

# 联想与北大联手高性能计算平台 “未名生科一号”正式上线

10月26日，联想与北京大学携手建设的高性能计算平台“未名生科一号”正式上线，双方将聚焦生命科学领域，共同冷冻电镜平台的科研工作。联想作为全球最大的超算平台提供商，继荣获全球 HPC TOP500 全球第一之后，在 HPC China Top100 榜单中以 40 套的成绩第四次名列榜首，此次高性能计算平台“未名生科一号”的成功上线，也是联想 HPC 领先技术的再一次成功落地。

## “未名生科一号”助力冷冻电镜技术研究

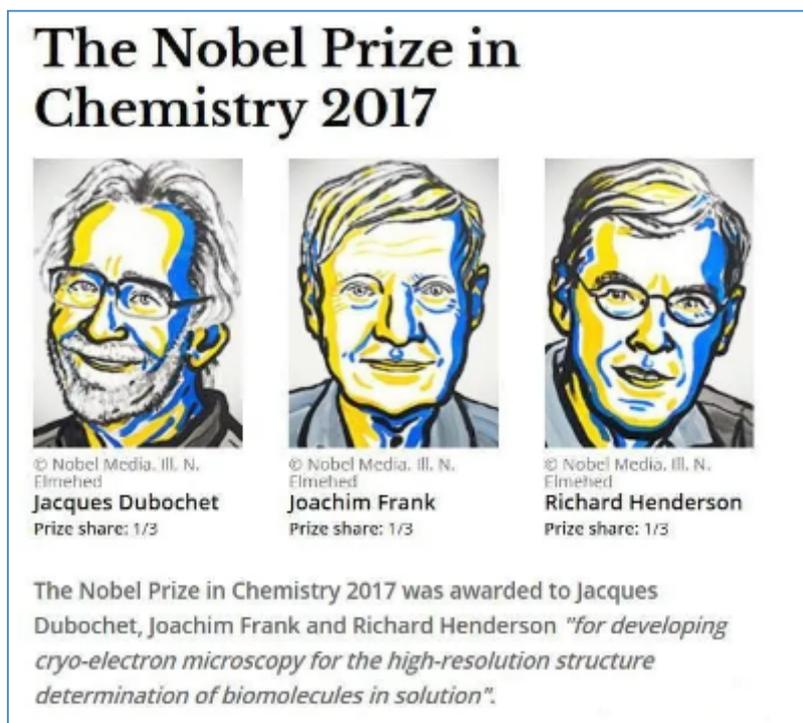
“未名生科一号”虽然是“一号”，但却是北京大学高性能计算校级公共平台上建设的第三套超算系统，此前，北京大学还建设了“未名教学一号”高性能计算平台，并在联想的帮助下建设了“未名一号”高性能计算平台，为各学科领域提供大规模数据处理和大规模科学计算的支持。

之所以“未名生科一号”的名字中出现了“一号”，原因就在于这套系统将聚焦生命科学及其相关前沿交叉学科的需要，要优先服务于冷冻电镜平台的科研工作。从这角度理解，它确实称得上是北大在生命科学领域的“第一号”超算系统。



北京大学冷冻电镜实验室设备

“未名生科一号”所优先服务的“冷冻电镜”科研工作，是一项用“速冻”技术固定住蛋白质等生物大分子，进而通过电子显微镜观察其空间结构的技术。这项技术的诞生，促进了结构生物学的蓬勃发展，2017年的诺贝尔化学奖，就颁发给了三位在冷冻电镜技术上作出突出贡献的科学家。



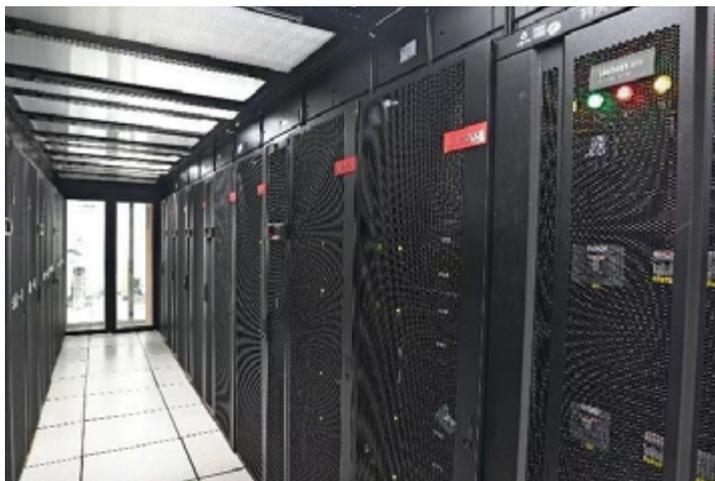
2017年诺贝尔化学奖得主：Jacques Dubochet, Joachim Frank 和 Richard Henderson，获奖理由是“研发出冷冻电镜，用于溶液中生物分子结构的高分辨率测定”

冷冻电镜有三个关键因素：冷冻固定技术，显微技术，以及对图像数据进行收集和处理的技術，而高性能计算平台正是实现图像数据收集和處理的重要基础。具体来说，从电子显微镜拍下的“照片”到立体的生物分子结构，这中间就需要超级计算机的能力了。所以，“未名生科一号”今后的主要工作就是，解析出电镜拍摄到的很多二维照片与生物大分子的三维空间结构之间的关系。

当然，作为一个强大的超算系统，“未名生科一号”也会为其他学科领域提供不低于30%的公共机时。据介绍，这将有效缓解高性能计算平台首套系统“未名一号”的排队情况，为广大师生营造更加优质的高性能计算环境。

## 1台“未名生科一号” = 5000台普通电脑

“未名生科一号”采用联想深腾 X8810 超级计算机系统建设，由 150 个节点组成，共计 4688 个 CPU 核心，28 块 GPU 卡，总体计算能力理论峰值为 587.8TFLOPS，其中 CPU 节点计算能力为 343.4TFLOPS，GPU 等其它节点总计算能力为 244.4TFLOPS，存储容量为 10.2PB。



未名生科一号的“定妆照”

计算节点 CPU 支持 AVX-512 指令集，大幅度提升了处理器的浮点运算能力，GPU 节点采用最新的 NVIDIA Tesla V100 型号 GPU，并采用 NVLink 方式连接，单卡 GPU 双精度浮点运算速度理论值可达 7.8TFLOPS。计算网络采用 omni-path 架构，安装有 intel、gcc 等编译器，作业管理采用 slurm 调度系统，集群管理采用计算中心自主开发的集群监控管理套件。

作为超级计算机，未名生科一号的参数配置与常见的家用电脑不太一致。直观解释它的运算能力的话，就是可以在一秒钟实现 587.8 万亿次的浮点运算，这大概相当于 5000 台普通电脑同时工作的运算能力。



未名生科一号运行情况监控

## “未名生科一号”为科研人员提供计算支持

“未名生科一号”于2018年6月21日起投入试运行，成为了北京大学高性能计算校级公共平台的“实习生”。4个月以来，它已经累计为12个项目35位科研人员提供了计算支持，包括生命科学学院高宁和李宁宁团队，物理学院欧阳颀、毛有东和李新征团队，分子医学研究所陈雷团队，北京国际数学中心鄂维南团队。试运行期间，系统的平均使用率达到了94.7%。经过6个月的安装调试和测试运行，北京大学高性能计算平台“未名生科一号”超算系统今天正式上线运行。

“未名生科一号”的建成，将为北京大学的尖端科研计算开拓新的发展空间。它既实现了高性能计算平台两级架构的建设思路，提升了平台对重大科研的支撑能力，又有效改善了生命科学的研究手段，对生物物理、定量生物学、结构分子生物学和分子医学等前沿交叉学科的发展起到重要的推动作用。

## 三套高性能计算机，多方位助力北大科研

不到一年的时间，北京大学携手共同完成了“未名一号”、“未名教学一号”、“未名生科一号”等三套超算平台，建成了一个融教学科研计算、海量数据处理、信息管理服务于一体的高性能计算校级公共服务平台。

- “未名一号”推动中国 HPC 进入温水冷却新时代



北京大学高性能计算校级公共服务平台“未名一号”正式揭牌启用

今年1月3日，以“未名一号”命名的北京大学高性能计算校级公共平台正式面向北大全校提供高性能科学与工程计算服务，满足各学科领域对于大规模数据处理和大规模科学计算的需求。值得一提的是，“未名一号”采用了联想首创45℃温水水冷技术，是国内首个温水水冷超算平台项目，相比传统的风冷散热技术，未名一号每年可以节省60万度电。

自正式投入运行以来，累计为北大26个院系的500余名师生提供了计算服务，支撑科研项目166个，支持发表高水平科研论文57篇，其中绝大多数为SCI一区或学科顶级会议论文，包括3篇Nature、1篇PNAS、1篇JACS、一篇PRL和3篇Nature子刊，并获得了两项专利。成果分布于数学、物理、化学、生物、信科、工学、医学、药学、地学、大气、材料等10余个学科领域。

#### • “未名教学一号”为科研训练提供上机环境

高性能计算平台自第一套超算“未名一号”建成以来，迅速成为北大科研工作的重要支撑。与此同时，很多在平台获益的老师希望在教学中也使用系统，为课程实习和科研训练提供上机环境。为了不影响“未名一号”上的科研任务，计算中心克服困难，通过综合资源调配，快速搭建了一个专门服务于日常教学的小型超算系统“未名教学一号”，为全校师生提供免费上机服务。

“未名教学一号”于2018年5月4日北大120周年校庆期间正式上线运行，不仅解除了老师们搭建系统的后顾之忧，更是体现了平台服务学校核心需求的大局意识，有效支持了人才培养工作。目前已经有204位用户在“未名教学一号”上机实习，平台欢迎有需要的师生随时申请使用。

#### • 联想智能超算助力科研创新成国之利器

随着高性能计算技术的不断发展，其应用领域也在不断被拓展，联想的HPC也已经广泛应用于政府、科研、教育、气象、大气海洋、石油石化、CAE仿真计算、生命科学、人工智能等各个领域。目前，全球最大的7个数据中心中，有6个采用了联想的解决方案和服务，目前全球500强企业超算系统中，有121家采用了联想的HPC。

联想HPC高度重视与国内外顶尖高校的协作，在国内，联想与南京大学、厦门大学等院校合作建立超算平台，持续提供强大计算力支持。在全球范围内，联想先后与牛津大学、伦敦大学、芝加哥大学、北卡罗莱纳州立大学等高校在HPC领域展开合作。

此外，联想还出了智慧超算的理念，直接针对人工智能的三大要素——算法（algorithm）、大数据（big data）和计算力（computing power），来进行重点攻坚。未来，联想将凭借领先的技术实力和深厚的实践积累，进一步加快智慧超算的进化速度。让智慧超算为科技创新提供更广阔的星辰大海，智慧超算也极有望成为科研院校和企业创新的国之利器。