

高性能计算 (HPC) 应用程序对 GPU 计算的支持

Michael Feldman

白皮书

2015 年 10 月

市场动态

自 2007 年 GPU 计算被引入到高性能计算 (HPC) 用户中以来, 这项技术一直发展迅猛。对于计算 GPU 的需求主要由追求更高性能与节能性的 HPC 从业者所推动。自 HPC 问世以来, 更高的性能一直是推动这一市场发展的重要力量, 而更高的节能性是最近才出现的需求, 是登纳德缩放比例定律 (Dennard Scaling) 失效的结果。GPU 由于具备针对吞吐量而优化的设计和可观的浮点计算能力, 因此与 CPU 相比能够在并行软件上提供更高的性能和每瓦特性能。因此, GPU 现已被近乎半数的新部署的 HPC 系统所采用。¹

GPU 在高性能计算领域中得到了越来越多的运用, 这种增长一直主要由 NVIDIA 推动。NVIDIA 一直大力投入以打造强大的软件生态系统来支持其硬件。具体而言, 该公司开发了一系列并行编程 API、库以及相关的软件开发工具来在其 CUDA (计算统一设备架构) GPU 平台上支持应用开发。这项工作以基于 CUDA 的软件工具和中间件为核心, 而且还涵盖了对 OpenCL 和 OpenACC 的支持。OpenCL 是一种用于在各种处理器架构上开发并行应用程序的开放标准框架, OpenACC 是用于高级语言的一系列标准编译器指令, 既可以用于 x86 CPU 也可以用于加速器。

NVIDIA 还在世界各地建立了 20 多家 GPU 卓越中心以及一个由诸多 GPU 研究与教育中心构成的全球网络, 该网络包含数百家学术机构。这些工作不但加速了通用 GPU 编程软件工具的开发, 而且还加速了开发者将开源 HPC 程序移植到 GPU 上来。该公司还携手诸多独立软件供应商以帮助加速商业性 HPC 应用程序与库的开发。现在, 数以百计的这类程序可供人们使用, 这些程序带来的速度提升从 10% 或 20% 到 1,000 倍以上不等。对最常见的加速型程序而言, 性能提升通常为 2 倍 - 10 倍。

我们通过研究发现, 大量的常用 HPC 应用程序目前均已融入 GPU 加速。最新的 Intersect360 Research 现场普查数据显示, 在 HPC 用户所提及的 50 款最流行的应用程序软件包中, 有 34 款提供 GPU 支持。在前 10 名中有 9 款支持 GPU。分布情况已总结在表 1 当中。

¹ HPC 用户现场普查: 处理器。Intersect360 Research, 2015 年 10 月

表 1. GPU 加速的应用程序

软件供应商 - 软件包名称	提及次数	排名	GPU 加速
Gaussian - Gaussian	118	1	开发之中
ANSYS - Fluent	114	2	已加速
Gromacs.org - GROMACS	93	3	已加速
Dassault Systemes - SIMULIA Abaqus	91	4	已加速
伊利诺伊大学厄本那香槟分校 - NAMD	75	5	已加速
美国国家大气研究中心 - WRF	72	6	已加速
维也纳大学 - VASP	68	7	已加速*
OpenFoam 基金会 - OpenFOAM	54	8	已加速
LSTC - LS-DYNA	53	9	已加速
AmberMD.org - AMBER	50	10	已加速
美国国家生物技术信息中心 - BLAST	46	11	不支持
太平洋西北国家实验室 - NWChem	35	12	已加速
爱荷华州立大学 - GAMESS	30	13	开发之中
Quantum-espresso.org - Quantum ESPRESSO	30	14	已加速
桑迪亚国家实验室 - LAMMPS	28	15	已加速
ANSYS - CFX	17	16	不支持
Exelis - IDL	16	17	已加速
MSC Software - NASTRAN	16	18	已加速
CD-adapco - Star-CD	15	19	不支持
Schrodinger - Schrodinger	14	20	已加速
美国国家大气研究中心 - CCSM	14	21	不支持
COMSOL - COMSOL	14	22	不支持
ANSYS - ANSYS Mechanical	12	23	已加速
Charmm.org - CHARMM	11	24	已加速
CD-adapco - Star-CCM+	10	25	不支持
CP2K.org - CP2k	10	26	已加速
Thermo Scientific - Sequest	9	27	不支持
Kitware - ParaView	9	28	已加速
USQCD.org - MILC	8	29	已加速
欧洲核子研究组织 - CMSSW	8	30	已加速
Scripps Research Institute - AutoDock	8	31	不支持
Open Source - MrBayes	8	32	不支持
Q-Chem - Q-Chem	8	33	已加速
劳伦斯利弗莫尔国家实验室 - VisIT	8	34	已加速
Terraspark - Insight Earth	7	35	已加速
Open Source - Galaxy	7	36	不支持
Illumina - Casava	7	37	不支持
CMOP - SELFE	7	38	不支持
Tecplot, Inc. - Tecplot	6	39	已加速
SCM - ADF	6	40	已加速
USQCD.org - CHROMA	6	41	已加速
Dassault Systemes - Accelrys Materials Studio	6	42	不支持
Abinit.org - ABINIT	6	43	已加速
美国国家航空航天管理局 - Overflow	6	44	不支持
CIG - Specfem3d	6	45	已加速
Kitware - VTK	6	46	已加速
Metacomp - CFD++	6	47	不支持
Open Source - Nbody	6	48	已加速
Altair Engineering - HyperWorks	6	49	已加速
马萨诸塞大学 - FVCOM	5	50	不支持

* GPU 版本的 VASP 已完成 Beta 测试；预计很快即将正式发布

目录

市场动态	1
应用	4
化学研究	4
流体动力学分析	5
结构分析	5
环境建模	6
地球物理学	7
可视化/图像分析	7
物理学	8
生物科学	8
分析	9

应用

高性能计算涵盖了科技界与商界中的一系列应用领域。为便于撰写这篇报告，这些应用领域被划分为多个主要应用领域以反映具体的用户群体。GPU 加速的应用程序已经出现在这些主要领域当中，其中包括化学研究、流体动力学分析、结构分析、环境建模、地球物理学、可视化/图像处理以及物理学。本白皮书接下来的部分将探讨这些加速型程序如何进入这些应用领域以及这些程序对各自用户群体而言的意义。

化学研究

人们利用 HPC 系统来开展化学研究以了解化合物和化学过程，根据这种理解来设计新物质，整理这类信息以供未来研究与产品开发之用。这一细分市场包括计算化学、分子建模等应用程序以及用于分析质谱数据的软件。

在 Intersect360 Research 所做的 HPC 现场普查所提到的应用中，大约五分之一的应用属于化学研究类。推动这种软件大行其道的因素是人们对生物分子研究非常感兴趣、热衷于在诸多经济领域中为工业用途而开发新化合物与材料。例如以更好的溶剂制成的产品、更高的电池性能、先进的建筑材料以及更高效的燃油都是这些软件包所能够衍生的商业性应用实例。

如表 2 所示，GPU 对顶级化学研究程序的支持根深蒂固，这在很大程度上要归功于开源程序在这一应用领域中占据优势地位，也要归功于开发者社区的积极开发。因此，在前 14 款应用中有 11 款目前已融入 GPU 加速功能，清单中有 2 款应用正在开发之中。

表 2. 化学研究：GPU 加速的应用程序

软件供应商 - 软件包名称	提及次数	排名	GPU 加速
Gaussian - Gaussian	118	1	开发之中
Gromacs.org - GROMACS	93	3	已加速
伊利诺伊大学厄本那香槟分校 - NAMD	75	5	已加速
维也纳大学 - VASP	68	7	已加速*
AmberMD.org - AMBER	50	10	已加速
太平洋西北国家实验室 - NWChem	35	12	已加速
爱荷华州立大学 - GAMESS	30	13	开发之中
桑迪亚国家实验室 - LAMMPS	28	15	已加速
Schrodinger - Schrodinger	14	20	已加速
Charmm.org - CHARMM	11	24	已加速
CP2K.org - CP2k	10	26	已加速
Q-Chem - Q-Chem	8	33	已加速
SCM - ADF	6	40	已加速
Dassault Systemes - Accelrys Materials Studio	6	42	不支持

* GPU 版本的 VASP 已完成 Beta 测试；预计很快即将正式发布

例如，GROMACS 这款流行的开源分子动力学程序主要旨在模拟生物分子，当基于 CUDA 的 GPU 加速发挥作用时，该程序一般可实现 3-5 倍速度提升。²

² http://www.gromacs.org/GPU_acceleration

NAMD 是一款分子动力学软件包，它对于病毒和核糖体等大型结构的建模来说尤为实用。其 GPU 加速版本被用于揭示 HIV-1 的衣壳结构。AMBER 是另一款流行的分子建模程序，该程序有一个被数百家实验室广泛采用的 CUDA 版本。³

流体动力学分析

基于计算流体动力学 (CFD) 的解决方案被广泛用于各种应用：从飞机设计到内燃机设计、建筑物周围气流分析、人造心脏泵设计以及细胞内的蛋白质转运建模等等。与结构分析类似，这一领域主要被商业性程序占据，然而有一些程序最初源自美国国家航空航天管理局的开发成果以及开源成果。作为该类型中的顶级应用程序，OpenFOAM 的出现表明，越来越多地使用开源程序已成为发展趋势。

如表 3 所示，ANSYS Fluent 和 OpenFOAM 这两款最流行的 CFD 应用程序现已包含 GPU 支持。ANSYS Fluent 是排名顶级的商业性程序，是总体上第二流行的 HPC 应用，当调用针对 Fluent 的 NVIDIA GPU 加速库时可令性能与生产率大幅提升。例如，在一级方程式赛车模拟中添加 GPU 加速能够令用时缩短 2.1 倍。⁴ 与此类似，领先的开源 CFD 软件包 OpenFOAM 具备 1 个 CUDA GPU 加速的线性解算器，该解算器能够在应用程序中带来 2 倍或更大的性能提升。⁵ 这表明，CFD 研究人员利用 GPU 版本的 Navier-Stokes 模型和 Lattice Boltzman 方法能够实现类似的速度提升。⁶

表 3. GPU 加速的应用程序：流体动力学分析

软件供应商 - 软件包名称	提及次数	排名	GPU 加速
ANSYS - Fluent	114	2	已加速
OpenFoam 基金会 - OpenFOAM	54	8	已加速
ANSYS - CFX	17	16	不支持
CD-adapco - Star-CD	15	19	不支持
CD-adapco - Star-CCM+	10	25	不支持
Tecplot, Inc. - Tecplot	6	39	已加速
美国国家航空航天管理局 - Overflow	6	44	不支持
Metacomp - CFD++	6	47	不支持

结构分析

结构分析这一类别包括用于分析各种结构的应用程序，其中包括显性和隐性有限元分析 (FEA)，FEA 是用于工程分析的一种重要计算工具。它主要用于确定结构上的负荷和应力。

表 4 列出了已融入 GPU 支持的顶级结构分析软件包，在本例中，前 6 款软件包中有 5 款支持 GPU，其中包括这一领域中 3 款最流行的软件包：Abaqus、LS-DYNA 以及 NASTRAN。

³ <http://ambermd.org/gpus/>

⁴ <http://www.ansys.com/staticassets/ANSYS/staticassets/resource/library/article/Accelerationg-ANSYS-Fluent-Simulations-with-NVIDIA-GPUs-AA-V9-I1.pdf>

⁵ <http://www.fluidyna.com/content/culises>

⁶ http://www.nvidia.com/object/computational_fluid_dynamics.html

表 4. GPU 加速的应用程序：结构分析

软件供应商 - 软件包名称	提及次数	排名	GPU 加速
Dassault Systemes - SIMULIA Abaqus	91	4	已加速
LSTC - LS-DYNA	53	9	已加速
MSC Software - NASTRAN	16	18	已加速
COMSOL - COMSOL	14	22	不支持
ANSYS - ANSYS Mechanical	12	23	已加速
Altair Engineering - HyperWorks	6	49	已加速

根据其开发商 Dassault Systemes 的资料显示，最流行的结构分析程序 Abaqus 利用其 GPU 加速的解算器可带来 1.3 - 1.45 倍速度提升。⁷ 至于 LS-DYNA，GPU 加速已经证明对特定类型的应用有用，尤其是对固体元素建模非常有用，它借助 2011 年的 NVIDIA Tesla 技术在这类应用中实现了 3 倍速度提升。⁸ NASTRAN 是一款流行的 FEA 程序，它在采用 2 颗 GPU 的 8 核 CPU 系统上带来了 1.4 - 2.0 倍速度提升；而且再一次采用了较为陈旧的 2012 年的 NVIDIA GPU 技术。⁹

环境建模

环境建模这一类别包括用于模拟天气、气候、空气质量以及海洋系统的应用程序。天气预报的潜在用途包括利用先进的恶劣天气预警来拯救生命与财产、预测野火、通过预测能源需求来管理电网、根据天气预报预测人们对当地超市产品的需求。气候建模研究可预测全球气候变化，水流建模可预测水的移动，环境建模所带来的影响现在变得显而易见。几乎所有这些程序均来自非商业性来源，其中大约四分之三为开源程序。

表 5 显示了最流行的环境建模软件包对 GPU 的支持情况。2 款流行的软件包已支持 GPU，其中包括应用最为广泛的天气研究与预报 (WRF) 软件包。美国国家海洋与大气管理局 (NOAA) 的研究显示，与在双路至强 “Ivy-Bridge” 平台上运行相比，WRF WSM5 微观物理学模型在单一 GPU (本例中为 NVIDIA Tesla K40) 上的运行性能提升了 2 倍。¹⁰

表 5. GPU 加速的应用程序：环境建模

软件供应商 - 软件包名称	提及次数	排名	GPU 加速
美国国家大气研究中心 - WRF	72	6	已加速
美国国家大气研究中心 - CCSM	14	21	不支持
Terraspark - Insight Earth	7	35	已加速
CMOP - SELFE	7	38	不支持
马萨诸塞大学 - FVCOM	5	50	不支持

⁷ <http://www.3ds.com/fileadmin/PRODUCTS/SIMULIA/PDF/rums/uk-rum-13-abaqus-613-isight-5.8.pdf>

⁸ http://www.dynalook.com/8th-european-ls-dyna-conference/session-6/Session6_Paper2.pdf

⁹ http://www.mscsoftware.com/Submitted-Content/Resources/nvidia_ps_ltr_w.pdf

¹⁰ <http://on-demand.gputechconf.com/supercomputing/2013/presentation/SC3133-CUDA-Weather-Research-Forecasting-Model.pdf>

地球物理学

地球物理学这一类别包括用于了解和预测地球地震特性的应用程序。地球物理学领域中的主要子分类为地震分析和储层建模等等。地震分析被用于了解和预测地震活动，储层建模则被用于石油天然气勘探和描绘储层特性。

表 6 显示了支持 GPU 加速的顶级地球物理学应用程序。支持 GPU 的地球物理学软件包并没有占据主流，表中所列的两款软件包是在最新 Intersect360 Research 调查中跻身 50 强应用榜单、被提及次数足够多的仅有的两款软件包。

表 6. GPU 加速的应用程序：地球物理学

软件供应商 - 软件包名称	提及次数	排名	GPU 加速
Terraspark - Insight Earth	7	35	已加速
CIG - Specfem3d	6	45	已加速

地球科学公司 CGG 的数据显示，与一台 8 核 CPU 系统相比，单一 NVIDIA GPU 将使 Terraspark Insight Earth 地震解释程序的运行速度提升 50 倍，如果添加更多显卡，性能提升幅度将会更大。

¹¹ 另一款运行于双路 16 核 x86 节点系统的流行地震程序 Specfem3d 在添加 1 颗 NVIDIA GPU 的情况下最高可实现 3.8 倍性能提升。

可视化/图像分析

可视化对大多数 HPC 工作流程来说至关重要，它让研究人员和工程师能够以图形的形式看到其模拟结果。在最新的 Intersect360 Research 调查中，用户提到了大量的可视化软件包。当然，有 4 款可视化软件包成功跻身我们的 50 强 HPC 应用程序榜单。这些可视化软件大致可以均分为商业性应用程序和非商业性应用程序两类。

如表 7 所示，所有的顶级可视化软件包均支持 GPU 加速，这一点都不令人感到惊讶，因为图形处理器最初就是针对图像与视频处理而设计的。像素分析尤其适合 GPU 架构。

表 7. GPU 加速的应用程序：可视化/图像分析

软件供应商 - 软件包名称	提及次数	排名	GPU 加速
Exelis - IDL	16	17	已加速
Kitware - ParaView	9	28	已加速
LLNL - VisIT	8	34	已加速
Kitware - VTK	6	46	已加速

Exelis IDL 是最流行的商业性软件包，支持加速的 CUDA 版本软件具备额外的优化，可在需要时使大型影像的处理时间缩短 50 - 100 倍。¹² ParaView、VisIT 以及 VTK 等所有流行的开源可视化软件包也已包含 CUDA 支持。

¹¹ www.cgg.com/InsightEarth/

¹² <http://www.exelisvis.com/Home/NewsUpdates/TabId/170/ArtMid/735/ArticleID/13966/Using-GPUs-to-Accelerate-Orthorectification-Atmospheric-Correction-and-Transformations-for-Big-Data-Recorded.aspx>

物理学

物理学这一类别所包括的应用程序被用于模拟物质与能量行为所涉及的基本原理。从评估宇宙的宇宙模型到亚原子级物质的量子力学模拟，物理学应用程序的研究领域十分广泛。物理学家是 HPC 的首批用户，他们现在依然有着一些最苛刻的计算需求。如大家在研究领域中所预料的一样，这些软件包中的大多数由非商业性组织以开源程序的形式提供。表 8 显示了 GPU 加速在顶级物理学程序中的普及情形。

表 8. GPU 加速的应用程序：物理学

软件供应商 - 软件包名称	提及次数	排名	GPU 加速
Quantum-espresso.org - Quantum ESPRESSO	30	14	已加速
USQCD.org - MILC	8	29	已加速
欧洲核子研究组织 - CMSSW	8	30	已加速
USQCD.org - CHROMA	6	41	已加速
Abinit.org - ABINIT	6	43	已加速
Open Source - Nbody	6	48	已加速

Quantum ESPRESSO 是一款用于电子结构计算和纳米材料建模的开源程序，该程序一直支持 GPU 加速，与 8 核 CPU 相比可提供 4-8 倍速度提升。¹³ 另一款流行的开源物理学程序 CHROMA 在利用 GPU 加速时能够使模拟时间缩短 5 倍。¹⁴

生物科学

生物科学应用程序被用于揭示生命本质并帮助设计医学治疗方法。它们还被用于了解和加强农业生产。这一细分市场包括基因组学、蛋白质组学以及药物开发等应用程序。我们看到，这一细分市场中的许多应用程序由基因革命所推动，这场革命利用生物信息学软件来分析与细胞功能相关的基因功能。这类信息导致生物学、药理学以及生物化学/生物工程等应用程序的盛行。需要注意的是，许多被归为化学研究类的分子动力学程序也被应用于生物科学领域。

如表 9 所示，向 GPU 移植的做法并未在顶级生物科学程序中成为主流。然而在研究领域中，BLAST、AutoDock 以及 MyBayes 均有成功的 GPU 加速版本。它们尚未融入到软件供应商所推出的正式版本程序中。

¹³ http://www.quantum-espresso.org/wp-content/uploads/QE-dev-meeting-2013/heterogeneous_Spiga.pdf

¹⁴ <http://arxiv.org/pdf/1408.5925.pdf>

表 9. GPU 加速的应用程序：生物科学

软件供应商 - 软件包名称	提及次数	排名	GPU 加速
美国国家生物技术信息中心 - BLAST	46	11	不支持
Thermo Scientific - Sequest	9	27	不支持
Scripps Research Institute - AutoDock	8	31	不支持
Open Source - MrBayes	8	32	不支持
Open Source - Galaxy	7	36	不支持
Illumina - Casava	7	37	不支持

分析

各个应用领域中 GPU 加速的软件包数量表明，这一加速器技术的运用在 HPC 用户群体当中已经颇具规模。在几乎每一个领域中，都有一款或多款最常用的应用程序软件包现已支持 GPU 加速。更重要的是，我们最新的现场普查结果显示，HPC 用户正越来越多地运用 GPU，与之相呼应的是，GPU 的运用正在从测试评估阶段转入生产阶段。

在化学研究、物理学、结构分析以及可视化等特定领域中，GPU 加速几乎无处不在。在生物科学和环境建模等其它领域中，渗透过程依然在进行中。然而即便在环境建模这一类别中，也有瑞士国家超级计算中心最近宣布，该中心将在 GPU 上运行其正式的天气模型，这充分表明该技术能够在这一领域中取得成功。

如市场动态章节中所述，从试验到生产的转变归功于 NVIDIA 为生态系统提供的支持，也归功于本篇报告中其余部分所述的应用程序软件包的问世。此时此刻，我们相信，GPU 计算已经达到临界质量，这会促进 GPU 支持更广泛地融入到那些可利用 GPU 架构高度并行特点的应用程序当中。事实上，这一过程正在进行中。除了本文所列的 34 款顶级 GPU 应用程序以外，NVIDIA 还在其网站上公布了另外数百款应用程序。随着 GPU 计算用户群体不断增大并更加深入地利用 GPU 技术，我们预计各类应用程序对 GPU 的支持会继续保持增长。