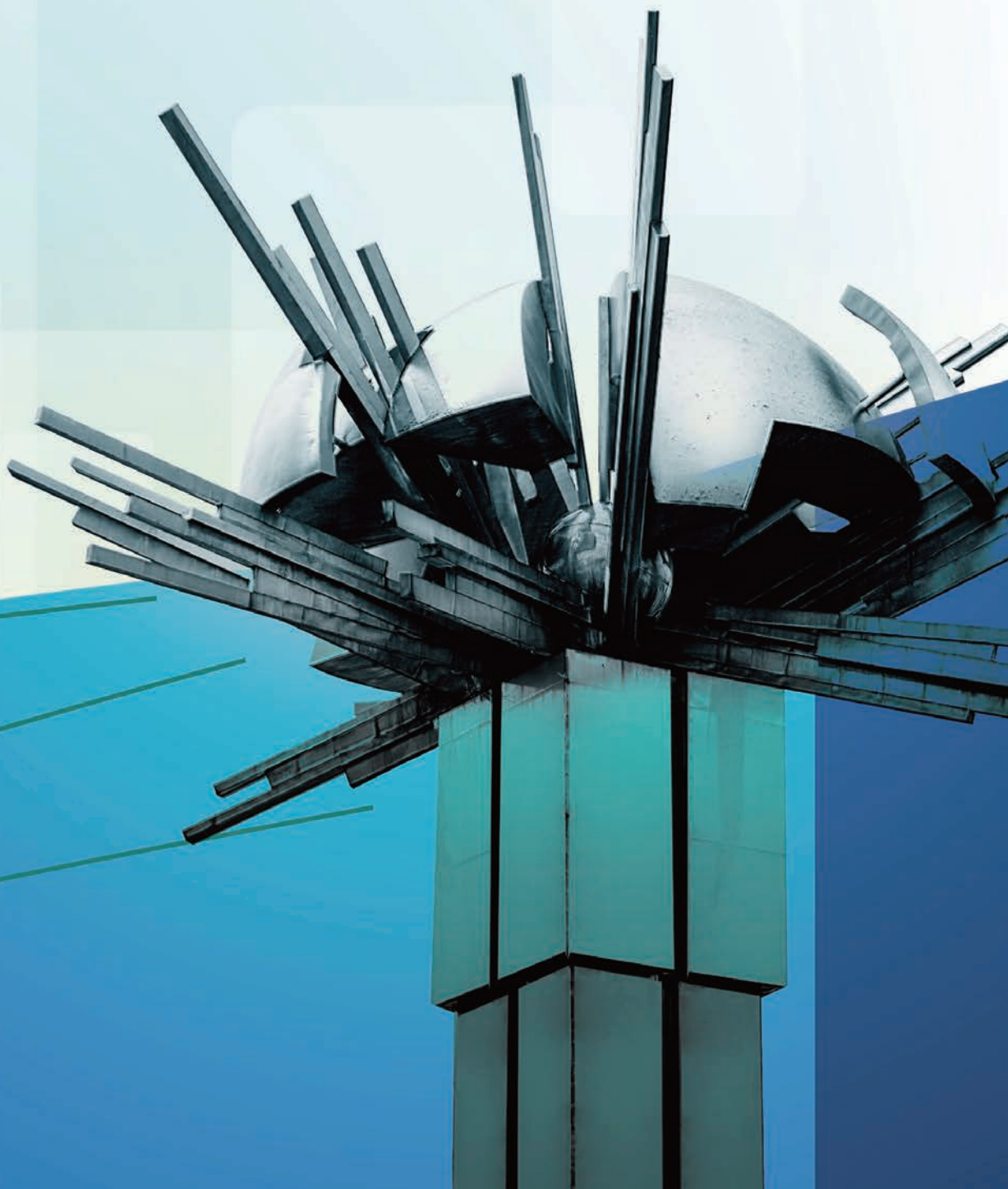




中物院高性能数值模拟软件中心
CAEP Software Center For High Performance Numerical Simulation

软件产品手册

SOFTWARE PRODUCT MANUAL



三高 一快 协同创新

高效能 高置信 高产出 快速研发

目录



中心简介	01
软件产品体系	02
高性能科学与工程计算中间件	03
并行自适应结构网格应用软件编程框架 JASMIN	05
并行自适应非结构网格应用软件编程框架 JAUMIN	06
并行无网格组合几何应用软件编程框架 JCOGIN	07
并行数值模拟前处理引擎 SuperMesh	08
TB 量级并行可视分析引擎 TeraVAP	09
反应堆粒子输运软件系统 JPTS	10
反应堆粒子输运软件平台 JPTS 应用实例	11
三维蒙特卡罗粒子输运模拟软件 JMCT	12
三维离散纵标粒子输运软件 JSNT	13
大规模可视建模工具 JLAMT	14
并行点燃烧耗计算软件 JBURN	15



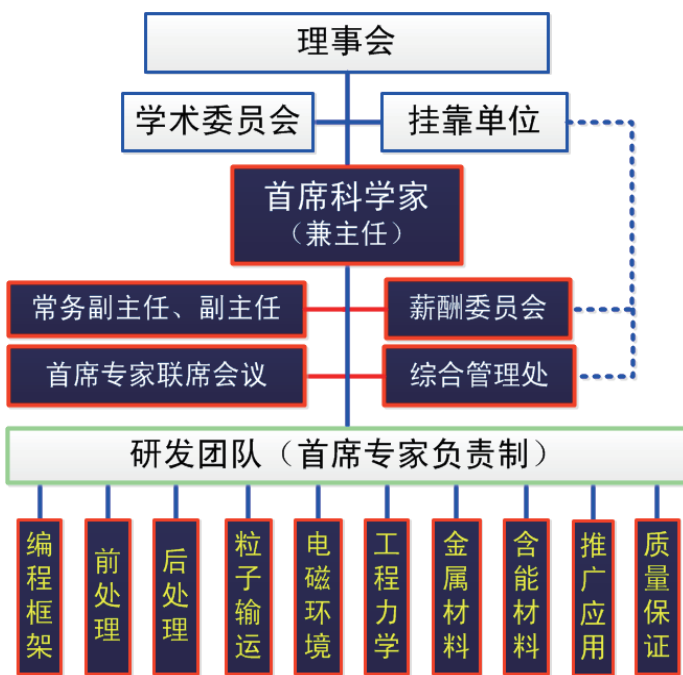
复杂电磁环境数值模拟软件系统 JEMS	16
三维时域全波电磁模拟软件 JEMS-TD	17
三维全电磁粒子模拟软件 JEMS-NEPTUNE3D	18
重大装备工程力学分析软件系统 PANDA	19
静力与振动响应分析软件 PANDA-Stavib	20
冲击动力学分析软件 PANDA-Impact	21
离散系统与非连续变形分析软件 PANDA-Disflow	22
任意裂纹扩展高精度分析软件 PANDA-Fracture	23
核相关 / 含能材料模拟与设计软件系统	24
核相关材料关联电子体系模拟软件 CESSP	25
含能材料高精度原子模拟软件 HASEM	26



中心简介

中物院高性能数值模拟软件中心
CPC Software Center for High Performance Numerical Simulation

中物院高性能数值模拟软件中心（以下简称“软件中心”）成立于2012年4月，是中国工程物理研究院推进战略科技“高性能科学与工程计算”的责任主体。软件中心主要从事“高置信、高效能、高可用”数值模拟软件的快速研发、产品化及推广应用工作，面向能源、信息、制造、材料等国家重大行业领域提供软件产品及模拟服务，推动我国高性能科学与工程计算的应用发展，构建“政-产-学-研-用”的国家超算应用生态环境。



“十三五”规划中，软件中心制定了“北京—绵阳—成都”新布局，总部设在北京，绵阳、成都成立两个分中心。其中，成都分中心定位为研发拓展中心，负责软件产品模块研发、二次开发与推广应用、高性能计算培训与服务、市场需求对接、软件产品化与商品化。

软件中心组建十支研发团队：领域编程框架、前处理、后处理、粒子运输、电磁环境、工程力学、金属材料、含能材料、流体力学和质量保证，现有固定研发人员127人，平均年龄32岁。其中研究员17名，副研究员38名，拥有博士学位81名，海外引进人才6名。

软件中心人员作为主要完成人获得国家科技进步特等奖1项，一等奖1项，二等奖2项，军队科技进步一等奖22项（共计55人次），1个团队获得国防科技创新团队荣誉称号。承担和完成国家杰出青年基金、国家自然科学基金（含重点项目和面上项目）、国家科技部重点研发计划项目、973项目、863重大项目、国家科技重大专项核电专项、国防科工局重大项目、中物院预研重大项目等40多项课题。

软件产品体系

中心凝聚各理事单位的历史积累，结合集成创新与自主创新，成功研发了具有自主知识产权的“一套中间件、五套应用软件”产品体系。其中，中间件用于在高性能科学与工程计算领域，支撑应用软件的快速研发；五套应用软件基于中间件的研发，服务于能源、信息、制造、材料等领域，支撑高性能数值模拟研究。

含能材料： 安全性评估数值模拟软件系统 **SESEM**

核相关材料： 多尺度模拟与设计软件系统 **MASES**

制造： 重大装备工程力学分析软件系统 **PANDA**

信息： 复杂电磁环境数值模拟软件系统 **JEMS**

能源： 反应堆粒子输运软件系统 **JPTS**

中间件： 前处理引擎 — 编程框架 — 可视分析引擎

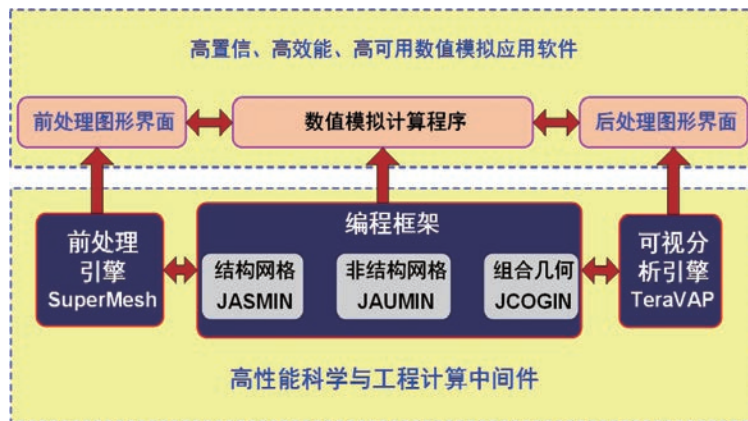
当前，产品体系已经服务于我院重大应用领域。例如，中间件在核武器物理、惯性约束聚变、高新技术装备方面，支撑了所有千万亿次应用软件的研制和应用；五套应用软件已成功应用于反应堆屏蔽、激光装置全厂、系统级电磁脉冲耦合、高功率微波源器件、大型离心机离心 - 振动响应、激光装置随机振动响应、核材料物性及微介观机理等实际应用的精细建模和模拟，关键环节的计算精度和能力超越国际同类商业软件两个以上量级。

此外，产品体系已推广服务于国家重大应用领域，包括全球气候预测、地球资源环境、飞行器优化设计、核能开发与利用、电磁环境信息安全等。例如，中间件已在这些领域支撑若干典型应用软件的重构和发展，实现了数万至数十万处理器核的并行计算。**JPTS** 已成功部署于中国核动力设计研究院，在反应堆屏蔽问题模拟方面，计算规模和速度比同类商业软件均高出 100 倍。**JEMS** 已成功应用于大型运输机的高强辐射场评估以及建筑物电磁脉冲耦合特性分析，计算规模高出同类商业软件两个量级。

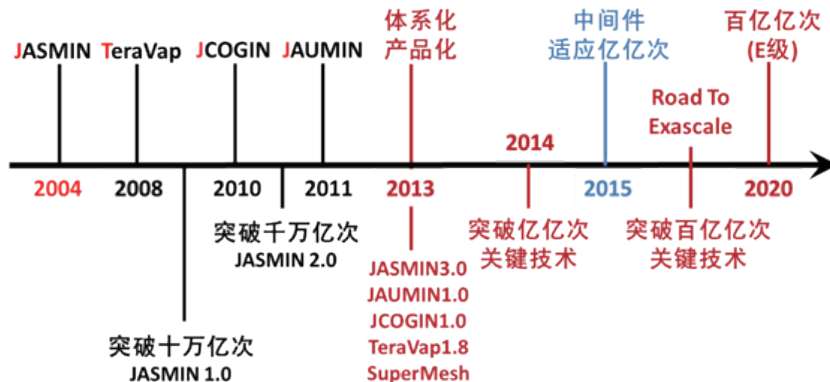
高性能科学与工程计算中间件

定位与内涵

高性能科学与工程计算中间件面向结构网格、非结构网格和无网格组合几何三类数值模拟应用，建立编程框架、前处理引擎、可视分析后处理引擎，支撑高置信、高效能、高产出应用软件的快速研发，突破应用软件“计算效率低”、“研制周期长”、“前后处理弱”的三大瓶颈，促进我国重大应用数值模拟与国产高性能计算机的协调发展。



- 编程框架：集成高效能计算共性技术，提供屏蔽并行实现细节的构件化编程模型和接口，支撑领域专家以“并行思考、串行编程”的方式研制应用软件，实现应用软件“高效能”。
- 前处理引擎与可视分析后处理引擎：与编程框架无缝对接，支撑应用定制专用前后处理图形界面，为应用软件提供前处理建模和数据可视分析，实现应用软件“高产出”。



研发团队

团队现有固定研发人员 41 人，含全职人员 11 人，集中人员 30 人，平均年龄 35 岁。其中，研究员 9 人，副研究员 14 人，博士学位 23 人。

团队有 1 人获全国五一劳动奖章、“冯康”科学计算奖、于敏数理科学奖、中国科协“求是”杰出青年奖（实用工程奖）、中物院杰出专家荣誉称号、2 人获邓稼先青年科技奖等奖项、1 人入选中物院“双百人才工程”，2010 年，团队获“国防科技创新团队”荣誉称号。

技术革新

建立“集成共性研制编程框架、基于框架研发应用软件”的软件研发新模式，革新了“串行程序并行化”的应用软件研发传统模式。

- 建立了实现“物理建模、数学离散、并行计算”三者分离的构件化并行编程模型及接口，突破了多学科交叉、多团队协作研制软件的“编程墙”，支撑应用领域专家“并行思考、串行编程”，快速研发应用软件。
- 建立了高效能计算架构技术体系，突破“效能墙”，支持应用软件从万亿次到千万亿次、亿亿次高效能计算的自动平滑升级，促进应用软件与高性能计算机的协调发展。
- 建立了“前处理引擎-编程框架-可视分析引擎”，突破了应用软件“前后处理弱”的瓶颈，支撑软件产品界面快速定制，促进应用软件产品化。

目前,中间件已支撑了武器物理、激光聚变、电磁环境、材料科学、地球环境、工程力学、裂变能源等 10 多个重大应用领域共 54 个软件的快速研发(右图所示),涉及 10 多家单位的 20 多个团队,150 多万行代码,使这些应用软件具备数万至数十万核的并行计算能力。



科技影响力

- 获国家技术发明二等奖(6人次),国家科技进步特等奖1项(2人次)、一等奖1项(1人次)、二等奖1项(1人次),军队科技进步一等奖12项(49人次)。
- 承担和完成国家杰出青年基金1项、国家自然科学基金重点项目2项、面上和青年基金23项、国家科技部973项目课题2项、863重大项目3项、国防科工局重大项目及课题6项、国家科技部重点研发计划项目1项、军口973、863项目及中物院预研重大项目等多项课题。
- 合作出版著作5部、译著1部,在国内外核心学术期刊上发表论文130多篇,发明专利授权6项。
- 2010年,作为信息科学部26项成果之一,部分成果入选国家自然科学基金委《25周年资助与管理绩效国际评估》优秀成果代表。
- 2014年,由美国科学院院士John Bell教授领导的劳伦斯伯克利国家实验室科学计算团队发表关于应用编程框架的综述文章,JASMIN框架被列为普适性编程框架的典型代表。



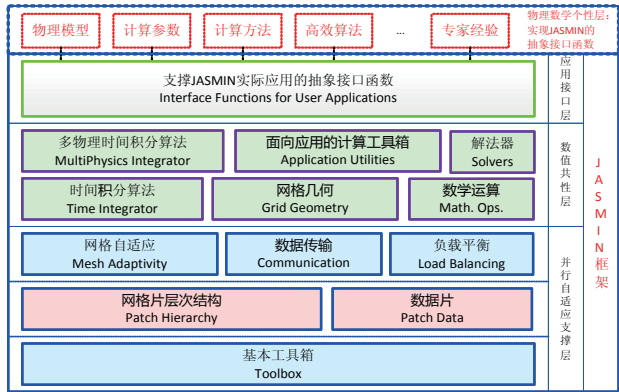
并行自适应结构网格应用软件编程框架 JASMIN

J Adaptive Structured Mesh applications Infrastructure

简要介绍

JASMIN 是面向结构网格应用研制的编程框架。该框架面向现代高性能计算机体系结构，设计数据结构、发展和集成高效并行算法、采用先进软件技术，提供屏蔽并行实现的编程接口，支持领域专家在个人电脑上“并行思考、串行编程”，快速研制并行应用软件。

JASMIN 框架已成功应用于武器物理、激光聚变、高新技术装备等领域，支撑了 4 个亿亿次和 30 多个千万亿次应用软件的快速研发和数值模拟。

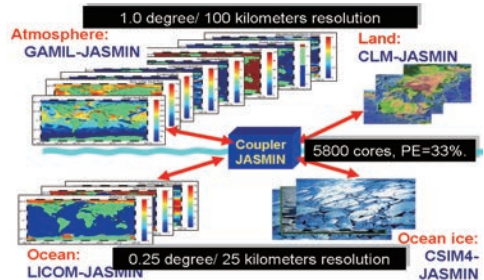
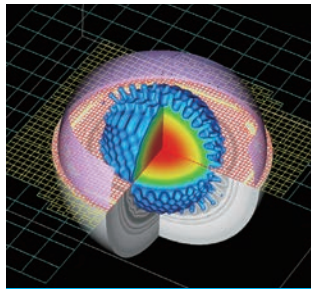
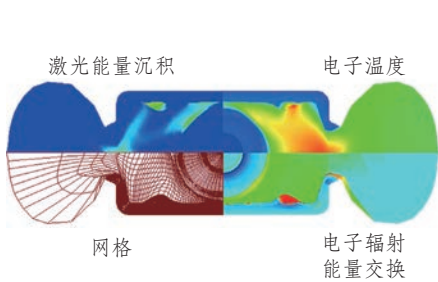


功能特色

- 支持多种网格类型：单块结构网格、多块结构网格（协调拼接、非协调拼接）、自适应加密结构网格
- 支持多种计算方法：h-自适应、r-自适应、接触碰撞、输运扫描、粒子模拟
- 集成多种求解器：线性、非线性、特殊求解器（FMM、FFT、Kohn-Sham、Poisson）及预条件库
- 支撑多物理场、多时空尺度耦合计算
- 支持异构协同计算
- 具备自动容错功能，支持“一次提交，完整模拟”
- 配备图形化集成开发环境，屏蔽并行编程和面向对象编程

应用实例

典型应用软件	应用领域	计算规模	处理器核数
时域全波电磁模拟软件	电磁环境	4608 亿网格	93 万异构核 (12 万 CPU 核 + 81 万 MIC 核)
激光等离子体相互作用粒子模拟	激光聚变	1555 亿粒子	93 万异构核 (12 万 CPU 核 + 81 万 MIC 核)
激光等离子体相互作用流体力学	激光聚变	805 亿网格	93 万异构核 (12 万 CPU 核 + 81 万 MIC 核)
三维辐射流体力学界面不稳定性	激光聚变	70 亿网格	80 万异构核 (10 万 CPU 核 + 70 万 MIC 核)
二维辐射流体耦合中子输运程序	武器物理	上亿自由度	1.2 万 CPU 核
关联电子体系模拟软件	材料科学	60 个 K 点 × 600 个特征态	1.2 万 CPU 核
三维冲击动力学粒子模拟	材料科学	2.56 亿粒子	3.2 万 CPU 核



ICF 集成程序:

多块结构网格非结构拼接、5 个物理过程（流体、三温热传导、辐射扩散、辐射输运、激光传输）耦合；物理建模图形界面

Lared-S 程序:

辐射流体力学 SAMR（三层自适应加密，显隐耦合时间积分）、80 亿网格分辨率，网格总量降低 1 个量级以上

地球系统高分辨率耦合模式:

7 人半年协同攻关，从低分辨率、108CPU 核跨越至高分辨率、5800CPU 核，其中大气分量模式实现超高分辨率，11088CPU 核

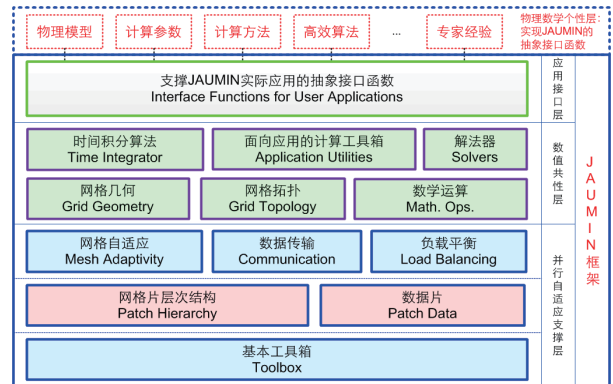
并行自适应非结构网格应用软件编程框架 JAUMIN

J Adaptive Unstructured Mesh applications Infrastructure

简要介绍

JAUMIN 是面向非结构网格应用研制的编程框架。该框架集成了高效非结构网格数据结构及索引算法，提供屏蔽并行实现的编程接口，支持领域专家在个人电脑上以“并行思考、串行编程”的方式快速研制并行应用软件。

JAUMIN 框架已成功应用于重大科学装置结构力学分析与优化设计、裂变能源、武器物理、水利水电等领域，支撑多个千万亿次应用软件的快速研发和与数值模拟应用。

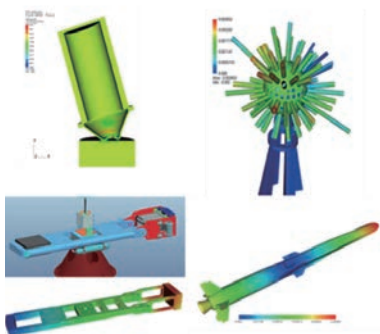


功能特色

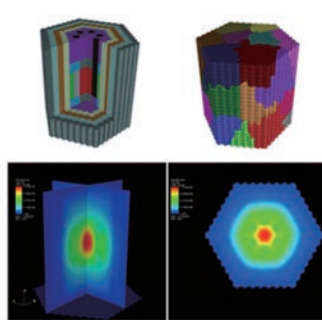
- 支持多种网格类型：任意多边形/多面体，如三角形、四边形、四面体、六面体、三棱柱等；混合网格；板、壳、杆等结构单元
- 支持多种计算方法：有限元、有限体积、ALE 方法、扫描输运、接触碰撞、光路追踪、离散块体分析 (DDA)
- 集成多种实用功能：线性/非线性/特征值求解器、动态负载均衡
- 支持多物理场、多时空尺度耦合计算
- 具备自动容错功能，支持“一次提交，完整模拟”
- 配备图形化集成开发环境，屏蔽并行编程和面向对象编程

应用实例

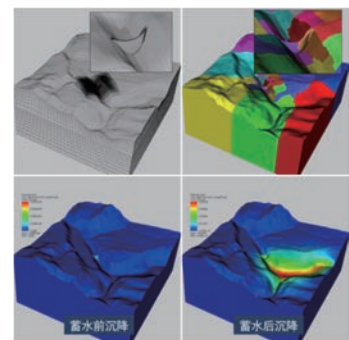
典型应用软件	应用领域	网格类型	计算规模	CPU 核数
三维粒子输运软件 JSNT-U	裂变能源	四面体	1.8 亿网格、691 亿自由度	49,152
冲击动力学分析软件 PANDA-Impact	工程力学	四面体/六面体	1 亿网格、2.5 亿自由度	12,288
静力/振动分析软件 PANDA-Stavib	工程力学	四面体/六面体	2.7 亿网格、1.3 亿自由度	10,000
三维 ALE 流体力学软件	流体力学	混合网格： 四面体、三棱柱、六面体	3 亿网格	4,096



结构力学软件 PANDA:
针对重大工程全生命周期中的力学问题，可完成产品部件、分系统、全系统的强度、刚度、模态与振动、冲击动力学响应等上万核上亿自由度的结构力学精细模拟



Sn 粒子输运软件 JSNT-U:
基于非结构网格的离散纵标多群中子输运软件，可计算临界本征值问题，用于堆芯物理分析。基于 JAUMIN 框架的多进程多线程并行扫描计算支撑模块，JSNT-U 能扩展至万核以上



Saptis 软件:
全生命周期水坝力学性能分析软件。由水科院在其串行程序的基础上基于 JAUMIN 框架 2 月内实现并行，计算规模提升 2 个量级

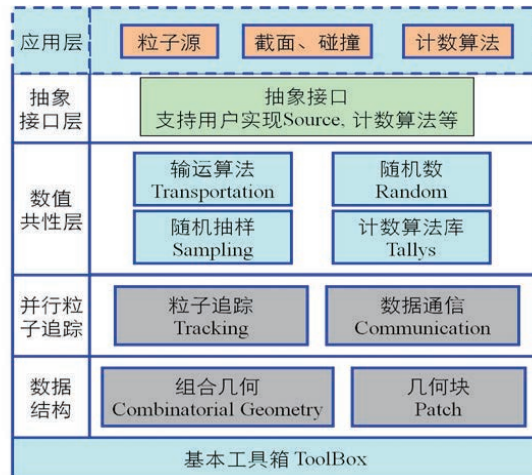
并行无网格组合几何应用软件编程框架 JCOGIN

J parallel COmbinatorial Geometry applications INfrastructure

简要介绍

JCOGIN 是面向无网格组合几何应用研制的编程框架。该框架集成了组合几何高效数据结构、并行粒子追踪模块、随机数生成器、并行通信算法，提供并行编程接口，支持领域专家在个人电脑上以“并行思考、串行编程”的方式，快速研制并行应用软件。

JCOGIN 框架可支持组合几何上的蒙特卡罗 (MC) 和特征线 (MOC) 方法的三维粒子输运计算。



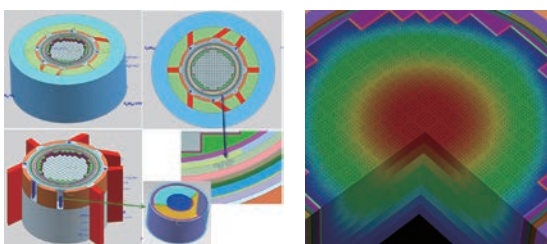
功能特色

- 支持十多种几何体：球、圆柱、长方体、圆锥、六棱柱、圆环体等，以及由基本几何体通过布尔运算构成的组合几何体
- 具备动态多物理耦合计算功能，可支持输运与燃耗耦合的多物理并行计算，燃耗区可达数百万
- 具备粒子并行 (MPI/OpenMP) 与区域分解并行 (MPI) 耦合功能，可支持实现千万几何体的反应堆全堆芯精细模拟，可扩展到十万 CPU 核

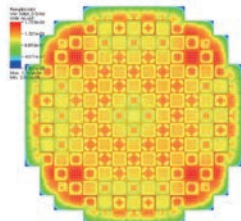
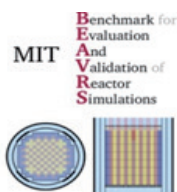
应用实例

JCOGIN 框架已支撑研发了 JMCT 等 4 个应用软件。其中 JMCT 针对多个反应堆模型实现了数千上万核的大规模数值模拟。

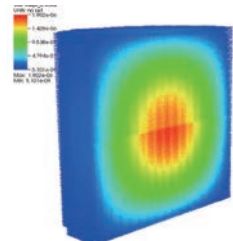
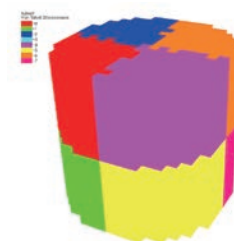
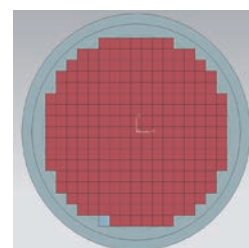
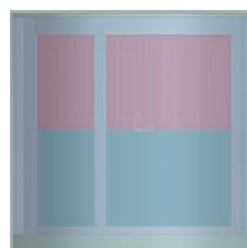
典型应用模型	计算规模	CPU 核数
BEAVRS 模型	2000 万几何单元、24000 亿粒子	120,000
大亚湾精细反应堆	1070 万几何单元、600 亿粒子	4,096
H-M 基准模型	1395 万几何单元、983 亿粒子	2,048



复杂组合几何模型 (拓扑关系复杂, 千万几何体)



BEAVRS 模型 (百万燃耗区)



H-M 国际基准反应堆模型 (千万几何体, 区域剖分 2*2*2)

并行数值模拟前处理引擎 SuperMesh

Parallel Numerical Simulation Pre-Processing Engine

简要介绍

SuperMesh 是一款面向大规模复杂数值模拟的前处理开发引擎。它采用并行网格生成方法为复杂几何模型生成高精度、高分辨率的大规模网格，支持按需快速定制应用程序的专用前处理工具。SuperMesh 具备 CAD 模型处理、基本几何建模、网格并行生成与优化、面向物理属性和边界条件定义的网格扩展标记、网格质量检查等功能，可支持基于复杂几何构型的结构网格、非结构网格的自动生成和组合几何体的自动转换。

SuperMesh 已成功应用于复杂电磁环境、反应堆辐射屏蔽、结构静力学和模态振动、冲击动力学、含能材料、冲击波等数值模拟分析。

主要功能

基于 CAD 模型的物理建模及几何建模

- ▶ 支持主流 CAD 软件的建模结果的导入 (SAT、STEP 格式)
- ▶ 面向网格生成的几何模型正确性检测和自动修补
- ▶ 面向物理属性、载荷及边界条件设置的网格扩展标记
- ▶ 基本几何体建模
- ▶ 面向图形显示的几何实体面片化

结构网格生成

- ▶ 笛卡尔和柱坐标系的均匀、非均匀结构网格
- ▶ 结构网格的并行生成
- ▶ 网格的几何及拓扑属性计算

非结构网格生成

- ▶ 三角形、四面体、六面体、多面体、混合网格
- ▶ 多种格式的网络文件输入、输出
- ▶ 几何自适应的网格分布
- ▶ 网格的并行加密和优化
- ▶ 网格几何和拓扑的正确性检测

组合几何模型转换

- ▶ GDML 格式模型的输入和转换为 Brep 格式模型
- ▶ 大规模几何构型的组合关系报表及可视化 vtk 文件输出

技术特色

面向超大规模复杂几何模型的百亿结构网格、十亿非结构网格的自动生成和千万组合几何的自动转化

面向 CAD 模型几何特征的网格自适应生成

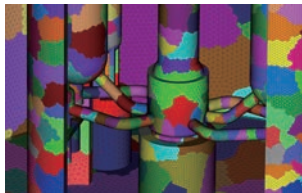
基于 CAD 模型的并行网格贴体加密，分辨率越高越逼近真实几何模型

良好的可扩展性，支持多级并行，可无缝对接数十万 CPU 核并行的数值模拟计算

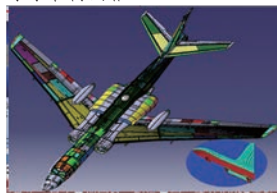
易学易用，支持通用 / 专用前处理软件的快速定制

应用实例

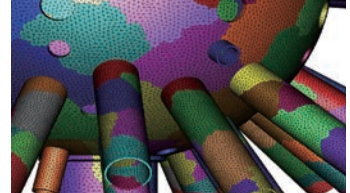
核电站模型，包含稳压器、蒸发器、反应堆、泵等精细部件，在 1024CPU 核上并行生成 1.6 亿四面体网格



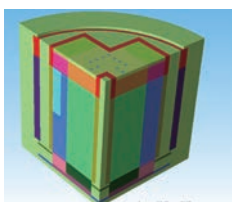
真实工程飞机模型，存在大量薄片、尖角等精细结构特征。6000CPU 核上并行生成 80 亿均匀结构网格



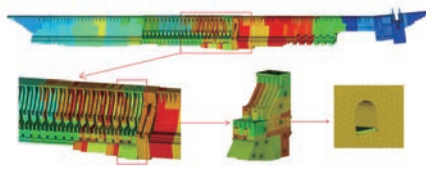
神光 III 靶球模型，存在大量薄壁、细圆管结构特征，在 8192 CPU 核上并行生成 2.6 亿四面体网格



强大的组合几何模型处理能力，粒子输运领域经典模型—Venus-3 模型，由 7484 个几何实体组成



三峡大坝模型，包含 1876 个几何实体，尺度跨越三个量级，在 64CPU 核上并行生成 1.6 亿初始四面体网格



含弹离心机系统模型，包含销轴、转臂、夹具、吊篮和真实弹头等部件，在 798CPU 核上生成 1.2 亿四面体网格



简要介绍

TeraVAP 是面向大规模复杂模拟数据场的后处理软件。它基于并行可视分析流程，通过优化数据读入、数据处理、图像绘制三阶段，实现数据场的交互可视分析。它提供丰富的可视化、数据操作和定量分析方法，支持用户绘制物理图像、制作视频动画、挖掘蕴含于数据中的物理规律和科学知识。

TeraVAP 已成功应用于武器物理、激光聚变、裂变能源、复杂电磁环境、材料科学、工程力学、地球环境等重大应用领域，支撑了 30 多个应用软件产生的所有 TB 量级数据场的可视分析。

主要功能

数据类型

- ▶ 网格类型：支持结构网格、非结构网格和组合几何
- ▶ 变量类型：标量、矢量、张量和介质组分量

10 多种可视化方法

- ▶ 标量：体绘制、云纹图、粒子图
- ▶ 矢量：箭矢、流线
- ▶ 其它：子集图、物质界面图、平行坐标

30 多种数据操作方法

- ▶ 空间抽取：切片、切割、曲面抽取
- ▶ 变量抽取：阈值抽取、等值体、等值面
- ▶ 空间变换：镜像、提升、绕轴旋转

60 多种定量分析方法

- ▶ 数值查询：拾取、线探查、极值
- ▶ 数据推导：数学运算、求导、积分、比较
- ▶ 数值统计：直方图、方差、相关性

技术特色

- ▶ 大规模数据并行：多 CPU 耦合多 GPU 混合绘制，实现 TB 量级时变数据场的交互可视分析，单时刻数据交互时间；100MB 小于 0.1 秒；1GB 小于 0.8 秒；10GB 小于 5 秒；2000 万几何实体小于 8 秒

- ▶ 可直接绘制复杂网格类型数据：多层自适应结构网格、多块拼接变形结构网格、带拓扑结构粒子等

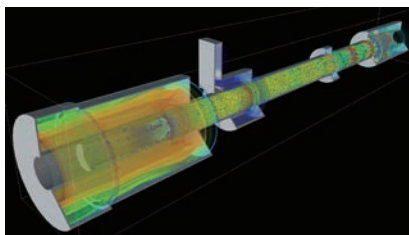
- ▶ 可处理超大规模数据：百亿结构网格、十亿非结构网格和千万几何实体数据

- ▶ 性能优于同类软件：与国际商用软件 EnSight 比，可处理数据规模高近 1 个量级；与国际开源软件 VisIt 比，性能快约 2 倍

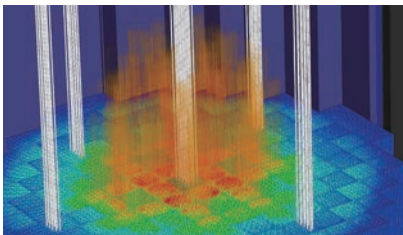
- ▶ 支持快速定制：二次开发，支持应用软件后处理图形界面按需定制

应用实例

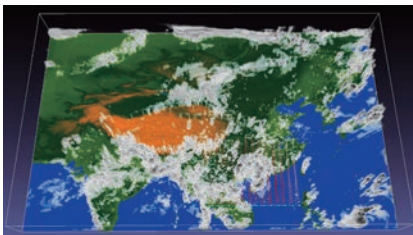
高功率微波器件的整管大规模粒子模拟：
体绘制 + 粒子图 + 几何构型



大亚湾核反应堆中子能量沉积：体绘制 + 云纹图 + 几何构型；24 CPU 核，75 万组合几何实体



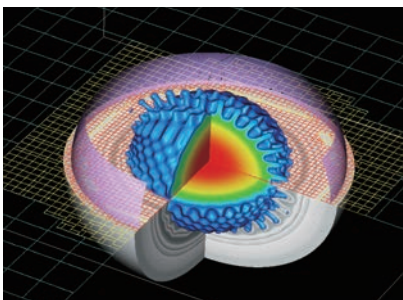
台风威马逊模拟：体绘制 + 云纹图 + 箭矢图；区域模式分辨率 8 公里



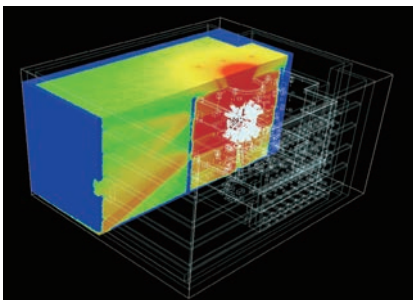
瞬态电磁脉冲照射下的电磁响应：几何构型 + 体绘制；1600CPU 核，75 亿均匀网格



流体界面不稳定性：灰度填充 + 云纹图 + 网格图 + 阈值抽取；三层自适应网格

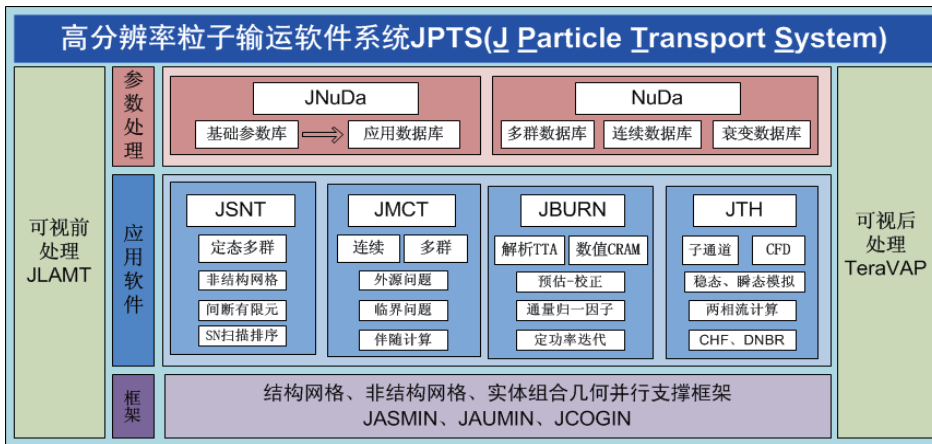


神光 III 主体建筑物结构耦合中子体平均通量模拟：剖切图 + 云纹图 + 网格图



反应堆粒子运输软件系统 JPTS

JPTS (*J Particle Transportation Software System*) 面向国家核能反应堆领域对粒子运输高分辨率数值模拟软件的需求，致力于核反应堆物理与几何材料的精细建模和模拟，为反应堆堆芯物理分析、临界安全分析、屏蔽设计、燃料优化设计、极端事故分析等提供系统级解决方案。此外，JPTS 还可应用于核探测、生物医学、石油放射性测井、物探、乏燃料后处理等领域。JPTS 包含四个应用软件、两套数据库和前后处理工具。已发布 JMCT V2.2.0、JSNT V1.2.0 和 JLAMT V2.2.0 三款软件。



JPTS 由软件中心粒子运输团队研发，团队现有固定研发人员 19 人，含全职人员 9 人，集中人员 10 人，平均年龄 34 岁。其中，研究员 1 人，副研究员 10 人，博士学位 15 人，海外引进人才 1 名。

近五年，团队负责承担了国家科技重大专项核电专项、科工局核能开发课题、科技部 973 项目课题、科技部 863 项目课题各 1 项，国家自然科学基金青年项目 3 项、中物院发展基金重点项目 1 项。获国家科技进步二等奖 1 项 (1 人次)，军队科技进步一等奖 7 项 (7 人次)、二等奖 3 项 (6 人次)、三等奖 1 项 (2 人次)，中国核能行业协会科学技术一等奖、三等奖各 1 项。

目前，JPTS 已应用于 CAP1400 屏蔽设计；面向中国核动力研究设计院、中国广核研究院有限公司、环保部核与辐射安全中心，中科华核电技术研究院、上海核工程研究设计院、中国核电工程有限公司、西南核物理研究院及中物院二所、四所、八所、九所等十多个用户单位提供技术支持。以下为部分用户证明。



简要介绍

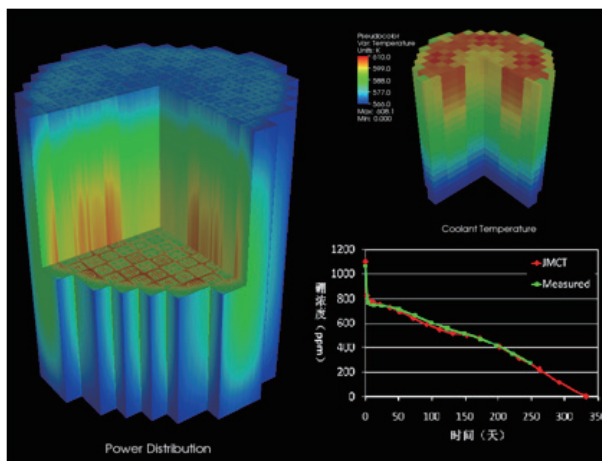
反应堆高置信度数值模拟是挑战性的国际难题，对提高反应堆数值模拟精度，提升反应堆的经济性和安全性具有工程指导意义。其中 JMCT 多物理耦合计算功能包含输运 - 热工 - 燃耗耦合计算及各个模块独立计算，支持核素截面的在线多普勒展宽计算（OTF）、临界搜索等功能。其中，外源输运 - 燃耗耦合计算可以用于活化问题的模拟，临界输运 - 燃耗耦合计算可用于反应堆物理的计算，支持的燃耗区可达百万量级；对于屏蔽计算，发展了蒙特卡 -SN 耦合输运计算，大大提升了深穿透屏蔽计算的精度，缩短了计算时间。JPTS 的多物理耦合计算中不同的计算模块采用统一的 CAD 建模、自动网格对应、内耦合计算以及可视化输出，形成一整套完整的高性能数值模拟产品，并应用于反应堆工程。

实际应用典型案例：BEAVRS 国际基准模型、国内某商业压水堆第一燃料循环、国内某商业压水堆全厂房中子辐照剂量计算。

应用实例

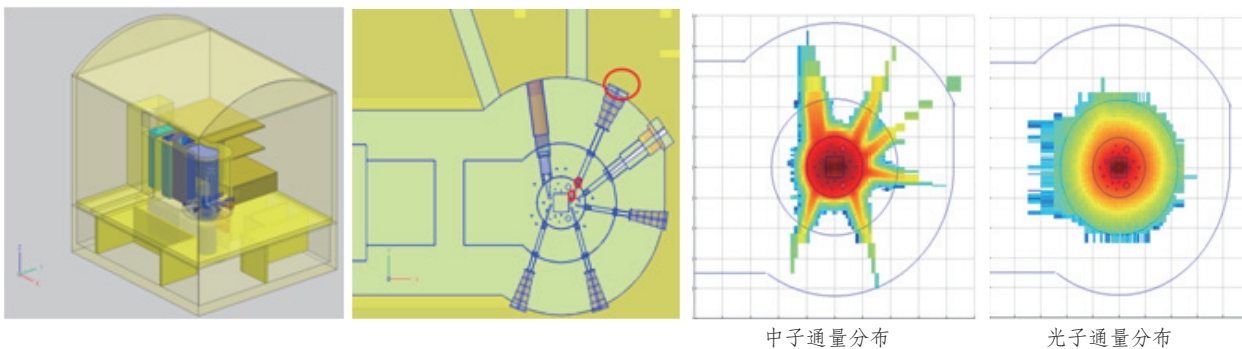
国内某商用压水堆第一燃料循环计算

全堆 pin-by-pin 输运 - 热工 - 燃耗耦合计算，燃耗区近百万，计算量 20 万核时。统计全堆 pin 功率分布，计算第一循环硼降曲线。下图是初始功率和冷却剂温度分布，以及第一循环硼降曲线，计算结果与实验结果符合很好



研究堆全厂房屏蔽计算

采用中子 - 光子耦合输运计算。堆芯采用 pin-by-pin 模型，全厂房精细建模，采用网格计数统计中子和光子通量分布。计算过程采用 3600 万初始源粒子，计数网格约 55 万。得到全厂房中子、光子通量分布



三维蒙特卡罗粒子输运模拟软件 JMCT

J Monte Carlo Transport

简要介绍

JMCT 是一款通用三维中子 - 光子电子耦合输运蒙特卡罗模拟软件。该软件具备 CAD 可视化交互输出界面，支持连续和多群能量模式，考虑了包括热化在内的各种核反应，可精细计算反应堆全堆芯 pin 功率及时空分布，能够模拟固定源、临界本征值及伴随输运问题。软件具有丰富的降低方差技巧，并为用户提供了多种标准源，支持大型反应堆“堆芯 - 组件 - 栅元”跨量级空间尺度问题的模拟，满足工业界反应堆计算分析对高精度的要求，可用于确定论设计软件的参考验证。

实际应用典型案例：大亚湾 1 号机组反应堆 pin-by-pin、秦山二期 pin-by-pin、ACP100、神光 -III、VENUS-3、军用堆、Kord Smith 挑战 H-M 模型和 BEAVRS 模型等。

主要功能

可视化建模

- ▶ 实体组合几何
- ▶ 几何重复 / 几何 + 材料重复

灵活高效计数

- ▶ 通量 / 流 / 反应率 / 本征值
- ▶ 体 / 面 / 点 / 网格

精细物理描述

- ▶ 连续 / 多群能量截面
- ▶ 热散射效应与温度效应

复杂源的抽样

- ▶ 几何体源 / 面源 / 点源 / 自定义源

降低方差技巧

- ▶ 源偏倚、权窗、俄罗斯轮盘赌、分裂等

技术特色

具备粒子并行与区域分解多级并行功能，支持千万量级几何体、千亿粒子规模输运问题模拟

支持百万量级几何体、千亿粒子规模输运 - 能耗耦合问题模拟，实现 Kord Smith 挑战 BEAVRS 简化模型模拟，1024 亿粒子，10240 个 CPU 核，计算结果达到双 99% 准则

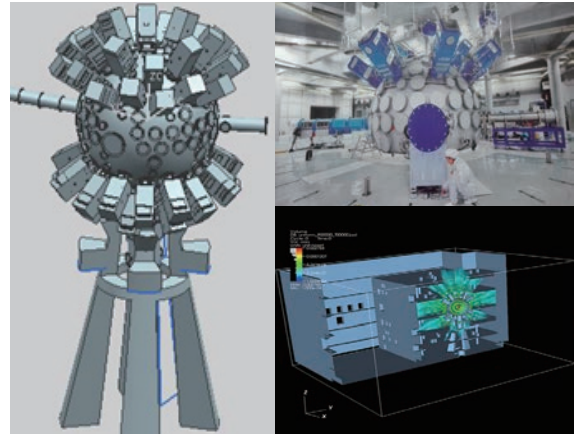
桌面机、万亿次、百万亿次、千万亿次：平滑移植、数十至数万 CPU 核可扩展

与前后处理软件无缝对接，支持大型复杂装置的精细化建模、支持千万几何体上物理量的可视分析

应用实例

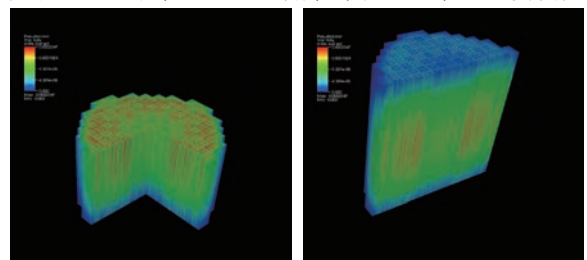
中物院神光 -III 主机精细模型屏蔽计算

1 万余个非规则的复杂几何体，4 亿粒子，720 核并行



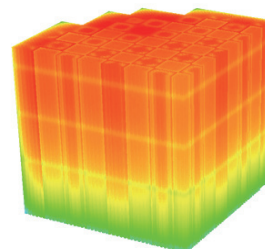
大亚湾全堆芯 pin-by-pin 模拟

轴向 16 ~ 256 层，1070 万几何体，计数量 12G，4096 核并行



Kord Smith 挑战 BEAVRS 模型

Units: mg 987
0.8777
0.2605
0.07731
0.02204
Max: 2.627
Min: 0.02204



活性区燃料轴向划分 398 层，燃料几何体数 2200 万，2400 亿粒子模拟；区域 8 剖分，12 万核并行

简要介绍

JSNT 是一款三维中子 - 光子耦合离散纵标 (SN) 输运软件。该软件采用 SN 权重差分算法求解玻尔兹曼输运方程, 可计算外源问题、临界问题、有源次临界问题以及伴随输运问题。软件主要用于反应堆屏蔽计算和堆芯物理分析。

主要功能

○ 输运计算

- ▶ 中子、光子、中子 - 光子耦合
- ▶ 外源、临界、有源次临界以及伴随问题
- ▶ 三维直角几何 / 柱几何
- ▶ PCR、Krylov 子空间等迭代加速算法
- ▶ 首次碰撞源算法

○ 截面参数

- ▶ 主库与工作库结合, 能群结构 199n-42 γ , 47n-20 γ (t)
- ▶ 无限稀释库以及问题相关库

○ 前后处理

- ▶ 一体化用户界面, 包括工程 /GDML、模型导入、几何模型显示与交互、物理模型参数设置、网格生成、离散预览、输运计算、后处理结果显示与交互、结果导出以及工程保存

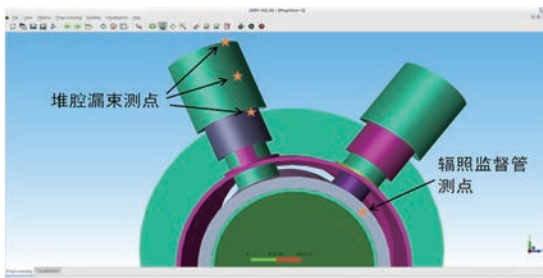
技术特色

- 数万核可扩展, 支持千万网格剖分、数万亿自由度屏蔽计算和堆芯物理问题模拟

- 与 TORT 程序相比, 计算规模和计算性能超越 2-3 个量级

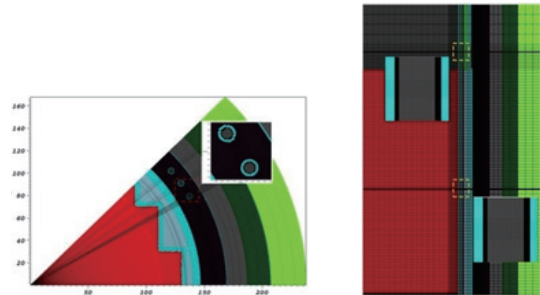
应用实例

- 国内某商用压水堆屏蔽计算模型

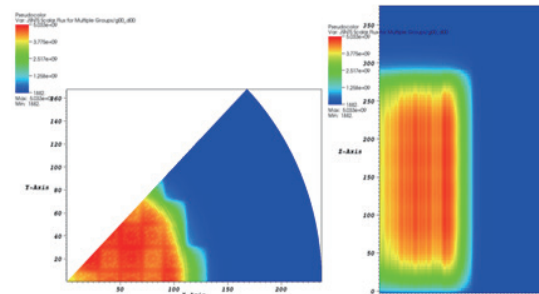


国内某商用反应堆屏蔽模型

辐照监督管模型, 采用约 200 万网格、S8/S16、P3、47 群参数计算, 计算精度完全满足工程设计要求, 且采用单节点并行即可高效完成模拟



辐照监督管模型网格剖分

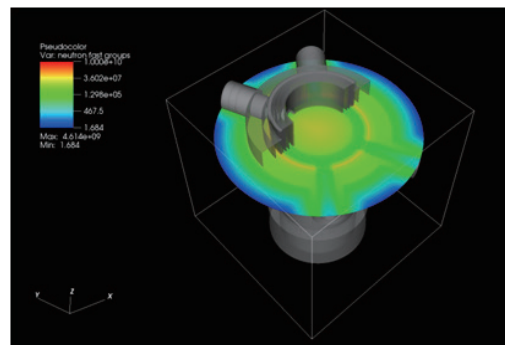


辐照监督管模型快中子注量率分布

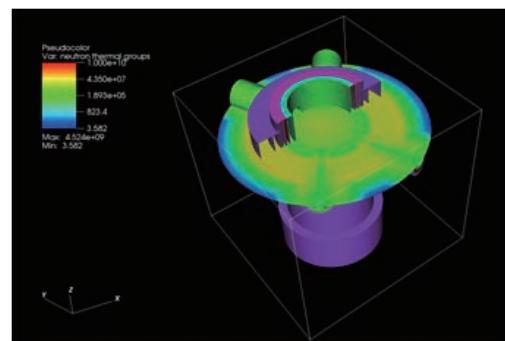
辐照监督管模型, JSNT 计算值与测量值的对比

求积组	各能量段与测量值相对误差(%)			计算时间(h)
	>1MeV	>0.5MeV	>0.1MeV	
S ₈	8.8	9.7	9.8	0.4
S ₁₆	-1.0	0.3	1.0	1.5

堆腔漏束模型, 采用千万网格、S16、P3、172 群参数计算, 给出三维中子注量率分布, 测点位置热群计算精度较设计单位 TORT/MCNP 接续计算方法提高 2 倍以上, 并行性能有效扩展至上万处理器核



堆腔漏束模型测点所在平面的快群中子注量率分布



堆腔漏束模型测点所在平面的热群中子注量率分布

大规模可视建模工具 JLAMT

J Large-scale Auto Modeling Tool

简要介绍

JLAMT 是一款 CAD 前处理建模工具软件。该软件针对大型复杂装置的几何体数量巨大、材料参数繁多等问题，集成了高效的数据结构和高精度的转换算法，提供了多种快捷的建模工具、行业组件工具、属性设置工具、操作工具等。

已和 JMCT、JCOGIN、Geant4 等软件无缝对接，可用于反应堆堆芯、辐射屏蔽等领域大型复杂装置的精细化建模。

实际应用典型案例：大亚湾反应堆、神光激光聚变装置、Kord-Smith 挑战、BEAVRS 模型、秦山二期压水堆模型、ACP100 反应堆、VENUS-III、星光 III 靶室装置模型等。

主要功能

文件操作

- ▶ 自动读入、保存模型文件及相关的参数文件

建模工具（可定制和扩充）

- ▶ 基本体素建模：球体、柱体、圆锥体（圆台）、长方体
- ▶ 特殊体素建模：1/n 圆锥体、1/n 圆柱体、椭球体等
- ▶ 行业组件建模：反应堆堆芯组件等

属性设置工具

- ▶ 材料参数设置：交互方式和文件方式
- ▶ 父子关系设置：使几何体之间具有空间关系
- ▶ 物理参数设置：计算边界等

操作工具

- ▶ 布尔运算操作：交、并、差
- ▶ 重复阵列操作：一次可重复多个几何体，多种重复方式

输出转换

- ▶ 检查功能：对模型进行正确性检查
- ▶ 输出转换：输出转换为 GDML 文件

批量查找工具

- ▶ 提供多种关键字查找，编辑工具

分层工具

- ▶ 复杂模型的不同部件可放置在不同图层中，便于操作

一体化工具

- ▶ 提供建模、计算、可视化分析一体化功能

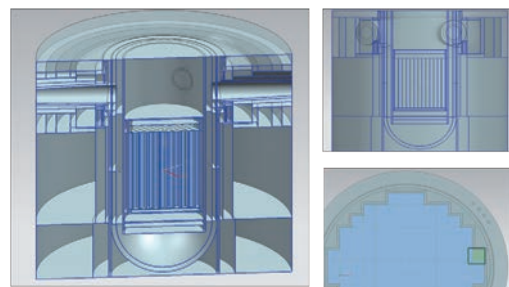
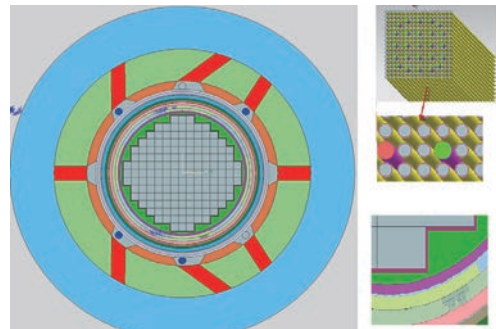
技术特色

- 基于特征建模技术的转换算法实现了模型转换的准确性
- 行业组件模块大大减轻了建模的工作量和出错率
- 显、隐式建模方法使百万量级的反应堆建模成为可能
- 多种辅助工具为大型复杂模型的后期编辑工作提供了便利

应用实例

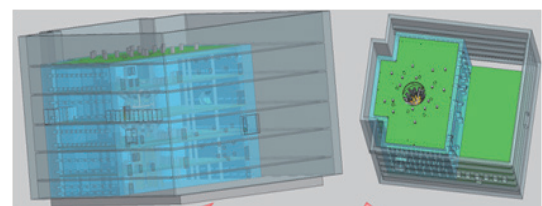
反应堆精细建模

大亚湾、BEAVRS 全堆等商业堆 pin-by-pin，上百万重复结构实体建模；CAP1400 堆体实体建模，研究堆全厂房实体建模；CFR-600 堆本体，上万不规则几何形状实体建模



神光全厂房精细建模

全厂房精细建模，孔道、靶室、机柜等结构精确 CAD 描述



神光III主机装置全模型

模型规模超过一万

简要介绍

JBURN 是一款并行点燃耗计算软件，可计算分析常见核能系统中核素含量的变化情况。该软件可应用于反应堆燃耗计算、乏燃料成分分析等。软件具备线性子链与切比雪夫有理近似两套求解器，数值计算精度与计算效率高；能够和运输软件 JMCT 内耦合计算，可实现不同燃耗区计算大规模并行，燃耗区可达百万量级。

实际应用典型案例：BEAVRS 国际基准模型、ITER 次临界包层、OECD-NEA 压水堆燃耗基准问题等。

主要功能

○ 燃耗方程求解器

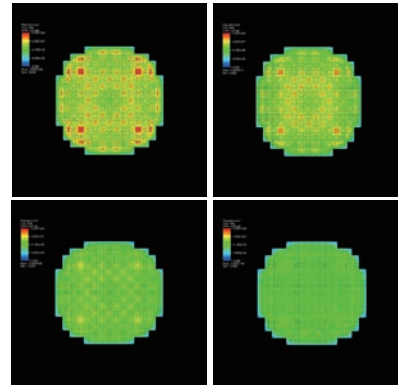
- ▶ 线性子链方法 TTA
- ▶ 切比雪夫有理近似 CRAM

○ 燃耗数据库读取

- ▶ TTA3400 种核素衰变数据，每种核素最多 5 种衰变分支；
- ▶ 3400 种核素 63 群中子反应截面数据，每种核素最多 82 种反应道
- ▶ 60 种常见铀系核素裂变产额
- ▶ 部分核素 25 群产光截面数据

○ 运输燃耗耦合计算

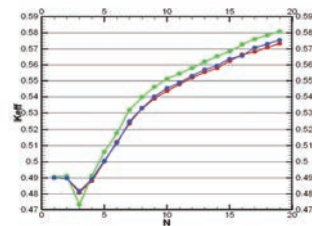
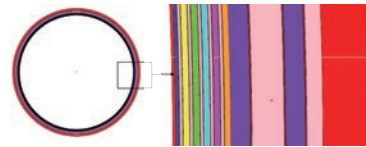
- ▶ 基于反应率或通量的耦合
- ▶ 定功率或定通量燃耗计算模式
- ▶ 起点近似、中点近似、预估校正计算策略



不同时刻全堆 pin-by-pin 功率分布

○ ITER 次临界包层

30 层同心球壳包层，含氢、锂、铁、铀等核素，材料构成复杂



系统 keff 随燃耗深度变化 (绿: MCNP+ORIGEN 蓝: ANISN+JBURN 红: JMCT+JBURN)

技术特色

○ 自动搜索、构造燃耗链的 TTA 方法，高精度、高效率的燃耗矩阵求解器 CRAM

○ 内耦合运输计算程序 JMCT，共享 CAD 可视化建模，重复结构燃耗区自动展开

○ 不同燃耗区计算可大规模并行，燃耗区数目超过一百万

○ 自动燃耗区数据可视化输出与分析

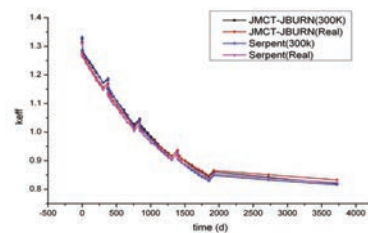
应用实例

○ BEAVRS 国际基准题燃耗计算

压水反应堆，193 个组件，17*17 棒束结构，全堆 pin-by-pin 建模，燃料棒轴向分 30 层，152.8 万燃耗区；堆芯总功率 3400MW，燃耗步 0d、4d、96d、180d

○ OECD-NEA 压水堆燃耗基准题

压水堆单栅元燃耗基准题，燃耗深度最深达到 44Gwd/tU

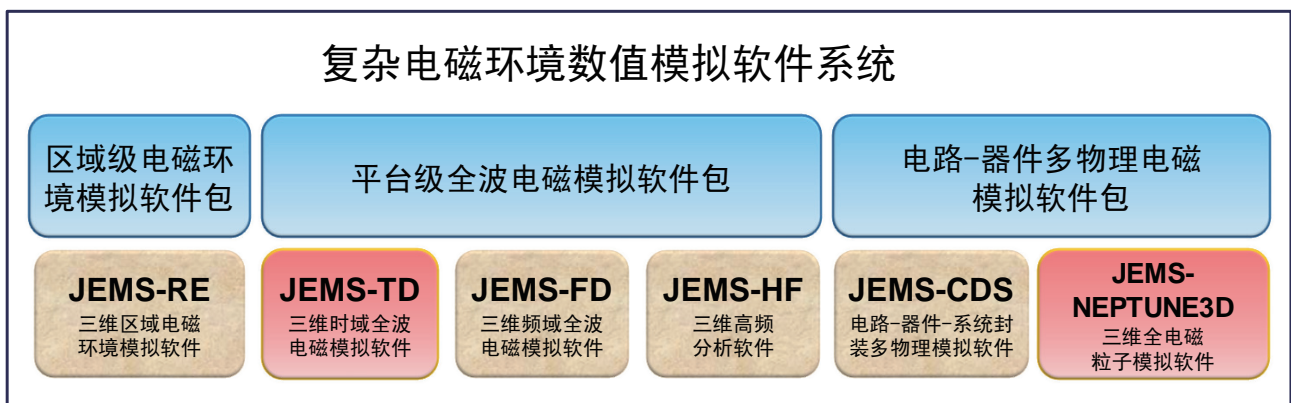


栅元 kinf 随燃耗深度变化

复杂电磁环境数值模拟软件系统 JEMS

JEMS(*J ElectroMagnetics Solver*) 致力于电磁场产生、辐射、传输及效应的高性能数值模拟，为高价值目标提供高置信度、高效能、高可用电磁计算服务及专用软件，为重大应用定制“区域-平台-系统-器件”整体电磁工程解决方案。

该系统以多时空尺度、多介质材料属性、多物理过程耦合条件下的高效并行及多算法协同计算为特色，可应用于高价值目标的目标特性及电磁环境适应性分析、高分辨率电磁频谱地图及平台级电磁兼容设计等领域，已应用于运八的整机高强辐射场适应性评估、建筑物的强电磁脉冲效应、驱逐舰目标特性分析及高功率微波源设计等重大应用中。该系统由区域级电磁环境模拟、平台级全波电磁模拟、器件级多物理电磁模拟三个软件包构成。已发布了 JEMS-TD V1.8、JEMS-NEPTUNE3D V2.4 两款软件。



JEMS 由软件中心电磁团队研发，团队现有固定研发人员 15 人，含全职人员 10 人，集中人员 5 人，平均年龄 32 岁。其中，研究员 1 人，副研究员 5 人，博士学位 8 人。

团队负责承担了科技部 973 项目课题 1 项、军口 863 课题 4 项、国防科工局重点项目 1 项、国家自然科学基金重点项目 1 项、面上项目 1 项、青年基金 2 项。获军队科技进步二等奖 6 项（13 人次），三等奖 7 项（10 人次），2 人获“863 项目关键技术攻关先进个人”称号，1 人入选中物院“双百人才工程”。

JEMS 软件系统已应用于中物院一所、五所、八所、九所、十所的科研项目中，并为马兰实验基地、中电集团 54 所、中船重工 7 院、西飞、一飞院、航天一院、空军装备研究院一所和八所等单位的实际应用提供了高性能数值模拟服务。

简要介绍

JEMS-TD 是一款通用三维时域全波电磁模拟并行应用软件。它使用时域有限差分 (FDTD) 方法求解 Maxwell 方程组, 通过精确建模及全波电磁模拟, 获取时域近场和远场电磁信息。该软件可应用于微波 / 毫米波 / 太赫兹 / 光波关键器件设计, 关键区域高分辨率电磁环境模拟、大型平台的电磁特性分析, 电磁兼容性分析等。

实际应用典型案例: 大型建筑物室内强电磁脉冲效应、运八整机高强辐射场适应性评估、多模制导弹近场耦合效应评估、“软 X 射线 / 极紫外无谐波光栅单色仪”重大科学仪器中的光子筛分光特性分析、机载阵列天线与无人机平台一体化仿真等。

主要功能

- 全电磁频段模拟: 短波、微波、毫米波、太赫兹直至光波段
- 材料: 金属材料、介质材料、复合材料、隐身材料等
- 多种边界条件: PEC、PMC、吸收、对称边界
- 多种激励源: 平面波、波导端口、高斯波束等
- 多频点输出功能: 自定义多个监测频点
- 近远场变换功能: 单站、双站 RCS 计算
- 混合阶 FDTD 计算: 高、低阶方法自适应选择
- 全波多导体传输线网络求解器
- 大规模并行计算: CPU+GPU/MIC
- 前后处理图形化用户界面

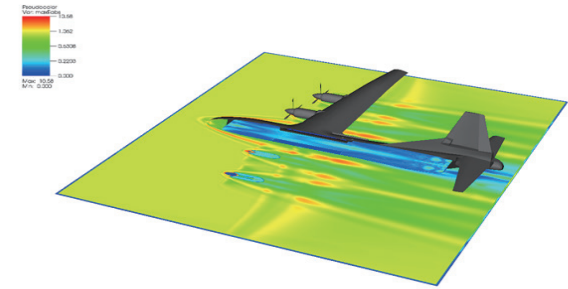
技术特色

- 千波长量级的平台级电磁辐射、传输、耦合、散射模拟
- 半空间计算功能, 具备目标 / 环境一体化电磁仿真能力
- 桌面机、万亿次、百万亿次、千万亿次、亿亿次计算: 平滑移植、数十至数十万 CPU 核可扩展
- 前处理复杂几何 CAD 精细建模、百亿量级 (非) 均匀网格并行自动生成、后处理 TB 量级交互并行可视分析
- 与商业软件 CST 时域全波求解器比, 计算规模高 2 个量级, 在数万 CPU 核上实现百亿量级网格的模拟

应用实例

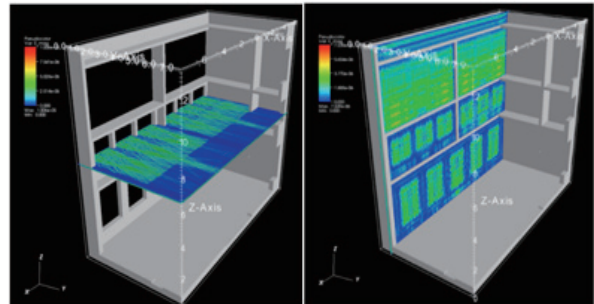
运 -8 高强辐射场适应性评估

运 -8 飞机电磁特性分析, 300 亿非均匀网格, 10800 处理器核并行



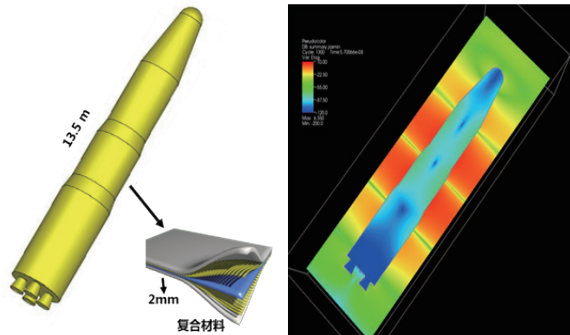
机载阵列天线与无人机平台一体化仿真

强电磁脉冲照射下建筑物内的电磁分布计算, 计及地面效应, 125 亿均匀网格, 5760 处理器核并行



复合材料弹头屏蔽效能评估

验证软件具备对包含复合材料电大尺寸、复杂目标的模拟能力。弹头电尺寸为 4 个波长, 弹头蒙皮为复合材料, 其厚度为 1/1500 波长, 网格数仅为千万量级, 使用小型服务器即可完成计算



三维全电磁粒子模拟软件 JEMS-NEPTUNE3D

J ElectroMagnetic Solver- Nonlinear Evolution of Plasma-interaction Technology Under Non-neutral Environment 3 Dimensional

简要介绍

JEMS-NEPTUNE3D 是一款三维全电磁粒子模拟并行应用软件。它采用电磁场时域有限差分与粒子质点网格法求解麦克斯韦方程与粒子运动方程，模拟电磁场与带电粒子的非线性相互作用全物理过程。软件充分考虑了带电粒子相对论效应，可满足高功率微波器件、脉冲功率装置关键部件、微真空电子学器件、微波等离子体非线性相互作用机制等领域的模拟仿真需求。

实际应用典型案例：多种典型高功率微波器件（磁绝缘线振荡器、相对论返波管、虚阴极振荡器、相对论速调管、回旋管等）、太赫兹微电真空器件（太赫兹折叠波导行波管）、大型脉冲功率装置关键部件（PTS 装置真空汇流区 DPHC 电流损失评估）等。

主要功能

- 三维复杂几何结构的边界描述建模、CAD 建模功能
- 多种波导结构下的多种电磁波模引入 / 加载
- 多种电子发射方式：束流、爆炸、回旋、热、场致发射
- 多种静磁场加载方式、多电极下的静电场分布计算
- 壁面金属有限电导率功能
- 电 / 磁场、电流、电压、功率、粒子数的实时动态监测

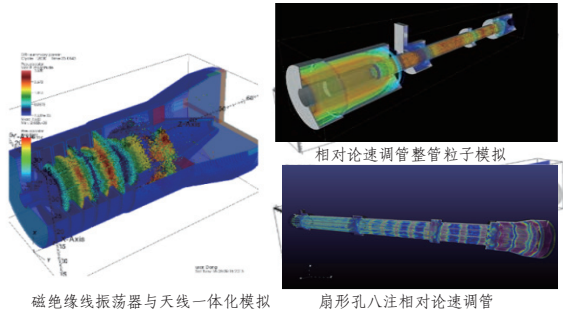
技术特色

- 桌面机、万亿次、百万亿次、千万亿次计算：平滑移植、数十至数千 CPU 核可扩展
- 可支撑米到毫米级电真空部件、器件模拟设计
 - ▶ M 型慢波器件（磁绝缘线振荡器）
 - ▶ O 型慢波器件（相对论返波管、相对论速调管）
 - ▶ 空间电荷类器件（虚阴极振荡器）
 - ▶ 快波类器件（回旋管）
 - ▶ 微电真空器件（太赫兹折叠波导行波管）
 - ▶ 大型脉冲功率装置关键部件（PTS 真空汇流区 DPHC）
- 与商业软件 Magic3D 及 CST-PS 相比，可对实际器件整体模型进行精细化粒子模拟，计算规模超过 100 倍
- 适用于大规模并行的全新高效电荷守恒型 PIC 算法

应用实例

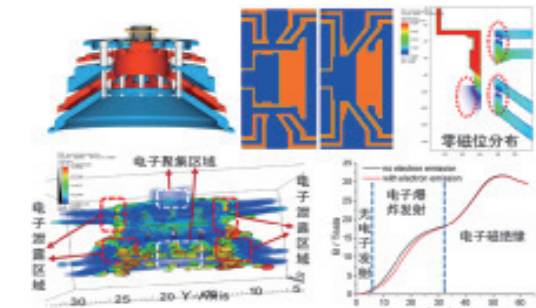
○ 高功率微波源系统分析与设计

高功率微波发射机一体化模拟，验证了软件具备脉冲功率源、微波源、模变与天线一体化联算功能，已用于评估部件间的影响。3000 万网格，500 万粒子，1024CPU 核。
相对论速调管模拟：2900 万网格，500 万粒子，288CPU 核；扇形孔八注相对论速调管模拟：2000 万网格，1000 万粒子，192CPU 核。可用于新型、具备复杂结构的高功率微波装置虚拟设计、分析和验证



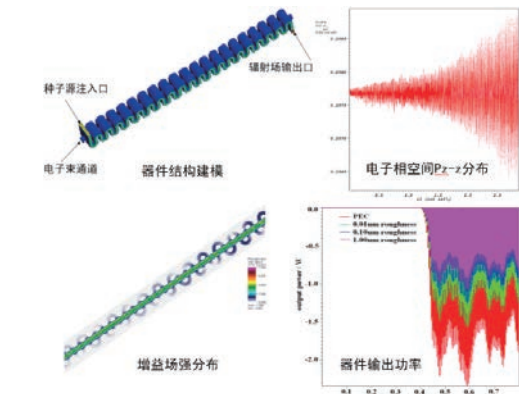
○ 大型脉冲功率装置真空汇流区电流损失评估

PTS 装置真空汇流区 DPHC 电流损失评估模型，模拟结果（零磁位分布、能量汇聚、电子输运、电流损失曲线等）与美国 LSP 软件对 Z 装置的模拟结果一致。2000 万网格，1000 万粒子，192CPU 核



○ 太赫兹微电真空电子学器件模拟与设计

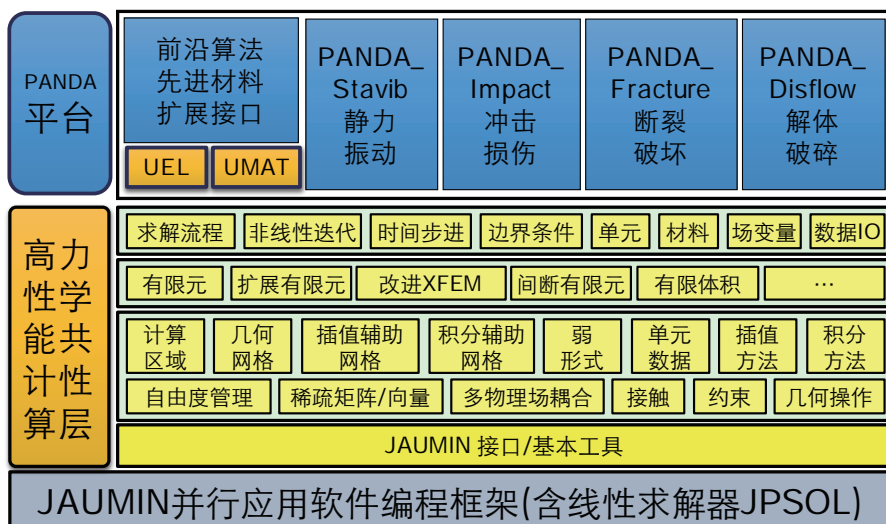
太赫兹微电真空折叠波导行波管模拟，计算结果与商业软件 CST-PS 一致，已为太赫兹微电真空器件优化设计和性能指标快速评估提供有效支撑。800 万网格，300 万粒子，128 处理器核并行



重大装备工程力学分析软件系统 PANDA

PANDA (*platform for parallel Adaptive Nonlinear Dynamic-and-Static Analysis*) 是面向国家核心行业重大工程力学问题，围绕高性能计算力学共性技术开发，支撑重大装备全生命周期性能评估及寿命预测、大型结构强冲击波毁伤效应评估的高性能数值计算，为复杂装备“零件 - 部件 - 系统”力学分析与大型结构全尺寸强冲击毁伤评估提供解决方案。

PANDA 由高性能计算力学共性层和静力振动分析、冲击动力学分析、裂纹扩展分析、离散系统分析四款软件组成。针对重大装备全生命周期与大型结构强冲击毁伤评估中的复杂工程力学问题，可完成从部件、分系统到全系统，从单机、服务器到高性能计算机的上万核、数十亿自由度的高精度精细模拟，可直接应用于武器装备、大型科学实验装置、土木水利工程、航空航天、舰船、地下工程等复杂装备与工程结构的设计方案改进与初步确定，环境适应性、安全性、可靠性分析等。



PANDA 软件始于中物院四所，2013 年基于 JAUMIN 进行了重构和发展，目前已发布 PANDA_Stavib V1.2.0、PANDA_Impact V1.2.0、PANDA_Fracture V1.0 三款软件。PANDA 具有前后处理用户界面，可实现数万核、数十亿自由度规模的复杂工程力学问题并行计算。已在中物院四所、水科院、清华大学等单位得到推广应用。

研究团队现有固定研发人员 17 人，含全职人员 7 人，集中人员 10 人，平均年龄 33 岁。其中研究员 3 人，副研究员 4 人，博士学位 10 人，海外引进人才 1 人，中科院百人计划优秀人才 1 名。

研究团队负责承担了军委科技委重大专项一项、科技部重大专项 1 项、国防基础科研核科学挑战专题 3 项、国家自然科学基金重大研究计划培育项目 1 项、面上项目 3 项、青年基金与国际合作项目各一项。获军队科技进步一等奖 1 项（1 人次）、二等奖 2 项（2 人次）、三等奖 1 项（1 人次），1 人获于敏书里科学奖，1 人入选中物院“双百人才工程”，1 人获得亚太计算力学学会青年学者奖、日本机械工程师协会计算力学成就奖。

静力与振动响应分析软件 PANDA_Stavib

Platform for Parallel Adaptive Nonlinear Dynamic-and-static Analysis _ Stavib

简要介绍

PANDA_Stavib 是一款工程结构静力与振动响应分析并行应用软件。它具备线性静力分析、材料 / 几何 / 接触非线性静力分析、模态分析、随机振动分析、谐响应分析、地震响应谱分析、热力耦合分析、声振耦合分析等功能。该软件可用于复杂结构系统静 / 动强度、刚度、稳定性高置信度分析。

实际应用案例：含试验产品的离心试验系统静力学分析、巨型光机系统随机振动分析及地震响应谱分析、高超声速飞行器随机振动响应分析、重力坝地震载荷作用下的声固耦合瞬态响应分析、潜艇水下谐响应分析及爆炸载荷瞬态响应分析、核反应堆地震响应分析、空间电源系统随机振动响应分析、大型舰船随机振动响应分析等。

主要功能

支持多种分析类型

线性静力分析、材料 / 几何 / 接触非线性静力分析、模态分析、预应力模态分析、随机振动响应分析、谐响应分析、地震响应谱分析、热力耦合分析、声振耦合分析等

支持多种单元类型

四节点 / 十节点四面体单元、八节点 / 二十节点六面体单元、非协调单元、金字塔 / 三棱柱退化单元、p 型六面体高阶单元、广义有限元、梁单元、薄壳单元等

支持丰富的约束和载荷类型

指定位移约束、面力载荷、重力、加速度载荷、旋转角速度 / 角加速度载荷等

友好的前后处理图形化用户界面

技术特色

前处理复杂几何 CAD 精细建模、数亿量级非结构网格并行自动生成、后处理 TB 量级交互并行可视分析

桌面机、万亿次、百万亿次、千万亿次计算：平滑移植、数十至数万 CPU 核可扩展

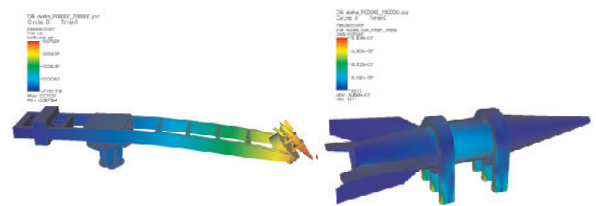
模块化、组件化、面向对象的体系架构和用户接口，支撑新算法的快速实现及单元和本构的二次开发

计算规模比 ANSYS 等商业软件高一个量级，实现十亿量级自由度计算

应用实例

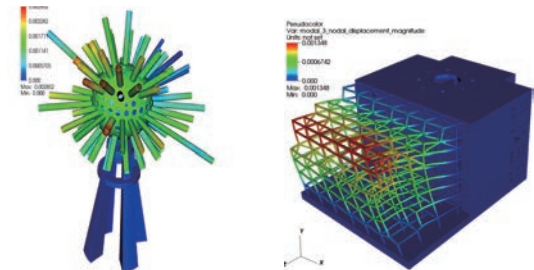
含试验产品的离心试验系统静力学分析

针对离心机设备和航弹组合结构系统，采用接触非线性分析方法模拟了旋转荷载下的离心试验过程，本数值模拟已经用于指导实验室离心试验的原理分析和过程研究



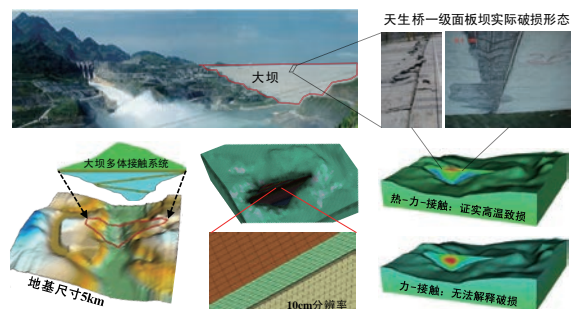
巨型光机系统随机振动分析及地震响应谱分析

巨型光机系统包含了靶球、各楼层、围墙以及钢架编组站等部分，依据系统研制的关注问题开展了随机振动分析和地震响应谱分析，计算规模为 2300 万自由度和 1200CPU。本分析实现的大规模计算能力成功突破巨型光机装置工程数值研制的瓶颈



天生桥一级面板堆石坝混凝土面板挤压破损热力 - 接触耦合分析

开展了含地基天生桥一级超高面板堆石坝的混凝土面板挤压破损的数值分析。考虑了大坝施工蓄水过程、含流变效应的土体本构关系、混凝土面板之间的强非线性接触、热 - 力 - 接触耦合分析、有限元 / 扩展有限元混合分析等复杂工程力学过程。在天河 2 号上最大使用 16000CPU，计算规模突破 11 亿自由度，超过目前行业软件 3 个数量级。首次通过数值模拟证实了混凝土升温膨胀效应是导致该坝面板挤压破损的重要原因，并得到设计单位认可



简要介绍

PANDA_Impact 是一款冲击动力学模拟软件。它采用拉格朗日显式有限元方法，能够处理弹塑性、粘弹塑性和各向异性等复杂材料模型、可模拟变形体间带摩擦的接触问题。该软件可应用于先进武器设计、精密仪器设备冲击安全分析、战略武器安全性评估以及复杂工程结构冲击响应分析等。

实际应用典型案例：抗事故包装箱结构异常跌落分析、战斗部穿甲模拟分析、车载结构安全性分析、Sandia 断裂模拟挑战、弹体的破坏机理模拟分析、波纹管动态压缩模拟分析等。

主要功能

单元算法

均匀应变六面体、四面体单元，选择减缩积分六面体单元、两点积分四面体单元、Hughes-Liu 壳单元、Belytschko-Lin-Tsay 壳单元、五面体金字塔单元、八节点后壳单元

材料模型

线弹性、粘弹性、Mooney-Rivlin 模型、HJC 混凝土模型、混合硬化弹塑性、Johnson-Cook 强度及损伤模型、Zerilli-Armstrong 物理型本构模型、Bodner-Partom 无屈服模型、GTN 细观损伤模型、可压缩泡沫模型、Johnson-Holmquist 混凝土模型、D-P 模型、正交各向异性线弹性模型

接触模型

点-面接触、面-面接触、粘接接触、侵蚀接触、单面接触

沙漏控制

经典沙漏控制算法、Flanagan-Belytschko 粘性沙漏算法

技术特色

具备均匀应变单元，更准确描述变形过程

具备多种应力-应变度量描述，支持次弹性-塑性和超弹性等材料本构关系

具备显式和隐式塑性屈服模型混合处理能力，可实现多界面复杂软硬材料组合结构冲击响应分析

桌面机、万亿次、百万亿次、千万亿次计算平滑移植、数十至数千 CPU 核可扩展

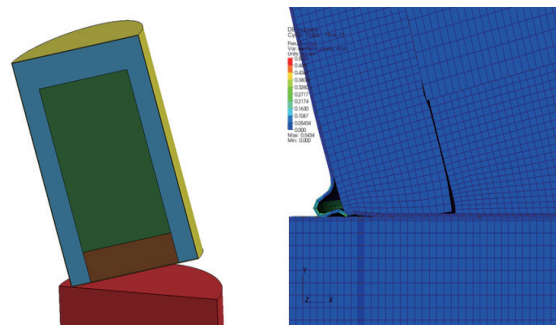
前处理复杂几何 CAD 精细建模、上亿量级非结构网格并行自动生成、加密以及后处理 TB 量级交互并行可视分析

计算规模比商业软件 LS-DYNA 高一个量级，计算精度相当

应用实例

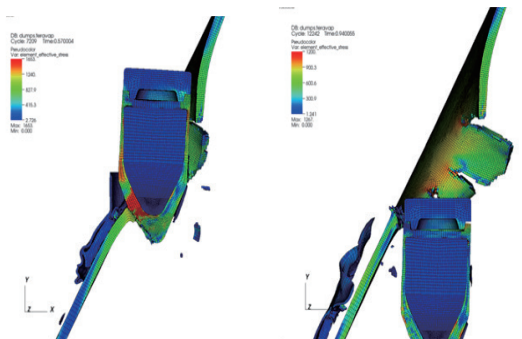
抗事故包装箱结构异常跌落分析

抗事故包装箱通常采用木材、硬质聚氨酯泡沫等缓冲材料和金属壳体等组成的组合结构。本分析模拟了外包装材料和缓冲材料发生大塑性变形或破坏，吸收大量能量、从而保护包装箱内的关键件的跌落过程，将用于指导包装设计优化。4400 万网格，1500CPU 核



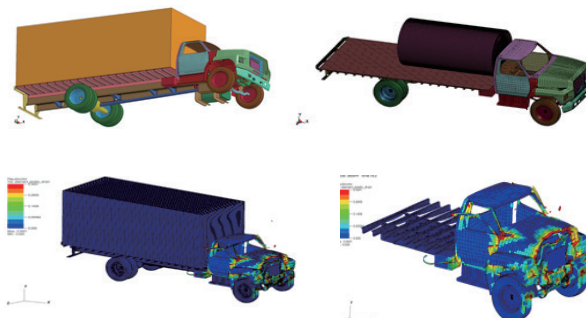
战斗部穿甲模拟分析

战斗部穿甲/侵彻是最常见的冲击动力学问题，本分析模拟了延性金属材料发生塑性变形、损伤积累直至破坏的过程，弹体、靶体的最终破坏形貌与实验一致



车载结构安全性分析

卡车以 100 公里/小时速度撞击刚性墙，分析汽车及车载结构在撞击环境下的载荷及能量传递规律、延性金属冲击破坏以及脆性材料动态变形特征等。该问题涉及复杂结构、复杂连接、复杂材料等在复杂环境下的响应，展现本软件处理复杂工程问题的能力



离散系统与非连续变形分析软件 PANDA_Disflow

Platform for Parallel Adaptive Nonlinear Dynamics-and-static Analysis_Disflow

简要介绍

PANDA_Disflow 是一款离散系统与非连续变形分析软件。它支持材料物质点法 (MPM) 和光滑流体动力学法 (SPH) 这两种粒子类方法，能够处理接触非线性、极端大应变、材料冲击破坏等复杂问题。该软件可用于武器包装材料设计、CAE 机械设计、地质灾害演化分析、材料冲击破坏分析等。

实际应用典型案例: 核反应堆结构抗震模拟、山体滑坡分析、防护结构超高速撞击分析、汽车撞击性能分析、武器包装泡沫材料承载能力分析等。

主要功能

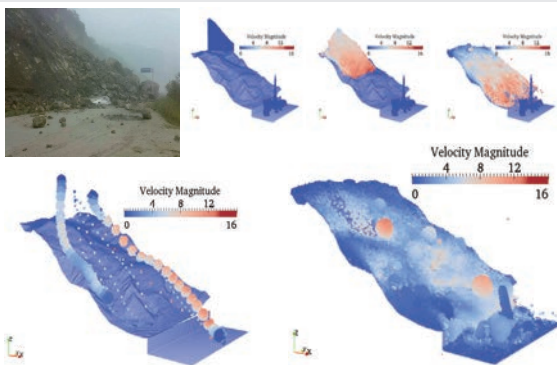
- 支持两种粒子类方法:
 - ▶ 材料物质点方法 (MPM)、光滑流体动力学方法 (SPH)
- 支持多种分析类型:
 - ▶ 结构动力分析、极端大变形分析、多体接触力学分析、材料破坏分析

技术特色

- 高可扩展性: 26 万 CPU 核
- 异构协同并行: 16384 个 CPU-GPU 节点
- 可容错计算: 天河 II 号与 Titan 接力

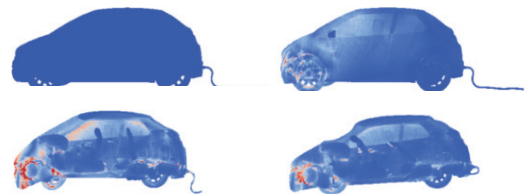
应用实例

- 地质灾害演化过程模拟

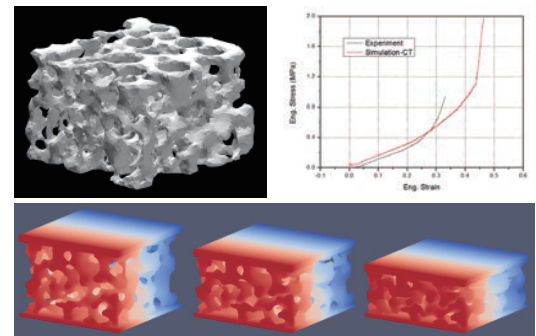


山体滑坡地质灾害演化过程模拟 (多尺度离散系统, 离散体数量 10 万块, 算法: MPM)

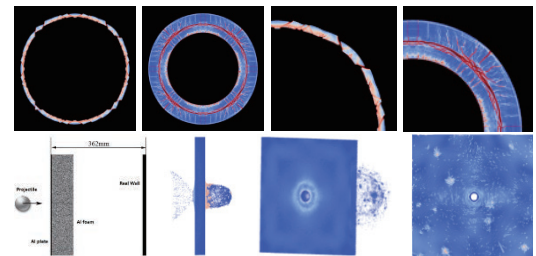
- 汽车撞击性能分析



- 武器包装泡沫材料压缩模拟

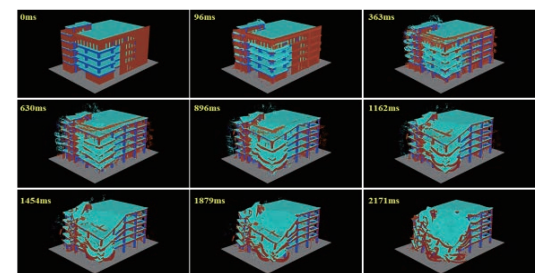


- 爆炸、侵彻冲击动力学模拟



上图: 爆炸载荷下金属薄壳 (大变形剪切)、厚壳 (层裂) 破坏模拟; 下图: 泡沫铝防护结构高速撞击实验模拟 (SPH, CPU-GPU 协同计算)

- 武器包装泡沫材料压缩模拟



钢筋混凝土建筑结构的倒塌过程模拟 (算法 MPM, 天河 2 号 10008 核, 4.2 亿粒子, 50 万时间步, 48 小时)

任意裂纹扩展高精度分析软件 PANDA-Fracture

Platform for Parallel Adaptive Nonlinear Dynamics-and-static Analysis - Fracture

简要介绍

PANDA_Fracture 是一款裂纹分析模拟软件。它采用扩展有限元方法，能够处理二维和三维复杂裂纹问题；具备千核、上亿自由度大规模计算能力；同等条件下裂纹起裂时刻和扩展速度预测精度优于主流商业软件；可为装备关键零部件及重大工程结构的断裂提供高精度分析手段。

实际应用案例：PBX 炸药结构完整性评估、天生桥面板坝地基断层分析、燃料棒包壳破裂分析等。

主要功能

- 支持三种扩展有限元方法：
 - Improved XFEM、Corrected XFEM、Standard XFEM
- 支持多种应力强度因子计算方法：
 - 张口位移法、Jr 法、Jdomain 法、自适应区域相互作用积分法等
- 支持多种分析类型：
 - 二 / 三维裂纹、静 / 动力裂纹、单 / 多裂纹的萌生、起裂、扩展、竞争、交汇、接触等

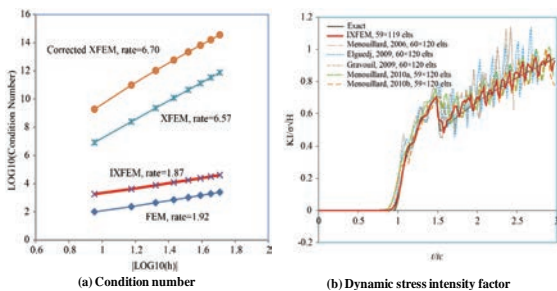
技术特色

- 高精度：支持裂尖加强，同等条件下计算与预测精度优于主流商业软件
- 可扩展：桌面机到天河 II 号，单核到数千核平滑移植
- 前处理简单：计算网格与裂纹分离式建模

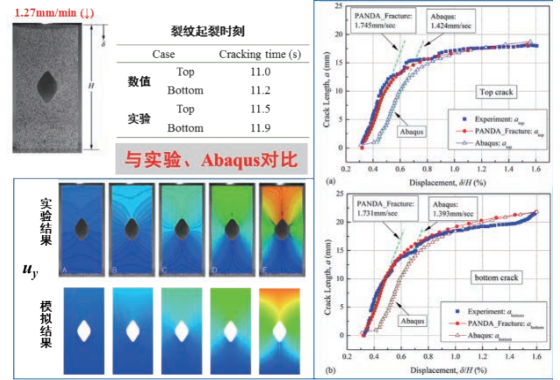
应用实例

- 扩展有限元算法改进

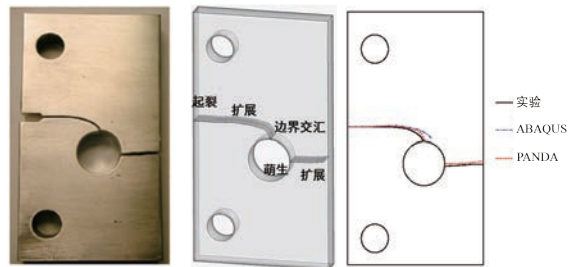
发展了一种“无额外自由度的单位分解插值格式”，解决了现有 XFEM 方法线性相关性与刚度阵病态的问题，在数量级上提升了 XFEM 总体方程的求解效率；克服了现有方法在动力学问题中的能量守恒、动态应力强度因子精度低下的问题



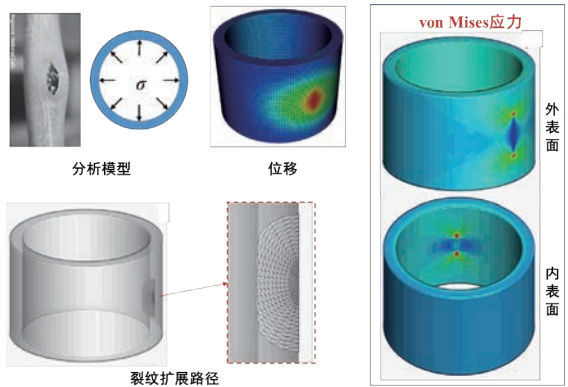
炸药结构件微空洞诱发裂纹的断裂实验验证



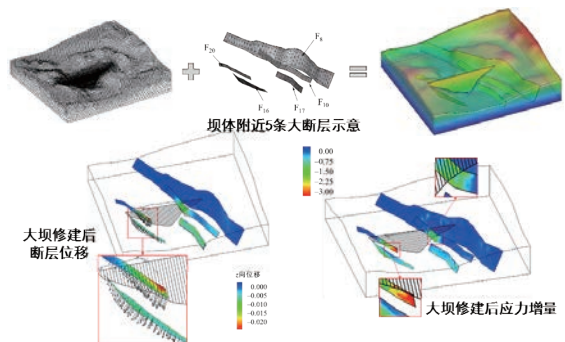
三维裂纹任意扩展实验验证



燃料棒包壳破裂分析



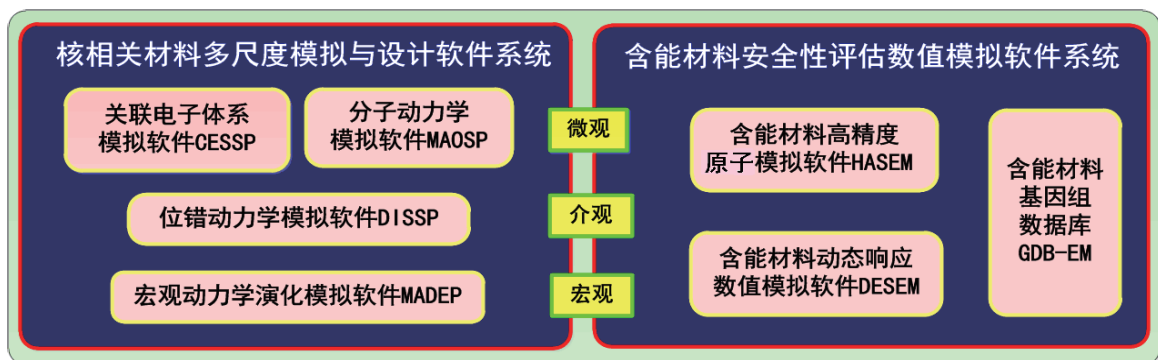
天生桥面板坝地基断层模拟



核相关 / 含能材料模拟与设计软件系统

核相关 / 含能材料模拟与设计软件系统面向国家重大应用需求，致力于为极端条件下核相关材料和含能材料的“微观 - 介观 - 宏观”结构、物性及其演化规律的研究提供可靠支撑。已发布基于量子力学计算的关联电子体系模拟软件（CESSP V1.0）和含能材料高精度原子模拟软件（HASEM V1.3）。

该系统主要针对金属材料、核材料以及炸药、推进剂与发射剂等分子晶体材料，服务于材料电子结构、微观结构、热力学性质等物性计算和极端条件下动力学行为等研究。它已在金属及核材料高温高压宽区物性、核材料强关联与自辐照效应、材料冲击损伤动力学行为、含能材料反应爆轰性质等方面取得重要成果。



该系统由金属 / 含能材料团队研制。团队现有固定研发人员 20 人，含全职人员 11 人，集中人员 9 人，平均年龄 34 岁。其中，研究员 2 人，副研究员 9 人，博士学位 20 人，海外引进人才 3 名。

团队承担科技部军口 973 项目课题、863 项目课题、国防科工局重点项目、中物院 909 项目各 1 项。获军队科技进步一等奖 2 项（2 人次）、二等奖 4 项（7 人次），1 人获得科技部“中青年科技创新领军人才”称号，1 人获得于敏数理科学奖，1 人入选“万人计划”，1 人入选中物院“双百人才工程”。

核相关材料关联电子体系模拟软件 CESSP

Correlated Electron System Simulation Package for Nuclear Materials

简要介绍

CESSP 是一款基于密度泛函理论 (DFT) 和动力学平均场理论 (DMFT) 的量子力学模拟软件包, 支持从弱关联材料到强关联材料的电子结构计算、晶体结构与性能预测、分子动力学模拟、热力学物性计算等。

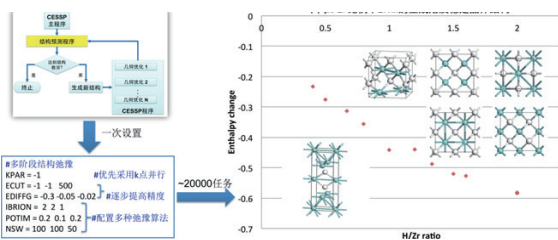
典型示范应用案例: 金属材料高压熔点和辐照损伤离位阈能的第一性原理预测, 强关联材料 SrVO₃ 电子结构和基态性质计算, 含空位缺陷包壳材料锆的力学性质预测等。

主要功能

- 电子结构计算和电子强关联效应的修正
- 材料结构预测, 包括晶体结构、表面重构结构和含缺陷团簇晶体结构
- 晶体材料力学性质计算
- 晶体材料热力学性质计算
- 第一性原理分子动力学模拟
- 材料电导率和热导率的计算

技术特色

- 基于动力学平均场方法和 Gutzwiller 变分方法的强关联理论计算
- 基于 Basin Hopping 算法的晶体结构预测, 并通过无缝耦合集成了 CALYPSO 软件的功能
- 力学性质、热力学性质的快速建模和分析
- 系综可配置、时间步长自适应的第一性原理分子动力学模拟, 可支持千原子 (万价电子) 量级体系
- 面向高通量的多任务集成计算
- 基于 Kubo-Greenwood 方法的材料固相、液相的电导率和电子电导率计算

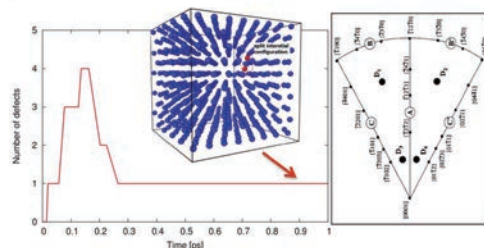


结构预测的多任务集成计算

应用实例

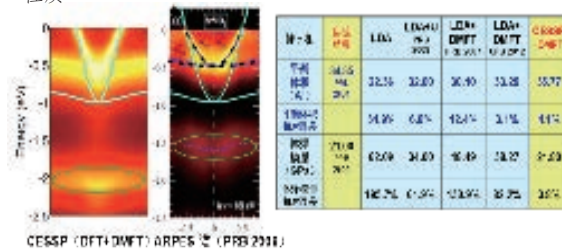
大规模绝热近似分子动力学 (BOMD) 模拟

- 预测离位阈能: 80个任务, 共约320亿亿次浮点计算, 获得最接近实验的理论结果, 与实验值相对误差2%。
- 单任务: 800个Zr原子 (9600个价电子), 1皮秒, 自适应时间步长
- 耗时: 1536个CPU核, 20小时 (天河2号)。

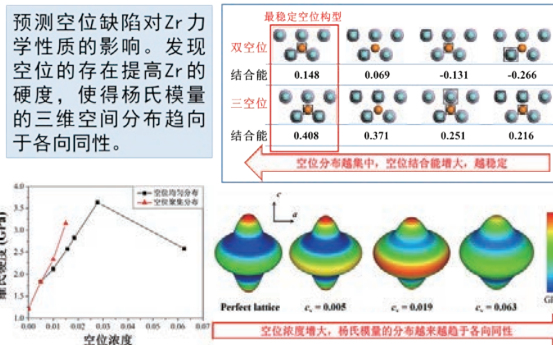


强关联材料 SrVO₃ 和 Ce 的基态性质计算

实现了 3d 电子关联材料 SrVO₃ 和 4f 电子强关联材料 γ -Ce 的物性计算。结果显示同实验吻合的 SrVO₃ 能带收缩和上下 Hubbard 带效应, 而传统方法不能准确反映出这种本质的关联效应。 γ -Ce 的计算同样表明考虑关联效应后才能正确得到体系的平衡体积和体弹模量等宏观性质



含空位缺陷包壳材料 Zr 的力学性质预测



含能材料高精度原子模拟软件 HASEM

High Accuracy atomistic Simulation package for Energetic Materials

简要介绍

HASEM 是针对大体系、晶体结构复杂的含能材料开发的高精度原子模拟软件，实现前处理建模、大规计算和后处理结果分析一体化。采用数值原子轨道，通过提供针对性的赝势、基函数及控制参数库，以及分子间长程弱相互作用的非局域泛函和半经验校正，实现含能材料体系的高精材料物性计算。该软件可应用于高能炸药、固体推进剂与发射剂等含能材料的高精度能量、物性、爆轰性能、热力学及动力学性质和新型炸药设计。

软件实际应用典型案例：HMX、RDX、FOX-7 和 TATB 等典型炸药高精度状态方程计算、高压相图计算、爆轰过程微观机理探索和新型炸药晶体结构标定及爆轰性能预测等。

主要功能

炸药物化性能计算

- ▶ 晶体结构优化、电子空间及能级分布
- ▶ 分子偶极矩、化学键 / 非键强度、Hirshfeld 面谱学、力学参数计算
- ▶ 热力学性质计算：热容、热膨胀系数、格林艾森参数等
- ▶ 爆轰性质计算：爆热、爆温、爆压、爆速

炸药化学反应计算

- ▶ 化学反应过渡态搜索
- ▶ 炸药热分解动力学模拟
- ▶ 炸药冲击加载动力学模拟
- ▶ 刚体约束动力学

新型炸药晶体结构预测

技术特色

支持千原子体系的大规模高效并行计算

提供含能材料专用赝势、基函数及控制参数，可精确预测分子间弱相互作用和晶体结构，近 80 种传统炸药和新型炸药的晶体结构参数与实验误差基本小于 3%

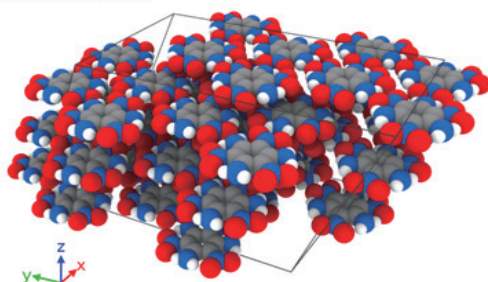
具备力学、谱学、动力学、爆轰性能等分析工具，相关参数和图表可直接导出

应用实例

千原子含能材料体系的超大规模高效计算

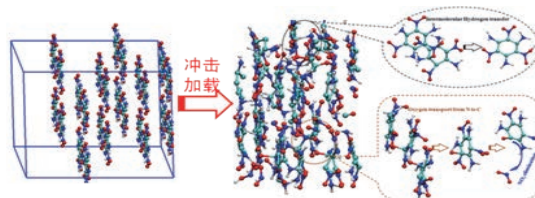
HASEM 软件突破并行扩展和计算精度瓶颈，实现千原子炸药体系化学反应的第一原理分子动力学 TATB 等典型炸药和 CL-20/TNT 等新型共晶炸药千原子单次能量计算时间小于 5 秒，计算误差小于 3%。(J.Phys.Chem.B, 2016,120,1510.)

TATB 1152 Atoms



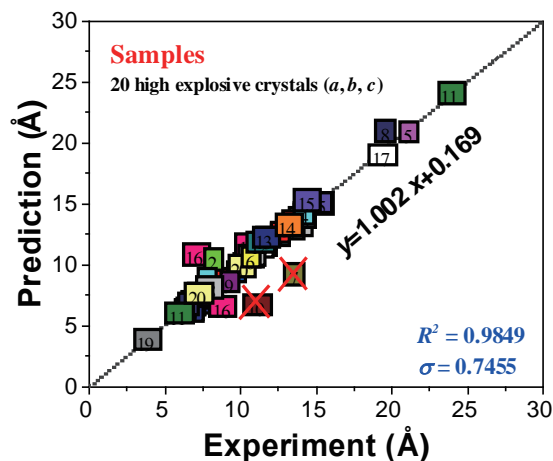
冲击加载下的化学反应模拟

钝感炸药 TATB 冲击加载下的化学反应始于分子间 / 内的质子转移，反应过程中产物的碳团簇对整体进度有明显的拖滞效应 (中物院一所; Phys. Chem. C, 2017, 121, 8227; Chem. Phys. Letts, 2017, 687, 200.)



新型炸药晶体结构的预测

成功预测了 20 种典型炸药的晶体结构，其中 10 种作为第一顺位给出，其他 9 种排序在前 10%。具备炸药晶体结构预测能力，以客户提供的低能量密度分子为输入，便可预测其晶体结构和性能





CAEP-SCNS

铸软件基石 擎模拟重器

中物院高性能数值模拟软件中心

地址：北京市海淀区花园路6号

电话：010-61935800

网址：www.caep-scns.ac.cn

邮编：100088

传真：010-61935702

Email:fazhanbu@iapcm.ac.cn



扫一扫 关注中心网站



扫一扫 关注中心微信平台