



上海超级计算中心  
Shanghai Supercomputer Center

2010 年度报告





上海超级计算中心  
Shanghai Supercomputer Center



## 关于我们

2010年，上海超级计算中心走过了第十个年头。从十年前上海超级计算中心的一期建设，到2009年的三期建设，以及未来的四期建设，国家科技部、上海市政府始终给予高度的重视。资源共享、科教兴国的理念得到了普遍的共识和提升。

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，在上海市经济和信息化委员会的领导下，按照国家“十一五”的总体发展纲要，配合国家863“高效能计算机及网格服务环境”重大专项的实施，在引进“魔方”超级计算机之后，2010年通过全体员工的努力，在用户的支持下，最大实际业务并行应用规模达到8192核，大规模并行计算业务能力大幅提升，有力地促进了国内高性能计算应用水平的发展。

2010年是上海超级计算中心总结“十一五”发展经验，启动“十二五”发展规划的关键年，在确保主机资源稳定、有效运营的基础上，取得了社会效益和经济效益的双丰收，为中心的可持续性发展提供了保证。

# 目录

1、主任寄语 .....	1	6、计算资源服务	
		◎ 我们为基础科学领域提供服务 .....	15
2、2010年上海超级计算中心计算设施和能力的重大升级		◎ 我们为工业领域提供服务 .....	19
◎ “科学应用规模倍增活动”提升“魔方”应用水平 .....	2		
◎ 中心内部管理 .....	4	7、软件研发服务	
		◎ 云计算——高性能计算平台软件Xfinity .....	25
3、国家战略地位不断提升		◎ HPC实验室 .....	28
◎ 中心举办“‘魔方’超级计算机使用情况及应用技术研讨会		◎ 在研各类国家研发项目 .....	29
——暨2010年上海超级计算中心用户大会” .....	5		
◎ 中心与上海核工院举行项目验收暨战略合作交流会 .....	6	8、2010年上海超级计算中心用户及相关数据统计	
◎ 中心与科盛公司-Moldex3D签署合作协议 .....	6	◎ 不同地域机时统计 .....	31
◎ 第一届中欧联合航空资助项目开题研讨会在南京举行，		◎ 不同项目来源帐号数统计 .....	32
中心应邀参会 .....	7	◎ 不同项目来源机时数统计 .....	32
◎ 中心参加市经信委举办的首届“两化融合”高级培训班 .....	7	◎ 各领域帐号数统计 .....	33
◎ “超大规模并行电磁计算”联合实验室成立 .....	8	◎ 各领域机时数统计 .....	33
◎ 上海超级计算中心积极探索云计算相关工作 .....	8	◎ 各用户机构机时统计 .....	34
◎ “曙光5000A高效能计算机”通过科技部技术验收 .....	9	◎ 各用户机构帐号数统计 .....	34
◎ 曙光5000A合同验收会召开 .....	10	◎ 各作业规模机时比例 .....	34
4、中心重大活动		9、2010年社会对中心的关注	
◎ 中心十周年庆 .....	11	◎ 媒体宣传 .....	35
		◎ “魔方”开通一周年汇报会 .....	36
5、加强国际交流与合作,提升中心国际地位			
◎ 中心参展ISC'10会议 .....	12	10、中心领军人物 .....	37
◎ 上海超级计算中心参加SC'10大会 .....	13		
◎ 中心与巴塞罗那超级计算中心签订《战略合作谅解备忘录》 .....	13	11、2010年上海超级计算中心所获奖励 .....	38
◎ 其他交流活动 .....	14		





## 主任寄语

2010年, 我们迎来了上海超级计算中心成立十周年。十年前, 在上海浦东张江高科技园区内, 上海超级计算中心正式成立, 开始了中国超级计算应用领域的拓荒工作。这一年, 上海药物所、上海气象局等第一批用户签约中心, 给了上海超级计算中心第一次的学习机会。借助2003年汽车工业的高速发展、2004年飞机工业和2005年核电工业的振兴机会, 上海汽车集团股份有限公司技术中心、中国商飞上海飞机设计研究所和上海核工程研究设计院等企业纷纷签约中心。他们在承担国家重点工程的同时, 为上海超级计算中心的稳步发展起了关键性的作用。

十年来, 中心专注于超级计算应用领域的拓展。从一期3840亿次的神威到2009年三期200万亿次的“魔方”超级计算机系统, 我们得到了众多高性能计算用户的极大支持, 计算资源始终处于满负荷运行状态。特别是2010年, 随着“魔方”的稳定运行, 我们成功推出了二期“科学计算倍增”计划, 使高性能计算这一集约化公共平台充分发挥了其资源优势, 应用质量获得了明显的提高。

2010年, 借助国家十一五规划的大力支持, 中国已拥有世界最快的计算机, 然而, 我们在应用规模、普及数量、应用范围上, 与先进国家还有很大差距。特别是金融计算领域, 需要实现零的突破。因此, 随着“十二五”的到来, 中心将面临新一轮的机遇和挑战——加快启动中心的四期建设, 全面提高超级计算的应用质量和规模, 并积极拓展高性能计算在金融计算和云计算等新领域业务, 争取迎来更辉煌的十年。

奚自立

2011.01.10

## 2010年上海超级计算中心计算设施和能力的重大升级

### “倍增计划”提升“魔方”应用水平

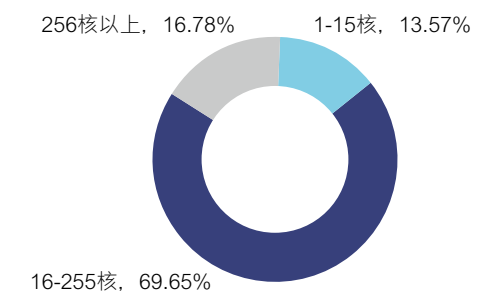
#### “倍增计划”活动内容及效果

大规模的并行计算一直是人们非常重视的发展方向，也是超级计算机发展的主要目的之一。它主要能体现高性能计算三个方面的技术和发展水平：（1）硬件集成水平及其稳定性；（2）并行算法和软件实现的先进性；（3）应用发展水平。目前在国际上排名靠前的超级计算机上，均有大规模的并行计算应用。而在国内的高性能计算领域，大规模的并行计算应用发展较为落后。

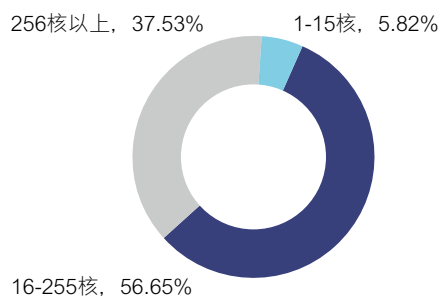
上海超级计算中心“倍增计划”从2009年开始启动，2010年全面实行。第一期“倍增计划”活动周期从2009年12月1日起至2010年5月31日止，共有5家用户参加了本次活动。他们包括大连化学物理研究所、上海应用物理研究所、上海天文台、中国科学技术大学微尺度物质科学国家实验室、美国西北大学。这5家用户都是在本专业领域内有非常重要影响地位，并且与上海超算中心有长期友好合作的研究小组，并有相当高的应用研究水平和较大的计算应用规模。

活动期间，上海超算中心共投入了近千万核小时的计算资源，帮助用户移植优化了大规模并行程序，提供了各种技术支持服务，提高了机器的使用效率。

“倍增计划”开展后，大规模计算作业机时比例显著增加（具体情况见图1、图2），充分发挥了“魔方”大规模计算平台的作用，显示了国内高性能计算应用水平提高的潜力。

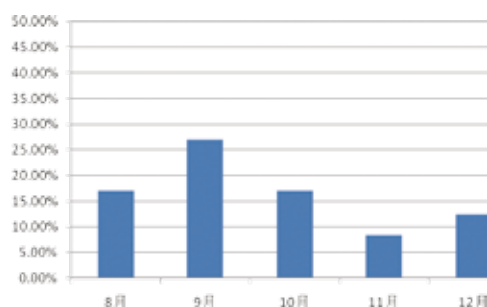


2009年8月-12月各规模计算作业的总机时比例分布

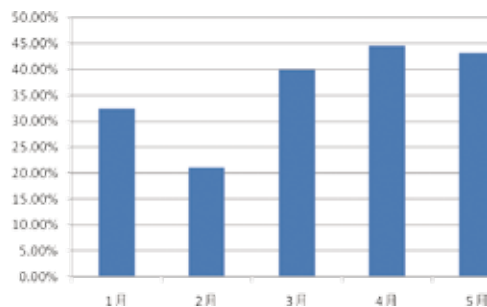


2010年1月-5月各规模计算作业的总机时比例分布

▲ 图1“倍增计划”一期实行前后各规模计算作业机时分布比例



2009年8月-12月256核以上规模计算作业的机时比例



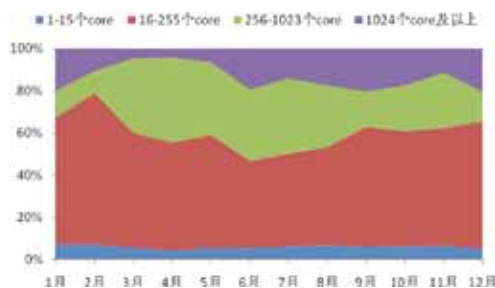
2010年1月-5月256核以上规模计算作业的机时比例

▲ 图2“倍增计划”一期实行前后256核以上规模计算作业机时比例

“倍增计划”实施中和实施后，即2010年1月到12月的总机时比例中，256核以上规模计算任务的机时比例比活动之前提高了一倍多。图3和图4显示了2010年1月到12月的各规模计算任务的总机时比例和每月大规模计算任务机时比例的变化。



▲ 图3、2010年度各规模计算任务的总机时比例分布



▲ 图4、2010年1月-12月每月各规模计算任务的机时比例分布

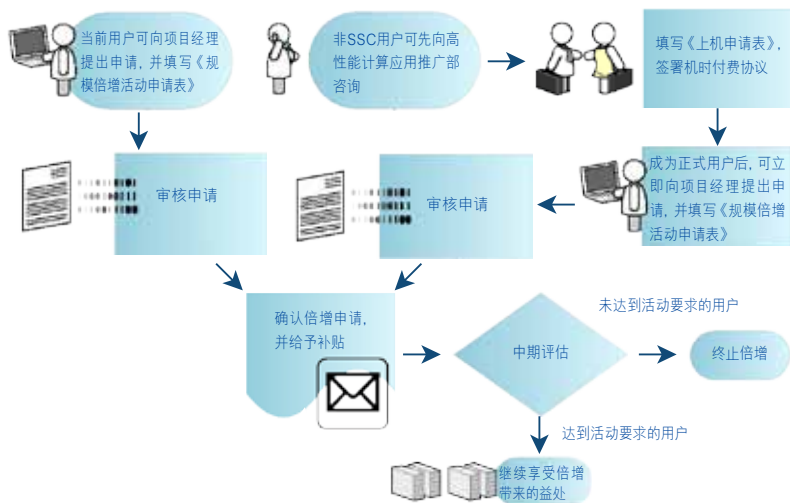
鉴于“倍增计划”一期效果良好，目前该活动二期已经启动。截至2010年年底，已有三家用户参加，包括复旦大学物理系、北京大学化学系、上海大学。二期“倍增计划”与一期相比，申请作业规模从256核增加到1024核以上。

### 第二期“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，已在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。

### 3. 活动流程



## 中心内部管理升级

### 中心管理信息系统 (MIS) 的建设

2010年, 根据MIS项目的开发和实施计划, 完成公文流转模块、档案管理模块、会议管理模块、邮件管理模块、网络管理模块的开发和完善工作。

在解决MIS系统安全性问题方面, 将数据库SQL2000升级至安全性较好的SQL2008。开发完成了邮件归档管理模块和流程委托模块, 推进了MIS的应用推广工作。

### 中心网站新版上线

2010年10月, 中心新版网站正式上线。新版网站界面清新友好, 各板块功能设置更加合理、专业, 使大众与中心交流更加顺畅。

网站作为中心的一个窗口, 经过一年的准备工作, 2010年6月在中心内部系统发布了测试版, 2010年10月正式上线。

### 世博安全工作

按照上海超级计算中心安全管理制度的相关要求, 及上海世博期间安全工作要求, 2010年中心完成中心与各部门安全责任书的签订工作, 明确各级领导安全责任及安全目标, 并将安全责任层层传递到每位员工, 将安全管理工作真正做到人人有责, 人人重视, 人人参与。

根据相关要求, 办公室组织物业公司对中心消防、治安进行风险评估, 发现并消灭消防安全薄弱点、治安安全薄弱点、以及防控薄弱点, 全面完成各项整改工作, 提升中心安全设施水平, 符合消防、治安要求。

经浦东新区及市公安局民警检查后, 认定中心治安工作管理情况良好, 授予本中心为治安信得过单位荣誉称号并授牌; 2010年12月张江高科技园区治安派出所授予中心“治安先进集体”称号。

### 信息安全工作

按照中心信息安全工作计划, 2010年对中心信息资产进行一次全面的风险评估, 重点是中心三期建设中新增的信息资产; 每二个月进行一次有效性测量; 4月份对中心所有部门进行了一次内审检查, 对部分部门存在的信息安全薄弱点进行跟踪, 并敦促其及时整改。中心全年未发生信息安全事故, 信息安全体系运行有效。





## 国家战略地位不断提升

### 中心举办“‘魔方’超级计算机使用情况及应用技术研讨会——暨2010年上海超级计算中心用户大会”

2010年6月3日，“‘魔方’超级计算机使用情况及应用技术研讨会——暨2010年上海超级计算中心用户大会”成功举行，近五十家用户单位代表应邀参加了会议。

本次会议由中心副主任李根国主持，他首先致辞感谢用户多年来一直对上海超级计算中心的支持与帮助。2009年6月，中心引进“魔方”（曙光5000A）超级计算机，计算资源得到巨大提升。但在新主机试运行阶段，不断出现的新技术问题给用户造成了一些影响，但都得到了用户的理解与支持。在用户配合下，中心主机在半年内达到稳定运行状态，为用户提供更加稳定及高效的环境和服务。目前主机利用率也不断攀升。他表示，中心有决心把高端计算服务平台越做越好。随后他介绍了中心未来“四期”工程的规划和展望。

会上，应用技术部经理王涛就“魔方”开通以来的使用情况以及中心“科学计算规模倍增计划”一期情况进行了总结。“科学计算规模倍增计划”从2009年11月推出，经过半年活动圆满结束，效果显著，256核以上大规模作业明显增加。

本次会议，中心推出了一套由中心应用推广部和研究开发部共同研制的名为“Xfinity”的计算平台，推广部工程师介绍了平台开发背景及特点，研发部工程师为与会人员进行了现场演示。此系统是中心首次根据用户需求而设计的在线计算平台，可以帮助用户通过远程登录使用中心计算资源，并对用户帐号及作业进行管理。通过会后调研，大部分用户表示有兴趣试用该平台。

本次会议还安排了两个特邀报告，中心的用户代表国家人类基因组南方中心周雁先生作了“日本血吸虫基因组研究成果汇报”（该项目在《Nature》杂志作为封面文章发表）；中心战略合作伙伴AMD公司的李约炯先生作了“GPU结合HPC应用的几点体会”。

最后，推广部经理吴建成代表中心宣布评选出的2009年度十佳金牌用户和特别贡献奖用户，金牌用户分别是中国科学院大连化学物理研究所、上海应用物理研究所、清华大学、中科院技术物理研究所、南京大学、上海核工程研究设计院、上海宝钢研究院、中国航空工业集团公司西安飞机设计研究所、中国商用飞机有限责任公司上海飞机设计研究所、中国科学技术大学十家用户单位；特别贡献奖是国家人类基因组南方中心。



## 中心与上海核工院举行项目验收暨战略合作交流会



2010年11月24日,上海超级计算中心(以下简称“上海超算”)承担的上海核工程研究设计院(以下简称“上海核工院”)《蒸汽发生器汽水分离装置数值模拟分析研究》项目验收会议——暨上海超算与上海核工院战略合作交流会议在核工院举行。

会议首先对《蒸汽发生器汽水分离装置数值模拟分析研究》项目进行验收,验收专家组听取了上海超算技术工程师的

项目报告,在核对各项指标和成果后,给予了极高评价,验收组认为:此项目研究探索性开创了国内核电设计新方法,极大缩短了研发周期,降低人力财力各项成本,有助加快对国外先进技术的引进消化吸收并更好的应对国家核电发展规划新要求。最后,验收专家组希望可以继续就当前研究过程中出现的设计难点进行深入研究,逐步发展出一整套核电站设计研究的模型和方法。

《蒸汽发生器汽水分离装置数值模拟分析研究》项目历时两年,在双方工程师共同努力下,对核电站蒸汽发生器汽水分离装置的部件和结构进行数值模拟分析,已有很多成果用于实际工程设计指导,相关实验产生的结果充分验证了模拟分析结果的可信性。

验收会议结束后,双方领导进行了战略合作交流与会晤。双方达成了加快在上海核工院建设上海超算分中心的合作意向,并在以下方面开展实质性工作:软硬件资源共享共建;计算中心运维管理合作;工程技术人员团队共建;工程项目联合申报与咨询合作。

上海核工院院办、科研管理部、信档中心、二所主要负责领导以及上海超算中心主任奚自立、副主任李根国、应用推广部经理吴建成与会,双方相关技术工程师列席会议。

## 中心与科盛公司-Moldex3D签署合作伙伴协议

2010年10月25日,上海超级计算中心与科盛科技(Moldex3D)签署合作协议,今后将共同在塑料成型产业之CAE注塑仿真公有云计算方面进行合作,结合双方资源与技术,共同在上海超级计算中心建立Moldex3D注塑成型CAE仿真分析云计算平台,让中国注塑行业技术人员能通过网络连接到该平台,使用平台所提供的Moldex3D注塑成型CAE仿真技术,有效提高其开发之注塑制品与模具的品质与效率。

上海超级计算中心主任奚自立说:“云计算已被列入国家重点发展方向之一,而Moldex3D是一套由华人成功自主研发的国际级CAE仿真分析软件,我们期盼此次合作为中国注塑行业带来新契机,加速中国塑料行业核心竞争力的提升。”

Moldex3D总经理杨文礼博士说:“上海超级计算中心拥有全球首屈一指的高性能IT环境,能充分发挥Moldex3D真实三维高精度高效能的技术本质,透过此次双方的合作,将建立起崭新的服务模式,为数万家中国注塑企业带来更简便更容易取得的注塑仿真技术!”

同时,上海超算中心与Moldex3D皆为微软合作伙伴,而该项合作也将在中国微软大力支持之下,将建立以Windows HPC为基础平台的云计算服务,共同推动中国云计算产业之发展。

## 第一届中欧联合航空资助项目开题研讨会在南京举行, 中心应邀参会

2010年10月25—27日, 第一届中欧联合航空资助项目开题研讨会在南京举行, 会议由中国航空研究院和南京航空航天大学主办, 主要的议题是使用环境友好的先进模型和试验以及大规模计算的方法和工具帮助绿色航空的研究。出席会议的有中国工业和信息化部装备司李本建副司长, 欧洲委员会科研总司鲁道夫·施特罗迈尔副总司长, 中国工业和信息化部总工程师朱宏任, 中国航空工业集团公司/中国航空研究院院长张新国、南京航空航天大学校长朱荻、欧洲航空顾问委员会联席主席Joachim Szodrach。

此次会议有三个由中国工业与信息化部和欧盟科技司联合资助的关于航空领域的项目开题:

GRAIN: 更环保的国际航空网络, 通过使用先进模型和试验及大规模计算的方法帮助绿色航空的研究。

MARS: 流动控制项目, 通过操控雷诺应力进行分离控制和减阻, 主要研究飞机周围的空气动力学问题。(最终减少燃油消耗)

COLTS: 大型钛铸件结构项目, 目的是克服在铸造工艺方面的主要难题。(降低航空业制造成本, 减少制造环节的二氧化碳排放量。)

上海超级计算中心应邀参加了本次会议, 并由寇大治工程师代表中心做了主题报告。

目前, 计算机仿真工程被大量应用于飞机设计、飞行过程模拟等。上海超级计算中心作为国内顶尖的高性能计算服务平台, 一直致力于为国内航空航天领域的用户提供高效、稳定的高性能计算服务, 不仅帮助用户取得了包括国产大飞机、ARJ21支线飞机的设计等大批成果, 同时也积累了丰富宝贵的经验。今后将继续为自主知识产权航空航天业研究提供一流的计算服务。

## 中心参加市经信委举办的首届“两化融合”高级培训班

2010年7月1日至3日, 上海市经济和信息化委员会在闵行举办了首届“两化融合”高级培训班, 参加培训的人员包括市经信委及其下属单位、各区经委和信息委、各行业协会、著名企业和高校等单位与“两化融合”工作直接相关的处室领导和一线同志。中心应用技术部的丁峻宏博士和王惠工程师参加了此次培训。

培训期间, 工信部杨学山副部长就全国“两化融合”总体战略和推进情况介绍; 国家信息化专家委周宏仁副主任就国家信息化发展情况和“十二五”总体规划作了专场报告。物联网、云计算、智能地球等话题, 成为培训期间大家热议的焦点, 对此不少领导和专家发表了各自的看法和意见。市经信委邀请了几家国内具有一定影响力的公共服务平台的领导前来授课, 其中上海超算中心副主任李根国博士以“云计算基本理论以及超级计算公共平台的主要功能”为题作了报告。

上海超级计算中心是上海市正式挂牌的十个“两化融合”重点实验室之一, 2009年度中心初步完成了面向工业企业的高性能计算应用环境建设工作, 今年的重点实施项目是用户计算环境的部署和开发。

## “超大规模并行电磁计算”联合实验室成立



2010年11月9日,上海超级计算中心和天线与微波技术重点实验室(西安分部)战略合作协议签署暨“超大规模并行电磁计算”联合实验室成立仪式在西安电子科技大学举行。该实验室将基于上海超算中心平台开展大规模电磁计算平台的建设、开发和应用。联合实验室的成立将使双方优势互补,促进中国高性能高精度电磁计算软件的研发,提高我国在复杂电磁仿真领域的科技基础能力和实际应用水平。

天线与微波技术重点实验室学术委员会主任梁昌洪教授,天线与微波技术重点实验室西安分部主任龚书喜教授,上海超级计算中心李根国副主任出席仪式并致辞。

根据规划,联合实验室将致力于研究超大规模电磁计算新理论、新方法。通过前期部署,实验室已于近期成功进行了美国HOBBIES软件1024个核以上的试算工作,这也是上海超级计算中心成功部署的第一个千核以上规模的高精度三维通用电磁仿真软件。

## 上海超级计算中心积极探索云计算相关工作

2010年上海超级计算中心积极配合“上海推进云计算产业发展行动方案(2010-2012年)”,在“云海计划”发布启动仪式上与上海数据港投资有限公司签订战略合作协议,重点开展云计算中心、云计算联合实验室、中小企业服务云、绿色数据中心、容灾备份中心等方面合作。加入上海软件促进中心组织的“云海产业联盟”,任副理事长,参与了云计算创新基地揭牌、云计算示范项目征集、云海联盟合作交流、云计算技术产学研研讨会等活动。

9月中心成立云计算工作小组,建立云计算实验室硬件环境。主要就工业仿真云与金融计算云两个方面开展技术探索。

工业仿真云方面,针对工业仿真计算特点,开展高性能计算云平台的IAAS, PAAS, SAAS技术调研。完成与台湾Moldex3D软件公司签署云计算合作协议,计划共同在上海超级计算中心建立Moldex3D注塑成型CAE仿真分析云计算平台,前期工作完成了Moldex3D的软件性能测试工作,并已制定2011年双方的合作计划与目标。与上海交大、微软、广东江门云计算中心达成初步合作意向。

提交两项“软件与集成电路”产业专项发展资金项目申报(工业仿真云计算公共服务平台、高性能金融云计算平台的开发与应用),其中工业仿真云计算公共服务平台已经基本列入市级五类云计算示范项目。



## “曙光5000A高效能计算机”通过科技部技术验收

2010年10月20日, 科技部高技术中心组织验收专家组在上海超级计算中心对中科院计算技术研究所、曙光公司、上海超级计算中心联合承担的“十一五”国家863计划“高效能计算机及网络服务环境”重大项目的课题“曙光5000A高效能计算机”进行了现场验收。验收专家组听取了课题组的验收汇报, 现场查看了“魔方”(曙光5000A)的实际使用情况, 并审查了相关资料, 经验收组专家讨论, 同意通过验收。验收意见如下:

1、课题研究了千万亿次高效能计算机系统的若干关键技术, 并完成了峰值运算速度233.5万亿次的曙光5000A高效能计算机系统, 在2008年11月发布的第32届TOP500排行榜上位列第10。系统自运行服务以来, 在工业制造、科学研究、大型工程等方面取得了一批显著的应用成果。

2、课题攻克了一系列大规模系统的关键技术, 对研制千万亿次及以上规模的高性能计算机有重要价值。兼顾了提高技术水平和产业化能力, 是对高效能计算机快速可持续发展道路的成功探索。

3、课题申请国家发明专利53项, 获得发明专利授权9项; 发表论文108篇, 培养了一批技术人才。

上海超级计算中心的“魔方”基于曙光5000A机型, 2009年6月投入运营以来, 现已满负荷使用, 目前为300多家科研和工程类用户提供可靠的高性能计算服务。







## 曙光5000A合同验收会召开

2010年12月20日，上海市经济和信息化委员会、上海市科学技术委员会、上海市发展与改革委员会组织，在上海超级计算中心召开了魔方（曙光5000A）超级计算机合同验收会。由上海市经济和信息化委员会副主任刘健担任专家委员会主任，上海信息投资股份有限公司副总经理方坚担任副主任。

魔方（曙光5000A）是中科院计算所、曙光公司和上海超算中心三方紧密合作，共同研制完成的一套高效能超级计算机系统，主机系统在2008年11月完成研制，在当年11月份的TOP500中排名第十，亚洲第一。魔方在2009年6月15日在上海超级计算中心安装完成并开放使用，同时开展应用调试。2010年1月1日开始试运行。

魔方自2010年1月运行至11月30日，全系统可用率为99.64%，稳定性指标均符合合同技术指标要求。自2010年1月以来，主机系统成功运行了Fluent、CFX、Ansys、Nastran、LS-Dyna、Star-CD等大型商业类工程应用软件以及一批科学计算软件。用户数超过400个，系统的平均使用率达到71.46%，经过近一年来上机用户的充分运行，证明该系统通用性好、兼容性好、可用性高。

验收委员会听取了软、硬件测试小组的报告并审阅了相关文件资料后，认为魔方（曙光5000A）各项性能参数均达到定制合同规定的技术要求，一致同意通过验收。

最后，上海超级计算中心与曙光公司、中科院计算所签署了《魔方（曙光5000A）超级计算机系统交接协议》。

## 中心重大活动

### 中心十周年庆

2010年, 中心迎来成立10周年。2011年1月10日, 为表示对各级政府、用户及业界同行等各方面大力支持的感谢, 中心在东郊宾馆举行十周年庆典活动。全国人大常委会副委员长、中心第一任主任严隽琪发来了贺信。

庆典会上邀请了中国工程院院士、国家并行计算机工程技术研究中心总工陈左宁、国防科技大学计算机学院副院长窦文华、曙光信息产业有限公司总裁历军等代表国内超级计算机的三大品牌就超级计算机的未来发展及应用趋势发表了精彩演讲。

上海市经济和信息化委员会副主任邵志清参加会议并讲话, 他对上海超级计算中心提出新的期望, 希望中心能够建成四个中心, 即计算中心、数据中心、服务中心和创新中心, 从而为服务产业和社会发展, 为上海经济结构转型、建设智慧城市发挥更大作用。



#### 中心十年发展里程碑

##### 里程碑一:

**2000年12月28日**

上海超级计算中心落成开放。作为上海市2000年一号工程信息港的主体部分, 上海超级计算中心用了不到一年的时间建成, 并引进当时国内投入商业运作最快的神威-I超级计算机, 计算峰值速度达每秒3840亿次浮点结果。

##### 里程碑二:

**2004年11月15日**

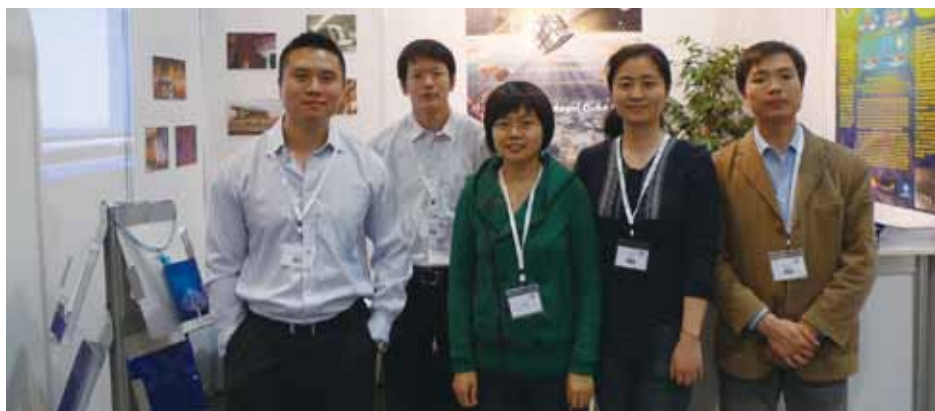
10万亿次曙光4000A系统正式投入运行。上海市市委、市府、中科院等领导出席了曙光4000A开通仪式, 仪式由上海市市长韩正主持。仪式上中心与上海市气象局、中科院上海分院、复旦大学签订了战略合作协议。

##### 里程碑三:

**2009年6月15日**

上海超级计算中心三期引进的百万亿次超级计算机——“魔方”开通。上海市委副书记、市长韩正出席开通仪式并致辞。中国科学院副院长施尔畏和上海市委常委、常务副市长杨雄共同启动“魔方”超级计算机。仪式上, 中心与中国商用飞机有限责任公司上海飞机设计研究所、国家核电技术有限公司上海核工程研究设计院、宝钢集团公司研究院、上海汽车股份汽车工程研究院、上海交通大学、上海光源、中国科学院上海高等技术研究院签署了合作协议。

## 加强国际交流与合作，提升中心国际地位



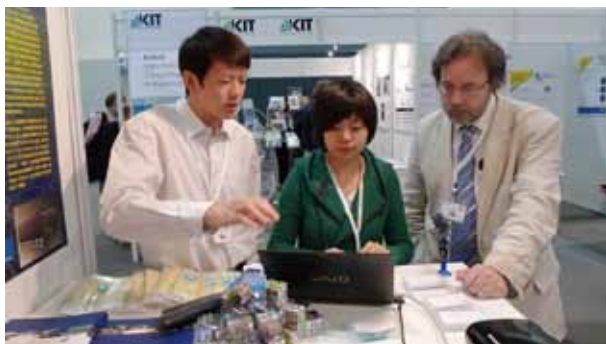
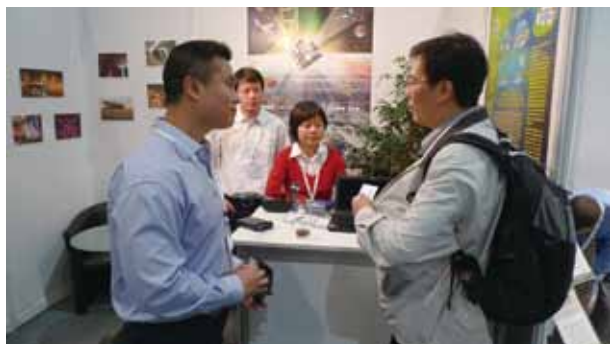
### 中心参展ISC'10会议

2010年5月31日至6月2日期间，上海超级计算中心在德国汉堡成功参展国际超级计算大会（ISC'10），这是中心第三次参展这一全球性的高性能计算大会，也是目前唯一参展国际超级计算大会的中国高性能计算中心。

本次上海超算中心的参展主题是：“魔方”时代。围绕我们目前的计算资源“魔方”（曙光5000A），向参会者展示上海超算中心在提供计算资源和计算服务方面实力和能力。同时展示了中心最新研发的“在线计算平台——Xfinity”，作为一种新的服务模式，该平台通过在线提交和管理作业的方式帮助用户更为便捷的使用中心计算资源，我们希望以该平台吸引国际高性能计算用户。

上海超级计算中心本次参展目的是为了推广中心在国际高性能计算领域的知名度，中心参展人员就高性能计算的应用及未来发展与来自世界其他国家的计算中心进行了探讨。

本次ISC'10会议公布了最新的世界TOP500超级计算机排名。最引人注目的是2010年中国制造的“星云”超级计算机紧跟排名第一的“美洲虎”成为排名第二的千万亿次级别超级计算机。中国共有24台超级计算机进入TOP500，其中包括总排名第7的“天河”（上次排名第5），以及排名24的“魔方”（上次排名第19）。



## 上海超级计算中心参加SC'10大会

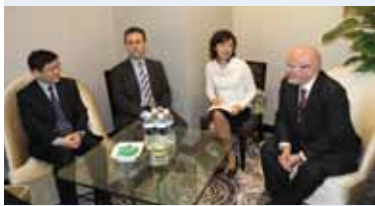
2010年11月15-19日, 上海超级计算中心代表团参加了在美国新奥尔良举办的2010年超级计算大会(SC10)。

在本次会议的“2010 workshop on HPC in China”分会上, 王涛博士代表中心做了“HPC Activity in Shanghai Supercomputer Center”的报告, 全面介绍了中心过去10年的建设、运营、应用、研发等情况, 以及中心未来的发展规划。报告取得了良好的效果, 获得了国际高性能计算界的广泛关注。同时, 中心参会人员也在SC10会议上详细了解了美国以及欧洲超算中心运营和应用、目前HPC硬件发展和解决方案、相关外围硬件设施的技术进展等情况。

本次会议宣布的Top500名单上, 部署在天津的天河一号超级计算机排名第一, 引起参会人员广泛关注, 同时中国共有41台机器入围, 中心的“魔方”排名第35位。



## 中心与巴塞罗那超级计算中心签订《战略合作谅解备忘录》



2010年5月29日, 上海超级计算中心(SSC)与西班牙巴塞罗那超级计算中心(BSC)在上海新天哈瓦那酒店签署了《战略合作谅解备忘录》。上海经济和信息化委员会副主任刘健和西班牙加泰罗尼亚自治区部长Josep Huguet出席并见证了双方的签字仪式。上海超算中心主任奚自立和巴塞罗那超算中心副主任Francesc Subirada签署了合作协议。

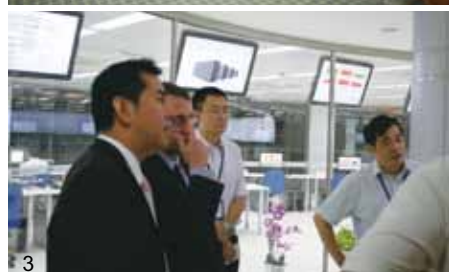
上海超级计算中心作为国内设施一流、首家对外开放的超算中心, 运营近十年来为国内科技创新提供大量计算资源和技术帮助, 积累了许多成功案例和合作伙伴; 而巴塞罗那超算中心运营的“我们的海洋”超级计算机曾排名世界第四, 参与了许多国际合作项目, 是一个具有世界影响力的欧洲超算中心。此次合作双方可以优势互补, 在技术、项目和人员培训上寻求合作, 为用户创造更好的高性能计算应用环境。

此次双方签署的《战略合作谅解备忘录》内容如下:

- 1、计划在上海召开中、西联合高性能计算研讨会, 会议预期吸引来自中国和西班牙两国的高性能计算专家、学者、从业人士和用户来对当前和未来高性能计算技术的发展以及高性能计算的应用展开深入探讨。
- 2、共同寻找双方的兴趣发展方向, 并探索符合双方利益的合作项目。今后可能在共同申请中欧合作项目/基金等技术领域进行合作。
- 3、开展双方人员技术交流以此加深彼此了解, 并进行知识和经验的交流。分享超级计算中心运作、管理、服务社会的经验和想法, 促进两国超级计算中心的健康发展。

上海超算中心主任奚自立和巴塞罗那超算中心副主任Francesc Subirada表示, 两个超算中心结成战略合作关系将有利于双方在更广阔的领域进行交流合作, 推动各国高性能计算应用的深度和广度, 更好地支持本国的科技创新。





## 其他交流活动

- 1、法国电力集团专家访问中心。
- 2、德国于利希研究中心主席来访。
- 3、加拿大SHARCNET来访，与中心商谈合作事宜。
- 4、美国环境分子科学实验室（EMSL）主任访问中心。
- 5、加拿大滑铁卢保险、证券与计量金融研究院主任  
THOMAS COLEMAN教授访问中心。
- 6、台湾计算中心一行访问中心。





## 计算资源服务

### 我们为基础科学领域提供服务

上海超级计算中心魔方超级计算机于2010年1月1日全系统全面对外开放。在2010年全年的运行过程中, 魔方超级计算机系统基本稳定。在全机系统对外开放约3个月, 魔方全机使用率超过70%, 系统基本达到满负荷使用状态。截至2010年12月31日, 魔方超级计算机上共为286个用户组和研究机构开设了正式计算帐号, 为网格用户开设了58个计算帐号, 提供了25个用户测试帐号, 为93个用户组和研究机构提供了计算测试服务。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, 在魔方超级计算机上, 用户的应用水平也得到了广泛的提高。最大实际业务并行应用规模达到8192核, 2010年并行规模在256核以上作业使用的机时占全年机时40%以上, 1024核以上作业使用的机时占全年机时10%以上。在整个2010年度, 用户共发表了超过120篇被科学引文索引 (SCI) 收录的论文, 领域遍及物理、化学、天文、生物等各个基础科学方向。这些论文的研究成果均为上海超级计算中心计算平台支持产生。典型研究成果如下:

#### Direct Observation of Enantiospecific Substitution in a Two-Dimensional Chiral Phase Transition

**项目来源:** 中国国家自然科学基金、863、973、瑞士国家自然科学基金

**用户来源:** 中国科学院物理研究所、吉林大学、瑞士材料测试与研究联邦实验室

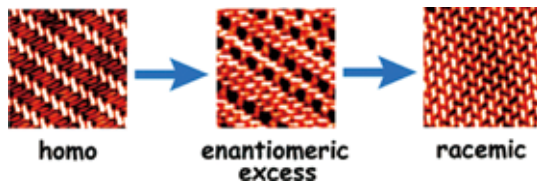
**论文来源:** 美国化学会志第132卷第30期, 页号: 10440-10444, 2010年7月13日出版

本项研究是关于二维表面分子手性识别与相变微观机制的研究。分子手性研究长久以来都是备受关注的重要课题。近年来, 更是由于其其在异质催化、非线性光学和液晶平板显示等方面的潜在应用而成为研究热点。在三维分子晶体中, 手性分子形成的结构可以分为以下三类: (1) 外消旋化合物: 左旋体与右旋体在晶胞中等量配对, 形成化合物晶体; (2) 单一手性晶体共聚体: 左旋体与右旋体分别成核并形成晶体, 但宏观保持等量; (3) 固体溶液: 左旋体与右旋体等量随机分布, 没有长程有序度(这种结构很少出现)。现实中, 只有少数手性分子可以形成手性分离的共聚体结构, 大部分分子并没有形成这种结构, 至今对于这个问题的解释学术界仍然存在很大的分歧。

分子体系作为一个很好的模型体系, 可以在微观尺度上研究分子的各种手性结构和演化现象。手性相变是二维手性分子体系研究中一个重要的研究现象。通常情况下, 随着覆盖度的变化可以观察到从同质手性分布的共聚体到异质手性的外消旋化合物的相变过程。但早期的实验报道只集中于讨论相变前后各自手性相的结构特征, 而对其相变的转化过程和微观机制并没有给出实验证据和合理的解释。

近年来, 作者们对喹啉酮分子 (QA) 及其衍生物在多种金属单晶表面的手性识别和结构调控等方面的研究(Langmuir 2010, 26, 3402) 取得了重要进展。最近, 他们与瑞士EMPA的K.-H. Ernst教授合作, 在单晶Au (111) 表面研究了QA16C分子的手性识别和相变过程。

在本项工作中, 他们利用扫描隧道显微镜 (STM) 观察到了由同质手性排列的分子线阵列, 经过一段局域对映体过量的过渡态之后, 最终形成异质手性排列的密堆积结构的相变过程。阐述了分子侧向取代烷基长链基团在结构相变和手性识别中所起到的关键作用。进一步, 通过控制沉积量得到了同质手性相与异质手性相的共存态, 提出了手性取代的微观机制: 外来的QA分子通过手性识别使得只有相反手性的分子才能吸附于同质手性畴中, 并取代原有同质手性线中的QA分子, 逐渐生长为外消旋的密堆积结构。该项研究对于理解二维分子体系中手性识别与相变的微观机制具有重要的研究意义。



▲ 图1、二维表面分子手性识别与相变微观机制

### Identifying Multiple Configurations of Complex Molecules in Dynamical Processes: Time Resolved Tunneling Spectroscopy and Density Functional Theory Calculation

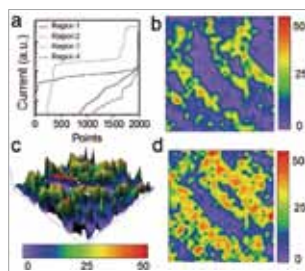
**项目来源:** 国家自然科学基金、863、973

**用户来源:** 中国科学院物理研究所

**论文来源:** 物理评论快报第104卷第16期, 论文号: 166101, 2010年4月23日出版

本项研究是关于表面分子动态系统研究方法: 利用时间分辨隧穿电流谱研究表面运动分子的构型和吸附能分布。

分子在表面的动态体系在科学研究和实际应用中具有非常重要的研究价值和意义, 适用于表面催化、构型转变、分子马达等多种研究方向。然而在表面动态过程中分子的表征却一直是一个富有挑战性的困难问题。特别是对于结构较为复杂的大分子, 难以用通常的手段得到关于整个动态体系的全面信息。目前这方面的研究瓶颈主要是运动中分子的构型的确认和对动态系统进行具有时间分辨和空间分辨的详细描述。最近, 该研究组在分子动态体系的研究中取得重要进展。通过液氮温度下两个典型的表面动态体系: Au(111) 表面的 (t-Bu)<sub>4</sub>-ZnPc 分子马达体系和 Au(111) 表面的 FePc 分子流体体系, 创新性地应用时间分辨隧穿电流谱并结合第一性原理计算, 成功确定了体系中分子的构型和吸附能分布, 并且首次通过时间分辨电流谱获得了 FePc 在 Au(111) 表面上吸附能差的分布曲面。上述成果对于表面动态系统的研究提出了一种新的研究思路, 这种研究方法成功地解决了目前在分子动态体系研究中存在的困难问题, 并且可以广泛应用于相关领域的研究。



▲ 图2、利用时间分辨隧穿电流谱研究表面运动分子的构型和吸附能分布

### Multishell Intermetallic Onions by Symmetrical Configuration of Ordered Domains

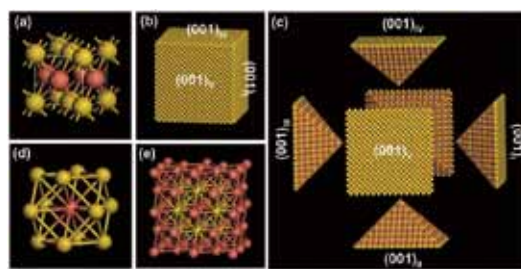
**项目来源:** 国家自然科学基金、973

**用户来源:** 清华大学材料科学与工程系、清华大学化学系

**论文来源:** 物理评论快报第105卷第22期, 论文号: 225501, 2010年11月26日出版

本项工作是关于金属间化合物“有序畴工程”的研究, 为新型材料例如高效催化剂的研究开拓了新思路。合金纳米颗粒或纳米合金在基础科学和技术角度, 都具有相当的重要性: (1) 能帮助人们理解在合金过程中结构是如何变成纳米颗粒的; (2) 在合金过程中, 通过裁剪纳米颗粒的结构和性质, 可以提供额外的灵活性。与初始形态的纳米颗粒相比, 合金纳米颗粒的“有序”是非常重要的现象, 也是很多应用的关键。近年来, 纳米颗粒中有序和无序相的转换引起了人们的广泛关注。然而, 合金纳米颗粒的有序畴结构以及在它们在功能修饰中的潜在影响, 还没有被清楚的认识。

在本项工作中, 作者们结合像差校正超高分辨电子显微术和电子微衍射, 分析了金属间化合物纳米颗粒中的有序畴结构。发现通过有序畴的对称组合, 可以在纳米结构中恢复在合金有序化转变中失去的对称性, 构造出一种新颖的多层金属间化合物洋葱结构, 其表面仅有一种原子组成, 并从实验上确定了表面原子种类。基于对畴界能的密度泛函第一原理计算, 研究还预测, 通过调控合金纳米颗粒的表面能, 可以在 FePd、FePt、CoPt、NiPt 等多种金属间化合物体系中实现这种新结构。这种“有序畴工程”方法利用物质在小尺度下的结构特性, 为人们调控材料表面原子构型和电子态提供了新的思路, 帮助人们研究能量和环境科学所需的新型催化剂。



▲ 图3、金属间化合物“有序畴工程”

### Direct Subangstrom Measurement of Surfaces of Oxide Particles

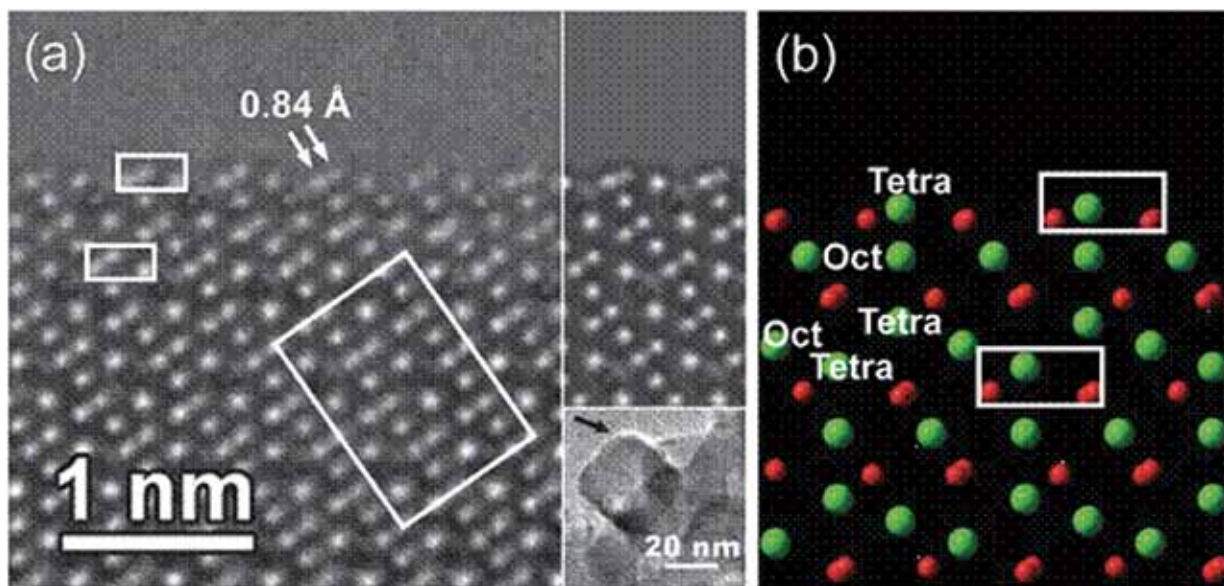
**项目来源:** 国家自然科学基金、973

**用户来源:** 清华大学材料科学与工程系、清华大学化学系、中科院金属研究所

**论文来源:** 物理评论快报第105卷第22期, 论文号: 226101, 2010年11月26日出版

本项工作是关于金属氧化物表面结构的研究。金属氧化物表面由于其结构复杂性和表面极性等因素一直是表面科学研究的难题。金属氧化物表面对于各种技术应用, 例如多相催化、薄膜生长、气敏和防腐蚀等, 都是非常重要的。表面的原子和电子结构在这些应用中扮演了重要的角色。化学反应和薄膜生长在本质上就是原子过程。催化剂的活性和选择性不仅由原子结构决定, 也受表面的电子结构控制。与金属和半导体相比, 金属氧化物通常具有比较复杂的晶体结构, 可以进行大量的表面结构修饰。大多数金属氧化物的离子性和较差的导电性导致了它们表面的极化性, 因而必须经过适当处理, 以避免静电不稳定。这种复杂性给用标准表面科学技术来分析氧化物表面的结构带来了挑战。因此, 氧化物表面的研究远远落后于金属和半导体表面的研究。传统的表面科学技术常常限制在单晶的表面。透射电镜 (TEM) 的表面成像技术对于氧化物颗粒的研究非常有用, 但分辨率有限。近期在TEM方面的技术进展为一些催化物的表面研究提供了较好的成像技术方法。这些方法应用实例的结构非常简单, 例如Pt和Ag。Pt催化物表面缺陷的结构已经用这种方法进行了定量研究。但是对于复杂的氧化物, 原子成像和定量测量需要更精细化的亚埃尺度的技术。

在本项研究中, 作者们通过像差校正超高分辨电子显微术, 在亚埃尺度实现了对复杂氧化物表面原子构型的直接观察和定量分析, 原子位置测量精度达到皮米量级。通过密度泛函第一原理计算的电子结构分析, 进一步揭示了基于离子的电子极化率的极性表面电荷补偿机制。对材料缺陷结构实现亚埃分辨率表征是在对完整晶体实现亚埃分辨率后的又一进步, 使像差校正超高分辨电子显微术成为研究催化剂表面结构等实际材料问题的有力工具。



▲ 图4、金属氧化物颗粒表面亚埃尺度的直接测量

## Chemistry on Single Atoms: Spontaneous Hydrogen Production from Reactions of Transition-Metal Atoms with Methanol at Cryogenic Temperatures

**项目来源:** 973、国家自然科学基金

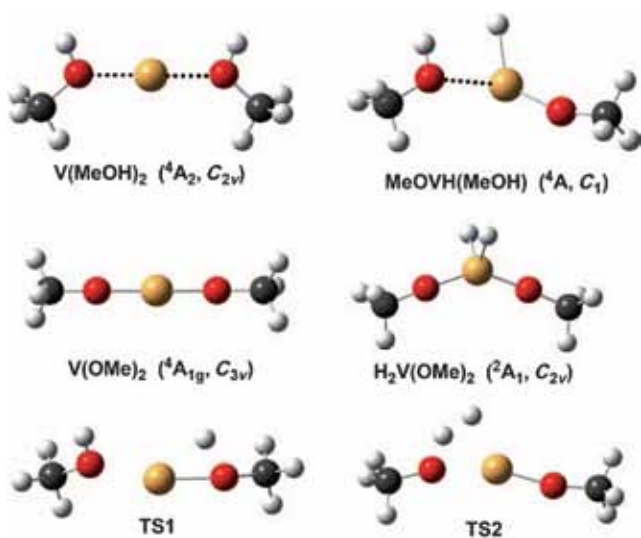
**用户来源:** 复旦大学化学系、清华大学化学系

**论文来源:** 德国应用化学-国际版第49卷第7期, 页号: 1302-1305, 2010年出版

本项工作为从甲醇中催化制备氢气提供了新的方向。甲醇在工业界被广泛使用, 例如作为燃料、溶剂以及生产其它化学材料的原材料等。它还可以被用于直接甲醇燃料电池 (DMFC), 并且通过重整的方法产生氢气等。因而甲醇被认为是可取代以石油为基础的碳氢化合物的可再生能源, 并在未来形成所谓的“甲醇经济”。由于金属经常被用作甲醇化学重整反应的催化剂, 甲醇与金属之间的相互作用的研究就显得非常重要。另一方面, 氢气是一种非常理想的环保燃料, 可用于制作环保燃料电池和燃料电池汽车, 具有零排放的特点。目前, 通过使用金属材料的催化剂对液体燃料 (例如碳氢化合物和酒精) 进行蒸汽重整的处理而产生氢气是主要使用的方法。将碳氢化合物和酒精催化转化成氢气是非常复杂的多步骤化学反应过程。金属原子与甲醇的相互作用提供了一种理想的、相对简单的模型体系, 它可以帮助人们在分子水平更好的理解这种复杂的催化反应机理。复旦大学和清华大学的研究人员通过采用理论化学计算和基质隔离光谱的方法对各种金属原子与甲醇的反应进行了大量研究。基质隔离光谱对于研究反应机理是一种很有效的方法, 它通过隔离和表征中间产物来得到反应机理。这些研究表明金属原子是通过插入甲醇的  $\text{H}_3\text{C}-\text{O}$  键或  $\text{O}-\text{H}$  键起作用的。通过采用基质隔离红外光谱与理论计算结合的方法, 研究前过渡金属原子与甲醇的反应, 作者们发现钪、钛、钒、铌等多种前过渡金属原子均可与甲醇直接反应产生氢气。为了揭示该反应的机理, 作者们对各种反应过渡态、反应途径及产物的红外光谱进行了量子化学理论计算, 发现了金属原子与两个甲醇分子自发反应形成低价化合物  $\text{M}(\text{OMe})_2$  ( $\text{M} = \text{Sc}, \text{Ti}, \text{V}, \text{Nb}$ ) 并产生氢气的微观机理: 前过渡金属的基态原子能与两个甲醇分子同时反应组成低价态的  $\text{M}(\text{OMe})_2$  甲醇盐并释放出双氢原子, 而不是预计的形成高价态的  $\text{H}_2\text{M}(\text{OMe})_2$ 。这表明在低温下, 金属原子可以与甲醇反应直接产生氢气。本项工

作指出了催化剂设计的一个新途径, 即可以采用单原子体系或嵌入金属原子的聚合物作为催化剂来进行氢气生产。此外, 由于甲醇的游离吸附 ( $\text{MeOH} + * \rightarrow \text{CHO}_{\text{ads}} + \text{H}_{\text{ads}}$ ) 是初始的基元反应步骤, 在甲醇对金属的腐蚀和甲醇在金属表面的吸附过程中都广泛出现, 因而本项研究的结果也可以帮助人们理解甲醇的腐蚀过程和甲醇在金属表面的催化机理。

英国“Nature Chemistry”杂志于2010年1月22日在“研究亮点”(Research Highlight) 栏目以“Hydrogen production: Made from methanol”为题对此利用甲醇与金属原子直接反应制备氢气的研究成果进行了报道, 认为“This gives a possible new direction for research on catalytic hydrogen production from methanol.”。

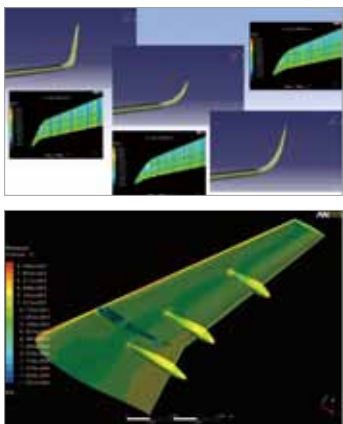


▲ 图5、过渡金属与甲醇的制氢反应机理



## 我们为工业领域提供服务

2010年是上海超级计算中心服务建设的第十个年头,上海超级计算中心立足“魔方”的高峰值计算速度优势,结合高性能计算与工程计算应用服务能力,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。同时基于中心技术人员应用能力和CAE/CFD有利工具,我们完成了一些工程咨询项目。本文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,与广大读者共享当今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机翼设计

**课题来源:** 大型飞机重大专项

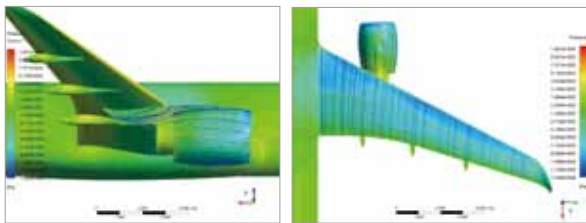
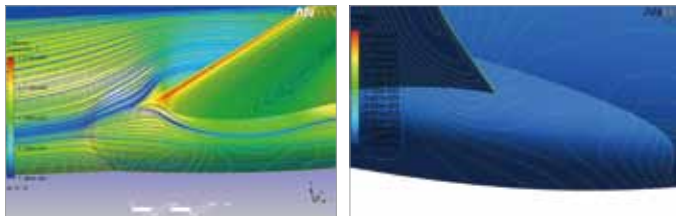
**用户单位:** 中国商用飞机有限公司上海飞机设计研究所

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。它不仅要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、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。机翼设计工作是气动力设计的关键技术,机翼设计的成败很大程度上决定了飞机设计的成败。

借助于上海超级计算中心的高性能平台,上海飞机设计研究所实现了快速准确地评估外形变化导致的气动特性变化,完成了C919过百副小翼设计方案(包括常规翼帆,鲨鱼鳍式小翼以及创新的阶梯式小翼等)、翼身鼓包设计(包括翼身整流修形、减小起落架鼓包阻力、消除翼根分离)、襟翼滑轨设计、机翼吊挂与发动机一体化设计工作。使得传统依赖试验或原型机验证的状态得到了改变,提高了设计水平,缩短研制周期,降低了设计成本。

- |    |    |
|----|----|
| 1、 |    |
| 2、 |    |
| 3、 | 4、 |
| 5、 | 6、 |

- 1、小翼设计
- 2、襟翼滑轨设计
- 3、4、翼身鼓包设计优化
- 5、6、机翼吊挂与发动机一体化设计





## · 航天领域

**研究课题:** 扫描驱动机构动力学计算和参数优化

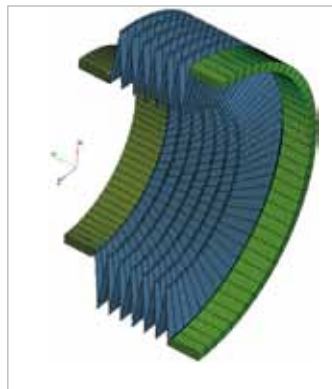
**项目来源:** 上海航天某研究所(咨询项目)

**用户单位:** 上海超级计算中心

为研究成像仪扫描驱动机构在带动负载转动过程中, 结构本身是否存在接触面分离和非正常摩擦等问题, 对扫描驱动机构进行了大量的动力学仿真分析。主要研究内容包括: 对波纹管组件轴向、径向、弯曲和扭转刚度特性的计算, 考察壁厚和载荷变化对波纹管组件刚度特性的影响; 对多种影响扫描机构正常工作性能的因素进行分类和综合研究, 包括离心力、弯矩、波纹管预紧力、接触面间隙、连接锥角等因素。



▲ 扫描驱动机构有限元模型



▲ 波纹管有限元模型

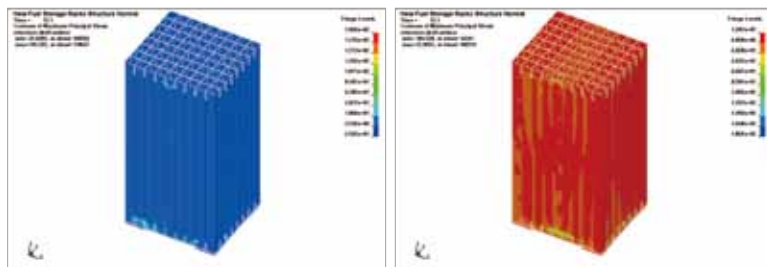
## · 核电领域

**研究课题:** 核电厂新燃料贮存格架抗震及跌落分析

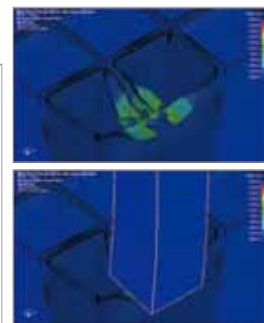
**项目来源:** 深圳中广核工程设计有限公司上海分公司

**用户单位:** 深圳中广核工程设计有限公司上海分公司

新燃料贮存格架是位于核电厂内用于贮存新燃料组件的格架。它在核电厂抗震设计中为I类的设备支承构件, 需要满足在万年一遇的地震下能继续使用。地震的响应是具有强非线性特征, 比如摩擦滑动、间隙、碰撞等。传统的线弹性分析方法(反应谱法)等将无法准确的描述这类强非线性响应, 而采用时程分析方法能有效地模拟地震响应。计算分析采用的程序是基于能量守恒原理的显式动力分析程序ANSYS/LS-DYNA V971版, 定义计算加速度时程曲线共计20秒, 计算时间步长为0.01s, 采用自动子步长加速收敛。此外, 利用LS-DYNA程序对新燃料组件在吊装过程中的意外跌落也进行了仿真计算。



▲ 新燃料贮存格架应力图



▲ 新燃料组件跌落分析图

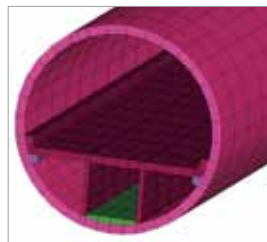
## · 土木市政领域

**研究课题:** 隧道结构与轨道车辆耦合系统振动分析

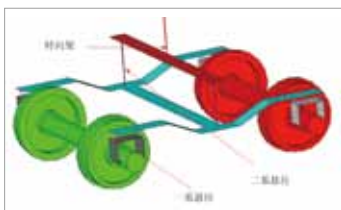
**项目来源:** 上海交通大学机械与动力工程学院

**用户单位:** 上海交通大学机械与动力工程学院

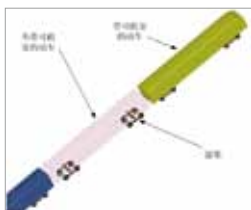
上海长江隧道位于长江入海口附近, 其地质情况非常复杂, 不均匀沉降可能导致隧道结构的局部应力集中。此外, 作为高速公路和城市轻轨两用隧道, 上海长江隧道也受到多种动态载荷的耦合作用。其中, 轨道车辆在隧道中行驶时, 不仅移动质量会产生隧道结构与车辆的耦合振动, 轨道不平度也是产生隧道结构与车辆耦合振动的主要原因。隧道结构与轨道车辆耦合振动产生的动载荷直接影响隧道结构的疲劳寿命和使用年限。因此上海长江隧道与轨道车辆耦合振动的数值仿真对于确保隧道设计使用年限具有重要的理论指导意义和实用价值。



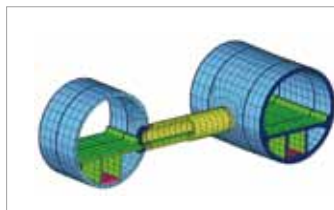
▲ 隧道局部有限元模型



▲ 车辆悬架模型



▲ 车厢模型



▲ 联络通道

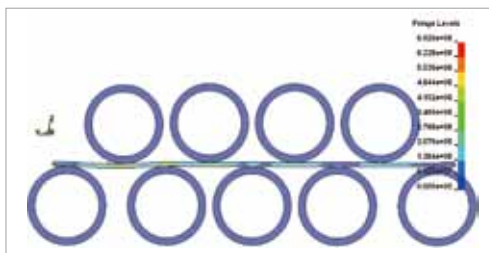
## · 钢铁领域

**研究课题:** 钢板矫直过程的三维数值仿真模拟

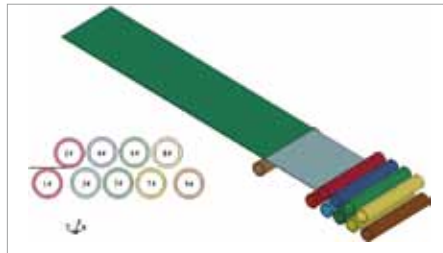
**项目来源:** 宝钢研究院(咨询项目)

**用户单位:** 上海超级计算中心

针对厚板冷矫直机的矫直工艺, 利用有限元隐式和显式两种不同仿真算法就其矫直过程进行了三维动态仿真。得到了不同矫直环境和计算条件下钢板矫直过程中的残余应力分布情况, 对矫直辊矫直力数据也进行了比较和分析。这一项目有助于今后深入探求矫直机工艺参数的合理性, 建立更加精准的数字化仿真模型, 并完善相应的矫直工艺设计流程。



▲ 矫直过程中的应力云图



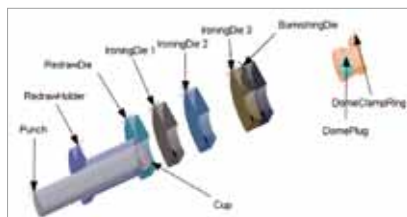
▲ 钢板矫直仿真模型

**项目名称:** 某产品变薄拉伸成形数值仿真

**项目来源:** 企业科研项目

**用户单位:** 宝钢研究院

某产品成形工艺不同于一般的冲压成形, 为多道次环模的变薄拉伸成形。原材料厚度0.23mm, 变薄拉伸以后最薄减小为0.07mm, 成形速度快, 对材料性能、模具尺寸、配模工艺等要求非常高。本项目通过数值仿真对该产品的材料性能、成形工艺及模具进行系统性研究。研究内容包括建立变薄拉伸成形数值仿真模型、基于仿真模型快速评估不同厚度材料的变薄拉伸性能、通过计算优化产品形状和变薄拉伸成形工艺。



▲ 多道次环模模具

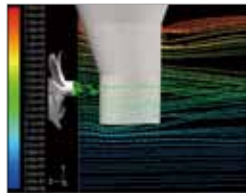
## · 船舶领域

**研究课题:** CFD实用化课题中桨舵干扰的研究

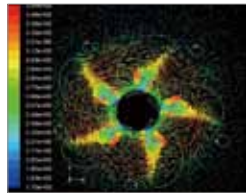
**项目来源:** 工信部

**用户单位:** 中国船舶工业集团第708研究所

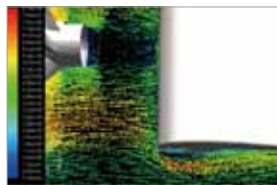
螺旋桨是船舶最重要的推进装置, 其水动力性能不仅与螺旋桨本身及船体有关, 还受桨舵相互干扰的影响。本项目通过CFD方法研究了舵和螺旋桨的相互干涉, 详细计算了桨舵推进器部件以及周围的流动特征, 包括压力分布、速度矢量分布、流线以及涡形态等, 得到了桨舵互相干扰的规律, 为大型船舶提供桨舵推进的性能机理分析, 提高设计人员对桨推进性能的认识, 为相关设计提供咨询服务。



▲ 桨毂和舵导边之间的流线



▲ 螺旋桨盘面速度分布



▲ 桨舵相互干扰局部速度矢量及速度分量分布

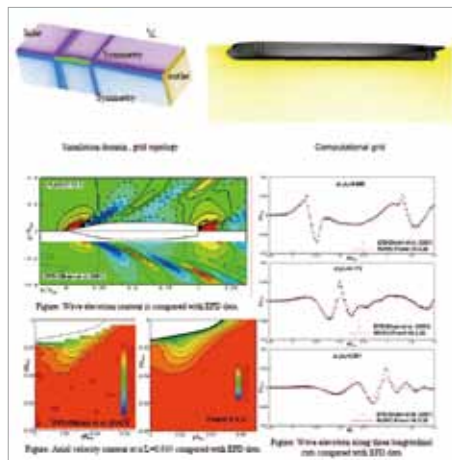
**研究课题:** 运用多块结构网格预测船体阻力和波形

**项目来源:** 国际船模拖曳水池会议

**用户单位:** 中国船舶工业集团第708研究所

该项目基于计算流体动力学 (CFD) 方法和VOF方法, 以KVLCC、KCS和DTMB5415标准模型为研究对象, 运用雷诺平均的Navier-Stokes方程、雷诺应力和SST k $\omega$ 湍流模型计算求解得到各自流场的详细信息、阻力和自由面波形分布。计算中模型区域采取多块结构网格。通过计算结果与试验结果的对比, 验证整个计算方法的有效性和可靠性。

该项目为验证和推广基于CFD技术的数值模拟方法成为计算操作运动水动力乃至直接预报船舶操纵性的有效工具打下了坚实的基础。上海超算中心的计算平台为此项目的开展提供了有利的保障。



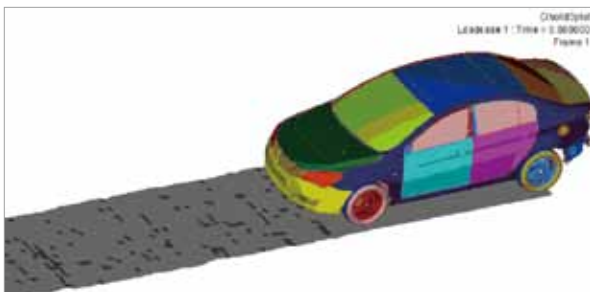
## · 汽车领域

**项目名称:** 面向制造企业创新产品开发及节能增效的信息化支撑技术研究与应用

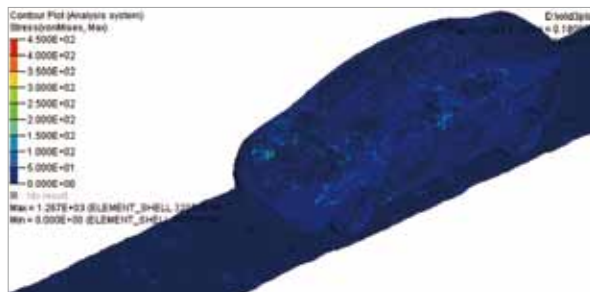
**项目来源:** 上海市科委项目

**用户单位:** 上海汽车集团股份有限公司技术中心

在汽车研发过程中, 创新产品的协同设计非常重要。针对此特征, 结合自主知识产权汽车产品开发的需要, 通过信息化平台的建设, 在解决其中若干关键技术问题的前提下, 为汽车产品的协同创新设计提供一个具有相当先进性的开发平台。本项目中利用此平台进行了“基于PAVE路谱的耐久性分析”, 分析中使用了上海超级计算中心的软硬件资源。



▲ 耐久性分析模型



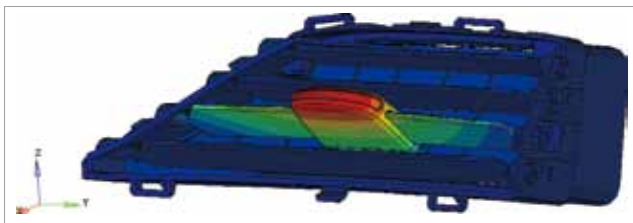
▲ 耐久性分析的应力分布

**项目名称:** 汽车空调出风口扇叶的变形及刚度分析

**项目来源:** 美国ford 公司

**用户单位:** 霍夫汽车设计(北京)有限公司

本项目针对汽车内部空调出风口扇叶的变形及刚度, 分析模拟了多个工况。在模拟分析的基础上, 对汽车空调出风口扇叶形状做出修改, 保证调整后的扇叶使用中的变形在标准之内。



▲ 空调出风口的扇叶变形图

## · 机械领域

**项目名称:** 某型号燃气轮机转子装配变形分析与控制研究

**项目来源:** 校企合作项目

**用户单位:** 上海交通大学

转子是燃气轮机核心部件之一,在制造、存储、装配过程中会产生一定的变形,会影响燃气轮机工作的效率。本项目通过有限元分析计算出转子的变形量、轴向与径向间隙,并与实际工况进行对比,提出了可行的控制方案,可靠高效的装配工艺流程,新颖的装配理论,保证燃气轮机组高效率装配项目预期成果。



▲ 燃气轮机变形云图

## · 机理研究

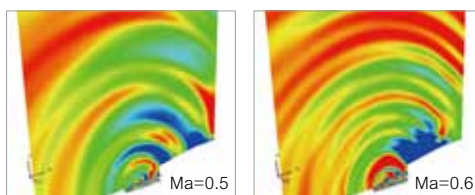
**研究课题:** 复杂流动发声机理的大涡模拟研究

**项目来源:** 国家自然科学基金

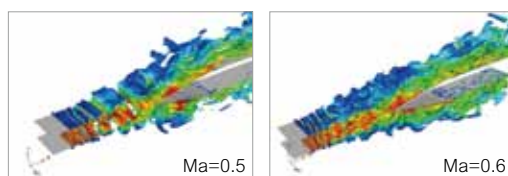
**用户单位:** 北京航空航天大学能源与动力工程学院

采用计算气动声学方法,研究对边楞音的详细发声机理,并且对边楞音频率与马赫数的关系进行了讨论;同时对不完全膨胀的超音喷流进行了数值模拟,并对其中的主要噪声分量宽带激波相关噪声进行了研究。

**边楞音三维数值模拟。**本部分研究对边楞音的详细发声机理,喷流与尖劈相互作用发声的详细过程进行了分析,并且对边楞音频率与马赫数的关系进行了讨论。从图中可以清晰地看到从尖劈附近产生的声波向上游和下游辐射的现象。(图1、2)

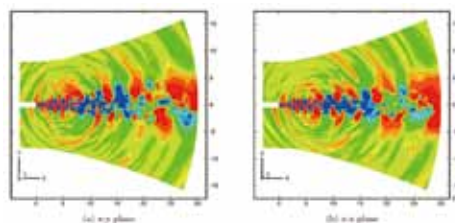


▲ 图1 喷流与尖劈相互作用瞬时压力场云图

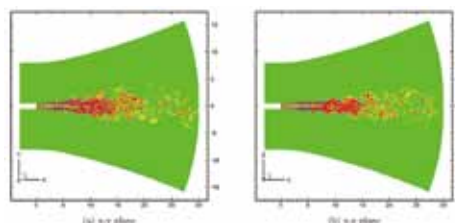


▲ 图2 喷流与尖劈相互作用相干结构

**宽带激波相关噪声预测数值模拟研究。**本部分对马赫数为1.077、1.166和1.221三个不完全膨胀的超音喷流进行了数值模拟,并对其中的主要噪声分量宽带激波相关噪声进行了研究。从图3可以清晰地看到向上游和下游方向辐射的声波,而且两个平面内的辐射图像并不完全一致;从图4中可以看到在喷流剪切层的起始位置大尺度结构很少而且强度也很小,随着向下游运动,各种尺度的涡结构逐渐发展,小尺度的涡越来越多,尤其是在喷流核心区之后的一段距离内,其后由于涡的合并及耗散作用小尺度的涡结构逐渐减少。(图3、4)



▲ 图3 马赫数1.166喷流瞬时压力场云图



▲ 图4 马赫数1.166喷流瞬时涡量场云图



## 软件研发服务

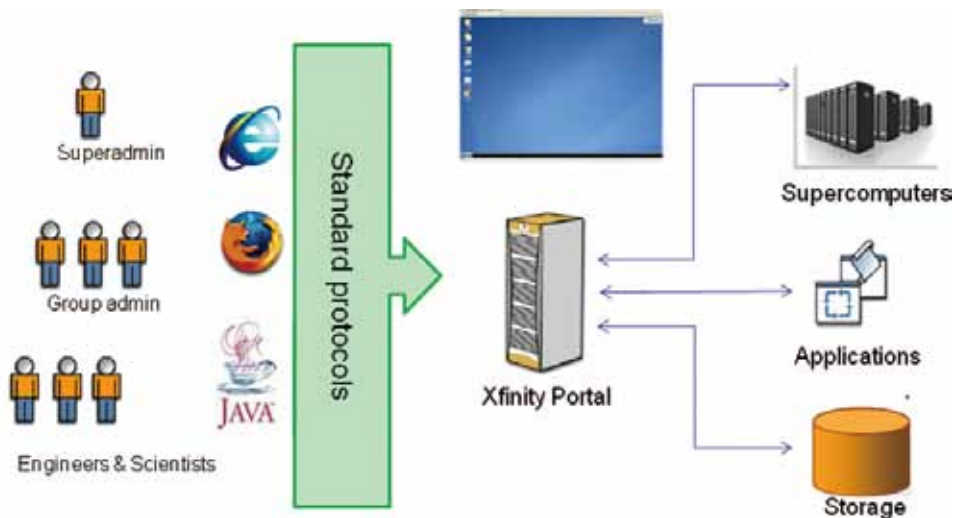
上海超级计算中心除了承接各类国家研发项目以外, 还在高性能计算使用环境、高性能计算软硬件产品测评、并行应用移植和性能优化等方面进行研发, 并为用户提供相关服务。

### 云计算——高性能计算平台软件Xfinity

#### 1. Xfinity软件简介

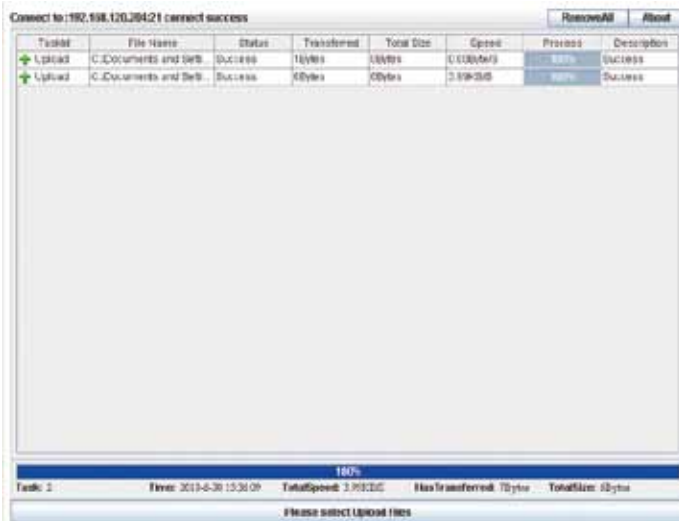
Xfinity软件是针对传统高性能计算的客户端使用方式不能满足用户对于方便性、安全性、可管理性等要求而开发的。通过该软件, 可以整合多个高性能计算资源, 为用户提供统一的基于web的资源使用方式; 提供基于用户角色的资源分配与调度方案, 保证用户使用过程中计算数据的安全; 提供详细的资源监控与使用分析信息, 帮助用户进行成本控制与管理; 提供分享HPC知识和经验、发布问题和寻求解决方案的平台。

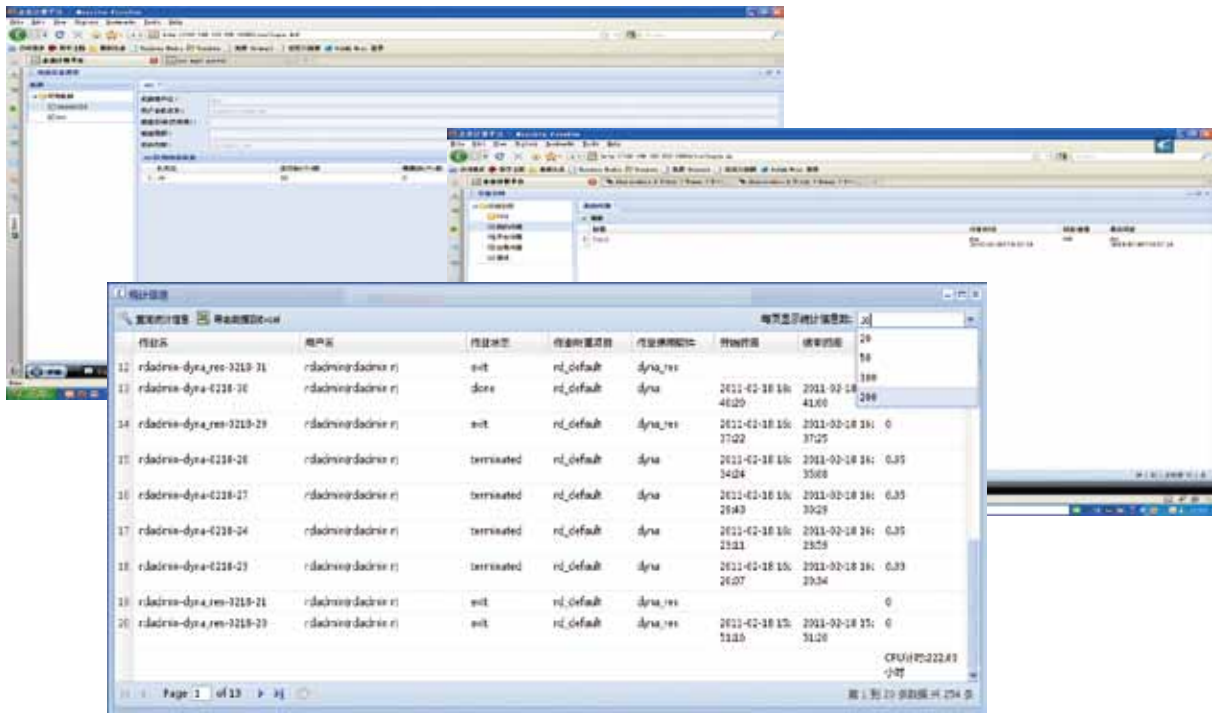
Xfinity软件包括三大模块, ①Portal, 用户访问接入点; ②Router, 资源控制中心, 部署于独立服务器, 所有Cluster和Portal通过Router接入; ③Cluster, 计算资源接入点, 部署于集群等高性能计算系统。



#### 2. Xfinity软件功能

Xfinity为用户提供丰富实用的功能, 并对用户进行分级管理, 授予不同权限。对管理员用户, 提供组管理、用户管理、项目管理、统计信息和在线信息查询等管理功能; 对终端用户, 提供作业管理、文件管理、资源监控、交流空间等应用功能。





3. Xfinity平台特点

Xfinity软件可以根据不同需求进行部署, 构建面向所有高性能计算用户的通用平台和面向特定企业或组织的定制平台。具有以下特点:

- ① 方便的使用方式
  - ▲ 采用B/S架构, 用户只需使用浏览器, 基于浏览器图形界面进行交互, 无需学习HPC相关的操作命令和技巧。
  - ▲ 随时随地使用资源进行计算。
- ② 界面友好
  - ▲ 平台实现windows操作界面风格, 沿用用户的使用习惯。
- ③ 安全的管理模式
  - ▲ 通过对用户授予不同的角色, 实现用户权限的自动控制, 如工程师只能访问自己目录下文件, 只能使用管理员所分配的应用软件。
- ④ 部署方式灵活, 扩展性强
  - ▲ 平台可根据用户需求部署在不同地点。
  - ▲ 平台支持多集群。

目前, 上海超级计算中心已为宝钢、上汽、延锋、核工院、商发等企业定制Xfinity专用平台, 为所有用户提供Xfinity通用平台(<https://xfinity.net.cn>)。

## HPC实验室

### 1. HPC实验室简介

为对各类高性能计算系统软件和应用软件在投入实际运行前进行测试和验证, 以保障主机业务系统的稳定运行, 以及对高性能计算新技术和产品进行充分地跟踪、分析和评估, 以满足中心未来主机选型的需求, 中心成立了HPC实验室, 它的主要职责包括:

- ① 构建系统多样、设备先进的高性能计算实验环境
- ② 为中心内外用户提供高性能计算试用和测试环境
- ③ 提供高性能计算相关培训
- ④ 提供性能评测和优化服务
- ⑤ 对高性能计算新技术和产品进行跟踪、分析和评估

目前实验室现包含28个节点和一个Tesla S2050 GPU节点, 其中包含一笼4路4核AMD Barcelona 1.9GHz刀片 (配备10个刀片节点, 每个节点64G内存, IB与千兆双网络, 配置与魔方刀片相同)。

2011年HPC实验室将继续完善软硬件环境, 加强管理, 最大化利用已有资源, 加强对高性能计算新技术和产品的跟踪和测试, 为中心四期建设服务。



### 2. 主要研发工作

#### ① CPU测评

CPU选型是高性能计算机系统建设的重要工作之一。CPU测评工作一方面跟踪CPU技术动态, 为中心设备的更新做技术积累; 另一方面, 与各大CPU产商合作, 对最新CPU产品和技术进行应用、分析, 获得第一手的技术资料。

目前, CPU测评上已完成了如下几项工作: AMD “Shanghai” 处理器与 “Barcelona” 处理器性能对比测试, 为



“Shanghai”处理器发布提供演示; AMD “Shanghai”系列处理器与Intel Xeon E54xx系列处理器进行对比性测试; Intel 4路8核Nehalem-EX Xeon处理器测试等。测试根据需求不同制定详细的测评计划, 测评涉及应用包括了Benchmark (如SPEC CPU, NPB)、科学计算应用 (如LAMMPS, CPMD)、工程计算应用 (如FLUENT, ANSYS)、Web应用、数据库等。

② GPU系统

GPU作为一种高效的加速部件正在快速地发展, 被逐步应用于各领域。GPU方向的主要工作目标包括: 了解掌握GPGPU的发展方向 and 前沿动态; 提高GPU应用程序的开发能力, 熟练掌握开发过程中所使用的工具、优化方法等; 选取GPU应用的热点领域进行探索, 和应用领域内的专家进行探讨合作, 完成相关问题的GPU移植。

目前, GPU工作完成了Gadget2、NPB-CG和热传导方程移植, 发表GPU-SMP国际会议论文一篇; 完成Monte Carlo期权定价模型的GPU移植; 测试了Gromacs的GPU版本。

③ 并行应用性能评测和优化

应用性能一直是用户关注的首要问题, 如何有效地利用硬件资源, 使应用程序能达到高可扩展性和高效地运行, 则必然要借助于性能评测和优化。目前, 实验室已具备相应的硬件和软件环境, 在用户有并行性能优化需求时, 及时进行沟通, 对用户的应用进行问题再现、分析、优化, 并提交最终的应用性能优化报告, 为用户提供应用优化解决方案。

④ 其他

除以上工作之外, 实验室还针对不同的操作系统 (Linux、Windows) 的不同版本、并行文件系统、网络、存储设备等进行相关测评, 积累HPC各层面的技术经验。

在研各类国家研发项目

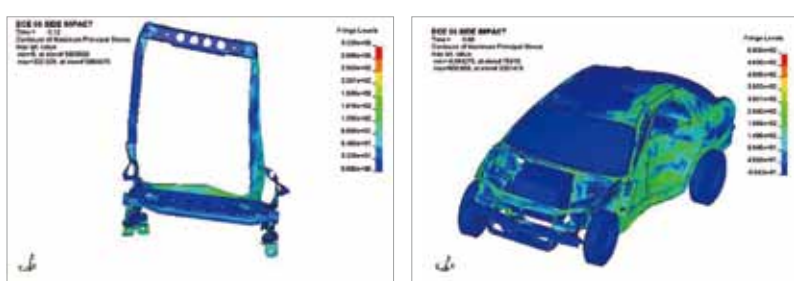
序号	项目名称	项目来源	起止时间
1	中国国家网格南方主结点建设及应用服务关键技术研究	863	2007.1~2010.12
2	中国国家网格运行管理技术研究	863	2007.1~2010.12
3	天体大规模并行数值计算软件平台的研制	863	2007.1~2010.12
4	新概念高效能计算机体系结构及系统研究开发	科技部/上海科委	2009.7~2011.7
5	工业仿真与优化设计网格社区的开发和应用	863	2009.8~2010.12
6	基于沉浸边界法的气固两相湍流全分辨率直接数值模拟	基金委青年基金	2010.1~2012.12
7	多(众)核以及GPGPU异构平台上性能测评软件的研究	科委浦江人才	2010.7~2012.6



▲ “中国国家网格南方主结点建设及应用服务关键技术研究”作业  
提交页面



## 汽车碰撞安全性模拟



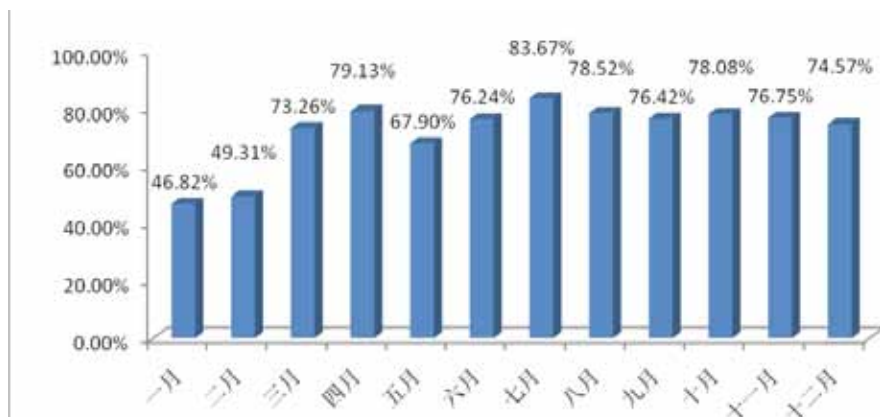
### 车身最大应力及变形图

### ▲ 工业社区项目上汽应用成果

### ▲ 工业社区项目上汽应用成果

## 2010年上海超级计算中心用户及相关数据统计

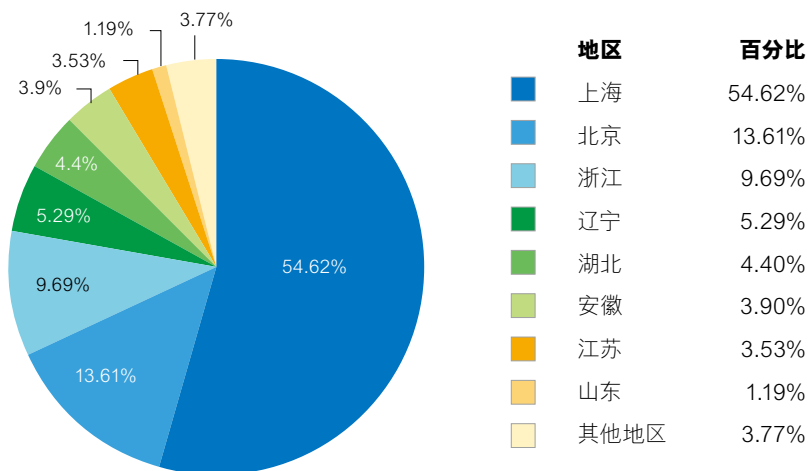
2010年, 魔方超级计算机系统全年可用率达到97.68%, 中心主干网络系统可用率为 99.79%。3月, 魔方全机使用率超过70%, 系统基本达到满负荷使用状态, 年平均使用率达到71.72%。



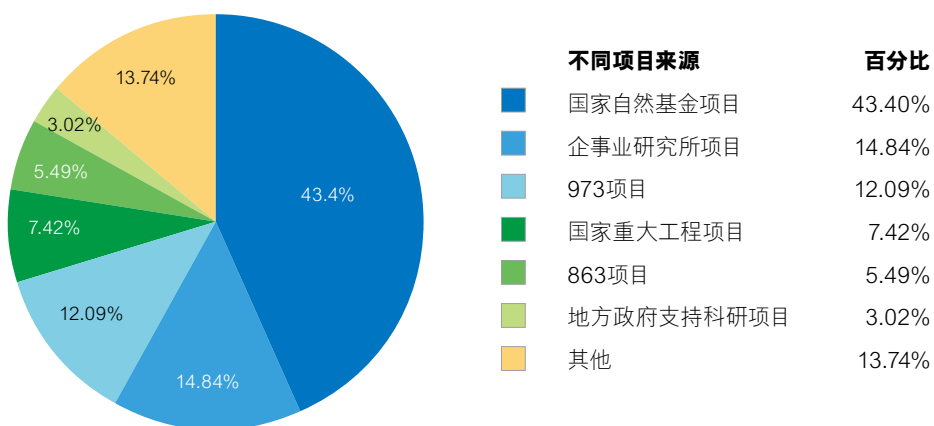
▲ 图1、2010年魔方超级计算机月平均使用率

2010年魔方超级计算机上共为286个用户组和研究机构开设了正式计算帐号, 为网格用户开设了58个计算帐号, 提供了25个用户测试帐号, 为93个用户组和研究机构提供了计算测试服务。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, 在魔方超级计算机上, 用户的应用水平也得到了广泛的提高。最大实际业务并行应用规模达到8192核, 2010年并行规模在256核以上作业使用的机时占全年机时40%以上, 1024核以上作业使用的机时占全年机时10%以上。

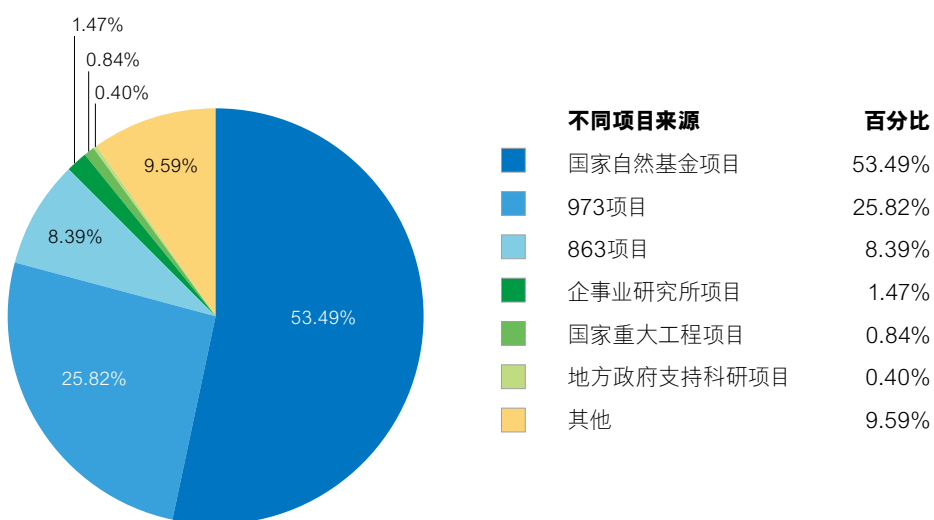
### 不同地域机时统计



不同项目来源帐号数统计

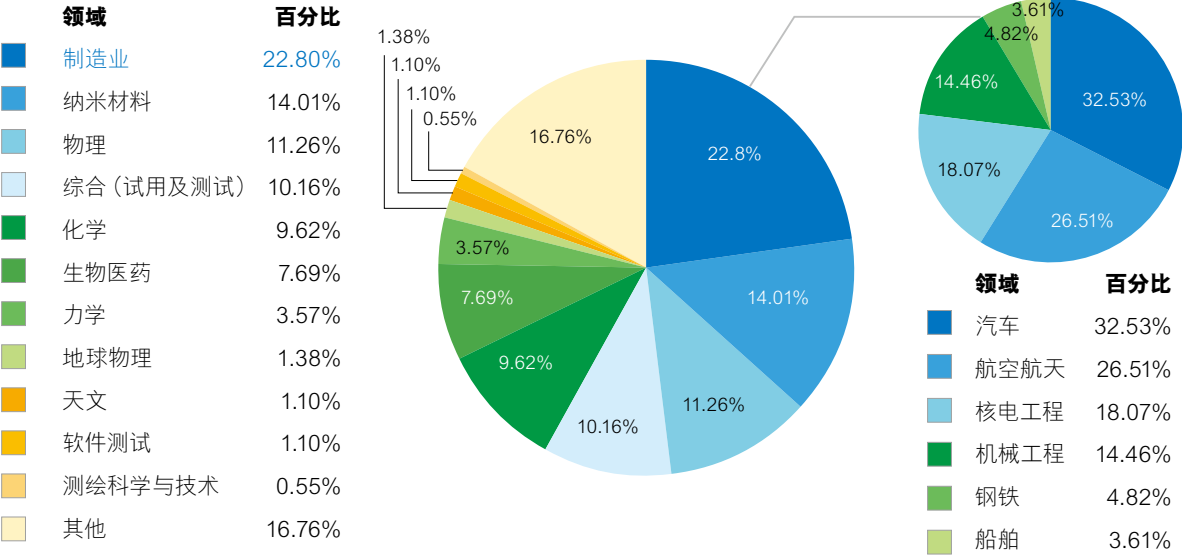


不同项目来源机时数统计

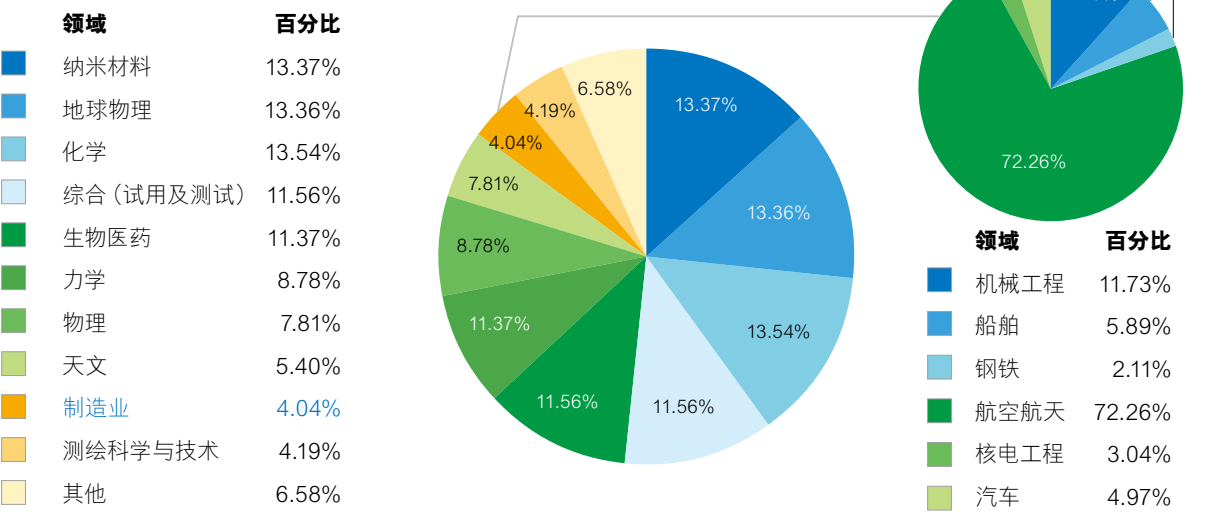




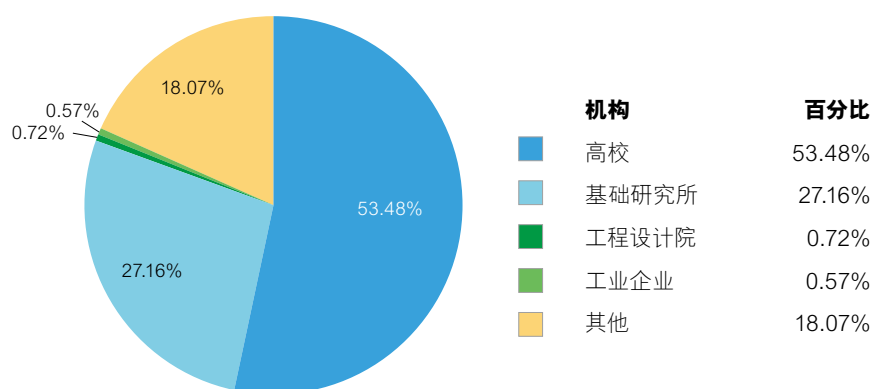
各领域帐号数统计



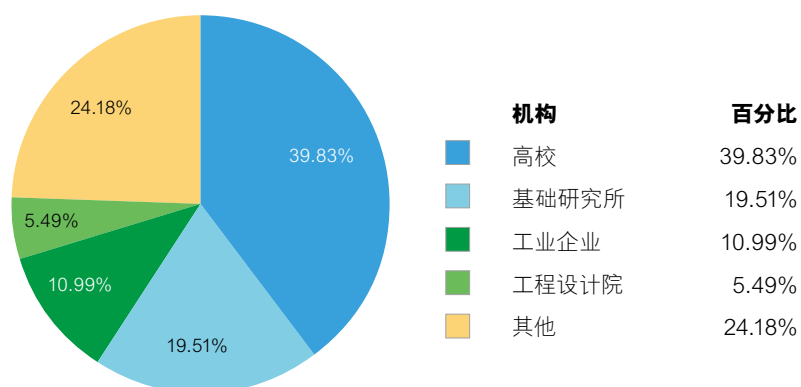
各领域机时数统计



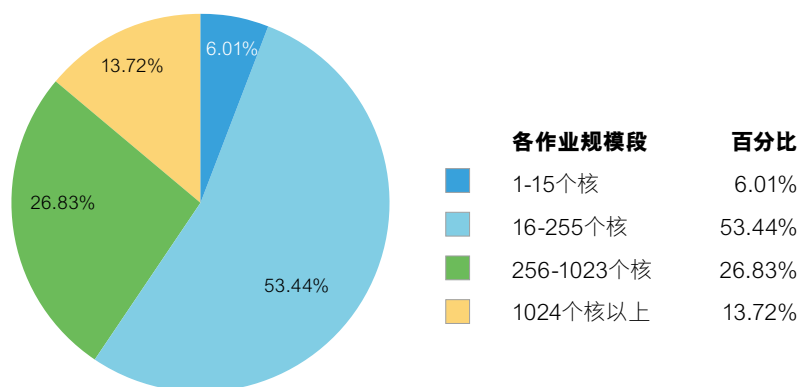
各用户机构机时统计



各用户机构帐号数统计



各规模作业机时比例



## 2010年社会对中心的关注

### 媒体宣传

2010年,上海超级计算中心围绕“魔方”运行一周年、第一期科学计算规模倍增计划、云计算、P级超级计算中心的出现等为主题,邀请社会各类媒体对中心运营情况、未来规划和各类活动进行跟踪采访,《解放日报》、《文汇报》、《计算机世界》等媒体对中心进行了专题报道,引起了上海市发展改革委员会和上海市经济和信息化委员会的重视。

以下是2010年重要报刊杂志对中心的关注和评论。





## “魔方”开通一周年汇报会

2010年7月12日，上海超级计算中心举办“‘魔方’开通一周年汇报会”。经信委各处室代表参加了此次汇报会，并参观了中心。

中心副主任王普勇向大家汇报了“魔方”开通一周以来的运营情况，并介绍了国际国内高性能计算的发展趋势，以及近十年来中心提供高性能计算服务帮助用户取得的重大成果。

上海超级计算中心三期工程于2009年2月启动，经过紧张的施工，安装调试完成速度二百万亿次/秒的“魔方”（曙光5000A）超级计算机，并于2009年6月15日主机开通运营，为用户提供高性能计算服务。到2010年6月，“魔方”开通已满周年，开设用户帐号240个，为用户提供机时超过1.05亿核小时。





## 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开发和应用”, “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”, “汽车协同制造网格”等, 有6项成果获上海市科委鉴定, 另外获得4项软件著作权登记。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。

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](http://www.q-chem.com))开发组成员之一, 研究方向为偶合簇理论(Coupled Cluster Theory), 实现并编写了Q-Chem程序中EOM-CCSD方法的冻结实近似解析梯度计算, 并应用到双自由基和三自由基体系的研究当中。

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

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



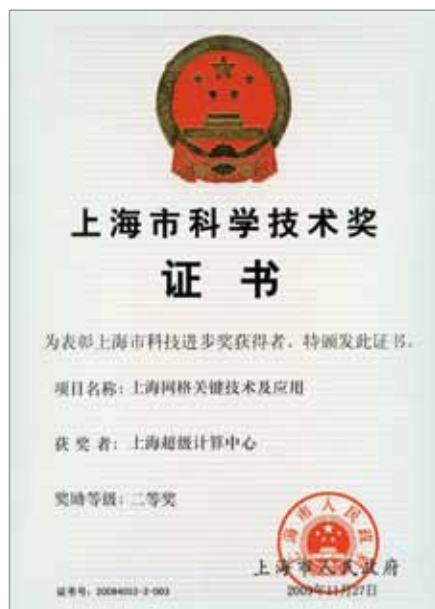
王涛

## 2010年上海超级计算中心所获奖励

### “上海网格关键技术及应用” 项目获上海市科技进步二等奖

2010年3月24日，“2009年度上海市科学技术奖励大会”在上海展览中心友谊会堂隆重举行。上海超级计算中心参与的“上海网格关键技术及应用”项目获得2009年度上海市科技进步奖二等奖。

该项目从2003年开始，由上海交通大学、上海大学、上海超级计算中心、万达信息股份有限公司、同济大学等几家单位共同承担，历经5年多的技术研究、系统开发和应用推广，取得了系统性的、具有创新意义的成果。该项目建立了一个城市范围的上海网格试验床，是国内首个城市网格平台，被称为中国五大网格计划之一。该项目在国际上首次提出了信息服务网格的体系结构，以该体系结构为指导开发的上海网格平台SHGOS，支撑了智能交通信息服务、电力网格、新药研发、工程应用等一批重要应用。



▲ 中心参与“万名大学生看科技浦东”活动，获“特别贡献奖”



▲ 中心计算机科技馆获“全国科普教育基地”称号



▲ 中心获世博荣誉证书

**2010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:** 吴 珩  
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>