

一篇文章入门HPC(高性能计算)

原创 www.cae-sim.com [多物理场仿真技术](#)



“如果你的仿真还没有受到硬件限制，说明你的仿真还没有入门”

对于仿真工程师来讲，最痛苦事情莫过于等待求解器计算。实际工程中稍微上规模的案例计算时间短则几小时，长则几天甚至更长。在这个过程中如果出现问题，还要找到原因排除问题重新计算(比如内存不够，可能造成程序退出，也可能和硬盘交换内存性能下降，再比如常见的网格质量差计算不收敛)。工程师都希望用最快的机器进行计算。

这也从某种程度上说明了为什么主流的仿真工具就那么几个：仿真的首要问题是稳定和精度，而这种稳定性和高精度只能通过长期的用户迭代和技术积累实现。

本文从硬件，软件以及开发三个方面来介绍仿真HPC

(High Performance Computing)

硬件

2020年一开始，COVID-19新型冠状病毒肆虐全球，夺走无数人的生命。加速药物和疫苗研发成为全球研究人员当务之急。而开发新药物和疫苗，依赖于海量数据的筛选计算，涉及到分子动力学的大规模计算和评估，这些计算无法短时间内在PC机上完成，只能依赖高并发，高共享的集群式HPC硬件。包括阿里云，腾讯云在内的国内厂商提供了开放式的云端硬件计算平台。

区别于一般的PC机器，仿真用HPC硬件重点在于处理计算海量数据，因此并不单单追求单核计算性能，而是包括共享内存，CPU调度，资源分配，网络吞吐，硬盘读写性能，数据存储等综合考量。

以我国神威·太湖之光为例，该超级计算机由40个运算机柜和8个网络机柜组成。每个运算机柜比家用的双门冰箱略大，4块由32块运算插件组成的超节点分布其中。每个插件由4个运算节点板组成，一个运算节点板又含2块“申威26010”高性能处理器。一台机柜就有1024块处理器，整台“神威·太湖之光”共有40960块处理器。每个单个处理器有260个核心，主板为双节点设计，每个CPU固化的板载内存为32GBDDR3-2133。

HPC硬件并不是简单的数字加法，对于用户而言，需要综合考虑各个因素，在评估经济性的前提下做出最佳选择。

软件

目前的HPC软件，主要是用来协调计算机硬件资源，包括CPU，内存，IO，集群等。以CPU为例，普通PC好的CPU只在几十核，资源调度以多进程，线程为主。服务器，集群则涉及到多台计算之间资源调度。而对于类似超算机器，核心可能有几百万，几千万，普通的资源调度算法本身可能也需要资源调度。

当一个有海量数据的任务交给HPC处理时，会遇到如下问题：该任务有多少比例可以分解单独分别执行，可单独执行的任务时间是否均匀，单个任务放在单独机器上内存是否足够，磁盘读写性能是否能同步，网络带宽是否会成为瓶颈等等，当所有问题放在一起考虑的时候，HPC就不可避免的成为一个系统工程。数据计算量越大，硬件越多，系统就越复杂。找到一个合适业务的HPC模式并不是容易的事，尤其是受限于硬件资源，很多HPC更多的依赖经验或者少考虑效率。所有这些操作需要好的软件来控制。

MPI (Message passing interface)，MPI是一个标准，用来定义数据交换标准，目前常用实现有两个：

OpenMPI

MPICH---全球十台超级计算机中有9台使用MPICH

针对HPC的软件研发

有限元计算中，稍大的模型自由度通常可以达到十万/百万。2004年，ANSYS求解出了自由度1亿的模型，2008年ANSYS 求解出了自由度为10亿的模型。千万单元自由度问题，任何一本有限元书籍上的实例代码，在普通PC机上都算不出来。针对大模型，传统的计算方法不再适用。

HPC可以加速计算，但不能解决所有算法带来的性能问题。以有限元方法为例，对于1亿自由度的问题，如果不使用稀疏矩阵而按照满秩矩阵传统方法求解，其算法复杂度和时间复杂度都是一亿的三次方，即使用”太湖之光”也要按小时来算，而且还没有考虑内存是否能装下所有数据。

HPC并不把单一的硬件性能作为评价指标，因此HPC的最大特点在于通过合理增加硬件数量，提升并行性。所以软件开发的目標就是：1. 对于算法本身降低计算资源；2. 尽可能将计算分解成独立的任务。

1. GPU开发

GPU 说简单就是利用显卡以加速计算，GPU是发展较快的一个方向。目前很多商业求解器都支持GPU加速，目前的做法是把逻辑性较强的业务放在CPU，而把纯运算部分放在GPU上，Nvidia公司提供了专门的GPU计算语言CUDA。主流的仿真软件诸如Marc, Nastran, Abaqus, ANSYS, LSDYNA, Fluent, StarCD, FEKO, Moldflow等等都支持GPU计算。

2. OpenMP

OpenMP是一个编译器指令和库函数的集合，主要是为共享式存储计算机上的并行程序设计使用。简单实用，可以快速上手。

3. OpenACC

OpenACC是一个可利用CPU/GPU 加速器编程标准 。OpenACC 类似于 OpenMP，通过简单的编译指令即可实现，但需要安装支持的编译器，目前貌似没有可用于商业开发的免费版本。

4. OpenCL

OpenCL是一种标准化，跨平台，基于C语言的并行计算API，简单讲OpenCL是一种可以实现跨平台，利用CPU/GPU的程序接口

随着硬件成本的不断下降以及云技术的不断成熟，许多云厂商将商业仿真软件安装在云端HPC服务器上，按照资源使用时间收费；有些提供专业软件，可以在本地进行建模，提交任务到远程HPC机器；还有些直接提供web端工具，将建模，仿真，计算数据等所有资源云端化。所有这些可以帮助用户避免购买昂贵的硬件，大幅降低仿真成本。

