

面向工业的高性能计算服务平台设计与实现

陈家慧, 刘杰, 刘晶, 姜恺

(上海超级计算中心, 上海 201203)

摘要: 为了满足工业仿真用户对高性能计算的便捷化、专业化、个性化及共享化需求,上海超级计算中心采用互联网、大数据等技术,自主开发构建了高性能计算服务平台。首先,聚合工业研发所需的计算、存储、可视化及应用软件等资源,实现异构资源的统一管理 & 监控,增强了资源的可使用性;其次,根据计算任务的资源需求进行作业调度,在高性能计算机上实现仿真计算作业,提升计算效率、准确性;再次,将有关数据的操作封装为服务,以统一访问与远程管理计算环境中的用户数据,增强数据安全性、可靠性;最后,提供了基于大数据技术的增值服务,辅助用户更好地进行计算与决策。实践表明,平台投入业务化运行后,可支撑汽车、航空、船舶和电子等工业领域的工程研发和产品创新,为企业提供了仿真模拟、优化分析、数据管理和智能化决策等解决方案。

关键词: 高性能计算;工业仿真;大数据;资源聚合;作业调度

DOI: 10.11907/rjdk.241569

扫描二维码阅读全文:



中图分类号: TP317

文献标识码: A

文章编号: 1672-7800(2025)010-0155-09

Design and Implementation of High-performance Computing Service Platform for Industry

CHEN Jiahui, LIU Jie, LIU Jing, JIANG Kai

(Shanghai Supercomputer Center, Shanghai 201203, China)

Abstract: In order to meet the needs of industrial simulation users for the convenience, specialization, personalization and sharing of high-performance computing, Shanghai Supercomputing Center has independently developed and built a high-performance computing service platform using Internet, big data and other technologies. Firstly, aggregating the computing, storage, visualization, and application software resources required for industrial research and development enables unified management and monitoring of heterogeneous resources, enhancing their usability; Secondly, job scheduling is carried out based on the resource requirements of computing tasks, and simulation computing jobs are implemented on high-performance computers to improve computing efficiency and accuracy; Once again, encapsulate data operations as services to unify access and remote management of user data in the computing environment, enhancing data security and reliability; Finally, value-added services based on big data technology are provided to assist users in better computing and decision-making. Practice has shown that after the platform is put into business operation, it can support engineering research and product innovation in industrial fields such as automobiles, aviation, ships, and electronics, providing enterprises with solutions such as simulation, optimization analysis, data management, and intelligent decision-making.

Key Words: high-performance computing; industrial simulation; big data; resource aggregation; job scheduling

0 引言

随着我国创新驱动发展战略的实施、工业转型升级及两化深度融合的不断推进,工业产品研发受到前所未有的

重视。工业和信息化部在《“十四五”信息化和工业化深度融合发展规划》中,全面部署两化深度融合发展工作重点,加速制造业数字化转型,持续做好两化深度融合。我国是制造业大国,制造业是国民经济的主体^[1]。制造业数字化转型就是将数字化技术融入企业产品、服务和流程当中,

收稿日期: 2024-07-02

作者简介: 陈家慧(1972-),女,硕士,上海超级计算中心高级工程师,研究方向为高性能计算与云计算技术应用、业务平台测试与质量评价;刘杰(1984-),男,硕士,上海超级计算中心高级工程师,研究方向为高性能计算与云计算技术应用、业务平台研发;刘晶(1980-),女,上海超级计算中心工程师,研究方向为高性能计算业务平台测试与质量评价;姜恺(1977-),女,上海超级计算中心高级工程师,研究方向为高性能计算与云计算应用。本文通讯作者: 陈家慧。

离不开数字化与工业软件^[2]。作为工业制造的“灵魂”载体,工业软件不仅是推动工业互联网高质量发展的主力军,还是支撑中国制造领先地位的关键所在,如果说工业软件是中国制造业的皇冠,那么工业仿真软件则是皇冠上的一颗宝石,是数字迁徙时代当之无愧的“工业之魂”^[3]。工业仿真软件是对工业产品进行计算分析、模拟仿真与优化设计的工程软件,随着工业仿真软件功能和性能不断提升,仿真模型的复杂度与计算精度不断增大,仿真过程基于强大的算力加速建模分析,因此高性能计算赋能工业仿真的效果显著^[4]。

高性能计算(High Performance Computing, HPC)是利用超级计算机实现并行计算的理论、方法、技术及应用的一门技术科学^[5]。通过聚合结构,使用多台计算机和存储设备,以极高的速度处理大量数据,帮助人们探索科学、工程及商业领域中的一些世界级重大难题^[6]。作为科学的第3种手段,高性能计算在工业产品中的创新不可或缺,2023年中国高性能计算机性能的TOP100显示:超级计算机专用于工业制造,突显了工业领域对高性能计算的需求一直具有强劲的增长态势^[7,8]。

通常情况下,在工业领域中起到重要作用的工业仿真与优化分析工作需要综合运用不同类型的仿真资源。然而,传统高性能计算服务资源分散、使用门槛高、服务模式单一、服务质量不高、资源难于共享,无法很好地满足工业产品创新设计需求。如何将高性能仿真与优化分析在国内工业领域中以较低的成本广泛使用,仍是一个亟需突破的问题。近年来,新兴信息技术不断发展,互联网、大数据等技术为解决上述问题提供了新思路。互联网技术使计算资源的共享和远程使用成为可能,工业仿真全过程所需的大量高性能计算能力有了基础保障。其中,大数据是现代高科技发展的产物,是重要的生产要素,金融、汽车、互联网、电信、物流、电影娱乐等在内的各行各业都已融入了大数据印记,现成为工业界和学术界的重要研究对象^[9-12]。

在工业界,应用大数据技术可为提升企业核心竞争力奠定坚实基础,“数据驱动发展”成为时代主题,已成为知识经济时代的战略高地^[13-15]。为此,基于互联网、大数据等技术集成各种创新优化资源,开发并构建了第三方高性能计算创新应用服务平台,以改变传统的生产方式和商业模式,实现资源高度共享,降低用户使用门槛,提升高性能计算服务质量,对深层次推动信息技术与工业领域的融合、提升工业自主创新能力具有重要意义。

在此背景下,本文基于外部供应商与顾客间的价值创造互动的商业模式,提出一个高性能计算服务平台(以下简称平台)^[16]。平台作为从网络效应发展出的一种商业模式,提供了基础设施与应用运行所依赖的环境,建立了人机交互规则,以吸引工业领域用户。

综上,上海超级计算中心自主研发的HPC平台基于互

联网、大数据等技术,聚合了工业产品创新所需的高性能计算、存储、可视化和应用软件等资源,为用户提供了专业、可靠的仿真分析和优化设计服务,为企业提供仿真模拟、优化分析、高性能计算数据管理和智能化决策等全面完善的解决方案。

1 平台设计

1.1 总体架构

为了构建开放、可扩展且易定制的平台,平台架构设计既要考虑系统的扩展性,又要避免复杂的结构,以便更好地提供工业领域的高性能计算服务。

在综合用户体验、功能耦合性及底层资源的扩展性等因素后,平台采用面向服务的体系架构(Services Oriented Architecture, SOA)。具体为:以服务为核心,基于分层方法进行设计,整合集群、存储、应用软件和图形节点等高性能计算资源,部署仿真服务、可视化服务、数据服务、监控服务等服务组件,以提升平台系统的灵活性、可扩展性和可维护性,也易于跨组织、跨语言的第三方进行开发集成^[17,18]。平台架构如图1所示。

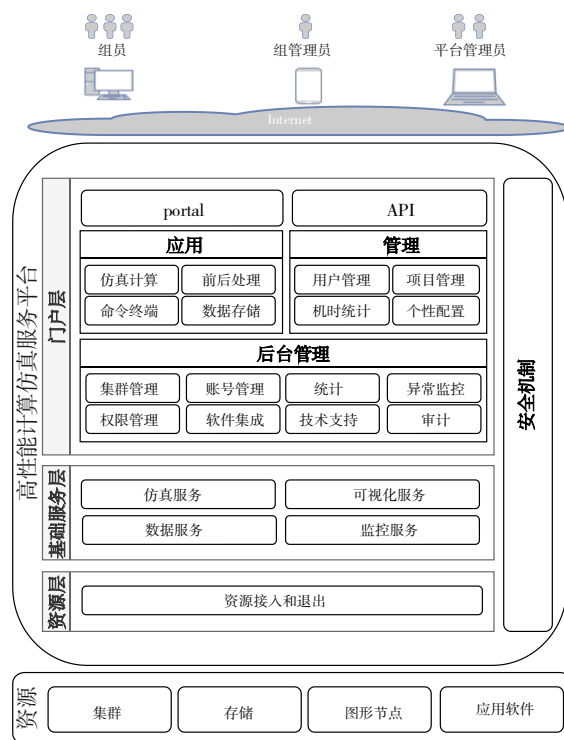


Fig. 1 Overall architecture of high-performance computing service platform

图1 高性能计算服务平台总体架构

1.1.1 架构简介

(1)门户层。该层是平台的对外服务层,提供portal、API两种使用方式。门户层基于基础服务层提供的服务接口,构建了应用、管理和后台管理等模块,不同用户根据权

限控制访问门户层不同模块。在门户层中,应用模块提供仿真计算、前后处理、数据存储和命令行终端等应用服务;管理模块提供用户管理、项目管理、机时统计和个性配置等管理服务;后台管理提供软件、存储、图形节点、集群等资源管理功能(集群管理、账号管理、异常监控、软件集成及权限管理),与终端用户相关的技术支持、行为审计功能。

(2)基础服务层。该层在平台中起到承上启下的作用,基于对计算任务的组织调度、用户数据的安全访问等研究,提供仿真计算服务、监控服务、可视化服务和数据服务:①仿真计算服务封装了高性能计算资源,对上层提供统一的仿真计算接口;②监控服务及时获取集群等资源状态,实现资源的有效调度;③可视化服务集成了图形节点资源,支持远程桌面技术;④数据服务提供在线数据管理功能,支持用户上传、下载大型文件,支持断点续传、自动重传等高级功能。需要注意的是,基础服务层中的各项服务不存在任何关联性,不会相互依赖,可分开部署、独立使用。

(3)资源层。该层是平台不可或缺的部分,主要针对资源的多样性特点,解决高性能计算资源集成的问题,实现资源的动态扩展。基于对计算资源的组织和访问技术的研究,使用多 Cluster 模式支持计算资源规模不断扩大,通过定制不同的驱动模块屏蔽异构资源之间的差异,为基础服务层提供统一的访问接口,实现不同资源的接入、发布和退出。需要注意的是,资源层支持的资源包括集群、存储、应用软件和图形节点等资源。

1.1.2 架构特点

(1)易扩展性。在高性能计算应用过程中,资源异构及需求扩展时刻存在,平台将硬件等资源交由资源层统一管理,通过分类标识资源,建立资源集中索引,为用户提供物理上独立存在的异构资源的一致资源视图。该视图可为用户作业的解析、提交、状态查询和结果获取提供统一的底层环境访问方式。需要注意的是,资源层的存在使资源扩展十分简单,底层资源只需遵循规范加入到平台,再由平台资源层进行管理,即可实现资源的动态接入。

(2)可维护性。平台采用折线型结构访问分布式资源,将通用资源标识符作为资源访问的要素。当底层资源发生变更时,平台动态更新资源索引并重新定位资源,但资源访问所用的通用资源标识符仍然透明。

(3)灵活性。平台采用多层次、分角色、按组管理的用户管理模式,与企业内部人事管理基本结构相对应,既能满足企业对用户的管理需求,又能适应工业用户群体的复杂性,克服了传统“管理员—用户”两级模型缺乏灵活性的缺点。

1.2 主要功能

1.2.1 管理模式与基于角色的权限控制

高性能计算服务平台采用组管理模式与基于角色的

权限控制(Role-Based Access Control, RBAC)策略,将用户分为平台管理员、组管理员和组员等 3 类角色,为不同角色提供不同权限的服务功能^[19]。具体地,平台管理员负责有关平台资源整合的相关工作,以及后期监控、管理平台所有资源的利用情况;组管理员负责管理、维护自身用户组中的资源和人员,以及监控本组内作业等资源的使用情况;组员基于可用资源提交作业、处理数据、统计查看资源使用情况、管理个人信息。

(1)仿真计算作业提交及管理。平台提供提交作业功能,允许组员创建新的计算任务,在平台资源上运行仿真计算。平台依据仿真研究对象的不同,将仿真计算分为流体、结构、电磁、热分析等,每类提供若干常用的工业仿真应用软件供用户选用,支持用户利用系统模型对实际或设想的系统进行动态试验。

平台支持直接提交、从历史作业提交和快捷方式提交等方式,允许用户从本地上传或从集群选择计算所需的输入文件,支持计算参数保存功能。平台支持用户管理已提交的作业、查看作业信息,例如作业状态、作业生成文件、作业输出和残差曲线等;或控制正在运行的作业,例如终止作业、控制某些应用执行功能等。

(2)数据存储与管理。平台可提供可视化管理数据功能,允许组员远程存储数据,实现用户对自身数据的管理。同时,平台提供统一的数据访问界面,以屏蔽存储系统的异构性,对各种分布式异构存储系统进行透明化访问。

平台支持管理多集群存储、常规数据操作,提供小文件在线编辑功能,提供大文件数据传输客户端以支持自动重传和断点续传功能,并提供磁盘限额时的页面提醒功能。此外,平台通过权限控制使用户只能访问、修改所在权限下的文件,以保证用户文件与数据的安全性。

(3)前后处理。平台提供前后处理功能,允许组员在图形节点上运行可视化作业,实现仿真计算前处理和后处理的三维可视化操作。

平台提供 GPU 节点、Fluent、STARCCM、CFX 等可视化软件,支持基于 VNC 的应用可视化操作、一键打开远程可视化应用、设置 WALLTIME 以避免资源浪费、支持查看可视化作业状态等操作。

(4)命令终端使用。平台提供命令终端功能,允许组员通过传统命令行提交作业。命令终端功能是平台基于小部分用户实际需求所提供的一种使用方式,作为 Web 的补充,使熟悉命令行操作的用户可使用命令行来提交作业、访问用户文件和数据等。默认情况下,该功能对用户不可用,只有管理员为用户开通了命令行权限后才能使用。此外,平台支持多开命令行窗口,对命令行提交的作业进行监控和管理。

1.2.2 管理机制

由于平台自身存在一套作业管理机制,在实际使用中因使用习惯和历史遗留原因,一些作业没有通过平台而通

过命令行方式提交,将引起作业归属问题。针对这类无主作业,平台的命令行作业监控功能将负责监视此类作业。同时,平台支持用户查询、领取所属组命令行提交的作业,一旦使用自动领取作业功能,将根据该作业工作目录与用户的映射关系,自动分配作业给匹配的平台用户,在错领后用户也可退回作业给用户所属的组,后续作业还可被组内用户二次领取。

(1)机时信息统计。平台提供了机时统计功能,允许组管理员多维度查看资源使用情况,导出统计结果。平台从提交时间、使用软件、所在项目等维度来展示资源使用情况,支持按照条件筛选用户机时信息,统计结果以图表方式显示,用户可导出表格数据,将统计信息形成报告和报表。同时,用户可根据报表中的各种统计信息,在使用资源时进行自我调节,从而更合理、有效地选择和使用资源,增加决策的科学性。

(2)用户管理。平台提供了用户管理功能,允许组管理员管理组员基本信息,支持添加、冻结、修改部分信息,以及管理组员使用软件等权限。对于企业用户,企业内部员工分为多个等级,不同级别用户关心的内容不同,权限也不同。为此,平台根据角色设置权限,采用按组管理模式以匹配企业内部的管理制度要求。用户通过被赋予的角色以获得相应的访问权限,即访问权限与角色相关联,角色再与用户关联,从而实现用户与访问权限的逻辑分离。

(3)集群管理。平台提供集群管理功能,允许平台管理员使用平台中的所有集群,支持添加与下线集群、修改集群信息、监控集群状况、查看集群动态信息。平台通过动态接入、整合跨区域的高性能计算资源,以统一的视图进行集群管理和监控,支持高性能计算应用业务。

(4)仿真应用软件集成与管理。平台提供软件集成功能,允许平台管理员管理平台中所有可用软件,支持添加应用软件、修改软件信息、修改软件计算脚本、管理软件版本。

同时,平台通过应用集成套件实现仿真应用软件的集成,应用的提交界面由模板(标准的XML文件)定义,以实现统一化、灵活易定制的作业提交界面。

2 平台实现

高性能计算服务平台的实现以用户需求为导向,以构建具有可扩展性、先进性和开放性的平台为目标。在平台建设中,资源、应用与数据是3个最重要的元素,底层资源的组织、应用作业的调度和用户数据的访问是平台建设的重点所在,决定了平台提供服务的专业性和用户使用体验度。

2.1 计算资源的组织与标准化访问

平台通过计算资源进行描述和标识、建立资源集中索引,定位与管理计算资源,以提供服务化计算资源访问方式,降低用户使用门槛,增强资源可使用性。具体为,将高性能计算资源标识为集群、队列和应用软件等类别,通过自动化监控获取计算资源的实时信息。针对不同标识的资源,通过建立不同标识间的逻辑关系以提供各类资源的管理功能。此外,为了屏蔽资源的异构性,通过统一底层环境的访问方式,设计并实现了标准化访问接口,通过接口与底层资源进行交互。

高性能计算服务平台通过集中式索引定位异构、跨地理区域的计算资源,实现资源的动态接入。具体为,将资源分类并抽象,通过通用资源标识符(Uniform Resource Identifier, URI)访问资源,实现跨地域的资源接入功能。同时,平台建立集中资源索引以快速定位资源,当实体资源发生变化时可动态更新资源索引并重新定位资源。综上,虽然资源是分布的,但资源中的索引是集成的,通过索引定位资源可实现资源的动态接入。

目前,平台采用折线型结构访问分布式资源,以更好地应对实体资源变化情况,如图2所示。

由图2可见,当客户端请求访问R1资源时,先通过高性能计算服务平台的资源管理器获取R1的URI,再根据获取的URI直接访问R1资源。因此,当R1资源更新时,平台也会动态更新资源索引并重新定位资源,但资源访问URI对客户端仍然是透明的。

平台采用集中统一管理方式管理资源,以有效纳管平台计算资源,主要包括如下操作:①信息收集。主要收集、存储集群动态信息、应用情况等;②信息更新。由于资源

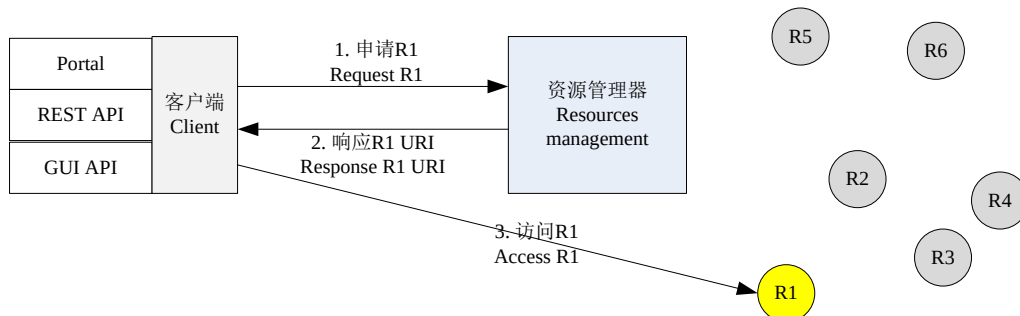


Fig. 2 Folding line type resource access process

图2 折线型资源访问流程

更新随时间变化,资源管理器周期性地更新信息以避免过期信息造成资源使用故障;③资源接入。接入资源需要正确的描述资源,给出正确的访问方式与资源唯一标识符;④资源分配。资源管理器依据用户权限、用户使用资源的需求分配资源。

2.2 计算任务的组织与作业调度

平台根据计算任务的资源需求及其依赖关系,将任务组织到任务队列中,在高性能计算资源上实现仿真计算作业的高效运行,以提升计算效率和准确性。平台以 Web 形式向用户开放 Fluent、LSDYNA、ANASYS 等仿真计算和可视化软件,通过资源管理器获取计算资源的实时状态,可实时获得资源使用权,并将作业调度到计算资源上执行。此外,用户可在平台上提交作业、查询作业和终止作业等操作,可查询作业状态、作业屏幕输出,部分应用还支持用户查看残差曲线,以让用户管理自身作业。

平台通过计算资源驱动技术接入多种不同的集群作业管理系统,打通了平台到集群作业管理系统的通道,底层支持 LSF、PBS、torque、Slurm 等作业管理软件。同时,通过高性能应用封装模板(HPC Application Packaging Template, HPC-APT)对应用进行规范化描述,Fluent、LSDYNA、ANSYS 等仿真应用软件和可视化工具进行封装^[20]。此外,计算资源驱动器和应用封装模板共同组成了应用集成套件,将分布在多个集群上的各种应用软件封装在高性能计算平台上,为用户提供统一风格的作业提交界面,保证用户计算任务在集群上正常执行,如图 3 所示。

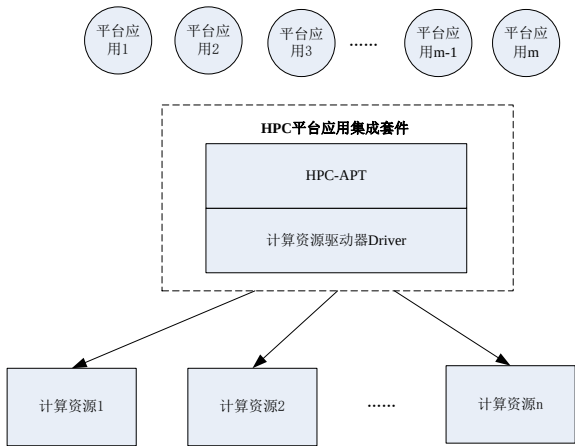


Fig. 3 Application integration suite
图3 应用集成套件

由图 3 可见,平台采用按需服务的资源调度策略,根据计算任务的资源需求进行合理安排,确保仿真计算作业在高性能计算机上高效运行,以提升计算效率和准确性。资源调度策略是协调整个系统有效运转的中枢,一个良好的资源调度策略能高效协调和分配资源,降低计算总执行时间和总耗费,从而达到最大的性能。

在实际应用中,不同的用户在提交作业、使用资源时具有不同的侧重点,例如有的用户期望尽快完成作业,有的用户可能期望使用尽量少的资源,有的用户可能期望完

成作业的花费最小。因此,要综合用户实际需求,从作业完成率、作业执行时间和作业执行费用等方面,制定按需服务的资源调度策略,以高效协调和分配资源。本文则主要考虑以下性能指标:①作业完成率,成功完成作业占提交作业的比例;②作业执行时间,用户向作业调度器提交作业的时间与调度器完成并向用户返回所有作业之间的时间差;③作业执行费用,即完成的作业费用之和,每个完成作业的费用是执行该作业资源价格与执行时间的乘积。

平台支持基于 GPU 的前后处理可视化任务,工业仿真服务不仅包括仿真计算部分,还包括前期设计和后期结果分析。早期的前后处理工作在用户本地图形工作站上完成,由于仿真数据需在集群与本地图形工作站之间来回传输,大量数据的往复传输增加了用户研发设计耗时,因此前后处理工作还需要 GPU 作为加速器,以提升模型整体性能、降低功耗。

为此,平台通过计算资源的组织和标准化访问方面的研究,实现了 GPU 资源的动态接入,完成了前后处理 3D 加速的硬件准备。同时,平台还集成了多种可视化软件,借助 VNC 技术实现了前后处理的远程可视化,在门户层对外提供前后处理功能。此外,平台通过深入研究作业管理系统,解决了只能以命令行方式向 GPU 资源提交作业并计费的问题,实现了作业管理系统对 GPU 类作业的调度,为作业的统计与管理提供了便利。用户在提交可视化作业时,可以一键式提交,后续平台自动完成 3D 加速资源申请、自动打开可视化界面等一系列操作,帮助用户远程实时进行前后处理工作。

2.3 用户数据的分布与聚合访问

平台通过封装数据操作、设置访问权限,实现对数据的统一管理服务,为用户数据访问、管理提供便利,增强了数据的安全性和可控性。具体为,平台基于并行文件系统与 SSH 协议,将有关用户数据的操作封装为服务,以服务化的方式提供统一访问,远程管理分布在计算环境中的用户数据信息。在平台上,用户可进行常见的文件操作,包括新建/删除文件(夹)、压缩/解压缩、复制/粘贴、改名、查看属性、上传文件(夹)、下载文件(夹)等。

同时,用户数据需要全面的安全防护,包括以下 3 点:①抵御来自外部的 DDos 攻击;②企业内部根据不同部门设置安全区域、级别进行隔离;③对应用层攻击进行预防和阻止等。为此,本文在网络层面、服务器层面和平台层面采取安全措施。具体为,网络层面的防护诸如防火墙、VPN 之类;服务器层面的防护包括进程隔离、补丁管理等;平台层面的安全措施主要为数据传输加密、访问权限控制机制。其中,平台数据传输加密主要是在数据传输时使用加密的 HTTP 请求和相应报文,例如 TLS 加密方法等。数据访问权限控制主要采用分级授权的组管理机制,利用磁盘空间软隔离技术和角色授权来保护用户数据安全。

在平台中,为了控制不同身份的用户使用不同的系统

功能、访问不同的资源,对角色进行授权来控制用户访问资源。具体应用中,角色可对应组织结构和用户类型。对于工业用户而言,一般都有自身内部的人员组织结构和管理机制,内部员工可分为多个等级,不同级别用户所关心的内容不同、权限也不同。

为了应对这种需求,平台采用组管理模式,设定平台管理员、组管理员和组员等不同的角色以建立用户和访问权限之间的关系。每个用户在逻辑上隶属于一个组,组管

理员(一般是企业部门管理者)向平台管理员申请资源,然后给组员(一般是企业部门工程师)授权分配。

如此,通过这种组管理模式能与企业内部的人员组织结构基本对应,适应用户群体的复杂性。同时,当用户数目增多时,这种按需管理的机制可避免单一管理员模式中管理任务量过大的弊端,克服传统的“管理员—用户”两级模型缺乏灵活性的缺点。本文所提组管理模型如图4所示。

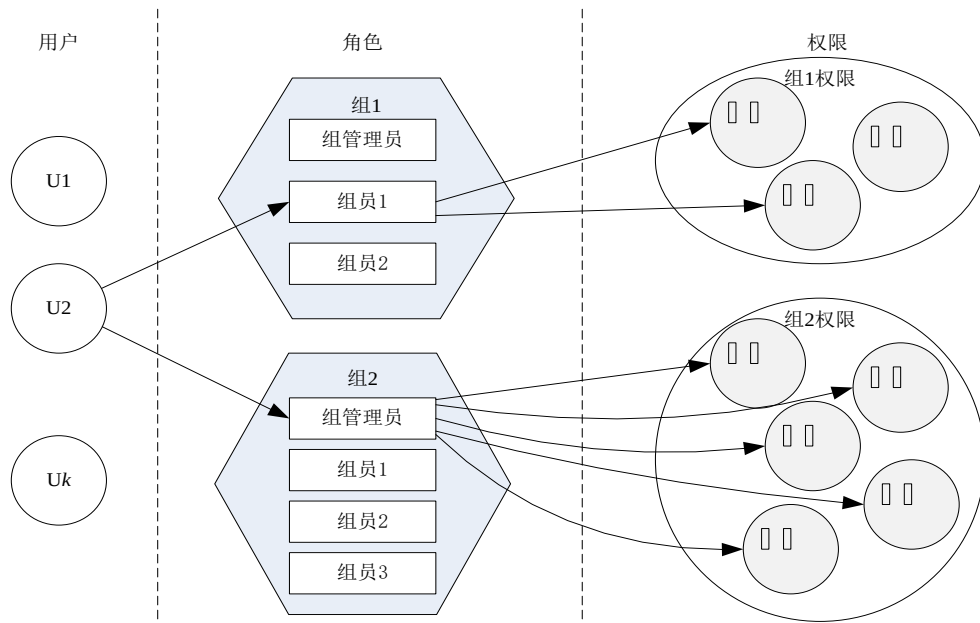


Fig. 4 Group management model

图4 组管理模型

在组管理模式下,用户数据的安全存储与访问通过用户主机磁盘空间软隔离的措施来保证。在平台中,组与集群主机账号是一一对应的关系。当组创建成功后,组管理员(一般是企业部门管理员)为对应组的主机账号 Home 根目录。每当有新组员加入后,将自动在主机账号下创建一个以该组员名字命名的目录,其用户数据就存放在此目录下。用户数据的访问控制通过平台数据存储功能来实现,该组员只能访问其用户空间,而组管理员则可访问全部组员的用户空间。

在数据传输方面,平台采用数据传输效率提升技术实现大文件的有效传输。该技术针对计算结果中的大文件,通过异步传输、失败自动重传和续传等技术手段避免文件多次传输,提升了带宽利用率。异步传输技术支持调用程序以独立进程的方式启动,以实现多个文件的同步传输,最大化利用带宽。失败自动重传技术支持在网络等外部条件不稳定的情况下自动检测、重连、重启传输文件,减少人工干预,提升传输时间利用率。文件续传技术是根据文件断点跳过已传数据,对同一文件数据只传送一次,以减少带宽的占用。实验表明,平台采用数据传输效率提升技术可实现大文件的有效传输,文件传输流程如图5所示。

此外,平台利用大数据技术快速分析、处理用户历史

作业信息等数据,提供与计算任务相关的增值服务,辅助用户更好地进行计算与决策。数据是平台的宝贵财富,大数据的价值是提供一种人类认识复杂系统的新思维和新手段,因此数据的重要性尤其可见一斑。为此,基于用户行为数据、用户的作业元信息等平台数据,可挖掘出更深入的需求,提供更精准的服务。雷小锋等^[21]提出应在分析、理解用户核心数据的处理需求和业务需求之上,建立大数据架构。

随着平台的业务化运营,数据量高速增长,单机已无法满足数据处理与分析的需求。为此,平台采用大数据技术来解决此类问题:以 Hadoop 为基底、以 Hive 和 Spark 分别作为离线和在线数据分析技术支撑,实现用户数据的分布式收集存储,保证数据的完整性和正确性。同时,在此基础上进行数据分析挖掘,包括根据历史作业信息提醒用户类似作业可能需要的资源规模、机时等信息,辅助用户更好地进行计算与决策。

用户在使用平台时,可在作业提交页面上看到系统推荐该作业使用的核数与作业预计运行时间,如图6所示。

由图6可见,用户在提交 fluent 作业时,作业提交页面的核数一栏显示“推荐使用8核”。为此,用户根据这些信息,可综合衡量资源、费用、任务紧急程度等因素,自行决

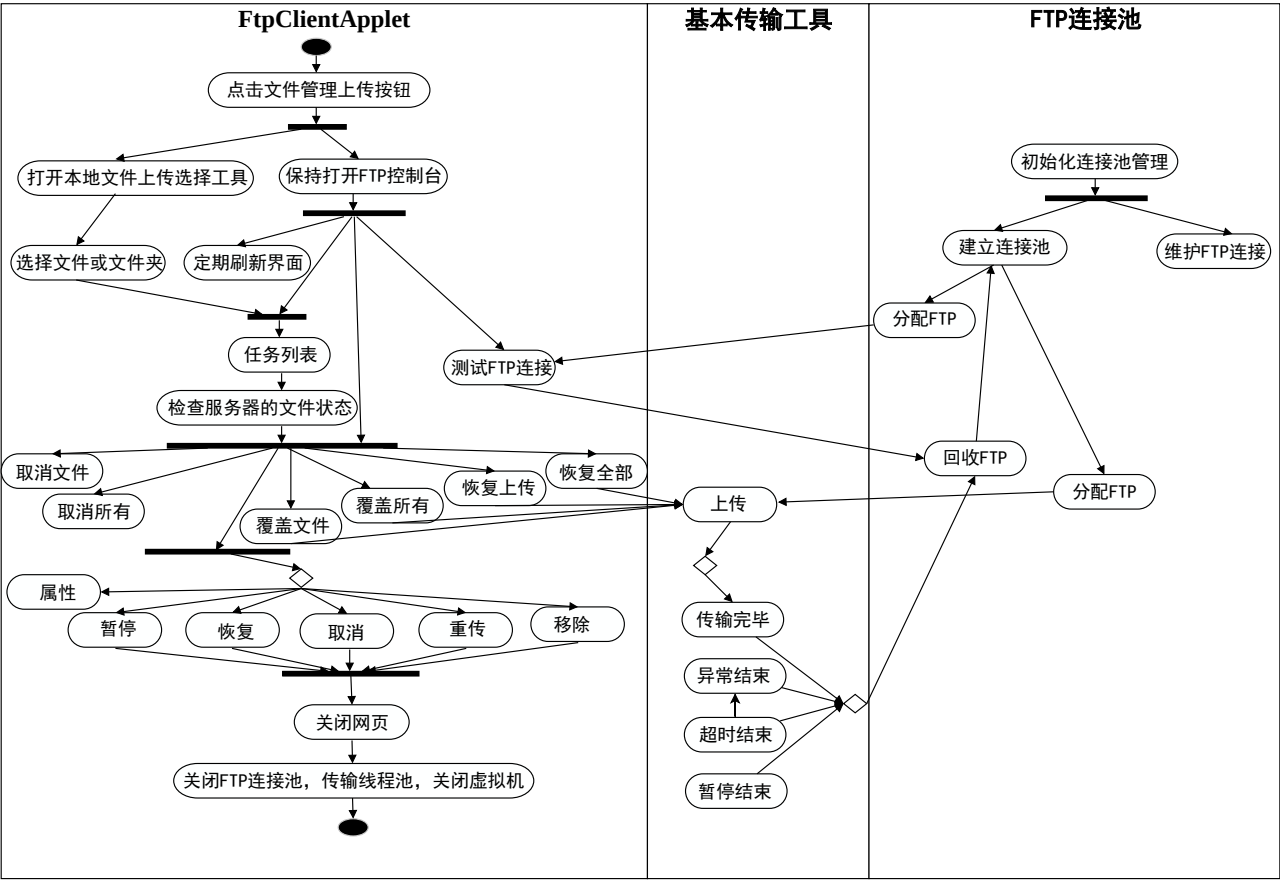


Fig. 5 File transfer process

图5 文件传输流程



Fig. 6 Recommended calculation parameter

图6 推荐计算参数

定作业计算参数并提交作业,从而实现计算任务的最佳决策。

3 平台应用

3.1 使用方式

(1)portal方式。高性能计算服务平台以 portal 方式对

外提供一个统一的在线使用入口,将用户细分为平台管理员、组管理员和组员 3 种角色,为不同用户角色提供不同功能。例如,后台管理模块主要面向平台管理员,实现资源接入与管理;管理模块主要面向组管理员,实现组员组织与管理;应用模块主要面向组员,实现作业的提交与管理。需要注意的是,以 portal 方式使用平台时,用户仅需在浏览器中输入平台网址即可登录。

(2)API方式。平台提供了 API 方式访问,包括跨平台的 HTTP REST API 和 GUI API,如图 7 所示。其中,HTTP REST API 支持任意客户端或第三方平台使用,GUI API 可支持 Web 系统无缝集成。在此情况下,第三方平台可独立拥有自己的用户系统,实现业务逻辑,平台仅在底层提供相应的服务。

3.2 应用成效

目前,平台提供了几十个应用服务,为超过 1 000 位以上的注册用户提供服务,典型的用户来自汽车、航空、船舶和电子等领域。例如,在某汽车公司新车型的整车安全验证分析及优化中,某公司通过三维 CAD 软件建立整车各零部件的原始模型,采用相应的数据接口软件传入 ANSYS/LS-DYNA;或通过其他非线性软件处理显式动态的有限元模型,根据碰撞安全法规要求进行整车碰撞性能仿真,并对仿真结果进行分析。同时,平台提供了 138 692 核小



Fig. 7 External API of high-performance computing service platform
图7 高性能计算服务平台对外API

时的计算支持,辅助用户通过仿真手段改善车辆被动安全性,大大缩短了研发时间,保证了整车性能在项目时间内可满足客户设计要求。

在连铸坯细晶区轧制过程形状演变模拟研究中,连铸坯作为轧钢用坯的主要来源,在生产过程中截面上的晶粒分布与其冷却条件相关,通常在截面芯部存在一个细晶区,在热轧过程中会发生一定的形状演变,影响轧制后的钢材成品的芯部组织和质量。为此,开展数值模拟计算工作十分必要。由于大量算例和高精度参数需求,用户单位根据实际轧制工艺与理论优化工艺,在平台上使用211432核小时开展了一系列数值模拟计算工作,提升了研发速度、精度,节省了大量试验工作、所需试验材料、物料损耗及对环境的影响。

2023年,用户通过高性能计算服务平台提交了约6万个作业,共使用了约2000万核小时,近3年使用情况如图8所示。由此可见,平台的业务化运行为工业领域用户提供了专业、可靠的高性能计算服务,有效缩短了产品研发周期,有力支撑了工业领域的重大工程研发与产品创新。

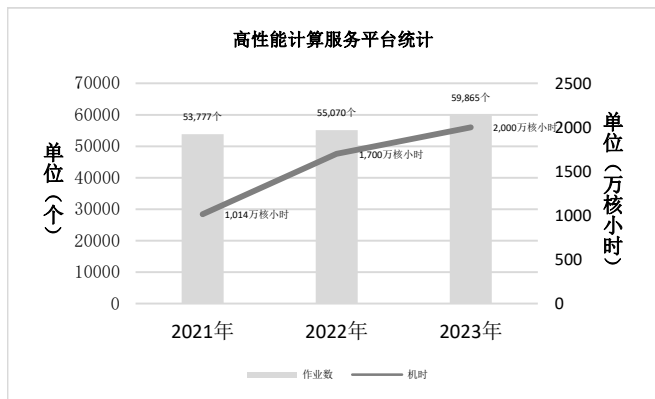


Fig. 8 Usage of high-performance computing service platforms in the past 3 years
图8 近3年高性能计算服务平台的使用情况

4 结语

本文以工业领域用户的实际需求为导向,以SOA思想构建了跨平台、可扩展、服务化的公共计算平台,整合了集群、存储、应用软件和图形节点等高性能计算资源,部署了

仿真服务、可视化服务、数据服务及监控服务等组件,可提供仿真计算、前后处理等应用服务,支持基于CPU、GPU计算加速器件的行业应用,为企业提供了仿真模拟、优化分析、数据管理和智能化决策等全面完善的解决方案。

具体为:①平台整合了多个异构高性能计算资源,提供了统一管理和监控服务;②提供了基于Web的一站式计算服务,涵盖计算、存储、可视化等;③提供了用户权限分级管理服务,保证用户使用过程中计算数据的安全;④提供了计算参数推荐等增值服务,可辅助用户更好地进行计算与决策;⑤提供了基于用户角色的资源分配与调度方案,以及详尽的资源监控与使用分析信息,帮助用户进行成本控制与管理;⑥为了应用高性能计算领域的应用软件,平台使用远程异构计算资源进行大规模计算,提供了统一的功能服务和访问接口。

在实际应用过程中,平台发挥了公共计算平台的集聚效应,聚集了大量高端工业与中小型企业用户,提供了标准化、模块化、流程化的工业仿真服务,有效解决了用户因缺乏大规模资源而无法进行复杂系统仿真、优化的问题。平台的落地促进了工业领域资源、信息、经验等全面共享,促进了仿真分析、优化设计技术和软件开发技术的发展,有力支撑了工业领域的重大工程研发和产品创新,具有良好的应用推广前景。

未来,将进一步集成更多服务和资源,将平台应用于更广泛的工业领域乃至其他领域,带动相关领域科学技术的进步,促进新技术、新产业、新模式、新业态的培育发展。

参考文献:

- [1] HU D G. The industrial Internet of Things: platform architecture, key technologies and practices[M]. Beijing: China Machine Press, 2022.
胡典钢. 工业物联网:平台架构、关键技术与应用实践[M]. 北京:机械工业出版社,2022.
- [2] LI F. Big data platform architecture[M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2022.
李昉. 大数据平台架构[M]. 北京:电子工业出版社,2022.
- [3] XIE K Q. Industrial software: a digital industry towards software definition[M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2024.
谢克强. 工业软件:通向软件定义的数字工业[M]. 北京:电子工业出版社,2024.
- [4] MI M W, LI M S. Supercomputing technology empowers the innovative development of industrial simulation software[J]. China Broadband, 2023, 19(4): 117-119.
米明威,李明时. 超级计算技术赋能工业仿真软件创新发展[J]. 中国宽带,2023,19(4):117-119.
- [5] China Computer Federation. High performance computing [EB/OL]. https://test2.ccf.org.cn/Chapters/TC/TC_Listing/TCHPC.
中国计算机学会. 高性能计算[EB/OL]. https://test2.ccf.org.cn/Chapters/TC/TC_Listing/TCHPC.
- [6] Oracle. What is High-Performance Computing (HPC) [EB/OL]. <https://www.oracle.com/cn/cloud/hpc/what-is-hpc/?bcid=6260067197001>.
甲骨文. 什么是高性能计算(HPC)[EB/OL]. <https://www.oracle.com/>

- cn/cloud/hpc/what-is-hpc/? bcid=6260067197001.
- [7] SUN N H. High performance computing: the third tool of scientific research[J]. Communications of the CCF, 2006, 2(1):20-21.
孙凝晖. 高性能计算:科学的第三种手段[J]. 中国计算机学会通讯, 2006, 2(1):20-21.
- [8] High Performance Computing Technical Committee of China Computer Federation. China high-performance computer performance TOP100 list [EB/OL]. <http://www.hpc100.cn>.
中国计算机学会高性能计算专业委员会. 中国高性能计算机性能 TOP100 排行榜[EB/OL]. <http://www.hpc100.cn>.
- [9] HUANG Y, JIANG W H, LONG Y. Big data analysis: Python, data cleaning and data visualization[M]. Beijing: Tsinghua University Press, 2022.
黄源,蒋文豪,龙颖. 大数据分析:Python、数据清洗和数据可视化[M]. 北京:清华大学出版社,2022.
- [10] East China Jiangsu Big Data Trading Center. Secure circulation of data element[M]. Beijing: China Machine Press, 2023.
华东江苏大数据交易中心. 数据要素安全流通[M]. 北京:机械工业出版社,2023.
- [11] Atguigu. Big data analysis: practical experience in data warehouse projects[M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2020.
尚硅谷IT教育. 大数据分析:数据仓库项目实战[M]. 北京:电子工业出版社,2020.
- [12] XU L J, FANG Y F. Design and implementation of big data processing framework Apache Spark[M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2020.
许利杰,方亚芬. 大数据处理框架Apache Spark设计与实现[M]. 北京:电子工业出版社,2020.
- [13] YANG J. Big data practice[M]. Beijing: China Machine Press, 2021.
杨俊. 实战大数据[M]. 北京:机械工业出版社,2021.
- [14] ZHANG C, JIANG R N, HE B. Application of industrial big data analysis in process manufacturing industry[M]. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2020.
张晨,蒋若宁,何冰. 工业大数据分析在流程制造行业的应用[M]. 北京:电子工业出版社,2020.
- [15] TIAN C H. Algorithms for industrial big data analytics: a practical approach[M]. Beijing: China Machine Press, 2022.
田春华. 工业大数据分析算法实战[M]. 北京:机械工业出版社, 2022.
- [16] GEOFFREY G P, MARSHALL W V A, SANGEET P C. Platform revolution [M]. Translated by Zhi P. Beijing: China Machine Press, 2017.
GEOFFREY G P, MARSHALL W V A, SANGEET P C. 平台革命[M]. 志鹏,译. 北京:机械工业出版社,2017.
- [17] ERIC N, GREG L. Understanding SOA with Web Services[M]. Translated by Xu H. Beijing: Publishing House of Electronics Industry, 2006.
ERIC N, GREG L. Understanding SOA with Web Services[M]. 徐涵,译. 北京:电子工业出版社,2006.
- [18] JUVAL L. Righting software: a method for system and project design [M]. Translated by Zhu S M, Zhang Y, Ding H, et al. Beijing: China Machine Press, 2021.
JUVAL L. 架构之道:软件构建的设计方法[M]. 朱少民,张元,丁慧等,译. 北京:机械工业出版社,2021.
- [19] ANONYMOUS. ANSI/INCITS Standard 359-2004 [EB/OL]. <https://www.doc88.com/p-512934131381.html>.
匿名. ANSI/INCITS Standard 359-2004[EB/OL]. <https://www.doc88.com/p-512934131381.html>.
- [20] LU D Y, LU Q, JIANG K. High performance computing application packaging method based on template[J]. Computer Engineering, 2011, 37(11):34-36.
卢大勇,陆琪,姜恺. 基于模板的高性能计算应用封装方法[J]. 计算机工程, 2011, 37(11):34-36.
- [21] LEI X F, CHEN P P. Introduction to big data computing architecture [M]. Beijing: Peking University Press, 2023.
雷小锋,陈朋朋. 大数据计算架构导论[M]. 北京:北京大学出版社, 2023.

(责任编辑:刘嘉文)