

上海交通大学 高性能计算中心年度报告 2016



主任寄语



我们的 π 高性能计算机走过了正式服务的第三个年头，就像一个孩子从年幼、成年，逐步步入了中年。我们的服务也从简单一步一步走向成熟，在高性能计算中心和用户的共同努力下，逐步实现了人与人、人与设备、软硬件之间的互相融合与和谐协调，设备运行更稳定，资源利用率更高；高性能计算服务团队为用户提供的深度优化服务取得的显著成效，也充分体现了我校高性能计算中心建设的方向和学校创建世界一流大学的战略目标高度契合。

2016 年，我们按照“用好机器”的既定目标，深化代码优化服务、推广在线自助服务、加强用户培训、更新完善系统软件、大幅扩展存储容量、改进运行环境，使高性能计算中心的工作走上了新的台阶。与 2015 年相比，2016 年提供的 CPU 年机时数增长了 7%，年平均利用率达到了 70%；GPU 年机时数增长了 10%，年平均利用率达到了 63%，设备利用率处于国内外同行较好水平，保持了较高的用户服务满意度。我们对校内若干高水平科研团队的精准贴身服务，得到了包括陈赛娟院士、张杰院士、景益鹏院士、盛政明教授、刘洪教授在内的多个科研团队的认可。经过这短短三、四年的努力，上海交通大学高性能计算中心的建设发展之路，受到了全国高校同行的高度关注，得到了广泛的好评。我们的团队也在实践中不断成长，服务和研究能力不断提高，不仅得到了广大用户的信任和支持，也正逐步成为国家高性能计算领域中的一支年轻力量。通过国际学术交流，也提升了上海交通大学在国际高性能计算领域的影响力。我们相信在学校的支持和全体用户的呵护下，我校高性能计算的计算能力、存储能力和服务能力一定会得到不断地提升，为学校创建世界一流大学做出更大的贡献。

上海交通大学高性能计算中心主任
二〇一七年五月一日

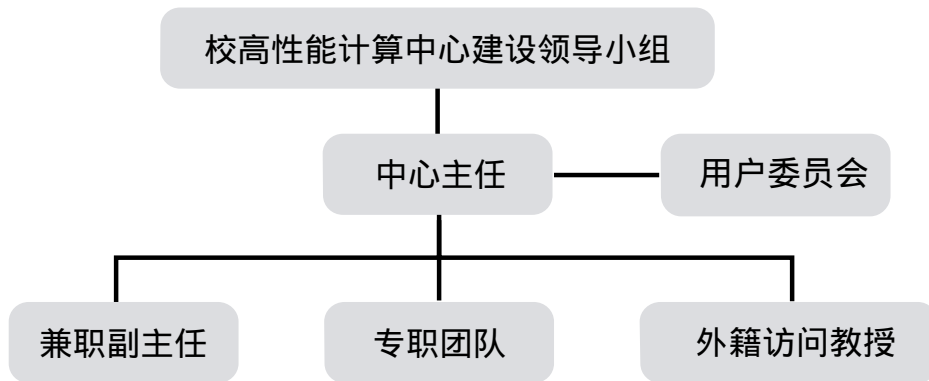


目 录

1	组织架构与人员	1
2	大事记	3
3	运维与资源分配	5
4	用户与成果统计	13
5	代码优化与研究	37
6	人才培养与培训	43
7	国际交流与合作	47
8	用户反馈与建议	51



1 组织架构与人员



中心主任顾一众全面负责中心的各项工作。**专职团队**负责 π 集群的运维、用户支持和培训、以及用户代码优化等工作，共 4 名员工：

林新华	副主任	在职博士	主持日常事务，负责国际交流和合作
文敏华	计算专员	交大硕士	负责科学代码优化，指导学生竞赛
韦建文	计算专员	交大硕士	负责系统运维，负责深度学习代码优化
王一超	计算专员	交大硕士	负责用户培训，负责 GPU 代码优化

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	网络信息中心	教授，书记
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 皓	材料学院	教授
林新华	高性能计算中心	副主任

外籍访问教授负责协助中心提升科研实力和国际影响力，共 2 位：

Prof. William Tang	美国 Princeton 大学教授、美籍
Dr. Simon See	NVIDIA 亚太区技术总监，新加坡籍

1月



3月



4月



6月



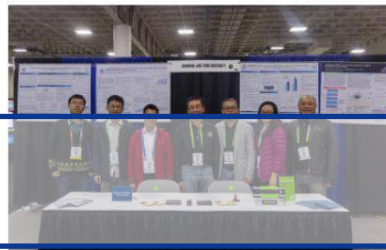
7月



10月



11月



2 大事记

1月

4日，中心发布 2015 年度 π 用户机时奖励结果，此次奖励基于上一年度对所有用户的成果统计。

7日，中心举行了 2015 年第一次 π 超算用户培训，中心员工韦建文和王一超现场讲授超算使用知识，并进行现场动手实验教学。

2月

寒假期间，由于空调制冷系统故障，集群停机约一个月。

4月

18-22日，由中心计算专员文敏华指导的上海交大本科生代表队，赴湖北武汉参加 ASC16 世界大学生超算竞赛决赛，在 16 支决赛队伍中脱颖而出，获得亚军。

5月

9日，《高性能计算中心 2015 年度报告》正式发布，这是中心成立以来的第 2 份年度报告。

13-15日，中心与 Intel 联合举办了第 5 届 Intel-SJTU 高性能计算研讨会 (ITOC16)。本次会议邀请了美国普林斯顿大学、西安电子科大、上海超算、中科大、南大、科大讯飞公司等 20 余家单位的 50 多位专家参与，该会议在原有华东地区的基础上扩大了面向范围，进一步提升了影响力。

6月

23日，由中心计算专员文敏华指导的上海交大本科生代表队在德国举行的 ISC16 国际大学生超算竞赛中再创佳绩，荣获季军。这是我校代表队第 2 次参加 ISC 的比赛，首次进入三甲。

暑假期间， π 超算集群进行系统维护，SLURM 作业调度系统、与之配合的在线计费系统和 15 个配备 NVIDIA K80 GPU 的全新计算节点正式上线。此次升级提高了 π 集群的易用性和计算能力。

7 月

20 日，第 4 届上海交通大学“AMD 高性能计算奖学金”颁奖仪式在网络信息中心贵宾厅隆重举行，高性能计算中心主任顾一众、发展基金会副秘书长黄金贤、AMD 公司中国研发中心技术总监张雷等嘉宾莅临颁奖。

24 日，由英特尔公司主办、高性能计算中心协办的 HPC Seminar 系列活动之“英特尔至强融核培训交流会”顺利举行，该活动吸引了 40 余位高校师生参加，影响范围涵盖整个华东地区。

交大物理系团队等离子体强光调制器研究获重要进展，研究成果发表于 Nature Communications，该研究的数值计算在高性能计算中心的 π 超级计算机上完成。

9 月

24 日，新的一级存储系统正式上线，提供约 4PB 的聚合存储容量。

10 月

27-29 日，赴西安参加 HPC China 2016。中心员工和所指导的学生共发表学术论文 5 篇，其中中心员工王一超发表的论文《太湖之光上基于神威 OpenACC 的 GTC-P 移植与优化研究》获大会最佳论文奖。中心指导的学生队伍参加 PAC 并行应用挑战赛，获性能优化组铜奖。

11 月


4 日，发布修订版的高性能计算中心管理办法。本次修订主要改进了存储相关的费用分担标准，以及欠费账户的处理流程。

14-17 日，赴美国盐湖城参加 SC16 大会，作为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。

25-26 日，中心组织的第三届 π 用户大会顺利举行。19 位校内 π 集群用户及学校相关职能部门领导参加进行交流，共同交流各自使用 π 超算进行科研工作的经验和体会，并对学校下一轮高性能计算的发展进行探讨。

12 月

物理系与天文学院的景益鹏院士和杨小虎教授团队，在高性能计算中心支撑下，成功发表国际学术期刊论文《An Empirical Model to Form and Evolve Galaxies in Dark Matter Halos》，影响因子为 1.29。中心员工韦建文为论文共同作者之一。



3 运维与资源分配

3.1 π 集群概述

π 的峰值计算能力为 367TFlops，其中 65% 的计算能力来自 GPU。2013 年 6 月建成时世界排名为 158，目前为国内高校第 6，上海地区第 2。取名为 π 有 4 层含义：

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

π 的配置如下表所示。为了满足不同应用的需要，并在建成后陆续增加新的计算资源，目前的计算结点有 6 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	110TFLOPS
大内存节点	20	2 颗 Intel Xeon E5-2670 CPU，256GB 内存	7TFLOPS
GPU K20 节点	46	2 片 NVIDIA K20 GPU 加速卡，64GB 内存	123TFLOPS
GPU K40 节点	5	2 片 NVIDIA K40 GPU 加速卡，64GB 内存	16TFLOPS
GPU K80 节点	15	2 片 NVIDIA K80 GPU 加速卡，96GB 内存	69TFLOPS
GPU P100 节点	4	2 片 NVIDIA P100 GPU 加速卡，64GB 内存	42TFLOPS

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¹，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²，也是国内唯一；
- 建立 π 用户微信群，及时通告 π 的重要运维情况。
- 通过邮件列表对用户进行日常技术支持，一般问题通常都能在 2 小时内解决，2016 年全年累计回复邮件 6650 封，平均每天 18 封。

系统利用率

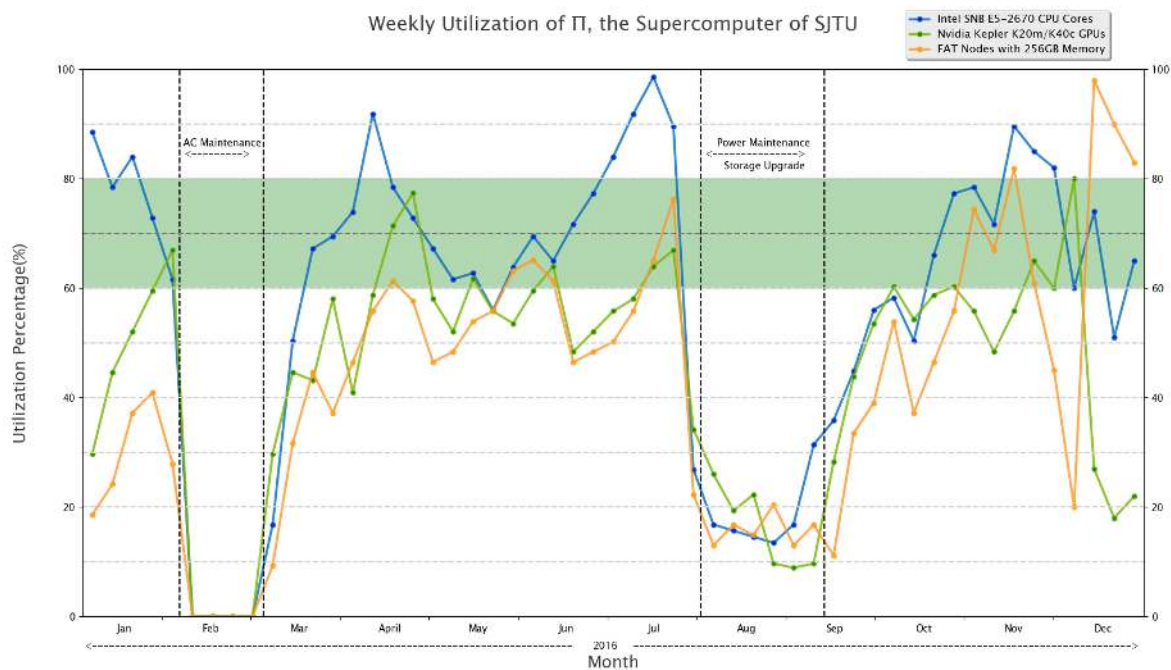


图 2016 年 1 月至 12 月的 π 集群系统利用率，其中蓝线表示 CPU 节点利用率，绿线表示 GPU 节点利用率，黄线表示大内存节点利用率。

- 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， π 集群

¹<https://pi.sjtu.edu.cn/ganglia>

²<https://pi.sjtu.edu.cn/log>

的系统利用率在 2016 年都保持在较理想的区间。与 2015 年相比，2016 年提供的 CPU 年机时数增长了 7%，年平均利用率达到了 70%；GPU 年机时数增长了 10%，年平均利用率达到了 63%，设备利用率处于国内外同行较好水平。

- 2016 年寒假期间机器利用率显著下降。主要是因为 2 月极寒天气导致空调制冷管道冻裂，需全机停机做空调维修。3 月空调维修结束后，利用率迅速回升到健康范围。
- 2016 年暑假因为因为供电系统调整导致 π 集群下线，加上新旧存储系统交替数据负载较高而计算负载较轻，利用率骤降。
- 大内存的结点数量少（不到整机的 5%），随着生命科学类大内存需求应用的增加，大内存节点利用率与 CPU 节点持平，年平均利用率提升到 65%。

计算量最大的项目、应用与院系

表 2016 年度 π 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	Mechanism of membrane active antimicrobial peptides	208 万核小时
物理与天文系	孙 弘	纳米结构对超硬材料强度激增效应新机制的第一性原理计算与探索	146 万核小时
材料学院	金朝晖	面向先进镁合金制造的多尺度模拟及高通量计算	145 万核小时
航空航天学院	刘 洪	仿鲨鱼皮微结构的减阻机理研究	136 万核小时
物理与天文系	罗卫东	拓扑绝缘体电子结构的磁性调控	133 万核小时
物理与天文系	何 峰	灰秒脉冲的产生	116 万核小时
密西根联合学院	鲍 华	Atomistic simulation on heat conduction at nanoscale	100 万核小时
生命科学技术学院	陈海峰	microRNA 翻译上调的分子机制及实验验证	91 万核小时
物理与天文系	盛政明	基于激光尾波场加速的可调谐超短 X 射线脉冲源的研究	87 万核小时
船建学院	万德成	船舶与海洋工程数值水池研究与开发	79 万核小时

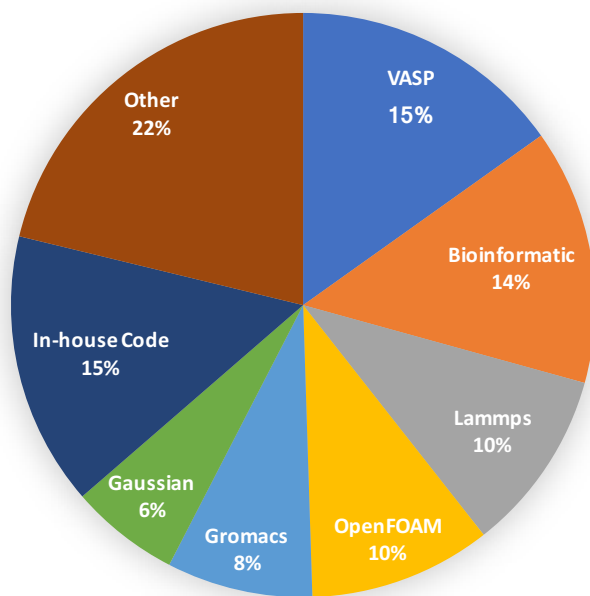


图 使用 CPU 最多的应用

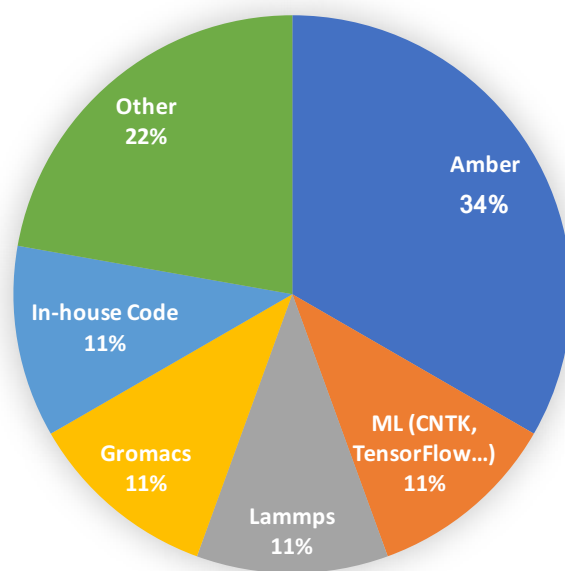


图 使用 GPU 最多的应用

3.3 公平分配资源

分配原则

π 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，我们遵循了以下两项原则：

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

为保证资源能被有效利用，我们采用了费用分担的方法，用户可以使用以下两种方式申请 π 的计算资源：

- 通过用户委员会申请。用户委员会负责分配 π 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截止时间或是申请未被接受，可以选择这种方式。

费用分担标准

2016 年 11 月，我们对原有费用分担标准进行了修订，具体如下表：

资源类型	CPU 节点	胖节点	GPU 节点	K40 节点	K80 节点
资源单价	16 点/节点/小时	32 点/节点/小时	20 点/节点/小时	20 点/节点/小时	40 点/节点/小时

用户类型		校内标准用户	获得用户委员会奖励的用户	校外学术用户	非学术用户
每 1 万点价格 (单位：万元)	单次充值 2.5 万元以下	0.09	0.06	0.18	0.36
	单次充值 2.5 万元(含)以上	0.08	0.05	0.16	0.32

机时奖励

2016 年，根据成果奖励的原则，我们公布了 π 用户机时奖励规章制度（试行），具体如下：

- 学校列表中 A 类论文每篇奖励 6000 点数（1 点数 = 1CPU 核小时），B 类论文每篇奖励 3000 点数，其他不在列表中的论文每篇奖励 1000 点数。
- 每个课题组可奖励多篇论文，可累加，不设上项。如一篇论文有多个作者，则只能奖励一个课题组。
- 论文发表时间为 2016 年 4 月 1 日到 2017 年 3 月 31 日之间。
- 论文的研究应全部或部分在 π 上计算，并在论文中注明。
- 高性能计算中心保留对未尽事宜的解释权。

表 2016 年 π 用户机时奖励结果统计

院系	PI	发表论文			奖励机时 (万点)
		A 类	B 类	C 类	
自然科学研究院	徐振礼	3	1	3	2.4
物理与天文学院	盛政明	3	3		2.7
物理与天文学院	何峰	1	2	1	1.3
物理与天文学院	赵玉民		2		0.6
物理与天文学院	杨小虎			4	0.4
物理与天文学院	孙弘	1			0.6
物理与天文学院	邢向军	1			0.6
生命科学学院	赵一雷		1	2	0.5
生命科学学院	陈海峰	4		3	2.7
生命科学学院	韦朝春	1	1		0.9
生命科学学院	赵立平		1		0.3
材料学院	沈耀	2		3	1.5
材料学院	孔令体		2	1	0.7
航空航天学院	李伟鹏		2		0.6
船建学院	刘明远		1		0.3
化学化工学院	罗正鸿	1		3	0.9
化学化工学院	孙淮			3	0.3
化学化工学院	张万斌		2		0.6
化学化工学院	周永丰	1	3	1	1.6
环境学院	龙明策	1			0.6
环境学院	蔡伟民	1			0.6
农生学院	张利达	2			1.2
合计		24	21	24	23.5

[†] 密西根学院的用户由于另有合作协议，不在此次奖励名单中。

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	2016 年 6 月	船舶海洋与建筑工程学院	万德成	船舶与海洋工程数值水池研究与开发	220 万核小时
2	2016 年 6 月	航空航天学院	刘 洪	高超声速飞行器多尺度多物理运输问题的计算方法	110 万核小时
3	2016 年 6 月	化学化工学院	张万斌	DFT study of the solvent effects for the control of selectivity in transition metal-catalyzed reactions	40 万核小时
4	2016 年 6 月	生命科学技术学院	陈海峰	残基特异性的天然无规蛋白质分子力场的开发与测试研究	50 万核小时 GPU
5	2016 年 6 月	物理与天文系	何 峰	阿秒激光物理和量子相干控制	60 万核小时
6	2016 年 6 月	生命科学技术学院	赵立平	探究肠道菌群在 2 型糖尿病治疗中的潜在作用及建立以肠道菌群为靶点的 2 型糖尿病治疗方案	25 万核小时
7	2016 年 6 月	瑞金医院	陈 竺 王侃侃	基于亚克隆和克隆演化分析的急性髓系白血病分子机制研究	200 万核小时
8	2016 年 6 月	材料科学与工程学院	金朝晖	轻质高强镁合金“溶质原子-位错-界面交互作用”动力学参数的第一性原理 NEB 计算	200 万核小时
9	2016 年 12 月	生命科学技术学院	韦朝春	3000 个水稻基因组的泛基因组学分析	26 万 CPU 核小时
10	2016 年 12 月	物理与天文学院	陈 民 翁 苏 明 盛政明	激光等离子体粒子加速、辐射及不稳定性的大规模数值模拟	300 万核小时
11	2016 年 12 月	环境科学与工程学院	程 真	耦合在线观测的细颗粒物组分源追踪解析优化技术研究	10 万核小时
12	2016 年 12 月	生命科学技术学院	吕 晖	肿瘤影像标志物的识别和关联分析研究	40 万核小时
13	2016 年 12 月	船舶海洋与建筑工程学院	万德成	船舶与海洋工程数值水池研究与开发	150 万核小时
14	2016 年 12 月	瑞金医院	陈赛娟 黄金艳	急性淋巴细胞白血病致病分子机制研究	200 万核小时
15	2016 年 12 月	生命科学技术学院	赵一雷	计算化学生物学: 基于结构计算的硫酯酶分子设计	200 万核小时
16	2016 年 12 月	化学化工学院	孙 淮	软物质材料物理化学性质的高通量分子模拟计算	10 万核小时
17	2016 年 12 月	化学化工学院	周永丰	两亲性超支化多臂共聚物在稀溶液中的自组装行为研究	60 万核小时
18	2016 年 12 月	电院计算机系	俞 凯	基于深度神经网络的声学模型研究	1.5 万核小时 CPU, 4 万卡小时 GPU



图 2016 年院系机时使用分布图

4 用户与成果统计

4.1 用户

截止至 2016 年底，使用 π 的课题组总计 140 个，来自校内的 16 个院系，覆盖了交大理工生医学科的所有院系。据不完全统计，用户获得的学术称号如下（排名不分前后）：

学术称号	获得者	院系
两院院士 (2 人)	陈赛娟	医学院
	景益鹏	物理与天文学院
长江学者 (5 人)	黄 震	机械与动力工程学院
	盛政明	物理与天文学院
	唐克轩	农业与生物学院
	杨小虎	物理与天文学院
	张大兵	生命科学技术学院
杰出青年 (8 人)	黄 震	机械与动力工程学院
	盛政明	物理与天文学院
	景益鹏	物理与天文学院
	杨小虎	物理与天文学院
	赵玉民	物理与天文学院
	张大兵	生命科学技术学院
	周永丰	化学化工学院
	罗正鸿	化学化工学院
青年千人 (5 人)	陈 民	物理与天文学院
	Jakob	自然科学研究院
	沈泳星	密西根联合学院
	翁苏明	物理与天文学院
美国物理学会会士 (2 人)	俞 凯	电信学院
	盛政明	物理与天文学院
美国微生物科学院院士 (1 人)	齐 飞	机械与动力工程学院
	赵立平	生命科学技术学院
美国力学学会会士 (1 人)	陈谦斌	密西根联合学院

4.2 论文

表 2016 年基于 π 完成的论文统计

院系	已发表论文数
生命科学技术学院	12
物理与天文学院	19
化学与化工学院	14
自然科学研究院	7
密西根联合学院	5
环境科学与工程学院	2
船舶海洋与建筑工程学院	1
农业与生物学院	2
航空航天学院	2
材料科学与工程学院	8
合计	72

† 数据来自用户填写的反馈表。

物理与天文学院

- [1] Guo-Bo Zhang et al. "Acceleration and evolution of a hollow electron beam in wakefields driven by a Laguerre-Gaussian laser pulse". In: *Physics of Plasmas* (*IF=2.142*) 23.3 (2016), p. 033114.
- [2] Guo-Bo Zhang et al. "Acceleration of on-axis and ring-shaped electron beams in wakefields driven by Laguerre-Gaussian pulses". In: *Journal of Applied Physics* (*IF=2.183*) 119.10 (2016), p. 103101.
- [3] Feng Shi et al. "Mapping the Real-space Distributions of Galaxies in SDSS DR7. I. Two-point Correlation Functions". In: *The Astrophysical Journal* 833.2 (2016), p. 241.
- [4] Shi-Jie Li et al. "An empirical model to form and evolve galaxies in dark matter halos". In: *Research in Astronomy and Astrophysics* 16.8 (2016), p. 013.
- [5] Yi Lu et al. "Galaxy groups in the 2MASS Redshift Survey". In: *The Astrophysical Journal* 832.1 (2016), p. 39.
- [6] Lu-Le Yu et al. "Plasma optical modulators for intense lasers". In: *Nature communications* 7 (2016).

- [7] Min Chen et al. “Tunable synchrotron-like radiation from centimeter scale plasma channels”. In: *Light: Science & Applications* 5.1 (2016), e16015.
- [8] J Luo et al. “Dynamics of boundary layer electrons around a laser wakefield bubble”. In: *Physics of Plasmas* 23.10 (2016), p. 103112.
- [9] M Liu et al. “Collisionless electrostatic shock formation and ion acceleration in intense laser interactions with near critical density plasmas”. In: *Physics of Plasmas* 23.11 (2016), p. 113103.
- [10] Lu-Ning Li and Feng He. “Ionization and high harmonic generation of two-dimensional quasiperiodic structures in arbitrarily polarized strong laser fields”. In: *JOSA B* 34.1 (2017), pp. 2707–2714.
- [11] Ji Luo et al. “A compact tunable polarized X-ray source based on laser-plasma helical undulators”. In: *Scientific reports* 6 (2016).
- [12] Zhi-Chao Li, Agnieszka Jaron-Becker, and Feng He. “Superelastic rescattering in single ionization of helium in strong laser fields”. In: *Physical Review A* 94.4 (2016), p. 043406.
- [13] Sen Cui, Pei-Lun He, and Feng He. “Ionization of hydrogen atoms in attosecond pulse trains and strong infrared laser pulses”. In: *Physical Review A* 94.5 (2016), p. 053401.
- [14] Pei-Lun He, Camilo Ruiz, and Feng He. “Carrier-Envelope-Phase Characterization for an Isolated Attosecond Pulse by Angular Streaking”. In: *Physical review letters* 116.20 (2016), p. 203601.
- [15] Yihao Liang, Xiangjun Xing, and Yaohang Li. “A GPU-based large-scale Monte Carlo simulation method for systems with long-range interactions”. In: *Journal of Computational Physics* 338 (2017), pp. 252–268.
- [16] Bing Li, Hong Sun, and Changfeng Chen. “Extreme Mechanics of Probing the Ultimate Strength of Nanotwinned Diamond”. In: *Physical Review Letters* 117.11 (2016), p. 116103.
- [17] Huiyuan Wang et al. “Elucid—exploring the local universe with reconstructed initial density field. III. constrained simulation in the SDSS volume”. In: *The Astrophysical Journal* 831.2 (2016), p. 164.

- [18] YY Cheng, YM Zhao, and A Arima. “Nucleon-pair states of even-even $N=82$ isotones”. In: *Physical Review C* 94.2 (2016), p. 024307.
- [19] Y. Y. Cheng et al. “Nucleon-pair states of even-even Sn isotopes based on realistic effective interactions”. In: *Phys.rev.c* 94.2 (2016).

自然科学研究院

- [20] Pei Liu, Manman Ma, and Zhenli Xu. “Understanding depletion induced like-charge attraction from self-consistent field model”. In: *Physics* (2016).
- [21] Manman Ma et al. “Microscopic insights into the efficiency of capacitive mixing process”. In: *AIChE Journal* (2017).
- [22] Manman Ma, Zecheng Gan, and Zhenli Xu. “Ion Structure Near a Core-Shell Dielectric Nanoparticle”. In: *Physical Review Letters* 118.7 (2017), p. 076102.
- [23] Pei Liu, Chun Liu, and Zhenli Xu. “Generalized Shockley–Ramo theorem in electrolytes”. In: *Communications in Mathematical Sciences* 15.2 (2017), pp. 555–564.
- [24] Zecheng Gan et al. “A Hybrid Method for Systems of Closely Spaced Dielectric Spheres and Ions”. In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 38.3 (2016), B375–B395.
- [25] Manman Ma, Shuangliang Zhao, and Zhenli Xu. “Investigation of dielectric decrement and correlation effects on electric double-layer capacitance by self-consistent field model”. In: *Communications in Computational Physics* 20.02 (2016), pp. 441–458.
- [26] Xiaofei Guan et al. “Hybrid Monte Carlo and continuum modeling of electrolytes with concentration-induced dielectric variations”. In: *Physical Review E* 94.5 (2016), p. 053312.

密西根联合学院

- [27] Han Xie et al. “Large Tunability of Lattice Thermal Conductivity of Monolayer Silicene via Mechanical Strain”. In: *Physical Review B* 93.7 (2016), p. 075404.
- [28] Cheng Shao and Hua Bao. “Thermal transport in bismuth telluride quintuple layer: mode-resolved phonon properties and substrate effects”. In: *Scientific Reports* 6 (2016), p. 27492.

- [29] Vahid Ziaei-Rad and Yongxing Shen. “Massive parallelization of the phase field formulation for crack propagation with time adaptivity”. In: *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 312 (2016), pp. 224–253.
- [30] Xiaobin Xie et al. “Accelerating Separable Footprint (SF) Forward and Back Projection on GPU”. In: *SPIE Medical Imaging*. International Society for Optics and Photonics. 2017, 101322S–101322S.
- [31] Qingyuan Rong, Cheng Shao, and Hua Bao. “Molecular dynamics study of the interfacial thermal conductance of multi-walled carbon nanotubes and van der Waals force induced deformation”. In: *Journal of Applied Physics* 121.5 (2017), p. 054302.

生命科学技术学院

- [32] Chen Sun et al. “RPAN: rice pan-genome browser for 3000 rice genomes”. In: *Nucleic Acids Research* (2016), gkw958.
- [33] Xi Ren et al. “Characterization of protein-conjugating kinetics based on localized surface plasmon resonance of the gold nanoparticle”. In: *Spectroscopy Letters* 49.6 (2016), pp. 434–443.
- [34] Xiong-Ping Chen et al. “Theoretical Studies on the Mechanism of Thioesterase-Catalyzed Macrocyclization in Erythromycin Biosynthesis”. In: *ACS Catalysis* 6.7 (2016), pp. 4369–4378.
- [35] 马鑫 and 赵一雷. “小胖威利综合征和天使综合征细胞株培养液的代谢组学差异分析”. In: *生命科学仪器* 14.5 (2016), pp. 42–46.
- [36] Jinmai Zhang et al. “Synergistic modification induced specific recognition between histone and TRIM24 via fluctuation correlation network analysis”. In: *Scientific reports* 6 (2016).
- [37] Wei Wang et al. “Dynamics Correlation Network for Allosteric Switching of PreQ1 Riboswitch”. In: *Scientific Reports* 6 (2016).
- [38] Jingxu Yang et al. “Synergistic Allosteric Mechanism of FBP and Serine for Pyruvate Kinase M2 via Dynamics Fluctuation Network Analysis”. In: *Journal of chemical information and modeling* 56.6 (2016), p. 1184.

- [39] Tianle Qian et al. “Crystal Structure of StnA for the Biosynthesis of Antitumor Drug Streptonigrin Reveals a Unique Substrate Binding Mode”. In: *Scientific Reports* 7 (2017), p. 40254.
- [40] Mueed ur Rahman et al. “Allosteric mechanism of cyclopropylindolobenzazepine inhibitors for HCV NS5B RdRp via dynamic correlation network analysis”. In: *Molecular BioSystems* 12.11 (2016), pp. 3280–3293.
- [41] Dong Song et al. “ff14IDPs force field improving the conformation sampling of intrinsically disordered proteins”. In: *Chemical biology & drug design* 89.1 (2017), pp. 5–15.
- [42] Jin-Mai Zhang et al. “Allosteric pathways in tetrahydrofolate sensing riboswitch with dynamics correlation network”. In: *Molecular BioSystems* 13.1 (2017), pp. 156–164.
- [43] Guojun Wu et al. “Genomic Microdiversity of *Bifidobacterium pseudocatenuatum* Underlying Differential Strain-Level Responses to Dietary Carbohydrate Intervention”. In: *mBio* 8.1 (2017), e02348–16.

船舶海洋与建筑工程学院

- [44] Xinliang Tian et al. “Flow around an oscillating circular disk at low to moderate Reynolds numbers”. In: *Journal of Fluid Mechanics* 812 (2017), pp. 1119–1145.

农业与生物学院

- [45] Shiwei Liu et al. “A computational interactome for prioritizing genes associated with complex agronomic traits in rice”. In: *The Plant Journal* (2017).
- [46] Fangyuan Zhang et al. “Genome-Wide Inference of Protein-Protein Interaction Networks Identifies Crosstalk in Abscisic Acid Signaling”. In: *Plant physiology* 171.2 (2016), pp. 1511–1522.

化学化工学院

- [47] Fenglei Cao, Joshua D Deetz, and Huai Sun. “A Free Energy-Based Coarse-Grained Force Field for Binary Mixtures of Hydrocarbons, Nitrogen, Oxygen, and Carbon Dioxide”. In: *Journal of Chemical Information and Modeling* (2017).

- [48] Yan Xiang et al. "Reaction Mechanisms of the Initial Oligomerization of Aluminum phosphate". In: *The Journal of Physical Chemistry A* 120.18 (2016), pp. 2902–2910.
- [49] Fenglei Cao, Zhifeng Jing, and Huai Sun. "Predicting the adsorption of n-perfluorohexane (n-C6F14) on BAM-P109 activated carbon using an ab initio force field". In: *Adsorption Science & Technology* 34.1 (2016), pp. 110–122.
- [50] Mao Quan et al. "Ni (ii)-catalyzed asymmetric addition of arylboronic acids to cyclic imines". In: *Chemical Communications* 53.3 (2017), pp. 609–612.
- [51] Jun-Kang Guo, Yin-Ning Zhou, and Zheng-Hong Luo. "Kinetic insights into the iron-based electrochemically mediated atom transfer radical polymerization of methyl methacrylate". In: *Macromolecules* 49.11 (2016), pp. 4038–4046.
- [52] Xiao-Fei Liang et al. "CFD-PBM approach with modified drag model for the gas-liquid flow in a bubble column". In: *Chemical Engineering Research and Design* 112 (2016), pp. 88–102.
- [53] Li-Tao Zhu, Mao Ye, Zheng-Hong Luo, et al. "Application of filtered model for reacting gas-solid flows and optimization in a large-scale methanol-to-olefin fluidized bed reactor". In: *Ind. Eng. Chem. Res* 55 (2016), pp. 11887–11899.
- [54] Li-Tao Zhu et al. "Effect of Particle Polydispersity on Flow and Reaction Behaviors of Methanol to Olefins Fluidized Bed Reactors". In: *Industrial & Engineering Chemistry Research* (2017).
- [55] Chunyang Yu et al. "Computer Simulation Studies on the pH-Responsive Self-assembly of Amphiphilic Carboxy-Terminated Polyester Dendrimers in Aqueous Solution". In: *Langmuir* (2016).
- [56] Chunyang Yu et al. "Computer simulation studies of the influence of side alkyl chain on glass transition behavior of carbazole trimer". In: *Science China Chemistry* 60.3 (2017), pp. 377–384.
- [57] Chunyang Yu et al. "HBP Builder: A Tool to Generate Hyperbranched Polymers and Hyperbranched Multi-Arm Copolymers for Coarse-grained and Fully Atomistic Molecular Simulations". In: *Scientific reports* 6 (2016).

- [58] Yuan Ma et al. "Cancer Theranostic Nanoparticles Self-Assembled from Amphiphilic Small Molecules with Equilibrium Shift-Induced Renal Clearance". In: *Theranostics* 6.10 (2016), p. 1703.
- [59] Mo Wang et al. "Direct enantioselective C-acylation for the construction of a quaternary stereocenter catalyzed by a chiral bicyclic imidazole". In: *Chemical Communications* (2017).
- [60] Chunyang Yu et al. "Molecular dynamics simulation studies of hyperbranched polyglycerols and their encapsulation behaviors of small drug molecules". In: *Physical Chemistry Chemical Physics* 18.32 (2016), pp. 22446–22457.

航空航天大学学院

- [61] Weipeng Li and Hong Liu. "Noise Generation in Flow over a Full-Span Trailing-Edge Flap". In: *AIAA Journal* (2016), pp. 1–11.
- [62] Yuxuan Zhang, Xinming Wu, and Weipeng Li. "Direct numerical simulations of tonal noise generation for a two dimensional airfoil at low and moderate Reynolds numbers". In: *46th AIAA Fluid Dynamics Conference*. 2016, p. 3630.

环境科学与工程学院

- [63] Haodong Wu et al. "Sulfur Dioxide Capture by Heterogeneous Oxidation on Hydroxylated Manganese Dioxide". In: *Environmental science & technology* 50.11 (2016), pp. 5809–5816.
- [64] Mingce Long et al. "Efficient visible light photocatalytic heterostructure of non-stoichiometric bismuth oxyiodide and iodine intercalated $\text{Bi}_2\text{O}_2\text{CO}_3$ ". In: *Applied Catalysis B: Environmental* 184 (2016), pp. 20–27.

材料科学与工程学院

- [65] Guisen Liu et al. "Peierls stress in face-centered-cubic metals predicted from an improved semi-discrete variation Peierls-Nabarro model". In: *Scripta Materialia* 120 (2016), pp. 94–97.
- [66] Guisen Liu et al. "Atomically informed nonlocal semi-discrete variational Peierls-Nabarro model for planar core dislocations". In: *Scientific Reports* 7 (2017).

- [67] Guisen Liu et al. "Quasi-periodic variation of Peierls stress of dislocations in face-centered-cubic metals". In: *International Journal of Plasticity* 90 (2017), pp. 156–166.
- [68] Guisen Liu et al. "Improvement of nonlocal Peierls-Nabarro models". In: *Computational Materials Science* 131 (2017), pp. 69–77.
- [69] Haiting Liu et al. "Grain Size Dependence of Uniform Elongation in Single-Phase FCC/BCC Metals". In: *Journal of Materials Engineering and Performance* 25.9 (2016), pp. 3599–3605.
- [70] C Qi et al. "Solid-liquid interfacial free energy and its anisotropy in the Cu-Ni binary system investigated by molecular dynamics simulations". In: *Journal of Alloys and Compounds* 708 (2017), pp. 1073–1080.
- [71] C Qi et al. "Atomistic characterization of solid-liquid interfaces in the Cu-Ni binary alloy system". In: *Computational Materials Science* 125 (2016), pp. 72–81.
- [72] GJ Yang et al. "Size effects in Cu 50 Zr 50 metallic glass films revealed by molecular dynamics simulations". In: *Journal of Alloys and Compounds* 688 (2016), pp. 88–95.

专家寄语

The Pi cluster has made a great impact on the quality and scope of computational science and engineering research in SJTU. Since 2013, over 100 scientific publications in top international journals have resulted from the support of SJTU HPC.

蔡伟

用户委员会主任、自然科学研究院讲席教授

4.3 项目

表 2016 年基于 π 正在进行的项目统计

院系	973	基金委	其他	小计
物理与天文学院	2	8	3	13
自然科学研究院	0	1	1	2
生命科学技术学院	1	6	5	12
化学化工学院	1	5	1	7
密歇根联合学院	0	3	4	6
船舶海洋与建筑工程学院	0	2	0	2
环境科学与工程学院	0	1	1	2
合计	4	26	15	45

† 数据来自用户填写的反馈表。

物理与天文学院

1. 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”。
2. 盛政明，国家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”。
3. 陈民，国家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”。
4. 翁苏明，国家自然科学基金面上项目，“激光驱动的无碰撞冲击波产生及其离子加速”。
5. 赵玉民，国家自然科学基金，NO.11225524。
6. 赵玉民，国家自然科学基金，NO.11505113。
7. 赵玉民，国家自然科学基金，NO.11675101。
8. 赵玉民，973 项目，NO.2013CB834401。
9. 赵玉民，上海市优秀学术/技术带头人，NO.16XD1401600。
10. 赵玉民，上海市重点实验室项目，NO.11DZ2260700。
11. 赵玉民，中国博士后科学基金，NO.2015M580319。
12. 何峰，国家自然科学基金面上基金，11574205，“超短圆偏振激光作用下的氢分子离子的超快动力学过程”，2016/01-2019/12，74.4 万元，在研，主持。
13. 何峰，国家自然科学基金优秀青年基金，11322438，“超快激光物理”，2014/01-2016/12，100 万元，已结题，主持。

自然科学研究院

14. 徐振礼, 国家自然科学基金, NO.11571236, “Analysis and computation of charge dynamics equations with many-body effects”, 1/2016-12/2019 (含多体效应的电荷输运方程的分析和计算)。
15. 徐振礼, Med-Engineering Interdisciplinary Research, Shanghai Jiao Tong University, Co-PI, 1/2015-12/2017. (医工交叉研究)。

生命科学技术学院

16. 李志勇, 韦朝春, 973 项目“南海珊瑚礁对多次度热带海洋环境变化的响应、记录与适应对策研究”子课题: 南海珊瑚礁退化机理和修复潜力”。
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”。
18. 韦朝春, 国家自然科学基金面上项目“包含重复序列的基因预测及其功能分析”。
19. 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”。
20. 赵一雷, 国家重点基础研究发展计划 (2013CB966802,2012CB721005)。
21. 赵一雷, 医工交叉研究基金“基于组学特征谱的新型遗传性疾病诊断工具”(YG2016NS33)。
22. 赵一雷, 国家自然科学基金委面上基金 (21377085)。
23. 赵一雷, 微生物代谢国家实验室重点课题 (2016)。
24. 赵一雷, 北京大学化学基因组重点实验室开放课题 (2016)。
25. 陈海峰, 国家自然科学基金国际合作重点项目子课题。
26. 赵立平, 完美(中国)有限公司 3000 万元横向课题资助。
27. 赵立平, 国家自然科学基金项目两项。

化学化工学院

28. 孙淮, 国家自然科学基金委面上项目, “开发可迁移的适用于软材料的粗粒化力场”。
29. 孙淮, 国家自然科学基金应急项目, “第四届分子模拟国际大会”。
30. 孙淮, 国家自然科学基金青年科学基金项目, “用计算化学方法研究镁离子电池阳极表面钝化层的形成机理”。
31. 孙淮, 国家自然科学基金青年科学基金项目, “聚-(γ -苯甲基)-L-谷氨酸酯的液晶态的分子模拟和密度泛函理论研究”。

32. 罗正鸿, 国家自然科学基金杰出青年基金: N0.21625603, “聚合反应器模拟及应用”, (2017-2021, 主持)。
33. 罗正鸿, 国家科技部 973 资助子课题: No. 2012CB21500402, “绿色低碳导向的高效炼油过程基础研究”之第四子课题“关键过程装备强化方法及放大规律”, (2012-2016, 主持)。
34. 罗正鸿, 石油化工联合基金: N0.U1462101, “多尺度层次下的循环流化床中甲醇定向转制烯烃过程的化学工程研究”, (2014-2017, 主持)。

环境科学与工程学院

35. 龙明策, 上海市自然科学基金面上项目 (13ZR1421000, 2013.07-2016.06)。
36. 龙明策, 国家自然科学基金面上项目 (21377084, 2014.01-2017.12)。

密西根联合学院

37. 鲍华, 国家自然科学基金面上项目, “电子声子耦合和非平衡导热的第一原理研究”。
38. 朱虹, 国家自然科学基金青年项目, “具有声子玻璃电子晶体特征的三元层状热电材料的高通量计算”。
39. 龙泳, National Science Foundation of China (NSFC), “Multi-material decomposition using reconstruction methods for low-dose dual-energy CT”, January 1, 2016-December 30, 2018, PI: Yong Long.
40. 龙泳, Medicine-engineering cross discipline program, SJTU, “Development and research of key technology of the optical navigation and 3D ultrasound imaging assisted craniomaxillofacial puncture robot”, January 1, 2016-December 30, 2018, PI: Jinyang Wu, Co-PI: Yong Long.
41. 龙泳, “Ultra-Low dose CT image reconstruction based on big data priors,” September 1, 2015-August 31, 2017, PI: Jeffrey A. Fessler (UM), PI: Yong Long (SJTU).
42. 龙泳, Science and Technology Commission of Shanghai Municipality (STCSM), Shanghai Pujiang Talent Program, “Enabling fast low-dose CT imaging using model-based image reconstruction”, July 1, 2015-June 30, 2017, PI: Yong Long.
43. 龙泳, 5.The Scientific Research Foundation for the Returned Overseas Chinese Scholars, State Education Ministry, “Image reconstruction methods for ultra-

low dose CT” , PI: Yong Long.

船舶海洋与建筑工程学院

44. 田新亮, 国家自然科学基金重点项目, “中近海域大型海上浮式风机耦合动力学与稳定性机理研究”, 项目编号 11632011, 2017.1-2021.12
45. 田新亮, 国家自然科学基金面上项目, “新型单点系泊浮式潮流能装置耦合动力性能研究», 项目编号 51679137, 2017.1-2020.12

4.4 典型应用

应用一：复发、难治白血病的亚克隆和克隆演化分析

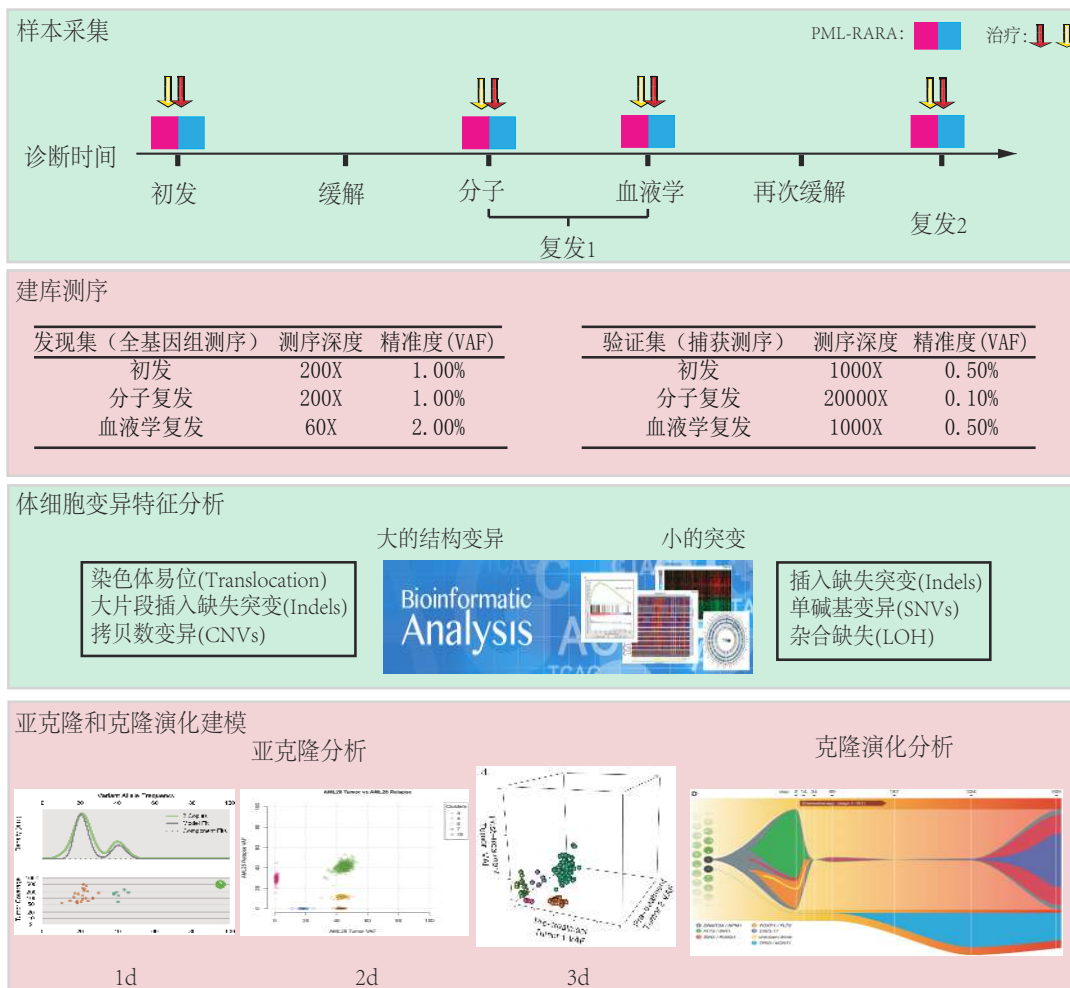


表 团队主要成员

陈赛娟	上海交通大学医学院附属瑞金医院教授、中国工程院院士
王侃侃	上海交通大学医学院附属瑞金医院研究员

复发、难治白血病是造成白血病患者死亡的主要原因，一般认为白血病内部复杂的亚克隆和治疗过程中克隆的演化，可能是临床表现背后的主要原因。但是，由于缺乏可行的研究手段，一直无法对亚克隆和克隆演化进行研究，这也使得临床上对这些患者可干预的手段极其缺乏。

随着下一代测序技术的成熟和应用，各国相继提出“精准医学”计划。在针对恶性肿瘤这一世界医学难题的研究中，揭示研究肿瘤内部异质性，被认为是理解肿瘤发生发

展和个体化用药的关键。而白血病作为一种取材容易的血液系统恶性肿瘤是最理想的研究模型。

在陈竺、陈赛娟院士的领导下，联合临床血液内科和医学基因组学国家重点实验室相关力量，针对这一重要课题方向，组成攻坚团队。利用最先进的全基因组测序，对复发、难治患者的初发、缓解和复发样本进行高深度测序，每个患者获得了 1T 以上的基因组学大数据。在 HPC 中心团队的协助下，利用相关的软件和硬件设备对迄今为止最大的临床个人基因组数据进行分析解读。在此基础上建立统计模型对患者初发、复发的白血病进行亚克隆预测和克隆演化比较分析。从而找出导致疾病复发、耐药的原因，并针对不同的克隆基因突变进行用药和治疗方案的优化。下一步将继续与 HPC 团队展开深入合作，主要内容包括：1. 基因组数据分析进行加速和自动化；2. 亚克隆预测和克隆演化分析模型的优化。

最终快速、准确地实现对白血病以及其他恶性肿瘤的精准分型诊断和个性化临床用药方案的优化。同时，提供便捷的方法对癌细胞进行跟踪和监视，方便医生及时进行临床干预，造福广大癌症患者。

专家寄语

肿瘤细胞的异质性研究是理解肿瘤发生、发展、转移、复发和耐药的基础。随着高通量测序技术的发展，全基因组测序为该研究的开展提供了有力手段，但是其产生的海量数据，对数据的分析解读提出了巨大的挑战。同时也为生物医学和大数据的结合，提供了难得的契机。

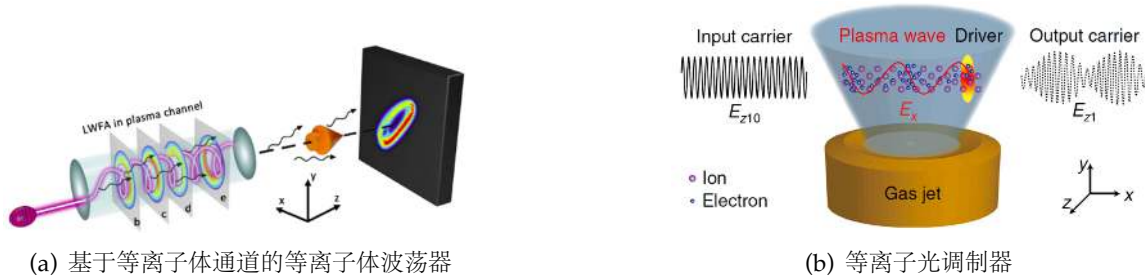
上海交通大学医学基因组学国家重点实验室利用急性早幼粒细胞白血病作为研究模型，对白血病的亚克隆和克隆演化分析开展个体化精准解读。研究过程中我们与上海交通大学超级计算机中心团队精诚合作，得到超算中心在硬件和软件方面的大力支持与帮助，使课题进展顺利。两个不同领域团队的碰撞，激发了科研的“火花”，成为临床医学、基础医学和计算机科学等多学科交叉合作的典范。

我希望医学基因组学国家重点实验室与超算中心的合作能够继续深入，取得更多重要成果。同时，期望在“精准医学”时代有更多的基础科学和数据科学研究人员开展深入合作，使大数据更好地为精准医学和健康服务。将科学研究高效地转化为更精准、高效、安全和适宜的诊断及治疗手段，使患者获益，是我们所有医学和科学工作者的最终目标。

陈赛娟

中国工程院院士、上海血液研究所所长、医学基因组学国家重点实验室主任、国家转化医学中心主任

应用二：激光等离子体相互作用中光传输、粒子加速和辐射的大规模数值模拟研究



(a) 基于等离子体通道的等离子体波荡器

(b) 等离子光调制器

表 团队主要成员

盛政明	物理与天文学院教授
陈 民	物理与天文学院特别研究员
翁苏明	物理与天文学院特别研究员

激光尾场加速由于其巨大的加速梯度，有望成为下一代紧凑型台面加速器和辐射源的加速机制。然而由于缺乏微型波荡器，其电子束的辐射可调谐性一直是本领域研究的难点。借助于大规模数值模拟研究，物理与天文学院陈民特别研究员与盛政明、张杰教授等合作者提出了基于等离子体通道的波荡器辐射方案，大大增强了尾波电子束辐射谱的可调谐性。2016 年该工作发表在杂志 *Light: Science & Applications* 5, e16015 (2016) 上，该工作受到国家 973A 类项目、青年 973 项目、以及自然科学基金面上项目和青年千人计划启动经费的支持。

强激光与物质相互作用表现出的效应十分依赖于激光场的时空特性，调节强激光脉冲的时空特性可以在很大程度上操控强激光与物质间的相互作用，这对于光学调控在很多方面的应用极为重要。目前人们已经提出或者利用等离子体反射镜、等离子体光栅、等离子体透镜、等离子体通道、等离子体拉曼放大器等来操控强激光脉冲，但这些都难以用来实现对强激光频谱的深度调制。物理与天文学院於陆勒、盛政明等人提出了一种基于等离子体介质的超快全光调制器。它不但能够快速调制强光的频谱和时空特性，而且频谱调制范围也得到了极大扩充，能够承受的激光脉冲强度可比传统的弱光调制器的光强阈值高十几个数量级，而调制速度与之相比可快 1-2 个数量级。该工作近期发表在 *Nature Communications* [7, 11893 (2016)] 上，受到国家 973A 类项目、以及自然科学基金面上项目的支持。

应用三：仿鲨鱼皮微结构的减阻机理研究

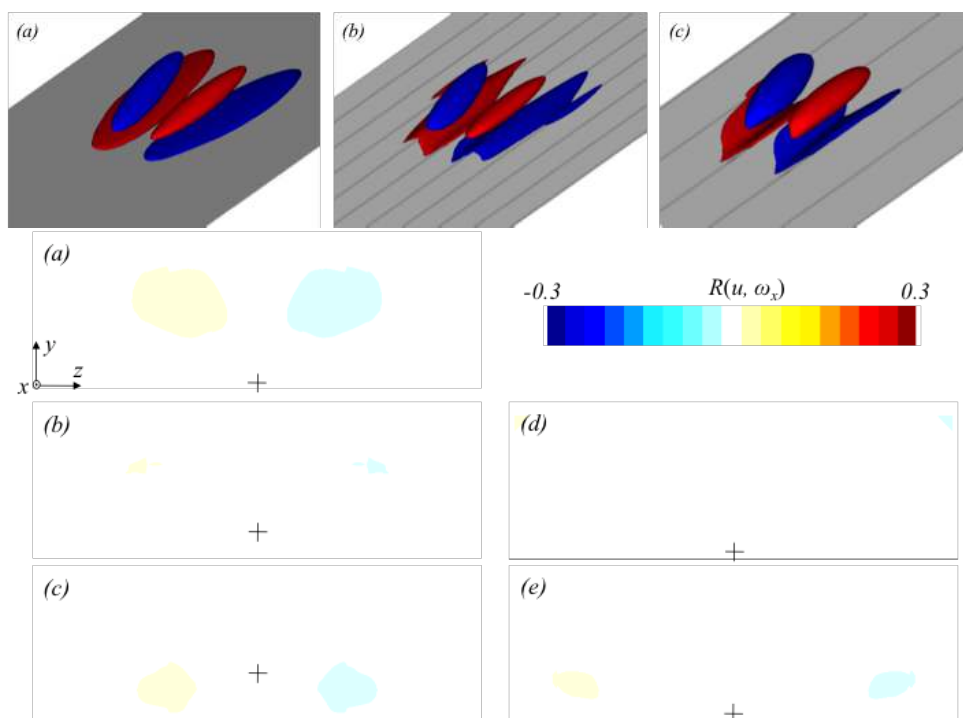


表 团队主要成员

李伟鹏	航空航天学院特别研究员
刘 洪	航空航天学院教授、副院长

仿鲨鱼皮微结构可减小 10% 湍流摩擦阻力，对于大型客机是一种极具有前景的减阻技术，该技术亦可应用于高铁或汽车领域。由于尺度效应和非定常因素，实验测量难以准确辨识仿鲨鱼皮微结构的减阻机理，为此，我们利用上海交大 π 系统，开展了基于高精度数值格式的直接数值模拟 (DNS) 研究，利用正相关性分析，分析了仿鲨鱼皮微结构对湍流中相干涡系结构的影响，如上图所示，揭示了仿鲨鱼皮微结构的减阻本质机理：仿鲨鱼皮微结构抬升了流向涡相干结构，抑制了流向涡与壁面的接触面积，消弱了雷诺应力对摩擦阻力的贡献，同时仿鲨鱼皮微结构抑制了湍流猝发，使得近壁湍流趋向于各向同性特征，减弱了湍动能的生成。该理论成果正在审稿中。

Highlight Application 4 : Spray Combustion Modeling Research involving Multi-component Surrogate Fuels and High-Fidelity Computational Fluid Dynamics

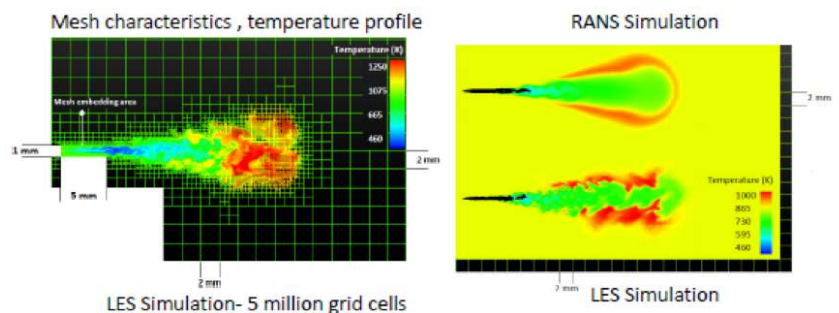


表 PI

Chienpin Chen Tang Junyuan Chair Professor in UM-SJTU Joint Institute

Spray combustion research finds wide applications in internal combustion and gas turbine engines. We are currently carrying out high fidelity Large Eddy Simulation (LES), as well as unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) simulation of multi-component fuel spray, evaporation and combustion. For computational modeling of the spray combustion processes, 4-component surrogate fuel (n-dodecane/ isocetane/trans-decalin/toluene) was used to emulate the Jet-A blend composed of hydrocarbon groups of linear paraffins, cyclo-paraffins and aromatics. Multi-component combustion reaction mechanism of 231 species and 5591 reactions was used for chemical kinetics. To account for complex geometries associated with modern combustors involving injectors and atomizers, both unstructured, structured and multi-level meshes have are blended to create the optimal grid system of the combustor configuration. For evaporating multi-component sprays, we have utilized discrete particle tracking method embedded within the underlying Eulerian turbulent flow simulation. Open source OpenFOAM and CONVERGE codes are used to carry out the multiphase calculations. In addition, open source CANTERA code is used for chemical kinetics in combustion flows. The multiphase multi-scale combustion flow simulations involving real world combustor geometries and large grid systems warrant the usage of HPC-SJTU, and have the capability to reveal the detailed thermal-physical-chemical multi-physic phenomena of spray combustion.

Highlight Application 5 : How membrane active peptides partition into bilayers and spontaneously assemble into functional membrane proteins

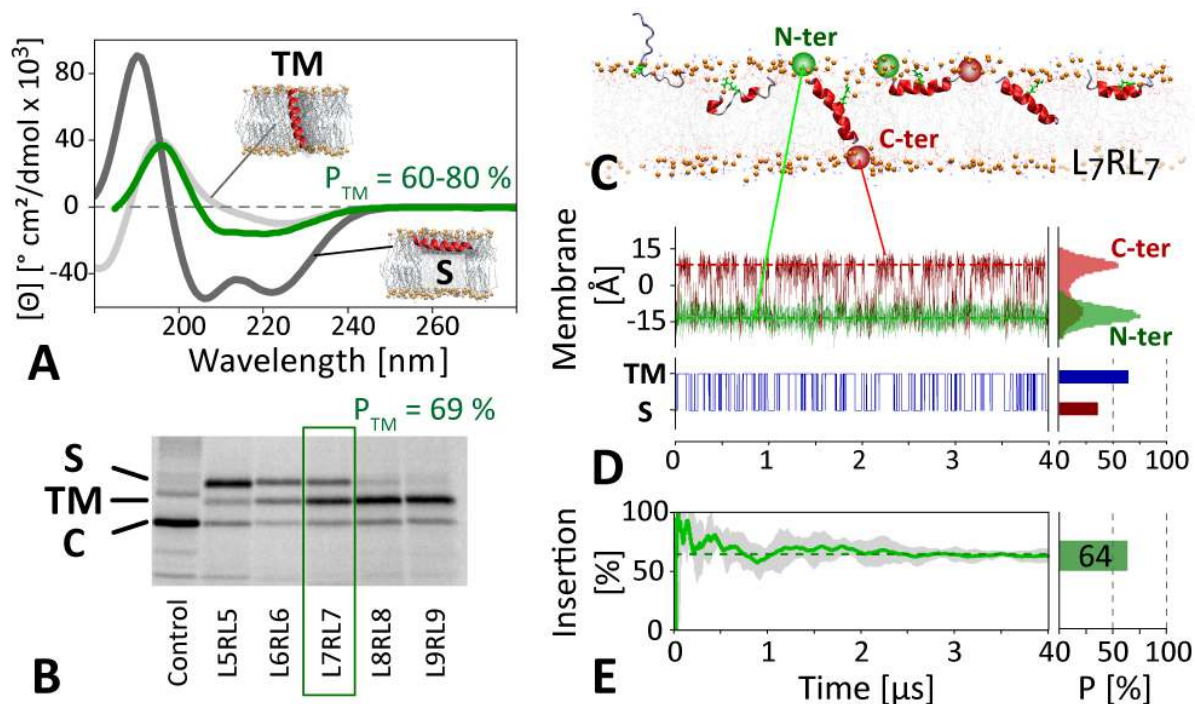


图 Oriented CD (A) and in vitro partitioning experiments (B) provide thermodynamic averages of the insertion propensity of a peptide (GL7RL7G). Unbiased MD simulations reveal that the native state is an ensemble of surface bound (S) and transmembrane configurations (TM), and provide additional information on the atomic detail structural ensemble, membrane insertion mechanism (C), kinetics (D), and thermodynamics (E), which are in quantitative agreement with the experiments ($P_{TM} = 70 \pm 10\%$)

表 Team Members

Jakob Ulmschneider	Professor, Institute of Natural Sciences
Song Ke	Postdoc, Institute of Natural Sciences

We study Antimicrobial peptides (AMPs), which are a key component of the innate immune defense of all forms of life. The mechanisms driving their antimicrobial activity are only poorly understood. AMPs are known to preferentially bind to microbial membranes and form pores. However, how AMPs selectively target microbial membranes and the relationship between pore-formation and antimicrobial activity re-

mains largely undetermined. This is chiefly due to the lack of atomic detail structural information detailing the mechanisms of membrane binding and channel formation, as well as the pore architecture.

Previous attempts at determining the structures of AMP channels have been thwarted by the transient nature of AMP channels. Here we demonstrate and experimentally validate a new methodology, based on unbiased atomic detail equilibrium molecular dynamics simulations, that allows direct ab initio assembly of functional AMP pores. This approach accurately predicts the insertion mechanisms and native state structures of membrane active peptides at atomic resolution, accurately reproducing experimental ensemble averages and partitioning data synchrotron radiation circular dichroism spectroscopy and in vitro translocon experiments [1-2]. The insertion probability as a function of peptide length follows two-state Boltzmann statistics and reveals atomic-resolution details about the partitioning process. Here we demonstrate the further extension of this methodology to capture the spontaneous assembly of peptides into functional channels in the bilayer.

References

1. Ulmschneider et. al., Nature Communications. 2014, 5:4863
2. Wang et al., Nature Communications 2016, 7: 13535.

专家寄语

The HPC center is essential to performing our research. The π supercomputer provides the computer power to perform our extensive calculations. Support of the HPC center has been exemplary and productive. Future upgrades to PI are envisaged and of extreme importance for the continuation of our research.

Dr. Jakob Ulmschneider
Distinguished Research Fellow, 青年千人

应用六：高性能计算在天然无规蛋白分子力场研究中的应用

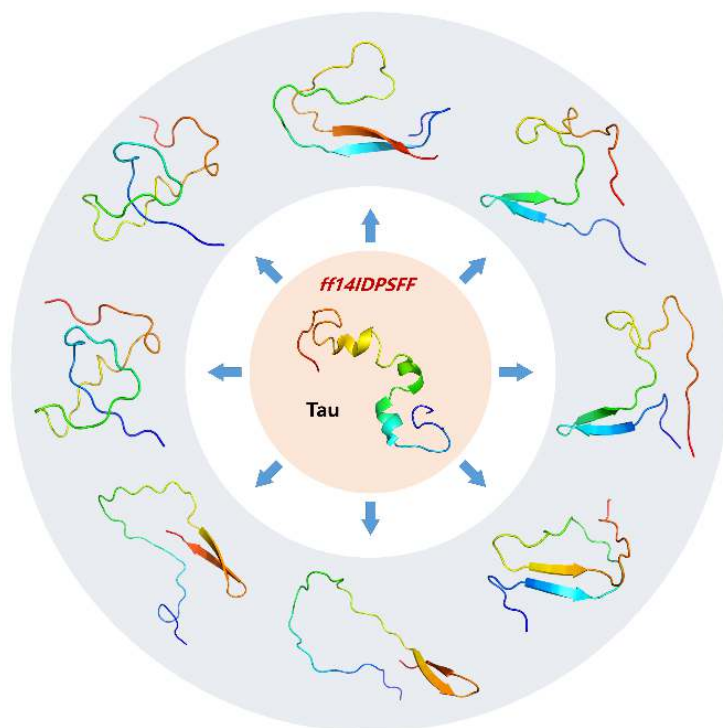


表 团队主要成员

陈海峰	生命科学技术学院副教授
刘 灏	生命科学技术学院博士生

天然无规蛋白是一类在生理条件下没有稳定三级结构的蛋白质。近年来，大量分子生物学研究表明，天然无规蛋白具有非常重要的生物学功能，其错误折叠与恶性肿瘤、心血管疾病、神经退行性疾病以及糖尿病等复杂疾病的发生密切相关。因此，研究天然无规蛋白的结构功能关系具有重要意义。然而，天然无规蛋白特殊的结构性质使得它们难以用 X-ray、NMR 等传统实验方法来研究。因而，依赖于高性能计算的分子动力学模拟在天然无规蛋白的研究中发挥着越来越重要的作用。自 2014 年以来，上海交通大学生命科学技术学院陈海峰研究团队依靠上海交大超算中心的大规模计算资源，相继开发出了针对天然无规蛋白的分子力场 ff99IDPs、ff14IDPs 以及 ff14IDPSFF。这些力场首次成功地模拟出了天然无规蛋白的构象特征，并准确预测出了天然无规蛋白 α 碳原子的化学位移。力场参数发表之后，受到国内外同行的广泛好评与引用。这些成果将大大地推动天然无规蛋白结构与复杂疾病关系的研究，并为靶向天然无规蛋白的药物研发奠定了坚实的基础。

应用七：3000 个水稻基因组的泛基因组学分析

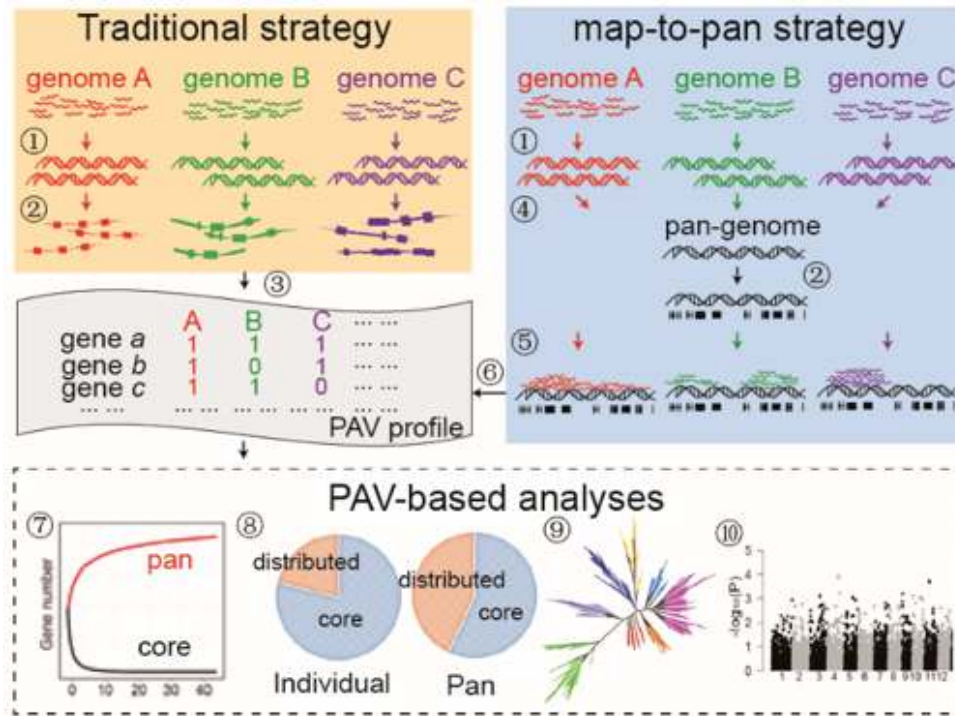


表 团队主要成员

张大兵	生命科学技术学院教授
韦朝春	生命科学技术学院教授
石建新	生命科学技术学院副教授

水稻是世界最重要的农作物和重要的模式生物之一。本项目收集了目前全世界 3,024 个优良水稻品种，进行基因组测序。测序平均覆盖率近 15 倍，原始测序数据量为 17 TB。本项目是目前最全面、最广泛的水稻基因组研究。从 2013 年末起，在交大高性能计算团队的支持下，在 π 上构建了真核生物泛基因组分析流程（如上图）；应用该流程完成了 3000 个水稻基因组测序数据的水稻泛基因组学分析，发现超过 1 万个水稻参考基因组中没有的新基因，分析了水稻不同品系中的基因有无的变异（PAV）。通过对这些水稻基因组比较分析，揭示水稻基因组的驯化演变，探究影响水稻产量相关性状的分子机制，对水稻科学及育种研究具有重要的理论指导意义和实际应用价值。本项目的部分结果已经发表在 NAR (IF 9.20)、Bioinformatics (IF 5.77) 等国际著名学术期刊。

应用八：基于数值模拟方法的长三角地区大气重污染事件发生特征与形成途径研究

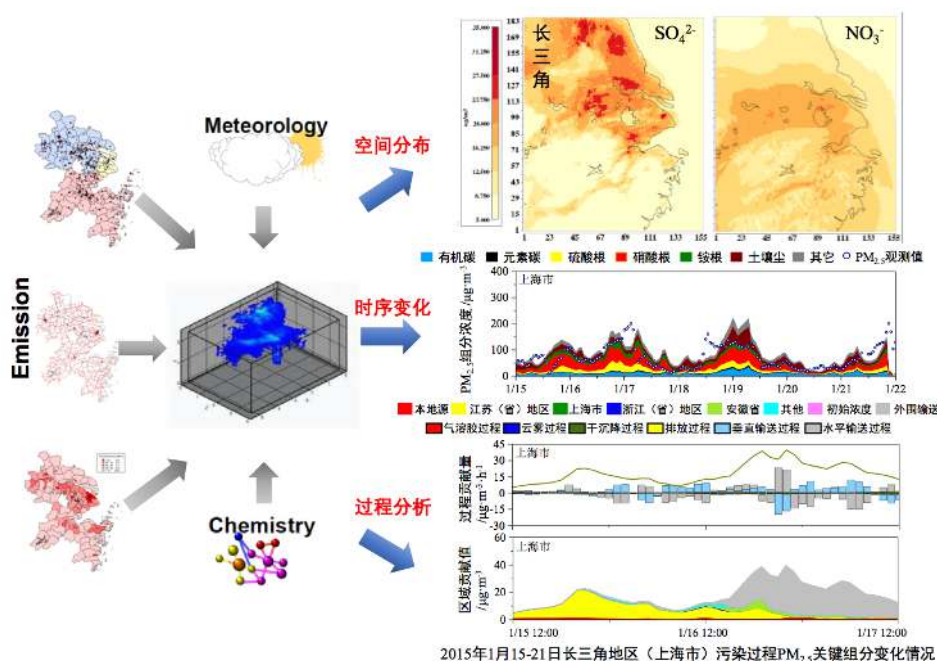


表 团队主要成员

程真	环境科学与工程学院副研究员
朱雯斐	环境科学与工程学院博士生

细颗粒物（PM_{2.5}）污染是长三角地区最为亟待解决的环境问题之一。外场观测、实验室模拟等传统研究手段已无法满足现有 PM_{2.5} 精细化来源分析的研究目标。基于第三代空气质量模型发展起来的大气污染全过程数值模拟方法，具有时空分辨率高、污染重现性强和过程解析度高等特点，已成为目前探究 PM_{2.5} 污染过程发生特征以及来源分析最为有效的手段。2015 年，上海交通大学大气环境研究小组在原有大气污染控制团队工作基础上，以上海交通大学高性能计算中心为基础平台，顺利搭建了大气污染全过程模拟体系，应用 WRF（Weather Research and Forecasting）、CMAQ（Models-3 Community Multiscale Air Quality）等模型，成功实现了长三角地区大气污染过程的准确再现，并在此基础上深入开展了冬季细颗粒物重污染事件发生特征、形成途径和来源解析研究。2017 年，大气环境研究小组将在原有模型基础上，进一步拓展模型解析结果应用方向，包括多种来源解析方法比对、污染应急预案评估以及集成化解析平台搭建等。

5 代码优化与研究

除了提供“管机器、开帐号”这些基础服务之外，我们还向国际一流大学的高性能计算中心学习，结合我们的专业知识，为用户提供代码调优的高级服务。并结合这部分工作，开展了研究，培养了学生。

5.1 用户代码调优

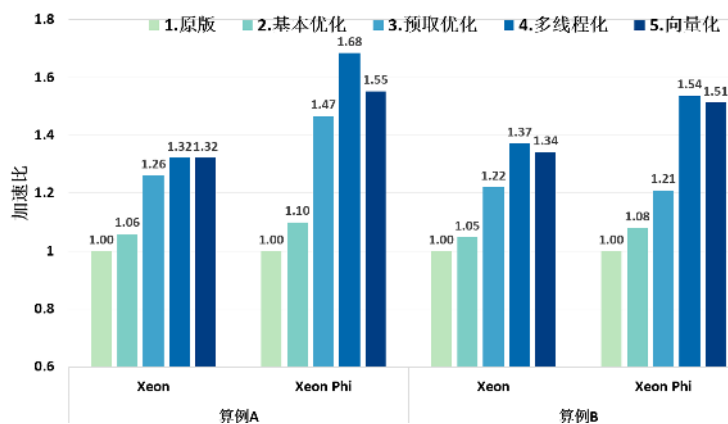
2014年初，我们推出了 Code Modernization, Acceleration, and Scaling (CMAS) 服务，为 π 用户免费调优他们的大规模程序。一方面减少程序的运行时间，提高整机利用率，另一方面能让用户在合理的时间内计算更大规模的问题，获得比之前结果更高的精度。CMAS 具体是指：

- **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。

到了 2014 年底，我们重新审视这项工作时发现，由于我们团队人手有限，这项工作开展进度没有达到预期。因此 2015 年初，我们推出了 CMAS 2.0 服务，不再仅依靠我们团队的力量，而是充分利用校外资源，构建“用户 + 高性能计算中心 + 外部团队”的三方合作模式。我们不仅在专业用户和外部团队之间起到了纽带和桥梁的作用，并在整个代码调优工作中做出了关键性的贡献。

案例一：VLPL-S 在 Knights Landing 上的优化



VLPL 是基于 PIC (Particle In Cell) 的粒子模拟方法，是从微观角度研究等离子体的某一小区域（例如上千个电子德拜长度）和较短的时间范围（上千个电子等离子体振荡周期）发生的物理过程。等离子体粒子模拟方法的基本过程是这样的：(1) 初始化粒子的位置和速度分布，求出电荷密度和电流密度分布；(2) 数值求解 Maxwell 方程组（用 FFT 方法或空间网格差分法）得到电磁场分布；(3) 由插值得到粒子所在位置处的电磁场；(4) 由单粒子运动方程求出粒子新的位置和速度分布。如此循环下去，就可知道电磁场和每个粒子的运动变化情况。

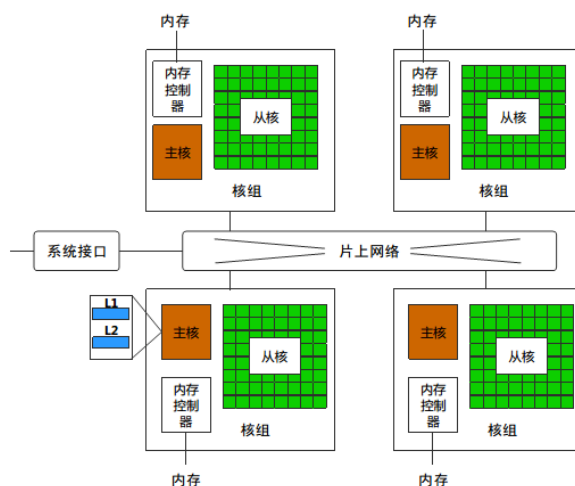
VLPL 程序由交大物理与天文系盛政明课题组陈民老师提供，由高性能计算中心、Intel 公司和物理与天文系合作优化。原程序使用 C++ 编写，并且已通过 MPI 并行化。在之前 CPU 优化的工作基础上，我们针对 Intel 新一代加速卡 Knights Landing (KNL) 进行了一系列优化。

使用的主要优化方法包括：

- 基础优化：编译选项优化、消除虚函数调用等基本优化手段；
- 访存优化：使用 Intrinsic 库将链表中下一个要处理的粒子数据预取到 L1 缓存；
- 多线程优化：节点内使用 OpenMP 替代 MPI，以降低数据通信开销；
- 向量化：计算粒子运动时，将 16 个粒子打包组成 512 位宽的向量，使用 AVX512 指令实现向量化计算。

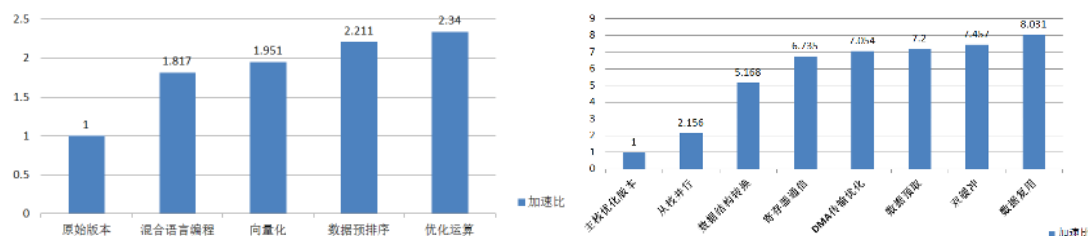
经过一系列的优化，在同样的优化策略下，VLPL-S 在 KNL 上的性能达到双路 E5-2699v3 的 1.68 倍，同时 CPU 版本程序也获得了大幅度的性能提升。

案例二：神威太湖之光上 OpenFOAM 的移植与优化



神威太湖之光是最新一期 Top500 榜单上排名第一的超级计算机，峰值性能为 125.4 PFlops，其计算能力主要来自于国产 SW26010 众核处理器。OpenFOAM (Open Source Field Operation and Manipulation) 是计算流体力学领域使用最广泛的开源软件包，高性能计算中心与国家并行计算机工程技术研究中心合作进行 OpenFOAM 在神威太湖之光的代码移植和优化工作。

由于 OpenFOAM 基于 C++ 实现，与神威太湖之光上的异构众核处理器 SW26010 的编译器不兼容，无法直接在该架构上有效运行。我们基于 SW26010 的主核/从核的体系架构移植了 OpenFOAM 的核心计算代码，并采用 C/C++ 混编的方式解决编译不兼容的问题。此外，通过寄存器通信，向量化和双缓冲等优化手段，单核组的性能较优化后的主核代码提高了 8.03 倍，较 Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2695 v3 的串行执行性能提高了 1.18 倍。我们将单核组的实现扩展到了神威太湖之光的大规模集群上，并进行了强可扩展性测试，256 个核组上实现了 184.9 倍的加速。外媒 NextPlatform 对我们的这项工作进行了报道¹。



¹<http://bit.ly/2kuGmKG>

5.2 代码优化研究

为了给 CMAS 服务提供可持续发展的动力，并为交大培养相关领域的人才，我们针对关键用户的关键应用，围绕 π 集群，在计算机系统结构及代码优化 (Computer Architecture and Code Optimization) 上开展了一系列的研究。由于 π 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，我们对它们的体系结构进行了深入的研究，熟练掌握了相关的代码优化手段。基于这些研究工作，我们发表了学术论文，并申请到了美国 NSF 的课题。

学术论文

1. Shi-Jie Li, You-Cai Zhang, Xiao-Hu Yang, Hui-Yuan Wang, Dylan Tweed, Cheng-Ze Liu, Lei Yang, Feng Shi, Yi Lu, Wen-Tao Luo and Jian-Wen Wei. An Empirical Model to Form and Evolve Galaxies in Dark Matter Halos. 2016 National Astronomical Observatories, Chinese Academy of Sciences and IOP Publishing Ltd. Research in Astronomy and Astrophysics, Volume 16, Number 8. (IF=1.292)
2. Yueming Wei, Yichao Wang, Linjin Cai, William Tang, Bei Wang, Stephane Ethier, Simon See and James Lin. Performance and Portability Studies with OpenACC Accelerated Version of GTC-P. The 17th International Conference on Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies, Guangzhou, China, December 16-18, 2016
3. 王一超, 林新华, 蔡林金, William Tang, Stephane Ethier, Bei Wang, Simon See, 松岗聪. 太湖之光上基于神威 OpenACC 的 GTC-P 移植与优化研究. HPC China 2016. 中国西安
4. Dandi Ding, Minhua Wen, Shan Zhou, Min Chen and James Lin. Optimization and Evaluation of VLPL-S Particle-in-cell Code on Knights Landing. HPC China 2016. 中国西安
5. Haipeng Wu, Minhua Wen, Simon See and James Lin. Parallelization and Optimization of Laser-Plasma-Interaction Simulation Based on Kepler Cluster. HPC China 2016. 中国西安
6. Delong Meng, Minhua Wen, Jianwen Wei and James Lin. Hybrid Implementation and Optimization of OpenFOAM on the SW26010 Many-core Processor.

- HPC China 2016. 中国西安
7. Yumeng Si, Jianwen Wei, Simon See and James Lin. Optimizing a Galaxy Group Finding Algorithm on SMP vs. Distributed Memory Cluster. HPC China 2016. 中国西安
 8. 林新华, 王一超, 秦强, 李硕, 文敏华, 松岗聪. 利用 Stencil 建模及评估 IntelIMCI vgather 指令. 计算机工程与科学 2016

科研项目

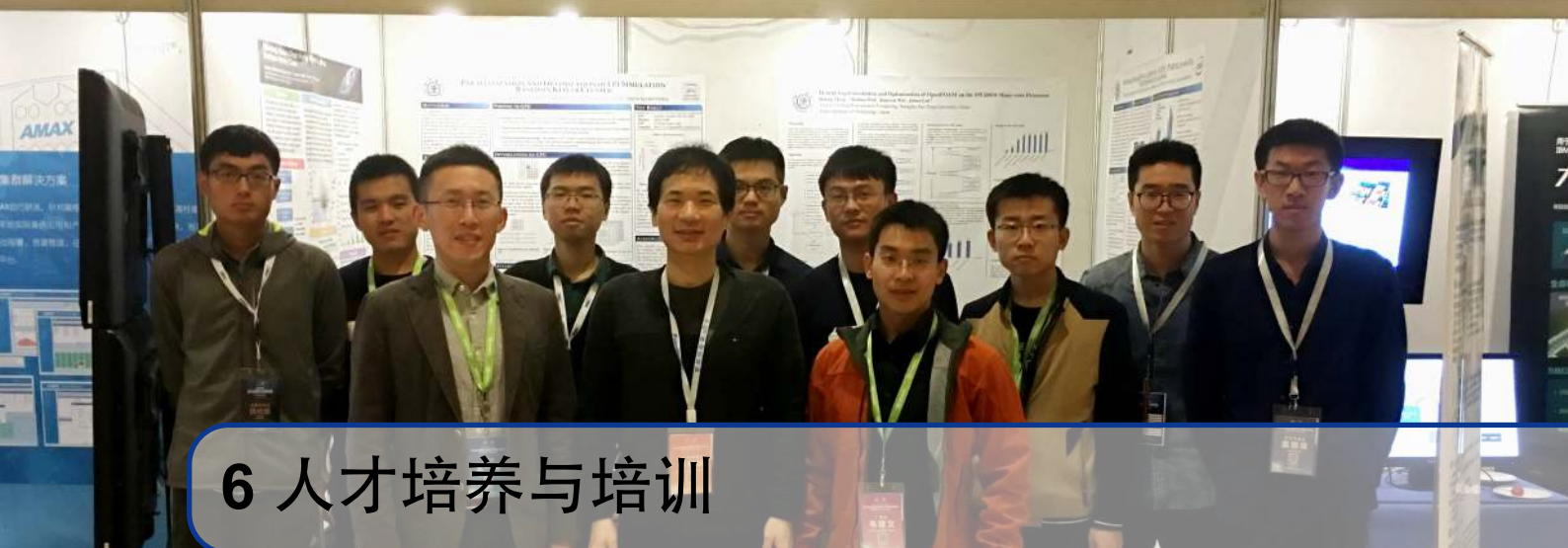
1. 顾一众、林新华等, 863 项目, 高性能计算环境应用服务优化关键技术研究, 2014AA01A302, 2014-2016
2. 林新华、王一超等, 美国 NSF SAVI 项目, A Model for Performance Evaluation of HPC Codes on GPU systems, 2015-2016
3. 林新华等, 国家重点研发计划, 工业产品创新优化设计服务社区开发与应用, 2016YFB0201800, 2016-2020
4. 林新华等, 国家重点研发计划, 国家高性能计算环境服务化机制与支撑体系研究, 2016YFB0201400, 2016-2018

专家寄语

2016 年, 我们激光等离子体团队利用 PI 的超算资源开展了多项富有成果的科学研究。我们的粒子模拟程序 VLPL, OSIRIS 及辐射计算程序 VDSR 在 PI 上整体运行非常顺利。我们在激光尾场加速及辐射源方面进行了三维高精度的模拟研究, 发现了基于等离子体的螺旋波荡器辐射机制; 并且提出了等离子体光调制器的概念, 为激光聚变的宽带激光实现提出了新的方案, 这些成果都发表在本领域的高水平期刊上。同时我们与超算中心文敏华老师, 丁丹迪同学, 英特尔的周姗老师等合作, 成功实现了 VLPL 在英特尔新一代众核处理器 KNL 上的移植, 为我们将来进一步的程序开发奠定了基础。感谢超算团队最近多年来在高性能计算机时提供及程序开发两方面对我们的大力帮助, 希望超算中心越来越壮大, 越来越好!

陈民

物理与天文学院特别研究员、青年千人



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。2016 年委托计算机系招收了 2 名研究生，2017 年毕业 3 名研究生。

表 历届研究生毕业去向

年份	学生	毕业去向
2016 届	秦 强	创业
	郝 赫	金融公司
	文 强	科技公司

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，中心每年组织学生参加相关竞赛。由中心组织的队伍参加了 2016 年 ASC 世界大学生超算竞赛，在决赛中出色发挥获得总决赛亚军；6 月在德国举办的 ISC16 学生超算竞赛中首次进入三甲，获得季军；9 月份，中心组织两支队伍依托交大校内应用，分别进入全国并行编程挑战赛最佳应用组和并行优化组决赛。在 11 月西安举办的决赛表现良好，获得并行优化组铜奖。

表 历年学生竞赛成绩

年份	获得奖项
2012	第 3 届全国 CUDA 编程大赛三等奖
2013	亚洲大学生超算比赛 (ASC13), 首次进入决赛 第 1 届全国 RDMA 编程大赛三等奖
2014	世界大学生超算竞赛 (ASC14) 总冠军 第 2 届 Intel 全国并行编程挑战赛并行优化组铜奖 第 2 届全国 RDMA 编程大赛三等奖
2015	世界大学生超算竞赛 (ASC15) 应用创新奖 第 3 届 Intel 全国并行编程挑战赛最佳应用组铜奖 第 3 届 Intel 全国并行编程挑战赛并行优化组铜奖
2016	世界大学生超算竞赛 (ASC16) 亚军 ISC16 大学生超算竞赛季军 第 3 届 Intel 全国并行编程挑战赛并行优化组铜奖

专家寄语

ASC 是以超级计算机为平台的多学科交叉创新型竞赛，大学生通过参赛可以接触到最前沿科技，提高超算应用水平，锻炼解决实际问题的能力。上海交大积极组队参与 ASC 竞赛并通过努力取得了优异的成绩，对此表示祝贺！期待交大在超算学科建设、应用发展和人才培养等方面取得更大的成果。

王恩东

中国工程院院士、浪潮集团执行总裁、ASC 超算竞赛发起人

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，高性能计算中心从 2010 年开始，一直坚持每年举办至少 6 场的 HPC Seminar 系列讲座。2016 年的系列讲座主要可以分为以下三类：

- 邀请具有应用背景的专家介绍本领域在 HPC 方面的前沿发展，如 5 月份分别邀请了陈海峰和胡丹老师为大家分享他们在各自领域中利用 GPU 进行并行加速的经典案例；
- 邀请工业界的知名专家介绍高性能计算领域的前沿技术，中心员工参与讲解实例，比如 6 月份邀请 Mellanox 公司的刘通主讲 RDMA 并行编程开发，7 月份邀请 Intel 公司周珊等多位资深工程师开展至强融核的并行编程培训，中心员工参与指导现场动手实验环节；
- 由中心员工主讲，针对 π 用户的基础培训，介绍集群的操作方法以及常用软件环境的配置等。比如 1 月份和 4 月份在中心举办的 π 用户现场操作培训。

表 2016 年 HPC Seminar 系列讲座

月份	主题
1 月	π 集群用户基础培训
3 月	分子动力学应用使用培训
4 月	π 集群用户基础培训
5 月	NVIDIA 大讲堂 GPU 应用系列讲座
6 月	RDMA 编程技术宣讲会
7 月	Intel 至强融核培训交流会

6.4 专项奖学金

为了鼓励交大的博士生和硕士生在 π 超级计算机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 公司联合设立了“上海交通大学-AMD 高性能计算奖学金”,由 AMD 公司每年出资 5 万元对 5 名获奖者进行奖励。由 3 名校内外专家、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,2015 年 5 人,2016 年 5 人。历年获奖的学生名单如下:

表 历年专项奖学金获得者名单

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
2015 年	胡智强	生命科学与技术学院	韦朝春
	梁逸浩	物理与天文系	邢向军
	孟德龙	电信学院	林新华、李明禄
	谭海娜	化学化工学院	周永丰
	许志耿	电信学院	林新华、李明禄
2016 年	李 冰	物理与天文系	孙弘
	丁丹迪	电信学院	林新华、李明禄
	吴国军	生命科学技术学院	赵立平、张梦晖
	韦跃明	电信学院	林新华、李明禄
	谢 涵	密西根学院	鲍华



结合学校国际化的战略和中心自身发展的需求，我们积极推动与国际一流高校和高科技技术公司进行实质性合作，为交大计算相关的科研实力提升提供坚实保障。2016年，我们顺利完成了与普林斯顿大学联合申请的美国 NSF 的 SAVI (Science Across Virtual Institutes) 项目，并积极推进了 NVIDIA GPU 卓越中心第 5 年的工作。

7.1 Princeton 大学计算科学与工程研究院

Princeton 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。2016 年，我们与 Princeton 的国际化合作完成了第一期项目，并取得了一定的成绩。

PICSciE 的执行理事 William Tang 教授曾多次访问交大，希望交大能借鉴 Princeton 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。2016 年 5 月，Tang 教授第三次访问交大，听取 NSF SAVI 项目的中期进展汇报，并对下一步工作给出了细致的建议。10 月，中心员工王一超与 Tang 教授合作的论文《太湖之光上基于神威 OpenACC 的 GTC-P 移植与优化研究》在 HPC China 2016 会议上获得最佳论文奖。

该工作的目标是开发大规模并行应用 GTC-P 的 OpenACC 版本，研究 OpenACC 编程语言用于真实应用时的性能可移植性。GTC-P (全称 The Princeton Gyrokinetic Toroidal Code) 是由 Princeton 大学激光物理实验室 (Princeton Plasma Physics Laboratory, 简称 PPPL) 开发的应用于模拟托卡马克装置内激光湍流的大规模并行代码。该应用的基本方法是利用 PIC (Particle-In-Cell) 算法求解 Vlasov-Poisson 方程，从而对于离子通过托卡马克装置时的运动状态进行模拟。GTC-P 不仅具备重要和实际的物理意义，而且由于其优良的可并行性，被美国能源部下属的 NERSC 超算中心选为官方

应用测试程序，用于对超级计算机的整机性能进行评估。

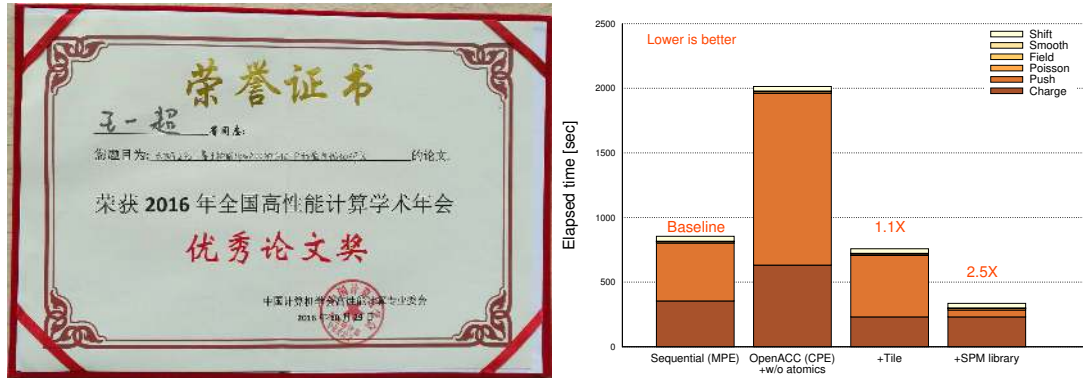


图 HPC China 2016 最佳论文获奖证书 (左) 和 GTC-P 代码不同版本的性能 (右)。

OpenACC 是一套基于制导语句形式的并行编程语言标准。通过为用户提供脱离硬件设计相关的功能接口，OpenACC 满足了用户编写一套代码就能在多个硬件平台上实现并行化的需求。OpenACC 版本的实现将使 GTC-P 代码能在不同设备间保持可移植性，避免对不同硬件环境需要开发不同版本的问题。

目前我们已经在单节点上完成了 OpenACC 版本 GTC-P 的开发和优化，并在 Intel CPU、NVIDIA GPU 和国产神威众核处理器上对于该版本代码进行了性能测试及评估。该版本仅在 8% 的代码修改基础下，相比 OpenMP 和 CUDA 版本，分别可以在多核 CPU 和 GPU 上实现将近 90% 的性能。此外，作为第一个成功运行在神威众核处理器上的 GTC 应用，相较于主核版本，代码整体取得了 2.5 倍的加速比。下一步，我们计划将 OpenACC 版本的 GTC-P 代码扩展到真正的大规模集群上，首先计划在美国 Titan 超级计算机上进行大规模测试。

专家寄语

The impressive work by Shanghai Jiao Tong University colleagues in porting GTC-P onto TaihuLight is much appreciated. This should be an excellent example of the productivity of the international pilot NSF SAVI Project.

Prof. William M. Tang

APS Fellow, Executive Committee. Princeton Institute for Computational Science and Engineering

7.2 NVIDIA GPU 卓越中心

GPU 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 24 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 年底成为全球第 16 个 GPU 卓越中心。借助 GPU 卓越中心这个国际性平台，我们与一些世界一流大学（如剑桥大学、莫斯科国立大学、东京工业大学）的高性能计算中心开展了多项有益交流。



图 NVIDIA 创始人、CEO 黄仁勋博士 (左) 在 SC16 上听取中心计算专员韦建文的汇报

行家评价

上海交大是我们 NVIDIA 公司在高性能计算领域的重要合作伙伴。从 2011 年起，作为 NVIDIA 全球 GPU 卓越中心 (GCOE)，上海交大高性能计算中心在 GPU 技术的前沿研究、应用开发、CUDA 的教学和学生培养等方面与 NVIDIA 一起开展了卓有成效的合作。我非常期待接下来能与上海交大高性能计算中心继续保持紧密联系，在深度学习等前沿领域开展合作。

William Shen
Nvidia 全球副总裁

8 用户反馈与建议

8.1 用户反馈

用户	院系	用户反馈
赵立平	生命科学技术学院	计算和存储资源一般都能满足要求，尤其是在和超算的团体交流和提出相关要求之后，能够得到积极的回应和支持。这一年感觉机器稳定了不少用户支持积极迅速，在工具的编译和按照方面给予了不少支持。
孙 弘	物理与天文系	超算中心总体来说各方面都很不错，用户遇到问题能立即反馈解决。希望超算中心越来越好。
陈海峰	生命科学技术学院	由于我们的力场参数优化需要大量的 GPU 计算资源，我们的 GPU 队列大部分时间处于排队状态，因而还需要扩充 GPU 计算资源。不过高性能中心的用户支持比较有效，反应及时。提交资源申请报告的方式很方便，评审过程透明。

用户	院系	用户反馈
徐振礼	数学科学学院	1) 目前 Pi 上的计算、存储和软件资源已足够我们课题组的需求; 2) 提交资源申请报告的方式越来越方便, 用户委员会的评审也非常透明, 公平, 公正; 3) 作业提交后很快就能运行, 用户支持非常有效, 反应也很迅速; 4) 偶尔会出现机器不稳定的情况, 但是会通过邮件和微信群及时的通知用户。
周永丰	化学化工学院	近半年以来超算中心的机器运行稳定情况相比之前有明显改善, 希望以后继续提高, 需要改进的地方是交大目前有许多用户没有一些计算软件的版权, 比如 gaussian09, material studio 等, 希望超算中心能统一购置, 方便校内用户。另外用户委员会评审不知道何时会有评审结果消息, 希望对评审结果给予回复, 即便不能通过, 也希望能够得到评审消息, 以进一步改进和提高。
何 峰	物理与天文学院	感谢 π 一直以来的支持和高效的服务; 各类资源满足需要; 并行作业 (比如 10 个或 20 个节点) 的等待时间偶尔会慢, 而且占用不同节点的同类型的任务, 有时候运行时间会有较大差别。
韦朝春	生命科学技术学院	主要意见和建议如下。1) HPC 提供的用户支持迅速、高效; 2) 提交资源申请报告方式比较方便; 3) 机器自 2016 年 9 月份升级后比较稳定; 作业等待时间尚可; 4) 目前存在问题: A. 大内存服务器 (256GB 内存) 内存过小 B. 存储资源可能是未来 1-2 年后的瓶颈。

用户	院系	用户反馈
罗正鸿	化学化工学院	<p>首先要特别衷心感谢交大 HPC 团队在过去一年中提供的优质服务，辛苦的为用户提供强有力的软、硬件技术支持；其次，还有一些小的建议希望对贵机构有所帮助：</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) 用户委员会委员数较少、覆盖面不够广泛、缺少一定的代表性，用户委员会机时评审等项目的规则及过程不够细化、透明，申请较难； 2) 交大 A/B 档分区不够细化、且其主要以影响因子及交大每年在该期刊的发文量为参考，因此机时奖励最好按 JCR 分区或者按汤森路透分区，其分区细致、且相对比较权威；另外建议两个标准：用户可选择在文末致谢 HPC、或者不用致谢而将 HPC 团队骨干列为论文共同作者； 3) 作为面向一所工科学校的超算中心，现有安装的软件数目，无论是商业软件还是开源软件，即使对于某一个学科而言，也较难满足广泛的用户使用需求；另外，强烈建议购买 Ansys Fluent 商业软件，国内已有多所大学或科研机构购买此软件； 4) 机器运行相对不够稳定，较频繁的开、停服务，影响作业计算的有效性； 5) 对于大型作业计算，计算成本仍然过高。建议建立阶梯式的打折优惠服务，例如，一年之内计算核时超过 20w 核时的部分，打 7 折；超过 40w 核时的部分，打 6 折；超过 80w 核时的部分，打 5 折。
田新亮	船舶海洋与建筑工程学院	<p>服务很好。建议价格再低点。国内很多高校都能获得免费的超算资源。</p>

用户	院系	用户反馈
张万斌	化学化工学院	过去一年感谢超算中心对于我课题组的帮助。目前的计算资源、存储资源和软件资源能够满足我们的需求，总体稳定，效果显著。同时超算中心工作团队对于我们所碰到的问题能够及时应对，提出解决方案，让我们很满意。
孙俊峰	生物医学工程学院	作为超算中心 π 的新用户，首先要感谢超算中心的用户支持团队，对于需求帮助的邮件回复迅速，问题解决十分及时。然后，由于个人项目需要使用 <code>matlab ode113()</code> 函数求解常系数微分方程， π 上的 <code>octave</code> 软件不能满足需要，希望 π 可以丰富自己的 <code>module</code> ，将 <code>matlab</code> 这一常用软件加入进来。
鲍 华	密西根联合学院	机器的登录节点时常会出现卡顿，反应慢的情况。
龙 泳	密西根联合学院	目前 π 上的软件资源不能满足我的需求，主要是缺乏 <code>Matlab</code> 的使用。
孙 淮	化学化工学院	16 年机器还算稳定。存储系统比 15 年稳定许多，但读写性能明显不足，尤其是在读写小文件或编译时会出现明显的卡顿。 <code>GPU</code> 节点的使用并不方便。有些软件需要多进程配合 <code>GPU</code> 进行运算，由于 <code>GPU</code> 节点进程数的限制，并不能发挥出应有的性能。天河二号对资源的控制方式值得借鉴：只要用户使用了一个核心或一张加速卡，就认为用户使用了整个节点，按节点数来收费。这样可以迫使用户预先想好怎么合理的分配资源，每个作业使用多少核心，多少加速卡。

8.2 对 π 2.0 升级的期待

用户	院系	用户建议
盛政明	物理与天文学院	在 π 上的用户体验一直都非常良好，但近几年随着用户的不断增多，能明显感觉到等待时间越来越长，希望 PI 可以进行恰当的扩容。最多时单用户可以支持上万个核的同时运算，存储容量 100T，希望配置可高速读写的 SSD。
徐振礼	数学科学学院	目前 π 的计算能力，存储能力已经满足了我们的课题组的研究需求，若能有进一步的提高，我们也非常期待。
何 峰	物理与天文学院	对现有的硬盘存储容量感到满意，不论是内存的容量增大或者是计算能力的提升，我们都期待升级带来的性能提升。因为 GPU 的编程友好度不那么高，需要专门的语言，我们组内暂时还没有用到，目前更多地使用的是 CPU，如果用户要适应超算中心的硬件升级，希望能有更多的机会得到培训或者说程序开发上的支持。
韦朝春	生命科学技术学院	1. 希望 π 2.0 能配置内存 4TB 或以上的大内存服务器一批 (>4 台); 2. 每个节点的硬盘容量提高到 1TB 或以上。目前的 200GB 太小，很多大文件输出到本地硬盘无法读写; 3. 加速卡目前已经配备，后期请及时更新升级; 存储容量需求增加非常快，请 HPC 提前开展全校范围的存储资源需求调研并做好相应的存储资源扩展准备。
罗正鸿	化学化工学院	稳定运行、增加软件安装数目。
田新亮	船舶海洋与建筑工程学院	数据上传和下载速度要提升一下。
鲍 华	密西根联合学院	考虑到计算效率的问题，建议配置加速卡，非常期待对 π 2.0 的升级。

用户	院系	用户建议
龙 泳	密西根联合学院	需要配置加速卡，如 GPU 需要高速读写的 SSD
孙 淮	化学化工学院	配置最新的 GPU，优化 GPU 节点的管理。部分目录使用 SSD 以提高小文件的处理速度。
陈海峰	生命科学技术学院	希望扩充更多的高性能 GPU 卡，满足计算资源的大量需求。
赵立平	生命科学技术学院	现有胖节点内存 256Gb，希望可以更大内存的节点。希望对不经常使用的大数据能提供更为便宜的存储方式。
孙 弘	物理与天文学院	加大 GPU 运算的普及力度。
孔令体	材料科学与工程学院	最好能够在一些节点上面增配 SSD。

专家寄语

交大高性能计算中心为我们提供了大量高效且具有针对性的服务，在我们激光等离子体实验室完成各类项目、人才培养等方面发挥了不可替代的作用。衷心感谢计算中心老师们的大量付出。

盛政明

物理与天文系教授、长江学者、杰出青年、美国物理学会会士

上海交通大学 高性能计算中心年度报告 2016

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