

中山大学

1 项目概况

中山大学由孙中山先生创办, 有着一百多年办学传统。作为中国教育部直属高校, 通过部省共建, 中山大学已经成为一所国内一流、国际知名的现代综合性大学。学校由广州校区、珠海校区、深圳校区三个校区、五个校园及十家附属医院组成; 开设 141 个本科专业; 有博士后科研流动站 44 个, 一级学科博士点 57 个, 一级学科硕士点 64 个, 专业学位类别 43 种。

2 客户需求

计算化学主要研究非周期性结构的分子体系, 主要有分子力学和量子化学两种方法。前者基于牛顿力学, 准确性偏低, 可研究的体系很大, 一般在一万到一百万个原子; 后者基于量子力学, 准确性高, 可研究的体系比较小, 一般不超过 500 个原子。需要用到计算化学的主流计算软件包括 Gaussian、GAMESS、QChem、ADF、NWChem 等。不同的软件对计算资源的需求也是不同的, 因此需要一套成熟稳定、高可靠、高性能的硬件集群方案来保障软件流畅运行。

3 解决方案

算工采用 SG-HW3330 高性能 GPU 服务器和 SG-HW3550 高性能四路服务器以及昇腾 SG-KW3560 高性能训练服务器提供硬件支撑, 专为复杂软件应用打造的高性能机架式服务器, 满足客户对数据库服务器高性能、可靠性、可扩展性、安全性等方面的要求。

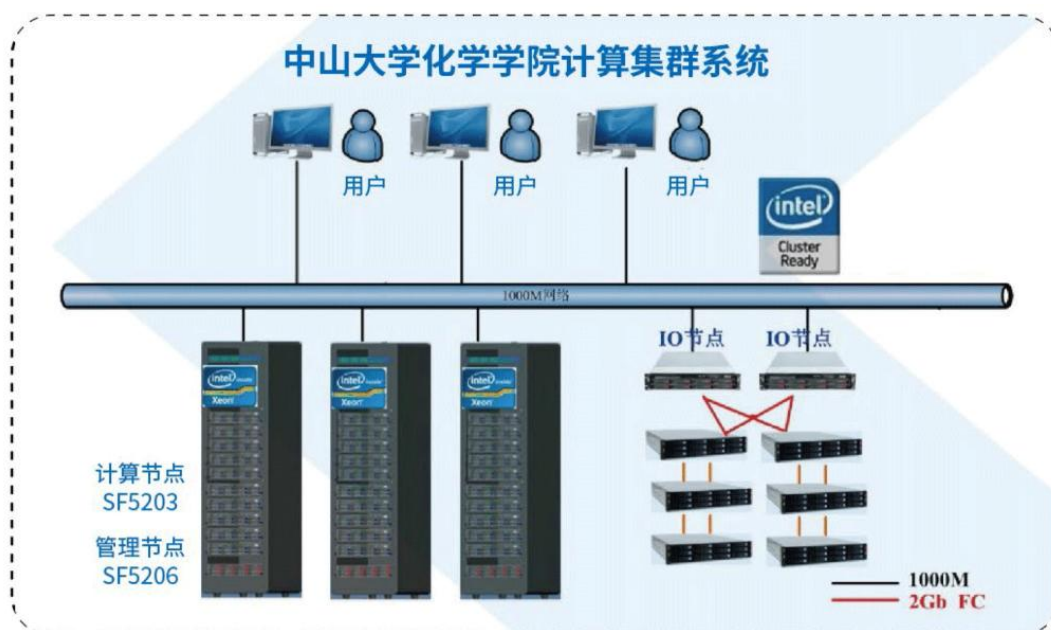


图 3-1 中山大学化学学院解决方案

4 客户效益



稳定性高

依托算盘 SG-HW3330 高性能 GPU 服务器和 SG-HW3550 高性能四路服务器的澎湃的算力以及 SG-KW3560 训练服务器, 助推中山大学科学研究工作加速, 奠定了坚实的算力基础, 为学院科研工作提供了极大的便利。