

中国科学院理论物理研究所-曙光信息产业(北京)有限公司

理论物理先进计算联合实验室

赋能新科研，助力产学研

Powering Scientific Discovery



年报

2020 年度

北京市海淀区中关村东路 55 号, 中国科学院理论物理研究所

电子邮件: jlab@itp.ac.cn

网站: <http://jlap.itp.ac.cn>

中科曙光
Sugon



目录

主任寄语	3
2020 年度建设情况	4
先进计算平台建设	4
代码托管平台	5
工程硕士点建设	5
项目申报	6
2020 年度亮点工作	7
Lattice QCD 代码移植	7
Gromacs 代码移植	8
先进计算技术培训	9
2021 年度重点工作	10
落实工程硕士学位点	10
先进计算开发平台建设	10
科学计算软件开发与代码移植	10
院士咨询项目实施与报告撰写	10
组织第一届理论物理先进计算交叉科学论坛	10
组织第一届理论物理先进计算开源软件和算法大赛或评优	10
关于联合实验室	11
定位	11
目标	11
组织架构	11
科学技术委员会名单（第一届）	12
联合实验室成员	12

主任寄语

先进计算技术正在快速发展，计算模拟已成为与理论研究和实验研究相辅相成的科学研究范式。目前国内研发、部署的超级计算系统已具有世界领先的性能。

随着我国基础研究的整体水平和国际影响力的提升，在一些领域开始出现开拓性的、原创性的研究成果。为更好地践行“创新驱动”发展战略，充分利用先进计算技术，培育基于国产硬件的先进计算生态，探索基础研究与先进计算技术融合的科研模式，培养理论物理和先进计算复合型人才，推动基础物理研究扎实发展，2019年11月26日，中国科学院理论物理研究所和曙光信息产业（北京）有限公司共同发起成立了理论物理先进计算联合实验室（以下简称联合实验室）。

联合实验室成立一年来，在各方大力支持和积极努力下，主要集中在软件移植优化、项目争取、先进计算平台优化和推广等方面开展工作，并取得了若干实质性进展。

今天，我们共同站在国家“十四五”发展规划的新起点上，基础科学研究与关键核心技术处于我国现代化建设全局的核心地位。大力推进联合实验室建设，符合我国创新发展战略，符合高性能计算生态发展需要，也是关注、支持和参与联合实验室建设的各方领导和同事的共同期待。

在2021年新春即将到来之际，让我们共同努力，秉承老一辈科学家“求真务实”的科学精神，扎实推进联合实验室各项工作，为科学计算软件这一基础物理研究的“利器”，做出实实在在的贡献！

联合实验室主任 **冯骥**

2020年12月30日

2020 年度建设情况

联合实验室年初讨论确定了 2020 年度重点工作，建立了定期会议机制，及时沟通、处理工作中遇到的问题。2020 年度主要在理论物理先进计算平台建设、科学计算软件移植、科研项目争取、工程硕士点申报、理论物理先进计算平台培训等方面开展工作。



图 1 2020 年度联合实验室工作规划

先进计算平台建设

完成理论物理所计算平台软硬件环境升级，升级 slurm 作业调度系统、升级 Gridview 最新版本、接入先进计算平台、部署 SoThisAI 平台、部署 gitlab 代码托管平台，实现 HPC+AI 的统一调度，前后升级 10 多次，制定研究所计算平台管理与使用办法，组织撰写计算平台用户手册 (<https://cloud.itp.ac.cn/published/wiki/HPC/home.md>)，组织 20 多场技术培训（培训内容涉及先进计算平台使用、作业调度、并行优化、计算应用等）。包括理论物理所、高能物理所、物理所、国家天文台、自动化所以及北京大学、上海交大、中国人民大学、南京师范大学、重庆大学等国内科研院所和高校多个课题组已在计算平台开展工作，截止目前计算平台已有 30 多个课题组 260 多个用户，有力地支撑了所内外相关课题组的科研和教学。

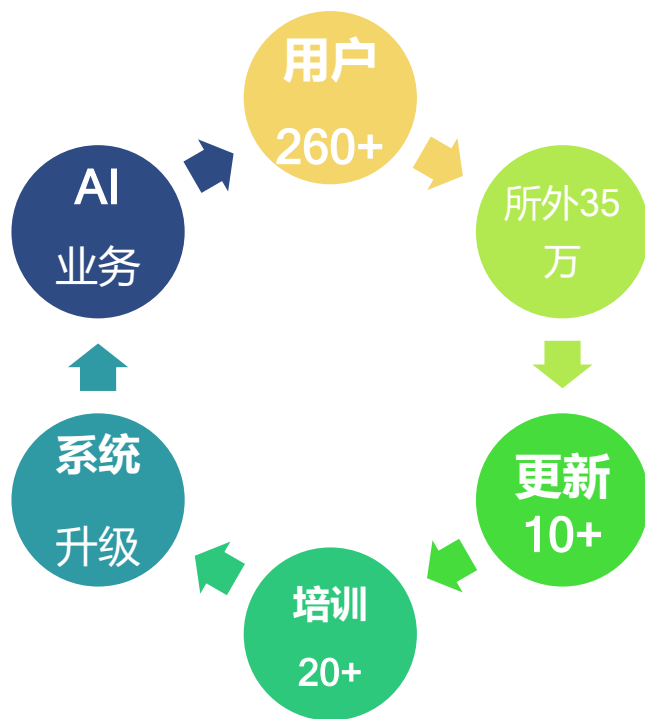


图2 先进计算平台建设

代码托管平台

结合联合实验室发展和定位，联合实验室建立了代码托管网站（<https://code.itp.ac.cn>），面向国内理论物理领域开放。目前，该网站已成为中科院理论物理所、曙光公司、中科院物理所等单位相关课题组和研究团队的公共代码托管平台。

工程硕士点建设

为了彻底解决联合实验室长期发展中存在的后备人才问题，为国内理论物理和先进计算领域培育更多复合型人才，在冯稷主任的推动下，理论物理所积极通过中国科学院大学在理论物理所设立“软件工程”工程硕士点。工程硕士点将结合研究所科研方向和发展目标，设立了5个研究方向，采用双导师制，由研究所相关方向的老师和曙光相关方向的工程师担任导师。

目前，工程硕士点申报材料已提交中国科学院大学，由国科大组织专家进行评审，讨论是否批复设立工程硕士点。

项目申报

1. 院士咨询项目（100 万）

为响应国家创新驱动发展战略，以科学问题为导向，针对对我国基础物理中面向国产超级计算系统的科学计算软件的现状、存在的问题和困难，由蔡荣根院士牵头组织申请了院士咨询项目（申请经费 100 万元），项目将为我国科学软件的健康发展提供相应的对策和政策建议，期望推动面向国产超级计算系统的科学计算软件的研发和发展，建立科学的研发模式和良性的用户生态，促进我国基础物理研究和关键核心技术的创新发展和重大突破。

今年在征求所内外相关专家意见和建议的基础上，组织撰写了我国基础物理中科学计算软件发展的战略咨询报告，并提交中科院院部。

2. CCAST 学术会议支持（4 万）

申请组织“第一届理论物理先进计算交叉科学论坛”，获得中国高等科学技术中心支持，会议经费 4 万元。本次会议计划联合中国科学院计算机网络信息中心、中科院理论物理所共同举办，推动并促进理论物理与科学计算交叉学科的发展和相关人才的培养。

3. 修购专项“高性能计算与数据可视化超融合系统”（530 万）

为了建设理论物理先进计算平台，组织申报了财政部 2021 年度修购专项项目。项目计划用先进计算技术，利建设一个开放、专业的、涵盖理论物理不同领域的理论物理科研协作虚拟平台，提供计算、模拟、数据、可视化、软件开发等服务，围绕科学探索、理论模拟、数值实验和人才培养提供全周期的服务和支持，为我国的基础研究和科技创新提供有力的保障。项目申报经费 530 万，目前已经经过财政部第二轮评审。

2020 年度亮点工作

Lattice QCD 代码移植

在 ROCm 平台上实现对 Lattice QCD 的 QUDA 软件包的稀疏矩阵操作性能的优化，移植调试相关代码 20w+行，在手征费米子的计算和探索上达到了国际先进水平，基于移植的程序产生了 4PB 数据。具体进展如下：

- 1 稀疏矩阵操作性能做了优化。针对 HIP 编译器的特性，通过分析汇编代码和强制指定数据位置的方式，引导编译器使用延时更短的数据读写方式，提升了稀疏矩阵的基准性能，单个核函数可以完全利用显存带宽，达到 1GFlops 以上性能。实际调试过程发现，调用核函数时周期性地出现单次计算极度缓慢的情形，计算性能提升低于预期，需要进一步分析。
- 2 手征费米子在 QUDA 上的移植和实现。在 ROCm 平台上移植了最新版的 QUDA，修正了数百处兼容性差异，将 QUDA 的具有近似手征对称性的畴壁费米子移植到了国产类 GPU 加速卡上，基于 chiQCD 合作组的算法，实现了跨平台的具有完美手征对称性的交叠费米子计算。
- 3 科学数据产生。在最大为 $48^3 \times 96$ 和 $64^3 \times 128$ 的格子上产生了 313 个样本的手征费米子矩阵近零本征值和本征矢量，并探索了 $96^3 \times 192$ 和 $96^3 \times 288$ 的格子上手征费米子组态的产生和手征费米子矩阵近零模式计算，已产生 4PB 的计算模拟数据。
- 4 相关科研进展。关于核子横向软胶子分布的研究，发表 SCI 文章一篇（PhysRevLett.125.192001），已完成矢量介子分布函数（arXiv:2011.09788）、粲偶素质量分解（arXiv:2012.05448）和非定域算符非微扰重整化（arXiv:2012.06228）三项科研工作。已经完成费米子近零模本征值谱的高精度计算和标度反常的探索性计算，正在撰写文章。

Gromacs 代码移植

- 1 基于 HIP 编程语言，首次实现了 GROMACS 2020 系列在 ROCm 平台上的完整移植；
- 2 使用典型算例，在国产类 GPU 加速卡上对移植代码进行了性能分析与优化；
- 3 在所用测试平台上，优化后代码运行目标算例的性能相对纯 CPU 版本加速比约 2.7，GPU 代码性能高于 GROMACS 原版 OpenCL 代码约 60.5%；
- 4 相关工作内容完成了一篇中文核心期刊投稿，目前论文已录用。

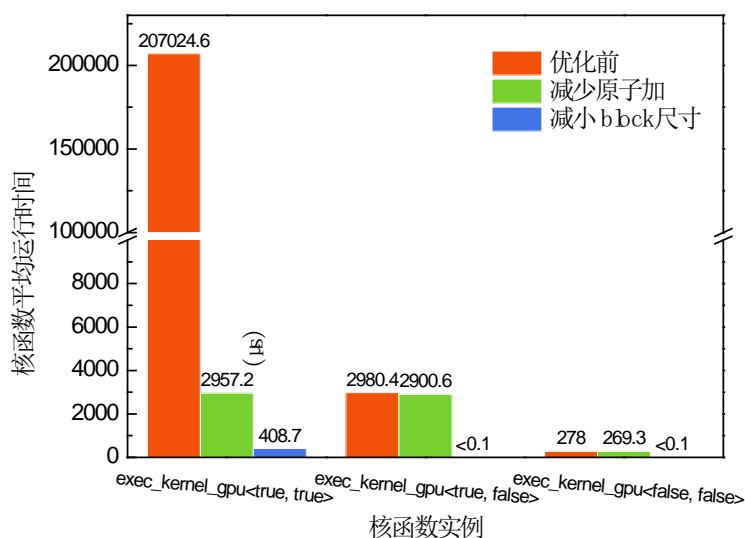


图 3 单核函数优化效果。经过两步优化，成键力计算核函数耗时大幅降低。

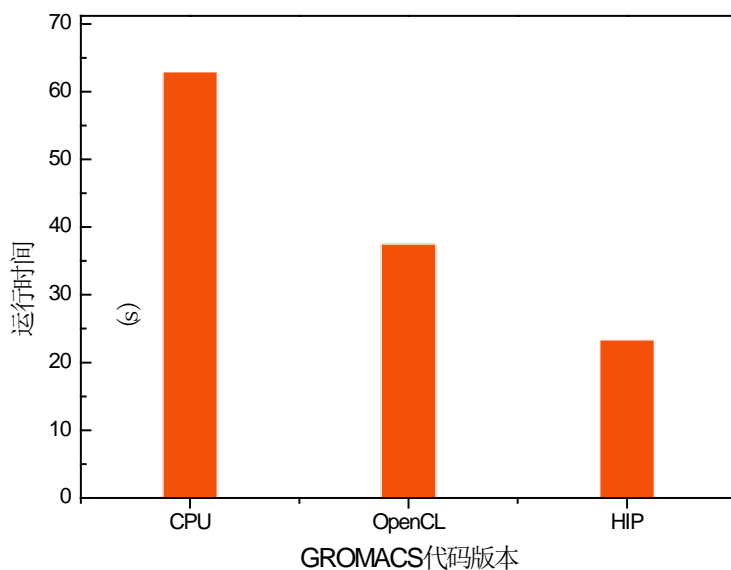


图 4 整体优化效果。优化后的 HIP 代码在所用测试平台上运行目标算例的性能相对纯 CPU 版本加速比约 2.7，GPU 代码性能高于 GROMACS 原版 OpenCL 代码约 60.5%

先进计算技术培训

自 2020 年 7 月起，联合实验室围绕先进计算平台使用、作业提交与管理、深度学习与 AI、gitlab 使用、MPI 等常用操作和具体科学应用软件如：VASP\Mathematica\Gromcacs\FeynCalc\eMD 等，组织了 20 多次技术培训，培训资料和培训视频整理并上传到先进计算平台网站（<https://cloud.itp.ac.cn/published/wiki/HPC/Training/training.md>），在国内科学计算领域产生了一定影响力，取得了良好的效果。

培训通告

主办单位

理论物理先进计算平台系列培训 第1期

先进计算平台介绍

ITP

2020.07.15
16:00 - 17:00

刘瑞贤 曙光先进计算架构师

培训简介

- 1 介绍先进计算平台及注册与申请。
- 2 AI与HPC作业提交与管理、数据集管理。

扫码进入培训会

作业提交 Slurm介绍

提交文件

培训简介

SothisAI 训练平台

王新峰

培训简介

Git & Gitlab 简介及其使用

曹洪涛

培训简介

VASP 及其使用

王浩田

培训简介

分子动力学 Gromacs软件

曹洪涛

培训简介

ATOMLY材料科学数据库

培训简介

MPI OpenMP 简介

王收力

培训简介

蒙特卡洛模拟 算法设计

培训简介

分子动力学 eMD软件

培训简介

颗粒物质模拟

培训简介

News from the FeynCalc Project

培训简介

2021 年度重点工作

落实工程硕士学位点

继续推进、落实工程硕士点相关工作，为联合实验室的后续发展争取人才培养条件。

先进计算开发平台建设

依托理论物理先进计算平台，建设面向国内理论物理领域的软件开发测试环境，提供代码测试、代码托管、文档共享、技术培训等相关服务，推动科学计算软件和相关算法的发展。

科学计算软件开发与代码移植

选取重点方向、重点领域的计算软件或算法，进行移植优化或针对性开发，提升先进计算平台可用性，建设先进计算平台软件生态。

院士咨询项目实施与报告撰写

依托院士咨询项目，通过现场调研、会议研讨等形式调研基础物理领域科学计算软件的现状和存在的问题，组织撰写项目调研报告。

组织第一届理论物理先进计算交叉科学论坛

在高科技中心（CCAST）支持下，邀请国内外理论物理和科学计算相关专家第一届理论物理先进计算交叉科学论坛，推动理论物理和先进计算科学的交叉与发展。

组织第一届理论物理先进计算开源软件和算法大赛或评优

组织第一届理论物理先进计算开源软件和算法大赛或评优，推动理论物理相关科学计算软件的健康发展。

关于联合实验室

定位

联合实验室以“开放、交融，合作、共享”为宗旨，结合理论物理所的学科优势和曙光公司的技术优势，建设面向科学发现的、开放科学计算平台，推动科学计算的普及和发展，促进科学计算软硬件生态的产学研用协同发展。

目标

联合实验室以先进计算为手段，针对基础研究中的重要工具——科学软件，开展算法研究、发展科学计算软件、建设软件开发环境、培育科学软件应用生态和培养相关专业人才，提升我国超级计算软硬件系统的自主能力，推动我国基础物理研究的创新发展。

组织架构

联合实验室设科学技术委员会、实验室主任、秘书处和项目组。科学技术委员会是联合实验室最高决策机构，负责审定联合实验室发展规划和年度工作计划、对一定期限内的研究方向或开发任务进行可行性论证、为联合实验室争取资源，聘用和考核联合实验室主任和副主任，推荐联合实验室总工程师。

联合实验室实行主任负责制，主任按照科学技术委员会给定的方向和资源，组建项目团队，定期考核、定向支持，确保按期完成既定目标。副主任协助主任开展工作。秘书处负责联合实验室日常运营和管理。总工程师负责联合实验室技术架构指导，确定技术路线，负责组织协调专家和技术团队进行难点攻关等。项目组由实验室主任按照具体任务、目标聘请组建，按照分配的任务和提供的资源，保质保量按期完成实验室主任安排的研发任务。

科学技术委员会名单（第一届）

主 席：蔡荣根

副主席：沈晓卫

成 员（按姓名拼音排序）：

蔡荣根 中国科学院理论物理研究所
陈 刚 中国科学院高能物理研究所
迟学斌 中国科学院计算机网络信息中心
高 亮 中国科学院国家天文台
沙超群 曙光信息产业（北京）有限公司
沈晓卫 曙光信息产业（北京）有限公司
谭光明 中国科学院计算技术研究所
王延颢 中国科学院理论物理研究所
翁红明 中国科学院物理研究所
徐小文 北京应用物理与计算数学研究所
周 昕 中国科学院大学

联合实验室成员

主 任： 冯 稷，中国科学院理论物理研究所

副主任： 李 斌，曙光信息产业（北京）有限公司

秘书长： 吉 青，曙光信息产业（北京）有限公司

总 工： 侯丰尧，中国科学院理论物理研究所