

上海超级计算中心
Shanghai Supercomputer Center



2012 年度报告



关于我们

2012年，上海超级计算中心在上海市经济和信息化委员会的领导下，以高性能计算服务为宗旨，不断完善和优化高性能计算平台，提升技术服务能力，拓展高性能计算市场；积极与上海市及国家重点项目用户开展深度合作，吸引、培养新用户，巩固和发展现有用户；充分发挥高性能计算公共服务平台作用，为上海经济建设和科学研究提供可靠、稳定的高性能计算资源，为上海创新驱动、转型发展做出应有的贡献。

上海超级计算中心作为国内第一个面向社会开放、资源共享的高性能计算公共服务平台，已形成一套较成熟的高性能计算服务体系，为科研及工程应用领域提供高性能计算服务和咨询服务，中心用户数逐年上升，超算中心业务呈可持续发展趋势。目前，国内已建立起数个千万亿次级超算中心，面对竞争和压力，中心在积极筹划新一轮建设的同时，不断完善中心的服务体系，提升服务能力和增值能力，使中心继续成为国内较有影响力的超级计算中心，并努力拓展国际业务，加强国际合作，力争在国际高性能计算领域占有一席之地。在人才队伍建设上，努力营造良好的工作氛围，加大引进人才、培养人才、留住人才的力度。



計算中心
puter Center



目录

主任寄语	1	2012年度用户培训	11
计算设施和能力的重大提升		国际交流与合作	
完善和优化高性能计算平台, 提升技术服务能力		中心用户国际合作项目应用成果引起国际性关注	12
完善应用服务体系	2	中心代表团访问美国英特尔研发中心及劳伦斯利福摩尔	
提升高性能计算应用水平	2	国家实验室(LLNL)	12
升级自主开发Xfinity高性能计算平台	2	中心参展ISC' 12大会	13
构建工业计算平台“蜂鸟”	2	巴塞罗那超级计算中心向本中心派驻交换员工	13
承接科研项目, 提升技术能力	3		
完善中心内部管理		科普活动	14
中心制度制定和完善	3		
员工培训	3	计算资源服务	
安全管理	3	我们为科学领域提供服务	16
中心管理信息系统(MIS)工作	3	我们为工业领域提供服务与支撑	23
中心形象的提升		软件研发服务	
中心参展中国化学会第28届学术年会	4	高性能计算平台软件研发	33
中心参加第八届中国国际动漫节	4	并行计算研发	33
中心举办2012年工业企业用户大会		国家科研项目	33
——暨IBM新机器发布会	5	基于沉浸边界法的气固两相湍流全分辨率直接数值	
中心召开2012年科学计算用户大会	5	模拟	33
上海超算核电分中心签约和揭牌仪式顺利举办	6	多(众)核以及GPGPU异构平台上性能测评软件的	
上海超级计算中心参加HPCChina2012大会	7	研究	33
863计划重大项目课题“复杂电磁环境数值模拟”启动暨		高性能综合计算服务平台建设	33
“超大规模并行电磁计算”联合实验室成立2周年总结会		复杂电磁环境数值模拟	33
召开	7		
中心举办第二届大规模电磁精细仿真平台理论与实		媒体报道情况	34
践研讨会	8		
中心参展第14届中国国际工业博览会	8	2012年“魔方”运行相关数据统计	
中心举办系统级噪声振动控制策略及仿真设计研讨会	9	不同地域机时统计	35
上海市力学学会计算力学委员会2012年学术会在中心		不同项目来源机时数统计	36
召开	9	不同项目来源帐号数统计	36
中心参展第十一届IDAJ中国区用户年会	10	用户机构机时统计	36
各类培训	10	用户机构帐号数统计	36
全国第四届电子输运理论纳米电子器件模拟技术		各领域机时数统计	37
讲习班暨ATK培训班	10	各领域帐号数统计	37
OpenACC技术培训	10		
高通量测序数据信息分析培训	11	中心领军人物	38
“基于GL规范的风机传动链认证”培训	11		

主任寄语

2012年上海超级计算中心为国家和上海市重点工程单位提供了高性能计算应用技术服务，为上海“创新驱动，转型发展”发挥了自身的独特优势和不可替代的作用。

中心是国内第一家面向社会开放的高性能计算公共服务平台，成立十几年来，中心本着应用驱动的服务理念和开拓创新的改革精神，为我国的基础科学领域、公益事业、工业工程等提供了数以亿计的计算机时，为众多领域的科研成果提供了坚实的支撑。当今世界，超级计算的发展与应用水平已成为国家综合实力的象征，超级计算机已突破千万亿次大关，正在向更高更快的速度进军；同时，应用规模也在逐步扩大，达到数十万核规模，应用水平不断提高。近几年，国内各地纷纷在建超算中心，给科学应用研究提供了广阔的发展平台，但是国内的应用软件和应用规模与国际高水平的应用仍有较大差距，中心还须不断提升服务质量，提高高性能计算服务水平，创出自己的服务特色和服务品牌。

2012年中心积极规划“四期”工程建设，调研国内外高性能计算业界发展动态和高性能计算需求，对中心新址的选择、机房建设方案进行论证，对中心定位、可持续发展和运维体制等问题进行深入分析和探讨。超级计算机计算速度每年增长一倍的规律不会改变，而我们将根据中国当前的应用状况，合理规划高性能计算资源的建设，合理调配科学用户和工业用户的比例，继续为用户提供更优质的技术服务，给用户带来更多的增值服务，在不断提升业绩的同时，扩大上海超算优质品牌的影响力。



蔡永良

计算设施和能力的重大提升

完善和优化高性能计算平台，提升技术服务能力

■ 完善应用服务体系

完善用户服务反馈机制

完善用户服务反馈机制，针对试用用户制定了《试用用户反馈表》，在每个试用用户试用完成后获得试用用户的评价和反馈意见；对正式用户，定期获得用户评价和反馈意见；对用户反馈意见积极应答，及时解决用户的需求，并根据用户提出的意见，提升中心服务质量。

完善用户服务日志

对用户作业和节点运行情况，每日进行巡查；通过中心outlook邮件分类管理（用户服务）系统，对用户遇到问题和提供的服务进行归类统计，每季度进行总结和点评，提高部门员工技术水平和服务质量；为重点用户提供使用情况月度分析报告：包括每日作业、CPU、硬盘等资源使用情况；每月机时和作业数目；每日提供的服务情况；机器异常状况的说明；以及使用中常见问题的解决方案等。

积极推进用户档案管理工作

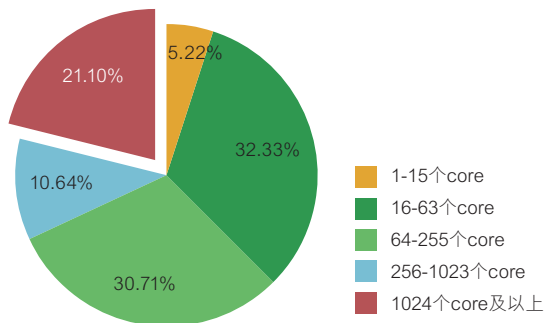
对中心上机用户建立用户档案，包括使用人员、联系方式、使用软件、经常发生的问题等，已形成一套服务用户的技术档案。

及时有效解决用户提出的问题

通过电话咨询、邮件服务、网站、用户培训等方式，及时有效解决用户登录、软件移植安装和使用中出现的问题，提供软件计算结果分析等，同时为用户提供相关软件的高性能计算指导服务。

■ 提升高性能计算应用水平

重点发展科学计算领域大规模（1024核以上）作业，2012年1024核以上作业机时比例平均保持在21.1%；体现了超算中心大规模计算的服务能力，充分发挥了大型超级计算机在科学计算领域的巨大作用，提升了用户的高性能计算应用水平；



2012年各种规模计算任务的总机时比例分布

■ 升级自主开发Xfinity高性能计算平台

中心基于多年高性能计算服务经验，针对传统计算模式已不能满足用户对于便捷性、安全性、可管理性等方面的需求，开发了基于web的高性能计算平台——Xfinity。通过Xfinity，可以实现：

- 1、整合多个异构高性能计算资源，进行统一的管理和监控；
- 2、提供基于web的在线资源使用方式；
- 3、提供用户权限分级管理，保证用户使用过程中计算数据的安全；
- 4、提供基于用户角色的资源分配与调度方案，以及详尽的资源监控与使用分析信息，帮助用户进行成本控制与管理；
- 5、提供分享HPC知识和经验以及发布问题和寻求解决方案的交流平台。

2012年Xfinity软件完成3个版本的开发，目前平台拥有204位活跃用户，完成了19937个作业，共计使用机时2175143核小时，同比增长超过100%。

■ 构建工业计算平台“蜂鸟”

为满足日益增长的上海市工业用户的计算需求，中心2012年6月基于IBM机群系统构建了工业计算平台“蜂鸟”系统。该系统拥有21.6万亿次的计算能力，130个intel最新的E5-2670（8核）计算处理器，400TB实际存储能力，并安装有Linux和Windows双操作系统，可同时提供Linux和Windows平台的计算服务，主要服务对

象为上海市工业企业和多媒体计算等新兴高性能计算领域。该系统的构建,很大程度上提升了中心的工业计算服务能力,计算速度和服务质量获得了工业用户的一致好评。

■ 承接科研项目,提升技术能力

共有“基于沉浸边界法的气固两相湍流全分辨率直

接数值模拟”,“多(众)核以及GPGPU异构平台上性能测评软件的研究”,“高性能综合计算服务平台建设”,“光源集群系统测评”,“复杂电磁环境数值模拟”等5个项目在研,并完成863主结点项目上海市科技进步奖申报和863重大专项验收测试及演示。通过这些项目的实施,进一步提升并行计算和平台研发能力。

■ 完善中心内部管理

■ 中心制度制定和完善

全年对《上海超级计算中心项目管理办法》、《上海超级计算中心项目经费管理办法》、《上海超级计算中心经营类项目经费管理办法》、《上海超级计算中心采购管理制度》进行修订,并根据需要制定《上海超级计算中心低值易耗品管理办法》、《上海超级计算中心会议采购管理流程》等2个新规定,全年发布新制定或修订制度6篇。

■ 员工培训

面向岗位需求,先后安排了17次技能培训,包括市场销售、系统体系架构、建筑弱电工程师、客户支持策略、职称政策、信息安全管理、软件架构、办公软件等内容。

根据员工的需求和兴趣方向,全年组织通用类企业内训: PPT编写技能培训、ITIL普及培训、团队拓展培训、信息安全知识培训。

■ 安全管理

信息安全(ISO27001)

中心信息安全小组坚持每两月进行一次有效性测量,每半年进行一次内审工作;同时,内审员每年进行一次信息安全培训工作,确保内审员的实际工作能力不断提高;2012年顺利通过信息安全外审工作;全年中心无信息安全事故发生,为中心真正建立了一道安全的防火墙。

■ 中心管理信息系统(MIS)工作

对中心管理信息系统(MIS)进行整合和优化,增加和修改了一些模块,另外将其他系统中的项目管理模块和经费管理模块成功移植到中心MIS系统中,并按照中心新的项目管理办法对项目模块重新进行了改造。中心MIS系统全年平均可用率达到99.68%。

中心形象的提升

中心参展中国化学会第28届学术年会

2012年4月13日-16日, 中心参加了在成都举行的中国化学会第28届学术年会。本届化学会年会由中国化学会主办, 四川大学承办, 以“化学的使命”为主题, 共设立19个分会。50位两院院士和5500名高校、科研院所的专家、学者应邀参会。

中心应用推广部时炜工程师在第13分会一理论与计算化学分会, 做了题为“如何跑的更快——科学计算软件在SSC的应用”的报告, 生动形象地对串行和并行的基本概念做了解说。报告中介绍了中心是如何使用普通硬件设备, 搭建出一流的计算服务平台, 如何为科研工作者提供高效、稳定的高性能计算服务。参加报告的近300位专家、学者对此表现出了浓厚的兴趣。

中心首席科学计算工程师、应用技术部经理王涛在人才招聘专场上特别介绍了上海超算中心成立12年来, 秉承客户至上、高品质服务等方面的理念, 期待更多有志青年加入到上海超算中心的服务团队中来。

在此次化学会期间, 许多参会者对中心产生浓厚兴趣, 中心还现场对一些用户进行了问卷调查, 获得了计算化学领域用户情况和需求的第一手资料, 为今后更好地服务用户打下基础。



中心参加第八届中国国际动漫节

2012年4月28日-5月3日, 中心参加第八届中国国际动漫节, 本次动漫节在中国“动漫之都”杭州滨江区白马湖生态创意城举行。

中心应用推广部李德玉工程师介绍了上海超算中心的资源、传统应用和服务, 向与会代表阐述了超算未来在动漫渲染领域的规划及定位, 并希望可以更好的为全国动漫公司服务, 在减少动漫公司运营成本的同时, 制造出更精美炫丽的动漫作品。报告获得了动漫业内人

士的认同, 众多参会者对我们提供的计算服务平台表示出了浓厚的兴趣, 会后与多位公司代表进行了详尽的交流和意向洽谈。

中国国际动漫节, 是唯一国家级的动漫专业节展, 由国家广播电影电视总局、浙江省人民政府主办, 已被列为中国《国家“十二五”文化改革发展规划纲要》重点支持文化会展项目、“中华文化走出去”的重要平台, 每年4月28日至5月3日在杭州举行。

中心举办2012年工业企业用户大会——暨IBM新机器发布会



2012年6月21日-22日, 中心在浙江举办了工业企业用户大会——暨IBM新机器发布会。

会议首先由中心副主任李根国博士发言, 他回顾了中心的发展历程, 提出2012年的工作展望, 期望能够通过此次用户大会为中心用户提供一个交流的平台, 并通过用户的反馈, 来提升中心的服务质量。随后应用技术部经理王涛博士对2011年上海超级计算中心的工作进行了总结。2011年, 中心工程计算A区的总体可用率达到了97%以上, 专线等各项配套设备运行正常, 为工业用户的正常运算工作提供了有力保障。

会上另一重要议题是为中心新引进的21万亿次IBM

新机器进行首次发布和命名活动。应用技术部陈小龙工程师介绍了IBM机器的硬件指标和测试结果, 该机器将主要在工业仿真领域提供应用。经过中心用户的现场投票, 该IBM机器被命名为“蜂鸟”, 其含义象征着计算规模虽小, 但核心计算速度强大, 能够灵活多变地为用户提供计算服务。

本次大会还安排了中心用户做现场演讲。商飞、华力微电子、三菱电梯、708所、微电子装备、宝钢等6家用户回顾了与中心合作的历程与感悟, 他们迫切希望中心加快计算能力的提升, 继续提供高性能计算资源和高质量的服务工作。

上海超级计算中心2011年度工业企业优秀用户也在大会上揭晓, 它们分别是: 宝山钢铁股份研究院、上海核工程研究设计院、中航商用航空发动机有限责任公司、中国商用飞机有限责任公司上海飞机设计研究院、上海汽车集团股份有限公司技术中心、中国船舶及海洋工程设计研究院、上海微电子装备有限公司、延锋伟世通汽车饰件系统有限公司。

中心召开2012年科学计算用户大会

2012年10月26-27日, 中心2012年科学计算用户大会在苏州召开, 有20家单位近三十位代表出席了会议。

会议首先由中心副主任李根国博士发言, 他回顾了中心的发展历程, 指出中心的发展与科学用户的不断探索密不可分, 科学计算用户始终是中心的最大使用群体。在中心即将开展的下一期建设中, 也会以科学计算作为一个重要应用方向。应用技术部王涛经理对2011年中心的工作进行了总结。在2011年, 中心硬件总体可用率达到了97%以上, 为科学计算用户的正常运算工作提供了有力保障。此外, 王涛也指出中心目前还存在一些不足, 会在日后的工作中逐步改善。中国科学院上海药物研究所的罗成研究员和中国科学院力学研究所的袁泉子副研究员, 代表中心用户做了精彩的专题报告。

上海超级计算中心2011年度科学计算优秀用户也

在大会上揭晓, 它们分别是: 中国科学院上海天文台、北京大学余振苏课题组、中国科学院上海技术物理研究所陈效双课题组、浙江大学曲绍兴课题组、上海交通大学孙宝德课题组、上海交通大学盛政明课题组、南京大学王炜课题组和中国科技大学微尺度物质科学国家实验室。



上海超算核电分中心签约和揭牌仪式顺利举办

2012年9月29日,上海超算核电分中心成立仪式在核工院顺利举行。国家核电技术公司党组书记、董事长王炳华、上海市经济与信息化委员会主任戴海波、副主任刘健、上海市科学技术委员会副主任陈鸣波、上海超级计算中心奚自立主任、上海核工程研究设计院郑明光院长等相关领导出席了本次成立仪式。



上海核工程研究设计院(以下简称“核工院”)隶属于国家核电技术有限公司,承担着AP1000依托项目工程设计、国产化AP1000核电工程设计、大型先进压水堆核电站国家重大专项研发,以及出口巴基斯坦核电工程、辽宁红沿河核电工程设计及核电厂技术服务等核电工程任务。

自上海超级计算中心(以下简称“中心”)成立以来,核工院就成为中心的用户。近年来,随着国家核电工程的启动和发展,核工院对高性能计算的需求不断增加。中心为了进一步深化“两化融合”工作,更好地对接国家重点工程项目,服务于核工院的各项工作任务,经双方友好协商,确定建立上海超算核电分中心,深化核电领域研发合作。

核电分中心建成后,中心可以更好地对接核工院的高性能计算需求,提升中心服务国家核电重大工程的能力。此次合作的主要目标是将中心的计算资源物理延伸到核工院,并提供高性能计算、商用软件许可证浮动及前后处理等服务,其次是定期派驻资深系统管理员和技术工程师,输出中心运维管理经验,协助提升核工院IT管理水平。同时,中心将与核工院共同建设核电专业的高端人才队伍,共同承接国家核电项目,为核工院百万千瓦核电自主研发提供技术支撑。



上海超级计算中心参加HPCChina2012大会

2012年10月28日-31日, 中心参加在湖南张家界召开的HPC Advisory Council中国研讨会和HPC China 2012大会。中心参会人员除听取国内外高性能计算专家报告, 与领域同行、参会代表进行交流外, 还设置了中心展台, 向参会及来访者介绍中心情况, 推广中心服务平台。

本次大会另专设了一场“超级/云计算中心论坛”, 参会单位包括: 上海超级计算中心、国家超级计算长沙中心、国家超级计算济南中心、北京计算中心、上海交通大学网络信息中心等。在论坛上, 各参会单位就各自当前发展状况进行了介绍, 并对运行过程中遇到的一些问题进行了探讨。总体来看, 参会的国家级及地方计算中心的服务模式基本相同, 但各个中心又各有侧重点。此次论坛上可持续发展问题成为各与会单位讨论的重点, 其中大规模计算资源的配备所带来的高昂运营成本更成为各单位需要面对的严峻挑战。



HPC China (全国高性能计算学术年会) 创办于2005年, 至今已举办七届。此次会议约有500人参会, 25家科研院所、厂商参展。本届盛会围绕着高性能计算技术的研究进展与发展趋势、高性能计算的重大应用等主题展开, 促进信息化与工业化的深度融合, 为相关领域的学者提供交流合作、发布最前沿科研成果的平台, 推动中国高性能计算的发展。

863计划重大项目课题“复杂电磁环境数值模拟”启动暨“超大规模并行电磁计算”联合实验室成立2周年总结会召开

2012年10月31日, 国家高技术研究发展计划(863计划)重大项目课题“复杂电磁环境数值模拟”启动会在中心召开。课题负责人、西安电子科技大学张玉博士, 中心王普勇副主任、李根国副主任, 中国电子科学研究院高斌博士, 以及各参与单位课题组成员参加了课题启动会。

本课题由西安电子科技大学、上海超级计算中心、中国电子科学研究院三家单位共同承担, 针对我国大型飞机等重大科学工程中的复杂电磁环境, 基于国产10亿亿次高效能计算机研发自主知识产权的大规模并行电磁仿真软件系统, 提出电磁算法的新理论, 并突破其大规模并行计算关键技术, 大幅提高我国的电磁计算能力, 实现国际先进的能力型计算。

启动会由西安电子科技大学赵勋旺博士主持, 课题负责人张玉博士就课题的背景、意义及其重要性进行了阐述。会议明确了课题的总体目标及分年度计划, 细化了各参与单位所承担的研究任务和考核指标。各参加单位汇报了课题研究进展和当前存在的问题, 以及其他各项协作事宜。

总结会上, 赵勋旺博士针对实验室成立2周年以来的发展历程作了简要回顾, 并对取得的阶段性成果进行了总结汇报, 主要包括千核级并行电磁算法新突破、一系列复杂大型电磁仿真案例、国家重大科研项目立项、国内外学术交流等。

各位专家针对并行电磁算法的关键技术、并行规模、并行效率等核心问题进行了深入研讨, 并对实验室的发展目标、近期规划提出了重要指导意见, 希望实验室能够在大规模电磁计算新理论、新方法方面取得更大进展, 形成自主知识产权的大规模电磁计算软件。

经过2年努力, 实验室已经初步建立了工业应用级超算电磁仿真平台, 该平台在飞机电磁兼容等典型电磁工程领域获得了成功应用。在前期工作基础上, 实验室将继续加强合作交流, 进一步提高并行电磁算法的计算能力, 推动高性能电磁计算软件的自主创新, 把大规模电磁仿真平台推向更高的应用层次。

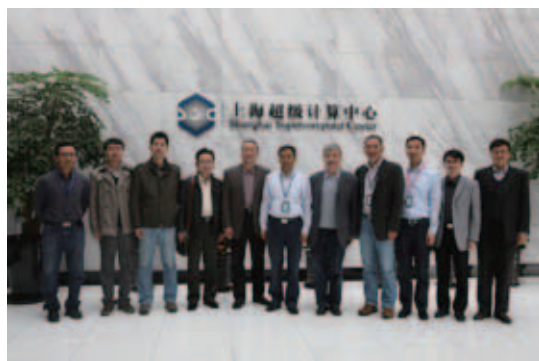
会议邀请天线与微波技术重点实验室学术委员会主任梁昌洪教授做了专题报告。

中心举办第二届大规模电磁精细仿真平台理论与实践研讨会

2012年11月1-2日, 第二届大规模电磁精细仿真平台理论与实践研讨会在上海超级计算中心举行。本届研讨会由中心和天线与微波重点实验室(西安)联合实验室共同举办, 在去年第一届大规模电磁精细并行计算研讨会举办的基础上, 本次研讨会受到十多家致力于高频电磁场大规模精细并行设计的科研院所关注, 并委派几十位相关电磁计算专家到会参加。

研讨会上, 中心副主任李根国博士肯定了上届研讨会取得的成绩, 并对本届研讨会提出了期望。

中心应用推广部工程师刘波向到会专家介绍了中心的大规模电磁精细仿真并行平台、在“魔方”上所计算的多个实际超大规模电磁精细计算项目、电磁场精细仿真HPC计算平台的组建、使用与管理等内容; 同时, 联合实验室的专家向参会人员汇报了联合实验室成立二周年的主要计算成果。会上, 各位专家详细讨论了高阶矩量法和多层快速多极子算法高效并行的技术改进设想, 并就电磁场精确并行计算在国防装备设计中的作用和应用方向进行深入探讨, 还在电磁场精确仿真方面提出了诸多很有建设性的意见和建议。许多专家认为复杂大型平台的电磁特性设计的准确度要求越来越高, 电大尺寸物体



高精度高可靠度的电磁场仿真技术已经成为我国需要着重发展的国防核心技术之一。

上海超算中心于2010年建成计算规模达2048 CPU核的并行大规模电磁精细仿真平台, 成为我国目前成功运行的最大的电磁精细仿真平台。迄今为止, 该平台已经为国内多个单位提供了上百万CPU小时的电磁精细计算服务, 成功解算多个颇具挑战性的电磁仿真项目, 项目涉及领域包括复杂大平台上复杂天线的布局及电磁兼容精细计算、复杂平台及编队形式下的雷达目标特性精细计算等方面。专家们一致认为该大规模电磁精细计算平台会为更多对大规模电磁精细计算有迫切需求的单位提供可靠的解决方案。

中心参展第14届中国国际工业博览会

2012年11月6日-10日, 第14届中国国际工业博览会(简称“工博会”)在上海新国际博览中心举行。作为一个国内外市场交易、企业宣传平台, 本届工博会共设立八大专业展, 其中包括: 数控机床与金属加工展、工业自动化展、新能源与电力电工展、环保技术与设备展、信息与通信技术应用展、科技创新展、新能源汽车展和航空航天技术展。2012工博会的展会面积达到15万平方米, 共计吸引超过1800家展商参展和10万人次的中外专业观众现场参观。

区别于以往的独立参展, 中心首次以合作伙伴的身份参加了由上海研发公共服务平台(隶属于上海市科学技术委员会)组织的“科技创新服务平台”联合展位。展位位于创新科技馆(W5展区), 共计有10家合作单位参与其中。除中心以外, 其余9家单位均为研发公共服务平台

台的挂牌单位, 并作为某一领域的平台与其存在长期合作关系。上海超算中心的本次参与或将为两个机构之间的进一步合作奠定基础。

在为期5天的展会中, 中心展位总计接待观众360名, 与83名观众进行了较为深入的交流。通过本次展会, 进一步加深了企业对中心和高性能计算的了解, 达到了在潜在用户中推广超算中心及其服务的目的。



中心举办系统级噪声振动控制策略及仿真设计研讨会

2012年11月14 -16日, 由上海超级计算中心、GET集团、中国汽车工程研究院联合组织的“系统级全频率噪声振动控制策略及仿真设计”高级研讨会在中心举行。来自整车、轨道交通、工程机械、内饰及材料、船舶、电子、航空航天等领域的40家企业和科研院所近60名用户出席了本次会议。

研讨会上, 来自北美的国际专家及中国汽车工程研究院、上海超级计算中心、泛亚汽车中心、上汽、大众、Henkel、上海交通大学等企业院校的国内知名NVH专家和资深工程师, 就现代振噪工程设计及发展趋势、系统级全频段振动噪声体系与技术应用、复杂工程系统高效能仿真、轻量化技术及声学包设计、声学系统性能设计与开发等关键议题, 与参会人员进行了深入的交流。

在声学材料设计和声学包优化和振动声学混合建模



技术领域, 国内振动噪声工程界一直面临着众多的挑战和技术难题。此次活动的专项培训期间, 国际专家通过技术转授的培训形式, 就这两个领域的关键技术策略和实施方法, 进行了专项剖析和知识传授, 引起了全体学员的广泛共鸣与认可。

上海市力学学会计算力学委员会2012年学术会在中心召开

2012年11月20日, 由上海市力学学会计算力学委员会主办, 上海超级计算中心承办的“上海市力学学会计算力学委员会2012年学术会”在中心报告厅隆重召开。

本次会议的主要内容为高性能计算在工业和工程中的应用。会议由中心副主任李根国博士主持, 力学学会主席胡振东教授出席了本次会议并作了题为“数值模拟在充气航天结构设计中的应用”的报告。另外, 中心应用技术部工程师丁峻宏、陈小龙通过讲解在中心使用的一些工程应用案例, 让参会者更清楚地了解了高性能计算在工业和工程计算中的作用。



■ 中心参展第十一届IDAJ中国区用户年会

2012年11月19-20日, 中心参展第十一届IDAJ中国区用户年会。会议期间, 中心工作人员与参会代表进行展台交流, 并向来访者介绍中心历史, 推广中心服务成果, 受到了广泛的关注。

本届IDAJ年会上各原厂商分别发布了GT-SUITE、STAR、modeFRONTIER、JMAG、MPCCI、FIELDVIEW, TURBOdesign等行业技术的最新发展战

略和产品研发的最新资讯。许多国内外知名学者和用户在会上发表了关于汽车、家电、船舶、航空航天、能源、电磁场、多相流等领域的经典行业解决案例。

借此机会, 中心还开展了用户需求调查问卷, 及时掌握了CAE领域用户情况和需求的第一手资料, 为今后更好地服务用户打下基础。

■ 各类培训

■ 全国第四届电子输运理论纳米电子器件模拟技术讲习班暨ATK培训班

2012年5月15日-16日, 上海超级计算中心联合北京宏剑公司举办了“全国第四届电子输运理论纳米电子器件模拟技术讲习班暨ATK 培训班”, 来自全国各地的40名学员参加了此次培训。

本次讲习班旨在为国内广大实验和理论工作者提供领域内的最新科研动态, 使大家能够更全面的了解并深入掌握第一性原理和半经验模拟方法在纳米结构和纳米器件电子的性质预测及分析方法上的应用、熟悉ATK软件的基本操作及技巧及了解ATK12.2新版本的最新功能。参会的学员纷纷表示, 通过此次培训, 除了界面操作外, 学员们还学到了很多原理性的知识。他们关心的问题不仅得到了比较满意地解答, 了解到一些理论研究的前沿动态, 还得到了和同行进行深入探讨交流的机会。

培训期间, 上海超级计算中心安排学员参观了高性能计算公共服务平台, 详细了解了中心的高性能计算资源配置、科学和工程应用项目及已完成的国内外重大项目成果, 为未来的进一步合作奠定了基础。



■ OpenACC技术培训

2012年5月24日, 25位从事GPU应用优化的编程开发人员参加了上海超级计算中心、美国Portland Group公司联合举办的OpenACC技术培训。

本次培训旨在让学员初步了解如何利用OpenACC指令进行GPU系统的应用程序移植, 并通过编程实例让大家掌握如何在5小时之内让程序提高5倍的速度。培训邀请了美国Portland Group公司工程师Ms. Zhen Wang讲解了OpenACC技术; 上海超级计算中心研发部工程师徐磊介绍了GPU与CUDA编程(偏编程)。另外, 上海超级计算中心还安排学员们参观了高性能计算公共服务平台, 详细了解了中心的高性能计算资源配置、科学和工程应用项目及已完成的国内外重大项目成果。



■ 高通量测序数据信息分析培训

2012年7月23-27日, 上海超算中心携手上海美吉生物医药科技有限公司在中心举办了“高通量测序生物信息分析培训”。

在此次培训班上, 上海超算中心针对大部分用户首

次接触Linux操作系统的特点, 特别开展了入门讲座以增加用户对于Linux的认识。美吉生物也针对数据分析所需掌握的常用软件, 进行了深入讲解和实例演示, 并通过用户的上机操作过程, 逐步加深用户对于软件的掌握程度。此外, 培训班特意邀请的几位外部讲师详细介绍了他们正在开展的研究工作和数据分析思路, 极大地拓宽了用户的科研视野。

在本次培训班上, 上海超算与美吉生物也与广大用户深入探讨了以后基因测序领域数据处理的应用前景和使用方式, 用户们纷纷发言, 为上海超算与美吉生物接下来进一步开展工作提供了很好的思路与建议。同时, 用户们也希望类似的活动能够经常举办, 为基因测序信息分析提供一个交流与学习的平台。



■ “基于GL规范的风机传动链认证”培训

2012年9月6日-7日, 上海超级计算中心举办了“基于GL规范(2010 标准)的风机传动链认证”培训。该培训由上海超级计算中心、环球工程技术集团、德国SIMPACK公司共同举办, 近30名从事风电行业工作和研究的学员参加了此次培训。

本次培训基于SIMPACK软件环境, 结合GL传动系动力学认证规范要求, 就如何完成风机传动链的认证工作, 从建模、分析、数据处理到认证报告的编制等内容进行专业的培训与详细的指导, 同时对认证分析的要求与结果等进行诠释。培训结束后, 学员们反响积极, 均表示此次培训对他们今后的研究和工作的有很大帮助。



■ 2012年度用户培训

2012年11月8日-9日, 中心举办了本年度用户培训, 来自三十多家用户单位的一百多位学员参加了本次培训。

本次培训内容包括上机初步、各类计算作业实战、并行计算基础、并行编程入门、Linux与集群系统等, 课程分别由中心研究开发部和应用技术部的工程师进行讲授。同时培训还邀请到了Intel公司、CAPS公司以及浪潮公司的工程师分别介绍了CPU、GPU和MIC相关的一些知识, 得到了学员们的欢迎。



国际交流与合作

中心用户国际合作项目应用成果引起国际性关注

印度主流报纸The Telegraph在其科学专栏Knowhow中以Reach for the Stars为题,专门介绍了上海超级计算中心“魔方”超级计算机帮助上海交通大学物理系盛政明教授的课题组在激光等离子体磁场湍流的研究中取得新进展,并给予了高度评价。今年5月,该研究相关的论文发表在《美国国家科学院院刊》[PNAS, vol. 109(21), 8011-8015, 2012]。PNAS为美国科学院主办的高水平的学术期刊,是科学界影响力最高的综合性期刊之一,涵盖数学、物理、化学、生物等所有科学领域。

从2010年7月至今,中心共为盛政明教授的课题组提供大约160万核小时的资源,使该课题组开展了大规模的数值模拟和理论分析,有力地支持了实验观测。

流体中的湍流是自然界中极为普遍、迷人而又复杂的现象。虽然人们借助实验和大规模的计算机模拟等最新技术手段对它开展了大量的研究,但至今还是没有能

完全理解它。而与激光核聚变研究有关的高温高密等离子体中的湍流则更为复杂,一方面其中引入了非线性的电磁力的作用,另一方面这种湍流发生的时间和空间尺度更快、更小,后者对实验诊断提出了更大的挑战。

盛政明教授的课题组与印度Tata基础科学研究所G. R. Kumar教授、印度等离子体物理研究所P. K. Kaw教授的团队一起,针对相对论强激光与固体靶作用中的超强磁场以及湍流产生开展了合作研究。实验观测到等离子体内部一定区域近百兆高斯的强磁场产生,而且磁场的空间分布呈现湍流的特性。

这项研究对认识和操控快点火激光核聚变中强流电子束的输运具有重要意义,也有助于人们深化对高温、致密天体现象的认识。过去十多年,随着实验技术的发展,所谓实验室天体物理逐渐发展起来。而强激光与等离子体相互作用是目前实验室天体物理研究的重要手段。

中心代表团访问美国英特尔研发中心及劳伦斯利福摩尔国家实验室(LLNL)

2012年1月初,上海超级计算中心和上海市经信委组成的代表团一行考察访问了美国英特尔研发中心和劳伦斯利福摩尔国家实验室(Lawrence Livermore National Laboratory, LLNL)。

英特尔研发中心

位于美国波特兰市的英特尔研发中心是英特尔公司全球最大的研发中心,有员工15000人,主要承担英特尔公司芯片核心技术研发。

代表团一行到英特尔研发中心访问的主要目的是了解 and 考察英特尔公司在未来几年对加速芯片技术,特别是其推出的MIC (Many Integrated Core)众核芯片方面的研发计划和产品路线。

访问期间,英特尔工程师详细介绍了最新发布的MIC加速芯片Knight Corner(产品简称KNC)的具体情况和技术参数。同时,英特尔工程师也介绍了正在研发中,预计于2015年发布的下一代产品Knight Loading(KNL)的情况,该芯片将是第一个可做到自启动的

MIC产品,从而使众核芯片真正脱离CPU而单独工作,其速度将达到单芯片3000GFLOPS(3T)。

在考察过程中,代表团一行还会见了英特尔公司副主席Kirk Skaugen,并与其进行了会谈。会谈中,双方均表达了加深合作的意向,希望不仅从CPU产品方面,而且从系统开发环境、程序开发等各方面建立长效机制,形成对应应用优化、开源软件效率提升等方面的长期合作。

美国劳伦斯利福摩尔国家实验室

劳伦斯利福摩尔国家实验室(Lawrence Livermore National Laboratory; LLNL)是一个隶属于美国能源部的国家研究机构。自1952年创建以来由加利福尼亚大学管理至2007年9月30日,2007年10月1日起,此研究机构由加州大学、Bechtel National、BWX Technologies、Washington Group International共同组成的保全机构来管理。

作为一个国家安全实验室,LLNL的使命是通过采用先进的科学技术确保国家安全。劳伦斯利福摩尔国家

实验室每年经费预算约16 亿美元, 工作人员超过8000人, 包括3500 科学家、工程师以及技术人员, 该国家实验室在许多科学领域中都处于国际领先地位。

代表团一行主要考察LLNL科学计算部, 即LLNL负责高性能计算的部门。在考察中, 代表团一行与该部的副主席Dona L. Crawford及各相关部门的管理人员、技术专家举行了专题会议, 就LLNL的高性能计算设施、组织架构、应用、运营、维护等情况进行交流, 同时也详

细介绍了上海超级计算中心的高性能计算设施、组织架构、应用、运维等相关情况。

会谈中, 双方就超级计算机系统技术、未来发展、性能预测, 以及高性能计算机系统运行的精细化管理等各方面进行了充分、详尽的交流。会后, 代表团一行实地参观了超级计算机主机房, 对美国的高性能计算发展水平以及LLNL高性能计算中心的管理水平和实际情况有了比较深入的了解。

中心参展ISC' 12大会

2012年6月18日-20日, 中心再度前往德国汉堡参展ISC' 12会议。在为期两天半的会展期间, 中心共计接待交流来访者约100名, 并对所有26家参展计算中心展位进行了拜访, 与其工作人员进行了不同程度的交流。其中包括: BSC (西班牙)、CSC (芬兰)、LLNL (美国)、CHPC (南非)、EPCC (英国)、ICHEC (爱尔兰)、SUSU (俄罗斯)、MSU (俄罗斯)、HLRN (德国) 等。

本届ISC会议总共吸引了来自全球共计超过2300名参会者, 以及包括研究机构、计算中心、HPC软硬件生产商在内的175家参展商。这两个数字均创造了ISC会议的历史记录, 表明其规模正在逐年扩大。

按照惯例, ISC' 12会议发布了2012上半年度TOP500排名, 其中排名全球前十的超级计算机出现了较为明显的变化。目前, 日本Riken的“京”已交出了全球最快计算机的宝座, 取而代之的是IBM “BlueGene/Q, Power”, 其峰值速度达到20.13千万亿次每秒 (pflops)。此外, 还有3台IBM的“BlueGene/Q, Power” (峰值速度为: 10.07、2.10、1.68Pflops) 以及

1台“iDataPlex” (峰值速度: 3.19Pflops) 新近入榜, 分别位居第3、4、7、8位; 这足以凸显IBM在超级计算机研制方面的强劲实力。另外一台新入榜的机器为Bull的“Bullx B510” (峰值速度: 1.67Pflops), 目前排名第9。与“京”的下跌1位相比较, 来自中国的“天河一号”和“星云”分别下跌了3位和6位, 目前分别位居第5和第10的位置; 而CRAY公司的XK6 (美洲豹) 也由原本的3位下跌至第6位。更值得注意的是, 与去年11月的TOP500排名比较, P级计算机的数量增加了80%, 达到27台之多。由此可见全球硬件厂商在P级超级计算机方面的激烈竞争必将日趋激烈。



巴塞罗那超级计算中心向本中心派驻交换员工

2011年12月6日-2012年3月31日, 根据上海超算中心与西班牙巴塞罗那超级计算中心 (BSC) 签署的战略合作框架下的人员互换协议, 巴塞罗那超级计算中心向本中心派驻了首位交换员工: 网络安全负责人Juan Carlos Sanchez先生。在为期4个月的访问活动中, Sanchez先生和上海超算中心信息技术部员工共同完成“SSC Eduroam”项目 (关于无限网络漫游的项目), 还

与中心人员多次进行交流, 内容涉及以下几个方面: 两个中心各自的运营模式、资金来源和组织架构, BSC和欧盟的网络架构、网络安全相关事宜, BSC的网络安全监控系统Matrix等。本次派驻人员是BSC-SSC人员交换活动的第一步, 其主要目的是通过工作的方式来增进双方人员之间的合作和了解, 并为未来开展进一步合作奠定重要基础。

科普活动

■ 2012年8月8日, 上海超级计算中心参与“春晖彩虹计划”, 接待了来自贵州的小朋友, “春晖彩虹计划”是由上海市贵州商会发起、开展的一项针对“贵州省贫困学子走进发达地区、感知科技”的公益活动。此活动今年在贵州省黔西南、毕节、六盘水地区选拔39名初中、高中在校学生暑假期间到上海的高等院校、科技园区、青少年教育基地等参观、学习, 其目的是开启大山里的孩子们一个山外的梦、一段坚定知识改变命运的感性历程、培养受助孩子们感恩社会、回报社会的意识, 让感恩、反哺的种子在受助孩子们心中生根发芽, 将爱心不断传递。

■ 2012年8月13日, 中心计算机科技馆接待了来自建国中学、大里高中、台南女中、高雄中学等10所台湾名校的近200名师生, 通过科普场馆参观与体验的方式, 让这些学生了解高性能计算的发展, 并推动了两岸青少年在科技创新方面的交流。

■ 2012年8月1日, 上海超级计算中心接待了来自新闻晨报的小记者团, 通过这些小记者们的亲身感受和

上海超算中心了解到的超级计算机的知识和应用成果感受超级计算机的魅力, 并通过他们的笔传达给上海市民。

■ 2012年7-8月, 中心参加了张江镇8000名张江娃免费进科普教育基地的活动, 张江镇内8000名小学生得到一张胸卡, 凭此卡, 孩子们可以随时走进超算中心等科普教育基地, 这是张江镇在暑期送给孩子们的一大礼物。

■ 2012年11月-12月, 中心接待多批香港特别行政区教育局组织的“2012薪火相传计划”参观团队。该活动由香港教育局主办, 致力于为香港青少年提供内地交流机会, 通过组织学生到内地交流学习, 亲身体验祖国的发展, 了解国情, 培养国家情怀。

本次参观团由香港各中学的中三、中四年级学生组成, 每一批上海交流学习4天, 参观外滩、南京路、洋山港等地标景点, 并到相关学校、上海城市规划馆等地方进行参观交流。参观后学生们对上海超级计算中心作为上海市信息基础设施在科学、信息工程领域所发挥的作用留下了深刻印象。



香港教育局“2012薪火相传计划”参观活动。



1	4
2	5
3	

1. 中心计算机科技馆接待10所台湾名校师生。
2. 张江镇8000名小学生免费参观科普教育基地活动。
3. “春晖彩虹计划”贵州省贫困学子走进发达地区公益活动。
4. 香港教育局“2012薪火相传计划”参观活动。
5. 上海超级计算中心接待新闻晨报小记者团。

上海超级计算中心魔方超级计算机全机系统2012年平均使用率为73.36%。在整个2012年度,用户共发表了超过203篇被科学引文索引(SCI)收录的论文,领域遍及物理、化学、天文、生物等各个基础科学方向。这些论文的研究成果均为上海超级计算中心计算平台支持产生。本期年报在上述的200多篇论文里,精选了在国际顶级刊物美国化学会志(JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY)、物理评论快报(PHYSICAL REVIEW LETTERS)、美国科学院报(PROCEEDINGS OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE UNITED STATES OF AMERICA)上发表的11篇重要成果进行介绍,以方便广大读者进一步了解高性能计算在基础科学领域内的应用。这些成果均为相关领域内的重要进展,在国际上引起了广泛关注。

论文题目: Band Formation in a Molecular Quantum Well via 2D Superatom Orbital Interactions

项目来源: 中国国家自然科学基金、中科院优秀论文基金、中央高校基本科研业务专项资金等

用户来源: 美国匹兹堡大学、中国科技大学物理系

论文来源: 《物理评论快报》第109卷第26期, 论文号: 266802, 2012年12月28日出版

本项研究在电子器件的分子材料设计方面取得进展。分子材料在电子器件中有着非常广泛的应用。在分子半导体中,有效质量接近自由电子的能带对电荷运输是非常有意义的。目前对有机半导体电荷运输方面的研究主要集中在 π 成键轨道上,而在多并苯材料中,泡利排斥作用会阻止分子的共面排布,难以形成 π 成键轨道。由于分子材料不容易堆积,屏蔽作用比较差且具有较强的电声耦合,所以很难形成平面堆积结构的运输能带。在有机分子和金属界面已经发现了近自由电子能带,但人们希望可以找到仅凭分子半导体本征的分子间相互作用产生近自由电子态特性的材料。

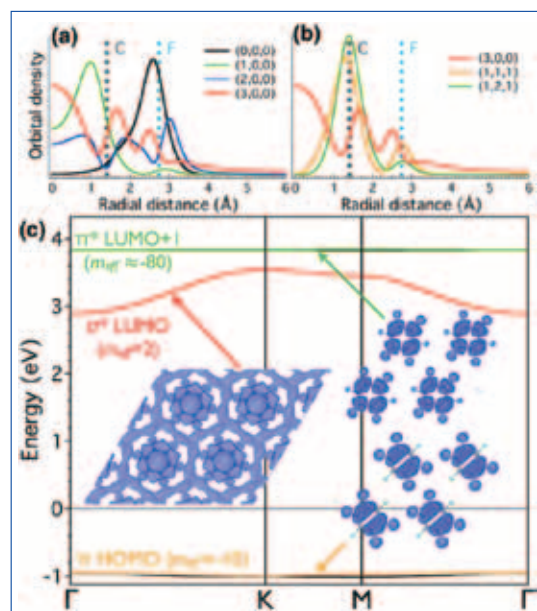
本项研究通过实验和理论计算结合的方法探索了由Cu(111)表面C₆F₆分子的最低未占据轨道(σ^* 轨道)形成的

近自由电子能带的起源。计算发现,这种强的分子间 σ^* 轨道耦合是分子本征特性, σ^* 轨道是三维超原子态的二维形式。超原子态是平面芳香分子的共性,这种近自由电子态为有机分子半导体的电子运输提供了新的思路。

实验和理论计算发现随着最近邻的C₆F₆分子数目的增加,体系最低未占据轨道(σ^* 轨道)能量会降低。Cu衬底对C₆F₆分子层的电子结构影响小的可以忽略,这种能带的形成确实是本征的电子相互作用引起的。采用量子数 n_r, l, n_z 来描述C₆F₆分子的轨道,当 $N = (n_r, 0, 0)$ 时, n_r 增大会使轨道更加弥散的分布在非核区域,便形成了超原子轨道的性质。 σ^* 轨道杂化形成近自由电子能带的首要起源是F原子外围非核区域的大量电荷密度分布。

这一发现对芳香类材料电子性质设计具有重要意义,增大平面空心分子的 n_r 轨道量子数可以得到二维超原子性质,从而形成可以形成近自由电子能带。此外还可以通过在分子中心引入金属阳离子或者改变内部原子和外围原子间的电荷转移来改变中心势场,从而实现对二维分子的超原子轨道电子性质的设计。平面分子超原子轨道的发现为有效能带的形成提供了普适的理论方法,通过利用近自由电子轨道的性质,可以设计有机半导体器件。

相关工作发表在Phys. Rev. Lett.109. 266802. 2012



电子分布几率密度及能带扩散

论文题目: Tuning the Area Percentage of Reactive Surface of TiO₂ by Strain Engineering

项目来源: 973、国家自然科学基金、教育部新世纪优秀人才支持计划等

用户来源: 南京大学

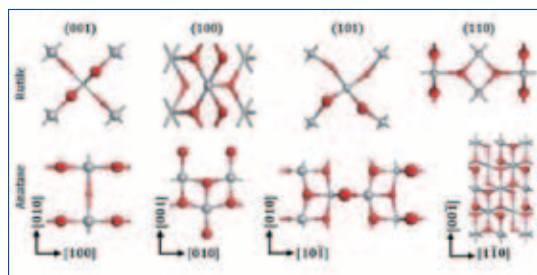
论文来源: 《物理评论快报》第109卷第15期, 论文号: 156104, 2012年10月出版

本项研究在二氧化钛的表面调控中取得了进展。

锐钛矿结构的二氧化钛在能源和环境等领域具有广泛的应用价值, 例如在紫外光的照射下, 它可以作为光电分解水制取氢气、作为光电子传输层应用于染料敏化太阳能电池、能够产生光生电子-空穴对分解有机污染物等等。这些性质与二氧化钛的表面结构比如高活性的(001)晶面直接相关。但是反应活性与稳定性又是一对永恒的矛盾。一般说来, 活性较高的表面具有较高的表面能。在平衡条件下, 晶体自然表露的小面中高活性小面的比例也较低, 从而限制了二氧化钛表面反应效率的提高。这个问题是一类催化材料中普遍存在的瓶颈。

本项研究发现, 根据材料不同表面的力学性质的差别, 可以通过选择合适的衬底材料在生长过程中引入外应变, 进而调节表面能的相对变化, 有效地增加高活性表面的比例。对于这个可能普遍适用的原理, 本文以锐钛矿二氧化钛材料为例子, 发现当施加5%的双轴压应变时, TiO₂高活性的(001)表面占总表面的比例可以提高5倍, 从而有可能大幅度提高材料的催化性能。特别值得指出的是, 外应变不会在生长过程中引入杂质原子, 且适度的应变也不会引起力学缺陷。因此这种方法将在提高化学催化效率的同时, 保持材料的本征理化性质。

相关工作发表在Phys. Rev. Lett. 109, 156104 (2012).



二氧化钛金红石型和锐钛型表面松懈结构顶视图

论文题目: Solvation and Evolution Dynamics of an Excess Electron in Supercritical CO₂

项目来源: 国家自然科学基金、教育部新世纪优秀人才支持计划等

用户来源: 山东大学

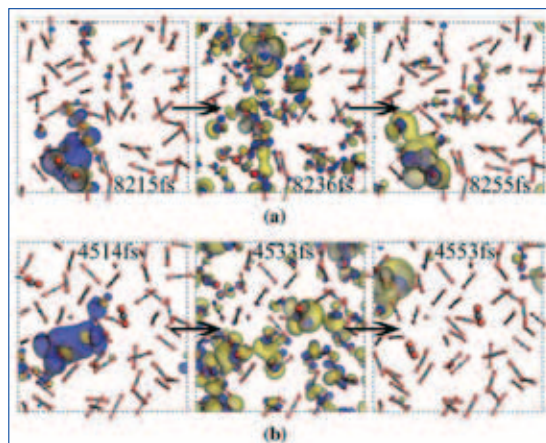
论文来源: 《物理评论快报》第108卷第20期, 论文号: 207601, 2012年5月18日出版

本项研究详细研究了具有广泛应用背景的超临界CO₂介质中“游离电子”的溶剂化现象。

电子基本运动规律的描述是化学、物理等诸多学科领域的重大而又基本的科学问题, 探索各类电子的运动规律一直是国际理论热点难点课题, 也向实验观察证实提出了诸多挑战。本项研究通过大规模的计算, 结合分子动力学模拟技术, 详细研究了具有广泛应用背景的超临界CO₂介质中“游离电子”的溶剂化现象, 发现了其新的结构状态, 揭示了其含时演化规律。该工作为深入认识此类特殊“电子”在各类软物质或流体介质中的状态及超快动力学提供了重要信息。

“游离电子”具有许多不同于常态“价态电子”的非常独特的性质及其超快动力学, 并且与能量的储存、转换与传递密切相关, 在生命过程、大气环境、功能材料等诸多领域扮演者非常重要的角色。尤其是在材料学或分子学领域, 此类“游离电子”对分子、分子簇、聚集体乃至材料的性质能产生较大影响, 甚至能使之表现出很多独特的性质。

相关工作发表在Phys. Rev. Lett. 108, 207601 (2012).



超临界CO₂介质中“游离电子”的溶剂化现象

论文题目: Mach-Number-Invariant Mean-Velocity Profile of Compressible Turbulent Boundary Layers

项目来源: 国家自然科学基金、973、中国科学院科研专项资助等

用户来源: 北京大学工学院、美国休斯敦大学、中国科学院力学研究所

论文来源: 《物理评论快报》第109卷第5期, 论文号: 054502, 2012年8月3日出版

本研究提出了与Mach数无关的可压缩湍流边界层湍流统一速度剖面理论——以粘性加权平均为基础, 针对可压缩湍流边界层推导出了与Mach数无关的统一速度剖面理论。该理论基于湍动能平衡理论, 且其给出的理论剖面优于传统的基于Van Driest 变换给出剖面。通过最高来流Mach数为6的湍流直接数值模拟(DNS)对该理论进行了验证。

该研究丰富和发展了可压缩湍流边界层的经典Morkovin假设, 提出了改进的van Driest新变换, 对今后实现可压缩湍流边界层平均场的理论预测和航空航天飞行器设计具有指导意义。

可压缩湍流边界层是发生在高速飞行器表面的流体流动, 决定了飞行器的力学、传热学和气动光学性能。由于该流动存在马赫数、雷诺数、壁面传热条件和压力梯度等多种效应的耦合, 人们在认识其物理机理和发展实用的工程湍流计算模型上遇到了巨大困难。在理论研究上, 零压力梯度、绝热可压缩湍流边界层模型是对工程实际问题的理论提炼, 对这一理论模型开展马赫数效应研究, 是当前国际上在该领域的研究热点。

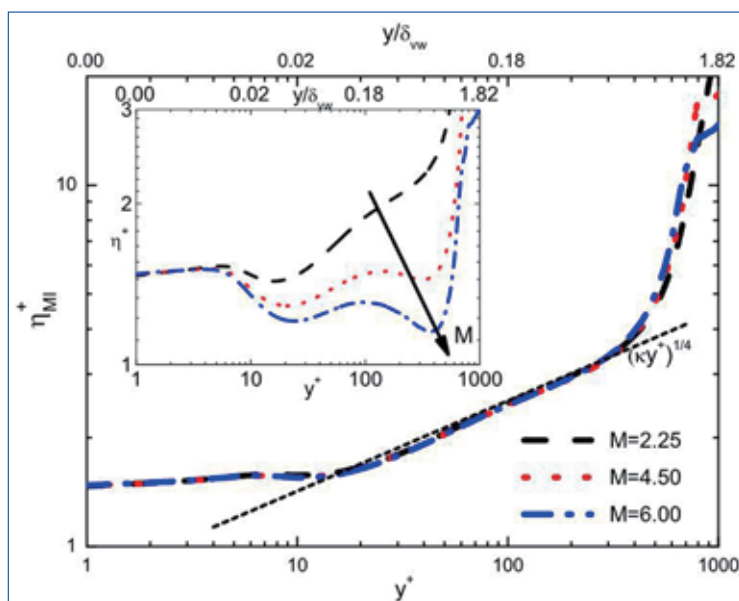
自上世纪40年代人类进入超音速飞行以来, 对可压缩湍流边界层马赫数效应的研究已取得很多重要

进展, 其中里程碑式的工作为1962年Morkovin提出的假设。该假设认为在中等马赫数以下, 可压缩湍流边界层的统计平均量的分布可以通过“恰当地”考虑流体物性(密度、粘性、热传导系数等)的局部变化, 与有着大量实验和理论结果的不可压缩湍流边界层的研究结论对接。该假设已然成为可压缩湍流边界层研究的基石, 然而遗憾的是, 这一假设未明确解决以下两个核心问题:

(1) 在讨论马赫数效应时如何正确定义雷诺数? (2) 哪些流体局部物性应该受到“恰当的”考虑?

本研究对以上两个问题给出了答案: (1) 发现可压缩湍流边界层具有马赫数不变的四层结构, 客观地确定了边界层厚度, 从而给出恰当的雷诺数定义; (2) 以湍动能平衡方程为基础, 导出了一系列新的马赫数不变量, 包括混合长和Kolmogorov耗散尺度等, 给出了Morkovin假设在一系列重要流动参量上的具体实现;

(3) 尤其重要的是, 指出了粘性与密度具有同等、甚至更为重要的地位。最后, 该研究团队推导出一个针对可压缩湍流边界层速度剖面的新变换, 大大优于经典的van Driest变换, 实现了不同马赫数下变换后平均速度剖面的整体重合。



同时考虑平均密度和平均粘性变化后的Kolmogorov耗散长度尺度具有马赫数无关性 (不考虑平均密度和平均粘性变化的情况)

论文题目: Electron Emission at Locked Phases from the Laser-Driven Surface Plasma Wave

项目来源: 国家自然科学基金、973、863等

用户来源: 中国科学院上海光学精密机械研究所、北京应用物理与计算数学研究所

论文来源: 《物理评论快报》第109卷第11期, 论文号: 115002, 2012年9月14日出版

本项工作首次报道了通过强场超快激光驱动固体表面等离子体波产生可控制的准单能电子束发射及其向靶面法线方向的偏转效应。首次提出了激光驱动表面等离子体波锁相电子发射的两步模型, 揭示了激光驱动固体表面等离子体波发射准单能电子束的新物理机制, 为未来实现激光操控表面等离子体波电子发射获得阿秒电子束脉冲提供了新途径。

由于在超快电子衍射、激光聚变快点火等方面的潜在应用, 利用超强超短激光与固体表面等离子体相互作用产生超热电子发射受到广泛关注和研究。然而, 迄今绝大多数报道的实验结果显示超热电子主要沿靶面和法线之间的方向呈现较大发散角的锥形发射, 而且由于激光与固体靶相互作用过程对激光强度、激光对比度及等离子体标长的高度依赖性, 影响电子发射特性的物理机制仍有待探索。上海光机所利用高对比度的中等强度 ($\sim 10^{17} \text{Wcm}^{-2}$) 超短脉冲激光辐照铝靶, 首次观测到

可控制的准单能电子束的发射及其偏转效应。实验发现该电子束在激光反射方向附近偏靶面法线方向发射, 并在相对于激光反射方向的镜像位置伴随电子的排空结构。通过改变激光参数可以操控电子束的发射特征如电子束能量、发射角等。本项工作首次提出了激光驱动表面等离子体波锁相电子发射的两步模型, 揭示了准单能电子束发射及其偏转效应的物理机制: 强场超快激光辐照固体平面靶产生沿靶面传播的表面等离子体波, 并建立由入射和反射激光构成的干涉激光场, 少数处于等离子体波波峰的电子由于较高的能量以特定的相位窗口沿激光反射方向从表面等离子体波逃逸进入干涉激光场, 然后在激光场有质动力作用下向法线方向发生偏转。该理论模型预言表面等离子体波的周期性电子发射可能产生准单能的阿秒电子束脉冲链。

相关工作发表在Phys. Rev. Lett. 109,115002 (2012).

论文题目: Lattice Mismatch Induced Nonlinear Growth of Graphene

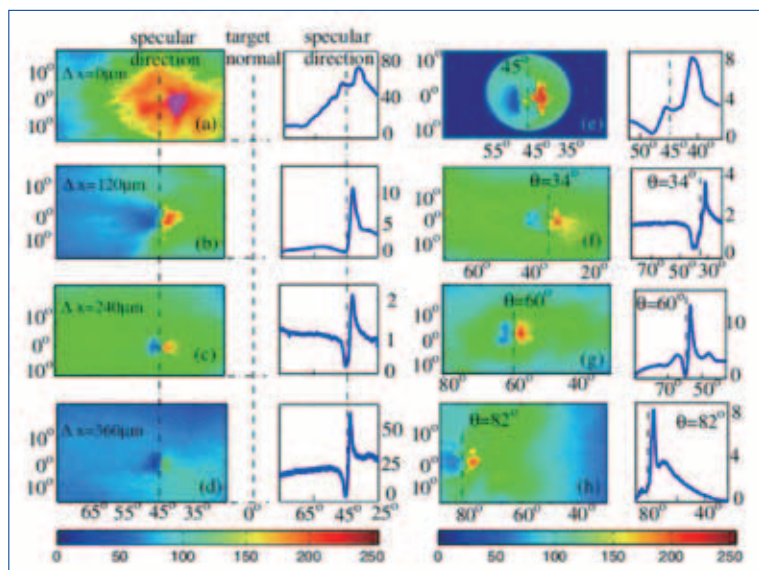
项目来源: 国家自然科学基金、国家科技部、中国科学院、中央高校基本科研业务专项资金等

用户来源: 中国科技大学合肥微尺度物质科学国家实验室

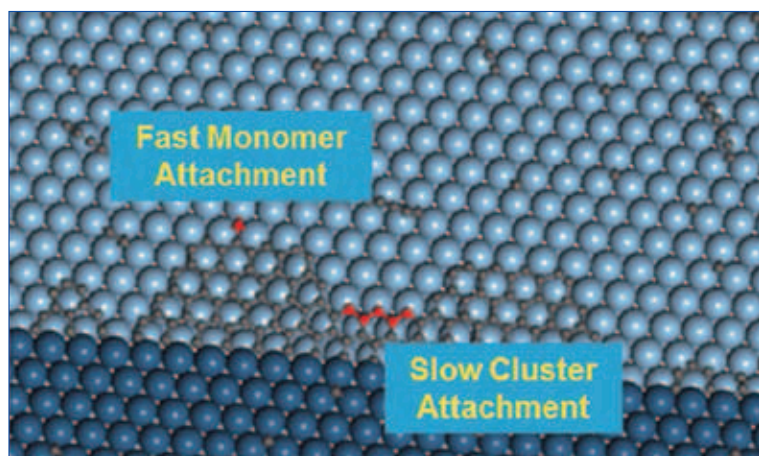
论文来源: 《美国化学会志》第134卷第13期, 页号: 6045-6051, 2012年4月4日出版

本项研究在石墨烯的生长方面取得了进展。

由于其独特的物理化学性质, 石墨烯有望在多个方面获得重要应用。化学气相沉积法是大规模制备石墨烯的一种重要方法。而Ir是其中一种重要的衬底材料。Ir表面生长的石墨烯可以作为模板进一步生长规则排列的金属纳米粒子超结构, 在纳米催化、纳米磁性等领域有重要应用前景。在Ir表面, 实验上观测到石墨烯的生长速率与表面C原子浓度呈大约五次方的关系。这表明在这种表面上石墨烯生长并不是通过常见的单个C原子贴附过程来进行, 某种5个C原子的协同作用过程决定了整个生长动力学。一种可能的解释是石墨烯的生长主要是C5团簇的贴附。考虑到C5团簇的浓度远小于C原子的浓度, 它究竟以何种机理在Ir表面石墨烯生长过程中起到关键性的作用并不清楚。为了阐明Ir表面石墨烯非线性生长的机理, 通过第一性原理计算和多尺度模拟, 发现由于石墨烯与Ir衬底之间的晶格失配, 在石墨烯边缘不同的



单枪电子发射角分布图。(a-d) 分别对应不同激光聚焦位置 $\Delta x = 0, 120, 240, 360 \mu\text{m}$ 。45°和90°处虚线分别表示激光角反射方向以及靶法线方向。(e) 直径30mm光阑放置于成像板前以标定激光角反方向。(f-h) 分别对应不同激光入射角度34°、60°、82°。



晶格错位导致石墨烯非线性生长

位置, C物种贴附的热力学明显不同。在某些位置, 单个C原子贴附后占据顶位。因为C原子在Ir表面的顶位吸附很不稳定, 这类贴附过程是热力学禁阻的吸热过程。即使高温下C原子可以很快的贴附在这些位置, 它们也会更快的脱附, 使得C原子对这些位置上石墨烯的生长没有贡献。这时, 如果有一个合适大小的C团簇扩散到这些位置, 贴附变成放热过程, 石墨烯生长就可以继续下去。考虑到团簇的浓度低, 它们找到这些单原子吸附困难的位置的几率很小。所以, 团簇吸附是整个生长过程的速控步, 从而直接导致了实验上观察到的非线性生长行为。

尽管第一性原理计算给出了石墨烯生长的主要物理图像, 但是直接模拟生长过程仍然十分困难。一方面, 为了统计生长速度需要一个很大的单胞, 而大单胞就意味着大计算量。解决的办法是对远场采用准平衡近似, 只考虑生长前沿发生的事件。这样可以取一个很小的单胞随着生长前沿移动。另一方面的困难是不同大小的C团簇浓度相差很大, 这使得不同时间的发生几率相差很大, 从而使得模拟效率大大降低。本项工作为此建立了一种多尺度动力学蒙特卡罗模型。最后的模拟结果给出与实验数据十分接近的非线性生长行为。多尺度模拟表明虽然实验观察到接近于5次方的生长动力学, 但是这并不完全由C5团簇贡献, 而是几种团簇的协同作用。这种由晶格失配导致的非均匀生长具有一定的普适性, 有望用来调控异质外延生长的动力学行为。例如, 这项研究预测将石墨烯与Ir衬底的相对取向旋转30度, 石墨烯可以更快的生长, 生长速度与C原子浓度大致呈平方关系。

相关工作发表在J. Am. Chem. Soc. 134, 6045-6051 (2012).

论文题目: Development of Cell-Active N⁶-Methyladenosine RNA Demethylase FTO Inhibitor

项目来源: 百人计划、国家自然科学基金、973、863

用户来源: 中科院上海药物研究所、沈阳药科大学、北京大学化学与分子工程学院、美国芝加哥大学、兰州大学应用有机化学国家重点实验室

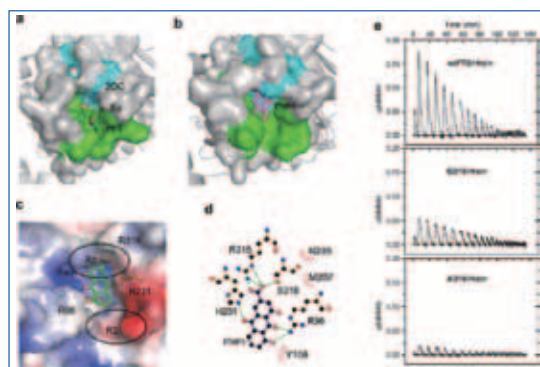
论文来源: 《美国化学会志》第134卷第43期, 页号: 17963-17971, 2012年10月31日出版

本项工作在小分子调控核酸去甲基化研究中取得进展, 首次报导了对mRNA中N⁶位甲基化修饰的腺嘌呤(N⁶-methyladenosine, m⁶A)去甲基化酶FTO, 具有细胞活性的小分子抑制剂。

最新研究表明, m⁶A广泛分布于基因转录区, 约每2000个碱基中存在一个m⁶A修饰位点, 人类7000多个基因中存在约12000个m⁶A位点, mRNA中的m⁶A的修饰水平在广谱基因表达中发挥着基础性调节作用。FTO与II型糖尿病、阿尔茨海默症、心脑血管疾病、肿瘤等关系密切, 是目前已知的唯一能够在体外和细胞内使mRNA中m⁶A去甲基化的核酸氧化酶。

本项工作基于FTO晶体结构开展小分子抑制剂的筛选和作用模式研究, 综合运用药物设计和生物化学等手段, 首次阐明了m⁶A对mRNA的动态修饰过程是可以通过化学干预的手段来实现调控的, 这为进一步揭示m⁶A修饰的mRNA的调控通路, 发现潜在的mRNA去甲基化酶提供了探针化合物

相关工作发表在J. Am. Chem. Soc. 134, 17963-17971 (2012).



rhein/FTO复合物的分子模型

论文题目: Conformational Transition and Energy Landscape of ErbB4 Activated by Neuregulin1 β : One Microsecond Molecular Dynamics Simulations

项目来源: 百人计划、国家自然科学基金、973

用户来源: 中科院上海药物研究所

论文来源: 《美国化学会志》第134卷第15期, 页号: 6720-6731, 2012年4月18日出版

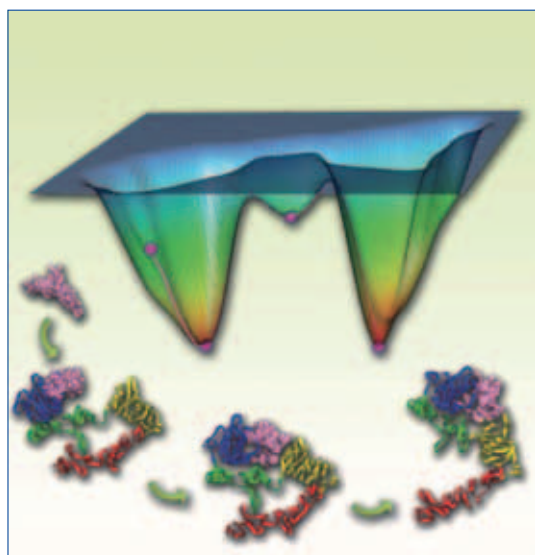
本项工作对ErbB4胞外区的配体激活机制进行了细致的探究。

表皮生长因子受体 (Epidermal Growth Factor Receptor, EGFR) 家族酪氨酸激酶受体在细胞生长和分化等过程中发挥基础性作用, 是众多疾病的重要药物靶点。此前, EGFR家族蛋白功能实现的动态机制并未被充分阐明, 人们对其生理和病理功能机制的认识因此受到了限制。

作为最晚被发现的EGFR家族成员, ErbB4在生理以及病理上都有着独特之处, 是重要癌症药物靶标, 亦与精神分裂症相关。本项工作利用分子动力学(MD)模拟。通过时间长达微秒尺度的常规MD模拟, 捕捉到了ErbB4胞外区在配体诱导下由“非激活”状态到“类激活”状态的大规模构象变化, 分析了配体在这一变化过程中的作用, 并且构建了构象转化的能量面。根据计算得出的ErbB4构象变化主要能垒(2.7kcal/mol)与实验测定的同家族成员EGFR构象变化能垒(1-2 kcal/mol)非常吻合, 并且计算得到的稳定构象与同家族成员晶体结构

也高度一致。根据计算结果, 本项工作提出了ErbB4胞外区的激活机制, 为ErbB4及其他家族成员的激活机制研究提供了新的思路。相关研究也为针对胞外区构象变化开展药物设计奠定了基础。

相关工作发表在J. Am. Chem. Soc. 134, 6720-6731 (2012)。论文被选为当期封面文章。



ErbB4的构象转变与能量

论文题目: Are MXenes Promising Anode Materials for Li Ion Batteries? Computational Studies on Electronic Properties and Li Storage Capability of Ti₃C₂ and Ti₃C₂X₂ (X = F, OH) Monolayer

项目来源: 国家自然科学基金、111工程、中央高校基本科研业务专项资金

用户来源: 南开大学

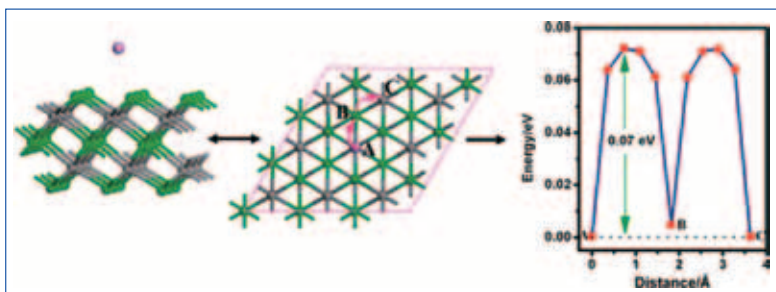
论文来源: 《美国化学会志》第134卷第40期, 页号: 16909-16916, 2012年10月10日出版

本项工作在MXene二维材料储锂性能研究中取得进展, 通过第一性原理计算详细研究了一种新型MXene二维材料(Ti₃C₂)及其氟化和羟基化的衍生物(Ti₃C₂F₂和Ti₃C₂(OH)₂)的电子结构和储锂性能。

MXene是从MAX相中剥离出来的新型二维材料, 而MAX相是一族60多种层状的三元金属碳化物、氮化物和碳氮化物, 通用的分子式为M_{n+1}AX_n (n=1, 2, 3), 其中M代表过渡金属 (M=Ti, Sr, V, Cr, Ta, Nb, Zr, Mo, Hf), A代表主族元素 (A=Al, Ga, In, Ti, Si, Ge, Sn, Pb), X代表碳或/和氮。Ti₃C₂等二维材料近年最早由美国Drexel大学Gogotsi教授课题组通过巧妙的化学腐蚀法把Ti₃AlC₂等材料中的Al元素溶解而获得, 并且由于与石墨烯结构的相似性, 被命名为MXene。受实验工作的启发, 本项工作通过高性能计算从理论上揭示了Ti₃C₂等MXene二维材料的几何形貌、电子结构和锂离子吸附与传输特性, 探索了上述材料在锂离子电池中的应用前景。其研究结果表明Ti₃C₂薄片呈现出磁性金属性, 而Ti₃C₂F₂和Ti₃C₂(OH)₂则表现出窄带隙的半导体特性。单层Ti₃C₂的理论储锂容量可以达到平均每个C原子容纳一个Li, 其与石墨的容量相当(每六个C原子可容纳一个Li), 而表面F或OH功能团的存在会带来不利因素, 阻碍Li离子的传输, 降低储锂容量, 因而在实验中需加以避免。MXene新型二维材料具有很高的导电性和快速的锂离子传输性能, 可望为锂离子电池负极材料提供更多选择。

相关工作发表在J. Am. Chem. Soc. 134, 16909-16916 (2012)。该论文发表后被JACS Spotlights以

Tweaking Monolayers for Even Better Lithium-ion Batteries为题进行了重点介绍。



MXene二维材料储锂性能

论文题目: Cation \otimes 3 π : Cooperative Interaction of a Cation and Three Benzenes with an Anomalous Order in Binding Energy

项目来源: 国家自然科学基金、973、上海市重点学科建设项目资助、中国科学院知识创新工程项目等

用户来源: 四川大学、中国科学院上海应用物理研究所、中国工程物理研究院流体物理研究所

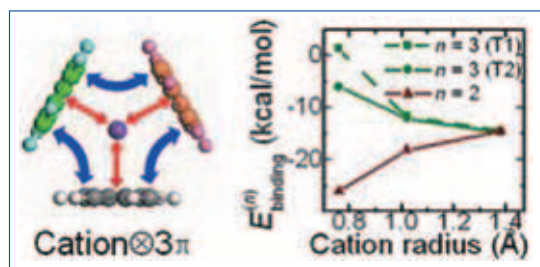
论文来源: 《美国化学会志》第134卷第29期, 页号: 12104-12109, 2012年7月25日出版

该项工作提出一个阳离子可以与三个苯环结构同时相互作用——Cation \otimes 3 π 相互作用(这里 π 代表一个苯环结构内部的电子特性)。正常情况下, 阳离子与一个或两个苯环结构的作用, 其强度跟阳离子直径相关。阳离子直径越大, 阳离子与苯环结构距离越远, 相互作用越小。对应三种典型的一价离子, 阳离子与一个苯环结构的作用强度的次序是 $K^+ < Na^+ < Li^+$ 。但是, 对于Cation \otimes 3 π 相互作用, 研究发现, 其作用强度随离子直径的增大而增大, 即: $Li^+ < Na^+ < K^+$ 。这种反常行为背后的物理机制是阳离子与苯环结构、相邻苯环结构间相互作用的协同效应。相邻苯环结构间相互作用导致直径小的阳离子与每个苯环结构的作用发生偏离, 减弱了阳离子与每个苯环结构的作用强度。需要说明的是, 阳离子与三个苯环结构相互作用强度和阳离子与两个苯环结构相互作用强度相当。

碳是生命的基本元素之一。由六个碳原子构成的苯环状结构广泛存在于DNA碱基、氨基酸等生物分子。包含苯环状结构的碳基纳米材料(例如富勒烯、碳纳米

管、石墨烯、碳纳米线)被认为在分子器件、生物检测、能源储存等领域有广泛的应用。另一方面, 阳离子广泛存在于土壤、大气等自然界, 并且是生物体内的必要元素和材料中常用的掺杂元素。阳离子与苯环状结构的相互作用, 在生物体系、纳米材料中起着关键的影响, Cation \otimes 3 π 的发现为进一步理解生物分子的结构与功能、新型碳基材料与器件提供了新的视角。

相关工作发表在J. Am. Chem. Soc. 134, 12104-12109 (2012)。



阳离子与三个苯环结构的相互作用

论文题目: Direct observation of turbulent magnetic fields in hot, dense laser produced plasmas

项目来源: 国家自然科学基金

用户来源: 印度Tata基础科学研究所、中科院北京物理研究所、上海交通大学物理系、印度等离子体物理研究所

论文来源: 《美国科学院报》第109卷第21期, 页号: 8011-8015, 2012年5月22日出版

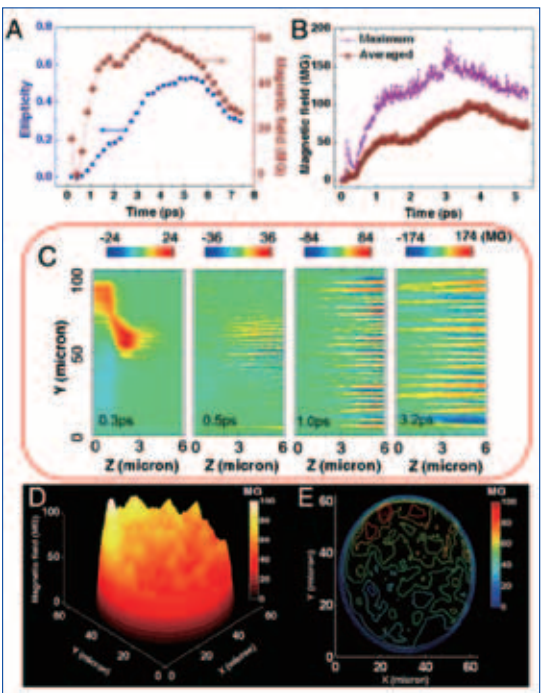
本项工作在激光等离子体磁场湍流研究取得了进展。流体中的湍流是自然界中极为普遍、迷人而又复杂的现象。虽然人们借助实验和大规模的计算机模拟等最新技术手段对它开展了大量的研究, 但至今还是没有能完全理解它。而与激光核聚变研究有关的高温高密等离子体中的湍流则更为复杂, 一方面其中引入了非线性的电磁力的作用, 另一方面这种湍流发生的时间和空间尺度更快、更小, 后者对实验诊断提出了更大的挑战。

本项工作针对相对论强激光与固体靶作用中的超强磁场以及湍流产生开展了研究。实验观测到等离子体内部一定区域近百兆高斯的强磁场产生, 而且磁场的空间分布呈现湍流的特性。本项工作对实验结果在上海超级计算中心的魔方超级计算机上开展了大规模的数值模

拟和理论分析, 有力支持了实验观测。

这项研究对认识和操控快点火激光核聚变中强流电子束的输运具有重要意义, 也有助于人们深化对高温、致密天体现象的认识。过去十多年, 随着实验技术的发展, 所谓实验室天体物理逐渐发展起来。而强激光与等离子体相互作用是目前实验室天体物理研究的重要手段。

相关工作发表在PNAS 109, 8011-8015 (2012). 印度有影响的报纸The Telegraph在其科学专栏Knowhow中以Reach for the Stars为题, 专门介绍了这项合作研究。



实验和数值模拟观察到的磁场时间演化过程 [(a)和(b)] 以及其空间分布[(c)-(e)]。(a)为实验观察到的磁场强度随时间的演化曲线, (b)为对应的粒子模拟结果。(c)为粒子模拟得到的不同时刻下磁场空间分布图, (d)和(e)为实验中在3.2皮秒时刻的磁场空间分布图。

我们为工业领域提供服务与支撑

从2012年上海超级计算中心工业用户的使用特点来看, 研究的问题越来越复杂, 计算规模越来越大。面对这样的形势, 中心在加强软件服务水平的同时, 引进蜂鸟集群来满足用户更高的计算需求。中心工业用户大多来自航空、船舶、汽车、钢铁、核电等诸多工业和研究领域。在设计和研发过程中主要运用到了计算结构力学和计算流体力学的方法和工具。同时基于中心技术人员经验能力和CAE/CFD有利工具, 我们也独立或与用户合作完成了一些工程咨询项目。

航空领域

研究课题: 大型客机C919飞机流场计算

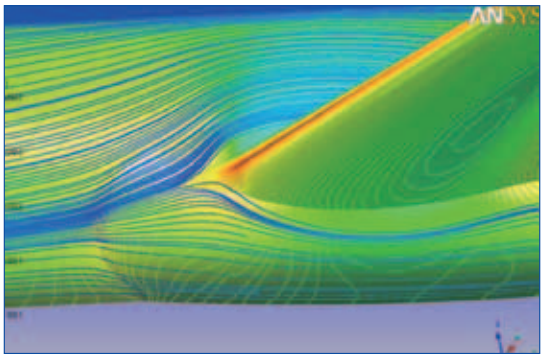
课题来源: 国家重大项目

用户单位: 中国商用飞机有限公司上海飞机设计研究院

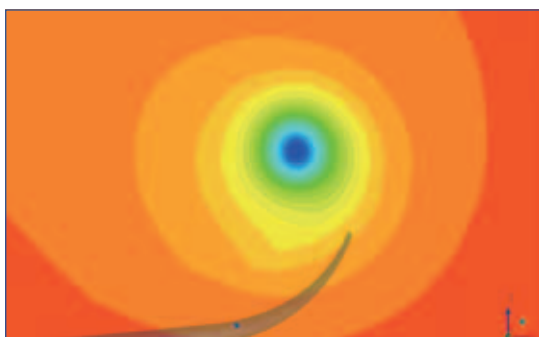
国家中长期科学和技术发展纲要(2006—2020年)中将“大型客机”列为重大专项之一。大型客机是建设创新型国家的标志性工程, 是新时期改革开放的标志性

工程。2012年, 上海飞机设计研究院在超级计算中心的计算集群上开展了大量的、种类繁多的CFD计算分析工作, 上海超级计算中心的工作人员提供了很好的技术支持和保障服务, 有力支持了C919型号研制工作。

部件气动力计算: 对全机流场进行CFD求解, 分析部件附近空间流场, 分解出部件上的气动力和力矩。部件气动力优化设计验证计算应用于两大型号多个部件气动优化设计、载荷分析和试飞改装强度校核等方面。



鼓包优化设计分析

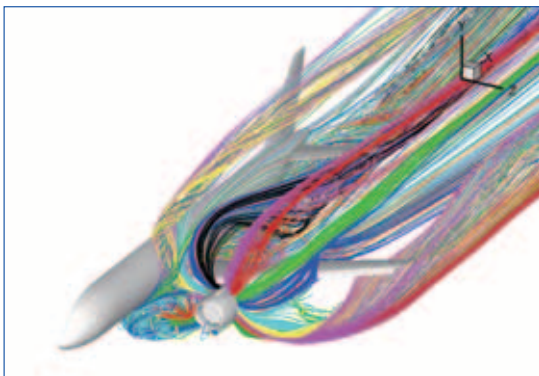


翼尖流场分析

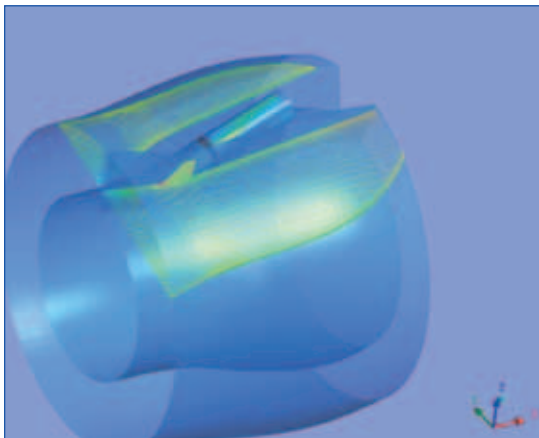
带动力影响气动力计算: 对带动力短舱的气动外形进行CFD分析, 模拟发动机的进排气影响。应用于考虑发动机进排气影响下的部件气动优化设计、全机气动特性计算和反推装置设计等方面。

全机复杂气动力计算: 对复杂构型全机流场进行CFD求解。用于流场分析、设计验证和构型评估等方面。

结构、系统和其他专业需求的气动力计算: 配合结构、环控氧气、强度等专业的特种需求, 开展对应的全机流场、局部流场CFD计算分析, 为这些专业提供设计输入和校核所需数据。



发动机反推格栅设计分析

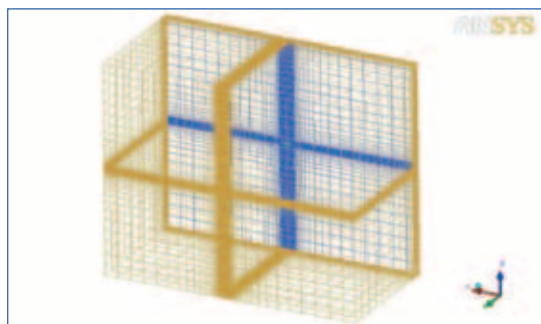


Scope设计总压损失分析

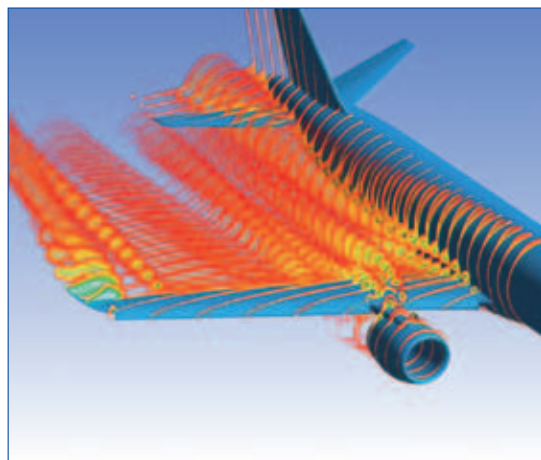
增升装置精细气动优化设计: C919大型客机已经进入详细设计阶段, 在初步设计方案的基础上, C919飞机增升装置设计开展了精细气动优化设计工作。而随着考察因素的细化, 网格数量增大, 计算状态增加, 计算规模扩大, 计算资源需求大大提高。借助于上海超级计算中心的高性能计算平台, 利用其充足的计算资源, C919飞机增升装置精细气动优化设计CFD工作得以顺利开展。



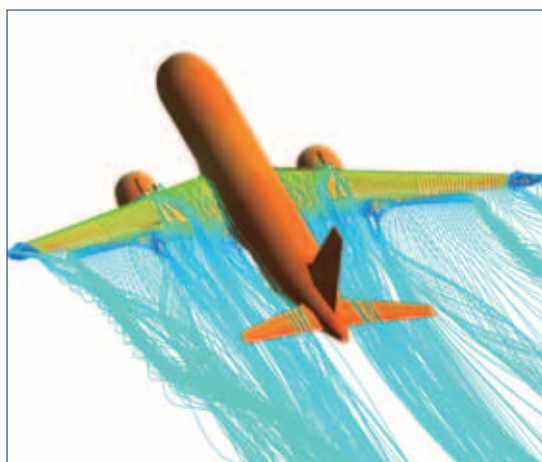
全机表面网格



空间网格



总压等值线分布



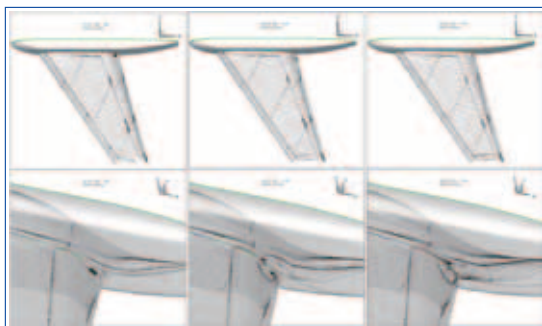
机翼表面压力云图及空间流线分布

研究课题: NASA高升力机翼模型全展襟翼构型CFD验证

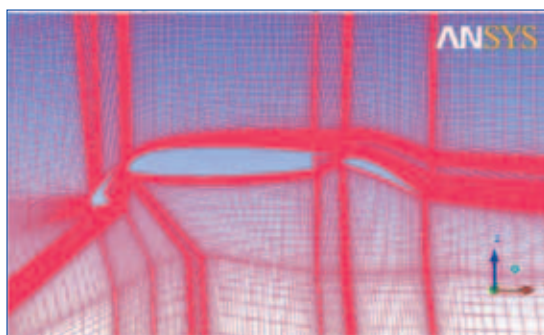
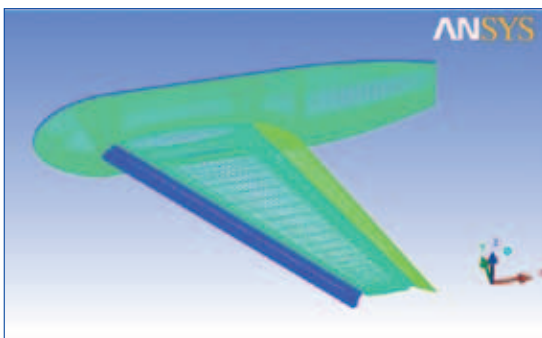
课题来源: 第二届航空CFD可信度开放式专题研讨活动

用户单位: 中国商用飞机有限公司上海飞机设计研究院

航空CFD可信度开放式专题研讨活动由空气动力学国家重点实验室承办, 中国航空研究院、上海超级计算中心、中国航空工业集团公司西安航空计算技术研究所协办。本次专题研究活动的目的是评估国内航空CFD整体技术状态, 推进CFD验证和确认工作, 明确CFD方法和软件今后的发展方向。研讨活动涉及的计算工况多达几十个, 计算网格量大, 所需计算资源多。上海超算中心提供了本次研讨活动CFD计算所需的软硬件资源。



不同密度网格CFD结果表面流线



高升力构型网格拓扑

研究课题: 航空发动机的数值模拟分析与优化设计

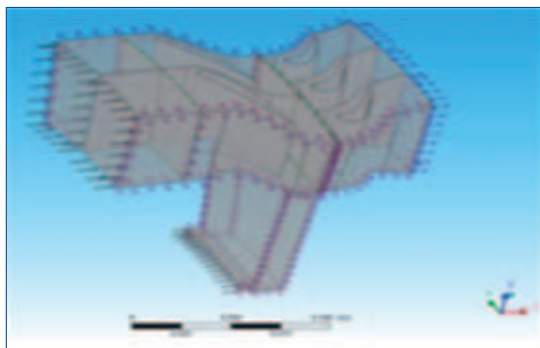
课题来源: 中航工业商用发动机有限公司

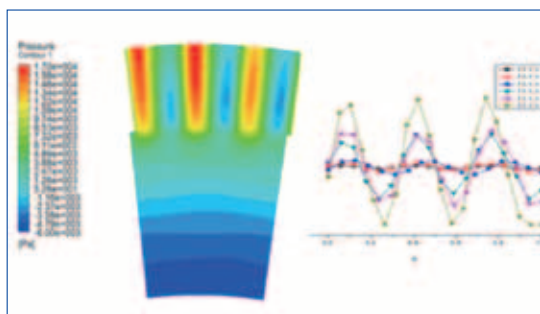
用户单位: 中航工业商用发动机有限公司

随着大规模有限元计算在结构分析、包容性仿真、CFD流场分析、流热固耦合分析等领域的深入开展, 仿真技术在指导发动机设计中得到广泛应用, 商用航空发动机对高性能计算的依赖程度也越来越高。高性能计算为大客发动机的设计方案、适航审定、关键技术预研提供重要的结果支撑和验证, 加速了大客发动机设计进程。

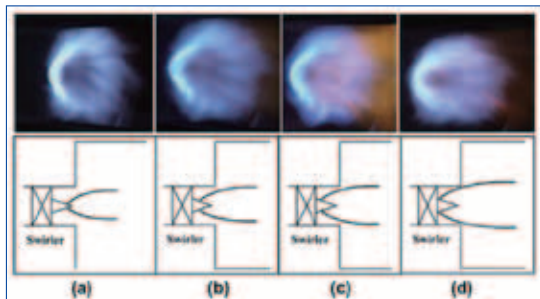
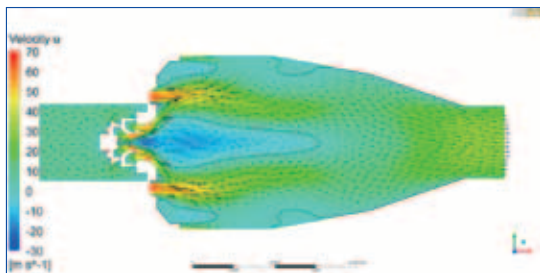
目前, 涉及到航空发动机各领域的计算模型已达百万至千万级规模, 单次计算所需时间普遍达到千CPU小时以上, 这种大规模的计算需求依靠单机工作站已经难以满足需求。上海超级计算中心高性能计算平台, 为商用航空发动机结构强度分析及流场计算分析等提供了强有力的支撑和服务, 满足了商用航空发动机研制过程中的高性能计算需求。

航空发动机气动性能CFD研究: 采用CFX分析软件, 分析导致燃气入侵的主要因素以及封严效果的影响因素, 计算结果对如何提高封严效率具有重要的参考价值。

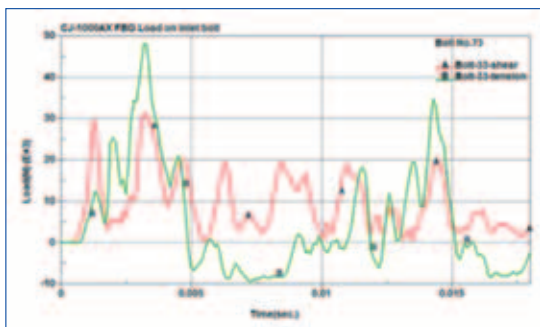




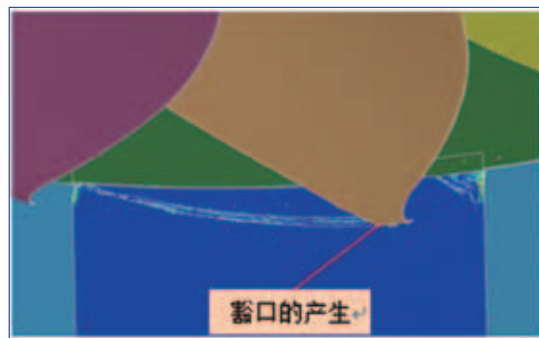
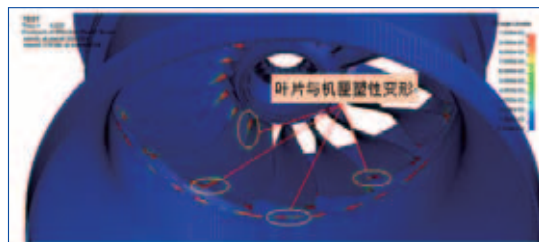
航空发动机燃烧特性分析: 采用FLUENT流体分析软件, 研究不同主燃级内径尺寸对燃烧室流场、燃烧及排放特性的影响, 对不同的湍流和燃烧模型进行校核分析, 以确定能准确客观反映燃烧室流场和排放特性的数值模拟方法。



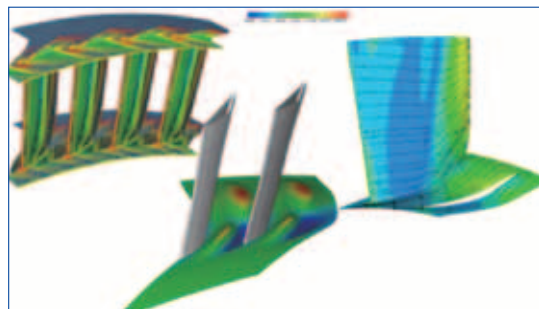
整机FBO动力学和静力学分析: 建立整机的LS-Dyna和ANSYS模型, 进行整机层面叶片脱落机匣所受冲击载荷分析, 同时突破关键分析技术: (1) 叶片接触碰撞/能量吸收。(2) 转子不平衡分析技术——叶片与风扇机匣的碰撞引发的瞬态冲击和振动、转子的瞬态动力学 (包含有限转动和平动) 等。

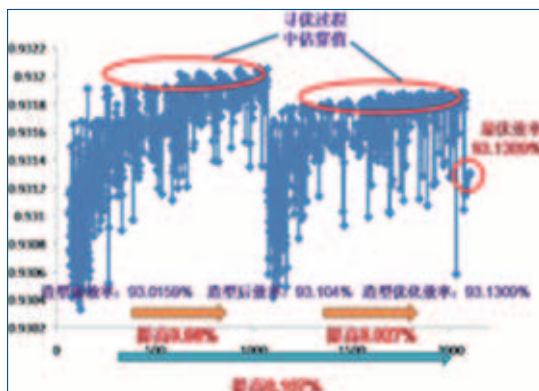


航空发动机零件级试验过程仿真再现: 采用LS-Dyna, 通过建立显式动力学仿真分析模型, 对航空发动机试验过程进行再现, 并对试验参数进行敏感度分析。模型规模300万 (宏观) — 600万单元 (细观), 计算资源采用“蜂鸟”集群, 总计算量超过20万CPU机时。



航空发动机优化设计技术: 采用CFX分析软件, 实现叶轮机端壁任意曲面拟合及参数化造型; 通过高压压气机流场分析和二级动叶端壁曲面造型参数敏感性分析, 采用DOE和多种优化策略, 实现涡轮第二级静叶总压损失降低。



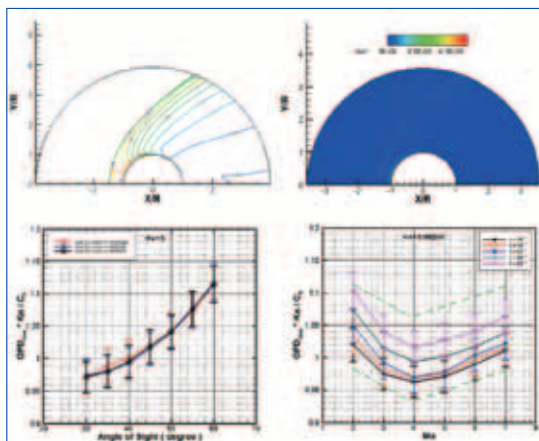


研究课题: 气动光学机理研究

课题来源: 国家自然科学基金

用户单位: 上海交通大学航空航天学院

高速飞行器周围的可压缩流场会引起气动光学效应。最近,在成像技术的不断发展的推动下,图像的时空分辨率都有很大的提升,这就使得(高)超声速流场中的脉动对机载成像系统有了更显著的影响。传统的CFD方法是基于Navier-Stokes方程的,并不适合于来解析这种物理过程。本项目使用基于Boltzmann方程的DSMC方法来更精确地处理这个问题。课题使用了上海超算中心的“魔方”来进行集群计算,成功地分析了主要流动特征量与气体稀疏程度之间的物理关系,这为之后高速飞行器设计提供了坚实的基础。



船舶领域

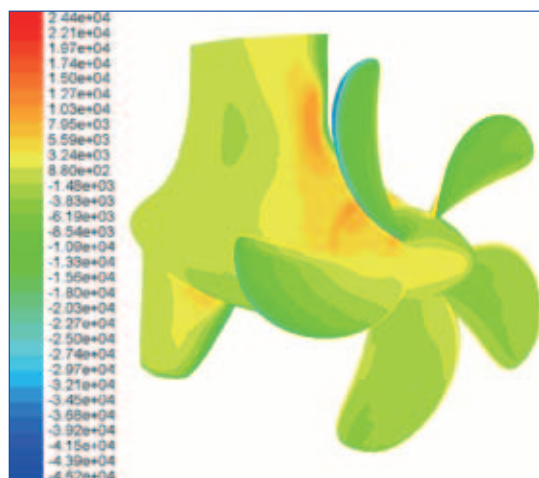
研究课题: 吊舱式推进器水动力性能预报技术研究

课题来源: 工信部

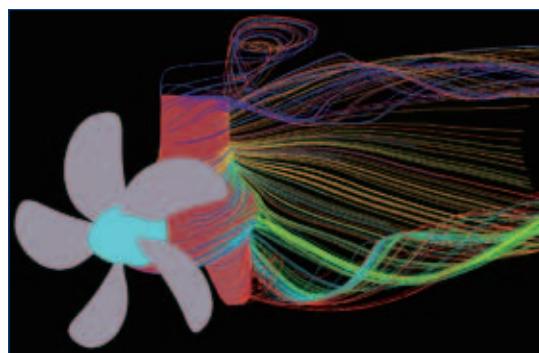
用户单位: 中国船舶工业集团第708研究所

吊舱式推进器集推进和操舵装置于一体,能够增加

船舶设计、建造和使用的灵活性。国内外早已对吊舱式推进器实船配置优化设计技术、性能预报技术进行了深入研究,708所则是较早开展研究的单位之一。吊舱推进器的船型能够提高能效水平,实现节能减排;可在360度范围内旋转,极大地提高了船舶的操纵性和机动性。选用吊舱推进器可以优化船舶的艉部线型,可以实现模块化设计、模块化安装。项目利用上海超级计算中心的高性能软硬件资源,对吊舱推进器在不同流动状态和舵角工况下的性能进行了分析计算,并基于此开展了吊舱推进器的优化设计工作。



吊舱推进器表面压力分布



吊舱推进器表面流线

研究课题: 船舶水动力节能装置数值模拟与应用研究

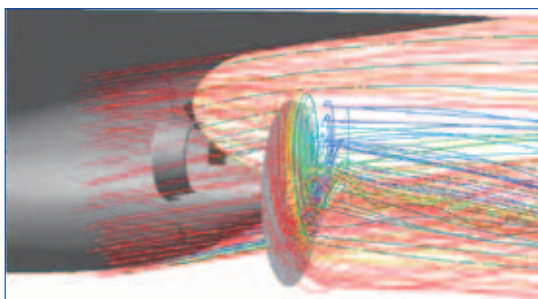
课题来源: 中国船舶工业集团第708研究所

用户单位: 中国船舶工业集团第708研究所

本项目利用上海超级计算中心的高性能计算机“魔方”,对研究课题中的几种节能装置进行数值优化计算,包括补偿导管、舵球和艉帽鳍等部件。分析结果显示各节能装置对流场分布有所改善,正确地反映了各个节能装置的工作机理,并且为各部件进行多方案参数优化提供了参考。



带补偿导管船自航数值模拟模型



带补偿导管船尾部流线图



舵球对桨后流场的改善



艤后流线分布

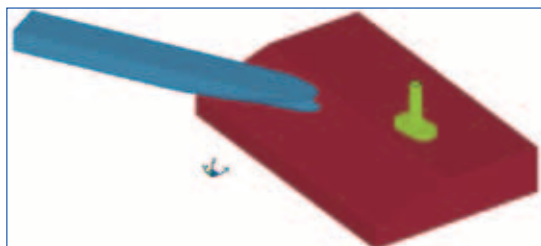
研究课题: 基于流固耦合的船舶搁浅和船桥碰撞预测动力学计算

课题来源: 上海船舶运输科学研究所

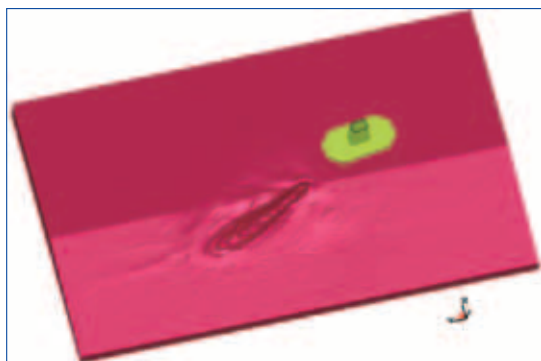
用户单位: 上海超级计算中心

跨越内陆河流和海湾(海峡)修建的桥梁便利了陆路交通,但也对水上船舶的航行安全产生不利影响。世界范围内每年都会发生严重的船—桥相撞事件。目前有限元方法在解决船—桥碰撞这一十分复杂问题上的应用越来越广泛和深入,特别是在需要兼顾桩土耦合和材料破坏研究的

时候。本项目利用LS-DYNA软件对船桥碰撞问题进行了研究,利用流固耦合功能模拟了船舶搁浅过程中桥墩周围软土的挤压变形,并分析了船舶在不同吃水深度和不同地段情况下撞上对应桥墩的可能性。



船舶搁浅前行状态



船舶搁浅痕迹

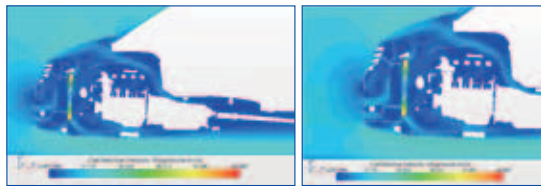
■ 汽车领域

研究课题: 某MPV整车空气动力学分析

课题来源: 华晨汽车工程研究院

用户单位: 华晨汽车工程研究院

随着高速公路和城市快速路的发展,提高汽车在高速行驶工况下的燃油利用率对能源安全和环境保护具有重要意义。华晨汽车工程研究院与宝马、麦格纳共同开发一款MPV,该车型采用宝马的设计理念,应用国际先进的仿真技术及标准,实现高精度模拟仿真。借助上海超级计算中心高性能计算平台,本项目对整车及主要部件进行仿真计算,分析实际工况下的内外部流场特性,优化发动机舱进气量,为该车型的空气动力性能设计、汽车造型优化设计工作提供参考和指导意义。



发动机舱内外流场分布

研究课题: 某汽车公司新车型研发过程中整车安全验证分析及优化

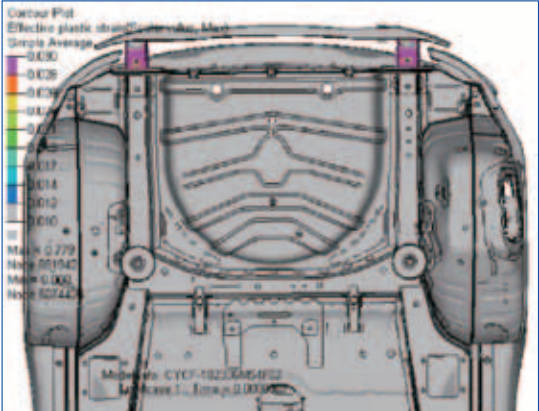
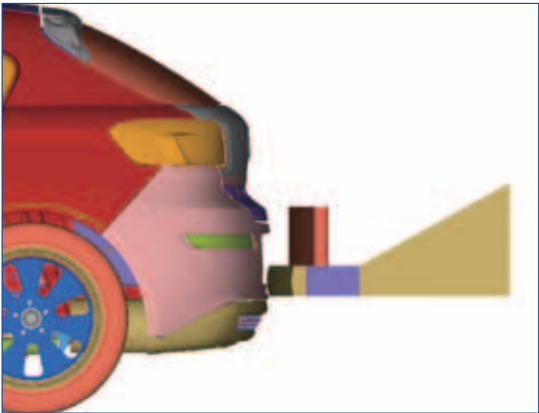
课题来源: 企业新车型研发

用户单位: 上海世科嘉车辆有限公司

某新车型的正向研发,需要在短时间内完成包含国标、美标及欧洲安全标准及法规的分析。在针对车身结构进行多轮优化及分析验证方面,上海超算中心的计算资源大大缩短了计算时间,最终保证整车性能在项目时间内满足客户设计要求。



FMVSS301 80Km/h后撞分析



RCAR Bumper分析

研究课题: 某汽车主机厂除霜系统设计、分析与优化

课题来源: 某汽车制造商

用户单位: 延锋伟世通汽车饰件系统有限公司

根据GB11555汽车风窗玻璃除霜除雾系统要求规

定:当汽车前风窗玻璃上铺设约0.5mm厚的冰层时,在零下18摄氏度环境下,车辆的风道系统需要在20分钟除掉前风窗玻璃A区上80%的冰,与A区对应的乘员侧区域需要在25分钟除掉80%的冰,40分钟时需要除掉B区95%的冰。延锋在承接某汽车主机厂仪表板系统的设计开发后,依据法规要求对风道系统进行不断的优化设计,最终物理试验的结果远远超越法规的要求。除前风窗玻璃的除霜除雾系统有法规要求外,侧窗玻璃并无此强制要求。但延锋在优化前风窗风道系统的同时,也在不断的优化侧面的风道系统。最终的试验表明,侧窗玻璃除冰效果也非常良好。



某汽车驾驶侧玻璃除冰结果



某汽车副驾驶侧玻璃除冰结果

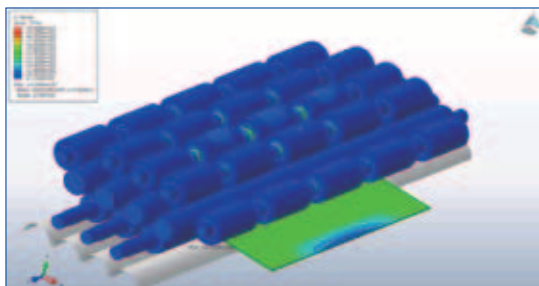
■ 钢铁领域

研究课题: 多辊矫直机辊系结构有限元分析

项目来源: 宝山钢铁股份有限公司

用户单位: 上海超级计算中心

辊式矫直在现代化生产中占据着极其重要的地位,各种型材及板带材生产中使用着大量辊式矫直机。辊式矫直机工作时,加工件在交替布置的多个矫直辊间经受多次反弯,在消除原始曲率不均匀性的同时,逐渐使加工件趋于平直。本项目借助ABAQUS软件,建立多辊矫直机辊系大规模计算模型,针对辊面磨损变形、支承辊开裂和热固耦合等问题开展研究,通过大量的辊系受力分析进行结构参数优化,改善辊系的受力状态。



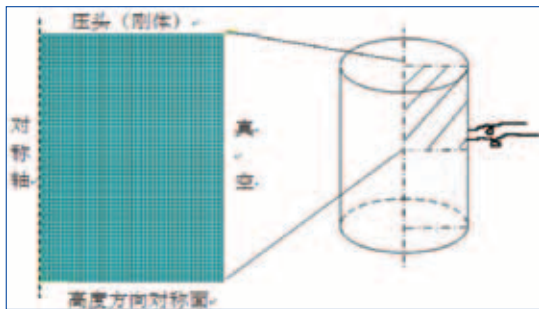
多辊矫直机辊系受力分析

研究课题: 特殊钢板带热轧工艺参数研究

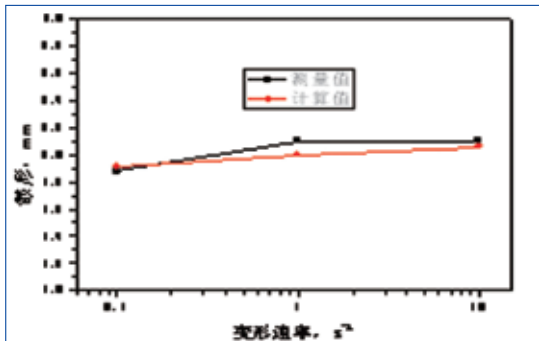
项目来源: 企业研发

用户单位: 宝钢研究院

特殊钢板带热轧工艺参数对于特殊钢板带生产起着尤为重要的作用, 需要通过研发工作掌握其热轧过程特性参数。本项目工作把有限元数值模拟计算方法作为其研究过程较为重要的手段之一, 通过大量的有限元数值模拟算例, 结合一定量的实验室试验和现场试验, 掌握了特殊钢板带热轧工艺参数。其计算结果为特殊钢板带产品设计、产线工艺设计提供了理论支持。由于大量的算例和高精度参数的需求, 项目需要一个超级计算平台来支撑计算工作。上海超算中心为项目的计算过程提供了高速计算平台, 大大提高了研发速度和精度, 节省了大量的试验工作, 也节约了试验工作中所需要的试验材料、物料损耗以及对环境的影响。



特殊钢圆柱形热模拟试样四分之一模型建立



不同变形速率对鼓形的影响

研究课题: B柱小总成零件轻量化方案设计

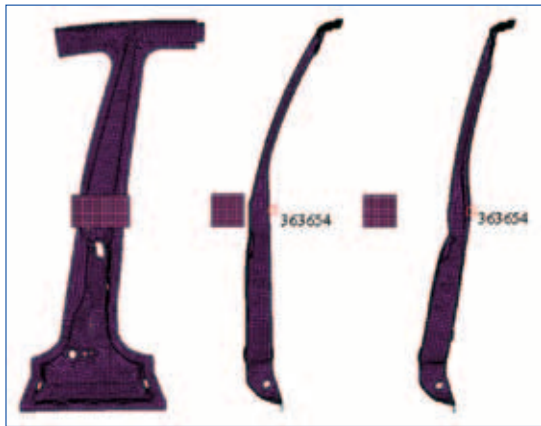
项目来源: 企业研发

用户单位: 宝钢研究院

B柱是轿车车身非常重要和关键的零部件, 对车身的刚度、强度、以及碰撞安全性都起着重要的作用。B柱通常由外板、中间板和内板组成, 并采用超高强度钢、激光拼焊等技术。本项研究旨在满足车身刚度、强度、碰撞安全性等要求的前提下, 通过仿真分析求出最优的轻量化方案。本项工作的开展为车身B柱总成部件的轻量化工作提供了工作思路。



柱碰撞前后变形分析结果



柱碰撞前后的变形对比

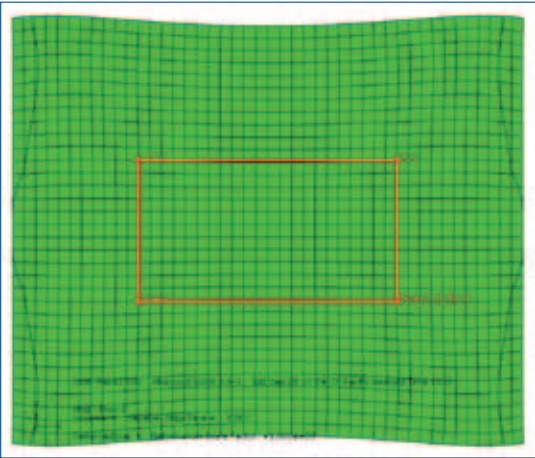
研究课题: 连铸坯细晶区轧制过程形状演变模拟研究

项目来源: 企业研发

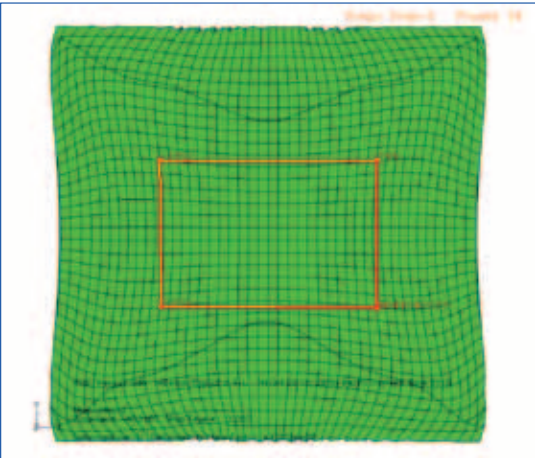
用户单位: 宝钢研究院

某钢材品种通过连铸坯来热轧生产。连铸坯在生产过程中, 截面上的晶粒分布与其冷却条件相关。通常在截面芯部有一细晶区, 该区域在热轧过程中会发生一定的形状演变, 对于轧制后成品的芯部组织和质量有很大的影响。为了跟踪轧制过程连铸坯芯部细晶区的形状演变, 本项目开展了数值模拟计算工作, 并根据实际轧制工

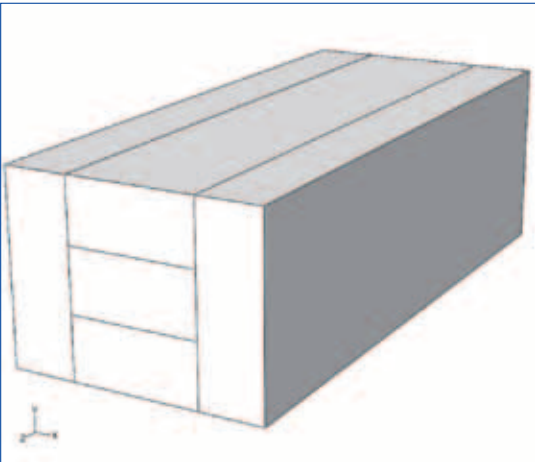
艺和理论优化工艺, 展开了一系列计算工作。上海超算中心为本项目的计算过程提供了高速计算平台, 支持了本项目的顺利开展。



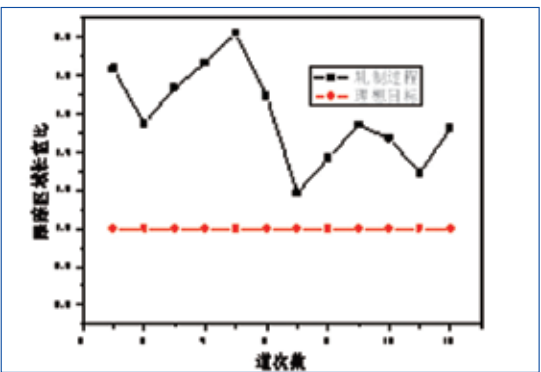
首次轧制后芯部跟踪区域形状



终轧后芯部跟踪区域形状



连铸坯芯部细晶区模型



轧制过程跟踪区域长宽比演变

■ 核电领域

研究课题: 蒸汽发生器汽水分离装置数值模拟计算

项目来源: 国家重大专项

用户单位: 上海核工程研究院

蒸汽发生器是压水堆和重水堆核电站的关键设备之一。汽水分离器位于蒸汽发生器上部, 作用是将蒸汽和水的混合物中的水分离出来。汽水分离器性能的好坏直接影响核电厂的热效率和汽轮机的安全运行与工作寿命。以往为了确定汽水分离器的分离性能, 通常需进行大量的试验。目前工程界开始尝试采用CFD方法研究汽水分离器的分离过程和结构影响因素, 为汽水分离器的优化设计提供指导。针对试验件, 本项目建立了旋叶式汽水分离器的数值计算模型, 并通过CFD模拟, 获得了反映旋叶汽水分离器的分离性能、阻力特性等数据, 汽水分离器内部详细的流场结构等信息。与试验结果进行的对比表明, 数值模拟结果与试验结果一致性较好, 包括计算域内流动结构、分离效率和压降等。

上海超级计算中心具有相关项目的模拟经验, 在项目开展过程中, 中心技术人员多次参与了技术讨论和交流, 为项目的顺利完成起到了推动作用。该项目计算规模较大, 在计算过程中大量使用了上海超算中心的计算资源, 极大地促进了项目的如期完成。

(项目涉密, 暂无图片或数据)

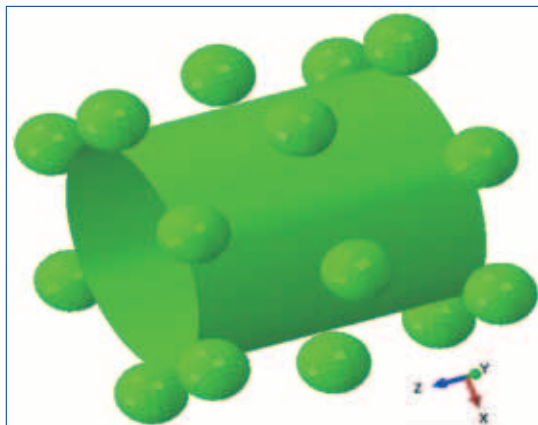
■ 材料加工

研究课题: 新型管壳式换热器成型及流动传热模拟

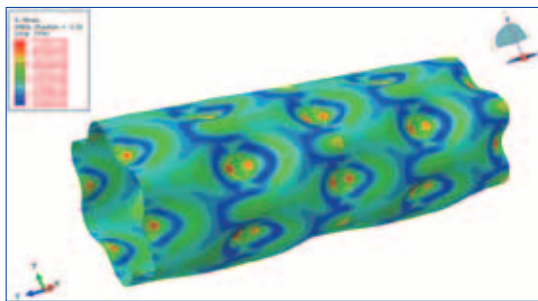
项目来源: 睿能太宇(沈阳)能源技术有限公司

用户单位: 上海超级计算中心

为了能有效地提高管壳式换热器的换热效率,需要对现有圆管式换热器进行结构改进,目前是对泡泡管进行成型分析和换热性能分析。在本项目中,利用ABAQUS软件对泡泡管成型过程和成型工艺参数进行了模拟和校验,考察了应力和变形情况,并预测了成型极限。此外,对成型后泡泡管中均匀流体通过时的承压能力也进行了计算分析。

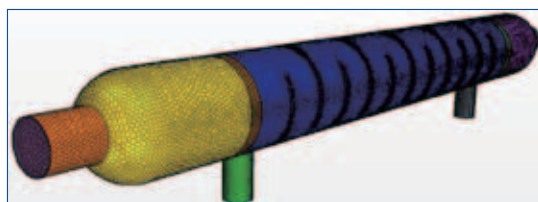


成型模具和圆管

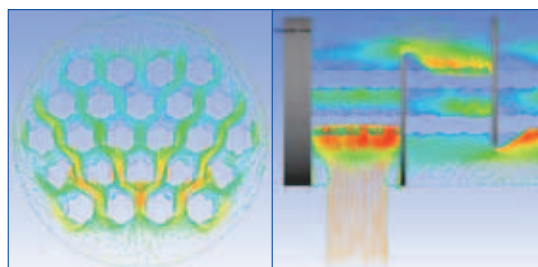


成型后应力分布

对成型模拟结果,本项目还采用了CFD仿真技术对加工工艺参数进行优化,进而设计分析出具有更高效能的异型管管壳式换热器。本项目的模拟分析工作使设计师能够更加深入了解新式换热器的研究分析方法、更全面地掌握异型管管壳式换热器的换热效果,也有助于公司客户了解研发技术实力。



整体模型网格分布图



壳程速度矢量图和入口段矢量图

■ 半导体领域

研究课题: MOCVD反应腔体数值模拟

项目来源: 上海市第四批高新技术产业化重大项目(新能源领域)

用户单位: 中微半导体设备公司

中微半导体设备公司的“高端MOCVD设备研发及产业化”项目是2011年度上海市高新技术产业化重大项目“第四批高新技术产业化重大项目(新能源领域)”的一部分。MOCVD设备是当今世界上生产半导体光电器件和微波器件材料的主要工具,也是当今信息产业发展不可缺少的战略性高技术半导体设备。由于多种原因,我国MOCVD设备长期以来一直依赖进口。中微半导体设备公司率先承担起MOCVD国产化的重任,开展设备的研发。计算模拟辅助设计是提高设备性能、缩短大型设备开发周期、降低开发投入必不可少的工具。目前中微的设备处于研发阶段。依托上海超级计算中心强大的计算资源,模拟计算为机械设计提供了理论支持,给工艺调试提供了指导。在研发中,通过建立合理物理和数学模型,进行仿真模拟计算,有助于了解设备内部不可见的复杂的质量和热量传递过程,从而有针对性地设计和改进关键部件,加快设备研发进程。

软件研发服务

软件研发主要是根据中心发展和用户需求开展相关研发工作, 确保各研发项目的顺利进展, 为提升中心服务能力提供技术支撑。软件研发服务包括高性能计算平台软件研发、并行计算研发和国家科研项目三大类工作。

高性能计算平台软件研发

上海超级计算中心高性能计算平台Xfinity为用户提供了基于web的高性能计算使用方式。2012年, Xfinity平台的用户数和作业数的增长均超过100%, 具体情况见下图。



2012年Xfinity软件的开发工作继续进行, 完成了2.1版和2.2版的开发, 新功能包括: 支持命令行作业的监控和管理; 优化文件管理模块, 支持文件自增长检查和自动下载, 自动续传; 支持chrome浏览器; 优化提交作业模块, 支持同时提交多个作业; 支持windows集群作业管理软件; 增加同组间用户文件共享等。

并行计算研发

上海超级计算中心研发部为用户提供串行应用并行化、并行应用的性能评测与调优、应用在GPGPU等新兴异构平台上的移植加速、集群系统性能评测、并行计算培训等服务。

2012年, 研发部为中科院力学所等用户分析解决程序运行的问题, 为上汽商务车技术中心等用户提供并行咨询, 为用户实现CFX用户子程序并行化, 跟踪GPU软硬件发展状况并实现CFD差分求解器、MAP等程序的GPU移植, 为光源用户提供集群性能测试服务。

国家科研项目

基于沉浸边界法的气固两相湍流全分辨率直接数值模拟

该项目于2013年3月5日提交结题报告。该项目完成了如下内容: 1) 并行流体软件的研发, 经过测试, 可以扩展

到1024个cpu核; 2) 该并行软件能够实现对气固两相湍流的直接数值模拟; 3) 为气固两相湍流模型的分析提供重要的量化依据。

多(众)核以及GPGPU异构平台上性能测评软件的研究

该项目旨在研究多(众)核以及GPGPU异构平台下的性能测评软件, 软件的研发分成两个部分: 1) 对已有并行应用性能分析工具的研究; 2) 对已有性能测评分析工具进行二次研发, 在大规模多核计算系统上为用户提供易用的性能测评软件包。多(众)核平台上性能测评软件主要提供以下功能: 剖析、性能跟踪; 提供分析结果报告, 生成文本、图表格式的报告给用户; 对不同并行编程模式的性能分析的支持, 如MPI、OpenMP、hybrid MPI+OpenMP、Multi-threaded并行编程模式。同时, 该软件需要能够适应“魔方”高性能计算平台, 开销低、可扩展性高等特性。2012年, 完成了该软件“超算中心并行应用程序性能测评软件”的研发, 并申请了软件著作权, 并于第4季度完成了该项目结题和验收工作。

高性能综合计算服务平台建设

本课题属上海市科委研发平台项目。2012年度主要工作内容: 完成高性能计算综合服务平台的开发、集成与测试工作; 遴选具有重大意义和实用性的高性能计算应用软件开发应用服务, 共计32个; 通过走访用户、举办课题交流会、参加工博会等形式充分调研用户需求; 为了拓展平台的应用领域和用户群体, 举办两次用户培训; 建立平台服务管理章程, 规范平台运行管理。

复杂电磁环境数值模拟

超算中心研发部主要负责该课题FDTD程序主循环代码段的GPU移植以及scalapck/MKL等相关数学库大规模计算的验证工作。目前FDTD代码的GPU移植基础版本已经完成, 单GPU卡(nvidia S2050, 515 GFlops)相对于超算魔方集群单核心(AMD Barcelona 1.9G, 7.8 GFlops)的加速比在40倍左右。数学库验证方面, 目前数学库在魔方已通过万核规模测试, 计算规模为50万乘50万的矩阵向量乘、30万乘30万的矩阵乘和30万乘30万的线性方程组求解已经完成。

媒体报道情况

2012年,上海超级计算中心围绕“魔方”的运行使用、引进“蜂鸟”新机器、核电分中心的成立和青少年科普活动为主题,邀请社会各类媒体对中心各类活动进行宣传 and 报道。《解放日报》、《文汇报》、《新华社》、《浦东时报》、《新闻晨报》、《科学生活杂志》及大量网站对中心进行了专题报道,引起了社会的广泛关注。

以下列举了2012年重要报刊杂志对中心的相关报道。



2012年“魔方”运行相关数据统计

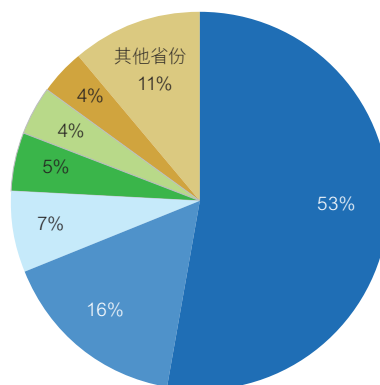
2012年上海超级计算中心主机“魔方”(曙光5000A)运行稳定,系统全年可用率平均为97.86%,主干网络系统全年平均可用率为99.7%,平均利用率达到73.36%,全年并行规模在1024核以上应用使用的机时占

全年机时的21.1%。

2012年中心全年新增63家用户,其中高校系统用户47家,中科院系统用户7家,企业及其他用户9家,用户数累计达到404个。

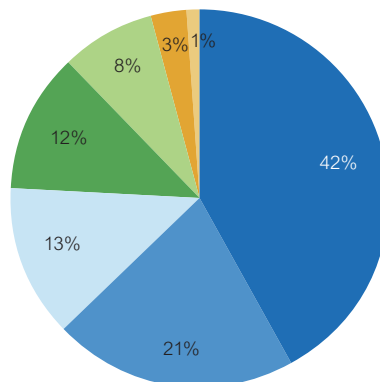
不同地域机时统计:

地域	总机时使用
上海	83574315.27
北京	25570448.73
浙江	10815224.03
安徽	7747127.12
陕西	7107625.95
江苏	6516702.08
山东	2931948.48
辽宁	2876867.71
福建	2246681.25
广西	2091496.27
天津	1164730.26
湖北	861093.41
广东	855115.39
山西	793590.5
吉林	597426.02
四川	595630.89
河南	572131.87
黑龙江	435441.46
湖南	207468.33
甘肃	139314.7
江西	127676.38
西安	79875.52
青海	59150.56
内蒙古	22132.85
河北	20515.58



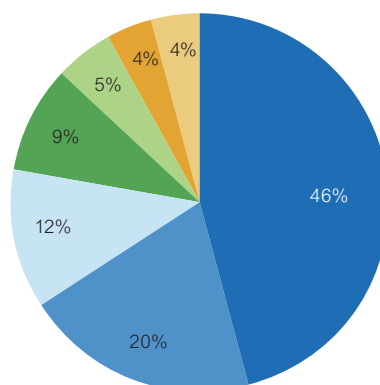
不同项目来源机时数统计:

项目来源	总使用机时
国家自然科学基金项目	42%
973项目	21%
其他	13%
地方政府支持科研项目	12%
863项目	8%
企事业单位项目	3%
国家重大工程项目	1%



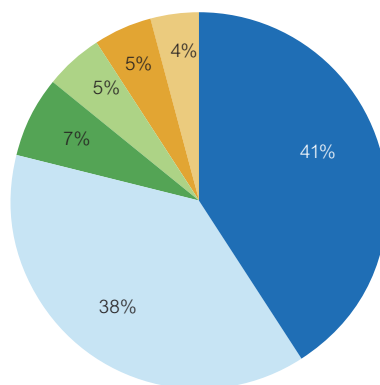
不同项目来源帐号数统计:

项目来源	帐号数
国家自然科学基金项目	46%
其他	20%
973项目	12%
企事业单位项目	9%
地方政府支持科研项目	5%
863项目	4%
国家重大工程项目	4%



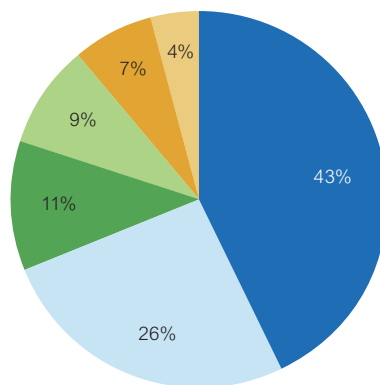
用户机构机时统计:

用户机构	总机时使用
高校	41%
基础研究所	38%
其他	7%
测试咨询	5%
工程研究设计机构	5%
工业企业	4%



用户机构帐号数统计:

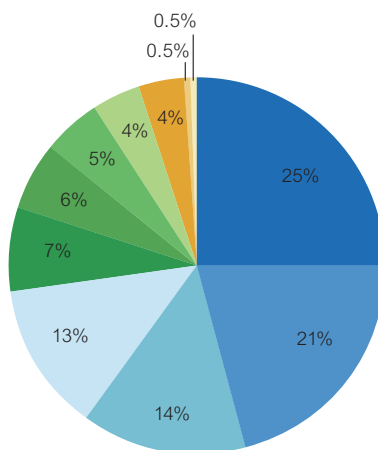
用户机构	总机时使用
高校	43%
基础研究所	26%
工业企业	11%
测试咨询	9%
工程研究设计机构	7%
其他	4%



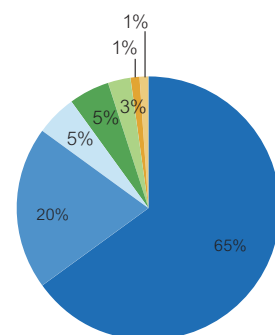
各领域机时数统计:

领域	总项目机时
纳米材料	25%
物理	21%
化学	14%
生物医药	13%
其他	7%
力学	6%
综合（试用及测试）	5%
天文	4%
制造业	4%
*海洋	0.5%
*通信	0.5%

*标注为今年新涉及的应用领域



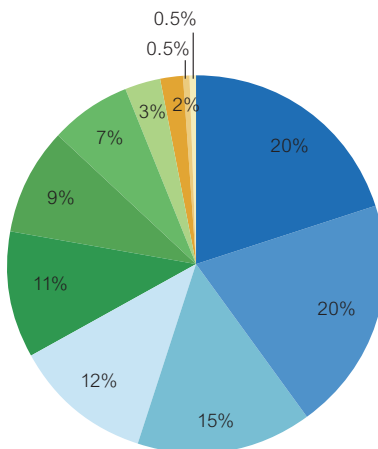
制造业	总项目机时
航空航天	65%
汽车	20%
钢铁	5%
船舶	5%
核电工程	3%
*半导体	1%
机械工程	1%



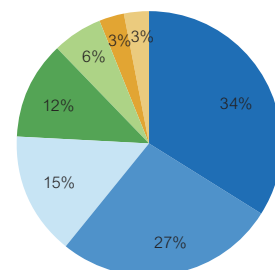
各领域帐号数统计:

领域	帐号数
化学	20%
纳米材料	20%
物理	15%
其他	12%
制造业	11%
生物医药	9%
综合（试用及测试）	7%
力学	3%
天文	2%
*海洋	0.5%
*通信	0.5%

*标注为今年新涉及的应用领域



制造业	帐号数
航空航天	34%
汽车	27%
机械工程	15%
核电工程	12%
船舶	6%
*半导体	3%
钢铁	3%



中心领军人物



李根国，现任上海超级计算中心副主任。工学博士，计算数学和力学专业，高级工程师，主要技术专长是有限元分析，高性能计算方法及其在工业和工程领域应用。近十年来一直从事飞机、汽车、船舶等工业产品以及大型地下工程等领域的高性能计算应用研究工作，积累了大量有限元分析，动力学仿真等方面的应用经验，有很强的解决工程实际问题的能力，先后在国内外重要学术刊物上发表20多篇论文，大部分被SCI、EI等检索或收录，出版了专著《具有分数导数型本构关系的粘弹性结构的动力学行为分析》(ISBN7-81058-564-9/G.216)；

负责和参加了多项国家自然科学基金、“863”项目，主要项目包括“工业仿真和优化设计网格社区的开发和应用”、“汽车协同制造网格”，“商业性大型有限元分析软件在‘神威I’超级计算机上的并行化移植和开发”，“汽车冲压和碰撞模拟程序并行化开发”，“特大型工程地震安全性评价的并行软件开发及其应用”。负责和参加了多项工业产品和工程CAE咨询项目，积累了大量的汽车、飞机、船舶、大型地下工程等领域的CAE应用案例。

参加研究的科研项目“基于超级计算机的结构动力学并行算法设计、软件开发与工程应用”，获得2005年上海市科技进步奖一等奖，项目“超大直径、超长距离盾构推进技术”获得2008年上海市科技进步奖一等奖。

2006年获得第三届“中国软件行业杰出青年”提名奖，同年获得第五届“上海IT十大新锐”荣誉称号，2011年获得国务院“政府特殊津贴”。



王涛，现任上海超级计算中心首席科学计算工程师，高性能计算应用技术部经理，博士，高级工程师。

1998年7月于中国科技大学化学系获无机化学学士学位，1999年7月于中国科技大学计算机科学与工程系获计算机科学与工程学士学位，2003年7月于中国科技大学化学系获理学博士学位，主要研究方向为原子势模型理论及其应用。2003年至2005年于美国南加州大学化学系任博士后研究员，Q-Chem(www.q-chem.com)开发组成员之一，研究方向为偶合簇理论(Coupled Cluster Theory)，实现并编写了Q-Chem程序中EOM-CCSD方法的冻结实近似解析梯度计算，并应用到双自由基和三自由基体系的研究当中

2005年9月加入上海超级计算中心，历任科学计算工程师、科学计算部副经理，负责上海超级计算中心基础科学类用户的推广、售前、售中和售后的技术服务工作。2009年1月至今任上海超级计算中心高性能计算应用技术部经理。负责上海超级计算中心高性能计算应用技术研发、咨询与支持工作。

主要研究领域为量子化学理论及其应用。对计算化学、材料化学、材料物理等方面的高性能计算均有研究。精通C、C++、FORTRAN等编程语言；cshell、bshell、expect、makefile等脚本语言。在国际著名学术刊物J.Chem.Phys.、Chem.Phys.Lett.、Phys.Chem.Chem.Phys.、Astrophys.J.Suppl.S.、Phys.Rev.A等发表论文近30篇。主持和参与了多个国家和地方科研项目。

2012年度报告

委 员: 奚自立

王普勇

李根国

王 涛

姜 恺

林 薇

主 编: 奚自立

副主编: 林 薇

编 辑: 张 怡

谢 鹏

战略合作伙伴



» 上海超级计算中心

地址: 上海浦东郭守敬路585号

邮编: 201203

电话: 021-61872222

传真: 021-61872288

<http://www.ssc.net.cn>