

QNP实验室计算资源介绍

张泽宇

2015年04月19日

框架

- 高性能计算中心(HPC) π 节点
- 戴尔T7610塔式工作站

HPC高性能计算中心

- 经过提交申请、签订合同、递交测试经费单等流程，下周实验室将获得HPC**授权一年**的超级计算机“ π ”测试账号，用于运算量较大的程序仿真与测试。
- 申请资源如下：
CPU，单价：**0.1元**每核时，数量：**60000核时**
GPU\MIC，单价：**1元**每块时，数量：**2000核时**
胖节点，单价：**0.2元**每核时，数量：**10000核时**
总价：**壹万圆整**（人民币）。



HPC高性能计算中心——预置软件

Scientific Applications

Applications	Version	GPU Support	MIC Support	Info	License	Notes	Website	Manual
Quantum Espresso	5.2	√		Density-functional Theory	Free		Mainpage	Link
DL_POLY	4.04			Classical Molecular Dynamics	Free	GPU Version Available Soon	Mainpage	Link
Gromacs	4.6.3	√		Classical Molecular Dynamics	Free		Mainpage	Link
LAMMPS	SVN Revision: 11013	√		Classical Molecular Dynamics	Free		Mainpage	Link
SIESTA	3.2			Density-functional Theory	Free		Mainpage	Link
OPENFOAM	2.2.1			CFD	Free		Mainpage	Link

多为生物、物理、材料方面的计算软件，相关性不大

HPC高性能计算中心——预置库

Scientific Libraries

Applications	Version	GPU Support	MIC Support	Info	License	Notes	Website	Manual
BLAS				Linear Algebra	Free		Mainpage	Link
LAPACK	3.3.0			Linear Algebra	Free		Mainpage	Link
FFTW	3.3.3			Fast Fourier Transform	Free		Mainpage	Link
GSL	1.15			Mathematics	Free		Mainpage	Link
Libxc	2.01			Functionals for Density-functional Theory	Free		Mainpage	Link
ViennaCL		√	√	Linear Algebra	Free	Will Be Installed Soon	Mainpage	Link
ScaFaCos				Coulomb Solvers	Free	Will Be Installed Soon	Mainpage	Link

与研究相关库，可编写C代码调用

HPC高性能计算中心——使用方法

- 使用方法：

- 使用SSH远程登陆高性能计算节点
- Windows用户使用Putty客户端登陆，Linux用户使用命令行登陆
- Linux登陆命令行：\$ ssh -p 22 YOUR_USERNAME@202.120.58.229
- 高性能计算节点为Linux系统
- 为充分体现计算节点并行运算性能，我们提交的作业程序必需是具备并行运算功能的，计算节点将会根据程序执行情况自动分配计算资源，加快运算速度
- 计算中心没有安装MATLAB软件，如需使用需要购买MATLAB正版license，软件89美元，库每个25美元：<https://cn.mathworks.com/store/index.do>
- 适合本实验室运行的程序：光学频率梳仿真、QKD后处理、光子晶体仿真
- 参考使用手册：http://pi.sjtu.edu.cn/docs/Main_Page#Documents_for_HPC_Users

戴尔T7610工作站

- 主要配置:

- 双英特尔至强处理器 E5-2630 v2 (六核 HT, 2.6GHz Turbo, 15 MB), Dell Fixed Precision Tx610
- 64GB (8x8GB) 1866MHz DDR3 ECC RDIMM
- 2TB 3.5英寸 Serial ATA (7,200 Rpm) 硬盘

- 操作系统: Ubuntu14.10、Windows 8 64位

- 安装软件:

- Ubuntu: MATLAB_R2014b、COMSOL
- Windows 8: Rsoft、OptiSystem、Xilinx_ISE_12.4、Visual Studio 2010

如需安装其他软件, 请与张泽宇同学联系
务必注意实验室资料保密, 勿外传!



戴尔T7610工作站

- Ubuntu下MATLAB启动方式：命令行进入/usr/local/MATLAB，运行matlab文件
- Ubuntu下COMSOL启动方式：命令行进入/usr/local/COMSOL，运行comsol文件
- MATLAB代码文件一律放到/home/qnp/matlab中，COMSOL测试文件一律放到/home/qnp/comsol中

由于HPC及T7610的使用均需用到linux系统，所以不了解linux命令行的同学在使用前要找资料自行学习

谢谢！