超算发展探讨

李根国

上海超级计算中心
2023年5月

提 纲

01

两类典型应用的演变

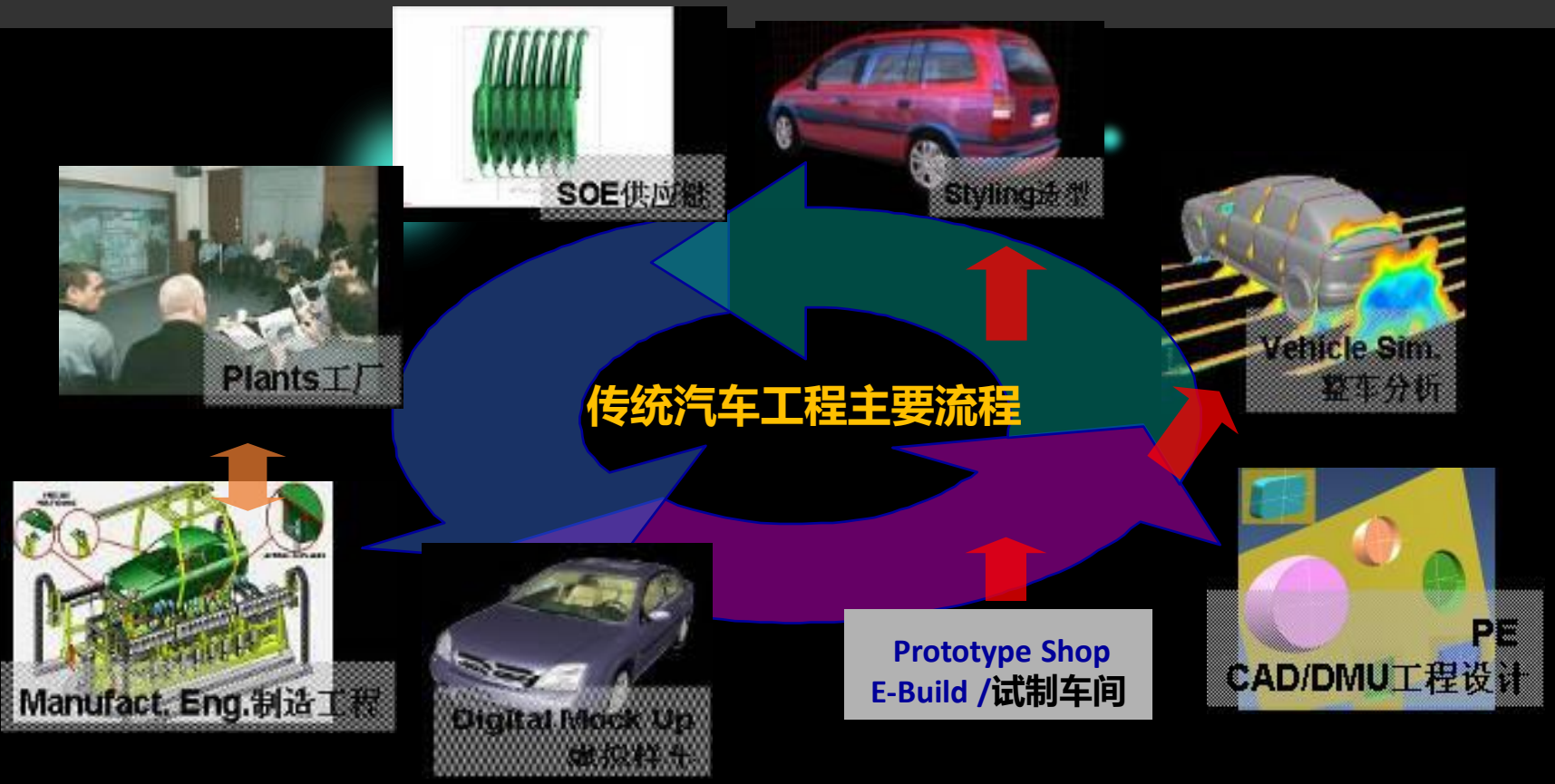
02

上海超算发展情况

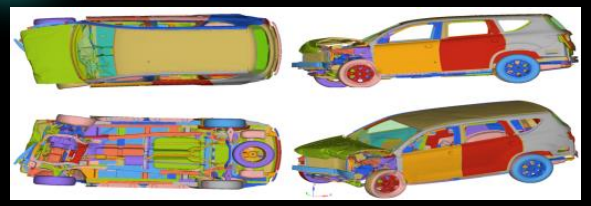
03

超算可持续发展探讨

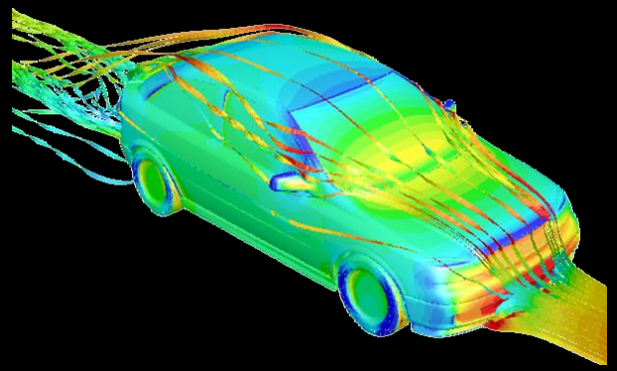
汽车工程的前生



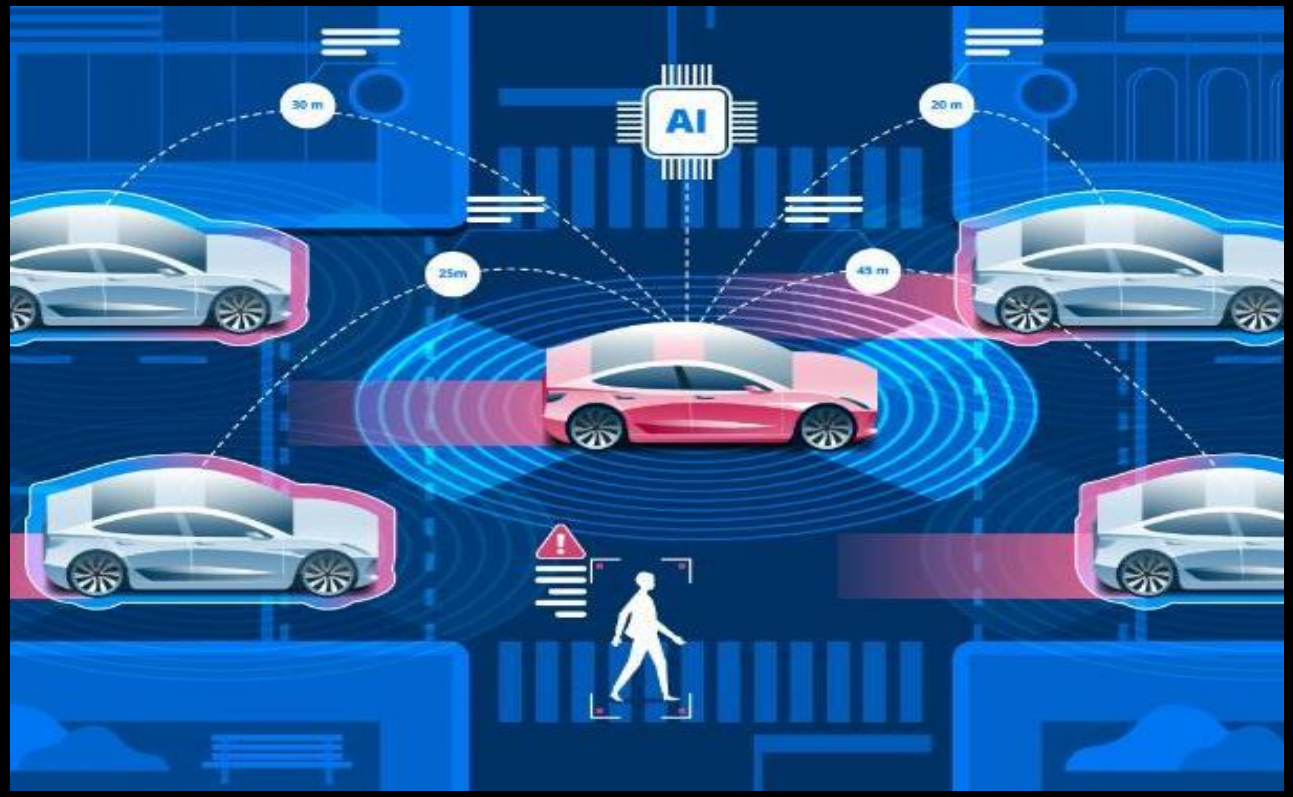
上海超算为上汽、奇瑞、吉利等自主研发汽车提供汽车碰撞、流体力学、噪音、耐久性等性能仿真超算资源



造型/几何 → **性能** → 制造 → 售后



汽车工程的现在和未来

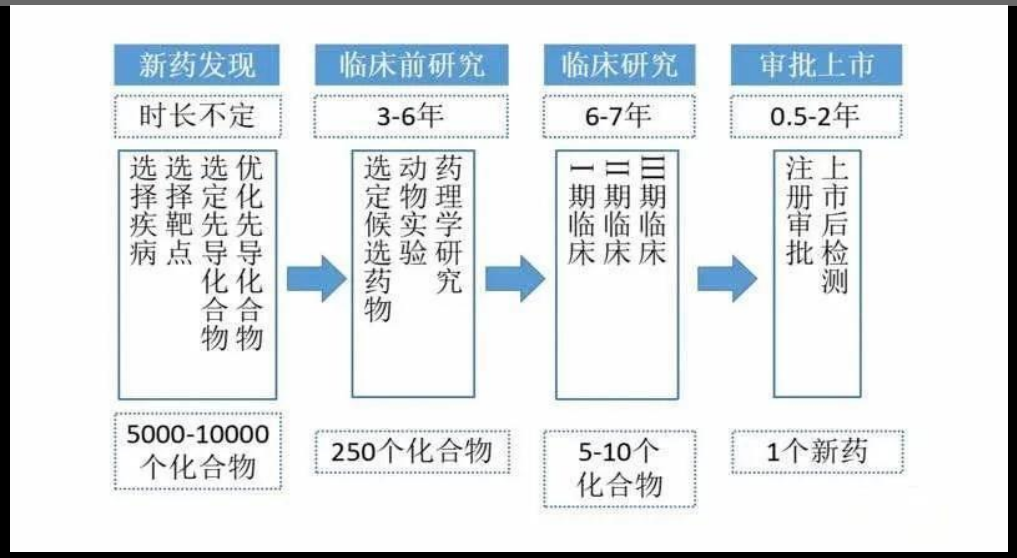


智能网联汽车需要端、边、云支持，算力叠加网络成为其运行的基础

汽车对算力的资源需求，不仅在研发设计阶段，更是在运营过程中

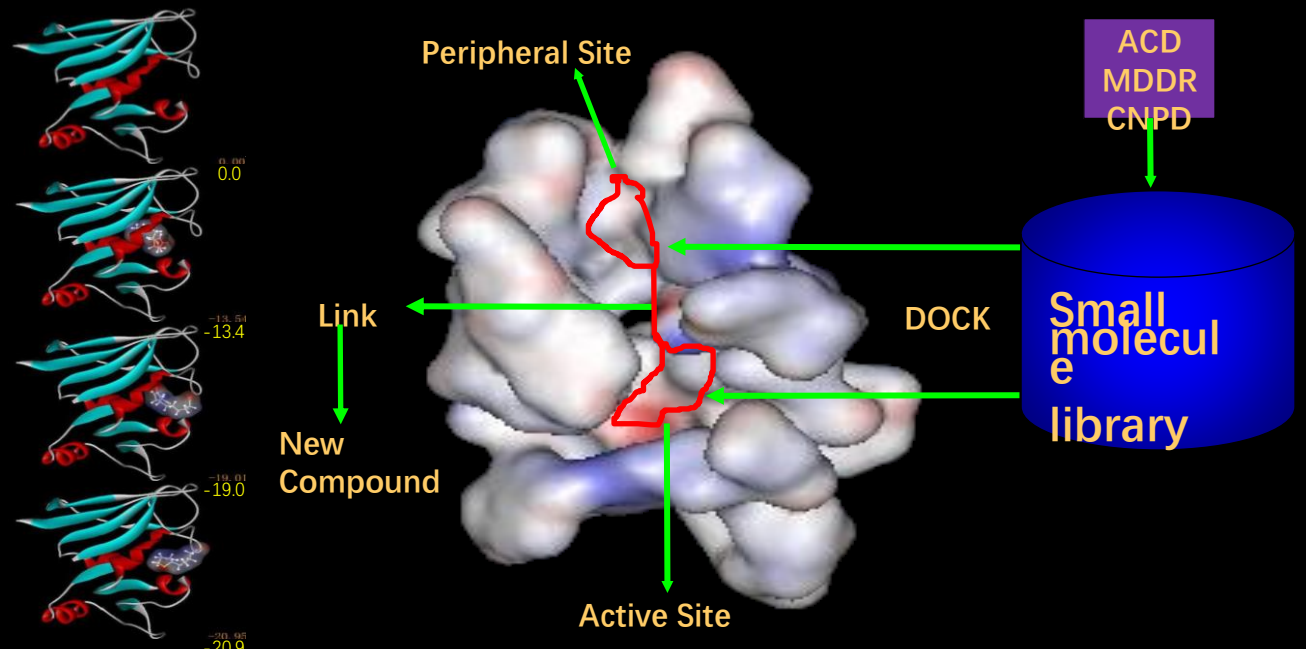
数字化设计 → 智能化、个性化制造 → **全生命周期管理**

药物筛选



药物计算辅助设计

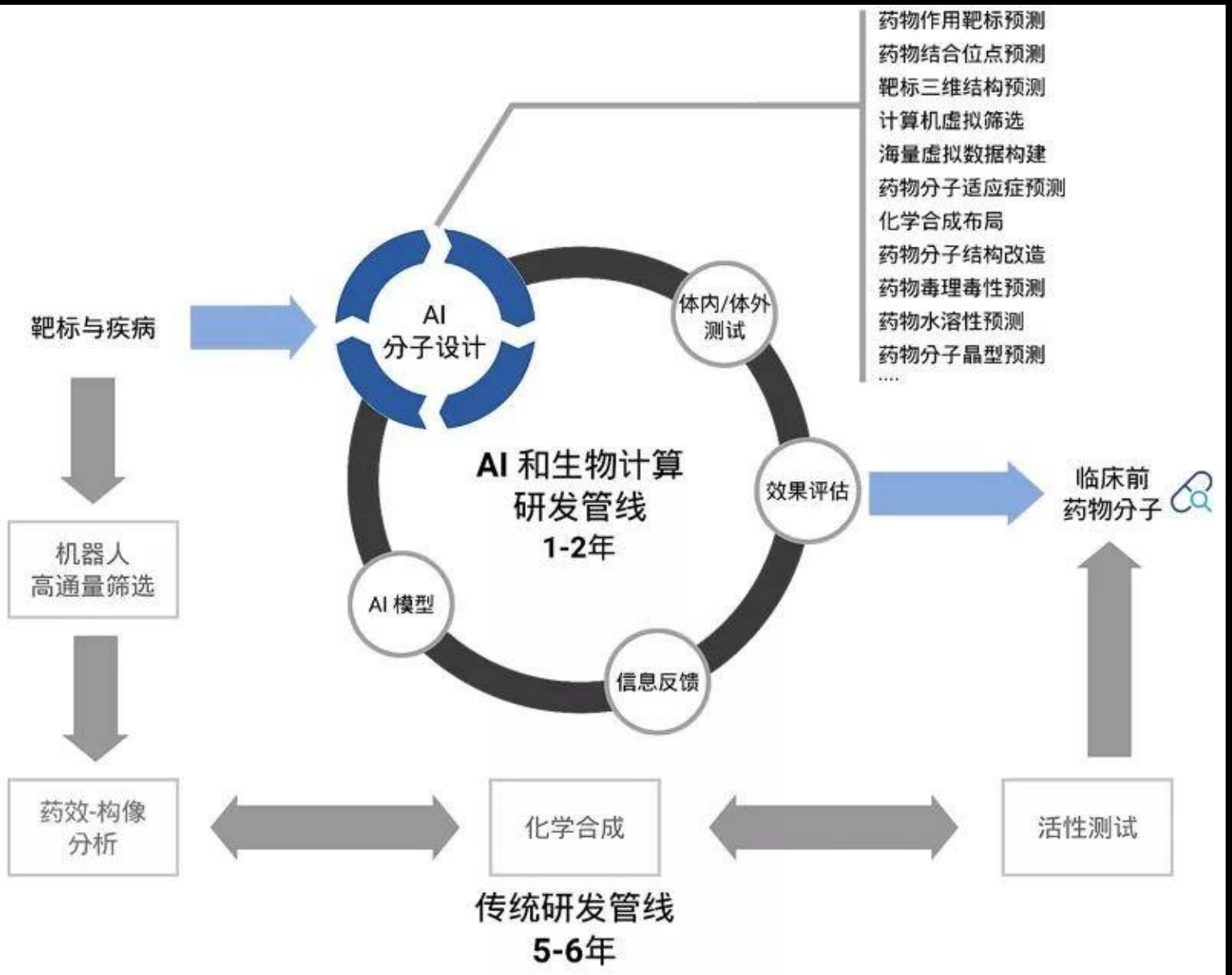
基因测序



需要大规模超算资源并长时间进行计算

上海药物所使用国内多家超算中心的资源

AI 辅助药物设计



AlphaFold

可以更加准确的预测蛋白质的结构

需要计算中心提供
多样化的
AI算力支持

提 纲

02

上海超算
发展情况

超级计算机建设情况

2000

神威I(2000-2007)
384G flops

2003

神威64P系统（2003-2009)
302.8G flops

2004

曙光4000A(2004-2010)
10T flops，ISC04排名全球第十

2009

魔方(2009-2015)
200T flops, ISC09排名全球第十亚洲第一

2012

蜂鸟(2012-2019)
21T flops

2015

魔方II(2015)
400Tflops

2019

魔方III（2019-)
3.7P flops,

2022

市公共算力服务平台(2022-)
102P flops @FP16

- **上海超算多次升级计算资源，参与研制和运营了世界一流的超级计算机**

上海超算特色优势

成熟完善的主机运维管理体系

- 严格规范的运维管理制度，无所不在的安全管理
- 深入扎实的系统技术，严格分级、及时有效故障处理措施和流程
- 科学有效的主机运行指标，精细服务和质量有效性控制

广受好评的应用服务团队和服务体系

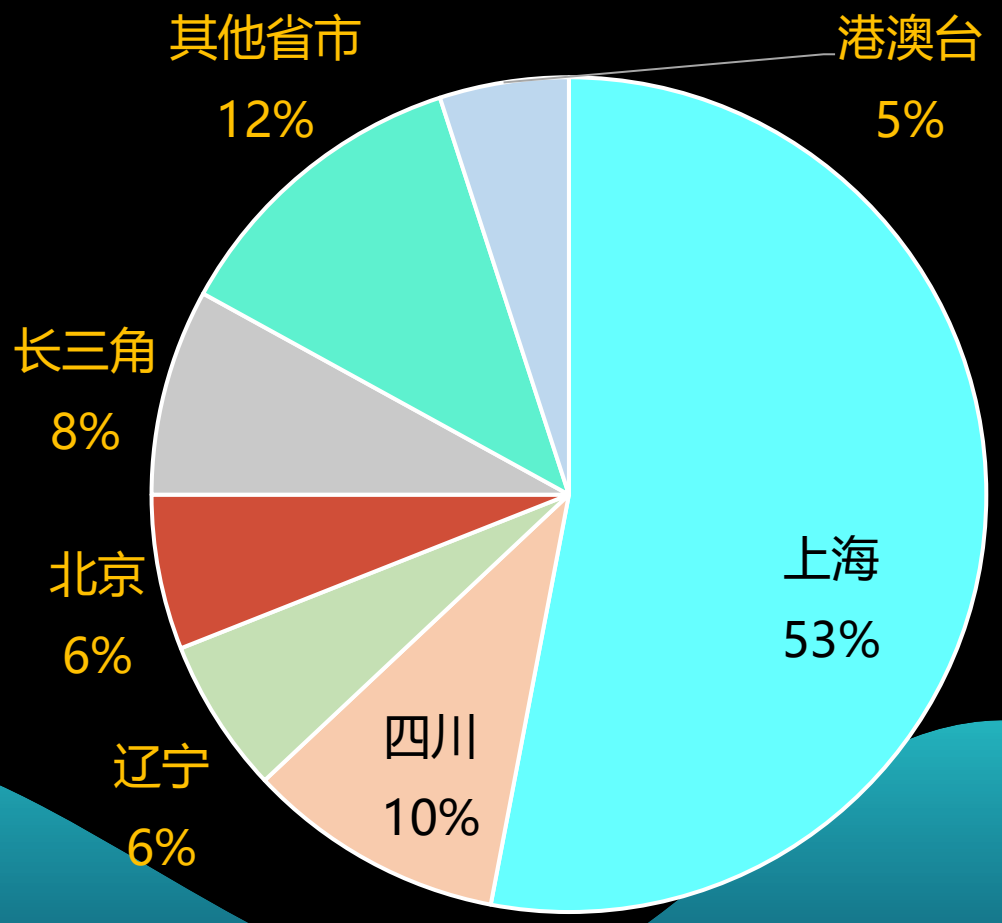
- 应用学科、交叉学科的高层次人才队伍
- 完备的用户服务体系：专业基础培训、需求快速响应、技术分级支持、项目深度参与、咨询增值服务
- 广泛的用户基础，良好的品牌形象：积累了大量来自各个领域学科的用户，打造了高性能计算应用服务的上海品牌

深度参与国家高性能计算发展，广泛开展国际交流

- 参与研制和运营了多台世界一流的超级计算机
- 主持或参与了一批科技部高性能计算重点研发应用项目，多次获得国家级科技进步奖和省市级科技进步奖
- 积极开展国际交流合作和人员互访，在国际舞台上发出中国声音、提供中国方案，与国外多家超算中心战略合作

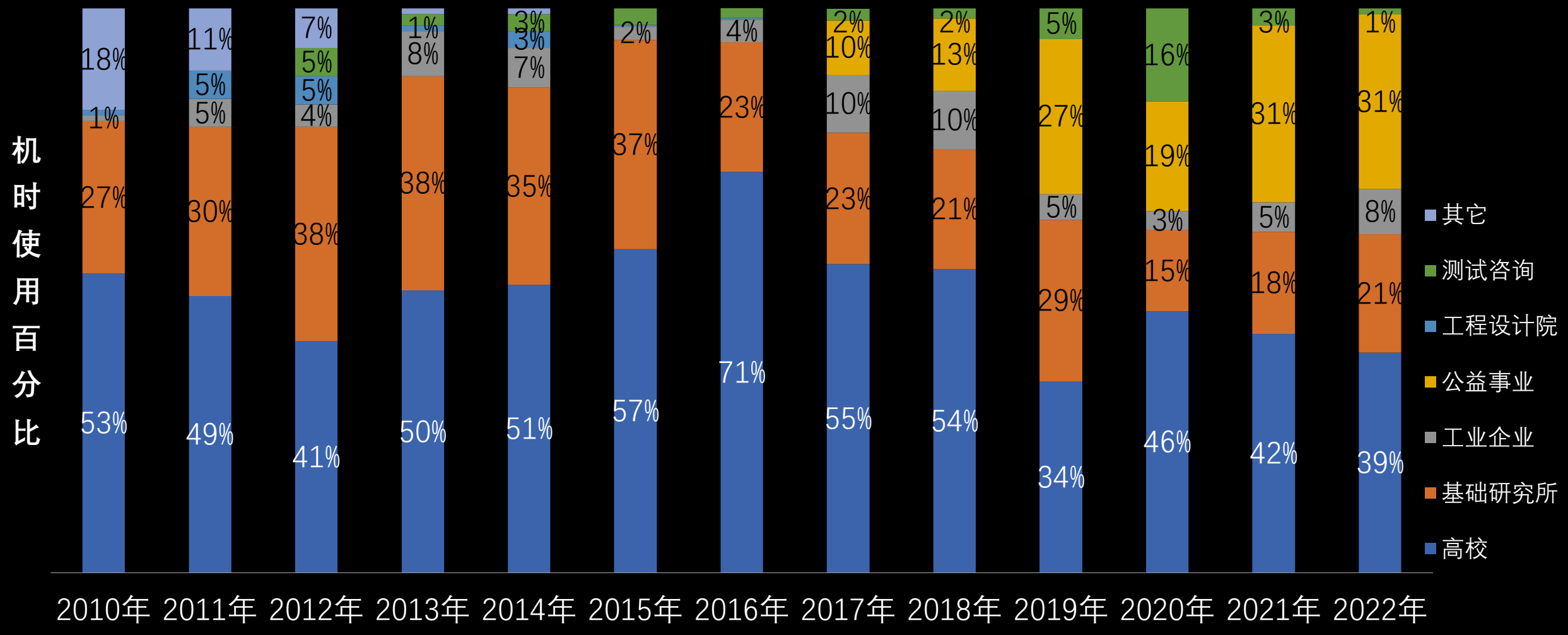
当前服务区域

2022年用户行政区域分布（按资源使用量）



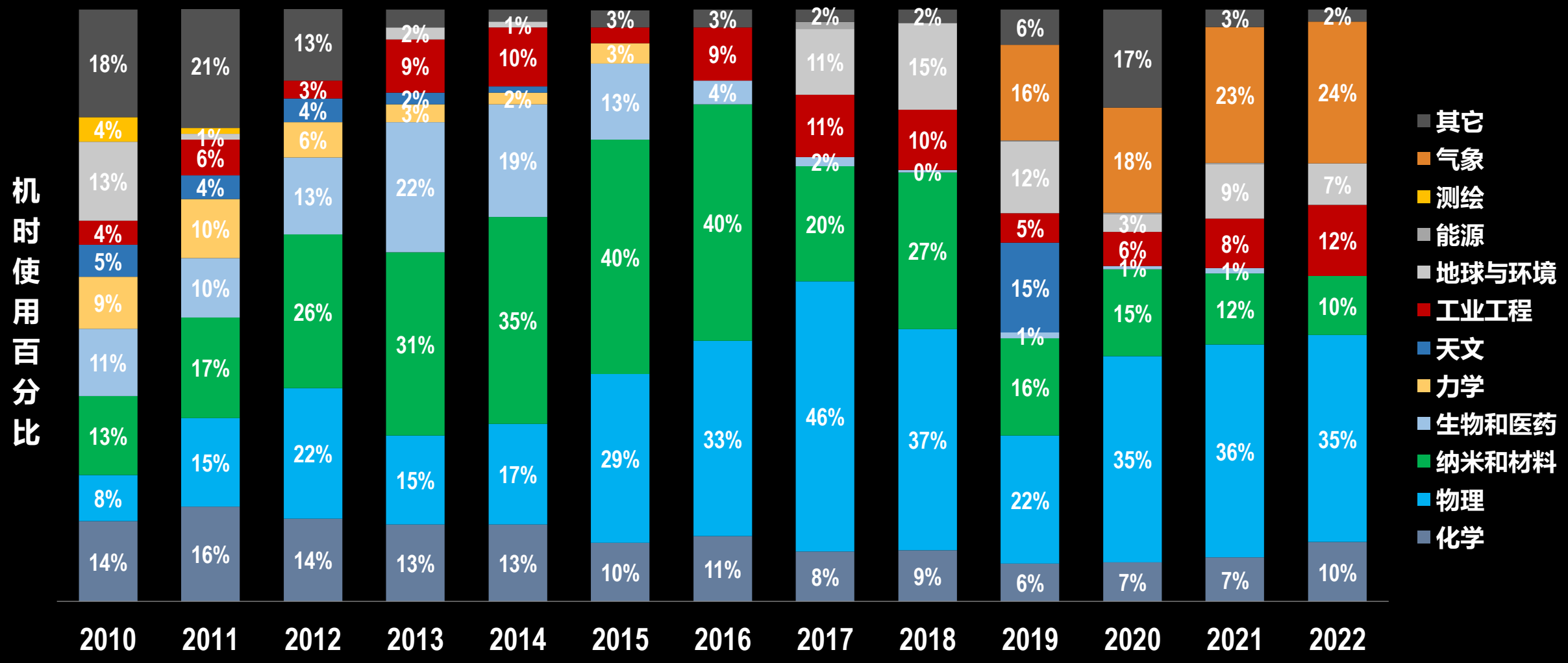
- 一半以上资源服务于上海地区

当前服务对象



- **80%以上的资源服务于基础科学研究和公益事业**

当前应用领域



- 科学研究包括化学、物理、生物、天文、地球、气象等

新定位，新目标——上海科技创新算力枢纽

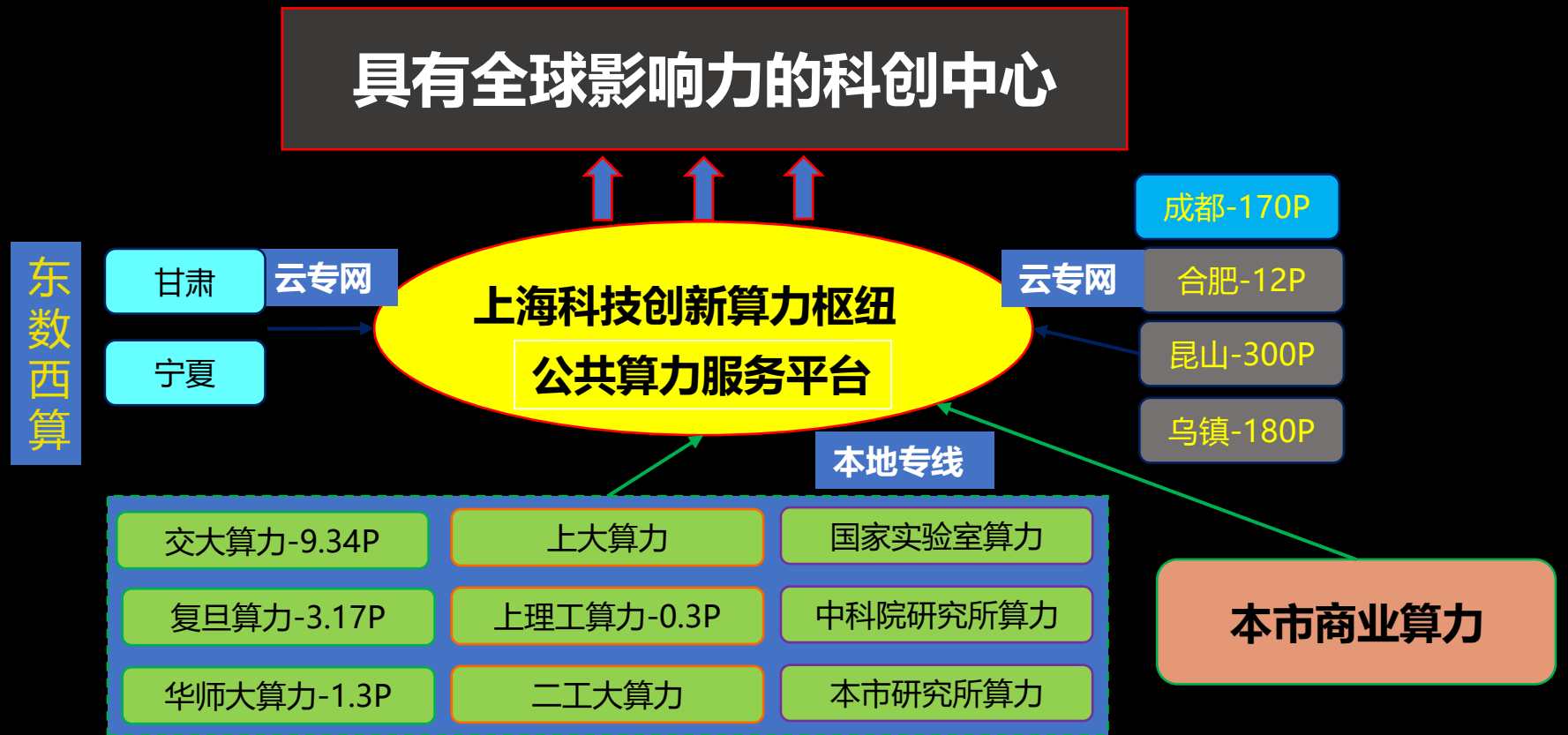
目标： 依托本市1+1+N算力供给体系，以公共算力服务平台为核心

建设**上海科技创新算力枢纽**

联动本市算力，调度外地算力，支撑上海科技创新，赋能助力上海数字化转型

提供E级以上算力服务

算力枢纽



提 纲

03

超算可持续
发展探讨

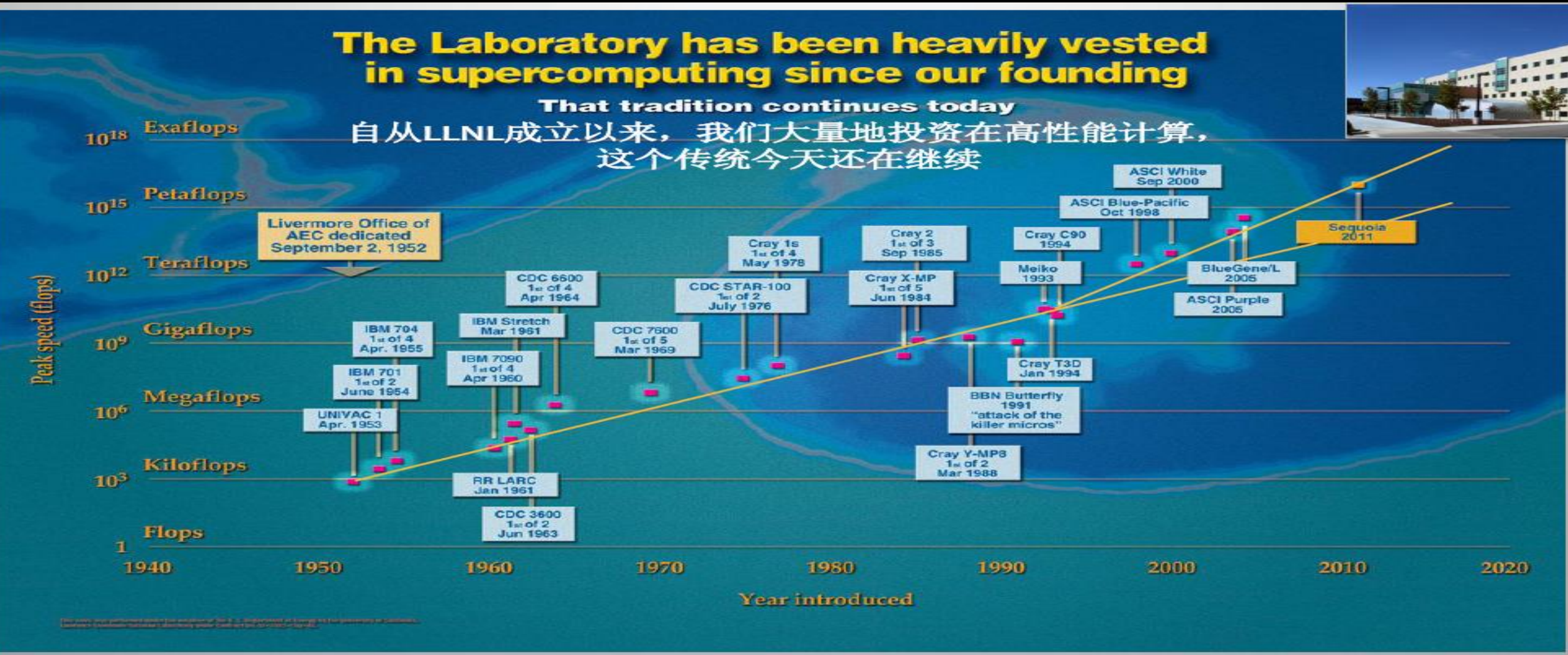
美国主要国家级计算中心

自电子技术发展以来，美国对高端计算一直十分重视，把计算作为国家实力的象征。高端计算也是对中国禁运的一个主要领域

	名称	人数	成立时间	主要研究领域
1	劳伦斯利弗莫尔国家实验室LLNL	>8000人	1952年	核安全，能源
2	橡树岭国家实验室ORNL	>4600人	1943年	中子科学，能源，复杂生物系统
3	洛斯阿拉莫斯国家实验室LANL	>13,000人	1943年	纳米技术，核聚变、激光技术
4	国家能源研究科学中心NERSC	>3000人	1974年	气候模拟、新材料研究
5	圣地亚哥超级计算中心SDSC	>250人	1985年	生物信息学
6	国家超级计算应用中心NCSA	>200人	1985年	各类高性能计算应用
7	匹兹堡超级计算中心PSC	>80人	1985年	计算化学、生物医学
8	德州先进计算中心TACC	>80人	2001年	计算新方法、新技术

超级计算机持续更新

案例：LLNL计算中心，自1950年成立以来计算能力持续更新，1950年-1990年计算能力增加10^7，从90年代至今，每十年增加1千倍。



美国有关高性能计算言论

2006年6月，美国总统信息技术咨询委员会 《计算科学:确保美国竞争力》

2022年9月，美国ITIF发布保持“E时代”高性能计算领先地位的政策建议

1、高性能计算概念；2、高性能计算的重要性（带来巨大的直接和间接经济收益）；3、全球主要国家HPC发展现状；4、HPC的下一代商业应用；5、建议

一：落实芯片和科学法案2022（CHIPS 2022）中与HPC相关的投资和项目

二：增加对美国能源部国家核安全管理局（NNSA）先进模拟和计算（ASC）项目的资助。

三：确保新创建的区域技术和创新中心投资超算资源

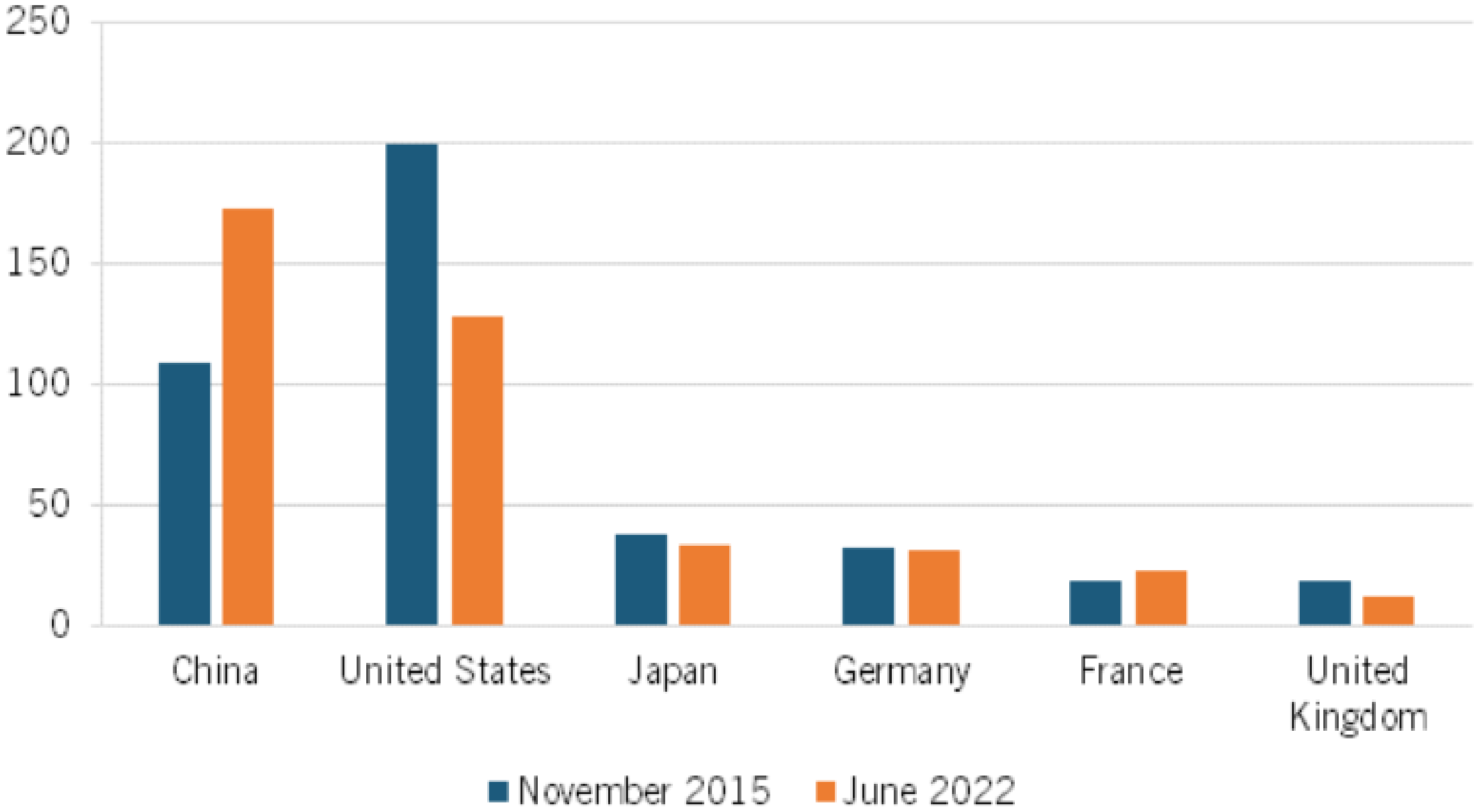
四：HPC相关的出口管制应考虑相关国家HPC的发展情况，并与盟友国家的管制政策相一致

五：加大计算机科学和电子工程人才培养力度，支持美国STEM（科学技术工程数学）人才储备

Table 1: Financial return on investment from HPC, by select industry[37]

Industry	Average Revenue per HPC Dollar Invested	Average Profit or Cost Savings per HPC Dollar Invested
Defense	$75.00	$18.80
Financial	$641.70	$47.40
Insurance	$175.70	$280.00
Life Sciences	$205.60	$40.90
Manufacturing	$216.50	$28.40
Oil and Gas	$416.00	$53.70
Telecommunications	$210.70	$30.40
Transportation	$1,804.30	$15.60
TOTAL	$452.10	$37.60

Figure 6: Number of supercomputers in the top 500, by select country[46]



国外超算中心模式

➢欧洲超级计算中心

建设资金来源	运营资金来源	运营管理模式	典型计算中心
• 欧盟 • 中央政府 • 地方州政府	• 欧盟 • 中央政府 • 地方州政府 • 依托单位或企业	• 股份制 • 董事会负责决策 • 执行委员会负责管理	• 芬兰（CSC） • 巴塞罗那（BSC） • 斯图加特

➢ 美国超级计算中心

建设资金来源	运营资金来源	隶属关系	运营管理模式	典型计算中心
• 联邦政府 • 州政府	• 联邦政府 • 州政府 • 依托单位	•国家实验室 • 大学	• 自主管理	•劳伦斯利弗莫尔（LLNL） •伊利诺斯（NCSA）

谢　谢