

高性能并行计算物理实验室

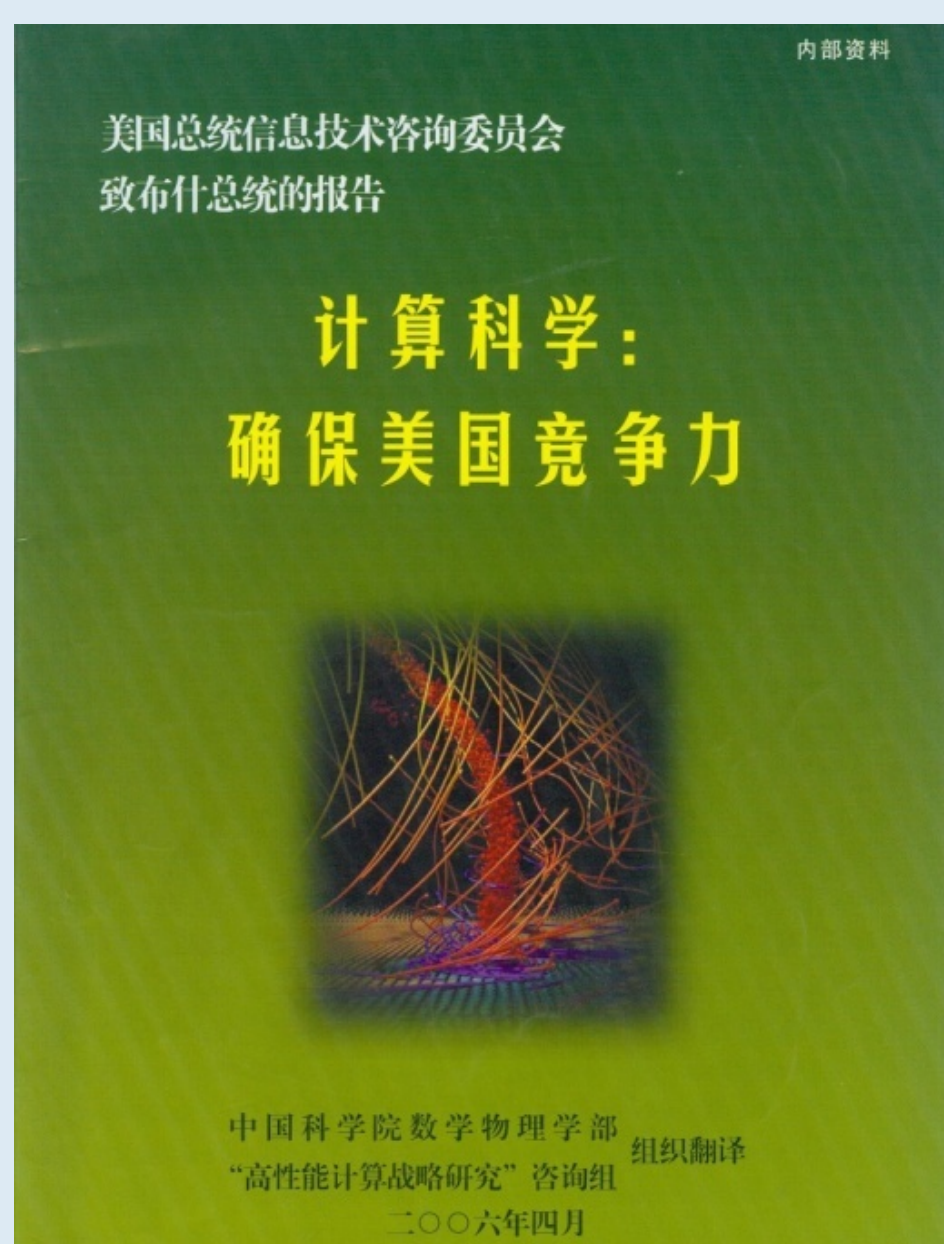
The Physics Laboratory of High Performance Computing

中国人民大学物理学系 Department of Physics, Renmin University of China

I. 计算科学的重要性 Importance of computing science

◆ 美国总统发展战略研究报告:

人类科技活动的主旨是发现和创新，而21世纪的发现和创新很大程度上依赖于模拟和计算的能力……，其科技竞争很大程度上是计算能力的竞争。



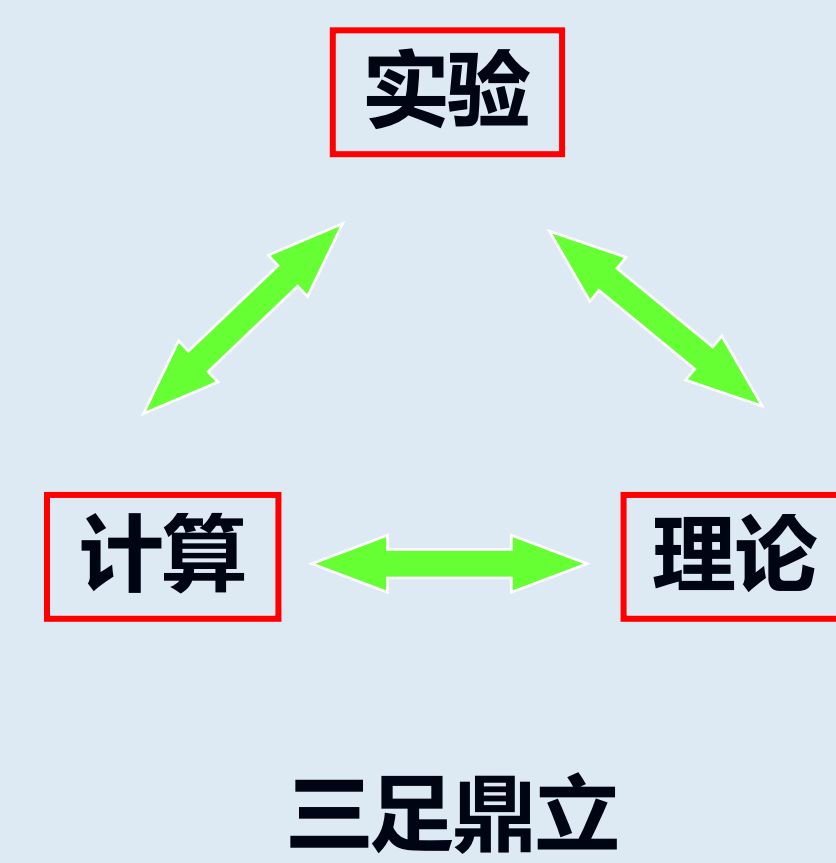
◆ 中国科学院院刊：我国计算科学的发展与对策建议

今天，计算科学已经成为科学技术发展和重大工程设计中具有战略意义的研究手段，与传统的理论研究和实验室实验一起，成为促进重大科学发现和科技发展的战略支撑技术，是提高国家自主创新能力和核心竞争力的关键技术因素之一。

II. 计算物理 Computational physics

◆ 计算物理学科:

- 1、可预言新物理与新现象、检验理论的预言、解释实验上的新发现；
- 2、模拟实验手段所不能达到的极端条件下的行为；
- 3、应用于国防等以满足国家科技战略的重大需求。
- 4、具有可持续性：随着计算机的性能提高和算法的发展而发展。



III. 实验室人员组成 Members

本实验室以教育部“计算物理方法的发展及其在新奇量子效应中的应用”创新团队为依托。

系内成员：“计算物理方法及应用”“材料计算与物质模拟”“理论物理”“原子分子物理”和“交叉学科”等五个团队的十多位成员；

合作成员：中国科学院物理研究所2人、美国Ames国家实验室1人、日本东京大学1人、日本筑波材料所1人、瑞士苏黎士高工1人。

IV. 高性能计算集群介绍 Introduction to high performance computing cluster

◆ 硬件部分:

物理系高性能并行计算集群于2010年、2013年和2016年分批建设了三期，目前正在运行的最新两套高性能计算集群总共有3568个Intel CPU计算核心，约10TB内存，180TB集中存储空间，计算节点之间通过40Gb Infiniband网络连接，总的理论计算峰值为103万亿次（TFLOPS），实测峰值合计92万亿次。



一期设备图



二期设备图

◆ 软件部分:

操作系统: Linux

编译器: Intel Compiler

并行环境: Openmpi 和 Mvapich2

数学库: Intel MKL, GotoBLAS2, ACML, FFTW等

开源软件: GNUPLOT, Quantum Espresso等

◆ 文件系统:

存储类型	名称	用户配额	保留策略
网络文件系统	/home/	1GB	每24小时备份，不清理
并行文件系统	/gpfs/userdata/	200GB	Raid6保护，不清理
本地文件系统	/tmp	200GB	无备份，每7天清理1次

◆ 作业调度: Grid Engine和Torque

集群的作业调度采用（FIFO）规则，但同时对以下参数进行了限定：

- 1、每个用户组最多提交的任务数和使用的核数；
- 2、并行队列的最长作业时间。

以上策略目前可以保证所有用户及时运行作业，将适时引入等份额分配等其他更加细致的调度策略。

V. 集群性能 Performance

根据物理系的具体需求，该集群配备了不同硬件类型的计算节点，除个别串行节点和测试节点外，其他所有并行计算节点的Linpack测试结果如下：

节点数量	节点型号	CPU	内存	理论峰值 (TFlops)	实际峰值 (TFlops)	Linpack效率
一期	38	IBM HS22 2个4核Intel Xeon E5530 2.4GHz	6*2GB	2.918	2.564	88%
	14	IBM HS22 2个4核Intel Xeon X5550 2.66GHz	6*2GB	1.192	1.109	93%
	14	IBM HS22 2个4核Intel Xeon X5550 2.66GHz	6*4GB	1.192	1.146	96%
二期	70	HP BL460 2个8核Intel Xeon E5-2670 2.6GHz	8*4GB	23.296	20.46	88%
	5	HP BL660 4个8核Intel Xeon E5-4640 2.4GHz	32*8GB	3.072	2.763	90%
三期	64	HP BL460 2个16核Intel Xeon E5-2683 2.1GHz	8*8GB	68.813	61.940	90%
	5	HP BL660 4个12核Intel Xeon E5-4650 2.1GHz	32*16GB	8.064	6.842	85%

VI. 集群的其它特点 Other characteristics

- 1、自主编写了监控程序，在集群温度高于一定值时会免费给管理员手机发短信，从而更好地保证集群的正常运行；
- 2、机柜背面的散热单元能迅速抽走集群产生的热量，提高机房空调的制冷效率，降低系统的总体能耗。