

高性能并行计算机的发展及其在石油勘探中的应用

李敏

中国石油化工股份有限公司石油物探技术研究院, 南京 211103

摘要 高性能计算机是推动工业发展的重要工具和手段。本文综述高性能计算机发展的几个关键问题, 阐明处理器的发展趋势正在过渡到新一代多核心异构并行计算系统过程中, 其中多核心缓存设计和多核心异构编程模型设计是关键因素, 云计算技术可能成为将来高性能计算的重要推动因素。最后, 结合石油勘探中对计算机的需求, 以CPU+GPU的异构计算系统为例, 阐明高性能计算的重要推动作用。并行算法的开发平台和程序设计方法是影响石油勘探中的高性能计算应用的主要瓶颈; 磁盘 I/O、高速网络和并行文件系统是制约高性能计算的重要因素。

关键词 多核处理器; 云计算; 石油勘探; 图形处理器; 中央处理器

中图分类号 TE19

文献标志码 A

doi 10.3981/j.issn.1000-7857.2014.2.013

Development of High Performance Computer and Its Application to Petroleum Exploration

LI Min

Sinopec Geophysical Research Institute, Nanjing 211103, China

Abstract High performance computer (HPC) is an important tool and means to promote the industrial development. This paper points out several key problems in the development of HPC, and expounds the development trend that the processors are in a transition to a new generation of multi-core heterogeneous parallel computing system, in which the core cache design and multi-core heterogeneous programming model design are the key factors. The cloud computing technology may be an important factor to promote the future HPC. Finally, to meet the needs for computers in petroleum exploration, the important role of HPC is further clarified, with the CPU+GPU heterogeneous system as the example. It is pointed out that the development platform and programming method of parallel algorithm are the main bottlenecks of HPC application in petroleum exploration. I/O features of disk, high-speed network and parallel file system are also important factors to affect the HPC application.

Keywords multi-core processor; cloud computing; petroleum exploration; graphics processing unit; central processor unit

随着双核心处理器逐渐成为个人电脑的主流配置以及八核心桌面系统的出现, 正迅速朝着多核心的时代迈进^[1]。将一个双核甚至是四核处理器装到PC的主板上, 即使不做任何软件改动, 也能产生额外的吞吐能力, 这是因为操作系统负责为各个核心安排具体的任务, 哪个核心有处理能力可用, 它就会自动开始新的线程。对于普通用户, 更多的处理核心仅仅意味着更好的性能。不过, 随着处理核心增加到8个或者更多, 在常规的程序设计模型下所看到的多核心的好处就开始减少。同时运行Windows和几个应用程序, 总

有上百个线程处于活动状态, 但其中的大多数并未工作, 并且面对用户的应用程序多数需要交互实现, 一个人不可能同时操作多个交互界面并行运行。因此, 并行运行多个线程实际上并不能显著提升性能。若要想充分发挥多核处理器的优势, 就需要对程序引擎进行相当大的重写, 让未来的多核心处理器充分发挥性能并不像过去想得那样简单。架构和软件问题逐渐成为目前高性能计算的核心问题。

在石油勘探领域, 高性能计算是不可或缺的一项技术, 多计算核心通常能够发挥出其最大的效率, 但是同样需要重

收稿日期: 2013-03-13; 修回日期: 2013-12-03

作者简介: 李敏, 工程师, 研究方向为高性能计算和信息化办公系统, 电子邮箱: limin.swty@sinopec.com

引用格式: 李敏. 高性能并行计算机的发展及其在石油勘探中的应用[J]. 科技导报, 2014, 32(2): 80-83.

新开发并行算法。与Windows用户不同,石油勘探多数与计算密集型的非交互算法相关联,无需用户交互计算,只需要随时可以监控计算进度和状态即可。这种类型的应用正是高性能计算目前能够发挥重大作用的机会,同时也是高性能计算技术发展的重要动力之一。本文以处理器的发展为出发点,分析高性能计算和石油勘探的密切关系,预测未来的发展方向。

1 处理器的发展

多核心芯片的开发是由传统单核心处理器在设计的实用效率和经济上限制推动的^[2]。随着芯片几何尺寸的缩小,以及它们的复杂性和时钟频率的提升,功耗与散热逐渐成为一个大问题,此外,还出现了其他一些难以解决的问题(例如,宇宙射线造成的软错误和布线造成的信号延迟影响),这些都使得芯片的开发和调试过程变得缓慢又困难。这也是为什么在很长一段时间里,处理器的性能都是每18个月提高1倍,而在过去的5年中,处理器的性能收益呈现递减态势的原因^[3]。在单核处理器开发受阻的情况下,多核心芯片的设计绕过了很多问题,使用更为简单、完全相同的处理核心使得处理器设计更容易可靠地构建。可见,处理器正在从单核心朝着多核心的方向发展。

那么,一块拥有100个相同处理核心的芯片真能实现对硅的最有效利用,产生最大的吞吐量吗?也许可以从大型计算机先驱Gene Amdahl在40多年前制定的理论中获得一些启示。他指出:所有软件都包含一些无法从并行处理中受益的串行处理,因此,添加一个快速的处理器加速顺序码处理,将产生较之10个小并行处理核心更高的吞吐量。假设在一个100核的处理器上,一个程序有10%并没有获得额外的速度提升,用一个专门给10%代码加速的单核心替换其中的10个核心,就可以得到一个效率要高得多的91核心处理器。这样就形成一种异构处理器研究的方向。

因为相同的处理核心在设计和构建上要容易得多,而且还能能为软件提供一个标准的平台。但在异构型环境中,对多个执行线程进行优化非常困难而且需要一种高效的通信架构来实现各个并行核心的正确执行。

2 多核心计算机的缓存

处理器上嵌入的高速缓存对于多核心设计至关重要^[4]。Intel的Core 2 Duo处理器使用一个共享的高速缓存,可以根据需要动态分配给两个核心,而AMD的双核处理器则是为每一个核心配备了专用的高速缓存。无论是共享缓存还是独立缓存都有其优缺点,将来可能需要将这两种不同的设计适当地结合在一起。因为某些应用程序可能需要配备专用的高速缓存,而在多个核心间同时共享的可动态改变的高速缓存可能更适用于其他某些应用程序。然而,在任何情况下,都需要制定改进的缓存一致性协议,确保内存存取独立,同时,使处理核心的运算保持同步。可能的解决方案就是将所

谓的事务型内存,在这种安排下,多核心更新共享内存,但只在特定的指令完成后且不与其他处理器发生冲突的情况下,才执行此更改。如果操作失败或者发生冲突,那么更改就被复原,同时共享内存被恢复到该指令执行前的状态。这一架构使得编程变得简单,但却是以执行时间和复杂的硬件实现为代价的。

与此同时,在多核心处理器外部的RAM架构也取得了一些进展。例如,512 MB RAM(随机存取存储器)芯片的内部有数百个存储体,每个都有几千比特带宽,使用新的封装技术,就可以提高RAM到处理器的传输带宽,甚至还可能将相当数量的RAM直接安装到处理芯片上,而不是像现在这样,将它们放到由相当缓慢的低速存储总线连接的不同的芯片封装中去。这一点对于多核心处理器的未来发展意义重大。

3 多核心处理器编程模型

任何硬件平台的性能都依赖于运行的软件。编程模型的定义需要考虑到“不透明性”和从硬件中提取软件架构,这样,编程人员就不再需要知道处理器的复杂细节和“可见性”,这就使得所有硬件元件都可以对开发人员可见,从而更容易开发出最优的软件^[5]。必须充分注意为并行多核心系统建立程序模型时人的心理因素:减少错误,尽量使开发方式符合人的思维,而不是适合硬件或一个系统平台的功能性模块。达到这个目标需要满足几个要求:1)不需要考虑计算任务到处理器的显式映射;2)编程模型应当独立于目标系统中的物理处理器的具体数量,尤其是在处理核心不断翻倍的情况下;3)可以通过定点和浮点选择使用多种数据类型,那么应用软件开发人员就能更高效地工作。

多核心并行运算非常适合用于有效地处理大量数据、快速分类和数据挖掘,通过对编程模型进行调整,从而得到更有效的成果。对软件开发来说,多核心处理器的蓬勃发展带来了新的机遇和挑战。

4 云计算

云计算是网格计算、分布式计算、并行计算、网络存储、虚拟化、负载均衡等传统计算机和网络技术发展融合的产物^[6]。它是继20世纪80年代大型计算机到客户端—服务器的大转变之后的又一巨变。用户不再需要了解“云”中基础设施的细节,不必具有相应的专业知识,也无须直接进行控制。

云计算描述了一种基于互联网的新的IT服务增加、使用和交付模式,通常涉及通过互联网来提供动态易扩展而且经常是虚拟化的资源。云其实是网络、互联网的一种形象的说法。因为过去在图中往往用云表示电信网,后来也用来表示互联网和底层基础设施的抽象。典型的云计算提供商往往提供通用的网络业务应用,可以通过浏览器等软件或者其他Web服务访问,而软件和数据都存储在云服务器上。云计算的关键要素就是个性化、简便和随意的用户体验。

高性能计算与云计算有紧密的联系,也有不同的特点。

高性能计算的发展以多核心异构计算的方向发展,需要借鉴云的服务方式和资源调度模式,并充分发挥更多硬件资源和软件资源的功效,但在实际操作中仍存在诸多的问题,例如,资源的调度开支、服务软件的设计与开发等。这些问题的解决还需要很长一段时间的发展。另外,多核心异构计算的发展最终将会靠近云计算的运行模式,同时服务模式和运营模式也会有相应的转变,最终利用云计算的思想来实现高性能计算。

5 石油行业的高性能计算

石油勘探的能力与计算手段密切相关,现阶段最流行、最精准的油气勘探法就是地震波法,其主要原理就是通过人工地震波,采集传入地下深处的不同形态岩层形成的反射波,转变为数据,并通过计算处理模拟勘探区域地下的地质构造^[6]。这样便可以精确地找到储藏石油或天然气岩层的精确位置。由于地震波法勘探收集的数据通常都以TB计,在海洋勘探过程中收集到的数据容量更是会突破PB级别量^[6],因此要处理这些海量的数据,就只能借助性能出色的高性能计算机,才能在最短的时间内完成,以实现最佳的勘探效益。

石油勘探的应用中要求高性能计算机必须要提供出色的浮点运算性能,在性能上也要有很好的可扩展性,对系统的内存带宽要求较高,并需要大缓存支持。以上这些应用的需求,看起来通过具体相对应配置特征的服务器就可以解决,但是如果仅仅将视角放在服务器层面,却不一定能够获得理想的应用效果,这是因为高性能计算机虽从表面上看似就是一台计算机,其实它是一个高性能计算的集群系统,这个系统也需要同样强劲的存储和网络设备的支持,它们也和其他应用领域使用的IT基础设施一样,是以数据中心的形态出现的,因此石油行业用户要让自己的高性能计算机在处理勘探数据时发挥最大效用,就必须从更高的层面考虑,构建一个计算、存储和网络组件之间性能保持平衡、彼此配合“融洽”^[7],具备高效率、易管理的高性能计算数据中心,这样才能获得最高的业务执行效率和最佳的投资回报。

从硬件发展方面来看,石油行业中的应用通常会第一时间反映出高性能计算的进步,具体表现在处理器的更新发展、体系结构的变化、网络环境等层面上来。随着处理器的更新发展,石油勘探中的很多重要技术手段得以升级,把以往计算机不能承载的方法,如今都已逐步推向生产实际的应用,例如逆时偏移和全波形反演等^[8]。于此同时,高性能计算机的体系结构也呈现巨大的改变,近年来从以往CPU主宰的PC集群方式逐渐更新为PC集群中包含多核心向量处理器的体系结构。新增加的向量处理器与中央处理器共同完成并行计算的任务,可实现多尺度的并行算法研究与开发,例如CPU+GPU的体系结构和Intel公司的MIC处理器^[9]。另外,由于向量处理器中无须大量的缓存作为支撑,所以可以节省大部分的面积用以安装计算晶体管,实现在很小面积的芯片上集成成千上万个计算核心的目的,这样就可以大幅度增加计算效率。这样与原来PC集群的体系结构相比,新的体系结

构具有计算效率高、占地空间少和资源消耗少的优点。石油勘探中的很多计算密集型的方法也都是得益与此类体系结构的出现而实现工业化应用,例如逆时偏移等技术。另一方面,无论多快速的计算机也要配备快速的数据访问能力才能实现其高性能计算的目的,所以网络技术和并行文件系统的发展在高性能计算领域是必不可少的环节^[10]。近年来,以InfiniBand网络互联的并行文件系统的开发和实施将逐渐取代以往千兆以太网络的磁盘管理系统,从百兆的访问速度提升到10 Gbps的磁盘访问速度。石油行业对此项技术的需求非常迫切,现阶段石油勘探采集的数据通常以TB为单位,将来数据采集仍逐渐进行从窄方位角到宽方位角转变,从常规采集到高密度采集转变,从中深层勘探到更深层的勘探转变,从常规地震资料处理方法向非常规精细地震资料处理方法转变,从以往以月计算勘探周期压缩到以周计算生产周期,甚至实时勘探要求的转变等^[11],这些石油行业的应用都离不开网络技术和并行文件系统的飞速发展,并且随着高性能计算机的发展,实际计算效率的瓶颈也很可能出现在数据访问上,所以解决网络和磁盘问题与处理器的提速问题是同等重要的。

从软件方面来看,并行编程环境和并行算法的研究发展也是石油行业迫切需要的发展方向^[12]。20世纪70年代末和80年代初是并行算法研究的顶峰时期,最著名的成果是递归问题的向量化。随着多向量处理并行计算机的出现,既要考虑多处理机间的任务级大粒度并行,又要考虑单处理机上向量级细粒度并行的算法。基于SIMD并行计算机设计的并行算法在20世纪80年代中期较热门,但因缺少通用性,过分依赖机器,程序设计复杂,随着20世纪80年代后期高性能计算机的发展,很快被淘汰。目前,并行算法的设计以MIMD类为主流,要求具有可扩展性和可移植性。20世纪90年代中期后,并行算法研究渐渐面向实际而内容有所拓宽,不但研究并行算法的设计与分析,同时也兼顾到并行机体系结构和并行程序设计。21世纪以来,随着纳米技术和处理器的快速发展,单位面积上的晶体管已经基本达到饱和状态,处理器的提速逐渐缓慢,以Intel和AMD厂商的CPU为例,其发展方向逐渐朝着多核多线程方向发展,但是由于固有的设计传承,对高性能计算的推动已经逐渐不能满足石油行业大规模计算的需求。21世纪初期,不同种类的多核心少缓存的向量处理器又重新登上历史舞台,例如GPU, FPGA等计算设备的快速更新^[13],这种处理器在单位面积上晶体管的计算效率以指数方式逐年递增,此类设备与CPU组合的方式被大量的研究和开发,以NVIDIA的CUDA(统一设备架构)平台最为成功^[14]。

从并行算法的设计上讲,基于消息传递的MPI和PVM等^[15,16]仍然主宰着MIMD并行算法的设计,而新的CPU+GPU的体系结构被称为异构并行计算机的框架中^[17],SIMD的程序设计方法的研究也重新占据重要的位置,并且现阶段的程序设计思路以粗粒度的MIMD与细粒度的SIMD相结合开发的方式快速的融合和演化,出现很多软件的编译平台即可以

支持MIMD程序的编译也可以进行SIMD程序的编译。

从上述的硬件设备的发展和并行程序设计的编程模型发展来看,NVIDIA推出的CUDA编程模型的出现是推动石油勘探行业发展的重要节点^[8],正因为有了可以编程的接口才使得石油行业可以更加有效的发挥CPU+GPU异构系统的高性能计算优势。另一方面,正是因为出现了InfiniBand等高速互联网络技术和对应的并行文件系统才使得CPU+GPU的异构多核心系统能够真正高效的应用于石油勘探中^[18,19]。

此外,近几年出现的云计算平台的商业化应用,也是计算和管理一体化发展趋势的突出表现^[20]。随着用户与工业目标的接近,用户需要随时随地的应用高性能计算机,例如三维可视化、油藏的动态模拟和随钻实时勘探等技术,不仅需要足够快速的计算机,而且还需要足够方便的管理方式。这样就能使计算与生产任务最有力的结合,最大限度的发挥高性能计算机的效率。云计算的发展与演化正是这一方面的需求所促成,中国石油行业的首个云计算平台已经在中国石化企业中落成,并且运行良好。

6 结论

高性能计算仅仅随着处理器本身的发展而发展的时代已经远去,而处理器的发展从单核心的处理能力向多核心方向发展,系统架构向着多核心异构的方向发展,以云计算为基础的系统组织方式、服务方式和资源调度方式已经进入工作实践中,在不久的将来也会为石油勘探事业提供强大的资源利用能力,为石油勘探的高性能计算提供强有力的工具。

参考文献 (References)

- [1] 田荣, 王迎瑞. 异构架构的新型高效协同模式[C]// 中国高性能计算2013年会文集, 2013: 751-757.
Tian Rong, Wang Yingrui. A new co-processing model on emerging heterogeneous architectures[C]// China High Performance Computing Annual Meeting, 2013: 751-757.
- [2] 吴杰谦, 严然, 栾钟治, 等. 云计算环境下资源动态分配方法研究[C]// 中国高性能计算2013年会文集, 2013: 677-680.
Wu Jieqian, Yan Ran, Luan Zhongzhi, et al. Research on dynamic resource allocation in cloud[C]// China High Performance Computing Annual Meeting, 2013: 677-680.
- [3] 刘谷. 可重构众核流处理器上的编译与程序优化技术[D]. 合肥: 中国科学技术大学, 2013.
Liu Gu. Compiler and program optimization on reconfigurable many-core stream processor[D]. Hefei: University of Science and Technology of China, 2013.
- [4] 李波. 基于异构多核平台的优化编程研究[D]. 武汉: 华中科技大学, 2011.
Li Bo. Research on optimized programming for heterogeneous multi-core platform[D]. Wuhan: Huazhong University of Science and Technology, 2011.
- [5] 林一松. 面向GPU的低功耗软件优化关键技术研究[D]. 长沙: 国防科学技术大学, 2012.
Lin Yisong. Study of low power software optimization technology for GPUs[D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2012.
- [6] 郭御风. 面向多核微处理器芯片的高效能I/O体系结构及其实现技术[D]. 长沙: 国防科学技术大学, 2010.
Guo Yufeng. Research on high productivity I/O architecture and implementing technology for multi-core microprocessor chip[D]. Changsha: National University of Defense Technology, 2010.
- [7] 赵改善, 李剑峰, 王于静, 等. 网格计算技术及其在石油勘探开发中的应用前景[J]. 石油物探, 2005, 44(5): 413-420.
Zhao Gaishan, Li Jianfeng, Wang Yujing, et al. Grid computing and prospect in petroleum E&P[J]. Geophysical Prospecting for Petroleum, 2005, 44(5): 413-420.
- [8] Wang P H, Collins J D, China G N, et al. Architecture and programming environment for a heterogeneous multi-core multithreaded system [C]// Proceedings of the 2007 ACM SIGPLAN Conference on Programming Language Design and Implementation, PLDI'07, 2007.
- [9] Nickolls J, Buck I. NVIDIA CUDA software and GPU parallel computing architecture[C]// Proceeding of the 6th International Symposium on Memory Management, 2007.
- [10] 赵改善. 我们需要多大和多快的计算机[J]. 勘探地球物理进展, 2004, 27(1): 22-28.
Zhao Gaishan. How big and fast computers can meet our needs[J]. Progress in Exploration Geophysics, 2004, 27(1): 22-28.
- [11] Thakkar S, Huff T. Internet Streaming SIMD Extensions[J]. Computer, 1999, 32(12): 26-34.
- [12] 迟学斌, 赵毅. 高性能计算技术及其应用[J]. 中国科学院院刊, 2007, 22(4): 306-313.
Chi Xuebin, Zhao Yi. High performance computing technology and its applications[J]. Bulletin of Chinese Academy of Sciences, 2007, 22(4): 306-313.
- [13] 赵改善. 地球物理高性能计算的新选择: GPU计算技术[J]. 勘探地球物理进展, 2007, 30(5): 399-405.
Zhao Gaishan. New alternative to geophysical high performance computing: GPU Computing[J]. Progress in Exploration Geophysics, 2007, 30(5): 399-405.
- [14] Lee S, Min S J, Eigenmann R. OpenMP to GPGPU: A compiler framework for automatic translation and optimization[C]// Proceedings of the 14th ACM SIGPLAN symposium on Principles and practice of parallel programming, 2009.
- [15] Lam M S, Rothberg E E, Wolf M E. The cache performance and optimizations of blocked algorithms[C]// Proceedings of 4th International Conference on Architectural Support for Programming Languages and Operating Systems, 1991.
- [16] Lee S, Eigenmann R. OpenMPC: Extended OpenMP Programming and Tuning for GPUs[C]// Proceedings of the 2010 ACM/IEEE International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis, 2010.
- [17] 李博, 刘红伟, 刘国峰, 等. 地震叠前逆时偏移算法的CPU/GPU实施对策[J]. 地球物理学报, 2010, 53(12): 2938-2943.
Li Bo, Liu Hongwei, Liu Guofeng, et al. Computational strategy of seismic pre-stack reverse time migration on CPU/GPU[J]. Chinese Journal of Geophysics, 2010, 53(12): 2938-2943.
- [18] 张军华, 臧胜涛, 单联瑜, 等. 高性能计算的发展现状及趋势[J]. 石油地球物理勘探, 2010, 45(6): 918-925.
Zhang Junhua, Zang Shengtao, Shan Lianyu, et al. Development status and trends for high performance computing[J]. Oil Geophysical Prospecting, 2010, 45(6): 918-925.
- [19] 赵毅, 朱鹏, 迟学斌, 等. 浅析高性能计算应用的需求与发展[J]. 计算机研究与发展, 2007, 44(10): 1640-1646.
Zhao Yi, Zhu Peng, Chi Xuebin, et al. A brief view on requirements and development of high performance computing application[J]. Journal of Computer Research and Development, 2007, 44(10): 1640-1646.
- [20] 赵改善. 地球物理软件技术发展趋势与战略研究[J]. 勘探地球物理进展, 2010, 33(2): 77-86.
Zhao Gaishan. Developing trend of geophysical software technology and strategy research[J]. Progress in Exploration Geophysics, 2010, 33(2): 77-86.

(责任编辑 吴晓丽)