，然后在每两层 (10-1) BCC 面上沿[101] BCC 滑移形成最终的 HCP 相，并且这两步几乎是同时开始的，因此这个过程中没有出现 FCC 相。在该模式中，局域应力驱动的塑性滑移通过相关晶体缺陷的应变场来贡献于相变的驱动力。根据这两种相变耦合模式的特点，可推断出它们的马氏体变体选择规则分别满足应变能准则和施密特因子准则，该结论同直接得到的模拟结果相符。相关研究结果发表在国际著名力学学术刊物上 (INTERNATIONAL JOURNAL OF PLASTICITY, 59 (2014) 180-198; 71 (2015) 218-236)，收到国内外同行的广泛关注。

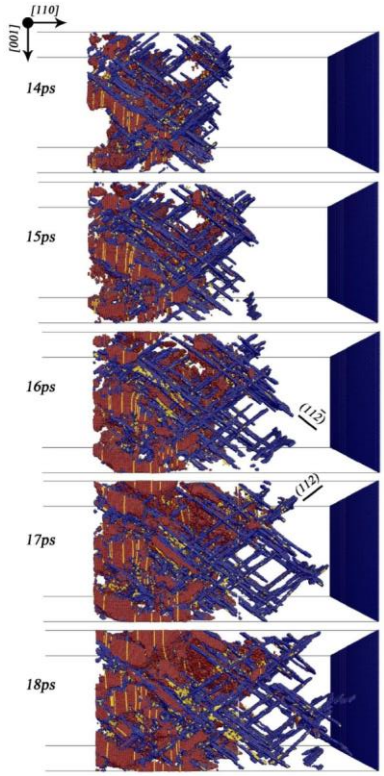


图 97 沿单晶铁的[110]晶向冲击，相变波前的位错传播过程

4.3.11 磁约束聚变模拟 CPU+GPU 异构并行开发

用户姓名：林志宏
用户单位：北京大学
应用领域：磁约束聚变模拟
软件来源：自编程序
计算规模：万核
成果简介：

通过开展磁约束聚变研究，使中国受到国际广泛关注，特别是美国橡树岭等国家实验室希望在这一领域加强与中国的合作，开发新能源，解决人类对能源的巨大需求问题。

天津超算中心与北京大学聚变中心建立长期合作，在“天河一号”上实现了高达 5 万核的大规模模拟，模拟的电子数超过三百亿，测试性能达到美国橡树岭国家实验室的超级计算机“美洲豹”(Jaguar)近 3 倍。

双方开发了 GTC 的 GPU 版本程序，在天河一号上实现了 3072 个 CPU 加 GPU 异构节点的并行模拟，性能比原 CPU 版本实现了大幅提升，相关成果也入选世界超级计算大会 ISC2013 会议报告论文。

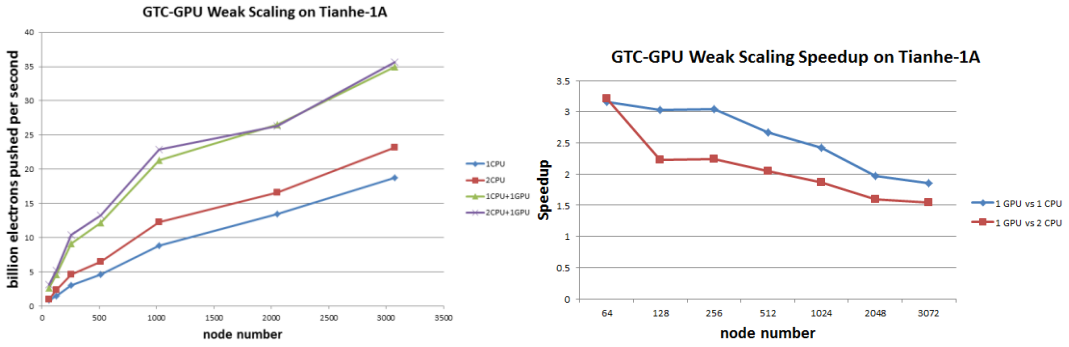


图 98　TH-1A 上 GTC weak scaling 的性能测试　　TH-1A 上 GTC weak scaling 的加速比

4.3.12 自主开发的涡分辨率海洋模式模拟

用户姓名：俞永强、刘海龙、林鹏飞

用户单位：中国科学院大气物理研究所

应用领域：海洋模拟

软件来源：自编程序

计算规模：万核

成果简介：

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（IAP/LASG)自主研发的全球 10km 涡分辨海洋模式 LICOM 成功地移植到天津超算中心的“天河一号”超级计算机上，开展了上万核大规模计算。它是我国第一次利用自行研发的涡分辨率海洋模式完成的长期数值模拟试验，计算结果有效地刻画了中尺度涡旋的基本特征。

模式能够很好地重现观测的中尺度涡旋的气候特征，可以很好地模拟黑潮与中国近海环流的关系，以及中国近海地水团性质。实现了最高水平分辨率为 10km，垂直有 55 层的 50 年的模拟分析。

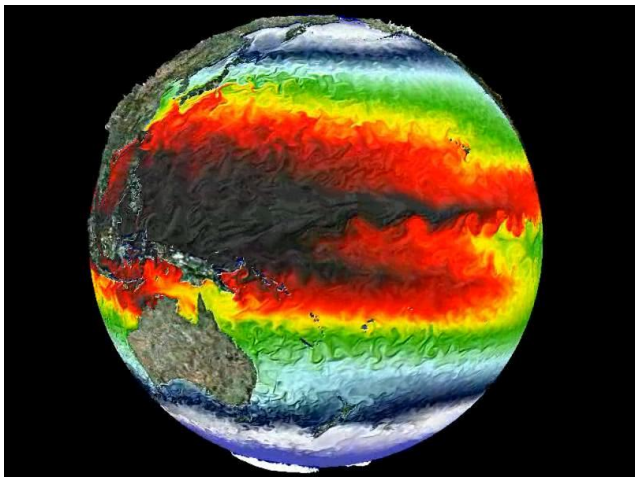


图 99 海洋温度、盐度、海平面高度随季节的变化

4.4 十万核及以上规模

4.4.1 中微子对宇宙大尺度结构演化的影响

用户姓名：张同杰
用户单位：北京师范大学
应用领域：天文地球物理
软件来源：自编程序
计算规模：30 多万核
成果简介：

张同杰教授团队利用“天河二号”超级计算机 13824 个节点，总计超过 30 多万核，首次测量到了以往任何宇宙学数值模拟看不到的中微子在宇宙结构中的微分凝聚(Differential Neutrino Condensation)效应：中微子质量可以通过对比宇宙中含有不同中微子丰度(即本地中微子与暗物质密度比)的区域中星系的特性来测量。相对于“贫”中微子区域，在“富”中微子区域，更多的中微子被大质量暗物质晕俘获，这种效应导致暗物质晕的质量函数的扭曲，最终导致星系的特性发生变化。因此这种效应在当今和将来的宇宙学观测中开辟了一条独立测量中微子质量的道路。

该项研究比美国阿贡国家实验室的 Mira 超级计算机去年进行的 1.07 万亿粒子数数值模拟超出两倍多，创造了新的世界纪录。对多达 3 万亿粒子数中微子和暗物质的宇宙学进行数值模拟，它好比一架“像素”极高的“超高速摄像机”，通过上述模拟能够“还原”出宇宙清晰而漫长的演化“视频”，使宇宙大爆炸 1600 万年之后至今约 137 亿年的漫长演化过程得以“呈现”，为通过天文观测手段测量中微子质量带来了新的契机和希望。

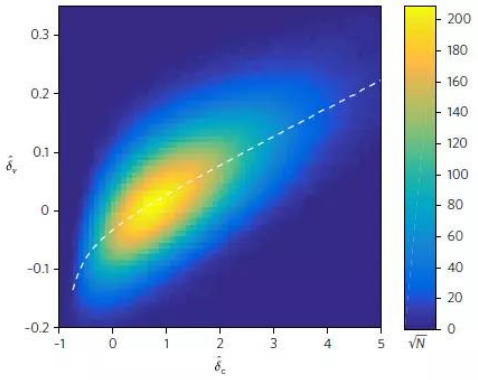


图 100 暗物质晕在宇宙大尺度结构'贫'中微子区域和'富'中微子区域中的分布

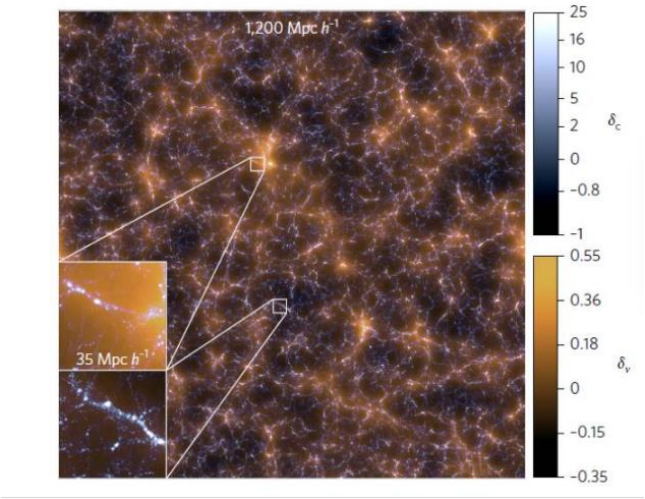


图 101 冷暗物质和中微子结构的二维可视化结果

4.4.2 Grapes 高分辨率数值天气预报业务模式

用户姓名：胡东明
用户单位：广州市气象台
应用领域：大气海洋环境
软件来源：自编程序
计算规模：62464 核
成果简介：

以“天河二号”超级计算机为依托，国内率先建立自主研发的 Grapes 高分辨率数值预报模式，并成功实现业务化运行，构建短临数值预报系统。Grapes-1km 超高分辨率模式的应用成果为广州乃至珠三角区域频发的短时极端天气的预报预警提供关键技术支撑，提高政府决策效率，以最快最准最全面的服务保证人民生命财产安全。

借助“天河二号”构建 Grapes 高分辨率数值预报业务模式，对严重影响的气象灾害进行准确预警、预报，科学有效防御气象灾害，已成为政府公共安全的重要组成部分和履行社会管理和公共服务职能的重要体现，同时成为社会防灾减灾的关键决策服务、专业服务和公共服务的关键支撑。

在推进与多部门的共建、共管、共享的基础上，Grapes 高分辨率数值预报业务模式也为海洋预报、航空调度和安全保障、陆上交通（尤其是高速公路和高铁）、水上交通和海上工程的安全保障、城市空气质量的预报和调控，以及由气象灾害诱发的其它次生灾害（如地质灾害、洪涝和风暴潮等）提供直接的服务，还在应对气候变化、碳排放的国际谈判、以及新能源（如风能必须有风机功率的气象预报）等经济可持续发展诸多方面起重要的作用。

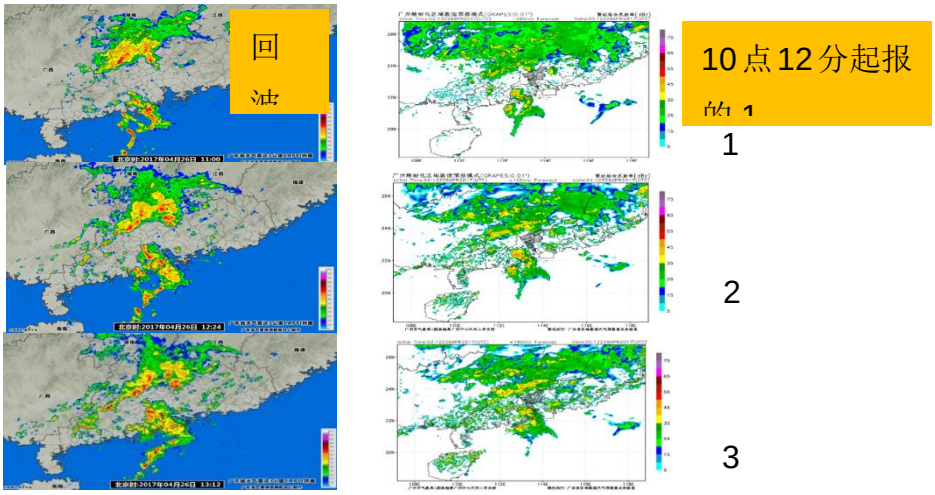


图 102 Grapes 高分辨率数值天气预报业务模式

4.4.3 大规模并行环境下的飞行器亿级网格流动模拟

用户姓名：赵钟
用户单位：中国空气动力研究与发展中心
应用领域：航空航天飞行器设计
软件来源：自编程序
计算规模：10 万核
成果简介：

PHengLEI 软件在“天河二号”集群上，对美国 AIAA 协会组织的第 3 届高升力预测活动中提供的 JSM 外形进行了大规模并行计算测试。采用 33.2 亿非结构网格，在近 10 万核条件下并行效率保持在 90%以上。

高升力外形是航空飞行器起降状态的标模外形，大攻角状态下，由于背风区大分离涡的存在，利用现有二阶计算方法，采用较稀疏的计算网格在小规模模拟下难以捕获空间细致结构，尤其是对最大升力系数和失速攻角难以预测，而这正是影响飞行器安全性的关键因素。从图 1 的气动力计算结果看，采用大规模的并行计算后，结果与试验值符合更好，充分证明了大规模高性能计算对实际工程应用的推动作用，表明了 CFD 应用领域对高性能计算机的实际需求。图 2 是在天河星光上绘制的 4.2 亿网格的大攻角流场图。

此外，还采用 33.2 亿非结构网格，在 10 万核条件下进行了大规模并行测试，并行效率保持在 90%以上（图 3）。大规模测试中，用到了并行分区、分组存储等技术。（1）并行分区：并行生成的初始网格分区数为 192，然后将这些分区进一步并行地划分为 3072~98304 个子分区；（2）分组存储：对于 33.2 亿网格而言，仅网格文件大小就有 204G，加上流场

文件会成倍增加，如果不用分组存储，会使得文件过大。为此，计算中将所有存储文件分为192 组，每组文件管理 512 个网格块及对应的流程文件，每个文件大小约为 1G。通过并行分区、分组存储，有效地解决了超大规模网格及流场数据的存储问题。

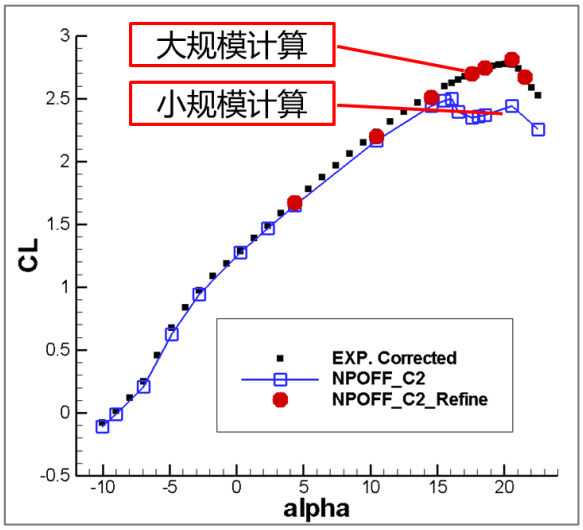


图 103 不同规模计算结果

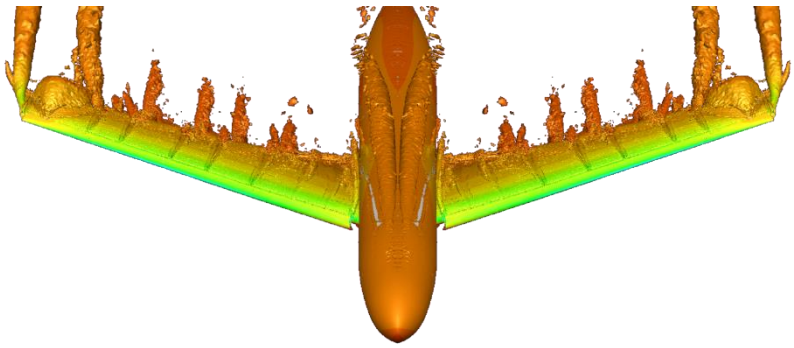


图 104 高升力外形模拟结果（天河星光绘图）

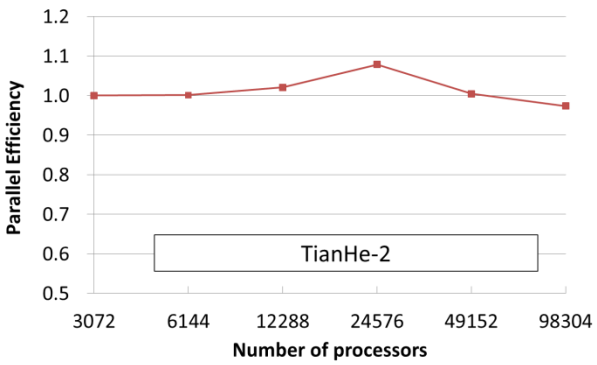


图 105 并行效率

4.4.4 航天飞行器全飞行流域数值模拟

用户单位：西安电子科技大学
计算单位：国家超级计算济南中心
计算规模：100,000CPU 核
成果简介：

近地空间航天飞行器以极高马赫数跨越空天过渡带，从连续流到近连续滑移流、稀薄过渡流以至高稀薄自由分子流，经历复杂的高空、高温、高速、高机动、变密度等真实飞行环境，这使得跨流域不同高度飞行器气动热力学问题已经成为新型近地空间飞行器应用平台研究的重大而关键科学问题。成果基于 Boltzmann 模型方程来求解新型近地空间飞行器各流域复杂高超声速绕流问题，利用国家超级计算济南中心“神威蓝光”超级计算机进行模拟，模拟结果如下下图所示。

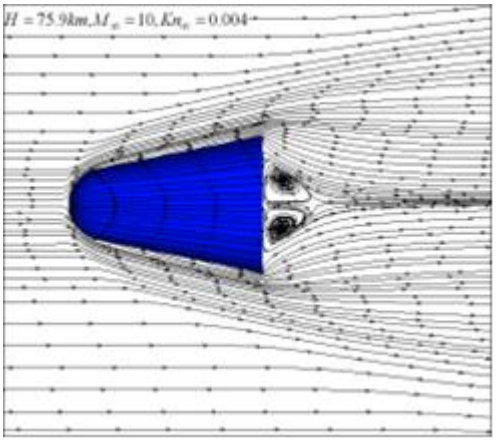


图 106 76KM 高度飞行绕流结构

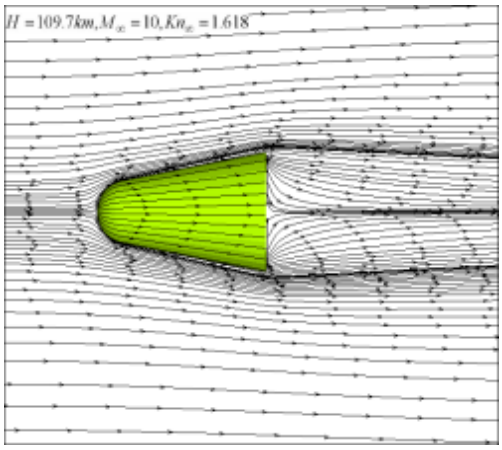


图 107 110KM 高度飞行绕流结构

4.4.5 高分辨率海气耦合模式研究

用户单位：国家海洋局第一海洋研究所
应用领域：海洋与气候变化应用领域
软件来源：MASNUM、POP、MOM
计算规模：131072 核心
成果简介：

（1）应用领域，应用的重要性，解决国家什么重要问题

本课题属于海洋与气候变化应用领域。

发展海气耦合系统模式，提高模式预测预估能力，不但对提高我国气候发言权具有重要的作用，而且对我国预防气候灾害具有重要的现实意义。气候系统模式是预测气候异常的重要工具，发展气候系统模式，提高气候预测预估水平，有助于增强国家气象减灾防灾的应对能力。本项目建立的高分辨率大气-海浪-海洋环流耦合模式，一方面发展高分辨率的海气耦合模式能够提高我国的气候系统模式能力，另一方面通过引入海浪的作用来完善海-气界面的通量交换和海洋混合的关键过程，提高了海气耦合模式的模拟效果和预测预估能力。

（2）技术难关

主要包括两个方面：高性能计算技术和物理过程。

高性能计算技术：神威蓝光平台为我国完全自主研发的高性能计算平台，硬件和软件都是自主研发的。现有国际上通用海洋模式软件一般支持千核左右计算规模，因此项目很大工作量在于优化程序的可扩展性和并行效率。最终，海洋环流模式能够有效使用 24000 核计算规模，并研发出具有良好扩展性的海浪模式，运行规模可达满机 131072 核；通过重写 IO 输出接口，输出效率可提高 50%以上。

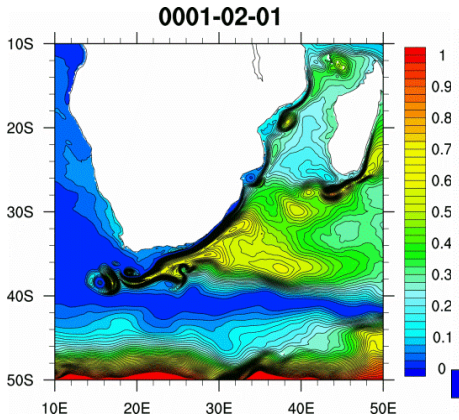
物理过程：随着分辨率的提高，如何确定已有物理过程和参数化方案需要进行多次数值实验进行研究和调整；对模式的地形分辨率要求要高、水深精度要高；各分量模式的选择、耦合的技术以及通量计算都是难点。

（3）应用成果描述

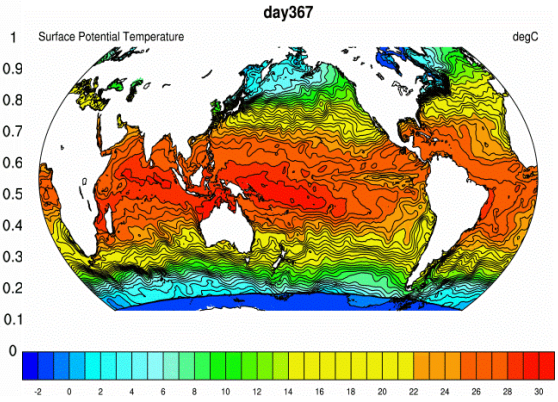
完成了全球大气-海浪-海洋环流耦合模式框架的移植，并分别基于 POP 和 MOM 建立了高分辨率海洋环流数值模式，又针对海浪模式特点建立了高效的并行海浪模式，这些工作为推动高分辨率模式的发展奠定了基础。

（4）应用效果

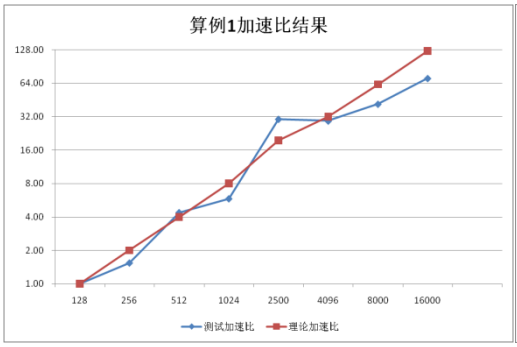
实现在国产高性能计算机系统上移植开发全球大气-海浪-海洋环流耦合模式，为推动高分辨率地球系统模式的发展奠定基础，拓展国产处理器的应用。



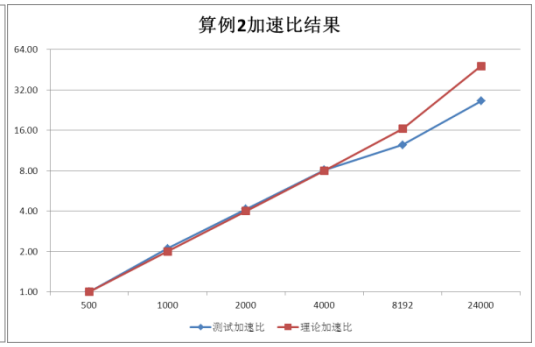
图（1）该模式下全球平均海平面高度图



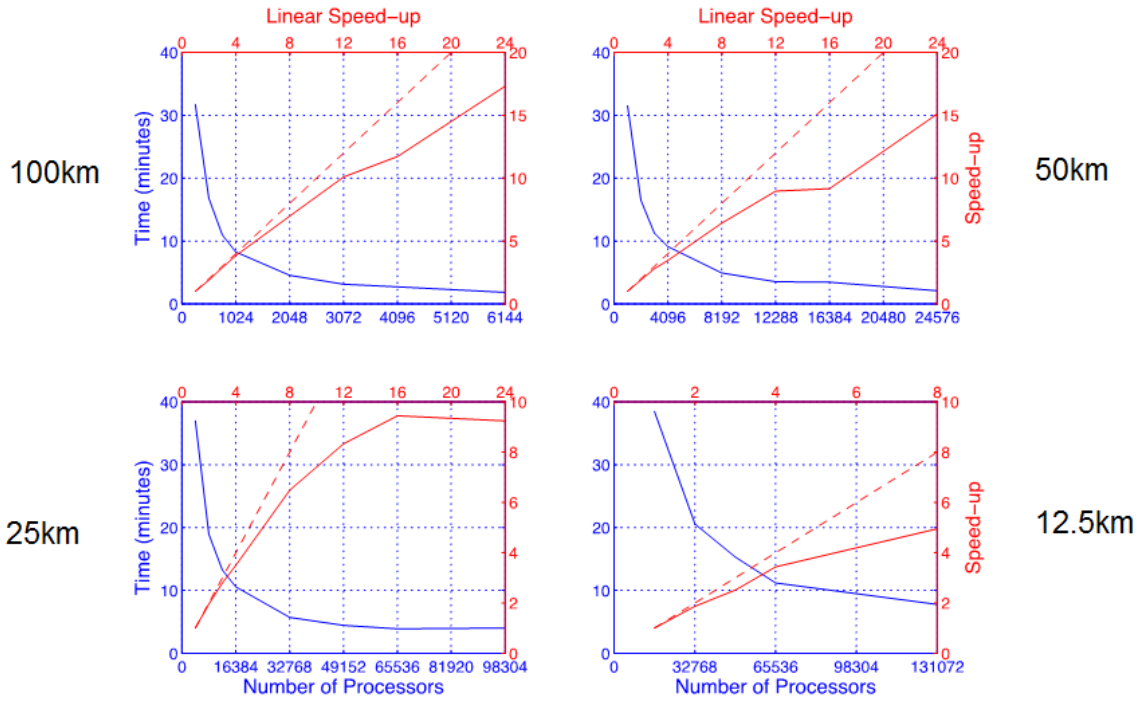
图（2）该模式下全球海洋表层温度图



图（3） 0.1 度加速比结果



图（4） 0.05 度加速比结果



图（5） 高分辨率并行海浪模式加速比结果

图 108 高分辨率海气耦合模式研究组合图

4.4.5 大规模数理金融研发与服务平台

用户姓名：魏刚
用户单位：山东大学数学院
应用领域：金融风险分析应用领域
软件来源：自研软件
计算规模：10 万核心
成果简介：

（1）应用领域，应用的重要性，解决国家什么重要问题

本应用成果属于金融风险分析应用领域。

本应用是我国金融业者与数学家的前沿工作。根据我国金融业急需的金融计量服务（如银行业压力测试、客户评级、违约概率、预期损失、资产回报评估、BASEL II、BASEL III 要求的资金转移定价、资产负债管理、金融风险提示等），提取部分业务和模型，实现了已成熟的计量技术，特别是需要大规模数据处理和并行计算的专题，优化设计，对我国金融业者和学者全面开放，建成了一个用户界面友好、有良好社会效益和全国知名度的公共金融服务和研发平台。

（2）技术难关

金融风险分析及压力测试，金融衍生产品定价，银行信用评级模型；

金融风险分析并行程序开发和优化，10 万核并行效率达到 90%；

基于超级计算机系统的应用软件系统构建。

（3）应用成果描述

面向我国金融业提供数据存储、金融数据分析、金融资产风险管理、金融衍生品定价、自动交易策略模拟和交易模型验证评估等服务，为企业进行大型资本的优化配置、经营策略量化分析、风险计量等提供咨询服务。

1) 金融风险分析与压力测试：

BASEL III 相关的资金转移定价、资产负债管理等；

金融客服、产品配送、风险提示；

风险计量(CVaR、PD、LGD、EAD、RWA 等) 。

2) 金融衍生品定价：（BS-模型，BSDE，对偶算法）

3) 银行客户信用评级 (对公、零售、同业)：

IV、WoE、PD，等；

Logit、Logistic 回归、降维、优化。

（4）应用效果

为 973 项目《金融风险控制中的定量分析与计算》提供验证平台，已为广发、东莞商业、恒丰、齐鲁证券等银行或金融机构提供风险咨询和计量服务。

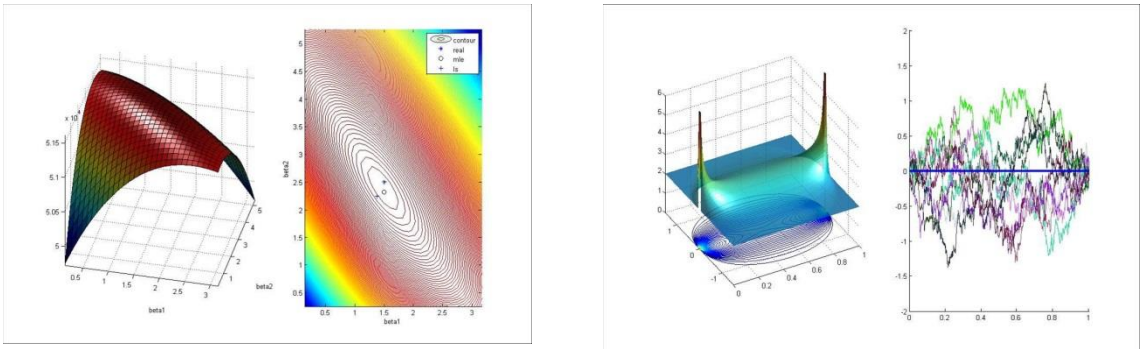


图 109 金融风险分析应用领域-山东大学数学院

4.4.6 外切纤维素酶 I 高效降解结晶纤维素动态学过程与充分条件模拟

用户姓名：王禄山
用户单位：山东大学生命科学院
应用领域：计算生物学领域
软件来源：Gromacs
计算规模：10 万核心
成果简介：

（1）应用领域，应用的重要性，解决国家什么重要问题

本应用成果属于计算生物学领域。

利用国家超算济南中心的神威 4000A 百万亿次集群，首先进行单副本的分子动力学模拟，然后利用外切纤维素酶催化结构域的模拟体系（约 5 万原子）进行多达 128 个温度副本的分子动力学模拟，一次模拟任务最多成功利用 6720 个 CPU 核心同时进行计算，最高总运算速度累计达到 2274 纳秒/天，为分子动力学模拟利用十万核心进行计算提供了新的思路。外切纤维素酶 I(CBHI)在降解结晶纤维素有很好的应用前景，如果它能够达到淀粉转化效率的水平，利用秸秆生产燃料乙醇新技术就可以进入工业阶段，对国家的能源战略意义深远。

（2）技术难关

1) 解决十万核并行规模；
2) 实现应用级保留恢复功能；
3) 优化大规模 I/O 数据处理。

（3）应用成果描述

973 及国家自然科学基金项目研究的一部分。

（4）应用效果

通过计算，研究了 CBHI 催化机理，并了解其催化机制可为其理性改造或全新设计奠定物质基础。同时，通过采用外切纤维素酶催化结构域温度副本交换分子动力学模拟技术，在国产神威蓝光系统上实现了十万核心级的大规模并行计算模拟。

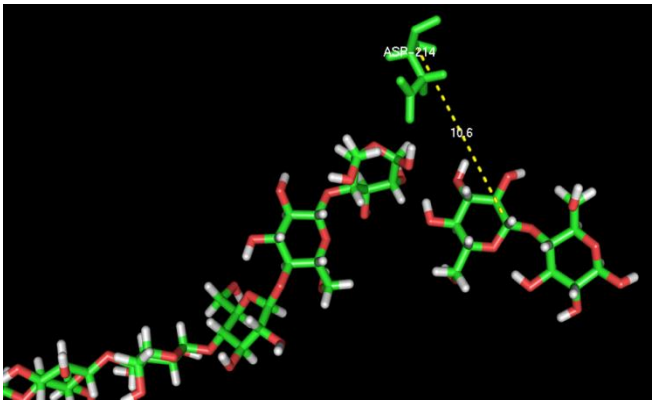


图 110 催化残基 ASP214 N 原子与纤维二糖分子 453 C1 原子的距离

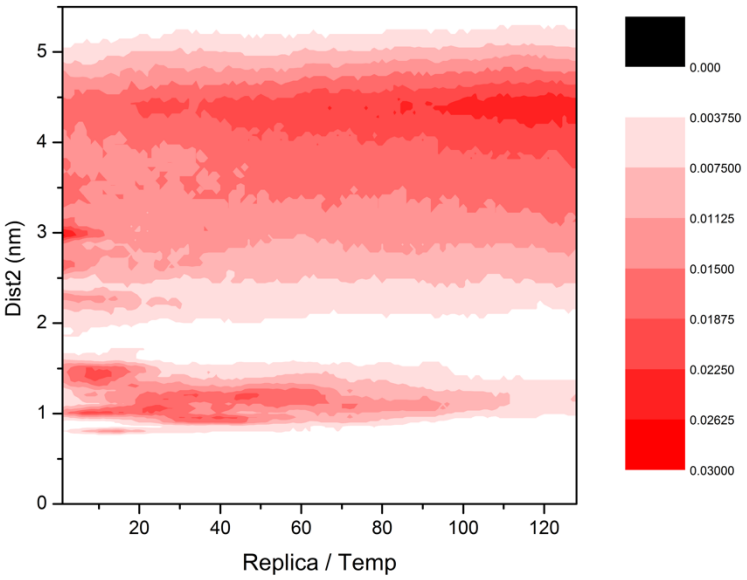


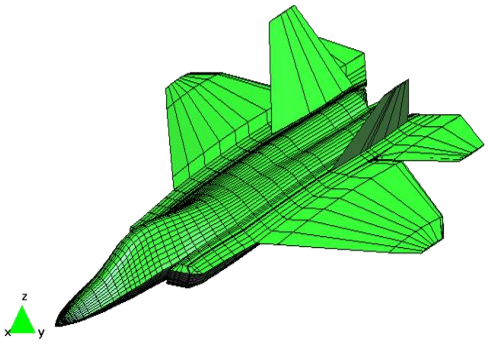
图 111 128 个温度下距离的统计分布

4.4.7 复杂电磁环境数值模拟

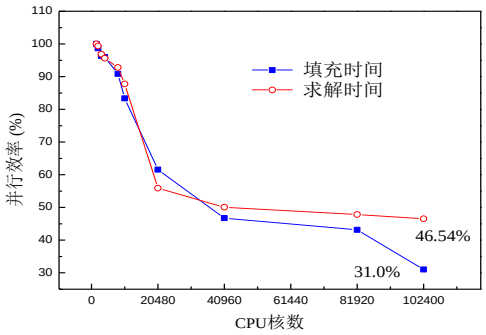
用户姓名：张玉
用户单位：西安电子科技大学
应用领域：电磁仿真领域
软件来源：自研软件
计算规模：10 万核心
成果简介：

在当前陆、海、空、天、电磁一体化的战争特点下，以天线综合布局为代表的复杂电磁环境数值模拟研究已经是制约装备研制水平的共性、基础、前沿性课题。国家超级计算济南中心与西安电子科技大学（天线与微波技术重点实验室）合作，张玉教授带领团队围绕基于国产超级计算机的高性能电磁算法研究及软件系统研制，在“神威蓝光”超级计算机上突破了 10 万 CPU 核的的矩量法、时域有限差分法、物理光学法的大规模并行电磁计算，研发了适用于求解复数稠密矩阵方程的高效并行 CALU 直接求解器，研制了大规模精细电磁仿真软件系统，应用于机载天线布局、电磁隐身设计、电磁污染评估等多个电磁领域，相关研究成果入选国家“十二五”科技创新成就展。

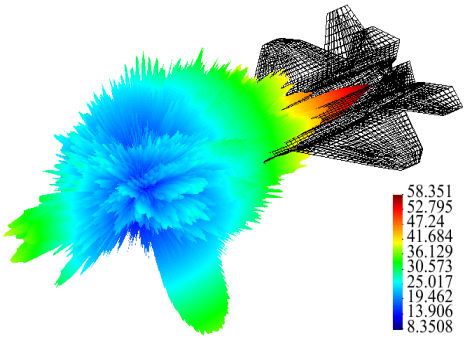
在神威蓝光超级计算机上，对某战机的雷达散射截面进行了 10 万核并行规模的仿真测试，求解时间的并行效率达到 30%以上，充分利用了神威蓝光国产计算资源。



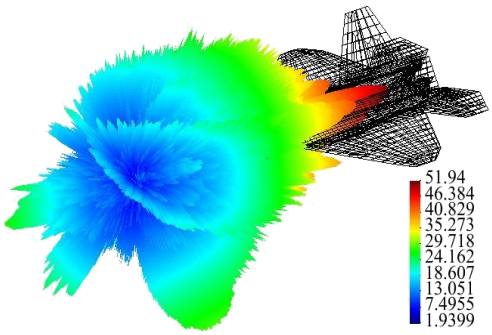
隐身战机仿真模型



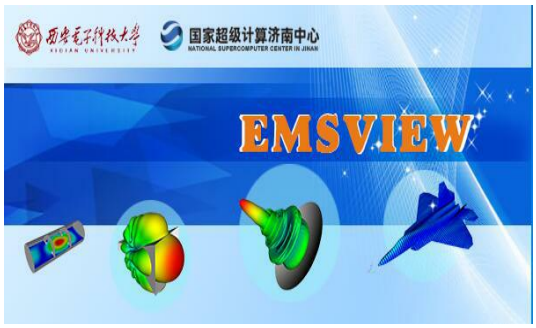
并行计算效率分析



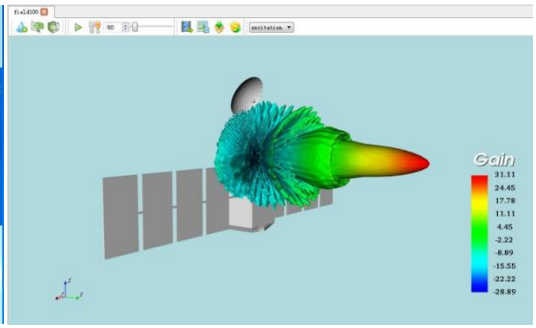
1HZ 双站 RCS



1.5HZ 双站 RCS



EMSVIEW 启动界面



电磁远场辐射方向图

图 112 复杂电磁环境数值模拟

精细电磁仿真完成以后，需要对产生的仿真结果数据进行研究分析来获知仿真的一系列结果。我们自主开发的电磁仿真后处理软件 EMSVIEW，可以直观地图形化展示电磁远场的方向图、近场的电磁分布图和电流分布云图等电磁场特性，并在后处理中实现网格模型的透明显示及隐藏功能。

4.4.8 基于 GPU 的晶体硅大规模分子动力学模拟

用户姓名：葛蔚
用户单位：中科院过程所
应用领域：分子动力学
软件来源：自编程序
计算规模：7168CPU+GPU 计算节点
成果简介：

随着石化能源日益匮乏、环境污染日趋严重，开发新的可再生能源成为世界各国研究的重点。

太阳能因其来源广泛、无污染等优点得到广泛的重视，被视为未来二十年人类可资利用的重要的一次能源。因为原料来源丰富，硅材料是目前最重要的高性价比的太阳能光电转换材料，而晶体硅（单晶硅/多晶硅）太阳能电池以其稳定性高、资源丰富、无毒性而成为市场的主导产品，在德、日、美等国家获得快速推广使用。同时，随着太阳能级多晶硅材料在我国的大规模生产，随之产生的高能耗、高污染和高二氧化碳排放，使我国已经开始沦为为发达国家制造清洁太阳能电池而自身被严重污染的硅材料“生产车间”。

生产多晶硅材料导致的环境污染和高能耗源自落后的生产工艺。目前占绝对优势的生产方法是在硅棒发热体上用氢气还原三氯氢硅来制备多晶硅。该方法的反应器的表面积/体积比非常小，化学气相沉积效率低，同时容易发生气相成核进一步降低三氯氢硅的转化效率，为此必须采用冷壁高温反应器，大量热能被循环冷却系统带走，造成高能耗；同时由于化学热力学原因，该工艺产生大量四氯化硅副产品，难以回收利用，造成严重环境污染。

为克服该方法的固有缺陷，国外开发了硅烷流化床法、金属置换法与物理冶金法等替代技术，其中流化床法已经在欧美获得工业应用。但是由于气体扩散-表面反应过程难以协调，容易在反应器内生成大量无定形超细硅粉，造成硅烷利用率降低，提高了制造成本。为此，我们采用分子动力学模拟方法对该反应和沉积过程进行微观的直接模拟，以了解组分、气氛和传递等各种因素对该过程的影响和优化调控的方法。

该计算需要从原子、分子尺度(埃-飞秒量级)出发计算到颗粒和流体微元尺度(毫米-纳秒量级)，计算的跨度已挑战了目前分子模拟的极限。过程所根据 GPU-CPU 耦合体系的特点自主开发了相应的模拟程序，并在过程所自建的 Mole-8.5 系统上获得了良好的单机效率和并行加速比。在此基础上，过程所在天河系统上将计算规模扩大到原来的四倍，成功利用其所有 7168 个节点模拟了预定的反应过程，规模较国际上这方面已有的报道增大一个量级以上，充分显示了 GPU-CPU 耦合计算的效率。

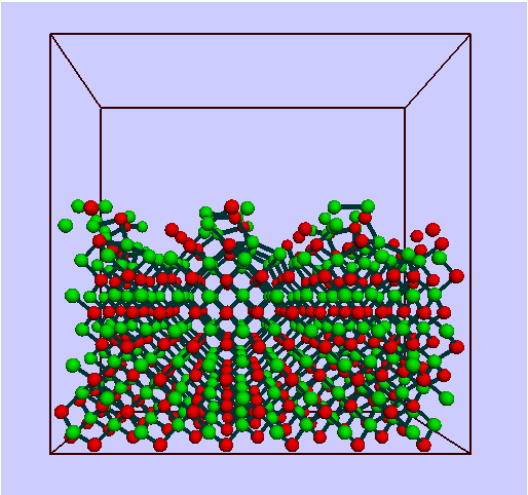


图 113 晶体硅的分子动力学模拟

4.4.9 上千平方公里的石油地震勘探数据资料处理

用户姓名：武威

用户单位：中石油东方地球物理公司

应用领域：石油地震勘探数据处理

软件来源：自主研发

计算规模：7100 个计算节点，85200 核

成果简介：

2010 年 11 月，天津超算中心与中石油东方地球物理公司研发中心合作，在“天河一号”超级计算机系统上运行了研发中心自主研发的 GeoEast-lightning 单（双）程波叠前深度偏移软件系统。最多利用 7100 个计算节点，在 16 个小时内完成了我国最大面积的 1050 平方公里、共计 7 万炮的石油地震勘探数据的复杂三维处理工作，取得了前所未有的好结果。

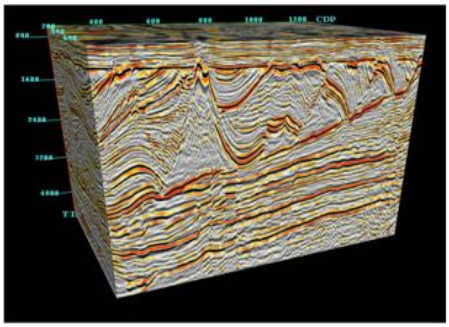


图 114 三维叠前逆时偏移成果剖面

4.5 入围“戈登·贝尔”奖应用

高性能计算应用最高奖——“戈登•贝尔”奖设立于 1987 年，由 VAX 系列的先驱者戈登·贝尔倡议发起的，并由美国计算机协会于每年 11 月在美国召开的超级计算大会上颁发，旨在奖励时代前沿的并行计算研究成果，特别是高性能计算创新应用的杰出成就，被誉为“超级计算应用领域的诺贝尔奖”。

2016 年基于“神威•太湖之光”的 3 项千万核量级并行应用，入围“戈登•贝尔奖”的提名。这不仅是中国团队首次入围，打破了美日的垄断，而且在 2016 年全世界 6 个入围项目中，我国就占据了 3 个，而 2017 年又有两项应用入围 2017 年“戈登•贝尔奖”提名（全球仅 3 项入围），证明中国不仅有能力用自己研制的国产处理器造出世界一流的超级计算机，还能有效利用世界领先的计算性能来解决高精尖的科学计算问题。

本节就五项入围“戈登•贝尔奖”提名的进行介绍。

4.5.1 千万核可扩展全球大气动力学全隐式模拟

中科院软件研究所杨超研究员与清华大学薛巍副教授、付昊桓副教授等人联合北京师范大学组成研究团队，设计并开发了一种用于大气动力学中经常出现的强时间依赖问题的高可扩展性全隐式求解器。该求解器使用异构多重网格局部分解算法，显著加快了求解器的收敛过程，并利用粗粒度并行。此外，设计了在物理上的多块异步不完全 LU 分解方法来解决每个重叠子域上的子问题，从而进一步取得粗粒度并发。同时，在不同硬件层级上实现了系统层面上的优化，充分利用异构计算单元，减少数据移动的开销。基于“神威·太湖之光”超级计算机，项目采用在线数据共享等技术，使非静力大气动力模拟的显式性能达到 2.4 亿亿次、隐式性能达到 0.8 亿亿次，可支持 500 米大气动力模拟，是国际上领先的研究成果，对发展大气模式具有重要作用。

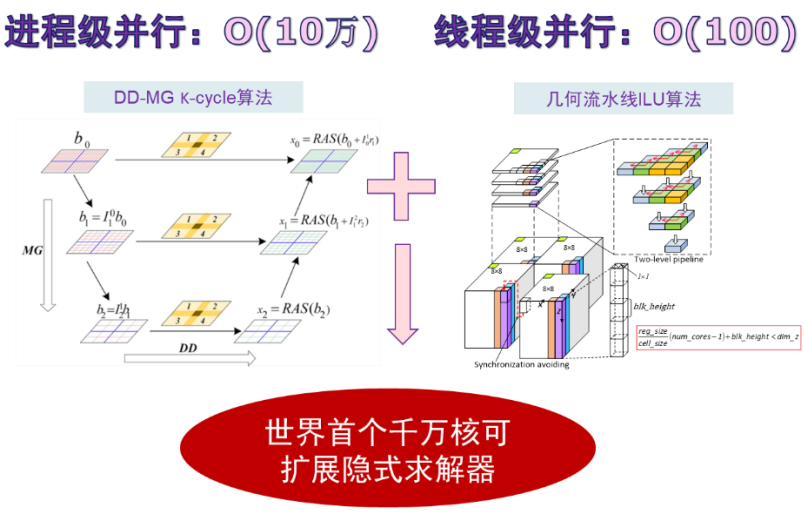


图 115 2016 戈登・贝尔奖-可扩展全隐式求解器

该应用获得 2016 年戈登贝尔(Gorden Bell)奖。这是该奖项自设立 29 年以来中国第一次获得此奖项，之前一直被美国和日本垄断。

“戈登•贝尔”奖评奖委员会主席、美国 NASA 的塞尼博士说：“在我本人看来，‘戈登•贝尔奖’就是高性能计算领域的诺贝尔奖。隐式求解器的模拟能力大幅度超越显式求解器，令人印象深刻”。

“戈登•贝尔”奖评奖委员会副主席、日本东京工业大学松岗聪教授说：“赢得‘戈登•贝尔’奖最终表明中国在全球超算领域已经成为领跑者之一，…成果会对科学和产业应用领域产生重大影响”。

图 116 2016 戈登・贝尔奖证书及现场

4.5.2 非线性地震模拟

2017 年 11 月 17 日在美国丹佛举行的全球超级计算大会上，由清华大学地球系统科学系副教授付昊桓等共同领导的团队所完成的“非线性地震模拟”应用获得国际高性能计算应用领域最高奖“戈登·贝尔”奖，实现了我国高性能计算应用 2017 年蝉联“戈登.贝尔”奖。

“非线性地震模拟”应用由清华大学地球系统科学系、计算机系与山东大学、南方科技大学、中国科学技术大学、国家并行计算机工程技术研究中心和国家超级计算无锡中心等单位共同完成。

基于国产超算系统“神威·太湖之光”的计算能力，该项目突破了系统存及带宽的限制，以精巧的并行设计和高效的实时压缩传输方案，实现了对唐山大地震 18Hz 8 米分辨率的高精度模拟，性能达到 1.9 亿亿次，是国际上首次实现如此大规模高分辨率、高频率的非线性可塑性地震模拟。将会为科学家理解地质构造、地震发生与传播机理提供支持，同时对防震救灾以及地震高发区城市建筑的规划设计也具有重要的价值和意义。

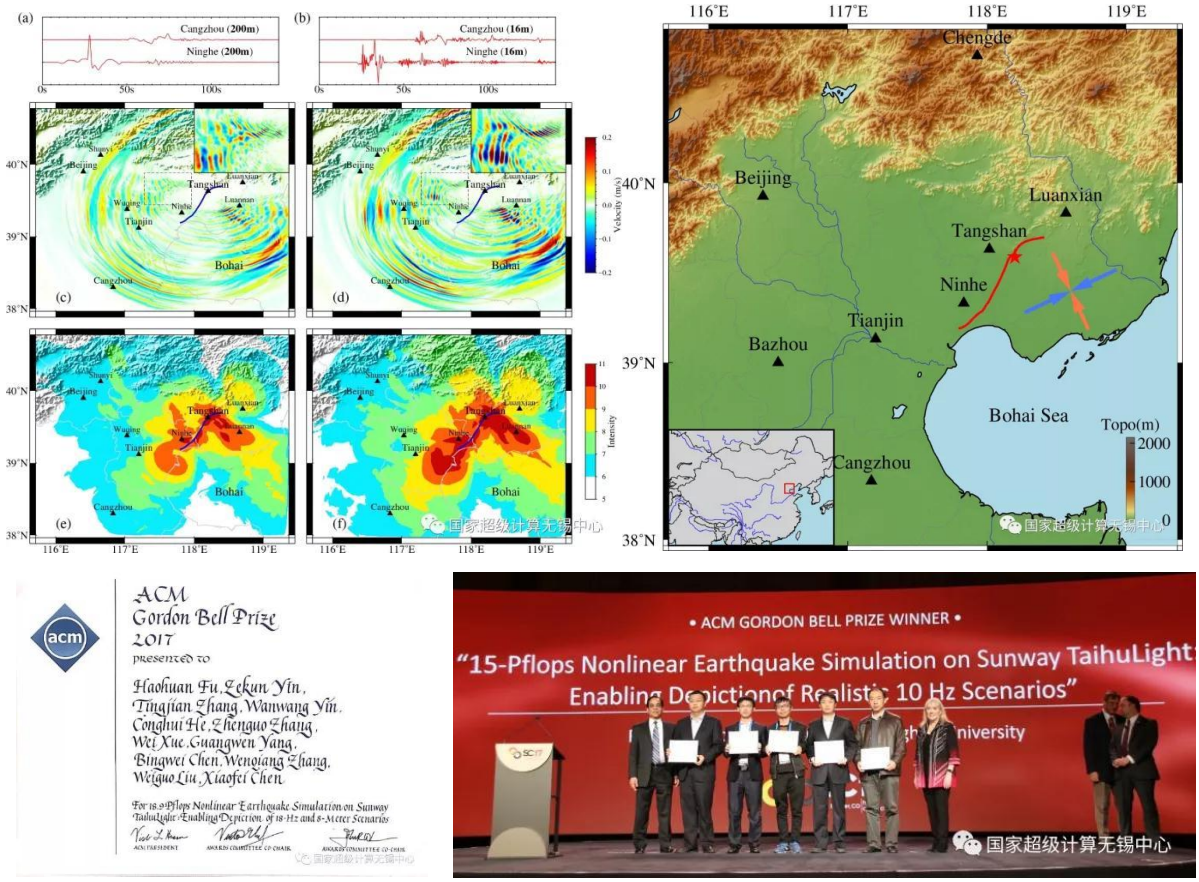


图 117 2017 戈登·贝尔奖-非线性地震模拟

4.5.3 合金微结构演化相场模拟

在材料科学的研究中，许多重要工程材料的设计都需要通过控制其相变和组织演变过程来实现。比如说，通过固态形核析出反应提高镍基高温合金和铝基时效强化合金的机械性能，通过控制铁电晶体的相变达到其介电和机电效应的耦合，以及通过马氏体相变得到形状记忆合金的记忆效应等。而采用计算机辅助虚拟分析技术代替耗时耗材的实验，可以大幅提高研发效率，缩短研发周期，加速新材料研发进程。

合金制备工艺复杂，微观组织形成机制和规律难以通过实验获得，常借助于软件模拟。相场法能够模拟微观组织的演化过程，广泛应用于新材料的设计。合金微组织演化大模拟并行软件 ScETD-PF 是基于可扩展紧致指数时间差分算法库的相场模拟软件。该软件由中科院计算机网络信息中心自主开发，支持计算材料科学、计算物理、计算生命科学等学科科研模拟。 该应用实现了国际最大规模的合金微结构粗化相场模拟，有助于加快我国新型合金的设计和加工工艺优化。

在“神威 • 太湖之光”上的运行的合金微结构粗化过程相场模拟，规模比之前提高近百倍，实现了超过千万核的扩展性能，相场模拟的实际性能可达到峰值的 40%，远高于普通软件约 5%的水

平。据了解，使用“神威·太湖之光”可在数小时内完成一次数千亿体系的合金微结构粗化过程的高精度模拟。

该应用已获得 2016 年戈登贝尔(Gorden Bell) 奖提名。

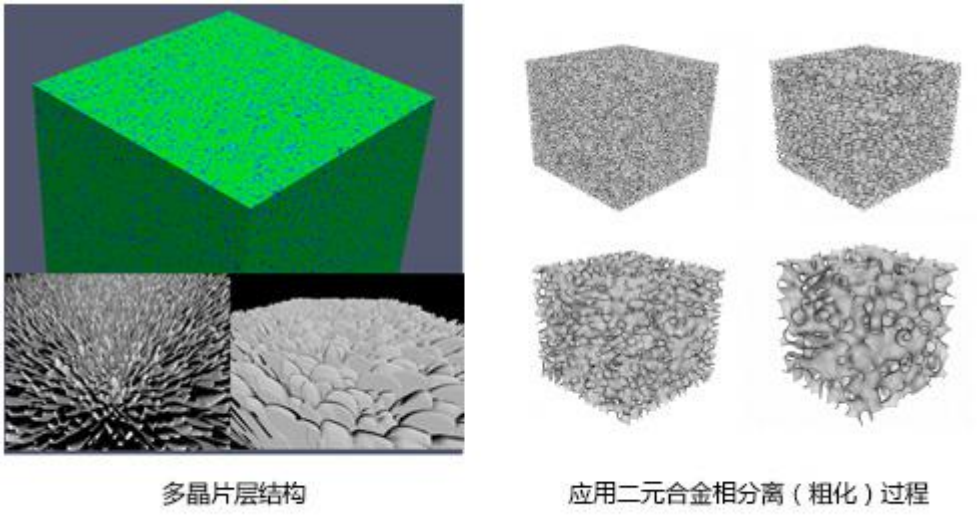


图 118 2016 戈登·贝尔奖提名-合金微结构演化相场模拟

4.5.4 全球高分辨率海浪数值模式

海浪与国家安全保障、防灾减灾、航海安全等有关。随着国家海洋强国战略和“一带一路”的不断推进，海上活动更加频繁，对海洋精确预报的需求也日益迫切。国家海洋局第一海洋研究所与清华大学合作，基于我国自主知识产权的 MASNUM 海浪模式，在国际上首次开展了全球空间分辨率 2 公里海浪模式研究，能够使用到“神威•太湖之光”全系统的计算资源，而且计算效率超过 36%，标志着我国海洋减灾防灾、海上军事保障能力可以提高上万倍。

4.5.5 全球气候模式的高性能模拟

全球气候模式的数值模拟是研究全球气候变化规律、预测与预防未来极端气候灾害的重要工具，为保护地球生态环境、实现可持续发展提供了重要理论依据。随着科学技术的不断发展，地球系统模式所包含的研究内容也变得更加丰富，由此带来了海量的模拟数据、巨大的模拟区域、以及复杂的变化过程等诸多问题。这些特征也使得实现高分辨率、高可扩展性与高性能的气候模式模拟变得更加具有挑战性，对优化方法、计算机性能等都提出了全新的要求。针对全球气候模拟所面临的诸多挑战，由清华大学、北京师范大学与山东大学组成的联合研究团队，从神威太湖之光超级计算机的系统特点出发，设计出了从进程到线程的一整套的优化方案，对具有海量代码任务的经典大气模式 CAM 进行了重构设计，将其成功移植到了国产平台上，并实现了千万核规模下 25 公里分辨率的模拟，取得了 3.4（模拟年每天）的计算性能；对于模式的动力框架部分，更是实现了千万核规模下 750 米的分辨率能力，以及 3.3PFlops 的计算性能。基于该工作的研究成果，研究团队借助神威太湖之光的强大计算能力，首次实现了全球范围对科特琳娜台风整个生命周期的准确模拟。作为对真实应用的大规模数值模拟，该工作的成功完成，对于未来面向 E 级（百亿亿次）计算系统的应用

发展具有重要借鉴意义，在程序设计、优化方法等方面提供了宝贵的经验。

4.6 小　结

国家高性能计算环境已进入千万亿次普及时代，超级计算机以超高的计算性能广泛应用于宇宙探索、核能与新能源、新材料、气象与气候变化、航空航天、新药研发与生物信息、工业仿真计算、动漫渲染、重大科学发现等国民经济各个领域，它已成为一种共性关键技术，是研究和解决各领域挑战性问题的重要手段。

限于篇幅，本章仅从众多典型应用成果中遴选了不同规模的有代表性的 49 个应用案例，从这些应用案例中可以明显感受到国家的科技创新能力日益加强，超级计算机这个国之重器将会扮演越来越重要的作用。

分 析 篇

第五章 超级计算应用成果统计分析

基于国家高性能计算环境的 19 家结点单位收集的数据，本章重点就超级计算应用成果进行了统计与分析，包括平台应用能力、服务科研项目、HPC 应用获奖、国家及地方资金投入、用户发表论文和社会效益等六个方面。

5.1 平台应用能力

1、应用最大并行核数

2015-2017 三年中，在 19 家结点单位中，**应用最大并行核数达到 300 万 CPU 核**，超过 60%的结点单位达到千核规模应用，超过 30%的结点单位达到万核规模应用，国家高性能计算环境已普遍进入千核规模应用，这与国家及地方政府支持超级计算基础设施建设是息息相关的。

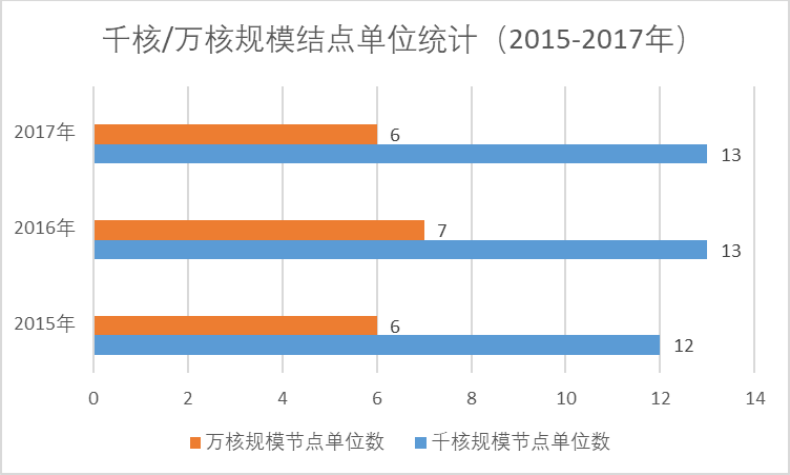


图 119 千核/万核规模结点单位统计（2015-2017）

2、科研教育应用软件数

科研教育应用软件数量，无论是国外开源软件、国外商业软件和国产软件，连续三年都是持续升高。国外开源软件数是最多的，2017 年超过 1500 个，比 2015 年增长 66.7%；国外商业软件数 2017 年超过 200 个，比 2015 年增长了 30%；国产软件数 2017 年接近 300 个，虽然只有国外开源软件的五分之一，但是比 2015 年翻了一番多，这充分说明从国家层面，包括科技部及自然科学基金在应用方面的投入取得了较好的成效。

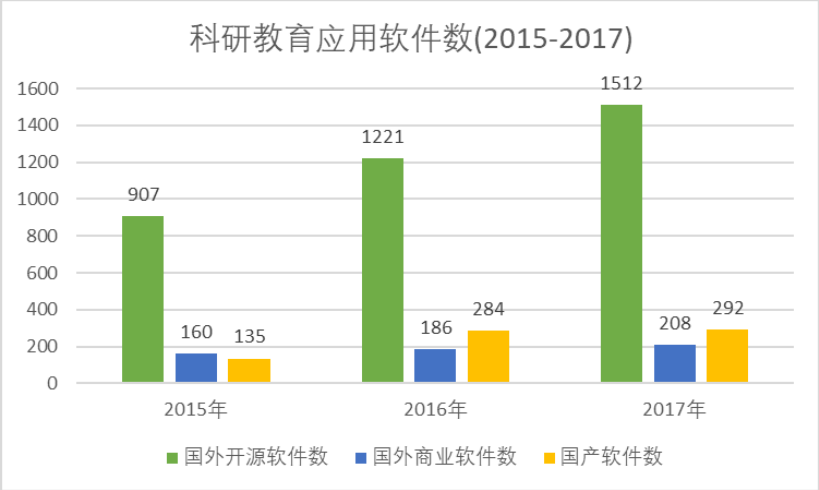


图 120 科研教育应用软件数（2015-2017）

3、企业应用软件数

企业应用软件数量，无论是国外开源软件、国外商业软件和国产软件，也是连续三年都是持续升高。国外开源软件数 2017 年 886 个，比 2015 年增长 88.11%；国外商业软件数 2017 年接近 100 个，比 2015 年增长了 48.65%；国产软件数 2017 年超过 200 个，增长非常迅速，是 2015 年的 4 倍，这充分说明各个结点单位为国家及地方政府相关企业做出了较大贡献。

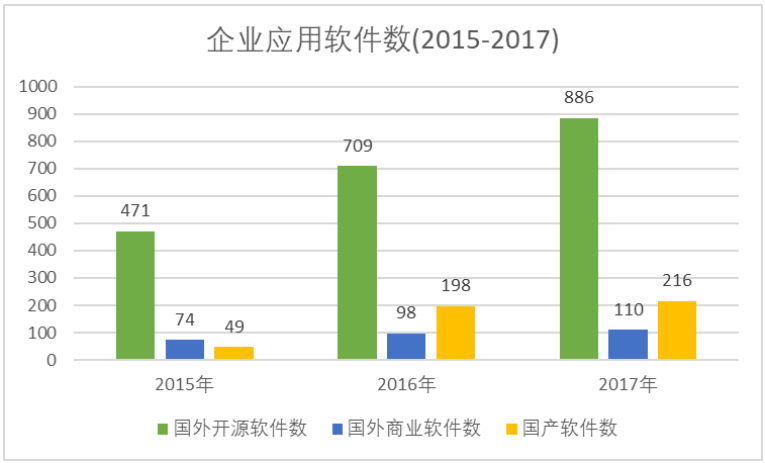


图 121 企业应用软件数（2015-2017）

4、政府应用软件数

政府应用软件数量，无论是国外开源软件、国外商业软件和国产软件，也是连续三年都是持续升高。国外开源软件数 2017 年 733 个，比 2015 年增长 86.99%；国外商业软件数偏少，2017 年 39 个，比 2015 年增长了近 130%；国产软件数 2017 年 192 个，增长非常迅速，是 2015 年的 4 倍多，这充分说明各个结点单位为地方政府做出了很大的贡献。

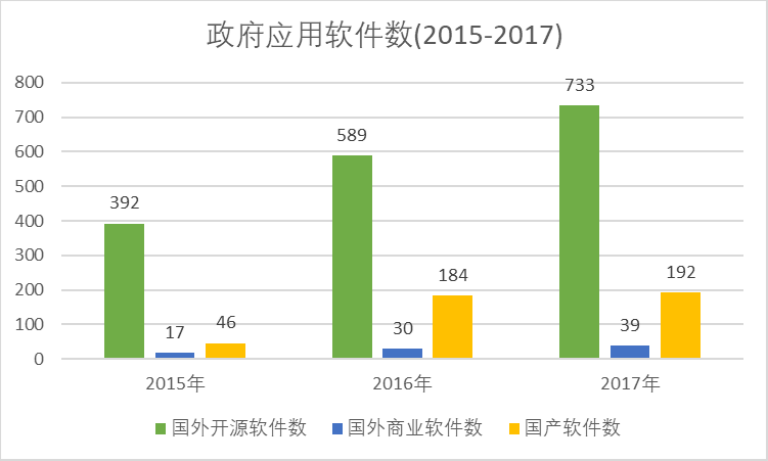


图 122 政府应用软件数（2015-2017）

总体上来说，无论是科研教育应用软件，还是企业应用软件，或者政府应用软件，国外开源软件数量都是最多的，占比超过 70%。这说明国外开源软件占据了重要地位，这也对我国高性能计算各领域的科学家们提出了更高的要求，国产软件的路程还是任重道远。

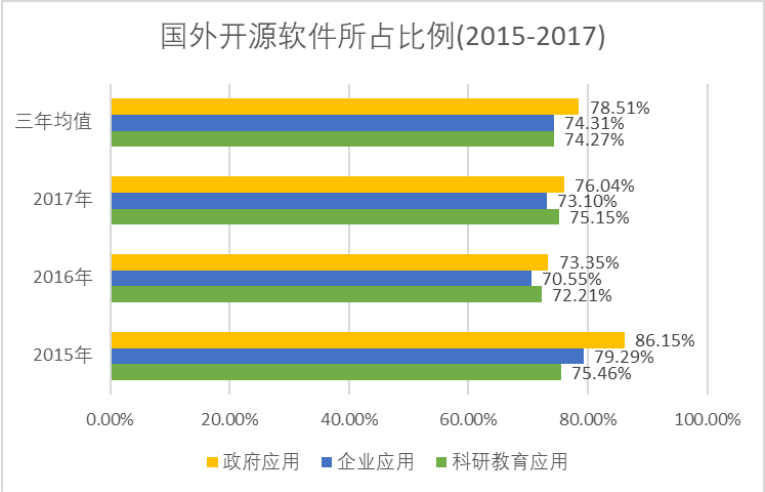


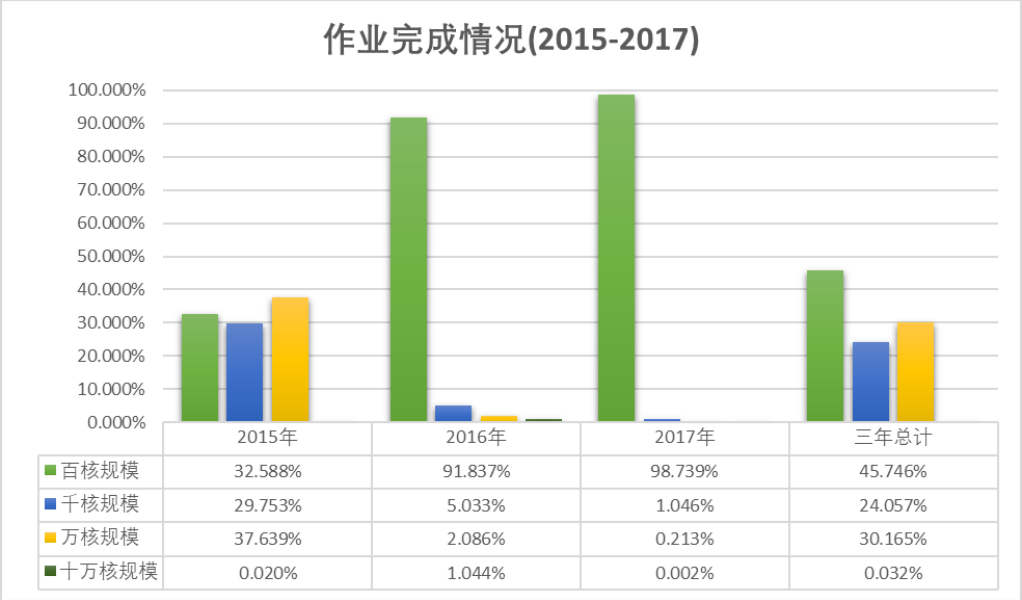
图 123 国外开源软件所占比例（2015-2017）

5、作业完成情况

根据超级计算应用水平评价体系，百核规模定义是小于等于 500CPU 核的作业，千核规模定义是大于 500CPU 且小于等于 5000 核的作业，万核规模定义是大于 5000CPU 且小于等于 50000 核的作业，十万核规模定义是大于 50000 核作业。作业完成情况的定义是对应规模的作业个数乘以对应规模的作业平均时长（小时），也就是对应规模的作业总 CPU 核小时数。

2015-2017 国家高性能计算环境为全国广大用户们提供了超过 500 亿 CPU 核小时的作业量，从

2015 年的万核规模比例最高，超过三分之一，高达 37.639%，这可能和天河 2 号研制成功有很大的关系；2016 年和 2017 年超过 90%都是百核规模，可能和用户数量增长有关系；2016 年十万核规模比例最高，超过 1%，可能和 2016 年“神威·太湖之光”投入使用有关系。



	2015年	2016年	2017年	三年总计
百核规模	32.588%	91.837%	98.739%	45.746%
千核规模	29.753%	5.033%	1.046%	24.057%
万核规模	37.639%	2.086%	0.213%	30.165%
十万核规模	0.020%	1.044%	0.002%	0.032%

图 124 作业完成情况（2015-2017）

5.2 HPC 应用获奖

HPC 应用获奖主要就国家自然科学奖、国家科学技术进步奖、国家技术发明奖、国际奖和省部级奖这五大类奖项进行了统计。2015-2017 年总共获得 47 个奖项，其中主要是省部级项目，有 34 项，占比 72.34%。虽然总奖项数量不是很多，但是在有些奖项方面得到了突破，比如湖南大学“功能纳米材料和微生物修复难降解有机物和重金属污染湿地新方法”获得 2017 年国家自然科学二等奖，中科院软件研究所杨超研究员团队 2016 年获得戈登·贝尔奖，实现自该奖项设立以来中国零的突破，这是非常鼓舞人心的。其它国际奖项还有 Alexander M. Cruickshank 和 Peter C. Waterman Award。

部分省部级奖项如下（排名部分先后）：

- 2015 年度山东省自然科学奖一等奖
- 2015 年度山东省自然科学奖二等奖
- 2016 年教育部高等学校科学研究优秀成果奖
- 2016 年辽宁省自然科学学术成果奖三等奖
- 2016 年山西省科学技术奖二等奖
- 2016 年陕西省科学技术奖二等奖
- 2016 年广东省第六届哲学社会科学优秀成果奖一等奖
- 2016 年全国商业科技进步一等奖
- 2016 年度中国海洋工程咨询协会海洋工程科学技术一等奖
- 2017 年中国气象学会科学技术进步一等奖
- 2017 年山西省科学技术奖二等奖
- 2017 年广东省科技进步奖二等奖
- 2017 年广东省第七届哲学社会科学优秀成果奖三等奖
- 2017 年黑龙江省科技进步三等奖
- 2017 年北京高校青年教师社会调研优秀项目一等奖

- 2017 年辽宁省自然科学学术成果奖二等奖
- 2017 年河南省第四届自然科学学术论文二等奖
- 2017 年山东省自然科学奖一等奖
- 2017 年甘肃省科技进步奖三等奖

遗憾的是 3 年以来没有获得国家自然科学一等奖、国家科学技术进步特等奖、国家科学技术进步一等奖和国家技术发明奖的奖项，希望以后随着我国科技实力不断增强，能突破这些奖项。

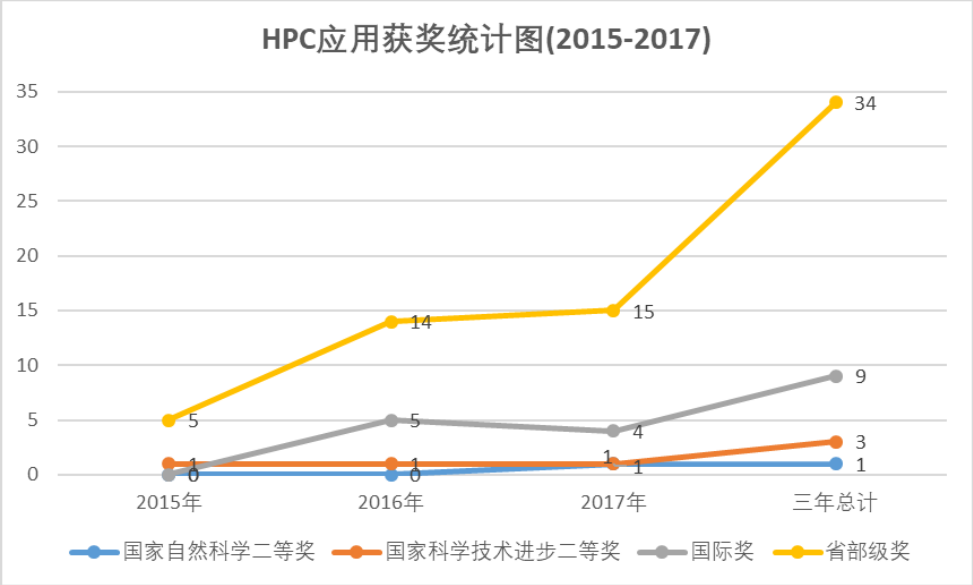
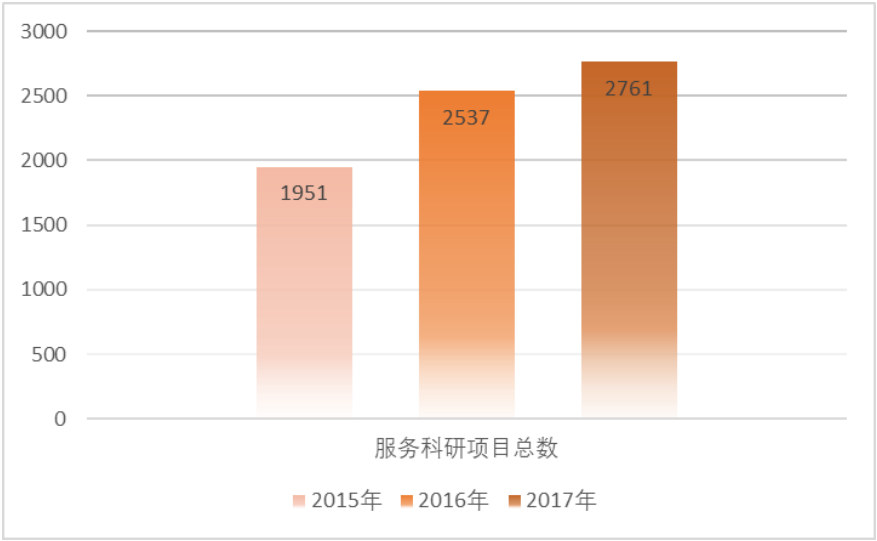
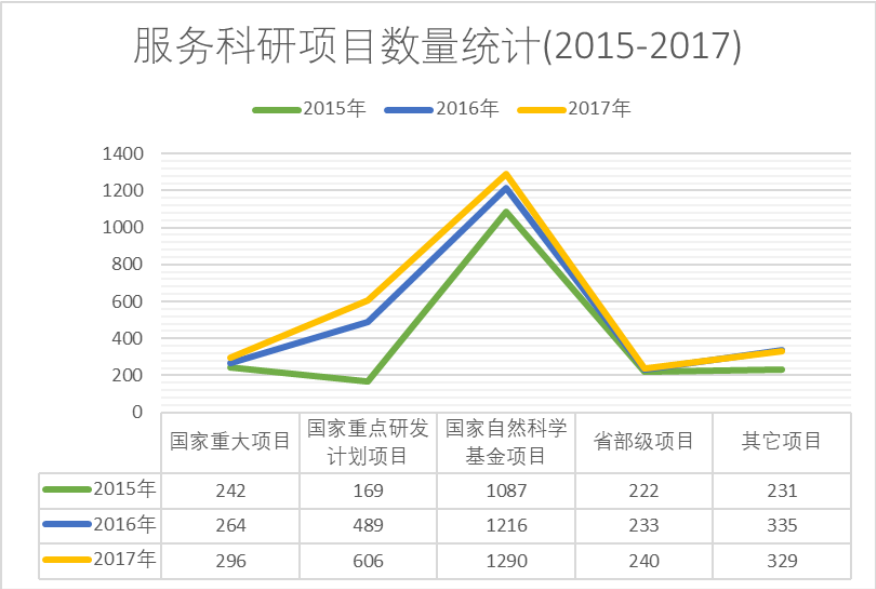


图 125 HPC 应用获奖统计图（2015-2017）

5.3 服务科研项目

国家高性能计算环境服务了众多科研项目，主要包括国家重大项目、国家重点研发计划项目、国家自然科学基金项目、省部级项目及其它项目等。2015 年服务科研项目共 1951 个；2016 年增长率超过 30%，达到 2537 个；2017 年 2761 个，比 2016 年增长 8%。这也说明国家级地方政府对高性能计算环境的重视，支持力度越来越大。

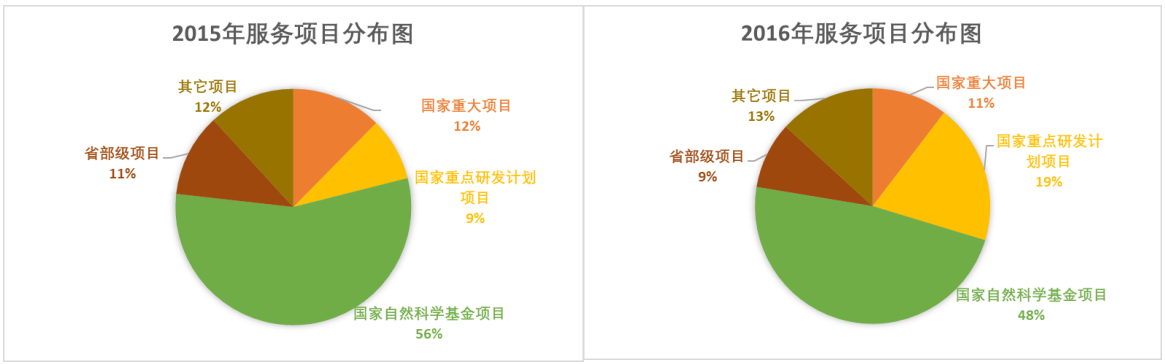




	国家重大项目	国家重点研发计划项目	国家自然科学基金项目	省部级项目	其它项目
2015年	242	169	1087	222	231
2016年	264	489	1216	233	335
2017年	296	606	1290	240	329

图 126 服务科研项目数量统计（2015-2017）

从近三年的服务项目分布图来看，最多的是国家自然科学基金项目，2015 年占比 56%，2016 年占比 48%，2017 年占比 47%；其次是国家重点项目和国家重点研发计划项目。由于国家重点研发计划项目从 2016 年才开始立项，估计以后的比例会逐年提升的。



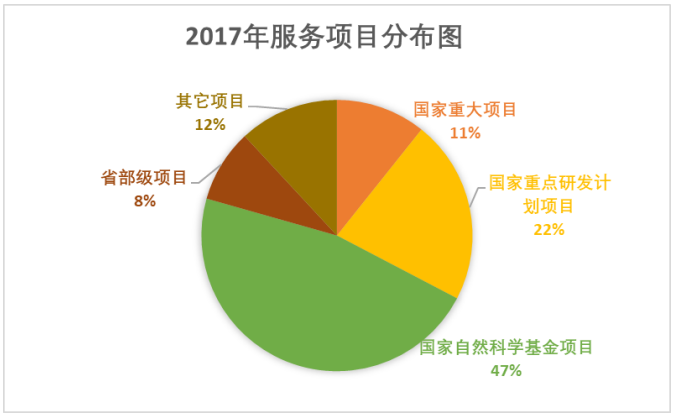
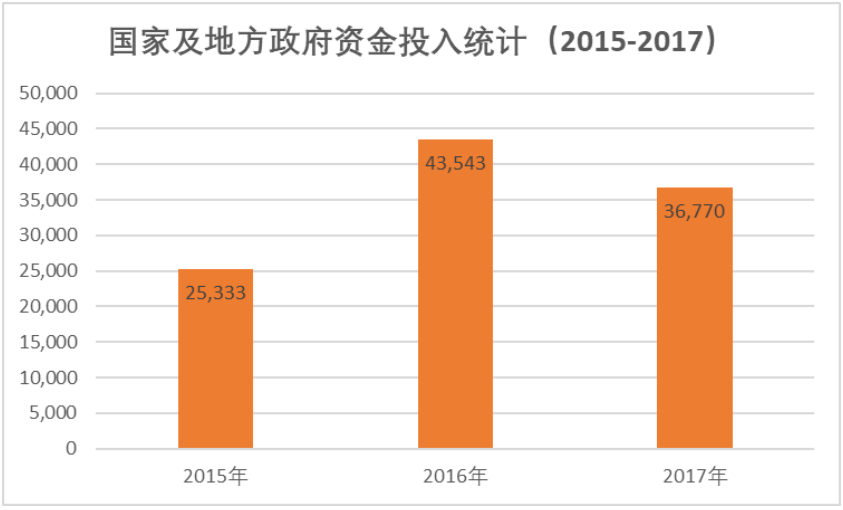


图 127 服务项目分布图（2015-2017）

5.4 国家及地方资金投入

在超级计算应用发展的过程中得到了国家和地方政府的大力支持，这里主要就科技部、国家自

然科学基金委和地方政府三个方面的资金投入进行了统计，三年总共资金投入超过 10 亿元。



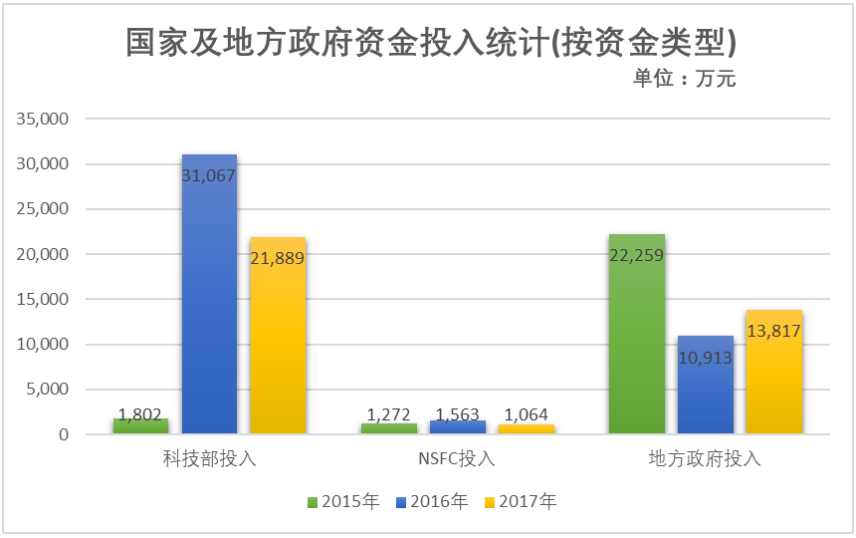


图 128 国家及地方政府资金投入统计 1

科技部从 2016 年开始设立了国家重点研发计划高性能计算专项，其中与超级计算应用直接相关的三年国拨经费超过 5.4 亿元，尤其 2016 年超过 3 亿元；

国家自然科学基金项目与应用直接相关的投入年平均超过 1 千万元，在这特别说明一下，这里统计的数字仅统计 020304、020305 两个方向的金额，实际上应该还有其他方向的投入，争取明年拿到更全面的数字；

地方政府一直为各结点单位的建设与运营方面提供了强有力的支撑与保障，三年累计投入资金超过 4.6 亿元。

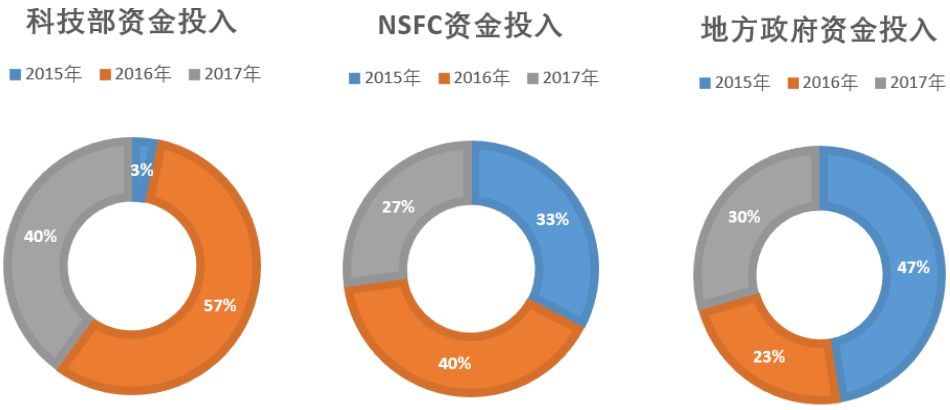


图 129 国家及地方政府资金投入统计 2

5.5 用户发表论文

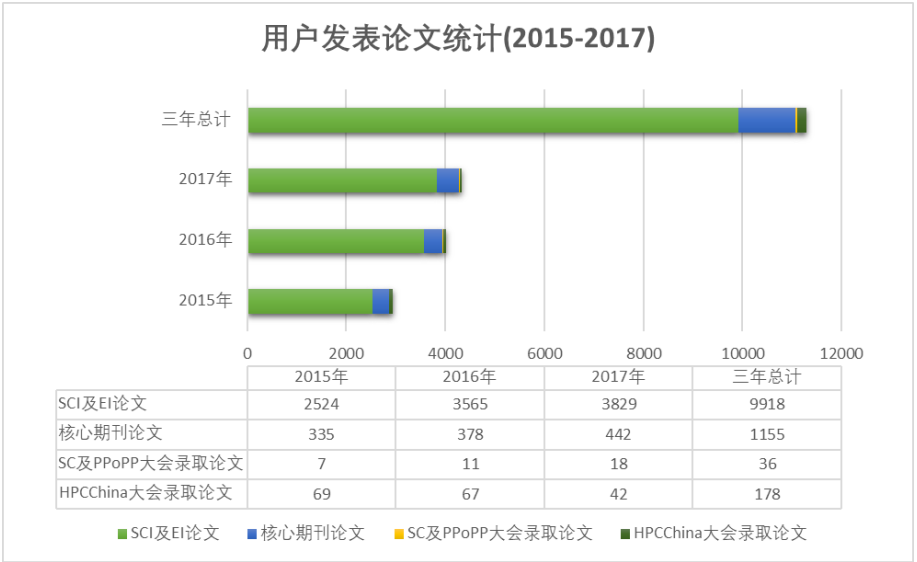
用户发表论文情况是超级计算应用成果很重要的组成部分，从 SCI 及 EI 论文篇数、核心期刊论文篇数、SC 及 PPoPP 大会录取论文数和 HPCChina 大会录取论文数四个方面进行统计。

SCI 及 EI 论文篇数三年总供 9918 篇，在四种论文类型中比例最高，超过 86%，这充分说明基于国家高性能计算环境产出的应用成果绝大多数在国际期刊发表，提高了国际学术地位与知名度。SCI 及 EI 论文篇数连续三年不断攀升，平均年增长率达到 25.85%；

核心期刊论文篇数三年总共 1155 篇，在四种论文类型中排名第二，占比 10%左右，平均年增长率近 20%；

SC（Supercomputing Conference）及 PPoPP（Principles and Practice of Parallel Programming）大会录取论文数总共 36 篇，虽然数量最少，但是其含金量非常高，随着国家高性能计算环境的实力加强，在这种国际顶尖学术会议上发表论文的涨势喜人，平均年增长率超过 78%；

全国高性能计算学术年会（HPCChina）是我国高性能领域规模最大的一个会议，每年有来自国内外的知名专家、学者、厂商、学生等 1000 余人参会。近三年一共收到投稿 642 篇，最终录取 178 篇，录取率 27.73%，论文质量逐年提高。



	2015年	2016年	2017年	三年总计
SCI及EI论文	2524	3565	3829	9918
核心期刊论文	335	378	442	1155
SC及PPoPP大会录取论文	7	11	18	36
HPCChina大会录取论文	69	67	42	178

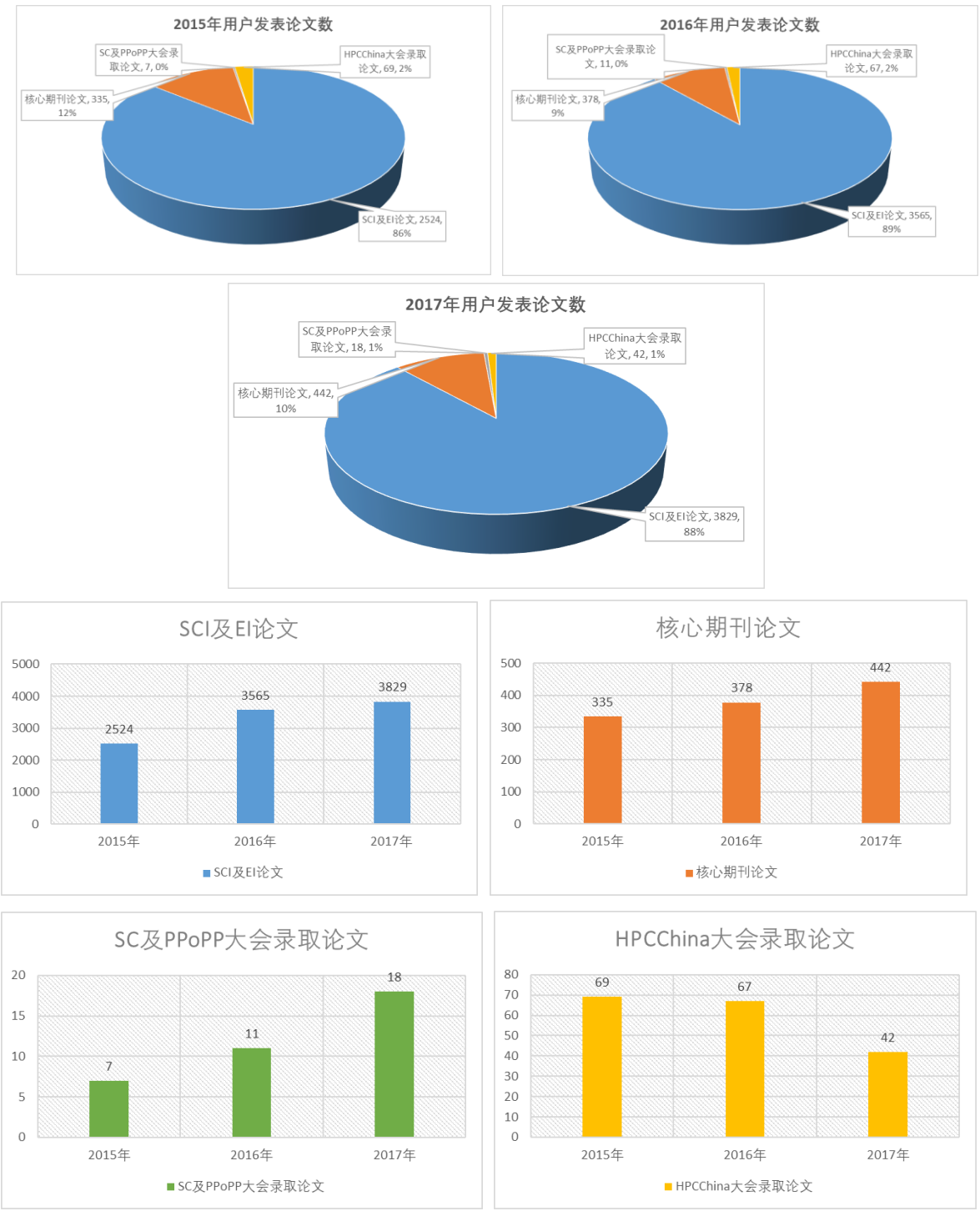


图 130 用户发表论文统计（2015-2017）

5.6 社会效益

社会效益从为企业节省资金额、研制周期缩短时间、国际领先的应用领域个数、HPC 科普活动参加人数、国内超算大赛（ASC/PAC/CPC）报名队伍数、国际超算大赛获奖情况（ISC/SC）和超级计算创新联盟成员单位数量七个维度进行统计。

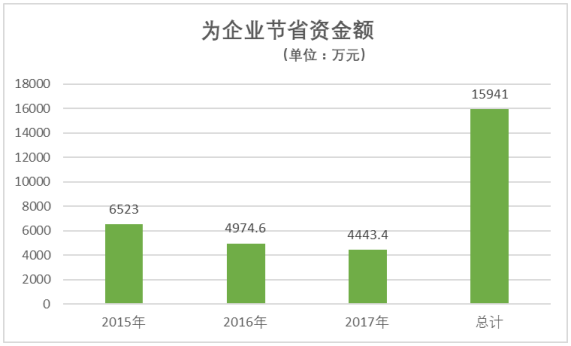
三年为企业节省资金额近 16000 万元，其中 2015 年节省 6500 多万元，2016 年节省进 5000 万元，2017 年节省 4000 多万元，这或许就是为什么国家及地府政府大力发展超级计算机的最好的说

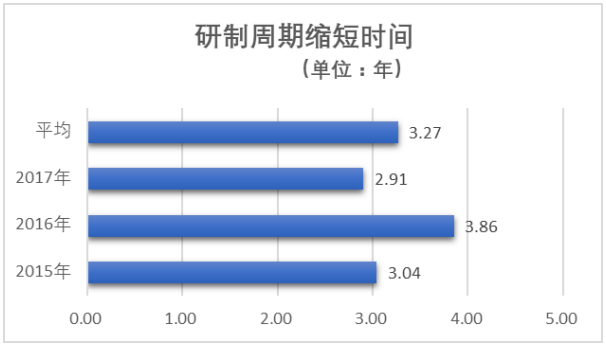
服力；

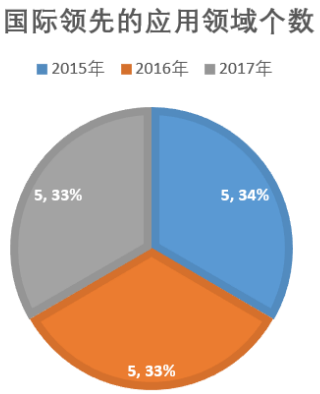
三年研制周期平均缩短了 3.27 年，这对某些应用领域来说就是创造了巨大价值；

国际领先的应用领域个数三年都是 5 个，虽然还是个位数，但是相信在大家共同努力下，一定会越来越多的；

HPC 科普活动让更多的大众了解，并吸引更多的人才加入到 HPC 事业。每年 HPC 科普活动参加人数都超过了 1.5 万人次，累计超过 5.3 万人次。少年强则国强，希望更多的年轻人加入进来，形成较好的人才梯队，为中国 HPC 事业添彩！







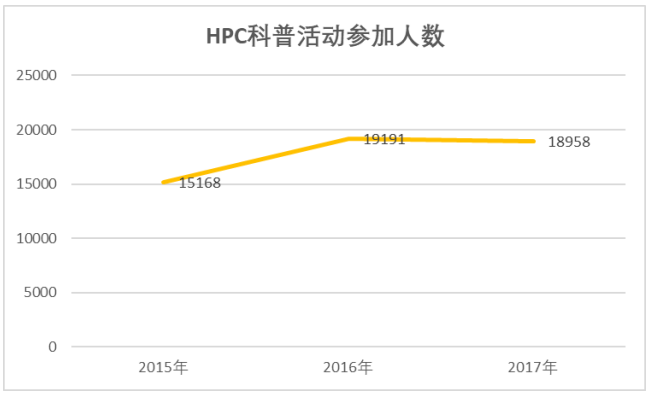


图 131 社会效益统计

国内超算大赛主要包括 ASC、PAC 和 CPC，在这分别做一个简要介绍。

ASC 超算竞赛（*ASC* Student Supercomputer Challenge）由中国 2012 年倡议成立，与日本、俄罗斯、韩国、新加坡、泰国、中国台湾、中国香港等国家和地区的超算专家和机构共同发起并组织，并得到美国、欧洲等国家地区超算学者和组织的积极响应支持；ASC 旨在通过大赛的平台，推动各国及地区间超算青年人才交流和培养，提升超算应用水平和研发能力，发挥超算的科技驱动力，促进科技与产业创新。

全国并行应用挑战赛（简称 PAC），由中国计算机学会高性能计算专业委员会联合英特尔有限公司共同主办，北京并行科技有限公司承办，在大陆及港澳地区展开的最大规模的并行应用大赛，目前已成功举办 5 届。

国产 CPU 并行应用挑战赛（简称 CPC），2017 年 8 月 27 日，由中国计算机学会主办、中国计算机学会无锡分部、国家超级计算无锡中心、国家超级计算济南中心、北京并行科技股份有限公司共同承办的第一届国产 CPU 并行应用挑战赛(简称 CPC)初赛评审会在济南圆满举办。CPC 大赛是第一次在国产 CPU 平台上举行的并行应用挑战赛，具有重要的战略意义，必将对国产 CPU 推广应用产生深刻的影响

ASC、PAC 和 CPC 三个大赛三年共有 1488 支队伍参赛，平均年增长率 38.71%，随这我国超级计算环境越来越好，希望更多的大学生报名参赛，将会上演一场接一场的高水平的尖峰对决。

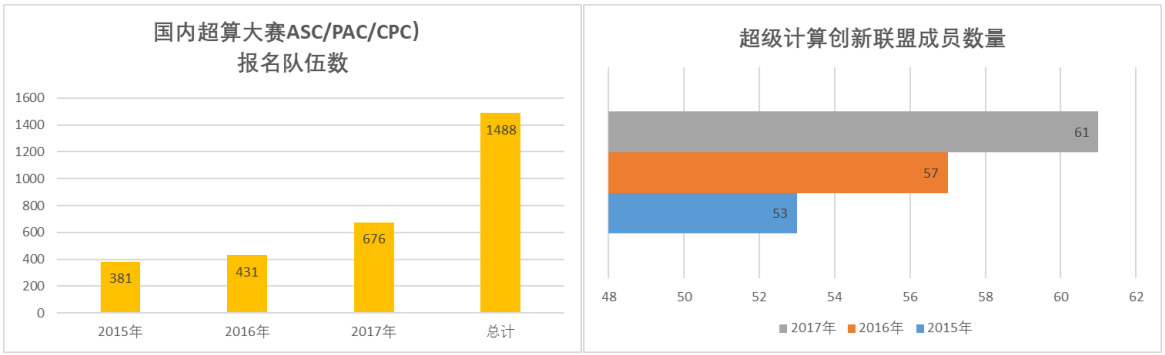


图 132 国内超算大赛及超级计算创新联盟成员数量

超级计算创新联盟于 2013 年 9 月 25 日在北京正式成立，由具有一定规模的国家或地方超级计算中心，高性能计算应用单位，超级计算相关技术和产品的研发、制造、推广、服务的企业、大学、科研机构等具备独立法人资格的单位或其他组织类机构，按照“平等自愿、统一规划、合理分工、权利义务对等、开放共享”的原则组成。联盟挂靠在中科院计算机网络信息中心，理事长由钱德沛教授担任，秘书长由迟学斌研究员担任，副秘书长由谢向辉研究员担任。截至目前联盟由 61 家单位加入，包括超级计算产学研用链条上的相关科研、高校及企事业单位，后续将进一步宣传，扩大影响力，欢迎更多的单位加入联盟，共同发展我国高性能计算事业。

国际超算大赛（ISC/SC）获奖情况近三年如下：

- 2015 年，清华大学代表队获得 ISC15 和 SC15 全球大学生超算竞赛（Student Cluster Competition）总冠军；
- 2016 年，在 SC16 上宣布，中科院软件研究所与清华大学、北京师范大学合作的“千万核可扩展全球大气动力学全隐式模拟”应用首次获得“戈登贝尔奖”（ACM Gordon Bell Prize ）；ISC16 全球大学生超算竞赛上，清华大学代表队和上海交通大学代表队分获总成绩的第二和第三名，华中科技大学代表队获最高计算性能奖；SC16 全球大学生超算竞赛上，中国科学技术大学代表队获得总分以及 LINPACK 测试双料冠军，这是该项赛事历史上首次有队伍获得双料冠军。
- 2017 年，ISC17 全球大学生超算竞赛上清华大学代表队获得总冠军；在 SC17 上宣布基于神威•太湖之光的 15-Pflops 非线性 10HZ 级地震模（15-Pflops Nonlinear Earthquake Simulation on Sunway TaihuLight: Enabling Depiction of Realistic 10 Hz Scenarios）拟获得“戈登贝尔奖”，这是我国第二次摘得此桂冠。

5.7 小 结

本章基于六个大的方面对超级计算应用成果进行了分析。

从平台应用能力来看，2015-2017 三年中，在 19 家结点单位中，**应用最大并行核数达到 300 万 CPU 核**，超过 60%的结点单位达到千核规模应用，国家高性能计算环境已普遍进入千核规模应用，这与国家及地方政府支持超级计算基础设施建设是息息相关的。无论是科研教育应用软件，还是企业应用软件，或者政府应用软件，国外开源软件数量都是最多的，占比超过 70%。这说明国外开源软件占据了重要地位，这也对我国高性能计算各领域的科学家们提出了更高的要求，国

产软件的路程还是任重道远。2015-2017 国家高性能计算环境为全国广大用户们提供了超过 500 亿 CPU 核小时的作业量，2015 年的万核规模比例最高，超过三分之一，高达 37.639%。

从 HPC 应用获奖来看，我国实现了戈登·贝尔奖设立以来中国零的突破，这是非常鼓舞人心的。

从近三年的服务项目来看，最多的是国家自然科学基金项目，三年占比均接近 50%。

在超级计算应用发展的过程中得到了国家和地方政府的大力支持，这里主要就科技部、国家自然科学基金委和地方政府三个方面的资金投入进行了统计，三年总共资金投入超过 10 亿元。

用户发表论文情况是超级计算应用成果很重要的组成部分，三年共发表各类论文 11287 篇。

社会效益从七个维度进行了分析，近三年为企业节省资金额近 16000 万元；三年研制周期平均缩短了 3.27 年；国际领先的应用领域个数达到 15 个；每年 HPC 科普活动参加人数都超过了 1.5 万人次，累计超过 5.3 万人次；ASC、PAC 和 CPC 三个大赛三年共有 1488 支队伍参赛，平均年增长率 38.71%；国际超算大赛（ISC/SC）获奖情况近三年表现非常优秀，2016 年戈登·贝尔奖实现零突破，并 2017 年成功蝉联；超级计算创新联盟目前有来自产学研用的 61 家单位，后续将进一步加大宣传力度，吸引更多的有志之士加入。

第六章 高性能计算环境发展水平综合评价

为科学地衡量和测度我国高性能计算环境的发展水平及变化趋势，基于 19 家中国国家网格结点单位的相关历史数据，我们研究并建立了高性能计算环境发展水平综合评价体系，编制了高性能计算环境发展水平综合评价指数。借此评价我国高性能计算环境发展状况，为今后制定我国高性能计算环境发展战略规划提供决策参考。希望该项创新性的研究工作能够为我国高性能计算环境发展水平提供科学的量化评价依据。

本章首先建立高性能环境综合评价指标与指数体系，在此基础上设计指数体系计算方法，最后基于 2015 至 2017 年我国高性能计算环境指标数据测算我国高性能计算环境发展水平，进行综合评价与统计分析。

6.1 高性能计算环境发展水平综合评价指标与指数体系

建立高性能计算环境发展水平评价指标体系的依据是“高性能计算发展”的内涵。高性能计算环境的发展是指在超级计算硬件环境发展的基础上，能为科学研究和技术创新提供强有力的计算服务支撑，并且将超级计算应用到相关领域或行业取得具有一定价值的应用研究成果，此外还应包括超级计算应用领域的专业支撑人才队伍的培养。

深入分析“高性能计算环境发展”要义发现：“系统能力”能够衡量我国高性能计算环境的硬件基础设施的发展状况；“服务能力”能够测度高性能计算面向用户所提供的服务支撑能力的水平；“人员能力”能够对高性能计算环境中专业性人才队伍的发展进行合理评价；“超级计算应用水平”则能够度量超级计算在实际行业应用或相关领域研究中的应用成果状况。

根据高性能计算环境评价指标体系的科学性、目的性、可操作性等构建原则，高性能计算环境发展水平综合评价指标拟从“系统能力”、“服务能力”、“人员能力”和“超级计算应用水平”四个维度综合考量，每一维度都构成具体评价方面的分指数，每个分指数又由若干个评价指标合成，由分指数综合形成总指数。经专家组多次充分讨论，高性能计算环境发展水平综合评价指标体系共计 67 个评价指标，各评价指标计量方法见表格 5，高性能计算环境发展水平综合评价指数体系如下图所示。

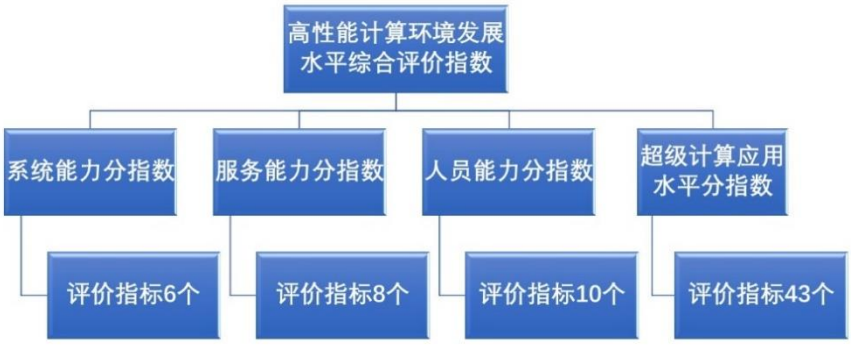


图 133 高性能计算环境发展水平综合评价指数体系框架图

在高性能计算环境发展水平综合评价指数中，超级计算应用水平分指数还包括“平台应用能

力”、“HPC 应用获奖”、“服务科研项目”、“国家及地方政府投入资金”、“用户发表论文”和“社会效益”6 个子指数，从应用获奖、用户科研产出和社会效益等方面衡量我国超级计算应用发展的状况，每个子指数由若干评价指标合成。超级计算应用水平分指数结构如下图所示，指标计量方法详见表格 6。

图 134 超级计算应用水平分指数体系框架图

6.2 高性能计算环境发展水平综合评价指数体系设计

在构建高性能环境发展水平指标体系基础上设计综合评价指数体系，具体步骤包括：评价指标数据无量纲化、评价指标权重确定、指标转化值合成（分指数计算）、总指数计算。

1. 评价指标权重确定

综合评价过程中，权重反映评价指标的重要性以及评价工作的导向性。评价指标权重确定常采用的方法有主观经验法、德尔菲法、层次分析法和熵值法等，各有优缺点。鉴于数据的可获得性及调查的可操作性，高性能计算环境发展水平综合评价指数体系采取集值迭代法和德尔菲法相结合的赋权方法确定评价指标权重，实施步骤如下：

- 由高性能计算领域专家在含有 k 个指标的指标集中依次选出认为最重要的 q 个指标、2q 个指标…tq 个指标，直至下一轮挑选指标数超出指标总数，迭代过程终止($1 \leq q < k$)；
- 计算出每个指标在迭代过程中被选中的次数，归一化得到指标权重。

在确定指标权重时，首先根据评价指标体系设计“高性能计算环境发展水平评价指标重要性调查”问卷，对高性能计算研究领域方面的专家进行调查，根据回收到的 21 份有效问卷得到专家对指标重要性的判断，利用集值迭代法计算出各指标权重，为保证各指标权重准确性和差异性，集值迭代参数 q 设为 1。计算出各级评价指标权重如表格 5，超级计算应用水平分指数各评价指标权重详见表格 6。

2. 综合评价指数计算

高性能计算环境发展水平综合评价指数采用阈值法无量纲化指标数据，以 100 作为基点，利用加权算术平均的方法合成指标转化值与分指数。

指数的具体计算方法为：

（1）确定各评价指标的基期值

根据数据可得性，各指标基期值设定为指标三年的算术平均值；

（2）计算各评价指标的转化值

$$评价指标_i的转化值=\frac{评价指标_i的实际值}{评价指标_i的基期值}\times 100$$；

（3）计算分指数

$$分指数值=\frac{\sum_{i=1}^{n}第i个评价指标的转化值\times 第i个评价指标的权重}{\sum_{i=1}^{n}第i个评价指标的权重}$$

其中，n 为合成该分指数的评价指标的个数；

（4）计算总指数

高性能计算环境发展水平综合评价总指数为各分指数的算术加权平均。

指数的计算结果反映出高性能计算环境当期的发展水平。当期指数结果大于 100（基期水平），说明该期高性能计算环境发展水平与基期相比有所提高以及提高的程度，反之则相反。不同时期的指数计算结果反映出高性能计算环境发展水平的变化趋势。

表 5 高性能计算环境发展水平综合评价指数及评价指标的计量方法与权重

总指数	分指数（权重）	二级评价指标（权重）	三级评价指标（权重）	评价指标计量方法
高性能计算环境发展水平综合评价指数	系统能力分指数（0.286）	计算（0.459）	CPU 计算能力（0.469）	CNGrid 各结点单位 CPU 计算能力累加
			协处理器能力（0.254）	CNGrid 各结点单位协处理器能力累加
			内存总容量（0.277）	CNGrid 各结点单位内存总容量累加
		存储（0.255）	在线存储总容量（0.477）	CNGrid 各结点单位在线存储总容量累加
			IO 聚合带宽（0.523）	CNGrid 各结点单位 IO 聚合带宽平均值
		通信（0.286）	互连通信带宽	CNGrid 各结点单位的系统中每个计算结点间的点点通信带宽平均值
	服务能力分指数（0.251）	网络环境（0.202）	网络出口带宽（0.408）	CNGrid 各节点的互联网接入 CNGrid 环境的带宽平均值
			网络延迟（0.261）	CNGrid 各节点互联网接入 CNGrid 环境的网络延迟平均值
			网络可靠性（0.331）	CNGrid 各结点单位内的互联网设计可靠性平均值
		系统在线情况（0.283）	登录节点的可访问情况（0.576）	从 CNGrid 各节点处的网格服务器到系统的登录节点可以正常访问的比例的平均值
			节点处的网格服务器的可访问情况（0.424）	从运管中心到 CNGrid 各节点处的网格服务器可以正常访问的比例的平均值
		开通用户账号数（0.190）	——	截止年末各结点单位累计开通的用户账号数量总和
		服务用户单位数（0.202）	——	截止年末各结点单位累计开通的用户账号所属的单位数量（隶属于一个法人单位的计为一个）总和
		用户培训人数（0.123）	——	各结点单位本年度举办面向用户的培训总人数
	人员能力分指数（0.194）	专职人员（0.465）	高级职称所占总职工人数的百分比（0.540）	各结点单位高级职称所占总职工人数的百分比平均值
			具有博士学位所占总职工人数的百分比（0.460）	各结点单位具有博士学位所占总职工人数的百分比平均值
		学生培养（0.283）	硕士毕业人数（0.429）	用户当年培养硕士毕业人数总量
			博士毕业人数（0.571）	用户当年培养博士毕业人数总量
		国际学术交流（0.252）	来访总人次（0.164）	各结点单位在学术交流中接待的来访总人次
			出访总人次（0.121）	各结点单位在学术交流中进行出访的总人次
			出访专家报告次数（0.207）	各结点单位在学术交流中出访专家进行报告的总次数
			邀请国外专家报告次数（0.175）	各结点单位在学术交流中邀请国外专家进行报告的总次数
			举办国际会议次数（0.198）	各结点单位举办国际会议次数总和
			国际参展次数（0.136）	各结点单位本年度国际参展次数总和
	超级计算应用分指数（0.269）	详见表 6.2		————

表 6 超级计算应用水平分指数各评价指标的计量方法与权重

指数	子指数（权重）	二级评价指标名称（权重）	三级评价指标（权重）	评价指标计量方法
超级计算应用水平指数	平台应用能力子指数（0.220）	应用最大并行核数（0.252）	——	各结点单位应用最大并行核数的最大值
		科研教育应用软件数（0.226）	开源软件数（0.351）	各结点单位已部署的科研教育方面开源软件数量总和
			国产软件数（0.260）	各结点单位已部署的科研教育方面国产软件数量总和
			商业软件数（0.389）	各结点单位已部署的科研教育方面商业软件数量总和
		企业应用软件数（0.191）	开源软件数（0.298）	各结点单位已部署的企业应用方面开源软件数量总和
			国产软件数（0.313）	各结点单位已部署的企业应用方面国产软件数量总和
			商业软件数（0.389）	各结点单位已部署的企业应用方面商业软件数量总和
		政府应用软件数（0.131）	开源软件数（0.290）	各结点单位已部署的政府应用方面开源软件数量总和
			国产软件数（0.260）	各结点单位已部署的政府应用方面国产软件数量总和
			商业软件数（0.450）	各结点单位已部署的政府应用方面商业软件数量总和
		作业完成情况（0.200）	百核规模（0.167）	各结点单位百核规模作业情况（百核规模作业个数*百核规模作业平均时长）累加

		千核规模（0.257）	各结点单位千核规模作业情况（千核规模作业个数*千核规模作业平均时长）累加
		万核规模（0.288）	各结点单位万核规模作业情况（万核规模作业个数*万核规模作业平均时长）累加
		十万核规模（0.288）	各结点单位十万核规模作业情况（十万核规模作业个数*十万核规模作业平均时长）累加
HPC 应用获奖子指数（0.147）	国家自然科学奖（0.262）	一等奖数量（0.685）	各结点单位获国家自然科学奖一等奖数量总和
		二等奖数量（0.315）	各结点单位获国家自然科学奖二等奖数量总和
	国家科学技术进步奖（0.225）	特等奖数量（0.492）	各结点单位获国家科学技术进步奖特等奖数量总和
		一等奖数量（0.300）	各结点单位获国家科学技术进步奖一等奖数量总和
		二等奖数量（0.208）	各结点单位获国家科学技术进步奖二等奖数量总和
	国家技术发明奖（0.195）	一等奖数量（0.653）	各结点单位获国家技术发明奖一等奖数量总和
		二等奖数量（0.347）	各结点单位获国家技术发明奖二等奖数量总和
	国际奖（0.216）	——	各结点单位获国际奖数量总和
	省部级奖（0.102）	——	各结点单位获省部级奖数量总和
服务科研项目子指数（0.205）	国家重大项目（0.300）	——	各结点单位的用户使用超级计算需求来源于国家重大项目的数量总和
	国家重点研发计划项目（0.251）	——	各结点单位的用户使用超级计算需求来源于国家重点研发计划项目的数量总和
	国家自然科学基金项目（0.214）	——	各结点单位的用户使用超级计算需求来源于国家自然科学基金项目的数量总和
	省部级项目（0.142）	——	各结点单位的用户使用超级计算需求来源于省部级项目的数量
	其它项目（0.093）	——	CNGrid 各结点单位的用户使用超级计算需求来源于其它项目的数量
国家及地方政府投入资子指数（0.157）	科技部投入资金额（0.356）	——	科技部在超级计算应用方向投入的资金额
	国家自然科学基金投入资金额（0.278）	——	国家自然科学基金在超级计算应用方向投入的资金额
	地方政府投入资金额（0.227）	——	各结点单位所在地方政府在超级计算应用方向投入的资金额
	其它投入资金额（0.139）	——	其它机构在超级计算应用方向投入的资金额
用户发表论文子指数（0.126）	SCI 及 EI 论文篇数（0.324）	——	CNGrid 各结点单位的用户发表 SCI 和 EI 论文（要求明确致谢节点）的数量总和
	核心期刊论文篇数（0.202）	——	CNGrid 各结点单位的用户发表核心期刊论文（要求明确致谢节点）的数量总和
	SC、PPoPP 大会录取论文篇数（0.310）	——	CNGrid 各结点单位的用户在国际会议 SC 及 PPoPP 大会上录取论文（要求明确致谢节点）篇数总和
	HPCChina 大会录取论文篇数（0.164）	——	CNGrid 各结点单位的用户在 HPCChina 大会上录取论文（要求明确致谢节点）篇数总和
社会效益子指数（0.145）	为企业节省资金额（0.177）	——	各结点单位为用户企业所节省的资金总额
	研制周期缩短时间（0.182）	——	各结点单位为用户提供高性能计算技术支持和支撑服务而缩短的研制周期平均值
	国际领先的应用领域个数（0.213）	——	各结点单位在国际领先的应用领域个数总和
	HPC 科普活动参加人数（0.100）	——	各结点单位参加 HPC 科普活动人数总和
	国内超算大赛报名队伍数（0.110）	——	各结点单位报名参加国内超算大赛（ASC/PAC/CPC）队伍总数
	国际超算大赛获奖情况（0.137）	——	本年度我国高性能计算在国际超算大赛中获奖情况，由专家打分获得
	超级计算创新联盟成员单位数量（0.081）	——	超级计算创新联盟成员单位数量

6.3 国家高性能计算环境发展水平综合评价

6.3.1 高性能计算环境发展水平综合评价

通过向 19 家中国国家网格结点单位收集高性能计算环境相关历史数据，整合得到 2015-2017 年国家高性能计算环境发展水平综合评价指标体系的基础数据。本次评价中各评价指标的基期值取

各评价指标数据三年的平均值。以高性能计算环境的历史数据为支撑，计算出 2015-2017 年国家高性能计算环境发展水平综合评价指数，如下图所示。

可以发现，2015-2017 年间我国高性能计算环境发展水平综合评价指数呈现上升趋势，稳步增长。2016 年增长快些，增长率为 34.69%，2017 年增长率为 10.57%，有所下降。2017 年高性能计算环境发展水平综合评价指数为 113.58，说明 2017 年当期高性能计算环境发展水平相比基期（三年平均水平）提高了 13.58%。

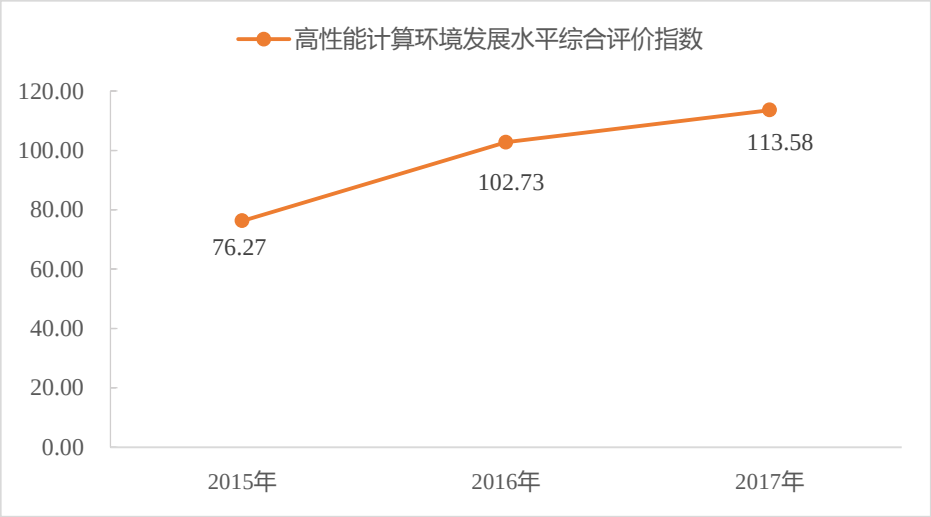
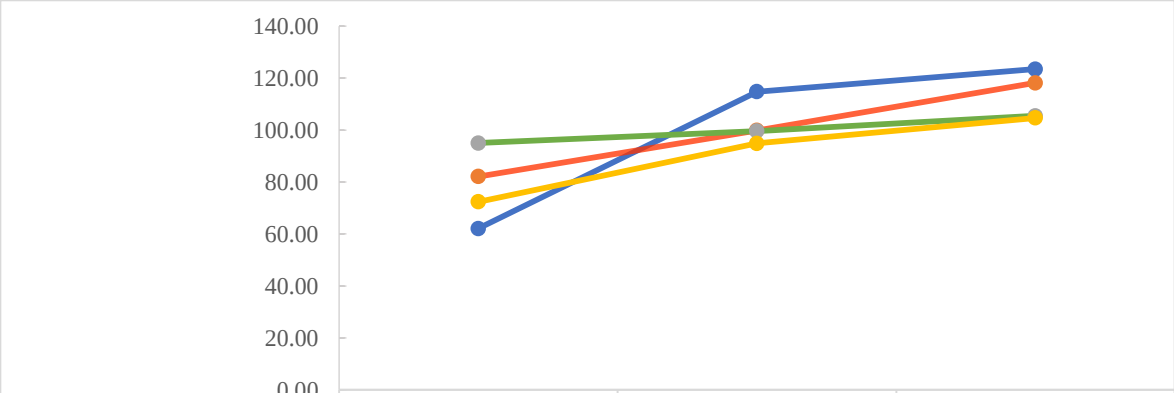


图 135 高性能计算环境发展水平综合评价指数走势（2015-2017 年）

各分指数走势如下图所示。可以看出，2015-2017 年间，各分指数均呈现稳定上升趋势，增长速度有所不同。

1. **系统能力分指数**增长最快，年平均增长率达到 41.02%，表明高性能计算在硬件基础设施发展状况方面发展迅速，高性能计算硬件环境的发展为我国高性能计算提供了强大的动力；
2. **服务能力分指数**年平均增长率分别为 19.95%，发展态势较好，增长比较平稳；
3. **人员能力分指数**增长最慢，年平均增长率相对较低，尚不足 6%，表明高性能计算在人员培养方面存在一定的滞后，在后续发展中应注重专职人员的培养，加大高性能计算专业人员队伍的建设力度，以强化专业人员对高性能计算环境的支撑作用；
4. **超级计算应用水平分指数**年平均增长率为 20.25%，三年间提升较为明显，但后续发展动力相对不足，需继续强化超级计算应用成果方面的研究，积极推动超级计算应用的深度和广度，更好地发挥超级计算在科学发现和科技创新中的作用，从而加强我国高性能计算软环境的建设。



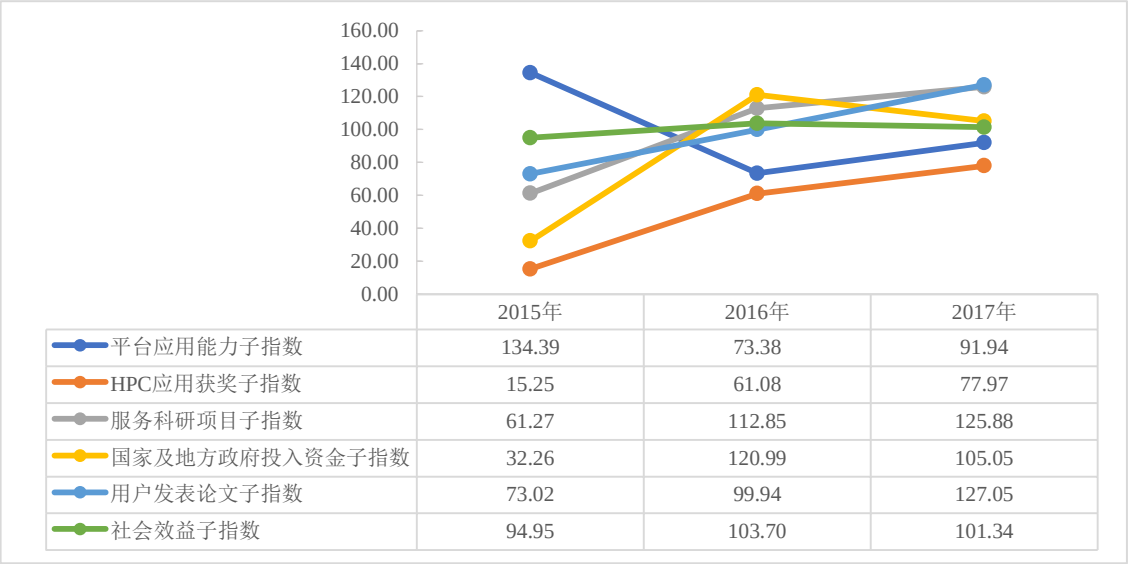
	2015年	2016年	2017年
系统能力分指数	62.08	114.75	123.47
服务能力分指数	82.10	99.83	118.13
人员能力分指数	95.01	99.63	105.44
超级计算应用水平分指数	72.40	94.88	104.69

图 136 高性能计算环境发展水平综合评价分指数走势（2015-2017 年）

6.3.2 超级计算应用水平综合评价

进一步对超级计算应用水平分指数的 6 个子指数进行计算与分析，得到子指数走势如图表 140 所示。可以看出，除了平台应用能力子指数呈现下降趋势外，其他子指数都呈现上升趋势。

- **平台应用能力子指数** 2016 年降幅 61.01%，2017 年降幅 18.56%，这是由于 2016 年应用最大并行核数较小和作业完成情况相对较差，较 2015 年下降明显，直接导致了平台应用能力子指数的回落，在后续发展中应注意保持平台应用能力发展的稳定性，以保证超级计算应用的良性发展；
- **HPC 应用获奖子指数**在 2015-2017 年间持续稳定增长，年均增长率为 126.11%，增长速度在各子指数中最快，分析其主要原因发现，三年间超级计算应用所获得的国家科学技术进步奖、国际奖和省部级奖数量增多，在国家自然科学奖方面实现了“0”的突破，整体较 2015 年进步较大。另一方面，HPC 应用获奖子指数三年数值均小于 100，主要是由于国家自然科学一等奖、国家科学技术进步特等奖、国家技术发明奖三个奖项的所有数据均为零。这些方面欠缺明显，今后需加大力度，争取实现零的突破；
- **服务科研项目子指数**呈现持续增长的态势，年均增长率为 43.33%，并于 2016 年超过基期值，增长较为稳定；
- **国家及地方政府投入资金子指数** 2016 年增幅 88.73%，实现了快速跃进，2017 年由于科技部投入资金额减少指数有所下降，回落 15.93%，三年间整体提升较为明显，表明国家及地方政府在超级计算应用发展方面的重视程度及支持力度提高明显；
- **用户发表论文子指数**在 2015-2017 年间年均增长率为 31.91%，指数保持稳定增长，超级计算支持用户研究方面发展状况较好；
- **社会效益子指数**发展最为缓慢，年均增长率不足 4%，主要由于超级计算在为企业节省资金额方面呈下降趋势，在研制周期缩短时间方面增长不明显，在国际领先的应用领域个数方面没有增长。这些都是超级计算应用中较为薄弱的环节，拉低了该指数的增长趋势，需要在今后发展过程中予以重点突破。



	2015年	2016年	2017年
平台应用能力子指数	134.39	73.38	91.94
HPC应用获奖子指数	15.25	61.08	77.97
服务科研项目子指数	61.27	112.85	125.88
国家及地方政府投入资金子指数	32.26	120.99	105.05
用户发表论文子指数	73.02	99.94	127.05
社会效益子指数	94.95	103.70	101.34

图 137 超级计算应用水平各子指数走势（2015-2017 年）

第七章 国外部分知名超级计算中心调研情况

7.1 已公开年度报告的调研

受限于时间和人力， 组织力量重点调研了美国国家计算科学中心（NCCS，隶属于橡树岭国家实验室）、美国国家超级计算应用中心（NCSA）、美国国家能源研究科学计算中心（NERSC）、德国于利希超级计算中心（JSC）、日本计算与通讯高级中心（ACCC）等 5 个知名的超级计算中心在互联网上已公开发布的年度报告的形式和内容

以先进科学计算研究(ASCR)项目为例，美国每个财年的研发预算主要集中在部分联邦部门，包括国防部（DOD）、国立卫生研究院（NIH）、能源部（DOE）、美国航空航天局（NASA）、国家科学基金会（NSF）、农业部（USDA）和国家标准和技术研究所（NIST），以上七家机构的研发预算近年来每年平均占到了总预算的 95%以上。其中 NSF、美国能源部科学办公室（DOE SC），以及 NIST 作为美国的基础三大关键基础研究机构，其每个财年的投资及计划重点对于整个美国的基础研究来说更是意义重大。

DOE SC 是美国物理科学基础研究领域最大的联邦资助机构，为物理、化学、生物学、材料科学、应用数学和计算科学等领域的研究计划提供资助。其宗旨是领导物理科学领域的基础研究，建设和运营先进的科学用户设施，加强基础科学进步与技术创新之间的联系。DOE SC 在 2016 财年的投资预算为 53.4 亿美元，增长 5.4%。其中先进科学计算研究（ASCR）项目是 DOE SC 旗下所有科学项目中最重要的项目，为 DoE 相关研究提供分析、建模、模拟预测复杂现象所需的计算资源和网络资源。该项目主要支持高级计算、应用数学、计算机科学和网络等领域的研究，同时紧密联系学术界和工业界，用于支持旨在发现、研发和部署相关科学计算与网络能力的研究，并发展下一代的用于大规模科学计算的计算机硬件和软件工具。这些科学计算和网络能力可用于分析、模拟和预测对能源部履行其职责非常重要的现象。ASCR 项目 2016 年预算比上一年提高了 15%，达到 6.21 亿美元，额外资金主要用于开发新一代的百万兆次级计算机（exascale，简称 E 级），目标是为先进气候模拟和无数应用程序铺平道路。2017 年 ASCR 项目预算进一步提高了 6.8%,达到了 6.63 亿美元，用于支持研究如何应对计算密集型的 E 级计算科学带来的挑战，并支持与 SciDAC (Scientific Discovery through Advanced Computing)项目合作进行清洁能源方面的计算科学研究。2017 年 ASCR 成立了新的 E 级计算项目（Science Exascale Computing Project，简称 SC-ECP）办公室，其中包含超级计算（SC）部门的 E 级计算计划（Exascale Computing Initiative，简称 ECI)，该计划包括四个 E 级计算机相关的研究领域：

硬件技术研发：支持基于硬件、软件厂商的研发活动，并研发和部署这些研发活动所需的至少两套异构 E 级系统。针对这个研究领域，节点的设计目标是发展 E 级计算机所需节点的组件技术以及相关软件，相应的系统设计目标在于发展部署完整的 E 级计算机所需的技术和系统软件。

系统软件技术研发：支持编程环境中的底层操作软件，扩展到支持高层的应用软件开发，包括支持 DOE 所需的 E 级大数据管理和数据科学研究所需的软件架构研发。

应用软件开发：集中在如何开发利用硬件处理器和存储的的并行性、可靠性和弹性、以及深层结构，便于扩展到大型系统以及数据密集型的科学计算。

E 级计算机系统引擎研究：支持厂商进行支持 E 级计算的先进系统引擎开发。

通过该项目，ASCR 预算中的各个应用数学、计算机科学、计算联盟、原型研究评估子项目基金可以在 SC-ECP 范围内更好的协作使用。

ASCR 主要支持研究方向

（一）应用数学、计算科学以及计算机科学（Mathematical, Computational, and Computer Sciences Research）：NSCI 重点关注可持续的国家 HPC 生态系统的容量和计算能力的增长，其中需要重点解决的相关因素包括网络能力、工作流、向下扩展能力、基础算法和软件、可访问性，以及劳动力发展。应用数学、计算科学以及计算机科学的发展（不包括在 ECI）则可以提供国家 HPC 生态系统容量继续发展的基础，因此成为 ASCR 的重点研究和资助的首选方向，用于确保 DOE 相关的计算密集型的 E 级应用可以最大程度的利用当前最先进的高性能计算系统。同时，在 SC-ECP 的支持下，将研究所得的相关软件和方法以及高性能计算相关设备提供给 SciDAC 等合作机构共同使用。其中包括与 BES 和 BER 合作研发脑科学相关的工具和技术，与 NNSA 合作研究地震波模拟，以及合作开展政府的清洁能源计划（Administration's Clean Energy Initiatives）。

（二）高性能计算与网络能力（High Performance Computing and Network Facilities）：在 SC-ECP 的支持下，该研究计划由原由 ECI 重点项目"高性能计算及网络设备子课题（Performance Computing and Network Facilities subprogram）"提升为"E 级计算子课题（Exascale Computing Subprogram）"。主要支持如下研究方向：研究和实现计算能力达 200pf 的新系统，并辅助用户实现原系统到新多核结构系统的升级；超摩尔定律（"Beyond Moore's Law"）相关计算机技术研发；HPC 系统的网络安全新技术研究；以及在 ESnet 的支持下为超级计算提供更高的网络带宽，目标为实现高达 400gbps 的高速网络链路。

（三）E 级计算（Exascale Computing）：在 SC-ECP 的支持下，该研究计划同样由 ECI 重点项目提升为 E 级计算子课题（Exascale Computing Subprogram）。原 ECI 中高性能计算项目研究项目的目的在于为所在部门未来十年的研究任务提供最前沿的高性能计算资源，这就对高性能计算技术，尤其是高性能计算系统的并行度提升、能源利用效率、可靠性，以及可扩展性提出了很高的要求。由于 DOE 与 HPC 相关厂商共同合作加速高性能计算的商业化应用，这些研究将从各方面影响高性能计算的发展，包括大型科学计算和数据中心、企业级服务器，以及家用台式机和笔记本电脑。

7.2 应用情况对比与分析

数值计算和模拟已经成为解决科学问题的重要手段，当前随着计算机能力的不断发展，围绕科学计算已经形成了一系列新兴学科，如计算物理、计算化学、计算材料学、计算金融等。高性能计算服务作为传统计算服务的推广（超级计算不仅能够处理传统计算问题，也能提供加速计算这一重要特性），在保障国家安全、推动国防科技进步、促进尖端武器发展等方面具有直接推动作用。在美国、欧洲和日本等发达国家高性能计算已经深入到各行各业中，主要解决社会发展的重大瓶颈问题。如美国在武器研究与评估、先进材料设计、新型能源开发、人类健康研究等均广泛利用高性能计算。

戈登贝尔奖是美国计算机协会(ACM)每年在超级计算大会颁发的奖项，用于表彰在高性能计算应用中取得的杰出成就。其目的是通过对高性能计算应用在科学、工程和大数据分析等方面的创新进行鼓励和奖励，来跟踪并行计算应用的进展情况。它的前身是 Alan Karp 在 ACM Communication 上对 MIMD 性能优化进行的公开招募和奖励。从 1987 年以来，戈登贝尔奖已经颁发 30 年，目前的奖金为 10000 美金。其捐助人戈登.贝尔出生于 1934 年，是一位杰出的美国电子工程师。他曾设计了几代 PDP 机器，设立了多家知名 IT 公司，并且是微软公司的荣誉研究员。作为国际公认的高性能计算应用技术发展水平的重要标杆和高性能计算应用领域的最高学术奖项，戈登.贝尔（Gordon Bell）奖二十多年来一直被美国和日本垄断。

个人和团队都可以对戈登贝尔奖进行申请。首先，申请人或团队需要在每年 4 月中旬的超级计算大会提交一篇技术文章来阐述自己的工作，入选决赛的申请会被要请到大会上做报告。随后，所有进入决赛的申请会经过评审委员会的评议，最终在该年的超级计算大会上颁奖。戈登贝尔奖主要对应用的 5 个方面进行评议：

- 证明算法的重要性或者实施的创新性
- 相对于前期的最好工作有着明显的改进
- 解决方案本身是不依赖于特定架构的，不能仅解决一小部分问题，并且不能是不可复制
- 性能评测包括：可扩展性，高效性，瓶颈资源的有效性（如，内存带宽、通信带宽、I/O），以及峰值性能
- 成果可以被其它人学习和利用

早年，戈登贝尔奖可以同时颁发给多个申请人。根据最近的策略调整，该奖项主要颁发给：

- 峰值类别。即对于某个重要的科学工程问题的 HPC 应用显著提高运算峰值，或者对于其瓶颈资源进行高效改进的申请
- 可扩展性的杰出贡献和时间有效性的杰出贡献。

下表为自 1988 年以来 Gordon Bell 最高性能奖的具体应用情况，该奖项旨在授予达到最高持续浮点性能的实际应用，体现了实际应用问题利用同期高性能计算机的最大能力。获得该奖项的应用绝大多数是基于同期国际 Top 500 排名前三的系统，由此可见，美国、日本、欧洲等先进的高性能计算中心在注重提高硬件系统研制水平的同时也十分重视高性能计算的应用。

表 7 戈登.贝尔奖最高性能奖的获奖情况（1988-2017）

年份	问题模型	问题类型或者领域
1988	偏微分方程	静态有限元
1989	偏微分方程	震波传播
1992	N体问题	引力、天体物理
1993	偏微分方程	CFD、激波计算
1994	偏微分方程	边界元、结构力学
1995	量子色动力学	夸克、基本粒子
1996	偏微分方程	CFD、气动计算
1997	N体问题	引力、天体物理
1998	量子分子动力学	原子排列、金属磁性
1999	偏微分方程	CFD、湍流
2000	N体问题	引力、天体物理
2001	N体问题	引力、天体物理
2002	偏微分方程	CFD、大气环流

2003	偏微分方程	震波传播
2004	偏微分方程	CFD、磁流体
2005	分子动力学	凝固、核材料
2006	量子分子动力学	电子结构、核材料
2007	分子动力学	K-H不稳定性、核材料
2008	量子蒙特卡罗	电子结构、超导材料
2009	量子蒙特卡罗	纳米热动力学、磁性材料
2010	多物理	CFD +分子动力学、生物医学
2011	量子分子动力学	电子结构、半导体材料
2012	N体问题	引力、天体物理
2013	流体动力学模拟	工业和医疗技术
2014	分子动力学	材料
2015	偏微分方程	地球科学
2016	流体动力学模拟	大气动力学
2017	偏微分方程	地球科学

从 1987 年到 2017 年，30 年间，戈登贝尔奖都在持续进行。从最初的 1Gflops 到最新的 20.1Pflops,获奖得主不断在刷新高性能应用的峰值，性价比，和可扩展性。已经取得该奖项的应用方向集中在流体模拟，有限元模拟，地震模拟，第一性原理计算，分子动力学计算，蒙特卡洛计算等。

这些获奖得主绝大部分是欧美的顶级研究机构。其中值得一提的是 Anton 这个获奖项目。该项目核心负责人 D.E.Shaw 是斯坦福大学计算机专业的博士, 30 岁不到就进入哥伦比亚大学做教授，专门研究超大规模并行计算。受到纽约大环境影响，他进入华尔街著名投行摩根士丹利做 quant trading（可以通俗地理解为用计算机自动炒股、债和外汇）。2 年后，他就开办了自己的对冲基金 D.E. Shaw & Co. LP.(全球第四大对冲基金公司)，专注 quant trading，利用高速计算机网络和市场瞬间的有效性缺陷来进行高频统计套利。他在 1994 年和 2009 年分别被克林顿和奥巴马任命为总统科技顾问委员会成员。在此期间，他还成立了一个研究实验室（www.deshawresearch.com），主要搞计算生物化学领域的超级计算机。他们的主要产品包括 Anton 和 Desmond。前者就是获得戈登贝尔奖的功臣，一种超大并行计算的特定目标超级计算机。后者是一个分子动力学软件包。他们的产品已经服务于结构生物，生物化学和计算机辅助药物设计等方面的研究和工业开发。

另外还有两个获奖项目是来源于日本的 K Computer。该超级计算机由富士通与日本理化学研究所(Japan's Institute of Physical and Chemical Research，也被称为 Riken)合资研发的，在 2012 年完工，耗资 1100 亿日圆（约 13.2 亿美元）。正如此项目立项时所制定的目标：处理气候变化和天气模式等复杂运算，让日本企业界拥有一个强大的运算工具，以寻求在医药、材料和新技术方面的突破，2 次获得戈登贝尔奖应该是对 K Computer 价值更加有力的证实。第一次获奖是他们研究的硅纳米线，它有希望成为下一代半导体的核心材料。这个应用的使用效率达到 43.6%，使用了当时 K Computer 2/3 的计算资源，峰值达到 3.08 Pflops。在这个应用

中，科学家们模拟了 10 纳米长，10 纳米直径的硅纳米线，模型一共含有 39696 个原子。第二个获奖项目是暗物质的引力波演变的模拟研究。 这是筑波大学基于 TreePM 算法开发了一套大型天体物理多体模拟的软件，用以探索暗物质在宇宙形成早期暗物质的一个演化问题。这个应用使用了 K Computer 98% 的计算资源，峰值达到 5.67 Pflops.其实，这个项目的获奖竞争者是来自美国 LLNL 实验室一个基于 Sequoia 的应用。虽然美国的应用峰值高达 14Pflops,但是日本这个暗物质研究的计算速度是美国的 2.4 倍，所以最终获得大奖。

此外，从 Gordon Bell 奖的应用领域可以看出，目前真正能够发挥出高性能计算能力的应用主要集中在材料模拟、CFD 和天文，往往这类问题是一个多尺度问题，微观尺度计算是计算密集型应用，如依赖于稠密矩阵计算（BLAS LEVEL 3）、粒子模拟等。

7.3 投入对比与分析

（一）美国国家计算科学中心（NCCS）

美国国家计算科学中心（National Center for Computational Sciences，NCCS）隶属于美国能源部所属的最大的科学和能源研究实验室--橡树岭国家实验室，面向国家及科研机构提供计算服务。NCCS 现有世界排名第 5 位（2017 年 11 月 top500 排名）的超级计算机 TITAN 对外提供服务，还将在 2018 年发布由美国政府投入 4.25 亿美元建设的新的 200P 的超级计算机 Summit，其计算性能将超过 TITAN 五倍。下表是 SUMMIT 与 TITAN 的对比情况。

TITAN VS SUMMIT

Compute System Comparison

FEATURE	TITAN	SUMMIT
Application Performance	Baseline	5-10x Titan
Number of Nodes	18,688	~4,600
Node performance	1.4 TF	> 40 TF
Memory per Node	32 GB DDR3 + 6 GB GDDR5	512 GB DDR4 + HBM
NV memory per Node	0	1600 GB
Total System Memory	710 TB	>10 PB DDR4 + HBM + Non-volatile
System Interconnect (node injection bandwidth)	Gemini (6.4 GB/s)	Dual Rail EDR-IB (23 GB/s)
Interconnect Topology	3d Torus	Non-blocking Fat Tree
Processors	1 AMD Opteron™ 1 NVIDIA Kepler™	2 IBM POWER9™ 6 NVIDIA Volta™
File System	32 PB, 1 TB/s, Lustre©	250 PB, 2.5 TB/s, GPFS™
Peak power consumption	9 MW	15 MW

图 138 SUMMIT 与 TITAN 的对比情况

2016 年以来，Titan 上产出了 405 项发表论文，其中，59 篇发表在包括 Nature, Science, and Proceedings of the National Academy of Sciences 这样的高水平杂志上，较 2015 年增加了 31%。该产出的研究出版物为 2013 年以来之最，年度用户会议的出席率也开创了历史新纪录。这些成果得到了包括美国能源部（DOE）的“创新和新计算对理论与实验影响”（INCITE）的项目的支持。同时 NCCS 还与世界各国的研究团队进行合作，如密歇根大学，伦敦帝国理工学院和

伦敦大学。参与到包括美国能源部的 Exascale 计算项目等在内的多个项目中。在总计 318 个项目中为超过 1100 个用户提供了该计算中心的计算资源。

2017 年，NCCS 的高性能计算应用主要面向物理学、地球科学、材料科学、工程学、生物学、化学、计算科学等领域（图 1 所示）。其中，有显示度的应用包括：

1.美国能源部实验室使用 OLCF 计算资源对 “sigma”粒子起源的 50 年之谜课题进行了研究，并获得了“物理评论快报”的封面。

2.伦敦大学学院的团队通过在原子水平进行大分子吸附的超级计算模拟获得了“美国化学学会期刊”的封面。

3.ORNL 计算科学家对局部自洽多重散射量子力学结构代码， 在 Titan 上进行了优化，实现了模拟磁性纳米粒子区域中原子级磁性。此项结果发表在了 Nature 杂志上。

4.伦敦帝国理工学院的研究人员将他们加速的行业标准计算流体动力学代码加速到比 13.7 petaflops 的 18,000 个 GPU 还快，并在 2016 年获得了戈登贝尔奖入围。

5.密歇根大学的一个研究小组利用泰坦研究了二维系统中的熔化信息，提高对应用于太阳能电池板和电池的薄膜纳米颗粒相变的预测。其中，GPU 加速模拟为著名的 2-D 融化理论模型提供了广泛的支持。

6.OLCF 与 ORNL 的科学计算和数据环境（CADES）合作，加速开发机器学习，图形分析和其他大数据工作流程，并将以数据为中心的资源与传统 HPC 功能相连接。与 CADES 合作为 ORNL 的研究人员提供访问 HPC，云计算和其他系统的权限，以便他们可以在 ORNL 的研究领域范围内利用建模，仿真和数据分析。

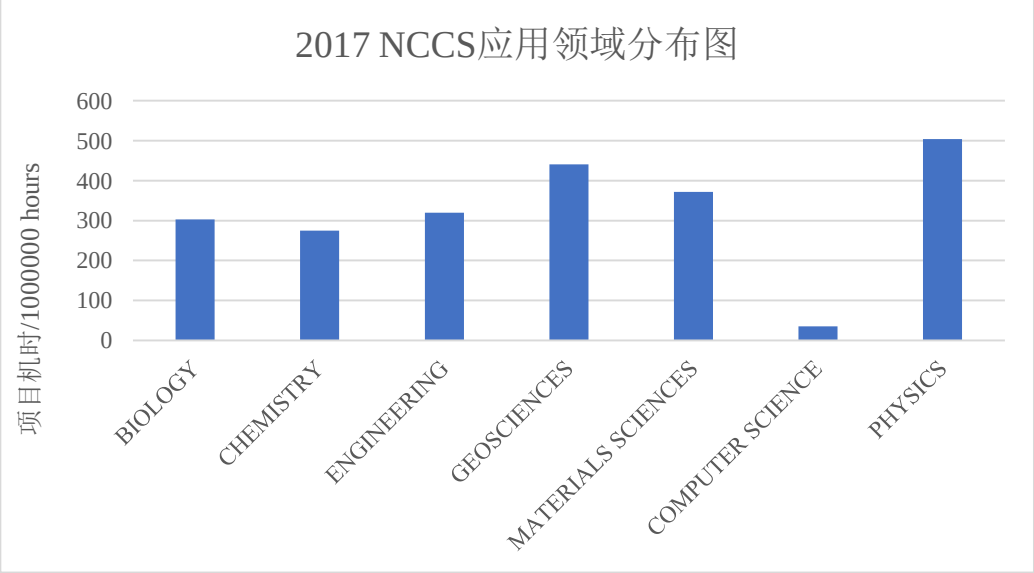


图 139 2017 年美国国家计算科学中心（NCCS）应用领域分布图

（二）美国国家超级计算应用中心（NCSA）

位于美国伊利诺伊大学厄巴纳-香槟分校（UIUC）的美国国家超级计算应用中心（National Center for Supercomputing Applications ，NCSA）其资金投入主要来源于美国国家科学基金会（NSF），伊利诺伊州大学，NIH，NASA，DOE，NOAA 等机构的科研项目支持。

迄今为止，NCSA 通过 NSF、 伊利诺伊州和 UIUC 联合设立的 Blue Waters 项目支持的高性能计算应用涉及了包括空间科学，计算机科学，地球科学，物理学与工程学，生物学，化学与健康，社会科学，经济学和人文科学等多个领域（如图 2 所示）。对伊利诺伊州带来超 10 亿美元的经济影响。2017 年的重点应用成果包括：

1.NCSA（Dark Energy Survey Data Management，DESDM）项目对 2013 年（ Dark Energy

Survey ，DES）宇宙暗物质能量观测数据进行了更准确的处理，并可在线获取；

2.埃克森美孚与 NCSA 合作实现了最大规模的复杂油气储层计算模拟，采用了 716800 处理器的并行模拟，比典型油气油藏的数据输出速度快上千倍；

3.NCSA 先进可视化实验室为 NASA 的 Terra 卫星数据提供可视化展示，使用 Blue Water 超级计算机的数据和快速分析能力，为科学家从太空研究空气污染问题提供数据支持和数据验证；

4.NCSA 从 NSF 的 MRI（Major Research Instrumentation）项目获取超过 270 万美元支持，与 NVIDIA 和 IBM 合作建立深度学习研究机器，为 NCSA 的深度学习社区提供更加深入研究机器学习和数据分析的工具；

5.2017 年 9 月，NCSA 在 NSF 的 400 万美元项目支持下，设立了第一个美国纳米制造计算节点（nanoMFG Node），用于开发纳米制造仿真工具，为纳米制造发展和模式发展的设计，仿真，规划和优化提供支持。

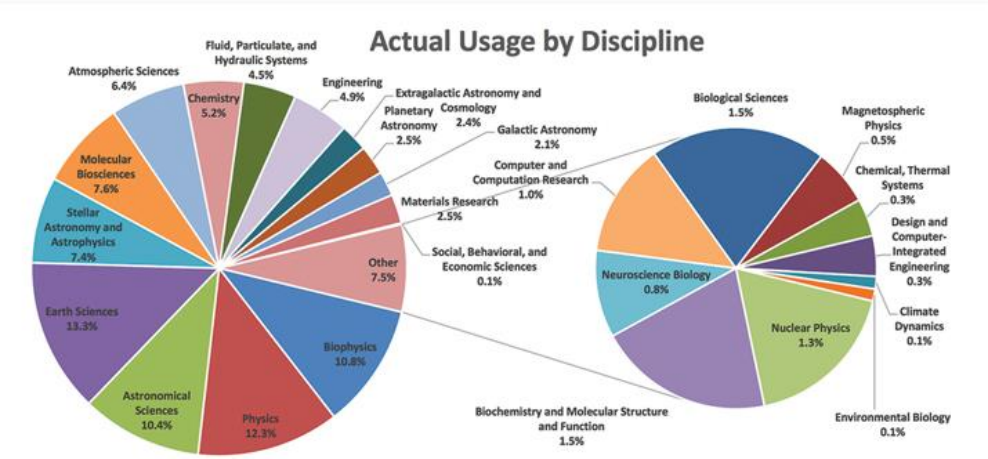


图 140 2016-2017 年美国国家超级计算应用中心（NCSA）应用领域分布图

（三）美国国家能源研究科学计算中心（NERSC）

美国国家能源研究科学计算中心（National Energy Research Scientific Computing Center ，NERSC）于 2016 年部署了 30P 的超级计算机 Cori，在 2017 年 11 月的 TOP500 中排名第 8。2017 年，NERSC 参与美国能源部（DOE）的几个关键项目，如 Exascale Computing Project 和 HPC4Mfg。此外，NERSC 还将与 ALCF 和 OLCF 合作，完成余下的 Exascale 要求审查研讨会。并将在 2020 年推出 NERSC-9 系统，通过加速工作流程性能来满足极限计算和数据用户的需求。

2016 年，NERSC 的高性能计算应用主要面向化学、物理学、计算科学、地球科学、工程学、应用数学、生物科学等领域（如下图）。

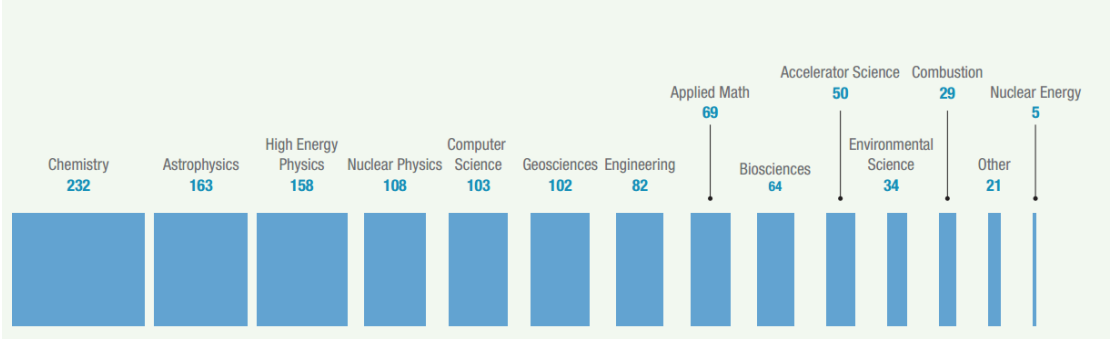


图 141 2016 年美国国家能源研究科学计算中心（NERSC）应用领域分布图

（四）德国于利希超级计算中心（JSC）

德国 Jülich 超级计算中心（JSC）是德国三家高性能计算中心组成的高斯超级计算中心（GCS）的成员。其项目资金主要来源与德国联邦政府、州政府、欧盟的补贴，以及第三方项目资金支持。JSC 为在德国和欧洲的大学、研究机构的科学家和工程师提供计算资源。计算资源将通过建立同行评议程序来分配给德国和欧洲各国的项目。旗下的约翰·冯·诺依曼计算机研究所负责项目的科学评估。

JSC 现有超级计算机包括 JUQUEEN 和 JURECA，其用户分布基本为：JURECA：国际用户 8%，德国用户 44%，于利希研究所用户 48，JUQUEEN：国际用户 2%，于利希研究所用户 27%，GCS 与 Prace Tier-0 用户 71%。

JSC 预计在 2018 年春天将会迎来其继任者，与 Par-Tec 合作部署一台 12 Petaflop 的 Atos 超级计算机。

JSC 的高性能计算应用范围包括：气象学，纳米电子，能源，材料计算，结构化学，医学成像，脑科学，计算机科学等（如下图所示）。2017 年，Jülich 超级计算中心的科学家与武汉大学和格罗宁根大学的研究人员一起，首次成功地模拟了一个具有 46 个量子比特的量子计算机，创造了新的世界纪录。

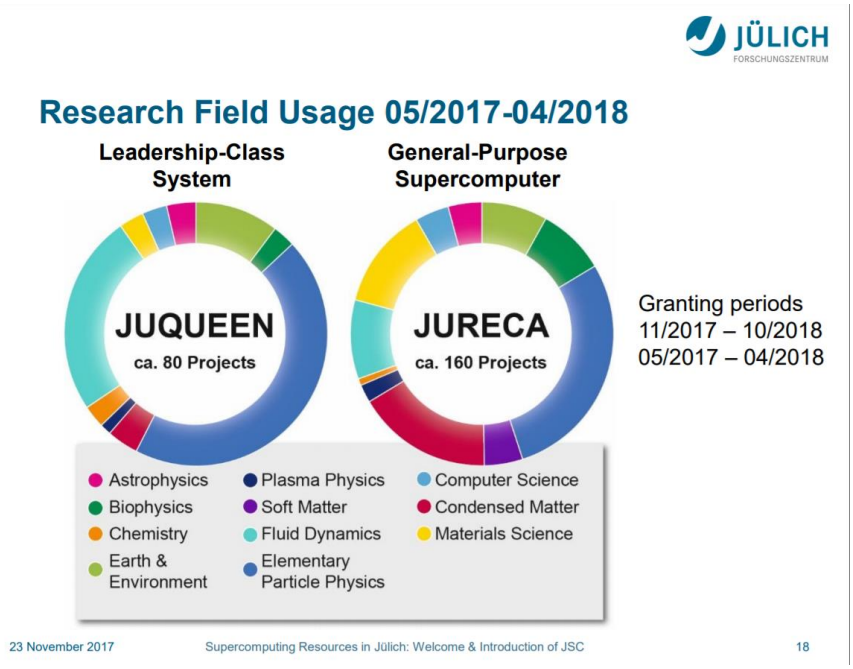


图 142 2017 年 Jülich 超级计算中心应用领域分布图

（五）日本计算与通讯高级中心（ACCC）

日本计算与通讯高级中心（ACCC）为日本理化学研究所（RIKEN）的下属计算部门，拥有目前世界超级计算机 TOP500（2017 年 11 月）排名第 10 的 K 系统，对 RIKEN 的研究人员提供高性能计算资源，以及确保这些资源可以有效运用的技术支持。ACCC 的资金来源主要是日本政府的投入，2012 年从政府获得月 740 亿日元的支持。

ACCC 的高性能计算应用研究包括物理、化学、生物学、工学、医学、生命科学、材料科学、信息科学等领域的基础研究和相关应用开发。据统计，K 系统上的计算应用中，基本粒子和核物理计算，占使用总计算核时数的三分之一，物性物理、生物物理、物理化学、天文领域等利用占用率如下图所示。

后 K 系统将投入 1300 亿日元来支持开发和维护项目，涉及的的应用领域包括分子动力学

/科学、工具库、生物学，精密医学，制药、天气研究与气候、数学数据同化、核物理理论、量子多体问题、汽车空气动力学模拟、电池开发、计算流体动力学、天体物理学，天文学，精密宇宙学、土木工程和社会模拟、计算材料科学、计算分子工程、计算神经科学、优化设计、大规模第一原理计算和中尺度气象研究等。

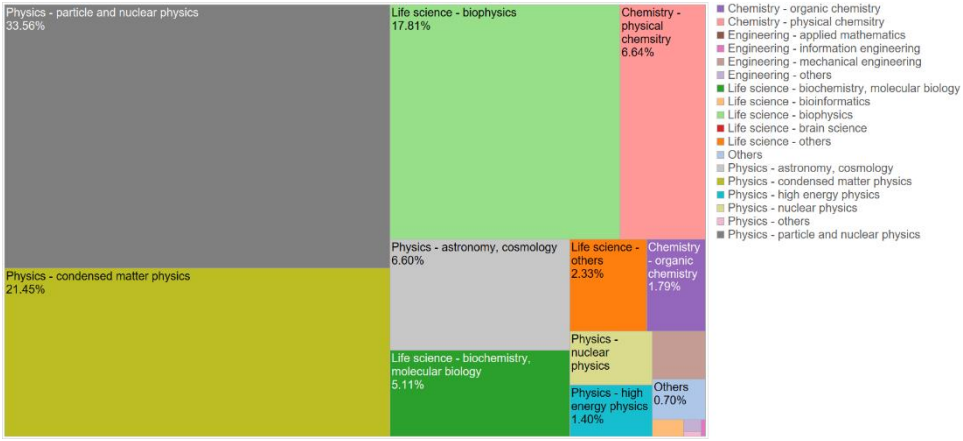


图 143 ACCC 计算机时应用分布情况

第八章 问题与建议

本章立足我国高性能计算环境发展现状，结合前文分析结果，以国内外超级计算发展状况为参照，分析并总结国家高性能计算环境发展过程中存在的问题，并对未来发展提出一些建议。

8.1 发展过程中存在的问题

（1）核心关键技术积累仍然不足

我国已进入千万亿次普及时代，超级计算机连续 10 届问鼎世界 TOP500 排行榜第一，高性能计算应用领域的诺贝尔奖——戈登·贝尔奖也实现了零的突破，这表明了中国人在具有重大挑战的算法与特定应用领域取得突破并非不可能。但是我们要很清楚的认识到，我国在高性能处理器、高速互连、存储器件、并行系统软件和大规模并行算法等方面的基础性研究与欧美日存在较大差距，核心关键技术积累仍然很不足。

（2）随着我国超级计算机的实力加强，高性能计算应用领域与日俱增，但是大多数的应用软件依然来自国外的开源软件或商业软件

根据来自 19 家结点单位采集的数据，无论是科研教育应用软件，还是企业应用软件，或者政府应用软件，国外开源软件数量都是最多的，占比超过 70%。这说明国外开源软件占据了重要地位，这也对我国高性能计算各领域的科学家们提出了更高的要求，国产软件的路程还很长。

（3）我国高性能计算应用集中在传统的科学计算和工程仿真领域，在经济、金融、国家和社会安全领域实际应用偏少

经过 20 多年的发展，我国高性能计算应用主要集中在科学计算和工程仿真领域，大部分用户集中在以研究为主的科研院所。而在美国和欧洲，超级计算已广泛应用于经济模拟、政策仿真和社会管理等领域。这也说明我国高性能计算发展的潜力还很大，任重而道远。

（4）超级计算应用水平的社会效益有待进一步加强

超级计算应用水平评价指数中，社会效益子指数发展最为缓慢，年均增长率不足 4%，主要由于超级计算在为企业节省资金额方面呈下降趋势，在研制周期缩短时间方面增长不明显，在国际领先的应用领域个数方面没有增长。这些都是超级计算应用中较为薄弱的环节，拉低了该指数的增长趋势，需要在今后发展过程中予以重点突破。

（5）目前没有建立高性能计算交叉学科人才梯队培养体系

从高性能计算环境发展水平综合评价指数中发现人员能力分指数增长最慢，年平均增长率相对较低，尚不足 6%，从专职人员、学生培养和国际学术交流三个方面都需要加强。由于高性能计算应用涉及问题模型、离散方法、验证与确认、快速并行算法、并行软件设计、性能优化和可视化等领域科学、计算机科学和数学多位一体的系统性工作，我国目前在本科、硕士和博士方面鲜有交叉学科人才的一体化的培养机制。另外，如何从市场需求出发，通过某种机制吸引更多人才进入高性能计算领域值得探讨。

（6）国家高性能计算环境共享与协作机制尚有待规范和完善

国家高性能计算环境的聚合计算资源超过 200PFlops，总存储资源超过 167PB，总内存资源超过 104TB。但是，由于该环境涉及单位较多，而且都没有上下级关系，如何科学合理的资源调度与分配机制，如何调动各单位参与环境建设与管理以及应用的积极性；另一方面，随着该环境中用户群体的扩容，如何协调、共享计算资源为用户提供高效服务显得尤为重要。因此，环境在高效运行与管理上的机制创新与优化，是发展过程中不可忽视的重要部分。

（7）国家高性能计算环境缺乏可持续发展的机制

国家高性能计算环境缺乏可持续发展的机制，对于可持续发展缺少长远的总体考虑，运行经

费不足，运行单位负担沉重，运行支持和研究开发的队伍不稳定。

8.2 未来发展的一些建议

（1）制定高效能计算机及应用发展的长期战略规划

吸取美国、日本、欧盟等世界发达国家的先进经验，制定我国高效能计算机及应用领域 10-30 年的中长期发展战略规划，争取国家长期稳定的经费支持。

（2）保证国家层面对高性能计算的持续投入

鉴于高性能计算的战略重要性，国家应对该领域持续投入，使我国保持在该领域的优势地位。建议将国家超级计算基础设施纳入到国家重大基础设施给予相对固定的经费支持。

（3）落实促进高性能计算可持续发展的长效机制

通过合理有效的机制，鼓励应用部门、研发部门和地方政府等各方的投入；鼓励高性能计算服务的提供者探索商业运营机制，通过有偿高质量服务，获得辅助性资金来源。

（4）加大高性能计算应用的研发力度，促进我国高性能计算环境均衡发展

切实加大应用系统的研发力度，改变我国大型并行应用软件长期依赖国外的被动局面；应用的研发要有系统性，要从基础数学方法、大规模并行算法、并行编程语言及工具、并行软件开发环境，并行软件的高效执行环境、面向应用的高效能计算机体系结构等多个层面部署研究。

（5）加大对超级计算相关关键技术的研究支持力度

集合产、学、研、用的力量，开展超级计算技术研究，解决阻碍超级计算应用发展的技术难题和瓶颈。E 级机对超级计算技术的发展提出了前所未有的严峻的挑战，如适应于 E 级计算模式的高可扩展并行算法设计、新架构计算环境下应用程序开发与优化、并行自适应技术等。有效地克服这些挑战，才能够带来超级计算应用的深入发展，进而提升超级计算的应用水平。国家应该有效组织和凝聚超级计算领域的专家与技术人才，协作攻关，开展超级计算技术研究，解决阻碍超级计算应用发展的技术难题和瓶颈，以此增强我国超级计算应用的国际竞争力。

（6）加强自主应用软件研发和改善高性能计算软环境

尽管计算能力迅猛发展，但超级计算软环境的改善更值得关注。超级计算机只有通过软件这个载体和工具，执行计算任务得到计算结果，方可体现出其自身价值。而且，应用软件的生命周期一般而言可持续几十年，但一般超级计算机的生命周期仅仅不过五年左右，研制应用软件的重要性和价值由此也可见一斑。

因此，必须加强自主应用软件的研发和改善超级计算软环境，建议率先重点支持一些学科领域和行业的应用软件研发，提高其高性能计算应用水平和能力，以点带面发挥示范作用，逐步地不断改善我国高性能计算软环境，为我国科研创新、为国家经济与社会发展提供强有力的计算技术手段和支撑服务。

（7）加强超级计算相关人才队伍建设，加大超级计算人才培养和储备的力度

一方面，超级计算应用发展涉及多个层面和环节，需要多学科密切协作，学科理论、物理建模、

数值算法、并行软件实现、硬件支撑等等都需要进行专业且深入的研究，这无疑需要加强对超级计算交叉学科人才的培养。另一方面，随着国家高性能计算环境的进一步发展和超级计算系统复杂性的提升，系统维护、服务支撑、技术研发等方面的人才匮乏局面日益显现，这需要加大对超级计算运维与技术服务专业化人才的培养。建议加强我国超级计算相关人才队伍建设，改革创新超级计算等服务支撑人员的聘用、考核体制，以促进我国超级计算的科学发展。

（8）面向云计算、大数据、人工智能等，深入研究，发展适应多种需要的、开放性的国家高性能计算环境

为了使得国家高性能计算环境有进一步的发展，必须朝着开放、适应面更广的方向发展。把握机遇，加快与云计算、大数据及人工智能的融合，发挥超级计算更大价值，为新兴领域提供多样化的高性能计算环境。

参考文献

[1] 国家网格官方网站 http://www.cngrid.org

[2] 中科院计算机网络信息中心 http://www.cnic.cn

[3] 上海超级计算中心 http://www.ssc.net.cn

[4] 国家超级计算天津中心 http://www.nscc-tj.gov.cn

[5] 国家超级计算济南中心 http://www.nsccjn.cn

[6] 国家超级计算深圳中心 http://www.nsccsz.gov.cn

[7] 国家超级计算长沙中心 http://nscc.hnu.edu.cn

[8] 国家超级计算广州中心 http://www.nscc-gz.cn

[9] 国家超级计算无锡中心 http://www.nsccwx.cn

[10] 超级计算创新联盟 http://www.sc-innovation-alliance.cn

[11] NCCS 资料来源于 https://www.olcf.ornl.gov/

[12] NCSA 资料来源于 http://www.ncsa.illinois.edu/news/story/ncsa_releases_2017_blue_waters_project_annual_report_detailing_innovative_r

[13] http://www.ncsa.illinois.edu/news/story/ncsas_2017_year_in_review

[14] NERSC 资料来源于 http://www.nersc.gov/

[15] JSC 资料来源于 http://www.fzjuelich.de/portal/EN/Home/home_node.html;jsessionid=1BBF1C20C810D6465FD6E347C32DFBE3

[16] https://insidehpc.com/2017/11/video-atos-partec-deploy-12-petaflop-supercomputer-julich/

[17] ACCC 资料来源于 http://www.riken.jp http://www.aics.riken.jp

[18] 《国家高性能计算环境及应用调查分析报告（2009 年-2013 年）》

[19] 《中国科学院超级计算发展报告（2011 年—2015 年）》

致　　谢

值此报告内容定稿之际，内心无比感恩，本报告的完成得到了很多领导、专家和老师们的无私帮助与支持。

首先，感家科技部长期以来的大力支持，本报告受益于国家重点研发计划的支持才得以面世。

感谢科技部高技术中心谈儒云高级项目主管、高性能计算专项总体专家组组长钱德沛教授、中科院计算机网络信息中心主任廖方宇研究员，在您们的精心指导与帮助下，本报告内容不断丰富和完善！

衷心感谢为《高性能计算环境发展水平评价体系》付出的 25 位专家顾问，多次现场开会讨论，发表各自的真知灼见，多次邮件往返就指标体系及权重进行沟通，谢谢您们的精益求精、严谨的治学态度，让我等受益匪浅！

特别感谢国家网格 19 家节点单位的领导及老师们对本报告的大力支持！因为时间紧任务重，您们认真、及时、有效地提供了相关数据与材料，为您们要点赞，因为您们本报告内容才得以更加完整和殷实！

特别感谢承担十三五重点研发计划“国家高性能计算环境服务化机制与支撑体系研究”项目的各单位的老师们无私帮助与支持，尤其感谢承担课题 5“超级计算应用综合评价体系建设与研究”的来自中科院计算机网络信息中心王彦棡研究员、中央财经大学胡永宏副教授和学生秦晨、山东大学龚斌教授、上海交通大学韦建文老师和吉林省计算中心孙贺老师！

特别向我国高性能计算环境的各类用户们表示诚挚的敬意！正因为有您们努力耕耘并取得诸多超级计算应用成果，我国高性能计算环境发展才得以成效显著，本报告的数据也才更有说服力。

感谢关心超级计算发展的社会各界同仁！我国超级计算发展所取得的成就，与您们一如既往的支持密不可分。

在这也特别呼吁，希望有更多热爱高性能计算事业的年轻人加入到我们的行列，期待着我们队伍越来越庞大，肩负起新时代国家战略科技力量的历史使命和责任担当，为创新型国家和世界科技强国建设，为实现“两个一百年”奋斗目标，不断做出我们的贡献！

最后，祝愿我国高性能计算环境发展取得更加辉煌的成就！

附　　件

附件 1 报告术语界定与英文缩略词

✧ TOP500 排行榜：是对全球已安装的超级计算机“排座次”的权威排行榜。从 1993 年起，由 TOP500 国际组织以实测计算速度为基准，每半年发布一次。官方网站：http://www.top500.org

✧ Linpack：国际上最流行的用于测试高性能计算机系统浮点性能的 benchmark。通过利用高性能计算机，用高斯消元法求解 N 元一次稠密线性代数方程组的测试，评价高性能计算机的浮点性能。Top500 排行榜就是根据 Linpack 进行排名

✧ TFlops：常用于描述超级计算机的浮点运算速度，1TFlops=1 万亿次浮点操作/秒

✧ PFlops：1PFlops=1000Tflops

✧ E 级：Exa-scale，百亿亿次

✧ TB：计算机中的一种储存单位，1TB=1024GB

✧ PB：计算机中的一种储存单位，1PB=1024TB

✧ GPU：Graphic Processing Unit 的简写，即图形处理器

✧ HPC：High Performance Computing 的简写，即高性能计算

✧ NSFC：National Nature Science Foundation of China 的简写，即国家自然科学基金

✧ 计算账号：超级计算系统使用过程中的一种身份标识，简称账号

✧ 用户：计算账号的申请人或课题组，用户数量等于计算账号数量

✧ 作业：用户提交至高性能计算系统上进行计算的任务

✧ 计算规模：通常指一个作业同时使用的处理器核心的数量

✧ Walltime：计算方法为(作业结束时间-作业开始时间)*占用 CPU 核心数，单位为 CPU 核小时

✧ 机时：即 CPU 核小时，通常指作业运行过程中所消耗的 CPU 时间

附件 2 高性能计算环境发展水平评价指标重要性调查问卷

国家高性能计算环境发展水平
评价指标重要性调查问卷

尊敬的_____专家：

您好！

为了能合理地评价超级计算应用发展状况以及国家高性能计算环境发展水平，特向您征询意见，咨询您对各评价指标权重的看法。请结合您自身的观点完成指标重要性及部分指标临界值调查，您的意见将对高性能计算环境的评价产生重要价值，感谢您的支持与配合！

请您最迟于 **2017 年 7 月 10 日之前**将本调查问卷反馈给我们。如是电子版请直接发送到邮箱 liulp@cnic.cn，如是纸质版请快递如下地址（可到付）：

北京市海淀区中关村南四街 4 号中科院软件园区 2 号楼 刘利萍（收）13701241247

如您在填写过程中，有任何问题、意见及建议，欢迎随时联系我们。

010-58812199/13701241247（刘老师） 或 13521519183（胡老师）

一、超级计算应用指标重要性调查

（一）一级指标重要性调查

在超级计算应用水平评价中，拟从“平台应用能力”、“HPC 应用获奖”、“服务科研项目”、“国家及地方政府投入资金”、“用户发表论文” 、“社会效益”6 个维度进行评价，请您将上述指标按重要性**由高到低**进行排序，并将指标序号填在对应空格中（**1—6 重要性依次递减**），同等重要可用相同序号，下同。

表 1　超级计算应用评价一级指标重要性排序

指标	平台应用能力	HPC 应用获奖	服务科研项目	国家及地方政府投入资金	用户发表论文	社会效益
重要性序号						

（二）二级指标重要性调查

1. 平台应用能力维度

在超级计算应用水平评价中，拟采用“应用最大并行核数”、“科研教育应用软件数”、“企业应用软件数”、“政府应用软件数”、“作业完成情况”5 个指标对平台应用能力进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—5 重要性依次递减)。

表 2 平台应用能力二级指标重要性排序

指标	应用最大并行核数	科研教育应用软件数	企业应用软件数	政府应用软件数	作业完成情况
重要性序号					

2.HPC 应用获奖维度

在超级计算应用水平评价中，拟采用“国家自然科学奖”、“国家科学技术进步奖”、“国家技术发明奖”、“国际奖”、“省部级奖”5 个指标对 HPC 应用获奖状况进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—5 重要性依次递减）。

表 3　HPC 应用获奖二级指标重要性排序

指标	国家自然科学奖	国家科学技术进步奖	国家技术发明奖	国际奖	省部级奖
重要性序号					

3.服务科研项目维度

在超级计算应用水平评价中，拟采用“国家重大项目”、“国家重点研发计划项目”、“国家自然科学基金项目”、“省部级项目”、“其它项目”5 个指标对服务科研项目情况进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—5 重要性依次递减）。

表 4　服务科研项目二级指标重要性排序

指标	国家重大项目	国家重点研发计划项目	国家自然科学基金项目	省部级项目	其它项目
重要性序号					

4. 国家及地方政府投入资金维度

在超级计算应用水平评价中，拟采用“科技部投入资金额”、“国家自然科学基金投入资金额”、“地方政府投入资金额”、“其它投入资金额” 4 个指标对国家及地方政府投入资金情况进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—4 重要性依次递减）。

表 5　国家及地方政府投入资金二级指标重要性排序

指标	科技部投入资金额	国家自然科学基金投入资金额	地方政府投入资金额	其它投入资金额
重要性序号				

5.用户发表论文维度

在超级计算应用水平评价中，拟采用“SCI 及 EI 论文篇数”、“核心期刊论文篇数”、“SC 及 PPoPP 大会录取论文篇数”、“HPCChina 大会录取论文篇数”4 个指标对用户发表论文情况进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—4 重要性依次递减）。

表 6　用户发表论文二级指标重要性排序

指标	SCI 及 EI 论文篇数	核心期刊论文篇数	SC 及 PPoPP 大会录取论文篇数	HPCChina 大会录取论文篇数
重要性序号				

6.社会效益维度

在超级计算应用水平评价中，拟采用“为企业节省资金额”、“研制周期缩短时间”、“国际领先的应用领域个数”、“HPC 科普活动参加人数”、“国内超算大赛

（ASC/PAC/CPC）报名队伍数”、“国际超算大赛获奖情况（ISC/SC）”、“超级计算创新联盟成员单位数量”7 个指标对社会效益情况进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—7 重要性依次递减)。

表 7　社会效益二级指标重要性排序

指标	重要性序号
为企业节省资金额	
研制周期缩短时间	
国际领先的应用领域个数	
HPC 科普活动参加人数	
国内超算大赛（ASC/PAC/CPC）报名队伍数	
国际超算大赛获奖情况（ISC/SC）	
超级计算创新联盟成员单位数量	

（三）三级指标重要性调查

1. 科研教育应用软件数维度

在平台应用能力评价中，拟采用“国外开源软件数”、“国外商业软件数” 、“国产软件数”3 个指标对科研教育应用软件数进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—3 重要性依次递减)。

表 8　科研教育应用软件数三级指标重要性排序

指标	国外开源软件数	国外商业软件数	国产软件数
重要性序号			

2.企业应用软件数维度

在平台应用能力评价中，拟采用“国外开源软件数”、“国外商业软件数” 、“国产软件数”3 个指标对企业应用软件数进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—3 重要性依次递减)。

表 9　企业应用软件数三级指标重要性排序

指标	国外开源软件数	国外商业软件数	国产软件数
重要性序号			

3.政府应用软件数维度

在平台应用能力评价中，拟采用“国外开源软件数”、“国外商业软件数” 、“国产软件数”3 个指标对政府应用软件数进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—3 重要性依次递减)。

表 10　政府应用软件数三级指标重要性排序

指标	国外开源软件数	国外商业软件数	国产软件数
重要性序号			

4.作业完成情况维度

在平台应用能力评价中，拟采用“百核规模”、“千核规模”、“万核规模”、“十万核规模”4 个指标对作业完成情况进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—4 重要性依次递减)。

表 11　作业完成情况三级指标重要性排序

指标	百核规模	千核规模	万核规模	十万核规模
重要性序号				

5.国家自然科学基金项目维度

在服务科研项目评价中，拟采用“重大项目”、“重点项目”、“面上项目”、“青年项目”4 个指标对国家自然科学基金项目进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—4 重要性依次递减)。

表 12　国家自然科学基金项目三级指标重要性排序

指标	重大项目	重点项目	面上项目	青年项目
重要性序号				

（四）特殊指标权重调查

1. 国家自然科学奖维度

在 HPC 应用获奖评价中，拟采用“一等奖数量”、“二等奖数量”两个指标对国家自然科学奖状况进行评价，请您直接填入指标权重，要求权重和为 1，例如（0.7，0.3）。

表 13　国家自然科学奖三级指标权重

指标	一等奖数量	二等奖数量
指标权重		

2. 国家科学技术进步奖维度

在 HPC 应用获奖评价中，拟采用“特等奖数量”、“一等奖数量”、“二等奖数量”3 个指标对国家科学技术进步奖状况进行评价，请您直接填入指标权重，要求权重和为 1，例如（0.5，0.3，0.2）。

表 14　国家科学技术进步奖三级指标权重

指标	特等奖数量	一等奖数量	二等奖数量
指标权重			

3. 国家技术发明奖维度

在 HPC 应用获奖评价中，拟采用 “一等奖数量”、“二等奖数量”两个指标对国家技术发明奖状况进行评价，请您直接填入指标权重，要求权重和为 1。

表 15　国家技术发明奖三级指标权重

指标	一等奖数量	二等奖数量
指标权重		

二、国家高性能计算环境发展指标重要性调查

（一）一级指标重要性调查

在国家高性能计算环境发展水平评价中，拟从“系统能力”、“服务能力”、“人员能力”、“超级计算应用水平”4 个维度进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—4 重要性依次递减)。

表 16　国家高性能计算环境发展一级指标重要性排序

指标	系统能力	服务能力	人员能力	超级计算应用水平
重要性序号				

（二）二级指标重要性调查

1.系统能力维度

在国家高性能计算环境发展水平评价中，拟从“计算”、“存储”、“通信”3 个指标对系统能力进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—3 重要性依次递减)。

表 17　系统能力二级指标重要性排序

指标	计算	存储	通信
重要性序号			

2.服务能力维度

在国家高性能计算环境发展水平评价中，拟采用“网络环境”、“系统在线情况”、“开通用户账号数”、“服务用户单位数”、“用户培训人数” 5 个指标对服务能力进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—5 重要性依次递减)。

表 18　服务能力二级指标重要性排序

指标	网络环境	系统在线情况	开通用户账号数	服务用户单位数	用户培训人数
重要性序号					

3.人员能力水平维度

在国家高性能计算环境发展水平评价中，拟采用“专职人员”、“学生培养”、“国际学术交流”3 个指标对人员能力水平进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—3 重要性依次递减)。

表 19　人员能力二级指标重要性排序

指标	专职人员	学生培养	国际学术交流
重要性序号			

（三）三级指标重要性调查

1.计算维度

在国家高性能计算环境发展水平评价中，拟从“CPU 计算能力”、“协处理器能力”、“内存总容量”3 个指标对计算状况进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—3 重要性依次递减)。

表 20　计算状况三级指标重要性排序

指标	CPU 计算能力	协处理器能力	内存总容量
重要性序号			

2.存储维度

在国家高性能计算环境发展水平评价中，拟采用“在线存储总容量”、“IO 聚合带宽”两个指标对存储状况进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—2 重要性依次递减)。

表 21　存储状况三级指标重要性排序

指标	在线存储总容量	IO 聚合带宽
重要性序号		

3.网络环境维度

在国家高性能计算环境发展水平评价中，拟采用“网络出口带宽”、“网络延迟”、“网络可靠性”3 个指标对网络环境状况进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—3 重要性依次递减)。

表 22　网络环境状况三级指标重要性排序

指标	网络出口带宽	网络延迟	网络可靠性
重要性序号			

4.系统在线情况维度

在国家高性能计算环境发展水平评价中，拟从“登录节点的可访问情况”、“节点处的网格服务器的可访问情况”2 个指标对系统在线情况进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—2 重要性依次递减)。

表 23　系统在线情况三级指标重要性排序

指标	登录节点的 可访问情况	节点处的网格服务器的可访问情况
重要性序号		

5.专职人员维度

在国家高性能计算环境发展水平评价中，拟采用“高级职称所占总职工人数的百分比”、“具有博士学位所占总职工人数的百分比”2 个指标对专职人员状况进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—2 重要性依次递减)。

表 24　专职人员三级指标重要性排序

指标	高级职称所占总职工人数的 百分比	具有博士学位所占总职工人数的 百分比
重要性序号		

6.学生培养维度

在国家高性能计算环境发展水平评价中，拟采用“硕士毕业人数”、“博士毕业人数”2 个指标对学生培养状况进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—2 重要性依次递减)。

表 25　学生培养三级指标重要性排序

指标	硕士毕业人数	博士毕业人数
重要性序号		

7.国际学术交流维度

在国家高性能计算环境发展水平评价中，拟采用“来访总人次”、“出访总人次”、“出访专家报告次数”、“邀请国外专家报告次数”、“举办国际会议次数” 、“国际参展次数”6 个指标对国际学术交流进行评价，请您对以上指标按重要性**由高到低**进行排序，并将排序后指标序号分别填在对应空格中(1—6 重要性依次递减)。

表 26　国际学术交流三级指标重要性排序

指标	来访总	出访总	出访专家	邀请国外专家	举办国际	国际参展

	人次	人次	报告次数	报告次数	会议次数	次数
重要性序号						

三、指标无量纲化临界值调查

说明：指标数据无量纲化是指标合成的前提。无量纲化需要用到各指标的满意值和不允许值。为了超级计算应用发展评价以及国家高性能计算环境发展水平评价过程的顺利进行，请您结合自身看法，分别给出三级指标及部分二级指标在**国家水平**取值的满意值(可以得满分的指标数值)与不允许值(可以得及格分的指标数值)，完成各表。

（一） 超级计算应用水平指标临界值

1.二级指标临界值调查

表 27 超级计算应用二级指标临界值调查表

所属一级指标	指标	单位	满意值	不允许值
平台应用能力	应用最大并行核数	CPU 核		
HPC 应用获奖	国际奖	个		
	省部级奖	个		
服务科研项目	国家重大项目	个		
	国家重点研发计划项目	个		
	省部级项目	个		
	其它项目	个		
国家及地方政府投入资金	科技部投入资金额	万元		
	国家自然科学基金投入资金额	万元		
	地方政府投入资金额	万元		
	其它投入资金额	万元		
用户发表论文	SCI 及 EI 论文篇数	篇		
	核心期刊论文篇数	篇		
	SC、PPoPP 大会录取论文篇数	篇		
	HPCChina 大会录取论文篇数	篇		
社会效益	为企业节省资金额	万元		
	研制周期缩短时间	年		
	国际领先的应用领域个数	个		
	HPC 科普活动参加人数	人次		
	国内超算大赛（ASC/PAC/CPC）报名队伍数	支		

	国际超算大赛获奖情况（ISC/SC）	个		
	超级计算创新联盟成员单位数量	个		

2.三级指标临界值调查表

表 28 超级计算应用三级指标临界值调查表

所属二级指标	指标	单位	满意值	不允许值
科研教育应用软件数	国外开源软件数	个		
	国外商业软件数	个		
	国产软件数	个		
企业应用软件数	国外开源软件数	个		
	国外商业软件数	个		
	国产软件数	个		
政府应用软件数	国外开源软件数	个		
	国外商业软件数	个		
	国产软件数	个		
作业完成情况	百核规模	作业个数*作业平均时长（小时）		
	千核规模	作业个数*作业平均时长（小时）		
	万核规模	作业个数*作业平均时长（小时）		
	十万核规模	作业个数*作业平均时长（小时）		
国家自然科学奖	一等奖数量	个		
	二等奖数量	个		
国家科学技术进步奖	特等奖数量	个		
	一等奖数量	个		
	二等奖数量	个		
国家技术发明奖	一等奖数量	个		
	二等奖数量	个		
国家自然科学基金项目	重大项目	个		
	重点项目	个		
	面上项目	个		

	青年项目	个		

(二) 国家高性能计算环境发展水平指标临界值

1.二级指标临界值调查

表 29 国家高性能计算环境二级指标临界值调查表

所属一级指标	指标	单位	满意值	不允许值
服务能力	开通用户账号数	个		
	服务用户单位数	个		
	用户培训人数	人次		

2.三级指标临界值调查表

表 30 国家高性能计算环境三级指标临界值调查表

所属二级指标	指标	单位	满意值	不允许值
计算	CPU 计算能力	Tflops		
	协处理器能力	Tflops		
	内存总容量	TB		
存储	在线存储总容量	TB		
	IO 聚合带宽	GB/s		
通信	互连通信带宽	GB/s		
网络环境	网络出口带宽	MB		
	网络延迟	ms		
	网络可靠性	百分比		
系统在线情况	登录节点的可访问情况	百分比		
	节点处的网格服务器的可访问情况	百分比		
专职人员	高级职称所占总职工人数的百分比	百分比		
	具有博士学位所占总职工人数的百分比	百分比		
学生培养	硕士毕业人数	人		
	博士毕业人数	人		
国际学术交流	来访总人次	次		
	出访总人次	次		
	出访专家报告次数	次		
	邀请国外专家报告次数	次		
	举办国际会议次数	次		
	国际参展次数	次		

四、国家级别指标数据计算方式调查

说明：结合目前数据现状，可获得的评价指标数据均为各节点单位数据，为

对国家高性能环境整体发展水平进行评价，可对节点单位数据采取**加总求和、取节点水平最大值、节点水平最小值、节点水平平均值、节点水平加权平均**等方式得到国家层面数据以衡量国家整体发展水平。对于明确的可加总指标，本次评价采取加总求和方式进行度量，对部分专业指标，请专家结合专业知识与自身经验，根据指标特点选择出一种衡量国家水平的合适的测度方式，并**在所选方式下划“√”**，若选择方式为加权平均，请写明权重变量；若所列方式均不合适，请在其他方式一栏中填写您认为合适的方法，完成下表，感谢您的配合！

表 31 国家级别指标数据计算方式调查表

所属上级指标	评价指标	单位	取节点单位最大值	取节点单位最小值	取节点单位平均值	取节点单位总和	取节点单位加权平均	其他方式请说明
平台应用能力	应用最大并行核数	CPU 核						
应用软件数	开源软件数	个						
	国产软件数	个						
	商业软件数	个						
作业完成情况	百核规模	作业个数*作业平均时长						
	千核规模	作业个数*作业平均时长						
	万核规模	作业个数*作业平均时长						
	十万核规模	作业个数*作业平均时长						
社会效益	研制周期缩短时间	年						
计算	CPU 计算能力	Tflops						
	协处理器能力	Tflops						
	内存总容量	TB						
存储	在线存储总容量	TB						
	IO 聚合带宽	GB/s						
通信	互连通信带宽	GB/s						
网络环境	网络出口带宽	MB						
	网络延迟	ms						
	网络可靠性	百分比						
系统在线情况	登录节点的可访问情况	百分比						
	节点处的网格服务器的可访问情况	百分比						

本次调查到此结束，感谢您在百忙之中抽出时间积极配合国家高性能计算环

境发展水平评价指标重要性及临界值调查工作的进行，谢谢您的积极参与，祝您生活愉快！

问卷填写人：_____

填写人单位：_____