创新IT架构 助力高校科研

哈佛大学化学与化学生物学系选择思科 InfiniBand 和 MDS SAN 解决方案实现高性能计算

项目简介

- **客户名称：**哈佛大学（化学与化学生物学系）
- **所属行业：**教育

面临挑战

- 创建一个高性能服务器阵列，利用共享I/O池和存储资源为研究集群计算提供高吞吐量支持。
- 支持在本科和研究生段的化学课程中使用高级计算方法。
- 提供一种经济高效的方法，以便基于投资，最大限度地提高性价比，并提供针对科学计算应用的兼容性。

网络解决方案

- 使用Cisco Catalyst、Cisco InfiniBand 和 Cisco MDS Multilayer SAN交换机构建一个统一HPC阵列来支持集群计算、共享存储和对集中资源的高度可访问性，是对化学“大规模研究”的更进一步体现。

带来价值

- 与管线通道基础设施相比，集群使性能提高了近50%。
- 比一般专有系统性能更高，容量大，可适应增长需要。
- 可以实现IT设施提速，与研究进展保持同步。
- HPC解决方案可满足当前需求并用作未来计算的一个模板。

面临挑战

哈佛大学化学与化学生物学系是哈佛大学文理学院的化学和化学生物研究中心，拥有大量的高性能计算基础设施，用以支持教学和研究。该系的 IT 环境是一个采用了不同种类供应商产品和技术的混合体，其大量的基础设施都是基于思科产品，包括高性能计算（HPC）阵列。

该系用于授课的软件应用包括Q-Chem和WebMO：Q-Chem是一个全面的量子化学分子建模应用软件，并入了很多针对分子轨函数及关联属性的半实验式和从头计算方法；WebMO是一个计算化学软件包，它的特点是包含多种强大的增强功能，这些功能适合重要的教育、商业和研究级用户。

该系提供的IT资源不同，在化学中用到的计算方法可能也不同，原因在于这二者是相关联的。有些计算过程通常为CPU密集型计算，例如使用从头计算方法的分子轨函数计算，这些计算往往使用大量存储，而分子动态模拟往往会挑战集群互联性和系统内存的极限。为了承载这些应用，在此HPC阵列周围构建了一个新的集群，用于一次应对20到50人的班级或一到两个学院。计算设备既用于研究，也用于教学，参与学院主持的独立研究项目的所有学生都有权使用这些工具。

化学与化学生物学系信息技术副主任兼该项目的项目经理Gerald Lotto博士表示，在实施该集群之前，系里遇到过很多问题，其中教授往往必须提前数月制定访问计划以及进行时间选择，以支持课程作业和研究。如果尝试使用共享集群资源进行教学，鉴于班级指定的时间限制，往往会有很多学生同时访问系统，因此存在三重业务挑战：

1. 创建一个高性能服务器阵列，利用共享I/O池和存储资源来为研究集群计算提供高吞吐量支持。
2. 支持本科和研究生阶段化学课程使用高级计算方法。
3. 提供一种经济高效的方法，以便基于投资最大限度地提高性价比，并提供针对科学计算应用的兼容性。

网络解决方案

Lotto博士与思科和IBM工程师进行了面谈，并测试了利用思科Infiniband阵列的高性能共享磁盘文件系统设计。根据Lotto博士的研究结果，最终化学与化学生物学系决定设计并实施该集群，将它部署在一个使用Cisco Catalyst、Cisco InfiniBand和Cisco MDS Multilayer SAN交换机的统一HPC阵列周围，用以支持集群计算、共享存储和对集中资源的高度可访问性，这是对化学"大规模研究"的更进一步体现。

带来价值

此新集群解决方案通过使用Cisco SFS 3012 InfiniBand Multifabric服务器交换机和MDS 9216i Multilayer SAN交换机，可以同时处理学生和教师负载，与光纤通道基础设施相比，集群性能提高了将近50%。

新基础设施适合该系的计算工作量需求，实际上在升级文件系统后，之前遇到的带宽和容量问题也都不存在了。

产品列表

思科应用程序和存储网络服务：

- Cisco SFS 3012 InfiniBand Multifabric Server 交换机
- Cisco MDS 9216i Multilayer SAN 交换机

InfiniBand提供了众多可能的配置。化学系在此新基础设施的帮助下，可以利用一个通过订购获得的阵列进行多种应用或填补多项空白，预期会利用此HPC阵列进行更多富有挑战性的应用。

了解更多信息

了解更多关于思科InfiniBand和MDS Multilayer交换机解决方案信息，请访问：http://www.cisco.com.

北京
北京市朝阳区建国门外大街 2 号北京银泰中心银泰写字楼 C 座 7-12 层
邮编：100022
电话：(8610) 85155000
传真：(8610) 85155960

上海
上海市长宁区红宝石路 500 号东银中心 A 栋 21-25 层
邮编：201103
电话：(8621) 22014000
传真：(8621) 22014999

广州
广州市天河区林和西路 161 号中泰国际广场 A 塔 34 层
邮编：510620
电话：(8620) 85193000
传真：(8620) 85193008

成都
成都市滨江东路 9 号 B 座香格里拉中心办公楼 12 层
邮编：610021
电话：(8628) 86961000
传真：(8628) 86961003

如需了解思科公司的更多信息，请浏览 http://www.cisco.com.cn

思科系统（中国）网络技术有限公司版权所有。

2010©思科系统公司版权所有。该版权和/或其它所有权利均由思科系统公司拥有并保留。Cisco, Cisco IOS, Cisco IOS 标识，Cisco Systems, Cisco Systems 标识，Cisco Systems Cisco Press 标识等均为思科系统公司或其在美国和其他国家的附属机构的注册商标。这份文档中所提到的所有其它品牌、名称或商标均为其各自所有人的财产。合作伙伴一词的使用并不意味着在思科和任何其他公司之间存在合伙经营的关系。