

2 | 0 | 2 | 4

融科 SuperHPC高 性能计算解决方案

目 录

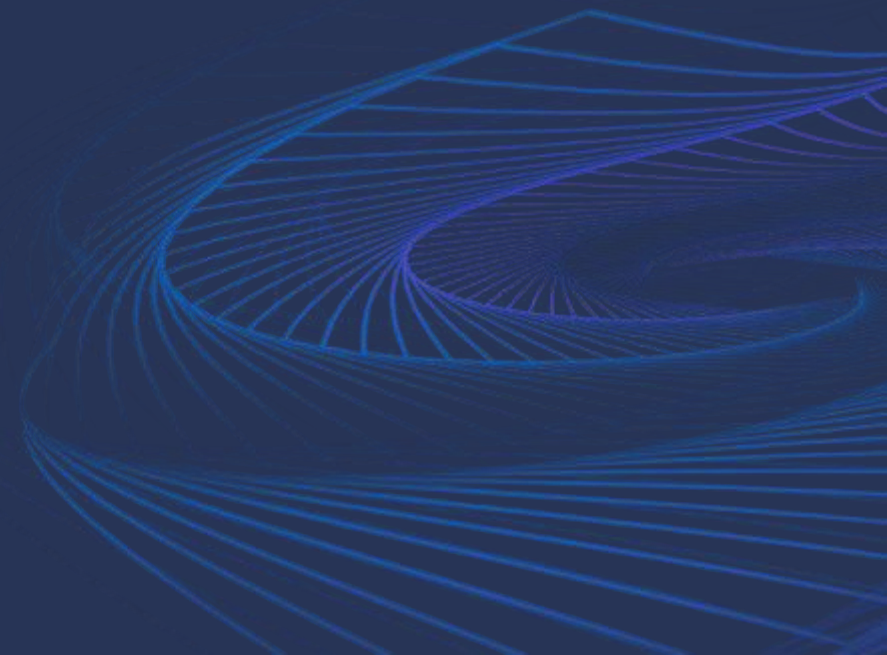
CONTENTS

01 HPC市场情况

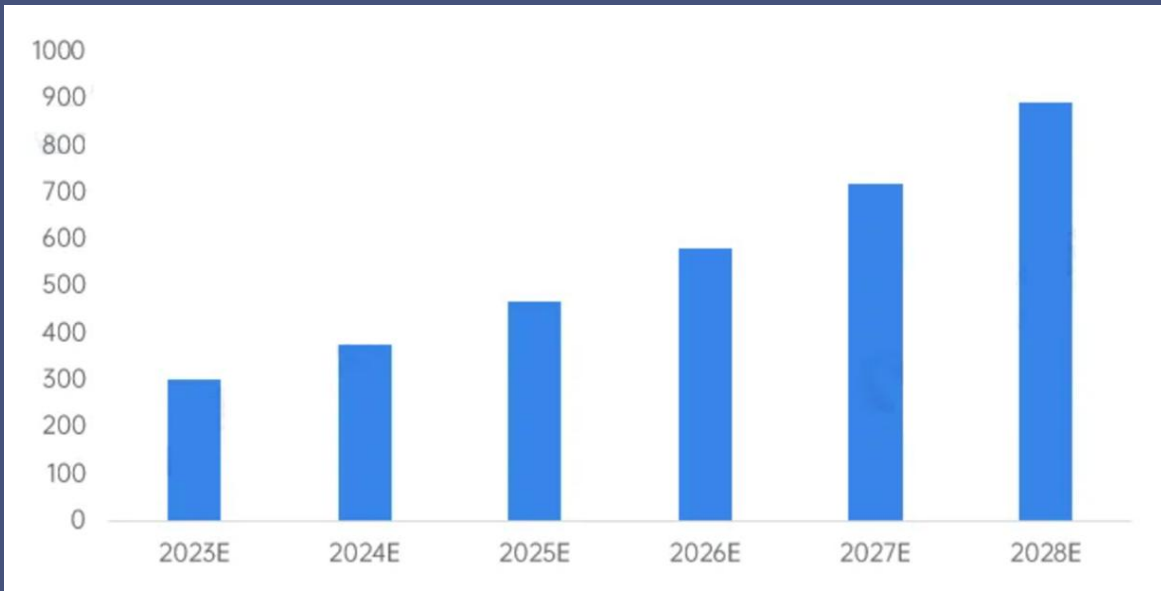
02 融科SuperHPC介绍

03 SuperHPC常用软件

04 应用场景

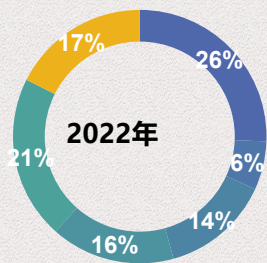
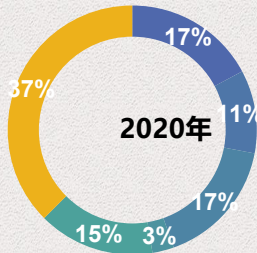


HPC市场情况

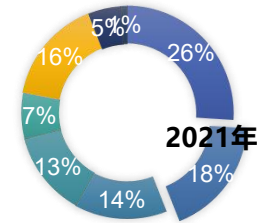


中国超算应用细分情况

- 平台应用
- HPC应用
- 科研服务
- 国家政府
- 学术研究
- 社会效益



中国超算在细分学科应用情况



- 数理
- 化学
- 工材
- 地球
- 生命
- 信息
- 医学
- 管理

HPC市场情况

HPC应用领域趋势预测



科学计算

- 1、气候模拟：可更准确预测气候变化
- 2、物理模拟：提供更精确的预测结果
- 3、生物医药：为新药研发、基因测序等提供强大的计算支持



人工智能

- 1、深度学习：进一步推动人工智能技术的突破与发展
- 2、语音识别：进一步提高准确率，为智能语音助手等应用提供更好地支持
- 3、图像识别：进一步优化图像识别算法，提高准确率



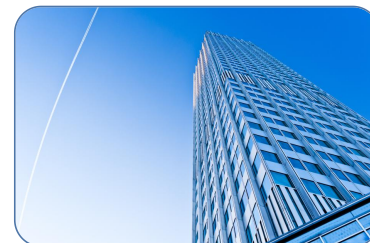
大数据

- 1、数据挖掘：进一步挖掘大数据的价值，提供更准确依据
- 2、数据处理：提高效率，为各行业数据分析提供更好地支持
- 3、数据存储：进一步优化数据存储方案，提高存储效率和安全性



云计算

- 1、云服务：为各类云计算客户提供高效、安全的计算服务
- 2、云存储：为大量数据存储提供更好地支持
- 3、云网络：提高网络的安全性和稳定性



HPC市场情况

HPC市场预测

预计到2024年，全球HPC市场规模将达到240亿美元，年复合增长率达到9.2%。其中，服务器和存储设备将占据最大的市场份额，而软件和服务将成为增长最快的部分。

未来几年，HPC行业将继续向AI和大数据方向发展，以支持更多的应用场景。同时，随着技术的不断进步，绿色化和智能化将成为行业发展的重点。建议企业加大研发投入，提升产品和服务质量，以适应市场的变化。此外，还可以考虑与AI和大数据厂商合作，共同推动行业的发展。



目 录

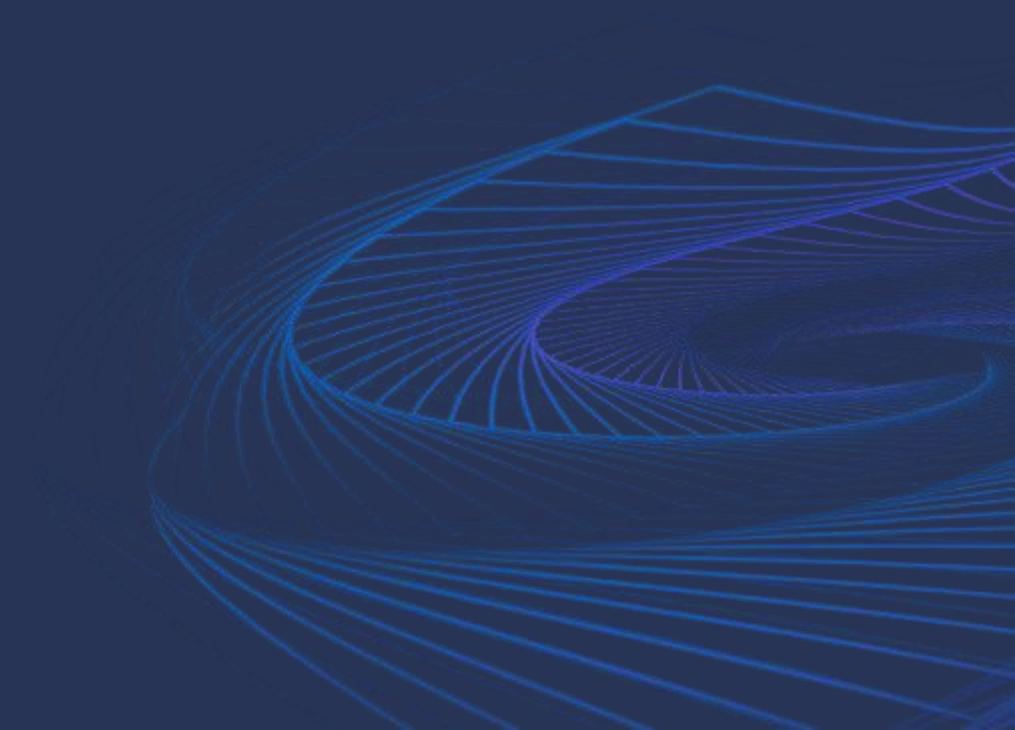
CONTENTS

01 HPC市场情况

02 融科SuperHPC介绍

03 SuperHPC常用软件

04 应用场景



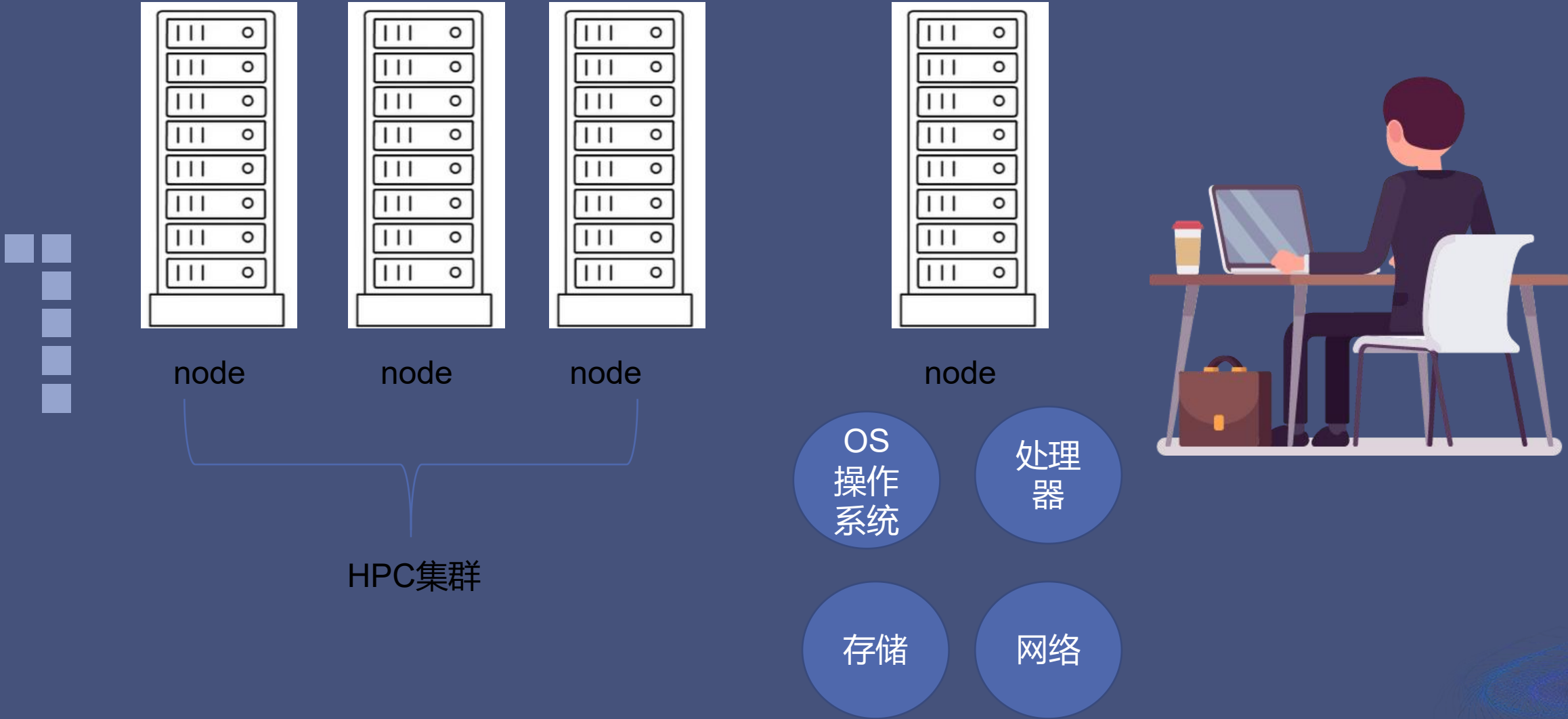
HPC高性能计算定义



高性能计算简称HPC，是指利用聚集起来的计算能力来处理标准工作站无法完成的数据密集型计算任务，例如勘探业务中所需要的仿真、建模和渲染等。我们在处理各种计算问题时常常遇到这样的情况：由于需要大量的运算，一台通用的计算机无法在合理的时间内完成工作，或者由于所需的数据量过大而可用的资源有限，导致根本无法执行计算。HPC方法通过使用专门或高端的硬件，或是将多个单元的计算能力进行整合，能够有效地克服这些限制。将数据和运算相应地分布到多个单元中。



HPC高性能计算定义



SuperHPC整体配置

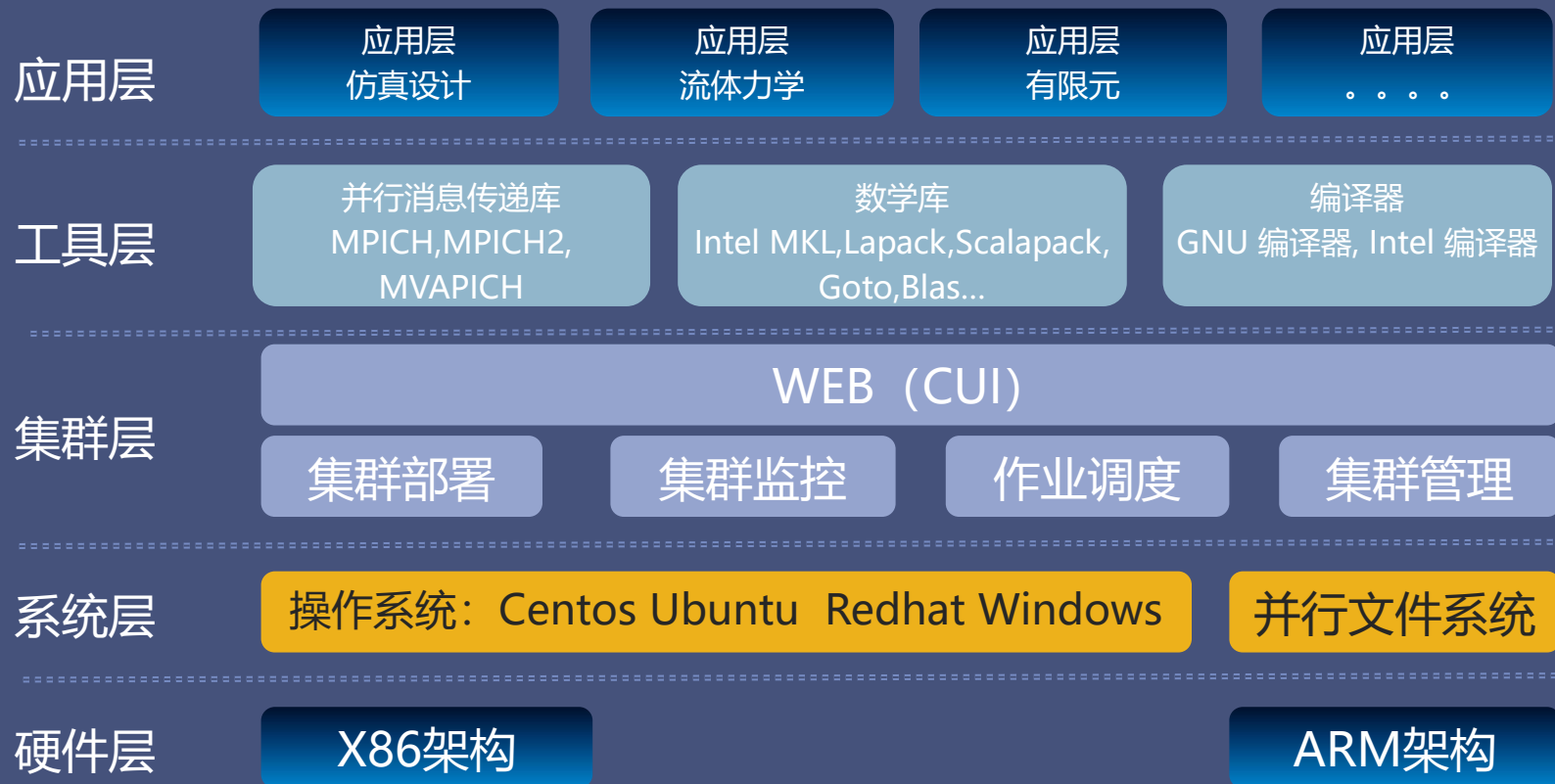


集群监控	CPU平均使用率、内存剩余率、磁盘剩余率、集群整体运行负载等
作业调度	提供作业提交，修改，删除，支持队列管理等
资源管理	提供资源配额、访问策略和调度策略，计费
用户管理	统一用户管理，支持用户的创建、修改、删除等
并行环境	提供编译器与并行环境库



- I/O管理节点
- GPU计算节点
- CPU计算节点
- 网络节点
- 存储节点
- 机柜管理

融科SuperHPC方案框架



通过SuperHPC整合站点的所有计算资源、实现站点的资源使用策略，并通过其强大的资源管理和作业调度功能，来最大化站点HPC资源的利用效率

Professional:
作业调度资源管理模块
Access框架:
计算管理模块
图形管理模块
结果可视化模块
硬件监控模块
分析报表模块
license统计分析模块
用户管理模块

HPC高性能计算分类

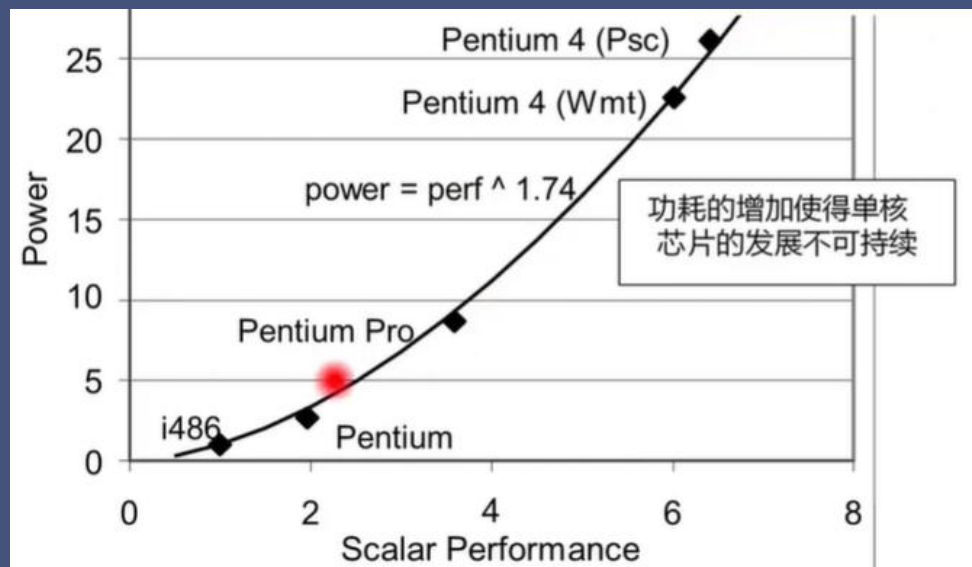
高性能计算分类及特点	
分类	基本特点
尖端HPC	主要以国家级高精尖项目为主，具备追求极致性能，协助解决核心技术难关等特征;通常由国家主导与投入，对经济性的要求非常低，从性能上看，通常可以满足万核以上的应用场景为主。
通用HPC	通用HPC在满足自身算力服务的条件下，具备一定的经济性需求，兼顾服务与性价比的考量;通用HPC可以通过自主建设中小微型超算服务系统或寻求超算云服务平台满足超算需求。
业务HPC	业务HPC更多地服务与所处行业的实际业务，通常是满足业务的可靠性优化和成本优化，而非相关领域的创新验证性工作。
人工智能HPC	在人工智能应用快速发展的当下，人工智能HPC成为重要的高性能计算场景。人工智能HPC指在大数据学习、人工智能算法模拟与优化、多类型数据分析与编解码场景下运用的超算服务。



高性能计算政策		
时间	政策	政策内容
2020年	《关于加快新型信息基础设施建设扩大信息消费的若干政策措施》	加快新型信息基础设施建设，加快新一代数据中心布局方面，对新建、扩建符合国标A级或T4建设标准的超算中心、大数据中心、云计算中心项目，保障用地，能耗指标配额，并推动转供电改直供电
2021年	《国民经济和社会发展“一四五”和2035年远景目标纲要》	加快构建全国一体化大数据中心体系，强化算力统筹智能调度，建设若干国家枢纽节点和大数据中心集群，建设E级和10E级超级计算中心。聚焦高端芯片、人工智能关键算法等关键领域，加强通用处理器、云计算系统和软件核心技术一体化研发
2021年	《新型数据中心发展三年行动计划（2021-2023年）》	到2023年底，全国数据中心机架规模年均增速保持在20%左右，平均利用率力争提升到60%以上，总算力超过200EFLOPS，高性能算力占比达到10%。加快高性能、智能计算中心部署，推动CPU、GPU等异构算力提升
2021年	《“十四五”大数据产业规划》	加快构建全国一体化大数据中心体系，推进国家工业互联网大数据中心建设，强化算力统筹智能调度，建设若干国家枢纽节点和大数据中心集群，建设高性能计算机集群，合理部署超级计算中心
2023年	《科技部启动国家超算互联网部署工作》	国家超算互联网将突破现有的单体超算中心运营模式，将全国众多的超算中心连接起来,构建一体化算力服务平台



HPC高性能工作原理



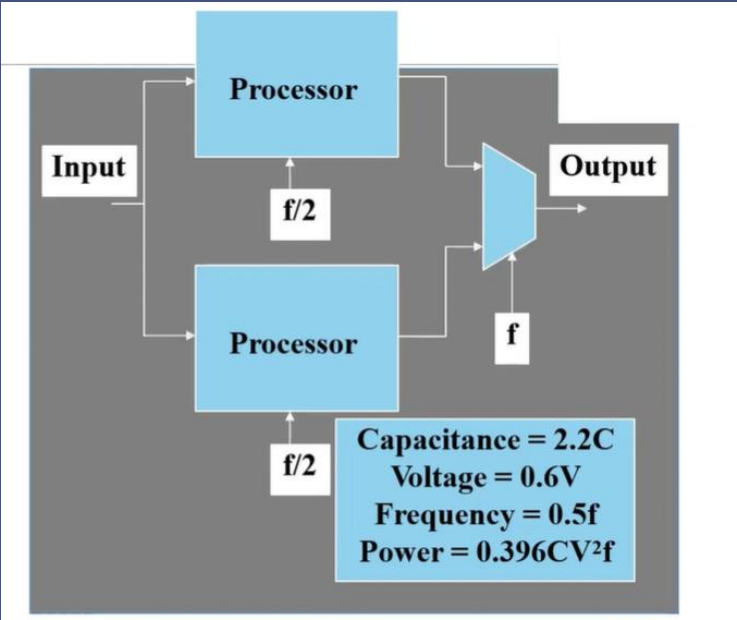
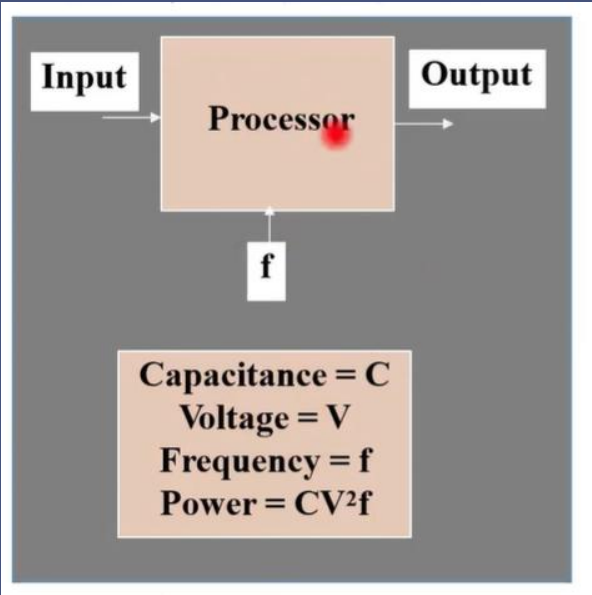
根据摩尔定律，CPU的性能每隔18到24个月就能增长一倍，但是从现在的发挥趋势来看，单核CPU的性能已经达到了一个性能瓶颈，很难再网上提升，也就是说，摩尔定律已经失效

CPU单核的功耗也属于一个问题，功耗消耗相对较大，功耗的增加使得单核芯片的发展不可持续，所以通过集成多核的方式可以在降低CPU功耗的同时，还可以继续提高CPU的性能，于是多线程并行由此开启

单核频率为f的CPU，理论功耗为 CV^2f



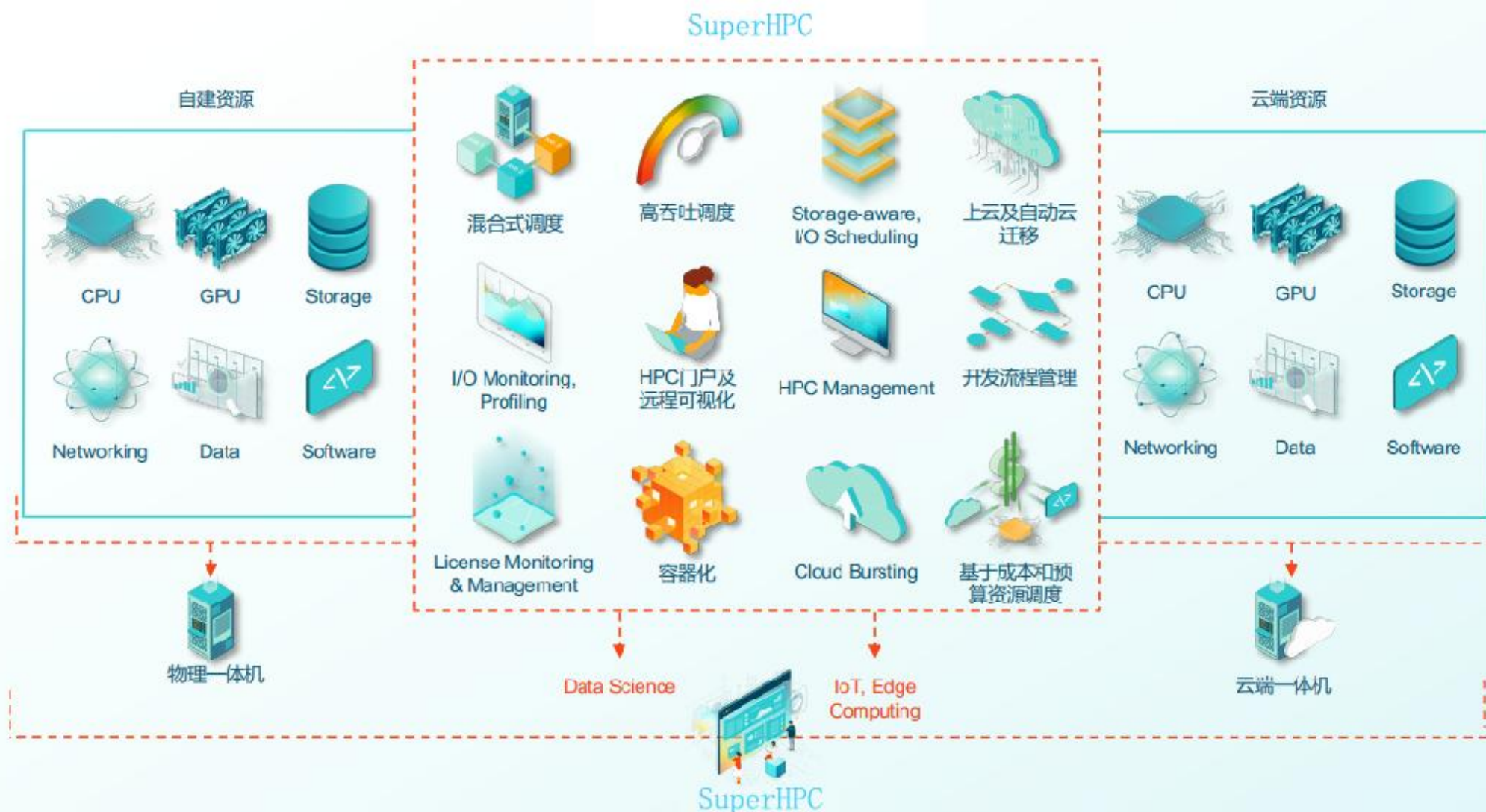
双核频率为f的CPU，理论功耗为 $0.396CV^2f$



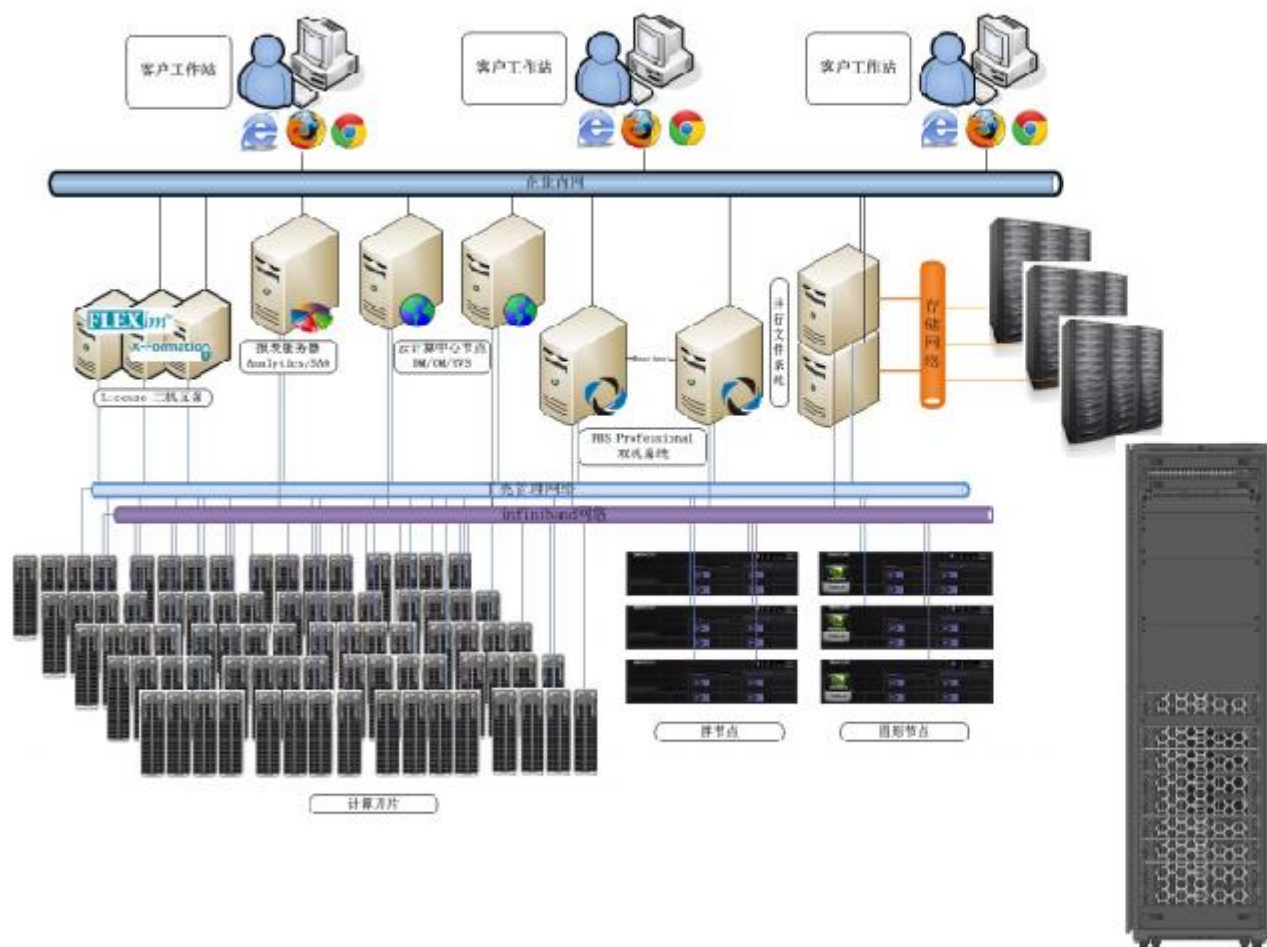
融科SuperHPC功能简介文字版

- 支持多种异构硬件平台，支持Linux、Unix和Windows多平台操作，支持Intel, Arm, AMD, NVIDIA等多种芯片架构，系统和应用程序，提供单一系统镜像，可以实现计算节点的集中管理和统一调度，提供云管理器，提供云端资源快速扩展，包括华为云，阿里云，AWS，Azure，OpenStack等多种云端架构及资源
- 支持快速集群部署，灵活的节点添加、切换、移除；支持对集群全部或局部的并行命令下发
- 用户可以基于web Service将HPC嵌入在各个仿真流程内，可以采用标准的HTTP报文实现作业提交和监控流程
- 支持CPU计算资源、GPU计算资源和应用程序License资源、图形节点资源的统一管理和调度，能够进行实时监控，并具有丰富的报表功能
- 提供对cgroup技术的原生支持，可以对每个计算任务进行cgroup资源进行分配，确保用户计算资源无法超用
- 用户提交作业时即可看到所有可用资源总数，占用数情况，帮助用户快速提交计算任务
- 保证当资源不足时，紧急的项目或任务可以获得更高的优先级，从而更快速地启动，避免影响关键任务的进度
- 提供基于web界面的公有云和私有云接入接口，直接和各个主流云厂商（华为云，阿里云，Azure，AWS等）及OpenStack进行无缝对接，未来可以将公有云或私有云资源池对现有HPC资源进行动态补充，实现按需开机和空闲资源释放
- 提供Windows客户端，一键完成任务提交，文件上传，结果完成自动下载到提交工作站的功能，并且可以通过客户端完成全部的前后处理，计算提交，结果查看等功能
- 提供手机app（IOS&Android），实现基于移动设备的作业监控和相关操作
- 提供远程前后处理可视化客户端模块，用户可以根据自身带宽调整图像质量（可以选择高中低图像质量，以在不同带宽下获得最好的操作体验），并且可以实现windows无缝自适应分辨率，确保更好的图形交互体验
- 提供强有力的负载均衡能力，保证计算服务器的任务分配尽可能均匀，避免出现机器忙闲不均的现象。并且可以根据服务器的负载指针（如：CPU利用率、可用内存数、IO等），采取保护性措施，避免因为任务过多导致系统忙而无效甚至死机。无需用户干预，自动分配计算资源
- 原生支持MPI集成，包括Intel MPI, LAM MPI, MPICH, MVAPICH, Platform MPI, HPE MPI, Open MPI避免MPI任务计算完毕后资源释放不充分，并且可以实现对于资源使用情况的精确记录
- 支持无并行文件系统HPC，并提供更高计算性能
- 支持调度Docker任务，实现对AI任务的管理
- 要求提供WEB方式的图形管理界面及作业提交界面
- 用户认证管理能够与AD域集成
- 要求提供WEB方式的图形管理界面及作业提交界面
- 计算结果文件可以自动通过HyperTrans进行压缩，压缩比超过50%，即将结果文件占用磁盘空间压缩到原有50%以内，且不影响用户后处理操作
- 提供远程前后处理可视化客户端模块，用户可以基于浏览器流畅使用HyperMesh, Star-CCM+, HyperView, Abaqus/cae等主流前后处理软件
- 提供包括HyperWorks, Nastran, Ls-Dyna, Star-CCM+, Abaqus等CAE并行计算软件接口
- 提供基于网页的配置和监控工具，管理员无需输入命令实现对HPC的配置和管理和监控，及相关计算任务的释放和追踪
- 提供优化软件HPC集成功能，包括Isight, HyperStudy, Optimus和相关CAE软件的耦合计算和互相调用，可以实现Windows桌面优化软件直接提交作业到HPC端，并完成相关文件处理和结果下载
- 提供多种调度策略，先进先出，公平共享，优先级，份额管理，基于方程的优先级管理，基于份额的优先级管理，实现完全定制化调度策略，提供多队列的多策略模式，匹配不同队列提供不同调度优先级算法
- 提供基于网页的批量计算提交功能，用户可以一次提交多个输入文件，进行多个任务分发，提升行人保护和相关优化计算的提交效率
- 协同作业，可实现CAE仿真与前后处理的协同流程
- 支持一个统计分析Portal提供多个集群资源的统计分析和报表
- 提供基于用户，部门，硬件，软件，项目的使用成本分析和计费功能。
- ★提供HPC资源规划功能，提供按天，按周，按月的用户实际需要资源信息统计，实现未来扩容时基于历史使用资源最高峰进行规划
- 支持历史作业关键资源分析，如利用率，机时，计算和排队效率，内存使用等，以便未来对计算资源和软硬件进行优化
- 支持基于每小时的利用率，资源使用统计，对资源使用进行定量分析

融科SuperHPC功能



SuperHPC

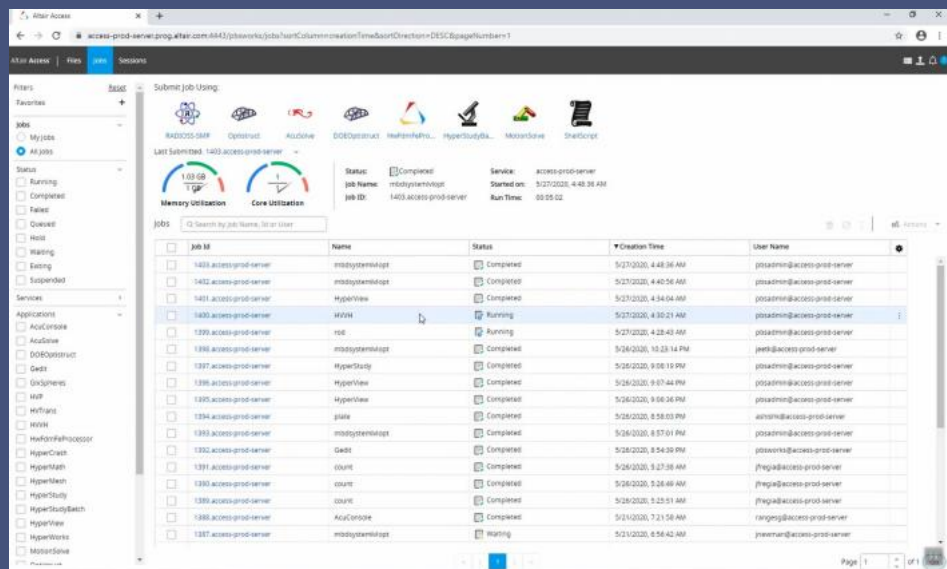


高性能计算云平台 (HPC)

硬件环境	节点类型
	显式计算/流体计算节点
	隐式计算节点
	图形节点
	管理节点
	其他：存储TB与网络等
资源调度环境	作业调度和资源管理软件



SuperHPC页面



不安全 <https://192.168.92.223:4443/pbsworks/oidc/auth/ssh/login?back=&state=vftp7ubruckndxtdcu2l2qrh>

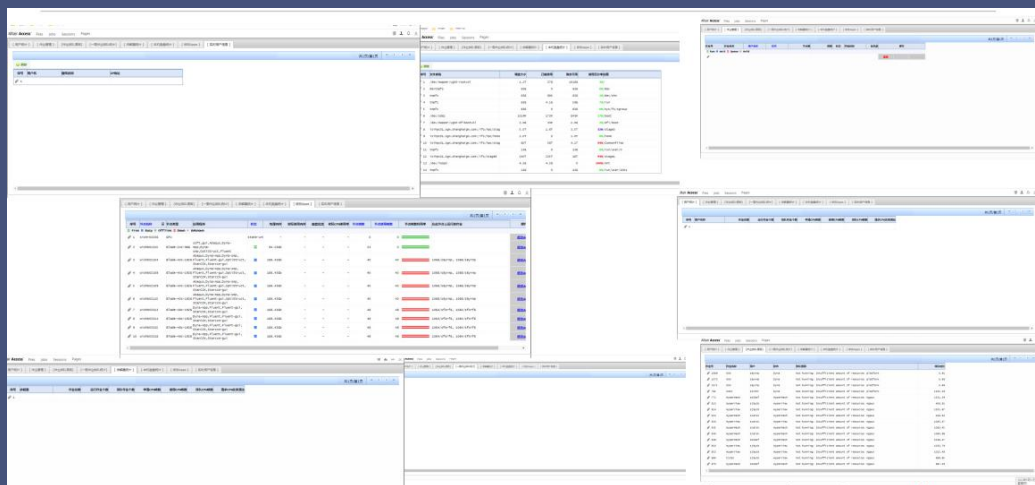
知道



用户名
pbsadmin

密码
密码

Sign In



Altair Access Files Jobs Sessions Pages

集群作业当前排队情况

- * 数据格式为: 作业ID_用户名_需求CPU数。
- * 队列不完全代表执行顺序, 系统会根据实时软硬件可用资源和用户提交作业数量调整计算。
- * 每个队列的硬件资源总量不相等。表头中有总资源信息和当前排队比(排队的CPU总数/该队列可用CPU总数)信息。
- * 提交作业时请同时参考排队比和资源总量。

Blade-24c-96G (总共1台) (排队比: 300.00%)	Blade-40c-192G (总共4台) (排队比: 400.00%)	- (总共-台) (排队比:-)
765-s2n3hr-48	1059-s8ymp-160	
	1070-s8ymp-160	
	1071-s8ymp-160	

SuperHPC页面-作业详情页面

文件

作业

Desktops

▼ Saved Views

All my jobs

+ Save Current View

▼ Job Ownership

☐ 我的作业

☒ 全部作业

▼ 作业状态

☒ 所有

☐ 计算中

☐ 已结束

☐ 已失败

☐ 排队

☐ 保留

☐ 异常等待

☐ 退出中

☐ 挂起



Feko



OptiStruct



Shell Script

Q Refine results by Job name, Id, Owner

☐	作业Id	名字	作业状态
☐	8.m1	test11	✓ Completed
☐	9.m1	Horn	✓ Completed
☐	2002.m1	Horn	✓ Completed
☐	2003.m1	test1	✓ Completed
☐	2004.m1	feko	✓ Completed
☐	2005.m1	Opt	✓ Completed
☐	2006.m1	111	✓ Completed
☐	2007.m1	111111	🚧 Queued

SuperHPC页面-提交作业过程

文件 作业 Desktops

← Back to All Jobs



Horn
2002.m1
Completed

CPU cores
32

Efficiency 50%

内存
0MB

Used: 4,742MB

Summary

输入文件

输出文件

计算目录

详细信息

Diagnostics

Job run at Thu Aug 01 at 14:17 on (c1:ncpus=32) and finished

Monitor
Horn.o2002

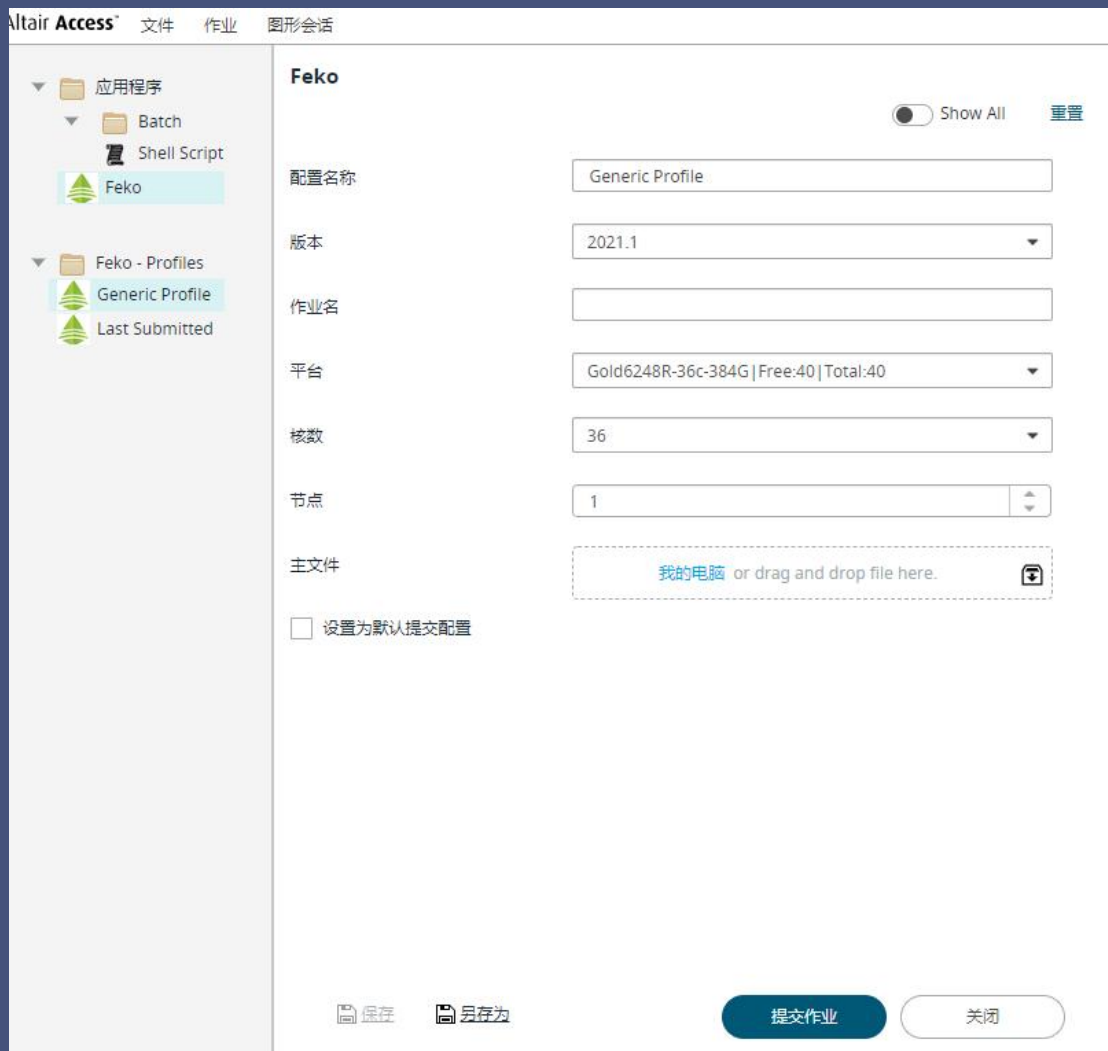
Text

```
1 network=ofi
2 Total Cores:32
3 /data/apps/hw2023.1/altair/feko/bin/runfeko Horn -np 32 --machines-file machines
4
5 Altair Feko - RUNFEKO Version 2023.1-9308 from 2023-12-14
6 Copyright (c) 1999-2014 Altair Engineering (Pty) Ltd
7 Copyright (c) 2014-2023 Altair Engineering Inc.
8
9
10
11 Altair Feko - Solver (par) Version 2023.1-9308 from 2023-12-14
12 Copyright (c) 1999-2014 Altair Engineering (Pty) Ltd
13 Copyright (c) 2014-2023 Altair Engineering Inc.
14
15 File:      Horn
16 Memory:   Limited to job submission memory of 11.787 GByte per process
17           Installed memory 377.376 GByte, thereof free 363.195 GByte on c1
18
19 MPI-lib:  Intel(R) MPI Library 2021.10 for Linux* OS
20 ---> Process    0 of 32 (PID: 11837) using 1 thread on c1
21 ---> Process    5 of 32 (PID: 11842) using 1 thread on c1
22 ---> Process    8 of 32 (PID: 11845) using 1 thread on c1
23 ---> Process   21 of 32 (PID: 11858) using 1 thread on c1
24 ---> Process   25 of 32 (PID: 11862) using 1 thread on c1
25 ---> Process    1 of 32 (PID: 11838) using 1 thread on c1
26 ---> Process    4 of 32 (PID: 11841) using 1 thread on c1
27 ---> Process   12 of 32 (PID: 11849) using 1 thread on c1
28 ---> Process   13 of 32 (PID: 11850) using 1 thread on c1
29 ---> Process   16 of 32 (PID: 11853) using 1 thread on c1
30 ---> Process   17 of 32 (PID: 11854) using 1 thread on c1
31 ---> Process   20 of 32 (PID: 11857) using 1 thread on c1
32 ---> Process   24 of 32 (PID: 11861) using 1 thread on c1
33 ---> Process   29 of 32 (PID: 11866) using 1 thread on c1
34 ---> Process   28 of 32 (PID: 11865) using 1 thread on c1
35 ---> Process    7 of 32 (PID: 11844) using 1 thread on c1
36 ---> Process   23 of 32 (PID: 11860) using 1 thread on c1
37 ---> Process    3 of 32 (PID: 11840) using 1 thread on c1
38 ---> Process    6 of 32 (PID: 11843) using 1 thread on c1
39 ---> Process   10 of 32 (PID: 11847) using 1 thread on c1
40 ---> Process   11 of 32 (PID: 11848) using 1 thread on c1
```

下载 重新提交 删除

Page 1 of 1

SuperHPC页面-提交作业过程



Altair Access 文件 作业 图形会话

应用程序

- Batch
- Shell Script
- Feko

Feko - Profiles

- Generic Profile
- Last Submitted

Feko

Show All 重置

配置名称: Generic Profile

版本: 2021.1

作业名:

平台: Gold6248R-36c-384G | Free:40 | Total:40

核数: 36

节点: 1

主文件: 我的电脑 or drag and drop file here.

☐ 设置为默认提交配置

保存 另存为 提交作业 关闭

1、作业名(可不填): 输入作业名, 主要用来标识作业, 不要使用@#¥空格等特殊字符支持英文符号下划线”_”, 以及短横线”-”, 不要使用中文, 建议使用字母或数字开头

2、核数: 本次计算需要使用的cpu核数量, 下拉框可选择

3、平台: 为该软件配置的服务器信息, 页面显示是

“Gold6248R-36c-384G|Free:40|Total:40”, 其中Gold6248R-36c-384G代表服务器的CPU型号是Gold6248R, 36c代表该服务器可用36个cpu物理核, 384G代表服务器内存, Free显示40, 代表集群上空闲40核, Total显示40, 代表该类型服务器总共核数是40

4、节点: 此处的含义是用多少台服务器并行计算, 默认是1, 假设节点数选2, 计算核数选40, 等同于此次计算任务调用的cpu核数为 $2 \times 40 = 80$ 核

只有Gold6248R-40c-384G这个平台的服务器才能多机并行计算, 节点数大于1时, 需注意核数选40, 这样才有意义。

建议在提交任务时看下“平台”中的资源使用情况, 即Free的数量, 避免调用核数超过Free显示的数值, 造成作业排队。

E) 主文件: 本次计算需要使用的求解文件, 文件可以从本地(My Computer)或服务器上(server)上获取

目 录

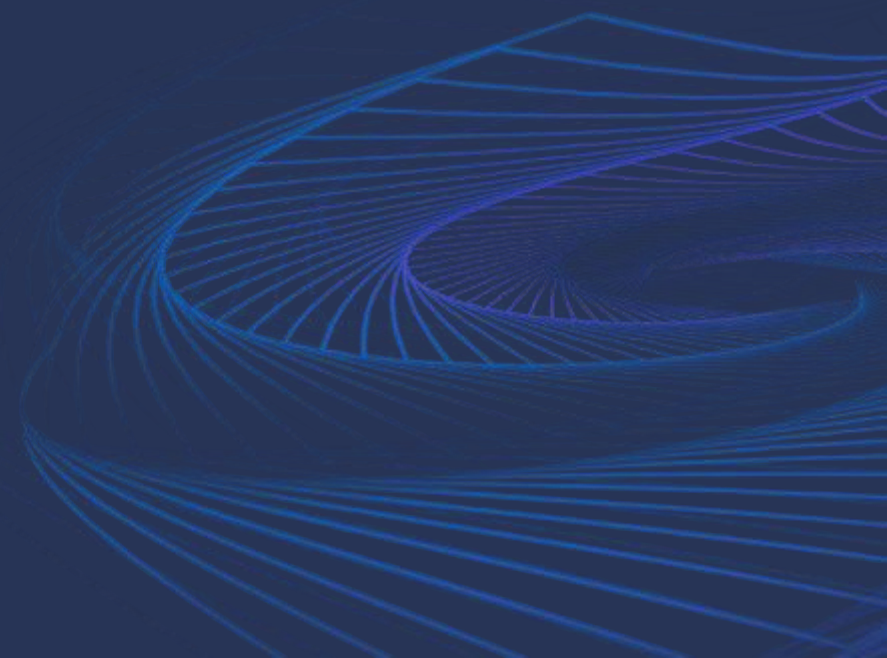
CONTENTS

01 HPC市场情况

02 融科SuperHPC介绍

03 SuperHPC常用软件

04 应用场景



高性能计算常用软件

常用软件					
序号	名称	简介	序号	名称	简介
CAE	HFSS	高频结构仿真	生命	BLAST	序列相似性检索程序
	COMSOL	物理场建模与仿真		FASTA	序列搜寻
	Feko* (EMSS)	三维全波电磁仿真软件		ClustalW	对序列对比
	ABAQUS	工程模拟有限元软件		Hmmer	搜索序列蛋白质序列与序列对比
	ANSYS	大型通用有限元分析软件		DOCK	分子半柔性对接
	LS-DYNA	瞬态响应动力学分析软件		RDOCK	蛋白质对接
	FLUENT	通用计算流体力学分析软件		MORDOR	柔性对接
	Maxwell	有限元分析软件	气象	MM5	中尺度模式
	Hspice	集成电路性能分析模拟程序		GRAPES	气象预报模式系统
基础学科	VASP	原子尺度材料模拟的计算机程序包		CESM	社区地球系统模型
	MOLPRO	量子化学计算软件		APRS	高级区域预报系统
	Materials Studio	分子模拟软件		WRF	中尺度预报模式
	GAMESS	量子化学计算软件		CAM	大气环流模式
	NWCHEM	量子化学计算软件		CGCM	全球海气耦合模式

Radioss有限元分析软件

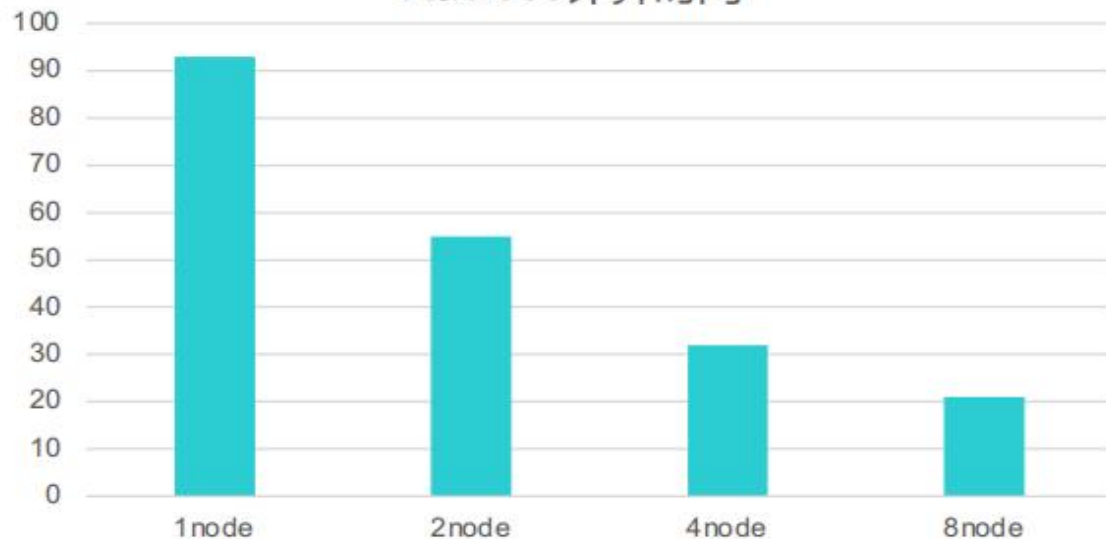
Radioss-调优案例

	Pure MPI	硬件价格 (万)
Gold 6150 2node 72cores(2.7G)	74mins	24
Gold 6154 2node 72cores(3.0G)	68mins	24
Gold 6136 2node 48cores(3.0G)	82mins	24
Gold 6136 1node 24cores(3.0G)	158mins	12
Gold 9242 1node 96 cores (3.8G)	64mins	20
Gold 9242 2node 192 cores (3.8G)	88mins	40
Gold 6242R 1node 40cores(3.1G)	93mins	12
Gold 6242R 2node 80cores(3.1G)	55mins	24
Gold 6242R 4node 160cores(3.1G)	32mins	48
Gold 6242R 8node 320cores(3.1G)	21mins	96
AMD Ryzen 3995WX (2.7G) 1 node 1cpu 64cores	93mins	10
AMD EPYC 7763 0.5 nodes 64 cores (2.45G)	56mins	8
AMD EPYC 7763 1 nodes 128 cores (2.45G)	47mins	16
AMD EPYC 9654 0.5 nodes 96 cores (2.4G)	31mins	15
AMD EPYC 9654 1 nodes 192 cores (2.4G)	22mins	30

84万网格整车碰撞模型



Radioss计算时间



2023的AMD硬件30万达到2021年的96万intel的性能

Abaqus

Abaqus计算调优案例

cpu :2*Intel Xeon Gold 6151 3.0GHz 36cores , 内存 : 192G , 硬盘 : nvme 1.5T

本地盘 : IOPS 55.4k 写性能 866MB/s

NFS : IOPS 52.8k 写性能 826MB/s

JOB TIME SUMMARY

USER TIME (SEC) = 2.25461E+05

SYSTEM TIME (SEC) = 1.20123E+05

TOTAL CPU TIME (SEC) = 3.45584E+05

WALLCLOCK TIME (SEC) = 39002

10.83小时

JOB TIME SUMMARY

USER TIME (SEC) = 2.25461E+05

SYSTEM TIME (SEC) = 1.20123E+05

TOTAL CPU TIME (SEC) = 3.45584E+05

WALLCLOCK TIME (SEC) = 39002

计算时间差距
22.55%

JOB TIME SUMMARY

USER TIME (SEC) = 2.21625E+05

SYSTEM TIME (SEC) = 1.20328E+05

TOTAL CPU TIME (SEC) = 3.41953E+05

WALLCLOCK TIME (SEC) = 47797

13.28小时

JOB TIME SUMMARY

USER TIME (SEC) = 2.21625E+05

SYSTEM TIME (SEC) = 1.20328E+05

TOTAL CPU TIME (SEC) = 3.41953E+05

WALLCLOCK TIME (SEC) = 47797

```
1.3T
[root@bms-a063-0002 test_202206291546]# pwd
/scratch1/test_202206291546
[root@bms-a063-0002 test_202206291546]# ls
abacus_v6.env      M331-vertical-2r.fil  M331-vertical-2r.msg  M331-vertical-2r.prt  M331-vertical-2r.sta
M331-vertical-2r.com M331-vertical-2r.inp  M331-vertical-2r.msg.1 M331-vertical-2r.res  M331-vertical-2r.stt
M331-vertical-2r.dat M331-vertical-2r.mdl M331-vertical-2r.odb  M331-vertical-2r.sim
[root@bms-a063-0002 test_202206291546]# du -sh
1.3T
[root@bms-a063-0002 test_202206291546]#
```

业务	计算需求	软件	日常需求核数	现有核数	本地典型题目计算时间	HPC最佳配置	HPC典型题目计算时间
可靠耐久	零部件的强度、耐久、多学科优化、结构优化	OptiStruct/Abaqus	-	16核/人	2小时保险杠Abaqus计算/20-40分钟保险杠显式计算	8核	1.5小时
流体分析	电池壳体温度场计算	STAR-CCM+	-	16核/人	10小时	20核	2小时
	其他流体仿真计算	STAR-CCM+	-	16核/人			
碰撞安全	保险杠的三点弯等/整车底盘	Ls-dyna/Radioss	-	16核/人	14小时整车计算/20分钟保险杠弯曲	128核整车计算	整车1小时
	电池壳体碰撞	Radioss	-	16核/人	6小时	64核	1小时
NVH	电池壳体的随机振动，模态	OptiStruct	-	16核/人	随机振动42分钟	8核随机振动	24分钟
总计			-	按10人，共160核	约32.5小时	228	约6小时

以上数据参考前期大量测试结果

上表可见企业HPC在计算速度上的优势：

1. 求解效率提升明显
2. 不同工程师各取所需，计算能力不会闲置

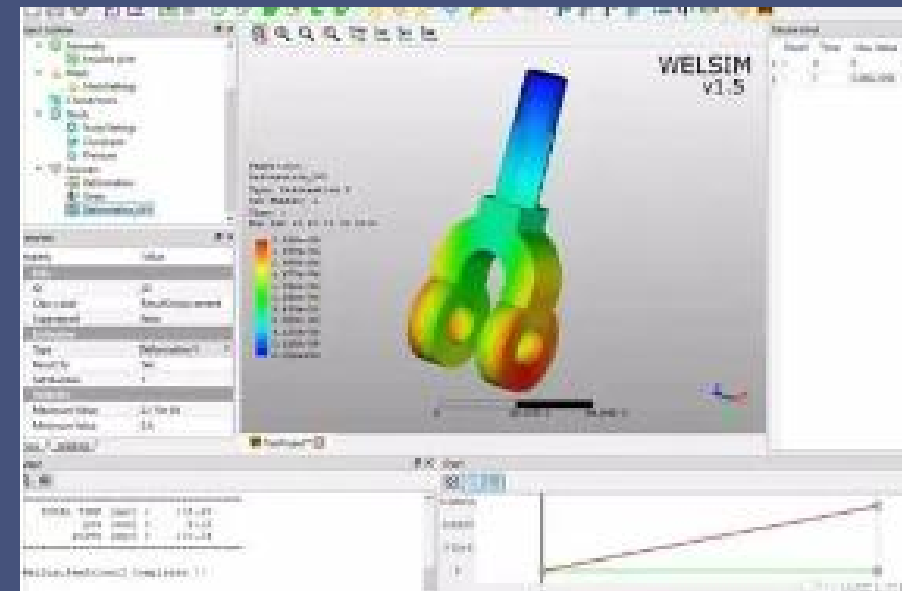
SuperHPC行业应用-CAE

CAE 主要是指在计算机上进行的基于现代计算力学理论的数值仿真技术，广泛应用于航空航天、汽车、船舶、机械、建筑、电子等行业领域，CAE 领域软件大部分采用 MPI 并行编程环境进行编译，采用并行计算的速度较原来有较大的提升。

应用：采用 SuperHPC 高性能计算管理平台可为 CAE 提供一套完整的高性能计算环境软件包，将 CAE 应用软件与调度系统相结合，提供应用模板，方便作业提交和查看结果

常见软件

HFSS	高频结构仿真
COMSOL	物理场建模与仿真
Feko* (EMSS)	三维全波电磁仿真软件
ABAQUS	工程模拟有限元软件
ANSYS	大型通用有限元分析软件
LS-DYNA	瞬态响应动力学分析软件
FLUENT	通用计算流体力学分析软件
Maxwell	有限元分析软件。
Hspice	集成电路性能分析模拟程序



SuperHPC行业应用-基础科学

基础科学研究是指认识自然现象、揭示自然规律，获取新知识、新原理、新方法的研究活动，主要应用领域包括高能物理、计算化学、纳米材料等。理论、实验、计算是当今科研创新的三大重要手段，高性能计算主要通过模拟仿真的技术把目前通过实验无法实现的想法得以实现，在降低研发成本的基础上加快人们对自然世界的认识

应用：SuperHPC 高性能计算管理平台针对高校以及科研院所的使用特点提供一套完整的软件解决方案，支持多种复杂并行环境与应用程序，多种作业调度策略，为用户提供软件支撑平台。高校与科研院所有用户多、管理复杂、数据统计、以及用户水平参差不齐等问题

常见软件

VASP	原子尺度材料模拟的计算机程序包
QCHEM	量子化学计算软件
NWCHEM	量子化学计算软件
GAUSSIAN	量子化学计算软件
MOLPRO	量子化学计算软件
Materials Studio	分子模拟软件
GAMESS	量子化学计算软件



SuperHPC行业应用-气象

气象行业对高性能计算需求十分强烈，其需求主体是数值天气预报模式的科学研究和业务运行。天气预报的准确率、时效性、精细化程度和服务水平提高都与高性能计算集群密不可分。数值天气预报涉及的应用主要包括气象模式、海洋模式、气候模式、环境模式及卫星、遥感资料处理程序等。各种模式在流程上有一定的相似性，都包括数据前处理，主模式计算和结果后处理三部分。数据前处理包括地形和地表资料、气象预报背景场资料、各种气象观测资料(观测站、雷达、卫星等)的处理和同化，为模式计算提供边界场和初值，主模式计算是主要计算量所在，通过并行计算进行数值方程的迭代求解。

应用：

气象、海洋模式对计算以及 I/O 要求较高，联科在气象行业有丰富的行业经验，CHESS 高性能计算管理平台解决用户常规管理、集群监控，为用户配备完备的并行计算开发和运行环境，针对不同模式可采用不同的应用模板进行提交作业；针对气象过程模拟涉及海量小文件的处理，为气象行业提供内存文件系统高带宽、高 IOPS 的解决方案

常见软件

MM5	中尺度模式
GRAPES	气象预报模式系统
CESM	社区地球系统模型
APRS	高级区域预报系统
WRF	中尺度预报模式
CAM	大气环流模式
Regcm3	区域气候模式
CCM3	大气环流模式
IFS	集成预报系统模式
CGCM	全球海气耦合模式



目 录

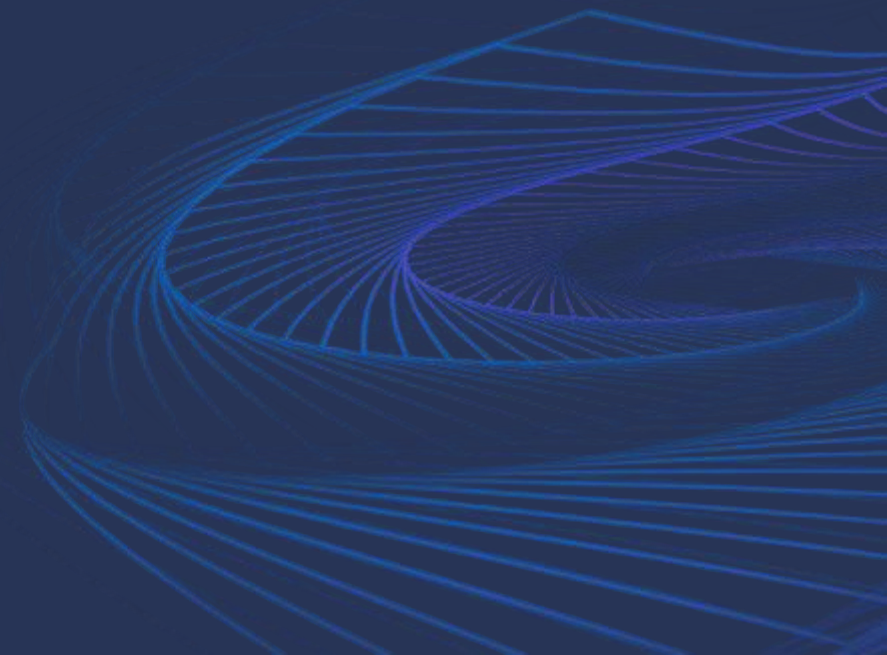
CONTENTS

01 HPC市场情况

02 融科SuperHPC介绍

03 SuperHPC常用软件

04 应用场景



HPC细分行业与场景

壹



国家实验室，大科学装置

叁



高校超算平台

伍



中科院各研究所

贰



气象 环保 海洋

肆



渲染AR/VR 元宇宙

陆



新基建（人工智能
发展试验区）

聚焦985/211，双一流高校HPC机会

武汉大学
华中科技大学
武汉理工大学
华中师范大学
中国地质大学



哈尔滨工业大学
哈尔滨工程大学
东北林业大学

吉林大学
东北师范大学

东北大学
辽宁大学
大连海事大学
大连理工大学

清华大学
北京大学
中国人民大学
北京交通大学
北京师范大学

南开大学
天津大学
天津科技大学

山东大学
中国海洋大学
中国石油大学

南京大学
东南大学
浙江大学
厦门大学
上海交通大学
上海同济大学
上海复旦大学
华东师范大学

西安交通大学
西北工业大学
西北农林科技大学
西安电子科技大学
长安大学
四川大学
电子科技大学
四川农业大学
重庆大学
西南大学

中山大学
华南理工大学
天津科技大学

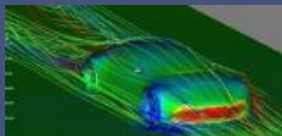
HPC市场-“云”业



基因测序



天气预报



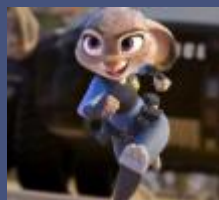
工业仿真



航空航天



风电发力



3D渲染



重点客户

风电发力：

金风科技，上海电气，远景能源，运达风电，东润环能

基因测序：

未来组，诺禾，贝瑞，华大基因，国家基因库，武汉样本库，协和医院

车企仿真：

一汽大众，一汽解放，一汽集团，吉利汽车，宝沃汽车，长城汽车，长安汽车，奇瑞汽车，上汽通用五菱，广汽研究院

航空航天：

九院，空气动力研究所

EDA仿真：

中芯国际，海思，江北新区产业技术研究院，南京产业园

案例分享 | 快速空气动力学仿真

融科联创联合Altair助力车企发展

项目背景

随着现代汽车对能耗需求的进一步提高，整车风阻系数的控制尤为关键，以本课题的主要研究对象电动车为例：风阻系数每降低10counts，在NEDC综合工况下，每百公里可节省电量约0.15KWh，其节能贡献量与减重31kg相当，在保证相同的续航里程情况下（按续航里程400km计算），可减少1个电芯（0.5KWh）。另一方面，在满足能耗需要的基础上，超低风阻系数车型渐渐成为提升消费者对品牌技术认可度的方法之一，各大主机厂都先后打造出了属于自己品牌的超低风阻明星产品。

研究总院CFD仿真分析主要是通过在高算平台上调用STAR-CCM+软件进行计算，STAR-CCM+软件是通过求解NS方程进行流体力学分析，其特点是一体化集成环境、高重复性和实用性强，但风阻仿真分析中底盘、尾部、车轮附近的局部计算精度不高，且风噪仿真分析中计算时间长，效率低，影响项目进度。因此，提升风阻仿真精细化程度和提升风噪仿真技术效率是目前CFD仿真急需解决的两大问题。目前通过总院工程支持与供应商Altair公司沟通的整体采购方案中，包含Altair公司的UFX流体仿真软件，该软件通过求解LBM方程的方案完美填补了现有STAR-CCM+软件的欠缺，但该软件需要GPU服务器作为硬件载体进行计算。本次请购项目为GPU服务器，为搭载已有UFX流体仿真软件提供硬件支持。

产品亮点

- 基于LES湍流模型的格子玻尔兹曼法(LBM)
- 集成强大的格子自动划分，可快速更改设计
- 高效的GPU显卡加速以支持瞬态分析
- 为外部空气动力学量身定制的解决方案

产品优势

- 使用ultraFluidX，可以在一台服务器上进行高保真度的瞬态空气动力学模拟。
- **快速而易用的计算设置**
嵌入在Altair HyperWorks™平台的Altair Virtual Wind Tunnel™中，设置一个外流场空气动力仿真变得十分便捷。针对不同的车型可快速建立相应的模板，流程清晰，不容易出错。
- **大程度降低前处理的投入**
得益于格子玻尔兹曼方法的“拖放”本质，求解器对面网格质量的要求低，允许部件之间的干涉和穿透，支持全自动的网格生成，这一切都使得部件替换比在真实的风洞中更容易实现，评估上百个设计方案以满足法规也变得可行。
- **更短的周转时间：一晚得到计算结果**
格子玻尔兹曼方法完美适用于大规模并行计算架构。比如GPU，为实现前所未有的周转时间提供了舞台。采用先进技术的GPU优化算法，在单个服务器上运行一个晚上得到计算结果变成了可能，同时能提供高精度的瞬态LES空气动力学仿真结果。
- **显著的成本节省**
相比于基于GPU的ultraFluidX，传统的仿真方法需要上千个CPU核心才能达到同等级的周转时间。基于GPU的解决方案在减少硬件和电费成本的同时提升了计算性能。

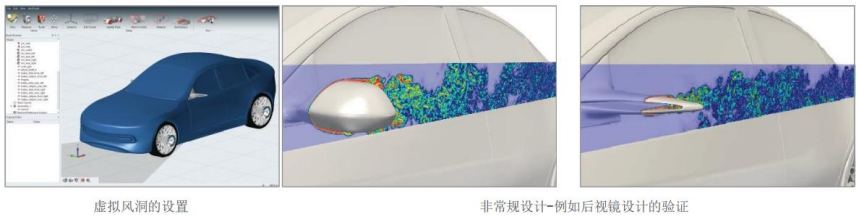
- **瞬态计算**
钝体空气动力学，特别是汽车空气动力学，在本质上是高度非定常的物理现象。采用ultraFluidX可在合理的时间内实现高分辨率的瞬态LES仿真，不再需要以牺牲捕捉瞬态物理现象为代价而选择稳态分析。

经典案例



ROYCOM (Tianjin) Information Technology Co., Ltd

融科联创（天津）信息技术有限公司



虚拟风洞的设置

非常规设计-例如后视镜设计的验证

工业应用

我们专为高分辨率的外部空气动力学研究而量身定制，应用包括：在各种运行条件下的地面乘用车辆，可以仿真车辆的气动力以及气动力矩（例如：阻力、升力、侧倾力矩、俯仰力矩、偏转力矩），并可以研究三维的瞬态流场，以了解车辆的空气动力学特性。进行CFD分析的目标包括最小化空气阻力以减少燃料消耗，以及平衡前后升力以及侧向力以提高驾驶稳定性。

功能

即可以为您带来更快的预处理、先进的GPU技术、最短的模拟时间以及直观的计算结果后处理。

GPU计算

相对于更繁琐的CPU而言，GPU计算可提供效果显著的性优势以及功耗降低。科学和工程计算领域的GPU革命正在迅速开展，ultraFluidX正是利用这项技术的先驱商业软件之一，它为产品的开发速度带来了显著的提升。

结果分析

瞬态空气动力学分析通常产生大量的结果数据，需要对其进行后处理以便于产品的研发改进。Altair强大的客户端-服务器并行架构，其支持交互式CFD后处理。即便面对大型数据集，也可以轻松实现自动生成报告以及定制后处理结果模板。

硬件要求

ultraFluidX团队推荐使用NVIDIA Tesla V100, A100 GPU处理器，它们是完善的GPU卡及科学计算的核心。而ultraFluidX已在其上进行了测试。

全新应用优化的4U双路高端GPU计算服务器，在4U空间可以容纳10片全高全长双宽的GPU计算卡，使服务器的GPU计算性能无比强大，计算性能处于行业领先地位。提供12x PCI-E 4.0 x16插槽。凭借巧具匠心的系统设计，它在有限的空间内完美展现了高效、可靠、智高扩展特性，更好的满足客户高性能计算场景的需求，适用于各种计算、存储、网络有高标准要求的关键应用。

- 专为GPU高性能计算设计
- 支持最新Intel 至强 Ice lake 系列处理器
- 最多支持 10片全高全长双宽的GPU计算卡
- 灵活的 PCI-E 扩展能力，提供12个PCI-E 4.0插槽
- 适用于人工智能、深度学习领域



案例分享 | HPC负载管理

融科联创联合Altair助力亿纬锂能云仿真

项目背景

惠州亿纬锂能股份有限公司（简称：亿纬锂能）成立于2001年，于2009年在深圳创业板首批上市，历经21年快速发展，已成为具有全球竞争力的锂电池平台公司，同时拥有消费电池和动力电池核心技术和全面解决方案，产品广泛应用于物联网、能源互联网领域。

本次项目需要实现基于浏览器的任务提交门户，可以实现基于浏览器的计算任务提交，基于结果可视化技术的web计算过程曲线动画监控，基于浏览器的远程前后处理功能，并提供手机的app客户端和windows的桌面客户端Access Desktop，用户可以通过鼠标几次点击提交任务到HPC，并可自动上传和下载计算结果文件。需要提供HPC的系统部署，统计分析，扩容及用户体验模拟，云端资源管理，系统配置监控等众多管理功能，含约5天的客户现场软件安装和软件集成调优服务。

PBS Works 是全面、安全的高性能计算（HPC）负载管理系统的市场引领者。集成的 PBS Works 套件简化了 HPC 用户的操作，提升了资源利用率和投资回报率。可以提供一流应用软件、HPC 负载管理工具和云计算功能，以满足不断增长

产品亮点

PBS Works 是全球多数大规模复杂集群和超级计算机的首选解决方案。同时也是那些需要简单易用的 HPC 解决方案的小型组织的选择。

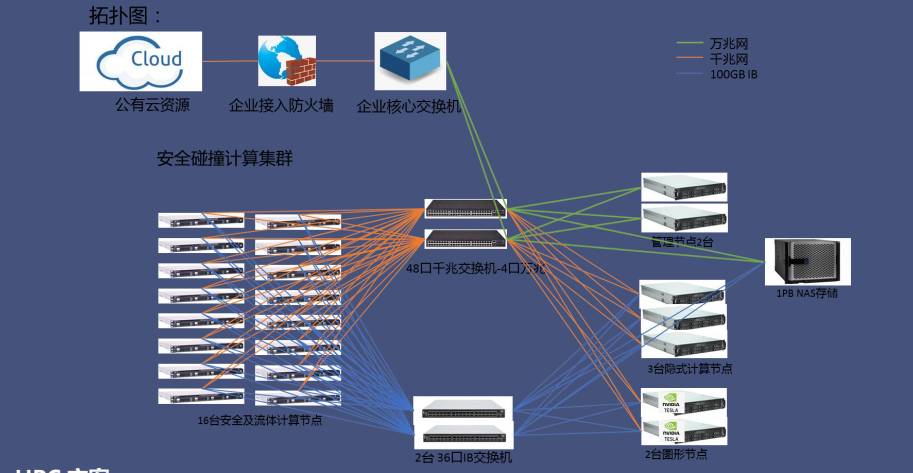
行业领先的 PBS Works 套件包含一套全面的工具，用于：

- 基于LES湍流模型的格子玻尔兹曼法(LBM)
- 集成强大的格子自动划分，可快速更改设计
- 高效的GPU显卡加速以支持瞬态分析
- 为外部空气动力学量身定制的解决方案

产品优势

PBS Works 套件专为百亿亿次级别计算而设计，作为 CAE 应用软件和云产品的坚强后盾，专注于速度、规模和弹性。经过 20 多年全球数千个客户的实践证明，PBS Works 让 HPC 在汽车、航空航天、学术界、能源、电子设计自动化、国防、气象等行业变得简单易用。HPC 资产全天候可靠运行，是企业优化求解器而投资 HPC 资源的前提。与此同时系统的易用性与可管理性，以及可扩展性对于企业的投资效率来说同样重要。PBS Works 通过一站式服务提供的最全面的集成式 HPC 负载管理产品来解决这些挑战。PBS Works 套件通过功能强大的基于策略的作业调度，用于作业提交和远程可视化的用户友好门户以及深度分析和报告简化 HPC 资源管理。通过 PBS Works，用户可以优化系统利用率，提高应用程序性能。

融科联创（天津）信息技术有限公司

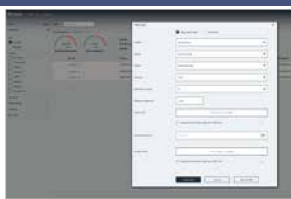


HPC 方案

我们为IT经理和设计师提供市场领先的软件。业界领先的功能包括用于能源调度的 Green Provisioning™ 市场领先的安全性、GPU 和协处理器调度、每天可扩展到数百万个作业的能力，以及高效处理海量数据集的能力。该项目的 HPC 解决方案旨在使HPC 变得简单快速且可靠，包括：作业调度管理的• PBS Professional™ • Accelerator™ • Accelerator Plus™，HPC 易用性的 • Access™ • Control™，软件资产优化的• Monitor™ • Allocator™ • SAO 关键任务流程管理的 • FlowTracer™ 以及 端到端 EDA 硬件仿真 • Hero™。



PBS Professional 是一个快速强大的作业调度管理器



Access 是为工程师和研究人员提供的任务提交和监控平台



Control 为管理员提供了管理集群和云设备的工具



云爆发功能允许在需求高峰时访问公有云



Altair SAO 分析和可视化整个公司内的软件使用情况



Altair 的物理和云端一体机解决方案简化对 HPC 的访问



融科联创（天津）信息技术有限公司



☎ 400-018-8995

🌐 www.roycom.com.cn

🏠 天津-北京-深圳-成都-西安-杭州-武汉