

使用英特尔® 至强融核™ 处理器 提升 HPC 工作负载的性能与能效

基于 LAMMPS 的测试表明英特尔至强融核面对严苛的应用需求时具备巨大潜力



英特尔®
至强融核™

英特尔® 至强融核™ 处理器的 架构优势

- 第二代英特尔® 至强融核™ 处理器可用作独立的 CPU，能够将单线程性能最多提高 3 倍²。
- 采用多核设计，可显著改善能效。
- 支持统一架构，不需要卸载负载或使用单独的主机处理器。
- 为 x86 指令提供了全面的二进制支持，同时降低了未优化的代码对于性能的影响。
- 支持标准编程模型和语言，以提升性能。
- 显著改善了内存带宽能效。
- 提供了增强的指令集，用于简化优化工作，并为非理想循环改进编译器生成的代码。

高性能计算能力现已成为众多行业的必备要求，包括金融、工业设计和医疗等。设计 HPC 系统以及在其上运行的应用程序挑战重重。这是因为其架构十分复杂，且经常需要在云等新环境中运行，同时，诸如大数据等发展趋势还在不断改变工作负载，并持续加快成果产出的速度。能效是其中最为紧迫的挑战。IDC 公司的 HPC 研究副总裁 Steve Conway 表示：“由于系统每年每兆瓦功耗的成本可能高达 100 万美元。因此，必须使系统尽可能使用最少的能源，这至关重要。”¹

提高当今代码的并行运行能力不仅可以支持软件充分利用英特尔® 架构硬件的广泛功能，同时更可以显著提高能效。通过在最新款英特尔® 至强® E5 v4 和英特尔® 至强融核™ 处理器上优化代码，您将可以有效利用多核处理能力，更快获得出色洞察。

大规模原子分子并行模拟器 (LAMMPS) 是一个软件包，用于执行经典分子动力学 (MD) 模拟。该模拟器以其广泛的通用性而广受欢迎，能够支持一系列势能模型、大范围解算器、统计计算和各种模拟选项。LAMMPS 是开源代码，遵循 GNU* 通用公共许可证。

在新款英特尔® 至强® E5 v4 和英特尔® 至强融核™ 处理器上进行的 LAMMPS 性能评估表明，相比上一代处理器上未经优化的代码，**模拟速度提高 7 倍以上，CPU+DRAM 功率效率提升 9 倍以上**。²

下方概要简述了这一初始测试及其结果。更详细的技术讨论请参阅出版物《*Increasing Molecular Dynamics Simulation Rates with an 8-Fold Increase in Electrical Power Efficiency* (更高的分子动力学模拟速度与 8 倍电力能效提升)》中。

高达

9 倍

通过在英特尔® 至强融核™ 处理器上运行优化的代码，CPU+DRAM 能效最高提高 9 倍²

高达

7.6 倍

通过在英特尔® 至强融核™ 处理器上运行优化的代码，模拟速度最高加快 7.6 倍²



运用于英特尔® 至强® 处理器上的优化同时还改善了其性能和能效²

高级架构带来无限可能

用于支持高效矢量化和数据本地化的优化对于发挥多核处理器的潜力至关重要，同时对于电力功率效率也有着重要作用。

英特尔® 至强融核™ 多核架构取得的重大进展使其可以用作独立 CPU。就 LAMMPS 应用而言，相比上一代双插槽英特尔® 至强® 处理器，未优化的基准软件在所有情况下均展示出同等或更好的性能功耗比。我们认为这是一个非常重要的成就突破，因为该 LAMMPS 代码并未针对指令、任何特定厂商、或特定架构进行明确的矢量化优化。

尽管仍需要在英特尔® 至强融核™ 架构上进行优化以实现能效的显著提升，但由于多核处理器可用作独立 CPU（在英特尔® 高级矢量扩展 512 指令集（英特尔® AVX-512）的支持下），因此优化所需的工作量大大减少。

对于所有测试的处理器，在 LAMMPS 中基于英特尔® 技术进行的优化均显著改善了性能。²

优化测试展示出的性能改善非常突出，表明 LAMMPS 能够更有效地利用新推出的 x86 处理器。这些测试中的软硬件优化结果表明，相比上一代英特尔® 至强® 处理器一年前的性能，在英特尔® 至强融核™ x200 系列处理器上，模拟速度提升了 7.6 倍²，同时性能功耗比提升了 9.1 倍²。与其他配置相比，使用 215W TDP 的英特尔® 至强融核™ 处理器的功耗显著降低。潜在的能效改进支持在功耗不变的情况下增加节点数量，从而能够为可扩展的 HPC 应用带来显著的性能提升。由于最新一代英特尔® 至强融核™ 处理器可以用作独立 CPU，因此优化可使用标准编程模型，不需要修改代码以卸载工作或在异构系统上更有效地运行。

基本要点

总体而言，这些优化还可提升标准英特尔® 至强® 处理器家族的性能。对于受带宽限制的软件，相比最新英特尔® 至强® E5 v4 架构，英特尔® 至强融核™ 架构可借助多通道 DRAM（MCDRAM），带来显著的性能改进潜力。对于这些代码，可能不需要优化软件便可实现显著的性能增强。但是对于其他代码，为实现英特尔® 至强融核™ 架构的全部潜力，必要时需对矢量化和数据本地化进行优化。否则在大多数情况下，相比英特尔® 至强® E5 v4，英特尔® 至强融核™ 处理器的性能功耗比更低。

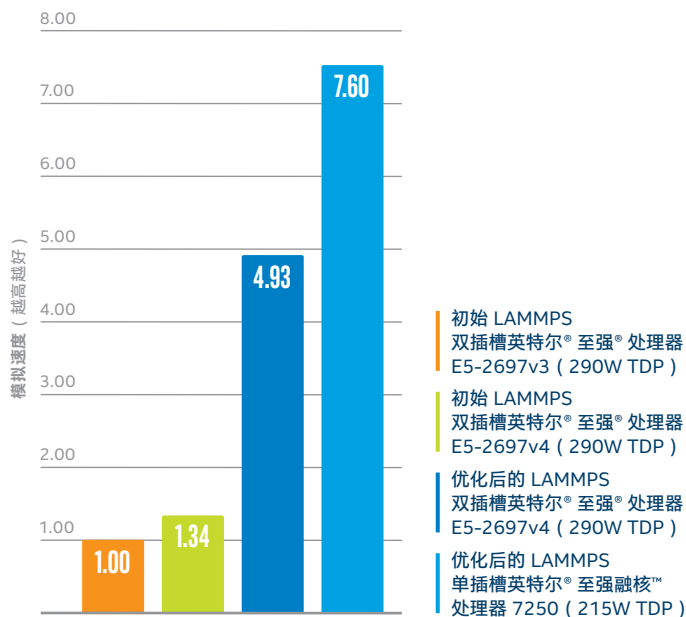


图 1

软件优化与最新发布的英特尔® 至强® 处理器 E5 v4 系列以及第二代英特尔® 至强融核™ 处理器中的硬件改进带来的 LAMMPS 性能（模拟速度）和能效（性能功耗比）改善。² 性能功耗比仅使用 CPU 和内存进行衡量，不包括其他的系统功耗。改进采用材料科学研究中使用的模拟模型获得。工作负载详情和其他模拟模型的结果请参阅出版物《Increasing Molecular Dynamics Simulation Rates with an 8-Fold Increase in Electrical Power Efficiency（更高的分子动力学模拟速度与 8 倍电力能效提升）》。

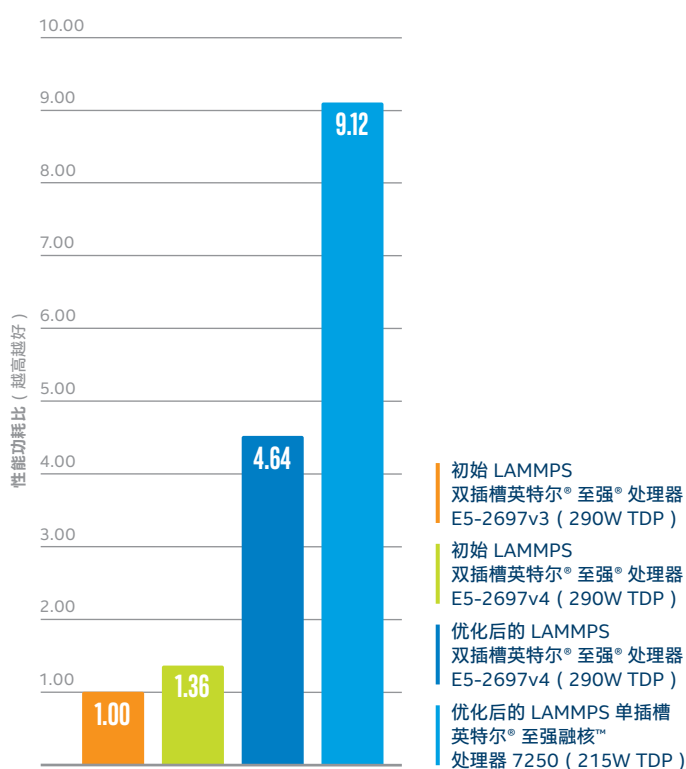


图 2

使用上一代处理器上的优化代码作为集群节点级性能的基准，不启用睿频加速技术时，新型英特尔® 至强® E5 v4 架构可以实现 1.27 倍模拟速度提升² 和 1.38 倍能效改善²。如果启用睿频加速技术，那么相比上一代处理器，模拟速度提升 1.4 倍，能效改善 1.5 倍²。

英特尔® 至强融核™ 处理器所体现的改善则更加显著。相比运行在上一代双插槽英特尔® 至强® 处理器上的优化代码（不启用睿频加速技术），模拟速度提升高达 1.94 倍²，性能功耗比改善高达 2.68 倍²。相比双插槽英特尔® 至强® E5 v4 处理器，英特尔® 至强融核™ 处理器的 LAMMPS 模拟速度提升高达 1.5 倍²，性能功耗比改善高达 2 倍²。尽管英特尔® 至强® E5 v4 CPU 启用睿频加速技术时能达到更好的性能，但英特尔® 至强融核™ 处理器在启用睿频加速技术时的改善也非常显著。在这种情况下，相比英特尔® 至强® E5 v4 处理器，英特尔® 至强融核™ 处理器上的 LAMMPS 性能提升 1.43 倍²，性能功耗比改善 1.89 倍²。

结论

相比第一代处理器，英特尔® 至强融核™ 处理器在封装架构、微体系结构和工艺技术等方面展示出显著改善。如果使用 LAMMPS 测得的结果对其他代码也成立，则英特尔® 至强融核™ 处理器对于需要运行广泛可扩展 HPC 代码的 HPC 中心而言将是一个理想的选择。

英特尔® 至强融核™ 处理器支持英特尔 AVX-512，每个内核支持两个矢量单元。因此，矢量化代码是实现峰值性能的一个相当重要的部分。英特尔 AVX-512 将矢量宽度从 256 位扩展到 512 位，每个矢量单元同时允许执行多达 8 组浮点计算，其他优势包括编译器能够更轻松地生成高效矢量代码等。²

相比上一代英特尔® 至强融核™ 架构或 GPU 加速器，在异构架构上无需使用主机负载的均衡功能管理异步卸载。相比使用 AVX2 的英特尔® 至强® 处理器，由于 AVX-512 支持通过抑制故障屏蔽错误，因此其能够在非理想循环上为编译器指令带来更高效的矢量性能。

这些初步研究结果基于单节点 CPU+DRAM 功耗测量的高度可信数据。根据设计，系统功耗会受到多种因素的影响，包括文件系统、冷却、网络适配器、协处理器和加速器等。根据具体配置，上述因素可能显著增加功耗，在多节点模拟中评估这些因素也是当前的一个研究热点。

更多信息

请参阅出版物：

《Increasing Molecular Dynamics Simulation Rates with an 8-Fold Increase in Electrical Power Efficiency (更高的分子动力学模拟速度与 8 倍电力能效提升)》，Brown 等，英特尔公司，2016 年。

请访问：

intel.com/xeonphi 和 intel.cn/hpc



扫码关注英特尔商用频道，
查看更多英特尔前沿技术及
解决方案。

英特尔商用中心：intel.cn/itcenter



1. Steve Conway，研究副总裁，高性能计算，IDC，2016 年。

2. 相比英特尔® 至强® E5 v3 处理器上的原始代码。

英特尔测量的节点与软件配置：性能指标评测由英特尔在以下处理器上运行：双插槽英特尔® 至强® E5-2697v3 处理器（Haswell）和 E5-2697v4（Broadwell），以及单插槽英特尔® 至强融核™ 7250 处理器（Knights Landing）。其各自的 BIOS 版本是 SE5C610-86B-01-01-5008-081020151115、SE5C610-86B-01-01-0015-012820160943 和 GVPRCRB1-86B-0009-D10-1602121844。各自的 Red Hat Enterprise Linux® 版本分别为 6.6、6.7 及 6.7，内核分别为 2.6.32、3.10 和 3.10。各自的处理器步进分别为 2、1 及 1。各自的 DDR4 配置分别为 8x8GB 2133MHz、8x16GB 2400MHz 和 6x16GB 2400MHz。集群/监听模式分别为“Home”、“Home”、以及“Quadrant”，Knights Landing 节点配置为“Flat”模式，使 MCDRAM 不可用作三级高速缓存。二进制文件使用 LAMMPS 提供的“intel cpu”和“knl”makefile 生成。除了目标 ISA，所有优化标志都是相同的。“16 年 3 月 22 日”版本的 LAMMPS 在英特尔® 16.0.2 编译器上使用 5.1.2.150 版本的英特尔® MPI 编译得到。

性能测试中使用的软件和工作负载可能仅在英特尔® 微处理器上进行了性能优化。诸如 SYSmark® 和 MobileMark® 等测试均系基于特定计算机系统、硬件、软件、操作系统及功能，上述任何要素的变动都有可能导致测试结果的变化。请参考其它信息及性能测试（包括结合其它产品使用时的运行性能）以对目标产品进行全面评估。更多信息敬请登陆 intel.com/performance

英特尔公司 © 2016 年版权所有。所有保留。英特尔、Intel 标识、Intel Inside、Intel Inside 标识、Xeon、至强、Xeon Phi 和至强融核是英特尔公司在美国和其他国家的商标。

*其他的名称和品牌可能是其他所有者的资产。