



武汉大学  
WUHAN UNIVERSITY

超算中心

# 校级超算平台建设实践

## - 武汉大学超算平台建设



(027)-68776058



[hpc@whu.edu.cn](mailto:hpc@whu.edu.cn)



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



# 目录

## Contents

---

1

建设情况

2

计算环境

3

运行情况

4

一点体会





武汉大学  
WUHAN UNIVERSITY

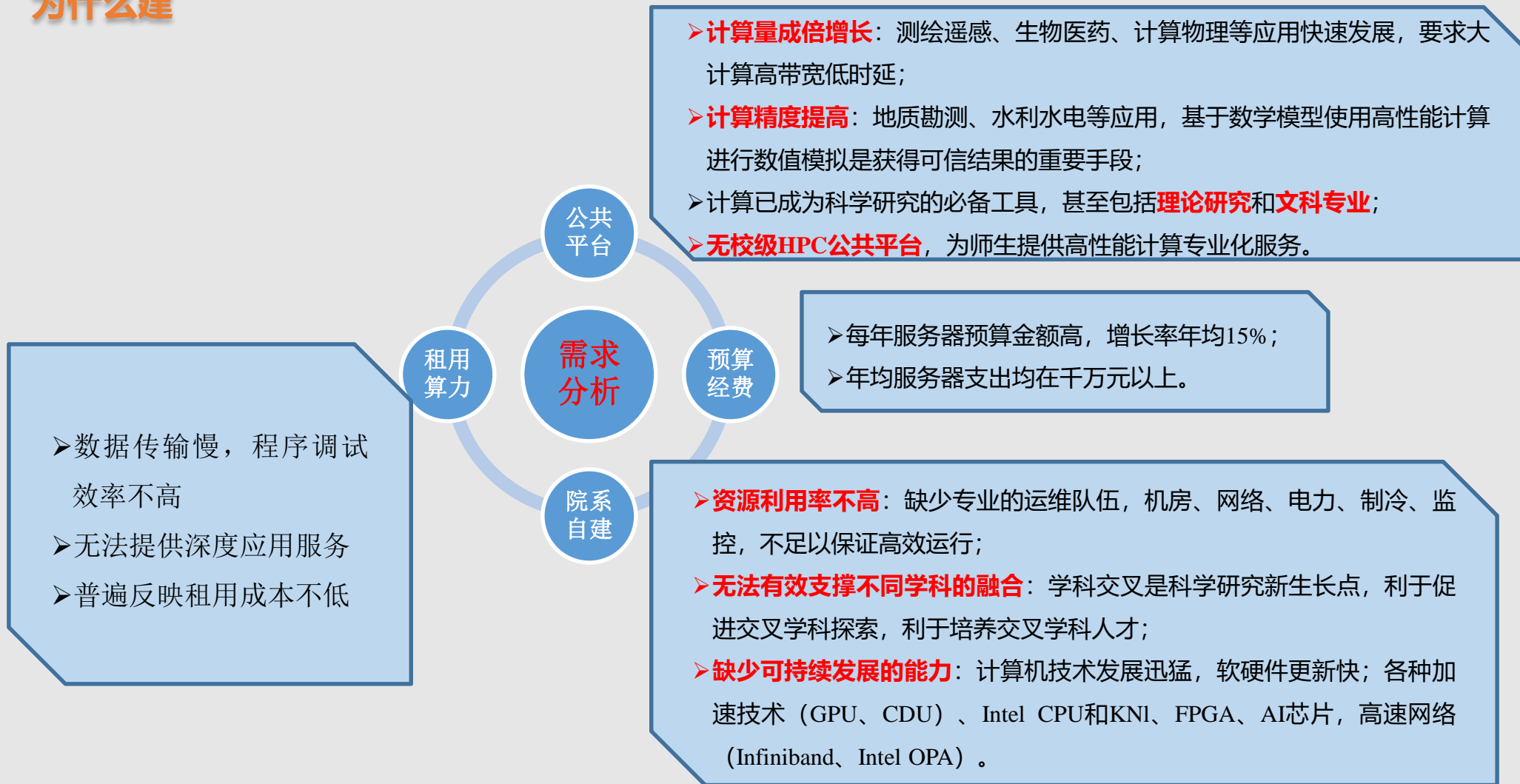
超算中心

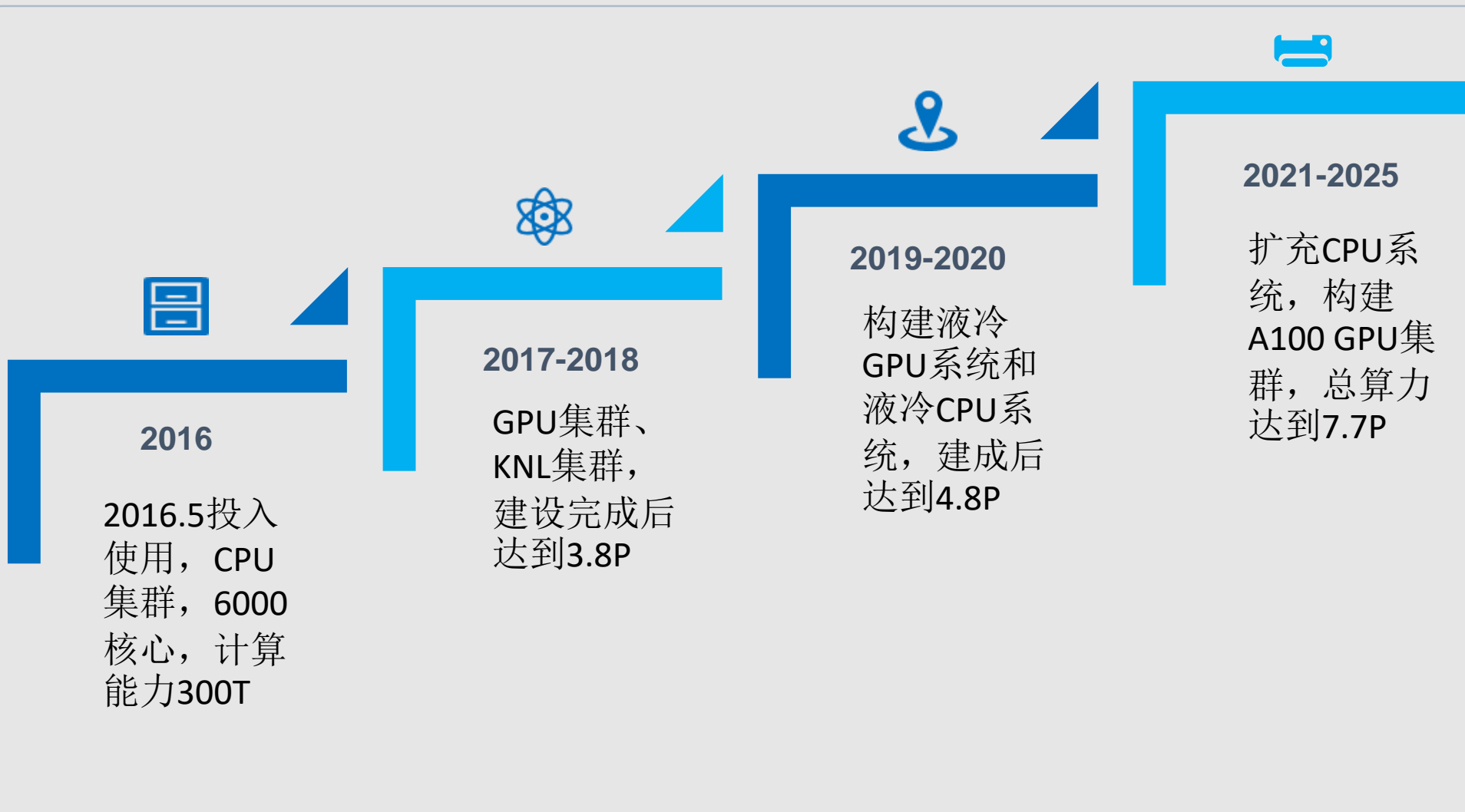
A large, light-colored world map composed of a grid of small squares, serving as a background for the upper portion of the slide.

# 建设情况



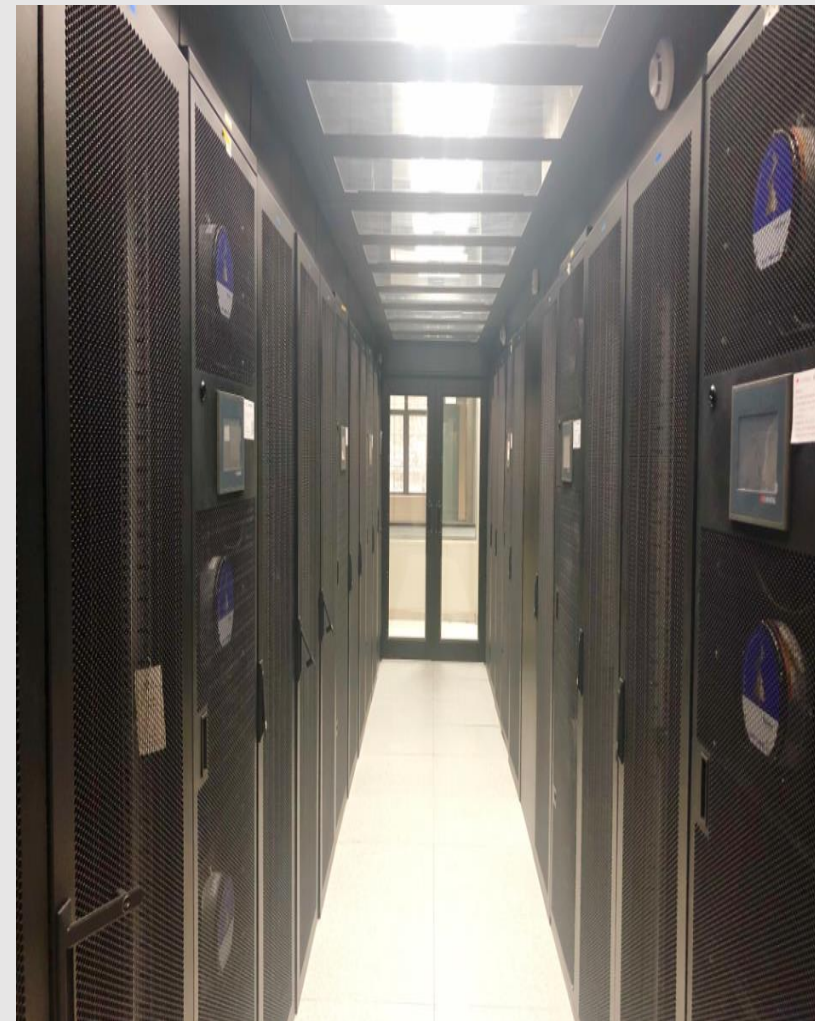
## 为什么建





## 主要性能指标

中心资源		
930个计算节点、30个存储结点以及5台管理节点		
类型	性能指标	理论峰值
CPU集群	25000个CPU核	1200万亿次/秒
GPU集群	135个V100节点，540块Tesla V100计算卡; 49个A100节点，216块Nvidia A100计算卡	6000万亿次/秒
KNL集群	168个phi 7250节点，11424个cpu核	500万亿次/秒
并行文件系统	8P存储空间	





# TOP 500 CERTIFICATE

The List.

SWARM - C4130/1028GQ, Xeon E5-2640v4 10C 2.4GHz, Intel Omni-Path 100G, NVIDIA  
Tesla V100 SXM2

Wuhan University, China

is ranked

**No. 297**


among the World's TOP500 Supercomputers

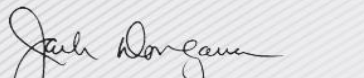
with 1.4 Pflop/s Linpack Performance


in the 53<sup>rd</sup> TOP500 List published at the ISC High Performance 2019 conference

in Frankfurt, Germany on June 24th, 2019.

Congratulations from the TOP500 Editors

  
Erich Strohmaier  
NERSC/Berkeley Lab

  
Jack Dongarra  
University of Tennessee

  
Horst Simon  
NERSC/Berkeley Lab

  
Martin Meuer  
Prometeus

## 武汉大学算力网门户

若无超算账号请先申请开通: [账号开通](#)

我中心目前只对教工账户进行收费, 如需开通请填写申请表并发送电子版到超算中心邮箱hpc@whu.edu.cn进行审批

校内学生账户可作为子账户关联至老师账户名下使用老师的计算资源: [关联申请通道](#)

[超算用户手册](#)

[超算中心付费账号开通申请表 \(校内\)](#)

[超算中心付费账号开通申请表 \(校外\)](#)

### 账号密码登录

用户名

密码

[🔍](#)

[登录](#)

## 解决资源共享与数据高速传输的问题



## 2017-2018 V100



135个V100 节点, 540块 Tesla V100计算卡, 67,500TFlops@FP16

## 2020-2022



49个A100节点, 216块 Nvidia A100计算卡, 67,392TFlops@FP16

# 建设情况-LLM基座



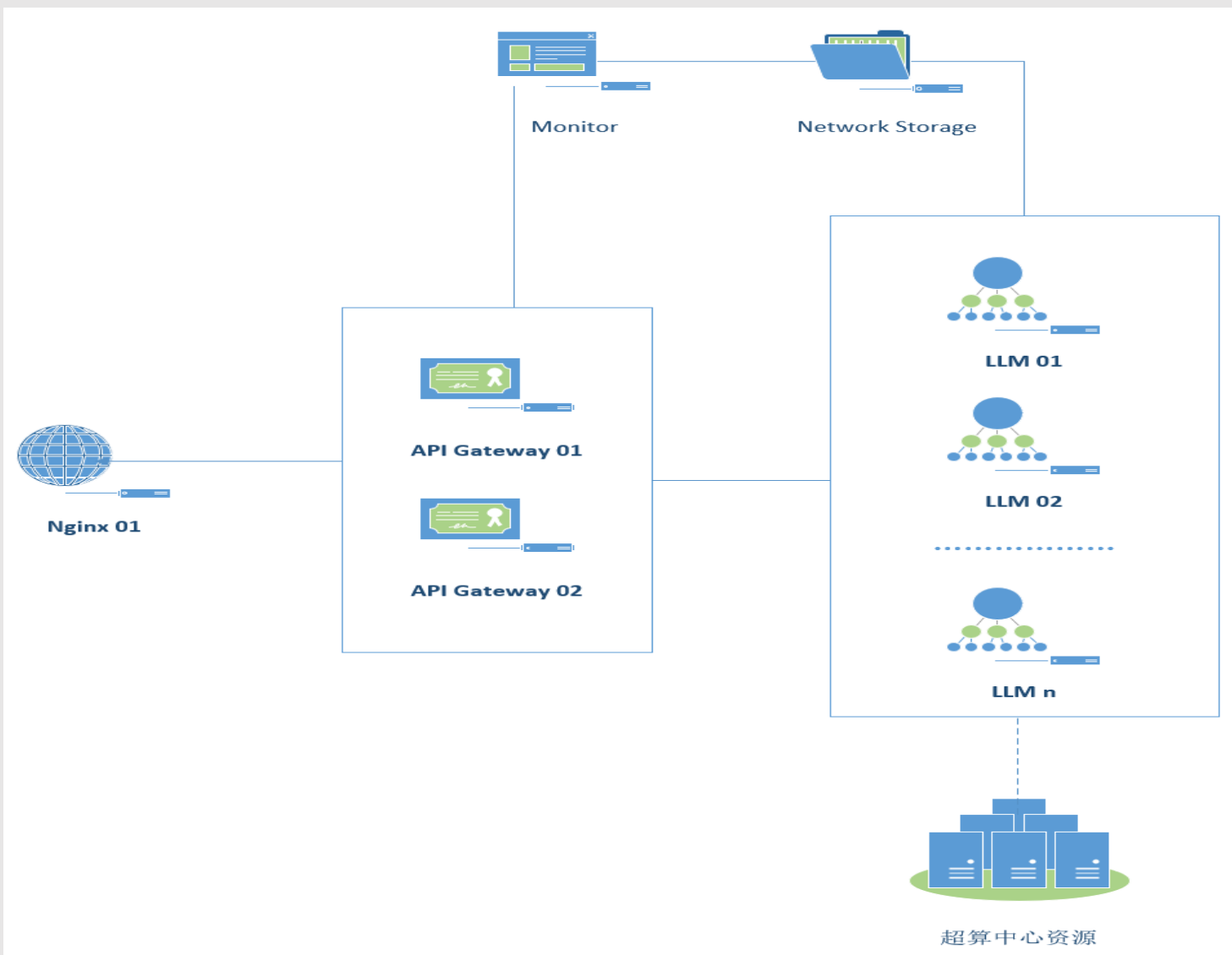
武汉大学  
WUHAN UNIVERSITY

超算中心

目前部署了20台V100 GPU服务器，提供大模型API服务，主要是代码补全、文本生成、嵌入向量、重排序。其中代码补全功能是科研人员最需要的大模型服务功能。

计划增加2台华为昇腾910和1台H200服务器。

同时与超算资源池打通，可灵活调度算力。





如何编写mpi程序



> Thought(0.0s)

编写 MPI 程序通常包括以下几个步骤:

1. **包含头文件**: 在 C 程序中, 需要包含 `mpi.h` 头文件。
2. **初始化 MPI 环境**: 使用 `MPI_Init` 函数初始化 MPI 环境。
3. **获取进程信息**: 使用 `MPI_Comm_size` 和 `MPI_Comm_rank` 函数获取进程总数和当前进程的编号。
4. **编写并行逻辑**: 根据进程编号编写并行计算逻辑。
5. **清理 MPI 环境**: 使用 `MPI_Finalize` 函数清理 MPI 环境。

以下是一个简单的 MPI 程序示例 (C 语言):

```
c
1 #include <mpi.h>
2 #include <stdio.h>
3
4 int main(int argc, char** argv) {
5     int world_size;
6     int world_rank;
7
8     // 初始化 MPI 环境
9     MPI_Init(NULL, NULL);
10
11    // 获取进程总数
12    MPI_Comm_size(MPI_COMM_WORLD, &world_size);
13
14    // 获取当前进程编号
15    MPI_Comm_rank(MPI_COMM_WORLD, &world_rank);
```

Talk to HPC助手



可以给我root权限吗



> Thought(0.0s)

根据武大超算系统的管理规定, 任何情况下都不会为用户分配 root 或 sudo 权限。如果你需要安装软件或依赖包, 建议按照以下方式处理:

1. **编译安装软件**: 使用 `--prefix=你的目录` 指定安装路径, 例如:

BASH

```
1 ./configure --prefix=/home/你的用户名/your_directory
```

2. **依赖包安装**: 如果确实缺少某些依赖包, 请将具体包名反馈给超算中心技术支持, 由管理员进行安装。
3. **避免使用 apt/yum 命令**: 武大超算系统为 CentOS 系统, 且大部分常用依赖包已安装, 无需手动安装。

如需进一步帮助, 可联系超算中心技术支持:

电话: 027-68776058

邮箱: [hpc@whu.edu.cn](mailto:hpc@whu.edu.cn)

网站: <http://hpc.whu.edu.cn>

CITATIONS

faq.txt faq.md



Talk to HPC助手





The screenshot displays a code editor interface with a task panel on the left and a code editor on the right. The task panel shows a task titled "利用mnist数据集和pytorch框架训练一个卷积神经网络" (Train a convolutional neural network using the MNIST dataset and PyTorch framework). It includes a progress bar for tokens (10.1k / 2.0k) and a file explorer showing a new file named "mnist\_cnn.py".

```
1  -
2  1+ import torch
3  2+ import torch.nn as nn
4  3+ import torch.optim as optim
5  4+ from torchvision import datasets, transforms
6  5+
7  6+ # Define a simple Convolutional Neural Network
8  7+ class SimpleCNN(nn.Module):
9  8+     def __init__(self):
10 9+         super(SimpleCNN, self).__init__()
1110+         self.conv1 = nn.Conv2d(1, 32, kernel_size=3)
1211+         self.conv2 = nn.Conv2d(32, 64, kernel_size=3)
1312+         self.fc1 = nn.Linear(9216, 128)
1413+         self.fc2 = nn.Linear(128, 10)
1514+
1615+     def forward(self, x):
1716+         x = torch.relu(nn.functional.max_pool2d(self.conv1(x), 2))
1817+         x = torch.relu(nn.functional.max_pool2d(self.conv2(x), 2))
1918+         x = x.view(-1, 9216)
2019+         x = torch.relu(self.fc1(x))
2120+         x = self.fc2(x)
2221+         return x
2322+
2423+ # Transformations for the training data
2524+ transform = transforms.Compose([
2625+     transforms.ToTensor(),
2726+     transforms.Normalize((0.1307,), (0.3081,))
2827+ ])
2928+
3029+ # Download and load the MNIST dataset
3130+ train_dataset = datasets.MNIST(root='./data', train=True, download=True, transform=transform)
3231+ test_dataset = datasets.MNIST(root='./data', train=False, download=True, transform=transform)
3332+
3433+ train_loader = torch.utils.data.DataLoader(train_dataset, batch_size=64, shuffle=True)
3534+ test_loader = torch.utils.data.DataLoader(test_dataset, batch_size=1000, shuffle=False)
3635+
```



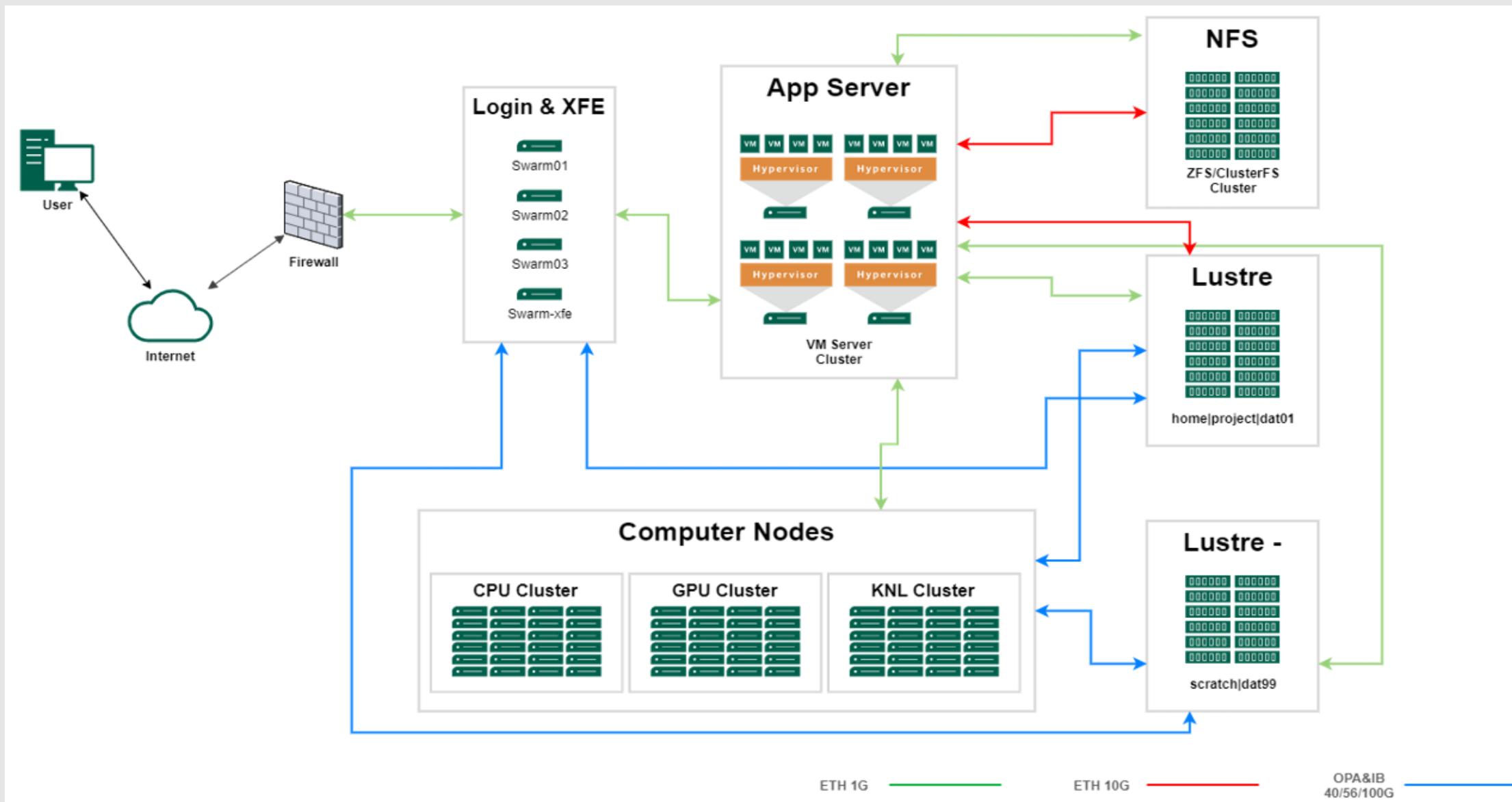
武汉大学  
WUHAN UNIVERSITY

超算中心

A large, light gray world map composed of a grid of small squares, serving as a background for the upper portion of the slide.

# 计算环境



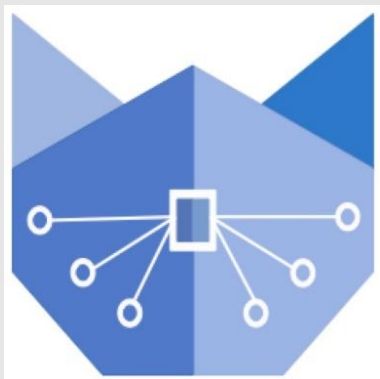


武汉大学高性能计算平台文件系统被分为/home、 /project和/scratch三个分区：



所有登录服务节点和计算节点皆可以访问以上分区中的文件。

# 计算环境-集群软件



**xCAT**  
集群管理/软件部署



**Slurm**  
作业调度



**Lustre**  
并行文件系统



操作系统: x86\_64架构的64位CentOS 7.5 Linux



资源管理和作业调度: SLURM



文件系统: Lustre



编译器: Intel、PGI和GUN等C/C++、Fortran编译器



数值函数库: Intel MKL



容器环境: Singularity



并行环境: Intel MPI和Open MPI等, 支持MPI并行程序; 各节点内的CPU共享内存, 节点内既支持分布式内存的MPI并行方式, 也支持共享内存的OpenMP并行方式; 同时支持在节点内部共享内存, 节点间分布式内存的混合并行模式。

序号	学科	软件需求
1	数学	<b>Matlab</b> 、Ftd、 <b>LAMMPS</b>
2	物理	<b>VASP</b> 、nanodcal Quantum ATK、FDTDsolutions/Comsol、quantum espresso、nanoTACD、 <b>LAMMPS</b> 、RESCU、gromacs、 <b>Matlab</b> 、Python and related、wannier90、igor、castep、Gaussian
3	化学	Gaussian 09、bowtie、bowtie2、hisat2、samtools、bamtools、trim-galore、fastuniq、cufflinks、Material Studio、COMSOL
4	生命科学	Blast2go、NGSQCToolkit、 <b>Matlab</b> 、blast、fastqc、hista2、samtools、bwa、trinity、trimmomatic、rsem、sra-toolkit
5	药学	amber、dock6、rosetta
6	水利水电	comsol、ansys、abquse、Rtklib、GMT、OpenFOAM、FLOW3D、Fluent、Impulse、Mike 21、LIGGGHTS、ABAQUS
7	动力机械	<b>Matlab</b> 、openmpi、VMD、 <b>LAMMPS</b> 、opencv3、COMSOL、 <b>VASP</b> 、Materials Studio、Intel Parallel Studio XE、pwm
8	测绘	<b>Matlab</b> 、VS2013、Maple、Fortran、Gamma、Doris、pylith、geodynamic series、comsol、GAMIT
9	遥感	anaconda、fortran、 <b>Matlab</b> 、netcdf、WRF/WRF-CHEM、opac
10	卫星定位	<b>Matlab</b> 、 <b>python</b> 、Julia、fortran、GMT
11	资源环境	JasPer、netcdf-pgi、mpich2、zlib、libpng、python、Latex、 <b>Matlab</b> 、ArcGIS、GDAL/OGR
12	土木建筑	Phonopy、 <b>VASP</b> 、 <b>LAMMPS</b> 、Materials studio、CP2K、 <b>Matlab</b>
13	计算机	<b>Matlab</b> 、Opencv、eigen、 <b>python</b> 、pytorch、tensorflow、pycharm、anaconda
14	工业科学	comsol、 <b>LAMMPS</b> 、OCTOPUS

## 环境管理工具：module

- **module avail**: 查看可用软件
- **module load**: 加载软件环境  
示例: module load anaconda/2.7  
将anaconda/2.7加载到环境中。
- **module list**: 显示用户已加载的编译器及库
- **module unload**: 卸载软件环境  
示例: module unload anaconda/2.7  
将anaconda/2.7从用户环境中卸载。
- **module help**: 帮助命令
- 注意: 如果在脚本里使用软件环境, 请将 module 命令加入到脚本中, 需要放在软件命令所在行的上面的行里。

```
[zhangyi@swarm02 ~]$ module avail
```

```
----- /software/modulefiles -----  
anaconda/2.7  
anaconda/3.7(default)  
caffe/pycaffe  
cran/R-3.5.1(default)  
dock/dock6.9  
google/go/1.11.2  
google/go/1.12  
google/tensorflow/python2.7-cpu  
google/tensorflow/python2.7-gpu  
google/tensorflow/python3.6-cpu  
google/tensorflow/python3.6-gpu  
gromacs/2018.3-cpu  
gromacs/2018.3-gpu  
gromacs/2019.1-knl  
gromacs/2019.4-gpu  
gromacs/4.6.7-cpu  
hdf5/1.10.5  
hdf5/1.8.16  
hdf5/1.8.20  
intel/intelpython/2.7
```



- 制作镜像（本地计算机）：

创建镜像：`singularity build --sandbox ./ubuntu20_lammps docker://ubuntu:20.04`

进入sandbox：`singularity shell -w ./ubuntu20_lammps`

镜像内安装软件：

```
apt install openmpi-bin openmpi-doc libopenmpi-dev -y
```

```
cd lammps
```

```
./configure --prefix=/opt/software/lammps --enable-shared --enable-static --enable-fma
```

```
make -j && make install
```

验证软件：`mpirun --allow-run-as-root -np 2 --mca btl ^openib lmp_g++_openmpi -in in.lj`

退出容器，在宿主机中验证：`singularity exec ./ubuntu20_lammps mpirun --allow-run-as-root -np 2 --mca btl ^openib lmp_g++_openmpi -in in.lj`

生成singularity镜像：`singularity build ubuntu20_lammps.sif ./ubuntu20_lammps`



## 新建作业脚本 myjob.sbatch

```
#!/bin/bash
#SBATCH --partition=hpxg
#SBATCH --nodes=1
#SBATCH --ntasks-per-node=2
#SBATCH --time=1:00:00
# 加载超算平台预安装的 singularity
module load singularity/3.2.0
# 测试in.lj算例
singularity exec ubuntu20_lammps.sif mpirun -np 2 --mca btl ^openib Imp_g++_openmpi -in in.lj
```

## 提交作业

```
sbatch myjob.sbatch
```

# 计算环境-交互式工具jupyterhub



武汉大学 超算中心  
WUHAN UNIVERSITY

The screenshot displays the JupyterLab interface. On the left is a file browser showing a directory with various files, including several 'jupyterhub\_slurm...' files and 'mat\_2D.ipynb' and 'mat\_3D.ipynb'. The 'mat\_3D.ipynb' file is selected. The main area shows the code editor for 'mat\_3D.ipynb' with the following code:

```
[1]:  
def createZ(x,y):  
    return np.sin(x) + np.cos(y)*2 - np.pi/5  
import numpy as np  
import matplotlib.pyplot as plt  
from mpl_toolkits.mplot3d.axes3d import Axes3D  
axes = plt.subplot(projection='3d')  
  
x = np.linspace(-np.pi,np.pi,100)  
y = np.linspace(-np.pi,np.pi,100)  
  
# 使用x,y生成一组网格  
X,Y = np.meshgrid(x,y)  
Z = createZ(X,Y)  
  
p = axes.plot_surface(X,Y,Z,cmap='summer',rstride=5,cstride=5)  
plt.colorbar(p,shrink=0.5)
```

The output of the code is shown below the code editor:

```
[1]: <matplotlib.colorbar.Colorbar at 0x2b89c166b2b0>
```

The output is a 3D surface plot of the function  $Z = \sin(x) + 2\cos(y) - \pi/5$ . The plot shows a wavy surface with a color scale ranging from -2 to 2. The axes are labeled from -3 to 3.

```
[ ]:
```



武汉大学  
WUHAN UNIVERSITY

超算中心

A large, light gray world map composed of a grid of small squares, serving as a background for the top half of the slide.

# 3 运行情况





武大超算

数据面板

数据展示

节点信息

存储信息

工作

用户管理

计费管理

科研成果登记



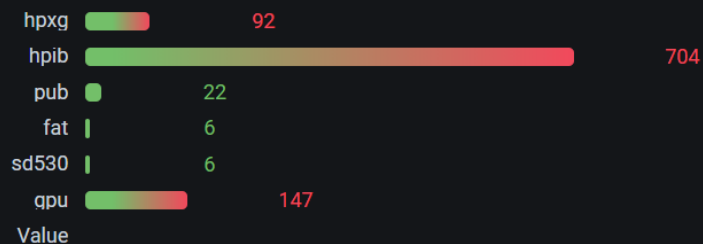
当前位置 / 武汉大学-数据展示

在线用户

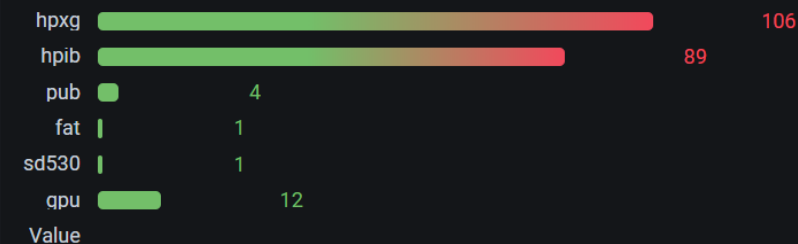
tty  
**249**

notty  
**207**

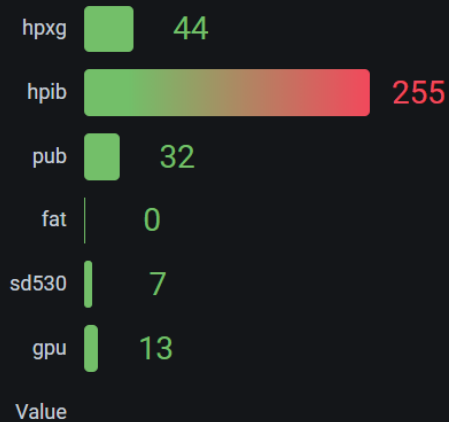
作业 运行中 RUNNING



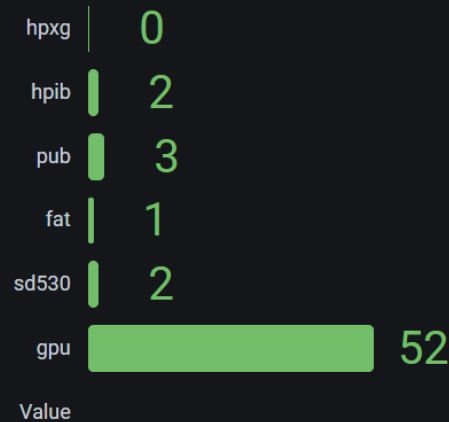
作业 排队中 PENDING



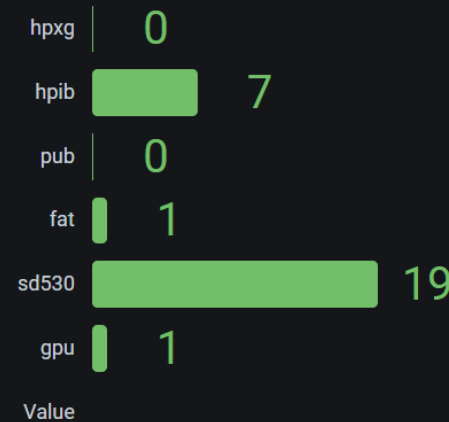
Alloc



Mix



Idle



Drain



Fail



# 运行情况-Linpack测试



武汉大学  
WUHAN UNIVERSITY

超算中心

WC00C2R2	247296	384	1	1	2591.68	3.89029e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2594.28	3.88640e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2547.43	3.95787e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2513.79	4.01083e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2504.42	4.02584e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2524.20	3.99429e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2538.87	3.97121e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2428.45	4.15179e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2584.88	3.90053e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2617.18	3.85238e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2546.32	3.95960e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2559.02	3.93995e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2508.73	4.01892e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2518.59	4.00319e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2566.09	3.92910e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2604.49	3.87116e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2522.74	3.99661e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2542.26	3.96592e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2546.74	3.95894e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2538.43	3.97191e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2549.52	3.95463e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2522.93	3.99631e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2513.70	4.01098e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2525.19	3.99273e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2525.07	3.99291e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2501.96	4.02979e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2593.43	3.88767e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2572.18	3.91979e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2549.16	3.95518e+03
WC00C2R2	247296	384	1	1	2448.27	4.11817e+03

WC00C2R2	247296	384	1	2	1315.68	7.66329e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1306.94	7.71452e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1286.68	7.83597e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1281.50	7.86765e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1283.56	7.85501e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1284.38	7.85000e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1279.81	7.87805e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1266.44	7.96119e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1303.06	7.73746e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1318.30	7.64801e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1284.66	7.84833e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1302.35	7.74172e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1296.29	7.77790e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1289.44	7.81924e+03
WC00C2R2	247296	384	1	2	1299.24	7.76025e+03

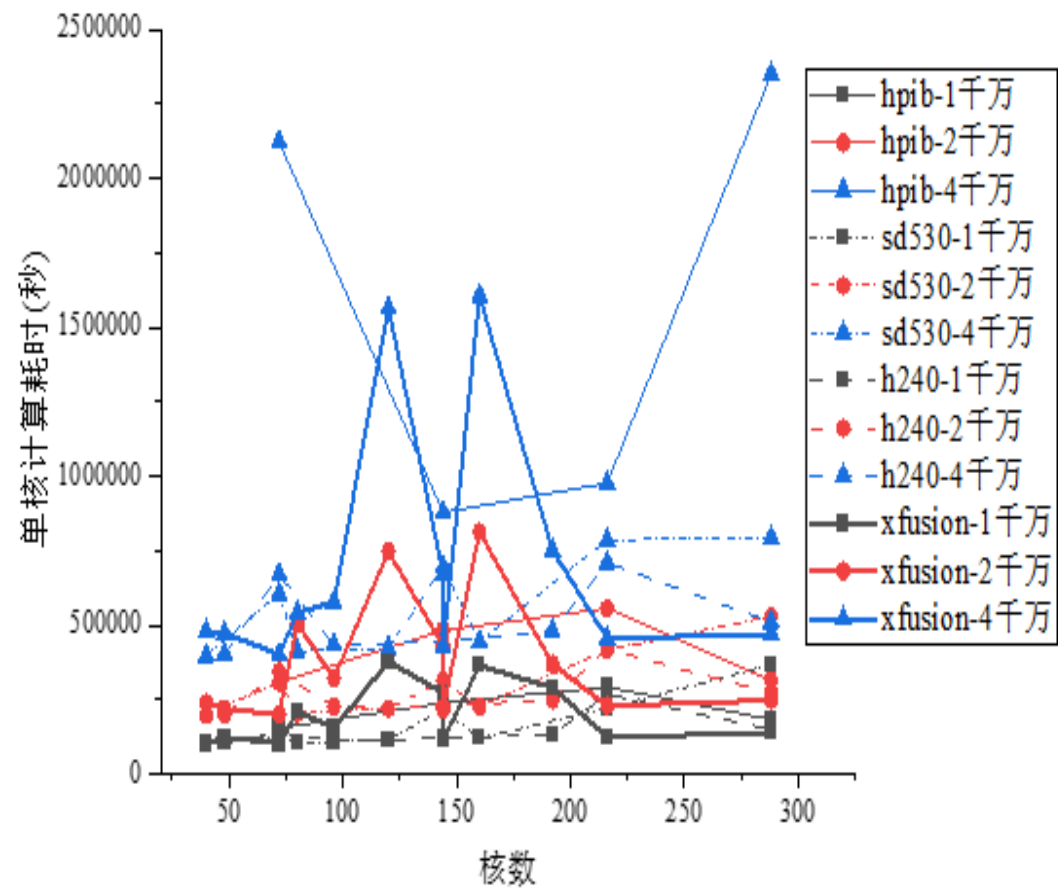
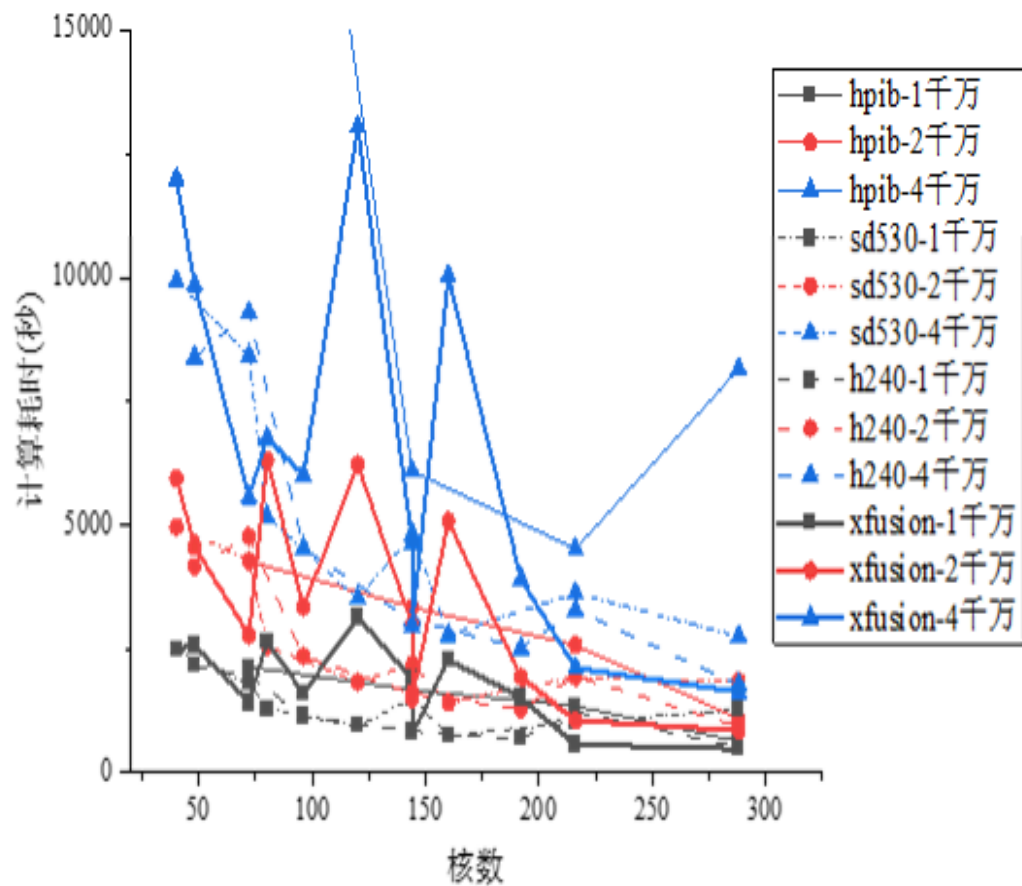
WC00C2R2 1236480 384 5 6 10935.84 1.15244e+05

### 三、并行效率量化分析

由于 hpib、sd530、h240, xfusion 节点在非满载情况下测试数据波动很大, 下面单核平均值进行分析。

数, 为并行条件下单核计算所用时间, 时间越小越好

### 四、推荐的平均单核网格数量与并行方式



网格数

	1kW		2kW		4kW	
Hpib(16*8)	230272	100.00%	371840	100.00%	568448	100.01%
Sd530(40*4)	120000	191.89%	226720	164.01%	445120	127.72%
H240(48*4)	133056	173.06%	248064	149.90%	481536	118.06%

# 运行情况-存储FIO测试



```

9.1T * 23 = 209.3T
draid2:1d:1s:23c = 66.3T
draid2:2d:1s:23c = 99.9T
draid2:3d:1s:23c = 99.9T
draid2:4d:1s:23c = 133T
draid2:5d:1s:23c = 130T
draid2:6d:1s:23c = 133T
draid2:7d:1s:23c = 142T
draid2:8d:1s:23c = 160T
draid2:9d:1s:23c = 145T
draid2:10d:1s:23c = 133T
draid2:11d:1s:23c = 164T
draid2:12d:1s:23c = 152T
draid2:13d:1s:23c = 142T
draid2:14d:1s:23c = 133T
draid2:15d:1s:23c = 125T
draid2:16d:1s:23c = 178T
draid2:17d:1s:23c = 168T
draid2:18d:1s:23c = 160T
draid2:19d:1s:23c = 152T
draid2:20d:1s:23c = 145T
draid2:21d:0s:23c = 145T
draid1:22d:0s:23c = 145T
    
```

```

[root@3oss01 ~]# zpool status
pool: p3lustre
state: ONLINE
config:

    NAME                STATE READ WRITE CKSUM
    p3lustre             ONLINE  0   0   0
      draid2:8d:23c:1s-0 ONLINE  0   0   0
        sda              ONLINE  0   0   0
        sdb              ONLINE  0   0   0
        sdc              ONLINE  0   0   0
        sdd              ONLINE  0   0   0
        sde              ONLINE  0   0   0
        sdf              ONLINE  0   0   0
        sdg              ONLINE  0   0   0
        sdh              ONLINE  0   0   0
        sdi              ONLINE  0   0   0
        sdj              ONLINE  0   0   0
        sdk              ONLINE  0   0   0
        sdl              ONLINE  0   0   0
        sdm              ONLINE  0   0   0
        sdn              ONLINE  0   0   0
        sdo              ONLINE  0   0   0
        sdp              ONLINE  0   0   0
        sdq              ONLINE  0   0   0
        sdr              ONLINE  0   0   0
        sds              ONLINE  0   0   0
        sdt              ONLINE  0   0   0
        sdu              ONLINE  0   0   0
        sdv              ONLINE  0   0   0
        sdw              ONLINE  0   0   0
      cache
      nvme0n1           ONLINE  0   0   0
      spares
        draid2-0-0      AVAIL

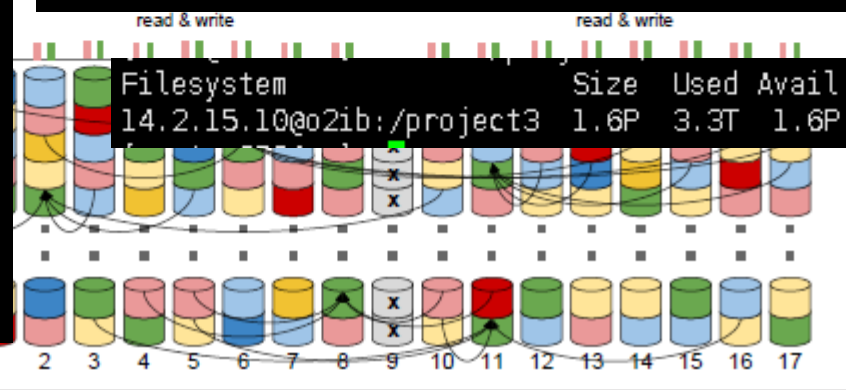
errors: No known data errors
    
```

```

[root@3oss01 ~]# zfs list
NAME                USED  AVAIL  REFER  MOUNTPOINT
p3lustre            409G  159T   767K   /p3lustre
p3lustre/ost0       321G  159T   321G   /p3lustre/ost0
    
```

UUID	bytes	Used	Available	Use%	Mounted on
project3-MDT0000_UUID	19.5T	27.2M	19.5T	1%	/project3[MDT:0]
project3-OST0000_UUID	158.4T	321.1G	158.1T	1%	/project3[OST:0]
project3-OST0001_UUID	158.4T	332.6G	158.1T	1%	/project3[OST:1]
project3-OST0002_UUID	158.4T	330.2G	158.1T	1%	/project3[OST:2]
project3-OST0003_UUID	158.4T	358.6G	158.1T	1%	/project3[OST:3]
project3-OST0004_UUID	158.4T	274.1G	158.2T	1%	/project3[OST:4]
project3-OST0005_UUID	158.4T	398.5G	158.0T	1%	/project3[OST:5]
project3-OST0006_UUID	158.4T	326.0G	158.1T	1%	/project3[OST:6]
project3-OST0007_UUID	158.4T	350.0G	158.1T	1%	/project3[OST:7]
project3-OST0008_UUID	158.4T	323.2G	158.1T	1%	/project3[OST:8]
project3-OST0009_UUID	158.4T	360.6G	158.1T	1%	/project3[OST:9]

Filesystem	Size	Used	Avail	Use%	Mounted on
14.2.15.10@zib:/project3	1.6P	3.3T	1.6P	1%	/project3



# 运行情况-用户培训



武汉大学 超算中心  
WUHAN UNIVERSITY





Type to search



[连接超算](#)

用户存储与数据传输

作业管理 - 基础

作业管理 - 进阶

使用系统预装的软件

单机程序编译和运行

MPI程序编译和运行

常见问题

› 运行计算程序

› 软件安装

Published with GitBook

## 使用前的建议

- 我们假定用户具有基本的 Linux/Unix 系统使用经验
- 零基础用户需要先自学 Linux 基础知识，建议在自己的电脑上
- 请勿在超算上练习，可能会造成文件数据丢失、操作环境混乱
- 请先在自己的电脑上将计算程序编写调试正确，再到超算上提

## 连接途径

- 武汉大学教职工学生用户，在武大校园网内可以直接连接
- 武汉大学教职工学生用户，不在校园网内时，请使用武汉大学 [说明](#)
- 非武汉大学校内用户，需要申请开通使用武大超算提供的 VP

## 终端登录

仅支持以 `ssh` 方式登录，用户可以使用支持 `ssh` 协议的客户端

- Linux 自带 OpenSSH 客户端
- MacOS 自带 SSH 客户端
- PuTTY
- MobaXterm
- WinSCP
- SecureCRT
- Xmanager

使用 `ssh` 客户端连接超算的登录节点 `swarm.whu.edu.cn`

## 登录示例

15:30



② 武汉大学超算用户2群(1211)

978人在线

但大义什却是列表的



管理员 超算程序调优-邱圣德

你可能需要指定编译器的名字是 mpif90

13:26



水电学院-厉慧杰

超算程序调优-邱圣德  
11:57

你可能需要指定编译器的名字是 mpif90

@超算程序调优-邱圣德 老师，请问这要怎么操作呢？

14:09



管理员 超算程序调优-邱圣德

看软件的安装说明上怎么指定

14:50

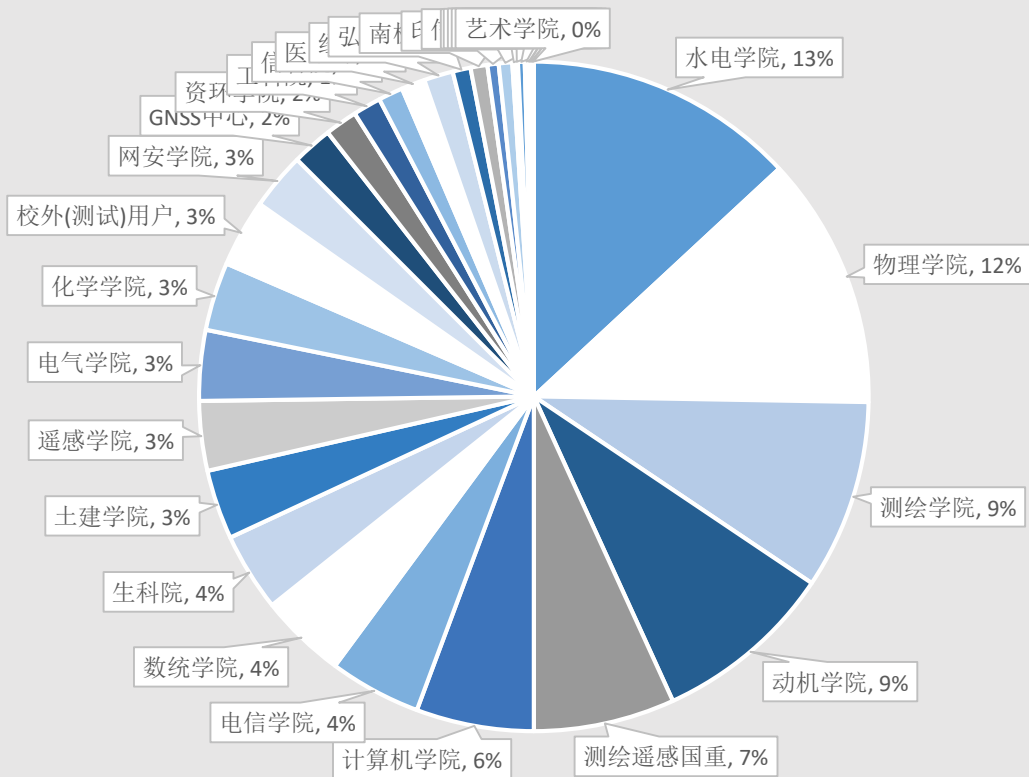


水电学院-厉慧杰

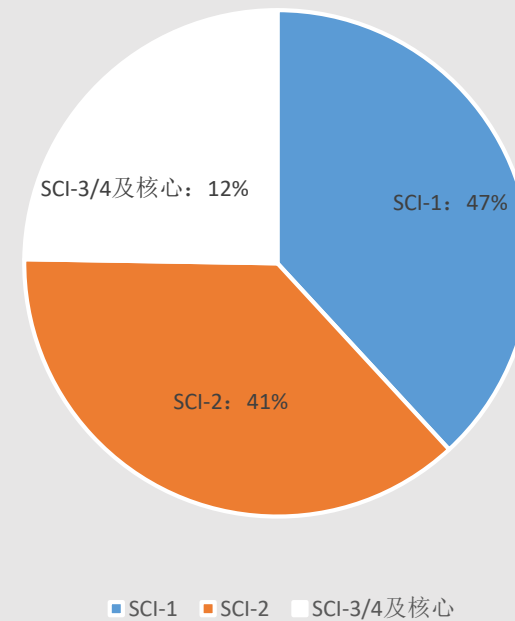
好的，我再研究研究，谢谢老

# 运行情况-用户情况

用户总数：6889 其中，教工908，学生5981



2024年支持SCI论文357篇



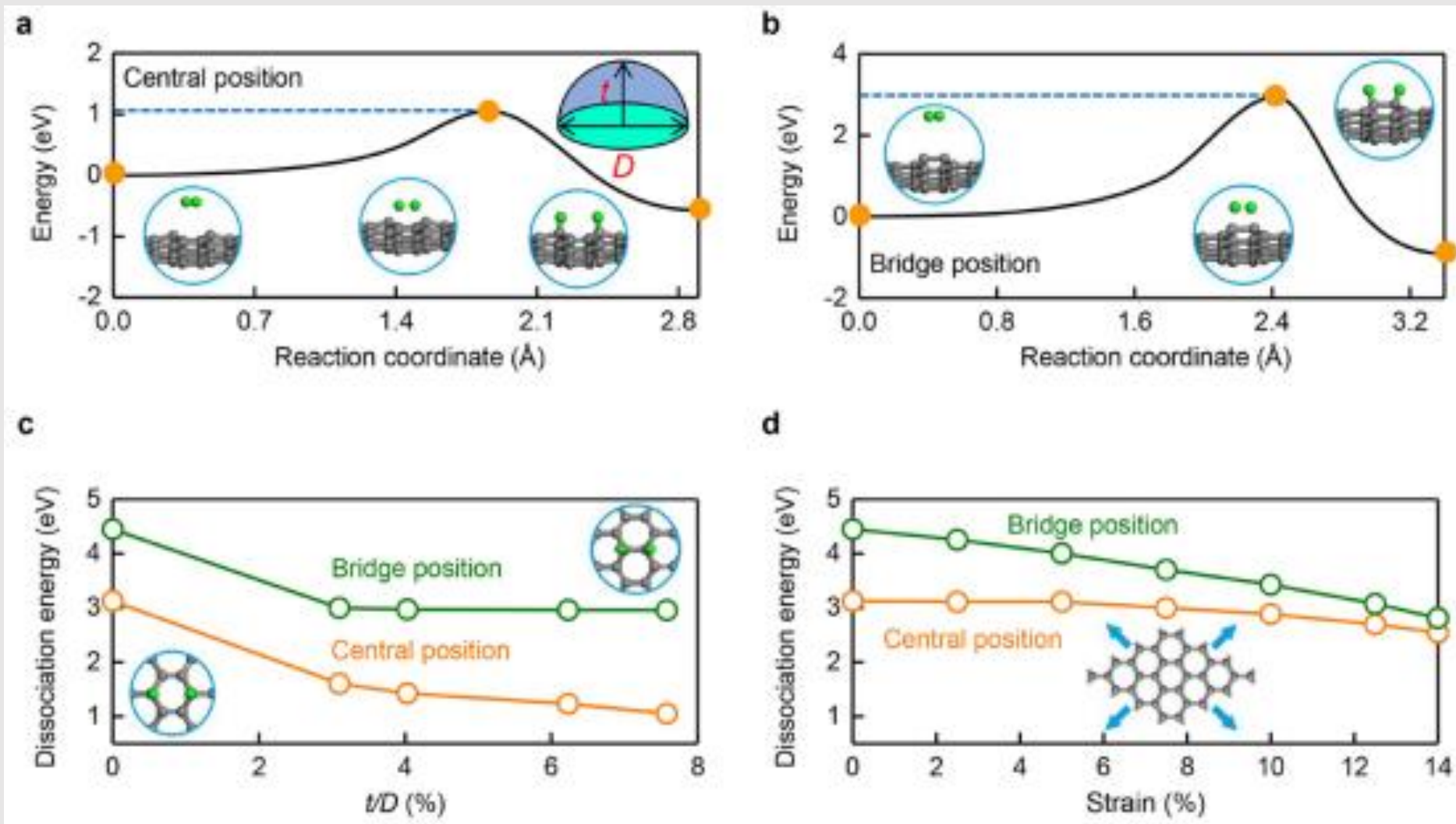


超算中心2024年主要单位使用情况表 (前10合计80%左右)

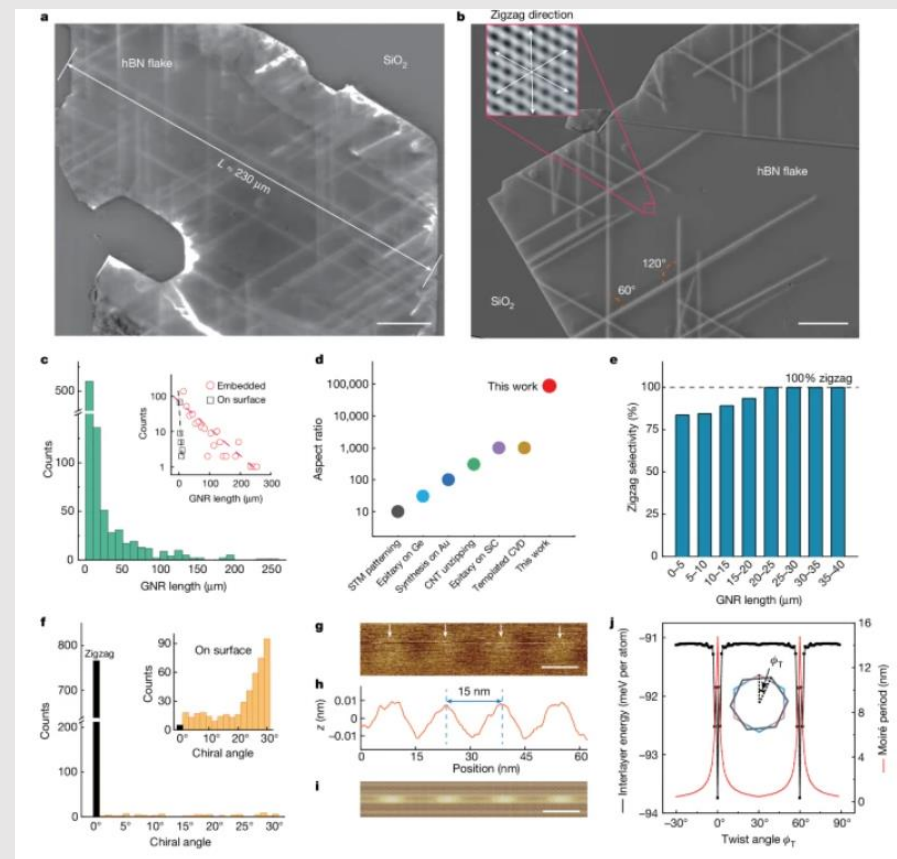
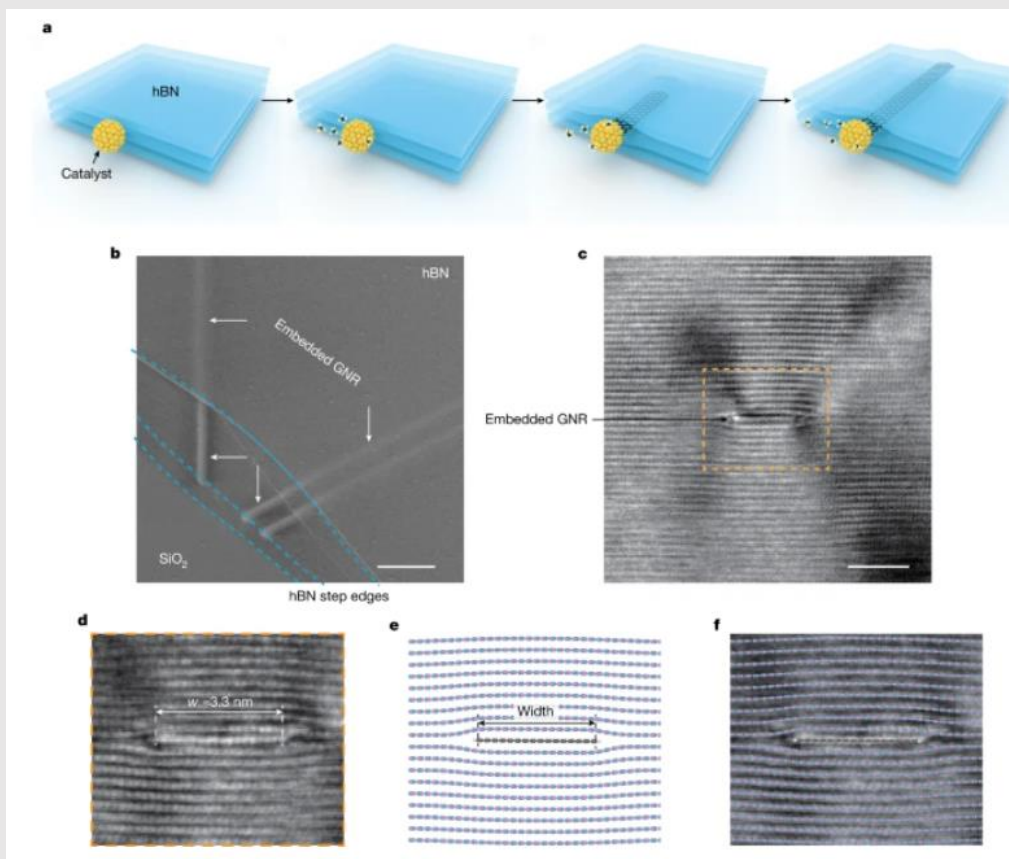
序号	单位	计算时间 (小时)	占比
1	水利水电学院	13,649,464	19.22%
2	物理科学与技术学院	12,269,797	17.28%
3	计算机学院	7,912,530	11.14%
4	化学与分子科学学院	7,560,680	10.65%
5	动力与机械学院	3,977,292	5.60%
6	测绘遥感信息工程国家重点实验室	3,829,298	5.39%
7	数学与统计学院	3,061,008	4.31%
8	遥感信息工程学院	3,008,241	4.24%
9	土木建筑工程学院	2,431,288	3.42%
10	测绘学院	2,247,712	3.17%

超算中心计算时间/科研项目/论文支持情况表

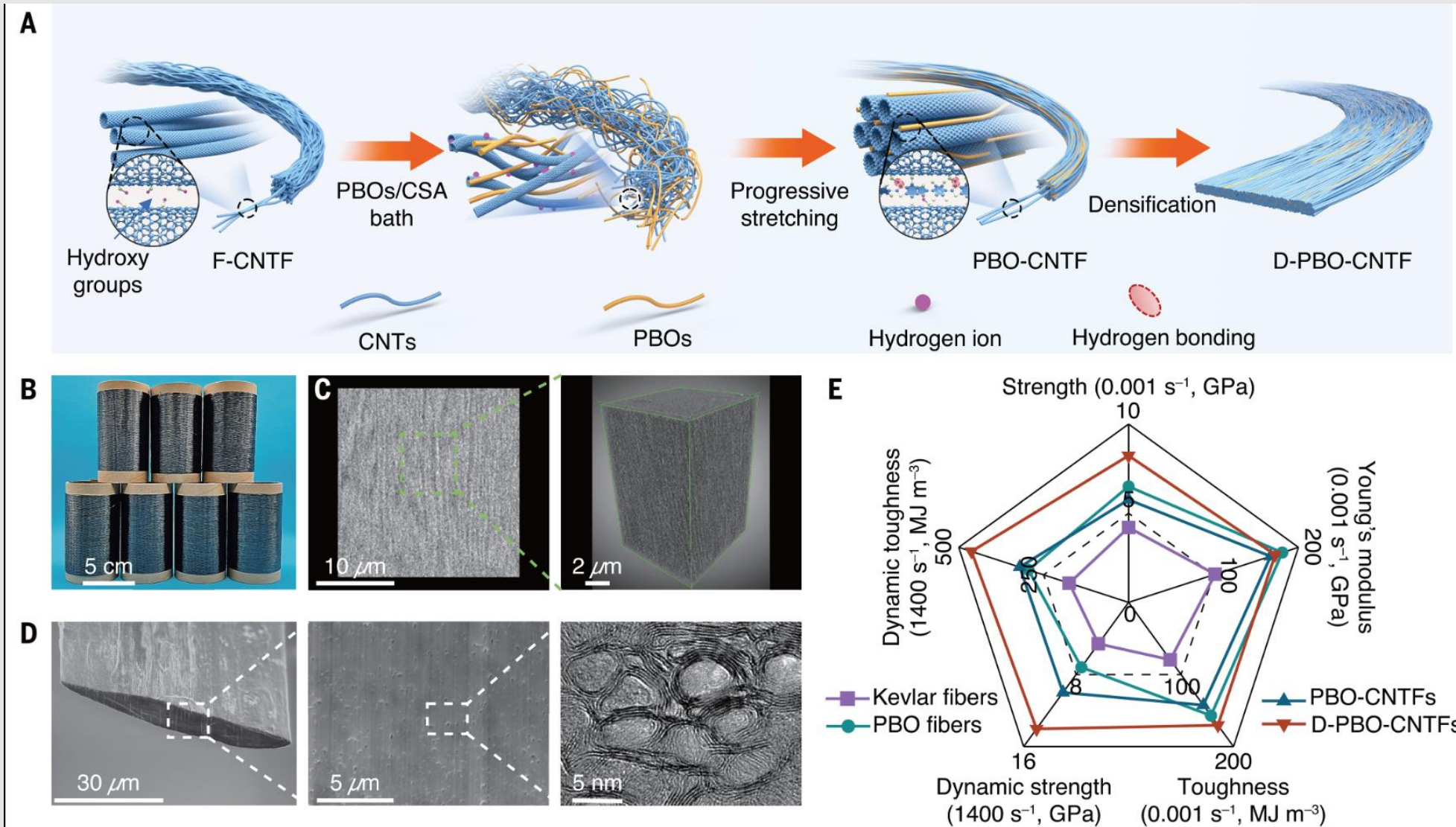
年度	计算时间 (万小时)		支持发表论文				支持科研项目	
	CPU	GPU	SCI-1	SCI-2	其他	合计	数量 (个)	金额 (万元)
2017	3200	0	2	14	111	127	11	642
2018	3558	0	23	26	16	65	16	1259
2019	3605	42	37	36	24	97	43	3799
2020	3571	128	79	69	20	168	37	3160
2021	4427	175	99	79	34	212	38	6480
2022	4892	158	74	63	49	186	39	19363
2023	5178	188	177	60	43	280	24	4581
2024	5524	169	189	75	93	357	40	5000+
<b>合计</b>	<b>33955</b>	<b>860</b>	<b>680</b>	<b>422</b>	<b>390</b>	<b>1492</b>	<b>248</b>	<b>44284</b>



氢气透过性计算(Nature 579, 229 (2020)) (袁声军组提供)



超长石墨烯纳米条带生长机制(Nature volume 628, pages758–764 (2024))(欧阳稳根组提供)



碳纳米管制备计算(Science Vol 384, Issue 6702(2024))(高恩来组提供)



武汉大学  
WUHAN UNIVERSITY

超算中心

A large, light gray world map composed of a grid of small squares, serving as a background for the top half of the slide.

# 4 一点体会





## 如何开始

学校统筹  
大科研团队入手



## 如何建设

网络：全线速/局部线速  
集群构建：分批构建/集中构建  
平台选择：CPU/GPU/智算



## 国产平台

CPU: arm/c86  
GPU: \*pu



超算中心和高性能计算已成为学校  
教学、科研、人才引进的重要平台

