**上海超算现有硬件资源**

上海超算现有魔方超级计算机，配置如下表：

|  |  |
| --- | --- |
| "魔方"（曙光5000A）主要技术指标 | |
| 计算核心 | 23000 Cores |
| 计算节点 | 1450个刀片节点：每个刀片节点配置4颗CPU，64GB内存 |
| CPU | AMD 8347HE 64bit 4核低功耗1.9GHzCPU |
| 磁盘总容量 | 500 TB SAN Storage |
| 网络互连 | Infiniband ConnectX DDR |
| 操作系统 | Suse Linux Enterprise Server10 |
| 作业调度系统 | LSF7.0 |

在此超级计算机上为我校开设专用账号，预置5个，可视情况增加。

|  |  |
| --- | --- |
| "魔方"（曙光5000A）专用账号 | |
| 账号数 | 5 |
| 计算核心 | 每个账号128Cores，共640Cores |
| 存储空间 | 每个账号500GB，共2500GB |

**2015年我校专用硬件资源**

上海超算2015年预留给上科大的专用硬件资源配置如下表：

|  |  |
| --- | --- |
| 专用资源区 | |
| 计算核心 | 2400 Cores |
| 计算节点 | 100个：双路Intel E5-2680 v3十二核，主频不低于2.5GHz，128GB内存 |
| 大内存节点 | 2个：八路Intel Xeon系列CPU，主频不低于2.3GHz，总计算CPU核心数不低于96核，1TB内存 |
| GPU计算节点 | 10个：双路Intel E5-2680 v3十二核，主频不低于2.5GH，256GB内存，1块Nvidia K40 GPU卡 |
| 存储容量 | 1PB |
| 计算网络互连 | Infiniband FDR 56Gb/s |
| 操作系统 | 64位企业级Linux操作系统 |
| 使用方式 | 开发专用应用平台 |

**​上海超算​软件资源**

上海超算配备了完善的系统软件环境，供研究人员开发应用程序，同时购买了大量工程类商业软件，并移植、安装了丰富的开源免费程序。下为软件列表：

|  |  |
| --- | --- |
| 系统软件环境 | |
| 软件名称 | 功能描述 |
| GPU编译器 | GNU C/C++/Fortran |
| PGI编译器 | PGI C/C++/Fortran77/ Fortran90/ Fortran95 |
| Intel编译器 | Intel C/C++/Fortran |
| MPICH编译器 | 标准MPI C/C++/Fortran77/ Fortran90编译器 |
| MVAPICH编译器 | 基于Infiniband计算网络的MPI编译器 |
| OPENMPI编译器 | MPI-2标准的开源MPI编译器 |
| BLAS | 基础线性代数子程序库 |
| LAPACK | 线性代数子程序库 |
| ScaLAPACK | 可扩展线性代数计算软件包 |
| FFTW | 快速计算离散傅里叶变换的标准C语言程序集 |
| MKL | Intel数学核心函数库 |
| ACML | AMD核心数学库 |
| 工程商业计算软件 | |
| 软件名称 | 功能描述 |
| HOBBIES | 超大规模精细电磁计算平台 |
| ABAQUS | 计算结构力学分析软件 |
| ANSYS.Multiphysics |
| MSC.NASTRAN |
| MSC.MARC | 显示动力学分析软件 |
| MSC.DYTRAN |
| LS-DYNA |
| Madymo Q/FEA DUMMY/MDB,ODB | 多体动力学分析软件 |
| ANSYS.FLUENT | 计算流体力学分析软件 |
| ANSYS.CFX |
| STARCD |
| STARCCM+ |
| MSC.PATRAN | CAE前后处理软件 |
| HyperWorks |
| AI\*ENVIRONMENT |
| ICEM-CFD | CFD前后处理软件 |
| GAMBIT |
| ModeFrontier | 多目标优化分析软件 |
| OPTIMUS | 过程集成和优化分析软件 |
| 开源计算程序 | |
| 软件名称 | 功能描述 |
| autoDOCK | 分子对接软件 |
| ABINIT | 从头计算量子化学程序 |
| GAMESS |
| ACES II |
| NWChem | 量子化学计算软件 |
| PSI3 |
| MOLPRO |
| GROMACS | 分子动力学计算软件 |
| CPMD |
| CP2K |
| ESPRESSO |
| LAMMPS |
| DL\_POLY |
| CHARMM |
| NAMD |
| SIESTA | 分子和固体的电子结构计算和分子动力学模拟 |
| EGO | 蛋白质分子动力学程序 |
| SMEAGOL | 从头电子疏运计算软件 |
| WIEN2k | 固体电子结构计算软件 |
| CosmoMC | 天体物理计算软件 |
| Gadget2 |
| FDS | 火灾模拟软件 |
| OpenFOAM | 计算流体力学软件 |
| meep | 计算电磁软件 |
| MM5 | 中尺度大气数值预报模式 |
| WRF |
| CCSM3 | 气候数值模式软件 |