

上海超级计算中心
Shanghai Supercomputer Center



2013 年度报告



关于我们

2013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”提供支撑。

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。未来,中心将不断完善服务体系,提升服务能力和增值能力,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。目前,国内高性能计算发展迅速,应用需求激增,同时云计算、大数据等新技术的应用,给中心的发展既带来了挑战,也带来了机遇,中心根据市领导的要求正在积极谋划新一轮的转型发展。



計算中心
puter Center



目录

主任寄语	1	中心访问德国斯图加特高性能计算中心和西班牙巴塞罗纳超级计算中心	10
计算设施和能力的提升	2	中心科普活动	11
为上海市科研和工业创新提供高性能计算服务及技 术支撑	2	计算资源服务	13
完善和优化高性能计算平台, 提升技术服务能力	2	科学领域	13
中心内部管理	2	工业领域	23
国家战略地位的提升	3	软件研发服务	35
上海市副市长周波赴中心调研	3	高性能计算研发	35
上海超级计算中心船舶动力研发分中心成立	3	并行计算研发	36
上海超级计算中心西电分中心成立	4	国家科研项目	38
2013年科学计算用户大会	4	媒体报道情况	39
2013年工业企业用户大会	5	2013年中心运行相关数据统计	41
上海市科委研发公共服务平台建设项目“高性能计算 综合服务平台建设”通过验收	6	不同地域机时统计	41
中心参展第八届中国汽车设计与研发高峰论坛	6	不同项目来源机时统计	41
中心参展第二届国际转化医学信息学会议	6	不同项目来源帐号数统计	41
中心参展第十二届全国计算(机)化学学术会议	6	用户机构机时统计	42
中心参展HPC CHINA 2013	7	用户机构帐号数统计	42
中心参展2013年中国国际工业博览会	7	各领域机时统计	42
中心参展第九届中国制造业产品创新数字化国际峰会	8	各领域帐号数统计	43
中心举办宏基因组测序数据分析培训班	8	中心领军人物	44
中心举办2013年度用户培训	8	奖项荣誉	45
国际交流与合作	9		
中心参加ISC'13国际超级计算大会	9		
中心参加SC13, 向国际同行展示HPC-Cloud工具 及应用	9		

主任寄语



2013年,中国的超级计算领域进入了深层次思考的阶段。随着中国的超级计算机位列世界超级计算机排名第一和中国各地千万亿级超级计算中心不断涌现,超级计算应用能力的提升和超级计算中心的持续运维逐渐引起了业内人士的广泛关注。中国的超级计算事业如何走上一条科学的可持续发展的道路、超级计算资源应归属于地方IT资源还是国家战略资源、超级计算应作为一项产业来发展还是作为一项事业来推进都是我们值得深思的问题。

上海超级计算中心作为最早成立运行的超级计算中心,经过近十五年三期的建设,已经形成了较为完善的超级计算机运维体系和应用服务体系,也已达到了较为合理的规模计算和容量计算的状态。2013年在国内超级计算装机规模和应用规模逐渐背离的背景下,上海超级计算中心面临下一代更新发展的抉择、面临功能再定位、业务再发展、机制再创新等深度考验。

在上海市政府的科学决策和上海市经济和信息化委员会的指导下,上海超级计算中心立足超级计算事业,拓展数据处理领域;立足上海,辐射长三角,服务全中国;立足公共资金,激活市场经济要素的可持续发展方案已经形成。上海超级计算中心将进入一个新的发展时期。

从2000年到2013年,我们的用户,业内同行,一直关注我们,支持着我们一路走来。同样期待着你们和我们一起进入2014年,进入上海超级计算中心全新的发展阶段。

袁国良

计算设施和能力的提升

为上海市科研和工业创新提供高性能计算服务及技术支持

2013年度,中心为物理、化学、生物医药、力学、汽车、核电、钢铁、航空、船舶、机械制造、市政建设等科学和工程领域提供了高性能计算应用技术支持,完善了工程应用环境,为用户自编代码、对专业软件进行移植、安装、升级、集成与测试工作,通过将部分软件license浮动到用户单位,更新用户手册,调整计算队列和存储空间,加强软件license管控,完善登陆环境和图形节点的图形显示库等措施,不断提高中心的服务能力和水平,对用户进行使用培训。

继2012年建立上海超算核电分中心模式后,2013年中心继续推动1+X工业云计算模式的建立,与沪东重机、上海电气中央研究院等合作,分别成立了上海超算船舶动力研发分中心和上海超算电气装备设计分中心,进一步努力做好上海工业企业“创新驱动,转型发展”的助推器,发挥自身的独特优势和不可替代的作用。该模式的特点:一是探索以用户需求为导向,依靠超算中心现有的软硬件资源、管理资源及人才队伍,树立全方位为用户服务的工作方式,从最初的机时租赁,到目前为用户单位提供硬件建设、软件部署、需求认证、技术咨询、平台建设的一条龙服务;二是探索建立上海工业大用户联盟,建立长期的、紧密的共赢合作关系,以提高上海市高性能计算在工业领域的应用能力和水平;三是利用超算中心开发的Xfinity平台通过对HPC资源的整合为各分中心提供云计算服务。

完善和优化高性能计算平台,提升技术服务能力

2013年,Xfinity软件升级至2.4版,新增功能包括远程可视化、应用重构、应用模板开发工具、技术支持、Putty集成、与中心MIS交互等,并进行了下一代版本的规划和开发;同时基于Xfinity推动了基因测序平台、商发优化设计平台、核电分

中心互联互通和宝钢数值模拟子系统等相关项目的实施和开展。

Xfinity平台为用户提供基于web的一站式服务,降低了用户使用高性能计算资源的门槛,提高了中心的用户服务质量。中心通过Xfinity与各企业分中心资源实现互联互通,为探索创新超算中心的服务模式和运营模式奠定了基础。

中心内部管理

信息安全管理

2013年根据各部门业务情况及流程的变化,对相关的信息安全体系文件进行了修改并颁布实施,促进了信息安全管理科学及流程的合理。同时定期在内部开展专项审核,对审核中发现的安全隐患,通过纠正预防措施,提高信息安全体系运行的有效性。

2013年6月,顺利通过了BSI公司对中心信息安全管理体系的监督审核,并获得了证书的持续有效。审核结果显示,中心信息安全管理体系能持续满足业务的需求,无新的不符合项发生。



国家战略地位的提升

上海市副市长周波赴中心调研

2013年12月13日,上海市副市长周波、上海市政府副秘书长徐逸波一行到上海超级计算中心调研,并参观了上海超级计算中心。

专题调研会上,周波副市长首先听取了上海超算中心关于“上海超算中心发展及四期建设情况”的汇报,并就中心下一步的发展问题听取市经信委、市发改委、市财政局等各方的意见。综合各方的意见,周副市长对中心下一步的发展提出具体要求:1、中心四期建设方案有待完善,包括服务对象和运维模式的深入研究;要同步开展四期建设方案、过渡期改造方案和中心转型发展方案的研究。2、面临云计算、大数据等新技术应用,超算中心要抓住当前的机遇,既解决自身的发展问题,又帮助政府解决信息技术发展问题。3、要制定保障机制和激励机制,整合人才,解决中心根本性的发展问题。

围绕中心四期建设,周波副市长还指出,上海超算要紧跟“创新驱动、转型发展”的形势,吸引人才、抓住机遇、转型转制,不断提高行业竞争能力,并且明确目标、整合资源,在产业链上要加强战略思考,同时体现社会责任,为上海市的发展提供更好的服务。

市发改委、市经信委、市财政、市办公厅秘书处、综合处、上海超算中心中层以上等参加了此次专题调研会。



上海超级计算中心船舶动力研发分中心成立



2013年3月20日,上海超算船舶动力研发分中心成立仪式在上海超级计算中心顺利举行。沪东重机有限公司董事长江民达、上海市经济和信息化委员会基础设施管理处处长赵瑞颖、上海超级计算中心主任奚自立出席本次成立仪式。

沪东重机有限公司是中国船舶工业股份有限公司的全资子公司,隶属于中国船舶工业集团公司。公司以大型船舶柴油机创新设计、先进制造和全面服务为基础,围绕船舶动力产业集群,发展动力系统成套设备制造产业、大型柴油机及关键零部件制造产业和备配件服务业,实现“总装化生产、模块化配套,数字化设计、信息化管理”。公司具有较强的研发能力,是上海市高新技术企业和国家级企业技术中心。

上海超算船舶动力研发分中心是上海超算对接国家重点科技研发工程项目,面向重点行业应用发展,全面对接沪东重机在船舶动力研发项目的高性能计算需求,而建立的专业研发平台,从而提升上海超算服务船舶动力领域国家重大工程的能力,支撑沪东重机及船舶动力领域用户将先进计算能力转化为科技研发创新能力。

上海超算船舶动力研发分中心的建立是政府主导社会公共资源有效服务于行业、企业,支持重大科学研究、工程和企业新产品研发设计的典型示范模式,积极支持了沪东重机及船舶动力行业创新驱动、转型发展,提升其在国际船舶动力产业链的竞争力。

上海超级计算中心西电分中心成立

2013年6月19日，“上海超算西电分中心”在西安电子科技大学正式成立。这是上海超算中心与高校合作建立的第五个校级高性能计算中心。

此次上海超算中心与西电合作，在“共享、共赢、共荣”合作原则下，建立校级高性能计算中心，帮助西电提升校级高性能计算中心的服务能力，更好的满足西电校内用户的高性能计算需求，并且承诺在上海超算中心未来大资源投入运行后为西电开辟资源服务专区，以减少西电计算中心持续投入的压力。除校级平台的建设外，双方还将结合西电电子与信息学科的特色与优势、共同建设面向信息系统工程、雷达、微波天线、电子机械、电子对抗、计算机、微电子、光电子等专业领域的应用创新平台。

西安电子科技大学校长李建东、上海超级计算中心主任奚自立、副主任李根国等相关领导参加了西电分中心的揭牌仪式，会前上海超级计算中心代表还参观了西电三个国防科技重点实验室。



2013年科学计算用户大会



2013年5月23-24日，上海超级计算中心2013年科学计算用户大会在浙江慈溪召开，25家用户单位近40位用户代表出席本次会议。

会议首先由中心副主任李根国致谢科学计算用户对中心的长期支持和帮助，并表示中心将会继续做好用户服务与建设规划工作，力争为科学计算用户提供更好的科研支撑；应用技术部经理王涛对2012年的服务工作做了全面总结。

中心结合多年高性能计算服务经验自主研发了Xfinity平台——一种新的高性能计算服务模式，为用户提供更便捷、更安全、更方便管理的使用方式。目前此平台已在工程用户中广泛使用，今年起将在科学计算用户中逐步推广使用。借此机会，中心研发部经理姜恺详细为用户介绍了Xfinity计算平台的各项功能，并与用户就相关问题进行了讨论，大部分用户表示愿意尝试，并为Xfinity的后续发展提供了良好建议。

会上,上海交通大学高性能计算中心副主任林新华等用户代表分别作了专题报告。

中心与美吉生物的基因测序平台战略合作签约仪式也在本次会议上举行。李根国副主任和黄华生总经理分别代表双方签订了战略框架协议。协议的签订,为双方建立长期友好的合作关系奠定了坚实的基础。

最后,与会用户对其所关心的上海超算中心规划发展、日常使用问题、Xfinity平台方便性等问题展开了讨论和交流。

上海超级计算中心2012年度科学计算优秀用户、优秀新用户在会上揭晓。科学计算优秀用户分别是:山东大学步宇翔课题组、上海交通大学盛政明课题组、浙江大学硅材料国家重点实验室杨德仁课题组、中科院上海技术物理研究所陈效双课题组、中科大微尺度物质科学国家实验室杨金龙课题组、中科院上海应用物理研究所方海平课题组、中科院上海光学精密机械研究所沈百飞课题组。科学计算优秀新用户分别是:南开大学周震课题组、中科院上海应用物理研究所高巍课题组。

2013年工业企业用户大会

2013年6月21-22日,中心在浙江慈溪召开了2013年工业企业用户大会暨上海超算电气装备分中心揭牌签约仪式。大会共邀请了中心工业企业用户13家29名用户代表及部分软硬件厂商代表参加会议。

会议首先由中心副主任李根国博士致欢迎辞,应用技术部的丁峻宏博士随后介绍了2012年中心在工业领域为各用户提供高性能计算服务的情况及取得的一些成果。

会议评选出了中心2012年工业企业优秀用户和优秀新用户。优秀用户是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、宝钢集团中央研究院、延锋伟世通汽车饰件系统有限公司;优秀新用户是上海华力微电子有限公司、华晨汽车集团。

会议还举行了上海超级计算中心与上海电气集团股份有限公司中央研究院签订合作框架协议和上海超算电气装备分中

心成立仪式。上海超级计算中心副主任李根国博士和上海电气中央研究院党委副书记、副院长余耀代表双方签订了合作框架协议并为上海超算电气装备分中心揭牌。上海超算中心为了更好地服务地方产业建设,集中研发资源,深化装备制造业领域研发合作,将协助上海电气中央研究院在上海电气集团内建设上海超算上海电气装备设计分中心,定期派驻资深系统管理员和技术工程师提升上海电气装备设计分中心运维管理能力,以满足上海电气中央研究院的高性能计算需求;同时建设高端人才储备队伍,共同合作、参与和承接国家和地方项目,服务上海电气集团产品的自主研发。最终目标是建立装备业数字化综合设计仿真分析及数据管理平台,并逐步向集团及领域内合作单位开放,搭建共性技术专业虚拟仿真平台。

会议最后还邀请了三家优秀用户代表和部分软硬件厂商代表做技术交流报告,内容包含平台建设、分中心应用管理、高性能计算应用成果分享、云计算平台、GPU技术等多个方面,给参会的工业企业用户提供了一个分享技术、互相交流的平台。



上海市科委研发公共服务平台建设项目“高性能计算综合服务平台建设”通过验收

2013年8月8日,上海市科委组织专家对上海超级计算中心承担的“高性能计算综合服务平台建设”项目课题进行现场验收。经评审,验收专家组一致同意通过课题验收。

本课题由中心副主任李根国担任课题组长,由多个部门参与。本课题突破时间和地域限制为用户提供更为便捷、友好的高性能计算公共服务,整合了251Tflops高性能计算资源,集成了34个工程计算和科学计算典型应用软件,可为用户提供机时租赁、工程咨询、应用开发等服务。平台服务领域广泛,涉及航空航天、船舶、汽车、钢铁、核电、材料加工、半导体、物理、化学、生物等。

该课题形成一支技术扎实、经验丰富并具有良好服务意识的专业团队,通过制定完善的平台服务制度和管理规范,以新的服务模式,帮助用户缩短研发周期、降低研发成本,促进了高性能计算的推广和应用,取得了一大批有价值的应用成果,产生典型应用服务案例28个,公开发表航空、汽车和材料加工领域应用服务案例3个。

课题申请专利1项,登记软件著作权1项,发表论文2篇,并与商飞、中科院技物所等单位签订了长期战略合作协议和租用合同。

中心参展第八届中国汽车设计与研发高峰论坛

2013年1月9日,由中国汽车会议网主办的“第八届中国汽车设计与研发高峰论坛”在三亚召开。本届论坛有近60名汽车产业的脑库、领导者和技术领军人物参加。通过这个平等开放的信息交流平台,结合汽车新能源技术的现状和发展趋势,交流整车企业和零部件企业在产品设计、市场发展、企业品牌塑造、技术融合、企业文化建设和效能管理方面的新思路、新举措。

本届论坛上,上海超级计算中心展示了上海超算在汽车领

域的服务能力和应用案例,让参会者更加清楚地了解高性能计算在汽车设计领域的作用。今后,中心将针对会上所掌握的用户需求,结合中心的服务模式,为汽车行业提供更优质的服务。

中心参展第二届国际转化医学信息学会议

2013年9月20-22日,第二届国际转化医学信息学会议暨第十二届国际生物信息学会议在江苏太仓举行,上海超级计算中心派员参加了本次会议。

本届会议设转化医学、生物信息学、临床医学信息、医学图像信息学和健康信息学等主题,会议讨论后基因组时代、面对转化医学所面临的挑战,如何将分子、细胞、个体和群体等不同层次的信息整合,如何结合生物医学问题,为转化医学的研究和应用提高重要的信息支持。

中心参会人员认真听取国际生物信息学专家的精彩报告,与参会代表进行交流学习,了解生物信息学发展趋势。同时,中心在会议期间设展,向来访者介绍中心情况,推广中心服务,向参会人员介绍中心与美吉生物合作研发的“宏基因组生信分析平台”测试版本。参会者对该平台的功能表示非常期待。



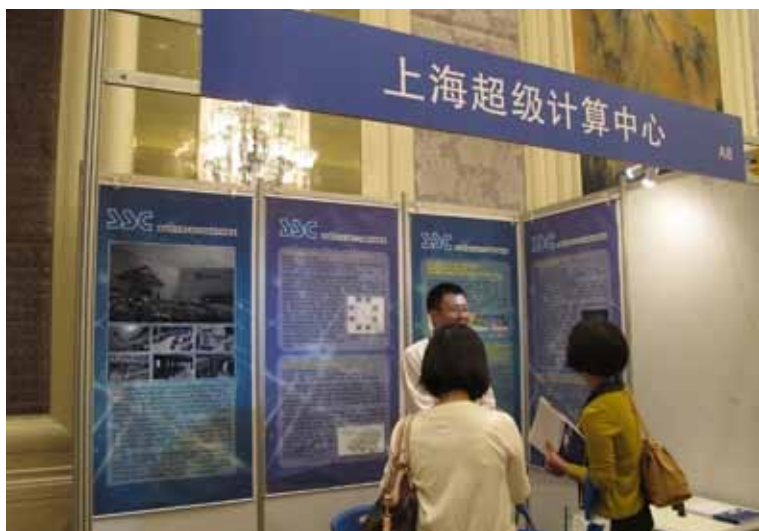
中心参展第十二届全国计算(机)化学学术会议

2013年10月21日,由中国化学会计算机化学专业委员会主办,苏州大学承办的第十二届全国计算(机)化学学术会议在苏州召开,本次大会共设有3个分会场——化学计量学、化学

信息学、生物信息学分会；药物分子设计分会；材料模拟与分子反应机理分会。超过350名国内外从事计算化学及相关技术研究的专家、学者、教授、青年科研工作者与相关企事业单位技术人员参加了此次会议。

本届会议上，上海超级计算中心展示了在计算化学、计算材料学领域的服务能力、工作成果和应用案例，并通过网络调查问卷的形式，吸引了大量用户前来展台进行现场互动交流，从而获得了用户需求的第一手资料。中心将利用这些信息结合中心的服务模式和资源状况，为用户提供更优质的服务。

中心参展HPC CHINA 2013



2013年10月29-31日，上海超级计算中心代表团参展在广西桂林举办的全国高性能计算学术年会（HPC CHINA）。本届会议由中国计算机学会主办，中国软件行业协会数学软件分会协办，中国计算机学会高性能计算专业委员会、桂林电子科技大学共同承办。

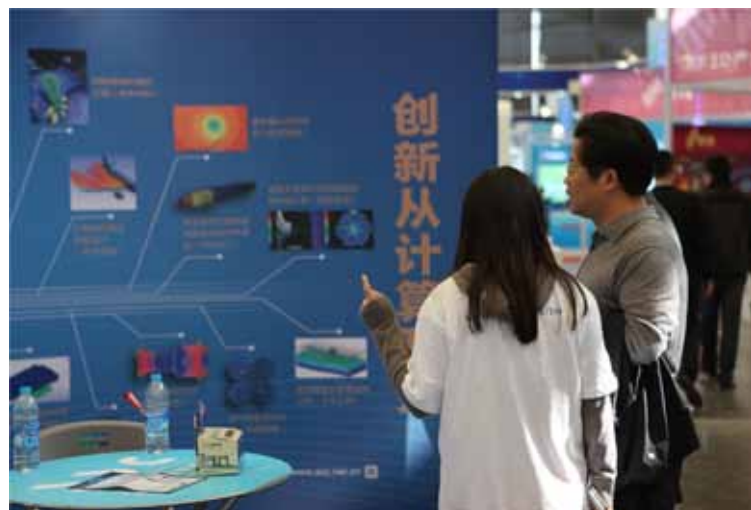
会议期间，中心副主任李根国主持了分论坛6-“厂商报告&大会优秀论文报告”：高性能计算算法应用、体系结构、并行算法等。中心研发工程师徐磊作了题为“GPU集群上的三维

UPML-FDTD算法的实现及优化”的报告，并获得大会“优秀论文提名奖”。

HPC CHINA 会议是国内高性能计算领域的盛会，每年举办一次，主要就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，并公布当年国内超级计算TOP100排名。2013年会议除国内外知名超算中心主任参加外，还邀请了美国HPC Advisory Council加盟。本次会议结合当前云计算和大数据等新技术，增设了“云计算”论坛、“大科学工程中的高性能计算”论坛、以及“CO-DESIGN”研讨会。

中心参展2013年中国国际工业博览会

2013年11月5-9日，中心以上海研发公共服务平台（隶属于上海市科学技术委员会）合作伙伴的身份参展了2013年中国国际工业博览会。展位位于创新科技馆（W5展区）。在本次展出中，中心就背景情况、硬件和应用发展史、应用案例等进行了介绍，并对中心目前推出的高性能计算云进行了推广。通过现场介绍和分发高性能计算云宣传单页，部分专业观众对于中心提供的高性能计算云产生了较为浓厚的兴趣。在为期五天的会展中，中心吸引观众近千名。



中心参展第九届中国制造业产品创新数字化国际峰会



2013年11月28-29日, 第九届中国制造业产品创新数字化国际峰会在上海举行, 上海超级计算中心参展该会议。

展出期间中心工作人员与数百名来自全国的制造企业和科研院所产品研发第一线的负责人进行了沟通, 探讨了如何利用中心强大的硬件和软件资源、丰富的工程咨询经验更好的为企业服务, 并且通过调查问卷的形式获得了用户需求的第一手资料。“虚拟仿真在产品创新中的应用技术”分论坛上, 中心副主任李根国博士做了主题演讲, 与参会代表分享了在超级计算平台上的工程综合应用。

本届峰会包括“信息消费时代的产品创新之道”及“产品创新数字化技术的实施与应用”两个主题论坛; “虚拟仿真在产品创新中的应用”、“CAD/CAPP/CAM一体化”、“产品创新过程管理(PDM/PLM)”三个技术研讨会; 汽车、机械、电子、电器四个行业沙龙。

中心举办宏基因组测序数据分析培训班

2013年8月5日-16日, 上海超级计算中心与上海美吉生物医药科技有限公司成功举办了为期两周针对宏基因组测序数据分析的培训班, 培训班共有90余位学员参加, 来自于全国31个省市自治区。

近年来, 宏基因组学研究方兴未艾, 该方法摒弃了此前对微生物的分析手段中对于可培养性的依赖, 在农业、环境、医药等诸多领域都有着深入的应用。但宏基因组学研究也面临着

诸多困难, 最大问题在于干扰数据的比例过高, 80%~90%的数据都是相对无用的, 需要从海量数据中挖掘极少数的有效数据。因此, 如何利用生物分析软件, 借助高性能计算机来进行筛选对于国内宏基因组的研究工作至关重要。基于这一点, 中心与美吉生物在双方的合作框架下, 共同推出了针对于宏基因组生信分析流程的培训班。

在培训班上, 中心针对大部分用户首次接触Linux操作系统的特点, 开展了专门的入门讲座以增加用户对于Linux的认识。美吉生物则针对宏基因组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, 并通过实际上机操作逐步加深用户对软件的掌握程度。

此外, 中心与美吉生物首次提出了“宏基因组生信分析平台”的概念, 针对这一理念, 学员们对生信分析表示期望并提出了一些建议。



中心举办2013年度用户培训

2013年11月14-15日, 中心举办了本年度的用户培训。本次培训有来自三十多家用户单位的一百八十位学员参加。

培训针对科学计算和工程计算用户需求的显著差异, 特别设置了科学计算和工程计算不同的培训内容。科学计算内容包括上机初步、各类计算作业实战、并行计算基础、并行编程入门。工程计算内容包括各类常用商业软件(Ansys、Fluent、Abaqus、LS-DYNA)在高性能计算中的应用和上机使用介绍。课程分别由来自中心研究开发部和应用技术部的专业工程师进行讲授。同时培训还邀请到了Intel公司的工程师做了Intel Xeon Phi的介绍。

国际交流与合作

中心参加ISC'13国际超级计算大会

2013年6月16-20日,上海超级计算中心派员前往德国莱比锡参加ISC'13国际超级计算大会。

此次大会上,有超过50个国家的160多家IT厂商及超级计算中心前来参展,内容涵盖了超级计算机各个领域的最新技术和成果。大会还举办了大学生超级计算竞赛、学术会议交流、新的TOP500发布及厂商最新产品技术展览。

本次大会现场发布的第41届世界超级计算机Top500排名榜单中,我国研制的“天河二号”超级计算机以运算速度超过第二名近一倍的优势排名榜首。Top500中,美国仍是超级计算机的最多拥有者,共计253台,并在Top500前十中占据5台,占50%份额。我国共有65台超级计算机系统入围,占整个TOP500的13%,Top500前十中,“天河2号”与“天河1号”分别位列第一和第十。

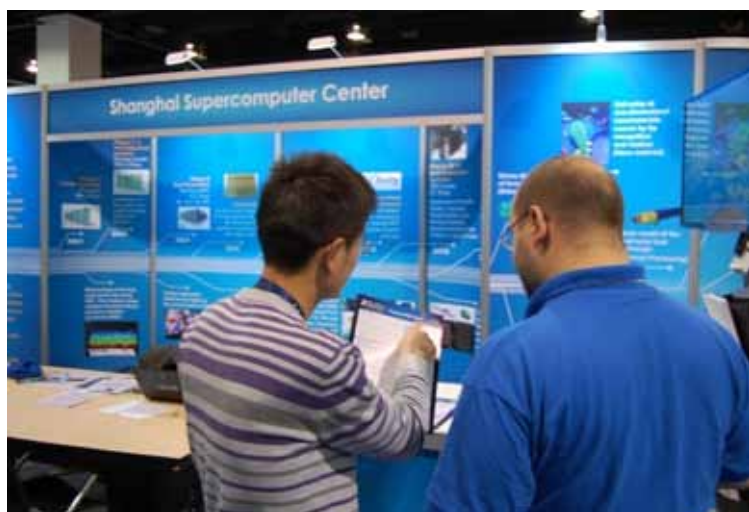
此次在莱比锡举办的全球大学生超级计算机竞赛成绩于19日揭晓。清华大学、华中科技大学、美国科罗拉多大学、英国爱丁堡大学等7所高校和南非高性能计算中心组建的大学生团队入围决赛。华中科技大学搭建的超级计算机以每秒8.455Tflops的浮点运算速度刷新全球大学生超算竞赛的赛事纪录,获得“最佳计算性能奖”。南非高性能计算中心代表队以总分第一的成绩获得竞赛总冠军,各项测试成绩名列前茅的清华大学获得亚军,哥斯达黎加工学院赢得最受欢迎奖。

大会就HPC面对的能源挑战,提出了各种节能的解决方法,其中最直接的方法是采用高效的水冷系统循环散热方法,能有效提高节点布署密度和散热效果。多家公司全方位展示了从台式机、企业服务器到数据中心的最新液体冷却技术,通过开发节能管理软件自动优化并调整CPU运行频率,达到非繁忙时刻节能的目的。

中心参加SC13, 向国际同行展示HPC-Cloud工具及应用

2013年11月17-22日,上海超级计算中心在美国丹佛参加了2013年度超级计算机大会(SC13),并在会议展厅设置了上海超算中心展台,展示了上海超算中心的硬件和应用发展历史,以及最新的高性能计算云平台——Xfinity的设计及其使用等。

此次SC13大会在丹佛的科罗拉多会议中心举行,有超过365家机构前来参展,内容涵盖了高性能计算各个领域和机构的最新技术和应用成果。上海超算中心展台主要向国际同行介绍了上海超算中心的硬件和应用的发展历史,最新的高性能计算云平台——Xfinity的设计及其使用等。展览期间,上海超算中心展台接待了近三百人次来访的参会人员,散发中心介绍资料及云平台Xfinity介绍资料近百份。



中心访问德国斯图加特高性能计算中心和西班牙巴塞罗那超级计算中心

2013年9月10-17日, 上海超级计算中心代表团一行对德国斯图加特高性能计算中心和西班牙巴塞罗那超级计算中心进行了访问。本次访问的内容主要包括: 对斯图加特高性能计算中心(HLRS)的运营模式进行深入了解; 就双方建立合作关系进行探讨; 与巴塞罗那超级计算中心就近年来的发展状况互换信息; 推进、并探讨双方合作事宜等。

由于上海超算中心与斯图加特高性能计算中心在工业计算方面存在一定的共通点, 且在某些能力方面可以进行互补, 双方经过本次会晤确定将在未来就工业领域方面开展诸项合作, 包括: 联合培训、研讨会、以及就潜在的中欧项目进行合作。为了确保这些合作项目能够按照既定的方向发展, 双方将于2014年3月签署战略合作备忘录, 以确保上述合作能够在此框架下得以顺利实施。

上海超算中心与巴塞罗那超级计算中心之间已签署战略合作备忘录, 并于2011年启动人员互换; 巴塞罗那超算中心已向我方派驻一名信息安全官, 为期3个月。因此, 本次访问首先就继续推进人员互换进行磋商, 并就上海超算中心向巴塞罗那超算中心派驻的人员类型以及时间长短进行了讨论, 并达成共识。鉴于双方均在智慧城市方面有一定的参与, 上海超算中心和巴塞罗那超算中心表示可以在允许的情况下开展相关合作。其他合作意向还包括在应用方面进行深入合作, 以利于上海超算中心服务能力的提升。

本次访问通过交流实现了彼此信息的互通。特别在中心运营方面, 斯图加特和巴塞罗那中心均毫无保留地分享了包括资金来源在内的信息, 并对其各自的运营模式进行了较为细致的解说。其次, 斯图加特和巴塞罗那中心都表示出极为热忱的合作意愿, 并希望彼此间的合作可以在未来得到进一步扩大。此外, 上海超算中心与这两个中心的合作均进入了实质性的阶段, 部分合作内容有望在2014年得到具体实施。



中心科普活动



▲ 2012年12月-13年1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, 每一批在上海交流学习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。

▼ 2013年暑假期间, 中心计算机科技馆特别推出主题为“人机交互”的暑期活动, 通过参观、互动等多种形式帮助小朋友了解计算机和人们是如何进行交流的。来自张江汤臣豪庭居委、塘镇和闵行科协的小朋友参加了本次活动。他们跟随讲解员参观中心主机房, 认识最新最快的超级计算机; 在计算机科技馆, 各年代的实物展品帮助小朋友了解计算机是怎样进化到现在的模样和功能; 主题活动时间小朋友们积极参与到“选边站队”的问答环节和实践体验中, wii游戏机不同的人机交互方式带给他们全新的科技体验。



▼ 2013年7月, 中心计算机科技馆为同济大学电信学院的学生们准备了一场以“超级计算”为主题的科普讲座, 中心副主任王普勇向他们介绍了该领域最新发展情况。讲座内容深入浅出, 既有实际应用案例, 又有最前沿的技术, 为学生们带来了超级计算最前沿的发展情况。中心一直致力于通过科普讲座让计算机专业学生更深入地了解超级计算, 吸引更多大学生投入到高性能计算领域。



▼ 2013年9月1日起, 中心计算机科技馆迎来了众多小客人——一两万名张江地区的中小学生。他们可以凭张江镇政府提供的“张江学子科普行”护照, 免费参观张江地区十家科普场馆。通过活动, 中心计算机科技馆提高了在周边社区的影响力, 也为今后面向低龄青少年的科普活动积累了经验。



▼ 2013年11月21日,中心作为活动协办单位参加了“共享科普阳光,走进科技殿堂”——2013浦东新区民办随迁子女学校基地行活动。活动启动仪式在浦东新区周浦镇民办紫罗兰小学举行。

活动仪式上,中心计算机科技馆向紫罗兰小学学生赠送了一批计算机科普书籍。活动仪式结束后,计算机科技馆的负责人为二年级小朋友开设了一堂有关计算机的科普讲座,课堂上同学们踊跃发言,积极互动。

紫罗兰小学是民办随迁子女小学,学生主要来自进城务工人员家庭。由于公办小学教育资源不足,这所小学解决了附近随迁子女入学需求,共有800多名小学生就读。虽然学校条件与公办学校有一定差距,但得到了社会各界的关心和帮助。此次学校基地行活动就是浦东新区科协、区教育局、周浦镇政府、上海科技发展基金共同主办,致力于为这些学生创造良好的科普氛围,中心参与到该项活动中,为随迁子女小学的科普教育出一份力。



▼ 2013年6月15日至21日,“上海节能宣传周”活动在虹口区花园坊节能环保产业园开幕。今年的主题是“践行节能低碳,建设美丽家园”。上海工业旅游促进中心和上海市能效中心合作推出一批低碳节能工业旅游景点,上海超级计算中心作为其中一个景点参与了该活动。此次活动旨在帮助更多上海市民了解节能环保产业,并积极参与到节能环保行动中来。



▼ 2013年11月28日,上海超级计算中心参加了首批爱心科普基地联盟成员单位的授牌仪式。该活动由上海市血液中心和上海市科普教育基地联合会共同发起,已开展4年,旨在树立公益精神、丰富科学文化生活,创造一种全新的公益科普活动模式。本次爱心联盟是原有活动的升级版,将活动范围扩大到所有参加献血人员。2013-2014年,持有上海市献血证的爱心人士都可免费参观上海超级计算中心。



科学领域

2013年度,上海超级计算中心为全国基础科学用户提供了大量高性能计算服务,领域遍及物理、化学、天文、生物等各个基础科学方向,中心用户共发表了(SCI)收录论文超过200篇。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。很多成果发表在《科学》(Science)、《自然》(Nature)及其子刊系列、《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)等国际顶级学术刊物上,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: Real-Space Identification of Intermolecular Bonding with Atomic Force Microscopy

项目来源: 国家自然科学基金、科技部基金、北京自然科学基金等

用户来源: 中科院国家纳米科学中心、中国人民大学物理系

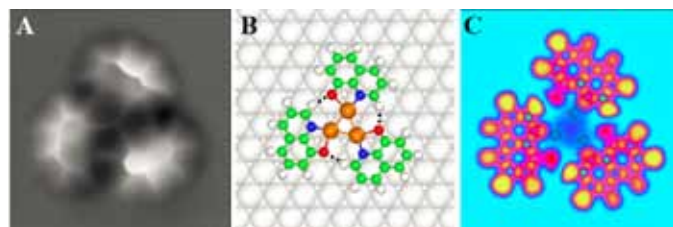
论文来源: 《科学》第342卷第6158期, 页号: 611-614, 2013年11月1日出版

本项研究在“氢键的本质”研究上取得了重大突破。研究采用了非接触原子力显微镜技术和第一性原理密度泛函理论计算在国际上首次实现了分子间局域相互作用的直接成像。研究成果为研究分子间相互作用开创了新思路,并为理解“氢键的本质”这一悬而未决的重大问题提供了重要证据。

非接触原子力显微镜是最先进的原子力显微镜表征技术。该技术可以通过显微镜探针顶部原子电子波函数与样品电子波函数之间的Pauli排斥相互作用得到高分辨的分子内部结构信息。例如,2009年IBM Zurich研究中心的科学家采用该技术首次观察到了分子内部的共价键。共价键波函数与探针顶端原子波函数有较为显著的Pauli排斥相互作用,因此之前的结果从原理上是相对容易理解的。然而,在本项研究成果中,氢键、配

位键、共价键在同一个分子聚集体中均被观察到。基于氢键的传统定义,在它附近不应存在电子波函数,因此,实验中直接对氢键成像似乎显得有些“不可思议”,这有悖于此前人们对原子力显微镜成像原理和氢键本质的认识。在经过大量的理论模拟后,最终确定了实验中分子(聚集体)的原子结构模型,确认了实验成像源于氢键和配位键的结论,并提出了实验观察到氢键和配位键的成像机制。

相关工作发表在Science 342, 611-614 (2013)。此外,2013年9月26日,美国《科学》(《Science》)杂志也以“Science Express”的形式在线发表了该论文



分子间三聚体的原子力显微镜像和理论计算结果

论文题目: Destructive extraction of phospholipids from Escherichia coli membranes by graphene nanosheets

项目来源: 973、国家自然科学基金等

用户来源: 上海大学、上海应用物理研究所、浙江大学等

论文来源: 《自然-纳米技术》第8卷第8期, 页号: 594-601, 2013年8月出版

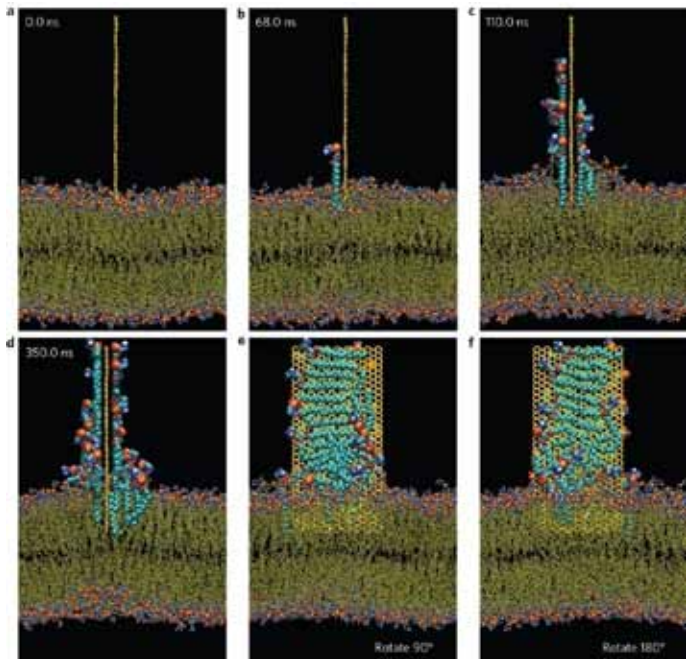
本项研究在石墨烯抗菌机制研究方面取得重要进展。

石墨烯作为一种新型的二维超薄纳米材料,以其独特的结构、力学和电子性质,被认为在药物投递、肿瘤治疗等生物纳米技术领域有着广泛的应用前景,因此石墨烯的生物相容性问题需要得到解决。目前虽然已经有大量的生物学实验工作得到了开展,但是石墨烯与生物分子相关的作用机制仍然不清楚。

本项研究通过分子动力学模拟开展了石墨烯与生物膜相互作用的研究,最终阐明了这种石墨烯抗菌的分子机制。计算模拟发现了一种新的分子机制:细胞膜上的磷脂分子可以被石

石墨烯抽取导致细胞膜的破坏。石墨烯不但可以通过对细菌细胞膜的插入进行切割, 还可以通过对细胞膜上磷脂分子的大规模直接抽取, 来破坏细胞膜从而杀死细菌。石墨烯独特的二维结构使其可以与细菌细胞膜上的磷脂分子发生超强的相互作用, 从而导致大量磷脂分子脱离细胞膜并吸附到石墨烯的表面。相关的电镜实验也直接观察到了细菌细胞膜与氧化石墨烯作用后产生的大范围空腔结构, 为理论计算结果提供了实验证据。该研究为揭示纳米材料的可能细胞毒性提供了一种分子机制, 为发展具有生物兼容性的基于石墨烯的纳米材料、纳米器件提供基础。

相关工作发表在Nature Nanotechnology 8, 594–601 (2013)。该工作发表后立即得到了众多国际科学媒体的关注, “Chemistry World”、“Beforeit’s News”、“Graphene Wiki & News”等网站均进行了报导与评论。其中, 英国皇家化学协会的《化学世界》以“Green grapheneband-aid”为标题对基于石墨烯的新型抗菌“邦迪”材料等作了讨论。



石墨烯脂质萃取的对接模拟

论文题目: The genome of the hydatid tapeworm *Echinococcus granulosus*

项目来源: 973、863、国家自然科学基金、上海市科委基金等

用户来源: 国家人类基因组南方研究中心、新疆医科大学第一附属医院、复旦大学等

论文来源: 《自然—遗传学》第45卷第10期, 页号: 1168–1175, 2013年10月出版

本研究成功绘制出了细粒棘球绦虫的基因组序列草图, 提供了关于细粒棘球绦虫生物学、发育、分化、进化和宿主相互作用等方面的一些新认识, 并鉴别出了一些药物和疫苗靶点, 有可能推动开发出包虫治疗和控制的新干预工具。

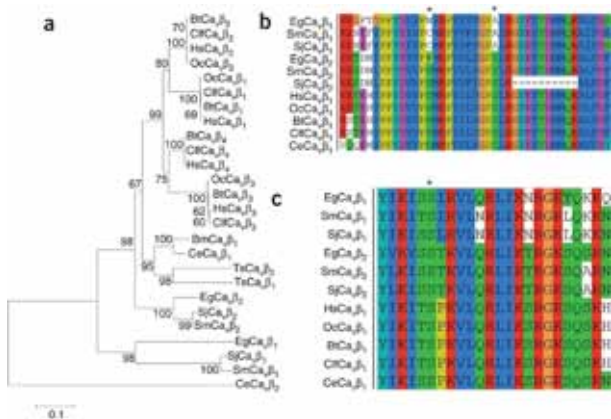
细粒棘球绦虫属带科、棘球属, 是一种重要的动物源性寄生虫, 全球至少有5千万人感染这种寄生虫。它的生命周期涉及两种哺乳动物, 其中间宿主通常是家养或野生的有蹄类动物 (人类是它的偶然中间宿主), 而狗则是其终末宿主。幼虫期可引起一种严重的人兽共患病称为棘球蚴病或包虫病。当前, 有多达300万人感染细粒棘球绦虫, 在一些地域10%的人口通过腹部超声和胸部X摄影检测出包虫囊肿。细粒棘球绦虫自身没有肠、循环或呼吸器官。其雌雄同体, 生成的二倍体虫卵可发育为六钩蚴。包虫囊肿中的幼虫 (原头节) 的一个独特特征是能够在狗胃肠道中双向发育为成虫, 或是在中间宿主 (人类) 体内形成二次包虫囊肿, 这一过程由胆汁酸所触发。细粒棘球绦虫的另一个显著特征则是能够感染和适应大量的哺乳动物物种, 使之成为它们的中间宿主, 这促成了它们广泛的全球分布。

本研究对细粒棘球绦虫基因组进行了测序和分析, 获得了这一寄生虫的基因组序列草图, 其包含151.6 Mb的序列和11,325个基因。细粒棘球绦虫包含有9对染色体, 它是第一批进行测序的绦虫基因组之一, 为早先英国Wellcome Trust基因科学园发表在Nature杂志上的高质量多房棘球绦虫 (*Echinococcus multilocularis*) 基因组提供了补充。

通过与其他绦虫物种基因组序列进行比较, 论文作者揭示出细粒棘球绦虫获得了包括EgAgB家族在内的一系列基

因, 细粒棘球绦虫通过分泌这些基因的产物干扰并改变了宿主免疫反应。论文作者发现胆汁盐信号通路中的基因有可能控制了细粒棘球绦虫的双向发育, 钙通道亚单位 $EgCa_v\beta_1$ 的序列差异有可能与其对吡喹酮抗寄生虫并药物的敏感性有关。

相关工作发表在Nature Genetics 45, 1168–1175 (2013)。



细粒棘球绦虫和其它类群的钙通道亚单元的进化树和多序列比对分析

论文题目: Probing the nature of gold - carbon bonding in gold - alkynyl complexes

项目来源: 973、国家自然科学基金等

用户来源: 美国布朗大学、清华大学

论文来源: 《自然—通讯》第4卷, 论文号: 2223, 2013年7月26日出版

本项研究通过光电子能谱实验和相对论量子化学研究, 对金炔基化合物中金碳之间的化学成键进行了研究, 发现了金碳键的键能与键级之间存在着罕见的逆相关关系。

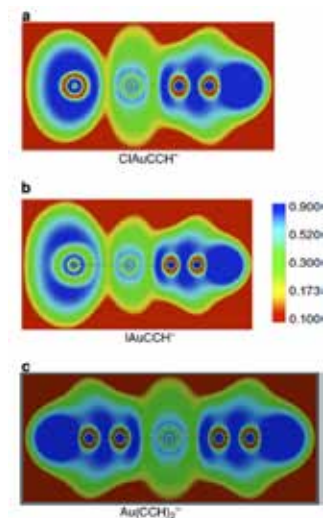
在过去的几十年里, 金化合物的均相催化已经有了显著的发展, 特别是对炔烃的活化。人们已经提出了许多反应的中间体。但一般来说, 直接观察和表征这些瞬态物质仍然是一个挑战。在Au中心和其底物之间的化学键的性质对均相金催化机制的认识是至关重要的。良好定义的金化合物可以作为模型系

统来探测金和其底物的成键。然而, 尽管人们已经知道强烈的相对论效应会导致金的许多独特的性质, 但是, 目前仍然缺乏对有机金化合物中Au-C键的研究, 而这一点对于理解催化中间体的可行性和机制是最相关的。作为一个探测分子的电子结构和化学键的强大实验技术, 光电子能谱最近已经被用来研究了一系列的Au-CN化合物, 但尚未应用于任何有机金化合物。

本项研究首次报告了一系列金炔基化合物 $LAuCCH^-$ ($L=Cl, I, CCH$)的光电子能谱实验研究, 以及相应的从头计算结果, 以探索Au-C成键的本质。振动分辨光电子能谱表明在 $LAuCCH^-$ 中的Au-C非常强。理论计算表明 $LAuCCH^-$ 中的Au-C是已知最强的金键之一, 其解离能为5.01eV。此外, 理论研究还表明 $LAuCCH^-$ 中的Au-C单键甚至比已知的 $ClAuCCH_2$ 中的AuC双键和 $ClAuC$ 中的AuC三键还要强, 表现出罕见的金的键级与键强的逆相关关系。 $LAuCCH^-$ 中的强金碳键表明最终金炔基的形成在热力学上是有利的, 这在炔烃活化中有着重要影响。

美国化学会《化学与工程新闻》杂志对此项工作进行了专题报道, 指出该研究成果对于理解均相金催化中间产物的生成机理具有重要意义。

相关工作发表在Nature Communication 4, 2223 (2013)。



金炔基化合物的电子分布

论文题目: Role of point defects on the reactivity of reconstructed anatase titanium dioxide (001) surface

项目来源: 973、国家自然科学基金等

用户来源: 中国科学技术大学合肥微尺度物质科学国家实验室

论文来源: 《自然—通讯》第4卷, 论文号: 2214, 2013年7月30日出版

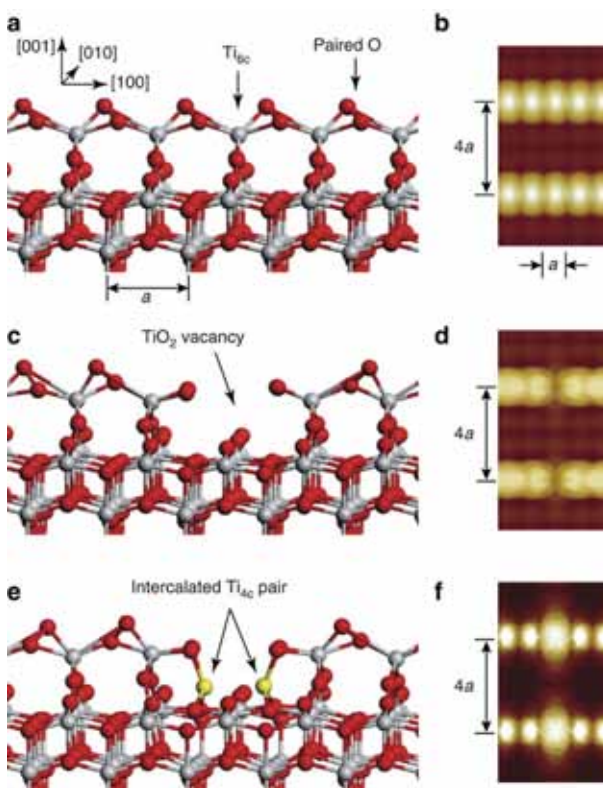
本项研究在锐钛矿二氧化钛表面催化活性和微观反应机理上取得了重要进展。此项研究通过实验和计算, 澄清了锐钛矿二氧化钛表面缺陷结构及化学活性位的长期争论, 为进一步设计和提高二氧化钛的催化活性及研究光化学反应提供了极有价值的信息。

二氧化钛是太阳能转化研究中的重要材料体系, 其在光催化分解水制氢气和人工光合作用等方面展现出迷人的前景, 针对这一材料体系的研究成为国际上新能源材料研究领域中的热点方向。寻找新的催化材料和高效的能量转换机理是其中重要的科学问题。二氧化钛的锐钛矿相和金红石相是两种得到广泛研究的晶相。其中, 金红石由于结构稳定、易于单晶生长, 过去的研究主要针对二氧化钛的金红石相。比较而言, 锐钛矿相的二氧化钛稳定性低, 直觉判断其化学活性应该比金红石相高, 有许多理论计算也支持这一观念。特别是理论预言锐钛矿二氧化钛(001)表面是所有晶面中活性最高的。近几年, 有大量的材料学家投入到合成富含(001)面的锐钛矿二氧化钛纳米晶, 并研究其光催化性质, 但实验得到的光催化效率与理论预言存在很大的差异。

针对这一问题, 论文作者采用脉冲激光沉积技术, 制备了高质量的锐钛矿二氧化钛(001)再构单晶薄膜, 利用扫描隧道显微镜 (STM) 微观表征和原子操纵的方法, 清晰地揭示出了该表面的结构和化学活性位点; 结合理论计算和分析, 提出了新的表面结构模型, 澄清了这一表面缺陷结构及化学活性位的长期争论。该研究结果表明, 锐钛矿二氧化钛(001)再构表面表现为完全氧化的形式, 纠正了过去关于该表面部分氧化的结构模型; +3价态的缺陷位是该表面活性位点。这一发现为进一步

设计和提高二氧化钛的催化活性及研究光化学反应提供了极有价值的信息。

相关工作发表在Nature Communication 4, 2214 (2013)。



二氧化钛结构模型与模拟图像

论文题目: Hopping transport through defect-induced localized states in molybdenum disulphide

项目来源: 973、国家自然科学基金、国家科技重大专项、江苏省自然科学基金等

用户来源: 南京大学、东南大学、上海大学等

论文来源: 《自然—通讯》第4卷, 论文号: 2642, 2013年10月23日出版

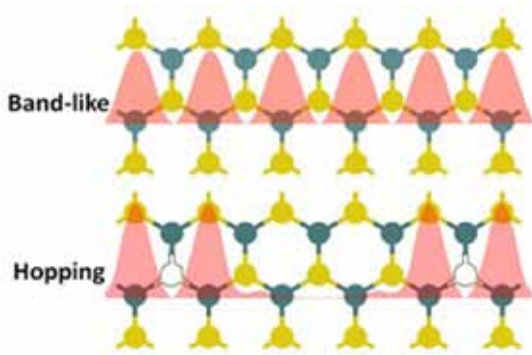
本项研究在二硫化钼电学输运领域取得的重要进展。这项成果对二硫化钼输运领域中的关键问题进行了较为系统地解

释，揭示了二硫化钼中的缺陷对电子输运和器件应用的影响，并且为进一步提高二硫化钼器件性能给出了理论指导。

二硫化钼是一种二维半导体材料，具有1.8 eV直接带隙，在电子、光电器件方面有着广泛的应用前景。作为后硅时代的一种新型纳米电子材料，二硫化钼近年来得到了学术界和工业界的广泛关注。然而在二硫化钼走向应用的过程中，实际器件迁移率远低于理论值的问题一直困扰着学术界。世界范围内的科研工作者在这一课题付出了诸多努力，但是对二硫化钼输运性质仍然没有一个较为系统和清晰的实验或者理论解释。

在本项研究中，论文作者结合实验与理论计算，阐明了二硫化钼中的电子输运机制。在这项工作中，研究者利用高分辨透射电子显微镜对二硫化钼表面原子结构进行了精细表征，结果显示有大量的硫空位缺陷存在于材料中。硫空位对二硫化钼能带结构有着显著的影响：基于密度泛函理论的第一性原理计算表明本征硫空位缺陷在能隙中引入缺陷态，在低载流子浓度下，电子由Bloch波变为局域在缺陷态附近的局域化电子，电子输运只能通过局域态之间的跃迁实现，该输运机制限制了二硫化钼的本征迁移率，这一结果得到了变温输运测试的证实。随着载流子浓度的提高（通过场效应在二硫化钼体系中引入高载流子浓度），电子传输将由跃迁传输转变为扩展态传输。这一模型也解释了在二硫化钼体系中金属态、甚至超导态的发现。

相关工作发表在Nature Communication 4, 2642 (2013)。



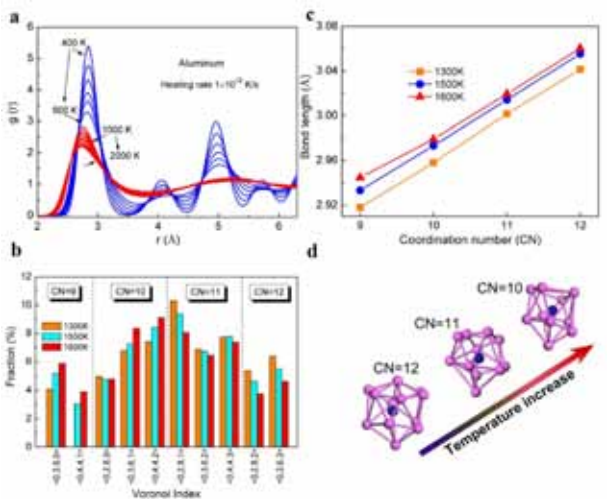
二硫化钼两种电子输运电子分布示意图

论文题目: Negative expansions of interatomic distances in metallic melts

项目来源: 973、国家自然科学基金、浙江省自然科学基金

用户来源: 浙江大学、中科院高能物理研究所、上海高压先进科研中心等

论文来源: 《美国科学院院刊》第110卷第25期，页号: 10068-10072, 2013年6月18日出版



纯Al的分子动力学模拟，图a为Al的双体相关函数随温度的变化情况，图b为Voronoi分形分析，图c为不同配位数多面体中原子的平均距离，图d示意说明温度升高，液体金属中高配位多面体逐渐向低配位多面体转变，随着低配位多面体含量的增多，最近邻原子的距离逐渐缩短

本项研究发现了加热诱导的金属液体中的近邻原子间距的收缩异常现象。固态无序合金的结构与合金液体的结构有着密切关系。液态金属结构的研究涉及材料科学和凝聚态物理中一些基本科学问题，例如，怎样理解物质熔化的过程、凝固以及玻璃转变等基本科学问题。固态材料中通常认为原子间距随着温度的升高而增大。论文作者从实验和理论两个方面对8种纯Al、Sn、In、Cu、Ag、Au、Ni和Zn液体金属开展深入研究，使用原位同步辐射技术研究了Al、Sn、In和Zn的液态原子结构随温度变化。采用经典的分子动力学对Al、Cu、Ag、Au、Ni和第一性原理的分子动力学对Zn的熔化行为进行了理论模拟，

实验和理论的结果均表明在液体金属中, 原子形成团簇结构, 中心原子到第一壳层原子的平均原子距离随温度的升高而减小, 在固态材料中, 通常不存在这种新现象, 但它却在液体金属中普遍存在。

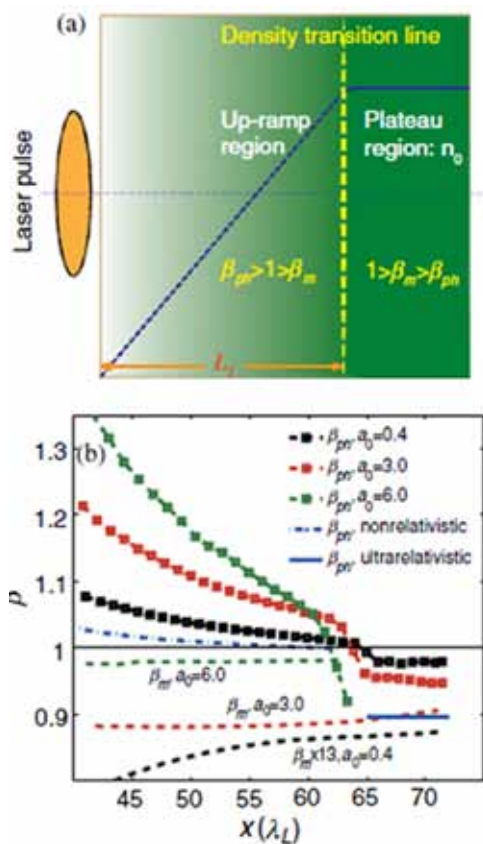
此项研究成果为解决无序物质结构的基本科学问题又近了一步。相关工作发表在PNAS 110, 10068–10072 (2013)。

论文题目: Dense Attosecond Electron Sheets from Laser Wakefields Using an Up-Ramp Density Transition

项目来源: 973、国家自然科学基金

用户来源: 上海交通大学、中科院物理研究所、清华大学等

论文来源: 《物理评论快报》第110卷第13期, 论文号: 135002, 2013年3月26日出版



AES生成原理与一维PIC数值模拟

本项工作在强激光驱动高能量密度物理研究中取得了新进展。

近年来基于百太瓦级 ($1\text{太瓦}=10^{12}\text{瓦}$) 强激光与等离子体作用产生新型粒子源 (电子、离子加速) 和辐射源是强激光驱动高能量密度物理研究的前沿热点课题。通过超短强激光等离子体作用, 有望在台面尺度上实现与大型传统加速器可比拟的加速效果, 且产生的粒子源和辐射源更短、更亮。早在1979年, Tajima和Dawson首次提出了采用激光脉冲产生的相速度接近光速的大振幅电子等离子体波 (激光等离子体尾场) 来加速电子。这种电子等离子体波可以承载的加速梯度可达 100GeV/m , 即比传统加速器的加速梯度高出3–4个数量级。在2002年, 人们首先在数值模拟研究中发现了大振幅电子等离子体的空泡 (Bubble) 结构, 它可以比较稳定地捕获并加速等离子体中一部分电子, 获得准单能的电子束能谱结构。在2004年, 国际上有三个实验室同时在Nature杂志报道在实验上获得准单能的电子束产生, 该期Nature封面将其称为“Dream Beam”。这为新型加速器的发展注入新的活力。目前利用激光等离子体电子空泡加速, 人们已能在数厘米的加速距离中实现了GeV、准单能电子束的输出。但受限于空泡固有尺寸以及电子注入方式, 过去近10年里, 人们在实验上得到的电子束一直徘徊在飞秒脉宽、~10%的相对能散, 以及10pC左右的电量。进而面向各种可能的应用, 其亮度、稳定性都有待大幅提高。

针对这些问题, 基于大规模数值模拟和理论分析, 论文作者提出了一种新的机制直接控制电子注入的时空位置, 从而产生大电量 (nC量级) 的阿秒电子层。数值模拟表明, 这种完全受控的注入方式能够大大改善电子束品质, 同时首次在尾波里实现了阿秒脉宽电子束的捕获。该方案要求的百太瓦级激光功率和气体靶参数降低了对实验的要求, 为实现高重复率、高质量电子源提供了可能。该方案需要相对较大的入射光斑, 使得形成的电子束成片状结构, 后者为通过汤姆逊散射产生相干超亮X射线源提供很好的载体。

相关工作发表在Phys. Rev. Lett. 110, 135002 (2013)。

论文题目: Surface Facet of Palladium Nanocrystals: A Key Parameter to the Activation of Molecular Oxygen for Organic Catalysis and Cancer Treatment

项目来源: 国家自然科学基金、国家青年千人计划、中科院百人计划

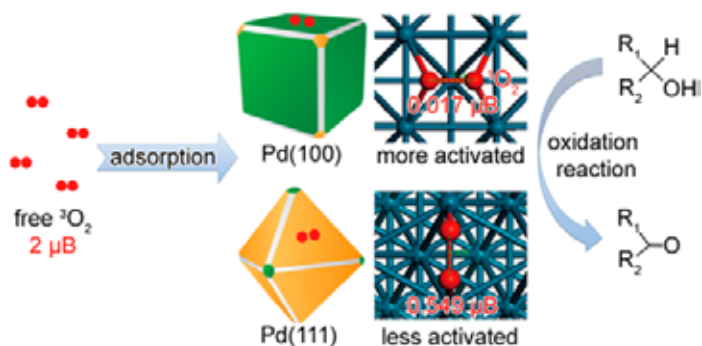
用户来源: 中国科学技术大学

论文来源: 《美国化学会志》第135卷第8期, 页号: 3200–3207, 2013年2月27日出版

本项研究发现金属晶面对于氧分子的活化具有重要的调控作用。

氧分子中的电子自旋态是影响很多化学与生物体系中物种活性的关键。基于金属纳米晶体表面晶面调控技术, 通过无机化学与理论化学、有机化学、物理化学、同步辐射技术等多学科交叉合作, 论文作者首次揭示了氧分子在不同钯晶面的吸附与活化行为。通过合理的晶面选择, 在分子吸附过程中可以自发地引发氧分子电子自旋态的改变。这项研究突破性的进展, 有助于促进癌症光热疗材料设计的发展, 对于阐明有机化学界在氧化反应中广泛使用金属催化剂的原理具有重要意义

相关工作发表在J. Am. Chem. Soc. 135, 3200–3207 (2013)。该工作同时被美国化学与工程新闻 (Chemical & Engineering News) 于2013年2月25日进行了题为“SELECT NANOCRYSTAL FACETS ACTIVATE O₂”的报道。



氧分子在不同钯晶面上的活化行为差异示意图

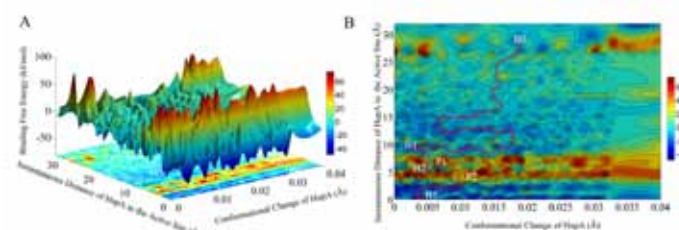
论文题目: Free energy landscape for the binding process of Huperzine A to acetylcholinesterase

项目来源: 973、863、国家自然科学基金、上海市科委基金等

用户来源: 大连理工大学、中科院上海药物研究所、美国莱斯大学等

论文来源: 《美国科学院院刊》第110卷第11期, 页号:

4273–4278, 2013年3月12日出版



石杉碱甲与乙酰胆碱酯酶相互作用自由能全景图。(A)三维结合自由能面; (B)结合自由能在反应坐标平面上的投影。

本项研究是有关药物设计理论计算新方法发展联合研究的结果, 突破了现有计算机辅助药物设计方法不能预测药效这一难题。

现有药物发现理念是“分子与靶标(受体)的结合亲和力(binding affinity)越强, 药效越好”。然而, 近年来对已经上市药物的统计结果表明, 药物与靶标的结合亲和力与药效没有直接的相关性, 大多数药物的药效与药物-受体结合的保留时间(residence time)成正比。药物-受体结合是一个动态过程, 结合亲和力是药物-靶标相互作用达到平衡时的热力学性质; 另一方面, 药物与受体结合和解离的动力学(kinetics)性质主要由结合速率常数(kon)解离速率常数(koff)决定。药物-受体结合的保留时间是解离速率常数的倒数, 解离速率常数越小, 药物在受体活性部位停留的时间越长, 药效越好。因此, 目前药物发现方法、技术和策略正由“强调药物-受体结合的亲和力”向“全面考虑药物-受体结合的动力学行为”转变。

30多年来, 基于结构的药物设计(structure-based drug design, SBDD)发展迅速, 基于分子对接(molecular docking)的虚拟筛选(virtual screening)等方法已经成为药

物发现的常规工具。然而，目前的SBDD方法是基于“分子与靶标的结合亲和力(binding affinity)越强，药效越好”的理念发展起来的，在药物设计过程中仅仅考虑药物-受体的结合强度。因此，目前的SBDD方法不能预测药物的药效，主要原因是现有的理论计算方法不能准确预测药物-受体相互作用热力学和动力学参数。

本研究将能精确预测小分子-蛋白质结合方式的柔性分子对接方法和精确预测小分子-蛋白质结合自由能的理论计算方法，与原先研究蛋白质折叠的能量全景图理论(energy landscape theory)和研究化学反应机理的过渡态理论(transition state theory)相结合，应用于药物-受体相互作用研究，发展了配体-受体结合自由能全景图(binding free energy landscape)构建方法，由自由能全景图可以获得准确的配体-受体结合热力学和动力学参数，预测药物的药效。应用该方法，论文作者构建了国际上第一个精确的药物-受体结合自由能全景图——抗阿尔茨海默病天然药物石杉碱甲(HupA)和乙酰胆碱酯酶(AChE)相互结合的自由能全景图，由此预测了HupA和AChE的结合自由能以及相应的动力学参数(结合活化自由能和解离活化自由能)。与此同时，论文作者也通过实验测定了HupA和AChE的结合自由能、结合活化自由能和解离活化自由能。理论预测结果与实验测定结果完全一致。

该理论计算方法的另一优点是，能给出药物与受体结合和解离的详细轨迹和作用机制。据此论文作者提出了新的药物设计策略：改变以往仅考虑分子与受体活性位点结合的亲和性，同时根据药物与受体结合能量较低的活性位点和结合能较高的过渡态位点设计化合物，获得与活性位点结合亲和性高、与过渡态位点亲和性低的化合物。

相关工作发表在PNAS 110, 4273-4278 (2013)。

论文题目: Understanding the High Photocatalytic Activity of (B, Ag)-Codoped TiO_2 under Solar-Light Irradiation with XPS, Solid-State NMR, and DFT Calculations

项目来源: 国家自然科学基金

用户来源: 中科院武汉物理与数学研究所、浙江大学、台湾中央研究院原子与分子科学研究所等

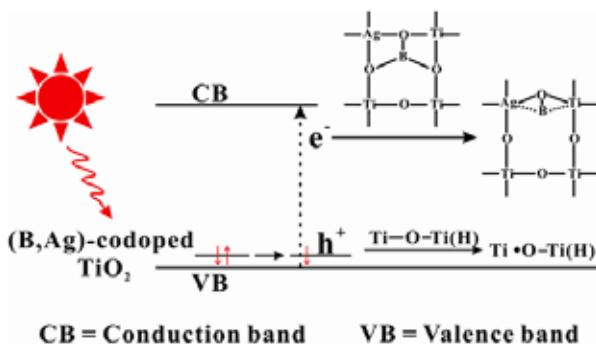
论文来源: 《美国化学会志》第135卷第4期, 页号: 1607-1616, 2013年1月30日出版

本项工作在二氧化钛光催化剂活性增强机制研究中取得重要进展。

二氧化钛是一种应用最为广泛的光催化剂，但在太阳光下的反应活性较低。近年来，人们发现掺杂二氧化钛光催化剂不但能有效增加可见光的吸收，而且还可以有效提高催化剂的光化学活性。然而对于光催化剂活性增强机制却一直不甚明确，这已经成为阻碍光催化剂研发的一个重要因素。

本研究发现了(B, Ag)共掺杂二氧化钛光催化剂在可见光或太阳光下具有非常高的光催化活性，并对催化剂的结构及其光催化机理进行了深入研究。研究人员利用灵敏度增强二维量子魔角旋转NMR新技术，发现银可以进入到二氧化钛的骨架，并与三配位间隙硼(T^*)空间邻近，形成 $[\text{T}^*-\text{O}-\text{Ag}]$ 结构单元；利用原位XPS技术对光致载流子的转移进行跟踪，发现 $[\text{T}^*-\text{O}-\text{Ag}]$ 结构单元在太阳光照射下可以诱捕光致电子形成中间体，从而延长光致载流子在催化剂中的寿命；DFT理论计算进一步证实 $[\text{T}^*-\text{O}-\text{Ag}]$ 结构单元可以大幅提高二氧化钛的光催化活性。这些研究结果不仅有助于人们从分子水平上理解光催化反应机理，而且对高效二氧化钛光催化剂的设计具有一定的借鉴意义。

相关工作发表在J. Am. Chem. Soc. 135, 1607-1616 (2013)。



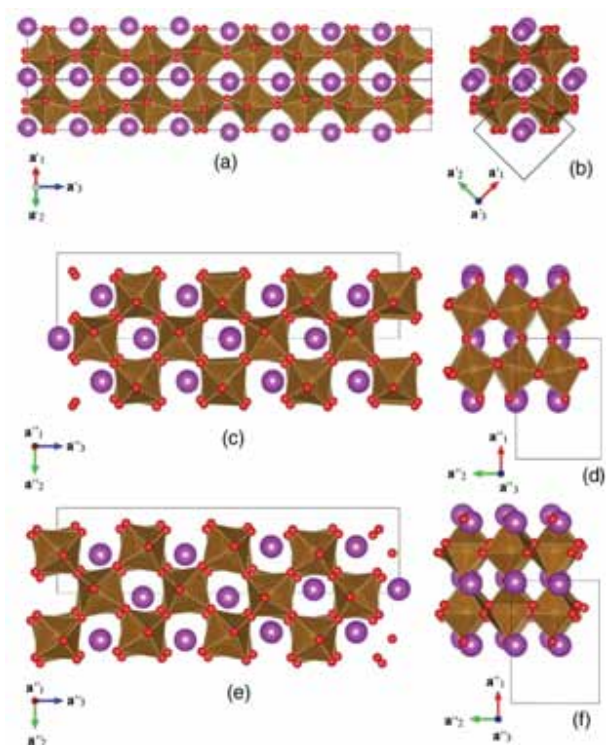
太阳光辐射下(B, Ag)共掺杂二氧化钛光催化剂电子/空穴转移机理

论文题目: Ferroelectric Domains in Multiferroic BiFeO₃ Films under Epitaxial Strains

项目来源: 863、上海市东方学者计划、上海市曙光学者计划、国家自然科学基金等

用户来源: 上海大学、美国阿肯色大学、南京航空航天大学等

论文来源: 《物理评论快报》第110卷第18期, 论文号: 187601, 2013年5月3日出版



铁酸铋薄膜中109° (a, b), 71° (c, d)和180° (e, f)三种不同类型的畴壁结构

本项工作在多铁性材料的物理机制研究方面取得了突破性进展, 提出了对铁电畴壁功能进行应变工程调控的重要概念。

多铁性是指在一定温度下物质中的铁电、铁磁和铁弹性有序共存的性质, 具有这种性质的物质称为多铁性材料。多铁性材料的独特性能使其不仅具有深刻的理论研究价值, 也具有广泛的实际应用前景, 是未来信息存储、传感器件、激励器及其自动控制的全新的候选材料。因此, 多铁性材料也成为了材料科

学和凝聚态物理研究领域, 继高温超导和庞磁电阻之后的又一热点前沿课题。

铁酸铋 (BiFeO₃) 是一种典型的多铁性材料, 具有非常大的自发铁电极化强度和远高于室温的铁电相变点和磁性相变点。在该材料中, 铁电畴及其畴壁对铁电体的物理特性有巨大的影响, 使其不仅可用于非挥发随机存储器和压电器件, 而且在电子输运和光伏效应等方面也存在潜在的科学价值。

论文作者运用第一性原理计算研究了铁酸铋薄膜中71°, 109° 和180° 三种不同类型的畴壁; 发现这三种畴壁的能量均在铁酸铋薄膜从R相到T相转变的临界应变附近达到最大值。该成果预言应变将引起畴壁能的次序改变、增强面外极化以及导致畴壁内外原子结构的新变化, 为纳米科学、相变以及多铁性材料等相关研究开创了一个新的方向, 即畴壁功能的应变工程调控研究。

相关工作发表在Phys. Rev. Lett. 110, 187601 (2013)。

论文题目: Excess Dielectron in an Ionic Liquid as a Dynamic Bipolaron

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, 山东大学自主创新基金

用户来源: 山东大学、美国密歇根州立大学

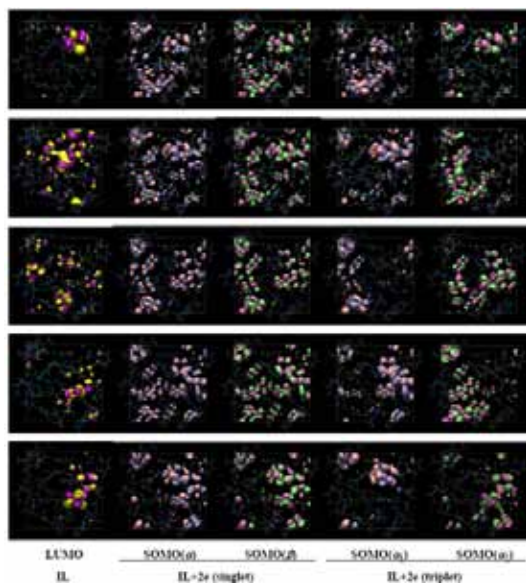
论文来源: 《物理评论快报》第110卷第10期, 论文号: 107602, 2013年3月6日出版

本项工作首次报道了离子液中“溶剂化双电子”结构、状态及其演化规律, 发现了双电子在此类流体介质中无论单重态还是三重态的新颖的双极化子特征, 以及两电子的非协同的、定域-离域互换式的特殊时间演化动力学, 从而在稳态分子动力学水平上给出了双电子间耦合相关的含时动力学统计信息。此外, 此项工作还论证了两电子间非共线自旋耦合的可能性以及此类液体可能展现的磁性特征。

电子基本运动规律的描述一直是化学、物理等诸多学科领域的重大而又基本的科学问题。实际上, 电子可简单定性分为“强束缚态电子”和“弱束缚态电子”。前者主要包括核实电

子、价态电子以及低激发态电子，是形成分子骨架或各种分子结构的重要组成部分；后者则是光激、辐射、甚至溶剂化等造成的存在于溶剂分子环境中的次生电子、游离电子或过剩电子，通常表现为“干电子”、“预溶剂化电子”或“溶剂化电子”，是一类新型的量子“粒子”或电子“物质”。目前已发现此类弱束缚电子广泛存在于生命、材料、能源、大气环境等众多领域，对分子、分子簇、聚集体乃至材料的性质能产生较大影响，甚至能使它们表现出很多独特的性质，展现出诸多潜在的重要应用前景。此类弱束缚电子的主要特点是受分子骨架的束缚作用较弱，易于电离或游离；或属于多个分子，具有灵活的流动性、较大的离域性及超快的区域转化动力学。其微观哈密尔顿算符不再或不严格遵守厄米属性。毫无疑问，这些电子运动的变异性使得其状态-性质表征及含时演化动力学描述变得比较困难，目前业已成为该领域的前沿热点、难点课题。

相关工作发表在Phys. Rev. Lett. 110, 107602 (2013)。



计算机模拟弱束缚电子的时间演化动力学

论文题目: Stable three-dimensional metallic carbon with interlocking hexagons

项目来源: 973、国家自然科学基金等

用户来源: 北京大学、美国弗吉尼亚联邦大学、上海技术物理

研究所

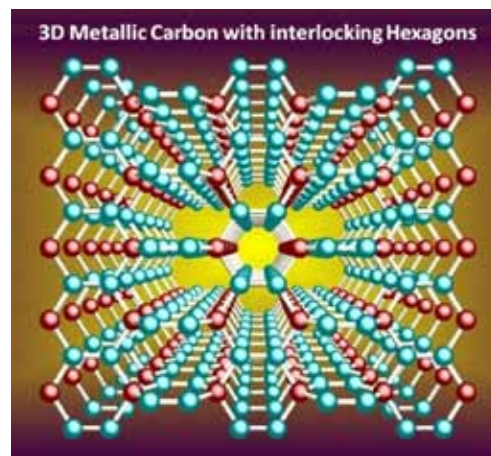
论文来源: 《美国科学院院刊》第110卷第47期, 页号: 18809-18813, 2013年11月19日出版

本研究从理论上证实可能存在处于常温常压下并具有金属特性的三维形式的碳。这一研究成果将极大地推进碳科学的研究。

碳科学是科学家们非常关注的研究领域。碳不仅是形成生命的化学基础，而且具有丰富的化学和物理特性，是材料科学家感兴趣的目标。碳可以多种结构形式存在，从石墨到金刚石，再到富勒烯、碳纳米管和石墨烯。但要找到能够在常温常压条件下稳定存在并且具有金属特性的三维形式的碳，一直是科学家们面临的挑战。

此项工作通过分析实现金属碳所需的条件，以碳的六元环为结构基元，设计出了相互嵌套的三维碳结构，并通过基于理论的深入研究，证明了由这种结构单元的奇妙组合所构成的三维碳结构不仅能在常温常压下稳定存在，而且表现出金属性。这种三维金属碳，由于其费米面处的电子态密度高，且具有纳米多孔性，可能表现出新奇的催化特性，并且还可能具有负微分阻抗、磁性和超导性等奇特物理特性，在研发适用于太空、催化作用以及负微分电阻器件或超导设备的轻金属方面等许多领域，都具有广阔的应用前景。这一发现将极大地丰富人们对碳材料的特性的认识并拓宽其应用领域。

相关工作发表在PNAS 110, 18809-18813 (2013)。



操控碳形成具有金属性质环环相扣的三维六角形结构

工业领域

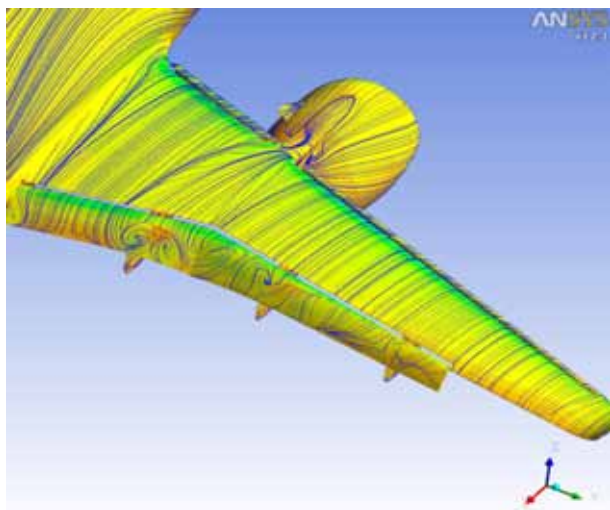
2013年上海超级计算中心充分发挥“魔方”和“蜂鸟”集群的硬件优势以及专业团队的服务优势，向工业用户提供了持续、稳定、可靠的高性能计算服务。从工业用户使用特点来看，研究的问题越来越复杂，计算规模越来越大。中心工业用户大多来自航空、船舶、汽车、钢铁、半导体等诸多工业和研究领域，在设计和研发过程中主要运用到了计算结构力学和计算流体力学的方法和工具。同时基于中心技术人员经验能力和CAE/CFD有利工具，中心也独立或与用户合作完成了一些工程咨询项目。

航空领域

研究课题：C919增升装置气动优化设计

课题来源：国家重大项目

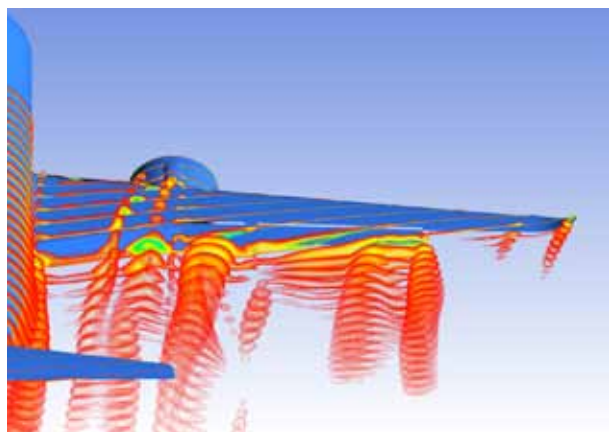
用户单位：中国商用飞机有限公司上海飞机设计研究院



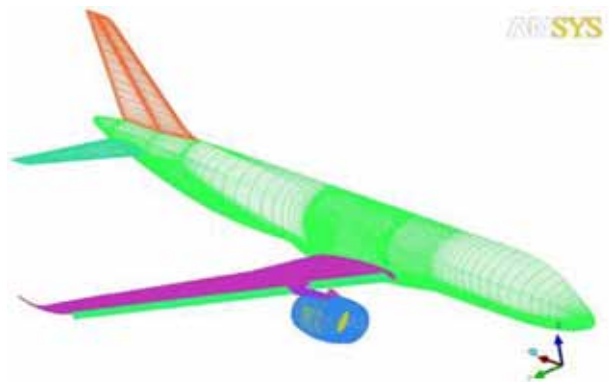
机翼表面压力云图和流线分布

大型飞机C919重大专项是党中央、国务院建设创新型国家，提高我国自主创新能力和增强国家核心竞争力的重大战略决策，是《国家中长期科学与技术发展规划纲要（2006—2020）》确定的16个重大专项之一。C919飞机增升装置的气

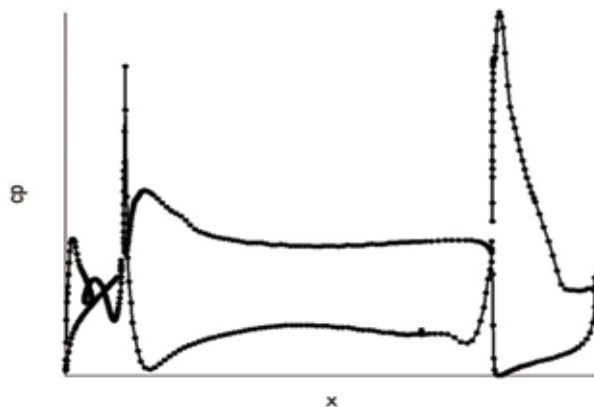
动优化设计工作一直在开展，并通过持续地创新，逐步丰富技术储备，以应用到未来的型号设计中去。优化设计工作考察点繁多、计算精度要求高，必然存在计算任务多、网格数量大等问题。借助于上海超级计算中心的高性能计算平台，利用其充足的计算资源，C919飞机增升装置气动优化设计工作得以顺利开展。



总压等值线分布



机身面网格分布



机翼表面压力系数分布

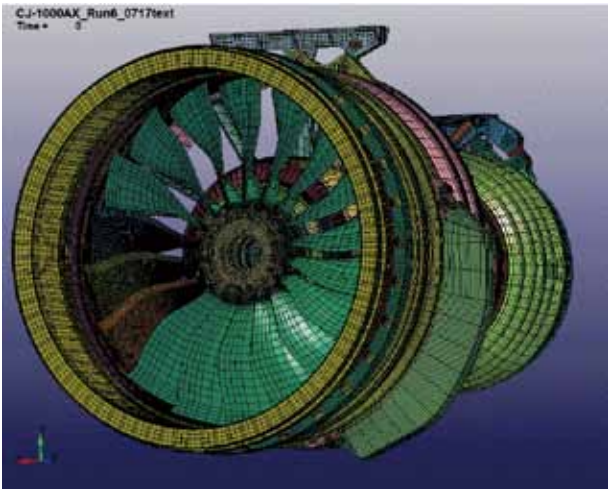
研究课题: 航空发动机的数值模拟分析与优化设计

课题来源: 中航商用航空发动机有限责任公司

用户单位: 中航商用航空发动机有限责任公司

■ 航空发动机机匣包容性机理及数值仿真研究

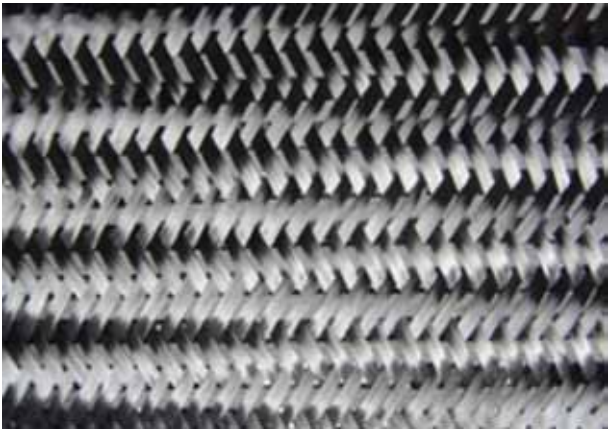
航空发动机机匣包容问题非常复杂, 涉及大变形、材料粘塑性和失效, 以及极短时间内发动机各部件之间大量整体和局部高速高能相互作用, 包含多种非线性特性。基于上海超级计算中心资源, 本项目采用有限元方法对航空发动机叶片断开甩出撞击机匣的非线性瞬态响应进行了数值分析。分析了撞击过程中叶片运动轨迹以及叶片和机匣的变形、应力与能量变化。结果表明: 有限元方法能较好地模拟航空发动机叶片丢失后撞击机匣的过程, 研究结果对于进行航空发动机机匣包容性设计具有重要参考价值。



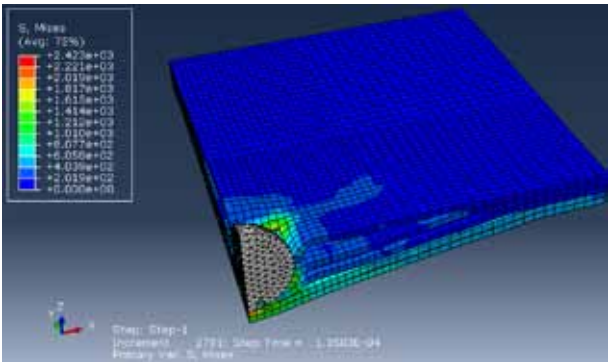
发动机机匣包容性研究仿真模型

■ 商用航空发动机复合材料部件的设计和验证

复合材料在航空工业中有着越来越广泛的应用, 在航空发动机机匣等冷端部件中, 以复合材料层合结构为主要结构形式。为了提高发动机的推重比, 改善飞机的综合性能, 必须对这些复合材料层合结构进行优化设计。由于复合材料的材料性能分散性大, 结构所承受的载荷也具有不确定性, 因此在设计中需要考虑复合材料层合结构的可靠性。本项目利用LS-DYNA用户自定义材料模型开发功能, 编写了针对复合材料风扇包容机匣周围采用的编织结构的材料模型, 并在超算平台上完成求解器的编译, 初步完成了复合材料平板的外物冲击仿真, 有力地支撑了商用航空发动机复合材料部件的设计。



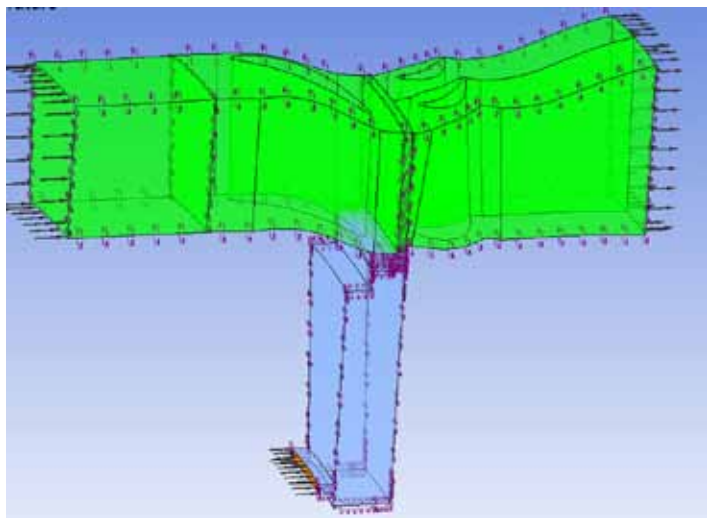
复合材料叠层结构示意图



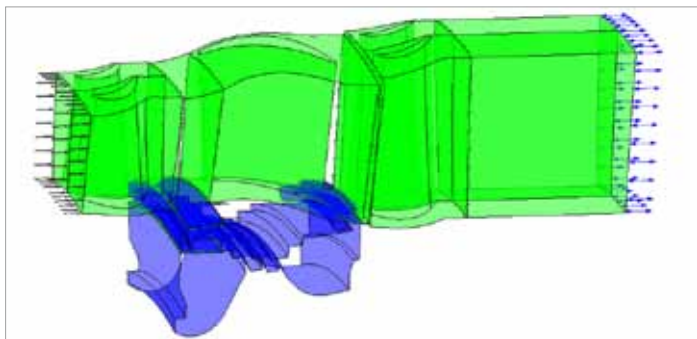
复合材料板冲击

■ 涡轮盘轮缘密封结构性能分析

涡轮盘密封主要应用于旋转机械静止与转动部件之间以减少流动损失。现代航空发动机中，涡轮盘密封系统的改进对于发动机整体性能的提高具有重要意义，通过实验或数值计算确定阻止主流燃气入侵的最小冷气入流量是改进盘腔密封系统的关键。随着涡轮盘主要部件设计和加工技术日趋成熟，通过改进密封提高涡轮盘效率相对于改进其他部件提高效率更容易，而这种改进的成本更低。本项目基于上海超算中心计算资源，采用CFX分析软件分析了导致燃气入侵的主要因素以及封严效果的影响因素，数值计算结果对如何提高封严效率具有重要的参考价值。



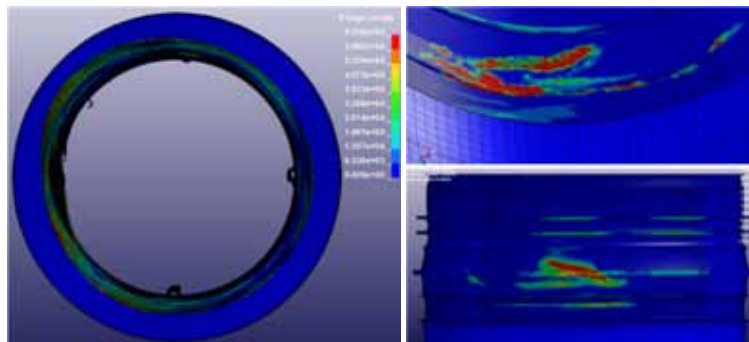
高压涡轮一级盘轮缘封严结构



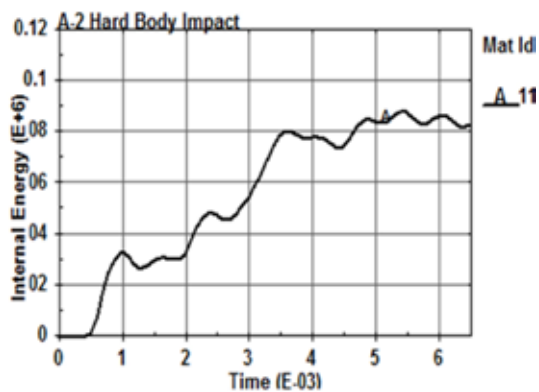
高压涡轮二级盘轮缘封严结构

■ 航空发动机包容性数值仿真并行计算一致性研究

工程化的航空发动机包容性分析涉及到大规模高性能并行计算。在瞬态动力学计算中，计算随机误差和误差累积是影响计算精度的重要因素。在采用并行算法时，上述计算误差的控制显得尤为重要。瞬态动力学并行计算误差主要表现在：单CPU计算和多CPU计算结果之间可能存在较大差异，同一个输入文件多次送交的计算结果可能不同，这一类计算误差如果不加以控制将极大影响仿真可信度。本项目针对航空发动机风扇叶片脱落包容性分析问题，对其数值仿真并行计算精度的影响因素进行研究。研究表明，通过计算方法的改进和计算平台的选择可以有效避免误差累积现象，同时使得多CPU并行计算结果的一致性显著提升。



包容机匣应力云图



内能时间历程

航空发动机包容性数值仿真并行计算效率研究

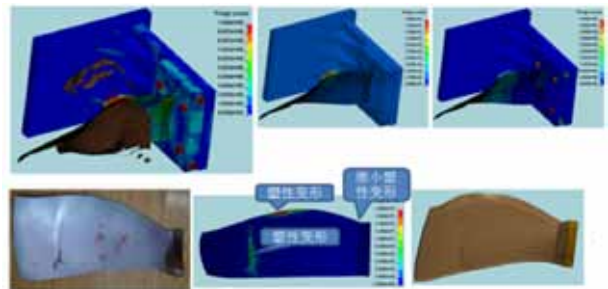
本项目研究如何提高航空发动机包容性数值仿真并行计算效率的问题。由于仿真需要庞大的网格数量、高度的非线性和复杂的接触算法,并行计算效率一直比较低,已经成为制约工程应用的重要因素。为了提高航空发动机包容性数值仿真并行计算效率,本项目提出了在共享内存并行模式(SMP)下,采用自接触算法进行显式动力学分析,提高并行计算效率的方法。实际算例的比较表明,相比传统的面-面接触算法,采用自接触算法可以有效提高航空发动机包容性数值仿真并行计算效率。

	未加密网格	加密网格
计算时间步长	$3.72 \times 10^{-8} \text{ s}$	$2.54 \times 10^{-8} \text{ s}$
1CPU 计算时间	$8.946 \times 10^5 \text{ s}$	$1.316 \times 10^6 \text{ s}$
4CPU 计算时间	$6.028 \times 10^5 \text{ s}$	$8.881 \times 10^5 \text{ s}$
速度提升 S_m	1.4831	1.4818
并行率 r_p	43.43%	43.35%

不同网格精度下FBO计算时间对比

空心风扇叶片鸟撞试验仿真校核分析

航空发动机风扇转子叶片是容易受到飞鸟撞击的飞机部件之一,在设计时必须考虑使航空发动机风扇转子叶片具有抗鸟撞击的能力,降低由于鸟撞击叶片而引起的飞行事故。本项目采用接触冲击算法,对航空发动机风扇转子空心风扇叶片进行了模拟鸟撞击数值仿真,得到了对应试验测试点的模拟鸟撞击叶片的瞬态响应曲线、叶片的位移和当量应力;比较了试验中和数值仿真中模拟鸟撞击叶片的瞬态响应曲线,试验中测试点与数值仿真中对应点的变化基本相同;分析了叶片的变形过程、最大位移和最大当量应力。模拟鸟撞击风扇叶片的数值仿真验证并补充了模拟鸟撞击风扇叶片的试验结果。



鸟撞结果云图

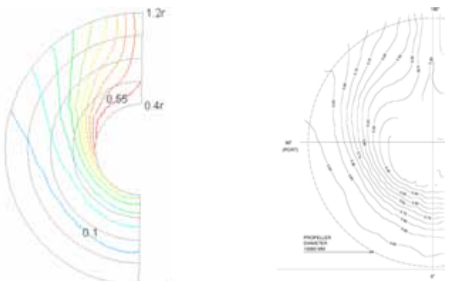
船舶领域

研究课题: 某超大型集装箱船伴流计算

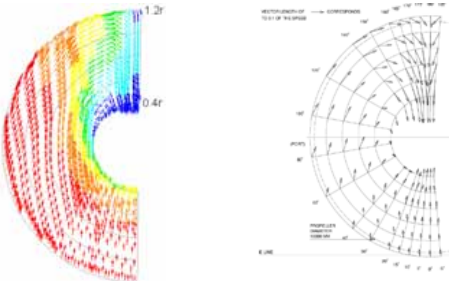
课题来源: 保密

用户单位: 中国船舶工业集团第708研究所

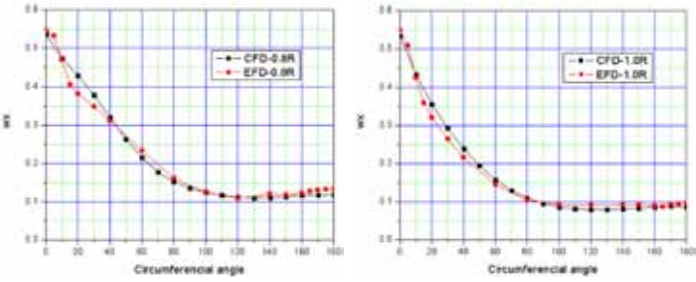
本项目采用数值模拟方法计算了某超大型集装箱船的伴流情况,并通过计算结果与水池试验结果的对比验证了数值方法的可靠性。借助上海超算中心的高性能计算资源,项目获得的伴流计算结果(CFD)与MARIN水池(荷兰)试验值(EFD)差异很小,计算得到的流场信息也为后续的螺旋桨设计提供了很好的依据。



轴向伴流图-轴向速度(CFD) 轴向伴流图-轴向速度(CFD)



桨盘面速度矢量分布(CFD) 桨盘面速度矢量分布(EFD)



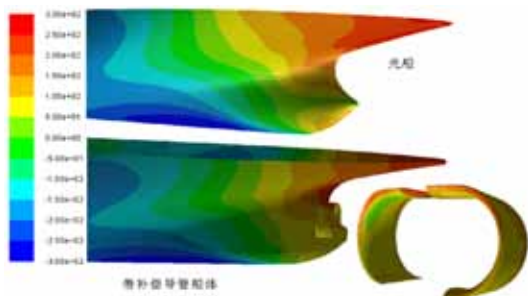
轴向伴流周向分布对比(0.8R) 轴向伴流周向分布对比(1.0R)

研究课题: 某万吨散货船节能装置分析计算

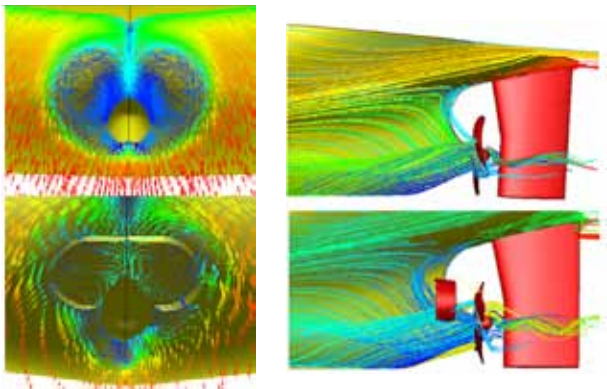
课题来源: 保密

用户单位: 中国船舶工业集团第708研究所

本项目通过数值模拟手段计算分析了船体尾部补偿导管等节能装置的节能效果, 并通过数值计算方法对节能装置的节能原理进行了合理剖析, 为补偿导管等节能装置的设计提供了技术支撑。项目实施过程中数值模拟结果与模型试验和实船试航的结果进行了对比, 三者结果基本一致, 进而验证了模拟分析方法的可靠性。



尾部安装导管压力变化及导管压力分布



船体尾部切面速度矢量对比 船体尾部表面流线对比

	速度(kn)	ESR
Sea trial	14.5	3.3
EFD	14.5	3.5
CFD	14.65	3.78

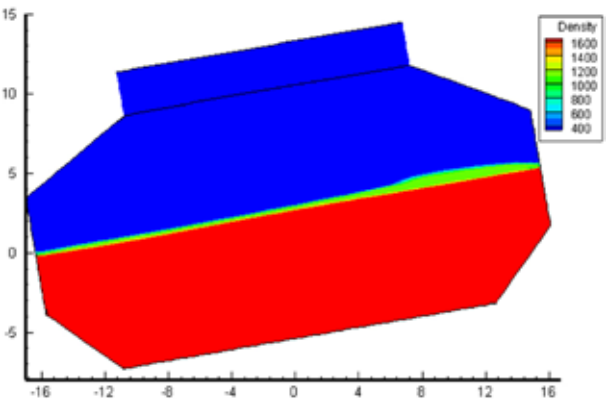
节能效果对比

研究课题: 船载液化矿砂晃荡问题的机理分析和数值仿真

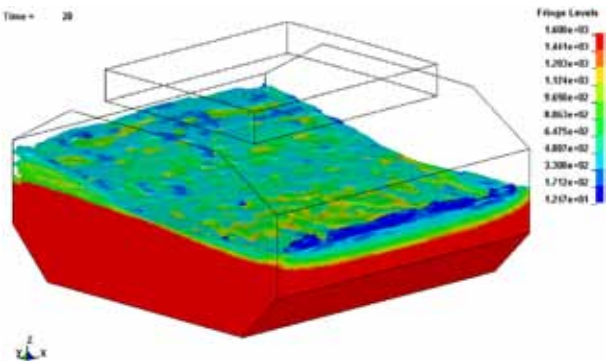
课题来源: 上海船舶运输科学研究所

用户单位: 上海超级计算中心

含水量较高的矿粉货物在海上运输过程中易出现液化, 形成自由液面并使晃荡现象加剧, 严重威胁船舶运输安全。本项目借助超级计算机和FLUENT、LS-DYNA等数值模拟软件, 对液化矿粉大角度晃荡和舱壁冲击现象和过程展开了三维拟实建模和仿真, 对自由液面的变化和倾覆机理、船舱所受各向摇摆力和力矩进行了深入分析。通过压力测点的布置, 并结合不同软件之间以及和实验数据之间的对比, 有效证明了仿真结果的合理性和准确性。



液化矿砂晃荡时的自由液面变化云图



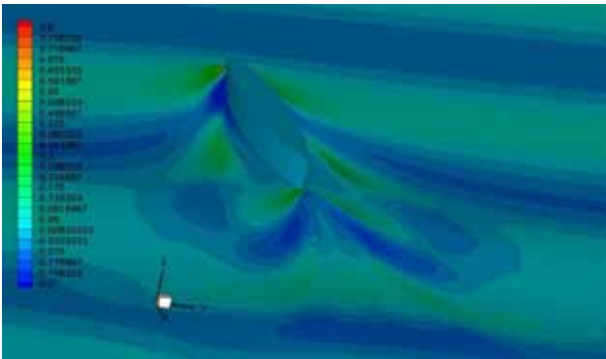
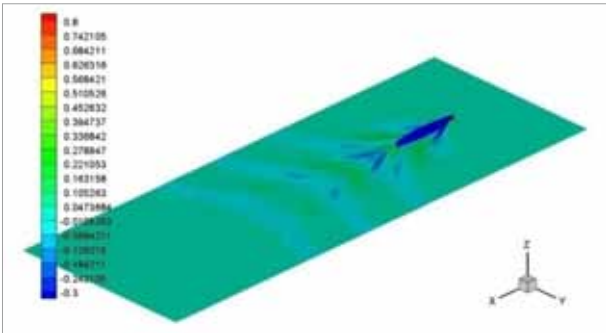
船载矿粉货物晃荡时的三维流体密度云图

研究课题: 船舶运动和波浪增阻的数值模拟研究

课题来源: 上海船舶运输科学研究所

用户单位: 上海船舶运输科学研究所

数值波浪水池是在近几年兴起的一种新的船舶水动力性能研究方法。相对于传统的物理试验, 该方法具有经济花费少、结果数据详细等独特的优势。因此, 运用数值波浪水池手段来展开对船舶水动力性能方面的研究对船舶领域的发展具有较大的促进意义。本项目借助上海超算中心资源, 运用FLUENT软件建立三维粘性数值波浪水池, 数值水池运用VOF模型捕捉自由面, 湍流模型采用RNG雷诺时均模型, 利用其二次开发接口UDF在动量方程中添加源项实现消波区的消波, 最终在数值水池内形成了稳定、准确的规则波波浪。数值模型有助于开展船舶水动力和耐波性能方面的研究。



波面Z向速度云图

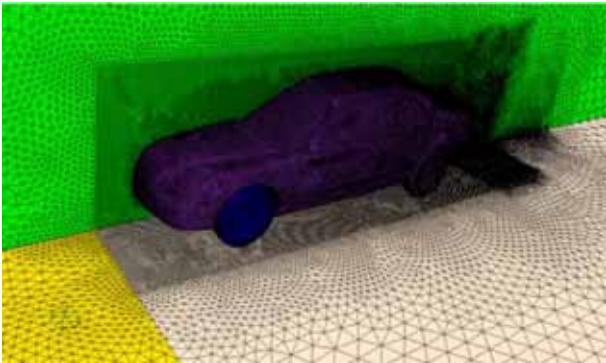
汽车领域

研究课题: 汽车外流场分析

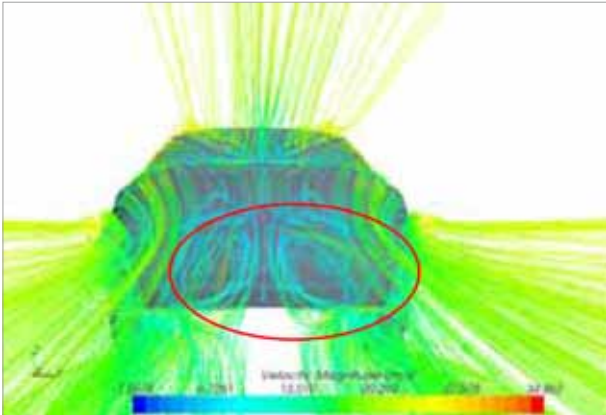
课题来源: 企业研发计划

用户单位: 上海汽车集团股份有限公司技术中心

汽车外流场分析直接影响汽车的外形设计、性能改良、燃油经济性、操纵舒适性、安全性和噪声水平等。因此整车外流场分析在车型研发中占有重要地位。汽车外流场数值模拟方法对降低成本、缩短研发周期、提高产品的自主开发设计能力也具有重要意义。本项目以上汽自主品牌某车型为案例开展数值仿真计算, 通过与实验和设计数据进行对比, 得到了比较合理的结果。汽车外流场分析具有计算规模大、计算时间长、工况复杂等特点, 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, 为车身外流场分析等提供了强有力的支撑和服务, 满足了车型研制过程中的高性能计算需求。



车身外流场网格分布



车身表面流线图

研究课题: 汽车仪表板安全气囊点爆仿真

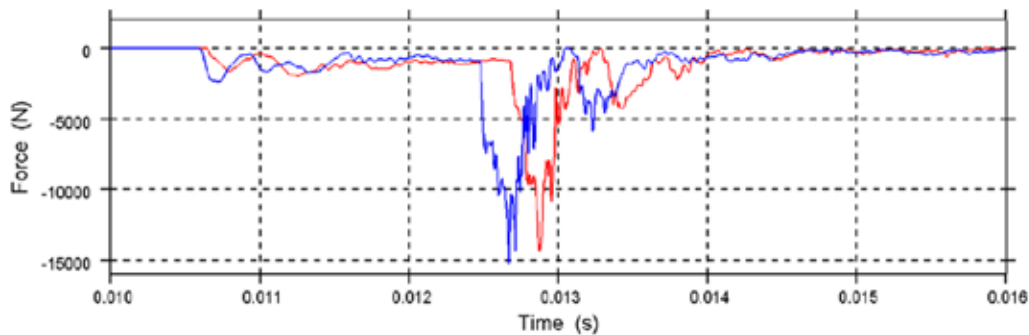
课题来源: 某汽车制造商

用户单位: 延锋汽车饰件系统有限公司

汽车安全一直是倍受关注的问题，随着汽车工业的高速发展，行驶中的汽车安全问题正变得越来越重要。被动安全除了安全带以外，安全气囊也是大多数汽车的标准配置。尽管气囊的点爆仿真计算牵涉到塑料材料的高低温性能、气袋折叠方式、气体发生器简化、气袋的织物材料参数、流固耦合、非线性接触等多方面难题，但为了减少设计风险，最大限度降低安全气囊点爆的失效风险，在前期对气囊点爆进行仿真计算仍然是非常必要的。本项目采用显式动力学软件——dyna进行建模，在上海超级计算中心高性能计算平台上进行计算。目前的气囊仿真在预测气囊的展开形态、气囊门塑料铰链撕裂、气囊门冲击前风挡玻璃导致玻璃的破碎等方面，均提供了很好的指导作用。



气囊展开形态



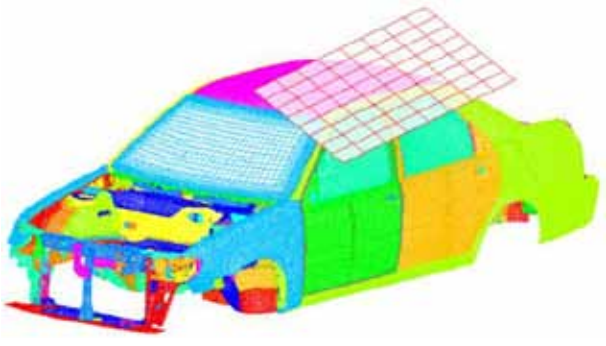
气囊门与仪表板骨架的作用力

研究课题: 轻量化车身车顶抗压设计优化

课题来源: 上海市科技人才计划

用户单位: 上海汽车集团股份有限公司技术中心

为保证轻量化车身的车顶在滚翻事故中有足够的强度抵抗变形，本项目参考美国的有关标准对车顶进行抗压强度有限元分析。项目采用拉丁超立方方法进行虚拟试验设计(Design of Experiment, DOE)。根据虚拟DOE结果分析车身侧围和顶部部件的敏感度，得到最敏感的6个部件；采用微分进化算法对这些部件进行优化计算，并用高强度材料替换，达到保证抗压性、经济性并减轻部件质量的目的。



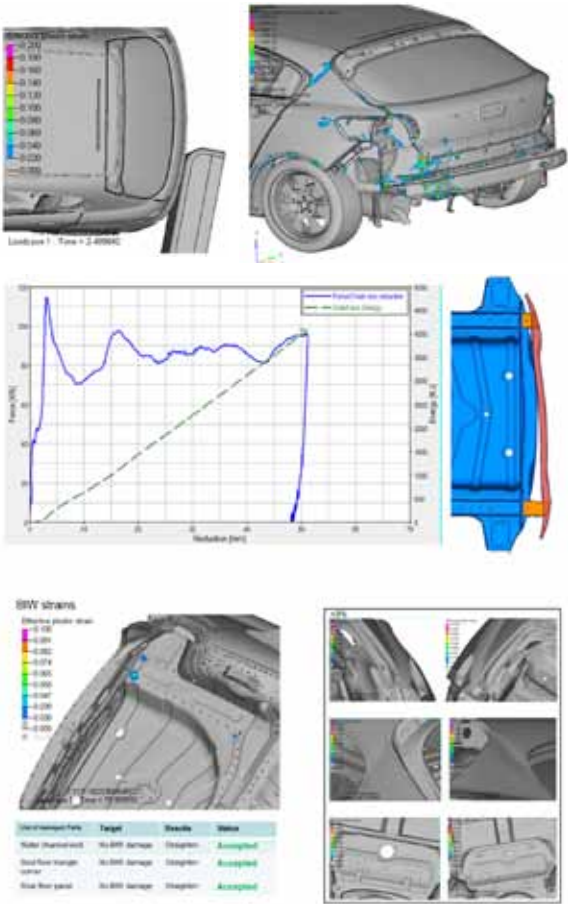
车顶抗压仿真模型示意图

研究课题: RCAR分析

课题来源: 客户项目

用户单位: 上海世科嘉车辆技术研发有限公司

RCAR全称Research Council for Automobile Repairs, 是一个关于汽车保险维修类研究的国际组织机构。RCAR分析的主要目的是当汽车发生碰撞事故后, 研究如何最大限度地降低车辆维修成本以及减轻乘员的伤害, 进而推动汽车制造商提高整车的碰撞抵抗能力和零部件维修性能。RCAR分析可以缩短设计周期, 减少设计经费。该工作计算量大, 任务繁重, 因而必须具备充足的计算资源才能达到预期效果。上海世科嘉车辆技术研发有限公司与上海超级计算中心达成协议, 利用其计算资源进行RCAR计算, 对整车设计方案进行优化, 以降低汽车维修成本, 提高整车安全性能。



优化后仿真结果

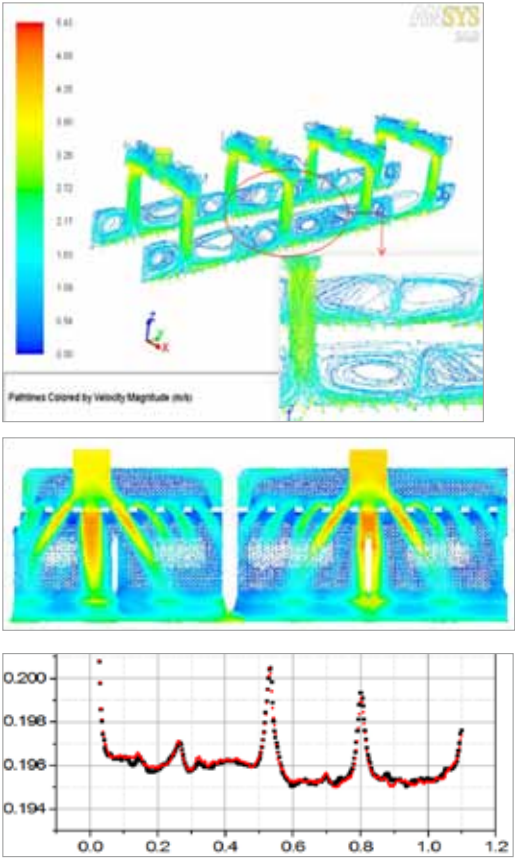
钢铁领域

研究课题: 淬火机喷水系统水流场分析

项目来源: 宝钢研究院

用户单位: 上海超级计算中心

淬火冷却系统是淬火机的重要组成部分, 是对钢板调质产品起决定作用的重要装备之一, 其核心技术仅被国外少数几家装备制造企业掌握。针对目前的形式, 宝钢研究院与上海超级计算中心合作, 针对宝钢引进的淬火机冷却设备进行水流场分析。本项目通过计算分析淬火机冷却水系统各个区段结构内部的流动情况, 获得了高压段多排喷嘴管和单排喷嘴管、低压段喷嘴管的流量分布情况, 着重针对狭缝水刀水冷结构进行了系统分析, 并在此基础上进行了一系列的参数优化尝试, 为喷嘴的改进和结构的优化提供了有利参考。



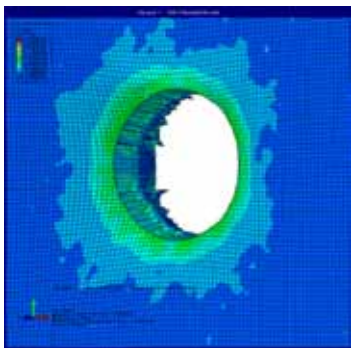
冷却系统水流场及流量分布

研究课题: 子弹击穿钢板的模拟

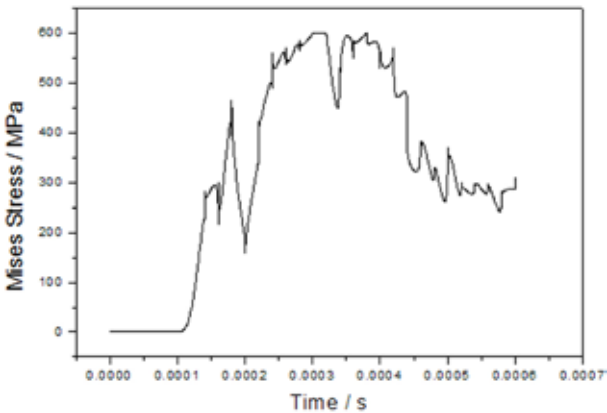
项目来源: 企业研发

用户单位: 宝钢研究院

装甲为不同的应用对象提供保护作用。低合金高强度钢早已引起人们的重视, 由于其高强度和对能量的吸收作用, 被大量用来制作保护人员、军事和非军事车辆的装甲。在装甲钢板投入使用前, 必须对其进行力学评估以确保其具有抵挡子弹的能力。故装甲钢和防弹钢的设计是非常谨慎的。产品设计时采用abaqus软件预先对子弹击穿钢板进行模拟计算, 是非常有用的一个节约成本、提高效率的手段。本研究采用了不同的钢板设计方案, 通过模拟计算, 得出一个装甲钢和防弹钢设计优化方案, 为实际产品设计提供了理论支持。该项目涉及大量的数值仿真计算工作, 上海超算中心为此提供了计算平台的支持。



钢板的穿孔状态



钢板被击穿过程局部应力

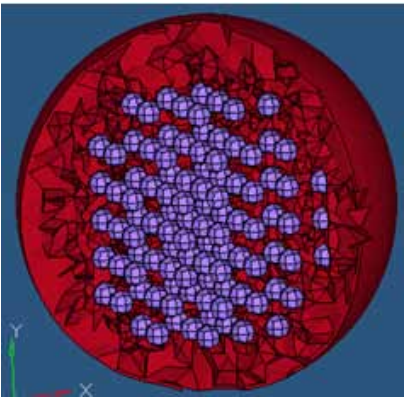
电气领域

研究课题: 金属石墨球感应加热数值模拟

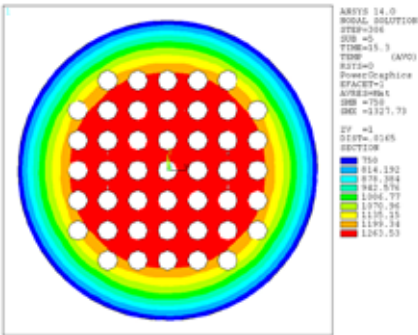
项目来源: 上海应用物理所放射化学部

用户单位: 上海超级计算中心

感应加热是利用工件中涡流的焦耳效应将工件加热。该方法具有效率高、控制精确、污染少等特点, 在工业生产中得到了广泛的应用。然而基于试验的传统设计方法耗时费力, 并且成本高, 因此, 数值模拟技术在感应加热中的应用具有重要意义。本项目以金属石墨球为研究对象, 建立了电磁场与温度场耦合的有限元数学模型, 利用通用有限元分析软件ANSYS对金属石墨球的感应加热过程进行了模拟分析。项目考虑了材料随温度变化的非线性特征以及多场顺序耦合方法, 得到了石墨球温度随加热时间变化规律, 并对不同加热频率和电流密度下石墨球感应加热效果进行了分析。计算结果对开展石墨球感应加热实验提供了参考。



金属石墨球模型



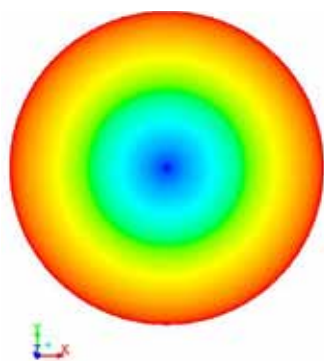
XY截面温度分布

研究课题: MOCVD反应腔体数值模拟

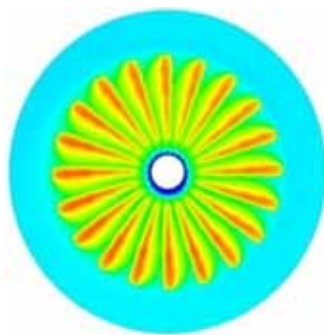
项目来源: 理想能源设备(上海)有限公司

用户单位: 上海超级计算中心

采用计算流体力学的方法对MOCVD反应腔体内的流场及化学反应进行数值模拟, 能够直观的获得反应器内各组分的浓度分布、温度分布、流动状况及表面反应的速率与均匀性等信息。而这些信息难以通过实验来较为全面的获得。因此, 数值模拟能够大大提高实验效率, 降低生产成本。上海超级计算中心受理理想能源设备(上海)有限公司之托, 开展MOCVD反应腔体的数值模拟工作, 对反应腔体的输入参数及结构特点进行模拟分析, 从而改进操作条件, 优化工艺及结构设计。为设计能够均匀稳定生长薄膜晶体的反应器提供了有利参考。



速度分布



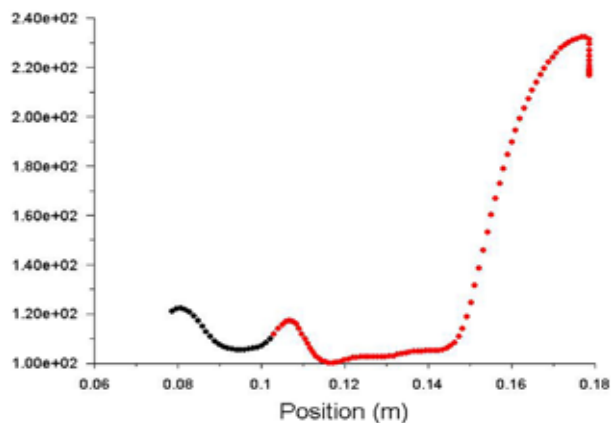
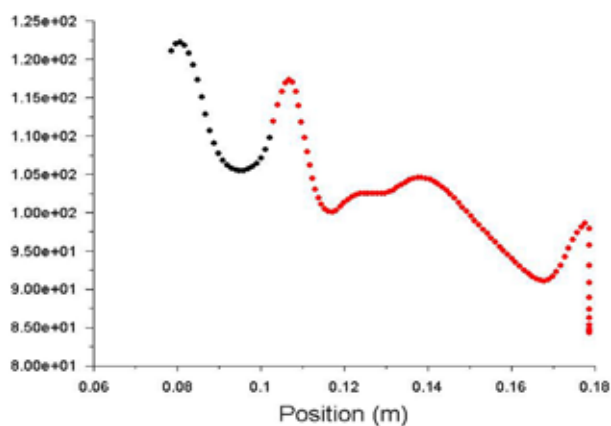
H2浓度分布

研究课题: MOCVD反应腔壁的温度研究

项目来源: 中微半导体设备有限公司

用户单位: 中微半导体设备有限公司

中微为全球半导体制造商及其他新兴高科技产业的领先公司提供先进的微观加工高端设备, MOCVD是其有竞争力的产品之一。MOCVD运行时, 放置衬底的载体会达到很高的温度, 同时放出大量的热量使反应腔壁升温。控制反应腔壁的温度对于MOCVD的性能稳定性有着重要的意义。本项目使用了DO辐射模型对这个问题进行分析研究。通过上海超级计算中心“魔方”超级计算机的计算, 项目成功地研究了相关结构和条件对反应腔壁温度的影响, 为之后的工程设计打下了良好的基础。



反应腔体壁面温度

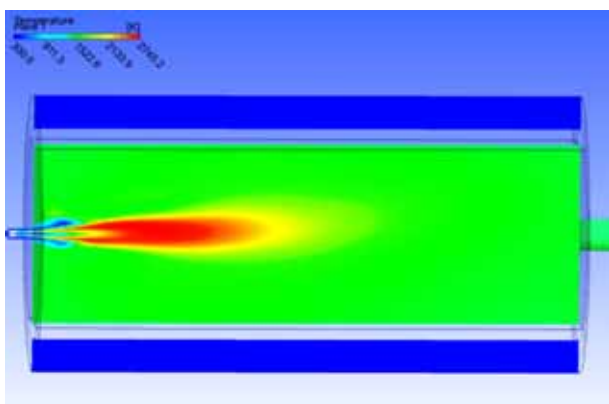
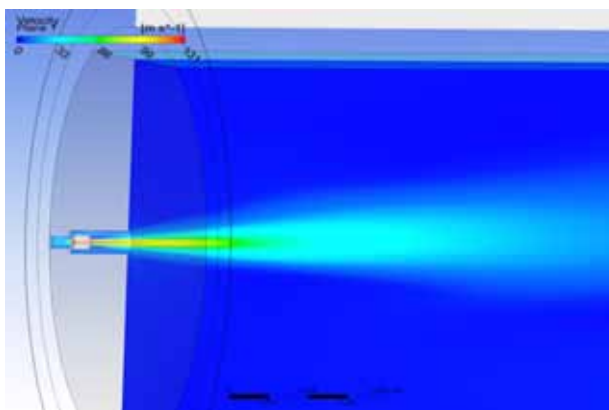
产品设计

研究课题: 燃烧器燃烧过程模拟分析与优化设计

项目来源: 普莱克斯(中国)投资有限公司

用户单位: 普莱克斯(中国)投资有限公司

本项目采用FLUENT流体分析软件,研究燃烧器不同结构对燃烧温度场、流场和火焰形状的影响,以及燃烧过程中的详细过程以确定出最佳的设计工况。上海超算中心为本项目提供了所需要的软硬件资源,同时由于计算工况种类多,上海超级计算中心高性能计算平台,为模拟提供了强有力的支撑和服务,加速了模拟优化设计工作的进程。



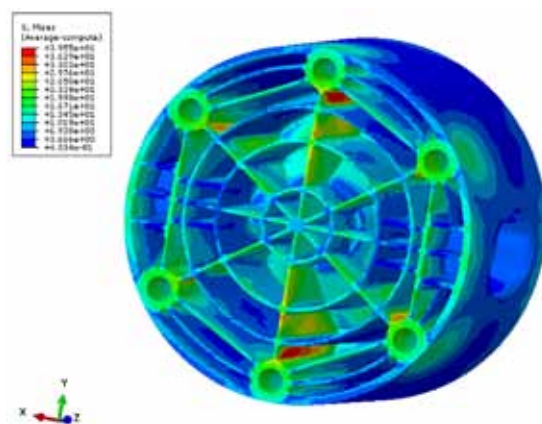
燃烧器速度场和温度场分布

研究课题: 计量泵液力端端盖结构静力分析与疲劳寿命计算

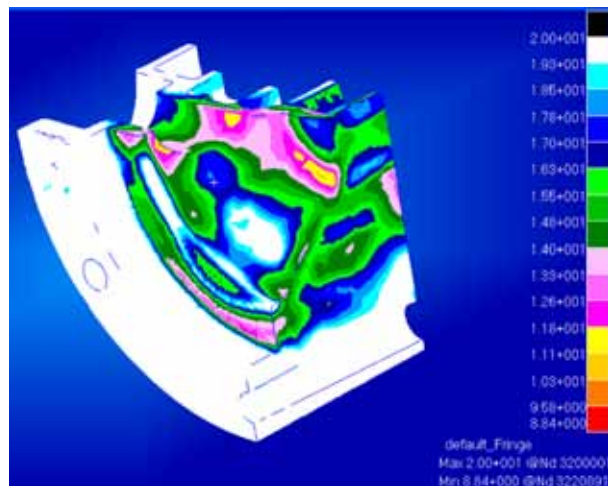
项目来源: 上海超然模具成型有限公司

用户单位: 上海超级计算中心

计量泵液力端端盖设计时除关注端盖承受流体高压性能外,还需留意流体压力波动所形成的循环载荷对产品使用寿命的影响。端盖CAD设计人员在现有产品设计方案基础上提出了另一种改型方案,但对两种不同设计方案下产品的使用性能无法确定。本项目借助ABAQUS等有限元软件,首先得到了端盖承受最大载荷时的结构应力场,并进行了强度校核,再基于液力波动引起的交变应力场完成了产品疲劳寿命分析,最后通过计算对比挑选出了优选设计方案。



液力端端盖承受最大设计载荷时的Mises应力分布



液力端端盖寿命分布云图

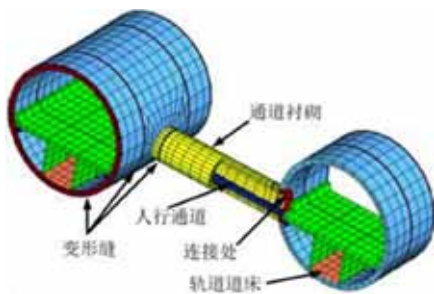
市政建设

研究课题: 列车载荷下隧道联络通道模型动态响应仿真的并行计算

项目来源: 国家自然科学基金

用户单位: 上海交通大学机械与动力工程学院, 机械系统与振动国家重点实验室

本项目以上海某大型双线隧道为例, 建立了列车-隧道-联络通道-土体的大型三维有限元模型, 并基于上海超算中心“魔方”超级计算机, 设计了列车隧道动态耦合均衡的分区方法, 解决了因模型规模庞大而造成计算量大的问题。项目还分析了列车载荷下联络通道结构的动态响应, 比较了不同分区方案的计算效率。结果表明: 列车载荷在联络通道与隧道连接部位引起的附加动应力较小, 但该位置处于较高的应力水平, 应尽量避免在联络通道位置会车; 列车隧道耦合均衡的分区方法比常用的递归坐标二分法具有更高的并行效率。



隧道-联络通道有限元模型

CPU 数	递归坐标二分法			列车隧道耦合均衡分区法		
	并行效率/%	耗时/h	加速比	并行效率/%	耗时/h	加速比
1	164.28	1.00	100.00	164.28	1.00	100.00
8	25.92	6.34	79.25	22.62	7.26	90.75
16	14.34	11.46	71.63	12.46	13.18	82.38
32	9.62	17.08	53.38	7.56	21.73	67.91

并行计算结果

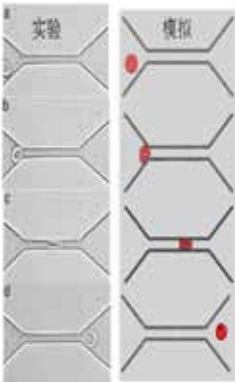
机理研究

研究课题: 红细胞变形的数值模拟

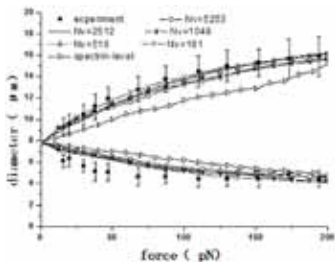
项目来源: 国家自然科学基金

用户单位: 同济大学

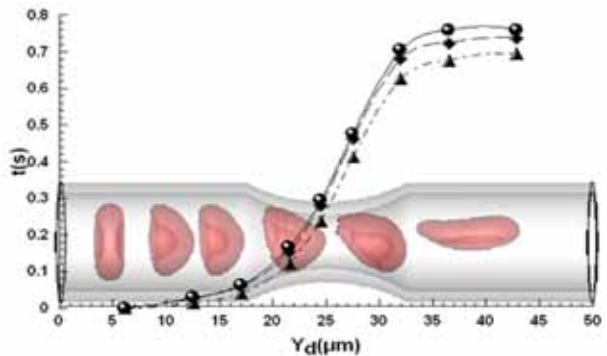
红细胞在血液循环中将氧气送到各组织并将二氧化碳带走, 不断地通过一些直径在微米级别的毛细血管, 所以具有较强的变形能力。红细胞的变形能力影响了血液的流变特性、细胞的结构以及运动。本项目采用介观尺度模拟方法-耗散粒子动力学方法以及粗粒化的三维网络结构的红细胞膜模型研究红细胞的变形, 通过与实验对比验证细胞膜模型的可行性, 模拟红细胞在毛细血管中的运动变形过程, 探究红细胞的变形能力的影响因素以及其对红细胞运动的影响。项目采用的高性能计算技术实现了含有大量红细胞的血液流动模拟, 从而可以研究血液流变特性。



红细胞在微通道内的运动变形模拟(右)以及与实验对比(左)



不同粒子数的红细胞拉伸结果以及与实验值的对比



不同刚度的红细胞在血管狭窄处的运动时刻与位置的关系对比

软件研发服务

高性能计算研发

为提升上海超级计算中心技术能力和用户服务能力，中心2013年积极开展高性能计算研发工作，包括高性能计算平台研发、并行计算研发和国家科研项目等三类。

高性能计算平台Xfinity

Xfinity研发进展

2013年中心Xfinity的研发包括两个分支同步进行，分别是Xfinity功能版本和Xfinity HPC Cloud版本。

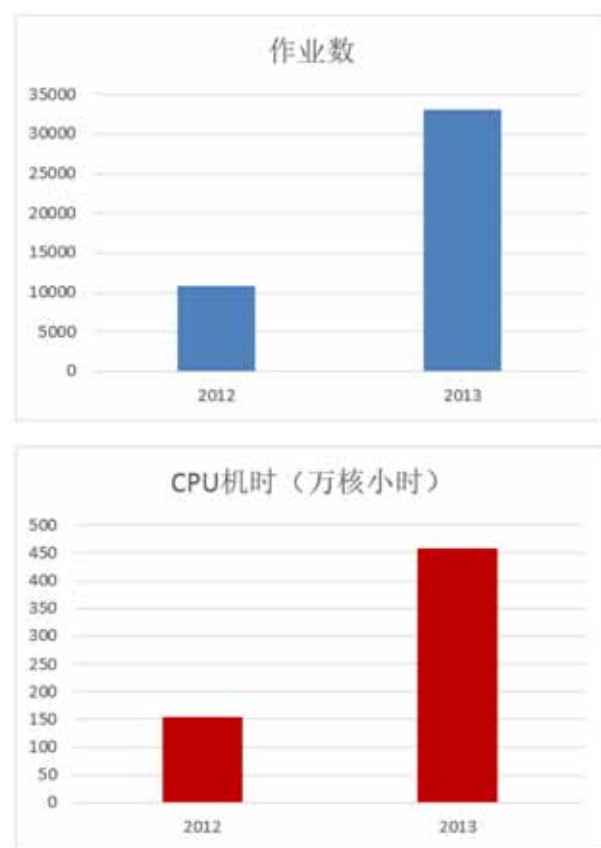
Xfinity功能版本在2013年共开发四个小版本，主要功能包括新增了远程桌面和license浮动功能，完善了对应用软件前后处理的支持；重构优化作业模版机制并提供便捷的模版开发工具开放给管理员使用；新增技术支持角色，添加对用户行为的统计和对异常作业的诊断功能，逐步完善对用户的技术支持功能；优化了命令行访问方式，可以更好地支持科学计算用户；添加了更多与应用结合的功能，包括dyna作业预计排队时间，starcd、starccm+等作业的残差曲线等；优化了主机帐号管理流程，与中心MIS互通。

Xfinity HPC Cloud在2013年研发完成了两个版本demo，主要功能包括计费系统和应用中心。在与Xfinity松耦合的计费系统中提供了计费帐号的状态和额度的管理、使用记录查询统计等功能，提供了计费策略的定制和管理；应用中心面向终端用户，提供了高性能计算相关资源的管理。

Xfinity使用情况

截至2013年末，Xfinity平台累计活跃的用户数达到307位，共提交了60622个作业，机时约为8347193核小时，其中作业机时和作业数均达到2012年的三倍。

2013年与2012年使用情况对比如下图：



2013年每个月的作业数见下图：



并行计算研发

系统测评

本年度中心与Intel和NVIDIA公司合作,分别测试了Intel最新处理器产品SandyBridge的性能和最新协处理器Intel® Xeon® Phi™产品KNC 3115A和KNC 7110P的性能,同时,还对NVIDIA最新GPGPU产品Tesla K20m加速卡进行了测试。协处理器部件需与CPU协同才能完成计算任务,测试中使用的CPU均为Intel®SandyBridge产品E5-2670。测试采用的基础类基准测试程序有HPL(浮点计算性能)、STREAM(访存性能)、IMB(点到点传输性能)、DGEMM(矩阵乘)、FFT(快速傅立叶变换)等,科学计算应用程序主要为分子模拟软件,如Gromacs、NAMD、LAMMPS等,工程计算软件为Abaqus。各部件测试情况概述如下:

(1) 处理器测试

处理器测试平台为4路8核E5-4650。与“魔方”系统相比,该处理器表现出了良好的计算能力和加速性能,能很好的应对复杂的高性能计算应用。

(2) NVIDIA® Tesla® Kepler™测试

NVIDIA® Tesla® Kepler™ 20m 是NVIDIA公司推出的新款CUDA架构的GPGPU。通过测试发现,对计算核心函数矩阵乘、快速傅立叶变换,K20m有较高加速比;对于工程计算应用Abaqus 6.12-1 版本的Standard求解器,GPU加速性能相比Fermi架构更高,且16个CPU核时GPU加速性能也有所改进;分子模拟软件在GPU协处理器下,表现出非常好的绝对计算性能,GPU性能相对至强2路E5-2670有2倍以上加速。

(3) Intel® Xeon® Phi™测试

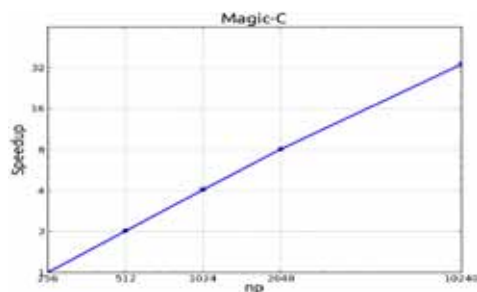
测试的Intel® Xeon® Phi™协处理器包括KNC 3115A和KNC 7110P两个型号,测试主要对比协处理器与2路至强E5-2670处理器的性能,并考查协处理器在不同工作模式(Native、OFFLOAD)下的性能表现。测试发现要想在协处理器上获得好的加速性能,必须针对性地对代码进行优化,与NVIDIA GPGPU类似。所不同的是,Intel的协处理器在不要求性能的情况下,具有不修改代码、或少量修改代码就能在协处理器上运行的易于移植的特性。

自研并行代码

SSC-FDTD

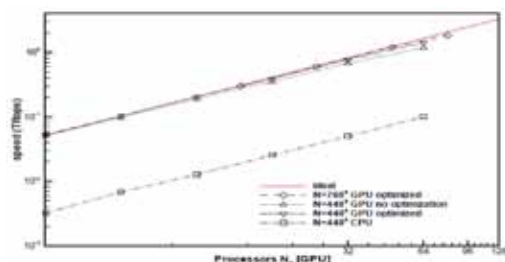
SSC-FDTD是以FDTD算法为基础基于C语言构建的FDTD并行模拟程序。本年度中心先后完成了该程序的串行、并行(MPI实现)、异构并行(GPU和MIC)版本及相关的优化工作,并在不同的平台上进行了性能测试。

SSC-FDTD选取 $2048 \times 1024 \times 1024$ 的计算规模在中心的“魔方”超级计算机上进行了CPU版本程序测试,共使用内存768GB。以256 CPU核测试数据为基准,该软件10240的并行效率达到了85.12%。



SSC-FDTD并行软件对 $2048 \times 1024 \times 1024$ 计算规模的并行加速比

GPU版本的SSC-FDTD的性能在上海交通大学高性能计算中心的“ π ”超级计算机的GPU集群上进行了测试。



GPU版本SSC-FDTD性能测试

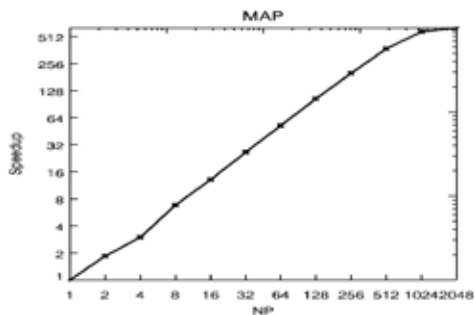
使用 $448 \times 448 \times 448$ 规模,SSC-FDTD在“ π ”上分别测试了CPU和GPU平台上的性能。初始的CPU版本和GPU版本程序的并行效率分别达到了97.1%(使用64CPU核)和71%(使用64块Tesla K20m卡)。GPU版本在经过优化后,在原有的规模下($448 \times 448 \times 448$,使用64块卡),并行效率提高到了84%,在扩大规模下($768 \times 768 \times 768$,使用80块卡),并行效率达到了95%。

MIC版本的SSC-FDTD在中心的实验集群进行了测试，共使用了2块Intel Xeon Phi 7110P协处理器卡。测试结果显示，在native模式下，相比16核CPU（2路8核Intel Xeon E5-2670），单块7110P卡的性能要高约9.9%，2块7110P的并行效率约为40%。MIC平台相关的优化工作还在持续进行中。

MHD

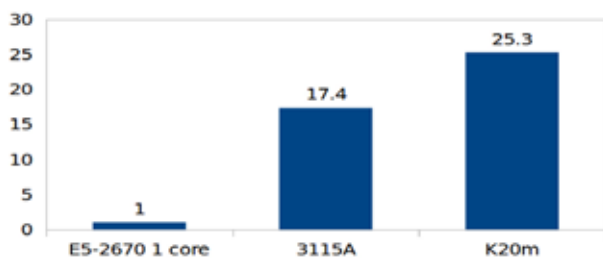
磁流体（MHD）计算程序通过数值求解MHD方程组来模拟等离子体与磁场的相互作用，以得到等离子体的物理特性和运动状态。此程序使用了二阶精度的WENO（weighted essentially non-oscillatory）格式。WENO是用于处理如MHD等此类双曲方程组的二阶精度、二步、分量形式的格式，计算十分的简单、迅速和高效。

二维MHD程序在“魔方”超级计算机上的1到2048核计算加速比见下图，使用的计算规模为 800×800 。由图上可看出，在512核以内，加速比曲线接近于直线；超出512核之后，由于计算量减小通信比例增加，并行效率迅速降低。



二维MHD程序加速比曲线

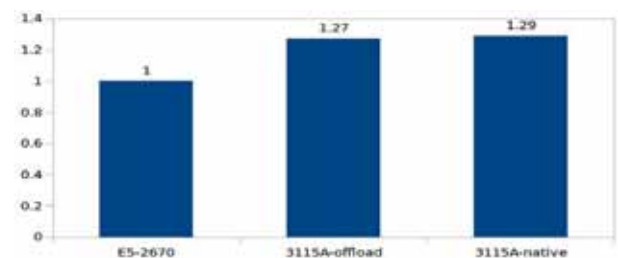
一维MHD程序在GPU和MIC平台上进行了测试，测试使用的硬件分别为Intel E5-2670 cpu单核、Intel Xeon Phi KNC 3115A协处理器一块和NVIDIA Tesla Kepler 20m GPGPU卡一块。计算程序没有包含 MPI 通讯过程，计算规模为 640000 个格点，内存量大概为 200MB，结果如下：



一维MHD程序加速比测试

3115A 相对于E5-2670单核的加速比为 17.4 而 K20M 达到了25.3。E5-2670 单核、3115A 和 K20m 的理论峰值计算性能分别为 20.8 GFlops、1.003 TFlops、1.17 TFlops。按理论计算，3115A 和K20m 的加速比可以达到48倍和56倍。这表明此 MHD 程序没有完全发挥出 3115A 和 K20m 的性能。可能的原因在于此 MHD 算法比较简单，显存的延迟没有被完全掩盖于计算之中。另外，从理论峰值上看，3115A 和 K20m 的性能是比较接近的，但是实际上 K20m 的加速比却大于 3115A 近 50%之多。虽然 MIC 移植的方法比较简单，但是想要完全发挥出 3115A 的性能很大程度上取决于 INTEL 编译器，程序员在其中的干预则相对较少。CUDA 编程虽然比较难入手，但是可以从更加底层的核心函数的编写来控制数据的处理与计算，从而达到更高的效率。

二维MHD程序也进行了相应的测试，并比较了MIC计算的Native模式和Offload模式。计算的规模为 800×800 。



二维MHD程序加速比测试

图中E5-2670使用了8核计算，3115A的offload模式（密集计算放入MIC上计算）相对于E5-2670的加速比只有1.27，而native模式（所有计算全部在MIC上计算）也只有1.29。效率低下的可能原因在于3115A使用OpenMP进行计算。对于一个拥有228个线程的3115A来说， 800×800 的计算规模会产生负载不平衡的缺点。此外，计算过程中某些求最大值最小值的归约操作也会降低效率。虽然MIC移植过程比较简单，但是在效率的提升上很大程度要依赖编译器的优化程度，因而MIC还有很大的发展空间。

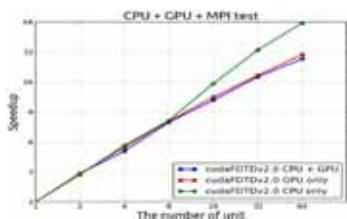
国家科研项目

复杂电磁环境数值模拟

本课题针对我国民用和国防领域的复杂电磁环境模拟需求,探索利用高性能计算硬件和软件技术加速仿真模拟过程的研发项目。本课题属863计划“高效能计算机”项目,由西安电子科技大学承担,上海超算中心主要负责时域有限差分(FDTD)算法在异构平台的实现与优化,以及相关数学库在CPU集群上的性能测试。

2013年度,中心完成了:(1)FDTD算法在异构平台移植;(2)50万规模的复数矩阵矩阵乘(ZGEMM)和矩阵向量乘(ZGEMV)在“魔方”超级计算机上的万核计算规模的测试;(3)FDTD并行程序在“魔方”超级计算机上的万核计算规模的测试;(4)DGEMM程序在MIC平台上的测试。

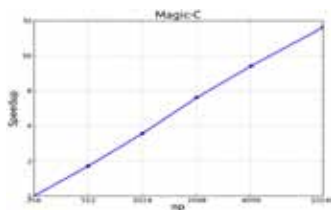
FDTD算法异构平台移植。该项工作是基于项目主承担单位(西安电子科技大学)的FDTD并行代码进行的,目的是充分利用CPU的计算能力和内存空间,进行CPU和GPU协同计算。测试工作在上海交大高性能计算中心的“ π ”集群上完成,性能数据见下图:



CPU+GPU协同计算性能测试

通过测试发现,cudaFDTD版本有较好的加速比,但是CPU+GPU混合计算的并行效率与纯GPU相比略有下降。

FDTD并行程序万核计算规模测试。万核计算规模测试中选取的计算规模为 $2048 \times 1024 \times 1024$,在256至10240个CPU核上的加速比见下图。以256核的单步计算时间为基准,10240CPU核的并行效率为70%。该并行软件已经达到项目初期设定的万核处理器并行效率不低于50%的要求。



FDTD并行软件对 $2048 \times 1024 \times 1024$ 计算规模的加速比

数学库测试。进行了50万规模的复数矩阵矩阵乘(ZGEMM)、矩阵向量乘(ZGEMV)和LU分解(矩量法MOM核心数学函数)的万核计算规模测试,其中矩阵矩阵乘由于内存过大无法计算,LU分解的计算效率为19.7%。此外,在Tesla K20m、Intel Xeon Phi 7110P和Intel Xeon Phi 3115A等异构平台上进行了DGEMM的性能测试和分析。

2013年度科研项目的其它成果包括发表论文两篇,并受邀在GTC会议作报告等。

高性能综合计算服务平台建设

本课题已于2013年8月顺利通过上海市科委组织的专家验收。课题建成了高性能计算综合服务平台,该平台为用户提供更为便捷、友好的高性能计算公共服务,整合了251Tflops高性能计算资源,集成了34个工程计算和科学计算典型应用软件,可对外提供机时租赁、工程咨询、应用开发等服务。平台服务领域广泛,涉及航空航天、船舶、汽车、钢铁、核电、材料加工、半导体、物理、化学、生物等,服务对象包括商飞、宝钢、中科院技物所等80多家单位。

课题组取得一大批有价值的应用成果,产生典型应用服务案例28个,申请专利1项,登记软件著作权1项,发表论文2篇。

大型工程设备结构力学并行计算软件及应用

本课题面向核电工程和地下工程这两大领域,研制大型应用软件系统——“大型工程设备结构力学有限元并行计算软件”,解决工程设计中所遇到的复杂结构力学问题,为工程设计提供理论依据和技术支撑。本课题属863计划“高效能计算机”项目,由上海交通大学承担,上海超级计算中心配合上海交大完成了并行有限元网格划分软件的研发任务。2013年,并行有限元网格划分软件在“魔方”超级计算机上针对2个几何模型完成了万核计算规模的测试。测试数据显示,在100亿网格单元情况下,其万核计算效率分别达到70.4%和62%。

媒体报道情况

2013年,上海超级计算中心围绕“魔方”超级计算机的投入使用、上海超算分中心的成立和科普活动为主题,邀请社会各类媒体对中心活动进行宣传报道。《解放日报》、《文汇报》、《新民晚报》、《浦东时报》、《张江报》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2013年重要报刊杂志对中心的相关报道。



Feature
新视界
Feature
2013年12月11日 星期三 第1100期

超级计算机十大主要应用

- 1. 天气预报
- 2. 基因测序
- 3. 石油勘探
- 4. 金融分析
- 5. 工业设计
- 6. 药物研发
- 7. 航空航天
- 8. 军事模拟
- 9. 气候变化
- 10. 人工智能

超级计算机十大主要应用

GE中国研发中心与南京大学强强联合 行业废水处理技术开发成功

废水回收率高达99%，成本大幅下降



GE中国研发中心与南京大学强强联合，行业废水处理技术开发成功。废水回收率高达99%，成本大幅下降。

浦东 ECONOMY 期待自贸试 企业布

【本报综合报道】随着自贸区的设立，浦东新区的企业正积极布局，期待在自贸区内开展更多业务。据浦东新区商务委表示，目前已有超过100家企业向自贸区管委会提交了备案材料，其中不乏知名的大企业。这些企业主要分布在金融、贸易、航运和制造业等领域。浦东新区政府表示，将全力支持企业在自贸区内开展业务，并提供一系列优惠政策和便利措施。同时，浦东新区也将加强监管，确保自贸区的健康发展。

超级计算的“上海面孔”

【本报综合报道】“东方明珠”上的超级计算中心，正成为上海的一张亮丽名片。这座位于浦东新区的超级计算中心，是目前国内规模最大的超级计算中心之一。该中心配备了先进的超级计算机，能够处理海量的数据，为科学研究、工业生产和城市管理提供强大的计算支持。该中心的建设，不仅提升了上海在超级计算领域的地位，也为上海的科技创新和产业升级提供了有力的支撑。



上海超算开展用户交流系列活动

【本报综合报道】上海超级计算中心近日开展了一系列用户交流活动，旨在加强与用户的沟通，提升服务水平。活动包括举办用户座谈会、技术交流会和现场演示等。在座谈会上，中心工作人员认真听取了用户的意见和建议，并对用户提出的问题进行了详细解答。在技术交流会上，专家们就超级计算的最新技术和应用进行了深入探讨。现场演示则展示了中心强大的计算能力和广泛的应用场景。通过这些活动，中心不仅增进了与用户的了解，也进一步巩固了其在行业内的领先地位。

文汇报

中欧都要反对各种形式保护主义

一张“办公桌” 推诿成难事

【本报综合报道】在推进长三角一体化发展的过程中，一张“办公桌”的推诿现象引起了广泛关注。据报道，一些地方政府在涉及跨区域合作的事项上，往往互相推诿，导致项目进展缓慢。这种现象不仅影响了长三角地区的协同发展，也损害了政府的公信力。对此，有关方面表示，将采取有效措施，加强部门之间的协调和沟通，确保各项事务能够高效运转。同时，也将加大对推诿行为的查处力度，确保各项政策能够落到实处。

千余品牌亮相国际乐器展览会

【本报综合报道】近日，一场规模宏大的国际乐器展览会在上海举行，吸引了来自世界各地的千余个品牌参展。展览会上展示了各种类型的乐器，包括钢琴、小提琴、大提琴等。参展品牌涵盖了从知名大牌到新兴品牌，展示了乐器行业的最新技术和产品。此次展览不仅为乐器爱好者提供了一个交流的平台，也为乐器制造商提供了一个展示实力的舞台。展览期间，还举办了多场精彩的演奏会，吸引了众多观众前来参观。

安全核电对超级计算提高需求

【本报综合报道】随着核电技术的不断发展，对超级计算的需求也在不断提高。特别是在核电站的安全运行和事故处理方面，超级计算发挥着至关重要的作用。通过强大的计算能力，可以模拟核电站的运行状态，预测可能出现的安全隐患，并及时采取应对措施。此外，在核废料处理和核能利用等方面，超级计算也具有重要的应用价值。因此，提高超级计算的水平和能力，对于保障核电的安全运行和推动核能产业的发展具有重要意义。

“肺”清了“利益雾霾”难消 “芯”慢了 超级电脑“失速”

【本报综合报道】在推进超级计算发展的过程中，面临着诸多挑战。一方面，利益关系的复杂使得一些关键问题的解决变得困难；另一方面，核心技术的瓶颈使得超级计算机的性能提升速度放缓。这些问题严重制约了超级计算的发展，也给相关领域的研究和应用带来了不利影响。对此，有关方面表示，将采取有效措施，破除利益壁垒，加大核心技术攻关力度，推动超级计算技术的突破和进步。同时，也将加强国际合作，引进先进技术，提升我国在超级计算领域的竞争力。

月最佳

【本报综合报道】本月最佳评选活动已经结束，多位优秀人士脱颖而出。这些获奖者在各自领域取得了卓越成就，为社会做出了重要贡献。他们的优秀事迹得到了广大群众的认可和赞誉。此次评选活动旨在表彰先进，树立榜样，激励更多人积极向上，为社会的繁荣和发展做出更大贡献。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

500 专职社工 守望爱国“16年”

【本报综合报道】一支由500名专职社工组成的队伍，默默守护着祖国的安全，已经坚守了16年。这支队伍由退役军人组成，他们具有强烈的爱国情怀和丰富的实战经验。在日常工作中，他们负责巡逻、值守和应急处置等工作，确保国家的安全和稳定。16年来，他们始终坚守岗位，无私奉献，为祖国的繁荣和发展做出了重要贡献。他们的先进事迹得到了社会的广泛认可和赞誉。

手计划

【本报综合报道】一项名为“手计划”的公益活动正在开展，旨在通过志愿者的服务，帮助有需要的人。志愿者们利用自己的专业技能，为弱势群体提供法律援助、心理咨询和技能培训等服务。通过“手计划”，志愿者们不仅帮助了他人，也实现了自身的价值。该活动得到了社会各界的广泛支持和参与，取得了良好的社会效果。

数字商情

【本报综合报道】数字商情周刊近日发布了一系列市场分析报告，为读者提供了丰富的市场信息和数据支持。报告涵盖了多个行业，包括制造业、服务业和金融业等。通过分析市场趋势和竞争格局，报告为读者提供了有价值的参考信息。数字商情周刊一直秉承客观、公正、专业的原则，致力于为读者提供高质量的市场信息服务。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“小模范”在学业、品德和社会实践等方面表现突出，是广大青少年学习的榜样。小记者们通过采访，不仅增长了见识，也锻炼了写作能力。他们的采访报道在报纸上刊登后，受到了读者的广泛关注和好评。

超算碰到“天花板”了吗

【本报综合报道】随着超级计算技术的不断进步，人们开始思考：超级计算是否已经碰到了“天花板”？从目前的情况来看，超级计算在性能提升方面确实遇到了一些瓶颈。例如，在功耗、散热和成本等方面，进一步提升的难度越来越大。然而，随着新材料、新架构和新算法的不断涌现，超级计算的发展前景依然广阔。只要持续加大研发投入，突破关键技术瓶颈，超级计算的性能必将得到进一步提升。

艺术节

【本报综合报道】一场精彩纷呈的艺术节即将拉开帷幕，届时将有来自世界各地的优秀艺术作品展出。艺术节将包括绘画、雕塑、摄影等多种艺术形式，为观众提供一场视觉盛宴。艺术节期间，还将举办多场音乐会和舞蹈表演，让观众在欣赏艺术的同时，也能感受到音乐和舞蹈的魅力。艺术节旨在促进文化交流，提升市民的艺术素养，为市民提供丰富的文化娱乐生活。

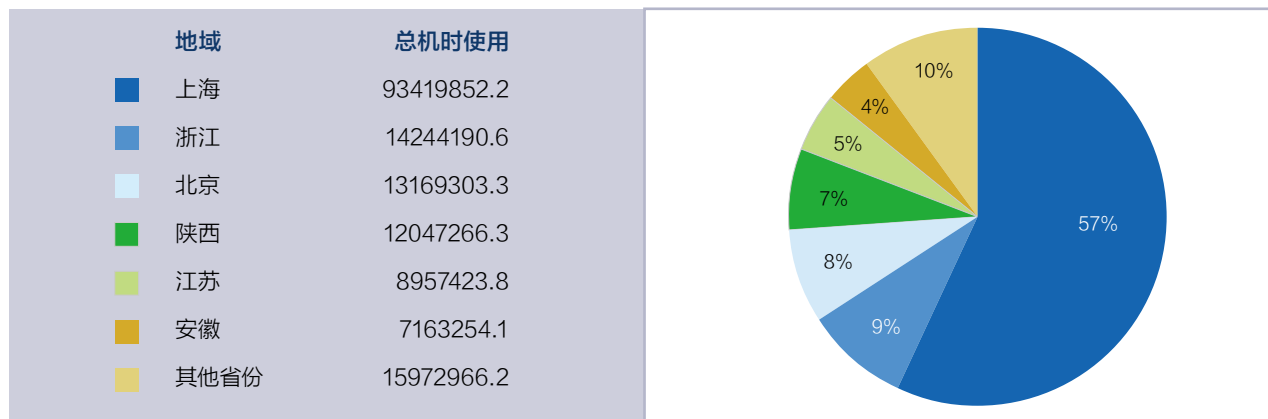
小记者采访“身边小模范”

【本报综合报道】小记者们近日采访了多位身边的“小模范”，了解了他们的成长经历和优秀事迹。这些“

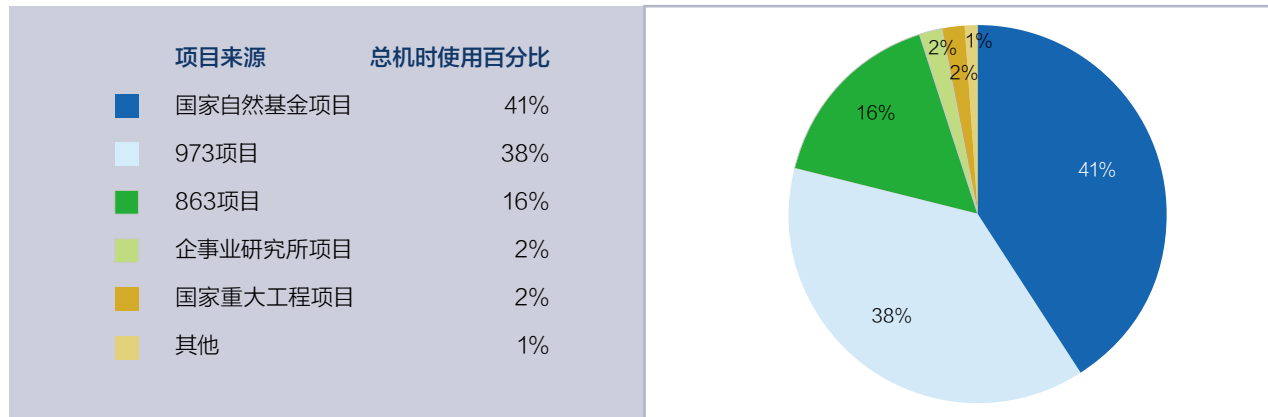
2013年中心运行相关数据统计

2013年,上海超级计算中心“魔方”超级计算机全机系统平均使用率为69.3%。全年为72个新用户开设了正式帐号,为137个新用户提供了试用服务,用户数累计达到494个。用户来自全国28个省、直辖市和自治区,包括一大批国家重点大学、中科院研究所、重大装备制造企业、工程开发设计研究院等。

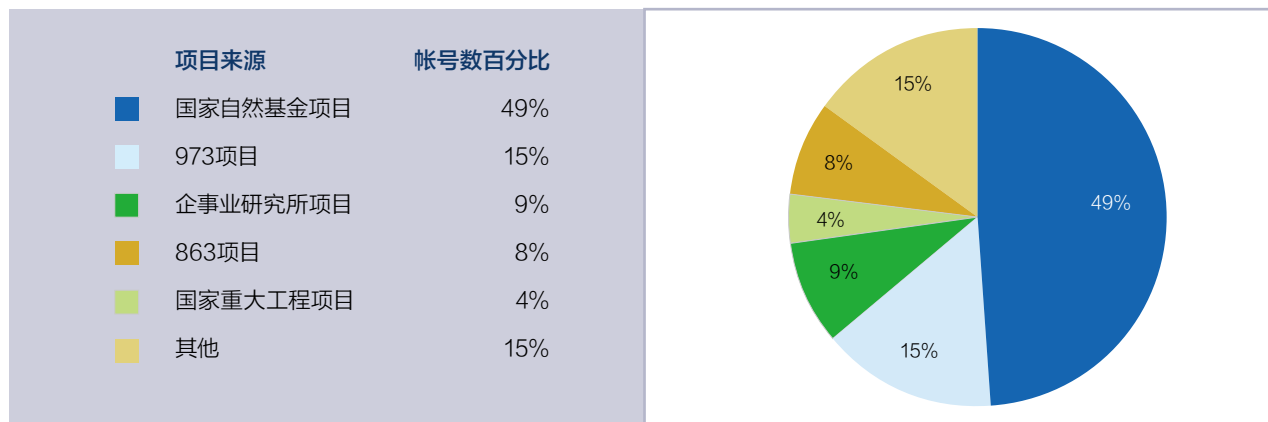
不同地域机时统计



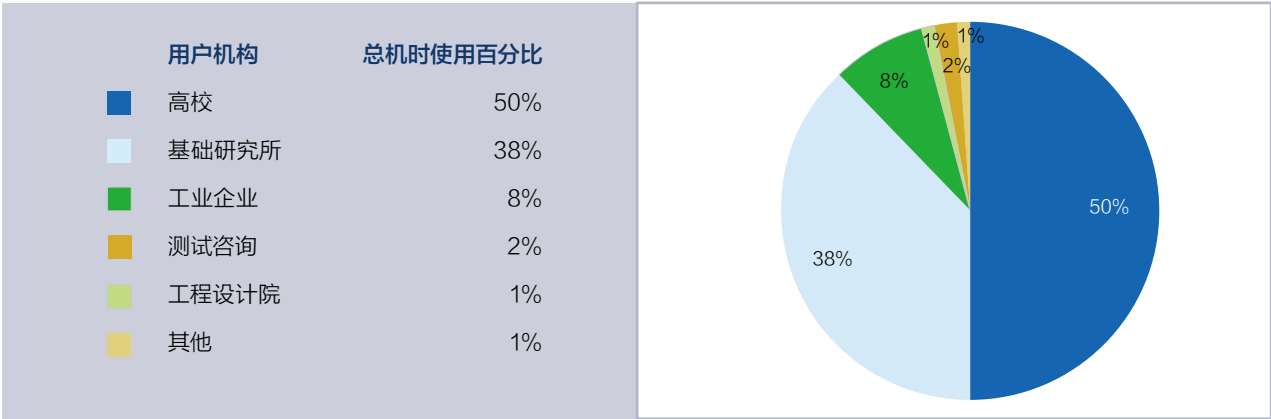
不同项目来源机时统计



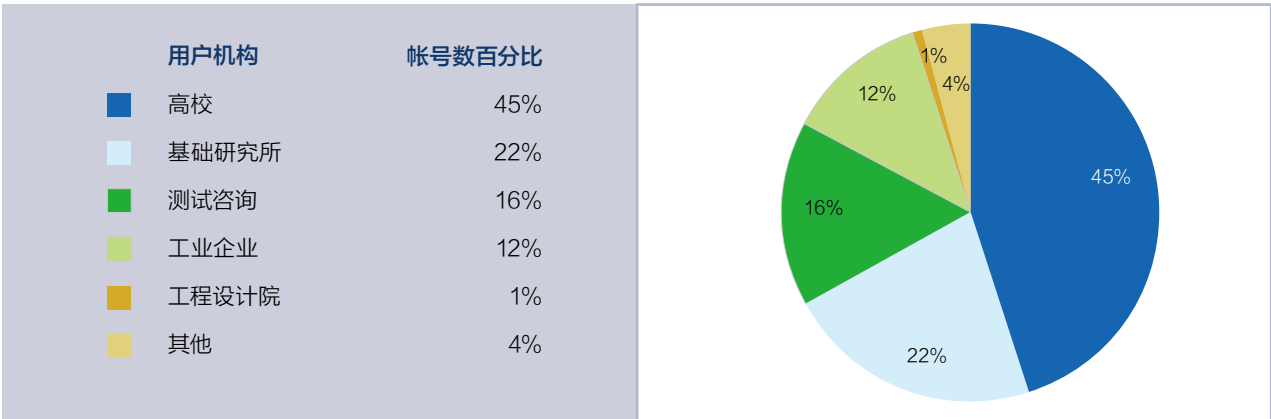
不同项目来源帐号数统计



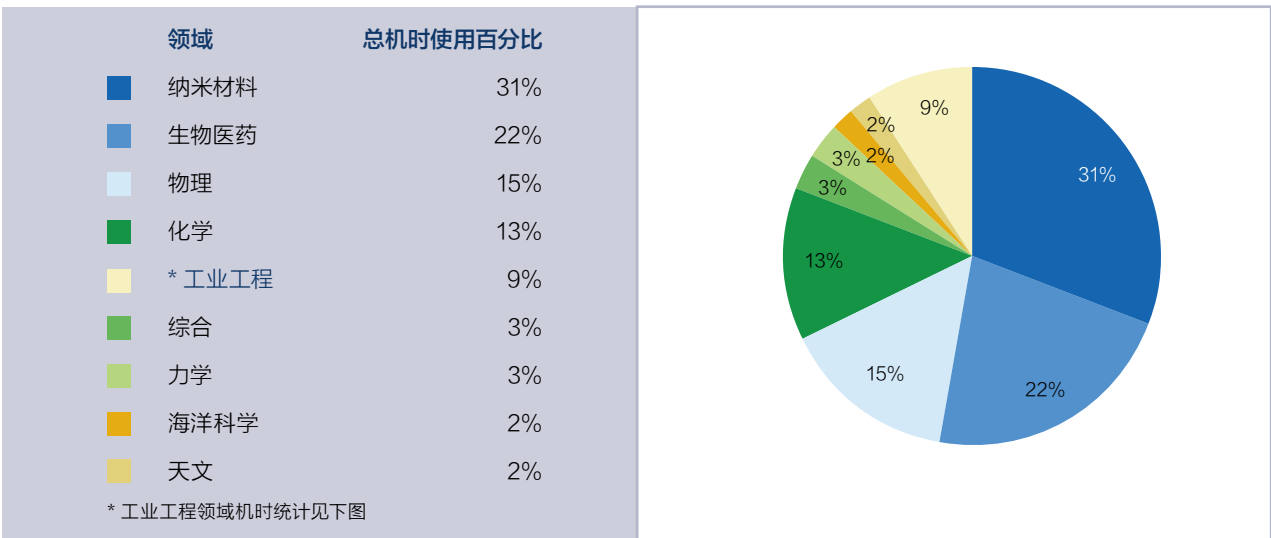
用户机构机时统计

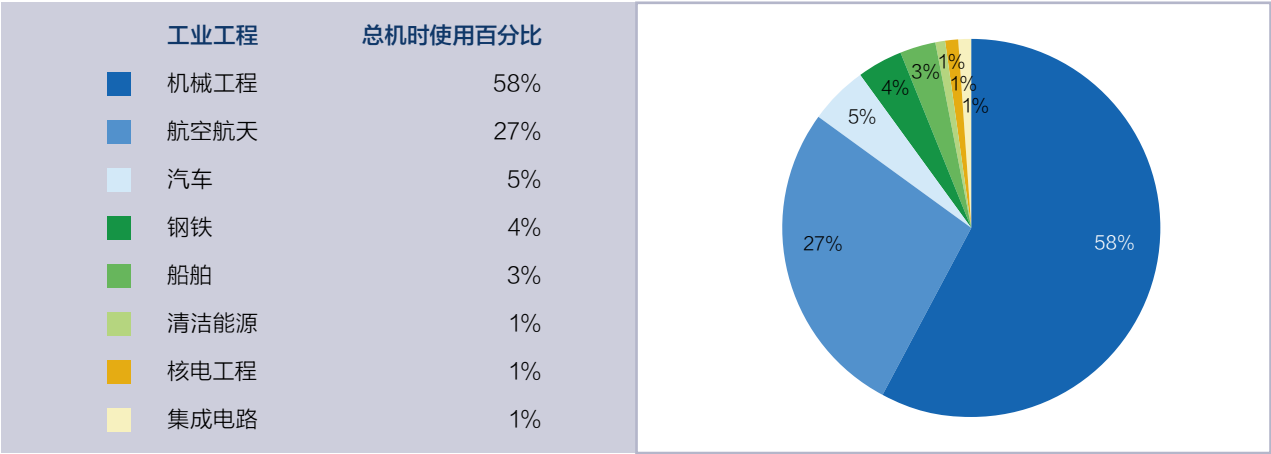


用户机构帐号数统计

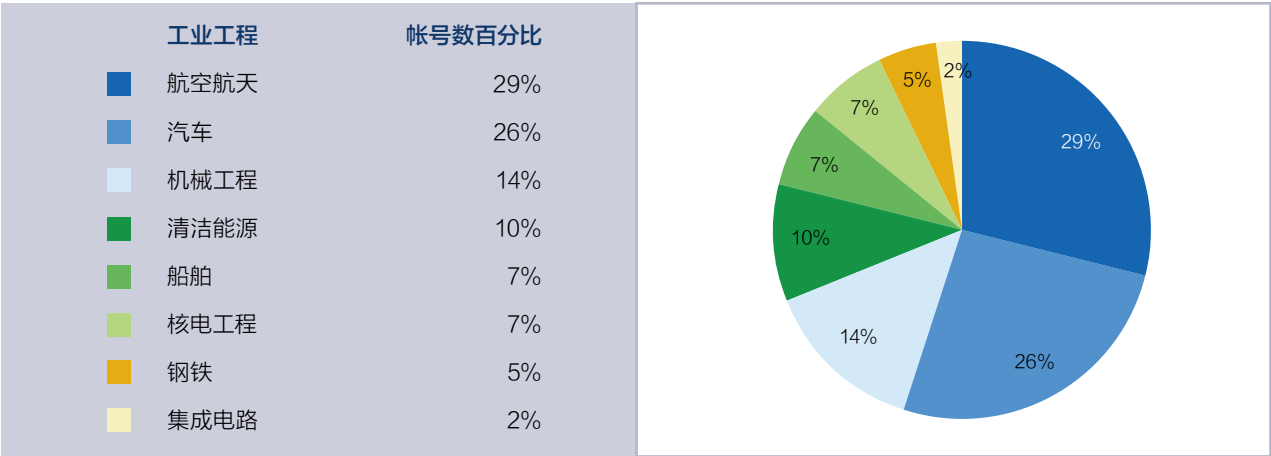
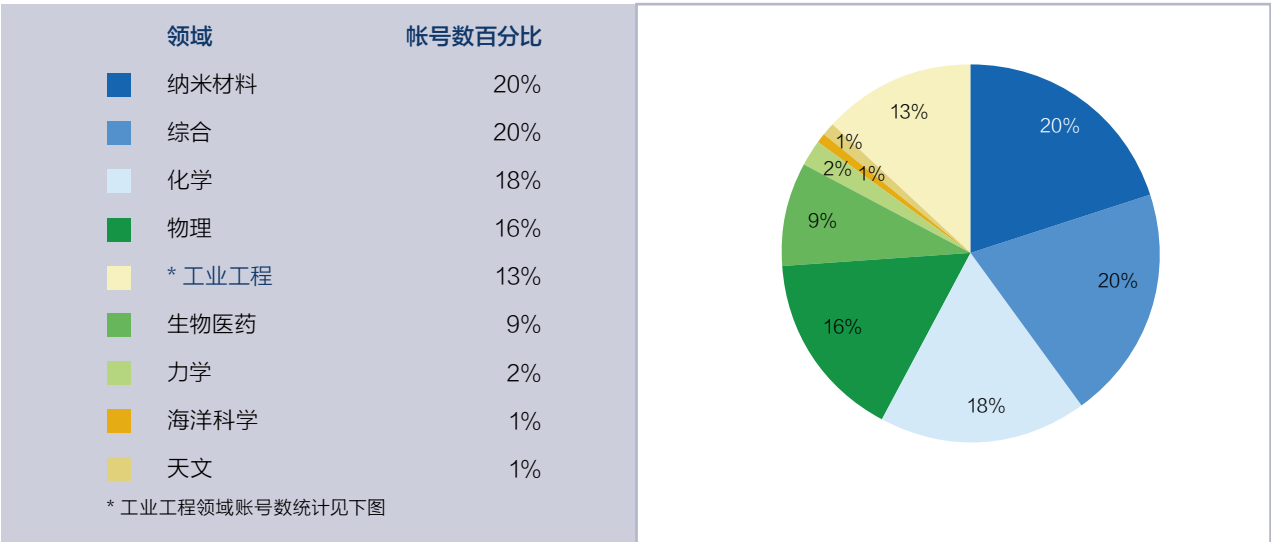


各领域机时统计





■ 各领域帐号数统计



中心领军人物



李根国

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；项目“曙光高效能计算机系统关键技术及应用”获得2013年国家科技进步奖二等奖。

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

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。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。

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。

奖项荣誉

“中国国家网格南方主节点建设及应用服务关键技术开发”项目获得上海市科技进步二等奖

2013年4月,上海超级计算中心“中国国家网格南方主节点建设及应用服务关键技术开发”的项目获得了上海市科技进步二等奖。本课题是“十一五”国家863计划“高效能计算机及网络服务环境”项目课题之一,由上海超级计算中心副主任王普勇担任课题组长。课题从基础设施、网格环境、网格应用和运行管理等四个层面开展研究,完成的主要技术指标包括(1)研制并建设200 万亿次(Tflops)高效能计算机及网络、机房等配套环境;(2)提供7×24 小时不间断服务,计算资源利用率不低于70%;(3)完善应用环境,提供科学计算软件56个,工程计算软件17个;(4)高性能计算平台软件Xfinity;(5)提供网格服务30个,支持多个应用网格开发;(6)网格结点用户管理规范。课题共发表专著1本、论文29篇、申请软件著作权3项及产品登记1项。

本课题在高性能计算平台软件Xfinity、基于模板的应用封装技术、网格软件部署技术、网格环境下的信任技术、网格用户服务质量体系、运维管理系统、高性能计算应用环境、网络多Internet 出口管理以及大型超级计算机水冷应用技术等方面取得创新。



上海超级计算中心荣获国家科技进步二等奖

2013年12月,上海超级计算中心参与的“曙光高效能计算机系统关键技术及应用”项目获得国家科技进步二等奖。该项目的完成单位是中国科学院计算技术研究所。

“魔方”(曙光5000A)在2008年11月发布的Top500排行榜上以180.6TFlops的Linpack值名列世界第十,亚洲第一。



上海超级计算中心计算机科技馆荣获2013年度上海市浦东新区科普教育基地“先进集体”



2013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>