

中国科学院超级计算发展报告

(2011 年—2015 年)

《中国科学院超级计算发展报告》编写组

二〇一六年四月

《中国科学院超级计算发展报告》参与单位

总中心（1家）

中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心

分中心（9家）

中国科学院合肥物质科学研究院（合肥节点之一）

中国科学技术大学（合肥节点之一）

中国科学院海洋研究所（青岛）

中国科学院昆明植物研究所（昆明）

中国科学院深圳先进技术研究院（深圳）

中国科学院寒区旱区环境与工程研究所（兰州）

中国科学院大连化学物理研究所（大连）

中国科学院金属研究所（沈阳）

中国科学院水生生物研究所（武汉）

中国科学院广州生物医药与健康研究院（广州）

GPU单位（6家）

中国科学院过程工程研究所

中国科学院近代物理研究所

中国科学院国家天文台

中国科学院电工研究所

中国科学技术大学

中国科学院地质与地球物理研究所

所级中心（19家）

中国科学院力学研究所

中国科学院北京基因组研究所

中国科学院紫金山天文台

中国科学院高能物理研究所

中国科学院上海天文台

中国科学院上海药物研究所

中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所

中国科学院山西煤炭化学研究所

中国科学院福建物质结构研究所

中国科学院微生物研究所

中国科学院新疆生态与地理研究所

中国科学院数学与系统科学研究院

中国科学院空间科学与应用研究中心

中国科学院青藏高原研究所

中国科学院生物物理研究所

中国科学院大气物理研究所

中国科学院遥感应用研究所

中国科学院重庆绿色智能技术研究所

中国科学院理论物理研究所

注目前院超级计算环境中包括总中心、9家分中心、19家所级中心和11家GPU单位。GPU单位除已列出的6家外还包括总中心、2家分中心（深圳和沈阳）和2家所级中心（高能物理所和紫金山天文台）。

《中国科学院超级计算发展报告》专家顾问

(按姓氏拼音首字母顺序)

陈润生	陈明奇	戴博伟	冯珑珑
桂文庄	黄向阳	胡永宏	黎建辉
李 隽	廖方宇	钱德沛	石耀霖
王鼎盛	王 斌	谢向辉	徐东生
袁国兴	尉迟坚	阎保平	张林波

《中国科学院超级计算发展报告》编写组

(按姓氏拼音首字母顺序)

组长：迟学斌

副组长：陆忠华

统稿：陆忠华 刘利萍

报告撰写：高阳 顾蓓蓓 和荣 金钟 刘利萍 卢莎莎 王彦桐
武虹 赵毅

数据分析：邓笋根 刘利萍

封面设计：赵青

报告摘要

本报告概要介绍了中国科学院“十二五”超级计算发展状况；介绍了部分典型超级计算应用成果；分析了超级计算的价值和相关研究开展情况；基于超级计算发展指数对全院超级计算发展状况进行了量化分析；总结分析了中国科学院超级计算发展过程中存在的问题，并针对性地提出了一些建议。

中国科学院超级计算发展状况统计结果表明：（1）院超级计算环境是由“总中心-9家分中心-19家所级中心及11家GPU中心”三层架构构成的学科与地域分布合理、特色鲜明的分布式网络计算环境，聚合CPU计算能力逾1300万亿次、GPU计算能力近3000万亿次，环境运行稳定状况良好，提供了87个并行计算应用，累计提交有效网格作业逾55万个，累计使用机时超过1.2亿CPU小时；（2）拥有各类用户近千名，应用领域涉及数学、物理、化学、材料、天文、地球科学、信息科学、生命科学、航空航天、能源与工业等，取得了一批重要的应用成果，科研成果的社会效益和行业影响力获得较高评价；（3）在院“十二五”重点应用项目的支持下，在宇宙探索、能源与新材料发现和工程计算等科学研究领域产生了三个十万核级以及十余个万核级的CPU重点应用，并在大规模GPU并行应用领域深入发展，院超级计算环境已经为科学研究和工业制造提供了有力的计算支撑；（4）“十二五”期间中国科学院超级计算环境用户发表各类论文共2724篇，其中SCI论文占比为85.52%；（5）整体环境中机时占比较高的作业计算规模集中在17~256CPU核。

中国科学院超级计算发展指数（CAS SCDI）研究表明：（1）“十二五”期间院超级计算发展指数稳步增长，从292.86点增长到453.03点，2006-2015年平均增长率超过31%；（2）2015年度用户直接科研产出分指数对总指数增长的贡献最高，超过55%，分析其主要原因，一是2015年度用户的科研成果产出增幅显著，二是用户发表论文数大幅增加；其次环境建设分指数对总指数增长的贡献也比较高，这归功于中国科学院对超级计算基础设施的持续支持，总中心引进新一代超级计算机“元”，新增广州分中心，并扩增合肥分中心中国科学技术大学节点；（3）“十二五”期间硕/博士研究生毕业人数为2503人，高性能计算培训人数近6000人次。与“十一五”相比，无论是高性能计算培训人数，还是硕/博士研究生毕业人数都大幅度增长，尤其是高性能计算培训人数增长超过10倍，这反映出我院近年来对超级计算相关研究和应用技术人才的需求旺盛。（4）环境建设对于用户直接科研产出、人才培养及收入具有非常显著的推动作用，说明稳定持续的环境建设是院超级计算发展的根基所在。

回望整个“十二五”期间，我院超级计算发展成效显著，有力支撑了我院科学计算环境的应用，极大促进了我院科学研究成果的产出，有效巩固了我院HPC应用的引领地位，持续助力了我院HPC的人才队伍建设，显著增强了我院HPC的自主创新能力。但是，在院超级计算的发展过程中也同时存在着一些较为突出问题，比如（1）院超级计算应用水平与世界先进发展水平仍存在差距；（2）院超级计算中心运维经费缺口较大；（3）院超级计算环境应用人才严重不足。

“十三五”期间，建议我院超级计算发展采取如下措施：加大超级计算硬件投入，提高我院超级计算机系统的硬件建设能力；采取措施，有效地促进院超级计算应用的发展；创新运维经费支持的新模式；加强院超级计算交叉学科人才培养，全面支撑院创新科研成果产出。

前言

超级计算机以超高的计算性能广泛应用于核能与新能源、新材料、气象与气候变化、航空航天、新药创制与生物信息、工业仿真计算、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。

中国科学院超级计算中心是推动我国超级计算发展的重要力量，在国内超级计算领域始终发挥着“国家队”和“火车头”的作用。自 2000 年以来，在国家 863 计划和科学院信息化重大专项的大力支持下，我院超级计算发展实现了计算能力由“十亿次”向“千亿次”、“万亿次”、“百万亿次”和“千万亿次”的成功跨越。2000 年，“曙光 2000-II”超级计算机落户中国科学院计算机网络信息中心；2003 年 12 月，我院引进当时位居世界超级计算机 Top500 排名榜第 14 位的联想“深腾 6800”超级计算机；2009 年 4 月，又引进当时在 Top500 排名 19 位的联想“深腾 7000”百万亿次超级计算机；2014 年 6 月正式发布最新一代千万亿次超级计算机系统“元”。目前，已基本建成符合院情的具有“总中心-分中心-所级中心”三层架构、学科与地域分布合理、特色鲜明的院超级计算环境。通过自主研发的网格系统软件 SCE，聚合通用计算能力逾 1300 万亿次、GPU 专用计算能力近 3000 万亿次，应用领域涉及数学、物理、化学、材料、天文、地球科学、信息科学、生命科学、航空航天、能源与工业等。为进一步提升应用水平，“十二五”期间我院设立了 12 个万核级规模的 CPU 重点应用示范项目和 4 个 GPU 重点应用示范项目，采取与用户深度合作开展并行算法研究和并行程序优化的方式，有效带动并实现了千核、万核以上规模的计算应用，产生了三个十万核级以及十余个万核级的 CPU 重点应用，并在大规模 GPU 并行应用中取得长足发展，院超级计算环境已经为科学研究和工业制造提供了有力的计算支撑，显著推进了科学院乃至国内的大规模并行计算发展。中国科学院超级计算中心作为国家网格运行中心和北方主节点，切实担当起了我国高性能计算发展的中坚力量，有效地推动和引领了中国超级计算的发展，加快了我国追赶世界先进高性能计算应用水平国家的脚步。

尽管我院超级计算发展成绩斐然，但与美国、日本、德国等超级计算发达国家相比，无论是在软硬件核心技术、应用软件研发、应用成果产出上，还是在环境运行管理机制与体制、人才培养和储备等方面都存在较大差距。因此，如何更加科学地发展我院超级计算环境，并高效利用该环境服务科学研究、工业制造和商业金融等领域，同时确保其经济和社会效益尽可能最大化，依然是今后我院超级计算发展过程中需要着重研究的课题。

本报告包含综述篇、成果篇和分析篇，总共七章内容，其中前两章为综述篇，中间两章为成果篇，后面三章为分析篇。具体结构安排如下：

第一章 从计算能力的跨越式发展、运维支撑服务团队的日益壮大以及超级计算应用能力和研发水平的逐渐提升等三个方面，系统概述了我院超级计算的发展历程和现状。

第二章 全面描述和分析了我院超级计算环境建设与应用状况，包括三层架构网格环境、各超级计算中心基础设施发展情况、各超级计算系统运行情况、用户特征分析、用户增长情况、应用领域以及计算规模情况等。

第三章 对我院超级计算应用成果进行统计分析，包括直接科研产出、人才培养、成果社会效益与行业影响力用户自评价情况等。

第四章 概要介绍院超级计算环境用户的 12 个典型应用成果，包括物理、化学、材料、天文、地球科学、生命科学、航空航天和工业制造等领域。

第五章 统计分析了用户关于超级计算价值的评价和开展超级计算相关研究的情况，主要包括用户基本使用情况统计、用户开展超级计算相关研究情况等。

第六章 分析了院“十二五”期间的超级计算发展指数走势。

第七章 立足院超级计算发展现状，结合前文分析结果，以国内外超级计算发展状况为参照，总结和分析了院超级计算发展过程中存在的问题，并针对性地提出了一些今后可持续发展的合理化建议。

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

目录

综述篇.....	1
第一章 院超级计算发展概述.....	3
1.1 十年一剑，三层架构网格环境显成效.....	3
1.2 薪火相传，运维支撑服务团队渐强大.....	4
1.3 携手同行，超级计算应用研发水平获较大提升.....	4
第二章 院超级计算环境建设与应用状况.....	5
2.1 三层架构网格环境.....	5
2.2 各超级计算中心基础设施发展状况.....	9
2.3 各超级计算中心系统运行情况.....	19
2.4 用户及其应用特征分析.....	26
2.5 小结.....	32
成果篇.....	33
第三章 院超级计算应用成果统计分析.....	35
3.1 用户直接科研产出情况.....	35
3.2 超级计算人才培养情况.....	37
3.3 小结.....	38
第四章 院超级计算典型应用成果.....	39
4.1 全球涡分辨率海洋环流模式研发和应用.....	39
4.2 针对使役性能的钛合金组织优化模拟.....	39
4.3 基于 CPU 蛋白质精确模拟大规模并行应用软件开发.....	40
4.4 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.....	41
4.5 基于多网格谱元法的深部资源探测大规模模拟软件研究.....	42
4.6 分子/集团统计热力学方法的并行软件研发及应用.....	42
4.7 面向航空航天的十万核级计算流体力学软件开发及应用.....	43
4.8 基于 GPU 面向 III-V 族半导体材料研究的应用软件开发.....	44
4.9 基于 GPU 的颗粒流软件研发.....	45
4.10 GPU 加速的第一性原理输运计算.....	45
4.11 连续-离散方法模拟多相流动的大规模 GPU 并行计算软件开发.....	46
4.12 地球系统模式输出数据可视化.....	47
4.13 小结.....	48
分析篇.....	49
第五章 院超级计算价值评价与研究状况.....	51
5.1 用户基本使用情况.....	51
5.2 超级计算价值评价情况.....	54
5.3 用户开展超级计算相关研究情况.....	54
5.4 小结.....	55
第六章 院超级计算发展指数.....	57

6.1“十二五”超级计算发展指数.....	57
6.2 分中心超级计算发展指数.....	59
第七章 问题与建议.....	61
7.1 院超级计算发展过程中存在的问题.....	61
7.2 对院超级计算未来发展的一些建议.....	62
参考文献.....	65
致谢.....	67
附件.....	69
附件 1 报告术语界定与英文缩略词.....	71
附件 2 院超级计算用户应用成果收集.....	72
2.1 收集对象.....	72
2.2 收集内容.....	72
2.3 收集方法.....	72
2.4 收集情况.....	72

综述篇

第一章 院超级计算发展概述

1.1 十年一剑，三层架构网格环境显成效

“十二五”期间，院信息化专项重点布局了“面向云服务的超级计算环境建设与应用”的建设任务，旨在优化完善网格环境、提供云计算服务、带动全院超算发展、适度提升能力等，并实现超级计算的稳定可持续发展。在建期间，实现了院超级计算环境用户使用模式的转变，同时，在业界以及国内外推广方面取得了显著成效。

促进传统超级计算服务向“云服务”模式转变：随着应用学科对超级计算的需求日趋强烈，越来越多的领域科学家开始抛弃传统的命令行终端使用界面，开始尝试使用具有领域特色的应用社区。同时，移动互联网的迅猛发展，也在逐渐改变科学家们的工作习惯。“十二五”期间，院超级计算总中心成功开发完成了科学计算“云服务”开发接口 SCEAPI 2.0 版，旨在把与计算相关的操作以“云服务”接口的形式提供给第三方，从而高效、便捷地开发科学计算应用社区以及提供 SaaS 软件服务。目前，SCEAPI 已利用全新的云服务模式，成功地应用在包括“气候变化背景下人类适应方式”以及“干细胞与再生医学研究”两个院 A 类先导专项、973 “（微）重力影响细胞生命活动的力学-生物学耦合规律研究”等众多重大课题中，并已成功推广到国内多家重点高校，如用于四川大学的燃烧动力学计算平台建设等。

在院内及国内的应用推广成效显著：目前，院超级计算环境的 9 家分中心中 7 家使用率超 50%。2014 年 12 月 8 日，院超级计算总中心千万亿次超级计算机“元”一期系统正式全面对外提供服务，2015 年年底完成“元”二期系统建设。伴随“元”系统的加入，将使院超级计算服务能力再上一个新台阶。同时，院超级计算环境的成果已成功推广使用到中国国家网格环境，并用于建设新药创制、文化创意、工业创新三大应用社区以及国家网格服务环境示范专网等的建设。

引起业界和国际同行的广泛关注：2011 年，北京市公安局刑侦总队通过院超级计算环境利用总中心和青岛、沈阳等超级计算分中心的资源，完成作业上千个，圆满完成了为期两个月的“指纹破案会战”工作的全部目标，共侦破案件近千起，其中含 B 级协查（公安部发出的、全国范围内、涉及跨省案件的通缉令）4 起，这种合作得到了公安部的充分肯定。2012 年，浪潮集团有限公司在商务部援建苏丹非洲科技城（ACT）项目中，通过自主研发的网格中间件建设苏丹国家高性能计算网格环境，这也是国产网格软件首次实现走出国门的技术输出。2015 年，欧洲 ATLAS 实验组与院超级计算总中心合作，超级计算云服务通过调度国家超级计算中心资源与 ATLAS 实验组展开密切合作，这标志着三层架构网格环境的建设成果正全面走向更大的国际化舞台。

1.2 薪火相传，运维支撑服务团队渐强大

发展是硬道理，人才更是关键。中国科学院超级计算中心科学制定人才发展战略，合理布局人才队伍结构，将自身培养和外部引进两种方式有机结合，不断壮大院超级计算系统的运行维护、技术支持和用户服务队伍，在人才建设层面有力地保障了面向全院提供高质量、高水平的计算服务。同时，为提高分中心运维水平，总中心采用集中培训、现场培训等多种方式，专门针对分中心运维人员开展培训，取得了良好的效果。薪火相传，院超级计算运维支持服务队伍逐渐壮大，为院网格环境的稳定运行和用户并行应用的有效实施提供了有力保障。

1.3 携手同行，超级计算应用研发水平获较大提升

伴随着我院超级计算环境计算资源的不断增多和计算能力的快速提升，尤其是“千万亿次”计算时代的到来，用户在科研活动中对实现大规模应用的需求日益强烈。然而，扩大计算规模绝非是简单地使用更多的处理器核来执行原有的并行应用程序。随着计算规模的扩大和使用的处理器核数的增加，并行程序一般存在通讯及内存需求增大、负载不均匀、可扩展性差和并行效率低等问题，这需要结合系统的体系结构对应用程序进行深度的并行优化，必要时需要根据计算问题的特点设计计算性能更加优良的并行算法。这在客观上要求超级计算中心的技术支持人员需要与用户进行合作，以协助用户扩大并行应用的计算规模，提高用户应用程序的计算效率。

为更好地满足用户在这方面的应用需求，超级计算中心技术支持人员与用户开展了多层次的合作，针对用户研究的科学计算问题和并行计算方法进行深入的研究，协助用户进行应用程序的并行优化和大规模计算实现。截至目前，在院超级计算总中心已有 3 个应用实现了十万核以上计算规模，6 个应用实现了万核以上计算规模。与此同时，超级计算总中心还注重加强国际交流合作，致力于提升超级计算应用研发水平。2014 年成功申请到中国首个且亚洲唯一一个英特尔计算中心 IPCC 项目，该项目将在场论（fEIF）和粗粒化分子模拟（DPD）两个方面开展基于 MIC 大规模并行研究，预期实现超过 30% 的并行效率和 1.8 倍的加速，达到国际领先水平。2015 年超级计算总中心与 ATLAS 实验室合作研发，通过高能物理领域云向超级计算机“元”提交第一个物理模拟作业并成功运行，这标志着高能物理领域云具备了利用中国超级计算机的能力，也是全球首个网格计算、云计算和超级计算整合的成功案例。

第二章 院超级计算环境建设与应用状况

我院目前已基本建成具有“总中心-分中心-所级中心”三层结构的院超级计算环境，聚合了逾千万亿次的计算能力。各超级计算资源拥有单位均已建立了面向相关领域的超级计算系统运维与应用支持队伍，形成了较完备的超级计算环境技术服务体系。

2.1 三层架构网格环境

2.1.1 环境建设

院超级计算环境建设是按照“优化布局，整合资源，强化服务，推动应用”的原则和思路开展的，目前已形成由总中心、9家分中心、19家所级中心组成的三层架构式超级计算网格环境，聚合了超过1300万亿次的CPU通用计算能力。同时，该环境还接入了院内11家单位的GPU计算集群，聚合GPU计算能力近3000万亿次。院超级计算网格环境部署情况参见下表。

表 2.1 院超级计算网格环境部署情况

序号	总中心
1	北京总中心（中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心）
序号	分中心（按接入顺序）
1	合肥分中心（中国科学院合肥物质科学研究院、中国科学技术大学）
2	青岛分中心（中国科学院海洋研究所）
3	昆明分中心（中国科学院昆明植物所）
4	深圳分中心（中国科学院深圳先进技术研究院）
5	兰州分中心（中国科学院寒区旱区环境与工程研究所）
6	大连分中心（中国科学院大连化学物理研究所）
7	沈阳分中心（中国科学院金属研究所）
8	武汉分中心（中国科学院水生生物研究所）
9	广州分中心（广州生物医药与健康研究院）
序号	所级中心（按接入顺序）
1	中国科学院力学研究所
2	中国科学院北京基因组研究所
3	中国科学院紫金山天文台

第二章 院超级计算环境建设与应用状况

4	中国科学院高能物理研究所
5	中国科学院上海药物研究所
6	中国科学院上海天文台
7	中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所
8	中国科学院山西煤炭化学研究所
9	中国科学院福建物质结构研究所
10	中国科学院微生物研究所
11	中国科学院新疆生态与地理研究所
12	中国科学院数学与系统科学研究院
13	中国科学院空间科学与应用研究中心
14	中国科学院青藏高原研究所
15	中国科学院生物物理研究所
16	中国科学院大气物理研究所
17	中国科学院遥感应用研究所
18	中国科学院重庆绿色智能技术研究所
19	中国科学院理论物理研究所
序号	GPU 单位
1	中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心（总中心）
2	中国科学院深圳先进技术研究院（深圳分中心）
3	中国科学院金属研究所（沈阳分中心）
4	中国科学院高能物理研究所（所级中心）
5	中国科学院紫金山天文台（所级中心）
6	中国科学院过程工程研究所
7	中国科学院近代物理研究所
8	中国科学院国家天文台
9	中国科学院电工研究所
10	中国科学院地质与地球物理研究所
11	中国科学技术大学（合肥分中心）

2.1.2 环境运行

2011年至2015年分中心年度系统平均利用率如图所示。青岛分中心2011年-2013年平均利用率在70%-85%之间，2014年-2015年平均利用率在65%左右；兰州分中心2011年平均利用率超过70%，2012年-2015年平均利用率在55%左右；合肥分中心2011年-2015年平均利用率在70%-85%之间；昆明分中心2011年-2013年平均利用率在46%-60%之间，2014年-2015年平均利用率在70%左右；大连分中心2011年-2012年平均利用率超过75%，2013年-2014年平均利用率在60%左右，2015年因盘阵故障影响利用率下降到40%；沈阳分中心2011年-2014年平均利用率在43%-60%之间，2015年因集群GPU部分存储硬盘损坏影响利用率下降至30%；武汉分中心2015年平均利用率65%，2014年因文件系统故障影响利用率略有下降，2012年-2013年平均利用率在60%左右；深圳分中心连续五年平均利用率在43%左右，2015年自8月因文件系统故障暂停服务。

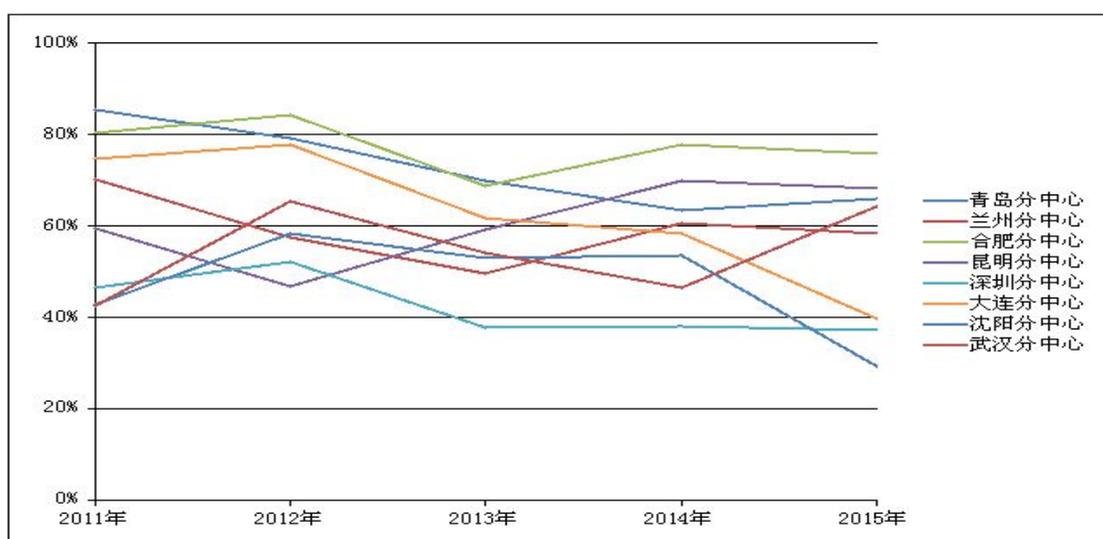


图 2.1 分中心 2011-2015 年度系统平均利用率

新建分中心2015年开始建设并于7月完成验收，从2015年5月份开始总中心通过监控系统自动获取统计数据。新建分中心2015年系统利用率如图所示。合肥分中心（中国科学技术大学）各月平均利用率在80%；广州分中心各月平均利用率为27%。

第二章 院超级计算环境建设与应用状况

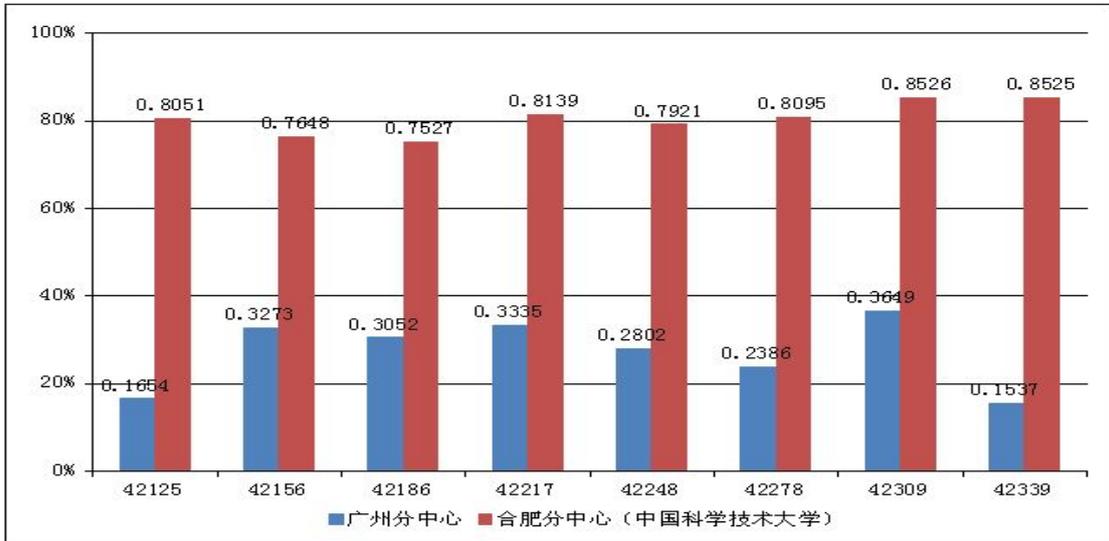


图 2.2 新建分中心 2015 年系统利用率

2011 年至 2015 年所级中心年度系统平均利用率如图所示。其中，重庆智能所自 2014 年 6 月份调整集群后开始统计利用率；遥感地球所 2013 年 1 月-2014 年 7 月因空调故障未统计利用率，2014 年 7 月集群恢复后开始统计利用率；上海药物所接入集群于 2012 年报废，故 2012 年以来无统计数据；福建物构所暂时没有计算资源接入院超级计算环境，故无统计数据。

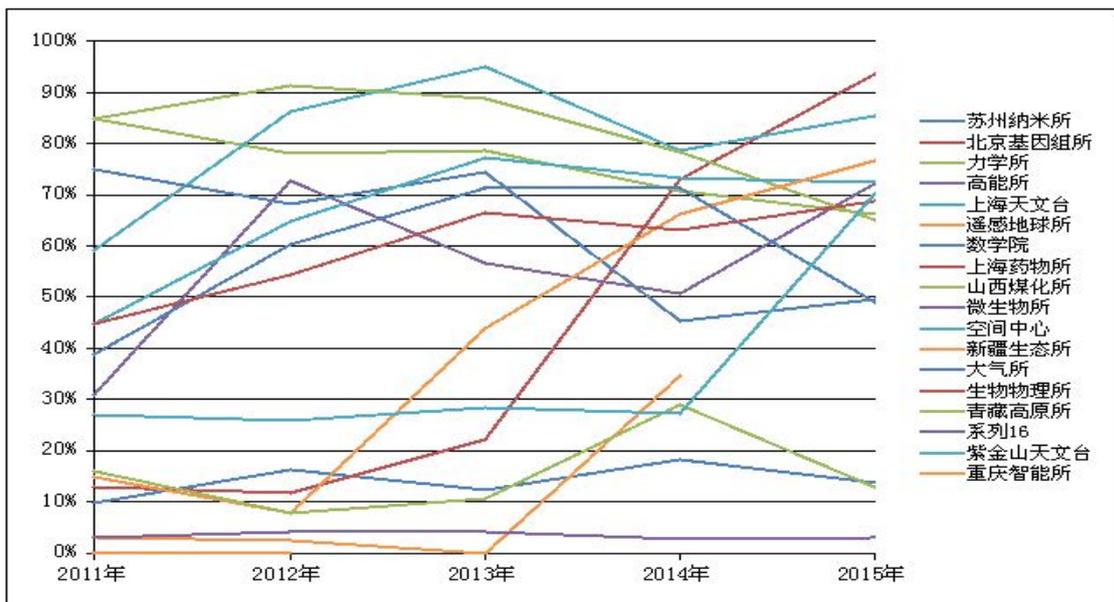


图 2.3 所级中心 2011-2015 年度系统平均利用率

2.1.3 环境应用

截至 2015 年 12 月，院超级计算环境已经面向用户提供了计算物理、计算化学、材料科学、生命科学、流体力学、工程计算等多个领域的 87 个并行应用，累计开通外部账号 498 个，累计提交有效网格作业逾 55 万个，累计使用机时已超过 1.2 亿 CPU 小时（Walltime）。

2.2 各超级计算中心基础设施发展状况

2.2.1 硬件环境

(1) 总中心

院超级计算总中心的硬件环境参见表 2.2。

表 2.2 院超级计算总中心硬件环境

超级计算系统	计算能力	内存容量	存储空间	互连网络	备注
联想深腾 7000 超级计算机（已关机，资产调拨中）	共 152 万亿次，143 万亿次用于计算服务，其它用于管理、IO 等	66TB	1410TB	千兆以太网+InfiniBand 网络	异构高性能计算集群架构，由采用 Intel Xeon 处理器的集群部分与采用 Intel Itanium2 处理器的胖节点部分组成
联想 7000G GPU 计算系统	200 万亿次	720GB	10TB	千兆以太网+InfiniBand 网络	GPU 型号：NVIDIA Tesla C1060/S1070
曙光 GPU 计算系统（已报废）	100 万亿次	336GB	20TB	千兆以太网+InfiniBand 网络	GPU 型号：ATI HD 4870x2
元超级计算机	全部建成总计算能力 2.3Pflops，其中 CPU 计算能力 700Tflops，GPU 和 MIC 计算能力共 1.6Pflops，目前一期部分总计算能力 303.4Tflops，CPU 计算能力 152.32Tflops，MIC 和 GPU 共 151.08Tflops	140TB	6PB	千兆以太网+InfiniBand 网络	总中心新一代超级计算机系统采用混合架构，支持异构计算，分三期建设，一期已于 2014 年年底投入使用，二期已于 2015 年 3 月投入试运行，三期预计 2015 年年底安装

第二章 院超级计算环境建设与应用状况

(2) 分中心

截止 2015 年年底，院超级计算环境 9 家分中心的计算资源参见表 2.3。

表 2.3 分中心硬件环境

超级计算分中心	承担单位	特色应用方向	主要计算资源
兰州分中心	寒区旱区环境与工程研究所	地学、生态学研究	10 万亿次，40TB 存储
青岛分中心	海洋研究所	海洋科学、生物能源与过程研究	10 万亿次，100TB 存储
合肥分中心	合肥物质科学研究院；中国科学技术大学	物质科学计算	10.7 万亿次，24TB 存储； 105.6 万亿次，68TB 存储
昆明分中心	昆明植物研究所	生物学、天然药物化学计算领域	10.9 万亿次，100TB 存储
深圳分中心	深圳先进技术研究院	工业计算、云计算	10 万亿次、150TB 存储
大连分中心	大连化学物理研究所	计算化学	11.6 万亿次，30TB 存储
武汉分中心	水生生物研究所	生物信息学等	10 万亿次，100TB 存储
沈阳分中心	金属研究所	计算材料	10 万亿次，30TB 存储
广州分中心	广州生物医药与健康院	干细胞与再生医学、创新药物设计等	50 万亿次，77TB 存储

2.2.2 软件环境

(1) 总中心

院超级计算总中心的商业应用软件参见表 2.4，开源软件参见表 2.5，自主研发的软件参见表 2.6，以及“元”系统应用软件参见表 2.7。

表 2.4 总中心公用商业应用软件一览表（深腾 7000）

序号	软件名称	说明
1	TotalView	图形化的源代码检测分析工具，可以提供给用户进程和线程级别的控制以及对程序状态和变量的可视化
2	ParaWise	一种半自动的程序并行化工具，它分析串行程序，通过用户交互式的操作可以生成包含 MPI 或者 OpenMP 调用的程序
3	PGI Compiler	PGI 的并行化 F77, F95, HPF, C 和 C++编译器的 linux 版本
4	Intel C/C++ Compiler	Intel C/C++编译器的 Linux 版本
5	Intel Fortran Compiler	Intel Fortran 编译器的 Linux 版本
6	Intel MKL	Intel 数学核心函数库，是一套针对科学工程计算和金融领域中一些对性能要求很高而开发的高度优化的多线程数学函数库
7	ITAC	用来帮助理解 MPI 程序的行为，快速发现程序的瓶颈从而取得并行程序的高性能
8	VTUNE	用来分析基于 x86 系列处理器的软件性能瓶颈，具有图形和命令行界面
9	Gaussian	功能强大的量子化学综合软件包，是目前应用最广泛的计算化学软件之一。它可以计算分子能量和结构、过渡态能量和结构、键和反应能量、分子轨道、多重矩、原子电荷和电势、振动频率、红外和拉曼光谱、核磁性质、极化率和超极化率、热力学性质、反应路径。计算既可以对体系的基态或激发态执行，也可以预测周期体系的能量、结构和分子轨道。因此，Gaussian 可以作为功能强大的工具，用于研究许多化学领域的课题，例如取代基的影响，化学反应机理，势能曲面和激发能等等。
10	ADF	ADF 基于密度泛函理论（DFT），主要应用于量子化学计算。广泛应用于医药化学，材料学等研究及应用领域。特别应用于同类和异类催化，无机化学，重元素化学，生物化学及多种光谱学。包括分子 ADF 程序，周期结构程序 BAND（专门用于计算周期性体系，如晶体、聚合物等）和图形用户界面程序 GUI。
11	ANSYS LS-Dyna	计算力学、有限元计算软件
12	LSF	Platform 公司的作业管理系统软件
13	Molpro	一套完整而全面的量子化学计算软件，包括各种进行分子体系电子结构的从头算方法。与其他常用的量化软件有所不同，Molpro 注重电子结构的高精度计算，所使用的方法包括 MRCI、MCSCF、CC、MPn 以及其他相关方法。借助于最新发展的密度拟合技术（Density Fitting），再结合局域相关方法（Local correlation methods），Molpro 可以明显改善计算量对于分子尺度的标度，显著地降低随着分子尺度的增大而增加的计算量，这使得 Molpro 能够对更大的分子体系进行精确的量子化学从头计算。
14	Medea VASP	基于第一性原理软件包 VASP 和蒙特卡罗方法提出的一款专业的材料计算软件，可以对材料的电子性质、磁学性质、光学性质以及热力学性质等进行模拟。具有强大的建模与分析工具，能够对气体、液体的热力学性质进行研究，能够对较大体系进行 NVE、NVT 等系综的分子动力学计算，已应用到材料的吸附、扩散、表面重构、外延生长等的研究中。
15	AVS	可视化处理软件包

第二章 院超级计算环境建设与应用状况

16	IDL/FastDL	大数据集的可视化和分析软件包
17	Tecplot	可视化处理软件包
18	GaussianView	GaussView是Gaussian软件的图形用户界面,用于观察分子,设置和提交Gaussian计算任务,显示结果。它可以简单快速地构造三维分子、设置Gaussian作业计算、显示Gaussian计算结果以及出版质量的输出。
19	Q-Chem	电子结构从头计算化学程序,可以对分子的基态和激发态进行第一原理计算。包含基态自洽场方法、MP2、耦合簇方法以及激发态方法。
20	Spartan	计算化学套软件,它提供图形接口,具有方便操作,容易上手等多项优点,除了提供理论化学家研究之用外,也可帮助实验化学家作计算,藉以辅助其研究。可提供 <i>ab initio</i> Hartree-Fock、MP2、半经验方法、密度泛函、分子立场等多种计算。
21	MATLAB	数值计算软件
22	TurboMole	量子化学计算软件,在标准的量子化学计算(HF, DFT, MP2)中, Turbomole 是最快最稳定的代码之一。它着重解决如何用尽量短的时间和尽量少的内存需求,快速稳定地处理工业应用型的分子。特别是独有的 RI-DFT 方法,可以较其它大多数量子力学程序节省 10 倍的 CPU 时间。由于使用了辅助函数(单位元分解近似,使得 TURBOMOL 非常适合于计算大分子或重复计算中等分子。它支持串行和并行两种计算模式。
23	Wien2K	计算化学/计算材料学软件,用密度泛函理论计算固体的电子结构。它基于键结构计算最准确的方案——完全势(线性)缀加平面波(L)APW + 局域轨道(lo)方法。在密度泛函中可以使用局域(自旋)密度近似(LDA)或广义梯度近似(GGA)。WIEN 2000 使用全电子方案,包含相对论影响。
24	Materials Studio	Materials Studio 是 ACCELRY S 公司专门为材料科学领域研究者所涉及的一款模拟软件。可帮助科学家解决当今化学、材料工业中的一系列重要问题。MS 使化学及材料科学的研究者们能更方便的建立三维分子模型,深入的分析有机、无机晶体、无定形材料以及聚合物。
25	CFX	通用 CFD 软件包,工程计算
26	Fluent	通用 CFD 软件包,工程计算
27	ANSYS Mechanics	结构计算软件包
28	Crystal	研究晶态固体的最流程序之一。它使用 Hartree-Fock, 密度泛函或各种混合近似方法, 计算周期体系的电子结构。周期体系的 Bloch 函数作为原子中心 Gaussian 函数的线性组合展开。程序使用了强大的屏蔽技术研究实空间区域。代码可以用来研究分子, 多聚物, 表面和晶体的物理的、电的和磁的性质, 使用全电子基组或者包含有效核势的价基组进行限制性闭壳层, 限制性开壳层, 或者非限制性计算。
29	Amber	AMBER 分子模拟软件包是加州圣弗兰西斯科大学(University of California San Francisco,UCSF)的 Peter A Kollman 和其同事所编写,用于分子(特别是生物分子)的动力学模拟。功能很全,涵盖种类非常多的生物分子,如蛋白、核算以及药物小分子。它很好地协调工作的各个程序部分一起提供了一个强大的理论框架,用于多种通用计算。
30	NAG	数值计算库
31	Intel Parallel Studio XE	Intel 新并行工具套件

表 2.5 总中心公用开源软件一览表（深腾 7000）

类别	软件名称
基础并行	<ul style="list-style-type: none"> ■ 常用的基础并行库 PETSc、AZTEC、TAO、SUNDIALS、FFTW、LAPACK、ScalLAPACK、PARPACK、DOUG、GotoBlas ■ 自动微分软件包--adic-1.2.0 ■ 线性求解器--aztec ■ 求解稀疏线性系统方程的软件库--BlockSolve95 ■ 图分解软件包--Chao ■ 无结构网格的区域分解黑箱并行有限元求解器--doug ■ 并行代数递归多层解法器--pARMS ■ 稀疏矩阵近似逆软件包--spai ■ 面向对象的稀疏线性等式解析器--spooles ■ 非对称模式多前点库--UMFPACK ■ 其他支持库 boost、AMD、CGAL、glpk、gsl、hdf5、lapackpp、metis、sprng4、UFconfig、elmerfem、SAMRAI、tides 等
计算化学	CPMD、DOCK6、AUTODOCK、TINKER、GAMESS、GROMACS、NAMD、polyrate、Espresso、NWChem、DL_poly、Xian-CI
材料科学	ALCMD、PSSP、PDIP、ABINIT、LAMMPS、multiscatter、OpenMX
生物信息学	NCBI Toolkit、Blast、MPI_Blast、Fasta、ClustalW、Phred-Phrap、VELVET、Blat、Emboss、Wise2、InterProScan、Cm2hmm、MEME、Weeder、Mfold、RNAfold、INFERNAL、InsPecT、Mrbayes、BEAST、Hypype、Newbler
环境科学	MM5、WRF、REGCM3、CCSM3、ECHAM5、CAM3、HYCOM、POP、ROMS、LIS
基础科学	Hoam-OpenCFD、Elmer
可视化	ParaView、GMT、VMD
计算金融	QuantLib

表 2.6 总中心自主研发软件一览表（深腾 7000）

类别	软件名称
网格软件	SCE、SCE Client、SCE Portal
基础并行	HPSEPS、PMDFFT、DFT、ADG
材料科学	Getstructure、MPI-PSSP
生物信息学	MPI_SiClone、Para_AltSplice、Para_MEME、Para_Weeder、P_InsPecT、gpu-InsPecT、MC-InsPecT
环境科学	FGOALS、RIEMS、CUACE/dust、GRAPES、IAP-AGCM、IAP-LICOM
计算化学	GridMol、SCChem、Xian_CI、CCSD-EOM、3D、BDF、HONPAS
可视化	GrADs_Web、LURR_TimeView、LURR_SpaceView、GeoModel、GlobalVis、VAT4M
地球科学	MPI_LURR
电磁学	EMS-FMM

表 2.7 元系统应用软件情况统计

应用领域	付费软件(包括商业软件、付费科研用软件)	免费软件(包括免费的开源与未开源软件)
工具软件	Intel C/C++/Fortran compiler, PGI Compiler, TotalView, Intel MKL, ITAC, VTUNE	GNU Compiler, TCL/TK , cmake, gflags, glog, protobuf, python, qt
基础并行与数值计算	Matlab, IMSL	PETSc, FFTW, LAPACK, ScalLAPACK,acml, boost, gsl, libxc, metis, mumps, atlas, libint, magma, openBLAS
计算化学	Q-Chem, Amber, Molcas, Charmm	CPMD, GAMESS, GROMACS, NAMD, cp2k, EspressoMD, NWChem, DL_poly, Salome, Thermo , Code_Saturne , QuantumEspresso
材料科学		ABINIT, LAMMPS
生物信息学		Blast, MPI_Blast, BEAST, Beagle , Beast , mafft , MrBayes, Phylip, dadi, mcl, MPI-HMMER, PGAP
环境科学		AGCM, WRF, NETCDF, hdf5
计算力学,CAE		PHG, LBS3D, MantevoMiniFE, ProCAST
可视化		ParaView, ffmpeg, pvserver, ImageMagick, opencv, jpeg-6b
智能计算		Caffe

(2) 分中心

院超级计算环境 8 家分中心的软件资源参见表 2.8。

表 2.8 分中心公共应用软件一览表

分中心	商业软件	开源软件	自主研发
合肥	wien2k、VASP、Material Studio、MATLAB、Molpro、ATK、Intel fortran、Intel C++、Intel MPI	lammps、Quantum-Espresso、siesta	ISSP-RadMat
青岛	PGI、Intel C++、Intel Fortran、MATLAB、Amber、Gaussian09、VASP、IDL	ccsm3、fvcom、hycom、pop、ROMS、ECHAM4-iom、CAP3、mpi-blast、glimmer、muscle、phylip、infernal、phyml、interproscan、repeatMasker、mireap、soap、velvet	Fgoals（中国科学院大气物理研究所）、QG（中国科学院海洋研究所）
昆明	Gaussian 03、Paup、Amber（注：版权为用户所有）	dock6、mpi-blast、clustW-mpi、hmmerrmpi、SOAPdenovo、blast/blat	
深圳	PBS Pro、Fluent	Abinit、Blast、Cap3、ClustalW、Games、Gromacs、Lammps、Mm5、Mbdyn、NWChem、NAMD、PETSc	Alphminer
兰州	Ansys、Adina、fluent、Gaussian 09、GAMMA、COMSOL Multiphysics 4.0a	SCE、Gromacs、LAMMPS、Dock、Spatial Modeling Environment、WRF、MM5、netCDF、	
大连	Gaussian 09、Molpro、Vasp、ADF、Amber、薛定谔套件、Material Studio、Discovery Studio、Intel 编译器套件、Chemshell、Turbomole（注：Molpro、VASP、ADF、Chemshell、Turbomole 版权为用户所有）	Games、NWChem、Orca、NAMD、Gromacs、CPMD、Siesta、DL_POLY、Games-plus	NASC ARQD
沈阳	JmatPro、Simufact.forming、Simufact.welding	ABINIT、CPMD、Gromacs	大规模并行分子动力学软件、高效并行三维相场动力学软件
武汉	PGI Fortran、Materials Studio、VASP、GoVASP、Gaussian 09、Gaussview、ADF、AIM2000、Aomix、AIMALL		
广州	Discovery Studio 3.0、Schrodinger、Gaussian	Blast、Fasta、CLUSTAL、HMMER、Bowtie、BEDTool、samtools、tophat、PHYLIP、TreeMap、Phrap、Consed、	

		RepeatMasker、Tandyman、NMRView、RasMol、VMD、Gaussian、Gromacs、Amber、NAMD、SIESTA、SMEAGOL、Materials Studio、Gaussview、MOPAC、Autodock、SHAFT、CCP4、Pheonix、CNS、LICOM、ECOM	
--	--	---	--

2.2.3 系统运维、技术支持与服务团队

(1) 总中心

截至 2015 年底，院超级计算总中心系统运维、技术支持与服务人员共计 49 人，其中高级职称 25 人，拥有博士学位 24 人，具体人员列表参见表 2.9。

(2) 分中心

9 家分中心的超级计算系统运维、技术支持与服务人员共计 47 人，具体见表 2.10。

表 2.9 总中心超级计算系统运维、技术支持与服务人员列表

姓名	学历	职称	岗位	姓名	学历	职称	岗位
朱鹏	硕士	高级工程师	系统运维	刘倩	博士	副研究员	计算技术支持
叶焯	博士	副研究员		周纯葆	博士	副研究员	
牛铁	硕士	高级工程师		陈卫	博士	副研究员	
赵毅	硕士	高级工程师		赵地	博士	副研究员	
张炯明	硕士	工程师		王武	博士	副研究员	
肖海力	硕士	高级工程师	网格技术支持	单桂华	博士	高级工程师	
王小宁	博士	副研究员		刘俊	硕士	高级工程师	
曹荣强	博士	副研究员		邓笋根	硕士	高级工程师	
赵一宁	博士	助理研究员		袁武	博士	助理研究员	
卢莎莎	硕士	工程师		何莲花	博士	助理研究员	
和荣	硕士	助理工程师		徐顺	博士	助理研究员	
解晓伟	硕士	助理工程师	梁姗	博士	助理研究员		
刘利萍	硕士	工程师	客户服务	胡晓东	硕士	工程师	
赵青	硕士	工程师		张宝花	硕士	工程师	

柴芳姣	硕士	工程师	计算技术支持	田东	硕士	工程师	
赵芸卿	学士	工程师		王杨	硕士	工程师	
赵永华	博士	研究员		高阳	硕士	助理工程师	
金钟	博士	研究员		刘夏真	硕士	助理工程师	
牛北方	博士	研究员		张博尧	硕士	助理工程师	
王彦桐	博士	副研究员		郝卉群	硕士	助理工程师	
张鉴	博士	副研究员		周宣汝	硕士	助理工程师	
姜金荣	博士	副研究员		朱超	硕士	助理工程师	
聂宁明	博士	副研究员					
王珏	博士	副研究员		备注：职称为截至 2015 年底的统计数据。			
冯仰德	博士	副研究员					
刘芳	博士	副研究员					

表 2.10 分中心超级计算系统运维、技术支持与服务人员列表

分中心	姓名	岗位
合肥	曾雉	负责人
	李京	
	刘大勇	系统管理（专职）
	李会民	
	郑小宏	系统管理（兼职）
	杨开帅	
	朱大梅	
青岛	张平	主管
	赵增芳	技术支持（专职）
	霍东明	
	李国民	用户管理等（兼职）

第二章 院超级计算环境建设与应用状况

	梁朋	
	李昂	机房监控（兼职）
昆明	王雨华	负责人
	庄会富	系统管理（专职）
	金涛	
	李拓径	网络管理（兼职）
	刘云龙	应用支持（兼职）
深圳	魏彦杰	主管（专职）
	李佳	运营维护（专职）
	刘清伟	
	孟金涛	软件开发（专职）
	张涌	
	张慧玲	
兰州	张耀南	负责人
	赵国辉	系统管理（专职）
	罗立辉	技术支持（专职）
	何振芳	应用支持（专职）
	冯克庭	运行支持（专职）
	敏玉芳	
	崔丹丹	环境维护（专职）
	杨永如	
大连	周潘旺	网络保障（专职）
	刘建勇	系统管理（兼职）
沈阳	杨锐	负责人（兼职）
	徐东生	技术负责（兼职）

	滕春禹	系统管理（兼职）
	王皞	
	叶荔华	
武汉	曾宏辉	系统管理（专职）
	戴尚真	
	徐丽娟	
	杨连东	软件调优（兼职）
	杜康	
广州	陈朝明	技术负责（专职）
	叶彦波	应用培训（专职）
	钟旭	系统集成（兼职）

2.3 各超级计算中心系统运行情况

2.3.1 系统年（月）度平均整体使用率

（1）总中心

自 2009 年 4 月份，百万亿次超级计算机“深腾 7000”开始投入运行，截至 2014 年 11 月底，深腾 7000 累计为院内外近 500 名用户提供计算机时逾 3 亿 CPU 核小时，支持国家自然科学基金、科技部 863、科技部 973、中国科学院、北京市等科研项目近 400 个，很好地支撑了院内外科学研究工作，取得了包括 IPCC、宇宙演化、药物设计等在内的一系列重要科研成果，培育了一批千核至万核的应用。但随着 IT 技术发展，深腾 7000 因计算性能落后、部件故障频发、效能功耗比低，已不能满足用户科研需求，所以自 2014 年 11 月起，深腾 7000 开始分步关机停止计算服务；截止 2015 年 3 月底，随着用户账号与数据完成迁移，深腾 7000 超级计算机系统也完全关机中止服务。

最新一代超级计算机系统“元”（外观见图 2.4）安装在中国科学院计算机网络信息中心怀柔分中心，用于替换已运行近 6 年的深腾 7000 超级计算系统。“元”超级计算系统采用混合架构，支持异构计算，总计算能力约 2.3Pflops，其中 CPU 通用计算能力 700Tflops，采用 Intel MIC 及 Nvidia GPU 的计算能力共 1.6Pflops。系统内存总量约 140TB，存储总裸容量超过 6PB。“元”超级计算系统由曙光公司研制，分两期建设，一期已于 2014 年 12 月投入运行，二期系统建成后也将陆续对用户开放。

第二章 院超级计算环境建设与应用状况

总中心超级计算机系统年度利用率和月度利用率如图 2.5 和 2.6 所示，年度利用率平均为 71.38%，月度利用率超过 75%及以上占比 33.67%，充分说明了总中心超级计算机系统属于满负荷运行，为支撑院信息化建设发挥了不可替代的作用和贡献。



图 2.4 总中心最新一代超级计算机系统“元”

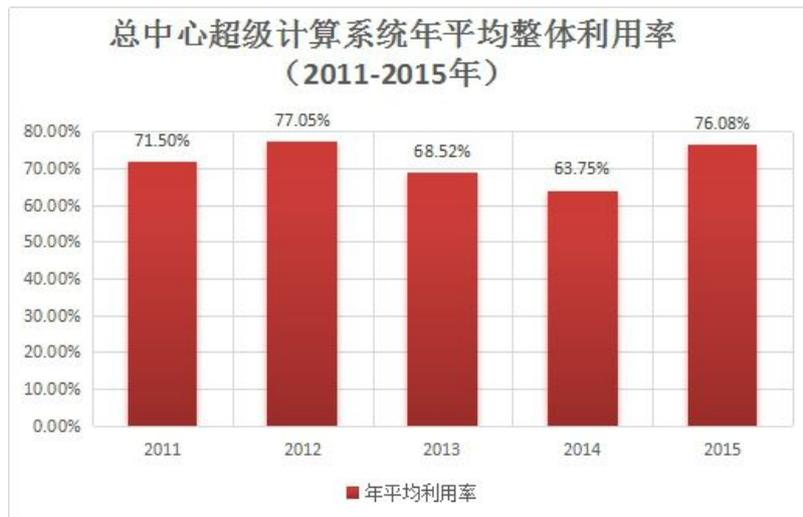


图 2.5 总中心超级计算系统年平均整体利用率（2011-2015 年）

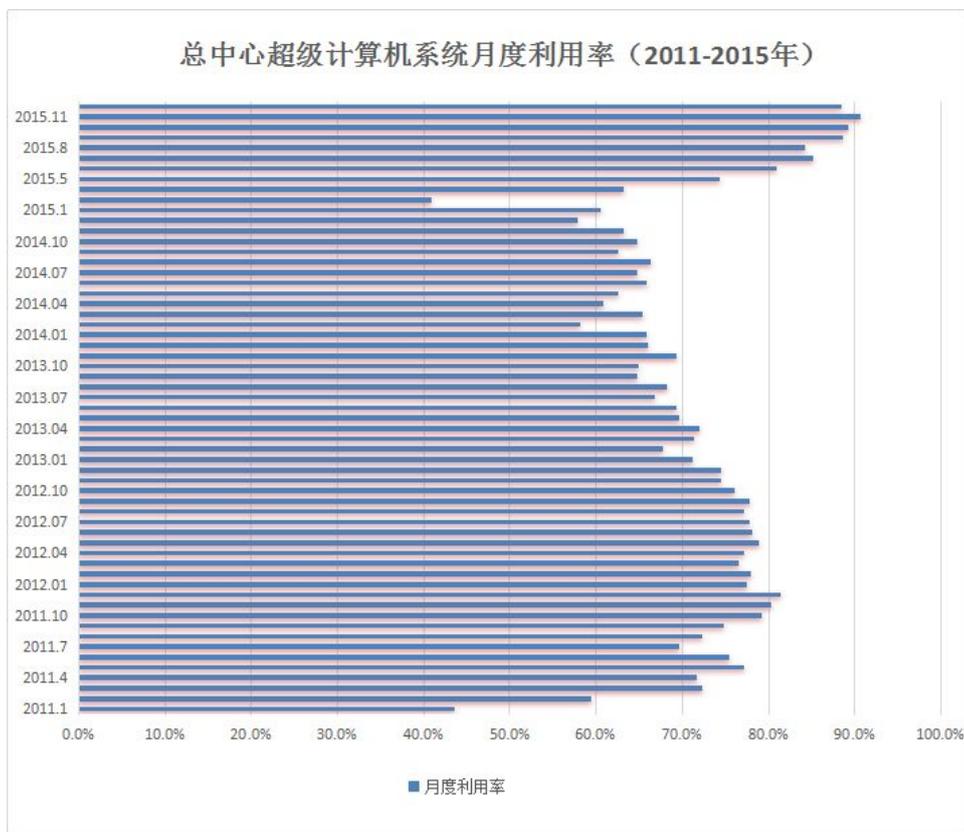


图 2.6 总中心超级计算机系统月平均整体利用率 (2011-2015 年)

(2) 分中心

在 2.1.2 节中已经阐述过，在这就不再赘述了。

2.3.2 按机时统计的各系统作业规模情况

(1) 总中心

2011-2015 年总中心各年份不同计算规模的作业机时量占比情况如图 2.7 所示，其中横坐标为年份，纵坐标为不同计算规模的作业机时量占比。分析该图发现，总中心在“十二五”期间 64~127 CPU 核计算规模机时占比最高，年均占比为 42.57%，比“十一五”期间作业规模提高了两个档次；其次是 2~31 CPU 核计算规模，年均占比为 16.19%；128CPU 核及以上计算规模以上的机时占比超过 31%；这都很好的说明了院超级计算中心发挥了重要的大规模并行计算支撑服务，超级计算机的计算能力对提升作业规模起到了很好的正效应，发挥了水涨船高的促进作用。这也表明，超级计算能力建设需要合理规划布局、分阶段扩容，才能够满足用户动态的应用需求，形成计算能力与学科领域应用协调、良性发展局面。

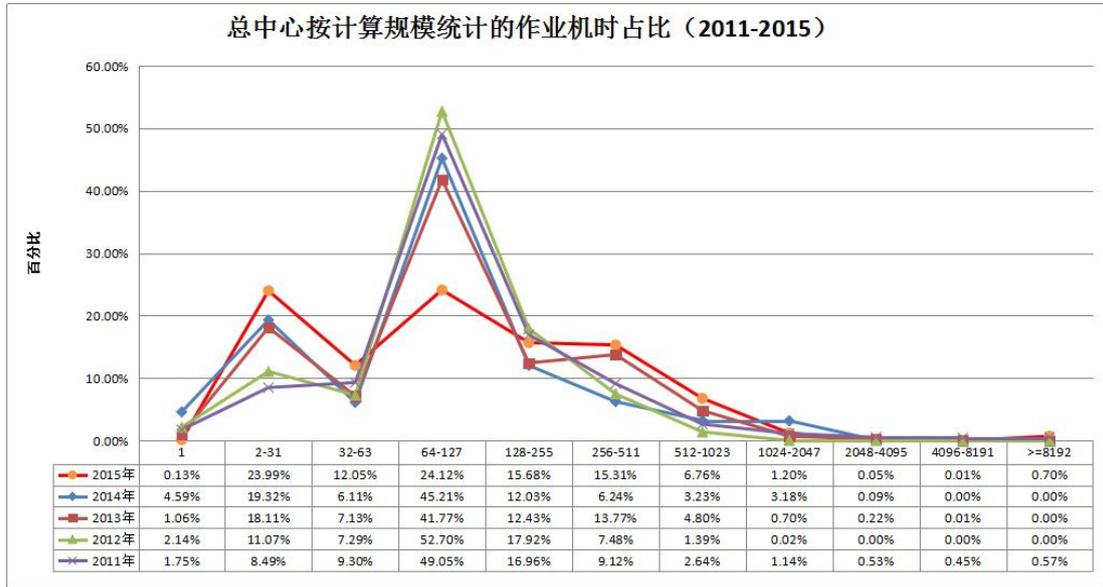


图 2.7 总中心按计算规模统计的作业机时占比情况（2011-2015 年）

对各年度按计算规模统计的作业机时占比数据分析如下：

● **2011 年**

本年度总中心 64~127 CPU 核计算规模的作业机时占比最高，且 2011 年度接近 50%，主要原因在于百万亿次计算能力带来了用户作业规模的提升，且该规模的用户作业在现有计算能力有限的深腾 7000 中排队等待时间相对较短；2011 年度 256 CPU 核以上大规模作业机时占比均较 2010 年度有所降低，512~4095 CPU 核计算规模的用户作业机时占比降幅较大，这主要是由系统负载较高、大规模作业难以被调度执行等因素导致；2~31 和 128~255 CPU 核计算规模作业机时占比基本与 2010 年度持平，串行计算作业机时占比降幅明显；2011 年度总中心“计算规模—用户作业机时占比”变化曲线的波峰较 2010 年度少，这主要与系统高负载直接相关。

● **2012 年**

本年度总中心 64~127 CPU 核计算规模的作业机时占比连续保持最高，且 2012 年度超过 50%，主要原因在于百万亿次计算能力带来了用户作业规模的提升，且该规模的用户作业在现有计算能力有限的深腾 7000 中排队等待时间相对较短；2012 年度 256 CPU 核以上大规模作业机时占比均较 2011 年度有所降低，512~4095 CPU 核计算规模的用户作业机时占比降幅较大，这主要是由系统负载较高、大规模作业难以被调度执行等因素导致；2~31 和 128~255 CPU 核计算规模作业机时占比基本与 2011 年度持平，串行计算作业机时占比降幅明显；2012 年度总中心“计算规模—用户作业机时占比”变化曲线的波峰与 2011 年基本接近，这主要与系统高负载直接相关。

● **2013 年**

本年度总中心 64~127 CPU 核计算规模的作业机时占比连续保持最高，超过 40%，主要原因在于百

万亿次计算能力带来了用户作业规模的提升，且该规模的用户作业在现有计算能力有限的深腾 7000 中排队等待时间相对较短；2013 年度 256~511CPU 核和 512~1023CPU 核作业机时占比较 2012 年度有较大提升，512~4095 CPU 核计算规模的用户作业机时占比降幅较大，这主要是由系统负载较高、大规模作业难以被调度执行等因素导致；2~31 和 128~255 CPU 核计算规模作业机时占比基本与 2012 年度持平，串行计算作业机时占比降幅明显；2013 年度总中心“计算规模—用户作业机时占比”变化曲线的波峰与 2012 年基本接近，这主要与系统高负载直接相关。

● 2014 年

本年度总中心 64~127 CPU 核计算规模的作业机时占比连续保持最高，2014 年度超过 45%，主要原因在于百万亿次计算能力带来了用户作业规模的提升，且该规模的用户作业在现有计算能力有限的深腾 7000 中排队等待时间相对较短；2014 年度 256~511CPU 核和 512~1023CPU 核作业机时比重较 2013 年度小幅下降，这主要是深腾 7000 进入服务期最后一年，系统负载较高、大规模作业难以被调度执行等因素导致；2014 年度总中心“计算规模—用户作业机时占比”变化曲线的波峰与 2013 年基本接近，这主要与系统高负载直接相关。

● 2015 年

2015 年新一代超级计算机“元”一期系统全面投入运行，同时在“元”二期系统上开放了少量的大规模应用测试，2015 年度总中心“计算规模—用户作业机时占比”变化曲线的波峰和波谷都相对平缓，总中心 64~127 CPU 核计算规模的作业机时占比尽管连续保持最高，但 2015 年度 64~127 CPU 核计算规模的机时比例比前几年降幅不少，只占 24.12%，主要分散到 2-31、128-255、256~511CPU 核和 512~1023CPU 核机时，同时串行作业比例历年最低，仅占 0.13%。

(2) 分中心

各分中心系统在“十二五”期间按计算规模统计的作业机时情况如图 2.8~2.12 所示。分析发现：在 9 家分中心中，用户作业基本集中在 2~127 CPU 核的计算规模，占比都接近或超过 70%；128 CPU 核以上计算规模的作业机时兰州分中心和青岛分中心占比最高；昆明分中心的串行计算作业机时占比最高且无 64CPU 核以上计算规模的并行作业。这些数据较好地反映了目前各分中心系统并行计算的应用情况，各分中心在大规模并行计算应用方面具有一定的潜力，在超级计算应用拓展方面具有更大的发展空间。

对各年度分中心按计算规模统计的作业机时占比数据分析如下：

- 2011 年度，详见图 2.8，分析发现，在分中心万亿次计算系统中，用户作业基本集中在 2~127 CPU 核的计算规模，除青岛和昆明之外的 5 家分中心该计算规模区间的作业机时占比逾 90%；7 家分中心中，青岛分中心 128 CPU 核以上计算规模的作业机时占比最高，昆明分中心的串行计算作业机时占比最高且无 64 CPU 核以上计算规模的并行作业，兰州分中心无 128 CPU 核以上计算规模

的并行作业，大连分中心则无 256 CPU 核以上计算规模的并行作业。这表明，青岛、合肥、深圳和沈阳 4 家分中心在大规模并行计算应用方面具有一定的潜力，而其他几家分中心在超级计算应用拓展方面具有更大的发展空间。

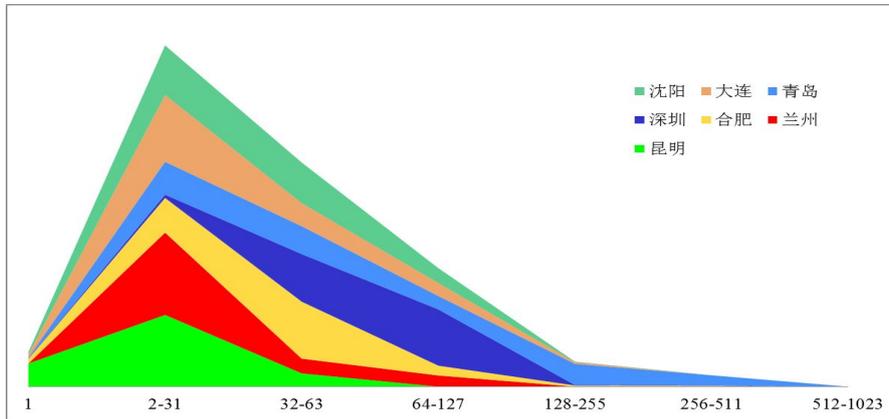


图 2.8 各分中心按计算规模统计的作业机时占比分布情况（2011 年）

● 2012 年度，详见图 2.9，分析发现，在分中心万亿次计算系统中，用户作业基本集中在 2~127 CPU 核的计算规模，除兰州之外的 7 家分中心该计算规模区间段的作业机时占比逾 80%，其中合肥和沈阳分中心在该计算规模区间段的作业机时占比超过 97%；8 家分中心中，兰州分中心 128 CPU 核以上计算规模的作业机时占比最高，昆明分中心的串行计算作业机时占比最高且无 32 CPU 核以上计算规模的并行作业，兰州分中心在 128-255CPU 核并行作业的占比是 8 家分中心最高的，超过 20%，除了深圳和青岛，其它家分中心都没有 256 CPU 核以上计算规模的并行作业。

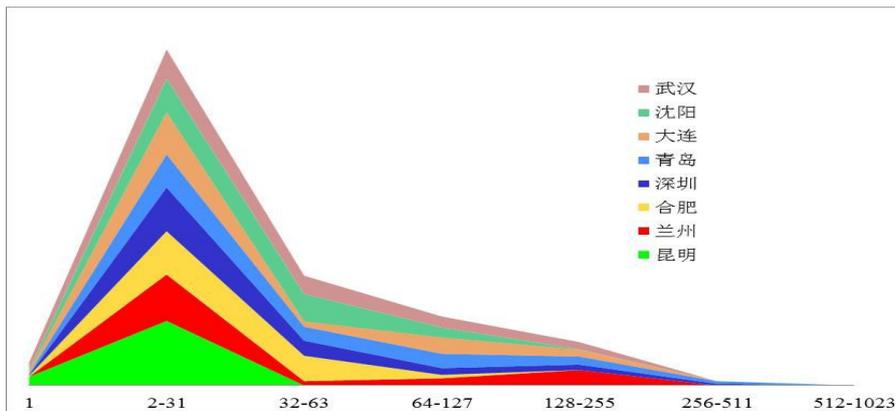


图 2.9 各分中心按计算规模统计的作业机时占比分布情况（2012 年）

● 2013 年度，详见图 2.10，用户作业基本集中在 2~127 CPU 核的计算规模，除兰州、昆明之外的 5 家分中心该计算规模区间段的作业机时占比逾 80%，其中合肥在该计算规模区间段的作业机时占比超过 97%；8 家分中心中，兰州分中心 128 CPU 核以上计算规模的作业机时占比最高，超过 20%；

昆明分中心的串行计算作业机时占比最高且无 64 CPU 核以上计算规模的并行作业，兰州分中心在 128-255CPU 核并行作业的占比是 8 家分中心最高的，超过 20%，除了深圳分中心和青岛分中心，其它家分中心都没有 256 CPU 核以上计算规模的并行作业。

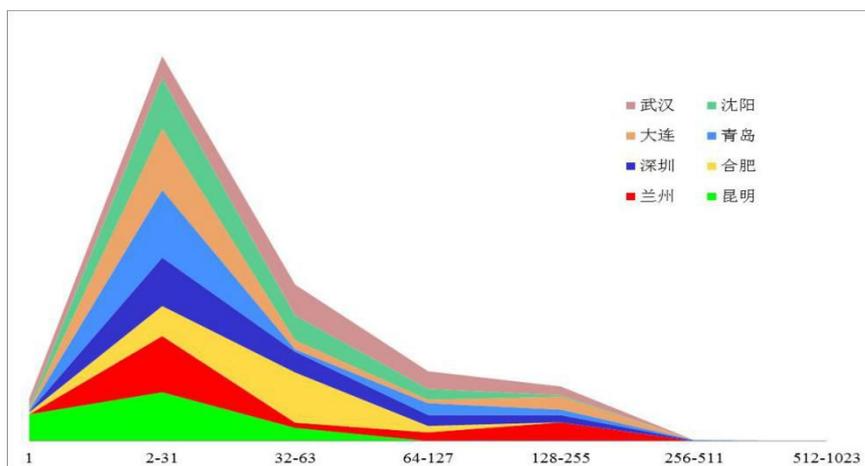


图 2.10 各分中心按计算规模统计的作业机时占比分布情况 (2013 年)

- 2014 年度，详见图 2.11，在分中心万亿次计算系统中，用户作业基本集中在 2~127 CPU 核的计算规模，8 家分中心该计算规模区间段的作业机时占比都接近或超过 70%，其中深圳、合肥在该计算规模区间段的作业机时占比超过 91%；8 家分中心中，兰州和青岛分中心 128 CPU 核以上计算规模的作业机时占比最高，超过 20%；青岛分中心 256CPU 核及以上计算规模的作业机时占比达到 10.86%，其它家分中心都没有 256 CPU 核以上计算规模的并行作业；昆明分中心的串行计算作业机时占比最高且无 64 CPU 核以上计算规模的并行作业。

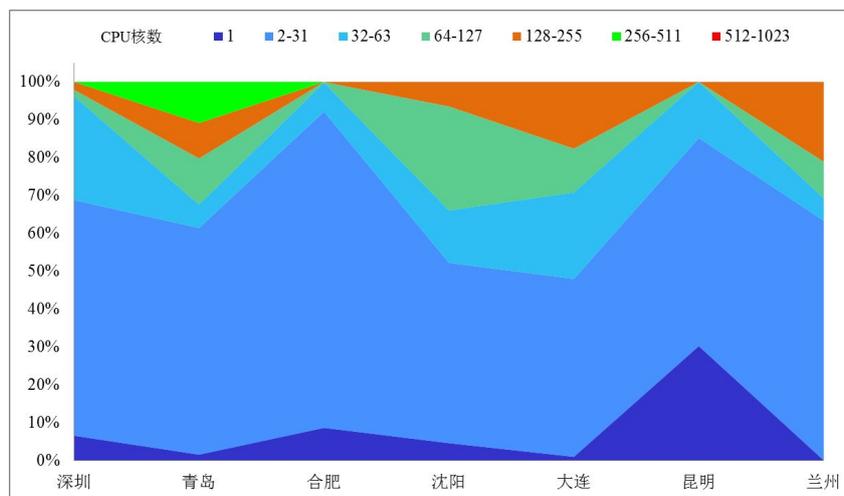


图 2.11 各分中心按计算规模统计的作业机时占比分布情况 (2014 年)

- 2015 年度，详见图 2.12，在分中心万亿次计算系统中，用户作业基本集中在 2~127 CPU 核的计算

第二章 院超级计算环境建设与应用状况

规模，9家分中心该计算规模区间段的作业机时占比都接近或超过70%，其中沈阳、合肥、深圳在该计算规模区间段的作业机时占比超过90%；9家分中心中，兰州和青岛分中心128 CPU核以上计算规模的作业机时占比依然是最高，今年超过30%；256CPU核及以上计算规模的作业机时广州分中心占比最高，超过20%，主要原因广州分中心的基础设施是新引入的且规模也大；其次是兰州、青岛、合肥和深圳；昆明分中心的串行计算作业机时占比最高且无64CPU核以上计算规模的并行作业。

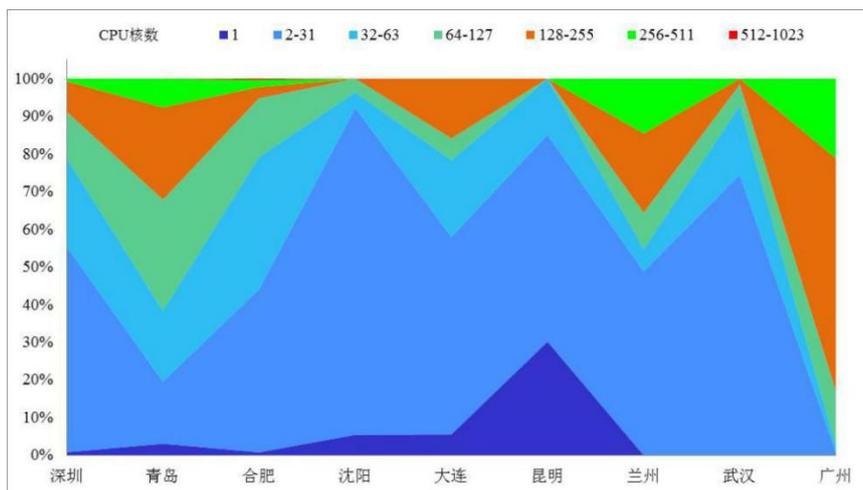


图 2.12 各分中心按计算规模统计的作业机时占比分布情况（2015 年）

2.4 用户及其应用特征分析

本节根据用户基本情况统计数据进行分析用户特征，并在此基础上挖掘我院超级计算应用特点。

(1) 总中心

在“十二五”期间，深腾 7000 从 2009 年 4 月 24 日起正式对外提供服务，截止到 2014 年 12 月正式停止对外服务，深腾 7000 共开通用户账号 498 个，年增长率超过 20%，详见图 2.13。最新一代超级计算机“元”一期系统于 2014 年 12 月 8 日才正式对外提供服务，为了更好的挖掘用户特征，在本报告中心重点分析深腾 7000 的用户情况。

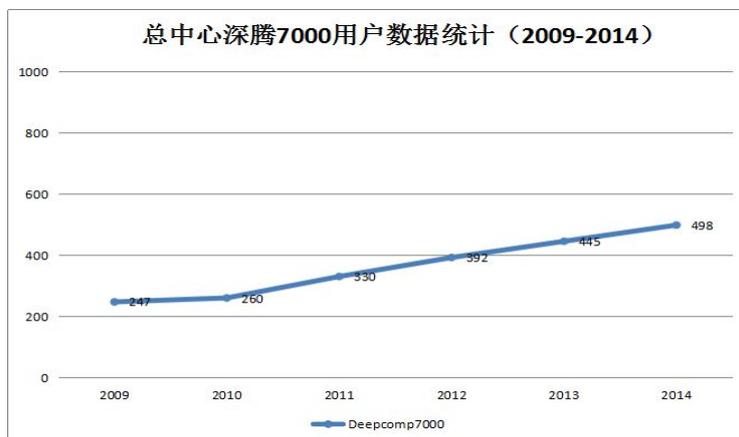


图 2.13 总中心深腾 7000 用户年度统计情况

❖ 按自然地理区域划分

按自然地理区域划分，用户遍布北京、上海等全国 23 个省市，已基本覆盖全国，北京最多(353)，其次是辽宁(27)、上海(16)、山东(14)，这主要是因为北京市科研院所分布密集，详见图 2.14。

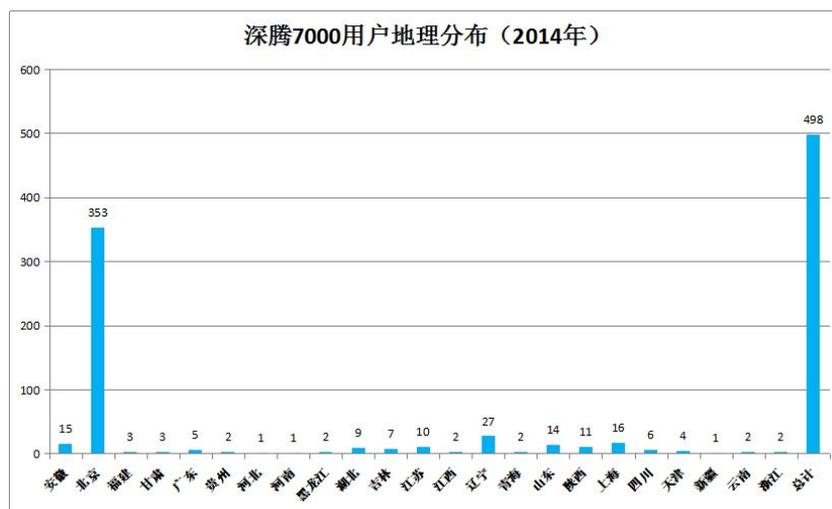


图 2.14 按自然地理区域统计的总中心用户分布情况

❖ 应用领域分布情况

深腾 7000 的用户所属学科应用领域的情况统计如图 2.15 所示，这里的学科领域参照国家自然科学基金委学科分类标准进行划分。可以看出，用户利用超级计算开展化学、物理、材料以及地球科学等领域的相关研究较多，这也体现了我院超级计算环境主要服务科学研究的特点。

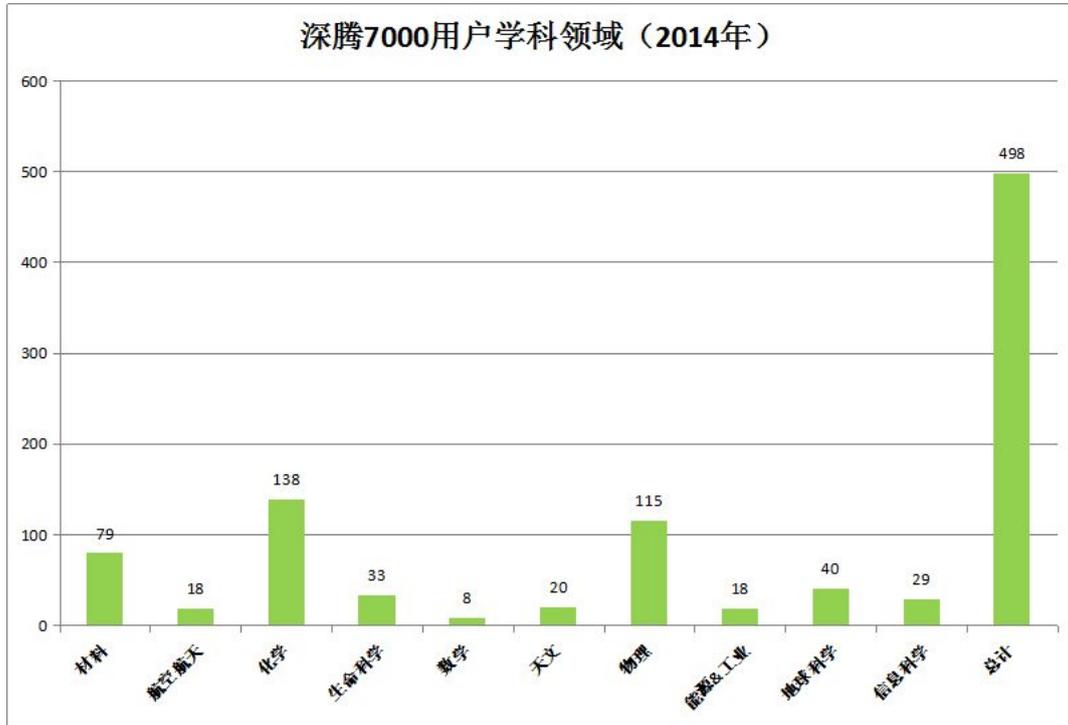


图 2.15 按自学科领域统计的总中心用户分布情况

❖ 支持用户科研项目情况

总中心深腾 7000 共支撑用户科研项目 396 个，其中 NSFC、973、863 和中国科学院百人计划之和占比 76.5%，其中 NSFC 占总项目超过 40%，这说明总中心为我国自然科学研究发挥了重要作用，详见图 2.16。

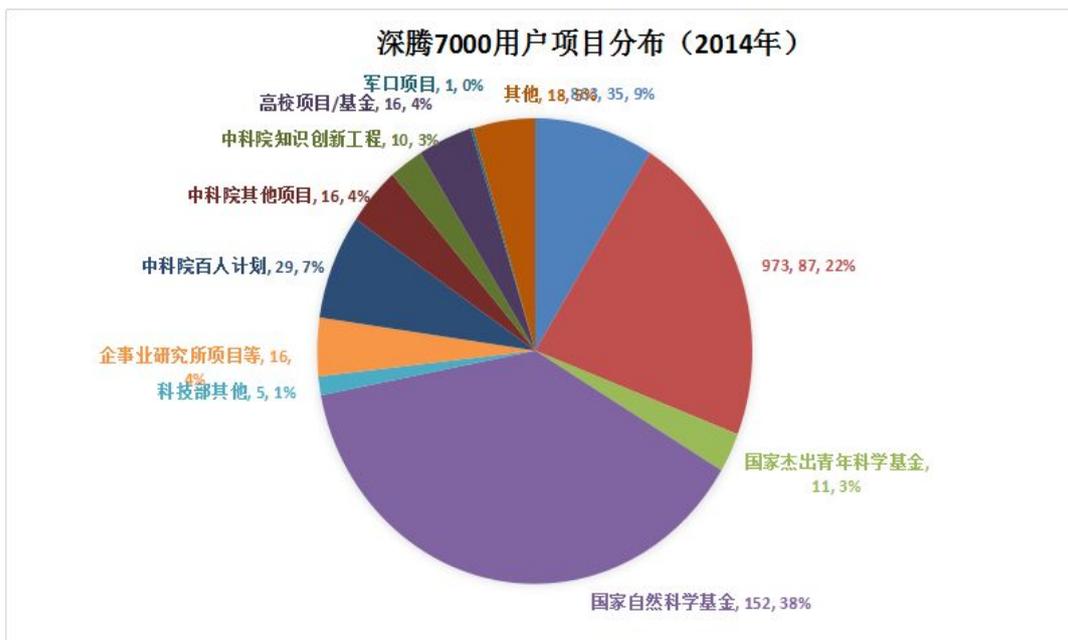


图 2.16 按项目分布统计的总中心用户分布情况

(2) 网格环境

2011年-2015年期间，累计开通外部账号 363 个外部账号，增长率达 269%。累计提交有效网格作业超过 51 万个，累计使用机时超过 1.1 亿 CPU 小时（Walltime）。用户增长情况如下图所示：

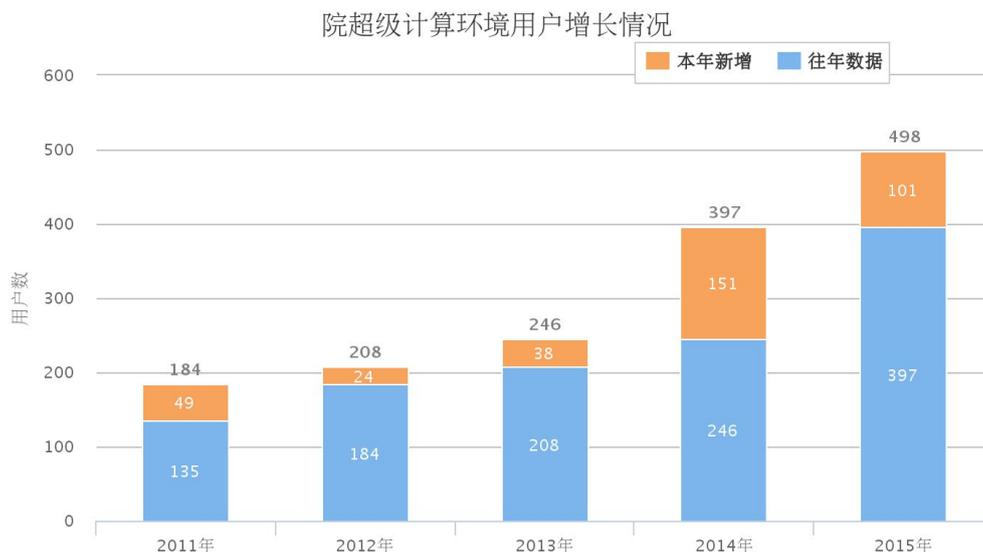


图 2.17 院超算环境用户增长情况（2011-2015）

院超级计算环境用户主要分布在中国科学院各研究所、院外的大专院校及科研院所，具体的分布情况如下：



图 2.18 院超算环境用户单位分布图

环境用户在全国范围内分布，跨越 30 个省市及自治区。其中北京地区用户数最多，占总体用户的 40.7%，具体分布如下图所示：

第二章 院超级计算环境建设与应用状况

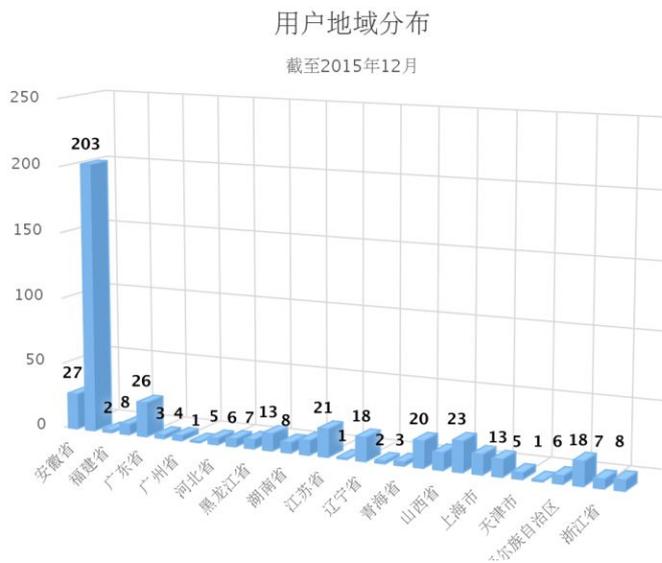


图 2.19 院超算环境用户地域分布图

院超级计算环境用户涉及物理、化学、生命科学、材料、能源工业、地球科学、航天航空等多个领域，其中 34.7%是化学领域用户，其次是物理、生命科学、材料等领域用户。具体分布如下：

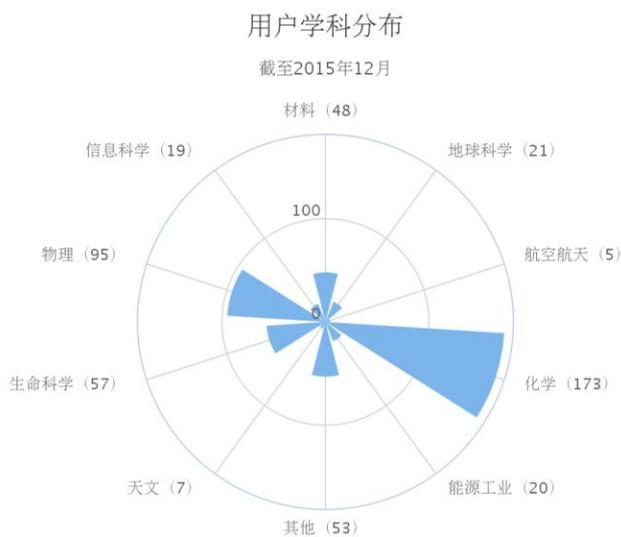


图 2.20 院超算环境用户学科分布图

院超级计算环境支持了多个国家级重点项目，包括 863 计划、973 计划、国家自然科学基金、国家重大科技专项等，同时也支持中国科学院内部项目、各高校项目基金。具体的项目分布如下：

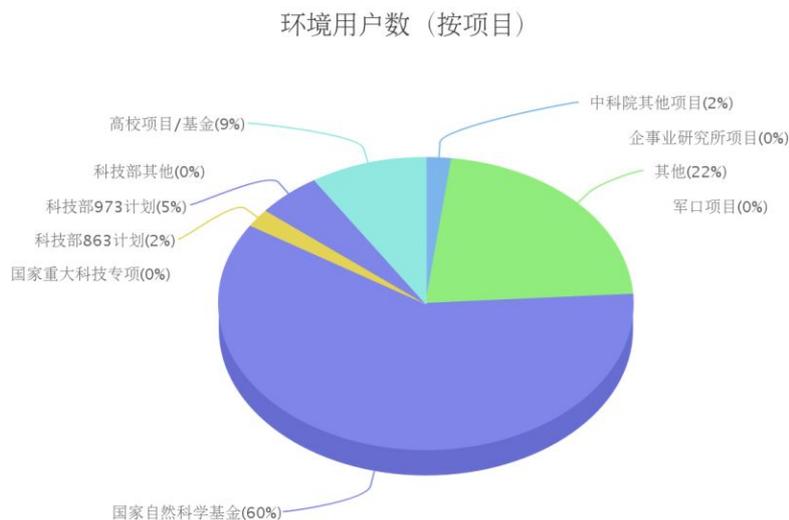


图 2.21 院超算环境用户项目分布图

2011年至2015年，按不同并行规模作业使用的机时统计，在所有的作业中，2-63个处理器（核）规模的并行作业所占比例最高，为71.5%；第二位是64-127个处理器规模的并行作业，为12.8%；128-255个处理器、256-511个处理器的并行作业比例相当，分别占5.9%和5.8%；串行和512处理器以上核数的并行作业占4%。

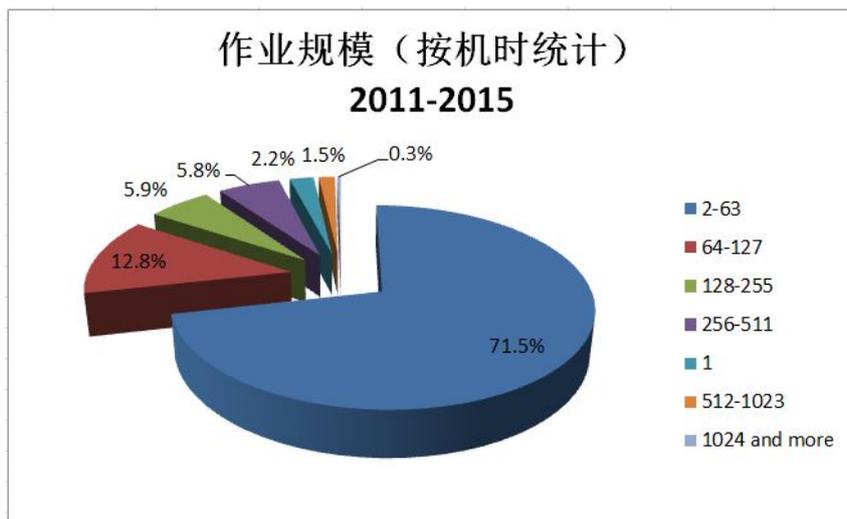


图 2.22 院超算环境作业规模分布（按机时统计）

2011年至2015年月期间，总中心和青岛分中心承担机时比例均超过了20%，共占总机时的48.4%；昆明分中心承担12.34%，兰州分中心承担12.3%，武汉分中心承担11.73%；其余各分中心对整体计算均有一定的贡献。

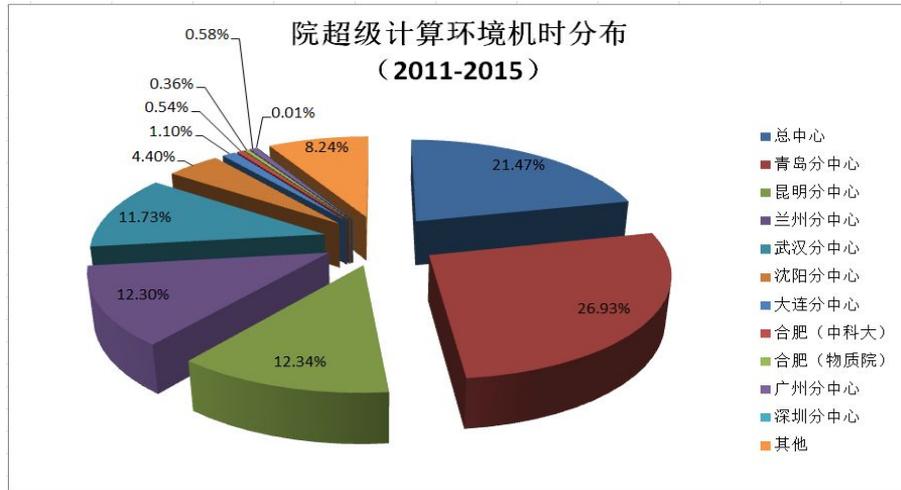


图 2.23 院超算环境机时分布 (2011-2015)

2.5 小结

本章以数据为支撑，从院网格环境建设与应用现状、各级中心超级计算软硬件环境和技术支撑人才队伍、系统整体使用率情况、计算规模占比情况、用户地理分布与增长情况、系统应用领域及支持用户科研项目情况等方面对我院超级计算环境建设与应用状况进行了统计分析。

“十二五”期间，院超级计算环境建设按照“优化布局，整合资源，强化服务，推动应用”的原则和思路，形成了 1 家总中心、9 家分中心、19 家所级中心组成的三层架构式超级计算网格环境，聚合了超过 1300 万亿次的 CPU 通用计算能力。同时，该环境还接入了院内 11 家单位的 GPU 计算集群，聚合 GPU 计算能力近 3000 万亿次。总中心累计为院内外近 500 名用户提供计算机时超过 3 亿 CPU 小时，支持国家自然科学基金、科技部 863、科技部 973、中国科学院、北京市等科研项目近 400 个，很好地支撑了院内外科学研究工作；总中心系统使用率五年平均为 71.38%，基本上是满负荷运行；分中心系统使用率五年平均为 59.56%，有待进一步充分利用其资源，提高使用率；总中心 64~127 CPU 核计算规模机时占比最高，五年平均占比为 42.57%，比“十一五”期间作业规模提高了两个档次；其次是 2~31 CPU 核计算规模，年均占比为 16.19%；总中心应鼓励和大力扶持大规模应用，以进一步发挥和体现其院超级计算龙头作用；分中心计算规模用户作业基本集中在 2~127 CPU 核的计算规模，应适度培育大规模应用。

统计分析结果表明，“十二五”期间，我院通过加大超级计算环境建设投入力度和加快超级计算环境应用步伐，超级计算发展成效显著，但仍然存在用户应用受计算能力制约、相关领域超级计算应用水平较低、超级计算应用的深度和广度亟待拓展等问题。需要在加强环境建设的同时加大对超级计算应用的支持力度；创新院超级计算环境运维和管理机制，有效调度全院超级计算资源为用户提供便捷、高效的超级计算服务，实现全院计算资源的高效使用；发挥总中心在支撑和服务大规模计算方面的龙头作用，大力协助和扶持大规模应用，促进我院超级计算应用水平的提升。

成果篇

第三章 院超级计算应用成果统计分析

基于 web 的“CAS SCDI 数据收集系统”，我们重点从用户直接科研产出（包括论文、专利和软件著作权）、超级计算人才培养（包括硕/博士研究生毕业人数、高性能计算培训人数）两个方面进行相关的统计分析。通过统计分析“十二五”我院超级计算应用成果产出现状，可以为今后院超级计算环境的深度应用和持续发展提供有参考价值的数据支撑。需要特别说明的是，这里的成果数据是由我院用户提交的科研成果，可能收集到的成果未必是用户的全部成果，但可以从一个方面反映我院超级计算应用的状况。

3.1 用户直接科研产出情况

本节基于用户论文、专利、软件著作权等三个方面内容的数据对用户直接科研产出现状进行分析。

◆ 用户论文发表情况

根据 2011-2015 年度通过成果收集系统收集到的数据，“十二五”期间中国科学院超级计算环境用户发表论文数量不断攀升，各类论文共 2724 篇，其中绝大多数是 SCI 论文，共 2321 篇，占比 85.52%，EI 论文 127 篇，其它 276 篇，这一统计结果表明超级计算极大地促进了科研产出，也有效保障了科研成果的质量和创新性。具体如图 3.1 所示。

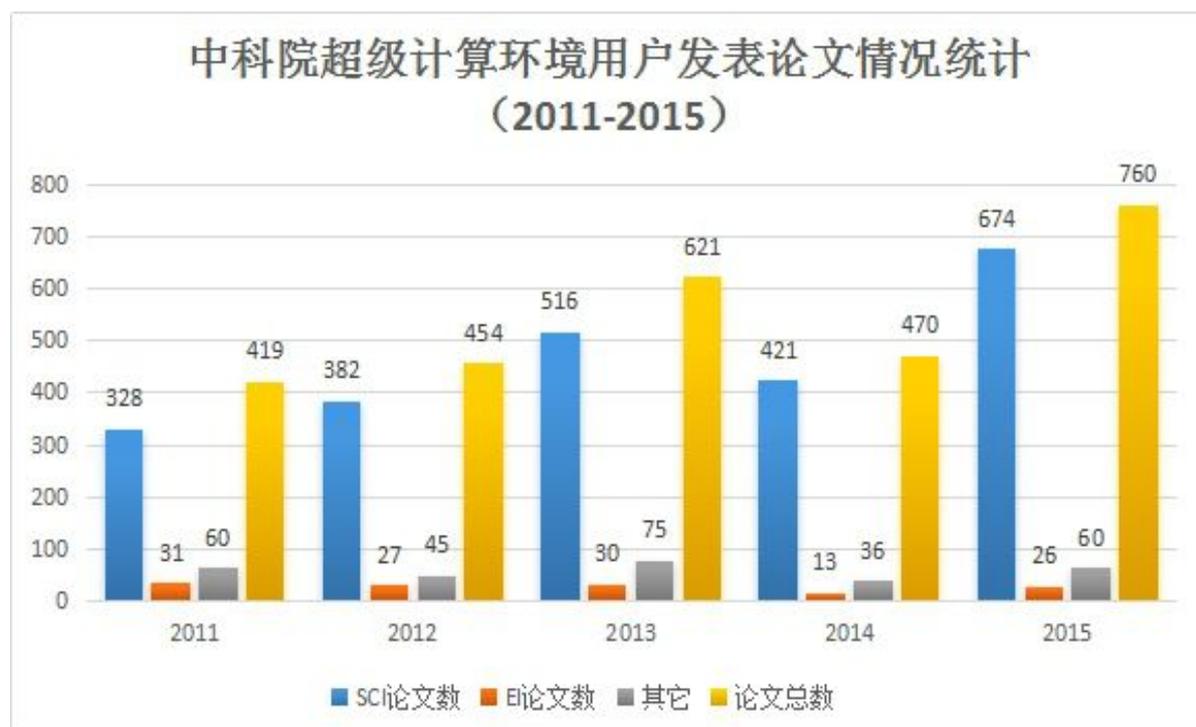


图 3.1 用户发表论文情况统计

◆ 用户获得专利授权与软件著作权情况

根据 2011-2015 年度通过成果收集系统收集到的数据，“十二五”期间用户共获得软件著作权和专利授权共 152 项，其中专利授权占 65.79%，如图 3.2。在专利授权中，发明 64 项，实用新型 34 项，国际专利 2 项，详见图 3.3。从各年度用户获得专利授权和软件著作权中可以看出，用户知识产权保护意识较强，每年都有一定数量的基于超级计算的研究成果获专利授权。但是总体上来说数量不多，这也反映了与超级计算相关的自主软件严重缺乏、超级计算软环境长期受国外制约等现状。



图 3.2 用户获软件著作权与专利授权数量情况 (2011-2015)

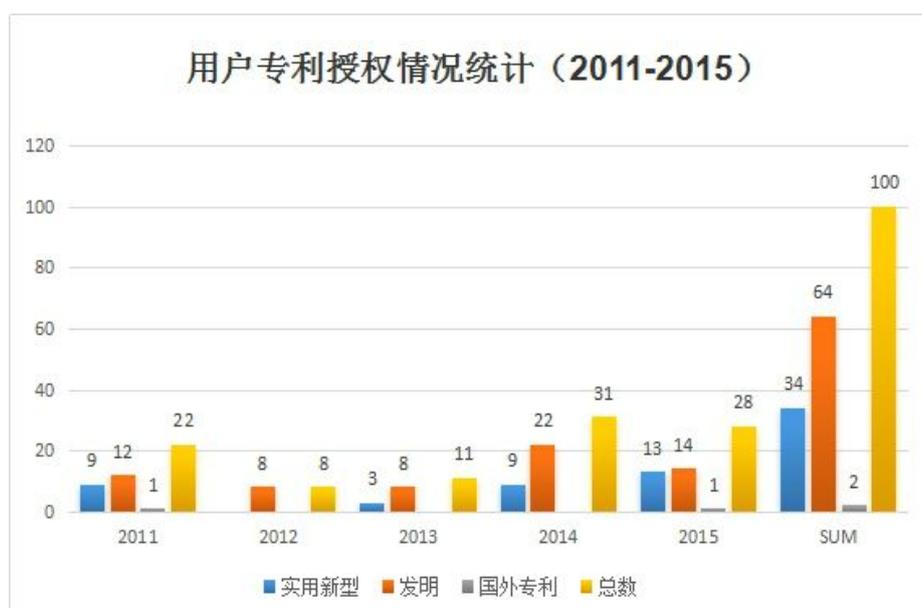


图 3.3 用户获专利授权情况统计 (2011-2015)

3.2 超级计算人才培养情况

超级计算人才培养主要包括学员参加高性能计算培训、硕/博士研究生培养。图 3.4 为 2011-2015 年超级计算人才培养情况。可以看出，随着院超级计算网格环境的不断完善与成熟，五年来与超级计算相关的人才培养数量急剧攀升，“十二五”期间硕/博士研究生毕业人数 2503 人，高性能计算培训学员人数近 6000 人次。与“十一五”相比，无论是高性能计算培训学员人数还是硕/博士研究生毕业人数都大幅度增长，尤其是高性能计算培训学员人数增长超过 10 倍，这反映出我院近年来对超级计算相关研究和应用技术人才的需求旺盛。

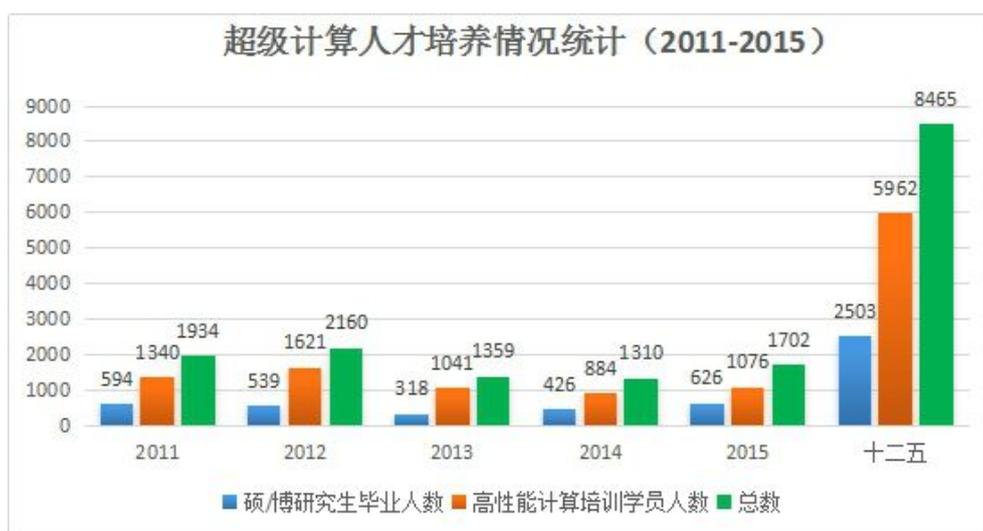


图 3.2 超级计算人才培养情况统计

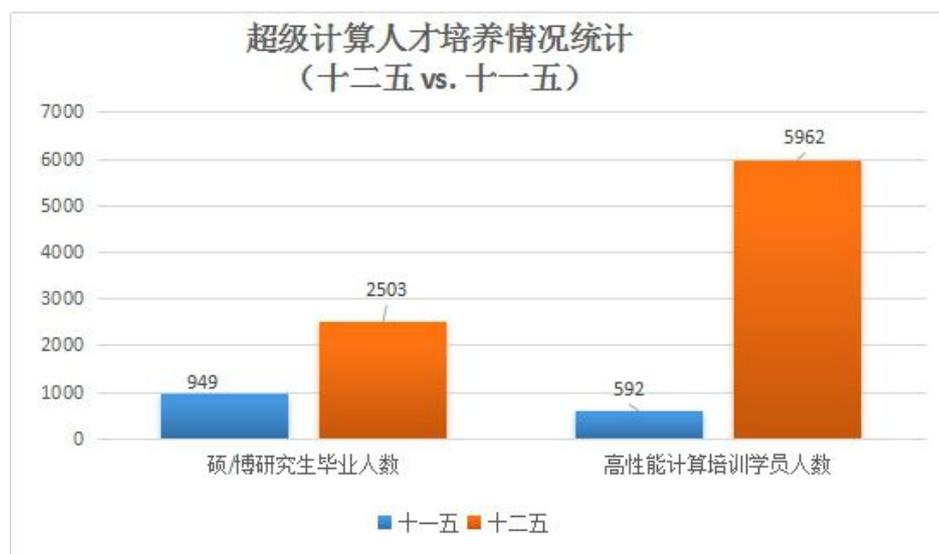


图 3.5 超级计算人才培养情况统计（“十二五” vs “十一五”）

3.3 小结

本章基于用户直接科研产出、超级计算专业人才培养两个方面的统计数据，分析了我院超级计算应用成果现状。统计数据显示，五年来用户基于超级计算的科研成果发表各类论文 2700 余篇，其中 SCI 论文数量占比超过 85%；各年度用户获得专利授权与软件著作权登记的总量有一定增长，专利保护意识越来越强；随着院超级计算网格环境的成熟与完善，培养研究生数量和高性能计算培训人数大幅提升，与“十一五”相比出现大幅增长，尤其高性能计算培训人数增长超过 10 倍。

分析表明，超级计算的发展对于提升科研产出的数量和质量、创新性、专业人才培养规模等都有着极大的促进作用；我院超级计算软环境发展中对超级计算专业人才需求旺盛，应加强超级计算人才培养，加大超级计算应用支撑队伍的建设和支持力度。

第四章 院超级计算典型应用成果

本章遴选了物理、化学、材料、天文、地球科学、生命科学、航空航天、工业制造等领域的超级计算典型应用案例，这些应用成果的取得由院超级计算环境总中心或分中心提供计算支撑。另外，对院网络环境中 GPU 应用成果也进行了简单介绍。

4.1 全球涡分辨率海洋环流模式研发和应用

用户姓名：俞永强研究员

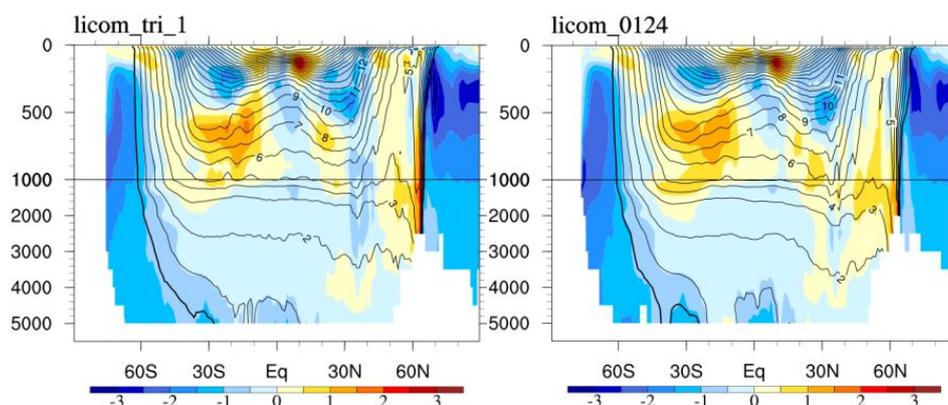
用户单位：中国科学院大气物理研究所

应用领域：大气物理

软件来源：基于原创理论和方法自主研制软件

计算规模：万核 CPU（“元”超级计算机）

成果简介：发展具有高并行度的新一代海洋环流模式，通过引进三极坐标框架下、优化模式并行方案等，实现同时利用 CPU 和 MIC 结点的混合同行，混合同行较 MIC 本地运行性能提升 10%。利用新版本的海洋模式 LICOM2.1，分别在 100 公里、10 公里和 5 公里三种不同分辨率下进行了大量测试，模式表现出很好的并行效率。其中 10 公里和 5 公里分辨率模式均进行了全系统整机 CPU 万核规模以上的并行测试，其中 10 公里分辨率模式整机的并行效率可以达到 53%，5 公里分辨率模式整机并行效率可以达到 82%。



4.2 针对服役性能的钛合金组织优化模拟

用户姓名：徐东生研究员

用户单位：中国科学院金属研究所

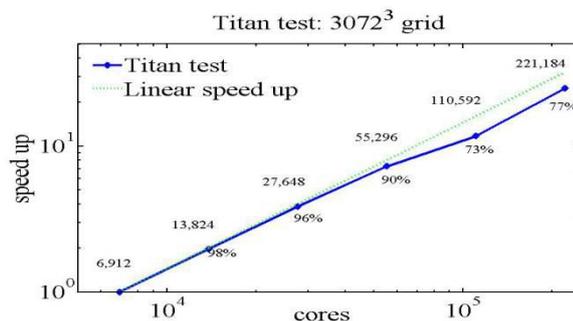
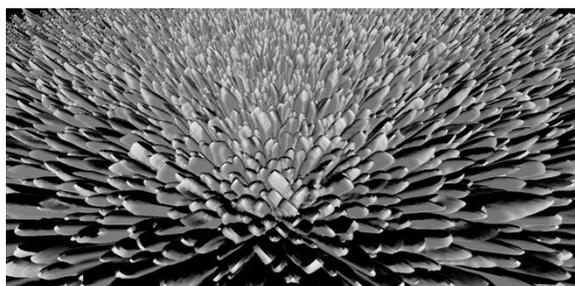
第四章 院超级计算典型应用成果

应用领域：计算材料学

软件来源：基于相对成熟的理论和方法自主研发的软件

计算规模：十万核 CPU（“元”超级计算机、Titan）

成果简介：针对钛合金相变过程中微观组织的形成、外场对相变过程的影响等进行研究，根据超级计算机架构编写大规模并行相场动力学程序，实现 10 万核以上规模并程序的高效运行，大幅度加速微观组织演化模拟。在此基础上建立相场模型并通过模拟获得热处理温度、外应力场等条件下钛合金典型相变微观组织形成的机制及演化规律，为钛合金热机械处理工艺的优化提供指导。



4.3 基于 CPU 蛋白质精确模拟大规模并行应用软件开发

用户姓名：李国辉研究员

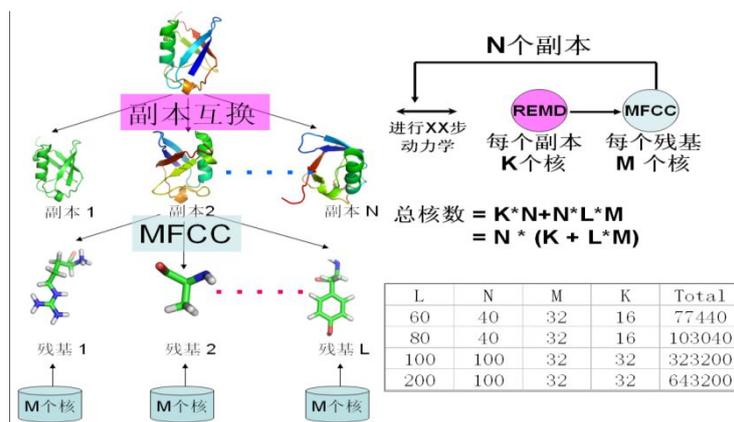
用户单位：中国科学院大连化学物理研究所

应用领域：计算化学

软件来源：基于相对成熟的理论和方法自主研发的软件

计算规模：十万核 CPU（“元”超级计算机、天河二号）

成果简介：针对生命科学、生物医药以及生物能源和生物技术等相关领域中涉及到的蛋白质结构与功能之间的关系研究，立足于自主创新的并行理论计算方法，充分利用基于 CPU 的十万核超级计算机，结合精确量子力学计算与分子模拟中最新的副本互换采样方法，实现蛋白质动力学的精确模拟，突破生物大分子模拟计算瓶颈，并行规模达到十万核、并行效率达到 30%。



4.4 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

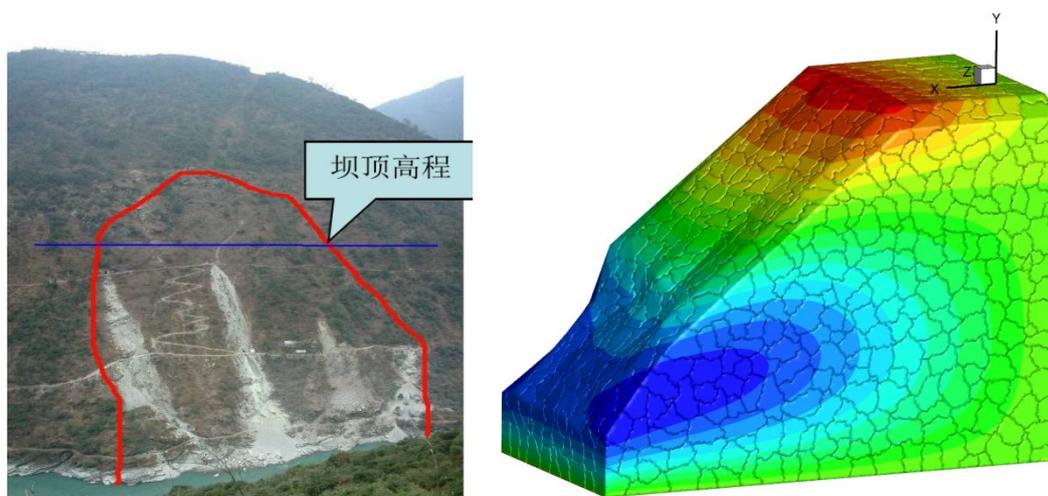
用户单位：中国科学院武汉岩土力学研究所

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 10000 核并行计算，得到了较好的并行效率（78%）。



4.5 基于多网格谱元法的深部资源探测大规模模拟软件研究

用户姓名：林伟军研究员

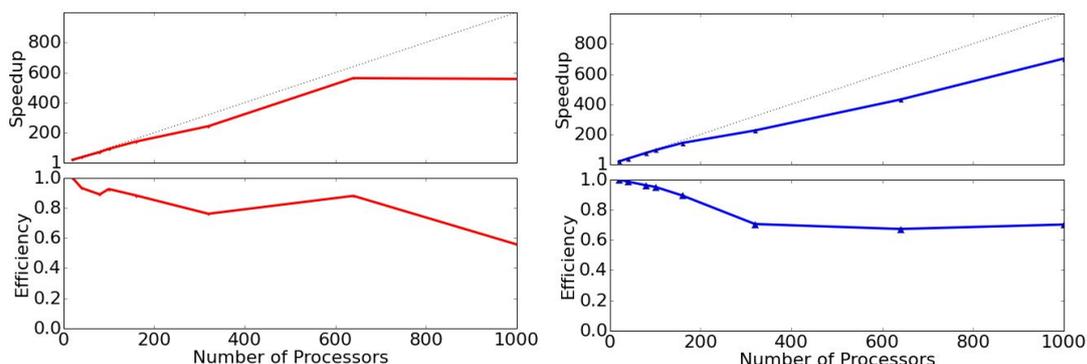
用户单位：中国科学院声学研究所

应用领域：地球科学

软件来源：基于原创理论和方法自主研发的软件

计算规模：万核 CPU（“元”超级计算机）

成果简介：研究了多网格谱元法在不同网格部分下描述声波场、介质和外力分布的方法，开发的多网格谱元法声波传播模拟软件可实现复杂地层中声波传播的模拟，并分析了软件的可扩展性和精度；开发并优化了基于 MPI+OpenMP 混合并行的三维变网格有限差分法模拟软件，实现了软件的可扩展版本，使软件具备大规模 CPU+MIC 的异构计算能力；软件在院超级计算中心并行系统上实现了万核级的并行，其中 CPU 版本软件 12288 核并行效率 58%，MIC 版本软件可扩展到 80 块 MIC 卡，其中 MIC 节点相比纯 CPU 节点加速在 1.8 倍以上；利用开发的软件开展了随钻声波测井、经颅超声聚焦等问题的高性能数值模拟研究。



4.6 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

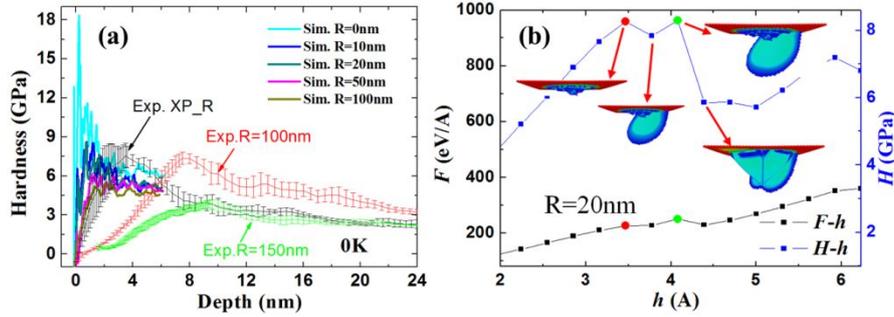
应用领域：力学

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。



4.7 面向航空航天十万核级计算流体力学软件开发及应用

用户姓名: 李新亮研究员

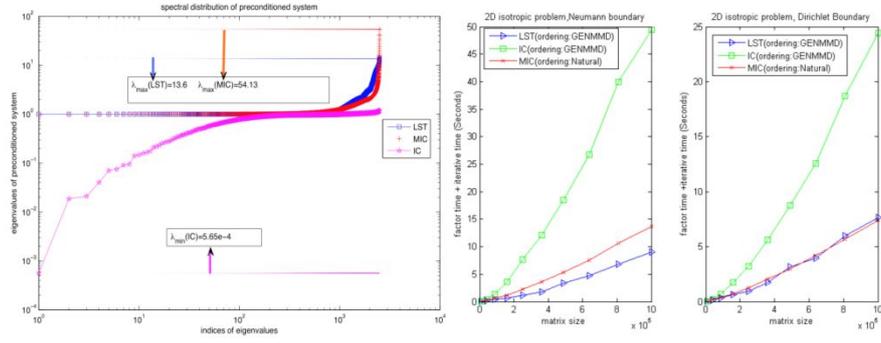
用户单位: 中国科学院力学研究所

应用领域: 力学

软件来源: 基于相对成熟的理论和方法自主研发的软件

计算规模: 百万 CPU 核 (“元”超级计算机、某国产机)

成果简介: 进行了大规模线性代数求解器并行算法、MIC 系统高效并行算法、高精度数值方法及湍流模型研究。在此计算上对自主开发的高精度 CFD 程序 OpenCFD 进行了完善并向 MIC 系统进行了移植。利用 ONEAR-M6 三维翼大涡模拟以及发动机进气道激波-湍流边界层干扰直接数值模拟等算例在“元”、天河-2 以及国产某众核并行机上对软件进行了并行测试及应用。计算机测试的最大纯 CPU 计算规模大 24.5 万核心, 最大 MIC 系统规模为 15000 块 MIC 卡, 最大众核系统计算规模为 327.6 万核心 (含从核)。测试过程中, 软件显示了很好的并行可扩展性, 各算例并行效率均超过 40%, “元”计算机上 MIC+CPU 单节点的计算速度达到纯 CPU 节点计算速度的 2.5 倍。



4.8 基于 GPU 面向 III-V 族半导体材料研究的应用软件开发

用户姓名：石林研究员

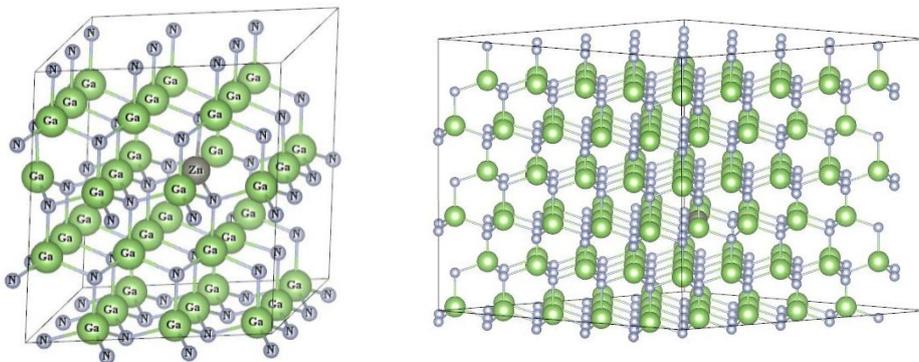
用户单位：中国科学院苏州纳米技术与纳米仿生研究所

应用领域：材料计算

软件来源：基于相对成熟的理论和方法自主研发的软件

计算规模：多 GPU 核（“元”超级计算机）

成果简介：III-V 族半导体材料因其在固态照明、蓝光激光器、高迁移率功率电子器件中成功应用而受到广泛关注。为深入研究 III-V 族半导体中掺杂、空位和量子点等复杂结构，对于大规模并行计算资源的需求日益迫切。传统并行计算已经出现可扩展性瓶颈的应用问题，利用性能功耗比更好的 GPU 异构计算实现进一步加速无疑极具现实意义。本项目中苏州纳米所和中国科学院计算机网络信息中心联合各自在 III-V 族半导体材料计算和大规模 GPU 异构计算两方面的优势力量，在 GPU 异构计算架构下，改进和优化 III-V 族半导体材料计算程序。院网络中心王龙研究员带领的团队，完成了第一原理平面波 GPU 加速软件 PWmat1.0 的开发。本项目已经实现 GPU 版本的软件加速比达 25 以上；对于 GaP 中 ZnO 的掺杂，GaN 中的 ZnGa-VN 掺杂等情况展开了深入的研究。



4.9 基于 GPU 的颗粒流软件研发

用户姓名：杨磊研究员

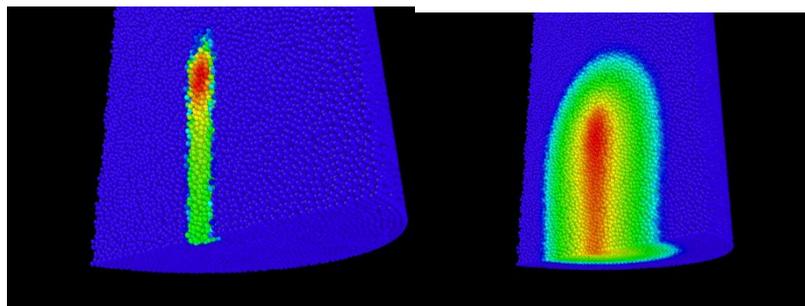
用户单位：中国科学院近代物理研究所

应用领域：计算物理

软件来源：基于相对成熟的理论和方法自主研发的软件

计算规模：多 GPU 核（“元”超级计算机）

成果简介：设计并研发了基于 CUDA 平台的多 GPU 颗粒流模拟算法。多 GPU 颗粒流模拟算法将原颗粒模拟规模提高了数个量级，能够支持模拟真实 ADS 散裂靶装置内颗粒流动所需的颗粒数。经过大量的优化工作，项目所实现的多 GPU 算法拥有较好的扩展性。经测试，在 128 块 GPU 并行计算 51,200,000 个颗粒时，实际性能达到了理论性能的 76.32%。针对 ADS 散裂靶的需要和多 GPU 程序框架的特点，设计并实现了高能粒子束流在轰击散裂靶后的束靶耦合能量沉积模拟算法。基于 GPU 的束靶耦合算法相对于原 CPU 模拟算法，计算速度提高了两个数量级，间接地提高了束靶耦合的计算精度。此外，多 GPU 颗粒流模拟算法还实现了颗粒之间热辐射传热、气膜传热、接触传热等主要的传热方式模拟，能够模拟束靶耦合后，热量在颗粒体系内传播的过程。目前，该算法已经用于 ADS 散裂靶装置的模拟工作。



4.10 GPU 加速的第一性原理输运计算

用户姓名：曾雉研究员

用户单位：中国科学院合肥物质科学研究院

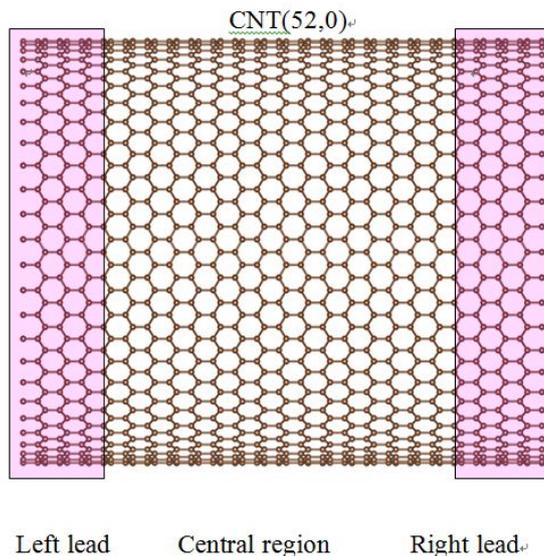
应用领域：材料计算

软件来源：基于相对成熟的理论和方法自主研发的软件

计算规模：多 GPU 核（“元”超级计算机）

成果简介：采用 GPU 加速的方法解决纳米与分子电子器件中第一性原理输运计算中的速度瓶颈问题，这是分子器件模拟与设计中的一个根本性问题。希望借这一问题的解决，将同时解决计算速度与模拟器件的尺寸问题。这一项目的完成，不仅对分子电子学的研究具有重要意义，同时对第一性原理计算在材

料模拟中的应用具有重要的示范意义。我们设定的最终考核指标是电荷输运计算过程中总耗时占 95% 以上的自洽计算部分与单 CPU 核相比，提速 100 倍以上。目前的加速效果是，在天河系列计算机上，利用 24 个 Tesla K40m 卡实现了接近 700 倍的加速效果。



4.11 连续-离散方法模拟多相流动的大规模 GPU 并行计算软件开发

用户姓名：陈飞国副研究员

用户单位：中国科学院过程工程研究所

应用领域：工程计算

软件来源：基于相对成熟的理论和方法自主研发的软件

计算规模：多 GPU 核（“元”超级计算机）

成果简介：针对气固多相流动多尺度结构特征，开发适应 GPU 计算特点连续-离散耦合模拟算法，根据多尺度并行计算方式实现大规模 GPU 并行计算，最终形成多相流动模拟的自主特色软件。本项目的实施将突破目前多相流动研究方式，利用大规模 GPU 并行计算提升多相流动模拟能力，大幅增加计算规模并缩短计算时间，针对工业反应器内的大规模模拟速度可望与实际物理演化速度相当，形成“虚拟过程”实时模拟技术。完善基于结构的粗粒化颗粒模型，优化实现 CFD-DEM 方法的大规模 GPU 并行计算，针对过程所的虚拟过程工程平台（反应器主体高 6m）实施了“所见即所得”的在线动态模拟，基本达到准“实时”计算。同时，本项目试验了 MIC 的加速计算，完成 CPU-MIC-GPU 多尺度计算原型机，应用于多相流动的直接数值模拟。



4.12 地球系统模式输出数据可视化

用户姓名：可视化技术部

用户单位：中国科学院计算机网络信息中心

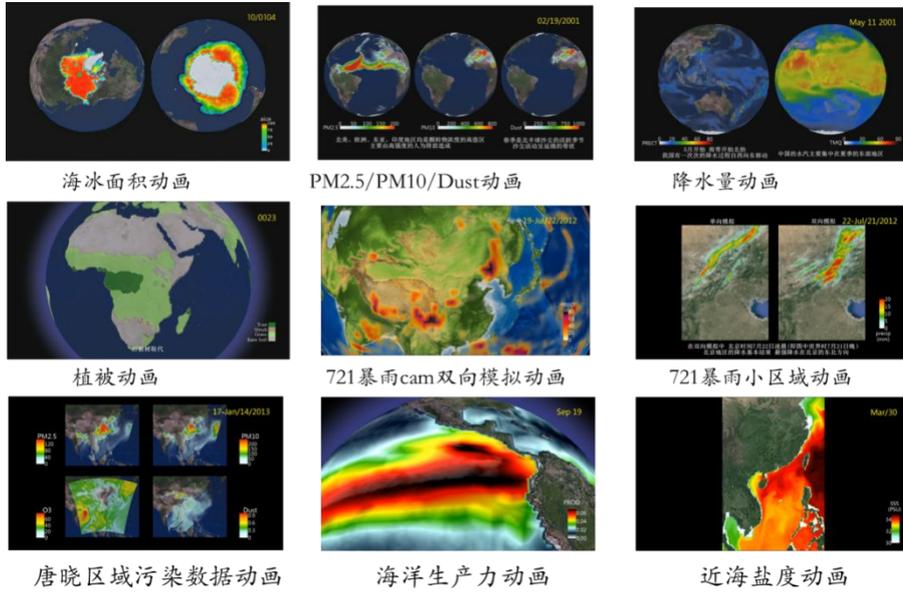
应用领域：大气、海洋

软件来源：基于原创理论和方法自主研发软件

计算规模：600GPU 核（元）

成果简介：由中国科学院计算机网络信息中心自主研发的 **GlobeVis**，是一款针对地球系统模式输出的海量数据进行可视化分析的软件。该软件提供了切片、等值线、流线等多种可视化功能，支持交互式可视化分析，此外，软件提供的动画导出功能在时序数据可视化分析方面起到了有力的推进作用。在“元”系统上使用该软件对大气所地球系统模式输出的数据进行了可视化分析，包括大气、海洋、海冰、大气化学和气溶胶、动力学植被、海洋生物、地球化学等子系统模式和分量模块输出的多种数据，并将可视化结果导出为动画，为大气所提供了很好的可视化分析支持，并有力地推动了大科学装置的建设。

第四章 院超级计算典型应用成果



4.13 小结

在院“十二五”重点应用项目的支持下，在宇宙探索、能源与新材料发现和工程计算等科学研究领域产生了三个十万核级以及十余个万核级 CPU 重点应用，并在大规模 GPU 并行应用深入发展，院超级计算环境已经为科学研究和工业制造提供了有力的计算支撑。

分析篇

第五章 院超级计算价值评价与研究状况

超级计算能力是衡量一个国家综合国力和国际竞争力的重要标准之一。明确用户对于超级计算的价值评价状况和用户开展的超级计算相关研究情况，有助于为院超级计算的可持续发展提供决策参考。基于用户应用成果调查数据，我们对院超级计算价值评价和研究状况进行了统计分析，以期为今后院超级计算发展规划提供有力的数据支撑。

5.1 用户基本使用情况

◆ 用户在科研活动中使用超级计算的频率统计

用户在科研活动中使用超级计算的频率的调查统计结果如图 5.1 所示。可以看出，超过 91% 的超级计算用户在平时的科研活动中经常使用超级计算技术手段，需要频繁使用超级计算的用户超过 76%。这充分说明超级计算对于科学研究和科学发现具有非常重要的支撑作用，也是需要大力发展超级计算的意义所在。与“十一五”调查情况相比，经过五年发展，在科研活动中需要频繁使用超级计算的用户占比由占比 53% 增长到 76%，这充分说明超级计算支撑科研活动的作用越来越大。



图 5.1 用户在科研活动中使用超级计算的频率统计（“十二五”）

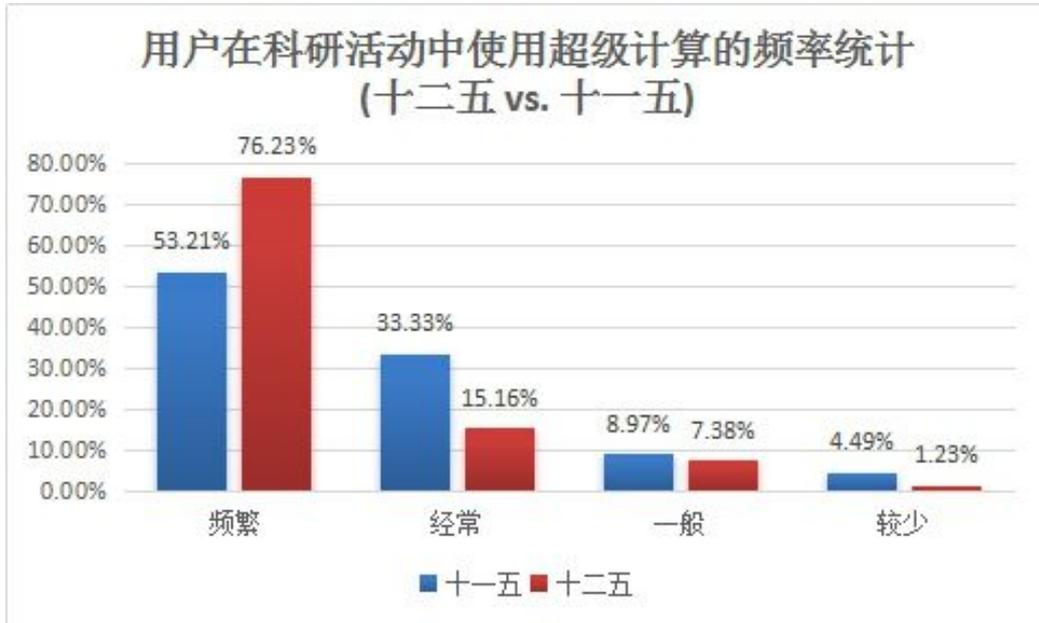


图 5.2 用户在科研活动中使用超级计算的频率统计（“十二五” vs. “十一五”）

◆ 超级计算技术使用类别统计

根据用户使用超级计算手段开展科学研究的情况，这里将其使用类型分为如下三类：

- 基本工具/平台型（用户所在的研究领域大规模计算问题明确，计算方法和软件相对成熟）；
- 超级计算推动型（相关研究领域大规模计算问题明确，超级计算技术处于探索阶段）；
- 科研探索与超级计算技术相互推动型（相关研究领域的计算问题较前沿，研究方法尚不十分明确，超级计算技术处于探索阶段）。

调查结果显示（参见图 5.3），66%的用户认为超级计算是其科研活动的必要工具和平台；17%的用户认为其研究领域的计算问题比较前沿、超级计算技术与其科研探索活动是处于相互推动型的；而认为相关研究领域的大规模计算问题明确、超级计算技术还处于探索阶段的用户为 17%。这表明，目前我院大部分用户已经将超级计算视为科研活动的必要手段，但同时也认为超级计算应用技术相对于其研究领域的问题而言滞后，应当在超级计算技术研究和应用特别是在交叉领域人才队伍建设方面加大投入力度。

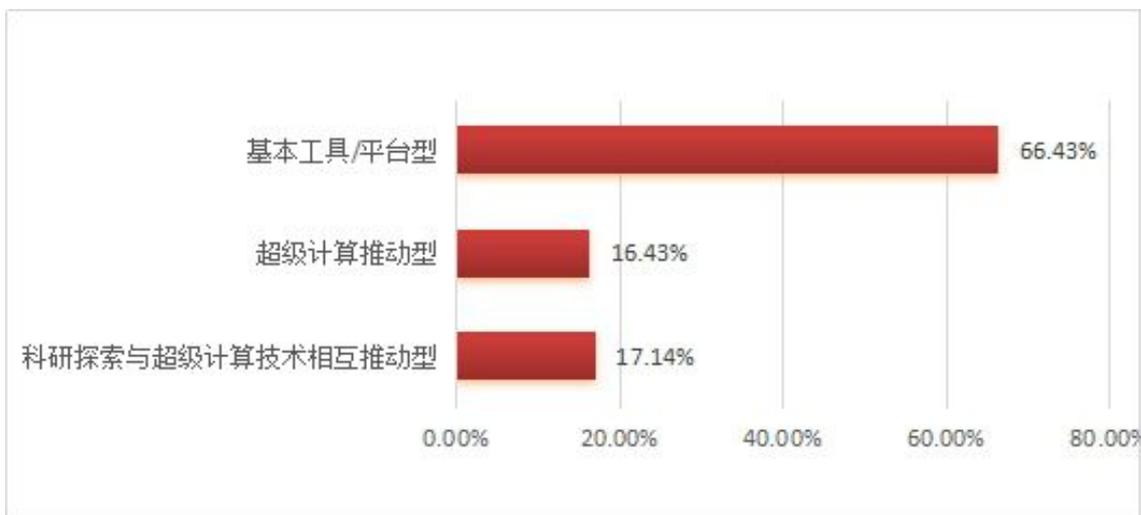


图 5.3 超级计算技术使用类别统计（十二五）

◆ 超级计算用户软件使用情况统计

图 5.4 为“十二五”期间超级计算用户软件使用情况统计结果，可以看出，在科学研究活动中，用户使用最多的是“基于原创理论和方法的自主研制的软件”，占比接近 70%，其次“商业软件”，占比接近 20%。通过对比“十一五”期间超级计算用户软件使用情况统计结果（如图 5.5 所示），最大的变化是基于原创理论和方法的自主研制软件比例大幅提升，占比由 17%到 70%，这说明，“十二五”期间我院超级计算应用软件的原始创新有较大进步，考虑软件研发周期长，后续依然需要大力支持自主软件的研发。



图 5.4 超级计算用户软件使用情况统计（“十二五”）

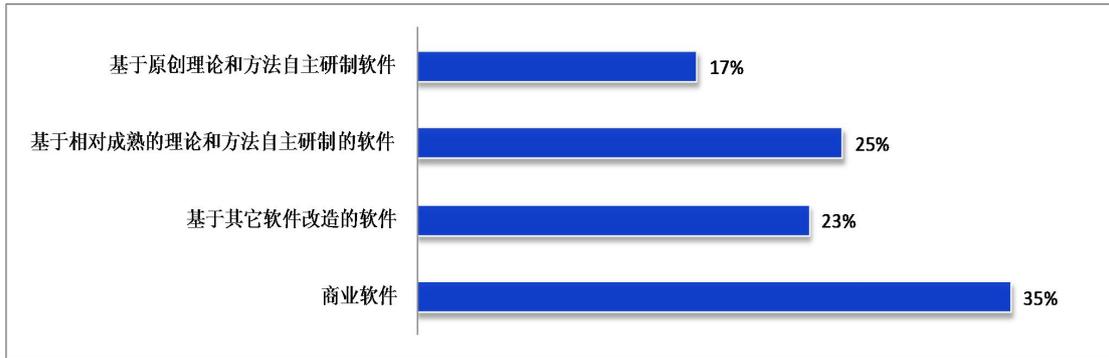


图 5.5 超级计算用户软件使用情况统计（“十一五”）

5.2 超级计算价值评价情况

关于超级计算的价值评价，我们重点就用户认为**超级计算在科研活动中所发挥的作用**进行了调查，结果如图 5.6 所示。可以看出，超过 92% 的用户认为超级计算在他们的科研活动中发挥着关键作用和重要作用，其中认为发挥关键作用的用户占比超过 84%。

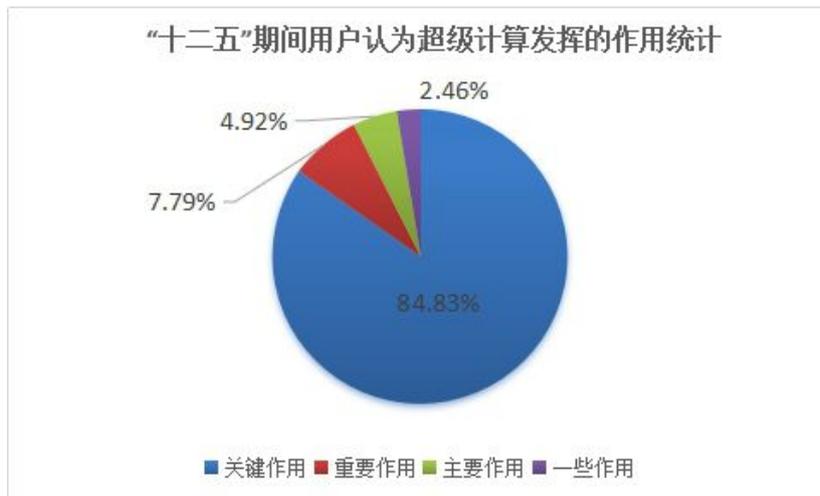


图 5.6 超级计算在科研活动所发挥作用大小的调查结果

5.3 用户开展超级计算相关研究情况

在收集 2015 年度用户成果数据时，就用户开展超级计算相关创新性研究和前瞻性研究的情况进行了调查，调查数据统计分析如图 5.7 所示，可以看出：

- (1) 有四成左右的用户开展了相关领域计算问题的并行计算方法研究；
- (2) 在创新性需求方面，45% 的用户开展了应用领域的并行计算软件研制；
- (3) 研究 HPC 新架构与技术的用户则相对较少，20% 左右；

- (4) 在创新性需求方面，为满足现实需求而开展超级计算相关研究的用户数量占比超过 2/3；
- (5) 在前瞻性需求方面，为满足现实需求或前瞻性需求开展超级计算相关研究的用户各占半壁江山。

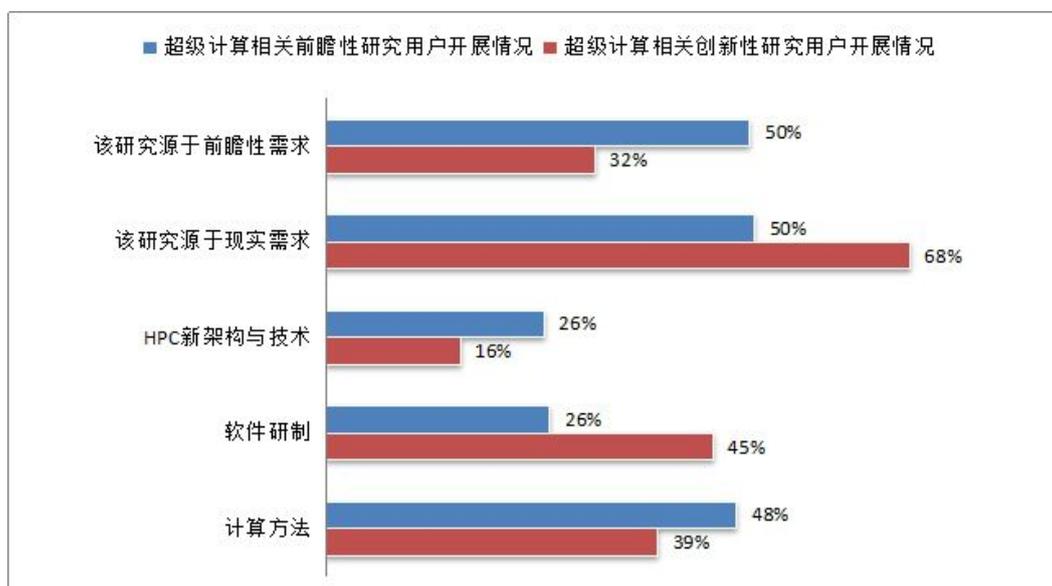


图 5.7 用户开展超级计算相关创新性和前瞻性研究情况统计（“十二五”）

以上调查结果表明：

- (1) 我院用户开展超级计算相关研究主要由其科研活动的现实需求驱动；
- (2) 我院用户开展计算方法研究和软件研制具有较好的基础，应该基于此加大对计算方法研究和软件研制的支持力度；
- (3) 我院基于前瞻性需求而开展超级计算相关研究有相当好的用户群基础，应该基于此加大支持力度，促进前瞻性研究的发展；
- (4) 我院开展 HPC 新架构与技术的用户数量比“十一五”期间有所上升，但占比还是偏少，这也从一个侧面表明我院乃至我国学科应用领域研究与 HPC 新架构与技术研究相结合方面亟待加强。

5.4 小结

本章对院超级计算价值评价和研究状况进行了统计分析。

统计数据显示，超过 91%的超级计算用户在平时的科研活动中经常使用超级计算技术手段，需要频繁使用超级计算的用户超过 76%；与“十一五”调查情况相比，在科研活动中需要频繁使用超级计算的用户占比由占比 53%增长到 76%，这充分说明超级计算支撑科研活动的作用越来越大。

在科学研究活动中，用户使用最多的是“基于原创理论和方法的自主研制的软件”，占比接近 70%，其次“商业软件”，占比接近 20%。通过对比“十一五”期间超级计算用户软件使用情况统计结果，最

第五章 院超级计算价值评价与研究状况

大的变化是**基于原创理论和方法的自主研制软件比例大幅提升，占比由 17%到 70%**，这说明，“十二五”期间我院超级计算应用软件的原始创新有较大进步，考虑软件研发周期长，后续依然需要大力支持自主软件的研发。

超过 92%的用户认为超级计算在他们的科研活动中发挥着关键作用和重要作用，其中认为发挥关键作用的用户占比超过 84%。

用户开展超级计算相关创新性研究和前瞻性研究中，有四成左右的用户开展了相关领域计算问题的并行计算方法研究；在创新性需求方面，45%的用户开展了应用领域的并行计算软件研制；研究 HPC 新架构与技术的用户则相对较少，占比 20%左右。

分析结果表明，超级计算的发展对于提升国家综合竞争力、对于促进科学研究自主创新以及经济社会发展具有重要的战略意义和现实意义；超级计算在我院相关学科领域研究中发挥着重要和关键作用；我院超级计算发展过程中存在着应用软件原始创新不足、超级计算的经济效益和社会效益未得到充分发挥等问题；我院用户开展超级计算技术研究和应用软件研制基础良好，建议藉此加大这方面的支持力度，特别是对于大规模并行应用软件研发的支持；同时大力促进 HPC 新架构和技术研究与具体学科领域应用的结合。

第六章 院超级计算发展指数

在“十一五”期间，我们研究和建立了“超级计算发展指数（SuperComputing Development Index, SCDI）”，它包括6个分指数和1个总指数，如图6.1所示。超级计算发展指数的评价指标体系包括6大类共计17个评价指标。基于该评价指标体系编制出的超级计算发展指数可用于评价各超级计算系统、各超级计算中心和各超级计算环境的发展状况，如院超级计算环境、院超级计算总中心和各分中心。利用超级计算发展指数，不仅可以进行某个超级计算系统、超级计算中心和超级计算环境的纵向历史发展状况比较，也可以进行不同超级计算系统、超级计算中心和超级计算环境的发展状况的横向比较。此种量化方法可以为衡量超级计算的发展状况提供科学依据。

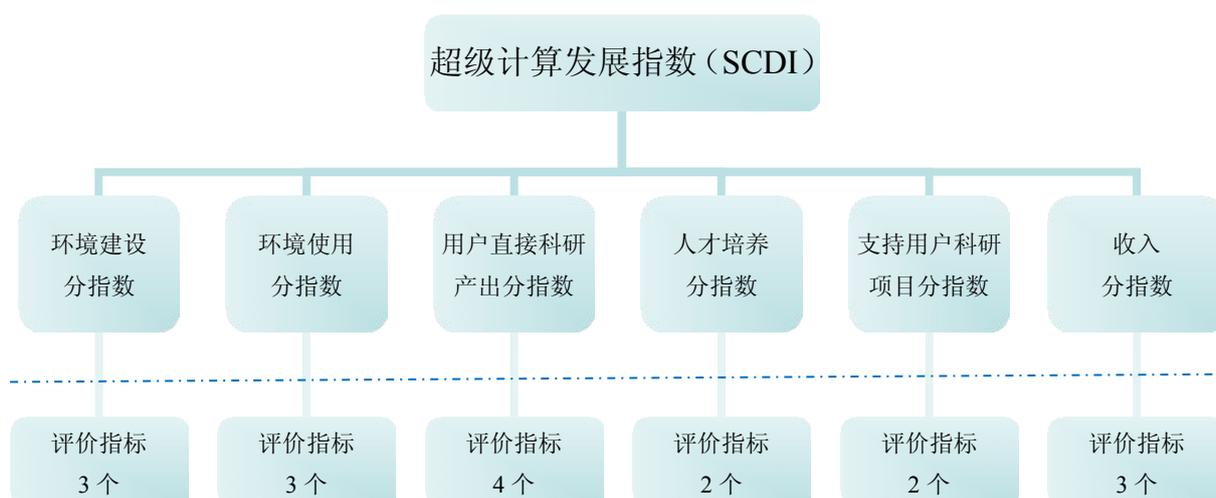


图 6.1 超级计算发展指数体系框架图

6.1 “十二五”超级计算发展指数

“十二五”期间院超级计算发展指数稳步增长，从292.86点增长到453.03点，2006-2015年间平均增长率超过31%，如图6.2所示。这表明，中国科学院超级计算在“十二五”期间保持着强劲的发展态势，中国科学院超级计算环境的建成为中国科学院超级计算的发展注入了强大的动力，加强超级计算软环境建设仍然是中国科学院超级计算今后发展需要着重解决的一个问题。超级计算应用的发展会在一定程度上滞后于计算能力的提升，但计算能力升级的间隔周期过长，致使用户作业规模长期保持在一定的水平，甚至出现一定幅度的下降，这不利于超级计算应用的良性发展，也是阻碍超级计算发展的一个因素。加强超级计算人才培养是超级计算生态环境建设中的关键环节，能够直接推动用户直接科研产出和收入等层面的发展，能够为中国科学院超级计算良性发展提供持续推动力。

(1) 有规划、有节奏地持续增强超级计算能力，动态扩展用户应用的计算规模，有效满足用户群体对超级计算的动态需求；

(2) 积极推动超级计算应用的深度和广度，注重培育超级计算重点示范应用，以点带面，不断提升了我院的超级计算应用水平，更好地帮助科学发现和科技创新；

(3) 进一步加强超级计算服务支撑团队建设和培养，细分服务支撑内容，设置对用户服务支撑和

第六章 院超级计算发展指数

技术支持的优先级，进一步提高对用户科研项目的计算服务支撑能力，为我院实施创新驱动发展战略贡献力量；

(4) 复合型、多元化的超级计算应用人才培养是超级计算生态环境建设中的关键环节，建议进一步加强交叉学科研究生培养，为中国科学院超级计算良性发展提供持续动力；

(5) 为适应超级计算技术的快速发展，中国科学院应结合云计算、大数据及互联网+发展潮流和趋势，组织力量开展高性能计算技术前瞻性研究，加强技术创新与储备，建立超级计算增值服务体系；

(6) 为支撑智慧中国科学院，服务四个率先，建议在“十三五”期间为国家重大项目、大科学和大工程等提供优先计算资源保障。

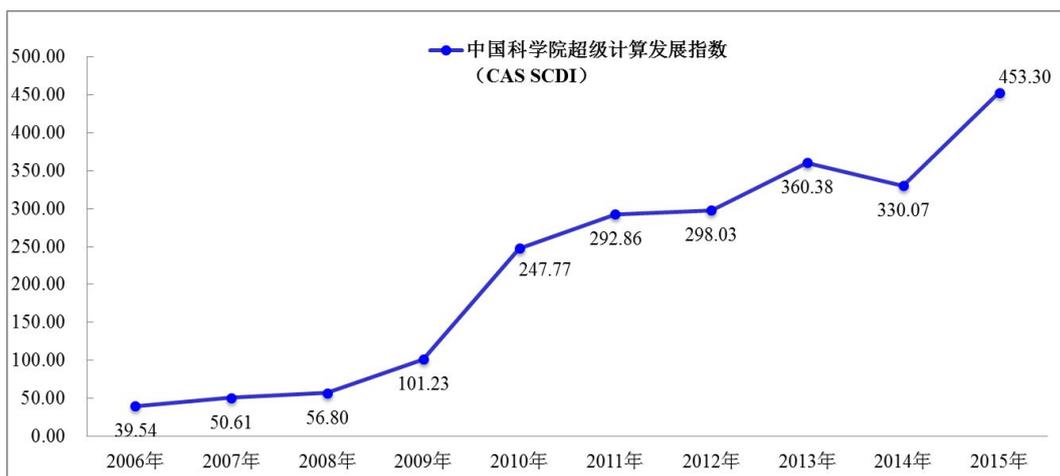


图 6.2 中国科学院超级计算发展指数 (CAS SCDI) 走势 (2006-2015 年)

中国科学院超级计算发展指数 6 个分指数走势如图 6.3 所示，对 6 个分指数的编制结果的分析表明：

- 2015 年度，所有分指数都较 2014 年度有较大提升，其中支持用户科研项目分指数、人才培养分指数、用户直接科研产出分指数和环境建设分指数增幅都超过 30%，增幅分别是 59.35%、50.54%、41.31%和 34.52%；
- 2015 年度，用户直接科研产出分指数对总指数增长的贡献最高，超过 55%，分析其主要原因，一是 2015 年度提交用户成果用户/课题增幅较大，二是用户发表论文数大幅增加；其次环境建设分指数对总指数增长的贡献也比较高，这归功于中国科学院对超级计算基础设施的持续支持，总中心引进新一代超级计算机“元”，新增广州分中心和合肥分中心，并扩增中国科学技术大学节点。
- 分析发现，随着超级计算基础设施能力提升，用户直接科研产出、人才培养等方面都相应直线上升，建议在“十三五”期间进一步提升我院超级计算环境能力，更好的支撑服务我院的创新科学发展。

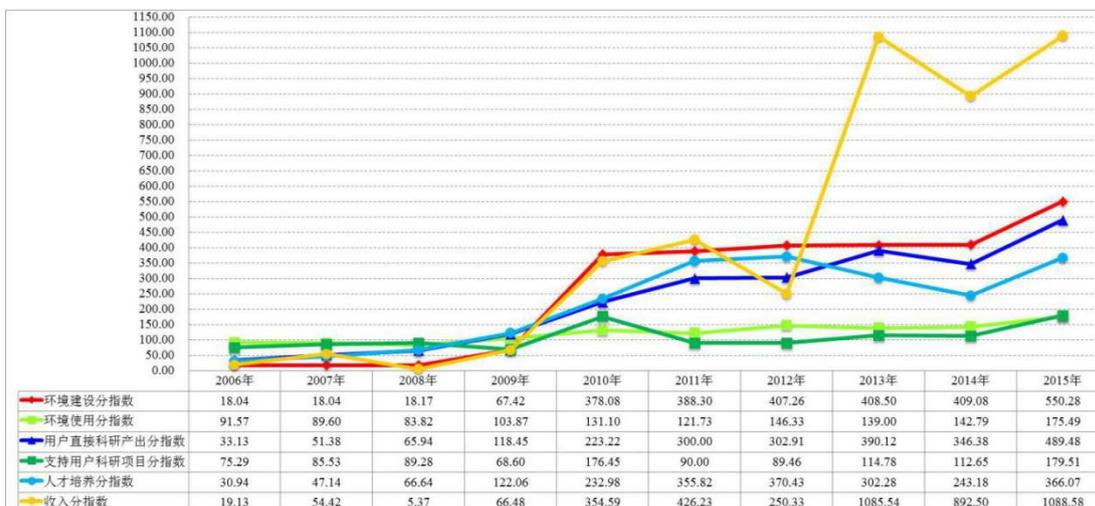


图 6.3 中国科学院超级计算发展分指数走势 (2006-2015 年)

6.2 分中心超级计算发展指数

2011-2015 年 9 个分中心的超级计算发展指数趋势如图 6.4 所示。数据表明，2015 年度合肥分中心、广州分中心和昆明分中心名列前三。其中合肥分中心扩增了中国科学技术大学，所以指数增长较快；特别值得一提的是，分中心通过不同渠道，在环境建设方面已经更新或扩容部分设备。整体来看，分中心是在逐步稳健向上发展的，同时由于分中心设备也已超过五年，设备需要升级换代以保障持续长久的发展。特别指出，从 2013 年开始，分中心超级超级计算发展指数纳入分中心年度考核的量化指标。

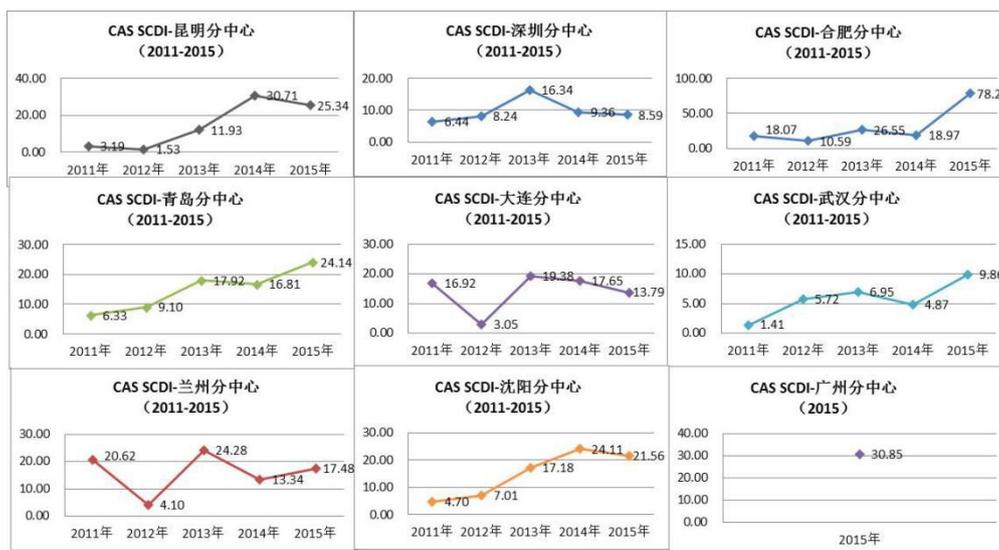


图 6.4 分中心超级计算发展指数走势 (2011-2015 年)

(2) 分中心指数对总指数的贡献率如图 6.5 所示。数据表明，分中心对我院超级计算发展指数起到了重要作用，尤其 2015 年度贡献超过 50%，发挥了半壁江山的作用，这也充分证明了中国科学院超级计算环境三层架构是非常有必要的。

第六章 院超级计算发展指数

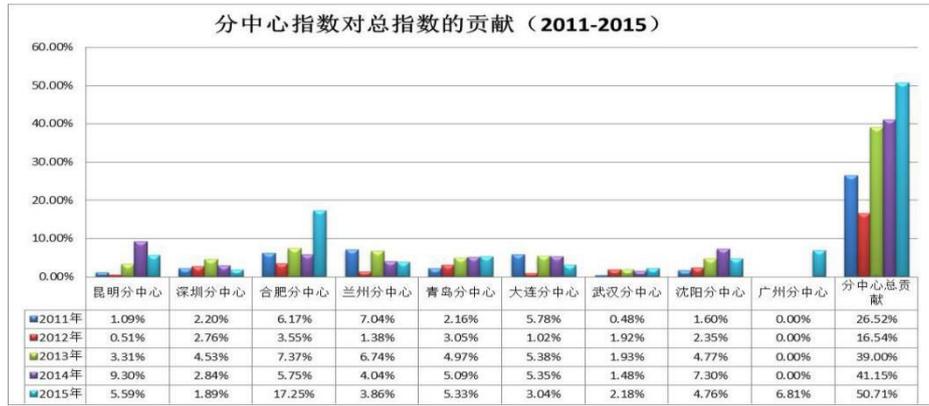


图 6.5 分中心指数对总指数的贡献率 (2011-2015 年)

(3) 9 家分中心的分指数发展走势如图 6.6 所示, 新增广州分中心; 各分中心环境建设分指数基本没太大变化, 合肥新增中国科学技术大学的基础设施, 兰州分中心有部分扩容, 希望我院有持续投入, 让分中心发挥更重要的中坚作用。

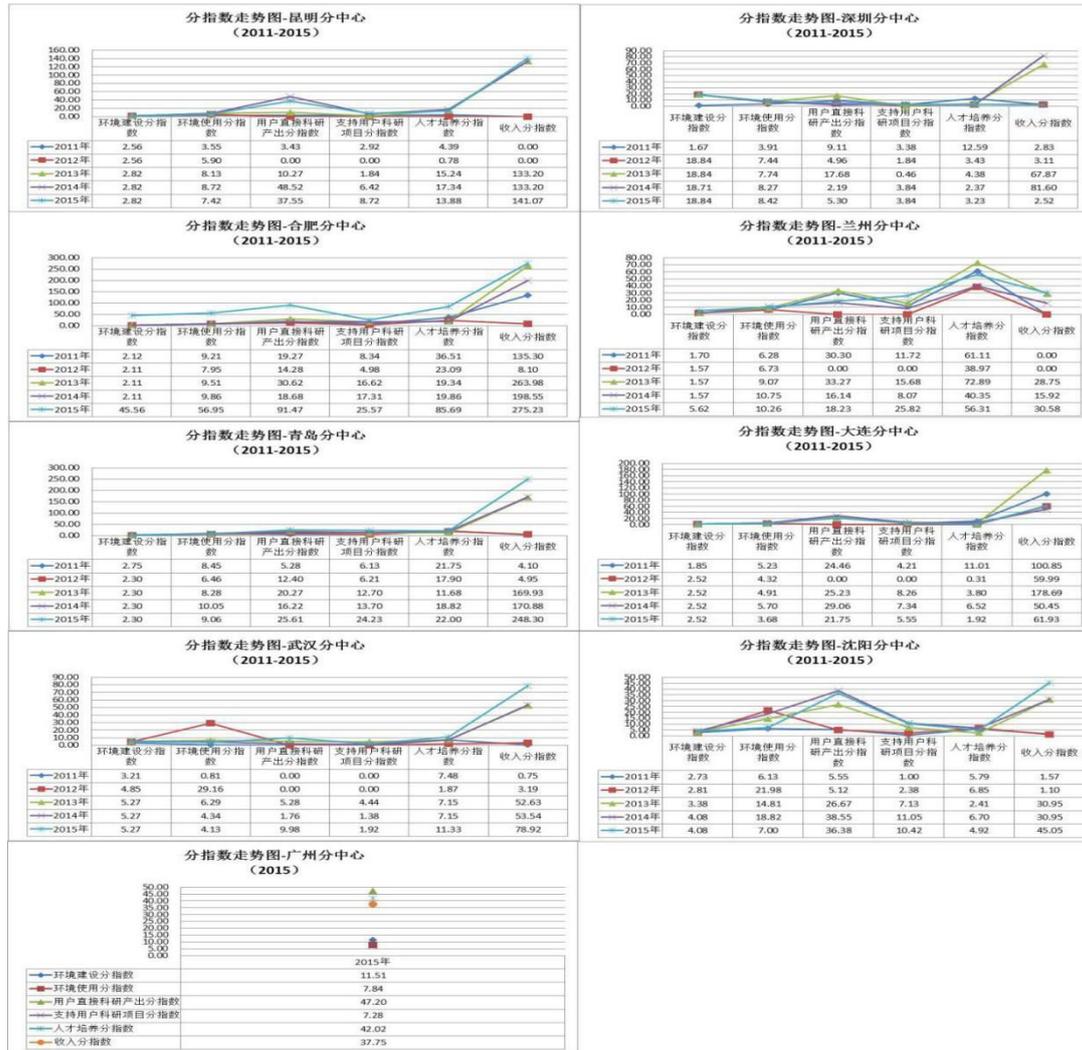


图 6.6 中国科学院超级计算发展分指数走势 (2011-2015 年)

第七章 问题与建议

本章立足院超级计算发展现状，结合前文分析结果，以国内外超级计算发展状况为参照，分析并总结院超级计算发展过程中存在的问题，并对未来发展提出一些建议。

7.1 院超级计算发展过程中存在的问题

(1) 超级计算系统能力大大不足

“中国科学院超级计算发展指数”的研究表明，计算能力提升是我院超级计算发展的决定性因素之一。院超级计算中心于2014年完成了第六代超级计算机——具有千万亿次计算能力的“元”高性能计算系统（一期）的建设。但在投入运行仅仅三个月之后，机器使用率即达到饱和并长期维持在较重负荷的状态。“元”系统二期将于2016年对外提供服务，预计投入使用后也将很快达到饱和。由此可见，我院超级计算系统的服务能力严重不足，这将大大影响应用规模与水平的提升和重大应用成果的产出。

(2) 超级计算应用与世界先进水平存在差距

随着峰值为5.49亿亿次的“天河二号”计算系统的出现，超级计算机的发展已进入十亿亿次的时代。2015年度的Gordon Bell奖授予了来自德克萨斯大学的科研小组，他们利用红杉超级计算机对全球地幔对流进行了数值模拟研究，模拟包含了超过600 000 000个非线性方程，计算性能达到了2.01亿亿次（20.1PetaFlops）。而我院“十二五”重点应用项目中，仅有5个应用实现了十万核级计算规模。而我国超级计算更多地应用于科学计算领域，在经济、金融、国家和社会安全等人文领域实际应用较少。在欧美等国家和地区，超级计算已广泛应用于经济预测、政策制定和社会管理等领域。通过“中国科学院超级计算发展指数”的研究表明，环境建设对于超级计算发展的贡献份额过大，环境使用的发展相对滞后于环境建设的发展。这说明，我院超级计算应用领域相对局限，大规模并行计算应用亟待进一步挖掘和培育，需要加大力度提升我院超级计算应用水平。

(3) 超级计算中心运维经费缺口较大

超级计算机的耗电量巨大，超级计算中心的第六代超级计算机的全负荷电费将超过1000万元/年。院拨运维经费仅能覆盖电费的70%左右，运维和技术支持、软件研发人员的相关费用必须自筹解决。超级计算中心运维经费的缺口超过800万/年，需靠各种项目经费维系正常运行。

(4) 超级计算应用人才严重不足

在现代科研活动中，计算已成为重要的范式，使用的频次越来越高。但23%的用户认为超级计算技术应用相对于其所在学科领域的计算问题研究而言尚处在探索阶段，超级计算应用技术相对于学科本身

而言滞后。通过多年追踪“中国科学院超级计算发展指数”，超级计算人才培养与用户直接科研产出呈现显著的正相关关系。但在执行多个大型的国家重点科技专项时，我院超级计算交叉领域人才匮乏的弊病彰显，在很大程度上制约了超级计算应用的发展。

7.2 对院超级计算未来发展的一些建议

针对上述我院超级计算发展存在的问题，本文提出以下建议。

(1) 加大超级计算硬件投入，提高我院超级计算机的硬能力

纵观“十二五”时期，我院第五代超级计算机“深腾 7000”长期处于高负荷状态，不堪重负。科学家的计算需求无法得到满足，研究潜能受到计算资源不足的影响，未能得到充分释放。长此以往，大大影响了科研产出。而在“十二五”末期启动的第六代超级计算机“元”很快即达到了较高的使用率。“中国科学院超级计算发展指数”表明，超级计算机的硬件能力是超级计算发展的决定性因素之一。因此，为进一步提升超级计算在科研中的应用水平，必须加大投入建设计算能力更为强大的超级计算机，更好地满足科学研究的需求。

(2) 采取措施，有效地促进超级计算应用发展

应用是超级计算发展的驱动力，而应用水平则是一个国家信息技术能力的重要指标。我们必须结合科学研究、经济建设、社会发展、国防安全对高性能计算的巨大需求，加大投入，加深和拓展超级计算应用，使得高性能计算应用发展与国民经济和国家重大战略需求相结合、相统一，充分发挥超级计算的社会效益。同时，采取有效措施并探索有效组织我院超级计算相关力量，开展算法研究与学科应用和软件深度交叉与合作的新模式。并且针对我院超级计算应用中的重点和瓶颈问题开展攻关，提升我院科学与工程计算应用水平。

(3) 创新运维经费支持的新模式

我院每年用于各个研究所、实验室的超级计算设备更新和购置的经费来源较多，在国家、科学院以及企业单位的各种项目也包含了一定比例的计算费。在现有模式中，计算费的使用效率不高。一方面，院超级计算环境的运维经费严重不足；另一方面，科学家们的科研项目的计算费有相当比例处于半睡眠状态。如能通过一定的组织方式将各类项目中的计算费直接支付给院超级计算中心，再将计算资源以服务机时的方式调配科学家使用，一方面可大大提升服务水平和拓展服务内容，另一方面也可使科学家得到更优质的计算资源，享受到更高水平的计算服务。从而促进我院的超级计算服务水平不断提高，实现可持续性发展。

(4) 加强超级计算交叉学科人才培养

超级计算应用的发展涉及多个层面和环节，需加强多学科的密切协作。物理建模、数值算法、并行

软件编写、软硬件协同等均需进行专业和深入的研究，这无疑需要加强对超级计算交叉学科人才的培养。超级计算机软硬件已呈现出跨越式发展的趋势，对于系统运维和多学科应用人才的需求越来越强烈，对人才综合素质的要求也越来越高。为了更好地运维和使用超级计算机，必须从体制、机制上进行探索，大力培养超级计算综合应用人才，即可以较好地融合相关学科领域理论与方法以及高性能计算技术的复合型人才。在全院针对各超级计算应用领域特别是某些新兴应用（如精准医学、脑科学等）加大人才培养的投入力度，稳定相应的人才队伍，并面向未来适当储备人才，以应对超级计算应用的快速发展。

参考文献

- [1] 中国科学院超级计算环境 <http://www.cscgrid.cn>
- [2] 中国科学院超级计算发展指数年度报告（2011、2012、2013、2014、2015）
- [3] 中国科学院超级计算发展报告（2006-2010）

致谢

值此报告内容定稿之际，请允许我们对《中国科学院超级计算发展报告（2011年-2015年）》的数据收集与报告编写人员致以深深的敬意，对为本报告提出重点咨询建议的专家与学者致以的深深的谢意，同时，还要向院超级计算环境各类用户表示我们诚挚的感激之情，正因为有您们的努力耕耘并取得诸多的超级计算应用成果，院超级计算发展才得以成效显著，本报告的数据也才更加真实可靠。

感谢院条件保障与财务局和计算机网络信息中心各级领导！在您们的正确领导下，院超级计算发展成绩斐然；在您们的精心指导下，本报告内容得以不断丰富和完善。

感谢关心我院超级计算发展的社会各界同仁！院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。

最后，祝愿“十三五”期间我院超级计算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

- ◇ 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
- ◇ 网格环境：由“总中心—分中心—所级中心”构成的三层架构式的超级计算环境
- ◇ 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小时
- ◇ 机时：即CPU小时，通常指作业运行过程中所消耗的CPU时间
- ◇ 系统整体使用率：指在一段时间内超级计算系统的所有用户使用的机时数量占这段时间系统正常运行所提供的总机时的比例（根据国际惯例，超级计算机的使用率达到80%左右，就处于满负荷运行状态）
- ◇ 并行效率：用于衡量并行计算性能的优劣，并行效率越高，用户应用程序的并行计算性能越好
- ◇ 超级计算发展指数：由本报告编写组首次正式提出，用于衡量超级计算发展水平的指标
- ◇ 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
- ◇ SCDI：SuperComputing Development Index的简写，即超级计算发展指数
- ◇ 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
- ◇ 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
- ◇ E级：Exa-scale，百亿亿次

附件 2 院超级计算用户应用成果收集

用户应用成果是说明超级计算发展状况的重要内容之一。为明确我院超级计算应用成果现状，保障院超级计算持续、健康发展，我们自主开发了基于 web 的“CAS SCDI 数据收集系统”，每年上半年面向中国科学院超级计算环境用户在线收集应用成果，在此基础上对超级计算应用成果进行统计分析，研究院超级计算发展过程中存在的问题，以期为今后我院超级计算发展发挥指引作用。

2.1 收集对象

结合院超级计算环境布局现状，超级计算应用成果调查对象为在总中心、分中心、所级中心及 GPU 单位等拥有计算账号的申请人，并以课题组为基本单位提交其应用成果。

2.2 收集内容

超级计算应用成果调查内容包括直接科研产出（包括论文、专利、软件著作权等）、成果应用与效果、科研项目、人才培养等。另外，为明确用户对超级计算价值的评价情况和超级计算相关研究工作开展状况，在收集 2015 年度应用成果同时收集了超级计算价值评价与研究情况。

2.3 收集方法

十二五期间院超级计算应用成果收集采用按年度通过 CAS SCDI 数据收集系统在线收集（<http://survey.scgrid.cn>），目前已经关闭访问权限。

2.4 收集情况

成果年度	收集日期	收集数量
2011 年	2012 年 6 月 8 日~21 日 / 7 月 2 日~10 日，共计 16 个工作日	122 个课题组
2012 年	2012 年 4 月 12 日~26 日 / 5 月 3 日~13 日，共计 18 个工作日	122 个课题组
2013 年	2014 年 2 月 28 日~14 日 / 3 月 20 日~31 日，共计 19 个工作日	181 个课题组
2014 年	2015 年 4 月 30 日~5 月 15 日，共计 11 个工作日	133 个课题组
2015 年	2016 年 2 月 24 日~3 月 4 日，共计 8 个工作日	244 个课题组

联系方式

地址：北京市海淀区中关村南四街 4 号

中国科学院计算机网络信息中心

通讯地址：北京市 349 信箱

邮政编码：100190

电话：010-58812020

传真：010-58812115

网址：中国科学院超级计算环境 <http://cscgrid.cas.cn>

中国科学院超级计算中心 <http://www.sccas.cn>