

基于 64 位 CPU 系统的计算性能比较:Opteron vs. Xeon

曾 忠¹,龙庆会²,陈景秋¹

ZENG Zhong¹,LONG Qing-hui²,CHEN Jing-qiu¹

1.重庆大学 资源及环境科学学院 工程力学系,重庆 400044

2.重庆大学 国际教育交流学院,重庆 400044

1.Dept. of Engineering Mechanics,College of Resource & Environmental Science,Chongqing University,Chongqing 400044,China

2.College of International Education and Exchange,Chongqing University,Chongqing 400044,China

E-mail:zzeng@cqu.edu.cn

ZENG Zhong, LONG Qing-hui, CHEN Jing-qiu. Performance comparison between computer systems based on 64 bit CPU: Opteron vs. Xeon. Computer Engineering and Applications, 2007, 43(19): 98-103.

Abstract: The 64 bit processors, AMD Opteron and Intel EM64T Xeon, are widely adopted in present deployed computer server. Opteron and Xeon are vastly different in their CPU frequency, memory and I/O subsystem etc., which results in the different characteristics of Opteron-based and Xeon-based systems, and the performance, therefore, relates closely with application code. To build a cluster for high-performance scientific computing, choosing the most suitable 64 bit processor for user's application is an important problem, which many users are interested in. For this purpose, the performance comparisons for applications including computational fluid dynamics (PHOENICS & FLUENT), quantum chemistry (GAMESS), quantum physics (VASP), and atmospheric research & numerical weather forecasts (MM5) etc. between computer systems based on AMD252(2.6 GHz) and Intel EM64T Xeon 3.6 GHz processors are conducted.

Key words: High Performance Computing(HPC); cluster; 64 bit CPU; CFD

摘要:目前配置的计算机服务器大量采用 64 位 AMD Opteron 和 Intel Xeon 两种处理器。Opteron 和 Xeon 处理器在时钟频率、内存控制器和 I/O 连接等诸多方面有所不同,这些差异导致基于这两种处理器的计算机集群系统有不同的特点,其性能与具体使用的应用程序密切相关。在构建面向高性能科学计算的集群系统时,选择基于何种 64 位处理器最为合理是众多用户所关心的一个重要话题,针对这个问题,对基于 AMD Opteron 252(2.6 GHz)和 Intel Xeon 3.6 GHz(L2 cache:1 M)处理器的计算机集群系统进行了一系列科学计算性能的测试和比较。

关键词:高性能计算;集群系统;64 位处理器;计算流体力学

文章编号:1002-8331(2007)19-0098-06 **文献标识码:**A **中图分类号:**TP338

1 引言

近年来,英特尔公司和 AMD 公司的面向服务器的 X86 架构微处理器在构建分布式并行计算机集群系统时得到广泛的应用。根据近年来的数据资料,英特尔公司的 Xeon 处理器和 AMD 公司的 Opteron 微处理器构建的大型集群系统在全球 500 强超级计算机中占据了很大份额。在最新的 2006 年 6 月发表的全球 500 强超级计算机名单里^[1],英特尔公司的 Xeon 和 AMD 公司的 Opteron 微处理器在 500 强使用的处理器中所占份额约为 69%。同时,数据还表明采用英特尔公司 Xeon 处理器的比例最高,而英特尔公司的高端处理器 Itanium 2 处理器在全球 500 强超级计算机中被采用的份额呈现继续下降的趋

势,同时采用 AMD 公司 Opteron 的超级计算机则呈迅速上升的趋势。

X86 架构作为通用微处理器的工业标准,二十年来,其不断地扩展,兼容 16 位和 32 位软件。32 位平台已经广泛应用在各种计算环境,但随着现代信息化技术的快速发展,信息处理量迅速膨胀,越来越多的操作系统和应用程序对处理器的运算能力以及内存的容量都提出了极高的要求,这使得以往的 32 位计算平台在越来越多的高端应用中显得力不从心。2003 年前,已有的 64 位计算平台是基于 RISC 架构的高端应用,包括 Compaq、IBM、HP 和 Sun 等在内的其他主要厂商都已经先后实现了向 64 位计算的过渡,都拥有了自己的 64 位 RISC 芯片、

基金项目:国家自然科学基金(the National Natural Science Foundation of China under Grant No.10302032, No.10472136);重庆市科委自然科学基金简化资助项目(No.2006BB0175)。

作者简介:曾忠(1968-),男,教授,博士生导师,主要研究方向:流体力学、高性能科学计算;龙庆会(1969-),女,工程师,主要研究方向:电子技术;陈景秋(1944-),男,教授,博士生导师,主要研究方向:流体力学。

Unix 操作系统、工作站和服务器的,但其高昂的价格、对应用环境的苛刻要求以及极少的软件支持,使得 64 位计算长期被局限在电信、金融等少数应用领域,不能形成大规模的应用环境。

AMD 公司于 2003 年 4 月正式对外公布了其第 8 代基于 X86 的处理器:64 位的 Opteron 处理器。Opteron 处理器是第一个在工业标准 X86 架构上进行 64 位的扩展(AMD64 指令集),以运行 64 位的操作系统和 64 位的应用程序^[2]。基于 Opteron 处理器的计算机采用 64 位操作系统可以突破传统的 32 位计算系统被限制在 4 GB 的内存寻址能力。同时已有的 32 位操作系统和 32 位应用程序也能在 Opteron 处理器上很好地运行,相对于 Intel 公司的 64 位 Itanium 采用全新的 EPIC 架构,AMD 的策略为从现有 32 位系统向 64 位系统平稳过渡提供了有力的平台。

AMD 的 64 位 Opteron 处理器进入市场后获得了很大成功,并迅速地被市场所接受,其对 Intel 的中、高端用处理器 Xeon 和 Itanium 2 市场均形成严重的冲击。在此压力下,2004 年 2 月 Intel 公司公布了其基于 X86 的 64 位 Xeon 处理器,与 Opteron 一样,Xeon 在 X86 架构上进行了 64 位的扩展(EM64T 指令集),其能运行 32 位和 64 位的操作系统与应用程序。AMD64 对应的 Opteron 和 EM64T 对应的 Xeon 处理器均遵从 X86 指令集体系以兼容现有的丰富的 32 位应用软件,因此这两种处理器在编程级别(Programming level)上是一致的。因特尔公司 64 位的 Xeon 问世后,其 64 位高端处理器 Itanium 2 的市场受到进一步的冲击。

2 Opteron 和 Xeon 在硬件上的差异

要理解 EM64T 对应的 Xeon 和 AMD64 对应的 Opteron 在性能上的不同,首先应该了解它们在硬件上的差异。尽管这两种处理器在编程级别(Programming level)上基本上是一致的,它们在硬件方面仍然有很多不同之处^[3-8]。

首先,Opteron 和 Xeon 在流水线(pipeline)和相关联的时钟频率问题以及多线程并行的补充上有重要差别:

(1)对于流水线的设计和相关的处理器主频:Xeon 处理器以流水线的执行效率为代价来优化主频;Opteron 处理器则以主频为代价优化流水线效率;

(2)对于多线程并行的补充:Xeon 处理器包括指令级别的并行和 Hyper-Threading 技术,其允许不同的线程并行操作;而 Opteron 仅仅提供指令级别的并行。

对微处理器的流水线类似于工厂的组装流水线,执行程序的工作被分成多段(stage),每一段只完成很小部分的工作。将工作任务分割成多段的指导思想是减少处理器等待数据的时间,尽量让处理器能一直满负荷运行。处理器更高的主频可以通过采用更多的流水线段数来实现。Xeon 采用 31-stage 流水线,31 段流水线使得 Xeon 的主频可以达到 3.6 GHz;而 AMD Opteron 仅采用了 12-stage 流水线,现在其主频为 1.4 GHz~2.6 GHz,明显低于 Xeon 的主频:2.8 GHz~3.6 GHz。然而 Opteron 采用较少的流水线段数可以减小由于 cache misses 和分岔错误预测引起的延迟。Alpha Ev68/21264 采用了 7-stage 流水线,其操作的时钟频率近似 1.25 GHz,Itanium 2 采用 8-stage 流水线,其操作的频率近似为 1.6 GHz。相对于 Opteron 处理器,Xeon 处理器有更多的流水线段数,因而有更高的主频,对分岔判断少和分岔判断预测准确的、cache 利用效率高的应用程序,主频高对程序执行性能有明显优势。然而在另一方面,

由于能源消耗和处理器的主频直接相关,当主频增加,其能源消耗也随之增加。能源消耗在中、大型集群系统中变得非常突出,是我们不得不考虑的问题。Xeon 和 Opteron 均采用指令级别的并行,每个时钟可以运行 3 个指令。此外 Xeon 处理器还采用 Hyper-Threading 技术以并行运行两个线程。

其次,服务器的性能不但取决于处理器性能,也依赖于内存子系统、I/O 子系统和运行的应用程序类型。Xeon 和 Opteron 在内存和 I/O 子系统有很大不同,Xeon 处理器采用前端 bus(Front Side Bus,FSB)技术连接北桥,然后连接 I/O 和内存(参见图 1),但 Opteron 采用点对点 Hyper-Transport 连接处理器、I/O 和内存(参见图 2)。对于 Opteron,内存控制器则直接集成在处理器中,其与 Xeon 处理器通过北桥连接内存控制器有关键性不同。

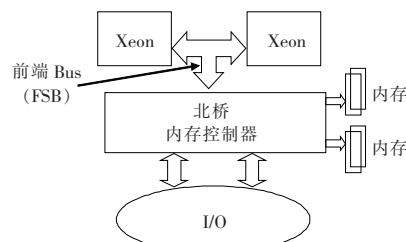


图 1 两路 Xeon 系统的构成简图

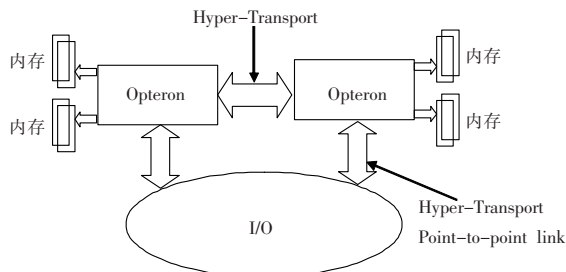


图 2 两路 Opteron 系统的构成简图

现代处理器的操作速度远远快于内存子系统,因此内存子系统容易成为大型科学计算的瓶颈,对于运行这类程序,其意味着简单地提高处理器的速度并不能提高整个系统的性能。对于内存子系统,有三个重要方面要考虑:即带宽(bandwidth)、延迟(latency)和扩展性(scalability)。

如图 1 所示,Xeon 采用共享的前端 bus(FSB),通过北桥连接内存控制器,前端 bus 是 64 位并行的,处理器和内存控制器共享带宽,内存控制器是与处理器分离的芯片集。本文测试的 Xeon 处理器采用 800 MHz FSB 以连接内存和 I/O 设备,其总的最大带宽是 6.4 GB/s。如果使用 400 MHz 或 533 MHz 的 FSB,其带宽分别为 3.2 GB/s 或 4.3 GB/s。Xeon 采用对称多处理器 SMP 结构(Symmetric Multi-Processing),每个处理器从内存获取数据的时间延迟是相等的。对 Xeon 系统,从数据内存到处理器的时间延迟约为 120 ns。对于 Xeon 系统,当只有单处理器工作时,该处理器能使用其 FSB 的全带宽,随着处理器数目的增加(2 或 4 个处理器),由于 FSB 是这些多处理器共享的,且总带宽不变,因此每个处理器的有效带宽就会相应地减少。

对 Opteron,内存控制器已经直接集成在处理器中,这种设计在数据从内存进入处理器的带宽、时间延迟以及扩展性均有好处:增加带宽、减小延迟和提高扩展性。Opteron 集成双通道 DDR SDRAM 控制器,其支持 PC1600、PC2100、PC2700 和 PC3200 DDR 内存。使用 PC3200 内存,其有效传输频率为 400 MHz,单

通道带宽 3.2 GB/s, 双通道总带宽为 6.4 GB/s。不同于 Xeon 的 SMP 结构, 基于 Opteron 的系统是 NUMA(Non-uniform Memory Access)结构。如图 2 所示, 每个处理器有其局部连接的内存, 也有远端内存。局部内存直接连在该处理器上, 该处理器可直接访问, 而远端内存则连接在另一个处理器上, 处理器-处理器用 Hyper-Transport 相连。数据从内存到处理器的时间延迟对局部内存和远端内存是不同的, Opteron 的局部内存的延迟约为 70 ns, 远端内存的延迟约为 100 ns, 其均小于 Xeon 的约 120 ns 的时间延迟。由于 Opteron 处理器集成内存控制器和处理器间用 Hyper-Transport 连接, 基于 Opteron 处理器的系统的内存带宽随处理器的数目具有线性的扩展性。

此外, Opteron 支持 AMD 3D Now 指令。3D Now 增加 SIMD 指令以提高矢量化处理(浮点计算)。Xeon 则支持 SSE3, 但 SSE3 也已被最新的 AMD Opteron 支持。如果系统运行在完全的 64 位模式下, EM64T 对应的 Xeon 可以支持 48 位虚拟内存(256 TB)和 36 位的物理内存(64 GB); 而 Opteron 在完全的 64 位模式下可以支持 48 位虚拟内存(256 TB)和 40 位的物理内存(1 TB)。此意味着 Xeon 和 Opteron 在 64 位模式下, 传统的 32 位计算系统仅 4 GB 的内存寻址能力的限制已经被突破。

3 Opteron 和 Xeon 的测试环境

本文对价格大致相当的 AMD Opteron 252(2.6 GHz)和 Intel Xeon EM64T 3.6 GHz(L2 cache 为 1 M)的计算机集群系统进行了面向高性能科学计算的测试和比较。详细配置如表 1 所示, Xeon 的 CPU 处理器主频为 3.6 GHz, 其较 AMD Opteron 252(2.6 GHz)的主频快约 38.5%。基于 Xeon 的计算机采用 DDR2-400 内存, 基于 AMD 252 计算机采用 DDR-400 内存, 两者规格不一样, 但频率和单片容量相同。除 Fluent6.2 的测试采用 Linux Enterprise Serve 9.0 操作系统以外, 本文的其它测试是在 AMD64 和 EM64T 对应的 64 位版 SuSE Linux 9.2 Professional 的操作系统环境下完成的。AMD Opteron 252 的 Hyper-Transport 频率由早期 AMD Opteron 240-250 的 800 MHz 提高到 1 GHz¹, 其对计算性能提高有较大的帮助。本文的测试中, 构建了 3 结点小型集群, 结点之间采用了价格相对便宜的千兆网来连接, 对于结点数较少的小型集群(例如结点数 < 8 结点), 采用千兆网连接的性能比很高, 是比较合理的选择。

4 浮点数运算性能测试 HPL Benchmark (High Performance Linpack)

HPL 由美国田纳西州大学(University of Tennessee)Antoine P. Petitet 教授开发的大型双精度线性系统求解软件包^[9], 通过对

高性能计算机求解线性代数方程组能力的测试, 评价高性能计算机的浮点处理性能。HPL 是针对现代并行计算机提出的测试方式, HPL 有效地使用高速缓存存储器(Cache), 其测出的机器速度是在机器解决实际问题时可能达到的运算速度的上限。HPL 核心算法是使用高斯消元法求解双精度浮点数线性代数方程, 测量在计算机上求解该线性方程组所需的时间, 根据其完成的双精度浮点数的运算次数, 求得单位时间内完成的浮点运算次数, HPL 的结果按每秒浮点运算次数表示, 得到的值越大表示计算性能越高。HPL 是目前世界超级计算机 500 强(TOP500)衡量机器性能的重要指标。

在本次测试中, 矩阵大小取为 2 万(2 万次元联立方程组), 使用的内存约为 3.2 GB。图 3 为 1CPU 和使用 MPI(Message Passing Interface)的 2CPU 并行时的 HPL 结果: 对基于 Opteron 和 EM64T 对应的 Xeon 计算机, 两 CPU 并行时的浮点运算次数是单 CPU 计算的约 1.9 倍, 其说明 HPL 并行效率极高。基于 Xeon 的计算机系统的浮点运算次数是基于 Opteron 的计算机系统的浮点运算次数的 1.36 倍, 其近似于 CPU 的主频之比(3.6 GHz/2.6 GHz ≈ 1.38)。由于 HPL 有效地使用高速缓存存储器, 计算性能主要取决于 CPU 处理器的主频, 计算性能的结果达到理论性能的约 90%。对于这类 CPU-bound 的运用程序, 可以很明显地看到, 高主频的 Xeon 较 Opteron 在计算性能上占明显优势。

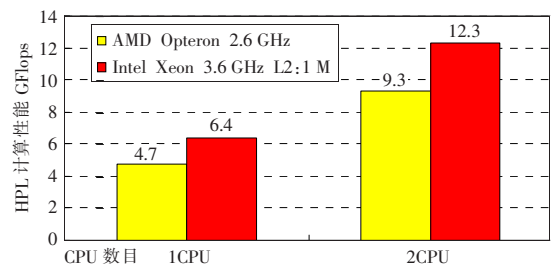


图 3 HPL Benchmark 测试性能比较

5 Himeno Benchmark 计算性能测试

Himeno Benchmark^[10]是采用 Jacobi 迭代求解 Poisson 方程的程序, 由 Himeno 博士开发, 应用于评估热传导、扩散问题、不可压缩流的数值模拟等科学计算的性能。该程序的高速缓存存储器(cache)使用率低, 对内存的数据存取直接影响测试结果, 内存带宽对该测试性能的结果表现很关键。Himeno Benchmark 软件包有 Fortran 版和 C 版的小尺寸(small size: 65×33×33), 中等尺寸(medium size: 129×65×65), 大尺寸(large size: 257×129×129)和超大尺寸(extra large size: 513×257×257)等几种类型,

表 1 测试用计算机集群系统配置

	基于 Opteron 处理器的系统	基于 Xeon 处理器的系统
CPU	Opteron 252×2(每结点)	EM64T Xeon 3.6 GHz×2(每结点)
CPU 主频	2.6 GHz	3.6 GHz
系统 Bus	1 GHz(Hyper-Transport)	800 MHz(FSB)
L1 cache	64 KB	16 KB
L2 cache	1 MB	1 MB
主板	Tyan Thunder K8SR(S2881)	SuperMICRO X6DAE-G2
内存	DDR-400 Registered ECC 1 GB×8	DDR2-400 Registered ECC 1 GB×8
OS	SuSE Linux 9.2 Professional(64 位)	SuSE Linux 9.2 Professional(64 位)
结点间的连接	双千兆网	双千兆网

¹ 最新推出的 AMD Opteron 处理器包括 AMD Opteron 240-250 亦改为采用频率为 1 GHz 的 Hyper-Transport。

这里选取了大尺寸算例进行测试, 内存使用约为 1.8 GB。图 4 为 Fortran 77 版的 Himeno (大尺寸) 的测试结果, 结果按每秒浮点运算次数表示, 得到的值越大表示计算性能越高。从这个测试看 Opteron 较 Xeon 有更好的性能表现。对单 CPU 的测试, Opteron 较 Xeon 快 8%。早期 AMD Opteron 采用 800 GHz 的 HyperTransport, 其相应的带宽为 6.4 GB/s, 由于 AMD Opteron 252 的 Hyper-Transport 提升到 1 GHz, 其带宽也相应提升到 8 GB/s; Xeon 采用前端总线 bus (FSB), 其带宽为 6.4 GB/s。如图 4 所示, 进一步观察 Himeno 在同一结点内的 OpenMP 并行和 MPI 并行的结果可以发现, 使用同一结点内的两个 CPU 并行, 相对使用 1CPU, Xeon 的双 CPU 并行并没有提高计算性能, 反而在 MPI 并行时, 其性能还有约 10% 的下降; 而对 Opteron 的计算机, 相对 1CPU 的结果, 双 CPU 的 OpenMP 并行的性能提高约 96%, 而 MPI 并行的性能提高约为 115%。使用两个不同结点的两个 CPU 并行, Xeon 相对 1CPU 的性能提高约 78%, 而 Opteron 则提高约 112%。这个测试结果体现出了 Opteron 处理器直接集成内存控制器的设计上的优越性。Himeno Benchmark 是一个有大量数据从内存向 CPU 处理器传输的程序, 内存带宽是决定性能的关键之一。Xeon 采用 FSB, 是 SMP 结构, 单结点内的内存总带宽受限于 FSB 带宽, 而 FSB 带宽并不随处理器数目增加而增加。对 Himeno 的计算测试, 仅仅使用 Xeon 的单 CPU 时, 几乎其全部的内存带宽都归该 CPU 使用, 其内存带宽的使用已经饱和; 在 Xeon 同一结点内的双 CPU 并行 (OpenMP 或 MPI 并行) 时, 尽管有双 CPU 同时工作, 但相对单 CPU 计算, 其总内存带宽没有任何增加, 内存带宽成为计算性能的瓶颈, 故其单结点内的双 CPU 并行性能没有任何提高。对 Opteron, 内存控制器直接集成在 CPU 上, 这种设计减小延迟, 同时处理器间用 Hyper-Transport 连接, 因此其内存带宽随处理器的数目具有线性的扩展性, 故其在本测试中的并行性能有很好的表现, 无论是在同一结点内的双 CPU, 还是不同结点内的双 CPU, 其双 CPU 的计算性能较单 CPU 性能都提高了近一倍 (96%~115%); 而对 Xeon, 仅仅是不同结点内的双 CPU 的计算性能较单 CPU 性能都提高了近 78%, 同一结点的双 CPU 的并行性能却没有提高。很明显, 对于这类 memory-bound 的程序, Opteron 较 Xeon 有明显更佳的性能表现, 特别对同一结点内的多处理器并行计算, Opteron 的这种优势相对 Xeon 非常突出。

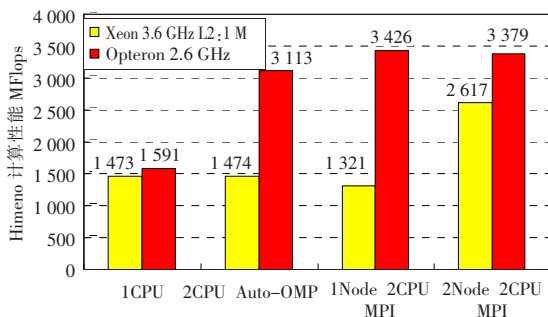


图 4 Himeno Benchmark 测试性能比较

6 计算流体力学程序包 PHOENICS v3.3 的性能测试

PHOENICS 软件是模拟传热、流动、反应、燃烧过程的通用 CFD 软件^[1], 它实际上是世界上最早的计算流体与计算传热学商用软件包。在与 CHAM-JAPAN 的合作中, 对 PHOENICS

v3.3 的 32 位 Linux 版本进行 64 位的移植, 并分别采用 64 位的 PGI5.1-6 编译器和 Intel Fortran v9.0 编译器进行编译连接生成执行码, 测试结果表明, 采用 64 位的 PGI5.1-6 编译器生成执行码的计算性能最佳, 其被选用于对三维圆球绕流问题和三维热浮力流问题两个算例进行了测试和比较。图 5 是三维圆球绕流问题模拟的计算时间, 其网格为 80×80×160, 迭代 sweep 数为 100。可以看到, 对单 CPU 的计算, Xeon 比 Opteron 计算时间约少 15.8%, 但 Opteron 的并行效率明显比 Xeon 好, 在相同的 CPU 数并行条件下, Opteron 计算时间较 Xeon 的计算时间短: 在同一结点内, Xeon 的双 CPU 并行的计算时间缩短到其单 CPU 的计算时间的 64%, 而 Opteron 则相应地缩短到其单 CPU 的计算时间的 33.5%, Xeon 的并行计算时间是 Opteron 的 1.66 倍; 对不同结点内的双 CPU 并行, Xeon 计算时间缩短到其单 CPU 计算时间的 55%, 而 Opteron 则相应地缩短到其单 CPU 计算时间的 33.8%, Xeon 的并行计算时间是 Opteron 的 1.41 倍; 对 2 结点 4CPU 的并行, Xeon 的计算时间缩短到其单 CPU 的计算时间的 37.8%, Opteron 的计算时间缩短到其单 CPU 的计算时间的 19.8%, Xeon 的并行计算时间是 Opteron 的 1.65 倍。对三维热浮力流问题, 采用 100×100×160 的网格划分, 迭代 sweep 数为 200, 其计算时间如图 6 所示: 单结点内 2CPU 的 MPI 并行时, Xeon 的计算时间是 Opteron 的 1.67 倍; 2 结点内 2CPU 的 MPI 并行时, Xeon 的计算时间是 Opteron 的 1.27 倍; 2 结点内 4CPU 的 MPI 并行时, Xeon 的计算时间是 Opteron 的 1.7 倍。

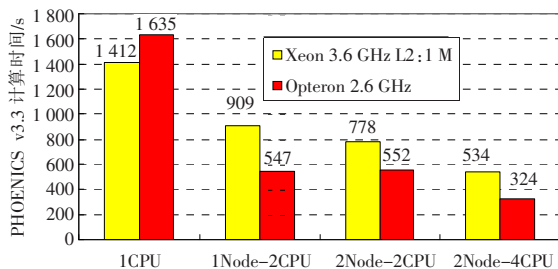


图 5 对三维圆球绕流问题算例 PHOENICS 计算时间比较

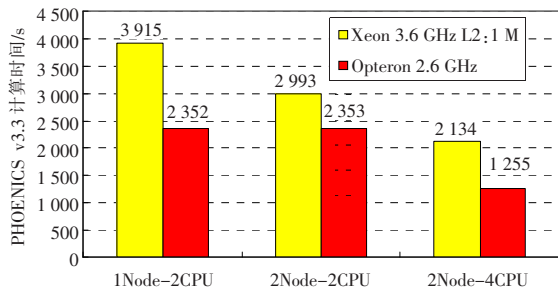


图 6 对热浮力流问题算例 PHOENICS 计算时间比较

PHOENICS 的这两个算例结果表明 Opteron 较 Xeon 有更好的计算性能表现, 特别对同一结点内的多 CPU 并行的情况下, Opteron 相对 Xeon 的优势突出。由于 Xeon 的内存总带宽受限于其 FSB 的带宽, 其不随处理器数目增加而增加, 故对于 Xeon 在同一结点内的多 CPU 并行以运行这类 memory-bound 的运用程序时, 其效率低于其不同结点的多 CPU 并行效率。

7 量子化学计算软件包 GAMESS 的性能测试

GAMESS 为计算量子化学程序包^[2]。对 GAMESS 的 Linux 版分别采用 Intel Fortran v9.0 编译器+Intel MKL 7.2 和 PGI

Fortran 5.1-6 编辑器+ACML 2.0 数学包进行了 64 位的移植和编译连接生成执行码。对 Xeon 而言,采用 Intel Fortran v9.0 编译器+Intel MKL 7.2 生成的执行码有最好的测试性能。对 Opteron 而言,采用 PGI Fortran 5.1-6 编辑器+ACML 2.0 数学包生成的执行码有最好的性能,为了比较的公平性,对不同的处理器,其具有最好计算性能的执行码被采用。其中对 C47014NH51 算例^[13]的测试时间参见图 7,对此算例,除 3 结点 6CPU 并行时 Opteron 较 Xeon 略快 1.4%外,在其余的单 CPU 计算、1 结点 2CPU 并行、2 结点 4CPU 并行,Opteron 均较 Xeon 略慢 3.8%、2.8%和 4%左右。对 Pt5-hess-dscf^[14]算例的测试结果如图 8 所示,对单 CPU 计算、1 结点 2 CPU 并行、2 结点 4CPU 并行,Xeon 较 Opteron 分别快约 11.8%、11%和 6.7%。

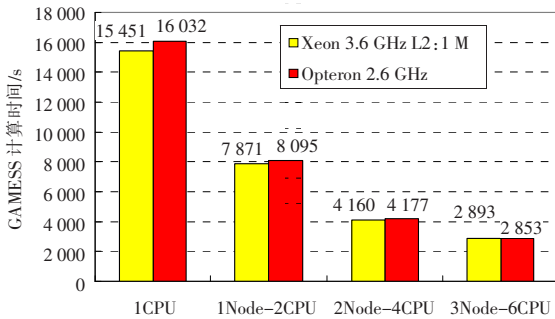


图 7 对 C₄₇O₁₄NH₃₁ 算例 GAMESS 计算时间的比较

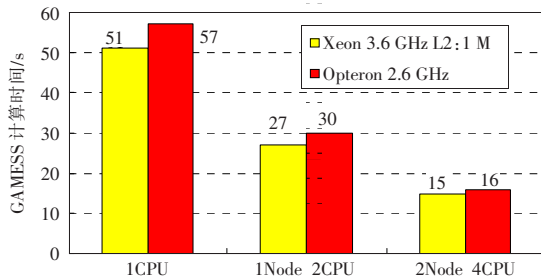


图 8 对 Pt₅-hess-dscf 算例 GAMESS 计算时间的比较

8 气象数值模拟程序包 MM5 的性能测试

MM5 是 Pennsylvania State University 和 University Corporation for Atmospheric Research 共同开发的气象数值模拟程序包^[15],是目前最流行的天气预报并行处理软件包。对 MM5 V3 进行了 64 位的移植,并采用 Intel Compiler v9.0 编译器生成了执行码。世纪风暴算例 input2mm5.tar.gz^[16]的性能测试结果参见图 9,结果表明,Opteron 较 Xeon 有更好的计算性能,对非并行版、MPI 并行版的 1CPU、1 结点 2CPU 和 2 结点的 2CPU 计算,Xeon 较 Opteron 分别多用约 20%、33%、55%和 37%的计算时

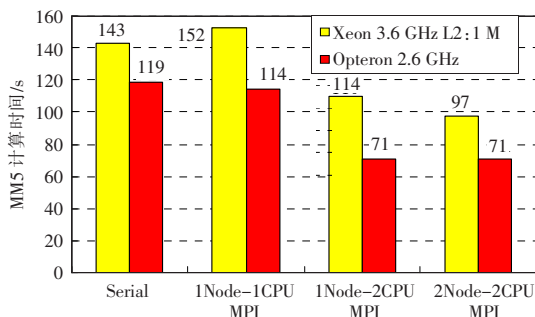


图 9 对世纪风暴 input2mm5.tar.gz 算例 MM5 计算时间的比较

间。对该测试,基于 Opteron 的计算机集群系统,其计算性能明显占有优势。

9 量子物理程序包 VASP 4.6.12 的计算性能测试

VASP 是一个量子物理程序包^[17],其使用赝势和平面波基组,进行第一性原理的分子动力学计算。在 64 位 SuSE Linux Professional 9.2 的操作系统下,对 VASP 4.6.12 分别采用了 64 位版 Intel Fortran v8.1+Intel MKL 7.2 和 PGI Fortran 5.1-6 配合基于 ALTALAS v3.6^[18]优化的 Lapack^[19]的数学库进行了 64 位的重新编译、连接以生成执行码。测试结果表明,对 Xeon,采用 Intel Fortran v8.1+Intel MKL 7.2 编译连接的执行码更快;但对 Opteron 系统,采用 PGI Fortran 5.1-6 配合基于 ALTALAS v3.6 优化的 Lapack 库编译连接的执行码性能更佳。下面结果比较对各系统分别采用具有最佳计算性能的执行码,测试包括 SiO₂、Si₆SC 和 SiO 三个计算算例。如图 10 所示,对 SiO₂算例,1CPU、1 结点 2CPU 并行和 2 结点 4CPU 并行,Opteron 较 Xeon 分别约快 2.5%、29.5%和 23.7%;对 Si₆SC 算例,1CPU、1 结点 2CPU 并行和 2 结点 4CPU 并行,Opteron 较 Xeon 分别约快 1%、69.9%和 19.1%;对 SiO 算例,1CPU、1 结点 2CPU 并行和 2 结点 4CPU 并行,Opteron 较 Xeon 分别约快 26.6%、165.9%和 34.3%。在该测试中,基于 Opteron 的集群系统其计算性能明显占有优势,特别对于大型算例在同一结点内的多 CPU 并行时,Opteron 的性能优势更加突出。如图 10~12 所示 SiO 算例的计算量最大,Opteron 相对 Xeon 的性能优势表现越突出。

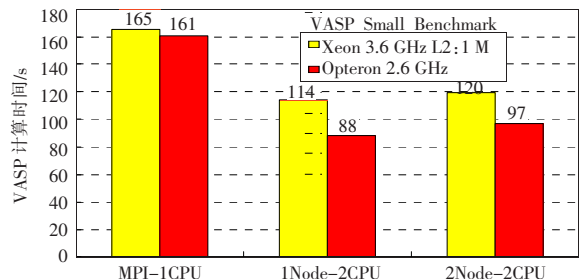


图 10 VASP 对 SiO₂ 算例计算时间的比较

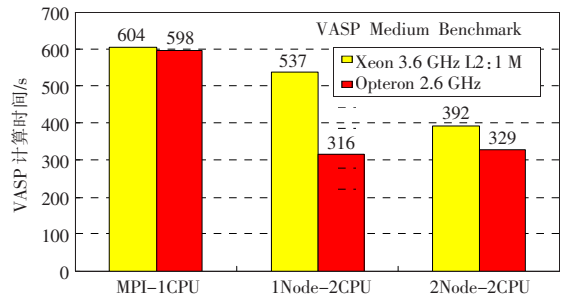


图 11 VASP 对 Si₆SC 算例计算时间的比较

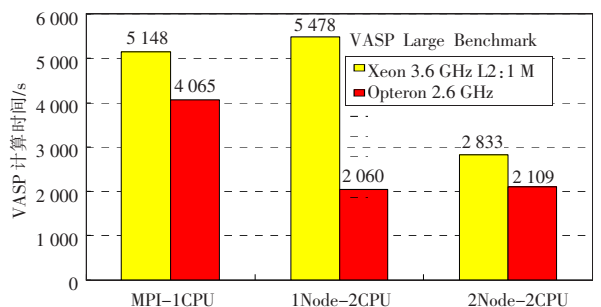


图 12 VASP 对 SiO 算例计算时间的比较

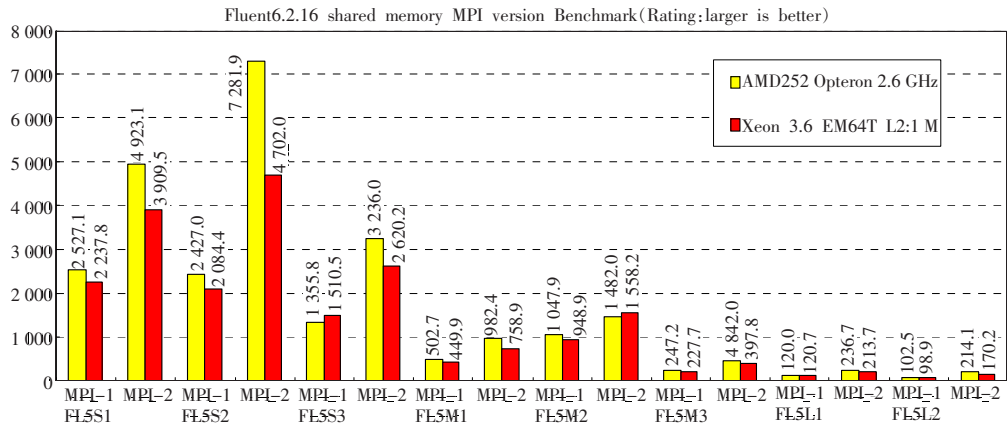


图 13 Fluent6.2 在基于 Xeon 3.6 GHz 和 Opteron 2.6 GHz 系统上的性能测试

10 通用计算流体力学商业软件包 Fluent6.2 的计算性能测试

Fluent 是通用计算流体力学商业软件包^[20],对其 64 位 Linux 版 Fluent6.2 的标准 Benchmark 算例^[21]进行了性能测试。算例包括 3 个小规模计算、3 个中等规模计算和 2 个大规模算例计算^[21]。这组 Benchmark 精选了代表当前典型的应用、覆盖大范围的网格大小和物理模型的算例,其由 Fluent 公司发布。由于 Fluent6.2 执行码的限制,操作系统被替换为 SuSE Linux Enterprise Serve 9.0。计算结果如图 13 所示,结果用 rating 表示,Fluent 公司定义 rating 为 24 h 内在测试计算机系统中能够完成其 Benchmark 算例的次数^[21],rating 数越高代表计算性能越高。测试结果表明,对大多数算例,AMD Opteron 252 的性能较 EM64T 对应的 Xeon 3.6 GHz 更好。Ref.^[22]提供了 Fluent 公司发布的其标准 Benchmark 算例在不同计算机系统上的测试性能结果,这些结果与本文的结论一致:即 Fluent6.2 在基于 AMD Opteron 252 的计算机集群系统较基于 Intel Xeon 3.6 GHz 的计算机集群系统有更好的计算性能。

11 结论

本文对基于 64 位处理器:AMD Opteron 252(主频 2.6 GHz)和 EM64T 对应的 Intel Xeon 3.6 GHz(L2 Cache 1 M)处理器所构建的小型计算机集群系统进行了一系列面向高性能科学计算的性能测试和比较。这两款处理器均是去年发布的,价格大致相当,目前具有较好的性价比,为计算机服务器大量采用的处理器类型。Xeon 处理器采用的流水线段数较 Opteron 多,其以流水线执行效率为代价来优化主频,而 Opteron 处理器则以主频为代价优化流水线效率,故对于分岔判断少和分岔判断预测准确的、cache 利用效率高的应用程序,Xeon 的主频高,其对程序执行性能有明显优势,在世界 500 强超级计算机的测试程序 HPL 的测试中,该特点被清晰地表现了出来。同时,在计算量子化学程序包 GAMESS 的测试上,Xeon 计算性能也明显优于 Opteron。Xeon 和 Opteron 在内存和 I/O 子系统有很大不同,Xeon 处理器采用前端 bus(Front Side Bus,FSB)技术连接北桥,然后连接 I/O 和内存,但 Opteron 的内存控制器则直接集成在 Opteron 处理器中,其采用点对点 Hyper-Transport 连接处理器、I/O 和内存。由于现代的处理器的操作速度远远快于内存子系统,因此内存子系统容易成为大型科学计算的瓶颈,对于运行这类程序,Opteron 较 Xeon 处理器具有明显优势,Himeno Benchmark 是这类程序的一个典型例子,其为 memory-bound

的程序,内存带宽对计算性能有重要作用,Opteron 的优势在该程序有很好的体现。在计算流体力学中广泛使用的商业程序包 PHOENICS v3.3 和 Fluent6.2 的测试中、气象数值模拟程序包 MM5 的测试中以及计算量子物理程序包 VASP 4.6.12 的测试中,基于 Opteron 计算机集群系统的计算性能均优于基于 Xeon 的系统。

根据运行应用程序时的瓶颈,科学计算应用程序主要包括 CPU-bound 和 memory-bound 两种类型。对于 CPU-bound 的应用程序,CPU 主频越高其计算性能优势越容易体现,故在这种情况下选择基于高主频的 Xeon 较 Opteron 有更好的计算性能;对于 memory-bound 的应用程序,Opteron 的内存控制器直接集成在处理器上,其采用点对点 Hyper-Transport 连接处理器、I/O 和内存这种相对 Xeon 在设计上的优势可以有很好的体现,对于这种情况,选择基于 Opteron 的计算机集群系统更加合理。作者的测试是面向高性能科学计算的用户,由于高性能科学计算中发生 I/O 瓶颈和网络瓶颈等的情况在实际中不常见,故在此不作测试和讨论。

致谢 本文的测试工作得到了日本计算机集群公司 Visual Technology Inc.和日本东北大学金属材料研究的全力支持,测试工作是由作者在日本 Visual Technology 公司内完成的,作者在此深表感谢。(收稿日期:2007 年 1 月)

参考文献:

- [1] 全球 500 强超级计算机网站.<http://www.top500.org/>.
- [2] AMD White Paper:AMD64 计算平台.http://www.amd.com.cn/CHCN/assets/content_type/white_papers_and_tech_docs/30172C.pdf.
- [3] 工业标准服务器所采用的 x86 处理器特性,HP White Paper:技术概要.2 版(日语).http://www.compaq.co.jp/products/servers/proliant/whitepaper/wp041_051214/pdfs/wp_051214.pdf.
- [4] x86-64™ technology white paper,advanced micro devices,Inc.http://www.amd.com/us-en/assets/content_type/white_papers_and_tech_docs/x86-64_wp.pdf#search=%22x86-64_wp.pdf%22.
- [5] 64-bit Intel® Xeon® processor dual processor server systems.<http://download.intel.com/products/processor/xeon/serverplatformbrief.pdf>.
- [6] White Paper:Intel announces Xeon processor with 64-bit extensions.http://www.intel.com/technology/64bitextensions/idc_intel_xeon_whitepaper.pdf.
- [7] AMD Opteron™ processor workstation competitive comparison.http://www.amd.com/us-en/assets/content_type/white_papers_and_tech_docs/30172C.pdf.