分子科学计算

EMSL 先进的分子科学计算资源为用户提供完善的综合性计算环境。 EMSL 不但为用户提供先进高效的计算设备和 EMSL 共享数据存储系统，更为用户提供与资深专家合作的机会。 EMSL 的计算资源为世界尖端基础科学研究提供最先进的模拟工具。这些模拟工具预测的准确性不断提高，系统化程度不断增强，并因此在应对环境分子科学领域里极其复杂的挑战中发挥着重要的作用。解决错综复杂的科学问题需要跨学科的综合科研能力，例如：交叉学科的实验与模拟的有机结合、即时数据提取、分析和可视化的配套能力等。 EMSL 高等的计算设备与先进的计算技术的完美结合组成了其独具特色的综合性计算能力，为 EMSL 重点支持的三个跨学科研究领域—生物相互作用与动力学、地球化学/生物地球化学与近地表科学、界面现象科学中的交叉性科研提供必要的计算支持。 EMSL 的分子科学计算资源为一系列环境分子科学领域的科研活动提供支持。例如：

- 分子层面的化学过程模拟，例如：催化、氢能生产与储存、材料及其表面性能、纳米颗粒、复杂的生物分子系统与相互作用、溶液化学以及环境中的重元素化学形态等的科研活动；
- 生物信息学与计算生物模拟，例如：通过分析大量实验数据组来获取对活细胞生物过程的系统化了解的科研活动；
- 地下水流动与迁移模拟以及监测气候变化的云层和气溶胶模拟。

计算资源详述

计算机系统

- 奇努克 Chinook 超级计算机是 EMSL 计算能力的重要组成部分，它有 18480 个内核处理器，其理论峰值为每秒 163 万亿次浮点运算。同时，它拥有 74 万亿字节的内存、 1.25 千万亿字节的高速本地和共享硬盘空间，其累计带宽为每秒1万亿字节，以及快速 Infiniband 平行开关；
- Aurora 数据存储与 EMSL 的超级计算机及其他实验设备相连接，具备 4.5 千万亿字节的数据存储容量；
- 图型和可视化实验室为复杂的实验和计算数据提供高端可视化支持。可视化的形式主要包括图像、声频及视频。

科学计算顾问

- 专业的计算科学专家为使用 EMSL 设备的科研人员提供配套的技术支持，包括：创建计算模型、解答疑难、排除故障、软件的安装和优化、设计模拟、科学数据分析等；
- EMSL 具备为中国用户提供中文支持的能力。

可扩展性软件

- EMSL 拥有一套自主开发的分子科学计算软件系统，主要包括： NWChem 可扩展化学计算环境 Ecce 、共享内存阵列 (Global Array) 工具箱等。用户可以通过使用 EMSL 的软件工具，将先进的计算化学方法与不断升级的高性能大规模并行计算机相结合，从而在分子层面开展化学的系统研究；
- ScalaBLAST 是一套对一系列数据库进行全基因组图谱或多重基因组图谱 BLAST 计算的高性能并行数据分析工具；
- EMSL 为一系列的商业软件及开源软件提供技术支持，详情参见 EMSL 网站的“分子科学计算资源”部分。

为何选择使用 EMSL 分子科学计算资源?

- 分子科学计算资源为用户提供了一套综合性硬件和软件资源，为复杂的环境分子科学问题的快速计算模拟提供了坚实的计算基础。
- 资深的计算科学专家拥有高性能计算、并行计算机操作、专业特长和科学训练等方面的广博的知识和经验，能够为用户提供全方位的支持。
- EMSL 实现了高端计算模拟与实验资源的充分结合，从而为用户营造了进行跨学科研究的综合性实验环境。

关于 EMSL

EMSL 隶属于美国西北太平洋国家实验室，它是一所由美国能源部建立的国家级科研资源共享中心。EMSL 拥有丰富的集实验与计算为一体的科研资源，能够为环境分子科学领域的科技创新提供配套支持。

EMSL 不但强调不同学科之间的相互协作，而且非常重视实验与计算能力的优化整合，从而为用户提供了一个稳定而高效的科研环境。通过引进世界上最优秀的科学家和最先进的科研设备， EMSL 已成功地帮助数以千计的科研人员通过跨学科的合作实现了能源与环境科学领域上的一些重大突破。欲了解更多有关 EMSL 的科学成就、 EMSL 为用户提供的设备和技术支持等信息，请登陆 EMSL 的网页 www.emsl.pnl.gov.

EMSL 用户申请指南

EMSL 欢迎科研人员向 EMSL 提出用户申请。 EMSL 的用户申请由业内知名专家进行评审。入选用户不但可以使用其世界一流的科研设备，而且有机会与世界知名专家合作。用户申请人可登陆 EMSL 网页 (www.emsl.pnl.gov) 点击 User Access 窗口，并完成其所列的五个步骤来提交申请。 EMSL 会在每年春季公布其一年一度的“用户申请项目建议书征集”的有关细则， EMSL 鼓励现有用户和希望成为 EMSL 用户的科研人员在截止日期前提出申请。此外，不在征集书指定范围内的有新意的申请可以在任何时候提交而不受限制。

EMSL 鼓励申请人在其用户申请项目建议书中强调联合使用 EMSL 的计算与实验设备。大多数的入选项目用户可以免费使用 EMSL 的设备来进行“开放式的科研活动”。开方式的科研活动是指在科学界公开发表并共享其科研成果的科研活动。

分子科学计算科研典型案例

银提高环氧丙烷的产品性能

环氧丙烷是商用化学品生产的一种关键的前驱物，它用于生产比如家用洗衣剂、 塑料和油漆。目前，工业制备环氧丙烷生产工艺不但成本高昂，而且产生氯化物、羧酸化物等对环境有害的副产品。为解决这一问题，由阿贡国家实验室牵头的一个研究小组，利用 EMSL 的分子科学计算设备进行了周期性的密度泛函理论计算，开展了一项重要的研究工作，旨在确定尺寸选择的三原子的银团簇 (Ag_3) 和负载在氧化铝载体上的 3.5 纳米的银纳米颗粒如何催化环氧化丙烯并保持低温下的活性和产生极少量的二氧化碳副产物。 此项研究使用 EMSL 的计算机和基于平面波基函数的密度泛函程序包 (VASP)。计算结果发现，由于其开壳层的电子结构氧化的三原子的银团簇对环氧化反应具有更好的活性和选择性。研究结果表明这种基于超小的银颗粒的新型材料可作为环氧化反应的高效催化剂，并有可能推广到其它的系统。

EMSL 用户：阿贡国家实验室，德国马普弗利兹-哈伯研究院无机化学所，伊利诺大学芝加哥分校

Lei et al. 2010. *Science* 328(5975):224-228. DOI: 10.1126/science.1185200.

超级计算与光谱技术的完美结合形成了对 Azurin 的新认识

金属蛋白如含铜的 azurin 氧化还原蛋白在催化细胞反应的电子传递过程中起着主导的作用。由于铜的核四极矩较大导致其核磁信号很弱。美国西北太平洋国家实验室的科学家和美国内布拉斯加大学的研究人员利用 EMSL的 800 兆赫兹的核磁共振仪和奇努克 (Chinook) 超级计算机第一次获得了 Azurin 的核磁共振信号。这一结果为科学家们开展前所未有的实验研究和检验超级计算的结果和模型奠定了基础。该研究团队使用此研究进展改进了 azurin 数据库，发现了该样品即使在 800 兆赫兹的核磁共振条件下仍然十分有效的自旋-晶格弛豫的丰富信息。理论计算与实验结果完全吻合验证了 azurin 的电子结构的细节。该项技术充分利用了 azurin 的四极矩特点，获得了对原子核附近电子密度的高灵敏的测量，从而揭示了其电子结构和铜活性中心的周边环境的详细的信息。

EMSL 用户：美国西北太平洋国家实验室生物科学组，美国内布斯加大学化学学院

Lipton et al. 2009. *Journal of the American Chemical Society* 131(39):13992-13999. DOI: 10.1021/ja901308v.

BERT DE JONG
高性能软件开发
Wibe.deJong@pnl.gov
509-371-6476

ERICH VORPAGEL
分子科学计算支持
erich.vorpagel@pnl.gov
509-371-6448

DAVID COWLEY
分子科学计算操作
david.cowley@pnl.gov
509-371-6471

Pacific Northwest NATIONAL LABORATORY
Proudly Operated by Battelle Since 1965
U.S. DEPARTMENT OF ENERGY

PNNL-SA-74512