
东方超算系统及其应用情况介绍

汇报人：姜金荣
中国科学院计算机网络信息中心
2023年 11 月30 日

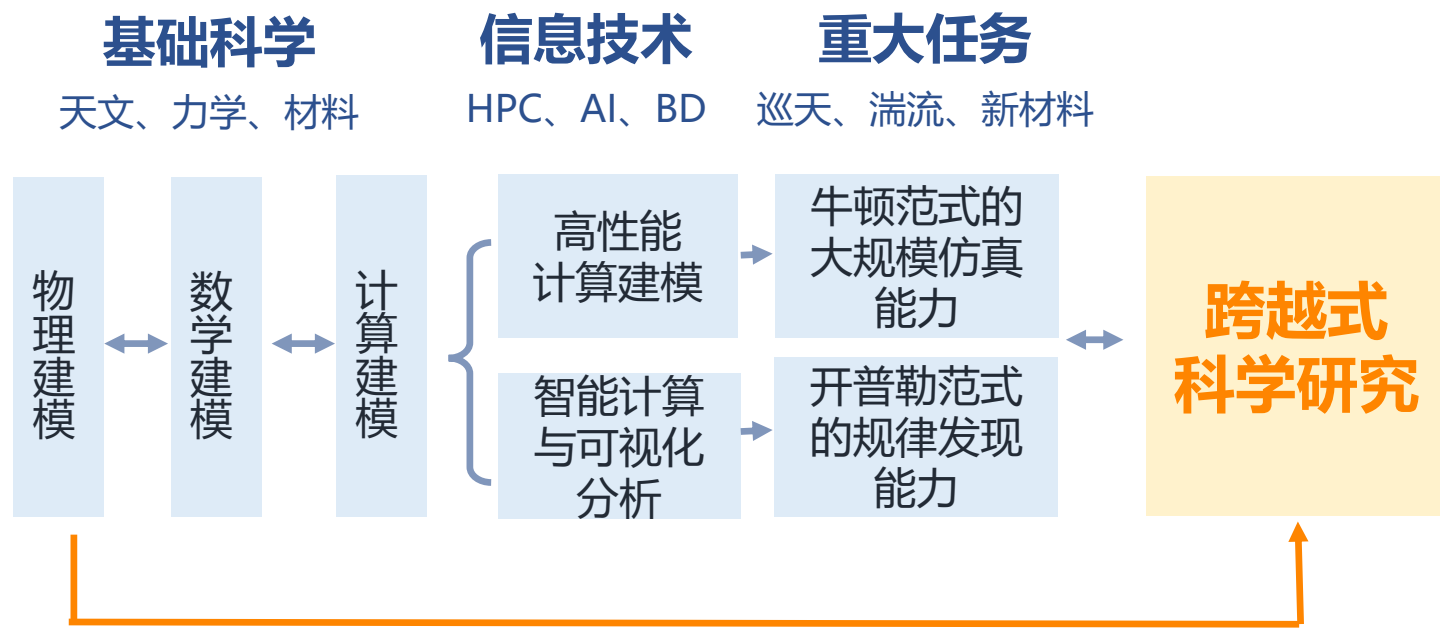
汇报提纲

一、超算重要性和院超算发展现状

二、东方超算系统及其应用情况

三、下一步工作重点

超算的重要性



融物理模型的智能超算

AlphaFold带动生物学“未有之变局”

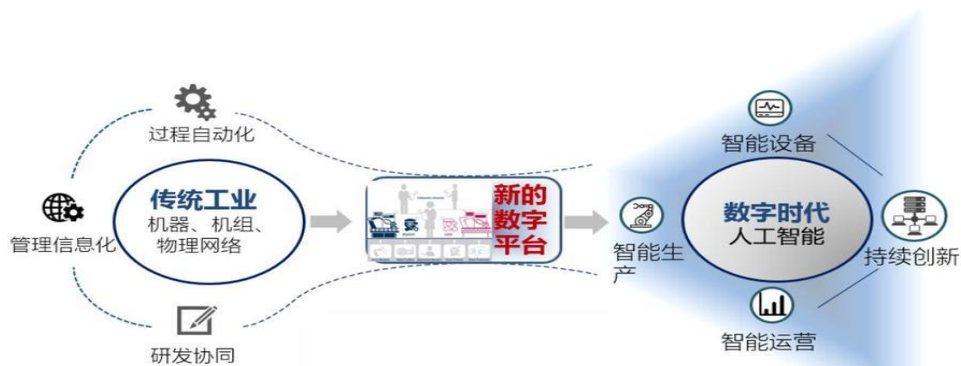
航天领域气动计算目标“星辰大海”

计算与数据融合改变拓扑材料研究模式

计算智能“发现”极端天气

E级Ops的基因组学计算

新科研范式



行业数字化智能化转型

- **GPT-3训练浮点计算量: 3.1×10^{23}**
- **最高分辨率气象预报: 神威·太湖之光全机运行1.1小时**
- **华为盘古气象大模型用了192张GPU卡 (~100M参数)**

超算的重要性

为了提升国家核心科技竞争力，各国都在积极发展超算

- 2019年 英国 ExCALIBUR, 设计面向高性能计算机的软件与算法

- 2014年 欧盟启动 Horizon 2020 计划, 目标是部署世界一流的高性能计算机系统 (EuroHPC), 研究应用、算法和创新生态环境



- 2016年中国推出了3台E级机计划, 发展国产高性能计算机及应用软件生态



- 2014年 日本推动 Flagship 2020 计划, 部署富岳系统, 解决系统软件、体系结构、应用和系统设计四大挑战

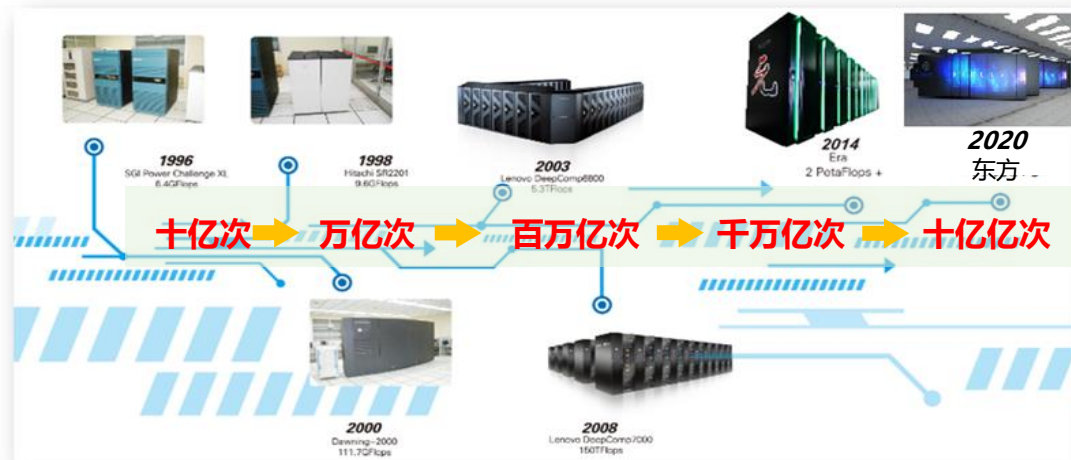


- 2016年 美国启动 ECP (Exascale Computing Project), 部署3套E级计算系统, 应用和算法软件研发



中科院超算发展情况

- 超级计算服务始于**1996年**
- 超过**1000**个用户，覆盖我院**85**家研究所、**154**家高校及企事业单位
- 国家NSFC、863、973、院重大专项**400+**个项目及**4400+**个课题组的计算支持服务
- 超级计算使用和软件培训，促进学科发展，培养超算领域人才



- **第七代超算系统：“东方”国产异构系统**
 - 首个先导C专项研制
 - 国产X86处理器+国产类GPU加速
 - 总算力200PFlops
 - 计算机网络信息中心运行管理



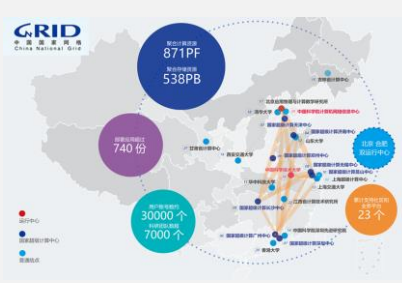
我院在国家超算学科领域占有重要地位

长期发展超算，在超算环境建设、算法与与软件研制上取得长足发展

超级计算创新联盟
发起及秘书长单位



中国国家网格
运行管理中心及北方主节点



获2020年
国家科学技术进步二等奖



位列我国科学计算应用发展前沿，在应用水平、计算规模及成果显示度上取得进步

多领域科学家联合攻关取得
高水平成果的成功

十大千核应用占我国80%以上
大规模并行计算

全球大气动力学应用取得
“戈登·贝尔”奖突破

“东方”超算系统全机应用
取得重大突破

20世纪九十年代

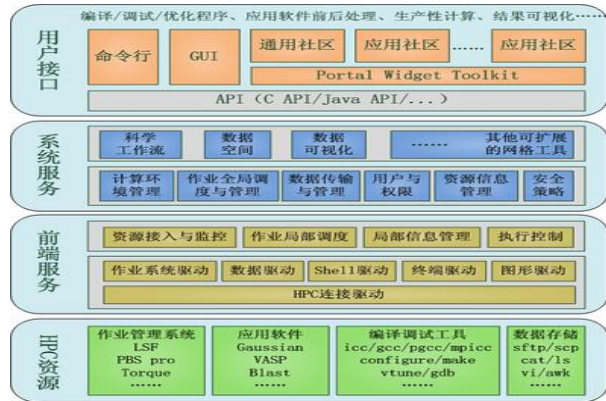
2010年前后

2016年

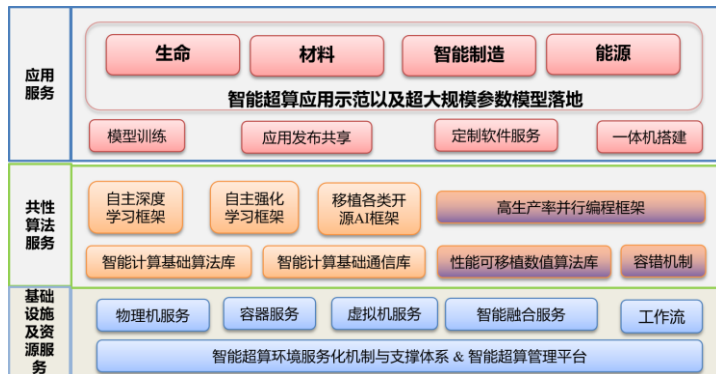
2020年

发展超算核心技术，形成多个成熟软件包

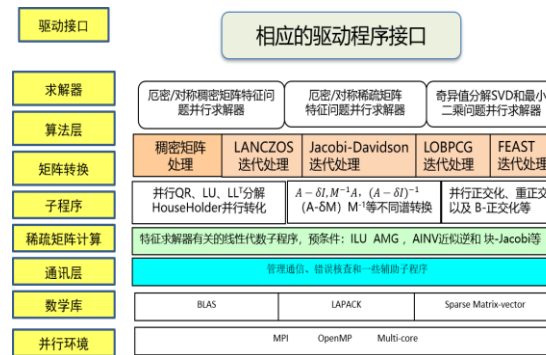
超级计算环境中间件 SCE



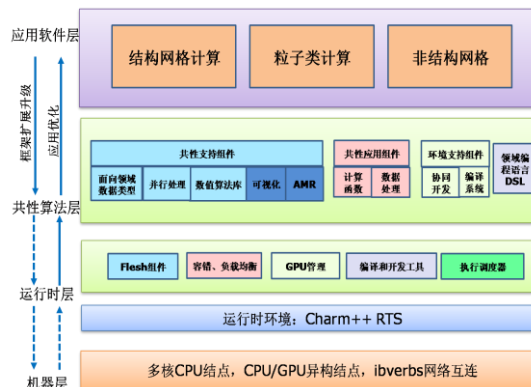
人工智能框架



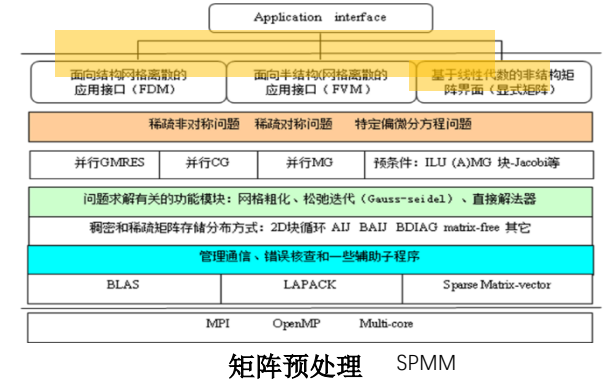
特征值问题求解并行软件包 HPSEPS



并行编程框架 SC_Tangram



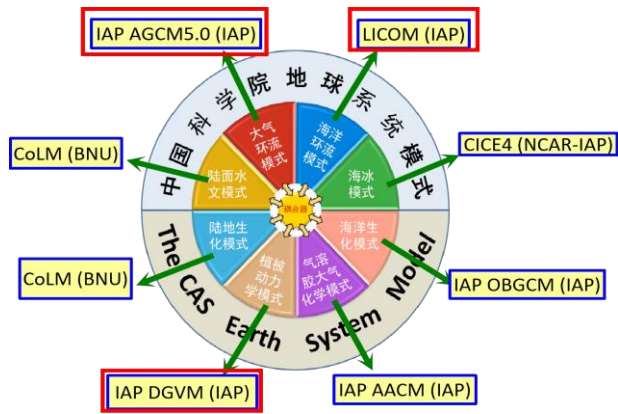
线性代数方程求解算法 软件包HSLES



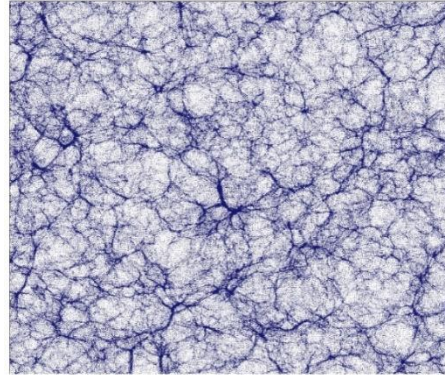
科学计算可视化分析 平台GPVis



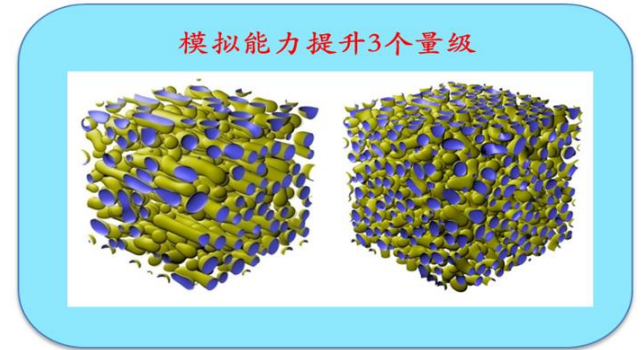
参与研发大规模应用软件，助力学科发展



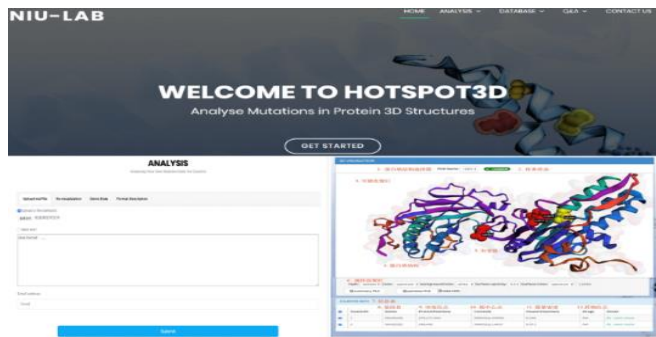
地球系统模式CAS-ESM



大规模计算宇宙学N体模拟软件
PhotoNS



材料微组织演化大规模模拟
软件ScETD-PF



多组学分析算法与软件

CCFD

- 常规计算**
 - 常用数值方法
 - 双时间步推进
 - 多种RANS模型
 - 多重网格加速
- 特种计算**
 - 重叠网格技术
 - 变形网格技术
 - 6DOF运动解算
 - 结构模态分析
- 并行技术**
 - OpenMP/MPI
 - 万核级并行
 - 异构计算

面向航空航天的实际应用
中航601所、中航603所、中航西安无人机研发中心、北航无人机所、航天科工九部

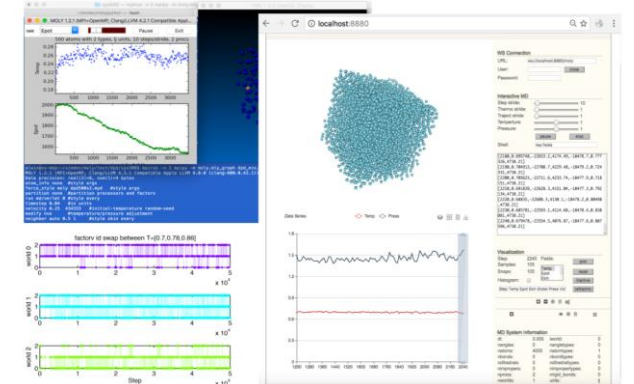
面向高校院所的开发平台
北航、北理工、西工大、大连理工、中科院力学所、数学所、深研研究院

面向超级计算的国产软件
国家超算广州中心、天津中心、无锡中心

NSFC项目，类C919外形

CHN-TI标模，参加全国性CFD测评活动

面向工程应用的大规模流场模拟
软件CCFD



分子动力学模拟应用软件
eMD

承担多项国家及院高性能计算重大项目，取得成果

十三五国家重点研发计划项目3项，课题13个

十四五国家重点研发计划项目1项，课题9个

- 国家高性能计算环境服务化机制与支撑体系研究（一期）
- 国家高性能计算环境服务化机制与支撑体系研究（二期）
- 基于国家高性能计算环境的生物医药应用服务社区
- 面向新一代超算系统的油气藏模拟软件

国家重大科技基础设施

- 地球系统数值模拟装置（地球系统模式数值模拟系统、支撑数据库和可视化分系统）

支持雄安新区创新发展专项

- 雄安超级计算中心运管软件与应用研制

院先导C专项项目“应用适配与运行环境建设”

院先导B专项“适配国产异构计算系统的先进计算方法与软件”

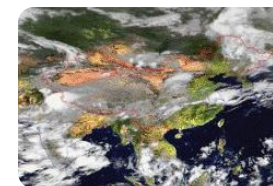


获2020年国家科学技术进步二等奖

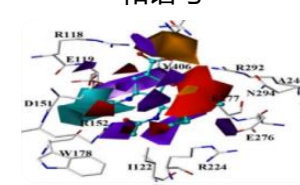
(迟学斌研究员排名第二)



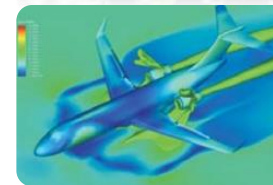
和谐号



天气预报



新药研发



国产大飞机C919

打造了高性能计算培训

二十年品牌 “高性能计算技术培训”

为在全国范围的国家科研单位、高等院校及企业开展高性能计算培训与应用推广，培养高性能计算专业人才并推广高性能计算应用，中心自2002年起，已累计举办公益培训十八期，千余人次接受了培训。

本着“以需求为导向、理论指导实践、学以致用、加强交流”的原则，中心从学员需求出发，采用普及化培训与定制化培训相结合的方式，取得了良好的培训效果，为我国超级计算的发展源源不断地输送着人才。



高性能计算培训班合影

汇报提纲

一、超算重要性和院超算发展现状

二、东方超算系统及其应用情况

三、下一步工作重点

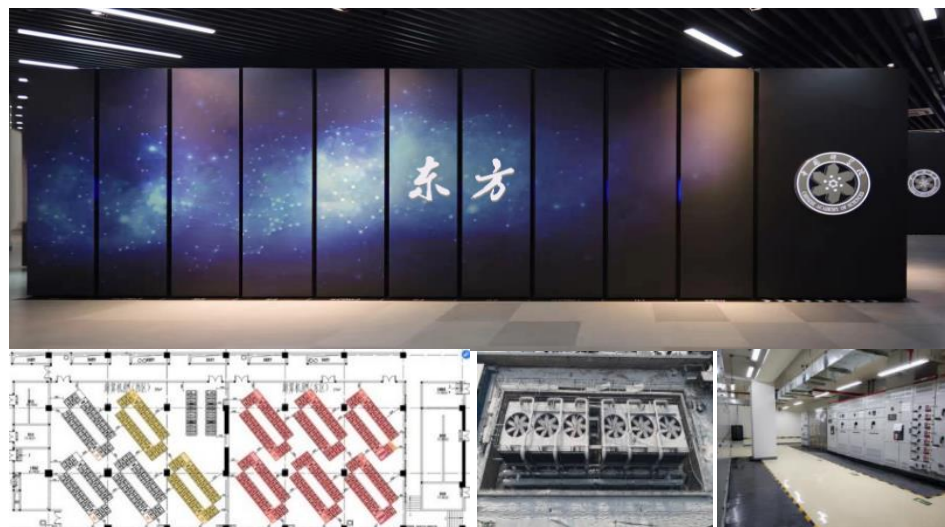
“东方” 新一代超级计算系统

“东方” 超级计算系统 (ORISE) (200P, 北京)

中科院首个先导C “国产安全可控先进计算系统研制” 重大成果

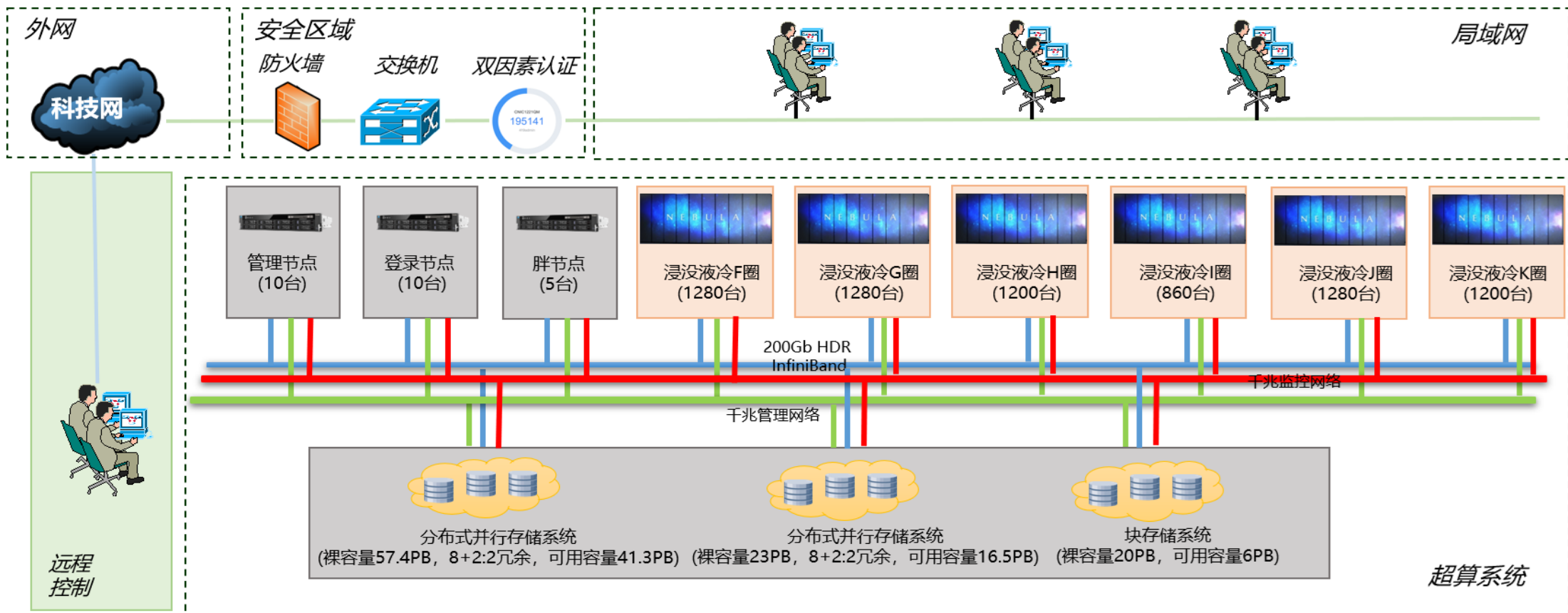
中科院超级计算中心第七代超级计算机

- **运行责任单位**: 中国科学院计算机网络信息中心
- **物理地址**: 中国科学院信息化大厦 (北京市海淀区东升南路2号院)
- **总投资**: 17.2亿元



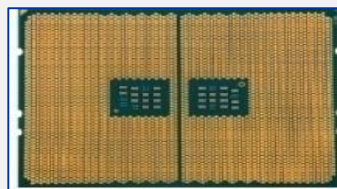
系统结构

- 7100台计算节点，DCU最高可提供197.75PFlops双精度计算能力，CPU最高可提供2.27PFlops双精度计算能力
- 100.4PB裸容量，可用容量约为63.8PB
- 全系统 200Gbps HDR InfiniBand 线速互连
- 完备的集群系统软件，曙光Gridview集群操作系统，提供系统监控、管理、告警、统计、作业调度等功能和组件，及HPC开发运行环境



“东方” 超级计算系统

海光1号 X86处理器



- X86架构, 14nm 工艺
- 32核/64线程, 2.0GHz 基频, 稳定运行 3.0GHz
- 八通道 DDR4 2666MHz ECC 内存
- 128 个 PCIe Gen3 通道
- **核心数、访存性能、I/O 扩展能力全球领先**

海光DCU 1号 加速器



- 类 GPU 架构, 7nm 工艺
- 2.5D Interposer SoC 封装
- 1.7GHz, FP64 峰值 ~7 TFlops
- 16GB HBM2 片上高速内存, 内存带宽可达 1TB/s
- 支持 OpenCL, 兼容 CUDA 主流异构编程标准
- **计算性能、访存性能、能效达到国际先进水平**

国产X86处理器+国产类GPU加速器, 符合国际主流发展趋势的超大规模异构并行体系结构

世界上首台实现浸没式液体相变冷却技术规模化应用的超算系统, 实现超算系统、服务器、存储的国产化替代

主流超算系统，性能世界领先

2023年11月全球超级计算机10强 <http://www.top500.org>

排名	机构	国家	系统	处理器核/ 个	浮点速度 PFlop/s	架构
1	橡树岭国家实验室	美国	Frontier	8,699,904	1194.00	X86 CPU+GPU
2	阿贡国家实验室	美国	Aurora	4,742,808	585.34	X86 CPU+GPU
3	微软Azure云	美国	Eagle	1,123,200	561.20	X86 CPU+GPU
4	理研计算科学中心	日本	Fugaku	7,630,848	442.01	ARM CPU
5	芬兰国家超级计算中心	芬兰	LUMI	2,752,704	379.70	X86 CPU+GPU
6	意大利CINECA超算中心	意大利	Leonardo	1,824,768	238.70	X86 CPU+GPU
7	橡树岭国家实验室	美国	Summit	2,414,592	148.60	Power9+GPU
8	巴塞罗那超级计算中心	西班牙	MareNostrum 5 ACC	680,960	138.2	X86 CPU+GPU
9	英伟达公司	美国	Eos NVIDIA DGX SuperPOD	485,888	121.4	X86 CPU+GPU
10	劳伦斯利弗莫尔国家实验室	美国	Sierra	1,572,480	94.64	Power9+GPU

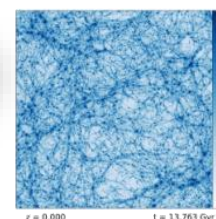
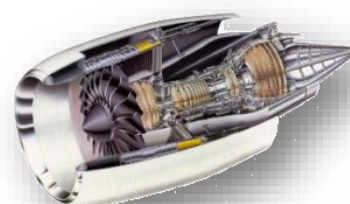
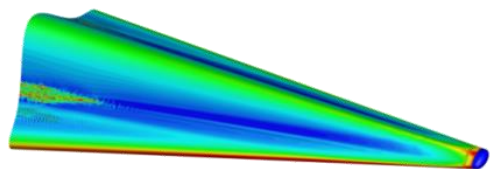
2020年3月，经中国高性能计算机性能TOP100排行榜专家组鉴定，HPL实测性能**119.6PF**，HPCG实测性能2.89PF，**超过当时第二的美国Sierra系统（2023年11月排第十）**

东方 (ORISE)

应用软件DCU适配和优化

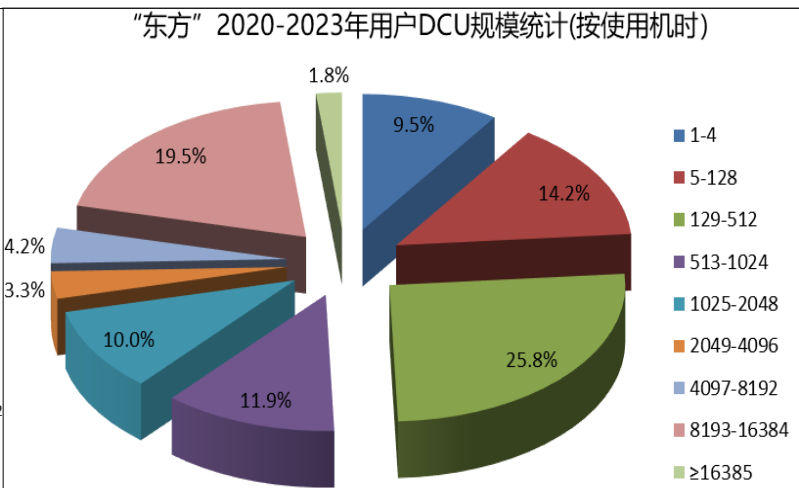
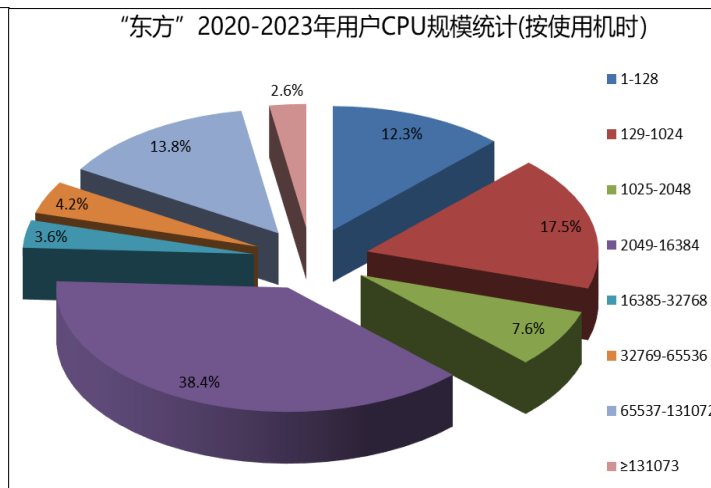
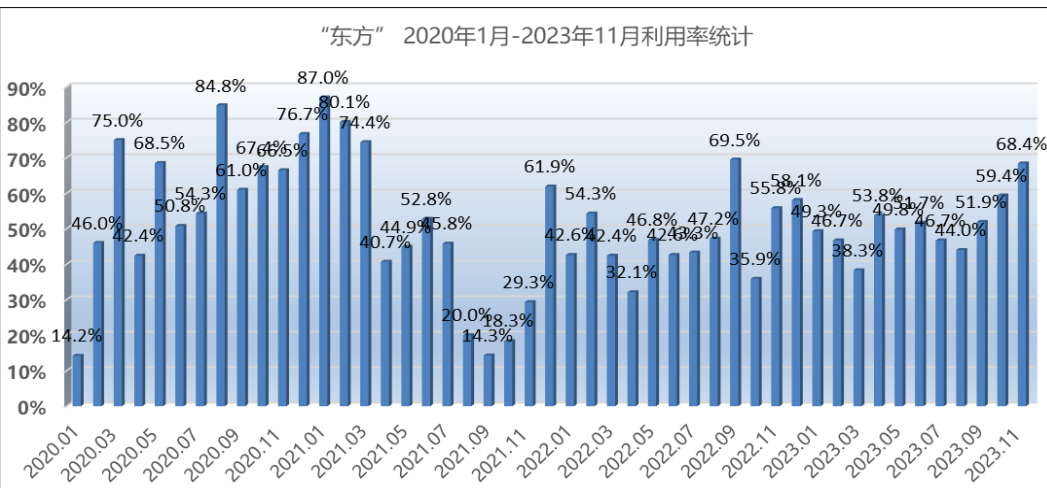
支撑了众多超大规模、战略性科学计算、工程仿真应用，实现了较广行业/领域覆盖

应用	应用效果	对标国际	国际先进水平
钛合金	持续性能 77.5P ，42.35%峰值，较入选GB Finalist提升52%。 入选GB奖水平 (CCF)	领跑	51PF
纳米器件	硅纳微结构与器件的计算模拟，6500节点。 入选GB奖水平 (CCF)	并跑	85.45PF(双精度) 90.89PF(混合精度)
格点QCD	用5184节点，强扩展性最大做到 96³×192 的格子，国际最大规模的格点量子色动力学模拟，有助微观粒子物理量的更精准计算	领跑	96 ³ ×192的格子
药物筛选	6000节点，6000CPU+24000DCU，50%效率，最强筛选能力 16-18亿 分子/天。 科技部“全国科技系统抗击新冠肺炎疫情先进集体和先进个人”	领跑	160000 CPU，10亿分子/天
海洋模式	用 6500 个节点，最大规模LICOM模式计算，全球平均分辨率 3km ， 10模式年	并跑	全球平均分辨率2km，几模式天
天文	已知最大粒子规模 1.48万亿 (11400 ³)，用6000个节点	并跑	~10PF
CFD	5.39千亿 网格规模，24576块DCU卡，模拟时间步长比传统显/隐格式提升10000/100倍，模拟规模比国外团队提升20倍 (2016) 和120倍 (2019)	并跑	九所JASMIN：百亿网格规模
DeepMD	在8192 DCU时，双精度模型测得7.2PFLOPS，达到了硬件峰值的13%	领跑	AI for Science
紫东太素	1.66亿超大规模高质量中文多模态预训练数据集	领跑	发表在人工智能顶级会议NeurIPS2022上



“东方” 为科学计算提供强大算力

- 2020年至2023年11月22日，共完成837万个作业，累计机时21.8亿CPU核小时，1.7亿DCU卡小时，涵盖物理、化学、材料、生物医药、计算宇宙、地球科学等领域
- 1024CPU及以下规模作业占用29.8%计算机时，2048CPU以上规模作业占用62.7%计算机时。
- 128DCU及以下规模作业占用计算23.7%机时，512DCU以上规模作业占用50.6%计算机时。



“东方超算” 服务重大科技基础设施

支持SKA、地球科学数值模拟装置等重大科技基础设施

- 开展**Ultramarine Simulation (群青)**，为星系巡天望远镜观测提供模拟星表，为**平方公里阵列射电望远镜 (SKA)** 的观测提供支持。（国家天文台）
- 依托东方超算，中心承担了地球系统数值模拟装置“地球系统模式数值模拟系统”和“数据库和可视化分系统”开发，支持国际模式比较计划 (CMIP) 气候系统模拟计算为**政府间气候变化专门委员会 (IPCC)** 报告和**国际气候变化谈判**提供数据、助力落实“**双碳**”战略。（大气所）

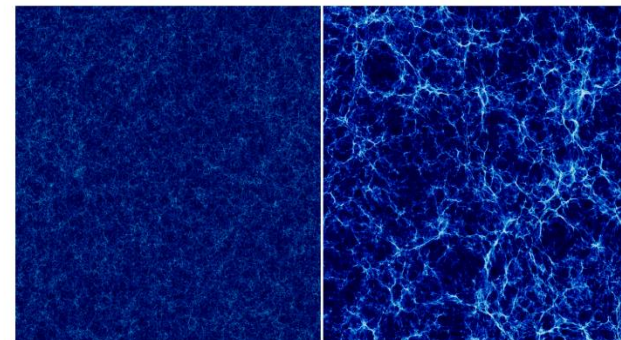


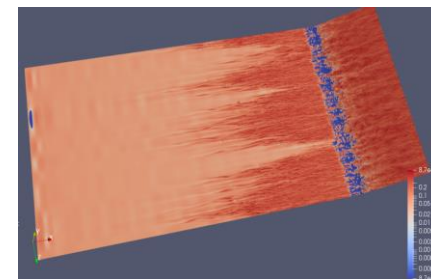
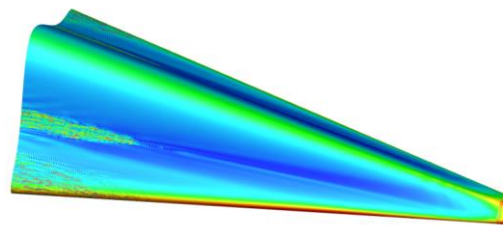
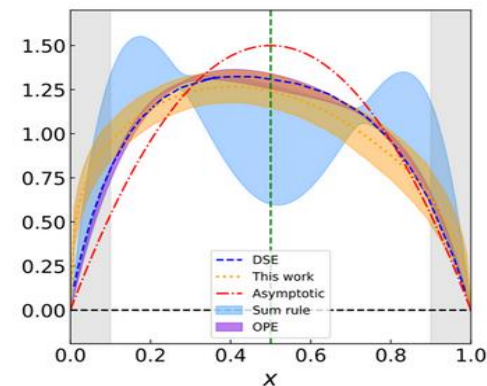
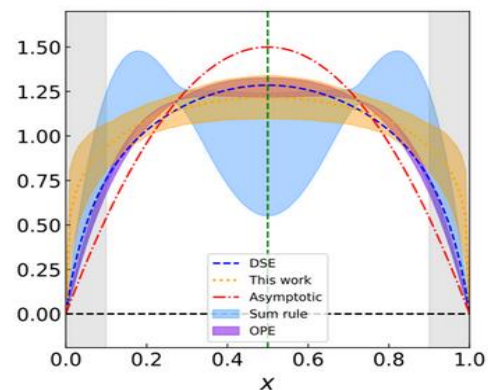
Figure 2. Projected dark matter density map at redshift $z = 5.5$. The left panel show dark matter distribution in a slice $512 h^{-1} \text{Mpc}$ on a side and $3.2 h^{-1} \text{Mpc}$ thick. The right panel show a “zoom-in” sub-region of the left with a scale $50 h^{-1} \text{Mpc}$.



“东方超算” 服务院先导专项

支持院先导专项40余项，涉及19家单位

- 最大**3亿格点数**的格点QCD大规模模拟计算，**国际上第一次**通过数值模拟直接验证质量的量子反常起源机制，为精确测量质子引力半径和探测相关引力波奠定理论基础。（理论物理所）
- 对升力体外形展开了**首次**DNS计算，对超声速和高超声速的压缩折角都进行了**超百亿网格的直接数值模拟**，获取流场数据库，为飞行器设计和流动机理研究提供支撑。（力学所）

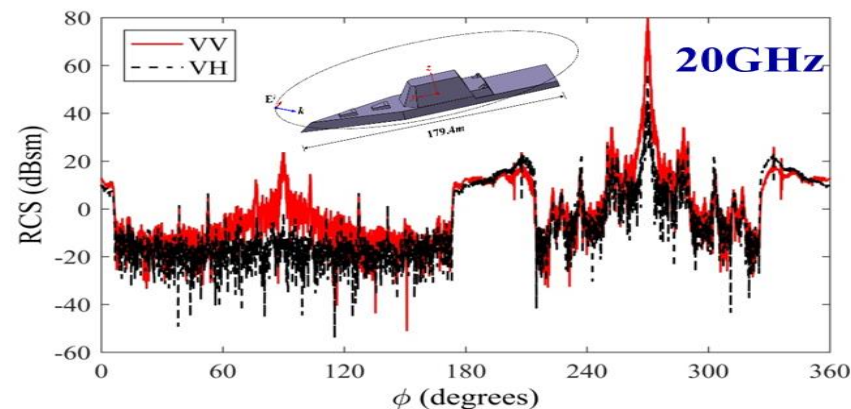
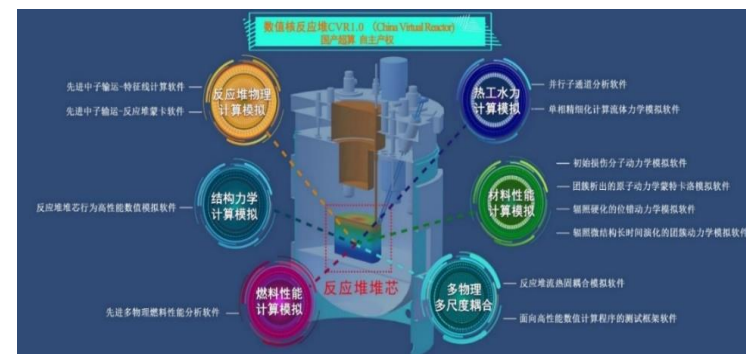


“东方超算” 服务重点研发计划等国家项目

支持国家重点研发计划30余项，涉及100多家单位

■ 中心**首次**实现中国实验快堆全堆芯结构静力学和动力学百亿网格仿真；**首次**实现高达千亿规模特征线的中子输运方程求解，相应成果**获得SC最佳论文和最佳学生论文双提名**（历史上大陆学者仅3次）。（计算机网络信息中心）

■ 支持对**218亿规模**未知量、17254电波长的大型战略隐身轰炸机模型，**418亿规模**未知量、23940电波长的超大型舰船模型等复杂电大目标的大规模并行求解，**国内外计算电磁领域目前报道的最大可计算规模**。（北理工）



汇报提纲

一、超算重要性和院超算发展现状

二、东方超算系统及其应用情况

三、下一步工作重点

支撑国家、地方重要科技项目

- 积极参加国家、地方布局，多渠道联合国家战略科技力量
- 支撑院重大科技攻关项目、助力“两加快一努力”

- 支撑“国船国导”、“高场高温超导材料”等15个抢占科技制高点专项等重大任务
- 以科学计算引领科技创新，用自主的超算系统来解决我国重大基础研究问题
- 仿真软件算法算力适配、可视化、人工智能等关键技术和软件模块研发



中华人民共和国科学技术部
Ministry of Science and Technology of the People's Republic of China

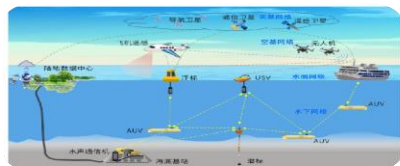


中华人民共和国国家发展和改革委员会
National Development and Reform Commission

北京市科学技术委员会、中关村科技园区管理委员会
Beijing Municipal Science & Technology Commission, Administrative Commission of Zhongguancun Science Park



任务二
多平台、多要素高精度海洋
气象观测分系统



任务一
超高分辨率海洋
气象预报分系统



任务三
适用于多场景的导航应用及
海洋保障分系统



中国科学院发展规划局局长 翟立新
编制《抢占科技制高点攻坚方案》

依托先导B专项，完善国产超算软件生态

适配国产异构计算系统的先进计算方法与软件

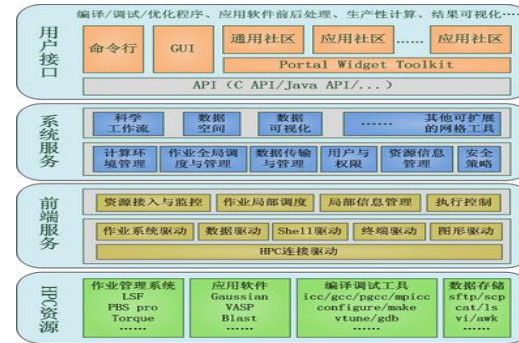
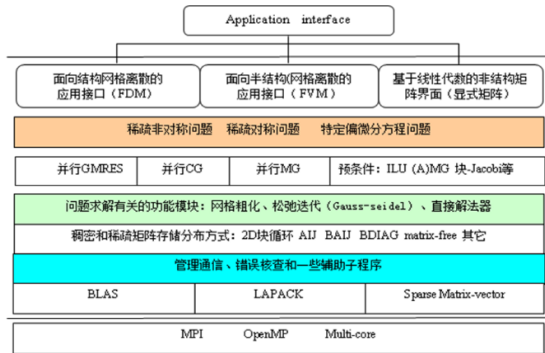
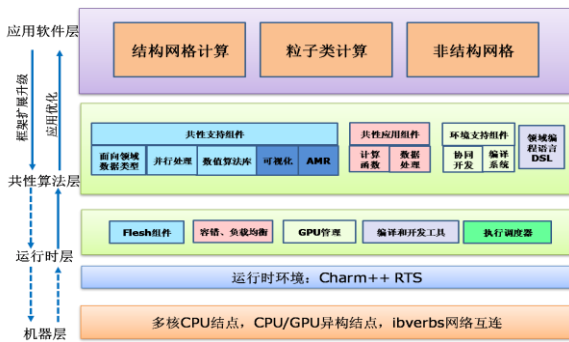
用好现有“东方”国产异构系统，从底层突破国产高性能软件生态之痛，提供超过3.4亿万CPU核时、4570万DCU卡时，产出高水平原创性成果



依托单位：中国科学院计算机网络信息中心

发展超算核心技术

研发核心技术和代表性科学计算应用软件，支撑科学创新发展

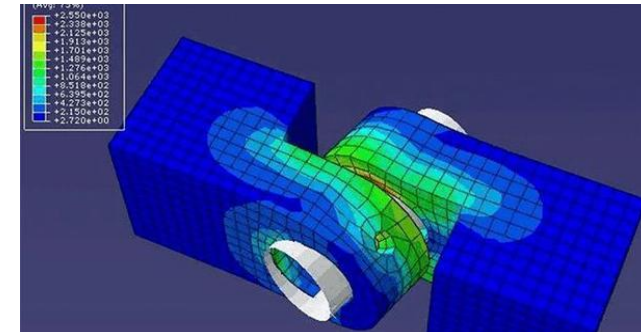
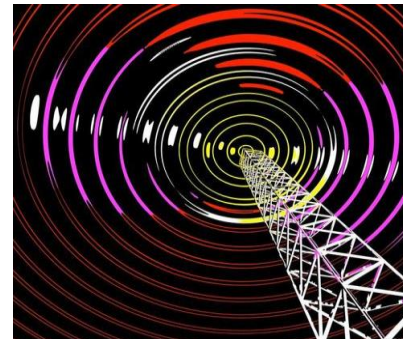
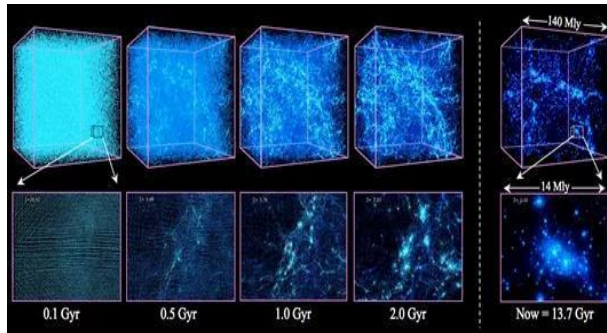
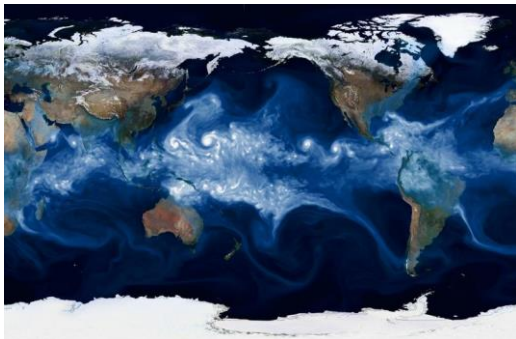


框架软件的完善和应用推广

算法库研发与应用

超算互联网平台软件

并行优化技术研究与应用



大气、海洋、天文、电磁、有限元仿真

组织高性能计算培训和学术研讨

- 组织超算前沿技术研讨交流
- 通过建模、算法，寻求解决系统性能瓶颈问题方案
- 互通超算技术信息，以新知识、新技术、新视野推动国超发展

高性能计算培训



高性能计算论坛

第三届国产高性能计算应用生态论坛

主持/嘉宾：迟学斌,龚春叶,孟祥飞,黄聃,赵...

红岛国际会议展览中心-观海楼(南楼)B302
14:00-16:00

第四届地学高性能计算与人工智能论坛

主持/嘉宾：姜金荣,王玉柱,林鹏飞,张贺,刘...

红岛国际会议展览中心-望海楼(北楼)A405
14:00-16:00

东方讲堂

东方超算讲堂 第7期

全球海洋长时序观测数据集建设和应用

全球海洋长时序观测数据集建设和应用，是海洋科学研究的重要基础。本次论坛将邀请国内外专家，就海洋观测数据集的建设和应用进行深入探讨。论坛将围绕海洋观测数据集的建设和应用，从数据采集、处理、存储、共享等方面展开讨论。论坛将邀请国内外专家，就海洋观测数据集的建设和应用进行深入探讨。论坛将围绕海洋观测数据集的建设和应用，从数据采集、处理、存储、共享等方面展开讨论。

特邀嘉宾：程雷京 中国科学院大气物理研究所 研究员

演讲题目：高性能工业软件研发和地球科学数值模拟应用

主持人：姜金荣 中国科学院青岛海洋地质研究所 所长

时间：2023年7月20日 14:00 中科院青岛大港1501会议室
#腾讯会议：741-814-558

联系方式：
姜金荣 13964061111
程雷京 0532-80881111 (微信同号) 程雷京@iapf.ac.cn

东方超算讲堂 第8期

高性能工业软件研发和地球科学数值模拟应用

高性能工业软件研发和地球科学数值模拟应用，是地球科学研究的重要基础。本次论坛将邀请国内外专家，就高性能工业软件研发和地球科学数值模拟应用进行深入探讨。论坛将围绕高性能工业软件研发和地球科学数值模拟应用，从软件研发、应用、优化等方面展开讨论。论坛将邀请国内外专家，就高性能工业软件研发和地球科学数值模拟应用进行深入探讨。论坛将围绕高性能工业软件研发和地球科学数值模拟应用，从软件研发、应用、优化等方面展开讨论。

特邀嘉宾：郑亮 中国科学院青岛海洋地质研究所 研究员

演讲题目：高性能工业软件研发和地球科学数值模拟应用

主持人：姜金荣 中国科学院青岛海洋地质研究所 所长

时间：2023年10月30日 14:00 中科院青岛大港1501会议室
#腾讯会议：700-890-064

联系方式：
姜金荣 13964061111
郑亮 0532-80881111 (微信同号) 郑亮@igpp.cma.gov.cn

开展超算调研及推广活动

- 开展算力需求调研
- 组织应用推广和宣传活动

“百所调研”

重大任务：深海所、赣江院、长光所等

重大战略：地理所、大气物理所等

前沿科学：物理所、国家天文台等

生命健康：杭州医工所、上海营养所等



组织了“东方之星”青年科学家创新基金，收到院内84家单位195份合格申请书，20个课题入选

加入“力学学会”，组织“力学领域超算应用课题遴选”，提供6个入选课题算力支持

合作“空气动力学会”，组织“计算赋能风工程和工业空气动力学科技攻关”，提供9个入选课题算力支持

服务我院科技创新发展

加速科学发现、产出国际一流科研成果

构建国产超算系统软件生态

谢谢