

利用 GPU 加速国内基础科学的研究

背景

中国科学院理论物理研究所成立于 1978 年，主要从事物理学基础领域的研究。理论物理所是中国科学院首批向国内外开放的研究所，也是中国科学院知识创新工程首批十二个试点单位之一，作为首批接受国际专家现场评估的四个研究所之一，2004 年 11 月国际现场评估专家认为“理论物理研究所是具有国际竞争力的研究所”，其中某些特别领域的研究与世界上最好的研究所与大学是有竞争性的，该所在中国引领了“未开展的若干研究领域，如超弦理论、计算生物物理、以及计算凝聚态物理”等。2006 年被美国 Kavli 基金会选中，成立了中国科学院卡弗里理论物理研究所，成为 16 个国际知名 Kavli 研究所成员之一。2011 年“理论物理国家重点实验室”正式筹建，并在 2013 年 9 月通过了科技部组织的建设验收。

理论物理研究所学科领域涉及物质起源及其基本组元、宇宙起源及其演化、生命起源及进化、物质结构及其量子相等。结合中国科学院“创新 2020”的实施，理论物理所争取在①暗物质和暗能量本质及新物理理论的研究②生命过程启发的信息处理和能量转换的物理问题研究③新奇物态的微观机制和相关量子场论问题研究三个方面取得重要突破，同时在粒子天体宇宙学与早期宇宙演化、统计物理及其交叉学科、计算物理学和数值实验模拟等领域开展研究和探索，积极培养青年人才，形成学科引领作用。

挑战

随着高性能计算技术和计算方法的飞速发展，数值分析和计算模拟成为与理论、实验相辅相成的第三种研究方式，作为理论物理研究中重要的研究方法已经发展成专门的学科“计算物理”。为了满足理论物理重大科学问题如宇宙起源、物质结构及相互作用、生命现象等研究中的计算模拟和海量实验数据分析需求，需要大规模的高性能并行计算单元的支持，传统的基于 CPU 集群的解决方案因为系统硬件的限制和算法上的局限，无法满足相关研究领域的数值计算需求，而基于 GPU 加速卡的并行计算平台的出现为解决此类问题带来了机遇。

解决方案

为了更好地服务和支撑科研活动，面向研究所“一三五”规划和中科院“创新 2020”科研目标，理论物理所建设了“计算模拟和数值实验及应用平台”。该计算平台选用高性能刀片系统和 GPU 异构加速节点共同组成，面向理论物理研究的中小规模的探索性、原创性研究。该平台在 2013 年、2014 年分期购置了 76 个配置了 GPU 加速卡的异构计算节点，系统配置 144 块英伟达 K20 GPU 卡，建成后总的 GPU 加速卡的理论峰值 262Tflops，实测峰值 203 Tflops。

针对科研人员的实际需求，系统安装了不同的 CUDA 版本并更新了 GPU 驱动，借助于多卡之间 GPU Direct，从而降低了数据传输的时延。经过测试，GPU 集群中单节点配置 2 块 K20 卡的 Linpack 单节点的并行效率为 81.3%。整机 40 节点的并行效率为 73.8%。系统建成后明显缓解了研究所对分子动力学模拟、格点量子色动力学模拟等计算密集型研究的计算需求，基本满足了研究所科研人员开展探索性研究和相关程序调试开发的需求。GPU 异构节点的建成，丰富了研究所并行计算的软硬件环境，推动了科研人员对异构计算、并行加速等方法在理论物理中应用，为研究所的科研工作 and 人才培养提供了基本的条件保障作用。

应用分析

我们对常用并行软件如 Gromacs、Namd、Ultra-Mat 等进行了 GPU 加速测试和调优。经测试发现，Gromacs 应用测试单卡对单 CPU 核心的加速比为 26.91 倍，Namd 应用测试加速性能正常，单卡对单 CPU 核心的加速比为 22.17 倍。在对不同应用测试过程中发现，如果算例计算过程存在大量数据交换时，数据通讯的压力将随着计算规模和节点数增加而快速增加，从而引起并行效率不高。

对 Gromacs 进行测试时发现，涉及中程静电力 PME 的计算过程中，CPU 和 GPU 被用来计算不同的过程，因而 CPU 和 GPU 之间资源的分配也会影响到程序的并行效率。在我们使用的算例中，CPU 与 GPU 的计算比例接近 1 时程序的并行效率较高。同时，我们测试了线程并行的效率，以考察充分使用 CPU 资源的情况下不同线程数对应用并行效率的影响。我们发现随着线程数的增加计算时间逐步降低，但线程数增加到某一值（我们的算例中是 4）时，计算时间反而随着线程数增加而上升。可见线程并行可以在 GPU 加速过程中充分利用 CPU 的计算资源，但如果引入过多的线程反而会引起 CPU 资源紧张从而影响程序并行性能。

在对 Ultra-Mat 的实际测试过程中发现，使用 64 个 K20 的 GPU 就能够达到 17s 每步分子动力学的计算时间（这是目前材料计算中使用 CPU 代码不能够达到的计算速度，即使采用商业软件也需要 1-2 分钟才能完成一步分子动力学的计算），GPU 的使用大大加速了相关算例的计算过程。