

近 600 个应用程序通过 NVIDIA GPU 实现了提速

英伟达 NVIDIA 企业解决方案 • 2019-02-14 14:15 • 1088 次阅读

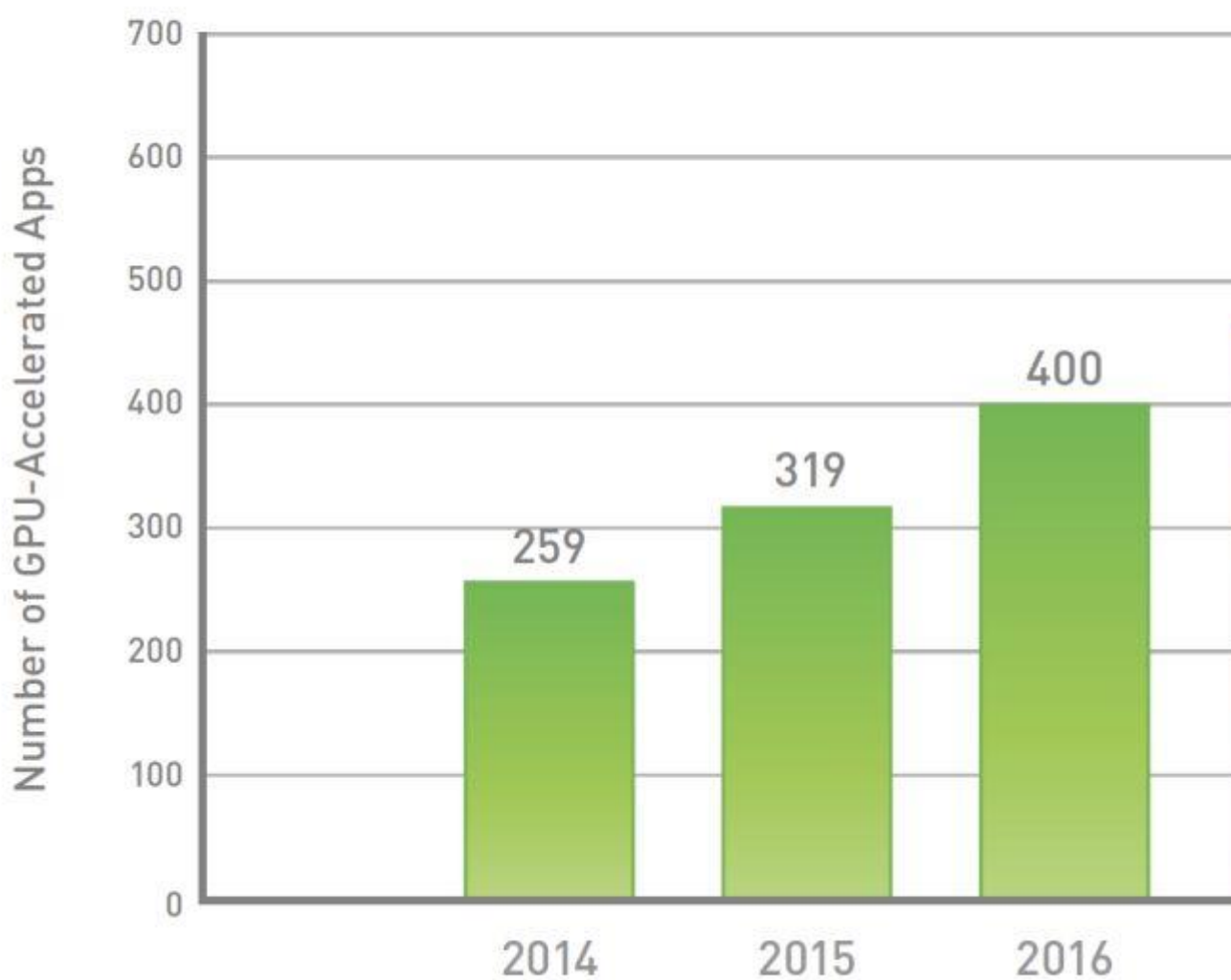


十几年前，还不曾有加速应用程序。而如今已有近 600 个应用程序通过 NVIDIA [GPU](#) 实现了提速。



这些应用程序涵盖了物理、生物科学、分子动力学、化学和天气预报等各个领域。其中包括全球最热门的 15 个高性能计算应用程序，也都是通过 GPU 实现加速的。去年，NVIDIA GPU 应用程序目录收录了 100 多个应用程序，接下来还会有更多的程序将被陆续添加到目录中。

Over 580 HPC Applications are GPU-Accelerated



Intersect 360 研究所的一份报告中收录了数据中心运行的各个关键应用程序。其中，排名前 15 的应用程序均由 GPU 加速，这些都是一系列杀手级的核心科学应用程序。其中包括：

[GROMACS](#)（化学）－ 分子动力学应用程序，旨在模拟包含了数百到数百万个粒子的系统的牛顿运动方程。

ANSYS（流体动力学分析）－ 模拟液体和气体与表面的相互作用。

Gaussian (化学) – 预测分子系统的能量、分子结构和[振动](#)频率。

VASP (化学) – 用于从头计算法量子力学分子动力学模拟。

NAMD (化学) – 大型生物分子系统的高性能模拟。

Simulia Abaqus (结构分析) – 用于结构力学的模拟和分析。

WRF (天气/环境建模) – 数值天气预报系统，专为大气研究和操作预测应用程序而设计。

OpenFOAM (流体动力学分析) – 通用型 CFD 软件的求解器库。

ANSYS (结构分析) – 对高频和高速[电子元件](#)中的 3D 全波电磁场进行建模。

LS-DYNA (结构分析) – 结构力学的模拟和分析工具。

BLAST (生物科学) – 应用最为广泛的生物信息学工具之一。

LAMMPS (化学) – 经典分子动力学程序包。

Amber (化学) – 专门针对生物分子系统模拟而开发的分子动力学应用程序。

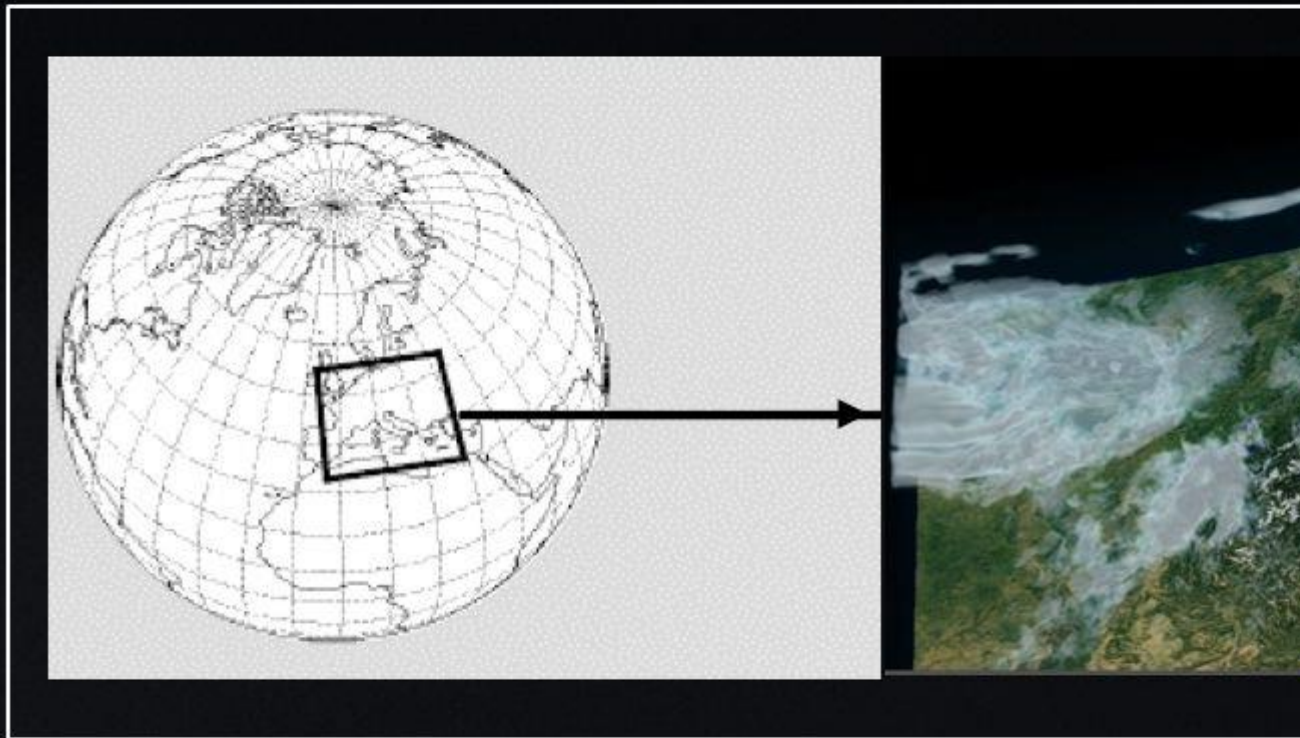
Quantum Espresso (化学) – 一套集成的[计算机](#)代码，用于电子结构计算和纳米级材料建模。

GAMESS (化学) – 用于模拟原子和分子电子结构的计算化学[套件](#)。

这些工具本身无法实现性能的递增性提升。但通过采用 NVIDIA GPU 的服务器，其性能通常可提高 10 倍或更多。并且，GPU 加速可以改善数据中心的经济效益。

预测天气

GPU Accelerated Weather App



COSMO
14x

WRF
9x

Speedup comparing one 2x Skylake vs 4xV100 Server



天气预报是一项远比其看起来更加困难的工作。天气预报是高性能计算领域的一个重要分支。准确可靠的天气预报不仅可以拯救生命，还有助于航空、能源和公用事业、保险、零售和其他行业做出经济决策。

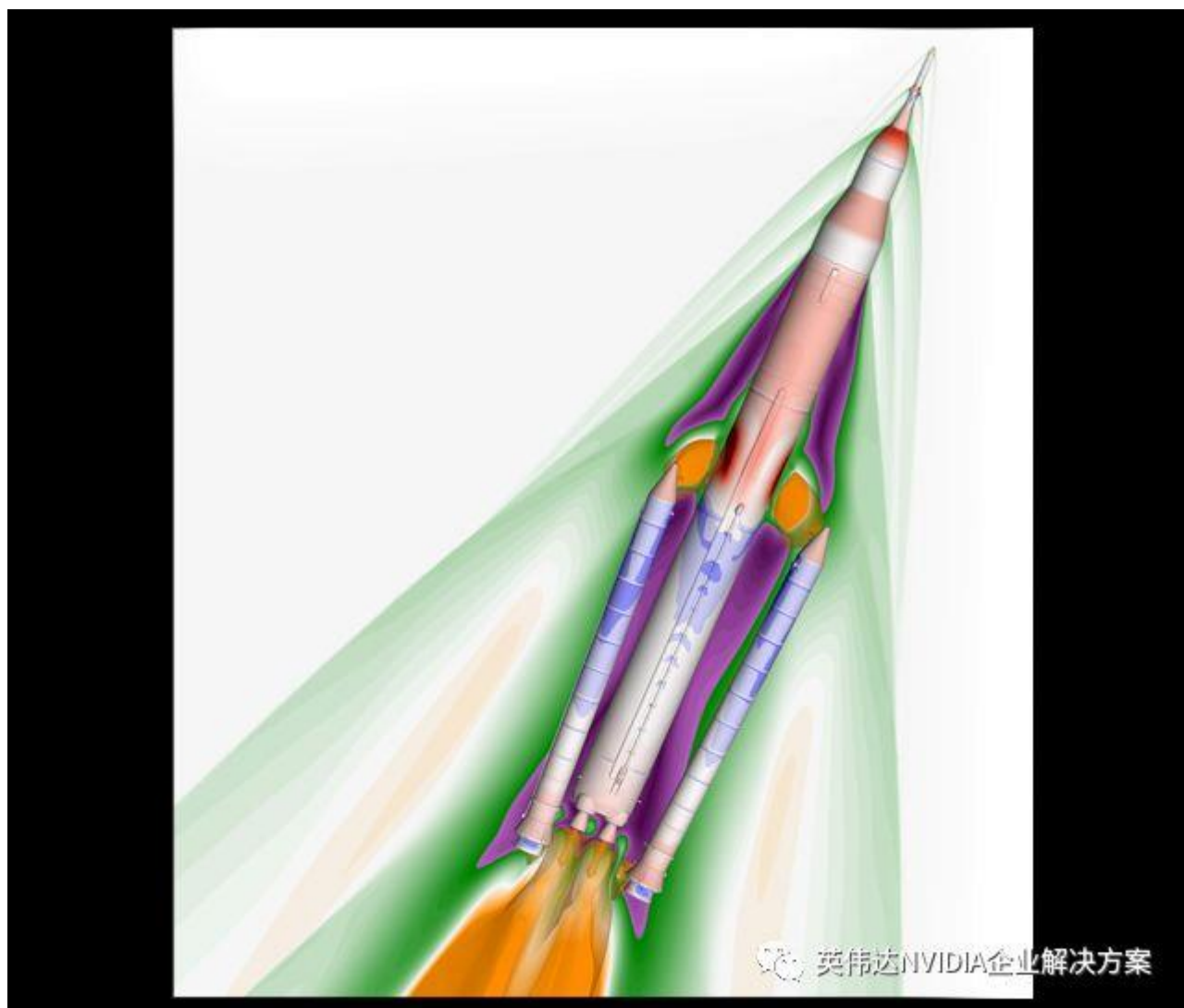
天气预报需要大量的计算资源,包括几何尺度(尤其是全球天气预报),和大量描述大气状态的变量。

但是,受限于可用的计算量和应用程序的性能,当前的天气预报模型仅限于低分辨率的模拟,例如 12 公里的分辨率。

这些模型忽略了一些重要的细节,例如云层的影响(云层可以反射太阳辐射,在天气模式中扮演着重要的角色)。采用 1 公里云分辨率可以改善预测效果,但这需要 应用程序的性能提升 1700 倍。

GPU 加速可以弥补此差距,提高天气预报的准确性。

加速空气动力学模拟



使用 [NASA](#) 的 FUN3D 代码模拟 SLS Block 1B 助推器分离流场。该图片由 [Jamie Meeroff](#), Henry Lee, NASA/Ames 提供。

火箭能够以超高的速度飞行，然而利用大规模空气动力学模拟，我们可以对其进行改进，让火箭可以飞得更快、更高效。

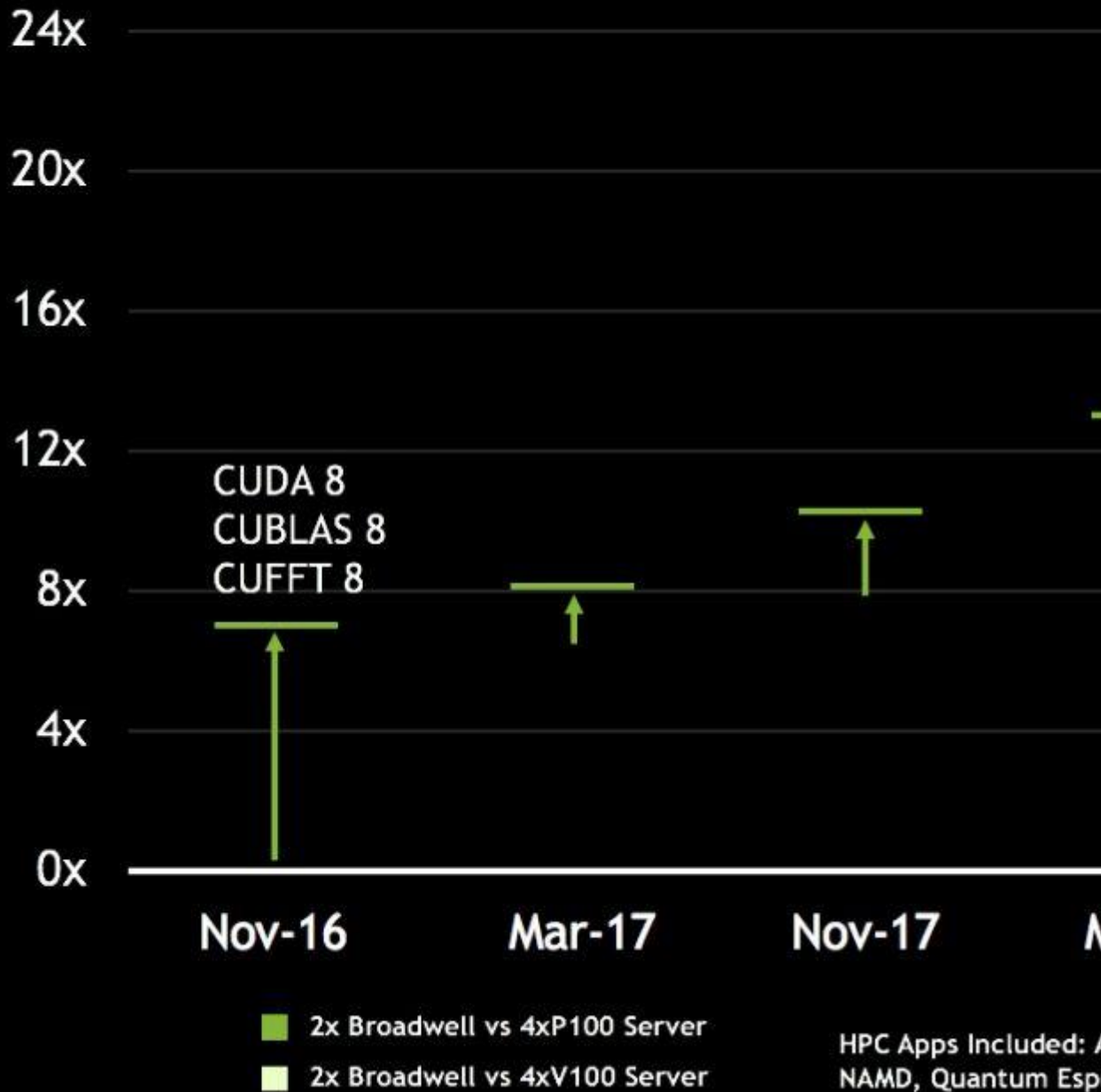
NASA 兰利研究中心开发的 FUN3D 计算流体动力学软件，可用于模拟各种空气动力学应用程序中的流体流动。该应用程序在 NASA Pleiades 超级计算机上消耗的周期比其他任何应用程序都要多。借助于 GPU 加速，采

用了 6 个 NVIDIA V100 [Tensor Core GPU](#) 的服务器能够以高出双插槽 [CPU](#) 服务器 30 倍 的性能运行这些模拟。

总结：GPU 具备非常好的性能，从而高效地计算规模更大、更复杂的模拟。NASA 已经证明，在 Summit 超级计算机上，仅需运行 1000 台 GPU 服务器就可以完成 100 多万个 CPU 核心的工作。而且，其能源成本远低于 CPU。

性能持续提升

HPC Applications Speed



我们在各个[加速计算](#)领域都拥有深厚的储备。结合由 100 多万名开发人员组成的生态系统，我们将共同形成一个不断改进的平台。该平台可以在相同的 GPU 加速服务器上提供更高的应用程序性能。

例如，在包含 11 个高性能计算应用程序的组合中，对于采用 4 个 NVIDIA Tesla P100 GPU 的服务器，其当前的运行速度比两年前提高了 2 倍。如果同时改进软件堆栈和 GPU 架构，您可以获得更大的性能提升。

现在，通过单一平台，您可以加速各种高性能计算领域的应用程序：科学计算、工业模拟、[深度学习](#)和[机器学习](#)。