

上海超级计算中心
Shanghai Supercomputer Center



2014年度报告



关于我们

2014年,上海超级计算中心在上海市经济和信息化委员会的领导下,以高性能计算服务为宗旨,不断完善和优化高性能计算平台,提升技术服务能力,拓展高性能计算市场;积极与上海市及国家重点项目用户开展深度合作,吸引、培养新用户,巩固和发展现有用户;充分发挥高性能计算公共服务平台作用,为上海经济建设和科学研究提供可靠、稳定的高性能计算资源,为上海“创新驱动、转型发展”做出应有的贡献。

上海超级计算中心作为国内第一个面向社会开放、资源共享的高性能计算公共服务平台,已形成一套较成熟的高性能计算服务体系,为科研及工程应用领域提供高性能计算服务和咨询服务,中心用户数逐年上升,业务呈可持续发展趋势。2014年是上海超级计算中心转型发展的关键阶段,随着云计算、大数据时代的到来以及国内多个千万级计算能力的超级计算中心相继建成和逐渐成熟运营,中心面临了很多机遇和挑战。在积极筹划下一轮建设的同时,中心将从业务方向、运维模式、建设模式、人才结构、体制机制等方面谋划转型,并不断完善服务体系,提升服务能力和增值能力,努力拓展国际业务,积极备战“二次创业”。



計算中心
puter Center



目录

主任寄语	1
转型发展, 积极备战“二次创业”	2
国内交流	
交流合作	4
参会参展	7
讲座培训	8
员工学习	10
国际合作	
中心与德国斯图加特超级计算中心签订《战略合作谅解备忘录》	11
中心参会ISC14	11
中心参展SC14	11
其他接待与交流	12
计算资源服务	
科研领域	13
工业领域	18
高性能计算研发	
高性能计算服务平台Xfinity	25
HPC实验室	26
第三方软件研发及服务	26
国家项目	27
科普活动	28
员工活动	31
媒体宣传	33
数据统计	34
中心领军人物	36

主任寄语



2014年，我国信息化发展与科学技术事业的改革持续推进，超级计算领域迎来深刻变革，上海超算中心改革提速、快马加鞭推进“二次创业”正在路上。在这一年里，中心每一位员工均是参与者、感知者，同时，“大数据”、“云计算”不再是停留在信息化领域里空洞的技术词汇，已经开始逐步进入百姓的生活工作中。在这以快速变化为新常态的信息技术领域，中心的全体员工面对各类挑战和考验正亟须迸发出了极大的活力与适应力，努力把握好自身的改革节奏。

2014年，中心全体同仁以创业者的心态，在保障自身稳定运营的同时，切实推进中心整体全面的改革与发展，对中心功能进行了新的定位，从业务模式、建设模式、运营方式、人才结构、体制机制提出了五大创新转型方案。在这一过程中，中心总结经验，拓展改革的思路，摸索出了一条适合上海超算中心发展的新道路。

新的一年征途中，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领导下，上海超算中心将继续发挥创新精神、奋斗精神，进一步推进五方面的转型工作，使中心真正成为上海市具有公信力的第三方信息化公共应用基础平台。

当前，国家已进入全面深化改革的关键时期，纵观国内，“四新经济”、“众筹众包”、“跨界经营”的经济发展模式和方式方兴未艾；“互联网+”引领的创业热潮如火如荼；工业4.0为代表的工业科技革命蓬勃发展，而这一切进步的实现，将越来越依赖于云计算、大数据和高性能计算技术的应用。所以，上海超级计算中心将争做改革大潮“先行者中的先行者”，扩大在同行业转型过程中的先发优势，以斗志昂“羊”的姿态在2015年继续奋发，以优异的成绩回报广大用户的关爱。

周毅民

■ 转型发展，积极备战“二次创业”

积极谋划转型发展，通过顶层设计形成可实施方案

2014年上海超级计算中心根据市领导的要求，结合目前正在兴起的云计算、大数据技术，从中心的业务方向、运维模式、建设模式、人才结构、体制机制等方面谋划转型。

转变观念，研究新的发展格局。2014年中心针对发展中遇到的瓶颈和困难，紧密结合当前的新技术，开展了一系列调查研究，形成发展共识及理念；并通过走访调研各个类型的信息中心和用户单位，邀请相关专家、大数据研发或应用单位到中心座谈，确定中心未来业务发展将以云计算为载体，同步发展高性能计算应用技术与大数据业务，形成“一体两翼”的业务新格局。

提出中心未来定位与五大转型方案。中心确定未来“三平台两基地”的发展定位，即建设高性能计算公共服务、云计算服务和大数据服务等三大平台，同时围绕三大平台建设产业孵化基地和新一代信息技术研究与人才培养基地；并提出要实现五大转型：业务方向转型：从单一的高性能计算转向高性能计算、大数据、云计算三大业务领域；建设模式转型：从全部依靠政府投入逐步走向政府投入与市场投入相结合的建设模式；运营方式转型：从政府投入为主转向政府购买服务与市场运作相结合；人才结构转型：从单一的高性能技术管理人才队伍转向建立一支大数据、云计算及高性能计算的技术与管理复合型人才队伍；体制机制转型：建立理事会、中心、发展公司三层管理架构，辅以投融资手段及自我造血功能。中心将在上海创建全球影响力的科技创新中心建设和新一轮智慧城市建设中发挥其不可替代的公共服务平台的功能和作用。

狠抓落实，转型发展已取得初步进展

积极探索大数据应用业务，形成阶段成果。1、引进并建成住金所第三方支付平台，该项目通过中国人民银行第三方支付牌照的评估以及信息安全的等保测评；2、正在与大虹桥管委会和微信银行平台等单位商讨更多的大数据合作项目；3、对国内外政府数据公开情况开展研究，收集美国、英国、新加坡、香港及国内其他省市等政府数据公开的资料并进行分析研究，其中《实现政府大数据价值的几点思考》刊登在中国浦东干部学院的《研究咨询》上；4、积极探索建立形成科学研究和产业发展等公共（第三方）的大数据汇聚和处理平台，开拓大数据领域的业务与服务。

探索可持续发展之路，在建设模式和运营方式探索政府支持与市场机制介入的“两条腿走路”发展思路。积极整合社会和市场资源，从业务、项目和资本三个层面寻求合作。首先，在纵向上深度拓展中心业务，包括服务器托管、IT服务托管、数据存储服务等更加基础性的第四方服务；其次，与上海科技大学、上海海洋大学、上海海洋信息中心、上海环境监察中心、中航商用航空发动机有限责任公司、上海核工院等单位开展项目合作，探索综合利用中心信息技术、整合能力以及其他资源为这些单位提供高性能计算、云计算、大数据、信息安全等方面完整的解决方案和政策咨询；第三，与浪潮、曙光、中信集团等公司协商资本合作方案，研究引入社会资本参与中心建设、运维、业务发展的实施方案，与社会资本共同投资或孵化相关业务，以实现中心的建设模式和运维模式从全部依赖政府到以政府资金为主，企业等社会化资本相补充的模式。

为科研和工业领域提供高性能计算服务及技术支撑

2014年,上海超级计算中心用户的增长速度保持平稳,全年为71个新进研发团队提供了正式帐号,为104个研发团队提供了试用服务,累计为570个研发团队提供了持续性计算服务。在机器使用上,中心克服“魔方”主机逐年老化,设备故障率上升等困难,确保对外、对内网络通畅和安全运行,网络可用率达到99.91%,重要机电设备和主机房环境保障的可用率达到99%以上。

全年新增用户单位55家。在建设1+N工业用户战略联盟思想的指导下,完成上海超算核电分中心二期平台建设;协助建设西安电子科技大学高性能计算中心;筹划上海超级计算虚拟安全仿真(上汽)分中心、飞机气动设计(商飞)分中心的建设;与上海科技大学、上海水务(海洋)局、环保局、集成电路设计等单位达成合作意向。

研究和推广云计算服务模式,提升技术服务能力

中心自2009年开始研发中心的Xfinity云计算服务平台,逐步完善中心HPC Cloud环境,并于今年推出更为便捷的Xfinity手机版,满足用户随时随地上机的需求。目前通过Xfinity平台使用中心资源的用户有366家,累计有108213个作业运行,全年提供机时16611961核小时。

完善中心内部管理

中心制度制定和完善 2014年,中心对现有的工作流程和规章制度进行了梳理,逐步健全中心内部管理机制,制订和修改了13个规章制度。中心通过梳理与完善中心内部的业务管理流程和规章制度,提高了服务的专业化程度。

人才管理 制定了《上海超级计算中心员工行政管理级调整办法(试行)》,为行政岗位人员职业发展提供了一定的空间;根据《上海超级计算中心员工专业技术级别调整办法》完成本年度技术岗位晋级评审工作。

信息安全管理 根据信息安全管理的要求,坚持有效性测量的常态化管理,每年通过内部审计及时解决信息安全管理上的薄弱环节。2014年,中心顺利通过BSI公司对信息安全管理体系的复审认证。根据中心拓展新业务的需求以及部分用户对信息安全的要求,中心今年对部分机房和设备按照等级保护3级的要求开展改建和设备更新,从硬件环境上进一步提升中心在信息安全方面的能力。

国内交流

交流合作

2014年5月14日, 中心主任周曦民带队参加了在上海交通大学召开的高分上海数据中心研讨会。本次会议议题为高分上海数据中心可行性报告研讨和大数据平台建设研讨。与会专家就高分上海数据中心可行性报告进行了论证, 重点讨论了高分上海数据中心的建设背景、需求分析、遥感现状、区域优势、建设目标与任务、建设方案、运营管理、效益分析等。会议初步确定了高分上海中心的发展目标为: 以高分数据为基础, 示范应用为牵引, 实现卫星遥感技术在上海以及周边地区的广泛应用。会议还就高分中心与上海超算中心的合作形式和内容进行了探讨。

2014年5月26日, 中心转型发展工作小组赴昆山凯捷咨询(中国)有限公司调研, 重点考察学习了在智慧城市建设中如何实现大数据的收集、处理及应用, 以及为行政机构提高决策效率、节省政府开支等大数据应用案例。

2014年6月3日, 中心主任周曦民、副主任李根国带队赴上海市高级人民法院(以下简称“市高院”)调研法院系统大数据应用需求以及洽谈合作事宜。市高院系统正在启动“天平工程”, 目前法院的业务在信息化系统上已运作起来, 但还存在较多问题, 如应用系统过多且分散, 希望通过大数据和云计算技术, 建立法院系统的私有云, 整合各基层法院的硬件资源进行集约化管理, 由市高院统一通过云服务方式为各基层法院提供基础服务设施。市高院表示双方合作的起点可以从同城数据备份、根据需要提供数据出口、实现非涉密案件办案信息的共享、公共办公云平台应用、大数据成果分享、公共安全认证平台等入手, 使司法信息进入上海市的大数据资源平台, 审判录像等信息能供社会开放, 并通过信息化促进法院内部变革。

2014年6月27日, 中心主任周曦民、副主任王普勇带队赴公安部第三研究所(以下简称“公安三所”)调研。双方交流研讨

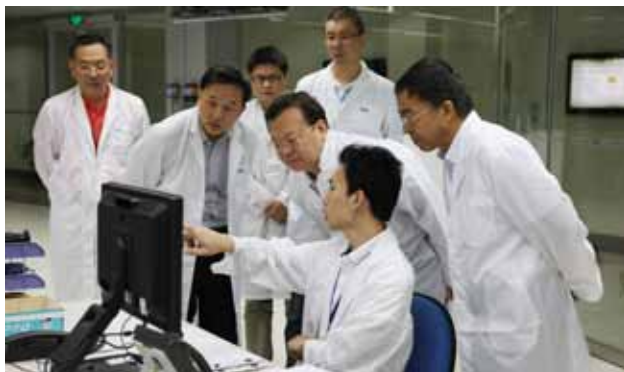
了未来可能合作的相关事宜。公安三所所长胡传平希望充分利用中心计算资源, 帮助解决信息梳理、密码破译等问题并节省投入; 未来中心转型后云计算、大数据应用的信息安全将会成为重点关注的内容, 双方希望长期保持沟通联系、资源共享。

2014年7月24日, 上海海洋大学信息学院院长黄冬梅等一行赴中心考察及交流大数据相关工作。中心主任周曦民向考察团介绍了中心的发展情况及转型发展工作中开展大数据业务的情况, 黄冬梅院长代表海洋信息学院介绍了学院近期开展的海洋大数据预研性项目、海洋学院的师资力量、学院的办学体制、办学特色、定向培养学生等情况。双方就未来的合作方向和内容达成了初步意向。



2014年8月14日, 上海市政府副秘书长陈靖到中心调研并指导工作。座谈会上, 中心主任周曦民就目前大数据方面开展的工作向陈靖副秘书长做了汇报, 并介绍了大数据在公共安全领域的相关应用案例。陈靖副秘书长对大数据在公共安全方面的应用非常关心, 并就相关技术问题与中心领导及专家进行了交流。陈靖副秘书长希望能借助上海超级计算中心的基础设施及技术力量, 在本市的公共安全防范上发挥作用, 如通过大数据分析进行反恐、交通安全、危险品监管、黑车整治等涉

及公共安全领域的大数据应用研究，能对本市公共安全事件起到预警作用。

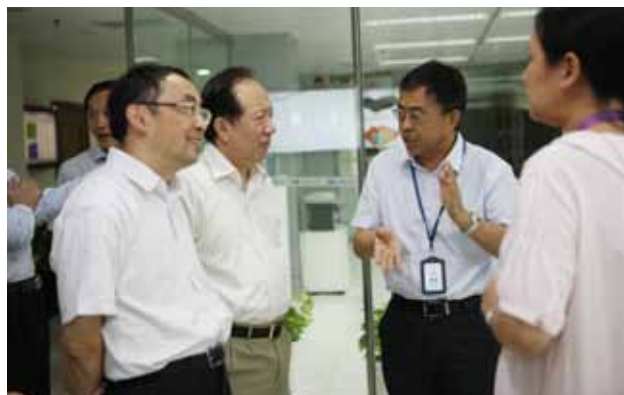


2014年8月21日，中关村大数据产业联盟秘书长赵国栋到中心交流。赵秘书长介绍了中关村大数据产业联盟的定位、品牌推广、运作方式及取得效益等，为中心即将开展的下一步工作带来了许多新思维和宝贵的经验。双方希望在未来能有更紧密的合作关系。



2014年9月16日，上海国盛（集团）有限公司党委书记、董事长张立平等领导班子一行赴中心调研，了解中心运行情况。调研中，中心主任周曦民介绍了中心发展情况、转型发展初步方案及市场运作设想。张立平书记对中心从2000年起通过

集约化运作为社会科研做出的贡献表示肯定，并表示国盛集团作为资本运营公司，将对中心这类战略型新兴产业给予支持。

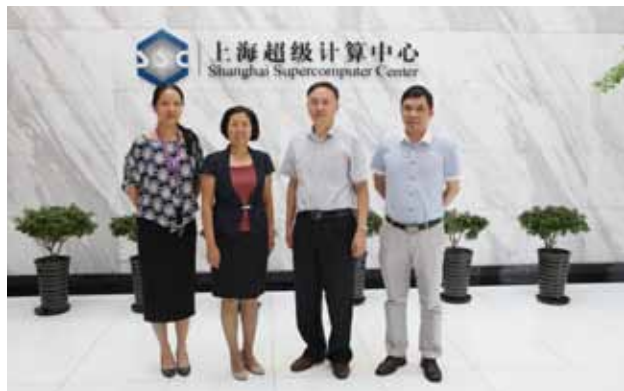


2014年9月25日，超级计算创新联盟2013-2014年度全体会议在广州中山大学行政楼讲学厅举办，中心主任周曦民及部分中层干部参加了会议。会后中心相关人员调研了广州市电子政务中心，电子政务中心刘俊主任接待并介绍了广州电子政务管理体制和财政投资的信息化项目在管理、运作、验收、绩效管理等方面的做法与经验。

2014年9月26日，中心主任周曦民应邀带队到国家超级计算深圳中心和华为技术有限公司调研。深圳超算中心成功的市场运行机制为中心进一步加强市场化运作提供了宝贵的经验。华为IT云计算产品线总裁任志鹏先生就华为公司目前在大数据领域开展的工作、取得的成果及大数据的长期战略政策等内容作了介绍；华为公司潘学林工程师介绍了华为云计算平台。

2014年9月27日，中共克拉玛依市市委常委、组织部长郭瑛到中心调研，中心主任周曦民就中心发展情况、中心转型发展期工作思路及大数据的业务思考等作了介绍。郭瑛部长表示，石油领域对高性能计算和大数据方面都有较大的需求，希望在未

来与中心有更紧密的合作。



2014年10月17日, 青海省海东市委书记于丛乐一行赴中心调研, 周曦民主任介绍了上海超算转型发展初步构想及大数据应用相关情况。于书记对大数据在国家治理体系、治理能力现代化方面发挥的重要作用, 以及利用大数据应用支撑政府进行还原事件真相及科学地决策等方面表示出浓厚的兴趣, 希望与中心建立合作关系。



2014年12月9日, 中信国通投资管理有限公司高青董事一行拜访中心。中心主任周曦民介绍了中心的基本情况和未来发展规划; 高青董事介绍了中信的相关情况并提出大数据的发展是未来必然的市场需求, 当下双方要打破传统、优势结合、与时代潮流紧密结合寻找合作突破口。双方就下一步合作表达了各自的意向。

2014年12月10日, 浪潮集团董事长兼CEO孙丕恕一行访问中心。中心主任周曦民接待并介绍了中心基本情况和转型发展规划, 孙董事长肯定了中心的服务优势, 并希望双方在大数据、云计算和高性能计算三大业务领域找寻合作突破口和商业模式, 真正帮助政府搭建公共服务平台并有效利用数据来支撑政府决策。双方就下一步合作和工作对接达成共识。



2014年12月22日, 中心主任周曦民带队赴中科院上海应用物理研究所上海同步辐射光源中心(以下简称“上海光源”)调研。应物所所长赵振堂博士介绍了“上海光源”建设、应用服务和运维管理方面的情况, 并表示上海光源作为国家重要的科学装置, 在计算模拟和数据处理等方面对高性能计算、数据存储和处理有巨大的需求, 与超级计算中心有着天然的联系, 希望今后能与中心在原有基础上进一步开展合作。周曦民主任表示, 中心将根据“上海光源”的实际发展需要, 在硬件、软件和资源管理等方面提供技术支持, 实现双方资源共享、优势互补, 为上海科技创新发挥重要作用。

参会参展

2014年6月10-13日, 中心参展了在上海大学召开的2014新兴电子材料和器件物理国际学术研讨会。本次研讨会由国家自然科学基金委员会、上海大学、上海市物理学会主办, 上海超级计算中心赞助。会议介绍了在该领域国内外研究的最新进展, 并交流探讨了在该领域未来的发展方向。

2014年6月19-23日, 中心参展了在南京师范大学召开的第七届计算纳米科学与新能源材料研讨会。会议邀请了该领域的专家学者就计算纳米科学与新能源材料领域的最新成果、发展动态等作专题报告。会议期间, 中心展示了硬件资源和相关领域的应用服务成果。

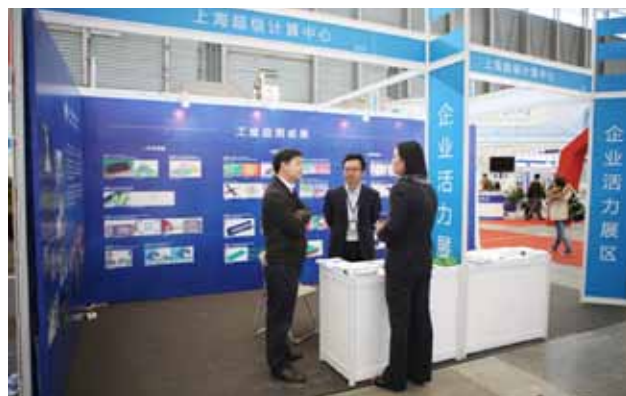
2014年10月26日, 西安电子科技大学高性能计算中心揭牌成立, 西安电子科技大学副校长李建东、总会计师刘延平出席。中心主任周曦民受邀参加了揭牌仪式并就今后进一步与西电在技术交流、科学研究和人才培养等方面开展合作进行交流。本次揭牌仪式现场启动了上海超级计算中心与西电高性能计算中心的互联互通, 标志着双方资源共享进入到更高的层次。这也是上海超级计算中心与西电高性能计算中心落实双方战略合作协议的又一举措。



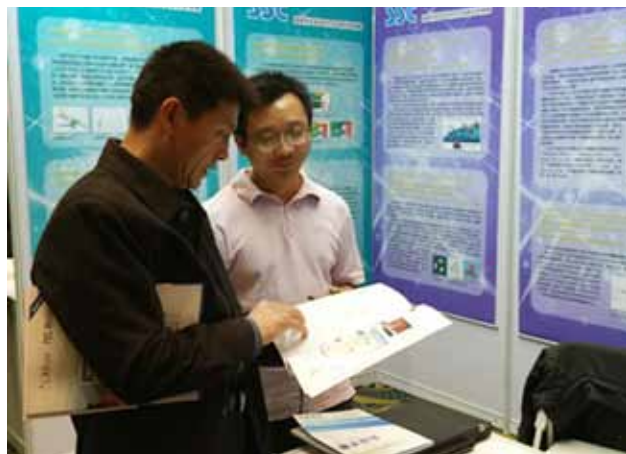
2014年10月17-18日, 英特尔高性能计算技术峰会在重庆召开, 本次会议主题包括: HPC发展与规划、HPC如何与云计算和大数据结合以及HPC新一代软硬件技术等。中心副主任王普勇在会上发表了题为《面向工业界的高性能计算云服务》的演

讲, 介绍了中心构建Xfinity平台为工业用户提供HPC应用云服务的情况。

2014年11月4-8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工博会。展位位于创新科技馆(W5展区), 占地18平方米左右。本次展出内容主要介绍中心在工业领域的重要应用成果和已建立的1+N工业创新联盟。部分专业观众对中心工业创新联盟的服务方式表现出较大兴趣。



2014年11月4-8日, 中心代表团参加并参展在广州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, 广东工业大学、中国计算机学会高性能计算专业委员会、中山大学共同承办。大会现场公布了中国TOP100高性能计算机排名。中心高性能计算应用技术部工程师寇大治在会上分别作了题为《HPC Application in Shanghai Supercomputer Center》和《有限元网格积分算法在MIC众核平台上的并行实现》的论文报告, 反响较好。



讲座培训

2014年3月25-27日, 上海超级计算中心和IBM公司联合举办了PLATFORM LSF管理员培训班。近五十位负责HPC集群日常管理和维护的系统管理员参加了此次培训。培训通过课程学习和现场大量的实践环节, 帮助系统管理员掌握LSF集群管理和维护的知识、产品的功能和实施以及熟练使用LSF高性能计算集群。



2014年5月8-9日, 中心举办DYNAFORM/LS-DYNA软件在钣金冲压中的应用高级培训, 近六十位技术人员参加了该培训。本次培训中, ETA-China特别邀请了美国LSTC公司朱新海博士等多名嘉宾就LS-DYNA软件在钣金冲压中的应用与大家进行了深入的技术交流, 并分享了实际应用案例。



2014年7月11日, 中心举办中国商飞上海飞机设计研究院专场用户培训。中心高性能计算应用技术部工程师对中心软硬件资源及上机环境、Xfinity云计算平台进行了介绍; 此外针对商飞的需求, 还特别设置了CFX平台应用展示、结构力学和流体力学相关工程咨询的案例分享。

2014年10月23-24日, 海基科技携手加拿大Lumerical公司在中心报告厅举办微纳光电子学高级技术应用研讨会。本次研讨会由Lumerical公司高级技术专家孙桂林博士主讲, 除了介绍Lumerical公司旗下的4款产品的功能外, 也和参加本次研讨会的专家学者分享了国内外最前沿的微纳光子学案例。



2014年11月13-14日, 中心举办2014年度用户培训, 吸引了来自三十多家用户单位的一百多位学员。本次培训根据科学和工程用户的不同需求, 设置了不同的培训课程。科学计算内容包括上机初步、各类计算作业实战、并行计算基础和并行编程入门; 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。课程分别由中心研究开发部和高性能计算应用技术部的工程师进行讲授。



2014年, 上海超级计算中心作为中国浦东干部学院的现场教学点, 共接待了来自全国各地12批领导干部培训班的学员, 其中包含全国银行干部培训班、全国档案管理干部培训班、工信部信息安全培训班、四川信息产业培训班、青岛“新生代民营企业家创新能力提升”网络专题班、海东“发展城镇化与城市现代化”专题培训班、成都龙泉驿区“转变经济发展方式”网络培训班、湖北企业家代表团培训班、珠海市金融与产业融合培训班等, 来交流的学员都对在日常工作和生活中涉及到大数据方面的问题产生浓厚兴趣。

员工学习

2014年5月19日, 中心组织全体员工观看了由中国工程院院士、光纤传送网与宽带信息网专家邬贺铨教授主讲的《大数据时代与新产业革命》的视频讲座。通过学习, 中心员工了解了在大数据发展时代下社会、经济发生的变革。



2014年6月25日, 中心党总支和上海市信息安全应急管理中心党支部联合开展“迎七一、听党课”活动。中国浦东干部学院党史、党建著名学者黄琨博士应邀作“透视历史档案、增加党性修养”为主题的专题报告, 上海超级计算中心和上海市信息安全应急管理中心的全体党员、员工参加了本次集体听党课的学习活动。

黄琨博士通过珍贵的历史档案资料讲解了毛泽东、邓小平等革命伟人对革命事业的赤胆忠心和献身精神, 全面阐述了他们忠于祖国、忠于人民、不怕牺牲、不怕困难的崇高精神。同时黄琨博士还用数据和实例, 阐述了目前党建工作面临的新形势, 对党建工作提出了建议和意见。

此次讲座让大家加深了对党性原则的认识和理解, 并认识到应该坚持不懈地加强党性教育, 自觉实行党性锻炼和党性修养, 充分发挥党员先锋队的作用。



2014年8月28日, 中心全体员工在报告厅听取了由新加坡国立大学李光耀公共政策学院黄靖教授作的题为《新型大国关

系》的视频讲座。整个讲座内容丰富多彩, 中心员工深受启发。黄靖教授目前也担任新华社资深国际经济分析师以及中国国际与战略基金会的顾问, 曾接受人民日报社《环球人物》杂志“全球50位顶级专家谈中国未来10年”之“未来10年两岸关系”采访。

2014年11月11日, 中心党总支邀请中国浦东干部学院王金定副院长到中心为全体员工工作报告, 以“圆‘中国梦’必须走‘中国路’”解读习近平总书记系列重要讲话精神。报告分四个部分, 分别从“什么是‘中国梦’—实现中华民族伟大复兴”、“为什么要走‘中国路’”、“‘中国道路’在发展中遇到的难题和问题”、“走好‘中国路’必须兼顾‘效率与公平’”等方面为中心员工作了详细解读。王院长的报告语言生动鲜活, 分析深入浅出, 听后令人振奋。此次报告会是中心深入学习习总书记系列重要讲话精神活动计划的重要内容之一。



2014年12月4日, 中心组织全体员工在报告厅听取了由林毅夫教授主讲的《新常态下的中国经济》的视频讲座。讲座中, 林毅夫教授阐述了什么是新常态下的经济, 以及中国经济在新常态下的现状和发展。同时, 林教授还回答了现今大家关心的一些问题, 如如何发展中西部经济、反腐对中国经济的影响等。通过讲座, 员工们学习了国内外时事、经济和技术的最新动态, 对于提升个人素养、拓宽视野和思维、培养创新型意识起到了良好的作用。

林毅夫教授于2005年获选第三世界科学院院士, 2008年被任命为世界银行首席经济学家兼负责发展经济学的高级副行长。他是首位在世界银行或国际货币基金组织获得如此高职位的中国人。

国际合作

中心与德国斯图加特超级计算中心签订《战略合作谅解备忘录》

2014年4月1日,上海超级计算中心(SSC)与德国斯图加特超级计算中心(HLR)在中心签署了《战略合作谅解备忘录》。此次双方签署的《战略合作谅解备忘录》主要包括双方技术人员交换、联合开展研究项目、联合申请国际或国家项目、联合提供专业服务、联合开展培训、与工业界开展合作等内容。



中心参会ISC14

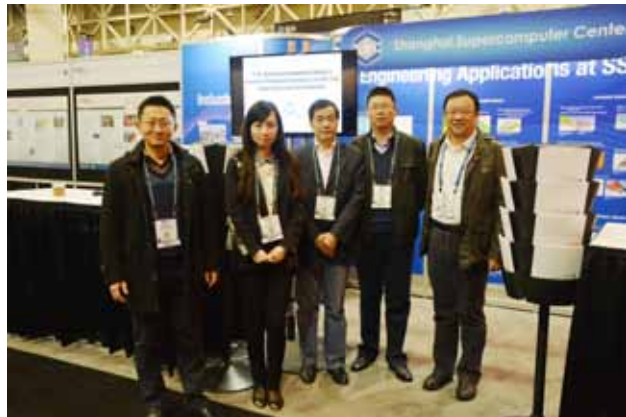


2014年6月22-26日,中心副主任李根国率团参加了在德国莱比锡举办的International Supercomputing Conference(ISC14)会议。本次会议为期5天,吸引了全世界2500多名专家、学者参会。会议提供了300多场学术报告以及170多个展位用于展示高性能计算领域的最新成果。本次会

议发布了第43届全球超级计算机TOP500排名,天河二号以33.86Pflop/s的实测性能继续蝉联本届TOP500第一名。

会议期间,中心代表团还与Cray公司相关人员展开了技术交流;参加了浪潮公司举办的高性能计算研讨会。中心研究开发部工程师徐磊在本次大会上发表了论文《Implementation and Optimization of Three-dimensional UPML-FDTD on GPU Clusters》,并做了相关的学术报告。

中心参展SC14



2014年11月17-22日,中心代表团参加了在美国新奥尔良举办的2014年度Supercomputer Conference(SC14),并在会议的HPC展览环节布置了上海超算中心的展台,展示了上海超算中心在工业领域的重要应用成果、“1+N”工业创新联盟以及高性能计算云平台——Xfinity。

为期四天的会议提供了500多场演讲、方案展示和现场讲解活动，涉及超算的应用、架构、能效、散热、管理、编程等诸多方面。大会同时颁布了新一届全球超级计算机TOP500排行榜，中国国家超算广州中心的天河二号稳坐全球超算性能之王的宝座，这也是天河二号的四连冠。

此次SC14会展区域位于Ernest N. Morial会议中心一楼展厅，展区面积超过11000平米，360多家企业前来参展，内容涵盖了超级计算机各个领域和机构的最新技术和应用成果。中心展台共接待了近三百人次的来访人员，散发中心介绍资料两百多份。

其他接待与交流

2014年7月28日，英国布拉德福德大学彭永红博士、华院数据技术（上海）有限公司董事长、住金所董事长一行到中心交流大数据业务，中心领导及部分技术人员参加交流。此次交流，双方就未来在大数据挖掘和大数据应用领域的研究等达成初步合作意向。

2014年11月4日，威斯康星大学王亚正教授一行拜访中心。中心副主任李根国接待并座谈交流。王教授一行对中心下一步开展大数据业务表现出兴趣，并在数据的整合、应用及如何更高效地为政府服务等方面提供了很多宝贵经验，双方希望未来能有更深层次的合作。

2014年5月6日，美国能源部和美国田纳西大学一行参观访问中心。

2014年10月16日，The college of St.Scholastica代表团一行访问中心。

2014年10月17日，V-net公司代表团一行参观中心。

2014年10月21日，法国瓦兹河谷省省长一行参观访问中心。

2014年11月21日，非洲纳米比亚工程师代表团一行参观中心。



科研领域

2014上海超算中心用户共发表了217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。这些论文均为上海超级计算中心计算平台支持产生, 并在论文致谢中明确提及上海超级计算中心。在上述的200多篇论文中, 约有21篇 (占总论文数的十分之一) 发表在国际顶级刊物《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)、《德国应用化学国际版》(ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION) 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: Interfacial Effects in Iron-Nickel Hydroxide-Platinum Nanoparticles Enhance Catalytic Oxidation

项目来源: 国家自然科学基金、科技部基金等

用户来源: 厦门大学、中国科学院物理研究所、加拿大Dalhousie University等

论文来源: 《科学》第344卷第6183期, 页号: 495-499, 2014年5月2日出版

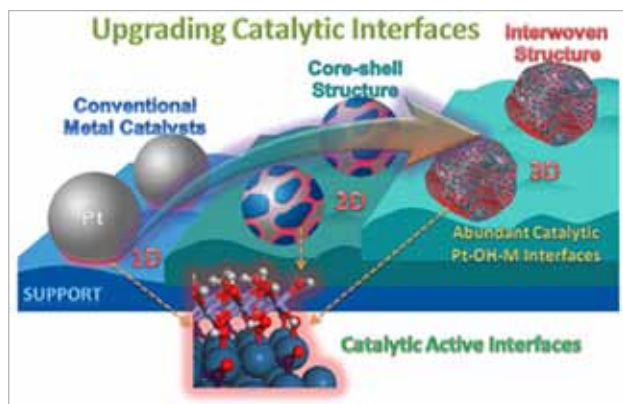
本研究由国内外多个课题组共同努力, 历时三年完成, 在铂纳米复合催化剂的制备、表征及催化反应的过程机理方面的研究中取得了重要进展。研究的实验工作在厦门大学、中国科学院物理研究所、台湾同步辐射研究中心等机构完成, 理论计算工作在上海超算中心计算平台上完成。

贵金属催化剂广泛应用于能源、环保、食品加工等重要化工领域。如何提升贵金属利用率, 同时维持高的催化剂活性、选择性和长的使用寿命一直是贵金属催化剂研制的核心问题。对于负载型贵金属催化剂, 氧化物载体与金属纳米颗粒之间存在着微妙的金属-氧化物界面协同效应, 因此不同氧化物负载的金属纳米颗粒在催化反应中的表现有很大差异。实际应用的催化

体系往往过于复杂, 很难通过现有表征技术剖析相关催化界面的精细结构, 阻碍了研究者对催化剂作用机理和反应构效关系的深入研究。

这项研究巧妙地运用湿化学方法制备了方便研究贵金属-氧化物界面效应的模型纳米催化剂, 结合先进表征手段 (亚埃级球差校正高分辨透射电子显微镜、同步辐射X-射线吸收光谱、高灵敏低能离子散射谱等) 和理论模拟 (密度泛函计算) 深入研究了Pt-FeNi(OH)_x界面协同促进CO催化氧化的机理, 并基于此机理进一步发展了更为实用Pt基催化剂的制备方法, 使反应活性界面从传统催化剂的一维向三维发展, 活性位与总铂原子数的比例可达50%以上。所研制的新型催化剂不仅能在室温下实现一氧化碳的催化氧化, 还可催化富氢条件下一氧化碳的选择性氧化、富氧下少量氢气的清除, 催化寿命可以长达1个月以上。

相关工作发表在Science 344, 495-499 (2014)。



Pt-FeNi(OH)_x界面协同促进CO催化氧化

论文题目: Ultrathin rhodium nanosheets

项目来源: 国家自然科学基金等

用户来源: 清华大学、新加坡国立大学、日本名古屋大学等

论文来源: 《自然 通讯》第5卷, 论文号: 3093, 2014年1月17日出版

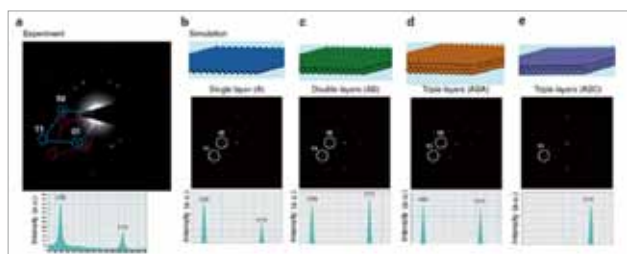
本项研究首次成功制备了单原子层纳米铑片, 其中的理论计算工作使用了上海超算中心魔方计算平台。

自石墨烯发现以来, 含离域大P键的单层材料备受科学界关注, 主要集中在具有层状结构相关材料体系。迄今为止, 具有离域电子特性的单原子层的金属结构未见报道, 主要原因在于金

属键无方向性而易于形成三维的紧密堆积结构。清华大学利用弱配体聚乙烯吡咯酮(PVP)稳定的甲醛还原金属铈,成功制备出第一例单原子层厚度的纳米金属铈片。球差电镜和同步辐射研究均证实了这一新颖的单原子层金属结构。在上海超算中心计算平台上进行的理论研究发现,单原子层铈片中存在着一一种新型的离域大化学键,有助于稳定其单层金属结构。

这项研究进展为进一步推动金属纳米与团簇、丰富发展重金属元素的化学成键理论研究具有重要意义,为探索金属原子单层结构与性能研究提供了重要启示。

相关工作发表在Nature Communication 5, 3093 (2014)。



实验及计算模拟的电子衍射图谱

论文题目: Near room-temperature multiferroic materials with tunable ferromagnetic and electrical properties

项目来源: 国家自然科学基金、教育部创新团队发展计划、上海市教委曙光计划和东方学者计划等

用户来源: 浙江大学、美国University of Arkansas、上海大学等

论文来源: 《自然 通讯》第5卷, 论文号: 4021, 2014年5月28日出版

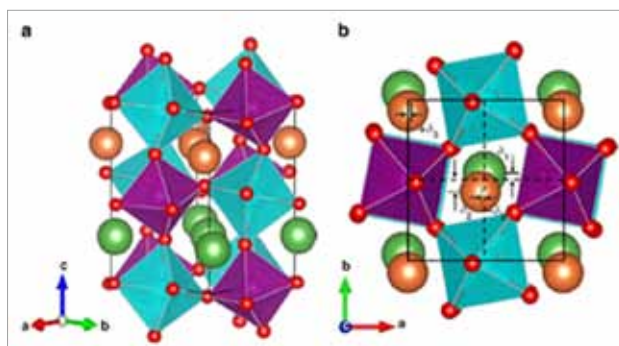
本项研究在多铁性材料研究中取得了重要进展。

多铁性材料(Multiferroic materials)是指同时拥有铁电、铁磁与铁弹三种初级铁性质中的两种或两种以上的材料,其在多态存储与弱磁场检测等方面有着重要的应用前景,是凝聚态物理与材料科学领域最具挑战意义的前沿方向之一。由于铁电与铁磁性的互斥,很难在单相材料中实现室温多铁性。目前,唯一公认的典型单相室温多铁性材料仅有BiFeO₃。需要指出的是,虽然BiFeO₃具有强铁电性,但它是反铁磁体,仅能表现出弱铁磁性。因此,目前室温多铁性的实现更多地依赖于铁磁/铁电复合材料与异质结构。

该工作提出了一种构筑室温多铁性材料的崭新思路,即将本身不具铁电性的两种双钙钛矿铁磁体形成超晶格,利用两者不相等的阳离子反向平行位移诱导非本征铁电性(improper ferroelectricity)。然后基于第一性原理计算与蒙特卡罗模拟,从

理论上预言了一种近室温多铁性新材料。这种多铁性新材料于室温附近具有铁磁电共存、且性能可调的特点,可望为室温多铁性材料的研究带来新的契机。

相关工作发表在Nature Communication 5, 4021 (2014)。



R₂NiMnO₆/La₂NiMnO₆ 超晶格材料

论文题目: High-mobility transport anisotropy and linear dichroism in few-layer black phosphorus

项目来源: 国家自然科学基金、科技部基金、北京市自然科学基金等

用户来源: 中国人民大学、四川师范大学

论文来源: 《自然 通信》第5卷, 论文号: 4475, 2014年7月21日出版

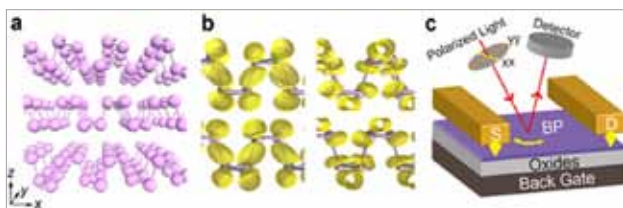
本项研究在多层黑磷材料的研究中取得了重要进展。

此项研究在国际上首次使用理论计算对多层黑磷材料的几何和电子结构进行了系统研究,发现了多层黑磷的奇特物性,独立预测多层黑磷材料的直接带隙半导体特性、层厚相关带隙调控、高载流子迁移率和各向异性的力学和输运性质,并与实验相互印证;此外,研究还预言了该材料特殊的层间作用机制和光学线性二色性。这些研究结果开拓了电子信息材料研究的新领域,为寻找新兴光电信息材料提供了新思路,并为深入理解该材料的物理、化学特性提供了重要证据。

随着电子器件的尺寸不断减小,工业界一直在寻找一种可以替代硅的新材料用于制造电子器件,尤其是逻辑器件。单(多)层黑磷被预测为可能的替代材料。该研究表明,各向异性是多层黑磷的最显著特征之一,体现在光学、电学和力学性质等方面。例如,单层黑磷可以在一个方向上吸收全部可见光,而在另一个方向上允许可见光全部通过。这些奇特性质的预测对多层黑磷材料的进一步应用具有重要意义。

相关工作发表在Nature Communication 5, 4475

(2014)。



多层黑磷材料结构及采用光学谱学方法确定多层黑磷取向并由此制备器件的示意图

论文题目: Irreversible Denaturation of Proteins through Aluminum-Induced Formation of Backbone Ring Structures

项目来源: 国家自然科学基金、科技部基金、中科院基金等

用户来源: 中国科学院上海应用物理研究所、中国石油大学、新加坡材料与工程研究所等

论文来源: 《德国应用化学国际版》第53卷第25期, 页号: 6357-6363, 2014年6月出版

本研究采用量子计算、经典分子动力学模拟与同步辐射光电子谱(XPS)、圆二色谱(CD)、核磁共振谱(NMR)等谱学实验相结合的方法, 研究了铝离子与蛋白的相互作用及对蛋白结构的影响, 提出了金属离子与蛋白的一种新的作用形式。

上世纪70年代以来的研究表明, 神经退行性疾病(例如, 阿尔茨海默综合症、帕金森氏综合症等等)与蛋白积聚有关, 其中金属离子(例如, 铝离子、铜离子)参与蛋白积聚。长期以来, 金属离子与相关蛋白的相互作用分子机理一直不清楚, 部分原因来自于量子模拟、经典模拟及实验技术的各自局限性。

不同于以往的观点(金属离子主要作用于蛋白的侧链), 该项工作提出: 通过取代神经退行性疾病相关的蛋白骨架上与氮原子结合的氢原子, 铝离子可以同时与骨架上的氮原子、氧原子形成共价键, 导致环状结构, 进而严重破坏蛋白的二级结构, 使蛋白产生不可逆的变性和积聚。他们使用PGK蛋白通过同步辐射和NMR实验证明了这一点: 1) CD实验显示, 铝离子可以使PGK蛋白不可逆变性、积聚; 2) 同步辐射XPS实验表明, 积聚物上的铝离子被显著还原, 与理论计算得到的XPS值一致; 3) NMR实验显示, 蛋白骨架上与氮原子结合的氢原子被铝离子取代。

由于分子机制的缺乏, 长期以来金属离子与蛋白积聚的研究进展缓慢。2011年, 英国Keele大学Chris Exley教授在Nature评论中认为, 如同“皇帝的新衣”一样, 铝离子在近期的阿尔茨海默综合症研究中一直被忽视。铝离子在蛋白骨架上诱导

的环状结构, 作为一种新的作用形式, 为理解金属离子与包括蛋白在内的生物分子作用机理提供了新的视角, 对揭示大脑相关疾病的分子机制有重要意义。此研究成果有望在药物设计、生物纳米技术及环境治理等领域得到广泛的应用。

相关工作作为首页插图发表于Angew. Chem. Int. Ed. 53, 6358-6363 (2014)。



铝离子诱导的蛋白骨架环状结构及其对蛋白二级结构的破坏

论文题目: Half-Metallicity in MnPSe₃ Exfoliated Nanosheet with Carrier Doping

项目来源: 973、国家自然科学基金、中国科学院基金等

用户来源: 中国科学技术大学

论文来源: 《美国化学会志》第136卷第31期, 页号: 11065-11069, 2014年8月6日出版

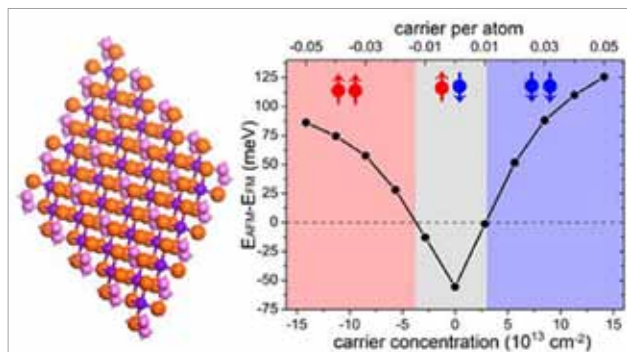
本研究在自旋电子学材料的理论设计方面取得新进展, 使得制备电学可控的自旋电子学材料成为可能。

自旋电子学是基于电子的自旋进行信息的传递、处理与存储的, 它具有目前传统微电子学无法比拟的优势。在自旋电子学应用中, 如何实现用电场调控载流子自旋取向是一个关键性的科学问题。为解决此问题, 研究组先前在概念上提出过一种新型的自旋电子学材料, 即双极磁性半导体。此类材料具有特殊的能带构造, 通过它的电流不仅可以达到完全的自旋极化, 而且载流子的自旋取向可以简单地通过加门电压的方法直接进行调制。然而, 设计出实验上容易制备的双极磁性半导体材料一直是一个难题。

本研究基于实验上已经制备出的三维层状晶体MnPSe₃, 提出可通过液相剥离的方法制备出二维的MnPSe₃纳米片, 而该纳米片具有双极磁性半导体的功能。研究的理论预测, 在无掺杂的情况下, MnPSe₃纳米片是弱反铁磁半导体, 而在一定的电子或空穴掺杂下, 它转变为铁磁半金属, 在费米能级附近具有完全的自旋极化。更为重要的是, 电子和空穴掺杂下的载流子自旋极化方向是完全相反的。因此, 借助这一体系有望实现电场对载流子自旋取向的直接控制。此外, 理论预测该材料的实验工作温度显著高于液氮温度。这一工作为在实验上实现电场

调控自旋取向提供了一个切实可行的方案,有望对自旋电子器件的研究与应用产生重要的影响。

相关工作发表在J. Am. Chem. Soc. 136, 11065–11069 (2014)。



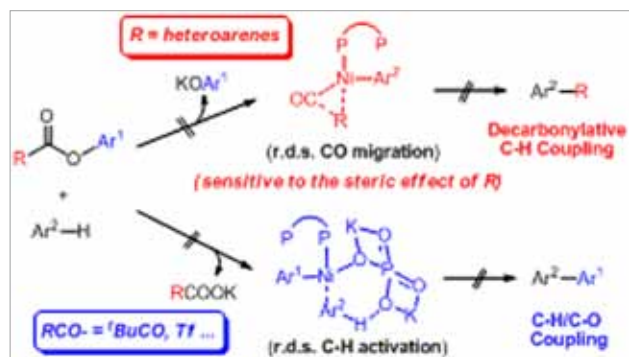
掺杂MnPS₃纳米片的半金属性

论文题目: Mechanistic Study of Chemoselectivity in Ni-Catalyzed Coupling Reactions between Azoles and Aryl Carboxylates

项目来源: 国家自然科学基金等

用户来源: 中国科学技术大学、北京科技大学

论文来源: 《美国化学会志》第136卷第23期, 页号: 8252–8260, 2014年6月11日出版



镍催化唑与芳基羧酸酯偶联反应

本研究探讨了镍催化唑与芳基羧酸酯偶联反应的化学选择性。

过渡金属催化芳酰基衍生物与(杂)芳烃的偶联反应是合成联芳化合物的有效手段。最近的实验研究通过由碳-氧亲电试剂调控化学选择性的镍催化唑与酯偶联反应发现,使用芳酯底物,则选择性生成脱羰/碳-氢偶联产物,而使用酚类衍生底物则高选择性生成碳-氢/碳-氧偶联产物。

本研究采用密度泛函理论计算方法对上述化学选择性偶联

反应的机理进行了研究。通过详细的理论推导,发现了一个新型的脱羰/碳-氢偶联反应机理,具体包括碳(酰基)-氧键氧化加成、碱辅助碳-氢键活化、一氧化碳迁移以及还原消除步骤。此外,碳-氢/碳-氧偶联的机理由碳(苯基)-氧键氧化加,碱促进碳-氢键活化和还原消除步骤组成。不同芳基酯对脱羰/碳-氢偶联反应机理的影响是决定化学选择性的原因。

相关工作发表在J. Am. Chem. Soc. 136, 8252–8260 (2014)。

论文题目: Antiinfective therapy with a small molecule inhibitor of Staphylococcus aureus sortase

项目来源: 新药创制重大专项、国家自然科学基金、863等

用户来源: 中国科学院上海药物所、美国The University of Chicago、复旦大学等

论文来源: 《美国科学院院刊》第111卷第37期, 页号: 13517–13522, 2014年9月16日出版

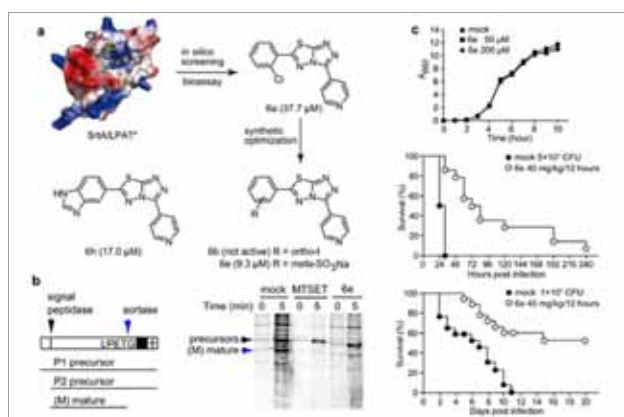
本项工作运用超级计算机,开展虚拟筛选研究,实现“育”菌不杀的抗菌菌致病力调节。

细菌耐药已成为当前人类健康面临的严重威胁之一,而传统抗菌药物的研发速度已无法完全满足临床上的需求。探索特异性阻断病原菌致病力逐渐成为抗菌感染研究的前沿方向。与传统抗生素作用机制不同,“抗致病力”策略通过减低病原菌感染宿主的致病力来控制细菌感染,预期缓解产生耐药性的速度,避免因杀菌而可能导致的副作用。

转肽酶SrtA的生物学功能对革兰氏阳性菌感染至关重要,已被证实是有前景的候选抗菌靶标。然而,利用小分子探针的化学生物学途径验证SrtA靶标成药性的研究进展缓慢。本研究基于SrtA的晶体结构,在上海超级计算中心和中科院网络中心的支持下,利用超级计算机,运用多种药物设计技术虚拟筛选30万个化合物的小分子库,获得了抑制SrtA酶活的苗头化合物。基于苗头化合物的骨架结构,开展结构优化改善了小分子的活性以及理化性质,该小分子在体外的靶向性以及体内对SrtA转肽SpA的抑制活性都得到了证实。感染致死小鼠实验结果表明,该小分子可以较好地延长感染小鼠的生存期,具有一定的治愈效果。生物实验结果表明,该类小分子体外不杀菌、不抑制细菌生长,实现了调控细菌致病力的新型抗菌药物发现研究。该小分子具有抑制革兰氏阳性菌SrtA的广谱活性,有进一步开发成为治疗广谱阳性菌感染的新类型抗菌药物的价值和潜力。

在该研究中, 药物设计技术快速获得骨架化合物的优势得到了充分发挥, 该研究为进一步靶向其它致病力调控靶标, 开发高效特异的小分子活性候选化合物验证了概念, 提供了技术平台。

相关工作发表在PNAS 111, 13517–13522 (2014)。



SrtA酶活性抑制

论文题目: Interplay between Water and TiO₂ Anatase (101) Surface with Subsurface Oxygen Vacancy

项目来源: 国家自然科学基金、中科院百人计划、上海市科委浦江人才计划等

用户来源: 中国科学院上海应用物理研究所、中国科学院大学

论文来源: 《物理评论快报》第112卷第20期, 论文号: 206101, 2014年5月20日出版

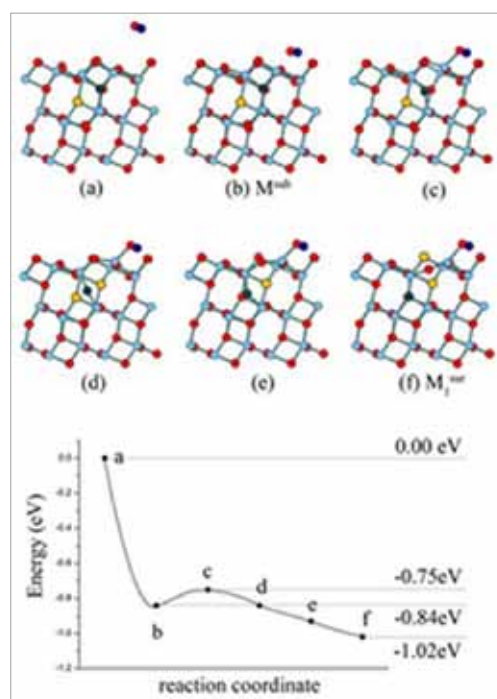
本研究利用密度泛函理论计算, 发现了水与二氧化钛锐钛矿 (101) 亚表面氧空位相互的新机制。

二氧化钛作为一种重要的半导体材料, 在有机物降解、水解制氢以及太阳能电池等方面有着广泛应用。由于大部分反应发生在水环境中, 因此二氧化钛与水分子之间的相互作用一直是研究热点。二氧化钛表面的高反应活性一直以来被认为由其表面氧空位决定。近年来, 科学家们在锐钛矿研究中发现亚表面以及体相氧空位比表面的氧空位更加稳定。当温度高于200K时, 表面的氧空位就会迁移到体相中去。这些发现为理解锐钛矿表面的高反应活性带来了困惑。

本研究通过计算模拟发现, 水在锐钛矿表面的吸附可以造成表面氧空位与亚表面氧空位的相对稳定性发生反转, 从而引发亚表面氧空位越过一个较低的能垒迁移到表面, 形成表面氧空位。该表面氧空位进而可以诱导水分子分解, 在锐钛矿表面上形成两个羟基。在另一条竞争路径中, 水分子在亚表面氧空位

上分解, 也可诱导亚表面氧空位向表面的迁移。该机制说明锐钛矿表面的高反应活性不仅仅依赖于表面氧空位的多少, 也同时决定于亚表面乃至体相氧空位的数量。这种新奇的基底与吸附质之间的相互作用一方面为理解锐钛矿 (101) 表面的高催化活性提供了新解释, 另一方面也为理解其他金属氧化物表面的高反应活性提供了全新的视角。

相关工作发表在Phys. Rev. Lett. 112, 206101 (2014)。



水在锐钛矿表面的吸附引发亚表面氧空位迁移到表面

论文题目: Transport discovery of emerging robust helical surface states in $Z_2=0$ systems

项目来源: 973、国家自然科学基金、中国博士后科学基金

用户来源: 苏州大学、北京大学

论文来源: 《物理评论快报》第112卷第17期, 论文号: 176601, 2014年5月2日出版

本研究在拓扑绝缘体表面态研究方面取得了重要进展。

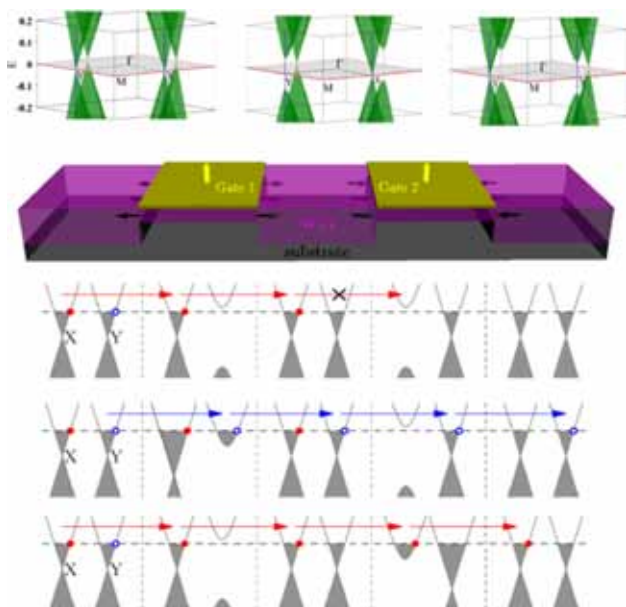
时间反演对称性保护的拓扑绝缘体是近年来研究的热点, 其拓扑性质可以用 Z_2 拓扑数来表征。科学家普遍认为在 $Z_2=1$ 的拓扑绝缘体中存在稳定的、不受材料具体细节和外部微扰所影响的螺旋表面态 (或边缘态)。这类稳定的螺旋表面态能导致一系列新奇的物理特性, 使得拓扑绝缘体领域的相关研究在基础物理原理探究和低能耗信息器件应用方面都具有重要地位。然而, 自然界中的多数保持时间反演对称的材料体系往往具有

工业领域

$Z_2=0$ 拓扑序, 而具有 $Z_2=1$ 拓扑序的体系是非常稀缺的。一个自然的问题是: 为了获得拓扑的螺旋表面态(或边缘态), $Z_2=1$ 的拓扑绝缘体体系是否是必须的?

本研究系统性地研究了这个问题。首先, 从理论上找到了一类具有 $Z_2=0$ 拓扑序的二维和三维模型体系, 在有限尺寸效应下, 该体系拥有拓扑的螺旋表面态(或边缘态)。通过数值模拟, 发现该 $Z_2=0$ 体系表现出与 $Z_2=1$ 拓扑绝缘体体系几乎完全相同的输运特征。此外, 研究还发现这类 $Z_2=0$ 体系拥有某些超越 $Z_2=1$ 拓扑绝缘体的优异性能。例如: 存在拓扑的螺旋表面态的能量窗口可以在大范围内连续调控; 基于这一拓扑的螺旋表面态可以实现全电调控的量子‘谷’阀门和‘谷’过滤器。最后, 研究还讨论了在实际材料体系中观测到理论所预言的拓扑表面态的可能性。最新的相关实验结果已经显示出这种全新的拓扑表面态存在的迹象。

相关工作发表在Phys. Rev. Lett. 112, 176601 (2014)。



基于尺寸效应诱导的拓扑表面态设计量子‘谷’阀门和‘谷’过滤器

2014年上海超级计算中心工程计算用户主要来自航空、船舶、汽车、半导体等诸多工业和工程领域, 用户在设计 and 开发过程中主要运用到了上海超算的工程计算平台及其上部署的计算结构力学和计算流体力学的商业计算软件。同时基于中心的计算平台和中心技术人员的经验能力, 上海超算也独立或与用户合作完成了一系列工程咨询项目。

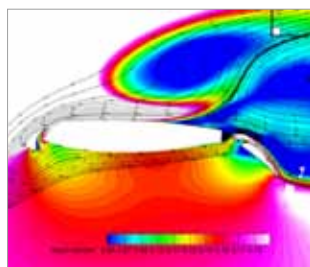
航空领域

研究课题: C919大型飞机数值仿真

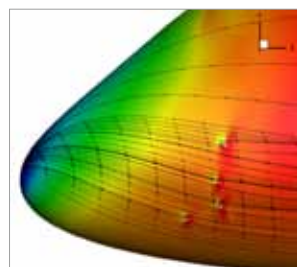
课题来源: 国家重大项目

用户单位: 中国商用飞机有限公司上海飞机设计研究院

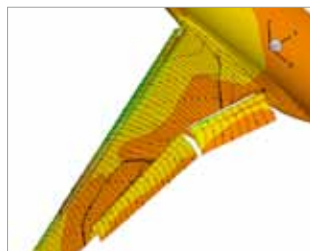
随着大型客机数据的陆续发放, 相关气动力设计构型确定及确认、评估等工作接踵而至。计算流体力学(Computational Fluid Dynamics, CFD)数值模拟和仿真计算在大型客机飞机气动设计和确认评估中至关重要, 需要充足的计算资源进行大量计算。中国商飞上海飞机设计研究院与上海超级计算中心达成协议, 利用其计算资源进行CFD计算, 开展气动设计与分析工作。借助于上海超级计算中心的高性能平台, 该研究院进行了C919飞机全机构型气动力特性计算, 部件流场分析, 发动机反推等复杂数值仿真模拟工作。



多段翼流场分析



大气传感器位置布置计算分析



失速特性计算分析



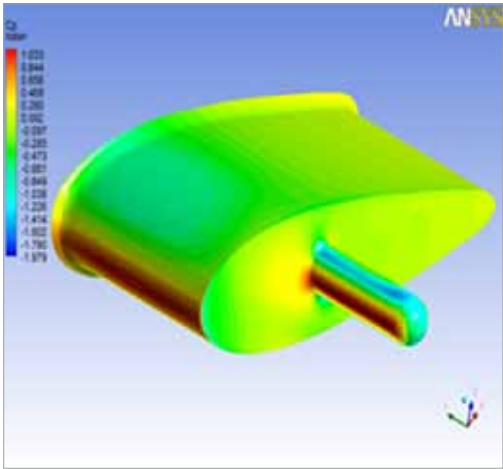
发动机反推数值仿真

研究课题: ARJ21局部气动优化设计

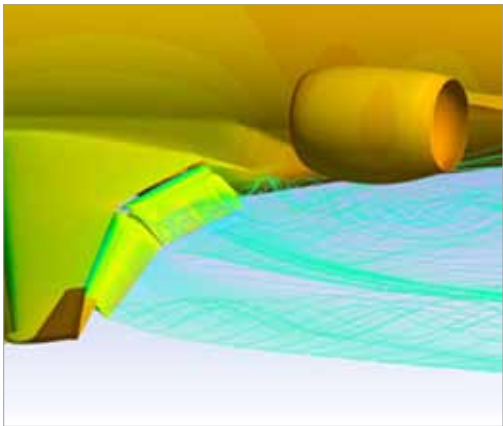
课题来源: 国家重大项目

用户单位: 中国商用飞机有限公司上海飞机设计研究院

ARJ21是Advanced Regional Jet for 21st Century的缩写, 是中国按照国际标准研制的具有自主知识产权中短航程新型涡扇支线飞机。在ARJ21飞机的适航取证过程中, 气动部门提供了大量的CFD计算、分析等技术支持。这些工作往往对飞机在不同工况下的局部流动情况十分关注, 要求气动力计算精准、流场细节捕捉准确。多工况、高精度的CFD计算, 对计算资源提出了很高要求。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, ARJ21飞机适航取证的相关CFD工作得以顺利开展。



结冰探测器压力系数分布



襟翼紧固件脱落轨迹分析

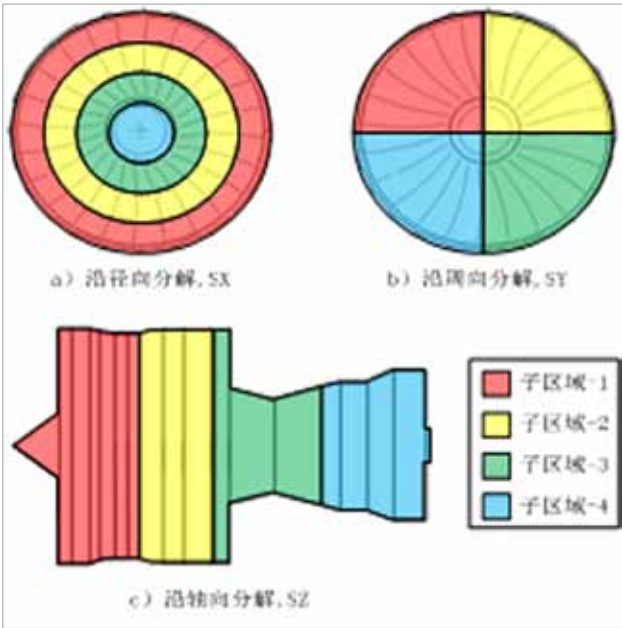
研究课题: 航空发动机受力机理研究

课题来源: 上海市科委基础研究重大项目、国家自然科学基金

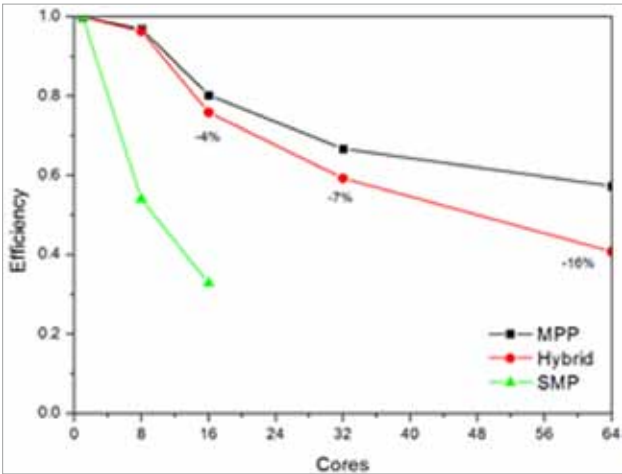
用户单位: 中航商用航空发动机有限责任公司

整机叶片脱落仿真分析

航空发动机整机叶片脱落仿真分析往往具有模型规模大、高度非线性的特点。如何通过并行计算有效缩短计算时间, 同时保证计算结果的一致性工程应用中必须解决的问题。本项目通过研究不同并行计算模式和网格区域分解策略对计算效率和计算结果的影响, 提出了适合整机叶片脱落仿真分析的并行计算优化配置策略。算例表明, 采用优化的并行计算配置可以显著缩短计算时间, 同时保证计算结果的一致性。



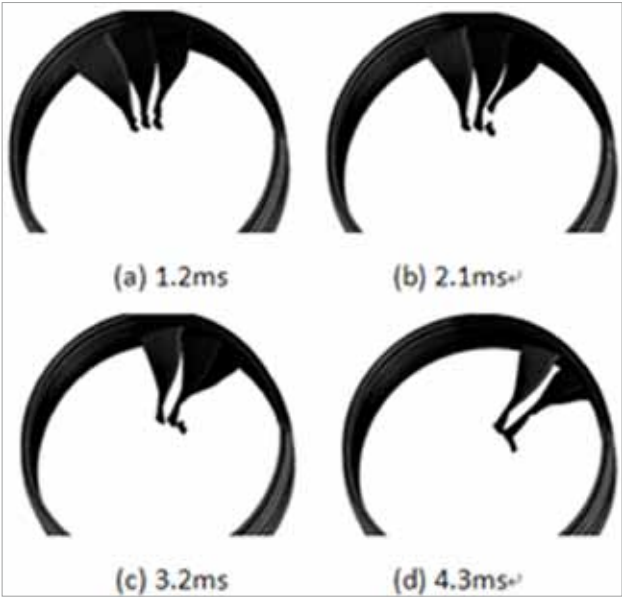
分区方案示意图



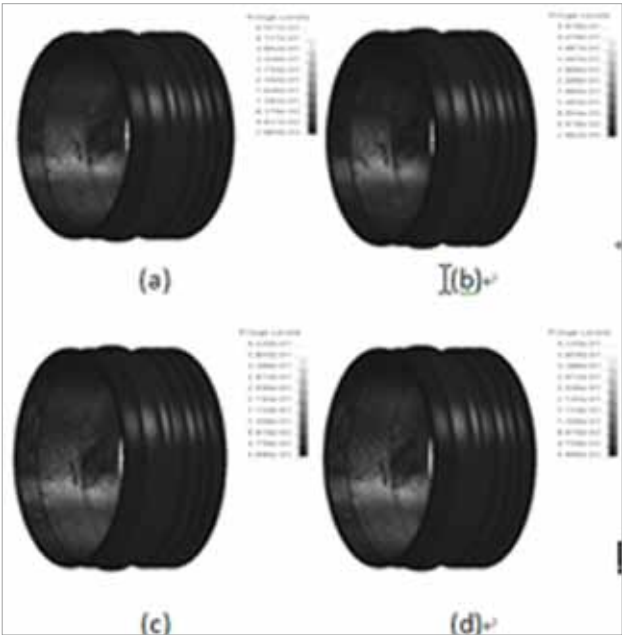
并行效率随并行核心数的变化曲线

风扇叶片脱落机匣包容性仿真分析

工程化的航空发动机风扇叶片脱落机匣包容性仿真分析及到大规模高性能并行计算。过去的计算仿真分析发现同一个研究对象仿真结果存在较大差异，尤其是同一算例多次计算结果不一致。针对此问题，本项目采用典型叶片脱落模型进行仿真研究，发现了计算随机误差和误差累积是影响计算结果的重要因素。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，提高并行计算精度。



叶片飞脱与机匣相互作用示例



包容机匣应力云图

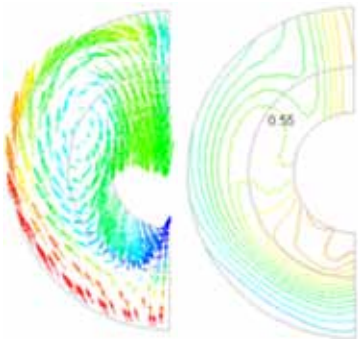
船舶领域

研究课题: 肥大船舶形状因子确定的CFD分析

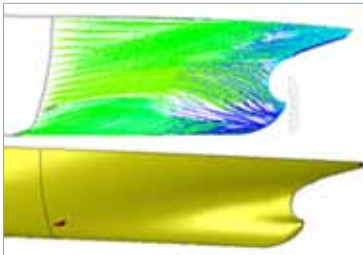
课题来源: 非公开

用户单位: 中国船舶工业集团第708研究所

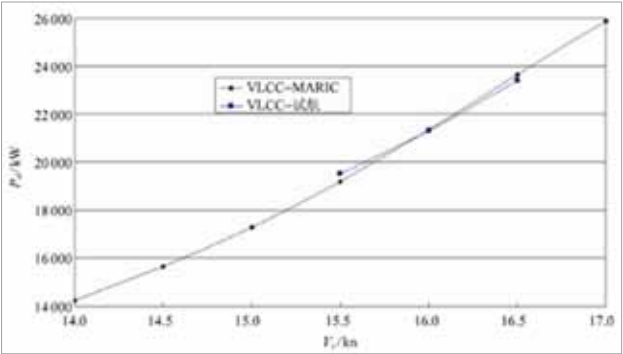
本项目以CFD为工具，探索了求取肥大船舶形状因子的新途径，并通过比较分析确定了叠模数值模拟方法中影响形状因子的主要因素。根据该结果，项目研究人员采用相同的网格生成方式和计算参数，对VLCC等十种船型进行了形状因子计算，并与国外的试验取值进行了比较。此外，所得到的形状因子还用于7万吨油轮和VLCC的航速预报，其结果与实船测试非常吻合。与实验结果的一致性表明，该方法可以用于确定肥大船舶的形状因子数值。



流场分布



船体表面流线分布



VLCC航速预报与实船测试结果比较

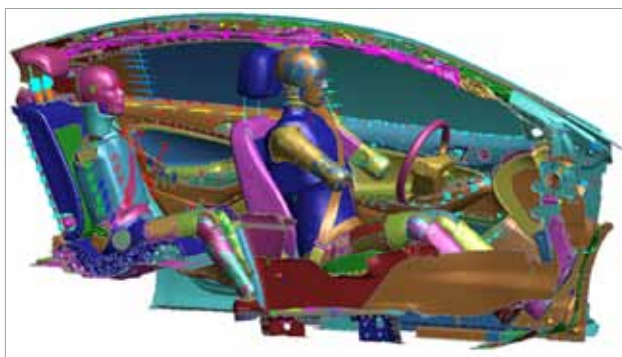
汽车领域

研究课题: 某汽车门内饰板开发

课题来源: 非公开

用户单位: 延锋汽车饰件系统有限公司

在整车侧面碰撞过程中,前门内饰板会出现零件脱落、焊接失效等的情况。针对该现象,延锋根据客户提供的子系统侧面碰撞仿真模型,对门内饰板的结构、内部链接与焊接进行了优化,最终解决了上述问题。由于该问题的仿真模型规模巨大,延锋本地的软硬件资源无法进行计算。在这种情况下,延锋充分利用上海超算良好的软件与硬件资源,通过不断的仿真和优化,在较短的时间内解决了上述问题,最终满足了客户需求。



内饰板研发模型

研究课题: 某车企跨界版两厢车研发

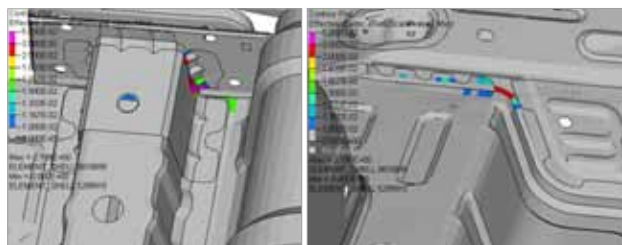
课题来源: 非公开

用户单位: 上海世科嘉车辆技术研发有限公司

某车企已经研发完成了两厢版车型,并希望在此基础上开发跨界版车型。而跨界版车型底盘高度的升高对于安全碰撞尤其是后撞影响较大,因此该车企希望通过计算机辅助工程(Computer Aided Engineering, CAE)分析来优化该车型的设计。项目时间紧,任务重。通过利用上海超级计算中心的计算资源,结合设计部门的设计优化,世科嘉顺利完成了项目交付。上海超级计算中心的计算资源,大大缩短了每个CAE分析的计算时间,节约了研发成本,为项目按时交付奠定了基础。



新车型RCAR后碰分析



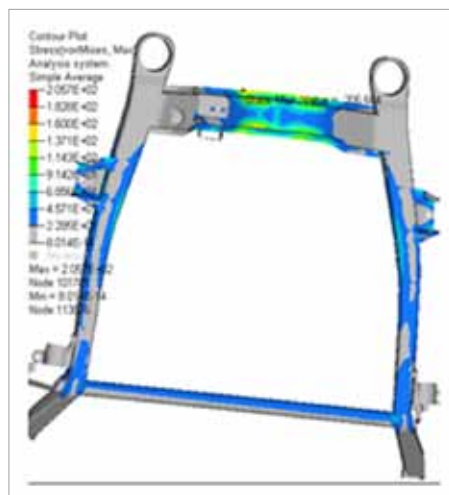
碰撞后局部结构塑性应变云图

研究课题: 汽车底盘零部件强度分析

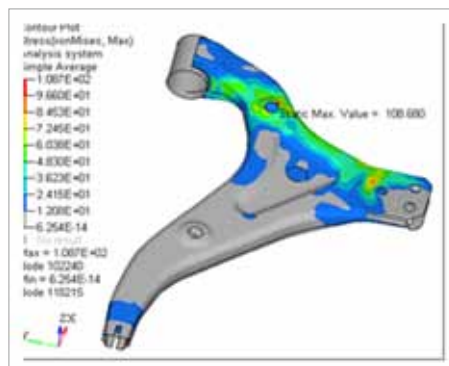
项目来源: 企业内部研发项目

用户单位: 上海汽车集团股份有限公司技术中心

针对某汽车底盘零部件结构耐久CAE校核问题,项目研究人员应用有限元仿真技术建立了整车的虚拟仿真模型,通过耐久性虚拟试验实现了整车开发过程中底盘零部件疲劳寿命的有效预估。上海超级计算中心的计算资源大大缩短了底盘零部件CAE计算的时间,节省了项目的整体研发时间,为按计划完成项目发挥了重要作用。



前副车架结构耐久分析



前下摆臂结构耐久分析

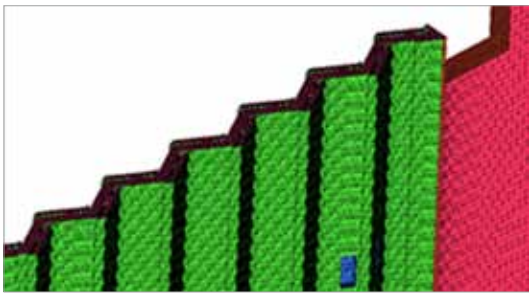
核电领域

研究课题: 汽水分离装置波形板数值模拟

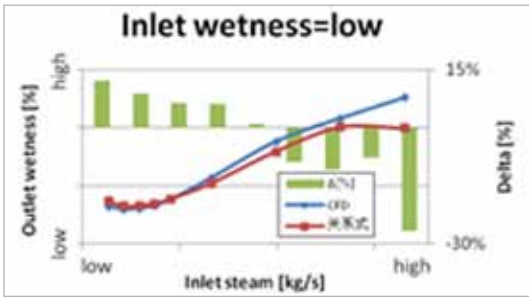
项目来源: 上海核工程研究设计院

用户单位: 上海超级计算中心

在核电设备中, 湿蒸汽必须经汽水分离器干燥, 将水分离到足够的干度指标, 才能为汽轮机提供合格品质蒸汽。本研究采用三维数值模拟方法对某型汽水分离器波形板内湿蒸汽的流动和分离过程进行了分析, 得到了波形板干燥器的分离效果和流动损失。项目组利用上海超级计算中心的工程计算平台, 通过分析多个变量间的耦合关系, 拟合得到了汽水分离特性的经验公式。该公式为优化结构设计、提高分离效率提供了分析依据。



波形板数值模型



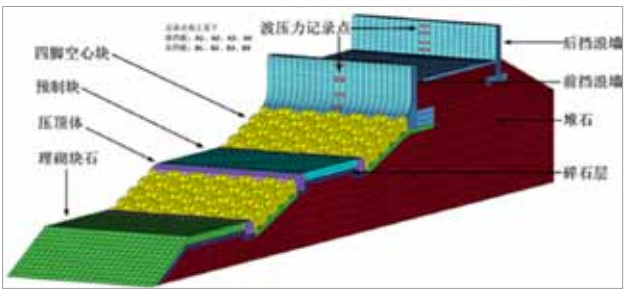
经验关系式

研究课题: 波浪冲击作用下核电站防浪堤动力响应的数值模拟

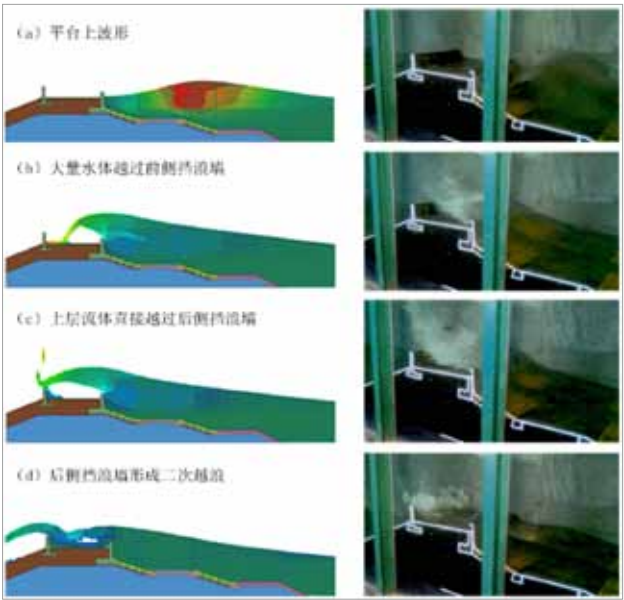
项目来源: 国家自然科学基金

用户单位: 上海交通大学机械与动力工程学院

本课题基于多物质ALE(Arbitrary Lagrange-Euler)方法, 利用带阻尼罚函数实现了波浪与防浪堤结构之间的耦合作用, 模拟了波浪冲击作用下防浪堤结构及流体的三维动态响应过程。所得的计算结果与物理模型试验结果有较好的一致性。同时, 课题还在此基础上讨论了挡浪墙表面波压力分布及挡浪墙承受的最大水平推力, 并讨论了结构动态响应对波浪冲击系数的影响。仿真结果可作为防浪堤强度设计的重要依据和控制越浪量的设计参考。



防浪堤结构有限元模型



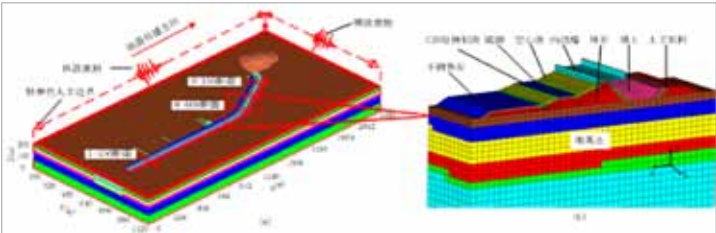
波浪演化的仿真结果(左)和实验图像(右)对比

研究课题: 行波激励下核电站防波堤地震响应分析

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

考虑到空间相关性对核电站防波堤地震动力响应的影响, 本课题建立了基于弹性本构的防波堤-地基系统三维有限元模型, 并在分析中考虑了结构间的动态接触作用。项目采用基于接触均衡的显式并行计算方法, 并利用超级计算机解决了该大规模非线性有限元问题的求解难题。计算给出了不同视波速下行波效应对防波堤挡浪墙沉降、防波堤残余变形以及挡浪墙内力的影响程度及规律。分析方法及结果为工程中的复杂设备及系统的三维整体抗震设计提供了参考。



计算模型及典型断面网格

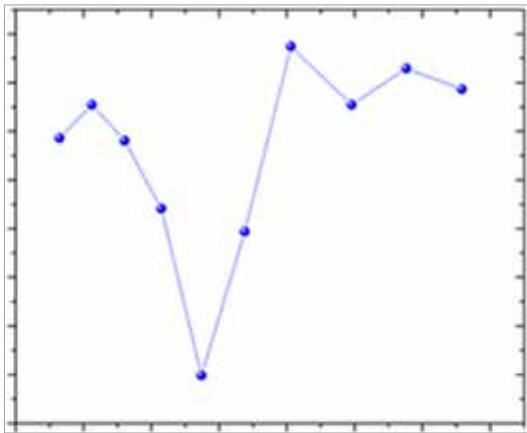
半导体领域

研究课题: MOCVD反应喷淋装置的数值模拟

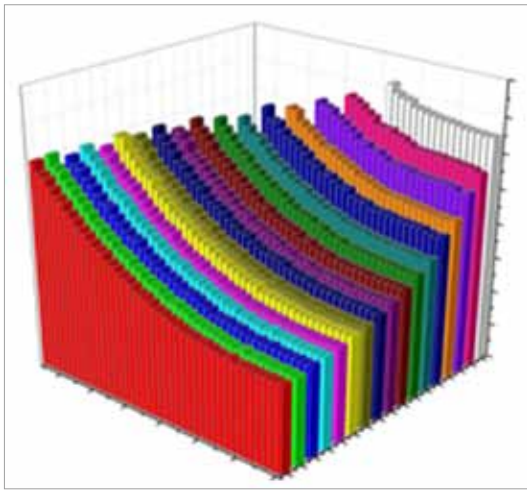
项目来源: 理想能源设备(上海)有限公司

用户单位: 上海超级计算中心

垂直喷淋式MOCVD反应器的特点是利用大量密布在showerhead上微小喷口, 将反应气体从很近的距离内喷向基片, 使到达基片上方各点的反应气体浓度基本相同。其中的喷淋装置必须满足能够均匀分配反应气体的分布, 以达到均匀生长晶体的目的。作为MOCVD反应器的关键部件, 喷淋装置牵涉到多个系统, 结构复杂, 难于加工, 实验成本很高。CFD的方法可以经济高效的解决设备的优化问题。因此, 理想能源设备(上海)有限公司与上海超级计算中心合作, 开展了MOCVD反应喷淋装置的数值模拟工作, 对反应器喷淋装置的气体分布情况进行了模拟分析, 找出了影响气体分布均匀性的主要因素, 并据此进行了优化设计, 从而节约了巨额实验成本, 大大缩短了研发周期。



径向流速分布



整体流速分布

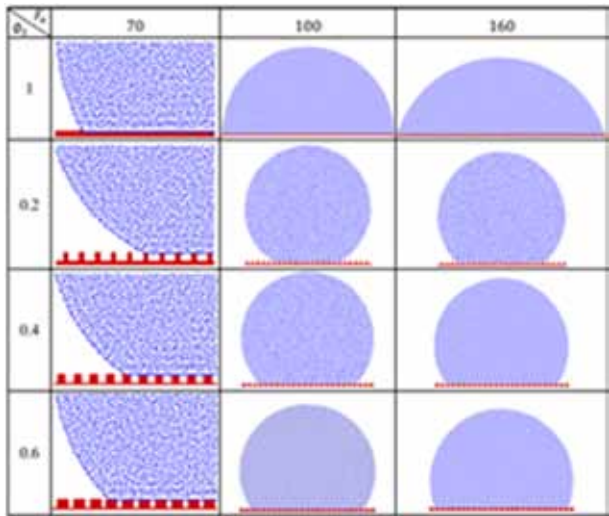
机理研究

研究课题: 液滴撞击在粗糙表面的多体耗散粒子动力学研究

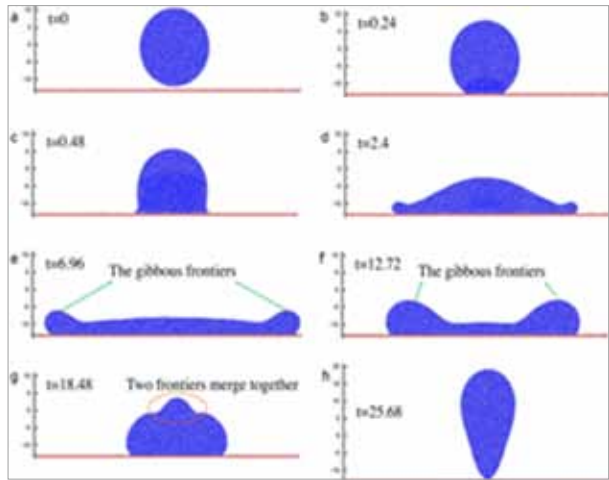
项目来源: 国家自然科学基金

用户单位: 同济大学

本研究使用多体耗散粒子动力学(Many-body dissipative particle dynamics, MDPD)对液滴撞击在具有粗糙结构的固体表面进行了数值模拟研究。仿真结果表明, 对于较小 θ_s 和 Fa , 静态接触角与凯西-巴克斯特公式相一致; 但 θ_s 和 Fa 较大时会产生较大的偏差。这是因为凯西-巴克斯特公式中没有考虑接触角的滞后效应。同时, 液滴反弹或吸附的动力学性质, 以及接触时间和最大扩展直径, 在很大程度上取决于材料的润湿性、支柱分数和液滴的碰撞速度的综合影响。研究成果发表在国际知名学术期刊《Applied Surface Science》上, 并在2014年“中国工程热物理年会”上做了相关研究报告。



各表面的静态接触角计算结果



典型的液滴反弹过程

研究课题: 三氧化二铝液滴对心碰撞数值研究

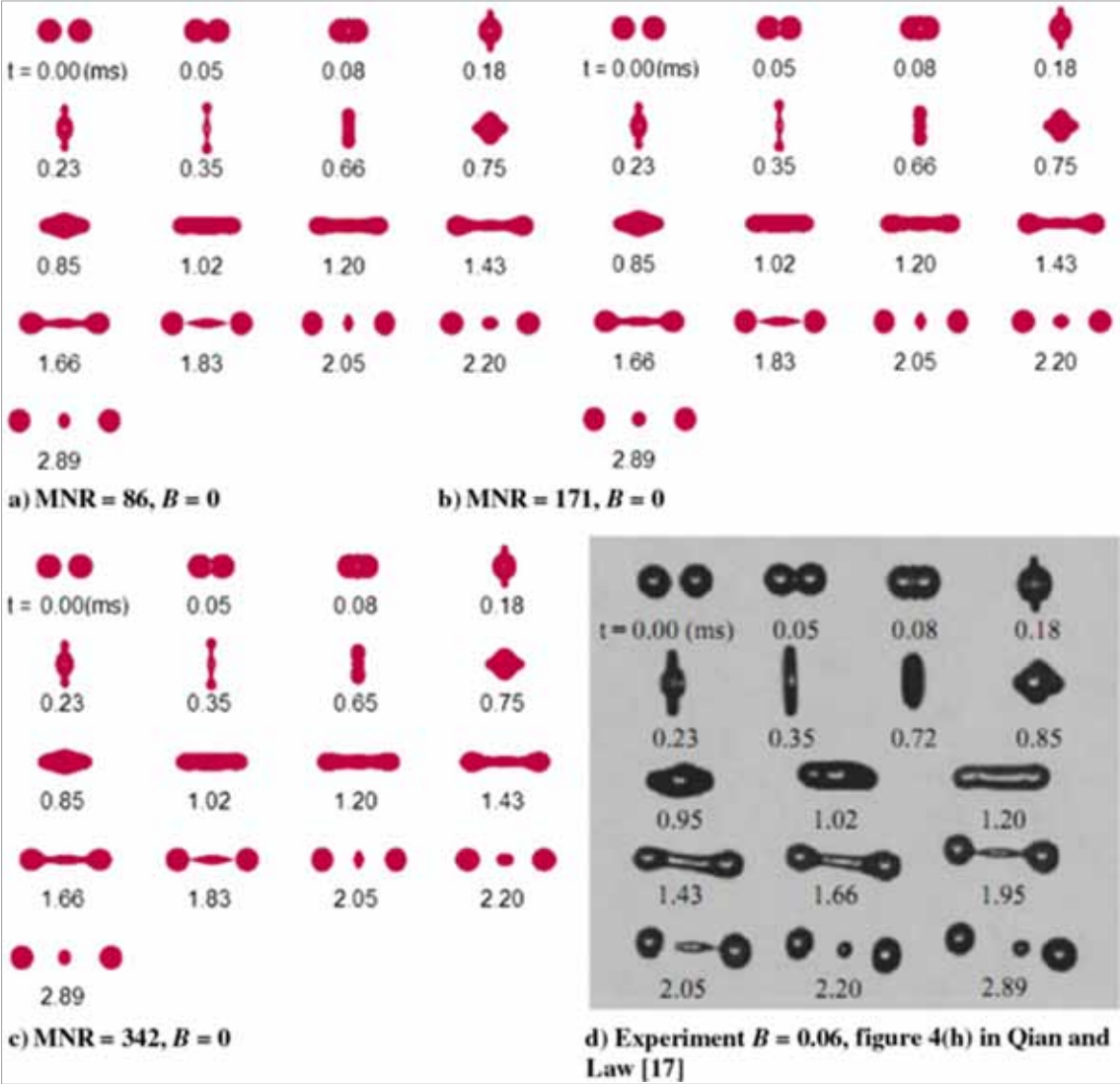
项目来源: 国家自然科学基金

用户单位: 西北工业大学

含铝复合推进剂因其具有高能量及抑制燃烧不稳定等特点而被现代固体火箭发动机所广泛采用。含铝推进剂在发动机内燃烧过程中，最终会大量生成处于熔融液滴状三氧化二铝。不同尺寸的液滴在发动机内流动过程中会发生碰撞，从而导致液滴粒径分布发生变化。液滴碰撞及粒径分布变化会严重影响发动机内绝热层烧蚀、燃烧稳定性和潜入喷管背壁区的熔渣沉积等，对发动机的安全、稳定和高效工作带来巨大隐患。本课题开展的直接针对三氧化二铝液滴碰撞物理规律及模型的研究在国内外

尚属首次。

由于发动机内高温高压的恶劣工作环境，实验研究三氧化二铝液滴的碰撞物理规律极为困难，因而需要对发动机内流场进行包含液滴碰撞等物理过程的数值模拟，以准确预测发动机工作过程中的液滴尺寸分布。本项研究以两个相同尺寸三氧化二铝液滴对心碰撞为模型，以通过实验验证的数值计算方法，针对三氧化二铝液滴开展了Weber数1~800范围内的对心碰撞数值研究，获得了反弹、大变形后聚合、自反分离等不同碰撞结果类型以及各临界Weber数，修正并获得了三氧化二铝液滴的碰撞模型。研究成果发表于国际知名学术期刊《AIAA-Journal of Propulsion and Power》。



对心碰撞的数值模拟与实验结果

高性能计算研发

上海超级计算中心的高性能计算研发工作宗旨是提升中心的技术能力和用户服务能力。高性能计算研发工作包括高性能计算服务平台Xfinity、HPC实验室、第三方软件研发及服务和国家项目等方面内容。

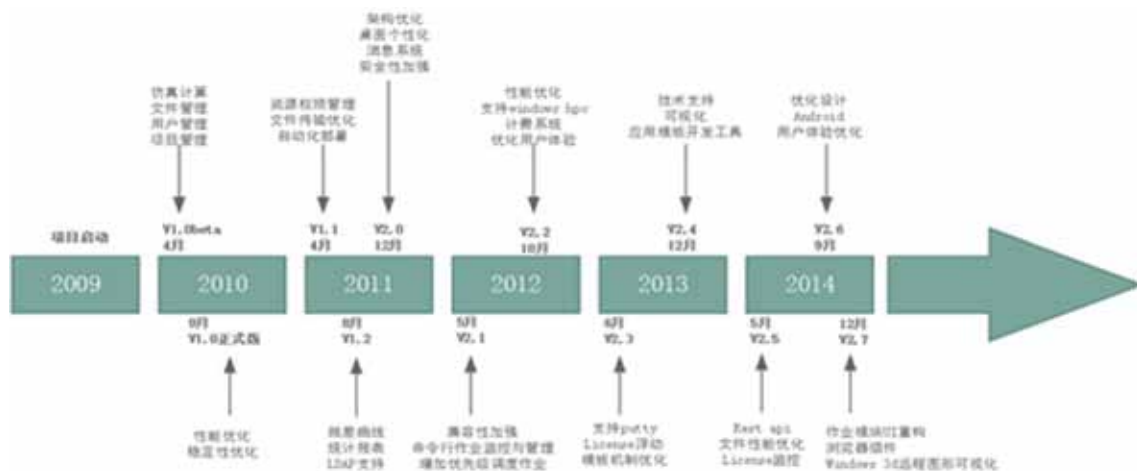
2014年, 高性能计算服务平台Xfinity致力于提升用户使用体验, 共推出3个软件版本和Android移动终端版本, 全年累计提供机时9946778核小时; HPC实验室提供35个计算节点共计18TFLOPS的计算能力, 形成中心HPC系统测试集并应用于测评工作, 开发高性能专业测评在线系统1套; 第三方软件研发及服务和国家项目按计划推进, 研制船用洗舱机阴影图计算软件1套和等离子体数值模拟软件1套, 移植和优化电磁场计算软件和

结构力学软件2套, 申请软件著作权2项, 发表论文4篇。此外, 提供用户培训5次, 发表国际会议报告1次。

高性能计算服务平台Xfinity

Xfinity平台致力于为用户提供基于web的一站式高性能计算服务, 降低用户使用高性能计算的门槛, 提高用户服务质量。同时与多家企业进行合作, 为专业领域和企业提供定制化平台, 为探索创新超级计算中心的服务模式和运营模式奠定基础。

自2009年启动开发以来, Xfinity经历约十二个主版本的更新演进, 最新版本推进到Xfinity2.7版本。下图是自2009年以来主要版本的研发路线图。



2014年, Xfinity共推出Xfinity V2.5、Xfinity V2.6和XfinityV2.7三个主功能版本, 以及Xfinity android版本和Xfinity HPC Cloud版本demo。本年度Xfinity集中力量解决了影响用户使用体验的关键问题, 如开发IE浏览器的ActiveX插件解决插件兼容性问题、通过重构解决Xfinity窗口过多的问题、去掉extjs渲染效果解决界面速度慢的问题。同时, 新增License管理和

监控、citrix图形节点接入功能, 完善作业管理细节, 优化提交作业、文件连接池、后端作业状态监控的性能。

Xfinity平台2014年新增用户74位, 共有366位用户, 共提交5万多个作业, 使用CPU机时近1000万核小时。下图是历年使用Xfinity的作业数和机时数, 从图表上可以看出相比2013年, 2014年Xfinity的使用量翻了一番。



使用Xfinity提交的作业数

使用Xfinity提交作业的机时数

HPC实验室

HPC实验室旨在建设一个设备先进、系统多样、有效模拟主机运行环境、对高性能计算新技术和产品进行跟踪、分析和评估。自2006年成立至今，目前已拥有35个计算节点，18TFLOPS的计算能力。2014年，实验室的工作重点是围绕主机系统建设开展HPC系统测评以及开发一套数据共享、方便友好的高性能计算评测服务系统。

系统测评

本年度通过调研美国、欧洲主要超算中心测评所用测试集及测评中心或实验室建设情况，结合中心实际情况，制定了系统测试集选择原则和方法，形成了自己的测试集。与此同时，将系统评价方法研究成果应用于同期的测评工作，完成了NVIDIA Tesla K40加速部件、Intel Haswell-EP架构18核、12核及Ivy-bridge 10核处理器等的测试工作。

测评数据库系统

上海超级计算中心在为科学计算和工程计算服务的过程中，HPC测评的数据量逐渐增大。为给用户提供更准确、更及时的测评数据信息，引入wiki技术，设计并开发了一个基于MediaWiki框架、支持Web使用的HPC测评数据库系统——高性能专业测评在线（HPC Professional Test Online, HPTO），为中心内部以及用户提供一个共享测评数据、分享测评经验的平台，同时为用户提供第三方参考依据。

第三方软件开发及服务

航空发动机异地协同优化超级计算平台

该项目目标是针对发动机整机优化、发动机设计零部件参数优化、零部件设计参数敏感度分析等需求，建立航空发动机异地协同优化超级计算平台软件。通过该平台，用户可利用上海超算中心软硬件资源，使用仿真优化设计服务工具，并建立优化流程标准，支撑航空发动机结构设计多学科优化研究与应用。

该项目中，Xfinity通过集成优化设计软件Lsight为用户提供优化设计计算服务，支持用户在该平台中远程打开Lsight软件，同时完成了作业调度软件LSF与Lsight、Lsight与应用软件Fluent、LS-DYNA、CFX、ANSYS集成，使用户完成优化设计后可以无缝使用上海超算的计算模拟资源。

基因测序平台

该项目是和上海桑格信息技术有限公司合作，为基因测序用户提供基于互联网的云计算平台，让用户可以在网页上自定义 workflow 进行基因测序计算，利用上海超算的高性能计算资源，快速获得计算结果。该项目是Xfinity与特定领域合作的重要案例，上海超算为该平台提供后端 workflow 计算服务接口，负责 workflow 服务的实现。

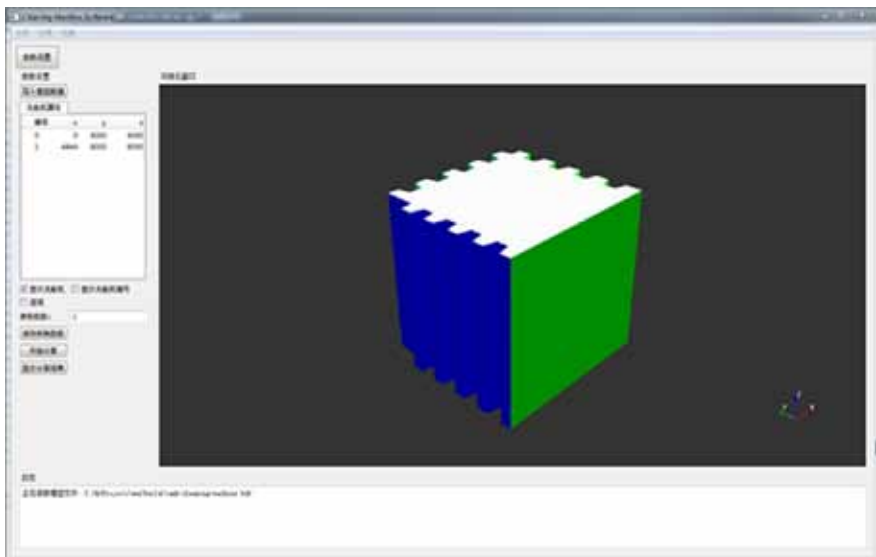
宝钢数值模拟子系统

该项目是为了解决宝钢集团有限公司在高性能计算资源建设过程中遇到的诸多问题，如资源的不断扩充、用户和项目信息管理系统的统一、历史数据的保留和利用、外部资源的有效利用等。该项目通过Xfinity为宝钢提供作业及文件的RESTful API及可编程集成的界面，使得宝钢在内部资源用满时，作业能自动迁移到上海超算资源池。该案例可以推广到其他大型企业，使上海超算的计算资源可以更好地支撑企业计算。

海鹰洗舱机软件开发

本项目针对船用洗舱机开发一款阴影图计算软件，可通过给定舱室结构、洗舱机的数量、位置及相关参数进行有效洗舱面积的计算（即阴影图计算）。通过阴影图法可以直观地计算出洗舱机的有效清洗面积和不能直接清洗到的区域，从而为设计方案的制定和改进提供依据。

2014年主要工作内容为算法验证。洗舱机软件主要在windows上开发，使用Qt软件框架和vtk三维可视化包，已完成的界面如下：



研发埠-云计算平台

该项目是与上海海基盛元软件科技有限公司合作，基于互联网的方式，以上海超算为依托，为中小型企业或个人、在校师生提供高性能计算工具。帮助其在更短的时间获得计算结果，以辅助其加快研发或完成课题研究。上海超算通过Xfinity为该平台提供作业和文件相关 RESTful API以及高性能计算资源。

国家项目

复杂电磁场数值模拟

本课题首先研究基于精确几何建模的电磁算法理论，主要包括频域和时域两类方法，然后重点研究不同电磁算法的高效并行策略，并基于CPU结合加速部件和通用并行计算架构研究算法的具体实现和优化，力求为软件系统提供高效的并行电磁算法内核。2014年度针对电磁场计算软件在Intel Phi平台上进行了移植与优化，在2块Intel Phi 3115A上的计算时间与Intel Xeon E5-2670相比，计算时间降低了20%左右；设计并实现了电磁模拟软件的海量数据可视化功能，支持电磁场模拟的量化分析与远程可视化。

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。

上海超级计算中心在本年度主要完成了多平台、多架构上的结构力学软件移植，先后在HPC实验室CPU、CPU+MIC异构环境及广州超算中心天河2号上移植并验证了该软件串行、并行及异构版本应用的可行性。

高性能计算环境应用服务优化关键技术研究

本课题将利用基础核心软件聚合分散的高性能计算资源，构建国家高性能计算应用服务环境，同时依托环境建立工业产品创新设计、新药创制、数字媒体和文化创意三个具有新型运行模式的领域应用社区，实现服务的多样化和专业化，提升用户体验和服务质量。上海超级计算中心是国家高性能计算应用服务环境的南方主结点，并负责工业产品创新设计社区的建设。

科普活动

2014年5月17日-23日,上海超级计算中心携互动科普展项参加了在上海普陀区跨国采购会展中心召开的2014上海科技周活动。本次科技周活动主打亲民互动活动,鼓励市民参与,展示项目强调互动和趣味性,集中展示了上海市各家高校、科研院所、科普场馆的最新科技成果。活动期间,中心展示了计算机模拟汽车碰撞仿真试验、计算机装配游戏,以及网上虚拟场馆等互动展项。超过2000位市民来到中心展位,很多参观者表示希望有机会到中心参观,了解更多计算机相关知识和应用信息。



2014年5月29日,上海超级计算中心邀请复旦大学教授、上海市力学学会副理事长丁光宏教授,在浦东进才中学大礼堂为学生们带来了一场题为“力学与现代生活”的讲座。讲座从万有引力开始,在“科学是什么”的讨论中结束。丁教授从力学出发,讲解科学的发展历程以及科学的涵义,并与学生积极互动,现场气氛十分热烈。

本次活动是上海超级计算中心和上海市力学学会联合主办

的“给我一个支点,我能撬动地球”计算力学系列活动的开幕讲座,共有近600名学生聆听了精彩讲座,达到了很好的效果。



2014年7月14-16日,2014华东高性能计算科普夏令营在中心顺利举行。本次夏令营由澳门科学技术发展基金和澳门特区政府科技委员会联合主办,上海科普促进中心和上海超级计算中心承办。夏令营期间,中心为澳门学生安排了专题科普讲座、“并行编程实践”、“汽车碰撞模型趣味修改”等内容的活动,通过做中学,使学生掌握并行计算原理,体验超级计算机在应用领域中的强大性能。





2014年10月27日-11月7日，约有八百多位市民在智慧城市体验周走进上海超级计算中心——智慧城市体验中心，体验超级计算机为市民带来的美好生活。活动期间，参观者走进超级计算机机房，实地感受超级计算机的庞大与其飞快的速度；走进计算机科技馆，感受信息技术的发展速度；通过操作中心的多媒体设施，体验信息技术的力量和“更智慧、更美好生活”的时代主题。



2014年12月9日，中心科普志愿者来到浦东新区三林镇民办寿春小学，参加“共享科普阳光 走进科技殿堂——2014浦东新区民办随迁子女学校基地行系列活动”启动仪式。本次活动由浦东新区科委科协、浦东新区教育局、浦东新区三林镇共同主办，多家科普单位支持。仪式上，中心代表向学生赠送了科普图书和报刊，并为学生们带来了精彩的科普讲座。



2014年12月11日，上海超级计算中心迎来同济大学第一附属中学100多位同学，参加由上海超级计算中心和上海市力学学会为他们精心准备的“计算力学主题科普活动”。

中心资深工程师丁峻宏博士为同学们带来一场主题为“计算无止境——当今高性能计算(HPC)应用情况介绍”的讲座。通过讲座，同学们了解到超级计算机可以应用在医药、生命科学、流体力学、化学、物理、天文、机械、汽车、飞机、船舶设计、航空航天、天气预报等多个领域，在科学、工程领域帮助人类更好的认知世界。

同学们对超级计算机的应用表现出浓厚兴趣，让中心科普人员感受到科普活动的魅力，激励中心今后举办更多丰富的科普活动。





2014年12月12日，由上海超级计算中心和上海市力学学会联合主办科普讲座系列活动“计算力学”走进上海洋泾中学。本次活动邀请了第一飞机研究所、上海飞机设计研究院的张锡金研究员为学生们带来了“飞机是怎样飞的”课题讲座。活动共计有1000多名学生参加。讲座中，张锡金老师准备了飞机模型以及飞机飞行状态的视频资料，把“飞机怎么飞起来的”、“飞机的稳定性和如何操纵”以及“典型的飞行过程”等内容一一呈现。学生们表现出了浓厚的兴趣。



2014年11月19日，上海工业旅游标准评委办公室专家组评审小组来到中心，进行工业旅游标准复核评定工作。专家小组听取中心的情况汇报并实地考察中心环境设施，对中心安全、环境、服务等方面提出了中肯的建议，复核工作顺利完成。

中心2007年成为工业旅游景点推荐单位，2010年取得工业旅游达标景点称号，是上海市较早获得工业旅游达标认证的单位之一。近年来，中心在工业旅游标准的引导下，完善相关标识等硬件设施，并不断改善服务质量，希望能为参观者提供一个较好的交流学习场所，促进行业发展。

上海超级计算中心被上海市力学学会评为2014年度先进集体。



员工活动



乒乓球赛



亲子活动



新年才艺秀



爱心捐助



素质拓展



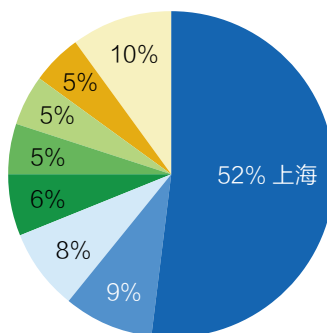


数据统计

上海超级计算中心魔方超级计算机全机系统2014年平均使用率为75.63%。全年为71个新用户开设了正式帐号, 为104个新用户提供了试用服务。用户单位包括国家重点大学、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。

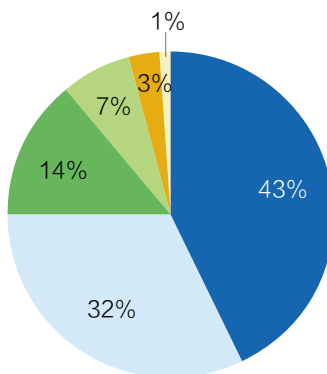
不同地域机时统计

地域	总使用机时(小时)
上海	79134784
浙江	13854150
北京	11428254
陕西	9033481
江苏	8249081
辽宁	8043748
安徽	7456436
其他省份	14774558



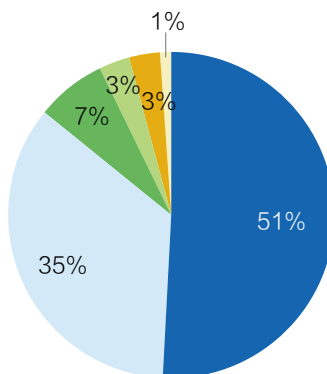
不同项目来源机时统计

项目来源	总使用机时百分比
国家自然科学基金项目	43%
973 项目	32%
863 项目	14%
国家重大工程项目	7%
企事业研究所项目	3%
其他	1%

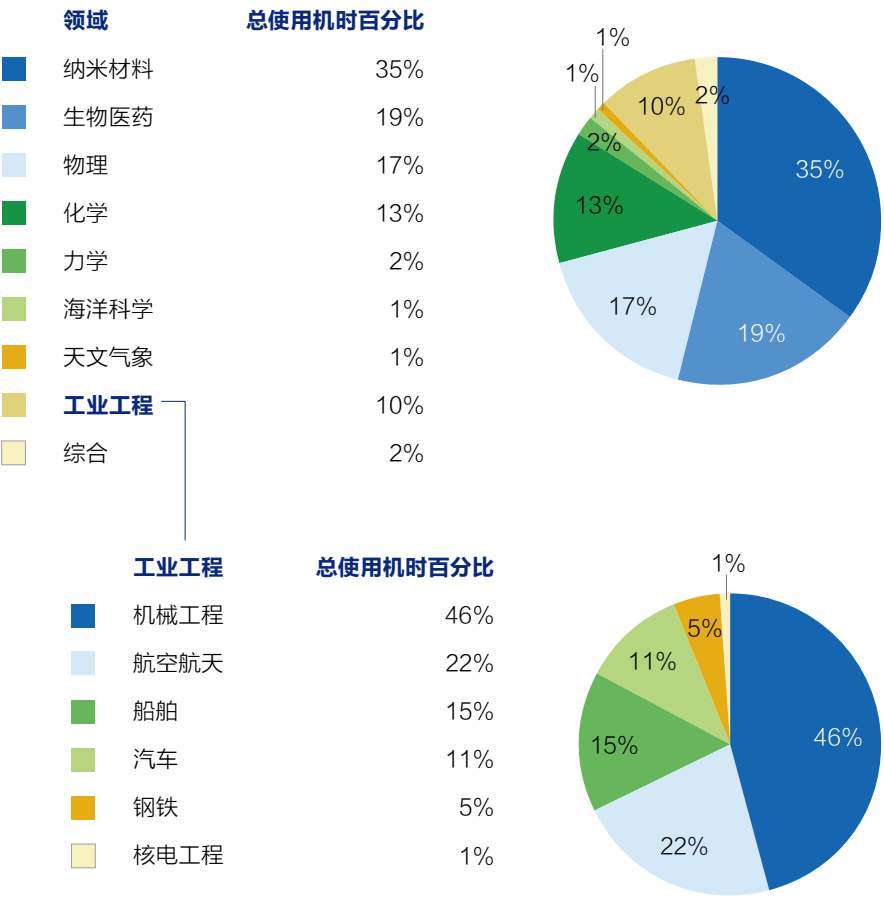


用户机构机时统计

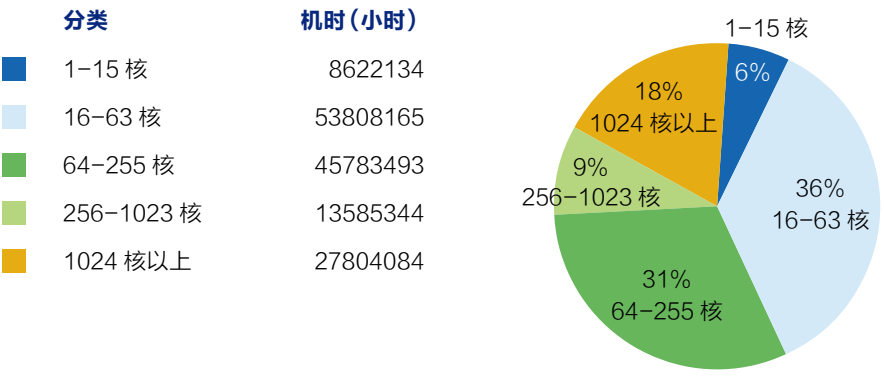
机构	总使用机时百分比
高校	51%
基础研究所	35%
工业企业	7%
工程设计院	3%
测试咨询	3%
其他	1%



各领域机时数统计



不同作业规模机时百分比



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，教授级高级工程师，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，先后在国内重要学术刊物上发表30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。

参加研究的科研成果“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，成果“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，成果“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，主要研究方向为原子势模型理论及其应用。2003年至2005年于美国南加州大学化学系任博士后研究员，Q-Chem(www.q-chem.com)开发组成员之一，研究方向为偶合簇理论(Coupled Cluster Theory)，实现并编写了Q-Chem

程序中EOM-CCSD方法的冻结实近似解析梯度计算，并应用到双自由基和三自由基体系的研究当中

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

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

2014年度报告

委 员: 周曦民

王普勇

李根国

王 涛

姜 恺

魏玉琪

林 薇

主 编: 周曦民

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>