高性能计算中的 SMP 与 CC-NUMA

在高性能计算(HPC)中,SMP(对称多处理)和 CC-NUMA(缓存一致非一致存储访问)是两种常见的多处理器架构。它们针对多核和多处理器的计算资源进行了优化,以应对不同的计算需求。以下是对这两种架构的详细介绍及其优缺点。

1. SMP (对称多处理, Symmetric Multi-Processing)

定义

SMP是一种多处理器体系结构,所有处理器共享同一块物理内存。每个处理器在硬件上是平等的,没有主从之分,所有的CPU都可以访问系统中的所有内存资源。

特点

- 对称性: 所有处理器平等, 能够平等地访问共享内存。
- 共享内存: 所有处理器共享同一块物理内存, 内存一致性通常由硬件和操作系统保证。
- 高效通信: 由于共享内存, 进程间通信非常高效, 尤其是多线程程序之间的数据交换。

优势

- 简化编程: 开发者可以利用共享内存轻松实现线程间通信与同步, 编程模型比分布式内存模型简单。
- **硬件支持**:现代SMP系统提供了多层缓存架构和缓存一致性协议,能加速数据访问。
- 适合中小规模系统:通常适用于核心数较少的系统(几十个核心以内),适合中小型服务器和工作站。

缺点

- 扩展性差: 随着处理器数量增多, 内存带宽可能成为瓶颈, 导致性能下降。
- **缓存一致性问题**:多个处理器对共享内存的并发访问可能导致缓存一致性问题,需要额外的协议来保证一致性。

应用场景

- 中小型服务器:适合小型并行计算任务,如数据库应用、科学计算等。
- 桌面工作站: 适用于多线程计算、图像处理等。

2. CC-NUMA (缓存一致非一致存储访问, Cache-Coherent Non-Uniform Memory Access)

定义

CC-NUMA是一种多处理器体系结构,其中每个处理器有自己的本地内存,且通过高速网络访问其他处理器的内存。CC-NUMA架构的关键在于不同处理器访问内存的速度不同,访问本地内存较快,而访问远程内存则较慢。

特点

- 非一致性内存访问: 每个处理器访问本地内存的速度非常快, 但访问远程内存的延迟较高。
- 缓存一致性: 通过缓存一致性协议 (如MESI协议) 保证系统中不同缓存之间的数据一致性。
- 内存局部性: CC-NUMA架构强调局部性,尽量避免频繁访问远程内存,减少延迟。

优势

- 高扩展性: 支持多个处理器和内存节点, 适用于大规模计算任务。
- 低延迟本地内存访问: 每个处理器的本地内存访问速度较快, 提高了性能。
- 适用于大规模并行计算: 尤其适合需要大量内存和计算资源的任务, 如科学仿真、基因组学分析等。

缺点

- 远程内存访问延迟: 虽然有缓存一致性协议, 但远程内存访问的延迟仍然较高。
- 编程复杂性: 比SMP系统复杂, 程序员需要关注内存访问局部性以及节点间的通信延迟。
- 成本较高: 多个节点和高速网络要求更高的硬件投入和维护成本。

应用场景

- 大规模科学计算: 如气候模拟、粒子物理、基因组学等。
- 大数据分析与数据库: 适合大规模数据存储和处理的场景。
- 超级计算机与高性能计算集群: 支持数百到数千个节点的并行计算。

3. SMP 与 CC-NUMA 的比较

特性	SMP	CC-NUMA
内存架构	所有处理器共享同一物理内存	每个处理器有自己的本地内存, 通过网络访问其他内存

特性	SMP	CC-NUMA
内存一致性	高效的缓存一致性协议保证所有处理器的数据一致性	使用缓存一致性协议 (如MESI协议) 保持内存一致性
扩展性	扩展性有限,处理器增多时,内存带宽成为瓶颈	高扩展性, 支持数百到数干个处理器, 适合大规模计算
通信延迟	处理器间共享内存,通信延迟较低	访问本地内存延迟低, 但远程内存访问延迟较高
应用场景	适用于小规模到中规模的计算任务	适用于大规模科学计算、 大数据分析、超级计算机等

参考文献

- 1. Patterson, D. A., & Hennessy, J. L. (2017). Computer Organization and Design: The Hardware/Software Interface (5th ed.). Morgan Kaufmann.
 - 这本书介绍了计算机体系结构的基础,包括多处理器系统(如SMP和NUMA)以及它们的性能优化问题。
- 2. Kerrisk, M. (2010). The Linux Programming Interface. No Starch Press.
 - 这本书详细讲解了操作系统层面的多核处理和多处理器系统的管理,包括SMP和NUMA架构的管理。
- 3. **Hager, G., & Wellein, G.** (2010). *Introduction to High Performance Computing for Scientists and Engineers*. CRC Press.
 - 本书深入探讨了高性能计算的架构,包括SMP和NUMA在科学计算中的应用和优化。
- 4. **Dinan, E., et al.** (2014). *Parallel Programming with MPI*. Addison-Wesley.
 - 本书讨论了MPI (消息传递接口) 在并行计算中的应用,适用于NUMA架构的大规模并行处理。

TOP500 超级计算机中 SMP 和 CC-NUMA 架构的应用

在 TOP500 超级计算机中,SMP 和 CC-NUMA 架构被广泛应用于不同类型的高性能计算任务。以下是几台代表性超级计算机的详细讲解,介绍它们如何使用这两种技术。

1. Fugaku (富岳) — CC-NUMA 架构的应用

概述

Fugaku 是目前(截至2024年)世界上最快的超级计算机,位于日本理化学研究所(RIKEN)。它首次登上 TOP500 榜单时,在2020年成为世界最快计算机。

使用架构

Fugaku 基于 Arm架构 和 A64FX 处理器,采用 CC-NUMA 架构。每个计算节点由48个 A64FX 处理器构成,每个处理器具有本地内存,通过网络连接访问远程内存。

- A64FX 处理器: 具有多个核心和本地缓存, 可以高效地进行并行计算。
- 内存访问: 采用 NUMA 架构, 优化节点之间的内存访问, 通过高速网络连接远程内存。
- **缓存一致性**: 使用硬件和操作系统结合的方式保证数据一致性,尤其在处理科学计算任务时,如气候模拟和分子动力学模拟。

应用案例

- **气候与天气模拟**: Fugaku被用于大规模气候模拟,预测天气模式。 **NUMA** 架构确保了高效的内存访问,支持分布式计算。
- 生物医药研究:包括蛋白质折叠、基因组学分析等,需要大量的内存和计算资源,NUMA 架构帮助高效分配计算任务。

参考文献

- 1. Fugaku Supercomputer Overview
 - 来源: RIKEN
 - 概述: 这是理化学研究所(RIKEN)关于 Fugaku 的官方页面,提供了关于 Fugaku 超级计算机的详细介绍,包括其设计理念、架构、应用领域以及最新的研究成果。
- Sato, Mitsuhisa et al. "Co-design for A64FX Manycore Processor and "Fugaku"", Software Composition (2020): 1-15.

介绍了日本的FLAGSHIP 2020项目,旨在开发下一代旗舰超级计算机"富岳"Fugaku。作者通过与富士通合作设计了基于Armv8指令集和可扩展矢量扩展(SVE)的原创多核处理器A64FX,并设计了包括互连和存储子系统在内的系统。

2. Summit — SMP 和 CC-NUMA 架构的结合

概述

Summit 是由美国橡树岭国家实验室(ORNL)开发的超级计算机,曾是全球最快的超级计算机之一。它结合了 SMP 和 CC-NUMA 技术,采用 IBM POWER9 处理器 和 NVIDIA Volta GPU。

使用架构

- **SMP架构**:每个计算节点有2个 **IBM POWER9 处理器**,每个处理器拥有多个核心,支持节点内高效的共享内存访问。
- CC-NUMA架构:每个节点的内存管理使用 NUMA 架构,计算节点通过 Infiniband 网络连接,确保低延迟数据传输。

应用案例

- 基因组学和生物计算: Summit被用于基因组学分析,如蛋白质比对和基因序列分析,处理大规模数据。
- **材料科学模拟**:用于量子力学和分子动力学模拟,需要大量内存和跨节点通信。**NUMA** 架构优化了内存访问,提升了并行计算效率。

参考文献

1. Oral, Sarp et al. "End-to-end I/O Portfolio for the Summit Supercomputing

Ecosystem", Software Composition (2019)

介绍了Summit超级计算机的端到端I/O策略,旨在解决其存储子系统中系统内部层与中心广泛并行文件系统层(PFS)之间的操作效率与可用性挑战。

3. Sunway TaihuLight — CC-NUMA 架构的应用

概述

Sunway TaihuLight 是中国的超级计算机,曾在 TOP500 排名中位居全球第二。它使用中国自主设计的 SW26010 处理器,并采用 CC-NUMA 架构进行大规模并行计算。

使用架构

- SW26010 处理器:每个计算节点配备了一个包含 256 个核心 的处理器。每个处理器有本地内存,通过高速网络与其他节点共享内存,采用 NUMA 架构。
- CC-NUMA架构:内存管理采用 NUMA 架构,节点之间通过高速互联网络进行低延迟数据传输。

应用案例

- 天气与气候模拟: Sunway TaihuLight用于全球气候模拟和天气预测, CC-NUMA 架构帮助优化节点间内存访问,提升计算性能。
- 工程模拟:在航空航天和汽车工程领域,使用Sunway TaihuLight进行高精度仿真,优化设计和材料性能。

参考文献

1. Xu, Kai et al. "Refactoring and Optimizing WRF Model on Sunway TaihuLight", International Conference on Parallel Processing (2019)

本研究将WRF模型整体移植并优化到神威·太湖之光超级计算机上,创新性地开发了针对WRF动态核心的特定领域工具SWSLL,以及应用了线程级并行化优化物理参数化方法,实现了高达4.7的加速比和良好的强可扩展性。

总结

在 TOP500 超级计算机中,SMP 和 CC-NUMA 架构的应用因应不同的计算需求而有所不同。通过优化内存访问模式和并行计算能力,这些超级计算机能够在科学研究、工业仿真和大数据分析等领域提供强大的计算支持。Fugaku、Summit 和 Sunway TaihuLight 等超级计算机都采用了 SMP 或 CC-NUMA 架构,通过精密的硬件和软件优化,实现了大规模并行计算,推动了科学和技术的快速发展。