

# 上海交通大学 高性能计算中心年度报告 2014





# 主任寄语



借助于“985工程”三期“高性能计算创新能力建设”项目，上海交通大学校级高性能计算公共服务平台跃上了一个新的台阶。计算能力位居国内高校第一的超级计算机 $\pi$ 于2014年1月正式收费运行，开始为校内高水平科研提供服务。一年来，我们高性能计算中心全体同仁精勤努力，苦练内功，积极理解用户需求，倾心服务科学研究，高水平研究成果和校级高性能计算平台建设的优势开始显现。

本年度报告主要汇报了2014年高性能计算中心在 $\pi$ 超级计算机运行、服务管理、科研支撑、人才培养、队伍建设和国内外合作交流等方面的工作情况，希望通过这个报告，使得广大用户了解高性能计算，关注高性能计算中心，积极为我校高性能计算事业的发展出谋划策；也使我们更好地倾听用户的意见，理解用户需要，改进服务。

计算已经成为与理论、实验并列的第三大科学研究手段，高性能计算能力也成为国家综合实力的重要体现。上海交通大学高性能计算中心将按照建设综合创新、人才培养和应用推广三个基地的既定目标，积极创造优良的计算环境，深化高水平科研计算服务，完善设备管理，提高运行效率，努力提升我校高性能计算水平和在国内外的影响力。同时，为普及计算知识，培训计算技能，培养计算人才做出我们的贡献。

上海交通大学高性能计算中心主任  
二〇一五年四月十五日

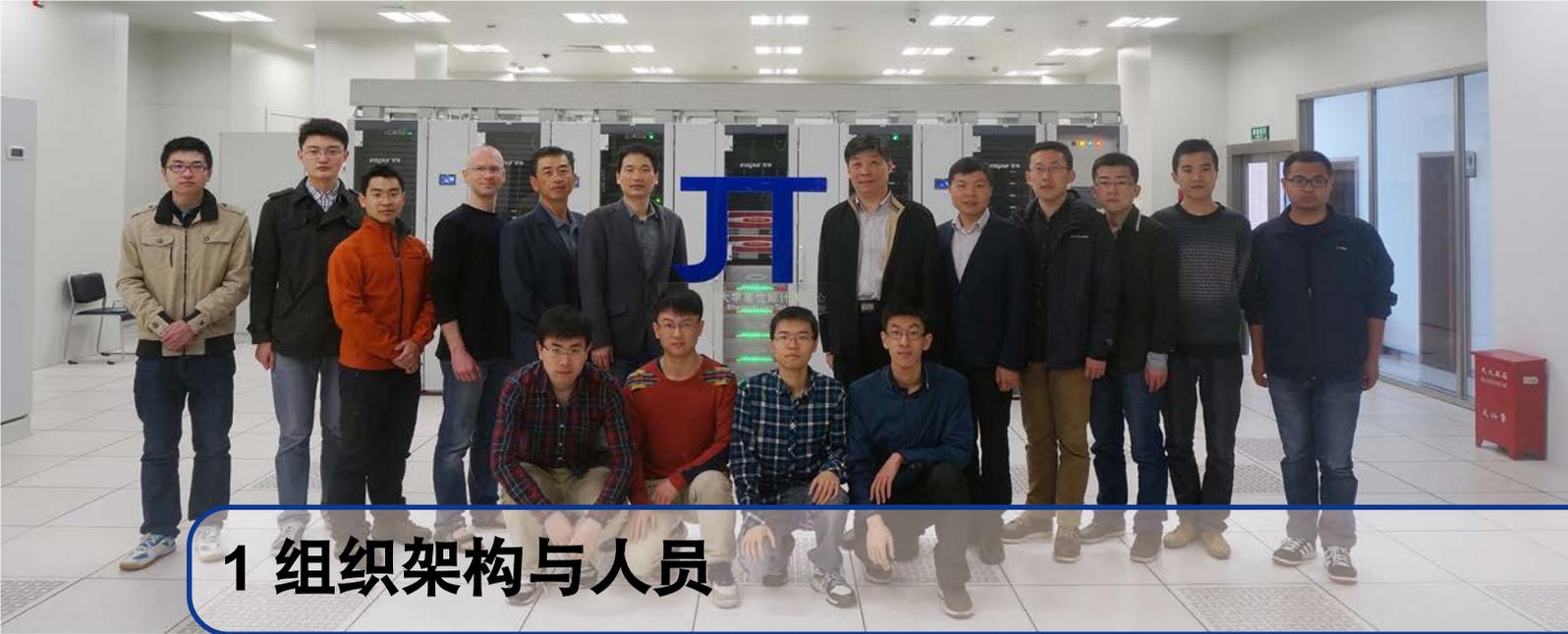
A handwritten signature in black ink, consisting of stylized Chinese characters, positioned to the right of the typed name and date.



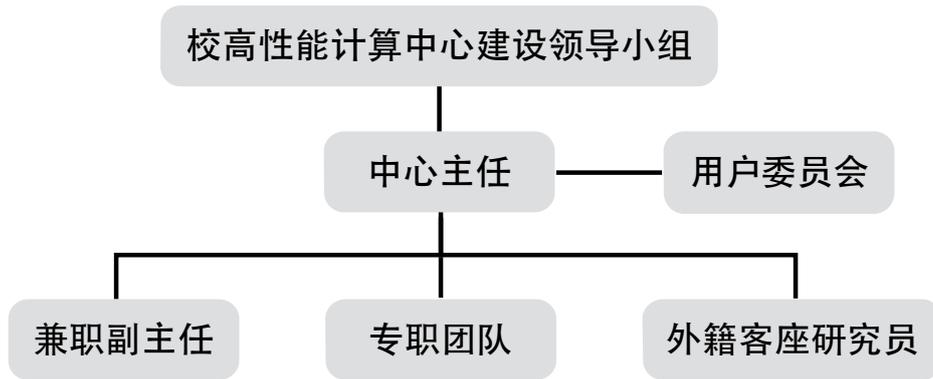


1	组织架构与人员	1
2	大事记	3
3	运维与资源分配	7
4	用户与成果统计	15
5	研究与代码优化	29
6	人才培养与培训	31
7	国际交流与合作	35
8	用户反馈与建议	37





# 1 组织架构与人员



**中心主任**全面负责中心的各项工作，由网络信息中心主任顾一众兼任。**专职团队**负责  $\pi$  集群的运维、用户支持和培训、以及用户代码调优等工作，共 4 名员工，其中 1 人为法籍：

林新华	专职副主任	在职博士	主持日常事务，关注代码优化的研究
文敏华	工程计算专员	交大硕士	负责用户代码调优，学生竞赛与培训
Eric	科学计算专员	EPFL 博士	负责支持物理与分子动力学的计算问题
韦建文	大数据专员	交大硕士	负责高通量计算，用户代码调优

兼职副主任负责协助和指导中心的服务及发展，共 4 位：

---

刘 洪	航空航天学院	教授，副院长
管海兵	电信学院	教授，副院长
蔡申瓯	自然科学研究院	教授，院长
金先龙	机动学院	教授

---

用户委员会负责评审用户的机时申请，主任为蔡伟教授，共 7 位：

---

蔡 伟	自然科学研究院	教授
盛政明	物理与天文系	教授
魏冬青	生命科学技术学院	教授
金朝晖	材料学院	教授
刘兴钊	电信学院	教授
陆 浩	材料学院	教授
林新华	高性能计算中心	副主任

---

外籍客座研究员负责帮助中心提升科研实力和国际影响力，共 2 位：

---

Dr. Simon See	NVIDIA 亚太区技术总监，新加坡籍
Prof. Francois Bodin	法国 Inrisa 研究所教授、前主任，法籍

---

1月



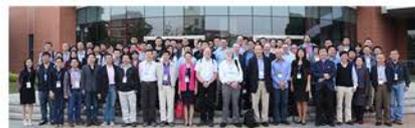
3月



4月



5月



6月



7月



9月



11月



12月

## 2 大事记

### 1 月

1 日， $\pi$  集群正式收费运行。

### 3 月

4 日，中心组织的 ASC14（世界大学生超算竞赛）交大代表队，从全球 82 支参赛队中突围，进入 16 强。

25 日，在美国 San Jose 举行的 GTC14 上，中心获得全球 CUDA 卓越中心成就奖提名，为国内高校首次。

### 4 月

21 日-25 日，ASC14 总决赛在广州中山大学举行。由中心员工文敏华和 Eric Germaneau 指导的交大代表队力挫群雄，勇获总冠军。

### 5 月

7-8 日，中心与自然科学研究院联合举办 2014 年大规模科学计算国际会议 (ICSC2014)。会议邀请了美国、欧洲、日本和中国的多位顶级计算领域的专家一起探讨高性能计算在解决大规模科学问题中面临的挑战。张杰校长致开幕词。

24-25 日，中心与 Intel 联合举办了第 3 届 Intel-SJTU 华东地区 HPC 研讨会。华东地区十多所高校及科研院所派代表参加，促进了高性能计算的区域性交流与合作。

## 6 月

21-25 日，中心组织交大代表队参加了在德国 Leipzig 举行的 ISC14 国际大学生超算竞赛。

## 7 月

1 日起， $\pi$  集群由于并行文件系统 Lustre 以及 Infiniband 线缆故障，先后出现 3 次大面积宕机，此次故障持续超过一个月。

1-11 日，美国高性能计算专家李硕受中心邀请，为交大学生讲授为期半个月暑期小学科课程《高性能计算之计算金融》。

10 日，上半年机时申请截止，共收到 13 份有效申请，分别来自物理与天文系、自然科学研究院、船建学院等 9 个院系。

24 日，中心与 NVIDIA 在材料学院联合举办 HPC Seminar 系列之“MD on  $\pi$ ”讲座，着重介绍材料领域常用的分子动力学软件在  $\pi$  上的应用。近百名材料学院的师生参加了该次讲座。

## 8 月

20 日，经过中心员工、驻场工程师和 DDN 工程师一个多月的修复、更新和调试， $\pi$  集群恢复正常。

## 9 月

15-26 日，普林斯顿大学 William Tang 教授受学校“引智计划”资助访问中心，并与自然科学研究院、物理与天文系的部分老师对跨学科合作进行了交流和探讨。

22 日，剑桥大学高性能计算中心科学计算负责人 Filippo Spiga 访问中心，落实了双方合作框架中的工作细节。

## 10 月

16 日，百度深度学习研究院杰出科学家吴韧博士在中心进行了 HPC Seminar 系列之“Deep Learning 与 GPU”的讲座，介绍了百度在 Deep Learning 的最新进展。近 80 多名交大师生参加了这次讲座。

## 11 月

6-8 日, 赴广州参加 HPC China2014, 宣读会议论文并参加布展。中心指导的交大学生代表队在第 2 届 Intel 全国并行编程大赛和第 2 届全国 RDMA 编程大赛均获得三等奖。

16-21 日, 赴美国 New Orleans 参加 SuperComputing14 会议, 为中国大陆唯一参加布展的高校, 提升交大在国际高性能计算领域的影响力。

27-28 日, 为了更好地听取用户反馈和了解用户需求, 中心组织了第 1 届  $\pi$  用户研讨会。近 30 名参会用户来自物理与天文系、生命科学技术学院、化学化工学院等院系。

## 12 月

1 日, 第 3 届 AMD 高性能计算奖学金申报开始。奖学金金面向校内在  $\pi$  上进行高性能计算研究和应用的研究生和博士生。名额 5 名, 每人奖励 1 万元。

31 日, 下半年机时申请截止, 共收到 10 份有效申请, 分别来自数学系、自然科学研究院、物理与天文系、生科院等 6 个院系。

### 专家寄语

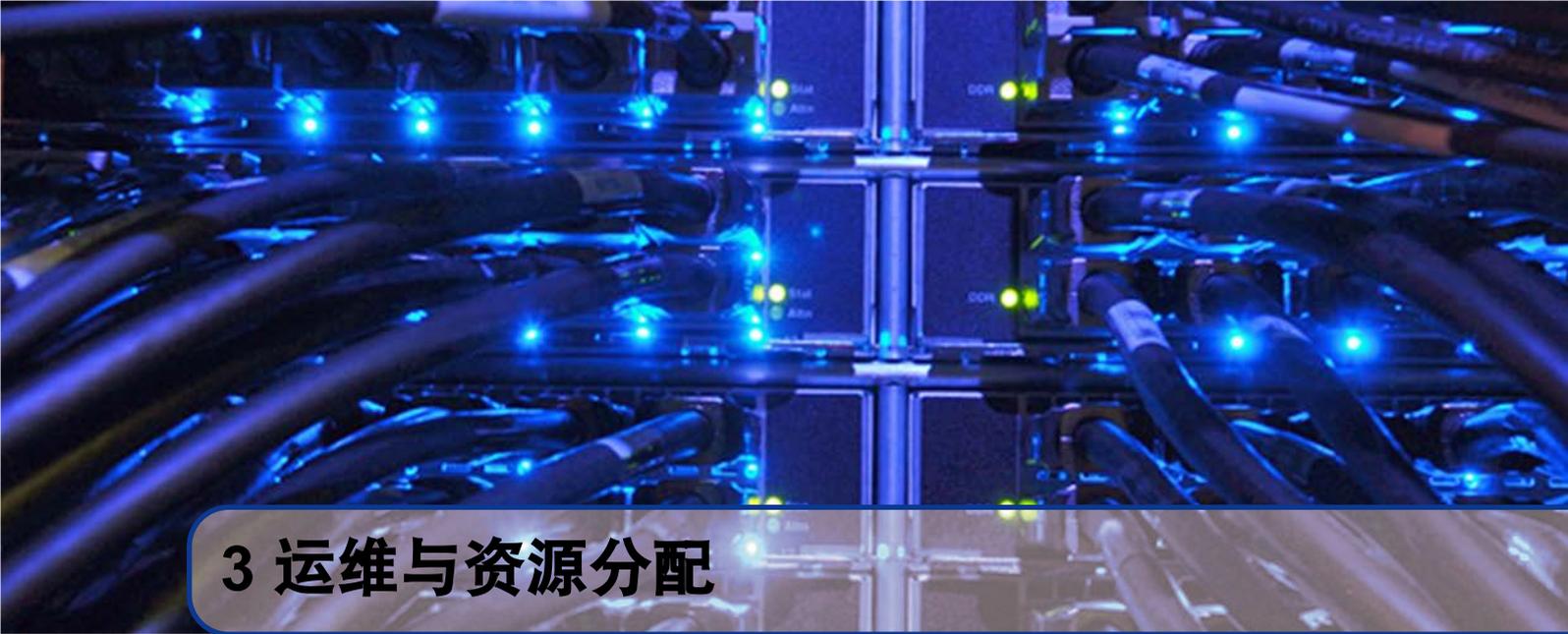


ICSC2014 showcased prominent computational scientists from Europe, U S, and China, including three Gordon Bell prize winners. This unique event provided a great opportunity for researchers and students to be exposed to the latest development in HPC and the open challenges in exscale computing.

蔡伟

ICSC2014 co-chair, 自然科学研究院访问讲席教授





## 3 运维与资源分配

### 3.1 $\pi$ 集群概述

$\pi$  的峰值计算能力为 262.6TFlops，LINPACK 实测达到 196.2TFlops，其中约有一半的计算能力来自于 GPU。2013 年 6 月建成时世界排名为 158，目前为全球 310，为国内高校第 1，上海地区第 1。取名为  $\pi$  有 4 层含义：

1.  $\pi$  在希腊文里有并行的涵义；
2.  $\pi$  是无限不循环的无理数，是人类理解无限的开始；
3.  $\pi$  的精确计算是人类使用计算机解决科学问题的代表；
4.  $\pi$  还可以看做为交通大学首字母 J 和 T 的组合。

$\pi$  于 2013 年 5-6 月进行整机调试。7 月份开始试运行，期间经受了上海高湿度的黄梅雨季和近一百年来最炎热夏天的考验。10 月下旬举行正式运行仪式。2014 年 1 月 1 日起正式收费运行。

$\pi$  的配置如下表所示。为了满足不同应用的需要，计算结点有 3 种不同类型：

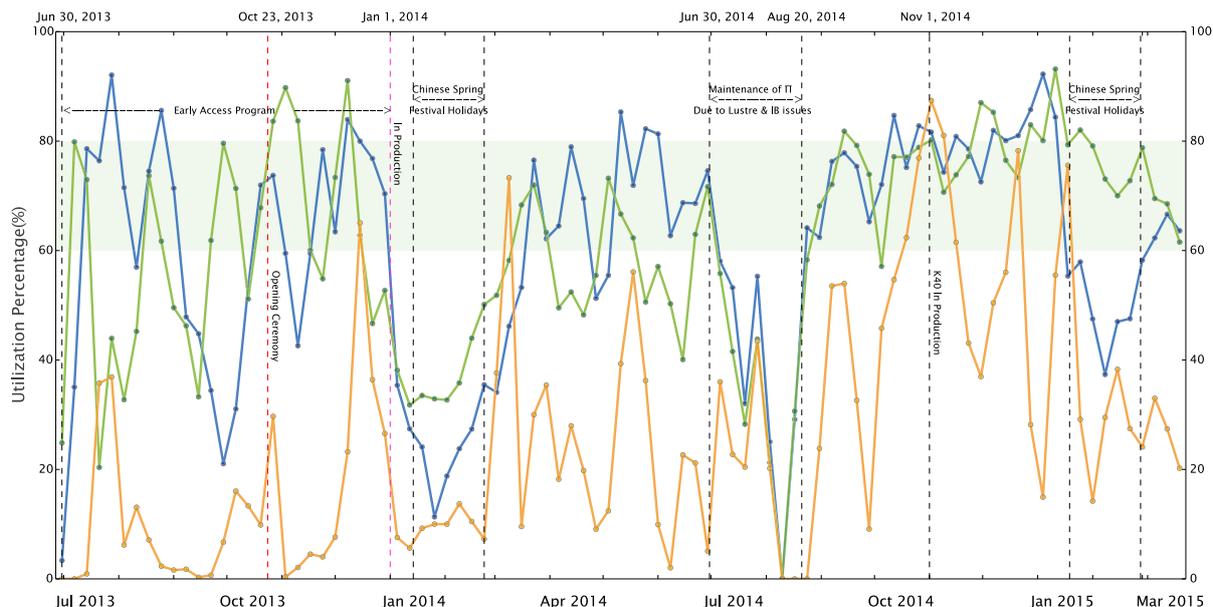
节点类型	节点数目	节点配置	峰值性能
CPU 节点	332	2 颗 Intel Xeon E5-2670 CPU，64GB 内存	135TFLOPS
GPU 节点	50	2 片 NVIDIA K20m GPU 加速卡，64GB 内存	117TFLOPS
大内存节点	20	2 颗 Intel Xeon E5-2670 CPU，256GB 内存	

### 3.2 公开运维信息

中心贯彻运维信息必须透明的原则，通过以下多种渠道及时公开资源利用和系统运行情况：

- 提供在线的实时利用率查询<sup>1</sup>，为国内唯一能提供该服务的高性能计算中心；
- 提供在线故障维修记录查询<sup>2</sup>，也是国内唯一；
- 建立  $\pi$  用户微信群，及时通告  $\pi$  的重要运维情况。

## 系统利用率



2013 年 6 月试运行至今的  $\pi$  集群系统利用率，其中蓝线表示 CPU 节点利用率，绿线表示 GPU 节点利用率，黄线表示大内存节点利用率。

- 健康的系统利用率应该在 60%-80% 之间 (绿色阴影区域)，过高则意味着系统过载，用户提交作业的等待时间变长。从上图可以看出，从整体上来看， $\pi$  集群的系统利用率从 2014 年下半年开始已经趋向饱和。
- 2013 年 6 月到年底之间是免费试运行，因此系统利用率居高不下。
- 2014 年寒假期间机器利用率显著下降。主要原因是接近年关，缴费合同等没来得及办。新学期伊始，这些手续办完之后，利用率迅速回升到健康范围。这说明  $\pi$  机时定价合理，收费没有影响利用率。
- 暑假期间由于并行文件系统 Lustre 和 Infiniband 网线故障等多个原因，导致  $\pi$  集群先后出现 3 次大面积宕机，导致利用率受到影响。经过多方的不懈努力和反复调试，终于在暑假结束前修复了故障。

<sup>1</sup><http://pi.sjtu.edu.cn/ganglia>

<sup>2</sup>[http://pi.sjtu.edu.cn/docs/Maintenance\\_Log](http://pi.sjtu.edu.cn/docs/Maintenance_Log)

- 2014 年下半年的利用率比上半年要高些，寒假里 GPU 结点比 CPU 结点要高许多。
- GPU 结点的利用率与 CPU 结点几乎持平，有时候甚至还要高一些，这表明提供了一半计算能力的 GPU 能很好地支持生产型应用。
- 大内存的结点数量少（不到整机的 5%），仅供一些有大数据处理需求的用户使用（如生科院），因此利用率波动比较大。

## 计算量最大的项目、应用与院系

2014 年度  $\pi$  上 10 个计算量最大的项目

院系	PI	项目名称	实际使用机时
自然科学研究院	Jakob	Elucidating the mechanism of pH-gating, solute selectivity, and flux of UreI, the urea channel of <i>Helicobacter pylori</i>	500 万核小时 CPU 20 万卡小时 GPU
物理与天文系	盛政明	激光等离子体相互作用中有关例子加速、输运和辐射的大规模数值模拟研究	400 万核小时 CPU
自然科学研究院	胡丹	肽-膜相互作用的分子动力学模拟和自由能计算	200 万核小时 CPU 18 万卡小时 GPU
自然科学研究院	徐振礼	软物质科学中复杂粒子相互作用和连续介质模型的高性能科学计算	170 万核小时 CPU 4 万卡小时 GPU
船建学院	万德成	船舶与海洋工程数值水池研究与开发	170 万核小时 CPU
材料学院	孔令体	非晶合金变形过程中微观结构演化规律的分子模拟研究	160 万核小时 CPU
物理与天文系	杨小虎	ELUCID 系列数值模拟	100 万核小时 CPU
化学化工学院	孙淮	表面活性剂水溶液表面浓度和临界胶束浓度 (CMC) 的研究	100 万核小时 CPU
生命科学技术学院	韦朝春	3000 个水稻基因组测序数据分析	90 万核小时 CPU
材料学院	金朝晖	超强韧“纳米复合金属玻璃”的原子尺度模拟及理论预测	80 万核小时 CPU

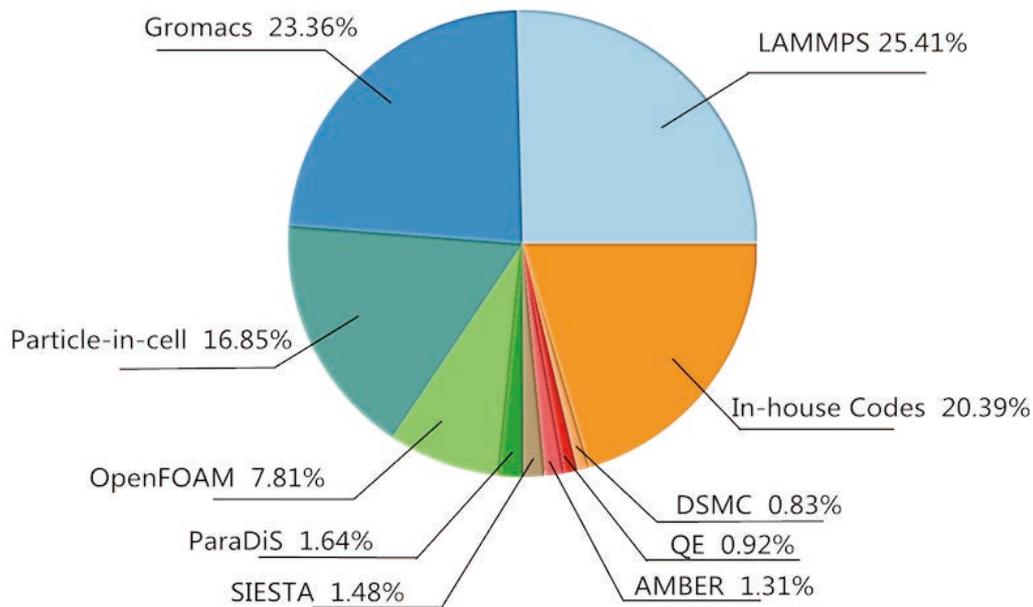
### 专家寄语



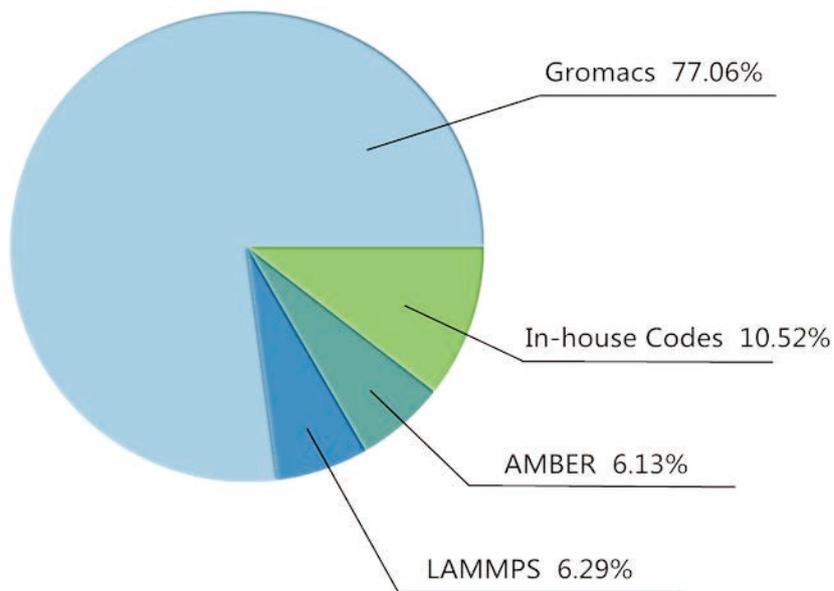
The HPC Center is extremely important to INS's research and essential to our progress in work. The staff of the Center has assisted our computing needs with efficiency and professional courtesy.

蔡申瓯

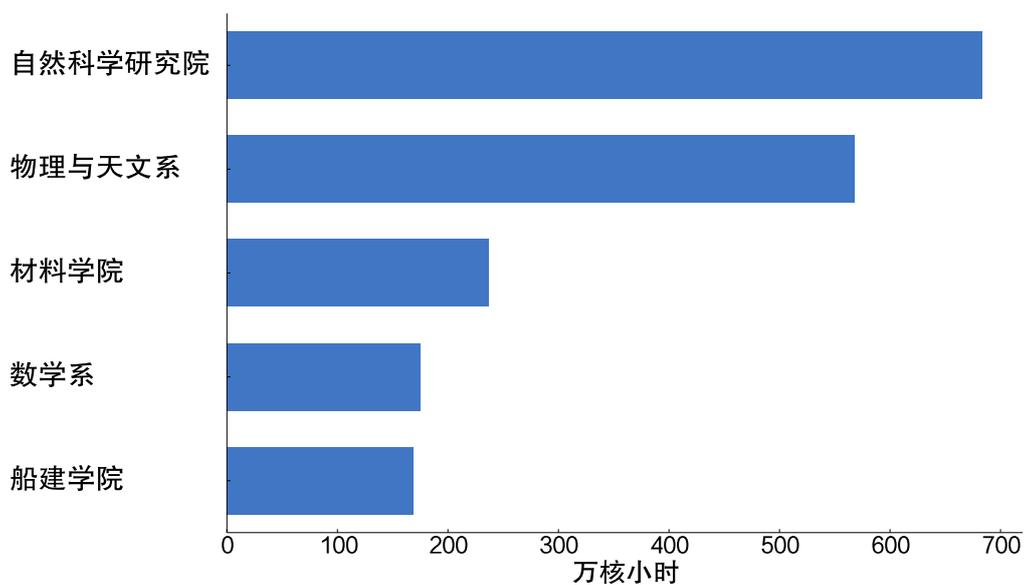
自然科学研究院院长，千人计划，长江学者



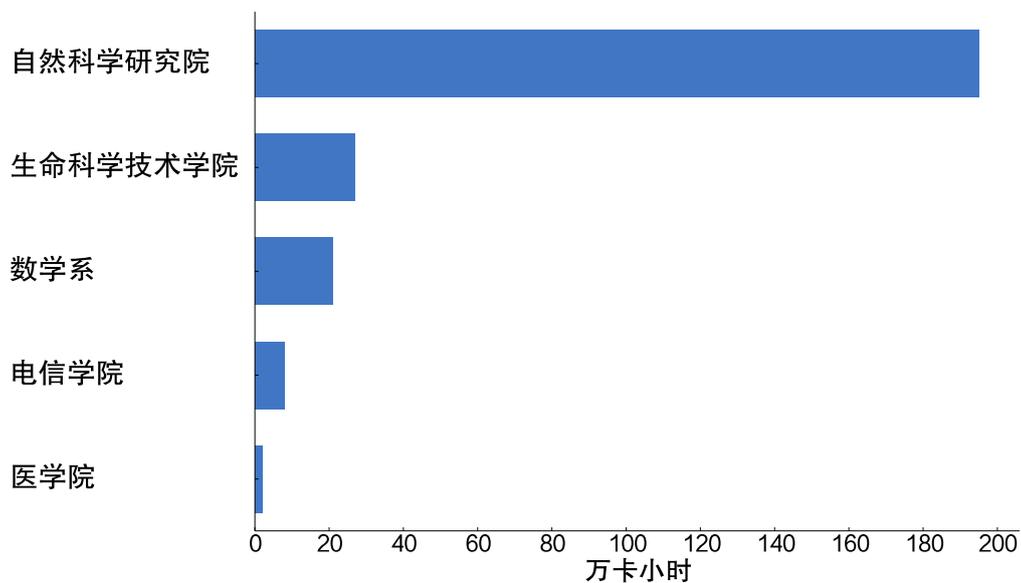
使用 CPU 最多的 10 个应用



使用 GPU 最多的 10 个应用



使用 CPU 最多的 5 个院系



使用 GPU 最多的 5 个院系

## 3.3 公平分配资源

### 分配原则

$\pi$  系统投入大、运维成本高。为使其充分发挥效用，在开放服务中，将遵循以下两项原则：

1. 坚持**面向重点和广泛受益**原则。优先保证对大规模计算的需求，特别是冲击国际前沿水平、涉及重大基础理论研究或涉及国民经济重大应用的国家级课题；其次尽可能满足校内科研和教学中的中小规模计算需求；少量考虑校外合作。
2. 坚持**费用分担和成果奖励**原则。通过学校补贴一部分、用户分担一部分的方式维持中心的可持续运行。对于重要的前沿探索和实质性合作研究项目以及取得重大成果的高水平课题，经用户委员会评议可申请优惠。

### 申请方式

为避免机时资源被滥用，我们采用了费用分担的方法，用户可以使用 2 种方式申请  $\pi$  的计算资源：

- 通过用户委员会申请。用户委员会负责分配  $\pi$  上约 70% 的资源。每年 7 月和 12 月接收用户申请，对具有重大科学价值和研究前景的项目予以机时优惠支持。
- 直接向高性能计算中心申请为标准用户。中心可以分配约 30% 的资源。用户如果错过用户委员会的申请或是申请未被接受，可以选择这种方式。

## 费用分担标准

计算节点类型		校内标准用户	校内获得用户委员会奖励的用户
CPU 节点 (64G 内存)	计时单价	A: 每核小时人民币 <u>0.1</u> 元	----
	包 50 万核小时以下	A*90%	A*60%
	包 50 万核小时(含)以上	A*80%	A*50%
GPU 节点	计时单价	B: 每核小时人民币 <u>1.0</u> 元	----
	包 10 万卡小时(含)以上	B*80%	B*50%
大内存节点 (256G 内存)	计时单价	C: 每卡小时人民币 <u>0.2</u> 元	----
	包 10 万核小时(含)以上	C*80%	C*50%

## 用户委员会批准支持的项目列表

编号	批准时间	院系	PI	项目名称	批准机时
1	2014 年 7 月	船建学院	万德成	船舶与海洋工程数值水池开发与验证	500 万核小时 CPU
2	2014 年 7 月	自然科学研究院	Jakob	Mechanism of membrane active antimicrobial peptides	400 万核小时 CPU
3	2014 年 7 月	生命科学技术学院	魏冬青	二氧化碳在极端高温高压条件下的理论研究	300 万核小时 CPU
4	2014 年 7 月	电信学院	候中宇	纳结构尖端场致跨态相变效应研究	230 万核小时 CPU
5	2014 年 7 月	自然科学研究院	邢向军	库仑多体系统的高性能科学计算	100 万核小时 CPU
6	2014 年 7 月	密西根联合学院	鲍 华	微纳尺度传热的分子模拟	100 万核小时 CPU
7	2014 年 7 月	材料学院	沈 耀	亚微米结构材料变形初期高硬化率机理的位错动力学模拟	60 万核小时 CPU
8	2014 年 7 月	生命科学技术学院	陈海峰	天然无规蛋白质分子力场的开发与运用研究	30 万核小时 CPU 1500 卡小时 GPU
9	2014 年 7 月	密西根联合学院	沈泳星	基于相场模型的裂纹扩展研究	20 万核小时 CPU 10 万卡小时 GPU
10	2014 年 7 月	化学化工学院	张万斌	新型手性配体的设计及金属不对称催化反应的开发	20 万核小时 CPU

编号	批准时间	院系	PI	项目名称	批准机时
11	2014 年 12 月	物理与天文系	於陆勒	激光等离子体相互作用中有关粒子加速、输运和辐射的大规模数值模拟研究	200 万核小时 CPU
12	2014 年 12 月	材料学院	金朝晖	超强韧“纳米复合金属玻璃”的原子尺度模拟及理论预测	60 万核小时 CPU
13	2014 年 12 月	航空航天大学	李伟鹏	大型客机气动噪声的大涡模拟研究	60 万核小时 CPU
14	2014 年 12 月	自然科学研究院/数学系	金石	Microsecond MD Studies of Allosteric Drugs in the Imidazole Glycerol Phosphate Synthase	50 万核小时 CPU
15	2014 年 12 月	自然科学研究院	徐振礼	软物质科学中复杂粒子相互作用和连续介质模型的高性能科学计算	40 万核小时 CPU
16	2014 年 12 月	自然科学研究院	张小群	医学图像处理与分析	40 万核小时 CPU
17	2014 年 12 月	生命科学技术学院	韦朝春	3000 个水稻基因组测序数据比较分析	40 万核小时 CPU
18	2014 年 12 月	生命科学技术学院	赵一雷	肝癌外显子组数据分析	40 万核小时 CPU
19	2014 年 12 月	材料学院	孔令体	二元合金固液界面特性的原子尺度模拟研究	30 万核小时 CPU

### 专家寄语



The scientific and engineering computing research has benefited greatly from the  $\pi$  cluster and HPC, currently researchers at SJTU are conducting cutting edge research in a diverse range of fields including material sciences, ship engineering, plasmas transport, drug designs, genomic sequence of crops, cancer studies, image analysis, soft matters, among others.

蔡伟

用户委员会主任，自然科学研究院访问讲席教授

## 4 用户与成果统计

### 4.1 用户

截止至 2014 年底， $\pi$  上的标准用户总计 61 位，覆盖了校内的 15 个院系。其中用户获得的荣誉称号如下：

荣誉称号	获得者	院系
千人计划 (1 人)	金 石	数学系
长江学者 (6 人)	金 石 盛政明 唐克轩 杨小虎 万德成 张大兵	数学系 物理与天文系 农业与生物学院 物理与天文系 船建学院 生命科学技术学院
杰出青年 (6 人)	金 石 盛政明 景益鹏 杨小虎 周永丰 张大兵	数学系 物理与天文系 物理与天文系 物理与天文系 化学化工学院 生命科学技术学院
青年千人 (6 人)	陈 民 Jakob 沈泳星 翁苏明 俞 凯 应文俊	物理与天文系 自然科学研究院 密西根联合学院 物理与天文系 电信学院 数学系
美国数学学会会士 (1 人)	金 石	数学系
美国物理学会会士 (1 人)	盛政明	物理与天文系
美国力学学会会士 (1 人)	陈谦斌	密西根联合学院

## 4.2 论文

院系	论文数			小计
	已发表	已提交	计划提交	
物理与天文系	10	1	0	11
生命科学技术学院	8	3	1	12
自然科学研究院	6	1	2	9
密西根联合学院	4	1	0	5
材料学院	3	1	0	4
航空航天学院	3	1	0	4
船建学院	1	0	0	1
合计	35	8	3	46

† 数据来自用户填写的反馈表。

### 物理与天文系

- [1] Ming Zeng et al. "Multichromatic Narrow-Energy-Spread Electron Bunches from Laser-Wakefield Acceleration with Dual-Color Lasers". In: *Phys. Rev. Lett.* (**IF=7.7**) (2015).
- [2] Guanjian Fu, Yumin Zhao, and Arima Akito. "Nucleon-pair approximations for low-lying states of even-even  $N=Z$  nuclei". In: *Physical Review C* (**IF=3.9**) (2015).
- [3] Yan Zhang et al. "Charge transport and ac response under light illumination in gate-modulated DNA molecular junctions". In: *Nanotechnology* (**IF=3.8**) (2015).
- [4] Wenhuan Zhu, Guohui Ding, and Bing Dong. "Negative differential conductance and hysteretic current switching of benzene molecular junction in a transverse electric field". In: *Nanotechnology* (**IF=3.8**) 25.46 (2014), p. 465202.
- [5] Meixiao Wang et al. "Interface structure of a topological insulator/superconductor heterostructure". In: *New Journal of Physics* (**IF=3.7**) 16.12 (2014), p. 123043.
- [6] Feiyu Li et al. "Coherent kilo-electron-volt backscattering from plasma-wave boosted relativistic electron mirrors". In: *Applied Physics Letters* (**IF=3.5**) 105.16 (2014), p. 161102.

- [7] Tong Xu et al. "Spectrum bandwidth narrowing of Thomson scattering X-rays with energy chirped electron beams from laser wakefield acceleration". In: *Applied Physics Letters* (**IF=3.5**) 104.1 (2014), p. 013903.
- [8] Feiyu Li et al. "Radially polarized, half-cycle, attosecond pulses from laser wakefields through coherent synchrotronlike radiation". In: *Physical Review E* (**IF=2.3**) 90.4 (2014), p. 043104.
- [9] Lule Yu et al. "Control of focusing fields for positron acceleration in nonlinear plasma wakes using multiple laser modes". In: *Physics of Plasmas* (**IF=2.2**) 21.12 (2014), p. 120702.
- [10] Ming Zeng et al. "Self-truncated ionization injection and consequent monoenergetic electron bunches in laser wakefield acceleration". In: *Physics of Plasmas* (**IF=2.2**) 21.3 (2014), p. 030701.

## 生命科学技术学院

- [11] Ting Shi et al. "Theoretical Studies on the Mechanism, Enantioselectivity, and Axial Ligand Effect of a Ru (salen)-Catalyzed Asymmetric Cyclopropanation Reaction". In: *Organometallics* (**IF=4.3**) 33.14 (2014), pp. 3673–3682.
- [12] Lishi Xu et al. "Recognition Mechanism between Lac Repressor and DNA with Correlation Network Analysis". In: *The Journal of Physical Chemistry B* (**IF=3.4**) 119.7 (2015), pp. 2844–2856.
- [13] Limeng Chen et al. "Theoretical Study on the Relationship between Rp-Phosphorothioation and Base-Step in S-DNA: Based on Energetic and Structural Analysis". In: *The Journal of Physical Chemistry B* (**IF=3.4**) (2014).
- [14] Qingfen Yu et al. "Specific Recognition Mechanism between RNA and the KH3 Domain of Nova-2 Protein". In: *The Journal of Physical Chemistry B* (**IF=3.4**) 118.43 (2014), pp. 12426–12434.
- [15] Hai-Feng Chen, Dingjue Ji, and Wei Ye. "Revealing the Binding Mode between Respiratory Syncytial Virus Fusion Protein and Benzimidazole-based Inhibitors". In: *Molecular BioSystems* (**IF=3.2**) (2015).

- [16] Shangli Cheng et al. "Features of S-nitrosylation based on statistical analysis and molecular dynamics simulation: cysteine acidity, surrounding basicity, steric hindrance and local flexibility". In: *Molecular BioSystems* (**IF=3.2**) 10.10 (2014), pp. 2597–2606.
- [17] Wei Wang et al. "New force field on modeling intrinsically disordered proteins". In: *Chemical biology & drug design* (**IF=2.5**) 84.3 (2014), pp. 253–269.
- [18] Ke Wu et al. "Selectivity Mechanism of ATP-Competitive Inhibitors for PKB and PKA". In: *Chemical biology & drug design* (**IF=2.5**) (2014).

### 自然科学研究院

- [19] Yukun Wang, Dan Hu, and Dongqing Wei. "Transmembrane Permeation Mechanism of Charged Methyl Guanidine". In: *Journal of Chemical Theory and Computation* (**IF=5.3**) 10.4 (2014), pp. 1717–1726.
- [20] Tao Du, Dan Hu, and David Cai. "Outlet Boundary Conditions for Blood Flow in Arterial Trees". In: *PLoS ONE* (**IF=3.5**) (2015).
- [21] Yukun Wang et al. "How reliable are molecular dynamics simulations of membrane active antimicrobial peptides?" In: *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes* (**IF=3.4**) 1838.9 (2014), pp. 2280–2288.
- [22] Manman Ma and Zhenli Xu. "Self-consistent field model for strong electrostatic correlations and inhomogeneous dielectric media". In: *The Journal of chemical physics* (**IF=3.1**) 141.24 (2014), p. 244903.
- [23] Zecheng Gan et al. "Comparison of efficient techniques for the simulation of dielectric objects in electrolytes". In: *Journal of Computational Physics* (**IF=2.5**) (2015).
- [24] Zhenli Xu, Manman Ma, and Pei Liu. "Self-energy-modified Poisson-Nernst-Planck equations: WKB approximation and finite-difference approaches". In: *Physical Review E* (**IF=2.3**) 90.1 (2014), p. 013307.

### 密西根联合学院

- [25] Xiaoliang Zhang et al. "Thermal conductivity of silicene calculated using an optimized Stillinger-Weber potential". In: *Physical Review B* (**IF=3.7**) 89.5 (2014), p. 054310.

- [26] Han Xie, Ming Hu, and Hua Bao. “Thermal conductivity of silicene from first-principles”. In: *Applied Physics Letters* (**IF=3.5**) 104.13 (2014), p. 131906.
- [27] Cheng Shao and Hua Bao. “A molecular dynamics investigation of heat transfer across a disordered thin film”. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer* (**IF=2.5**) 85 (2015), pp. 33–40.
- [28] Hua Bao et al. “Enhancement of interfacial thermal transport by carbon nanotube-graphene junction”. In: *Journal of Applied Physics* (**IF=2.2**) 115.5 (2014), p. 053524.

## 材料学院

- [29] Guiqin Yang et al. “Orientation dependences of atomic structures in chemically heterogeneous Cu<sub>50</sub>Ta<sub>50</sub>/Ta glass-crystal interfaces”. In: *Journal of Applied Physics* (**IF=2.2**) 117.1 (2015), p. 015303.
- [30] Guiqin Yang et al. “Structural and dynamical properties of heterogeneous solid-liquid Ta-Cu interfaces: a molecular dynamics study”. In: *Computational Materials Science* (**IF=1.9**) 86 (2014), pp. 64–72.
- [31] Xiaoze Gao et al. “Atomic structure and energetics of amorphous-crystalline CuZr interfaces: a molecular dynamics study”. In: *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering* (**IF=1.5**) 22.6 (2014), p. 065007.

## 航空航天学院

- [32] Weipeng Li, Taku Nonomura, and Kozo Fujii. “Mechanism of controlling supersonic cavity oscillations using upstream mass injection”. In: *Physics of Fluids* (**IF=2.0**) 25.8 (2013), p. 086101.
- [33] Weipeng Li. “Generation of Acoustic Disturbances in Supersonic Laminar Cavity Flows”. In: *International Journal of Acoustics and Vibration* (**IF=0.4**) (2015).
- [34] Weipeng Li and Hong Liu. “Noise Generation in Flow past a Full-span Trailing-edge Flap”. In: *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*. 2015.

## 船建学院

- [35] Benlong Wang et al. “Numerical simulations of wake signatures around high-speed ships”. In: *Journal of Hydrodynamics, Ser. B (IF=1.3)* 26.6 (2015), pp. 986–989.

## 已提交或计划提交论文

- [36] Zhiqiang Hu and Chaochun Wei. “The rice pan-genome based on the 3K rice genome project”. In: *Plan to submit to Nature (IF=42.4)* (2015).
- [37] Chenhong Zhang. “Systems understanding of gut microbiota-targeted alleviation of human genetic obesity”. In: *Submitted to Nature Communications (IF=10.7)* (2015).
- [38] Zhiqiang Hu et al. “Revealing missing isoforms encoded in the human genome by integrating genomic, transcriptomic and proteomic data”. In: *Submitted to Scientific Reports (IF=5.1)* (2015).
- [39] Wei Ye et al. “Test and Evaluation of ff99IDPs Force Field for Intrinsically Disordered Proteins”. In: *Submitted to Journal of Chemical Information and Modeling (IF=4.1)* (2015).
- [40] Guanjian Fu. “Quartet structure in atomic nuclei”. In: *Submitted to Physical Review C (IF=3.9)* (2015).
- [41] Li Yao and Zhaohui Jin. “Stagnation Accommodated Global Plasticity within Metallic Nanoglass Composites”. In: *Submitted to Scripta Mater (IF=3.0)* (2015).
- [42] Tao Du, Dan Hu, and David Cai. “A fast algorithm for the simulation of blood pulse waves”. In: *Submitted to Journal of Computational Physics (IF=2.5)* (2015).
- [43] Weipeng Li. “Mechanism of Acoustic Resonances in Flow past a Leading-edge Slat”. In: *Submitted to AIAA Journal (IF=1.2)* (2015).
- [44] Mingnan Ding et al. “The long scale properties of dense electrolytes”. In: *Plan to submit* (2015).
- [45] Yihao Liang, Zhenli Xu, and Xiangjun Xing. “A Multi-scale Monte Carlo Method for Electrolytes”. In: *Plan to submit* (2015).

- [46] Vahid Ziaei-Rad and Yongxing Shen. “Massive parallelization of the phase field formulation for crack propagation with time adaptivity”. In: *Plan to submit* ().

### 4.3 项目

院系	973	基金委			863	其他	小计
		重点	面上	青年			
物理与天文系	4	0	2	3	1	2	12
生命科学技术学院	0	1	3	0	1	1	6
自然科学研究院	0	0	2	0	0	0	2
密西根联合学院	0	0	0	1	0	0	1
材料学院	1	0	1	0	0	0	2
航空航天学院	0	0	0	0	0	1	1
电信学院	0	0	0	1	0	0	1
合计	5	1	8	5	2	4	25

† 数据来自用户填写的反馈表。

#### 物理与天文系

1. 张杰, 973A 类项目课题四, “极端相对论光场驱动的粒子加速新机制探索”, 2013CBA01500, 2013–2018。
2. 杨小虎, 973 项目, “暗能量观测: 基于大规模红移巡天精确测量宇宙膨胀历史和结构增长速率”。
3. 向导, 青年 973 项目, “基于逆康普顿散射的高增益超快 x 光源若干前沿问题研究”, 2015CB859700, 2015–2019。
4. 赵玉民(子课题参加者), 973 项目 (NO.2013CB834401), “原子核质量的描述和预言”, 2013–2017。
5. 赵玉民, 杰出青年基金 (NO. 11225524), “原子核结构理论”, 11225524, 2013–2016。
6. 盛政明, 自然科学基金面上项目, “极端光场驱动超短相干强 X 射线源产生”, 11374210, 2014–2017。
7. 陈民, 自然科学基金面上项目, “基于激光尾波场加速的桌面伽玛射线辐射源”, 11374209, 2014–2017。

8. 陈民, 自然科学基金青年项目, “激光尾波场加速中横向光离化注入对电子的控制”, 11205101, 2013–2015。
9. 於陆勒, 自然科学基金青年项目, “激光尾波场加速中的双色光离化电子注入”, 11405107, 2015–2017。
10. 翁苏明, 自然科学基金青年项目, “惯性约束核聚变的离子驱动快点火方案理论与数值模拟研究”, 11405108, 2015–2017。
11. 863 项目, “利用激光等离子体相互作用产生相干高频辐射”, 2012–2015。
12. 陈民, 上海市浦江人才项目, “基于激光尾波场加速的可调谐超短 X 射线脉冲源的研究”, 2013–2015。

## 生命科学技术学院

13. 赵立平, 国家自然科学基金重点项目, “肠道功能菌与营养互作诱发代谢综合征的分子生态学机制研究”, 31330005, 2014-2018。
14. 李志勇, 国家重大科学研究计划, “南海珊瑚礁对多尺度热带海洋环境变化的响应、记录与适应对策研究: 课题 3-南海珊瑚礁退化机理与修复潜力”。
15. 李志勇, 国家自然科学基金项目, “基于宏转录组学的海水酸化对南海近海珊瑚礁海绵共生微生物种群结构与生态学功能影响的研究”, U1301131, 2014–2016。
16. 李志勇, 国家自然科学基金项目, “利用深度测序与比较元基因组学分析海绵共生微生物群落代谢潜力与生态学功能”, 41176127, 2012–2015。
17. 韦朝春, 国家自然科学基金面上项目, “元基因组中复杂结构的序列模块寻找及其功能分析”, 61472246, 2015–2018。
18. 陈海峰、韦朝春, 863 项目, “微生物组学数据集成及分析的关键技术研发”, 2014AA021502, 2014–2016。

## 自然科学研究院

19. 胡丹, 国家自然科学基金面上项目, “多步自由能算法及其在膜-肽相互作用中的应用”, 11471213, 2015–2018。
20. 徐振礼, 国家自然科学基金面上项目, “生物和胶体中的库仑多体系统: 算法, 建模与模拟”, 91130012, 2012–2014。

## 密西根联合学院

21. 沈泳星, 国家自然科学基金青年科学基金项目, “基于万能网格及相场的水力压裂多尺度数值模拟方法”, 11402146, 2015–2017。

## 材料学院

22. 金朝晖, 973 项目, “纳米金属材料的多级结构制备及优异性的探索研究”, 2012CB32202, 2014–2016。
23. 沈耀, 国家自然科学基金面上项目, “亚微米结构材料变形初期高硬化率机理的研究”, 51471107, 2015–2018。

## 航空航天大学

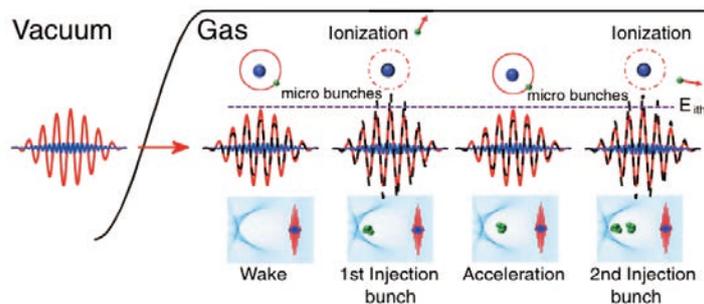
24. 李伟鹏 (Co-PI), “Novel non-intrusive measurements and simulations of supersonic flows and noise”, 新加坡教育部支持的国际合作课题 (MoE Tier 2, MOE2014-T2-1-002), 2015–2017。

## 电信学院

25. 顾海华, 国家自然科学基金青年基金, “密码学中的椭圆曲线理论研究”, 61202372, 2013–2015。

## 4.4 典型应用

### 激光等离子体相互作用中有关粒子加速、运输和辐射的大规模数值模拟研究



团队成员包括：

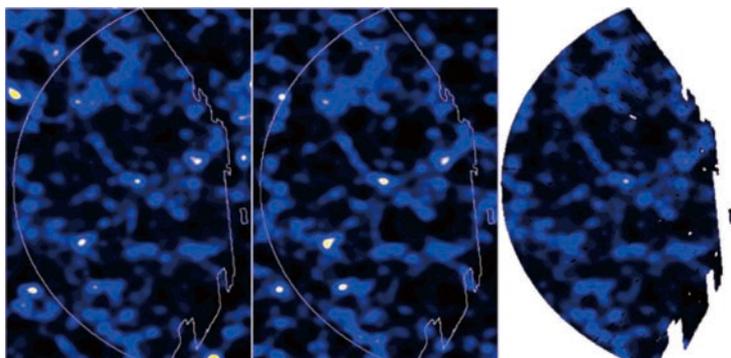
---

盛政明	物理与天文系教授，长江学者，杰出青年
陈 民	物理与天文系特别研究员，青年千人
翁苏明	物理与天文系特别研究员，青年千人
於陆勒	物理与天文系助理研究员

---

激光等离子体物理是近二十年来随着强激光技术发展而兴起的一门崭新学科，它涵盖了从激光加速，激光等离子体辐射源，激光驱动的惯性约束聚变物理，到实验室天体物理等诸多新型及交叉的学科，在世界范围内引起了广泛的研究兴趣。本课题就激光等离子体相互作用中有关粒子加速、运输和辐射问题，通过大规模并行程程序的开发及数值模拟研究，拟对激光尾波场加速中的电子注入过程，尾波加速电子束的辐射及汤姆逊散射，激光固体靶相互作用中的离子加速及超快激光驱动的快点火聚变方面展开深入细致的研究，以期在大幅度尾波加速电子束品质的提升，辐射源亮度及可调谐性，离子加速的能量和质量，以及快点火聚变方案中的电子运输和能量沉积若干方面取得突破性进展。

## ELUCID 系列数值模拟



团队成员包括：

---

杨小虎 物理与天文系教授，长江学者，杰出青年  
景益鹏 物理与天文系教授，杰青

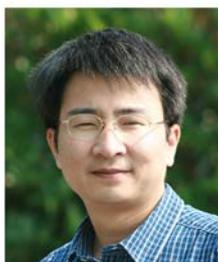
---

基于理论和方法创建从星系巡天样本得到近场宇宙初始密度场，作为初始条件，利用我国超级计算能力处于国际领先水平的有利条件，通过大规模并行数值模拟再现近邻宇宙四维时空结构，揭示重子物质和暗物质分布特性，革新人类对银河系和近邻宇宙结构起源的认识；在避免宇宙观测涨落的情况下，把模拟得到的结果与观测到的近邻宇宙各层次结构进行一对一的比较，准确理解影响星系和宇宙结构演化的各种物理过程，并为星系形成理论模型提供有力限制。

2015 年初在  $\pi$  系统上完成了一组  $3072^3$  粒子的数值模拟（采用 2048 核，运行了 100 多万 CPU 小时）。在上半年将基于这一数值模拟，完成系列检验工作，并构建模拟巡天，评估观测的精度（预计可以发表 2 篇天文学高水平论文）。

在下半年，将构建基于观测的初始条件，再运行一组  $3072^3$  粒子的数值模拟。这一模拟将有更为广泛的应用前景。

### 用户证言

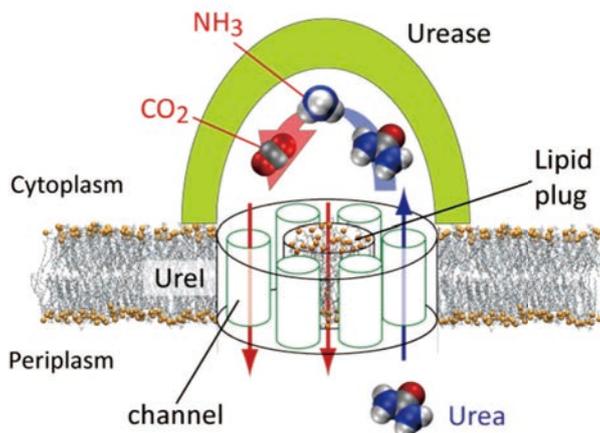


经过高性能计算中心团队的大力支持，我们顺利完成了  $3072^3$  粒子的数值模拟。为我们后续研究、运行同等规模的数值模拟积累了经验。

杨小虎

物理与天文系教授，杰青，长江学者，973 首席

## Elucidating the mechanism of pH-gating, solute selectivity, and flux of UreI, the urea channel of *Helicobacter pylori*



Group members include:

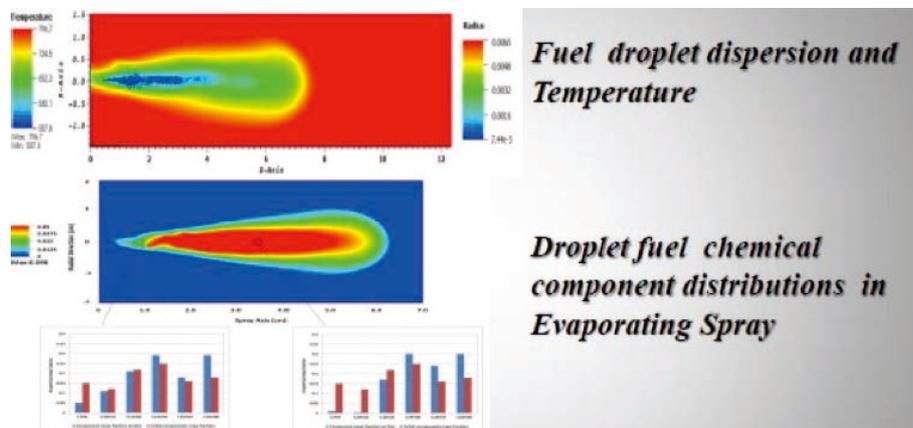
---

Jakob Ulmschneider	Professor in Institute of Natural Sciences
Yukun Wang	Ph.D student in School of Life Science and Technology

---

We are studying the atomic detail mechanics driving pH-gating, solute selectivity, and flux of HpUreI, the urea channel crucial for survival of *H. pylori* at low pH. *H. pylori* remains a worldwide problem, contributing to peptic ulcer disease and gastric cancer. Without active intervention, at least 20% of the population of developed countries will continue to be infected. Current eradication requires triple therapy, a proton-pump inhibitor and two antibiotics given twice a day for 10 to 14 days. Resistance to either clarithromycin or metronidazole is > 20% and rising. Gastric infection by *Helicobacter pylori* depends on the expression of a urea channel unique to this pathogen, UreI. This channel allows *H. pylori* to thrive in low pH environments by funneling urea to the cytoplasmic urease, where it is split into  $\text{CO}_2$  and  $\text{NH}_3$ , which in turn are exported to buffer the pathogen's periplasmic space. Our collaborators have recently succeeded in solving the crystal structure of UreI, which forms a completely new protein fold consisting of a hexameric ring of channel protomers surrounding a central lipid filled plug. We use multi-microsecond simulations of the hexameric channel assembly to investigate the atomic detail mechanics that regulate pH-gating, solute selectivity, and flux limitation. In addition, we will study the export route and transport mechanisms of the urea hydrolysis products,  $\text{CO}_2$  and  $\text{NH}_3$ , back into the periplasmic space. Inhibition of either urea or  $\text{CO}_2$  and  $\text{NH}_3$  transport would render *H. pylori* susceptible to acidic degradation, thus presenting a good opportunity for targeted drug development. A thorough understanding of the molecular mechanisms underlying channel function is vital for the design of suitable inhibitors and new therapies. Blocking of this channel would be expected to result in a specific and effective monotherapy for eradication of the organism. This would provide a preventive approach to serious upper gastro-intestinal diseases, particularly gastric cancer. Our studies require multi-microsecond simulations that are able to capture channel function of the native UreI homo-hexamer in a lipid bilayer. Simulations of systems of this size, and at the timescales required, are currently only feasible on large resources, such as HPC-SJTU, and have the potential to reveal the inner workings of a major drug target for one of the world's most dangerous pathogens.

## High Fidelity Spray Combustion Modeling Research involving Multi-component Surrogate Fuels



Group members include:

---

Chienpin Chen Professor in UM-SJTU Joint Institute

---

Spray combustion research has wide applications in internal combustion and gas turbine engines. We are currently carrying out high fidelity Large Eddy Simulation (LES) of combusting flows involving multi-component fuels. For computational modeling of the spray combustion processes, it is essential to have accurate values of fuel thermo-physical (for heating and evaporation) and chemical kinetics (for ignition delay) properties.

We have utilized a recently developed inversed batch distillation methodology to select a group of hydrocarbon species that closely match the experimental distillation curve of a Jet-A blend to include hydrocarbon groups of typical kerosene fuels of linear paraffins, cyclo-paraffins and aromatics. For chemical kinetics target, a multi-component skeleton reaction mechanism of 231 species and 5591 reactions was used to predict ignition delay times with satisfactory results. To account for complex geometries associated with modern combustors involving injectors and atomizers, both unstructured and structured mesh have to be blended to create the best grid system of the combustor configuration. For evaporating multi-component sprays, we have utilized discrete particle tracking method embedded within the underlying Eulerian LES simulation. Open source OpenFOAM and KIVA family codes are used to carry out the multiphase LES calculations. In addition, open source CANTERA is used for chemical kinetics in combustion flows. The multiphase combustion flow simulations involving real world combustor geometries warrant the usage of HPC-SJTU, and have the capability to reveal the detailed thermal-physical-chemical multi-physic phenomena of spray combustion.



## 5 研究与代码优化

除了“管机器、开帐号”这些基础用户服务之外，我们还向国外一流大学的高性能计算中心看齐，将一些研究成果和心得应用到代码优化等高级用户服务中，努力为一流的科学家提供一流的计算服务。

### 5.1 代码优化研究

我们团队的主要研究方向是计算机系统结构及代码优化（Computer Architecture and Code Optimization）。由于  $\pi$  集群的一半的计算能力来自于 NVIDIA GPU 加速卡，为了使用户代码能够在 GPU 以及下一代 Intel Xeon Phi 上获得最佳的性能。为了使用户的代码能在这 2 种计算设备上获得最佳的性能，我们对它们的体系结构进行了深入的研究，熟悉了相应的代码优化手段。我们还发表了一些学术论文，并申请到了科技部 863 的课题。

#### 论文

- James Lin, Shuo Li, Jiaming Zhao, Satoshi Matsuoka. Node-level Memory Access Optimization on Intel Knights Corner. HPC China 2014. Guangzhou China.
- James Lin, Satoshi Matsuoka. OpenACC vs. OpenMP4: the Strong, the Weak, and the Missing to Develop Performance Portable Applications on GPU and Xeon Phi. GPU Technology Conference 2014. San Jose.

## 项目

顾一众，863 项目，高性能计算环境应用服务优化关键技术研究，2014AA01A302，2014-2016。

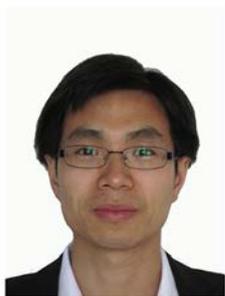
## 5.2 用户代码调优

我们从 2014 年起推出了 Code Modernization, Acceleration, and Scaling (CMAS) 服务，为用户免费调优他们的大规模程序，一方面减少程序的运行时间，提高整机利用率，另一方面能让用户在合理的时间内计算更大规模的问题，获得比之前结果更高的精度。CMAS 具体是指：

- **Modernization**: 针对 CPU 的并行化和向量化的代码优化
- **Acceleration**: 针对 GPU 的移植与优化
- **Scaling**: 针对跨节点的大规模并行化

CMAS 服务最主要的挑战是用户习惯于在合理的时间内获得正确的结果即可，因此不太愿意花时间去配合我们调优代码，而更希望把精力放在解决专业问题上。因此只有通过多次充分沟通，建立信任并落实切实可行的技术方案来解决。物理与天文系的盛政明教授团队和景益鹏教授团队是 CMAS 服务的首批对象。

### 用户证言



高性能计算中心对我们实验室自主开发的粒子模拟程序专门设计了针对上海交通大学  $\pi$  集群系统的优化方案；目前已完成一维程序的优化工作，经优化后程序整体运算速度提高 30% 以上，部分算例可提高 2 倍之多，为我们节省了相当可观的机时费并显著地缩短了模拟的等待时间。

翁苏明

物理与天文系特别研究员，青年千人

# Student Supercomputer Challenge ASC<sup>14</sup>

## 世界大学生超算竞赛

## 6 人才培养与培训

高性能计算人才可分为两种，“做超算”和“用超算”的。中心通过与计算机系联合培养高性能计算方向的学生，以竞赛培养这些学生对高性能计算的兴趣；同时也通过暑期课程、系列培训和专项奖学金等多种方式鼓励更多的学生来用超算。

### 6.1 研究生培养

在校领导和研究生院的支持下，中心与计算机系合作，联合培养高性能计算方向的学生。2014 年委托计算机系招收了 3 名研究生，将毕业 2 名研究生（其中 1 人为泰国留学生）。

### 6.2 竞赛

为了鼓励计算机系学生积极投身高性能计算领域，激发他们的学习兴趣，中心会组织这些学生参加相关竞赛。由中心组织的交大代表队总结了 2013 年首次进入决赛的经验和教训，击败了全球 80 多支参赛队，勇夺世界大学生超算竞赛（ASC14）的总冠军及最有价值的单项奖 e Prize 挑战奖。姜斯宪书记和张杰校长分别发来贺信鼓励队员们。

历年学生竞赛成绩

年份	获得奖项
2012	第 3 届全国 CUDA 编程竞赛 3 等奖
2013	亚洲大学生超算比赛 (ASC13)，首次进入决赛 第 1 届全国 RDMA 编程大赛 3 等奖
2014	<b>世界大学生超算竞赛 (ASC14) 总冠军</b> 第 2 届 Intel 全国并行编程挑战赛 3 等奖 第 2 届全国 RDMA 编程大赛 3 等奖



## 贺 信

文敏华老师、éric Germane 老师并超级计算机竞赛团队：

欣闻你们在刚刚结束的 ASC14 世界大学生超级计算机竞赛总决赛中，从来自全球 82 所高校的代表团队中脱颖而出，以优异的表现获得冠军，并同时获得“e Prize 挑战计算奖”和“应用创新奖”。在此，我谨代表学校党委向你们致以最热烈的祝贺！

当前，超级计算机已经在科研、经济和社会问题的解决中越来越多地发挥出重大作用。你们在这项比赛中取得优异成绩，传承着交大人敢为人先、与日俱进，砥砺创新，勇于突破的优秀品质，也体现出交大人攀登科学技术高峰，推动社会经济发展的不懈追求。感谢两位老师的辛勤指导，感谢同学们在世界大学生竞赛的舞台上展示了交大学子追求卓越的时代风采，为学校赢得了荣誉。

希望你们再接再厉，在未来不断取得佳绩，继续为母校争光添彩。

上海交通大学党委书记：姜斯宪

二〇一四年四月二十八日

上海市东川路800号 邮编：200240 <http://www.sjtu.edu.cn>



OFFICE OF THE PRESIDENT  
800 Dongchuan Road  
Shanghai 200240, China  
Tel: +86-21-34206116  
Fax: +86-21-34206110  
E-mail: [officepresident@sjtu.edu.cn](mailto:officepresident@sjtu.edu.cn)

## 贺 信

文敏华老师、éric Germane 老师并超级计算机竞赛团队：

近日，欣闻你们指导的交大代表队在全球规模最大的世界大学生超级计算机竞赛 ASC14 总决赛中力克来自五大洲的众多参赛劲旅，勇夺总冠军，为中国高校、亚洲高校赢得了至高的荣誉，我谨代表学校并以个人名义向你们及你们指导的团队表示热烈的祝贺！

你们不计名利得失，敢为人先，勇于拼搏，带领上海交通大学代表队攻坚克难，实现了学校在此项竞赛中的新突破。你们向全世界展示了交大师生的智慧和能力，很好地诠释了我校知识探究、能力建设、人格养成“三位一体”的育人理念，极大提升了我校的国际影响力。你们是学校全体师生的骄傲，是交通大学创建世界一流大学的重要力量！

衷心祝愿你们再接再厉，取得更大的成绩！

张杰  
校长、中科院院士  
2014年4月28日

上海市东川路 800 号 邮编：200240 <http://www.sjtu.edu.cn>  
800 Dongchuan Road, Shanghai 200240, China

## 6.3 课程与培训



为了提高交大师生高性能计算的应用水平，普及高性能计算知识，中心邀请了美国高性能计算领域专家李硕开设了暑期小学期课程《高性能计算导论之金融计算》。

此外，从 2010 年开始中心坚持每年举办 6 场以上的 HPC Seminar 系列讲座，主要有 2 种形式：

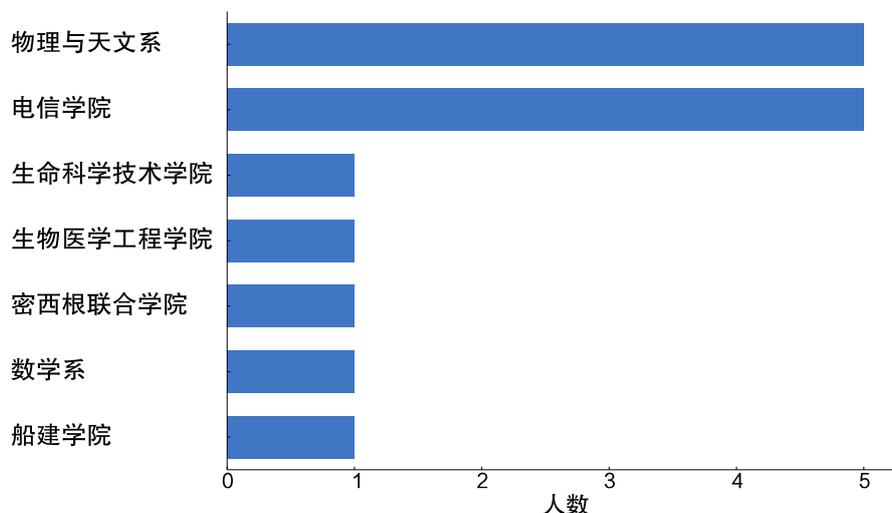
- 邀请海内外著名专家来交大介绍本领域的前沿进展，如 10 月份邀请了百度深度研究院的杰出科学家吴韧博士来介绍深度学习与 GPU 的进展；
- 由中心员工主讲，针对不同学科，介绍  $\pi$  上相应常用软件应用及编程技巧，比如 7 月份在材料学院举行的培训。

2014 年度 HPC Seminar 系列讲座

时间	标题
5 月	AMD HSA 技术研讨会
5 月	ICSC2014 会议高性能计算编程培训
7 月	高性能计算导论之计算金融
7 月	MD on $\pi$ 培训
9 月	RDMA 编程培训
10 月	Machine Learning 与 GPU 讲座

## 6.4 专项奖学金

为鼓励交大的硕士生和博士生在  $\pi$  集群上进行高性能计算相关的研究，在校基金会的支持下，中心于 2012 年与 AMD 公司合作设立了“上海交通大学 AMD 高性能计算奖学金”，AMD 公司每年出资 5 万元对 5 名获奖者进行奖励。由 3 名校内专家、1 名上海超算中心专家及 1 名 AMD 专家担当评委。2012 年首次举行有 4 人获奖，2013 年 6 人，2014 年 5 人。获奖学生的学院分布情况如下：



历年 AMD 奖学金获得者名单

年份	获奖者	院系	导师
2012 年	刘晋陆	物理与天文系	盛政明
	周 洋	船建学院	张景新
	徐 锋	电信学院	李明禄
	卞亚涛	电信学院	刘允才
2013 年	黎飞宇	物理与天文系	盛政明
	李 平	物理与天文系	罗卫东
	王昱焜	生命科学与技术学院	魏冬青、胡丹
	贾 犇	生物医学工程学院	韦朝春
	王一超	电信学院	李明禄
	敬 超	电信学院	李明禄
2014 年	朱文欢	物理与天文系	董 兵
	曾 明	物理与天文系	盛政明
	干则成	数学系	徐振礼
	邵 成	密西根联合学院	鲍 华
	秦 强	电信学院	李明禄





## 7 国际交流与合作

注重结合学校国际化的战略以及中心的自身情况，积极推进与世界一流大学高性能计算中心的实质性合作，与日本东京工业大学 GSIC 中心、澳大利亚 NCI 国家超算中心、新加坡 A\*STAR 超算中心建立了密切的联系，为学校计算相关的科研实力提升提供坚实保障。

### 7.1 剑桥大学高性能计算中心

剑桥大学高性能计算中心（High Performance Computing Service, University of Cambridge）成立于 2007 年左右，目前拥有全英高校排名第一的超级计算机 Wilkes，也是英国第 1 个 CUDA 卓越中心。

双方中心在 GPU 前沿技术研究上有着共同的兴趣，分别于 2014 年 6 月和 9 月进行了互访，落实了合作框架中的工作细节。目前正在稳步推进合作协议的签署。

#### 国际同行寄语



High Performance Computing Service (HPCS) of University of Cambridge is looking forward to formalizing an engagement between SJTU HPC and Cambridge HPCS CUDA Centre of Excellences to advance adoption of GPU computing across several research field, mainly engineering, material science, chemistry and physics. We are excited about this and we are working hard to meet all steps to sign Memorandum of Understanding.

Filippo SPIGA

HPC Application Specialist, High Performance Computing Service,  
University of Cambridge (UK)

## 7.2 普林斯顿大学计算科学与工程研究院

普林斯顿计算科学与工程研究院 (Princeton Institute for Computational Science and Engineering, 以下简称 PICSciE) 成立于 2002 年, 是国际上著名的以计算为中心的跨学科合作的研究所。

PICSciE 的执行理事 William Tang 教授曾多次访问交大, 希望交大能借鉴普林斯顿建立 PICSciE 中的经验与教训, 逐步推动校内以计算为基础的跨学科合作。目前 Tang 教授正在和我们联合积极申请美国 NSF 的 Science Across Virtual Institutes (SAVI) 项目。

## 7.3 CUDA 卓越中心

CUDA 卓越中心是国际上对一所高校在 GPU 计算领域综合实力的最高认可。目前国际上仅有 22 个, 且绝大多数是世界一流名校。英国只有剑桥大学和牛津大学入选。美国的哈佛大学和斯坦福大学亦在内。

上海交大于 2011 年成为全球第 16 个 CUDA 卓越中心。2014 年由于在 GPU 计算的教育和培训领域杰出的贡献获得 CUDA 卓越中心年度成就奖提名。同时, 借助 CUDA 卓越中心这个平台, 我们与一些世界一流大学 (如剑桥) 的高性能计算中心展开了平等互利的交流与合作。

### 国际同行寄语



During the course of my two weeks visit here at SJTU, I have seen and met people here who show significant interest in collaboratively working together to potentially deliver a real center of excellence in this area in a timely way.

Prof. William M. Tang

Executive Committee, Princeton Institute for Computational  
Science & Engineering

## 8 用户反馈与建议

### 8.1 用户反馈

用户	院系	用户反馈
丁国辉	物理与天文系	We are satisfied with the services provided by the HPC center, in SJTU. The compute, storage, and software resource is rather abundant, and the queue time for our compute project is very short. Our experience from HPC is good, so, many thanks for the perfect work of the staffs at HPC center.
胡丹	自然科学研究院	对高性能计算中心的运行比较满意。
徐振礼	自然科学研究院	高性能计算中心提供的用户支持非常有效，反应也很迅速。提交资源申请报告的方式很方便，用户委员会的评审也非常透明，公平，公正。
陈海峰	生命科学技术学院	管理团队比较专业，反映比较迅速。
张大兵	生命科学技术学院	高性能计算中心的支持非常有效，反应非常迅速，服务质量高。
赵立平	生命科学技术学院	作业等待的时间可以接受。高性能计算中心对用户支持迅速有效，邮件沟通顺畅。

用户	院系	用户反馈
金朝晖	材料学院	高性能计算中心提供的用户支持迅速有效。提交资源申请报告的方式非常方便。用户委员会评审的过程透明、合理。交大高算中心值得很多国内外超算中心借鉴。
沈 耀	材料学院	通过邮件，我们在使用过程中遇到的大多数问题都能得到及时反馈和解决。总体上，我们对 $\pi$ 提供的计算资源和服务比较满意。
李 冕	密西根联合学院	Satisfied with the current management of HPC. User support requests are handled fast and in a kindly manner. We are completely satisfied with the staff.
张万斌	化学化工学院	交大超算中心提供的资源非常方便快捷，能大大减少计算时的等待时间。
李伟鹏	航空航天学院	交大的计算资源较为充足，等待时间可以接受，问题反馈迅速，提交报告方便，对目前的计算中心非常满意。

## 8.2 用户建议

用户	院系	用户建议
陈 民	物理与天文系	1. 希望 $\pi$ 增加 CPU 计算节点的核数，减少排队等待时间；2. 希望 $\pi$ 增加图形处理节点，并安装相应的数值图形处理软件，如 IDL, Matlab；3. 希望实现用户已使用计算时间，及剩余时间的网络实时查询及历史查询；4. 希望 $\pi$ 实时显示系统运行情况，如各重大任务使用的计算核数，已经计算时间等；5. 希望高性能计算中心经常举办有关高性能计算的基础培训；6. 希望高性能计算中心与相关实验室合作，实程序 GPU 化服务。
何 峰	物理与天文系	处理数据用的 matlab 程序只能运行 10 分钟左右，极大的限制了工作的灵活性。这使得我们只能把几百 G 的文件先下载到本地机器再数据处理，极为浪费时间。建议允许正常使用 matlab 软件。对某些计算，matlab 的运行效率比 C++ 的要高。处理数据用的 matlab 程序只能运行 11 分钟左右，极大的限制了工作的灵活性。这使得我们只能把几百 G 的文件先下载到本地机器再数据处理，极为浪费时间。建议允许正常使用 matlab 软件。对某些计算，matlab 的运行效率比 C++ 的要高。
陈海峰	生命科学技术学院	计算资源以及存储资源严重不足，运行作业经常出现排队等待时间过长的现象，建议学校进行扩容。

用户	院系	用户建议
李志勇	生命科学技术学院	因项目中涉及到序列拼接, 对内存需求较大 (需要 1T 以上), 目前 HPC fat 节点内存无法满足工作中得需求, 能否增大 fat 节点的数目及内存? HPC 资源分配能否安排调度, 如节假日前后, 经常出现作业过多, 资源不够的问题, 而平时提交的任务却相对较少。
张大兵	生命科学技术学院	目前 $\pi$ 上的计算资源基本能满足计算需要, 但分配还存在一定改进空间。目前最大瓶颈是存储资源, 迫切希望学校能够进一步升级存储资源。每个教师开一个账号的做法希望能尽快改进。理想状况是一个教师开一个组账号, 可以给组内每个学生开设一个用户账号。这样, 一旦发现问题, 可以及时明确到个人。目前的情况是, 发现某个账号有问题, 而这个账号往往是一个课题组共用的, 无法即时明确是哪个学生/老师的操作导致的问题。
赵一雷	生命科学技术学院	Hope for a more convenient way (e.g. a better version of bacct) to look up how much computing resources (both cpu and gpu) have been consumed. And hope for more regular email report. The price of gpu computing is a little high. And the limit for a preferential price (100k card*hour) is also high, which means more than 11% of the whole gpu computing resource on $\pi$ every year. $\pi$ has been shutdown for maintenance many times in the past year. Hope it healthy in the future.

用户	院系	用户建议
孔令体	材料学院	本人前期为加拿大 <b>Sharcnet</b> 的用户，个人认为他们的系统管理有可借鉴之处：1) 用户培训：每年举办多期用户培训，介绍系统使用、程序编译等相关知识；2) 资源使用：所有用户均可免费使用计算资源，但一般用户优先级别较低，申请优先资助课题用户优先级高；3) 用户管理：每个课题组定义一个 <b>group</b> ，下面可为课题组每位成员建立一个账号，所有资源使用统计以 <b>group</b> 为单位进行。
李 冕	密西根联合学院	$\pi$ could have a test queue that limits the computational time (for example, 4 hours, unlimited CPU) for testing purpose. This was the case for the HPC at Purdue University and I found that quite helpful. Up to now, we (Shen group) have been programming and running on a single node single GPU. Hence, we enjoyed the amount of resource allocated to us for our limited examples. However, we are going to need more compute and storage resources in the nearest future. Occasionally job queue time lasts for a long time. We have had an experience of waiting for one whole day, although it rarely occurs. We wonder whether it is possible to have a clear idea of waiting time.
唐克轩	农生学院	对于大型基因组的组装，节点内存资源不足是一重要瓶颈。

上海交通大学  
高性能计算中心年度报告 2014

编写：顾一众 林新华 韦建文 王一超 文敏华

封面设计：栾婧怡

上海交通大学高性能计算中心

地址：上海交通大学闵行校区网络信息中心205

邮编：200240

电话：021-34206060-8204

主页：<http://hpc.sjtu.edu.cn>

邮箱：[hpc@sjtu.edu.cn](mailto:hpc@sjtu.edu.cn)