

上海超级计算中心
Shanghai Supercomputer Center



2011 年度报告



关于我们

2011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，在科学发展观引领下，按照“创新驱动，转型发展”的要求，进一步优化超级计算应用环境，推进大规模并行计算应用发展。全年并行规模在1024核以上应用使用的机时占全年机时的20.46%，应用质量得到提升。

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、软件开发服务以及咨询服务，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，中心积极筹划新一轮建设计划，在提升计算能级的同时，不断完善用户服务体系，使中心继续保持在国内的领先地位，并努力拓展国际业务，加强国际合作，力争进入国际超级计算中心的先进行列。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	国际交流与合作	
计算设施和能力的重大提升		◎ 上海超级计算中心参展ISC'11大会	11
◎ “倍增计划”提升“魔方”应用水平	2	◎ 中心代表团访问美国橡树岭国家实验室及英特尔研发中心	11
◎ 中心内部管理升级		◎ 上海超级计算中心参加SC'11大会	12
信息安全工作	3	◎ 中心接待来访活动	12
中心管理信息系统（MIS）的建设	3	高性能计算服务	
国家战略地位的提升		◎ 中心为科学研究提供服务	14
◎ 中心成功举办2011年用户大会	4	◎ 中心为工业领域提供服务	20
◎ 中心参展第十一届全国量子化学会议	5	软件研发服务	
◎ 中心参展2011全国微波展	5	◎ 高性能计算平台软件研发	29
◎ “上海超级计算中心中航工业商发分中心”成立	5	◎ 并行计算研发	30
◎ 中心参展2011全国高性能计算学术年会	6	◎ 国家科研项目	31
◎ 中心参展2011中国国际工业博览会	6	媒体报道情况	33
◎ 中心“超大规模并行电磁计算”联合实验室完成		2011年用户和“魔方”运行相关统计数据	35
机载电大尺寸平台天线电磁特性高性能计算	7	◎ 不同地域机时统计	35
◎ 中心成功举办第一届大规模电磁精细仿真平台理论与实践研讨会	7	◎ 不同项目来源账号数统计	36
◎ 首届航空CFD可信度开放式专题研究活动圆满结束	8	◎ 不同项目来源机时数统计	36
◎ 中心联手微软、摩根士丹利成功举办金融大赛	8	◎ 各领域帐号数统计	36
◎ 2011年中心相关用户培训活动		◎ 各领域机时数统计	37
中心举办专题高性能计算用户培训会	9	◎ 各用户机构机时统计	37
中心举办Lammps软件研讨会	9	◎ 各用户机构帐号数统计	37
中心举办Ansys软件新功能用户培训会	10	中心领军人物	38
中心举办2011年用户培训	10		
中心举办FDTD Solutions 软件高级培训会	10		

主任寄语

2011年是上海市“十二五”规划的开局年，上海超级计算中心作为上海的基础信息设施和公共服务平台，也正在积极筹划中心在上海“十二五”规划中的任务和使命。为了提升中心的能级和服务水平，中心除了继续在科学计算和工程创新方面发挥公共服务平台的作用，还积极探索高性能计算在我国金融、动漫等数据产业的应用，并已取得初步成效，为今后中心扩容后的应用服务领域的拓展打下了基础。2011年在全体员工的努力下，中心在社会效益和经济效益上都取得了良好的业绩，市场运营能力得到进一步提升；在关注经营效益的同时，中心更注重应用服务能力和应用水平的提升，用户数目逐年上升，千核以上规模作业机时较去年同比上升7%。

2011年上海超级计算中心的四期建设工程已启动，为了更科学、更经济的建设中心四期，并保持中心的可持续发展，各项调研工作正在紧锣密鼓地开展。面对国内超级计算中心不断的兴起和国际高性能计算日趋激烈的竞争，中心应认清形势，并逐步提炼出自己的文化与内涵。追求更高更快的运算速度虽然是我们的目标之一，但我们更注重不断提升服务质量，提高高性能计算服务水平，扩大高性能计算服务领域。中心的发展愿景是立足于高性能计算发展的前沿，成为国内超级计算中心的领跑者，推动国内高性能计算的发展。



A handwritten signature in black ink, consisting of stylized Chinese characters.

2012.1.10

计算设施 and 能力的重大提升

“倍增计划”提升“魔方”应用水平

“计算规模倍增计划”活动二期已于2011年结束，目前共有8家用户参与该活动。倍增计划达到了预期效果，产生了一批需要大规模并行计算资源的用户。2011年1024核以上规模的作业同比2010年相应作业所占比例有较大提升。

从图1、图2、图3分析，2011年1024核以上规模的作业同比上升6.74%，256到1023核之间的作业同比下降12.97%，64-255核之间的作业同比上升1.05%，16-63核之间的作业同比上升5.48%，1-15核之间的作业同比下降0.31%。

“倍增计划”活动的主要内容如下：

1、活动对象

(1) 此次活动适用于所有已经使用或计划使用上海超级计算中心计算资源的教育和科研机构等非营利性机构的用户。

(2) 此次活动适用于包年付费的用户，并且申请用户必须在相关领域有较大影响力，能够产生较为重要的科研成果。

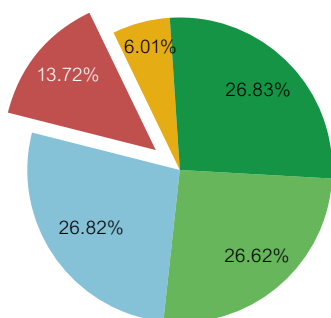
(3) 有志于发展高性能计算应用事业，已对相关科学计算领域拥有3年以上应用经验，并对高性能计算应用程序编写或优化感兴趣的团体或个人可申请加入该项活动，视其专业能力水平参加某项具体项目。

2、使用规则

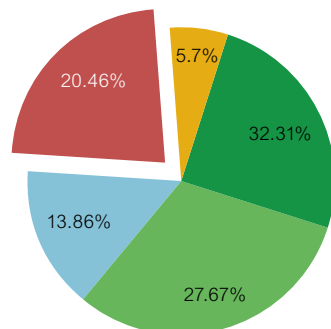
(1) 用户申请审核通过后，上海超级计算中心将按申请要求，在用户付费协议的有效期内，提供协议规定的为期半年的计算资源和相关服务

(2) 用户申请审核通过后，用户须按照协议，切实提高单个作业计算规模，并按本活动要求提供论文发表副本和总结报告。

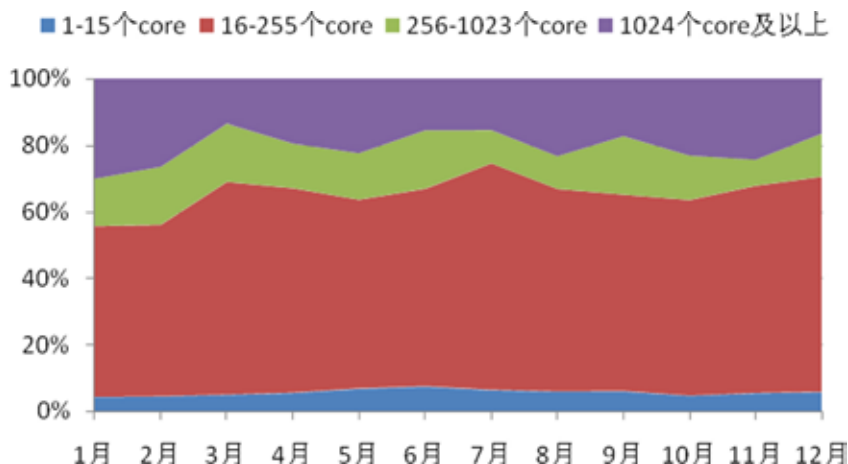
(3) 本次活动将要求申请用户的单个作业规模在1024核以上。



图一、2010年各种规模计算任务的总机时比例分布

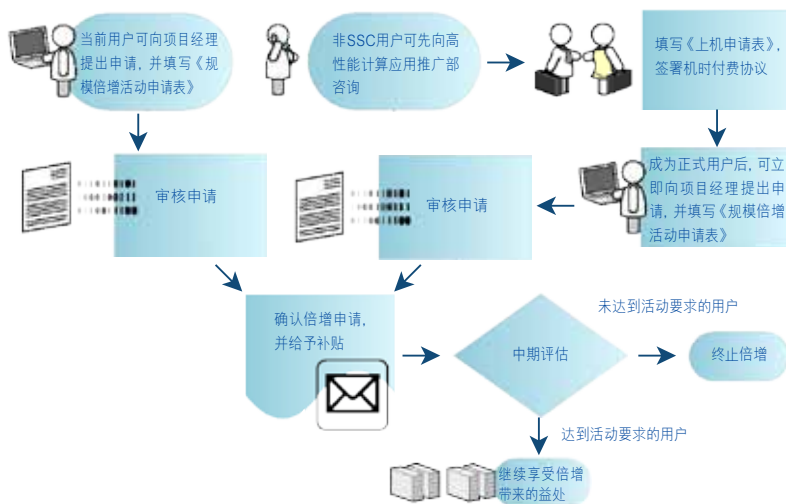


图二、2011年各种规模计算任务的总机时比例分布



图三、2011年1月-12月每月各种规模计算任务的机时比例分布

3、活动流程：



中心内部管理升级

信息安全工作

2011年9月20-22日，BSI派专员对上海超级计算中心ISO27001信息安全管理体系进行了换证审核。

审核组对本中心9个部门的运维体系进行了一次重新评估，经过审核，认为上海超级计算中心现有体系运行良好，在现场审核中未发现任何不符合事项。经过BSI国外本部专员对审核记录的复审，我中心于2011年11月获得新证书。

BSI是全球权威的标准研发和国际认证评审服务提供商，上海超级计算中心于2005年取得BSI颁发的BS7799信息安全证书，是中国大陆地区率先获得此认证的十家单位之一。中心长期重视对用户的信息安全的关注和保护，通过ISO27001信息安全管理体系的认证，更加规范地管理和保护中心的信息资产，尤其是客户的信息安全。



中心管理信息系统(MIS)的建设

根据中心综合管理信息系统（MIS）的规划，完成了短信发送模块、网络管理模块、文档中心管理模块、离职流程模块、上机申请模块、资源分析模块等开发工作，除资源分析模块外，其余均已上线使用。另外邮件分类模块也已上线使用。



国家战略地位的提升

中心成功举办2011年用户大会

2011年7月29日，“魔方”超级计算机使用情况及应用技术研讨会——暨2011年上海超级计算中心用户大会在兰州分中心成功举行。

本次会议由中心应用推广部经理吴建成主持。会上，中心副主任李根国博士致辞，感谢各位用户对上海超级计算中心的支持与帮助，并表示中心将继续致力于为用户提供稳定、高效的高性能计算运行环境和服务；甘肃省计算中心胡铁钧主任对上海超级计算中心兰州分中心的概况做了介绍，并表示将与上海超级计算中心一起把高端计算服务平台越做越好；中心首席科学计算工程师王涛博士汇报了2010年度“魔方”使用情况，对“科学计算规模倍增计划”实施进行了总结，并介绍了中心“四期”建设发展规划。

本次大会安排了四个特约报告。浙江大学罗坤教授的报告“基于大规模并行计算的燃烧流体力学”；上海交通大学金耀辉教授的报告“高性能网络：HPC、Grid和Cloud”；上海交通大学林新华博士的报告“众核计算技术GPU介绍”；以及中心战略合作伙伴AMD公司李约炯工程师的报告“基于AMD GPU技术的开发平台和工具”。

本次会议发布了上海超级计算中心2010年度十大金牌用户，分别是：上海宝钢股份研究院（技术中心）、上海核工程研究设计院、中国商用飞机有限责任公司上海飞机设计研究所、中航商用飞机发动机有限责任公司、上海汽车集团股份有限公司技术中心、中国科学技术大学、中国科学院大连化学物理研究所、浙江大学热能工程研究所、清华大学化学系、清华大学航天航空学院。



中心参展第十一届全国量子化学会议

2011年5月27日-30日，上海超级计算中心作为主赞助方，参加了在合肥举办的第11届全国量子化学会议。本次会议由中国化学会主办、中国科学技术大学化学与材料科学学院与合肥微尺度物质科学国家实验室承办，内容涵盖理论与计算化学的各个方面，全面地交流我国在量子化学领域取得的最新进展。共有来自全国各高校研究院1200名学者和研究生参会，会议期间中心设置了展台与广大参会者进行了现

场交流。

会上，中心高性能计算应用推广部工程师时炜向参会者全面介绍了上海超级计算中心过去10年的建设、运营、应用、研发情况。宣讲会后，许多参会者对中心产生浓厚兴趣，展台前咨询者络绎不绝。借此机会，中心向参会者发放用户需求调查问卷，共回收约400份，获得了量子化学计算领域用户需求的第一手资料。

量子化学一直是超级计算应用的一个



重要领域，中心参展全国量子化学会议，很好地向各大高校研究院展示了中心的计算资源和在该领域的服务能力，为今后资源整合、提供优质服务打下了坚实的基础。

中心参展2011全国微波展

2011年6月1-4日，全国微波毫米波会议暨2011年微波毫米波科技成果及产品展（MIE2011）在青岛国际会展中心成功举办，上海超级计算中心作为参展商参加了此次会议，受到来自全国各地微波领域企业、科研院所、高校共数百名与会者的极大关注。

此次会议为全国微波毫米波技术领域的科学家、工程技术与管理人员提供一个广泛交流科研成果和最新进展的平台，也为上海超算中心展示电磁领域应用成果提供了专业平台。

上海超级计算中心和天线与微波技术重点实验室（西安）合作共建“超大规模

并行电磁计算”联合实验室后，在计算电磁领域具备了强大的技术背景和应用实力。此次会议是中心在电磁领域的首次展出，与会展商和参会人员对大规模并行电磁计算平台显示出浓厚的兴趣，充分显示出超算电磁计算平台在国防科技、科学研究领域的应用前景和发展潜力。

“上海超级计算中心中航工业商发分中心”成立

在上海市经济和信息化委员会的指导和推动下，经过中航商用航空发动机有限责任公司（以下简称“中航商发”）与上海超级计算中心（以下简称“上海超算”）调研协商，“上海超级计算中心中航工业商发分中心”于2011年9月19日正式揭牌成立。该分中心作为航空发动机设计研制的高性能计算平台，将为中国大型客机发动机相关设计及关键技术攻关提供有力保障。分中心的成立也意味着上海超

算成为中航商发融入地方产业链的试点单位。

该分中心的成立是中航商发与上海超算双方实现资源共享、优势互补战略合作的成果。双方将按照“超算分中心”、“联合计算平台”和“航空发动机云计算平台”三个阶段展开合作。中航商发计划到2014年统筹国内航空发动机相关领域的供应商资源，与上海超算中心实现协同计算平台；到2016年把全球供应商企业平台

接入航空发动机云计算平台，并共同承担国际合作项目。而上海超算拥有的高校、企业与研究机构等资源，也可在此平台上与中航商发实现共享。

该分中心是上海超算成立的第8个分中心。分中心成立仪式同时举行了中航商发“整机结构分析工程研究中心”及“结构完整性工程研究中心”的揭牌仪式。这标志着我国航空发动机相关设计及关键技术攻关工作又有实质性推进。

中心参展2011全国高性能计算学术年会

2011年10月26-29日，全国高性能计算学术年会（HPC China 2011）在山东济南召开。会议围绕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。

本次会议分主题报告会和若干分论坛。大会报告邀请了陈国良、钟万勰、徐冠华、陈左宁四位院士以及国际知名专家分别就高性能计算技术和应用以及下一代超级计算机的发展趋势作主题演讲。同时发布多项中国高性能计算最新研究成果。会上还发布了2011年中国HPC TOP100排行榜，“天河一号”仍排名第一，新上榜的国家超级计算济南中心的“神威蓝光”

排名第二；上海超级计算中心的“魔方”本次排名第十。

在国内超级计算中心分论坛上，国家超级计算天津中心、深圳中心、长沙中心、济南中心，上海超级计算中心、北京计算中心、甘肃计算中心以及成都云计算中心等单位参加了讨论，并发出倡议：拟成立国内高性能计算应用联盟，以期提升国内高性能计算应用能力和水平，更好的发挥超算中心作用。

在专业技术分论坛上，中心研发工程师张丹丹发布了论文《异构平台下格子Boltzmann方法实现及性能分析》。中心应用推广工程师刘波代表上海超级计算中

心与西安电子科大的“超大规模并行电磁计算”联合实验室发布了论文《武器装备总体设计中系统级高频电磁场精细问题的HPC并行计算》。

上海超级计算中心与微软公司在大会上联合发布“企业私有云与超算公有云无缝集成平台”，该平台旨在方便用户在企业内部资源紧缺时可以自动、无缝地使用中心的高性能计算资源，大大提高工作效率。

上海超级计算中心还在会场设立了展台，向与会者介绍中心的资源、应用以及服务等情况，吸引了大部分参会人员前来咨询交流。

中心参展2011中国国际工业博览会

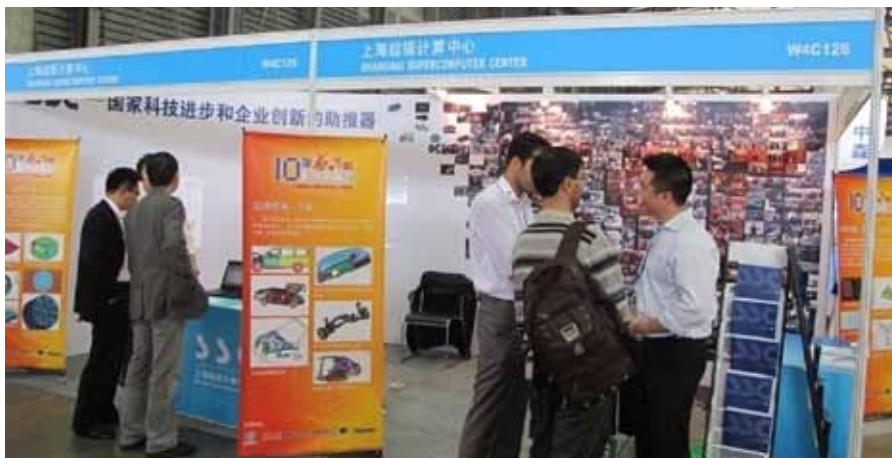
2011年11月1日至5日，“2011中国国际工业博览会”在上海新国际博览中心举行。开幕当天，中共中央政治局委员、上海市委书记俞正声出席并宣布开幕。上海市市长韩正、工业和信息化部部长苗圩、国家发改委副主任刘铁男、商务部国际贸易谈判副代表崇泉致辞。

本次工博会围绕建设创新性国家战略，共设八大专业展区，主题为“创新转型与战略性新兴产业”，特别设置了科技创新展区。本次工博会共吸引了超过1800家参展商和10万人次左右的中外专业观众现场参观。

作为上海市推进信息化和工业化融合重点实验室之一的上海超级计算中心参加了本次工业博览会，以实例展示中心10年来为工业企业创新转型，支撑国家重大战

略性产业提供的大量高性能计算服务，以及取得的科研成果。同时，展会上中心还带来了一套自行研制的高性能计算服务平台——Xfinity，演示如何将中心的高性能计算服务通过互联网送到企业用户桌面，这种类似云计算服务的方式吸引了众多的专业用户。

在为期5天的会展中，上海超级计算中心通过发放宣传资料、现场交流、演示等方式，共吸引中、外专业观众逾730名。其中有一大部分是有意向使用高性能计算服务的高校和企业。中国国际工业博览会为上海超级计算中心提供了一个开展产品宣传、吸引潜在客户和合作伙伴的良好平台。



中心“超大规模并行电磁计算”联合实验室完成机载电大尺寸平台天线电磁特性高性能计算

2010年11月，中心“超大规模并行电磁计算”联合实验室成立并成功部署相关软件后，于2011年2月完成了国内某大型飞机平台上的通信天线以及大型相控阵天线完整精细模型电磁特性的精确计算。该计算任务在“魔方”超级计算机上使用560颗CPU核进行了约2天时间的计算，各计算节点计算任务负载均衡，加速比达到90%以上；计算结果与实测数据吻合良好。该计算任务的圆满完成使得诸如飞机舰船平台设计中必须考虑的细节高频电磁问题的计算难题得到有效解决；后续将继续进行相关计算仿真任务。

随着设计技术的进步以及指标要求的越来越高，大型装备（舰船、飞机、航天飞行器、车辆等）设计流程中精细电磁特

性的准确计算被越来越多的总体设计单位所重视。在HPC（高性能计算）技术日趋普及的今天，大规模精确的电磁仿真计算使得工程师可以进行天线与飞机一体化设计与布局仿真、先进飞机射频综合一体化设计仿真、飞行器全频段隐身RCS计算、舰船综合桅杆整体设计计算、舰船加载机一体化电磁特性（含RCS隐身/EMC/EMI等）分析计算等复杂工作，并得到准确可靠的计算结果。

此次计算成功，标志着中心和天线与微波技术重点实验室（西安）“超大规模并行电磁计算联合实验室”所建设的HOBBIES电磁仿真平台已具备非常成熟的针对复杂电磁问题的高性能精细仿真计算能力。

中心成功举办第一届大规模电磁精细仿真平台理论与实践研讨会

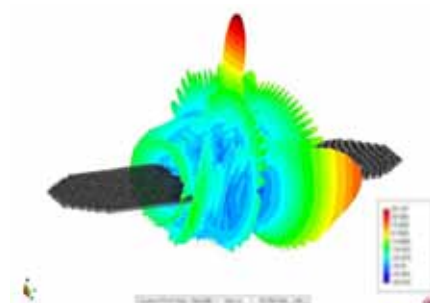
2011年11月24-25日，第一届大规模电磁精细仿真平台理论与实践研讨会在上海超级计算中心成功举行。本届研讨会由“超大规模并行电磁计算联合实验室”（中心和天线与微波重点实验室（西安）联合设立）举办，研讨会受到多家致力于高频电磁场大规模精细并行设计的科研院所关注。

随着国防领域各项技术的不断进步，对复杂大型平台的电磁特性设计的准确度要求越来越高，近年来电大尺寸物体高精度高可靠度的电磁场仿真技术成为各国着重发展的国防核心技术之一。

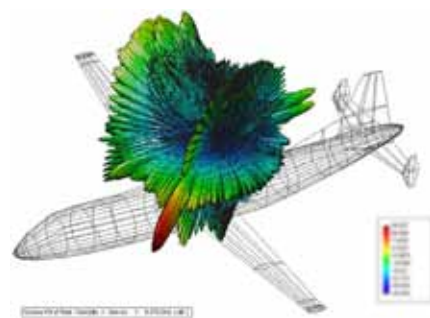
研讨会上，上海超算中心向与会专家

介绍了中心的大规模电磁精细仿真并行平台和在“魔方”上计算的多项超大规模电磁精细计算案例，高频电磁仿真HPC计算平台的组建、使用与管理等内容，以及超大规模电磁精细计算的关键理论；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一周年的主要计算成果。

上海超算中心于2010年建成最大计算规模达2000 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数十万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



数千单元天线阵列完整精细计算



机载天线阵列一体化仿真

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。

上海超级计算中心副主任李根国博士，应用推广部经理、联合实验室副主任吴建成，西安电子科技大学副教授、联合实验室副主任赵勋旺博士出席此次研讨会并做相关专题报告。



首届航空CFD可信度开放式专题研究活动圆满结束

2011年12月3-4日，首届航空CFD可信度开放式专题研究活动总结会在三亚召开。会议由空气动力学国家重点实验室和国家重点基础研究发展计划“数值风洞软件系统若干基础问题研究”项目组联合主办，中航工业第六三一所和上海超级计算中心联合承办。

上海超算中心作为本次活动的承办方之一，承担了高性能计算软硬件资源环境服务、FTP服务器搭建、会务组织等工作，中心工程师也积极参与会议提供的航空标模计算研究，并针对CFX软件做了高升力模型的计算研究。本次活动共接收8家单位上传的10余套模型和结果。

中国空气动力研究与发展中心、中国航空研究院、中国航空工业集团公司第六三一研究所、中国商用飞机有限公司上海飞机设计研究所、中国航天科技集团公司第十一研究院、中航工业气动研究院和上海超级计算中心、同济大学、上海大学、复旦大



学、清华大学、GridPro中国、尤迈克中国等单位的专家和代表参加了本次专题活动总结会，并参加首届航空CFD可信度开放式专题研究活动的各项日程。本次活动吸引了国内各类机构、公司的广泛参与，共同促进了国内CFD领域的人员交流和技术水平提高。

中心联手微软、摩根士丹利成功举办金融大赛

2011年11月25日，“微软—摩根士丹利杯”2011金融超级计算挑战赛在上海圆满落幕，本次比赛由微软亚太研发集团、摩根士丹利管理服务（上海）有限公司和上海超级计算中心三家联合举办。经过五天比赛，武汉大学的Fast团队，北京邮电大学和复旦大学的Fusion联合团队以及华中科技大学的Skyline团队从全国近150个报名队伍中脱颖而出，分别夺得“最佳软件设计奖”、“最佳金融模型奖”和“最佳并行计算奖”。另有来自复旦大学、北京大学、清华大学、浙江大学等十所高校的12支团队获得挑战赛优胜奖。

10月24日至28日，各参赛队伍在上海超级计算中心提供的曙光5000A超级计算机平台上，根据万得资讯提供的金融产品的真实历史数据，对摩根士丹利提供的多种虚拟金融衍生产品进行了定价与评估。这些期权包括亚洲期权、回望期权以及障碍期权等多种路径相关期权。经过5天比赛，主办方根据各队提交的计算报告与结果进行了评审，挑选出3组总冠军和12组成绩优异的团队。

高性能计算被誉为创新催化剂，能从三方面助力金融机构实现创新：更快速、有效地把握金融产品的定价；更全面、精准的风险分析；更快速的反应能力，提升程序交易效率。在中国，高性能计算在金融领域的应用还处于探索起步阶段；而在国外，金



融计算已成为各大金融机构的核心竞争力。始于1993年的全球超级计算机500强排行榜中，约有40台为国际一流金融机构服务。中国目前有74台超级计算机跻身500强，但至今没有一台用于金融领域。

上海超级计算中心主任奚自立表示：“金融计算服务是上海超算中心发展规划的重点之一，我们希望能以此带动中国金融服务业的快速发展。上海如要成为更加重要的国际金融中心，无疑需要建设金融云。而建设金融云的前提是研究能力强大的金融信息技术、高端人才，以及政策支持。”

本次大赛的主办，就是希望能够联手业界和学界推动金融计算在中国应用和基础研究，缩短国内外在这方面的差距。

2011年中心相关用户培训活动

中心举办专题高性能计算用户培训会

2011年3月4日，上海超级计算中心举办了针对同济大学数学系和复旦大学数据科学研究中心的高性能计算培训，包括同济大学的徐承龙教授、梁进教授、陆洪文教授和许威副教授等四十多名老师和同学参加了此次培训。

本次培训主要内容涵盖了高性能计算领域的各个方面，包括：Linux操作系统和常见Linux命令、集群的基本概念和搭建、并行计算基础、MPI程序的开发以及GPU和CUDA编程。培训期间，各位学员结合工作中的实际问题与中心技术人员进行了热烈讨论。

上海超级计算中心一直在努力拓展计算金融方面的应用，而参加本次培训的同济大学数学系和复旦大学数据科学研究中心均有计算金融领域的研究课题。上海超算中心希望通过这次专题用户培训，为专业领域的用户提供一个互相交流学习的平台，为今后进一步开拓和深化计算金融领域的应用起到推动作用。

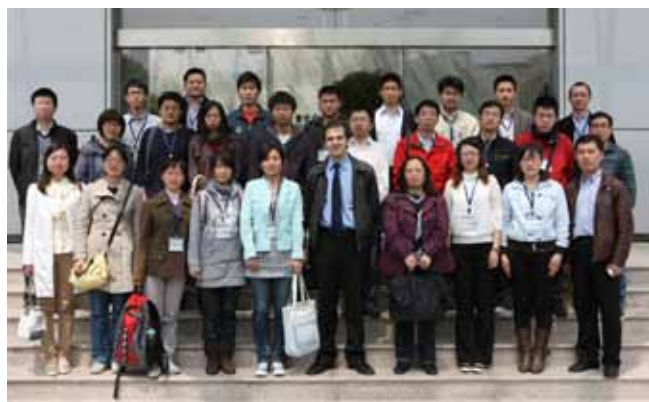


中心举办Lammps软件研讨会

2011年4月14日，上海超级计算中心成功举办了Lammps软件研讨会。来自复旦大学、上海交通大学、华东师范大学、浙江大学、中科院硅酸盐研究所、中科院应用物理研究所等十多个单位机构的近四十人参加了此次研讨会。

研讨会邀请了法国Scienomics公司的Krokidis博士，对其公司MAPS软件的计算方法和研究领域进行了详细介绍，并针对于Lammps软件的前后处理过程做了现场演示。浙江大学的周昊飞博士和上海大学的鲁红权博士介绍使用Lammps软件的经验 and 注意事项。会上大家就应用Lammps软件在科研和使用中遇到的问题进行了交流和讨论。

本次研讨会是中心首次针对一款科学计算软件举行的用户交流活动，目的是为计算材料学用户提供交流的便利。



中心举办Ansys软件新功能用户培训会

2011年4月28日，Ansys公司联合上海超算中心举办了“Ansys Fluent 动网格及R13网格新功能的用户培训”。上汽集团股份有限公司技术中心、联合技术中心（中国）有限公司、泛亚汽车技术中心有限公司、森松、810所、803所、开利公司研发中心（中国）、费希尔调压器（上海）有限公司等近20位工程师参加了培训。培训后对学员进行了调查问卷，学员满意度较高。



中心举办2011年用户培训

2011年11月10日，上海超级计算中心用户培训在中心报告厅成功举办。本次培训有近30家用户单位50位学员参加。

每年一度的上海超级计算中心用户培训旨在让用户能更好的了解和使用上海超级计算中心的主机系统。

本次培训内容包括上机初步、各类计算作业实战、并行计算与编程基础、并行编程入门、GPU与CUDA编程介绍、Linux与集群系统，分别由来自研究开发部、应用技术部、应用推广部的专业工程师进行讲授。



中心举办FDTD Solutions 软件高级培训会

2011年12月12-13日，FDTD Solutions 软件高级培训会在上海超级计算中心报告厅成功举办。本次培训由上海超级计算中心、加拿大Lumerical Solutions公司、上海海基盛元信息科技有限公司共同主办，共有30名学员参加。

该培训旨在为广大用户提供一个全面地了解和掌握业界一流的纳米光学软件的应用的平台。培训内容为介绍FDTD及其相关物理和数学问题、教授学员如何使用该软件来加快仿真速度、以及如何参数化扫描和优化设计等，从而加快课题研究进度并取得突破性进展等相关问题。本次培训为学员提供了现场答疑和上机使用超级计算机进行仿真计算练习，并体会超级计算机软件强大的分布式和并发式。



国际交流与合作

上海超级计算中心参展ISC'11大会

2011年6月20日-23日，上海超级计算中心在德国汉堡成功参展ISC'11(International Supercomputing Conference 11)大会，这是中心第四次参展这一全球性的高性能计算大会。中心王涛、吴建成分别以在科学计算和工程计算方面的成就而获得国际数据公司在大会上颁发的“高性能计算创新优秀奖”。

此次参展全方位介绍了上海超级计算中心，包括资源、应用以及服务等各方面情况，并着重介绍自主研发的产品Xfinity。在吸引了来自世界各地的与会者参观中心展位的同时，我们也就高性能计算技术应用及未来发展与其他国家的计算中心进行了探讨和交流。与以往大会不同，越来越多来自中国的高性能计算专家出现在会议以及展览现场。亚洲超级计算分会在会上成功举办。

6月20日大会发布最新TOP500排名，其中日本的K Computer(京)占据首位，它的实测运算速度为每秒8000万亿次，据日本官方消息显示，到2012年其完全建成后，运算速度将达到每秒一万亿次。值得一提的是，2011年6月排名TOP10的超级计算机，运算速度均已达到P量级。



中心代表团访问美国橡树岭国家实验室及英特尔研发中心

2011年8月底，上海超级计算中心及上海市经信委、上海市科委组成的代表团一行考察访问了美国橡树岭国家实验室（Oak Ridge National Laboratory, ORNL）和美国的英特尔研发中心。

代表团一行主要访问了ORNL的国家计算科学中心，参观了超级计算机机房和设施，进行了比较充分的交流，对美国的高性能计算发展以及ORNL高性能计算中心的情况有了比较深入的了解。考察期间，代表团一行还参观了ORNL的机房和可视化环境。

代表团一行到英特尔研发中心访问的主要目的是了解英特尔未来几年在CPU方面的研发计划和产品路线。在访问期间，英特尔工程师介绍了未来5年英特尔通用处理器的发展方向和英特尔众核处理器的发展方向。英特尔将在不增加功率的情况下，增加向量运算的带宽来提高CPU的整体计算性能。在单个CPU中，主频的变化不会太大，总的核数不会增加太多。对于众核处理器，英特尔也倾向发展向量运算的带宽，并使得众核芯片脱离CPU而单独工作。



上海超级计算中心参加SC'11大会

2011年11月12日-18日，第24届超级计算大会（SC'11）在美国西雅图举行。作为全球最大规模的高性能计算会议，本次会议的内容囊括了高性能计算、网络、存储和分析等四个方面；主要就高性能计算中的一些最新动态和未来发展趋势进行了介绍和讨论。会议主题包括：多核系统的开发、用于大尺度计算的GPU、可升级系统和存储、编程模型、E级计算（百万亿次计算）等。此外，未来超级计算机所面临的能耗问题也成为此次会议中受到较多关注的问题。

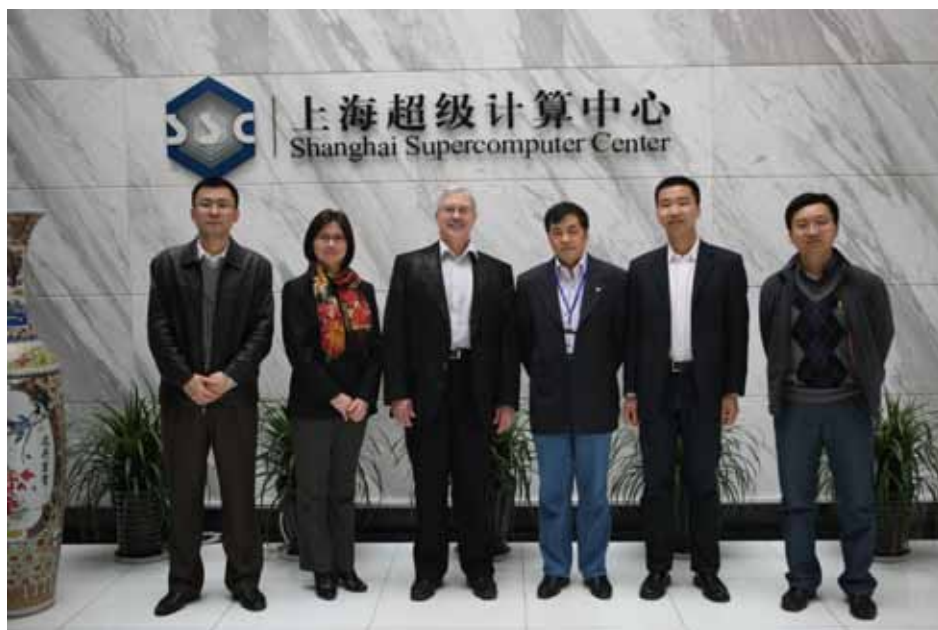
为期7天的会议共计23场研讨会、10个分会场会议、94场BoF报告、74个学术报告演讲、70个海报张贴介绍、30场教学、以及1个学生集群搭建竞赛，吸引了上万名参会者。

作为SC会议的一个重要内容，会议发布了全球TOP500的下半年排名。本次排名前十位的机器与上半年发布的排名保持一致：美国仍占据半壁江山，中国、日本分别占据了前十中的两席，欧洲则以法国为代表拥有一个席位。目前，日本的“京”计算机仍保持着6月份以来全球第一的位置。该机器由日本理

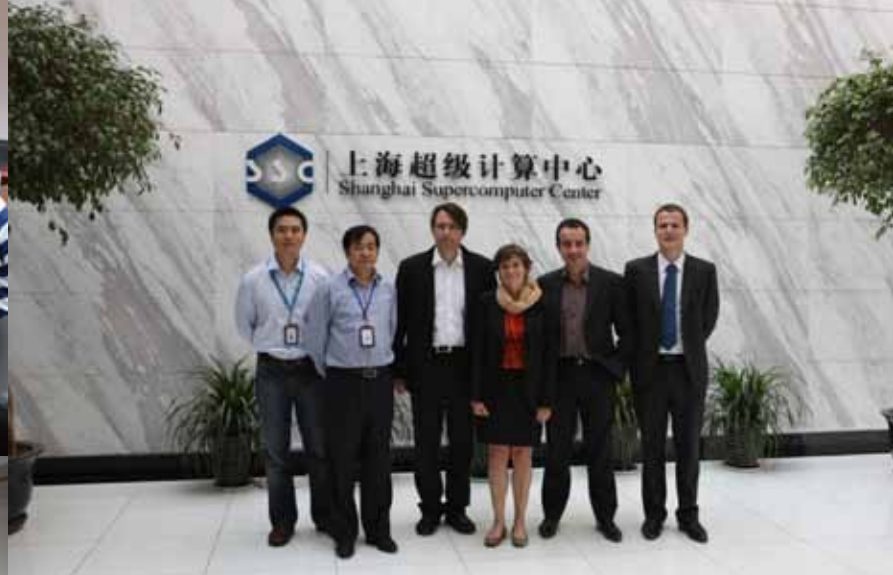
化研究所位于神户的计算机科学高级研究院完成装配，共计使用705,024个富士通SPARC64处理核，并达到了11千万亿次/秒的峰值速度。“京”是目前第一台超过10千万亿次/秒峰值速度的超级计算机，同时也是目前最为节能的系统之一。通过全球TOP500的前十位排名，我们不难发现目前千万亿次每秒的超级计算机已站在了高性能计算发展的前端，这也与高性能计算应用的不断发展，以及计算需求的不断扩大有着密不可分的联系；其次，虽然目前千万亿次每秒计算机速度主要集中在3千万亿次/秒以下范围，但是这一数字很快会因诸多10千万亿次/秒超级计算机的开发而在下一次排名中出现较大变化。

本届会议展会共吸引349个参展商、观众上万名。而对于在全球HPC舞台上已有较高知名度的上海超级计算中心而言，参展SC会议无疑为我们提供了一个更为广阔的宣传平台。作为中国代表团的一份子，上海超级计算中心参加了由中国高性能专家委员会组织的中国联合展位，共同对外宣传中国的高性能计算事业。

中心接待来访活动



4月8日，加拿大共享等级学术研究计算网络(Sharcnet)副主任Michael A. Bauer教授一行访问中心。



1	2
4	3
5	

1、5月10日，美国橡树岭实验室主任Thom Mason访问中心。

2、5月27日，法国超级计算代表团访问中心。

3、6月30日，美国劳伦斯利弗莫尔实验室（LLNL）代表团访问中心。

4、9月13日，IDC公司高性能计算项目副总裁Earl Joseph一行访问中心。

5、9月26日，德国斯图加特大学超算中心一行访问中心。

高性能计算服务

中心为科学研究提供服务

上海超级计算中心魔方超级计算机全机系统2011年平均使用率为74.39%。全年为60个新用户开设了魔方正式帐号，为77个新用户提供了魔方试用服务。截至2011年12月31日，魔方共有活跃的正式用户帐号226个，用户来自全国28个省、直辖市和自治区。用户单位包括一大批国家重点大学、中科院研究院所、重大装备制造企业、工程开发设计研究院等。同时，2011年魔方超级计算机上用户的应用水平也有了显著的提高。1024核以上作业使用的机时占全年机时超过20%。在整个2011年度，用户共发表了超过144篇被科学引文索引（SCI）收录的论文（其中，Nature

两篇），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。本文在上述的140多篇论文里，精选了在国际顶级刊物自然（NATURE）、美国化学会志（JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY）、物理评论快报（PHYSICAL REVIEW LETTERS）和能源与环境科学（ENERGY & ENVIRONMENTAL SCIENCE）上发表的7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：Cell entry of one-dimensional nanomaterials occurs by tip recognition and rotation

项目来源：中国国家自然科学基金

用户来源：美国布朗大学、中科院力学研究所

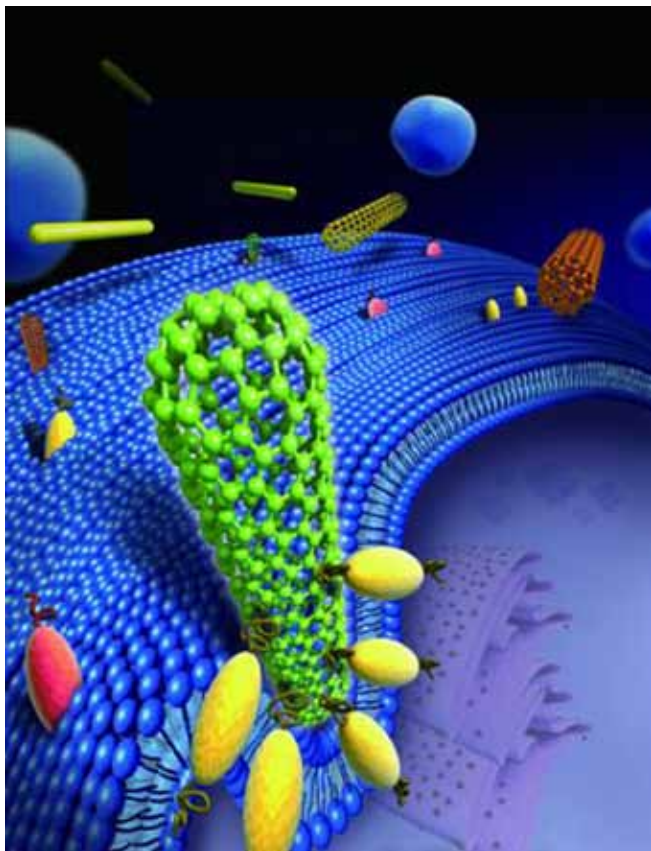
论文来源：《自然：纳米技术》第6卷第11期，页号：714-719，2011年11月出版

本研究在理解纳米材料和细胞之间的相互作用方面取得显著进展，解释了为什么碳纳米管和其它长型纳米材料会给细胞带来伤害。

纳米材料如碳纳米管，在医疗上有着广泛的应用前景，比如作为递送工具，将药物运载到特定的细胞或人体内特定部位。但如果不了解纳米材料和细胞之间的相互作用，反而会给细胞带来伤害。本项研究发现，细胞会把长直的纳米材料误判为球形而试图整个吞下去，一旦这种情况发生，就没办法在退回去。而这个材料太长，细胞不可能整个吞下。

人们知道石棉对人体有害，其长长的纤维能像箭一样刺穿细胞。但科学家一直不理解，细胞为何会对石棉纤维和其他纳米级的材料感兴趣，而进行吞噬。这些材料对细胞来说太长了，根本无法整个吞下去。本项研究通过分子计算模拟发现，碳纳米管尖端接近细胞时，细胞会产生“误会”，以为它只是个小圆球而不知其是个圆柱，等意识到小球“太长”，根本吞不下时，已经为时太晚。作者们用纳米管、金纳米线对小鼠肝脏细胞、人类间皮细胞进行细胞实验，发现90%的纳米材料都是以尖端90度角进入细胞。

石棉纤维、商用碳纳米管和金纳米线都有一个圆形的尖头，直径在10纳米到100纳米之间，正处于细胞处理范围。细胞上有



细胞通过吞噬来进行物质摄取。长垂直纤维来到附近时，细胞只感受到它的一角，从而误判为一个球，并开始吞噬。但这个纤维太长，细胞无法完全吞噬。

一种受体蛋白质会聚集并弯曲细胞膜壁，使细胞卷曲包住纳米管尖端，反向调整纳米管角度，使纳米管尖端能以90度进入，从而降低细胞吞噬微粒所需的能量。这一行为叫做“尖端识别”。作者们原以为纳米管会贴附细胞膜以得到更多结合位点，但模拟却显示，纳米管稳定地旋转到近垂直角度以适于进入，以便其尖端被完全包围。这和人们的直觉相反。细胞膜包住纳米管时，会释放弯曲能量，而如果纳米管的圆形尖端被切掉，开口而且中空，

它就只会贴在细胞膜上而不会进入细胞。当细胞的吞噬作用开始，就没办法再退回去。细胞觉得无法整个吞下纳米管，就会求救。但求救信号反而会引发免疫反应，造成更多炎症反应。只有完全理解纳米材料和细胞之间的相互作用，才能设计出可靠的运输工具，控制它们和细胞之间的相互作用，不引起中毒反应，最终制造出对细胞没有伤害的纳米管。

相关工作发表在Nature Nanotechnology 6, 714-719 (2011).

论文题目: Single-atom catalysis of CO oxidation using Pt1/FeOx

项目来源: 国家自然科学基金

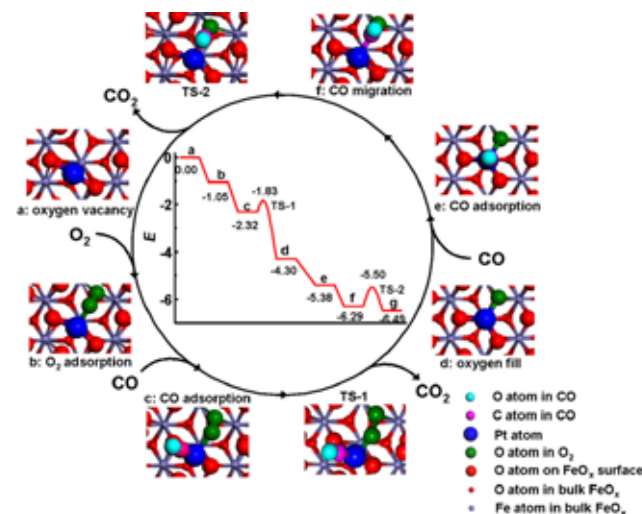
用户来源: 中国科学院大连化学物理研究所、清华大学化学系、美国橡树岭国家实验室、上海应用物理研究所同步辐射装置、美国密苏里圣路易斯大学

论文来源: 《自然: 化学》第3卷第8期, 页号: 634-641, 2011年8月出版

本研究是关于一氧化碳氧化的单原子催化剂的研究。

近几年来，随着先进表征技术（如STEM-HAADF, XAFS）和理论计算方法的发展，人们对纳米催化科学的认识得到了极大地推动。一些亚纳米尺度的催化剂已经被证明具有显著不同于纳米尺度催化剂的性能。然而，制备负载型单原子催化剂仍然是一种最有效的获得高性能催化剂的方法。实验研究发现，氧化铁负载的单原子Pt催化剂可以获得一氧化碳氧化反应的高活性。密度泛函理论（DFT）计算结果表明，单原子Pt位于氧化铁的氧终端位，同时，单原子Pt催化剂可以有效避免催化剂中毒，并促使催化剂表面氧空穴的形成，从而具有高效的催化一氧化碳氧化的性能。该研究工作为开发新型高效催化剂提供了新的思路。

相关工作发表在Nature Chemistry 3, 634-641 (2011).



一氧化碳氧化反应在Pt/FeOx表面的催化循环图及其能曲线

论文题目: Metallic Few-Layered VS2 Ultrathin Nanosheets: High Two-Dimensional Conductivity for In-Plane Supercapacitors

项目来源: 973、国家自然科学基金、中国科学院知识创新工程、新世纪优秀人才支持计划

用户来源: 中国科技大学合肥微尺度物质科学国家实验室、上海超算中心

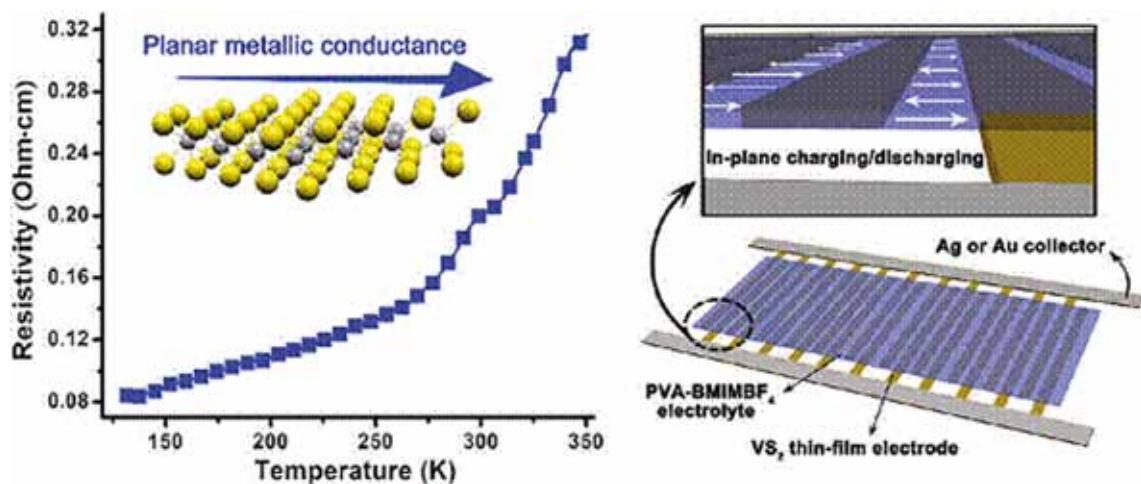
论文来源: 《美国化学会志》第133卷第44期, 页号: 17832-17838, 2011年11月9日出版

本研究发现了超薄纳米片状二硫化钒层状材料具有高二维导电性，可用于制造平面内的超级电容。

自石墨烯发现以来，其他类石墨烯的低维层状材料如过渡金属硫化物等也引起了人们广泛的关注。二硫化钒层状材料的层间是弱的范德华相互作用，层内是钒原子层处于两层硫原子之间，形成了类似于石墨烯的几何结构。它们可以被剥离出只有单层或少数几层的材料，同时又有丰富的电子结构性质，因而可以被用

来制备纳米器件，超薄电子材料等。本项工作成功地制备了少数几层的二硫化钒纳米二维材料，它们具有金属性的同时，还有较高的电容，可以进行超过1000次的充放电循环，有望成为高表现的平面内超级电容。理论计算根据实验几何结构，使用广义梯度近似和杂化泛函，确认了单层二硫化钒的金属性。

相关工作发表在J. Am. Chem. Soc. 133, 17832-17838 (2011).



超薄纳米片状二硫化钒层状材料的二维导电性和充放电

论文题目: Atomistic Analysis of Pseudoknotted RNA Unfolding

项目来源: 国家自然科学基金、江苏省自然科学基金、973

用户来源: 南京大学物理系

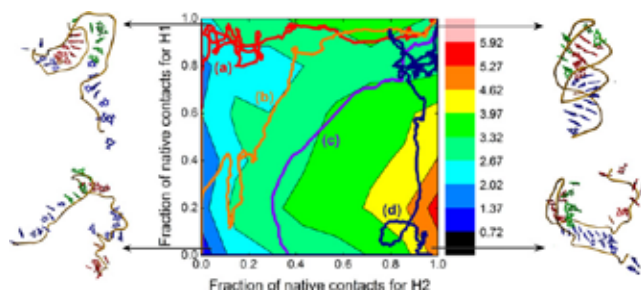
论文来源: 《美国化学会志》第133卷第18期, 页号: 6882-6885, 2011年5月11日出版

本项工作对赝结 (pseudoknot) 结构的RNA的去折叠过程进行了原子水平的分析。

近年来, 人们越来越认识到在生物基因组中, 大量的DNA序列被转录为非编码RNA, 这些非编码RNA的功能具有惊人的多样性, 如转录调控、染色体复制、RNA修饰、mRNA稳定性与翻译、蛋白质降解与转位等等。人们逐渐认为, 非编码RNA在细胞内部的基因调控网络中构成了另外一层次隐藏的信号系统, 并决定了生物的复杂性与多样性。为了更好的认识非编码RNA的功能, 需要研究其三级结构以及这些结构的形成过程。对RNA折叠动力学和热力学的深入理解还可以帮助人们进行有效的结构预测。特别地, 最新的研究暗示RNA的折叠能量面也许和传统的蛋白质能量面有所不同, RNA具有更多的折叠中间态和更粗糙的能量面, 传统的全或无的蛋白质折叠图像对RNA可能不再适用。因此, 非编码RNA的折叠研究可促进生物大分子能量面理论新的发展。

本项工作选择了一个典型的RNA赝结 (pseudoknot) 结构, 首次在全原子水平上对其去折叠过程进行了大规模分子动力学的模拟与分析。研究结果表明, RNA的去折叠路径具有丰富的多样性, 显示出多个中间态, 并且其过渡态也具有多种结构, 整个过程没有蛋白质分子系统中的全或无协作行为。结果还表明, RNA二级结构和三级结构之间存在很强的耦合, 这种耦合决定了大部分折叠路径的走向, 这也和通常认为的RNA hierarchical

folding看法不同。此外, 本项工作还分析了loop结构、coaxial stacking、和结构应力等因素在RNA去折叠过程中所起的作用和对其折叠过程的影响。本项工作最后研究了水分子在去折叠过程中的作用, 发现水分子主要通过两种机制和RNA去折叠耦合, 即expulsion和concurrent机制, 在蛋白质折叠中观察到的dewetting机制在此类RNA去折叠过程中没有被观察到。这一研究工作是人们首次在全原子水平上对RNA的折叠和去折叠行为进行探讨, 得到了这一过程的统计绘景。RNA折叠能量面的研究为传统的生物分子能量面理论提供了新的物理内涵, 并将推动其理论的进一步发展。



非平衡态RNA链去折叠的自由能预测

论文题目: Undulating Slip in Laves Phase and Implications for Deformation in Brittle Materials

项目来源: 国家自然科学基金

用户来源: 中科院金属研究所、清华大学材料科学与工程系

论文来源: 《物理评论快报》第106卷第16期, 论文号: 165505, 2011年4月22日出版

本项工作利用球差校正电镜发现在Laves相金属间化合物中, 位错通过反复地在上下两个不同的滑移面间来回跳跃, 从而以波浪形状的路径向前滑移。这种位错滑移机制的产生归结于Laves相中不同原子层之间结合力的不同。这种特殊的变形机制将有利于解释金属间化合物在高温变形时存在脆-韧转变的特性。

金属间化合物虽然具有优异的高温力学性能, 适合用作耐高温材料, 但是它们在室温下的脆性严重地阻碍了其工业应用。这类材料要实现塑性变形, 往往需要加热到很高的温度(脆-韧转变温度以上), 位错才可能被激活。由于金属间化合物具有复杂和特殊的结构, 位错在其中的运动不像在金属中那样简单, 它们的滑移往往需要涉及几个甚至几十个原子的协调运动, 而不仅仅是在某个固定的滑移面上简单的剪切过程。这样, 位错滑移的区域也由一个滑移面扩展为一个滑移区域。这样复杂的过程需要通过高温的热激活降低原子间的键合, 从而使得原子的协调运动成为可能。但是, 目前还没有足够的实验证据显示这个复杂滑移过程的具体步骤, 以解释热激活是如何促进位错运动的。

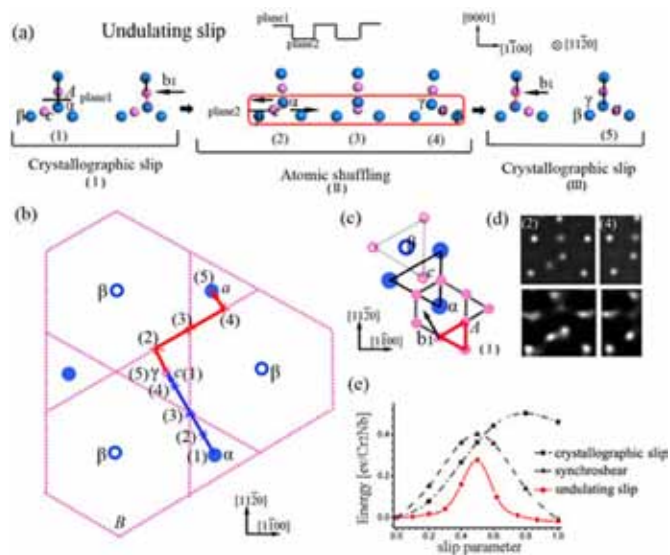
本文作者利用球差校正电镜, 在原子尺度上确定了Laves相中基面不全位错的核心结构, 从而揭示了位错在一个柏氏矢量距离上的运动是由三个阶段组成的: 首先, 位错在结合力较弱的滑移面上以晶体学滑移的方式移动; 接着, 位错跳跃至另一个结合力较强的滑移面, 以原子重整(shuffle)的方式实现三层原子的重新排列, 从而避免了单纯晶体学滑移会造成的高能垒状态; 最后, 位错返回到原来的滑移面, 继续晶体学滑移。由于位错在每个柏氏矢量距离的运动中都必须经历一次原子重整, 因此位错的运动需要热激活的帮助才能完成。

另外, 通过对位错周围的定量应变分析, 研究也发现了这一特殊的位错结构周围具有异常的应变场分布。虽然利用Foreman模型计算出的位错周围的应变场分布和实验得到的大致相符, 即滑移面上半部区域是压应变状态, 下半部区域是拉应变状态, 但是实验得到的拉应变却是一种花瓣形分布, 与集中分布在位错正上方的压应变呈现非对称的形态, 甚至在位错核心正下方没有任

何应变分布。这种奇特的应变场分布, 跟这种特殊的滑移过程导致的位错核心结构有很大关系。这也同时表明, 要得到精确的位错应变场分布, 尤其是在具有复杂结构的材料中, 往往需要精确地确定位错核心结构。

Laves相中波浪滑移机制的发现, 不仅有助于理解金属间化合物的脆-韧转变, 也将丰富对金属间化合物中位错运动机制的认识, 同时也扩展了对于位错性质的认知和理解。自然界中很多脆性材料都具有比较复杂的结构, 这也将预示这种波浪滑移机制有可能用于解释更多材料的变形过程。

相关工作发表在Phys. Rev. Lett. 106, 165505 (2011).



波浪滑移机制的NEB计算结果。(a)从侧面显示了位错的滑移过程。(b)和(c)从俯视的方向显示了原子沿着Z字形的路径向前运动。(d)中计算模拟像(上)与实验像(下)相互一致。(e)显示了波浪滑移是所有可能滑移机制中能垒最低的一条路径。

论文题目: Intercalation and diffusion of lithium ions in a carbon nanotube bundle by ab initio molecular dynamics simulations

项目来源: 国家自然科学基金、中科院、973

用户来源: 上海应用物理研究所、四川大学物理学院、大连理工大学

论文来源: 《能源与环境科学》第4卷第4期, 页号: 1379-1384, 2011年4月出版

本项工作通过分子动力学模拟研究了碳纳米管束中锂离子嵌入和扩散行为。

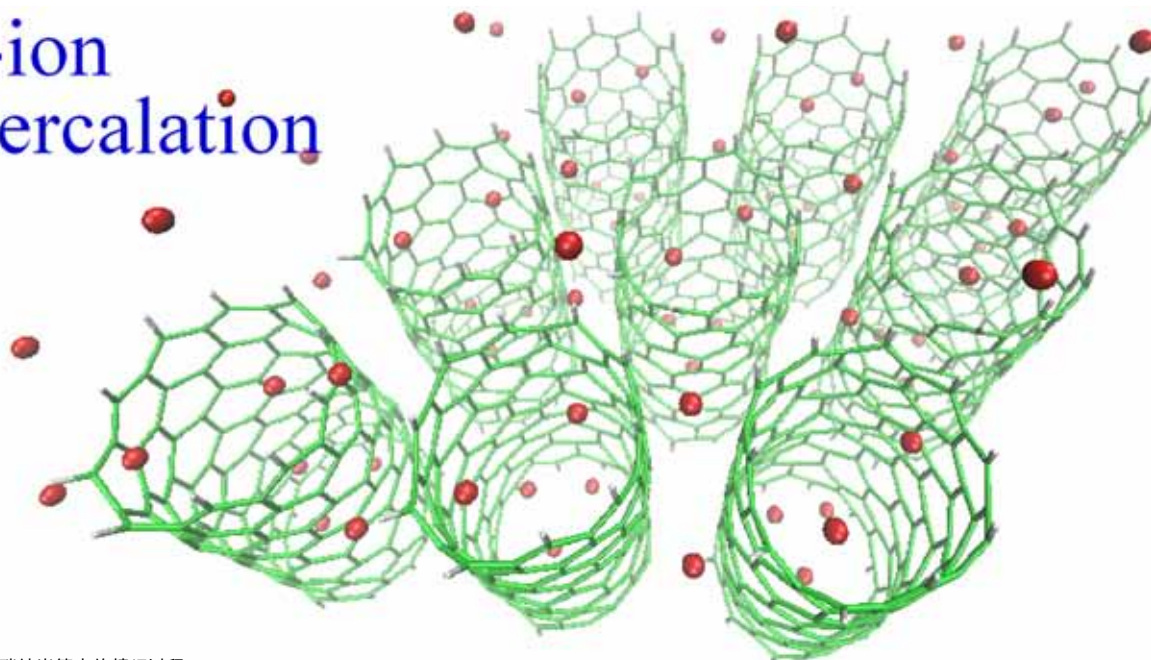
高充电-放电效率、高容量、高可循环性的能量储存装置, 是本世纪能源问题的一个核心挑战。锂离子电池是一种很有希望的能量储存装置, 利用纳米材料修饰的锂电池电极被认为能够大大提高锂离子电池的性能。揭示锂离子在纳米结构中的运动规律及其机理, 可以有力地推进基于锂离子的能量储存方法和技术的发展。

本项工作采用最新的量子分子动力学模拟技术, 研究了锂离子嵌入碳纳米管束及其在碳纳米管束中扩散的动态行为。首次观察到锂离子嵌入碳纳米管束过程及其在碳纳米管束中的扩散行为。特别是发现嵌在三个碳纳米管之间锂离子很难受到很强的吸

引势, 很难离开这个位置。因此, 嵌入此类位置的锂离子, 在充电-放电过程中很可能是不可逆的, 这将会降低锂离子电池的能量储存能力。深入研究显示, 碳纳米管之间的距离对锂离子的嵌入稳定性起关键作用。因此, 这个理论研究预言: 合理的调控碳纳米管之间的距离可以有效地提高充电-放电过程中可逆的部分, 提高充电、放电效率, 实现基于纳米调控的高效能量储存装置。这项研究成果对揭示锂离子嵌入碳纳米管束及其在碳纳米管束中扩散的物理机制有重要意义, 并且对研制高充电-放电效率的锂离子电池有重要启示。另外, 本项研究所用的量子分子动力学具有普适性, 还可以广泛的应用于其它纳米结构相关的研究领域。

相关工作发表在Energy Environ. Sci. 4, 1379-1384 (2011).

Li-ion Intercalation



锂离子嵌入碳纳米管束的精细过程

论文题目：T-Carbon: A Novel Carbon Allotrope

项目来源：国家自然科学基金、中国科学院

用户来源：中国科学院研究生院

论文来源：《物理评论快报》第106卷第15期，论文号：155703，2011年4月15日出版

本项工作基于密度泛函第一性原理研究，设计提出了元素碳的一种新结构，该结构被命名为T型碳（T-carbon）。

碳是地球上组成生命的最基本元素之一，可以形成 sp^3 、 sp^2 和 sp 杂化化学键，具有很强的结合能力，可与其他元素结合成不计其数的无机和有机化合物，构成了丰富多彩的世界。在自然界，碳一般具有三种同素异形体：石墨、金刚石和无定形碳。

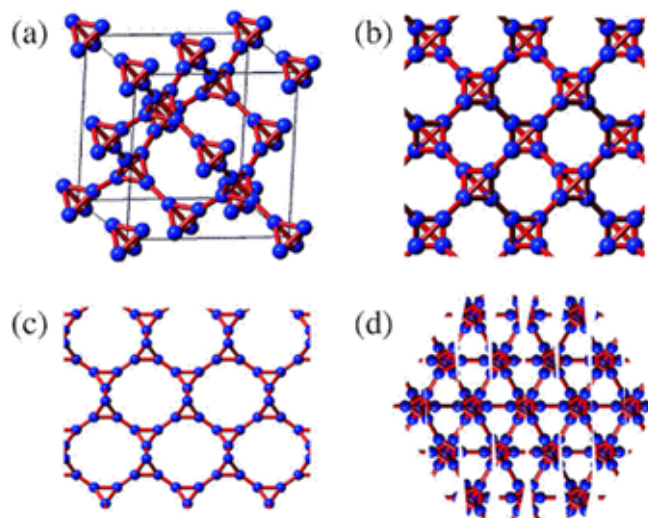
本文作者提出，如果将立方金刚石结构中每个原子用一个碳的正四面体来替代，将会形成碳的一种新型三维立方晶体结构。他们基于密度泛函的第一性原理研究，发现这种结构在几何、能量以及动力学上都是稳定的，并命名该同素异形体为T-carbon。研究表明，T-carbon具有与金刚石相同的空间群，是一种具有直接带隙的半导体，带隙在3eV左右，并可通过掺杂来调控带隙

大小以适用于光催化；其价电子形成了各向异性的 sp^3 杂化键。

T-carbon的维氏硬度为61.1GPa，与立方氮化硼的硬度相当，比金刚石的硬度小1/3左右，具有非常低的密度，仅为每立方厘米1.5克。与碳的其他同素异形体比较，T-carbon沿特定方向上的原子间距比较大，每个原子体积是金刚石的两倍多、石墨的1.5倍；其体弹性模量是金刚石的36%、石墨的57%；其原子间空隙较大，非常有利于做储能材料。由于上述独特的性能，T-carbon一旦实验上被获得，将会在光催化、吸附、储氢、航空航天材料等领域有潜在的广泛应用。进一步的研究显示，T-carbon也有可能

在宇宙星际尘埃或太阳系外行星中被观察到。

相关工作发表在Phys. Rev. Lett. 106, 155703 (2011).



T型碳的结构示意图。(a) 将立方金刚石结构中每个原子用一个碳的正四面体来替代所形成的T型碳的立方晶体结构。(b)- (d)分别从[100]、[110]和[111]方向所看到的T型碳

中心为工业领域提供服务

2011年，上海超算中心不断提高高性能计算的应用服务水平，为新老用户更好地利用CAE技术来解决众多大规模工程实际问题做出了有力支持和贡献。同时，基于上海超算完备的CAE/CFD工具以及工程技术人员丰富的经验与较高的技术水平，完成

了一批工程咨询项目。从众多研究和项目成果中撷取各个领域内具有代表性的一些用户实例，共享当今CAE-HPC技术在工业和研究领域广泛应用的成果和经验。

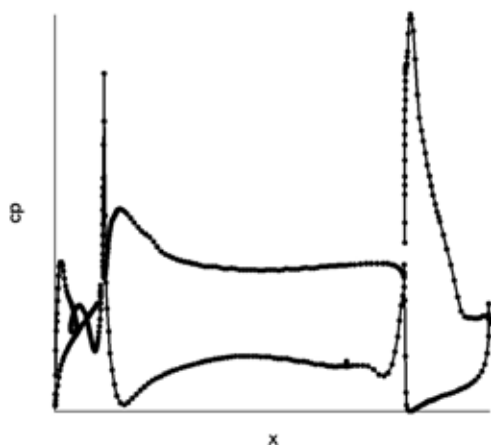
航空领域

研究课题：大型客机C919增升装置设计

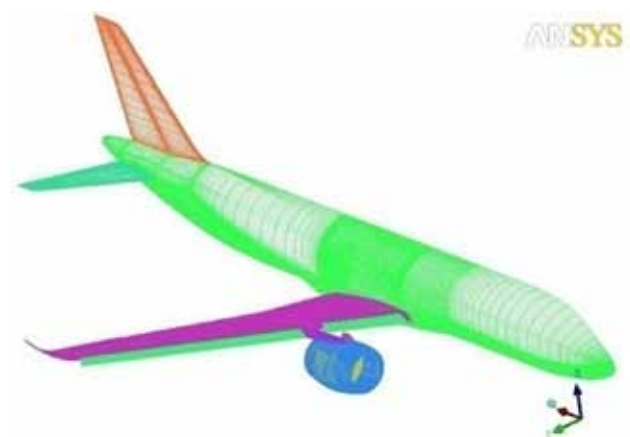
课题来源：大型飞机重大专项

用户单位：中国商用飞机有限公司上海飞机设计研究院

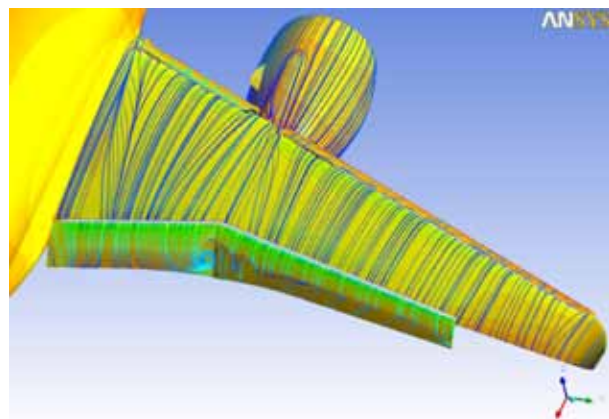
气动性能评估和CFD仿真计算在C919大型客机增升装置设计过程中占有重要地位，能为增升装置设计与试验提供参考，缩短设计周期，减少设计经费。该工作计算量大，任务繁重，为达到预期效果，必须具备充足的计算资源。因此，中国商飞上海飞机设计研究院与上海超级计算中心达成协议，利用其计算资源进行CFD计算，便于C919大型客机增升装置设计工作的进行。借助于上海超级计算中心的高性能平台，对C919飞机增升装置某设计轮次的着陆构型，验证增升装置设计方案，获取增升构型的气动特性并分析，以指导增升装置设计。



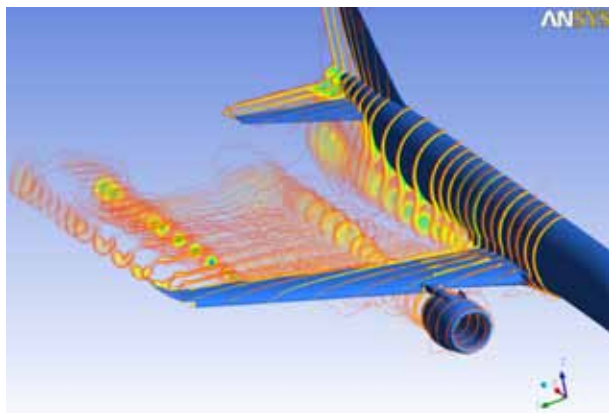
机翼剖面压力分布



全机表面网格



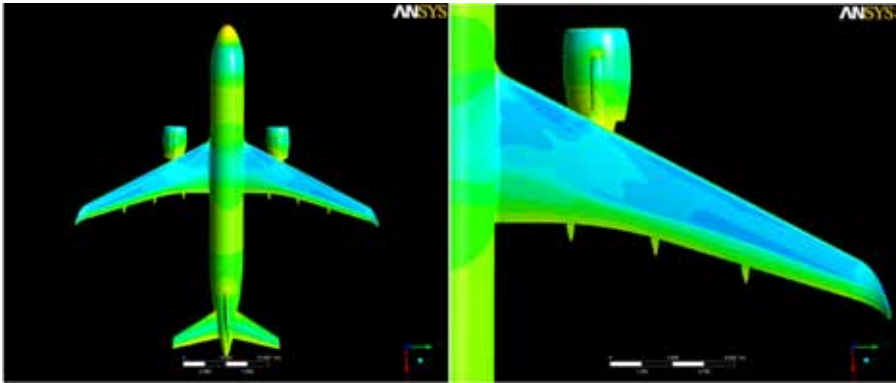
机翼表面压力云图及流线分布



总压等值线分布

研究课题：大型客机C919气动设计
课题来源：大型飞机重大专项
用户单位：中国商用飞机有限公司上海飞机设计研究院

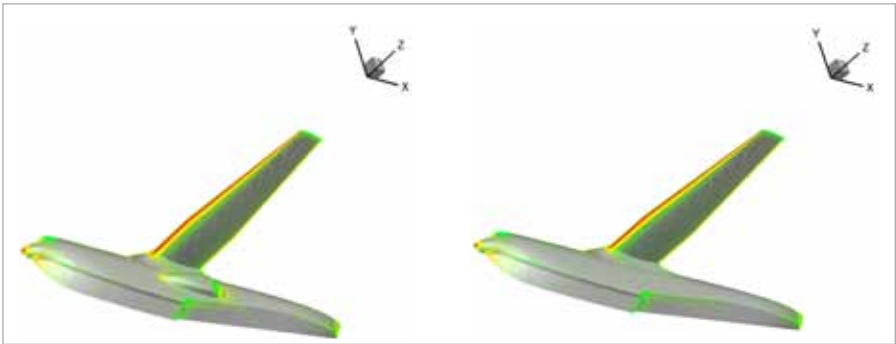
C919客机是我国拥有完全自主知识产权的150座级中短航程商用运输机。在2011年底顺利通过了工信部转详细设计阶段评审。它不仅具备一般民机安全性、经济性、环保性和舒适性的基本特征，还要比同座级后续机更加经济、环保、舒适。气动力技术在这些目标的实现过程中占据着至关重要的作用，是飞机性能提升的主要措施和手段。借助于上海超级计算中心的高性能计算平台，上海飞机设计研究院实现了快速准确的评估分析外形变化导致的气动力特性变化。



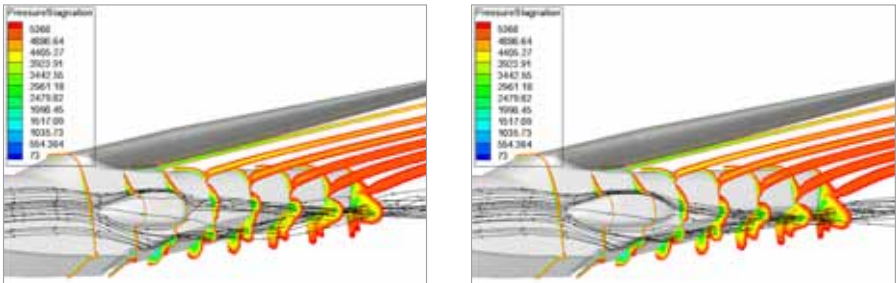
全机全模构型压力云图

研究课题：某型水陆两栖飞机起落架整流罩减阻研究
课题来源：大型民机设计
用户单位：上海交通大学航空航天学院

随着航空技术的发展和环保压力的增大，对飞行器经济性的要求越来越高。气动设计减阻是当前飞行器提高经济性的主要措施。水陆两栖飞机起落架整流罩一般体积较大，目的是为了将无法完全收入机身的起落架包裹住，它自身不但有型阻，而且还对机翼下表面产生了巨大干扰，降低了机翼的气动效率，因此，需要设计良好的气动外形以尽可能减小阻力。为明确起落架整流罩的气动特性影响及指导修形，首先进行了有无起落架整流罩的气动特性对比分析。然后基于CATIA的NURBS参数化方法，考虑起落架布局约束，对起落架整流罩进行了修形设计。CFD计算结果表明，修形后总阻力减小1.9个Counts，整流罩的影响主要体现在对机翼的干扰上。



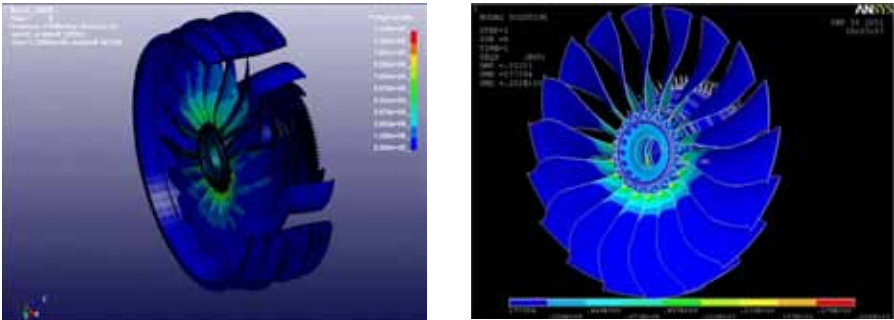
有无整流罩压力分布对比



修形前后总压流线对比

研究课题：整机FBO分析
项目来源：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

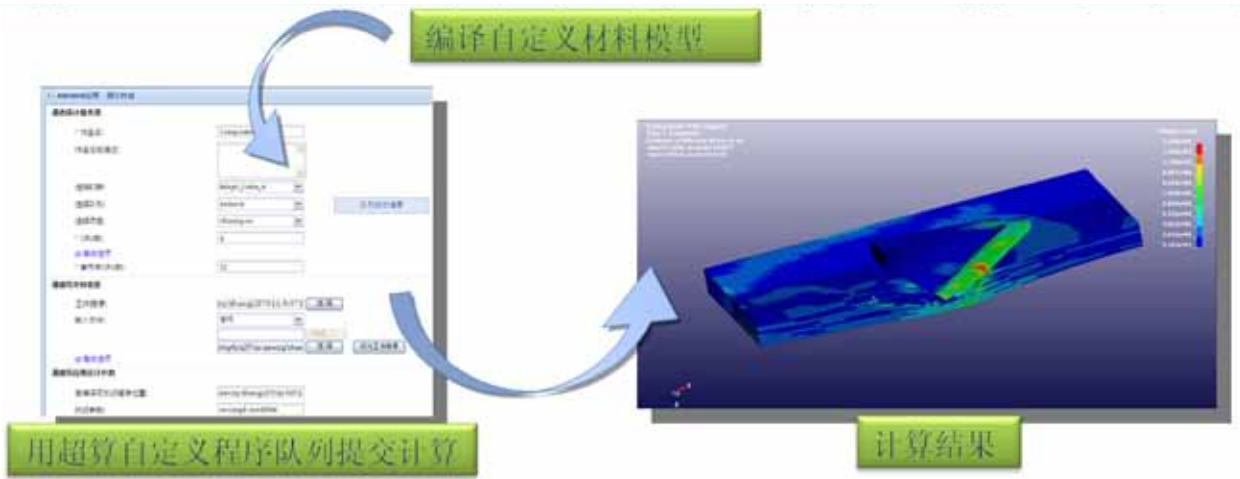
利用LS-DYNA对航空发动机整机模型进行仿真，主要是为了验证发动机整机模型的可行性，并通过该方法建立一个较为的准确物理模型，预测发动机在风扇叶片脱落（FBO）时的动力学行为，以及后续对发动机产生的震动和不平衡载荷。此外，对航空发动机的FBO仿真分析也是取得适航认证的重要手段。



FBO分析结果云图

研究课题：自定义材料模型冲击仿真
项目来源：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

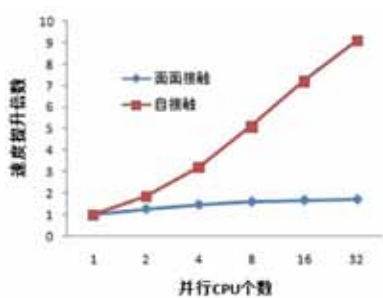
利用LS-DYNA用户自定义材料模型开发功能，编写了针对复合材料风扇包容机匣周围采用的编织结构的材料模型，并在超算平台上完成求解器的编译，初步完成了复合材料平板的外物冲击仿真，有力地支撑了商用航空发动机复合材料部件的设计。



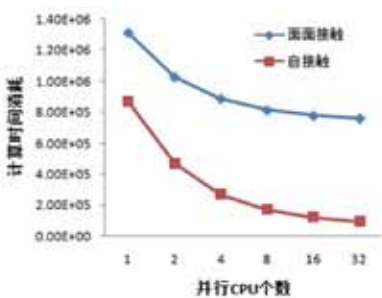
自定义材料模型求解流程

研究课题：LS-DYNA并行计算效率研究
项目来源：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

由于航空发动机包容性数值仿真庞大的模型规模、高度的非线性、以及复杂的接触算法，使得并行计算效率成为制约其工程应用的重要因素。中航工业商发在共享内存并行模式（SMP，Share Memory Parallel）下，分析影响包容性数值仿真并行计算效率的原因，研究提高并行计算效率的方法。分析结果表明，通过优化网格质量和改进接触算法等措施，可以有效提高航空发动机包容性数值仿真并行计算效率。



不同接触方式并行计算速度提升对比

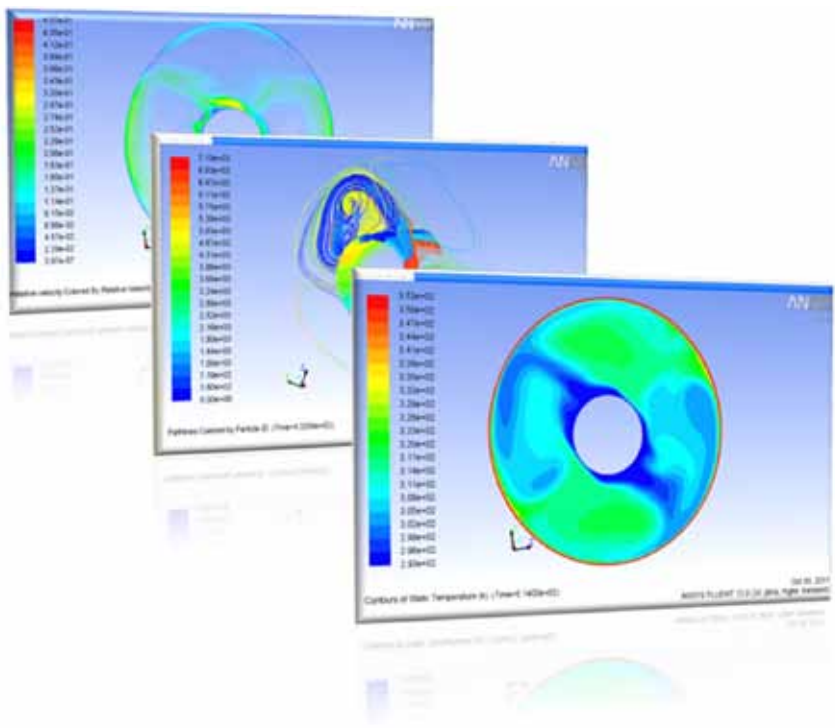


不同接触方式并行计算时间消耗对比

并行效率对比曲线

研究课题：压气机旋转盘腔流热耦合三维数值模拟
项目来源：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

该工作是为了获得高压压气机典型旋转盘腔内部气流换热流热耦合数值模拟结果，高压压气机旋转盘腔内部流动复杂，具有强烈的三维和瞬态特性，进行三维瞬态压气机盘腔数值模拟的主要目的是算取稳定的流场和温度场，提取壁面热流，计算获得换热经验关系式，并为计算固体力学提供高压压气机温度数据，供强度分析使用。

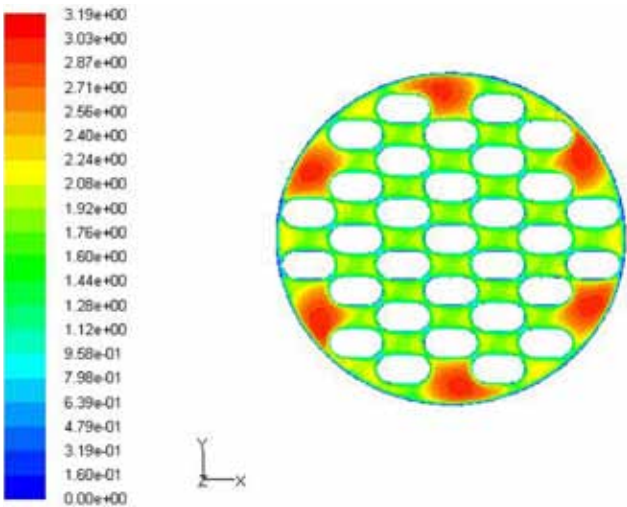


热流耦合分析结果云图

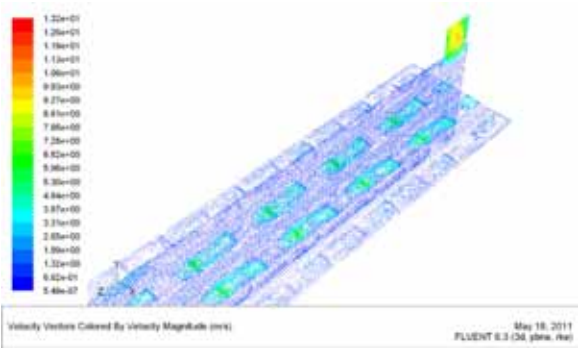
船舶领域

研究课题：螺旋扭曲式传热管研制
课题来源：内部发展基金项目
用户单位：中国船舶重工集团公司第七一一研究所

螺旋扭曲管最早由前苏联学者提出，随后得到较广泛的应用。应用场合遍及化学、石油、食品、造纸、电力、冶金、矿业和城区供暖等多个行业。学术界曾对螺旋扭曲管的传热和阻力性能进行过研究。同时期，抚顺石油化工公司石油二厂，对该厂蒸馏车间热回收系统的一台螺旋扁管换热器进行了工业试验。但是螺旋扭曲管换热器在国内一直未能有效推广。通过对螺旋扭曲管进行大规模整体性的CFD模拟，能够更加直观详细的得到其内部的流动与换热情况，发现影响传热和流动阻力的主要因素，并加以改进优化。



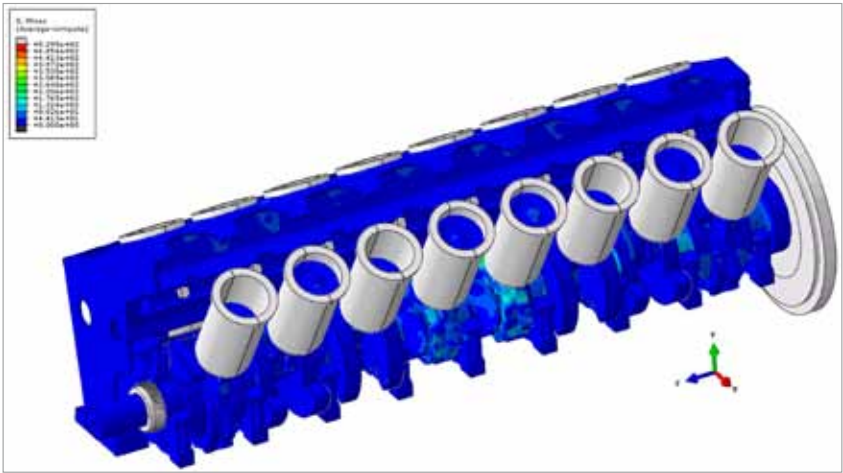
换热器内温度场分布情况



换热器内流场分布情况

研究课题：柴油机抗冲击性能动力学仿真分析
项目来源：沪东重机有限公司
用户单位：上海超级计算中心

柴油机等舰船设备在受到冲击载荷作用下的响应特性和性能研究，直接影响到整个船舶生命力和航行能力的稳定性。本项目以某型号柴油机为研究对象，利用ABAQUS软件开展虚拟冲击环境下的动态仿真，比较和确立了针对柴油机设备冲击分析问题的大规模数值仿真技术路线和实现方法，并且对该柴油机停机和运转两种情况下的抗冲击性能进行了分析评估。



柴油机应力云图

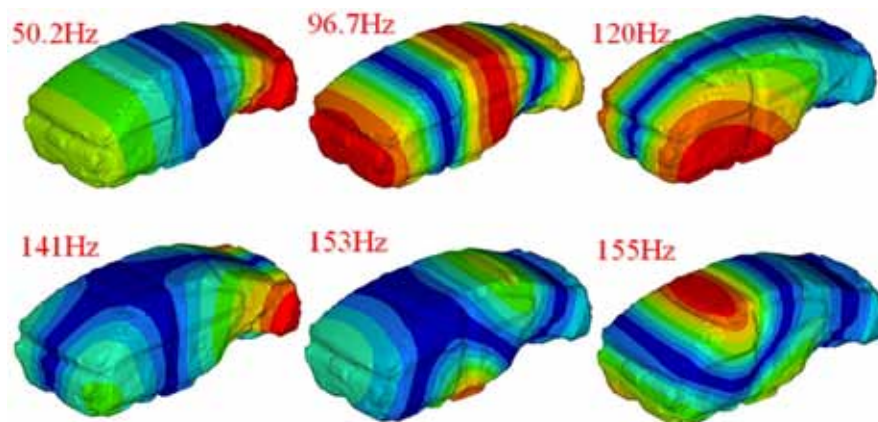
汽车领域

研究课题：某三厢乘用车开发

项目来源：奇瑞汽车股份有限公司

用户单位：上海世科嘉车辆技术研发有限公司

在现有平台上进行某车型的改型，涉及到车身和内外饰的重新开发。在项目开发中NVH性能仿真是重要的一环。其中NVH的声固耦合计算对CPU与IO有严格的要求，超算中心的高性能服务器将仿真计算所需时间缩短了5倍，为新产品开发赢得了时间。该分析为整车声学灵敏度分析，需要将整车结构有限元模型与声腔有限元模型进行流固耦合计算。其中整车的自由度为5100000万，声腔的自由度为100000。使用模态叠加法计算频响函数，模态提取到500Hz，频率提取到300Hz。该计算对存储空间与计算量都有苛刻的要求。利用上海超算中心的计算平台加快了分析速度，使得更多方案的尝试成为可能。通过数轮改进方案，最终该车型的NVH虚拟性能得到了项目组认可。



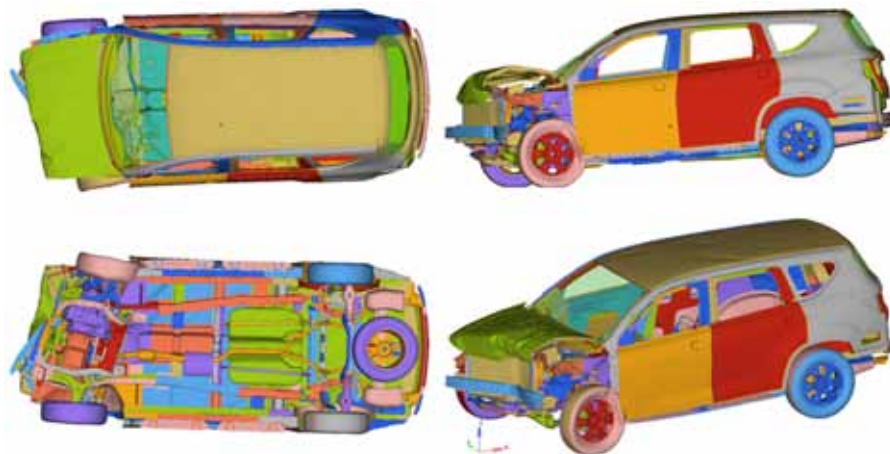
声腔模态前六阶振型

研究课题：某SUV整车全新开发

项目来源：奇瑞汽车股份有限公司

用户单位：上海世科嘉车辆技术研发有限公司

在项目开发中安全性能仿真是极其重要的一环。整车碰撞仿真是对CPU、存储以及内存要求最苛刻的计算之一。上海超算中心的高性能服务器具有大规模并行计算能力。通过同时调用48个核心进行并行计算，将仿真计算所需时间缩短到原来的1/3，为开发赢得了时间。该分析使用LS-DYNA求解器计算，模型含有100多万单元。使用超算中心的服务器顺利完成分析任务。



整车偏置碰撞变形图

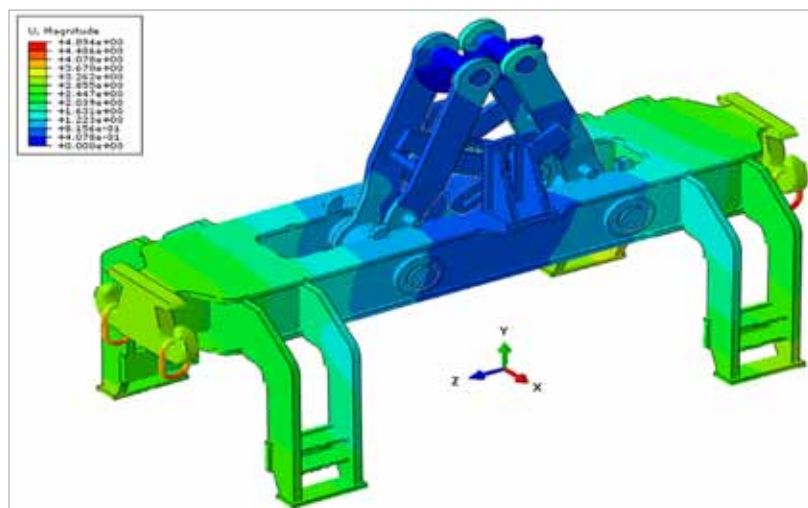
钢铁领域

研究课题：大型轧机起吊设备结构强度分析

项目来源：西马克技术（北京）有限公司

用户单位：上海超级计算中心

本项目针对大型热轧和冷轧轧机起吊设备结构进行三维CAD建模和起吊时结构受力分析，结合相关欧洲技术标准，考察了最大载荷和最不利工况下各起吊设备零部件中的结构强度和薄弱部位，指导关键零部件结构改进，确定了各起吊设备工作状态下的整体极限承载能力。



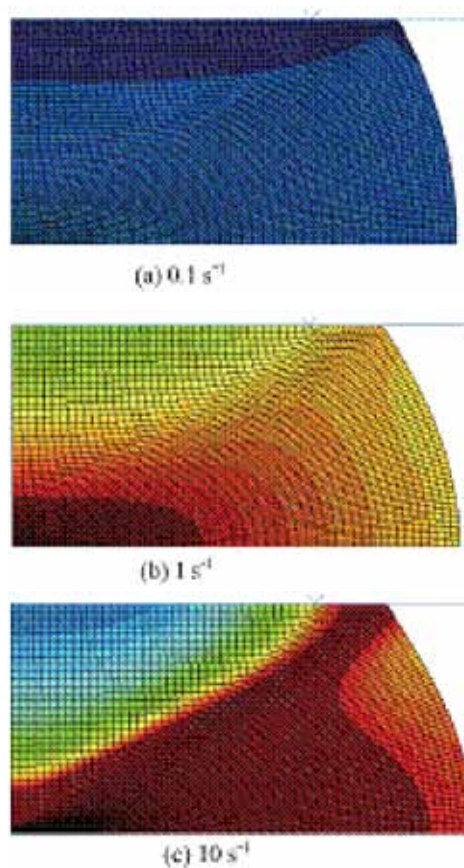
起吊设备整体变形云图

研究课题：镍基合金圆柱形热模拟试样热变形后鼓形的有限元研究

项目来源：企业科研项目

用户单位：宝钢研究院

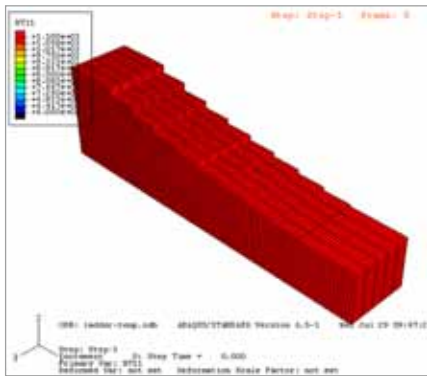
通过ABAQUS有限元分析软件对镍基合金圆柱形热模拟试样在加热和保温后的单向压缩变形过程进行了模拟。研究表明，由于镍基合金材料导热系数较小，在快速变形条件下，试样在单向压缩过程中产生的变形热不能充分扩散，从而导致变形后试样内部局部温度升高。通过与热模拟试样变形后鼓形的实测值进行比较，结果均表明变形后试样的鼓形随着应变速率的提高而增大。



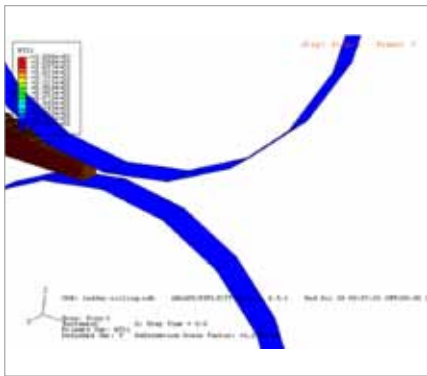
变形后试样温度分布云图

研究课题：某钢板轧制技术领域项目
项目来源：企业科研项目
用户单位：宝钢研究院

随着市场对钢板品种需求的提高，国内钢材生产厂大力拓展了对产品品种的研发，本项目中的有限元计算课题也是基于这个背景之下产生。通过有限元计算，可以获得一些实际生产试验过程中无法测量或者获取的参数。对于成本较贵的金属，采用有限元数值模拟计算，更是起到了节约了实验室研发成本的作用。超算中心为有限元模拟计算过程提供了一个高速计算平台，使得复杂模型的长时间计算大为缩短，提高了研发效率。



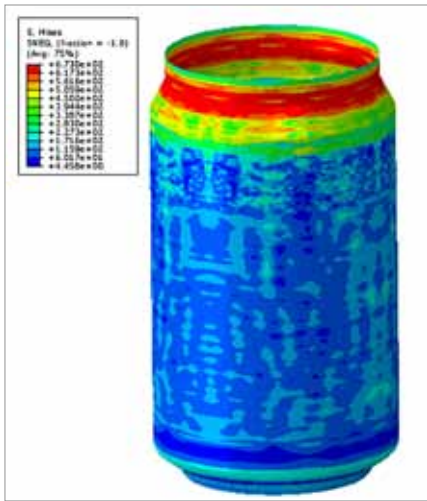
阶梯件加热后在空气中的冷却-热分析模型



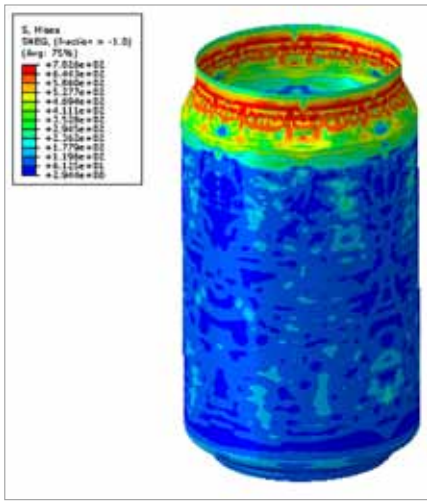
阶梯件轧制模型-热力耦合

研究课题：某产品缩颈翻边成形全流程数值仿真分析
项目来源：企业科研项目
用户单位：宝钢研究院

某产品持续减重，缩颈翻边工艺需要持续优化以解决减重后带来的缩颈起皱、翻边波浪等缺陷，因此必须对缩颈翻边工艺及模具具有深入了解。这里建立了缩颈翻边全流程数值仿真模型，对工艺及模具进行仿真分析，知道工艺改进及模具优化。与此，超算中心提供了强大的有限元仿真计算软硬件资源，作业提交方便，计算高效可靠，为科研工作提供有力可靠的手段。



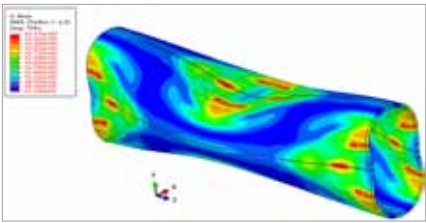
某产品缩颈翻边成形数值仿真



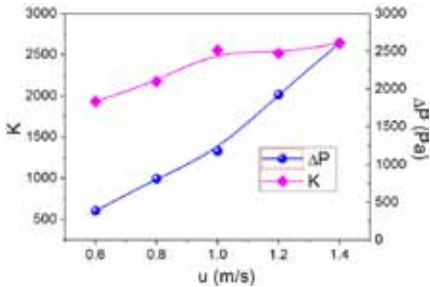
材料加工

研究课题： 三维波形换热管CAE辅助设计
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

为了能够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，即对异型管(三维波形换热管)进行成型分析和换热性能分析，最终选定符合使用工况且换热性能最佳的异型管结构。通过结构分析主要完成了不同类型模具，以及同一模型不同加工工艺下的异形管变形过程和承压能力模拟。并采用CFD的手段，对不同变形形状的异型管进行模拟，得到对应形状的异型管的传热与阻力特性，作为客户进行优化设计的参考依据。



成型后换热管中应力分布云图（周期对称模型）

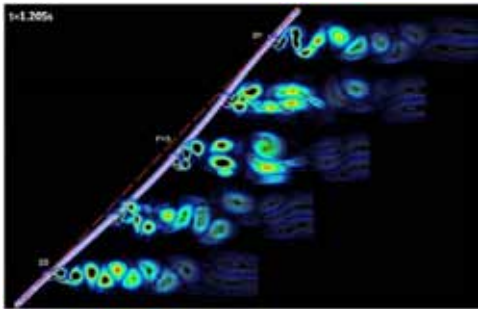


异型管传热与阻力特性随流速的变化关系

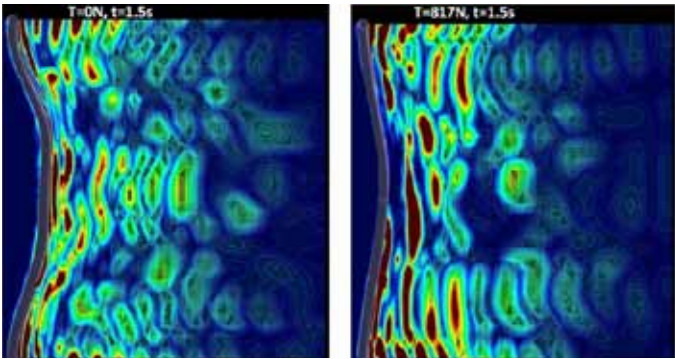
机理研究

研究课题： 海洋隔水管涡激振动的三维数值模拟研究
项目来源： 国家科技重大专项子课题资助项目
用户单位： 上海交通大学动力机械与工程教育部重点实验室

流体场采用k-ω湍流模型进行三维CFD数值模拟，固体场采用基于三维实体单元的有限元方法进行模拟，通过一种新的方法实现流-固耦合交界面的无缝数据交换，参考Lehn（2003）长径比为482的模型实验完成隔水管流向与横向涡激振动的三维数值模拟。模拟结果与实验结果吻合良好，都反映了多阶振动模态特性。引入激发速度解释了多阶振动模态的现象。进一步分析表明，大长径比柔性隔水管发生涡激振动时流场尾流区涡的脱落呈现多种涡结构模式，尾涡动力特性在不同截面的变化体现出明显的三维特征。同时隔水管振动时出现非对称弯曲大变形现象，运动轨迹呈现变形的“8”字形。研究同时表明，顺流向的振动响应不可忽略。



尾流区涡的脱落模式



尾流区涡量图

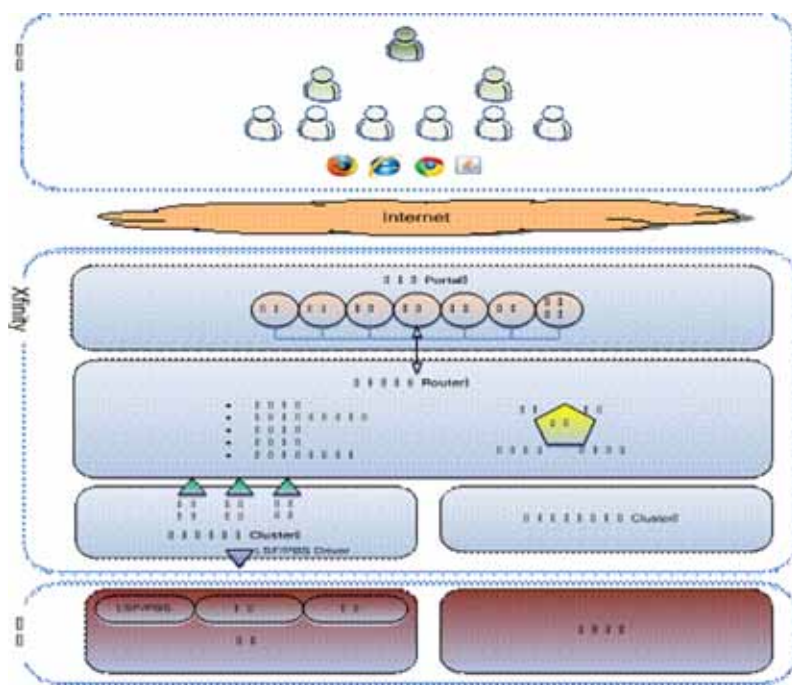
软件开发服务

软件开发服务主要根据中心发展和用户需求开展相关研发工作，为提升中心服务能力提供技术支撑。软件开发服务包括高性能计算平台软件开发、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开发

2011年，高性能计算平台软件Xfinity完成了四个常规版本和一个定制版本的开发工作。软件大版本号进入第二版，此版本中我们对软件整体架构进行了优化，从底层扩展性，安全性，稳定性等方面进行了改善，同时根据用户需求新增了若干功能，并修复了运行过程中发现的bug。在开发规范方面，我们增加了自测文档，代码review等内容以提高代码质量，使其更加完善、合理和高效。在软件的部署维护方面，我们定期检查，严格记录，谨慎实施，定期备份及测试备份还原，确保了Xfinity服务质量。

截至2011年12月30日，Xfinity平台提供15个工程计算软件，15个科学计算软件，已部署至7家企业（商发、上汽、宝钢、核工院、延峰、微电子所、光源）和1个通用平台，拥有119位活跃账户，使用41个并行软件，共提交9378个作业，共计使用CPU机时约为721709核小时。



并行计算研发

1.1 并行化

并行化工作主要是根据用户需求进行串行程序并行化, 以及并行应用的排错分析等。2011年主要对南大用户的wham串行应用进行了并行化工作, 首先对串行程序优化, 实现了接近70%的加速, 然后在优化的串行程序基础上完成了MPI、OpenMP和GPU三个版本的并行程序开发, MPI程序在魔方上测试到1024核加速比接近线性, OpenMP程序在魔方单节点刀片上测试加速比为15倍(16核), GPU程序在FermiS2050上测试加速比8.6倍左右。另外, 还对光机等用户程序进行错误定位和分析。



1.2 GPU

2011年GPU工作主要包括GPU应用移植、GPU测试以及GPU技术调研与跟踪。

(1) GPU应用移植

- 完成格子Boltzmann方法的移植与性能分析, 使用Hybrid MPI+OpenMP+CUDA多层次并行编程模式, CPU+GPU协同计算, 测试加速比接近100倍。
- 与复旦大学、同济大学实习生合作完成期权定价问题的GPU移植。实现了金融计算应用在GPU上的移植, 使用MPI+CUDA模

式, 利用GPU集群获得超过900倍加速。

- CFD差分求解器GPU移植(进行中)。在CUDA编程模式下移植优化CFD差分求解器, 使用MPI+CUDA模式进行大规模并行, GPU+CPU协同计算, 计划封装并开放接口以重用或实现为GPU benchmark。

(2) GPU应用测试

- 测试LAMMPS (LJ, 108, 000 particles)、NAMD(ApoA1 Benchmark, 92, 224 atoms, 12A cutoff)、LBM 3D Lid-driven cavity flow、AMBER, 显示/隐式Solvent GB benchmark。
- GPU Linpack Benchmark测试。选取业界通用的Linpack测试GPU的浮点峰值性能。采用 HPL 2.0 with CUDA, 结合 GotoBlas 2.1.13进行测试。
- 异构平台Benchmark (SHOC、Rodinia、Parboil) 测试, 研究异构平台下(CPU+GPU, 支持CUDA和OpenCL)性能测评方法, 选取目前业界通用的Benchmark (SHOC、Rodinia、Parboil) 进行测试。

(3) GPU技术调研及跟踪

- GPU开发、调试以及性能分析工具的调研。掌握CUDA平台开发工具的使用, 提高了开发的效率, 输出相应的指导手册。
- 调研并测试GPU平台platform和torque作业调度系统的使用。
- 调研国内外GPU超级计算机的现状以及应用情况, 作为四期建设参考。

1.3 性能评测

2011年性能测评工作主要包括以下几个方面:

(1) 高性能计算系统测评工具的部署及使用

调研mpi和openmp程序的性能分析工具, 如TAU、Scalasca、IPM、mpiP、ompP等, 确定了简单易用、可移植性强的性能测评工具:mpiP (MPI) 和ompP(OpenMP), 并将其部署于刀片集群上, 为大规模集群系统的部署提供了可供参考的技术文档。

(2) 高性能计算应用性能评测

针对典型的高性能计算应用包括科学计算应用如LAMMPS、CPMD、NAMD、NWCHEM等, 以及部分用户程序进行了应用特征性能分析。研究应用在高性能计算集群系统上的MPI每个函数随着运行进程/节点数增加调用的变化情况; 每个MPI函数调用所占时间比重随着运行进程/节点数增加的变化情况; 通信消息的分布情况, 包括消息大小的变化、消息量的变化等。为应用或用户程序的优化运行提供参考。

(3) 高性能计算系统评测

高性能计算系统日趋复杂化, 加速部件的使用使得高性能计算系统的性能评测变得更为重要。本年度研究了HPC CPU计算系统的测评规范、方法, 以及基于CPU+GPU异构平台的高性能计算系统的测评规范及方法, 形成了相关的测评技术方案。同时根据用户需求, 提供了高性能集群的系统性能测评方案, 并协助签订了相关的测评技术合同。

国家科研项目

1. 中国国家网格南方主结点建设及应用服务关键技术研究

本课题从基础设施、网格环境、网格应用和运行管理等四个层面开展研究，成功部署200TFlops 曙光5000A高效能计算机，构建相应的网络系统和配套环境，研制主机运维管理系统，制订结点运行管理制度，建立网格用户服务质量管理体系，机器平均利用率超过70%。作为中国国家网格南方主结点，提供稳定的高性能计算和网格服务，移植优化大量应用软件，为用户提供了良好的应用环境；参与中国国家网格软件研发，遴选22个应用软件进行封装，构建了网格服务平台，支持了协同制造网格、上海网格、工业仿真与优化设计社区、新药研发网格及天文等应用。

课题在改善用户体验的网格软件技术、适应复杂网络环境的网格软件部署技术、支持多类型应用的应用封装技术、多网格环境的信任技术以及主机运维管理系统等方面的研究工作具有创新性，有效推进了网格实用化进程。

课题共出版1本专著，申请2项软件著作权，登记1项软件产品，发表论文29篇，培养15名博士、硕士，形成了一支技术扎实、经验丰富并具有良好服务意识的专业团队。本课题于2011年5月通过项目验收。

2. 中国国家网格运行管理技术研究

本课题于2011年7月顺利通过国家科技部组织的专家验收。课题由中国科学院计算机网络信息中心承接，上海超级计算中心与清华大学共同协作完成。课题依托中国国家网格支撑平台和国家网格相关管理规范及协议，广泛开展网格环境建设与运维工作，从多方面展开技术研究确保网格环境的稳定运行，建立了国内第一个网格技术支持中心，并通过远程镜像、动态迁移等容灾备份技术确保技术支持中心7×24小时不间断的技术支持服务。

课题组作为中国国家网格整体形象的代表，在高性能计算、网格软件、网格应用等领域开展培训和技术宣讲共计16次，参加培训人员超过500人次，并与国外单位合作主办网格应用比赛。

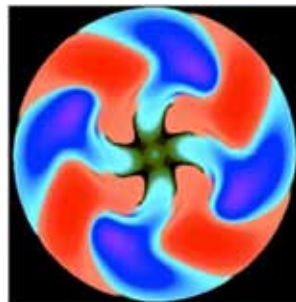
课题共申请4项专利，完成3项软件著作权登记，发表论文29篇。培养硕士生12名、博士生5名，为中国国家网格培养核心软件开发人员、管理人员及技术支持人员。

3. 天体大规模并行数值计算软件平台的研制

本课题是由上海天文台主持，上海超级计算中心与中科院软件所参与完成的，于2011年6月接受并通过863专家组的现场检查。上海超级计算中心完成了软件平台的实时可视化模块，并申请软件著作权一项。



行星流体动力学算例：等温面条带装螺旋图案



径向速度分布(极点观测)

4. 新概念高效能计算机体系结构及系统研究开发

上海超级计算中心在该项目中承担5个子任务，主要涉及高性能计算典型应用的分析以及在新型加速部件上的移植等。2011年，上海超算完成所承担的所有子课题任务，发表学术论文3篇。

5. 工业仿真和优化设计网格社区的开发与应用

本课题依托中国国家网格环境，通过对社区组成结构、基本服务功能、应用和管理技术、安全和运行机制等方面的研究和开发，形成了一套工业社区的软件系统。面向大型企业集团用户建设专用社区，面向中小型企业、科研院所的个人用户建设通用社区，涵盖工业领域结构、流体、电磁场、热力学等典型学科领域的仿真、分析、优化设计以及咨询交易等服务，制定了工业社区运行管理制度和规范，保障工业社区环境稳定可靠，确保7×24小时稳定运行。

课题申报软件著作权9项，发明专利7项，发表论文23篇，出版专著1本，培养博士、硕士研究生27名，取得了良好的社会效益和经济效益。本课题于2011年9月通过验收。

6. 基于沉浸边界法的气固两相湍流全分辨率直接数值模拟

2011年，该项目根据基金委要求，完成项目进度报告等工作；完成魔方上混合编程移植和前后处理，形成报告；形成颗粒移动模型报告。按照合同中并行应用可扩展性的要求，实现串行、并行差分场求解器，对并行可扩展性进行测试。

7. 多（众）核以及GPGPU异构平台上性能测评软件的研究

该项目结合国内HPC用户的需求，通过在大规模多核计算系统上研制性能测评软件包，对GPGPU这样高性能计算热点的深入研究，促进国内HPC应用水平的提高。根据项目计划任务书的安排，年初制定详细的工作计划按时完成了任务一至任务三，即：研究HPC的评测方法、规范，选择典型应用进行了CPU及异构平台下的应用特征分析；结合典型应用性能测评，研究性能测评工具，并基于mpiP和ompP二次开发性能测评工具；在大规模多核计算系统上部署性能测评工具。结合研究内容，在核心期刊上发表论文3篇：《异构平台下格子Boltzmann方法的实现及性能分析》、《随机波动率下的亚式期权定价问题在GPU集群上的实现》和《SSerach基于众核加速的并行模型分析》。

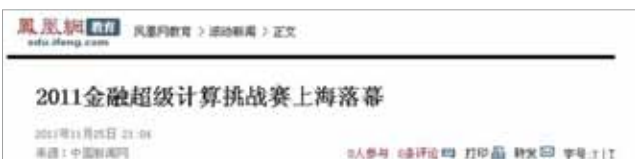


媒体报道情况

2011年，上海超级计算中心围绕“魔方”的运行使用、金融计算以及中心在国内高性能计算中发挥的作用等为主题，邀请社会各类媒体对中心的运营情况及各类活动进行追踪报道。《解放日报》、《文汇报》、《联合时报》等重要报刊、杂志和网站对中心进行了专题报道，引起了社会各界的重视。

以下列举了2011年重要报刊杂志对中心的相关报道。





2011年用户和"魔方"运行相关统计数据

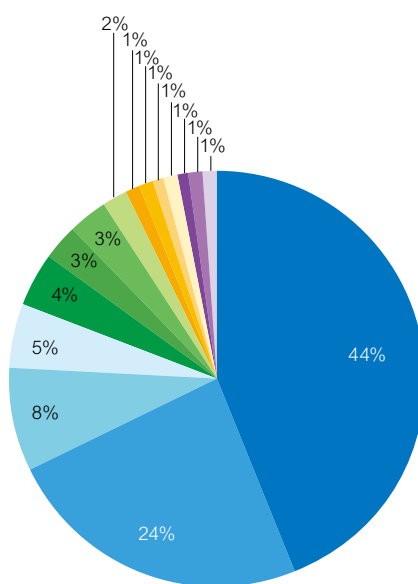
2011年上海超级计算中心主机“魔方”（曙光5000A）运行稳定，系统全年可用率平均为97.87%，网络系统全年平均可用率为99.81%，主机利用率显著上升，平均利用率达到74.39%。

2011年中心全年新增60家用户，累计共有342家用户。今年进一步优化超级计算应用环境，推进大规模并行计算应用发展，全年并行规模在1024核以上应用使用的机时占全年机时的20.46%。



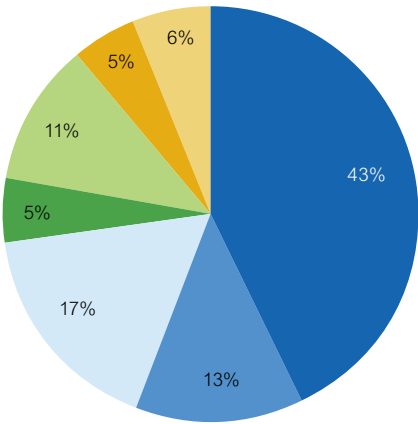
不同地域机时统计

地区	百分比
上海	44%
北京	24%
浙江	8%
安徽	5%
辽宁	4%
江苏	3%
陕西	3%
山东	2%
广西	1%
黑龙江	1%
吉林	1%
广东	1%
天津	1%
福建	1%
其他	1%



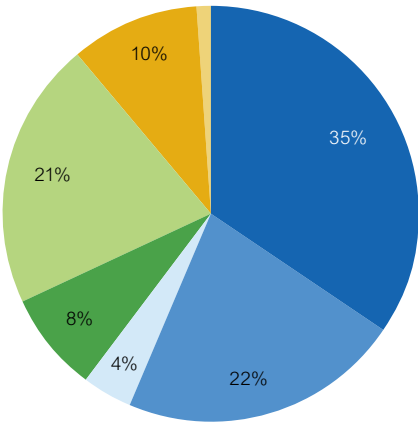
不同项目来源账号数统计

项目来源	百分比
863项目	5%
973项目	11%
地方政府支持科研项目	5%
国家重大工程项目	6%
国家自然科学基金项目	43%
企事业研究所项目	17%
其他	13%



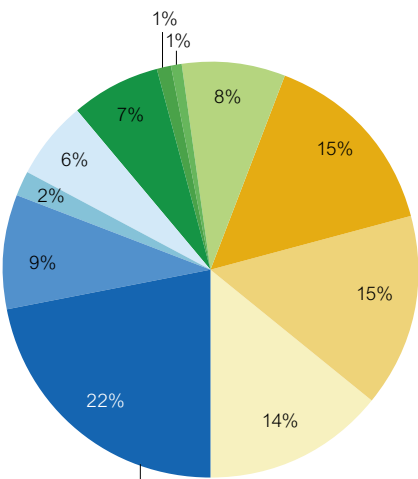
不同项目来源机时数统计

项目来源	百分比
863项目	8%
973项目	21%
地方政府支持科研项目	10%
国家重大工程项目	1%
国家自然科学基金项目	35%
企事业研究所项目	4%
其他	22%

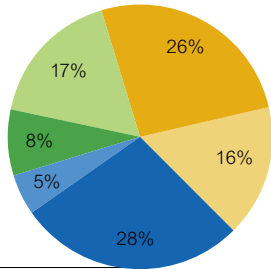


各领域帐号数统计

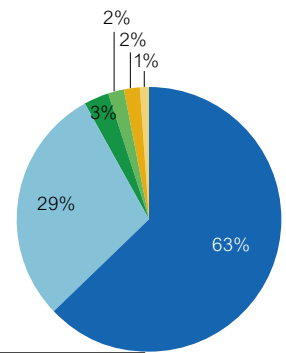
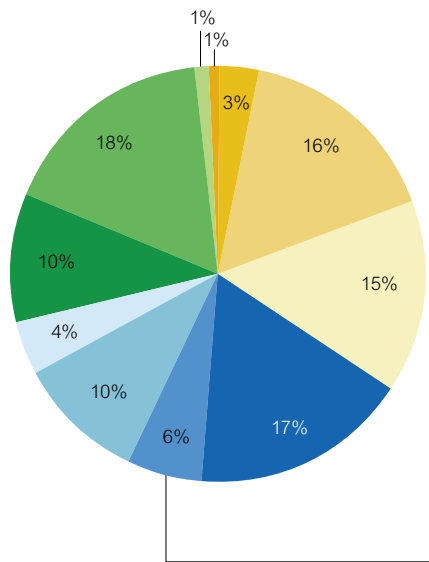
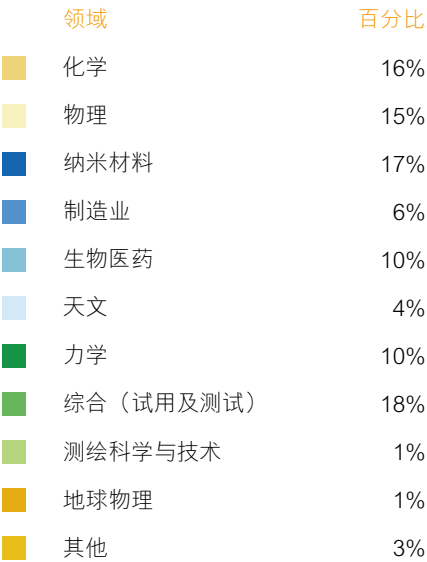
总计数	百分比
化学	15%
物理	15%
纳米材料	14%
制造业	22%
生物医药	9%
天文	2%
力学	6%
综合（试用及测试）	7%
测绘科学与技术	1%
地球物理	1%
其他	8%



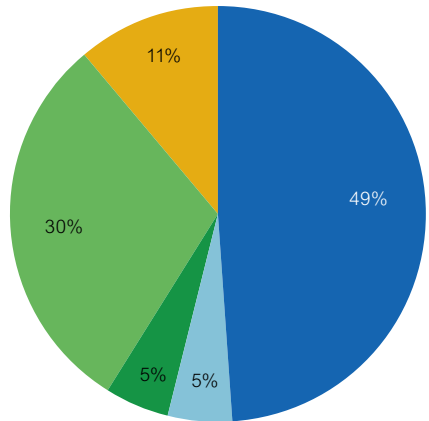
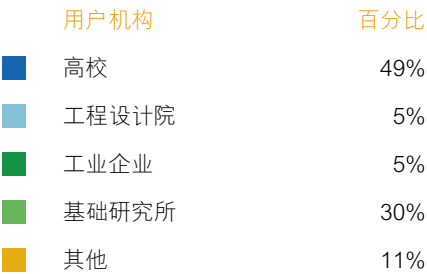
制造业	百分比
航空航天	26%
机械工程	16%
汽车	28%
船舶	5%
钢铁	8%
核电工程	17%



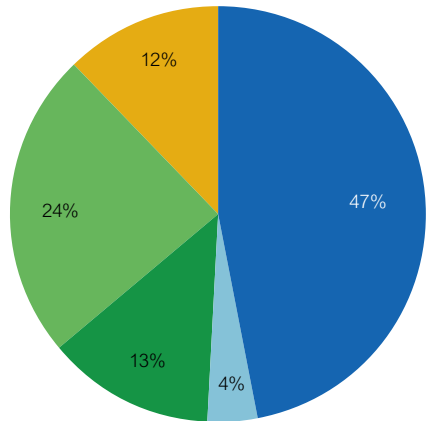
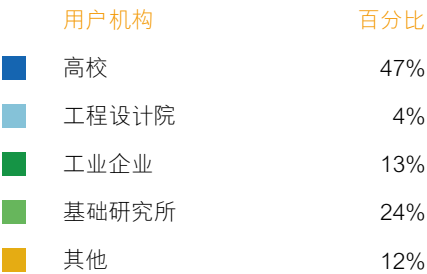
各领域机时数统计



各用户机构机时统计



各用户机构帐号数统计



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，研究方向为耦合簇理论(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。



2011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](http://www.ssc.net.cn)