

Summit 架构分析

·介绍

在 2018 年的 6 月，美国能源部在橡树岭国家实验室正式宣布了全新的超级计算机——Summit，2018 年 6 月 25 日，TOP500 组织发布了第 51 届全球超级计算机排行榜。在这个榜单中，来自于美国橡树岭国家实验室，受美国能源部资助的 Summit 暂居超级计算机榜首。

·性能参数

根据超算 Top500 排行的数据，Summit 超级计算机的峰值浮点性能为 187.7PFlops，Linpack 浮点性能为 122.3PFlops，功耗为 8805.5kW。在 HPCG 排行榜中，Summit 仍然暂居第一名的位置，HPCG 性能为 2925.75TFlops/s。由于计算机制程和架构进步，新的 Summit 在功耗相比 TITAN 增加不多的情况下（从之前的 9 兆瓦提升至 13 兆瓦），性能提高至前代产品的 10 倍。另外，在 Linpack 和 HPCG 性能之外，由于 Summit 使用了目前深度学习领域最强的 GV100 芯片作为加速芯片，因此具有强大的深度学习计算能力，每秒可以进行 30 亿亿次混合精度计算（30 exaops），成为目前深度学习计算最强大的计算机。

节点性能表				
	按插座计算		以节点计算	
处理器	POWER9	V100	POWER9	V100
数量	1	3	2	6
FLOPS(单精度)	1.081 TFLOPS (22 × 49.12 GFLOPs)	47.1 TFLOPS (3 × 15.7 TFLOPs)	2.161 TFLOPS (2 × 22 × 49.12 GFLOPs)	94.2 TFLOPs (6 × 15.7 TFLOPs)
FLOPS(双精度)	540.3 GFLOPs (22 × 24.56 GFLOPs)	23.4 TFLOPS (3 × 7.8 TFLOPs)	1.081 TFLOPS (2 × 22 × 24.56 GFLOPs)	46.8 TFLOPS (6 × 7.8 TFLOPs)
AI FLOPS	-	375 TFLOPS (3 × 125 TFLOPs)	-	750 TFLOPS (6 × 125 TFLOPs)
内存	256 GiB (DDR4) 8 × 32 GiB	48 GiB (HBM2) 3 × 16 GiB	512 GiB (DDR4) 16 × 32 GiB	96 GiB (HBM2) 6 × 16 GiB
带宽	170.7 GB/s (8 × 21.33 GB/s)	900 GB/s/GPU	341.33 GB/s (16 × 21.33 GB/s)	900 GB/s/GPU

·Summit 硬件剖析

硬件架构：

Summit 依旧采用的是异构方式，其主 CPU 来自于 IBM Power 9，22 核心，主频为 3.07GHz，总计使用了 103752 颗，核心数量达到 2282544 个。GPU 方面搭配了 27648 块英伟达 Tesla V100 计算卡，总内存为 2736TB，操作系统为 RHEL 7.4。从架构角度来看，Summit 并没有在超算的底层技术上予以彻底革新，而是通过不断使用先进制程、扩大计算规模来获得更高的性能。

计算节点：2CPU+6GPU

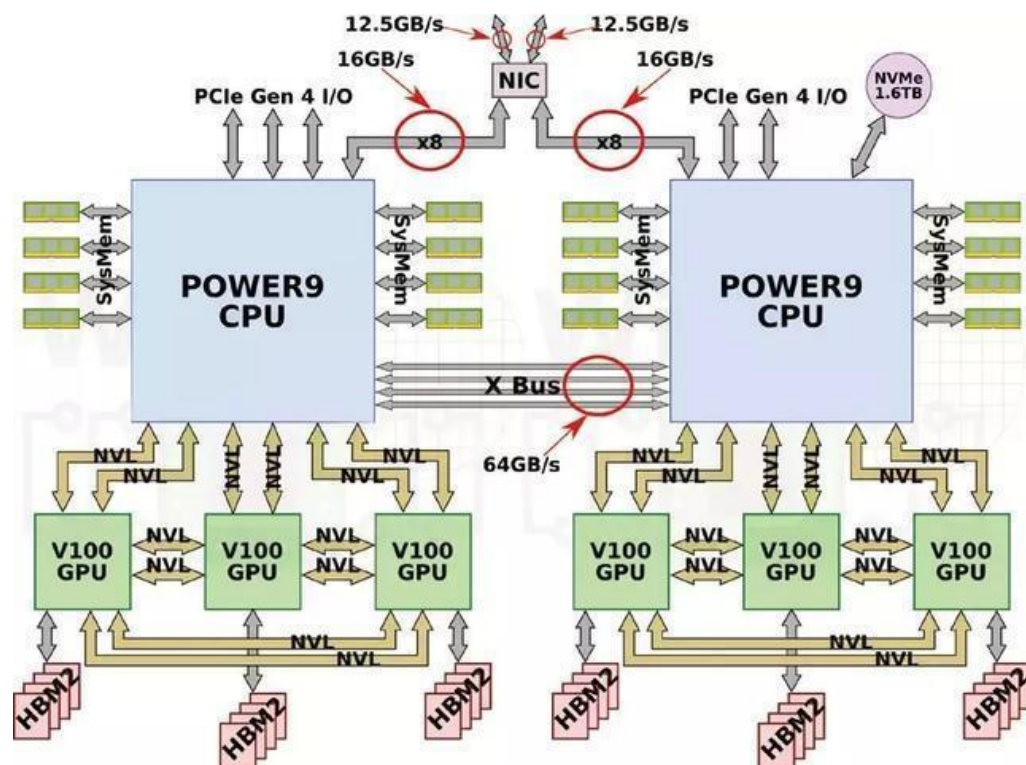
Summit 采用的计算节点型号为 Power System AC922，之前的研发代号为 Witherspoon，后文我们将其简称为 AC922，这是一种 19 英寸的 2U 机架式外壳。从内部布置来看，每个 AC922 内部有 2 个 CPU 插座，满足两颗 Power 9 处理器的需求。每颗处理器配备了 3 个 GPU 插槽，每个插槽使用一块 GV100 核心的计算卡。这样 2 颗处理器就可以搭配 6 颗 GPU，并使用更强大的 NVLink 来取代 PCIe 总线

内存：

每颗处理器设计了 8 通道内存，每个内存插槽可以使用 32GB DDR4 2666 内存，这样总计可以给每个 CPU 带来 256GB、107.7GB/s 的内存容量和带宽。GPU 方面，它没有使用了传统的 PCIe 插槽，而是采用了 SXM2 外形设计，每颗 GPU 配备 16GB 的 HBM2 内存，对每个 CPU-GPU 组而言，总计有 48GB 的 HBM2 显存和 2.7TBps 的带宽。

X 总线：

除了 CPU 和 GPU、GPU 之间的通讯外，由于每个 AC922 上拥有 2 个 CPU 插槽，因此 CPU 之间的通讯也很重要。Summit 的每个节点上，CPU 之间的通讯依靠的是 IBM 自家的 X 总线。X 总线是一个 4byte 的 16GT/s 链路，可以提供 64GB/s 的双向带宽，能够基本满足两颗处理器之间通讯的需求。



·应用方向和领域

1.天体物理

超新星爆发可以为科学家研究重元素在宇宙起源中的作用提供线索（重元素是指比铁族元素还重，即原子序数 $Z > 30$ 的元素，例如金）。可以在多个尺度上对此进行建模和模拟。利用 Summit, FLASH 可以进行长达数千倍时间内对多达 12 倍的元素种类进行高分辨率的模拟。

2.材料学

为了研发下一代材料(例如能够进行能源储存、转换和生产的化合物)需要在亚原子层面对材料属性、行为进行理解。QMCPACK (Home | QMCPACK) 是一个使用了第一性原理进行相关模拟的量子蒙特卡罗程序。由于 QMCPACK 的计算开销极大，到目前为止，科学家们只能模拟数十个原子的体系。利用 Summit，可以研究的体系可以包含数百个原子，这样能够为研究更实用的超导体提供极大的帮助。

3.癌症研究

为“战胜”癌症，需要研究基因、生物标记物与环境之间隐藏(目前未知)的关系。融合已有的健康数据、非结构数据如文本型的报告、医学影像等，利用机器学习算法，在 Summit 上可以对美国的癌症群体进行更全面的分析。这样的分析之前只能针对少数的临床实验病人进行。Summit 的强大能力使得可以探索更复杂、更精准的模型。这是美国能源部和美国国家癌症研究院的联合项目 CANDLE（CANcer Distributed Learning Environment）的一部分。CANDLE 旨在实现面向疾病精准医疗使能的 E 级深度学习和模拟