



中国科学技术大学

University of Science and Technology of China

超算中心简介

沈瑜

中国科学技术大学，超级计算中心

2023 年 5 月 30 日



- 历史** 2002 年底，学校决定建设第五公共服务平台，即科学计算平台（超级计算平台）。2003 年 10 月初步建成中国科大-中国惠普高性能运算联合实验室，后经几年的不断发展扩建，逐步建设成为现在的中国科学技术大学超级计算中心，简称超算中心
- 现状** 超算中心是学校六大公共实验中心之一，挂靠校网络信息中心，是中科院超级计算环境合肥分中心、国家超算天津中心中科大分中心、中国教育网格中科大节点、国家网格合肥分中心
- 宗旨** 本着推动科学研究、促进人才培养的建设方针，中心面向校内所有有高性能计算需求的科研院所、实验室、教师、学生提供高性能计算服务



超算中心以 CPU 计算资源为主，辅以 GPU 和大规模存储资源

百核以内 实验室、课题组自建超算平台

千核到万核 校超算中心自建平台

万核以上 中心可协助租用校外超算资源（中科院超算、国家超算、上海超算等）



- 2002 ~ 2012
 - ▶ 超算中心成立，共用网络中心机房
 - ▶ 超算系统从国外品牌（HP、IBM）过渡到国产品牌（联想、曙光）设备总价值 2 千 3 百万
- 2013 ~ 2022
 - ▶ 建成东区超算机房，配置双路供电、高密机柜、水冷空调
 - ▶ 国产高密度 CPU 服务器成为主流（联想、曙光、华为、浪潮……）
 - ▶ 每年持续投入，以 CPU 系统为主，总投资超过 1.2 亿
- 2023 ~
 - ▶ 建成西区生科院共建机房，20 个机柜，单机柜支持负载 30kW
 - ▶ 建成大规模 GPU 服务器（浪潮，25 台 8 卡 NVLINK A100 80GB）、高性能大容量存储系统（浪潮，10PB 存储，聚合读写性能 >100GB/s）和高性能 CPU 服务器（浪潮，10 台 4CPU 3TB 内存胖节点和 80 台双 CPU 高密计算节点）
 - ▶ 高新校区机房开始建设，一期机柜 260 多个



瀚海 22 超级计算系统 2022 建成，2023 年扩建。以 GPU 和高性能存储为主，辅以配置高性能本地存储的双路 CPU 和大内存节点。适合可以使用 GPU 加速和需要高性能 IO 的应用

瀚海 20 超级计算系统 2020 年建成。大规模双路 CPU 节点为主，辅以少数 GPU、大内存和国产 CPU 节点。适合大规模并行作业和普通 CPU 作业。

曙光 TC4600 百万亿次超级计算系统 2014~2016 年建成并逐步扩建。以 CPU 为主，也包括 GPU、KNL 众核计算节点。节点较老，性能较差，免费使用。¹

¹详见超算中心主页“系统平台”栏目：<https://scc.ustc.edu.cn/435/list.htm>



超算机时服务

我校师生可申请超算账户，在超算系统上进行科学计算

用户系统托管和运维服务

在机房条件允许的情况下，可以为我校各单位、实验室的超算设备提供托管和运维服务

超算应用开发和优化

为科研应用提供程序开发和优化，助力科研活动

超算培训和技术支持

为用户提供超算相关培训和技术支持

免费使用 曙光 TC4600 百万亿次超级计算系统和瀚海 20 超级计算系统的国产 CPU 服务器，用户申请账号后可免费使用该服务器计算

- 付费排队使用**
- ▶ 瀚海 20 和瀚海 22 主要为付费排队使用，用户可随时申请账号，随时计算。按学校规定，计算费为“测试费”类别，需要先使用后付费，不可预存
 - ▶ 校内计算单价为 CPU 系统 0.02 元/CPU 核心小时，GPU 系统 3 元/卡小时
 - ▶ 中心每年拿出约一半机时对上年度致谢中心的科研论文给予奖励

独占队列使用 每学期开学集中申请一次，每次有效期半年。价格比排队计算贵，但可以避免和其它课题组争抢计算资源²

²详见超算中心主页“用户申请”栏目中“中国科学技术大学超级计算中心收费标准（试行）2022 年 7 月 15 日版”：<http://scc.ustc.edu.cn/2022/0725/c416a563398/page.htm>



用户系统托管

- ▶ 为用户解决机房空间、服务器噪音、日常巡检等问题
- ▶ 目前东区图书馆机房因供电不足不能接收新托管服务器
- ▶ 西区生科院机房还有空间可以托管，该机房机柜为高密机柜，只接收高密度服务器或者 GPU 服务器以及附属设备，普通塔式等低密度设备不接收托管

用户系统运维

- ▶ 为用户解决学生或者老师兼职维护自建服务影响科研工作以及网络安全等问题
- ▶ 目前中心运维生科院集群、核科学学院集群等，已产生大量科研成果



- ▶ 超算中心有来自高性能计算、物理、化学的专业开发队伍，可与用户合作开发优化科研计算软件
- ▶ 中心优先支持有广泛应用价值和重大科研需求的软件
- ▶ 案例

ABACUS 中心自 2014 年起为 ABACUS³进行持续开发优化，先后解决核心函数性能、大规模并行效率等关键问题，共同承担了校创新团队项目、国家重点研发项目和中科院先导项目，为 ABACUS 从课题组自研软件发展到目前 2 地 3 单位联合开发，数百个用户实际使用的大规模开源项目做出了大量贡献

³ABACUS 主页: <https://abacus.ustc.edu.cn>



PositronDFT 中心自行开发正电子计算软件，为用户重要论文提供计算软件

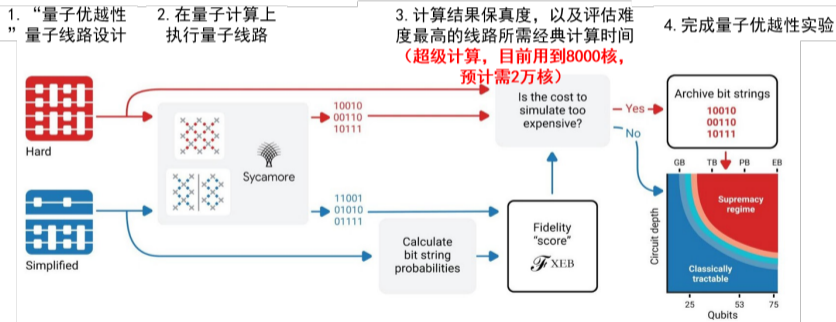
HSPM 与地空学院合作，将该软件移植到国产超算平台上，支持异构加速卡计算，获得了“光合基金”的支持，并评为“优秀课题”

地震背景噪声研究 与地空学院合作，将地震背景高频噪声互相关函数计算程序先后移植到 GPU 和国产异构加速卡上，获得了核心计算模块加速 1100 多倍，整体性能加速近 400 倍的优异性能。得到了中国地震局项目和“光合基金”项目的支持

- ▶ 2022 年共支持发表 SCI 论文 464 篇，包含 Nature、Science 等顶级论文 38 篇
- ▶ 2022 年，在校主页新闻报道的重要科研成果论文中有 22 篇致谢了校超算中心



潘建伟院士团队研究的“量子优越性” (Quantum Supremacy) 是量子计算发展道路上的一个重要里程碑, 指的是量子计算机在某个特定问题上的计算能力远超过性能最好的超算, 证明量子计算机的优越性。



我校化学与材料科学学院罗毅、江俊教授团队与自动化系尚伟伟等合作打造的“机器化学家”获得了广泛关注。独有的计算大脑通过调用物理模型、理论计算、机器学习和贝叶斯优化，让智能模型融入底层的理论规律与复杂的化学实验演化，使得机器科学家更加理解化学，更加擅长化学创造。



杨金龙院士团队开发更准确、高效、实用的线性标度方法，实现高性能并行，便于模拟新材料、新器件关注的复杂体系获得具有自主知识产权的、准确高效的线性标度第一性原理程序包，为理论计算和模拟提供实用有效的工具

HONPAS: Hefei Order-N Packages for Ab initio Simulations
合肥从头模拟线性标度软件 (2019SR1267056)

基于严格局域化的数值原子轨道基组 NAOs

在天河超算上实现线性标度HSE06计算，28,800核并行效率高达70%

Comput. Phys. Commun. (2020)

DGDFT: Discontinuous Galerkin Density Functional Theory

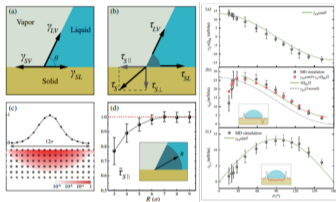
- 更准 (平面波)、更大 (20,000原子)、更快 (800,000核心)
- 突破VASP瓶颈: 平面波/500原子/1,000核心

基于平面波分块计算的自适应正交局域基组 ALBs

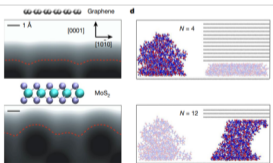
- 美国NERSC Intel平台Cori: 128,000 进程, 80%并行效率
- 国产神威·太湖之光: 8,519,680核心/131,072 进程, 30%并行效率

Sci. Bull. (2020)

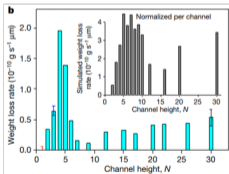
利用超算模拟纳米尺度下实验无法观测的 限域传质原子细节



建立了描述液滴三相接触线处毛细力平衡的微观力学模型，给出了1805年建立的Young方程的力学解释。
Physical Review Letters, **124**: 125502 (2020).

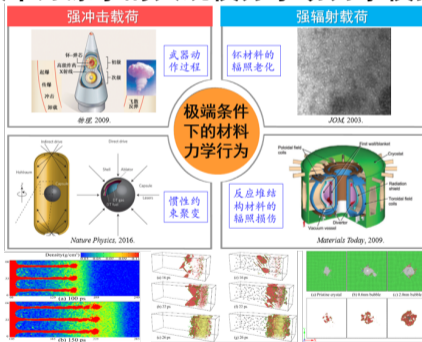


Nature, **558**: 420-424 (2018).



Nature, **538**: 222-225, (2016).

承担国防基础科研核科学挑战计划: 强冲击作用下凝聚介质表界面微力学行为和机理研究, 2016-2020 年利用超算平台开展数千万原子的大规模分子动力学模拟。





中国科大在新型碳基晶体研究方面取得重要进展

中国科大在水系锌电池研究中取得重要进展

中国科大揭示核壳型双金属纳米催化存在共轭双量子尺寸效应

中国科大在分子光物理和光化学领域取得重要成果

中国科大揭示细胞有丝分裂期转录调控动态机制

中国科大合作研究在低维硼领域取得新进展

中国科大合作研究实现高效稳定近红外钙钛矿LED

中国科大在可燃冰绿色可持续利用领域取得新进展

中国科大在锂-氯气二次电池研究领域取得重要进展

可燃冰是一种重要的储备能源，试采可燃冰的产品中99.5%成分为

中国科大通过金属间连接体自旋态和晶格对称性设计，实现了五重功能集成的二维单层磁性半导体

陈维教授联合江海龙教授和李震宇等
for Nanoconfinement of Chlorine
采用一种功能化的金属有机框架(MOF)
长循环稳定性 (500圈) 和低温(-4

中国科学技术大学杨金龙课题组李星星团队通过调整有机连接体的自旋态和晶体结构的对称性/拓扑性在二维铬(Cr)基五元杂环金属有机框架中理论预言了一类同时具有五种重要功能特性的单层磁性半导体材料

到广泛应用，但其为一次不可充电
种新型高能密度电池，具有1200



- ▶ 主任：薛开平，网络信息中心主任兼，主持全面工作，kpxue@ustc.edu.cn
- ▶ 主任：李会民，网络信息中心副主任兼，具体负责，hmli@ustc.edu.cn
- ▶ 主任助理：沈瑜，协助主任开展超算各项工作，shenyu@ustc.edu.cn
- ▶ 成员（东区新图书馆一楼东侧 126、124 室）
 - ▶ 张运动，用户管理、技术支持及系统管理等日常事务，zhangzyd@ustc.edu.cn，63602248，126 室
 - ▶ 张文帅，物理学博士，程序优化及用户技术支持，wszhang@ustc.edu.cn，63602248，126 室
 - ▶ 刘晓辉，物理学博士，程序优化及用户技术支持，liuxiaohui@ustc.edu.cn，63601540，124 室
 - ▶ 吴超，计算机博士，程序优化及用户技术支持，wuchao15@ustc.edu.cn，63601540，124 室



- ▶ 超算中心主页: <https://scc.ustc.edu.cn>
- ▶ 办公电话:
 - 63602248 账户和系统管理等日常事务, 程序优化和技术支持
 - 63601540 程序优化和技术支持
 - 63600316 副主任办公室
- ▶ 电子信箱: sccadmin@ustc.edu.cn



超算中心

- 扩大计算能力，减少排队时间
- 增加工作人员，提供更多方面的服务

用户：

- 年底及时反馈成果统计
- 在论文致谢中提及超算中心

学校

- 超算中心对科研起重要作用，应支持超算中心发展