

[6] Lee B., Richards F. M., The interpretation of protein structure: estimation of static accessibility[J]. J.Mol.Biol. 55(3), 1971, 379-400

[7] Kabsh. W. and Sander. C., Dictionary of Protein

Secondary Structure: Pattern Recognition of Hydrogen-Bonded and Geometrical Features[J]. Biopolymers, 1983, vol.22 2577-2637

[8] 中国国家网格[CP/OL] http://www.cngrid.org/en_index.htm

来稿时间:2008年11月6日

作者信息



孙衍华

中国科学院计算机网络信息中心, 硕士、助研, 主要研究方向为并行计算与应用。



刘继凤

中国科学院计算机网络信息中心, 博士, 主要研究方向为计算化学。



金 钟

中国科学院计算机网络信息中心, 博士、副研究员, 主要研究方向为计算化学。

2008年中国高性能计算机TOP100排行榜分析与展望

张云泉¹ 孙家昶¹ 袁国兴² 张林波³

1 中科院软件所并行计算实验室, 北京, 100190

2 北京应用物理与计算数学所, 北京, 100088

3 中科院数学与系统科学研究院, 北京, 100190

摘要 本文根据2008年11月发布的中国高性能计算机TOP100排行榜的数据, 对国内高性能计算机的发展现状从总体性能、制造商、行业领域等方面进行了深入分析。在此基础上, 根据七届排行榜积累的性能数据和能够得到的其他公开历史数据, 对未来几年中国大陆高性能计算机的发展趋势进行了分析预测。从预测可以看出, 峰值Petaflops的机器将在2010年到2011年间出现, 峰值10Petaflops的机器将在2012年到2013年间出现, 累计Linpack性能将在2011年到2012年间达到10Petaflops。

关键词: 高性能计算机; TOP100; 排行榜; 性能; 分析

Analysis of 2008 China HPC TOP100 Rank List and Perspectives

Zhang Yunquan¹, Sun Jiachang¹, Yuan Guoxing² Zhang Linbo³

1 Lab. of Parallel Computing, Institute of Software, CAS, Beijing, 100190

2 Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing, 100088

3 Academy of Mathematics and Systems Science, CAS, Beijing, 100190

Abstract: In this paper, we first introduce the background of SAMSS China HPC TOP100 rank list. Then we give the total performance trend of China HPC TOP100 and TOP 10 of 2008. Followed with this, the performance, manufacturer, and application area of 2008 China HPC TOP100 are analyzed in detail. Based on public available historical data of the peak performance of TOP100 supercomputers from 1993 to 2008 in China mainland, we predicted the future performance trend of China HPC TOP100. We found out that supercomputers with peak performance of Petaflops will appear between 2010 and 2011, supercomputers with peak performance of 10Petaflops will appear between 2012 and 2013, and total Linpack performance of China HPC TOP100 rank list will be over 10Petaflops between 2011 and 2012.

Keywords: High Performance Computer; TOP100; Rank List; Performance; Analysis

1. 背景

在国际上，自1993年起每年都会按Linpack的测试性能公布在世界范围内已安装的前500台高性能计算机排行^[1]，成为高性能计算机研制生产、市场发展、应用交流和趋势分析预测的重要参考。在2002年之前，我国的高性能计算机未曾向国际申报Linpack性能测试结果，故而未列入国际TOP500排行榜。在中国软件行业协会数学软件分会（挂靠中科院软件所）发布首次中国高性能计算机排行榜的2002年当年，中国TOP500排行榜中名列第一的联想深腾1800万亿次机群名列2002年世界TOP500第43名。2003年，在中国TOP100排行榜中名列第一的联想深腾6800万亿次机群名列2003年世界TOP500第14名，达到了国产高性能计算机的历史新高。2004年，在中国TOP100排行榜中名列第一的曙光4000A更是取得了6月份TOP500排行榜世界第十的历史性突破，引起世界关注。在2005年，中国TOP100的第一名自发布以来首次被国外厂商夺走，但国产计算机所占的份额却首次赶超国外计算机，国产计算机亦喜亦忧。由于处于发展的平台期，2006和2007年中国TOP100排行榜让人开始为国产并行机担忧了，不但第一名的位置未夺回，所占份额维持在40%左右，未见增长。在国家“十一五”863计划的“高效能计算机与网络软件”重大专项里部署了研制更大规模

的Petaflops的高性能计算机的课题，并在2008年底推出了峰值超过百万亿次的两台国产高效能计算机。我们在2008年发布的中国TOP100排行榜中看到了国家863项目对改变国产高性能计算机现状的显著推动作用。国产高性能计算机的机遇与挑战并存，在曲折中前进。

此次测评按国际惯例选用Linpack测试（HPL）^[4]，2008年9

月底刚刚发布最新的2.0版本。本文给出对中国软件行业协会数学软件分会联合国家863高性能计算机评测中心和中国计算机学会高性能计算专委会于2008年11月1日在江苏无锡发布的中国高性能计算机性能TOP100排行榜^[1]数据（前三名机器的Linpack性能进行了更新）的深入分析与展望。文中的图表数据主要来源于中国HPC TOP100。以下将中国HPC TOP100

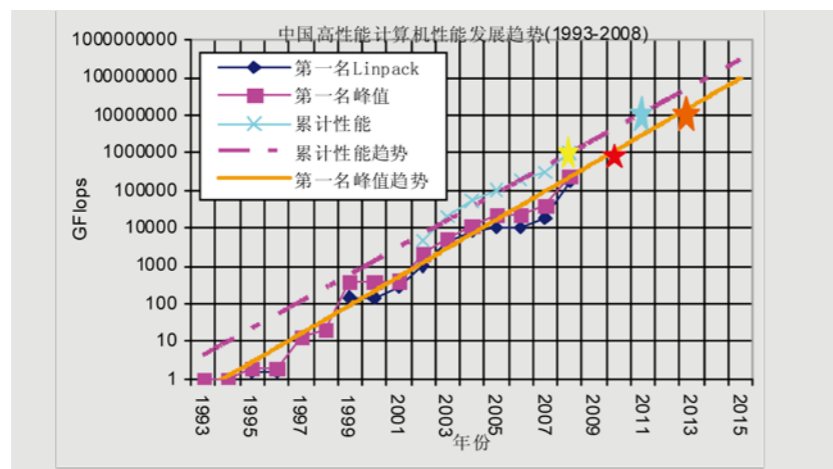


图1 中国高性能计算机年度性能发展趋势(1993-2008.11)

表1 中国TOP100排行榜TOP10 (2008.11)

序号	研制厂商	型号	安装地点	年份	应用领域	处理器核	Linpack值 (Gflops)	峰值 (Gflops)
1	曙光	曙光5000A	上海超级计算中心	2008	科学计算	30720	180600.00	233472.00
2	联想	深腾7000	中国科学院超级计算中心	2008	科学计算	12216	102800.00	145970.00
3	IBM	BladeCenter HS21/X3950 Cluster	中石油四川石油物探公司	2008	能源/地球物理	5040	24670.00	53625.6
4	HP	Cluster Platform 3000 BL460c	中国地震局工程力学研究所(北京)	2008	科学计算/地震工程	3072	23272.00	32686.08
5	IBM	BladeCenter HS21 Cluster	中石油大庆物探公司	2008	能源/地球物理	4128	21126.44	43921.92
6	宝德	PowerScale 8000	湖南	2008	科学计算	2048	20410.00	24576.00
7	宝德	PowerScale 8000	江苏	2008	科学计算	2272	19970.00	26627.00
8	IBM	IBM BladeCenter HS21 Cluster	中石化胜利油田分公司物探研究院	2007	能源/地球物理	4096	18600.00	38223.90
9	IBM	BladeCenter HS21 Cluster	中石油东方地球物理公司	2007	能源/地球物理	4048	18146.86	37727.36
10	HP	Cluster Platform 3000 BL460c	电信公司(北京)	2008	电信	3096	17680.00	32941.44

简称中国TOP100^[2]。

2. 总体性能分析

本节图1和表1分别给出的是中国TOP100的总体性能发展趋势图以及TOP10计算机情况的列表。

和2008年11月发布的世界TOP500高性能计算机的情况相比较，可以看到：

- 2008年11月世界TOP500总Linpack性能达到了16.95Petaflops，是2007年6.97 Petaflops的2.43倍；而根据2008年中国TOP100排行榜的数据，中国TOP100的总Linpack性能是1.036PFlops（2007年307.35Tflops），是2007年的3.37倍；
- 2008年11月世界TOP500第一名为美国IBM公司的走鹃（Roadrunner），其Linpack性能为1.105Petaflops，因为系统升级，比2008年6月份的性能略有增加。但Roadrunner的第一名位置差一点被Cray公司的Jaguar XT5系统超过，1.059Petaflops。而且，下一次该系统很有可能超越Roadrunner，夺走第一名。因此，目前世界上共有两套系统突破了Linpack的千万亿次大关，且全部美国制造。中国TOP100排行榜第一名的位置在被国外公司占据三年之后，再次被安装在上海超算中心的曙光5000A夺回，其Linpack性能在国产计算机中率先突破百万亿次大关，为180.6 Tflops，是2007年18.6 Tflops的9.7倍。部署在中科院超算中心的深腾7000，

也以102.8Tflops的性能取得第二名。目前中国国内有两套系统突破了Linpack百万亿次大关。中国高性能计算已经快速走出平台期，实现性能的量级变化，进入百万亿次计算时代。在刚刚发布的2008年11月最新一期TOP500排行榜上，曙光5000A再次取得第十名的位置，是前十台机器中，唯一在美国之外且由中国公司制造和安装的超级计算机！

进入2008年11月份世界TOP500机器的Linpack性能都超过了12.6Tflops；进入2008年中国TOP100机器的Linpack性能都超过了3.33TFlops；中国TOP100中有92个（2007年为75个）系统是机群，机群继续占主导地位。而国际TOP500虽然也是这个趋势，但机群仅占到80%，低于国内的份额。值得注意的是，中国TOP100中性能比较高的系统，往往采用机群体系结构，尤其是前10名里，全部都是机群，且9台是四核处理器，8台是刀片系统；而整个排行榜有43台（2007年34台）刀片系统，刀片呈逐年上升趋势。

世界TOP500中TOP 10的最低性能超过180Tflops；其中4台由Cray公司制造，3台由IBM公司制造，SGI公司1台，SUN公司1台，曙光公司1台。和去年相同，目前仍然只有2套机群系统进入TOP 10，表明美日等在采用新体系结构高性能计算机方面仍在高端稳步探索，而中国大陆还看不到这种转变，且体系结构

日趋同质化，采用机群系统。在超级计算机的体系结构创新上，国家必须加大投入力度，设立相关课题，鼓励创新，否则会影响国产高性能计算机的发展后劲。中国TOP100中，TOP 10的最低性能大于 17.68Tflops(2007年6.98Tflops)，其中4台由IBM制造，HP 2台，宝德2台，曙光和联想各1台。国外机器虽然丢掉了第一名和第二名的位置，但仍然占据TOP10超过半壁江山，且有4台用在能源领域。

- 世界TOP500上的379套（2007年354套）系统使用Intel处理器。大部分系统使用多核处理器，其中使用四核处理器的机器已经上升到336台，双核处理器的系统153台，只有4套系统仍然使用单核处理器；IBM和AMD公司的份额差别不大，成为处理器的第二和第三大厂商，60套（2007年61套）系统使用IBM的Power处理器，稍有下降；59套（2007年78套）系统使用AMD的Opteron处理器，继续下滑。中国TOP100中有54套系统使用四核处理器，26套系统使用双核处理器，也就是将近80%的系统使用多核处理器。而20%的单核处理器大部分是过去上榜的机器。有71套系统采用Intel的处理器，21套系统采用AMD的处理器。就互连网络方面来说，仍然有71套系统采用千兆网络，17套系统采用Infiniband网络，千兆网络仍是主要的互连网络。
- 亚洲国家在世界TOP500上

的机器数量有较大幅度下降，从58台降为47台。排行榜中有来自日本的18套系统（2007年20套）和29套来自其他亚洲国家或地区的系统，包括16套来自中国大陆的系统（与2007年的10套相比，大幅回升），8套来自印度的系统（与2007年的6套相比，略有上升）。中国的曙光5000A超级计算机目前最高排名为世界第十，亚洲第一。重新夺回了失去多年的亚洲第一位置！

• 目前中国TOP100排行榜中机器的平均Linpack性能为10.36Tflops,是2007年3.07Tflops的3.29倍,国内TOP100的平均性能首次超过10Tflops。2008年国际

TOP500排行榜中机器的平均Linpack性能为33.9Tflops,平均性能首次超过30Tflops,是中国TOP100平均性能的3.27倍,比2007年的4.54倍缩小;而国际上平均性能接近10Tflops的时间为2007年6月,平均性能差距缩小为一年半,2008年TOP100的总体性能增长很快。

3. 制造商分析

我们在表2中给出了中国TOP100机器制造商的上榜情况统计表。并在图2和图3中给出了中国TOP100制造商的上榜机器数量和性能份额图。

2008年中国TOP100排行榜上国内外厂商的上榜机器数量份

额,与2007年相比,基本没有发生太大的变化,美国厂商制造的机器数量继续保持装机总数的57%,国外机器继续占据国内较大的市场份额,但有下降的趋势,双方处于胶着状态。国外厂商看来很难恢复到2004年67%,2003年73%及2002年76%的绝对优势状态,国产机器还有更大机会夺取更多份额。国产机器的市场份额被曙光、联想、宝德、浪潮、神威、银河风云、中科院过程所、防化研究院/宇驰科技和蚬壳星盈等几家瓜分。国外的上榜厂商由2007年的HP、IBM和SGI三家,增加为HP、IBM、DELL、SGI和SUN五家。HP公司连续七年保持中国

TOP100数量份额第一名。

从机器的Linpack性能来看,国产机器的性能比例为55.93%,比2007年的33.09%大幅提升。而国外机器从2007年的地66.91%,大幅下降为44.07%。国外机器虽仍占据数量优势,但国产机器历史上首次在总性能上超过了国外机器,有接近12%的优势。曙光公司更是凭借曙光5000A夺得总性能第一名的历史好成绩。

图4给出的是从2002年到2008年中国TOP100国内外厂商系统份额的趋势变化情况。

总体从装机数量上,前三名分别是HP(33%,比2007年的44%有较大幅度下降,仍保持第一)、

曙光(26%,比2007年下降3%,保持第二名),和IBM(18%,比2007年13%有较大上升,保持第三名);从机器的Linpack性能来看,前三名分别是曙光(32.68%,比2007年的24.82%大幅上升,历史上首次夺得第一名!),HP(22.54%,比2007年的44.22%大幅下降,历史上首次退居第二位置。)、和IBM(18.06%,比2007年的19.44%继续下降,保持第三名)。HP公司继续保持机器数量第一名,但失去总性能的第一名。曙光公司今年历史性的夺得总性能的第一名,实属不易,其对高性能计算机市场多年耕耘,终于

有所回报,当然这里面曙光5000A的功劳最大。

4. 行业领域分析

为便于对比分析,我们在图5和图6分别给出了2008年中国TOP100中的行业应用领域的系统数量和系统性能份额图。2008年中国TOP100的行业应用领域统计情况见表3。

除了约有23%的机器无法说明用途外,国际TOP500目前的应用领域主要为研究、金融、地球物理、半导体、信息服务、服务行业、后勤服务、软件、能源、硬件、信息处理服务、WWW、大气气象、电信、零售、汽车、空间科

表2 中国TOP100 机器制造商表 (2008.11)

厂商	系统	份额	Rmax[GF/s]	Rpeak[GF/s]	效率	处理器核	
国产机器	曙光	26	26%	338555.86	499575.64	60.68%	67996
	联想	5	5%	130590.64	194468.56	62.68%	17724
	宝德	3	3%	49018	68141.88	69.67%	5912
	浪潮	3	3%	17194	35328	49.20%	4416
	神威	2	2%	23721	35639.04	65.05%	3680
	国防科大/银河风云	1	1%	7055	9543.68	73.90%	1024
	中科院过程所	1	1%	6069.4	10214.4	59.40%	960
	防化研究院/宇驰科技	1	1%	3868.13	9504	40.70%	792
	蚬壳星盈	1	1%	3413	4046.4	84.30%	562
国产小计	43	43%	579485.03	866461.6	66.88%	103066	
引进机器	HP	33	33%	233558.23	398145.43	59.62%	53343
	IBM	18	18%	187115.2	364387.1	55.32%	36472
	De11	3	3%	13826.6	26224.64	52.23%	2560
	SGI	2	2%	11696.38	13322.24	88.05%	2048
	SUN	1	1%	10320	13584	76.00%	1200
引进小计	57	57%	456516.41	815663.41	55.97%	95623	
总计	100	100%	1036001.44	1682125.01	60.08%	198689	

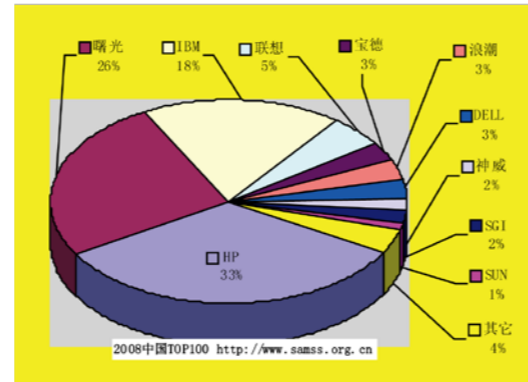


图2 中国TOP100 制造商机器数量份额图 (2008.11)

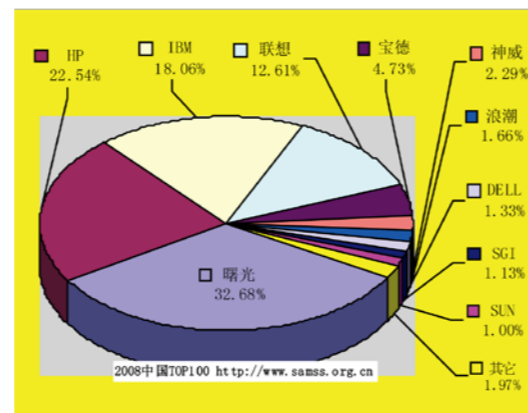


图3 中国TOP100 制造商机器性能份额图 (2008.11)

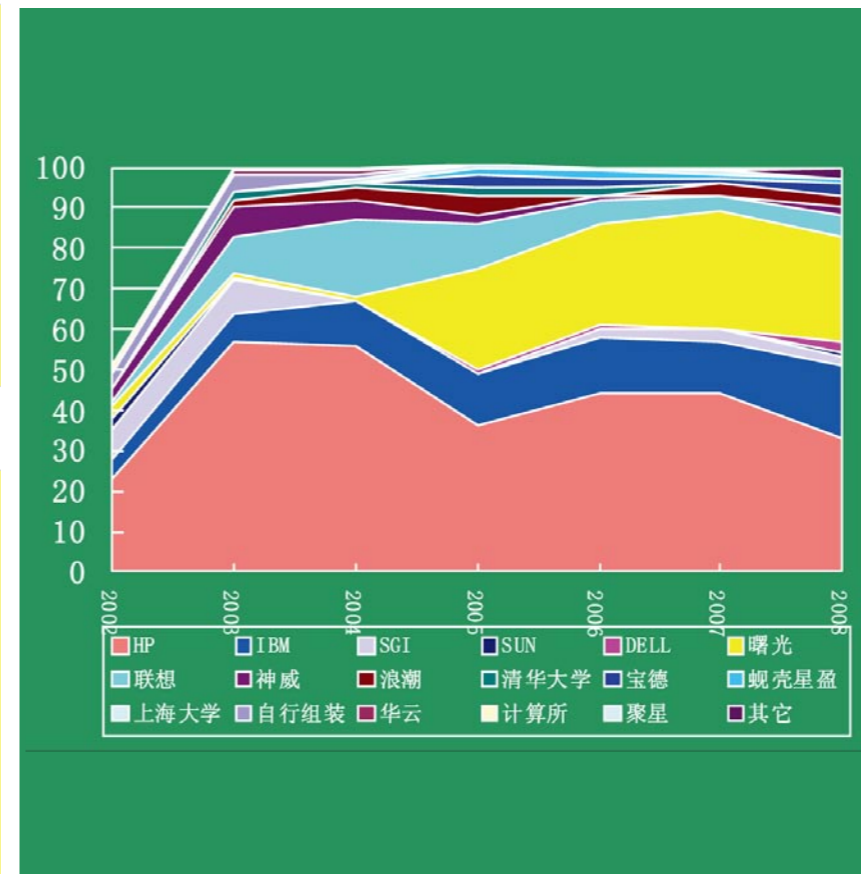


图4 中国TOP100 国内外厂商系统份额趋势(2002-2008)

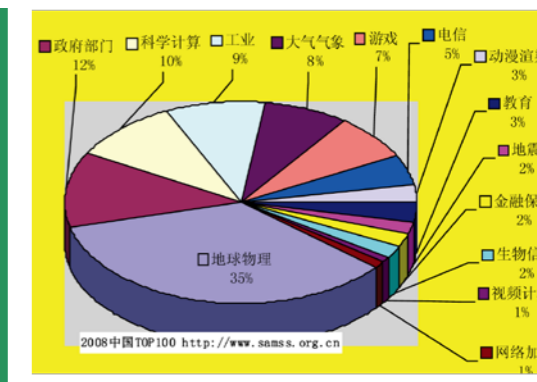


图5 中国TOP100 行业应用领域机器系统份额图 (2008.11)

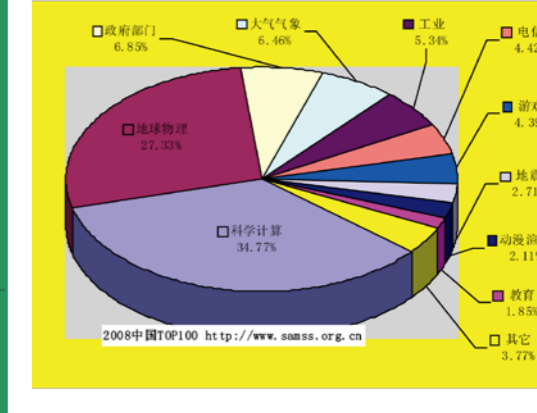


图6 中国TOP100 行业应用领域机器性能份额图 (2008.11)

学、媒体、国防和评测等二十个主要领域，比2007年的十一个领域大幅增加，其中的软件、WWW、汽车和空间科学为新增加的应用领域。从中国TOP100的行业应用领域来看，2008年高性能计算主要分布在地球物理、政府部门、科学计算、工业、大气气象、游戏、电信、动漫渲染、教育、地震、金融、生物信息、视频计算和网络加速等十四个领域，比2007年的十个领域增加，与国际趋势一致。地球物理在国内是应用领域保持第一名，但在国外则仍然为第三名。国际上金融下降为第二名，研究（科学计算）重新上升为第一名。国际上的三大主要应用领域是研究、金融和地球物理；国内的三大主要应用领域是地球物理、政府部门和科学计算（研究）。国内高性能计算的主要应用领域分布与国际上并不完全一致。但地球物理和科学计算（研究）无论是国内还是国际，都是重要的应用领域。此外，我们还可以看到，国外在金融和各类服务行业（含零售）及软件等的高性能计算应用也很普遍和发达。这一点与国内很不同。

2008年中国TOP100，从机器数量上看，地球物理（35%，与2007年持平，保持第一）、政府部门（12%，第一次进入前三），科学计算（10%，回到前三），分列前三名，科学计算的显著上升和今年新研制成功的两套百万亿次

机器有关。从机器Linpack性能上看，科学计算（34.77%，2007年28.06%，夺回第一名），地球物理（27.33%，2007年36.47%，结束五年上升势头，失去第一名）、政府部门（6.85%，第一次进入前三），分列前三名。综合来看，目前的地球物理、科学计算、政府部门、工业、大气气象是高性能计算主要用户。2008年，动漫渲染、地震、视频计算和网络加速等作为新应用领域在中国TOP100上首次出现，说明高性能计算的应用领域进一步扩大，是个可喜的趋势。

根据历年积累的数据，我们在图7中给出了中国TOP100从2002年到2008年的应用领域趋势图。

如果按产学研三个大领域粗略划分，学主要是指教育，研主要是指科研机构（大气气象、生物信息、科学计算等），其他的

都算作产业，那么2007年产学研三者的数量分别为：77：3：20。目前产业的份额占据了2008年TOP100排行榜的77%，比2007年的80%有小幅下降，这主要是受到两套百万亿次机器的影响。高性能计算教学和科研环境今年继续大幅度下降。而曾经占据主要地位的以科研单位为主的科学计算，所占份额再次大幅上升，说明国家对纯粹用于科学计算研究的高性能计算投入在2008年大幅增加。虽是短暂上升，但对推动高性能计算平台上的创新大规模高性能并行算法与并行软件的研究开发，还是有很好的推动作用的。将有利于相关产业的长远发展，进一步推动行业软件的研发升级。因此，建议国家应制订中长期发展战略规划，设立国家级的超级计算研发及应用中心，持续加大对计算科学软硬件研究开发平台的协调支持

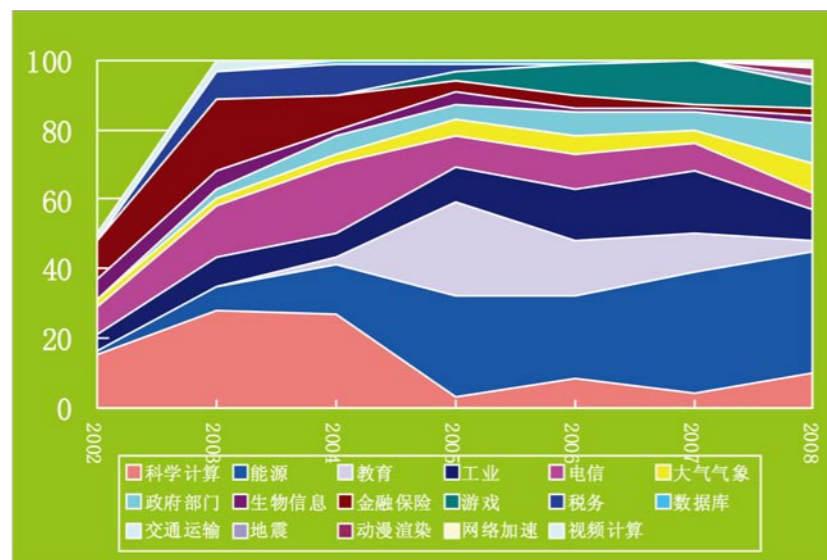


图7 中国TOP100 应用领域趋势(2002-2008)

表3 中国TOP100 行业应用领域份额表（来源：中国TOP100 2008.11）

应用领域	数量(套)	份额	Linpack[GF/s]	峰值 [GF/s]	平均效率	处理器数
能源	35	35%	283117.17	538075.38	54.58%	55840
政府部门	12	12%	70997.61	124499.00	57.49%	20258
科学计算	10	10%	360208.54	489617.16	70.01%	55008
工业	9	9%	55363.06	89760.32	65.22%	13694
大气气象	8	8%	66919.77	97189.12	74.15%	12032
游戏	7	7%	45432.00	81277.6	55.90%	13154
电信	5	5%	45823.00	74340.48	67.26%	8747
动漫渲染	3	3%	21854.07	42908.16	49.47%	4128
教育	3	3%	19166.22	26916.48	70.03%	2608
地震	2	2%	28024.00	40878.08	64.60%	4096
金融保险	2	2%	13264.00	24396.35	56.60%	3116
生物信息	2	2%	11980.00	23466.88	51.10%	2408
视频计算	1	1%	9196.00	19200.00	47.90%	2400
网络加速	1	1%	4656.00	9600.00	48.50%	1200
总计	100	100%	1036001.44	1682125.01	61.59%	198689

力度,改变目前波动的趋势。

5. 展望

综合从1993年开始统计的中国大陆高性能计算机当年性能最高的机器的峰值性能，我们得到了图2中的中国高性能计算机性能发展趋势图（1993-2008）。从图中的数据可以看出，中国高性能计算机的研制和生产也是有一定规律的。虽然由于早期发展变化比较大和其它一些因素的影响，数据精确度不够高。但根据这些数据还是可以给出大致的趋势预测的。中国高性能计算机从1993年到1996年发展平稳（3年），没有量级的变化；从1996年开始（曙光1000）到1999年（神威I）实现了第一次跨越式的发展（3年）；从1999年到2001年又进入平稳发展期（2年）；然后

从2001年开始（曙光3000）进入另外一次快速发展时期，这个发展期维持到2004或2005年（3年或4年），然后重新进入平稳发展期。而2007年排行榜第一名性能的小幅增长，是一个信号，说明大陆地区开始走出平稳发展期，进入新一轮快速发展期。2008年百万亿次机器的出现，证实了我们之前的观察。从第一名的峰值性能趋势预测可以看出，峰值100TFflops的机器将在2007年到2008年间出现（2008年10月，已经实现）；累计Linpack性能将在2008年到2009年间超过Petaflops（2008年10月已经实现）。根据新收集的数据，我们可以得到的新预测结果是：峰值Petaflops的机器将在2010年到2011年间出现；峰值10Petaflops的机器将在2012年到2013年间出现；累计Linpack

性能将在2011年到2012年间达到10Petaflops。

综上所述，2008年的TOP100排行榜主要体现了以下几个趋势：1）国产机器在失守第一名位置三年后重新夺回榜首地位，两套百万亿次机首次出现在排行榜中；2）TOP100总体性能超过1千万亿次（PFflops），中国高性能计算机市场进入快速增长期；3）TOP100平均性能首次突破10万亿次，与国外差距进一步缩小；4）入门系统的性能门槛大幅提升，达到3.33万亿次，是2007年的2.78倍；5）92套系统采用机群结构，机群有一统天下的趋势，计算机体系结构创新面临挑战；6）上榜高性能计算机制造商从去年的9家增加到了14家；7）高性能计算应用进一步普及，应用领域从去年的9个扩大到14个。

参考文献



- [1] 安培浚、赵纪东编译. 美国国家地震减灾计划2008-2012年战略计划介绍. 科学研究动态监测快报. 2008, No. 42:1-6.
- [2] <http://earthquake.usgs.gov/research/monitoring/anss/>
- [3] <http://www.nees.org/>
- [4] <http://www.iris.edu/hq/programs/gsn>

来稿时间:2008年11月23日

作者信息



张云泉

中国科学院软件所并行计算实验室, 计算机科学国家重点实验室, 博士、研究员、博士生导师, 主要研究领域为并行算法与并行软件。



孙家昶

中国科学院软件所并行计算实验室, 计算机科学国家重点实验室, 研究员、博士生导师, 主要研究领域为大规模科学与工程计算的方法与软件。



袁国兴

北京应用物理与计算数学所, 研究员, 主要研究领域为大规模科学与工程计算的方法与软件。



张林波

中科院数学与系统科学研究院, 博士、研究员、博士生导师, 主要研究领域为并行计算方法及其实现技术。

美国科学基金会 (NSF) 的PetaApps计划

PetaApps Project in USA: Accelerating Discovery in Science and Engineering through Petascale Simulations and Analysis

2007年, 美国科学基金会 (NSF) 发布了“通过千万亿次量级的仿真和分析加快科学与工程领域的发现”(Accelerating Discovery In Science And Engineering Through Petascale Simulations And Analysis) 即 PetaApps 计划, 这一计划指南于 2008 年 7 月进行了修订 (Program Solicitation NSF 08- 592)。这是 NSF 为了落实其信息化发展规划《21 世纪科学研究的信息化基础设施》(Cyberinfrastructure Vision for 21st Century Discovery) 配合千万亿次计算机研制的一个计划。

PetaApps 计划旨在开发未来的模拟与分析的工具, 以推动千万亿次规模计算的科学与工程前沿研究, 使研究人员利用新兴的千万亿次计算架构, 促进具有突破性潜能研究的发展。计划指南要求申请者必须阐明其研究中的问题需要利用千万亿次计算能力来解决。计划特别鼓励年轻研究人员参与, 并通过这一计划促使千万亿次计算应用群体的形成。

PetaApps 计划投资 1800 万美元, 在 5 年中支持 11 到 16 个项目, 每个项目预算不超过 160 万美元。

1. 引言

到 2011 年, 科研人员将会拥有丰富的千万亿次高性能计算 (HPC) 系统资源。当前 HPC 架构的发展趋势是, 在未来的两到三年内, 最高端的计算机系统将有几万到几十万个处理器, 每个处理器又包含了多个计算内核, 其中每个内核都可以执行多线程, 同时还包含可以支持向量计算的算术单元。这些特征要求程序员能够通过不同的方法来优化实现算法中各种各样的并行性。算法优化将面临许多挑战, 包括发现和利用代码中的并行性和兼容不同类型的操作, 多级缓存、本地和远程主存储器、节点内部和节点间的通信网络以及并行的 I/O 接口将增加计算机系统内部的延时。此外, 也出现了其他类型的商用 HPC 系统, 如混合系统将通用处理器和专用的协处理器连接, 这种连接可能是片上连接的, 也

可能是是独立连接的。

许多最新的进展可以简化开发研究性代码的挑战, 这些代码在最高端的计算机系统中占的比重很大。其中一个进展包括了日益精确的细粒度性能分析技术, 该技术利用了改进的软硬件设备。性能建模使得研究者可以预测一个精心设计的代码在新系统上的性能, 从而可以设计代码以使其能够在其他一系列的 HPC 系统中有更好的兼容性。另外一个进展是编译器更加精密, 从而提供了更加简单的编程模型; 例如, 分割全局地址空间的编译器, 如 Co-Array Fortran, UPC 和 Titanium, 以及它们自带的本机方式的通信库。

新的建模技术使得研究者能够在不同的空间和时间尺度上更加全面地从物理的角度观察社会和行为现象, 包括将细节精确匹配到尺度边界的能力。随着我们对多尺度现象仿真能力的增加, 在某些情况下引入随机效应以便在更加细微的尺度上表示现象的某些方面变得更加重要。因此, 在许多科学计算中, 有必要对复