

厦门大学：在机房里搞出来的尖端化学研究

提起“化学”，我们总会想到实验室里的瓶瓶罐罐，但有这样一些站在化学研究最前沿的人却日日对着计算机：他们就是理论化学的研究者。厦门大学化学化工学院建立于 1991 年，下辖有固体表面物理化学国家重点实验室和理论与计算化学福建省重点实验室两个重点实验室，十分重视科学计算与化学的交叉，在理论化学方面颇有建树。理论化学研究是通过纯计算而非试验的方式进行的，每项研究都需要进行大量的计算工作，使用 HPC 可以大幅提高计算效率，但申请现有的计算中心往往要面临排队的问题，难以按研究需求随时进行调试。因此，该学院建设起了自己的计算中心。

机房里的魔法：半宽节点

厦门大学化学化工学院拥有两个重点实验室，进行着大量研究项目，学院计算中心巨大的计算资源不仅没有浪费，反而每年都会采购新设备进行扩充，以满足更多的计算任务需求。大量的服务器占用了数据中心机房的巨大空间，如何用最少的空间达成最高的计算效率成为了首当其冲的问题。在联想提供的整体解决方案中，大量部署的瘦节点选用了采用半宽设计的节点 NeXtScale 系列 nx360 M5 服务器。这款服务器的节点采用全高度、半宽度的设计以提高空间利用率，可以在 6U 机架内容纳 12 个计算节点，大幅节约了数据中心的空間资源。



并行系统，让所有节点“团结协作”

在单一领域的前沿科技中，往往需要研究人员自行编写程序进行特定的运算，厦门大学化学化工学院的研究者们也不例外。这些程序所需的计算是一台服务器不能胜任的，这就需要多台服务器并行处理。在厦门大学的这套解决方案中配置的 GPFS 并行文件系统拥有极佳的可扩展性，最多支持 3906 个节点。同时，它保障了传输速度的最大化，尽可能地缩小节点间通讯造成的延误，实测并发数据访问带宽达到 134GB/s。同时，项目组会有一些不支持大量服务器并行处理的程序需要在多路服务器上运行，依赖 HPC 中的胖节点进行运算工作。这套系统的胖节点选用了 System x3850/3950 六路服务器。这些高端服务器拥有灵活简洁的系统设计和极佳的可扩展性，每台服务器拥有多达 120 个内核，最多可扩展到 224 个节点。为了使各个计算节点负载合理，让每一个程序都能以最高效率完成任务，该系统还配备了 Platform LSF 负载管理器。这是一款先进的负载调度软件，用以整合资源、提高计算资源的利用效率。它可以支持数以千计用户的百万个并发请求并调配数十万核 CPU 的计算资源，并且支持异构平台，拥有极高的灵活性。

除此之外，这套系统还有六台 System x3650 M5 作为管理登陆节点和两套存储设备。在联想专业定制化的服务保障下，这套系统为厦门大学化学化工学院提供了稳定、高效的计算能力，提高了教学科研的效率。

