

GPU 加速大规模和高性能科学计算应用

背景

在信息化时代，基础科学的研究方法也随之进步，计算成为基础科学研究必不可少的重要工具。世界科研强国也争相建造高性能计算机来满足基础科学领域的计算需求。基础科学研究是现代科技的基石，奠定了整个人类科技发展的稳固根基，因此，也是科技实力的体现，从根本上影响着技术发展。

以核物理研究为例，在用高速重离子作用于原子核、原子、分子、固体晶格等，从而研究它们的结构及规律的核物理学分支是现代物理研究的热点。离子加速器为其研究的基本设备之一。主要研究深度非弹性散射；用重离子合成新核素，发现新的超重元素；寻找新的裂变元素，开辟新能源。在束箔光谱学、天体物理学、固体物理学及医学等领域也有很有希望的应用前景。在具体的研究方法上，计算已经成为核物理研究的重要手段，以计算结果指导实验，以实验结果修正计算方案，成为一个良性循环的科学研究方案。从中可以窥探到计算对基础科学领域研究的重要性和必要性。

挑战

自然科学抽象成的计算问题，不失一般性是求解各种类型的数学方程组，计算目的就是寻找这些方程组的数值解或者近似数值解。科学计算的过程主要包括建立数学模型、建立求解的计算方法和高性能计算机求解方程。

高性能计算是为了适应大规模基础科学研究而发展起来的一种计算方案，可以提供超乎想象的计算能力，为基础科学研究提供计算动力。结合基础科学研究，目前高性能计算的主要内容有：

1. 高性能计算机体系结构包括处理器（包括 CPU 和 GPGPU）研究和系统研究。主要是计算能力强大的处理器结构和计算系统架构，包含处理器微体系结构模拟、大规模（E 级）计算系统体系结构，特别是异构计算条件下的 GPU 混合结构，通过体系结构研究，从规模上为基础科学研究提供计算能力。
2. 降低 GPU 编程难度，实现 GPU 资源的有效利用，面向通用计算的 GPU 并行算法、显存访问优化、主机通信优化等程序优化方法。
3. 超级计算已经成为继理论研究和实验研究之后的第三种科学研究方法，为把信息和数据变成知识，计算将起到不可替代的重要作用。当前科学计算正在向大规模和高性能发展，

4. 高效的计算方法与发展高性能的计算机同等重要，求解由实际基础科学研究而得到的复杂的偏微分方程，不仅计算规模大，更由于非线性、多尺度、长时间、不适定、多区域、高病态等特点使计算格外困难，现有高性能计算算法和体系结构远不能满足需求。

方案

目前的科学计算主要是产生数据的过程，即通过输入模型模拟实际科学问题，然后通过迭代过程模拟科学实验的过程，期间主要依赖于计算机的浮点运算能力。在计算过程中，计算精度是非常重要的概念，单精度和双精度数据类型最早是为了科学计算而产生的，它能够给科学计算提供足够高的精度，来存储对于精度要求比较高的数值。

在传统的数值模拟计算中，一般应用双精度计算能力，针对此用户，双精度能力见长的 NVIDIA Tesla P100、Tesla K80 等成为首选，可以为用户提供强大双精度计算能力，保证在反复迭代后数据精度满足计算需求。

在某些特殊领域，如地震资料处理、图像处理等应用中，单精度可以满足计算需求，用户进而追求单位计算能力，则 NVIDIA Tesla K80、Tesla M40 等产品成为首选。

曙光解决方案团队的工程师，会针对用户的不同应用，具体分析分子动力学、计算化学、材料科学、仿真计算、数字渲染、流体计算等具体应用的特点，向用户推荐不同的 GPU 加速产品，满足用户需求。

影响

在中科院重离子研究团队，曙光公司为用户提供了 8 颗 P100 的 DGX-1 实验方案。在前期测试过程中，利用 DGX-1 中最新的 P100 加速器，用户程序有 70% 以上的效率提升，大大超出用户期许。项目后期会全部采用 NVIDIA P100 GPU 卡，求解重离子研究遇到的科学难题。

曙光公司一直秉承“计算决定未来”的理念，借助于 NVIDIA GPU 产品，为中国基础科学领域的计算用户提供一体化的高性能计算方案。基础科学关系着国计民生，每一项基础科学领域的进步都离不开超级计算的身影，曙光用 GPU 为基础科学的进步保驾护航。