

· 资助成果 ·

## 协同构建国产超算应用生态环境

卢宇彤\* 陈志广\*

中山大学, 广州 510006

**[摘要]** 近年来,我国超算系统技术快速发展进入世界领先前列,如何同步加快超算应用的发展以充分发挥国产超算的效能,是学术界和产业界共同关注的问题。本文以世界超算 TOP500“六连冠”的“天河二号”超级计算机在国家超算广州中心的应用实践为例,围绕国家自然科学基金委员会与广东省政府联合设立的我国首个大规模引导、支持超算应用的专项——超级计算科学应用研究专项的执行情况,分析了如何发挥政府、大学、科研机构的职能和作用,促进国内多学科研究人员利用现代科学研究和产业技术革新的高性能计算方法来开展各类研究与创新,协同构建国产超算应用生态,加快提升我国超算应用水平。

**[关键词]** 高性能计算;应用软件;多学科交叉;超算应用生态

超级计算(高性能计算)已经成为科学技术发展中的重要研究手段,与传统的理论研究和实验观察一起构成了现代科学技术和工程设计中相互补充、相互关联的研究方法<sup>[1]</sup>。加快发展超级计算对于提升国家和地方的科技自主创新能力、增强国家和区域竞争力、保障国家安全、促进社会经济和产业发展具有重要的战略意义。随着超算向各学科领域和行业的应用深入,超级计算机已成为人类解决能源、材料、环境、健康等方面所面临的重大挑战性问题的利器,并以其基础性、前沿性和前瞻性,对原始创新的促进作用,对下游产业的带动作用,成为国家和地区创新体系不可或缺的组成部分<sup>[2]</sup>。

过去十年间,我国超级计算机研制能力迅速提升,“天河一号”“天河二号”“神威-太湖之光”相继问鼎世界超级计算机 TOP500 榜单第一,打破了美日对世界领先超级计算机的垄断地位,建立了世界超算新格局。同时,世界一流国产超算系统的研发推动了我国相关软硬件技术和各学科领域超算应用水平的提升,有力支撑了我国的科技创新和社会发展<sup>[3]</sup>。但是,我国在高性能计算领域的投入,过去更多是对硬件研发的投入。相比较而言,我国在超算应用上的能力,包括应用的软件和水平,都与国际领先水平存在较大的差距,软件资源明显不足<sup>[4]</sup>。超



**卢宇彤** 中山大学计算机学院教授,国家超级计算广州中心主任。主要研究方向为高性能计算系统软件、大规模存储和文件系统,高效并行应用环境等。致力于超算和大数据、人工智能融合创新发展的技术、系统和应用的研究与实现。



**陈志广** 中山大学计算机学院副教授,国家超级计算广州中心副主任。主要研究方向为大数据存储与处理、并行与分布式计算、高性能计算与超级计算机相关研究。

级计算系统能力只有实际应用于科研与产业,切实推动科技创新,提升科学认识和工程设计水平,才能实现其核心价值。

国家自然科学基金委员会(以下简称“自然科学基金委”)审时度势,前瞻布局,与广东省人民政府联合设立了我国首个大规模引导、支持超算应用的专项——“超级计算科学应用研究专项”(简称“超算应用专项”)。超算应用专项依托国家超算广州中心开展实施,基于“天河二号”超级计算机和中心的超算应用服务平台,支撑了一大批前沿科学与工程创新研究,为提升我国各学科领域的超算应用水平,实现

收稿日期:2021-06-24;修回日期:2021-09-24

\* 通信作者,Email: yutong.lu@nscg-gz.cn, zhiguang.chen@nscg-gz.cn

我国基础科学研究与一流超算系统的对接,推动国产超算应用生态良性发展,支撑我国整体科研实力和创新能力提升起到了强有力的促进作用。

## 1 超算应用专项总体执行情况

超算应用专项在十三五期间自2016年2月正式启动实施,执行时间为2年,以6个月为一周期,分4个周期执行,每周期结束时进行效益评估,并遴选进入下一期的用户。超算应用专项一期入选项目团队606个,二期入选212个,三期入选100个,四期入选54个,使用超算的规模和水平不断提升。入选项目组的学科方向覆盖地球、工材、管理、化学、生命、数理、信息、医学等8大学部,有力提升国产超算应用的规模和效益。超算应用专项执行期间,专项项目组共使用58 622.5万核时,总使用比率为100%,63%以上的项目组机时使用比率超过100%。各学科项目组的总体资源使用情况如图1所示。

推广应用情况表明,各学科领域对超算有着广泛的需求,尤其是在数理、化学、信息、地球工材等基础学科领域的超算应用基础较好,这是自然科学基金委提前部署的“高性能科学计算的基础算法与可计算建模”重大研究计划打下的良好基础;在生命、医学、管理等领域的超算应用也在不断拓展,为近几年蓬勃发展的超算与大数据融合多模式计算研究与应用奠定了基础。执行期结束后,大多数项目成员持续获得了国家和省部级各类研究项目的支持,不断扩大规模使用超算在各自领域进一步深入研究并取得成果。

## 2 超算应用专项取得的成效

超算应用专项充分挖掘了我国广大科研人员对超算应用的旺盛需求,在专项的支持下,依托“天河二号”超级计算机,多学科领域实现了前所未有的

大规模计算,大大缩短了相应领域的研究周期,提升了科技创新能力,在科学发现、工程创新、软件自主可控、学科建设与人才培养等方面取得了显著的成效。

### 2.1 推动基础科学研究提质增效,促进多学科交叉融合创新

在超算应用专项支持下,自然科学基金委八大学科领域科研人员利用“天河二号”超级计算机持续开展创新研究,全方位促进了我国基础科学研究方法的转变,提升了整体科研效率,缩短科学研究周期,加速科学发现和技术突破。专项执行期间,支持各领域项目组共发表5 820多篇高质量的论文,其中SCI论文占比82.9%,*Science*、*Nature*文章(包含子刊)130篇,专利申请数量625件,还获得了各类奖项与荣誉77项,包括2016年度高等学校科学研究优秀成果奖、海洋工程科学技术一等奖、2017年中国气象学会科技进步一等奖、国际著名出版社Elsevier和SCI期刊JQSRT联合颁发的Peter C. Waterman Award、中国科学院科技促进奖、2018年IEEE Harrington-Mittra计算电磁学成就奖、2019年中国光学十大进展、2020年中国十大科技进展等。在超算应用专项的引导下,超过90%的项目组在专项结束后继续使用“天河二号”及其他国产超算系统开展创新研究,应用水平不断提升,持续产出大量创新研究成果。

在专项执行期间,研究团队取得了诸多创新成果。在生物医药领域,专项支持实现了国际上目前最快的已知化合物筛选,一天内完成4 200万个有机分子虚拟筛选,为针对未知突发性病毒的快速虚拟药物筛选提供了有效手段<sup>[5]</sup>。在宇宙科学领域,支持完成了国际上规模最大的中微子宇宙尺度演化模拟,首次测量到中微子在宇宙结构中的微分凝聚效应<sup>[6]</sup>。在大气科学领域,完成了网格分辨率达米级、

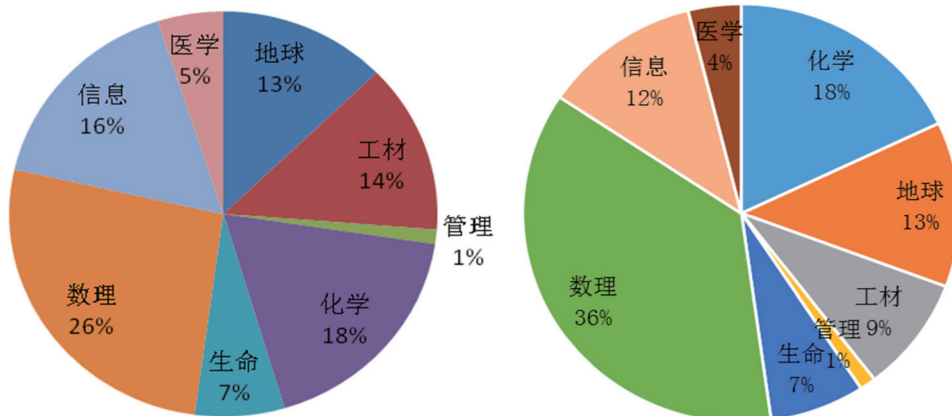


图1 各学科超算使用情况(左图为用户数分布情况,右图为机时分布情况)

十亿量级未知数数量、万核规模大气环境模拟,有力提升我国高分辨率污染溯源能力<sup>[7]</sup>。在生命科学领域,支持大规模水稻全基因组数据关联分析,发现了对稻瘟病具有广谱持久抗性的水稻天然变异位点,为防治稻瘟病提供了全新路径<sup>[8]</sup>。在化学领域,支持了Rh(III)催化的C-H键活化反应及其串联反应机制的探究与模拟计算,3天完成原来30天的计算量,使研究成果提前至少2年完成<sup>[9]</sup>。在材料科学领域,支持完成了新型石墨烯纳米带结构模拟,24小时内完成原3周的计算量,首次实现纳米带中四八元环的可控嵌入<sup>[10]</sup>。

在专项的牵引和培育下,研究团队的超算应用规模与水平在专项后继续提升,不断有基础科学领域成果涌现,这为我国前沿科技创新起到了关键的引导作用。例如,在国际上率先制备出综合性能俱佳的“三高”量子纠缠光子对源<sup>[11]</sup>;获得全球第一条高精度的古生代3亿多年的海洋生物多样性变化曲线,分辨率较国际同类研究提高400倍<sup>[12]</sup>。首次获得了宇宙中从最小的类似地球质量大小到具有最大质量的超级星系团(跨越20个数量级)的暗晕内部结构的清晰图像等<sup>[13]</sup>。特别地,依托专项牵引的生物医药领域的研究成果,超算中心搭建了药物虚拟筛选与创新设计平台,并自主设计了一种新颖的端到端深度学习框架DrugVQA<sup>[14]</sup>,利用视觉问答模型以预测药物-蛋白质相互作用,预测精度高,结果可解释性强,为推动基于蛋白质结构与功能改造的各类新药研发提供支撑。在2020年新冠肺炎疫情爆发时,超算中心依托药物虚拟筛选与创新设计平台,第一时间针对已上市药物进行了药物虚拟筛选,发现多种可能起作用的潜在药物,包括六种此前未见报道的药物,帮助中山大学驰援医疗队提出有效临床治疗药物、写入了国家卫健委的指导方案,有力地支持针对新型冠状病毒的老药新用研究。这些成果都是在专项的培育下最终开花结果,进一步印证超算应用专项基金对科学研究的牵引和促进作用。

## 2.2 解决重大工程问题,推动国家发展战略实施

围绕国家创新发展战略,超算应用专项支持了航空航天、气象预报、水利、核电、生物制药等多领域的一系列工程应用,解决众多国家和地方发展的实际工程问题,多项成果世界领先。

在航空航天工程方面,超算应用专项支持开展了140亿网格规模真实飞行器外形跨流域稀薄流动精细模拟,为解决高速飞行器跨流域绕流问题奠定基础<sup>[15]</sup>。电磁工程方面,支持完成了万核级复杂大

尺寸目标电磁特性计算,数小时内精确求解400波长电尺寸的电磁场仿真问题<sup>[16]</sup>。天文工程方面,实现了平方公里射电望远镜阵列(SKA)数据处理软件迄今为止最大规模、最高性能的成功运行<sup>[17]</sup>。核电工程方面,对核反应堆国际挑战难题BEAVRS模型进行了模拟,模型几何体达2500万,粒子数达千亿,首次精确给出我国在役核反应堆主管道范围内的中子注量率全区域三维分布,实际应用的典型案例包括:秦山一期核电站屏蔽计算、大亚湾1号机组反应堆pin-by-pin、秦山二期pin-by-pin、ACP100、BEAVRS换料周期计算、宁德一号机组换料周期计算、CFR600的PRN计算等<sup>[18]</sup>。水利桥梁工程方面,开展了三维溃坝水流精细仿真模拟,突破了混凝土坝溃决机制离散元模拟在实际大型水利工程应用的效率瓶颈,采用1平方米高分辨率网格覆盖约11平方公里城区,5分钟内完成洪水传播全过程模拟<sup>[19]</sup>。防灾工程方面,在“天河二号”支持下,中国地震局实现了对城市群地震灾害的高精度、高效、精细化模拟,将百万数量级建筑群的弹塑性精细仿真时间减少至10分钟以内<sup>[20]</sup>。战略装备制造工程方面,实现了船舶与海洋工程装备强非线性波浪抨击的精细模拟,精准预报砰击载荷,为解决恶劣海况下船舶甲板上浪抨击、海洋浮式平台气隙/抨击等问题提供技术手段<sup>[21]</sup>。

在专项的牵引下,还有更多的战略工程领域成果不断涌现。比如,通过高铁/隧道耦合压力波研究,采用上亿网格成功模拟重联编组高速列车在2公里隧道内快速交会等多个工况,支撑高铁气动外形优化设计以及隧道缓冲结构的优化<sup>[22]</sup>;通过风场分布数值计算支持兰新线百里挡风墙设计,成功破解了该关键区段行车安全这一世界性难题<sup>[23]</sup>;完成某四代核电项目相关热交换机应力分析与事故排放容器事故工况热冲击分析,助力建成了我国第一个百万千瓦级核电站压水堆反应堆压力容器。这些实际工程技术和应用成果,充分彰显了超算应用专项成果对国家战略工程的支撑作用。

## 2.3 培育典型领域软件国产替代,催生国产超算应用生态

应用软件是高性能计算的核心关键,建立国产自主应用软件生态环境是我国高性能计算可持续发展的保障。在超算应用专项支持下,“天河二号”上陆续研发和部署了460项各领域应用软件和252项工具软件。其中,材料与能源领域的软件共119项,生物计算领域的软件共154项,仿真设计领域的软

件共 73 项,天文宇宙与地球科学领域软件共 93 项,深度学习与大数据领域的软件共 21 项。超算应用专项共支持了 136 家项目组基于“天河二号”开展应用软件的自主研发工作,涵盖地球、工材、管理、化学、生命、数理、信息、医学等 8 大学科,涉及大气海洋环境、天文地球物理、装备制造、新材料设计与制备、生物医疗健康和大数据分析等方面,自主软件开发用户的分布情况如图 2 所示。

在超算应用专项的支持下,国家超算广州中心团队与专项各个项目组协作完成了多领域应用的大规模并行优化,形成了一批具有自主知识产权的大规模并行应用软件,加速典型领域的超算应用软件国产替代。电磁模拟分析软件方面,利用波尔兹曼模型与粒子云模型构建出“三流体”模型,基于“天河二号”全球首次实现对大尺度、长时间、磁重联演化的数值模拟,促进跨尺度级联分形湍流磁重联机理分析软件的自主可控<sup>[24]</sup>。药物设计软件方面,利用结合能量计算程序 AUTOFEF,依托“天河二号”将绝对结合自由能计算值的误差缩小到 3 kcal/mol 内,已应用于精准药物设计,部分先导化合物应用到抗老年性痴呆的临床实验<sup>[25]</sup>。气象模拟软件方面,自主研发的全球 25 公里(最高达 6 公里)高分辨率大气环流模式 FAMIL,解决了多项国际公认难题,入选国际高分辨率模式比较计划分辨率最高的 4 个气候模式,使我国自主高分辨率气候模式进入世界前列<sup>[26]</sup>。材料科学研究软件方面,扩展自适应偏置力(eABF)算法软件,使计算效率较传统方法提高 3 倍;开发了材料结构高温相变研究软件 STEP MAX,比主流第一性原理软件节省进 1/4 计算量<sup>[27]</sup>。地质勘探软件方面,进一步优化国产 GeoEast 软件,支持完成的南海可燃冰地震勘探数据三维叠前成像研究,成果数据成像质量可靠,分辨

率高,为我国南海可燃冰勘探和试采提供了有力支撑。计算流体力学软件方面,推广自主开发的风雷 CFD 软件,采用 33.2 亿非结构网格进行了大规模并行计算模拟测试,在十万核级下并行效率保持 90% 以上,目前持续提升软件能力扩展至百亿级网格和百万核规模,为建设一流“国家数字风洞”提供重要支撑<sup>[28]</sup>。

超算应用专项对地方科技和区域经济发展也起到了创新引擎的作用。广东省入选专项的项目组共 223 家,占专项支持项目组总数的 36.8%,有 20% 的广东省内专项项目组基于“天河二号”自主研发或优化了领域应用软件,领域涵盖对地观测及其信息处理、高精度天气预报、海洋过程及其资源和环境效应、火山喷发模拟等科学研究,以及工业特种材料、水利科学与海洋工程、高速流动及控制的机理、生物工程、基因研究、医疗与健康、量子材料、金融风险分析、房地产金融资产及衍生物定价与风险管理研究、车联网等智慧城市研究。超算应用专项的成果在广东省、广州市的气象预报、工业制造、生物医药、材料能源、智慧金融等各行业领域得到应用和推广。例如,汽车制造领域的广汽集团、小鹏汽车等,基于专项培育的平台,快速优化了其产品设计、生产流程,有效提升产品性能、节省研发成本,在市场竞争中占领先机。在专项培育的大量的领域成果基础上,广州市气象局依托“天河二号”成功实现 3 公里、1 公里分辨率的高精度短临气象预报系统 7×24 小时业务运行,每 12 分钟就能够完成一次城市未来 6 小时的天气预报<sup>[29]</sup>,大幅缩短了预报时间、提高了预报精度,使广州的短临天气预报达到国际领先水平,并成功拓展应用到广东省、珠海市、广西省的气象预报。

此外,专项支持香港地区项目组取得的应用示范,为后续广州超算在粤港澳大湾区的应用推广起到了至关重要的作用。在成功经验的引导下,港澳高校和科研机构的一大批科研团队开始与国家超算广州中心建立应用合作,多家高校组团使用超算中心资源。2018 年,粤港澳大湾区超算联盟正式成立,进一步实现了国家超算广州中心资源的开放共享,为粤港澳大湾区科技创新提供超算动力,为国家粤港澳大湾区战略规划的国际科技创新中心建设打下坚实基础。

#### 2.4 提升学科水平,培养具有超算思维、掌握超算方法的跨学科基础科研团队

基于“天河二号”强大的计算和存储能力,专项支持的团队得以开展原有条件下难以进行的研究,

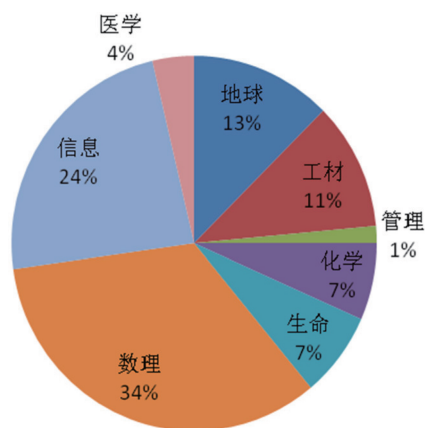


图 2 基于“天河二号”自主研发软件的领域分布

大幅提升研究广度与深度。推动基础研究高质量发展的同时,超算应用专项提供了一个天然的学科交叉平台。在超算专项的支持下,各学部的项目组与超算中心密切合作,利用“天河二号”进行跨学科协同创新,研究深度得以提升,学科竞争力得以加强。同时,大数据、人工智能等新兴学科的迅速发展都离不开超级计算的应用,超算专项为上述学科团队保障了必需的计算与数据资源,提供了重要的测试和推广平台,对我国新兴学科的发展起到了有力的推动作用。专项依托单位中山大学的计算机学科建设也取得了显著成效,建立起以超算、大数据、人工智能融合为特色的一流计算机学科。

在卓有成效的资助方式支持下,超算应用专项迅速培养了一批具备超算思维、掌握并行计算方法的基础科研团队,成为跨学科超算应用人才培养的基地。在基金委的委托下,超算中心举办了多期面向专项项目组的超算应用能力培训,从超算体系结构、并行编程模型、程序设计与开发、数据处理、云计算、应用优化等各方面,全面提升专项项目组的超算能力。在专项的支持下,一大批一线科研人员开始熟练使用超算开展科研,应用规模从最初的数十核迅速扩展至数万、数十万核,2万多名研究生和各领域科研人员开始进行超算理论学习与研究实践。超算中心与中山大学计算机学院还进一步研发构建了目前世界最大规模的超算教育实践平台“超算习堂”<sup>[30]</sup>,面向全国广大高校本科生与研究生,以及工程研究人员提供高性能计算优质教育内容。超算习堂注重理论与实践相结合,创新实现了以学习者为中心,个性化递进式实践教学模式,集成了多层次的资源环境和教育内容,实现了超算教育实践层次的全覆盖。特别是为了适应高性能计算的多学科交叉性,构建了面向不同体系结构以及特定领域编程模型和语言的实践环境,按需定制不同应用领域的在线教学实验室,满足了超算多层次人才培养需求。通过线上提供超算课程教育与并行程序设计实践,目前已支持全国各大高校、主要科研机构的数万名学生和研究人员使用,有力促进超算人才培养。

## 2.5 有力提升国家超算广州中心的应用服务与应用平台研发能力

为保障超算应用专项的执行,国家超算广州中心在专项执行过程中,持续优化“天河二号”的软件环境,搭建了大气海洋科学、生命科学与生物医药健

康、战略工程与装备仿真、新能源新材料等一系列面向领域的应用平台,和专项项目组合作共同优化其应用程序,持续提高服务能力与质量。为满足专项众多项目组的应用需求,超算中心构建了专门的服务团队,并对重点潜力项目组实施一对一对接,快速响应项目组的各类问题,实现7×24小时的超算服务;研发并优化了大规模并行算法库,面向领域进行应用软件的可扩展设计和并行调优,提升领域应用的大规模并行效率<sup>[31]</sup>;优化了“天河二号”文件系统性能,利用新型存储设备提升并行文件系统的服务处理能力,大幅提升领域应用数据处理性能,解决大规模计算中的数据访问瓶颈问题<sup>[32]</sup>;构建远程可视化资源,支持海量数据的远程绘制,实现应用软件前处理、模拟计算和后处理的全生命周期管理<sup>[33]</sup>,全面提升平台的服务能力;同时,在专项的牵引下,超算中心技术团队有针对性地与专项项目组共同优化应用程序,支持各项目组在“天河二号”上开展大规模国产并行应用程序的开发和优化,使得国产超算应用软件的推广使用、功能增强和能力提升效益显著。

为进一步降低领域用户的使用门槛,提高应用水平与效益,超算中心自主研发了“星光超算应用平台”(图3),实现高性能计算服务、大数据服务、人工智能服务、可视化应用服务、容灾备份服务、基础设施服务等全面融合,实现了超算应用软件开发、集成、服务新模式,使用户不需关心底层资源与环境<sup>[34]</sup>,专注领域模型优化和应用能力提升。

在超算应用专项的支持带动下,“天河二号”系统资源使用效率快速提升,国家超算广州中心的应用服务能力得到了长足发展。通过与超算应用专项各学科项目组的互动合作,超算中心获得了丰富的领域应用反馈,为中心的应用平台优化、技术团队配置提供有力支撑,积累了大量国产软件研发、应用和推广的宝贵经验,为国家超算广州中心建设国产超算中心应用软件中心建设奠定了坚实的基础。截至目前,国家超算广州中心的服务账号数量已超过4500家,服务超算用户数量超过30万,“天河二号”系统资源年平均利用率达75%,峰值利用率超过90%,是全世界用户数量最多、利用率最高的超级计算系统之一,可支持从中等规模到超大规模、不同领域的各类应用,不断创新应用模式,将超算、大数据和云计算相结合,应用范围不断扩大,应用效益不断提升,促进国产超算应用迈上新台阶。

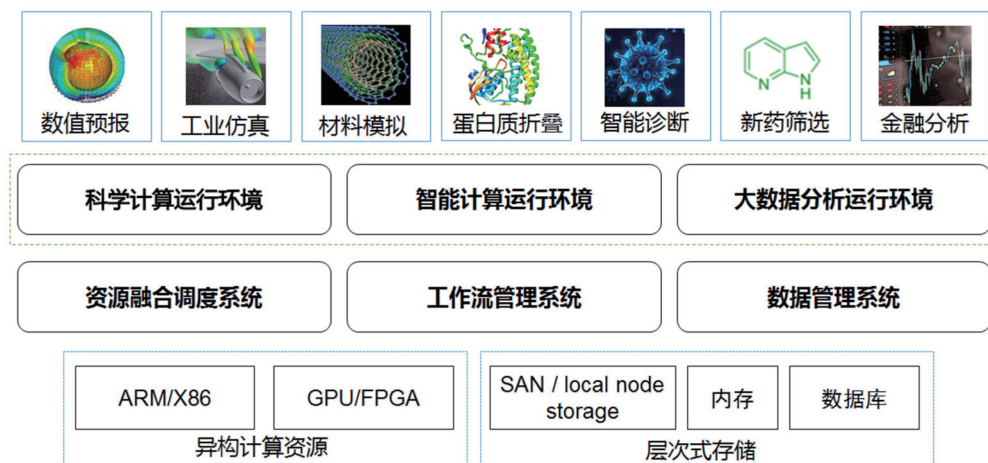


图3 星光超算服务平台

### 3 构建国产超算应用生态的建议

国家自然科学基金-广东省政府联合基金超级计算科学应用研究专项在国内首创了支持各基础学科领域团队在超算平台上开展高水平基础研究和工程应用的项目模式,利用超算支撑了地球、工材、管理、化学、生命、数理、信息、医学等多学科领域取得一系列重要的科学研究成果,培养了一批超算应用人才,对我国各学科领域的创新性、突破性研究起到了关键的支撑与示范作用,为我国多领域研究赶超世界先进水平起到了推动作用,促进了国产超算应用软件研发与应用生态的构建,全面开启了我国超算应用软件发展的新局面,为我国深入创新驱动发展和超算的可持续发展做出了重要贡献。同时,超算平台是一个典型的多学科交叉和协作融合的平台,本专项资助和协作方式应当是学科交叉成功的一个案例,这对今天我国在学科交叉领域鲜有成功的痛点问题是一个非常有意义、值得借鉴的成功案例。

超算应用专项最后一期于2018年8月实施完成,但是国产超算应用与软件的发展任重道远,各学科领域超算应用水平层次不均衡、大规模国产并行计算软件的缺口还比较大,科学与工程计算软件仍是我国“卡脖子”的问题,是制约我国超算可持续发展和利用超算取得更高水平科技创新的瓶颈。发展国产超算是一项长期的战略任务,与国家周期性地资助超算系统研制相比,国产超算应用目前尚未形成持续的支持规划。进入十四五,各学科领域的科学与工程研究对高性能计算、大数据与人工智能融合的算力需求扩大,下一代国产超算系统体系结

构更加复杂,超算应用面临更加严峻的异构、能耗、效率、可用性等诸多挑战,为推动我国各基础研究领域的原始创新和高水平发展,应充分发挥超算中心作为连接多模式多类型应用和复杂超算系统之间的桥梁作用,发挥超级计算的学科交叉特性和平台优势,为科学与工程研究提供长效可靠的先进算力资源和应用服务保障。

特此,建议面向我国基础科学研究领域,依托国家超级计算中心设置持续的“超算应用”专项,稳定支持多学科领域的超算应用研发优化实践,建立国产超算应用软件科学研究中心,联合突破我国超算大型工业计算软件的“卡脖子”问题,加快实现国产超算的系统资源、软件资源、数据资源、应用资源、人才资源的聚集和协同,构建健康、可持续发展的国产超算生态环境,充分发挥国产超算促进各领域科技创新的核心引擎作用,为我国深化科技创新提供持续动力。

### 参 考 文 献

- [1] 中国科学院数理学部“高性能计算战略研究”咨询组. 加速发展我国高性能计算的若干建议. 科研信息化技术与应用, 2008, 1(3): 1—7.
- [2] 迟学斌. 国家高性能计算环境发展报告: 2002—2017年. 北京: 科学出版社, 2018.
- [3] Lu YT, Qian DP, Fu HH, et al. Will supercomputers be super-data and super-AI machines?. Communications of the ACM, 2018, 61(11): 82—87.
- [4] 钱德沛. 构建支撑科技创新的新一代计算基础设施. 数据与计算发展前沿, 2020, 2(1): 1—17.
- [5] Peng SL, Zhang XY, Yang SY, et al. mD3DOCKxb: an ultra-scalable CPU-MIC coordinated virtual screening framework. CCGrid, 2017: 671—676.

- [6] Yu HR, Emberson JD, Inman D, et al. Differential neutrino condensation onto cosmic structure. *Nature Astronomy*, 2017, 1(7): 1—5.
- [7] Luo L, Zhang Q, Wang XP, et al. A parallel finite element method for 3D two-phase moving contact line problems in complex domains. *Journal of Scientific Computing*, 2017, 72(3): 1119—1145.
- [8] Li W, Zhu Z, Chern M, et al. A natural allele of a transcription factor in rice confers broad-spectrum blast resistance. *Cell*, 2017, 170(1): 114—126.
- [9] Wu JQ, Zhang SS, Gao H, et al. Experimental and theoretical studies on rhodium-catalyzed coupling of benzamides with 2, 2-Difluorovinyl Tosylate: diverse synthesis of fluorinated heterocycles. *Journal of the American Chemical Society*, 2017, 139(9): 3537—3545.
- [10] Liu MZ, Liu MX, She LM, et al. Graphene-like nanoribbons periodically embedded with four- and eight-membered rings. *Nature Communications*, 2017, 8: 14924.
- [11] Liu J, Su RB, Wei YM, et al. A solid-state source of strongly entangled photon pairs with high brightness and indistinguishability. *Nature Nanotechnology*, 2019, 14(6): 586—593.
- [12] Fan J, Shen S, Erwin DH, et al. A high-resolution summary of cambrian to early triassic marine invertebrate biodiversity. *Science*, 2020, 367(6475): 272—277.
- [13] Wang J, Bose S, Frenk CS, et al. Universal structure of dark matter haloes over a mass range of 20 orders of magnitude. *Nature*, 2020, 585(7823): 39—42.
- [14] Zheng, S, Li, Y, Chen, S, et al. Predicting drug-protein interaction using quasi-visual question answering system. *Nature Machine Intelligence*, 2020, 2(2): 134—140.
- [15] Tan S, Li Q, Xiao Z, et al. Gas kinetic scheme for turbulence simulation. *Aerospace Science and Technology*, 2018, 78: 214—227.
- [16] Lin Z, Gu Z, Zhao X, et al. An efficient matrix equation parallel direct solver for higher-order method of moments in solution of complex electromagnetic problems. *IEEE Access*, 2018, 6: 29784—29792.
- [17] Lao B, An T, Yu A, et al. Parallel implementation of w-projection wide-field imaging. *Science Bulletin*, 2019, 64(9): 586—594.
- [18] Cheng T, Mo Z, Yang C, et al. JSNT-S: a parallel 3D discrete ordinates radiation transport code on structured mesh. *International Conference on Nuclear Engineering*. American Society of Mechanical Engineers, 2018, 51463; V004T15A017.
- [19] Xu D, Ji C, Bai Y, et al. Three-dimensional numerical investigation on the influence of geometric shape on flow in river bends. *Journal of Hydroinformatics*, 2017, 19(5): 666—685.
- [20] 叶列平, 金鑫磊, 田源, 等. 建筑结构抗震“体系能力设计法”综述. *工程力学*, 2021: 1—12.
- [21] Liao K, Duan, W, Ma Q, et al. Numerical analysis of wave impact loads on semi-submersible platform// *Proceedings of the ASME 2017 36th International Conference on Ocean, Offshore and Arctic Engineering*, 2017.
- [22] Zhang L, Yang M, Liang X, et al. Oblique tunnel portal effects on train and tunnel aerodynamics based on moving model tests. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*, 2017, 167: 128—139.
- [23] Liu TH, Chen ZW, Zhou XS, et al. A CFD analysis of the aerodynamics of a high-speed train passing through a windbreak transition under crosswind. *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*, 2018, 12(1): 137—151.
- [24] Zhu B, Yan H, Zhong Y, et al. Relativistic HPIC-LBM and its application in large temporal-spatial turbulent magnetic reconnection. Part I. Model Development and Validation. *Applied Mathematical Modelling*, 2020, 78: 932—967.
- [25] Yu YF, Huang YD, Zhang C, et al. Discovery of novel pyrazolopyrimidinone derivatives as phosphodiesterase 9A inhibitors capable of inhibiting butyrylcholinesterase for treatment of Alzheimer's disease. *ACS Chemical Neuroscience*, 2017, 8(11): 2522—2534.
- [26] Li JX, Bao Q, Liu YM, et al. Evaluation of the computational performance of the finite-volume atmospheric model of the IAP/LASG (FAMIL) on a high-performance computer. *Atmospheric and Oceanic Science Letters*, 2017, 10(4): 329—336.
- [27] Chen H, Fu H, Shao X, et al. ELF: an extended-lagrangian free energy calculation module for multiple molecular dynamics engines. *Journal of chemical information and modeling*, 2018, 58(7): 1315—1318.
- [28] 赵钟, 张来平, 何磊, 等. 适用于任意网格的大规模并行 CFD 计算框架 PHengLEI. *计算机学报*, 2019, 42(11): 2368—2383.
- [29] 陈璟崑, 杜云飞. 地球科学大规模并行应用的重叠存储优化. *计算机研究与发展*, 2019, 56(4): 790—797.
- [30] Zou Z, Zhang Y, Li J, et al. EasyHPC: an online programming platform for learning high performance computing// *2017 IEEE 6th International Conference on Teaching, Assessment, and Learning for Engineering (TALE)*, 2017, 432—435.

- [31] Liao X, Li SG, Lu YT, et al. A parallel structured divide-and-conquer algorithm for symmetric tridiagonal eigenvalue problems. *IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems*, 2021, 2(32): 367—378.
- [32] Lu YT, Cheng P, Chen ZG. Design and implementation of the Tianhe-2 data storage and management system. *Journal of Computer Science and Technology*, 2020, 35(1): 27—46.
- [33] Zhang J, Tao J, Wang JX, et al. SurfRiver: flattening stream surfaces for comparative visualization. *IEEE transactions on visualization and computer graphics*, 2021, 6(27): 2783—2795.
- [34] Huang D, Lu YT. Improving the efficiency of HPC data movement on container-based virtual cluster. *CCF Transactions on High Performance Computing*, 2020, 2(1): 67—80.

## Co-constructing the Domestic Supercomputing Application Eco-system

Lu Yutong\*      Chen Zhiguang\*

*Sun Yat-sen University, Guangzhou 510006*

**Abstract** While domestic supercomputing system technology has entered the forefront of the world in recent years, how to facilitate the development of home-grown supercomputing application in order to make the most out of our supercomputing power has become a common concern for both the academia and the industry. Based on the successful implementation of China's first large scale funding program that supports supercomputing application, the “NSFC—Guangdong Joint Founding Program for Supercomputing Application Research”, used as example the supercomputing application practices of the National Supercomputer Center in Guangzhou with Tianhe-2, the 6-time No. 1 system on the TOP500 List of the world's most powerful supercomputers, this paper aims to analyze how the government, universities and research institutes can exercise their specific roles and work together to guide and support researchers from all disciplines to use high performance computing to carry out various research and innovative works, so as to co-construct China's home-grown supercomputing application eco-system, and to speed up the development of indigenous supercomputing applications.

**Keywords** high performance computing; application software; interdisciplinary; supercomputing eco-system

(责任编辑 刘 敏)

---

\* Corresponding Author, Email: yutong.lu@nsc-gz.cn, zhiguang.chen@nsc-gz.cn