

## GPU 助力超级计算机 $\pi$

--上海交通大学 CUDA 卓越中心

### 背景

近年来，伴随着越来越多的生命科学及物理学家们将数值计算和数值模拟作为其重要的科学研究和手段，高校中的高性能计算需求与日俱增。上海交通大学作为传统理工科强校，校内对计算资源的需求尤其迫切，传统的单纯由CPU构建的超级计算机，无论在可支持的计算规模还是在计算效率上都无法满足这么巨大的需求。相较于CPU，GPU具有支持高并发并行计算的特点。以分子动力学模拟为例，许多应用在GPU上能获得更高的性能，从而缩短模拟周期以及扩大模拟规模，这都将极大推动科研人员的研究进展。

### 挑战

上海交通大学对计算能力的需求极其巨大，但是大部分用户还习惯于使用CPU进行计算，这为设计新的超级计算机带来了挑战。在如此大的需求下，如果仅使用CPU搭建超级计算机，其资金预算以及相关的能耗都将面临巨大的挑战。如何在有限的预算内，尽可能地搭建性能强大的超级计算机以满足用户的需求，是中心当时面临的巨大挑战。

### 方案

上海交大校内对计算能力需求巨大且相当大部分可以在GPU上进行计算。生命科学、材料科学及生物医学等几个重点学科的相关应用对GPU支持良好。基于CUDA的AMBER、LAMMPS和GROMACS等分子动力学模拟软件在GPU上已有较成熟的实现，并已

获得用户的认可。据此而设计的超级计算机  $\pi$ ，峰值性能达到263TFLOPS，性能位居国内高校第一，其过半的计算能力来源于100块NVIDIA Tesla K20 GPU和10块K40 GPU。

在中心的积极推广与支持下，已有相当数量用户将运行 GPU 上的 AMBER、LAMMPS 和 GROMACS 作为日常科研用的软件。目前  $\pi$  集群上 GPU 的利用率稳定在 70%~80%之间。此外，中心还积极与  $\pi$  集群最大的用户之一——物理与天文系的科研团队合作，进行代码的 GPU 移植，以期将更多的 CPU 计算量转移至 GPU。未来  $\pi$  集群的扩容也将以 GPU 为主，力求以有限的预算获得超高的计算能力。

### 影响

上海交通大学于 2011 年成为全球第 16 个 CUDA 卓越中心，并于 2014 年获得 CUDA 卓越中心年度成就奖提名。其拥有的超级计算机  $\pi$  位列国内高校第一，是唯一配置了超过 100 块 Kepler K20 的超级计算机，也是国内少有的 GPU 利用率高于 CPU 利用率的超级计算机。上海交通大学 CUDA 卓越中心与 NVIDIA 的长期紧密的合作，为推动 GPU 在国内高性能计算领域的实用起到了标杆性作用。