

2014 年中国科学院超级计算应用奖

最佳应用奖

1. 《钛基合金组织形成及变形机制的高通量计算研究》

该项目集成第一原理、分子动力学、相场和有限元等不同尺度的模拟，紧密结合实验，借助高通量计算系统研究钛合金的微观组织演化、缺陷行为及其对力学性能的影响，取得了一系列创新性成果，为几种关键钛合金的优化奠定重要基础。

研究成果对理解钛合金中片层组织形成规律、塑性变形微观机制和新型钛合金的设计和工艺优化有重要推动作用；所研究的问题具有很强的科学意义与应用背景，计算规模大，实现了万核计算规模，累计机时达 500 万 CPU 核小时；编写了多套微观组织及变形模拟程序，其中微观组织模拟的相场动力学部分程序已实现大规模并行化，万核级并行效率达 70% 以上；分子动力学模拟实现大规模并行，并实现 GPU 应用。研究成果丰富、水平高、有较高的应用价值。

2. 《北京指纹会战并行计算》

该项目核心是基于北京市公安局刑侦总队实战系统，项目成果已经成为北京市公安局利用指纹破案时广泛使用的工具。通过与中科院超级计算中心的合作，完成了扩展性可达万核的指纹识别软件，实现了大批量指纹的高速比对。由于比对速度得到大幅提升，比对时间大大缩短，节约了大量比对过程中进行维护的人力、物力。检视结果在短时间内生成可以保证结果的时效性。使用检视结果，在短时间内抽调大量人力集中开展指纹会战，可提高工作效率，达到事半功倍的成效。基层技术人员直接检视比对结果，省去了提交比对和等待的复杂过程，降低了劳动量，节省了警力。该工作模式为我国指纹应用领域首创，目前已被推广至其他省市公安机关，得到公安部认可，指纹识别算法已完成了 GPU 改造，将进一步利用 GPU 集群的计算优势开展工作。

该项目在我国首个拥有自主知识产权指纹识别软件上开展了并行化工作，完成了扩展性达万核的计算，2048 个核并行计算效率达 80%，完成了 GPU 加速进行工作，是 GPU 应用的一个卓越典范；计算规模大，效率高，累计机时达 361 万 CPU 核小时。该项成果得到了公安部认可，有效服务于公安工作，应用成果获得了实战检验，产生了很好的经济和社会效益。

3. 《中国科学院地球系统模式研制和并行效率提升》

围绕气候变暖等全球变化相关问题的研究，是当今世界头等重大的科学问题之一，对该科学问题的研究结论也是当前国际气候环境外交的基础。作为研究气候变化的最有力工具，地球系统模式（和气候系统模式）的研制，是国际上知名大气科学研究机构投入大量人力、物力的一项最重要研究工作。

中国科学院地球系统模式的研制，是中科院大气物理研究所列入“一三五”规划要开展的最重要研究工作。该项目在我国多年来气候系统模式发展成果的基础上，初步研制了新一代中国科学院地球系统模式（CAS-ESM），包含大气、海洋（海冰）、陆面、生态植被、

气溶胶和大气化学、海洋生物地球化学和陆地碳氮循环过程等，CAS ESM 中的大部分分系统模式源自我国自主知识产权的研究工作。

该项目有重要应用背景，从模式、计算方法到软件都有创新，工作量大，也是需迫切解决的问题。该项目完成了大气环流模式 IAP AGCM4.0 的二维剖分的并行算法设计、调试和长期积分试验；完成了大气环流模式 IAP AGCM4.0 的高分辨率（ $0.5^{\circ}\times 0.5^{\circ}$ ）的并行版本定型；完成了陆表过程模式（CoLM）和全球植被动力学模式（IAP-DGVM）的耦合，并通过大量的模拟试验评估了耦合性能，其成果水平高，具有极广泛和重要的实用意义。

杰出用户奖

1. 杨金龙 《理论与计算化学》 中国科学技术大学

该课题组在中科院超级计算中心的支持下，作业规模达到 256CPU 核，累计机时 2,242,560CPU 核小时，在理论与计算化学方面取得了一系列研究成果，共发表 SCI 论文 18 篇。开展了一种吸收可见光的光解水催化材料、可实现电控制自旋的新型自旋电子器件材料、低维材料生长机理等一系列理论化学计算研究，成果丰富、意义较大。计算规模大，时间长，围绕材料科学多个前沿问题开展系统工作，成效显著。在本年度申报材料中，累积机时量排名第一。

2. 方海平 《水的微观性质的理论研究》 中国科学院上海应用物理研究所

该课题组开展了理论物理与生物交叉学科的研究，发现了传统扩散理论无法解释的纳米尺度下分子扩散新现象，并提出了基于纳米尺度分子扩散动力学的一些水的输运特性；研究了高分压的生理惰性气体（以氮气为例）形成的纳米尺度分子聚集可以使生物体失去部分生物功能这一现象，该研究对于我们理解气体在生命活动中的作用有重要意义。在本年度申报材料中，累积机时量排名第二。