

# 2015 年中国科学院超级计算应用奖

## 最佳应用奖

### 1. 《ATLAS 蒙特卡罗模拟计算平台》

该项目通过ATLAS蒙特卡罗模拟计算平台，取得了显著的科研应用成果。

ATLAS是一个全球合作的高能物理实验，位于欧洲核子物理研究中心的大型强子对撞机LHC上，于2012年发现了“上帝粒子”，证明了物质质量的起源。为了更高效地利用计算和内存资源，对Athena（ATLAS离线物理模拟和分析软件）改进多核方式，并采用了ROW（Read on Write）方式的共享内存方式。跟传统单核方式相比，这种多核方式节省了50%的内存。

同时，为了将ATLAS软件运行于中科院的超级计算机“元”上，该项目基于Arc CE（网格中间件中计算资源管理器）开发了针对SCE中间件的插件，将网格上的ATLAS作业通过“桥接”的方式转发到由SCE中间件所管理的中科院超级计算环境（ScGrid）。这一方式，首次实现了ScGrid网格与基于X509认证和EMI等中间件的世界高能物理网格资源整合。目前，ATLAS作业已经成功运行于超级计算节点“元”上，也产生了丰硕的科研成果。

### 2. 《散裂靶模拟算法开发》

该项目为自主研发的多 GPU 颗粒流模拟应用程序，依托 ADS 散裂靶模拟算法开发项目，开展了基于 GPU 架构的并行算法研究工作。

在 ADS 系统中，高能质子与重金属靶材料相互作用后会沉积大量的热量，沉积的热量有可能会导致固体部件（如靶窗、靶侧壁等）发生形变，因此如何将沉积的热量带走是散裂靶设计中的重要问题之一。目前提出的散裂靶方案是以重金属靶材料作为冷却剂，通过流动将辐照产生的热量带走。重金属靶材料的流动可以是液态或固态（颗粒）的方式。颗粒流相对于液态流体更加稳定（无法形成湍流、漩涡），因此使用固态靶是一个更优的解决方案。

由于 ADS 散裂靶在世界范围内并没有建造先例，因此在研制散裂靶装置的过程中，计算模拟工作是最重要的设计手段。该项目自主研发的多 GPU 颗粒流模拟应用程序目前已经投入散裂靶的设计研究工作中，并取得了显著的模拟计算效果。

### 3. 《辛 PIC 算法在射频波大规模并行模拟中的应用》

本项目基于辛 Particle-in-cell (PIC) 方法，通过第一性原理大规模数值模拟，充分利用超算资源，研究多尺度、非线性的射频波物理过程。在算法构造、大规模模拟实现及物理研究上均具有创新性和重要价值。

本研究还得到科技部 ITER 专项、自然科学基金、教育部等多项基金支持。该系列工作突破了传统算法的瓶颈，为自主研发世界领先的磁约束聚变模拟程序奠定了系统的理论基础。同时，算法的有效实施为解决磁约束聚变领域关键问题提供了有力工具。

### 4. 《基于多网格谱元法的深部资源探测大规模模拟软件研究》

本项目针对复杂非均匀介质中声场的高精度数值进行模拟，利用三维交错网格高精度的有限差分法和高阶谱元法开发的自主知识产权软件可以模拟部分裂隙介质、缝洞介质等非规则形状储层中声波传播。目前本项目已经开发了多网格 Chebyshev 谱元法的声场和弹性波场模拟软件，并进行了并行化扩展，1600 核并行效率达到 40%以上。该方法应用于深层孔洞介质的声场模拟，其精度和可靠性都经过了验证。此外，项目组基于三维变网格有限差分法开发和优化的并行软件，

5000 核并行效率达到 75%。

利用上述软件，本项目开展了声波测井相关问题的高性能数值模拟，在各向异性地层、倾斜井和偏心套管井、随钻测井、固井质量评价、远程探测声波测井等目前亟需解决的技术难题上取得了一系列创新成果，实现经济效益约 1200 万元。在国内外期刊发表多篇论文，为解决深部油气藏的勘探开发中的难点问题奠定了重要基础。

## 杰出用户奖

1. 方海平 《纳米结构的性能调控及相关应用的理论研究》 中国科学院上海应用物理研究所

该课题组在纳米尺度下运用分子动力学模拟提出在纳米受限空间内的溶液中，溶质的溶解状态可以在分散与聚集之间双向转变。采用量子计算、经典分子动力学模拟等方法，在铝对蛋白结构的影响机制方面取得了突破性进展。在本年度申报材料中，累积机时量排名第一。