

平台资源配置和预安装应用（计算）软件资源

表 1: 平台资源配置

硬件类型	计算类型	集群节点配置			备注
		CPU	GPU	内存	
通用 CPU	Intel 6458Q	64 核	0	256G	计算网络采用 Infiniband HDR 200G 高速互联。
胖节点 CPU	Intel 8268	192 核	0	2048G	
国产 CPU	Hygon 7380	64 核	0	512G	
A800GPU	NIVDIA A800	36 核	4 卡	1024G	
	NIVDIA A800	64 核	8 卡	512G	
MI210GPU	AMD Instinct MI 210	64 核	8 卡	512G	
V100GPU	NIVDIA V100	32 核	4 卡	192G	
国产 DCU	Hygon DCU Z100	64 核	8 卡	512G	

表 2: 平台系统软件资源

集群	Hpckapok1	Hpckapok2
操作系统	Rocky8.6、Redhat8.6	Centos7.9、Centos8.4
作业调度	Slurm 22.05.10	Slurm 20.11.8
编译器	gcc, intel oneapi	gcc, intel oneapi
并行环境	Intel MPI、OpenMPI、Mpich等并行环境	Intel MPI、OpenMPI、Mpich等并行环境
GPU驱动	520.61.07	545.23.06
GPU环境	CUDA（10.2，11.3，11.8）、cuDNN	CUDA（12.3）、cuDNN

表3: 平台预安装应用（计算）软件资源

序号	类型	软件名称
1	建模、仿真类软件	Aimsun Next、Anylogic、ASPEN、Cadence、COMSOL、cruise、Crystal Ball、CST Microwave Studio、cuda、CYMCAP、Endurica、ESI CFD Advanced、pscad、psim、psse、Discovery Studio、EDEM、Isight、Keysight ADS
2	计算类软件	MATLAB、Materials Studio、LAMMPS、Mathematica、Molcas、Molpro、NAMD、powerworld、CYMCAP、Gaussian、GROMACS、VASP、Schrodinger_Suites

3	设计分析类软件	ACIS、MAYA、SolidWorks、Zbrush、Mari、Moldex3d、AutoPIPE
4	流体力学模拟分析软件	ANSYS、Metacomp CFD++、MPI
5	有限元分析软件	Abaqus、ANSYS、Fe-safe、Tosca
6	人工智能类软件	Tensorflow、Python、pytorch、paddlepaddle、AlphaFold2
7	基因分析类软件	Megahit、Soap、SPAdes
8	环境/气候模式分析软件	WRF