



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

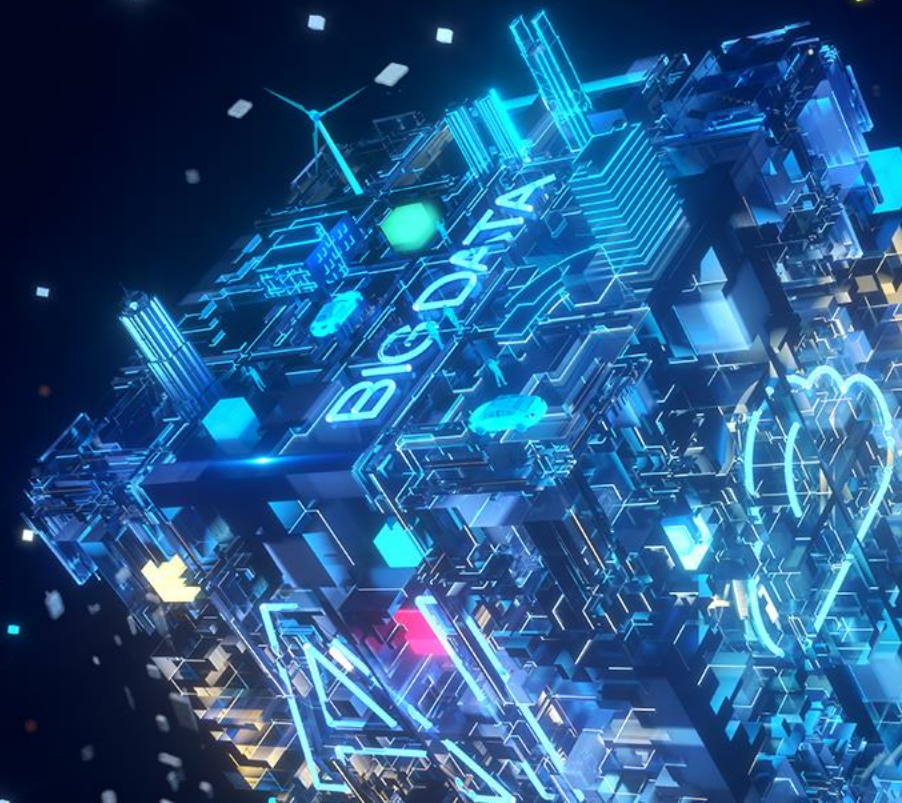
南科大超算发展

王连平

力学与航空航天工程系 讲席教授
科学与工程计算中心 主任

融合计算

2019 联想全球超算峰会
Lenovo HPC Summit





主要内容



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

南科大发展情况介绍

南科大科学与工程计算中心简介

南科大冷冻电镜中心简介

南科大学生超算俱乐部简介

南科大科学与工程计算中心未来发展规划





南方科技大学介绍



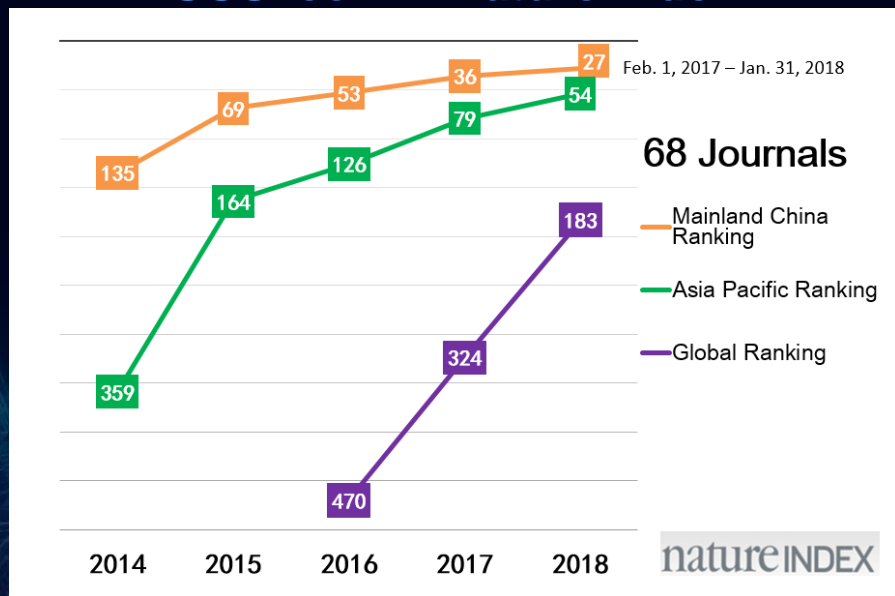
南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY



截止目前，全校近400名教学科研序列教授。学校设置数学、物理、化学、生物、电子、材料、金融、环境、海洋、力学、机械、计算机、医学系、地球与空间科学等18个院系中心，开设金融数学、物理学、化学、生物科学、生物医学工程等29个本科专业。

学校影响力迅速提升

SUSTech in Nature Index



Best Universities in China Ranking by



Rank	University	City	Score
1	Tsinghua Univ.	Beijing	94.6
2	Peking Univ.	Beijing	76.5
3	Zhejiang Univ.	Hangzhou	72.9
4	Shanghai Jiao Tong Univ.	Shanghai	72.1
5	Fudan Univ.	Shanghai	65.6
6	Univ. of Science and Technology of China	Hefei	60.9
.....
35	SUSTech	Shenzhen	44.6
36	East China University of Science and Technology	Shanghai	44.5

Times Higher Education Ranking 2019



World University Rankings (301-350)

Young University Top 55

Asia Top 41

Mainland China Top 8

融合计算

<http://hpc.sustech.edu.cn>

2019 联想全球超算峰会
Lenovo HPC Summit



计算中心基本情况



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

- 南方科技大学科学与工程计算中心成立于2018年10月。主要任务是管理全校超算公共平台（**管理平台**）；为全校超算用户提供服务（**提供服务**）；提高用户的超算使用能力，培养超算管理型和应用型人才（**培养人才**）；提高计算中心的影响力（**提高影响力**）。
- 计算中心目前管理学校两套大型超算集群，“启明”和“太乙”。两套集群均为全校公共计算平台，总共拥有约**4万个计算核心**，总计算能力约**2.0 PFlops**。
- 计算中心目前设有主任和副主任各一人，主任工程师一人，工程师两人（其中一人待招聘），秘书一人。另有学生助理，驻场工程师等。未来，计算中心工程师人数预计再增加2~3人，学生助理人数预计增加至5人以上。
- 中心机房和办公室：慧园5栋1楼（500 m²左右）；慧园5栋307（60 m²左右）。



南科大科学与工程计算中心揭牌



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY



2019年5月11日，南方科技大学第一届高性能计算研讨会暨科学与工程计算中心揭牌仪式在图书馆报告厅隆重举行。会议除了邀请鲁春副校长和王连平主任致开幕词外，还邀请了多项复杂系统国家重点实验室主任葛蔚等多位高性能计算专家做专题报告。



融合计算

<http://hpc.sustech.edu.cn>

2019 联想全球超算峰会
Lenovo HPC Summit



人员组成



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

主要成员



主任：王连平教授



副主任：史玉回教授



主任工程师：范靖



工程师：谢作扬



秘书：李云

- 计算中心教授管理委员会：7人（物理，化学，生物，计算机，力学，机械，海洋）
- 学生助理：3人
- 驻场工程师：3人



南科大超算设备及归口部门发展



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY





科学与工程计算中心计算资源



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

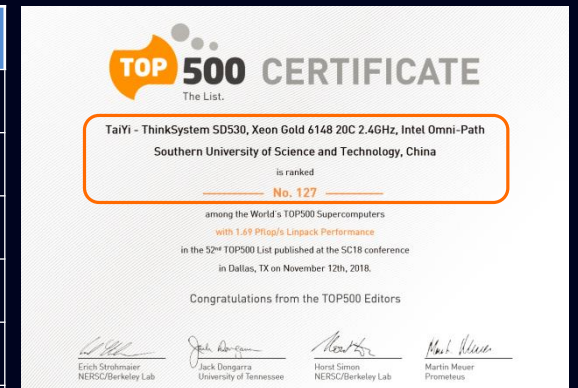


启明 (6672核) : 每年可提供计算机时5800万核时以上。

节点	数量	单节点配置
登陆节点	4 台	2个Intel Xeon E5-2690v3 CPU (2.6GHz/12c) , 128 GB内存
刀片节点	230 台	2个Intel Xeon E5-2690v3 CPU (2.6GHz/12c) , 64 GB内存
大内存节点	7台	8个Intel Xeon E7-8880v3 CPU (2.3GHz/18c) , 6 TB内存
GPU节点	6台	2个Intel Xeon E5-2690v3 CPU (2.6GHz/12c) , 128 GB内存 , 4张NVIDIA Tesla K80 GPU卡
存储	528 TB	Intel Enterprise Edition for Lustre Software , 实测读写带宽超过 6 GB/s
作业管理	/	Torque + Maui

太乙 (33144) : 每年可提供计算机时2.9亿核时以上。

节点	数量	单节点配置
登陆节点	4 台	2 个 Xeon Gold 6140 CPU(2.3GHz/18c), 384 GB 内存
刀片节点	815 台	2 个 Xeon Gold 6148 CPU(2.4GHz/20c), 192 GB 内存
大内存节点	2台	8个Xeon Platinum 8160 CPU (2.1GHz/24c) , 6 TB内存
GPU节点	4台	2 个 Xeon Gold 6148 CPU(2.4GHz/20c) , 384 GB内存 , 2张NVIDIA V100 GPU卡
存储	5.5 PB	IBM Spectrum Scale (GPFS) , 实测读写带宽均超过 40 GB/s
作业管理	/	IBM Platform LSF





南科大冷冻电镜中心基本情况



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

深圳市发改委2018年8月21日正式批复建设南方科技大学冷冻电镜大科学装置平台项目；南方科技大学冷冻电镜大科学装置于2018年12月开始逐步交付使用，目前已经安装四台300千伏冷冻电镜，使用运行情况良好，处于7*24满负荷状态；一台120千伏电镜于2018年7月交付使用；第五台300千伏冷冻电镜预计于2019年9月到货；第六台专门订制的300千伏冷冻电镜预计于2020年6月到货；由联想配套的冷冻电镜数据处理系统已于2019年5月开始使用；各种样品制备仪器近百台，从2019年二季度起逐步到货安装；使用南方科技大学冷冻电镜大科学装置收集的数据，已经在顶级科学杂志（科学，自然【微生物】）发表论文两篇。

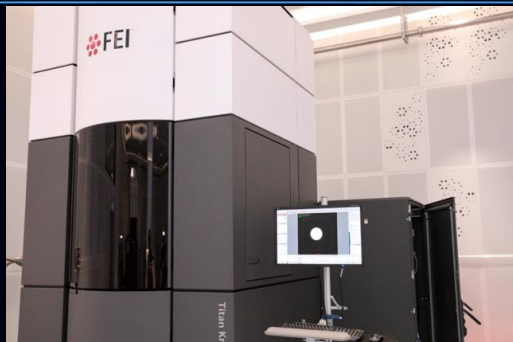


南科大冷冻电镜中心基本情况



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想



目前，4台300千伏
冷冻电镜已安装并投入使用



未来1年内，将再安装2台
300千伏冷冻电镜以及近百台辅助仪器

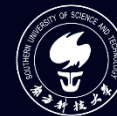


“南科大冷冻电镜中心将成为
全球最大的三个冷冻电镜中心之一，
研究能力将会达到全球的前5%。”

-- Richard Henderson 教授
(2017年诺贝尔化学奖获得者、
冷冻电镜技术开创者之一)



账号、磁盘及队列



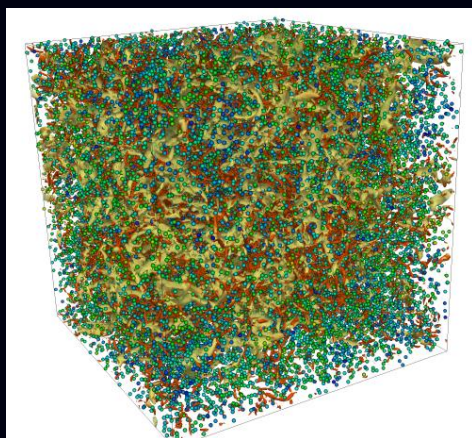
南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

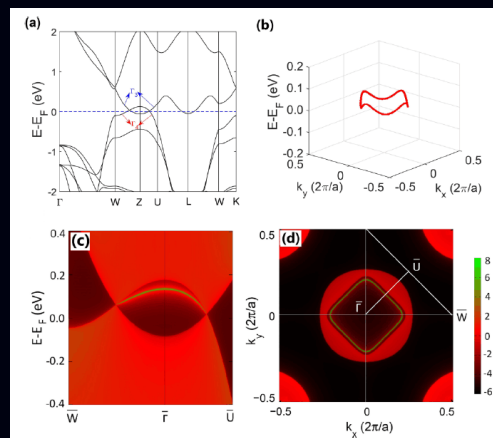
- 账号：每位PI可以申请一个group，group下添加课题组成员的user account。
- 集群存储分三个区（data，scratch，work）。每个group在data和work下都拥有一定磁盘配额（quota）；scratch分区不设磁盘配额，但是会做定期清理数据。
- 队列：
 - smp—大内存节点队列(胖节点，6 TB/节点)，运行时长限制为72小时，中等优先级。
 - medium—长时间作业队列（刀片节点），运行时长限制为72小时，低优先级。
 - short—短时间作业队列（刀片节点），运行时长限制为24小时，高优先级。
 - debug—调试作业队列，运行时长限制为5小时，中等优先级。
 - ser—串行作业队列，运行时长限制为24小时，中等优先级。
 - gpu —gpu队列（gpu节点），运行时长限制为24小时，中等优先级。

主要应用领域

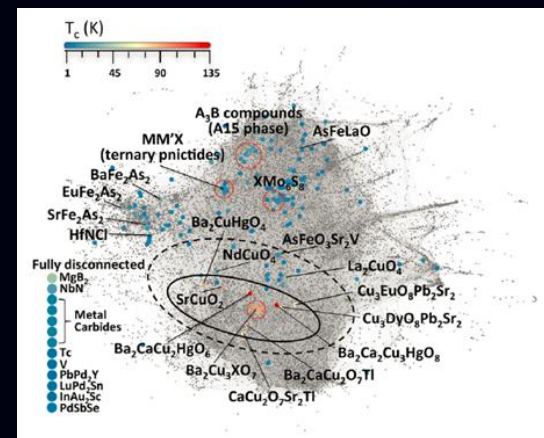
- 多尺度模拟（机械与能源，力学与航空航天等）
- 量子计算（物理，化学，材料，电子等）
- 大数据（材料，生物，环境科学，金融等）



多尺度模拟：湍流多相流
直接数值模拟



量子计算：半金属 CrO_2
中的拓扑Nodal-line费米子及其表面态模拟



大数据：材料超导转变温度的大数据分析

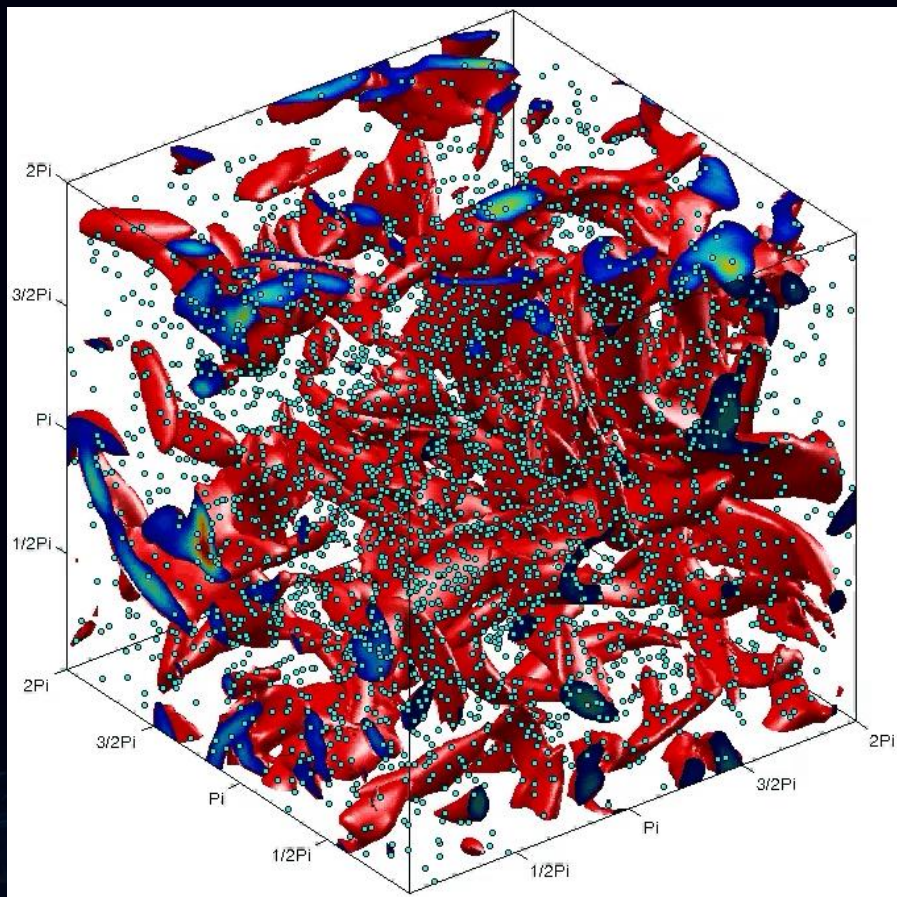


典型应用—湍流颗粒流直接数值模拟

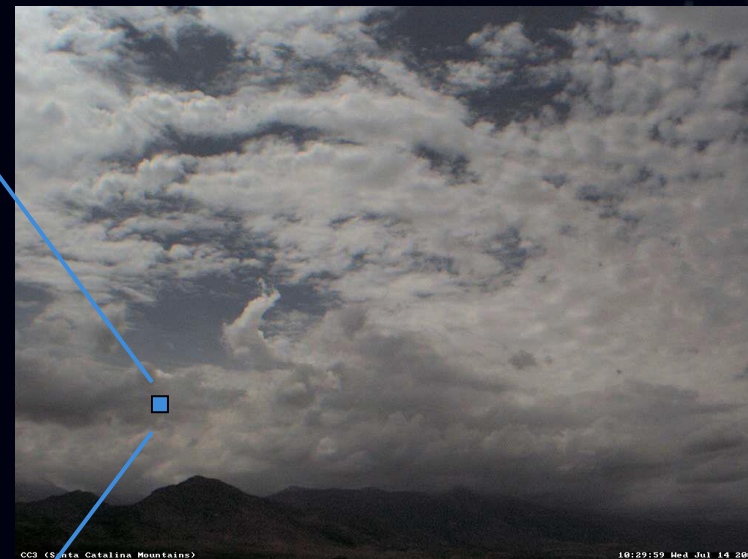


南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想



Real clouds



Grabowski and Wang, Growth of cloud droplets in a turbulent environment. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 45 (2013) 293-324.

融合计算
2019 联想全球超算峰会
Lenovo HPC Summit

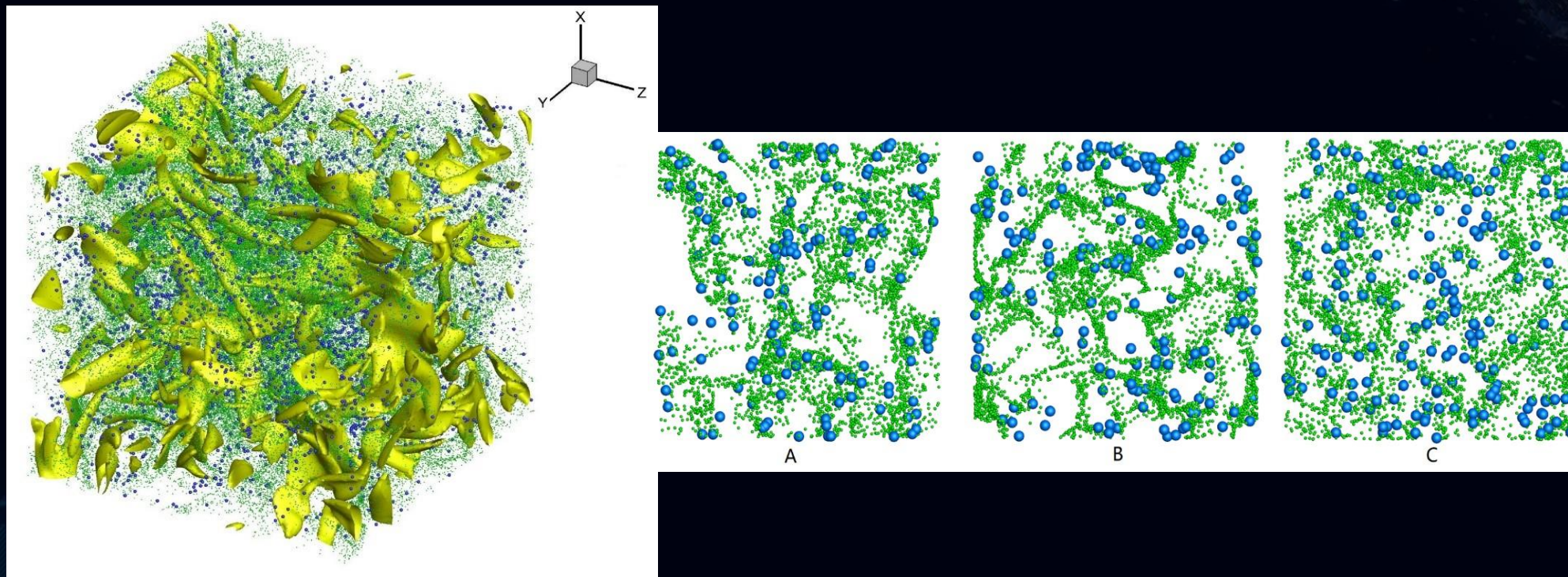
<http://hpc.sustech.edu.cn>



浮选湍流中颗粒气泡碰撞特性



浮选是在液相流场中通过气泡将有用颗粒上浮带出的一种分离工艺。工业应用包括矿物、煤粉、塑料颗粒分选、废纸脱墨回收以及废水处理等。



Wan DD, Wang L-P, Chen SY, Wang GC, 2019, Study of collisions between particles and bubbles with point-particle model embedded in the direct numerical simulation of turbulent flows. *Minerals Engineering*, in review.



“启明”使用情况统计



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

- 1月**：账号数达到538个，课题组数达到154个。其中活跃课题组为51个，1月份为全校师生提供328万核时，机器使用率为69%。
- 2月**：账号数达到542个，课题组数达到155个。其中活跃课题组为39个，2月份为全校师生提供225万核时，机器使用率为55%。
- 3月**：账号数达到545个，课题组数达到156个。其中活跃课题组为48个，3月份为全校师生提供419万核时，机器使用率为**92%**。
- 4月**：账号数达到547个，课题组数达到157个，其中活跃课堂组为50个，4月份为全校师生提供405万核时，机器使用率为**89%**。



“太乙”使用情况统计



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

- 1月**：共开设349个账户，覆盖除人文、创业学院以外的全校所有院系。涉及全校77个课题组。其中活跃课题组15个。1月共为全校师生提供1914万核时。机器使用率77.63%。
- 2月**：账户数达到391个，课题组数达到83个，其中活跃课题组数17个。2月共为全校师生提供1701万核时。机器使用率76.36%。
- 3月**：账户数达到452个，课题组数达到90个，其中活跃课题组数16个。3月共为全校师生提供2311万核时。机器使用率**93.71%**。
- 4月**：账户数达到484个，课题组数达到95个，其中活跃课题组数15个。3月共为全校师生提供2250万核时。机器使用率**94.29%**。

融合计算

<http://hpc.sustech.edu.cn> 2019 联想全球超算峰会
Lenovo HPC Summit



近半年重要工作——接待来访



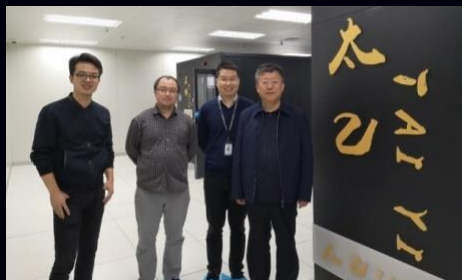
南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY



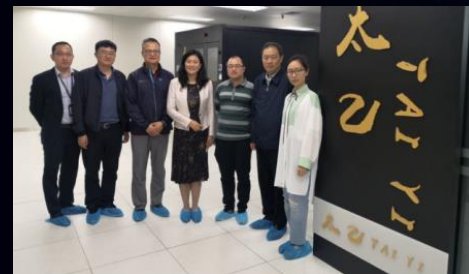
接待来访工作。



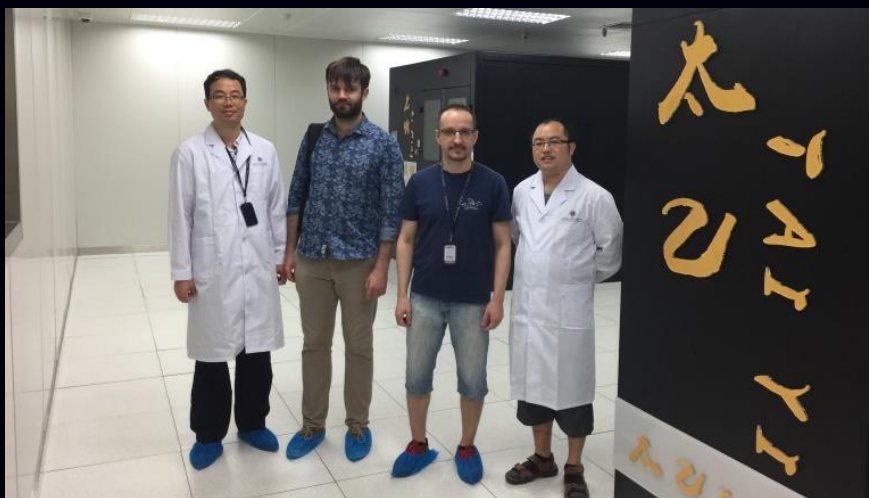
中央台《国宝档案》栏目组



北京大学航空航天学院张雄教授



环境保护部固体废物管理中心



University of Social Sciences and Humanities
Darek Kowalski and Michal Rozanski



近半年重要工作—学生超算俱乐部



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY



ASC19南科大大学生团队

初赛成绩



ASC19世界大学生超级计算机竞赛
总决赛队伍名单

北京航空航天大学 Beihang University

南方科技大学 Southern University of Science and Technology

第二名

总决赛成绩



总决赛获奖最多的参赛队

✓ 一等奖

✓ 应用创新奖

✓ 最佳人气奖

融合计算

<http://hpc.sustech.edu.cn>

2019 联想全球超算峰会
Lenovo HPC Summit



近半年重要工作—收费策略

➤ 收费策略



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

收费策略

1. 刀片共享队列：市价5折。
2. 胖节点共享队列：单核心是刀片节点的3~4倍价格。
3. GPU节点共享队列：单节点价格是刀片节点的2~3倍。
4. 存储空间扩容费：每个课题组基础容量5 TB左右，超出需额外收费。
5. 账号维护费：每个group收取2000元/年的年费。每年机时费使用量超过3000元免收年费。
6. 论文成果奖励：以费用结算打折方式给予奖励，有论文产出者，平均折扣为60%。

融合计算

<http://hpc.sustech.edu.cn> 2019 联想全球超算峰会
Lenovo HPC Summit

<http://hpc.sustech.edu.cn>



未来计划—代码测试



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY



Table I. The test results of "DHIT" in "Qi-Ming" and "Tai-Yi" clusters

cluster	mpi	nodes	cores	nprocY	nprocZ	isteps	time	second/step	steps/s
Qi-Ming	impi	1	16	4	4	1000	2294 s	2.294 s	0.436/s
Qi-Ming	impi	3	64	8	8	10000	7721 s	0.772 s	1.295/s
Tai-Yi	impi	1	16	4	4	1000	1747 s	1.747 s	0.572/s
Tai-Yi	impi	1	16	4	4	5000	8509 s	1.702 s	0.588/s
Tai-Yi	impi	2	64	8	8	10000	6797 s	0.679 s	1.473/s
Tai-Yi	impi	7	256	16	16	10000	1648 s	0.165 s	6.068/s
Tai-Yi	openmpi	1	16	4	4	1000	1574 s	1.574 s	0.635/s
Tai-Yi	openmpi	1	16	4	4	5000	7721 s	1.544 s	0.648/s
Tai-Yi	openmpi	2	64	8	8	10000	6811 s	0.681 s	1.468/s
Tai-Yi	openmpi	7	256	16	16	10000	1658 s	0.166 s	6.024/s
Tai-Yi	openmpi	26	1024	32	32	10000	301 s	0.030 s	33.333/s
Tai-Yi	openmpi	26	1024	32	32	50000	1432 s	0.029 s	34.916/s
Tai-Yi	mvapich2	1	16	4	4	1000	2310 s	2.310 s	0.433/s
Tai-Yi	mvapich2	2	64	8	8	10000	6803 s	0.680 s	1.470/s
Tai-Yi	mvapich2	7	256	16	16	10000	N/A	N/A	N/A
Tai-Yi	mvapich2	26	1024	32	32	10000	N/A	N/A	N/A
Tai-Yi	mpich	1	16	4	4	2000	3111 s	1.556 s	0.643/s
Tai-Yi	mpich	2	64	8	8	10000	14407 s	1.441 s	0.694/s



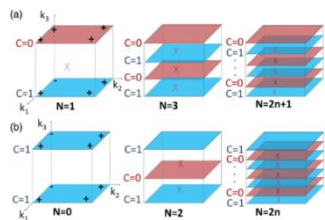
未来计划—收集和统计研究成果



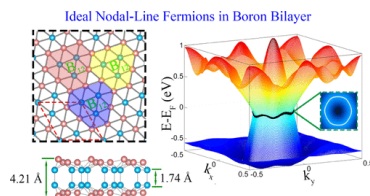
南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY



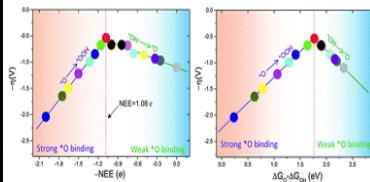
以下为历年来在科学与工程计算中心设备支持下所发表的研究论文。



1. Bowen Xia, Yuanjun Jin, Jinzhu Zhao, Zhongjia Chen, Baobing Zheng, Yujun Zhao, Rui Wang* and Hu Xu*. "Robust Twin Pairs of Weyl Fermions in Ferromagnetic Oxides" Phys. Rev. Lett. 2019. 122 057205.



2. Shaogang Xu, Baobing Zheng*, Hu Xu* and Xiaobao Yang*. "Ideal Nodal Line Semimetal in a Two-Dimensional Boron Bilayer" J. Phys. Chem. C 2019. 123 4977.



3. Xiang Huang, Jiong Wang, Huabing Tao, Hao Tian and Hu Xu*. "An essential descriptor for the oxygen evolution reaction on reducible metal oxide surfaces" Chem. Sci. 2019. 10 3340.

融合计算



近期发展需求



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

南科大可视化中心架构

三大建设模块：

1. 云管理平台
2. 可视化平台
3. 医学成像平台



充分利用人类头脑、视觉、听觉、触觉，提高互动和研发能力、科研成果宣传力度和教学实践效果。

融合计算

<http://hpc.sustech.edu.cn>

2019 联想全球超算峰会
Lenovo HPC Summit



总结



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

管理



建立超算硬件系统管理长效机制，建立超算管理员系统长效机制。

教学



大力发展学生超算团队，培养学生兴趣，为学生提供教学指导和设备保障。

研究



软件部署与测试 → 代码优化和移植 → 开发科学计算软件。

融合计算
2019 联想全球超算峰会
Lenovo HPC Summit

<http://hpc.sustech.edu.cn>



人才招聘



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

基本要求

- 硕士以上学历，特别优秀者可适当放宽。
- 精通Linux/Unix操作系统操作，具有3年以上Linux/Unix系统管理经验。
- 熟练掌握Shell脚本语言，同时掌握Python、Perl、Fortran、R、C/C++、java、php等至少一种程序语言。
- 有超算集群部署、维护和管理经验。有国内外计算（超算）中心工作经验。
- 善于沟通交流，做事耐心仔细。
- 有一定英文读写交流能力。

加分项

- 深度学习，生物信息学，人工智能，大数据开发等研究经验者优先。
- 熟悉HPC并行计算原理和相关并行框架(OpenMP、MPI等)，有高性能计算程序优化及调试经验者优先。
- 熟悉图像处理算法、三维立体成像、VR等可视化方法，具有数字图像处理算法研究或开发的实践经验者优先。
- 有弱电、强电、制冷设备规划维护经验者优先。

融合计算

<http://hpc.sustech.edu.cn> 2019 联想全球超算峰会
Lenovo HPC Summit

<http://hpc.sustech.edu.cn>



人才招聘待遇



南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

- 计算中心提供良好的科研与办公条件
- 计算中心提供国内外培训与交流的机会
- 薪酬：基础年薪、五险一金、过节费、高温补贴、计划生育奖、年终绩效奖
- 计算中心支持中心人员申请国家、广东省、深圳市各类各级科技研发项目
- 符合深圳市孔雀计划或高层次人才条件的，可获得160万元以上免税补贴
- 在深圳没有自有产权住房者，可申请深圳市为南科大配套的人才保障房

融合计算

<http://hpc.sustech.edu.cn> 2019 联想全球超算峰会
Lenovo HPC Summit



中心主要工作



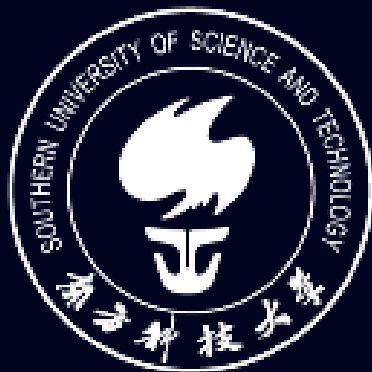
南方科技大学
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

Lenovo 联想

- 运维：既面对用户、又面对设备
- 收费：计费、查账、对账、交账
- 申请与完成各类项目：校级、市级、省级以及国家级
- 写总结：部门总结
- 带参观：平均每周一次
- 参加学校规定的行政会议
- 组织用户培训会及学术研讨会
- 项目招标采购验收工作

融合计算

<http://hpc.sustech.edu.cn> 2019 联想全球超算峰会
Lenovo HPC Summit



南方科技大学

SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

我们还处在摸着 石头过河的阶段



Thanks