

文章编号: 0258-1825(2020)06-1149-09

国家数值风洞(NNW)集成框架系统研发

白汉利¹, 陈晓梦^{1,2}, 蒲 巧^{1,*}

(1. 中国空气动力研究与发展中心, 绵阳 621000;

2. 西南科技大学 计算机科学与技术学院, 绵阳 621000)

摘 要:在当前空气动力学研究中,各类求解计算程序缺乏与其配套的前后处理平台,容易降低研究人员的工作效率和软件的实用性。针对这一问题,NNW 集成框架系统作为国家数值风洞项目(NNW)中数值模拟软件平台的重要组成部分,将前处理软件、求解计算程序、后处理软件集成于统一的集成环境,针对未来 E 级高性能计算的特点,以中间件为框架核心,按照一定的工作流模型集成多种功能模块,通过过程集成的方式,实现数据集成、计算集成、分析集成。同时,NNW 集成框架系统支持对各类求解器的调度、作业管理、实时监控,为用户提供自动化多学科计算平台。通过在实际计算环境下运行计算案例,表明该集成框架系统能够为用户提供完整的计算工具链,快速定制一套或多套网格,并将与之配套的前处理和后处理计算结果可视化。

关键词:集成框架;中间件;高性能计算;工作流;过程集成

中图分类号:TP311

文献标识码:A

doi: 10.7638/kqdlxxb-2020.0120

Development of integration framework system of National Numerical Windtunnel project

BAI Hanli¹, CHEN Xiaomeng^{1,2}, PU Qiao^{1,*}

(1. China Aerodynamics Research and Development Center, Mianyang 621000, China;

2. School of Computer Science and Technology, Southwest University of Science and Technology,
Mianyang 621000, China)

Abstract: In the current aerodynamic research, various solving calculation programs lack the pre- and post-processing platforms that are compatible with them. This shortage easily reduces the work efficiency of researchers and the practicability of software. In response to this problem, the NNW integrated framework system, as an important part of the numerical simulation software platform in the National Numerical Windtunnel Project (NNW), integrates the pre-processing software, solving calculation program, and post-processing software into a unified integrated environment. The system considers the characteristics of high-performance computing with middleware as the core of the framework, integrates multiple functional modules according to a certain workflow model, and realizes data integration, calculation integration, and analysis integration through process integration. Moreover, the NNW integrated framework system supports scheduling, job management, and real-time monitoring of various solvers, providing users with an automated multi-disciplinary computing platform. By running the calculation case in an actual calculation environment, it is shown that the integrated framework system can provide users with a complete calculation tool chain, quickly customize one or more sets of grids and visualize the matching pre-processing and post-processing calculation results.

Keywords: integrated framework; middleware; high-performance computing; workflow; process integration

收稿日期:2020-08-14; 修订日期:2020-09-28

基金项目:国家数值风洞工程

作者简介:白汉利(1974-),男,山东定陶人,高级工程师,研究方向:并行计算,软件工程. E-mail: baihanli@qq.com

通信作者:蒲巧*(1994-),女,四川阆中人,硕士,研究方向:并行计算,科学工作流. E-mail: puqiao_03@163.com

引用格式:白汉利,陈晓梦,蒲巧. 国家数值风洞(NNW)集成框架系统研发[J]. 空气动力学学报, 2020, 38(6): 1149-1157.

doi: 10.7638/kqdlxxb-2020.0120 BAI H L, CHEN X M, PU Q. Development of integration framework system of National Numerical Windtunnel project[J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2020, 38(6): 1149-1157.

0 引言

当前,我国经济发展已经由高速增长阶段进入了高质量发展阶段,国家的发展更加依赖自主创新,尤其是科学技术自主创新。在这种宏观环境下,我国航空、航天、兵器、地面交通、能源、环保、制造等空气动力学相关专业的资助研发投入大幅增长,各类型号、新产品、新技术、新概念不断涌现,面临一系列复杂的空气动力学问题,迫切需要自主研发以 CFD (Computational Fluid Dynamics) 为核心的多学科耦合的大型软件系统,并配套建设高性能计算机系统,构建空气动力数值模拟平台,形成数值模拟、数值试验、数值飞行、多学科融合和协同优化等能力,支撑相关产业转型升级,这也是国家数值风洞项目 (National Numerical Windtunnel, NNW) 致力于解决的问题^[1-2]。

随着高性能计算硬件由 P 级计算 (PFLOPS, 运算速度每秒千万亿次) 向 E 级计算 (EFLOPS, 运算速度每秒百亿亿次) 发展^[3-4] 以及 CFD 软件的拓展,其应用需求逐渐从单一功能向多学科耦合模拟、大规模并行计算、高精度和高分辨率以及充分利用计算资源等方面转变。对此,国内外在提高硬件计算能力的同时,也对相关的 CFD 软件和数值模拟平台不断进行更换,使其具备面向 E 级计算机高性能计算的能力。如国外的 DLR 项目 Digital-X, 集成了流体力学模拟、结构力学模拟、多学科优化等 7 大领域的软件包,借助合适的高保真、多学科仿真方法,通过数值计算,确定飞机的飞行特性,实现飞机在虚拟计算机环境中的首次飞行,降低了实际研发成本^[5];典型的数值模拟软件如 ANSYS Workbench、ABAQUS、Nastran 等通过对高性能计算环境中间件的建立^[6-7],集成了网格划分、CFD 模拟、后处理技术,实现了对流体力学、结构动力学、结构热等应用场景的分析模拟;国外开发的科学计算 workflows 系统如 Kepler^[8]、Trident^[9]、Pegasus^[10]、Taverna^[11]、Vistrails^[12] 等,支持科研过程中的复杂步骤按照逻辑关系顺序进行自动执行计算与模拟分析,现已在天文、气象、材料、物理、生物等多个领域应用。

此外,国内陈飙松教授团队一直致力于计算力学的科学研究和工程应用的 SiPESC 平台^[13-14],实现了求解器集成、有限元求解器研发、性能优化等模块,并完成了大量计算分析软件集成案例;安世亚太研发的多学科异构集成平台软件 SimCube^[15],支持自主及商业计算分析软件的联合仿真、性能优化、界面集成、结果可视化等功能;还有一些公司基于开源 CFD 模

拟仿真软件和商业软件进行二次开发,对原有软件进行扩展和定制,如蓝威技术有限公司开发的 EasyCAE 集成平台。但是,目前国内自主研发的这些软件或平台,或是注重功能实现而未对扩展性和通用性进行深入统筹,或是扩展性和通用性较差,软件架构需要升级更新。

因此,为了加快空气动力数值模拟平台的构建、提高研究人员的工作效率、软件的开发效率和实用性、软件之间的通信效率以及计算资源的利用率,作为 NNW 项目中数值模拟软件平台的重要组成部分,NNW 集成框架系统在研究软件系统体系结构、集成方法、工作流管理、数据交换标准的基础上,以中间件为框架核心,为软件系统提供了一个面向分布式的科学计算环境,实现了各学科求解器、前置处理软件、后置处理软件的集成,有效地为用户提供计算流程配置、计算工程监控管理、数据管理功能。

本文第一部分介绍高性能计算环境下数值模拟软件集成的相关工作,第二部分介绍 NNW 集成框架系统的设计过程,第三部分介绍 NNW 集成框架系统在实际计算环境下的应用,第四部分总结并展望未来工作。

1 相关工作

在科学计算领域,由于用户对不同软件操作的熟练度有所差异,以及不同的计算机可能存在操作系统不同、应用软件版本不同、软件之间的数据交换格式不统一等情况,因此为用户提供统一的、易于操作和理解的使用方式,是构建面向科学计算领域用户的集成框架的基本要求。另外,提高高性能计算能力的同时并高效利用高性能计算资源、合理调度和管理作业及数据,是科学计算领域需要考虑的重点问题。

1.1 基于 Web Portal 的高性能计算应用集成

20 世纪 90 年代末,随着 UNICORE 项目的实现^[16] 和 WebSubmit^[17] 的首次公开发行,拉开了基于 Web Portal 的高性能计算应用集成的帷幕。由于高性能计算应用具有复杂多变的特点,用户通过多个应用软件交互来获取数据文件或通过命令行对作业进行管理时,需要熟悉并掌握相关的软件操作或具备丰富的调试经验,这不仅对于用户极不友好,也不利于科学计算研究工作的进一步开展。考虑到基于 Web 的图形化交互界面无需用户安装软件或编写脚本,在浏览器中即可访问应用数据或资源,因此,继 UNICORE 和 WebSubmit 之后,针对不同领域的基于 Web 服务的高性能计算研究工作逐渐增多,如美国国防部高性能计算现代化项目 HPCMP 中提出的

基于 Web 的安全访问以实现高效的超级计算^[18], 俄罗斯科学院信息传输问题研究所提出的基于 Web 的计算应用程序发布和分布式执行平台^[19], 韩国科学技术研究院提出的用于大规模科学计算软件的基于 Web 的 HPC 仿真执行框架^[20], 中国科学院计算机网络信息中心提出的基于 Portlet 的高性能计算应用集成组件^[21]等。

1.2 基于中间件的异构资源访问与数据集成

高性能计算环境下的设备、软件、应用和通信技术往往具有动态性和异构性, 其中, 解决数据的不完整性和多源异构性是相关研究人员关心的两大重点问题, 因此, 整合多源数据和访问异构资源并进行集成成为了关键需求, 而中间件在屏蔽底层硬件差异、计算资源的使用差异、集成异构数据、增加软件重用性等方面发挥着重要的作用。为了充分利用高性能计算资源, 降低用户使用难度, 业界学者致力于研究不同平台和不同领域的中间件研发, 如中国科学院计算机网络信息中心设计实现了面向科学计算领域的网格中间件 SCE, 和优化后承载 E 级计算的高性能计算环境中间件^[22-23], 有效地屏蔽了高性能计算资源在使用和信息方面的异构, 提高了系统的性能, 增强了系统的可扩展性和稳定性。Wan^[24]等人通过开发 RFID 中间件, 将独立的功能模块和分布式数据资源集成为可以有序运行的系统, 并在过程集成中对数据对象标准化, 保证设计过程中数据的一致性, 实现数据集成, 解决数据管理和信息传输的问题, 实现了用于空气动力学建模仿真的集成设计系统。

此外, 国外 Judy Qiu^[25]等人实现了用于数据密集型科学计算与分析的中间件 MIDAS, 其提供底层资源管理和异构基础设施访问层, 支持并行数据分析库在不同资源下跨应用程序高效工作。Maddineni^[26]等人利用基于 SAGA 的分布式应用运行环境的中间件框架 DARE 集成了分布式和高性能基础设施, 其支持动态分配计算资源, 具有可扩展性、互操作性、动态执行的特点, 现已被应用到多个完全不同领域的科学应用中, 促进科学逻辑与高性能和分布式计算基础资源的快速集成。

1.3 科学计算 workflow

科学计算 workflow 的实现对于科学计算具有重要的意义, 目前 Kepler^[8]、Trident^[9]、Pegasus^[10]、Taverna^[11]、Vistrails^[12]等典型的科学 workflow 管理系统已被广泛地应用到天文学、物理学、生物信息学、地球科学等领域, 它们提供了流程定义与控制、任务管理、作业调度与执行、容错处理等功能, 屏蔽底层资源, 实现流程化集成, 有效地帮助科学研究人员减少对流程的部署操

作等时间花费, 专注于具体科学问题的研究, 提高求解问题的效率。

科学计算 workflow 虽然起源于以流程驱动为主的事务型 workflow, 但事务型 workflow 和现有的商业型 workflow 主要面向流程控制、任务管理及文档处理等方面, 可重复性高, 而科学计算 workflow 主要面向数据密集型的科学计算, 以数据驱动为主, 更关注复杂的数据处理和计算分析, 可重复性低。由于科学计算 workflow 能够通过定义各个活动调用资源或软件的方式, 有效地建立任务之间的逻辑关系和数据依赖关系, 快速实现特定问题的科学计算, 因此, 科学 workflow 与高性能计算结合的相关研究不断增多。汪春杰和曹健^[27]认为 Kepler 等典型科学 workflow 系统虽然提供了常见的应用活动表示, 但是用户在具体问题的流程建模过程中需要花费大量的时间去熟悉各类活动节点的含义及使用方式, 对此, 其提出了可扩展性较高的 ESW 应用集成统一框架, 提高了建模工具的易用性。赵勇^[28]等人提出将科学 workflow 系统与高性能计算平台相结合实现高性能计算平台上的大规模并行计算, 并通过 Swift workflow 系统和 Windows HPC Server 集成, 用 NASA MODIS 图片处理 workflow 分析并验证了该集成方案的可行性。Li 和 Song^[29]提出了一个灵活且可扩展的软件框架, 将模拟仿真应用和其他分析应用程序集成, 共享组件资源, 使端到端延迟最小化, 并在复杂的工作流程中提供实时插入分析和可视化功能, 将其应用在湍流的异常检测中。

1.4 其他集成方法

中国工程物理研究院针对多领域数值模拟软件的封装、计算任务的集成、异构资源屏蔽、图形化交互等问题设计了适用于高性能计算环境的数值模拟 workflow 管理平台 HSWAP^[30], 并将其应用在材料、光学、力学等领域, 然而其主要针对文件兼任务的松耦合, 对于其他数据耦合方式还没有分析总结。而 NNW 集成框架系统主要是面向计算流体力学耦合计算和气动相关问题的模拟, 整合相关数据和资源, 在工作流的求解器解算过程中调用耦合通信框架, 提供完整的计算工具链。同时, 集成的网格生成软件提供网格数据前置处理, 使其可被正确加载到客户端页面进行数据可视化。

此外, 基于 STEP 的集成方法^[31]和基于 Agent 架构的集成方法^[32]也被应用于异构环境下的软件集成和数据交换等问题的解决, 但其在扩展性方面还有所欠缺。

2 NNW 集成框架系统设计

针对气动数值模拟工程对科学计算和仿真与设

计集成的需求,本文结合上述三种方法设计了面向计算流体力学耦合计算和气动相关问题模拟的 NNW 集成框架系统,在研究软件系统体系结构、集成方法、工作流管理、数据交换标准以及容错机制的基础上,以中间件为框架核心,集成各学科求解器、前置处理和后置处理软件,整合工作流功能模块,并提供 B/S 和 C/S 两种交互方式,提高系统的可用性。

集成框架系统主要分为表现层、业务层、资源层,表现层为业务操作的入口,用户可以通过 C/S 或 B/S 的模式与整个平台进行交互。表现层为用户提供了工作流建模、建模引擎管理、计算任务管理、计算引擎

管理、统计查询功能。业务层作为整个分布式交互软件的桥梁和神经系统,整合资源层提供各项服务,处理表现层的服务请求,提供辅助功能;业务层的核心为中间件,集成了各款软件,并整合了工作流引擎、作业调度、负载均衡、组件管理等核心功能。资源层为所有的计算任务提供计算平台,对于计算过程中产生的中间文档和整个计算过程进行统一的管理。整个系统的体系结构如图 1 所示。资源层和业务层及表现层之间的请求服务过程如图 2 所示,主要以客户端和服务端交互的形式表现出来。

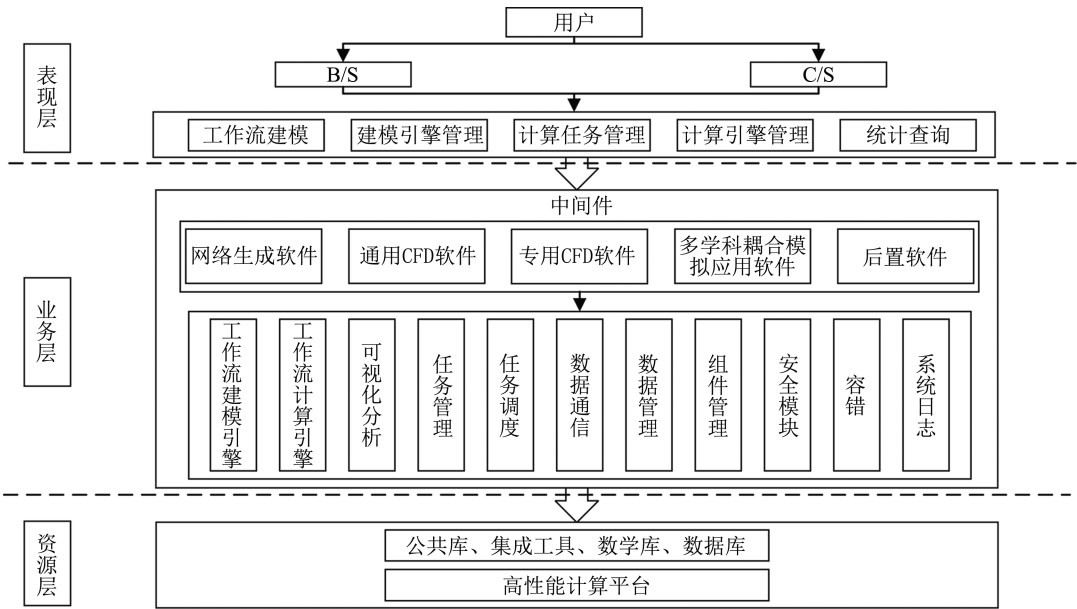


图 1 集成框架系统体系结构

Fig.1 Architecture of the integrated framework system

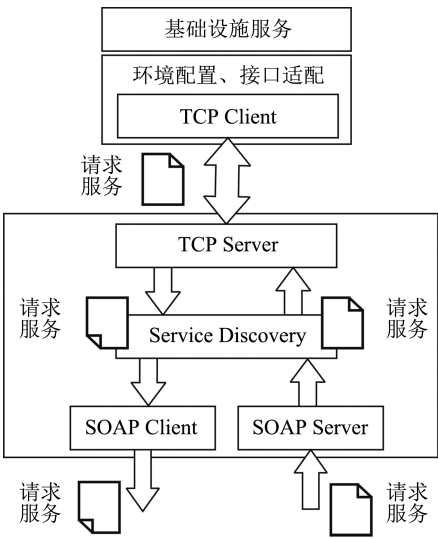


图 2 请求服务过程

Fig.2 Poccess of request service

2.1 组件化集成

由于各种数值模拟软件存在串行和并行计算方

式的差异、周期长短的计算差异、输入/输出格式差异、单一运行进程和多学科耦合计算的差异以及不同运行环境的差异,同时为了便于工作流引擎对各软件进行流程化管理,通过统一封装和制定接口规范将各计算软件、参数文件、材料库以组件化形式进行封装集成,并通过环境适配实现各种组件对不同计算机软硬件环境的兼容性。

软件组件化集成的一般过程如图 3 所示。主要分为封装信息抽取过程和组件封装过程两个步骤,其中抽取过程是提取计算软件差异化信息的过程,封装过程是平台根据抽取的软件差异化信息,利用各种软硬件适配器完成软件组件化封装的过程。

2.2 工作流引擎及执行过程解析

在 NNW 集成框架系统中,设计了工作流计算引擎对用户提交的工作流计算任务进行管理,并对工作流计算任务要占用的计算资源、条件限制、计算时间等进行分析,通过过程集成的方式实现计算集成、分

析集成、数据集成。 workflows 计算引擎主要分为四个子模块，分别是 workflows 计算任务管理器、容错管理器、 workflows 计算任务调度器、高性能计算系统接口，其架构如图 4 所示。

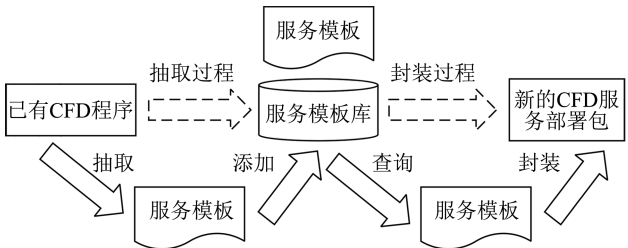


图 3 组件化封装基本流程

Fig.3 Basic process of service encapsulation

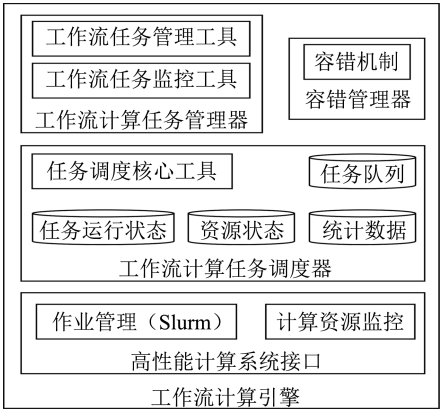


图 4 工作流引擎架构

Fig.4 Architecture of workflow engine

在用户创建工作流模型后，将其提交到中间件工作流引擎中的 workflows 计算任务管理器中，由于高性能计算系统不能直接识别 workflows 模型，需要将其解析成具体的 workflows 计算任务并决定计算任务的执行顺序，

再将其提交到高性能计算平台，由 Slurm 等作业调度系统调度具体物理资源并执行计算。

在 workflows 计算任务被提交后， workflows 计算任务调度器根据动态集成的不同超算系统的作业调度方法，调整作业执行顺序，并实时监控任务队列、计算资源状态、统计数据文件，持续调整和优化各个计算任务的执行顺序。当任务执行失败时，及时对失败任务进行恢复计算，检测其出现的异常类型，将发生的异常记录到日志信息中进行输出，并通知给任务提交者，具体的 workflows 实例执行过程如图 5 所示。

2.3 数据交换

在计算求解程序前，往往需要对配套的网格参数文件进行前处理并将其可视化。 NNW 集成框架系统通过调用网格处理软件的接口，将网格文件进行前处理。而可视化部分，考虑到大多数结构网格和非结构网格文件较大，直接进行文件传输将其显示到页面上容易使 I/O 消耗大，交换时间长，造成系统的可读性下降。因此，在实现过程中采用了基于内存拷贝的方式来加载数据文件，并将常见的数据交换方式写至接口中并隔离到数据底层，读写数据时使用统一的数据接口，以此来减少消耗时间，增强系统的可读性和可扩展性。

2.4 集成框架系统调度策略

集成框架中调度类型分为任务调度和作业调度，任务调度是针对 workflows 层次而言，作业调度则用于表示 workflows 中的计算任务。每个 workflows 模型被解析为一个任务图，如图 6 所示，图中的每一个节点对应为一个计算模型，图中的边则表示为任务之间的依赖关系，即计算任务 A 执行结束后才能执行计算任务 B，

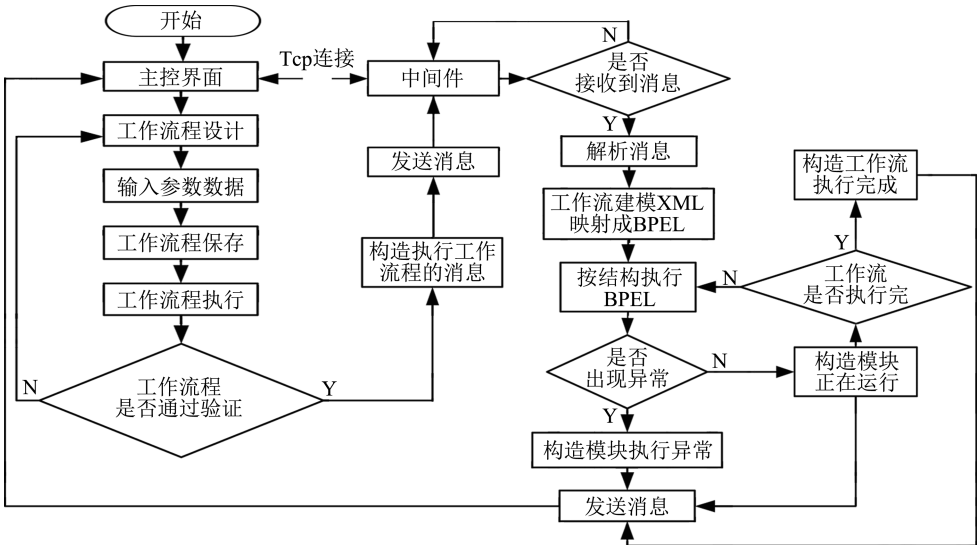


图 5 工作流执行逻辑流程图

Fig.5 Logical execution of workflow

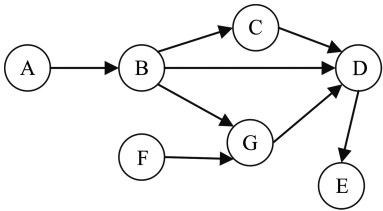


图 6 有向无环图(DAG)
Fig.6 Directed acyclic graph

若要执行计算任务 D,则需要计算任务 B、C、G 均执行结束才能开始。

在集成框架中,每位用户所提交的工作流计算任务都会被解析为图 6 所示的 DAG 图,并通过任务调度模块将其提交给高性能计算平台。当只有一个工作流计算任务在执行时,调度较为简单,按计算任务间依赖关系调度即可。而当平台中同时有多个工作流计算任务在执行时,即同时处理多个 DAG,调度模块则需要根据计算资源的占用情况以及平台中全局的计算任务队列情况,按既定优化目标以及调度策略进行计算,例如,优先保证先提交的工作流计算任务完成、优先保证高性能计算资源的整体利用率等,以此来确定工作流和计算任务的调度序列。

工作流任务调度问题是典型的 NP-hard 问题,从算法效率和效果两方面综合考虑,采用列表启发式算法应用于该集成框架下的项目场景。列表启发式算法主要由任务优先级排序和计算资源的选择这两步组成,两个步骤中采取不同的策略,形成不同的调度算法。根据任务优先级对任务进行排序时,需要先通过任务的相关属性来确定任务的优先级,如表 1 所示。

表 1 计算任务优先级排序的属性

Table 1 Calculate task priority sorting properties

属性描述	数学表示
任务 t_i 的平均执行代价	$\bar{w}_i = \frac{q}{j=1} w_{i,j} / q$ (1)
通信启动代价(向量)	L
数据传输率矩阵	$B(q,q)$
任务 t_i (调度到 p_m 上) 到任务 t_k (调度到 p_n 上) 的通信代价	$c_{i,k} = L_m + \frac{data_{i,k}}{B_{m,n}}$ (2)
平均代价	$\bar{c}_{i,k} = \bar{L} + \frac{data_{i,k}}{\bar{B}}$ (3)

其中,设 $R(P,B)$ 表示资源模型, P 表示处理器资源, B 表示处理器资源之间的带宽,(1)中的 q 表示资源总数,(2)中的 $data_{i,k}$ 表示任务 t_i 与任务 t_k 之间传输的数据量, $B_{m,n}$ 表示资源 p_m 与资源 p_n 之间的数据传输率矩阵,则 $w_{i,j}$ 表示任务 t_i 在资源 p_j 上的执行时间,即计算开销,故 $\bar{w}_i$ 表示任务 t_i 平均计算开销。通常情况下,DAG 可用三元组 $G=(T,E,C)$ 表

示,其中, T 为有序任务的集合,可表示为 $T=\{t_i,i=1,2,\cdots,n\}$, E 为有向边的集合,可描述为 $E=\{e_{ij}\}$,即任务 t_i 到 t_j 的边, t_i 为前驱节点,只有任务 t_i 完成后才能执行 t_j ,因此任务 t_i 的前驱和后继任务分别描述为:

$$pred(t_i)=\{t_j\in T,e_{ji}\in E\} \quad (4)$$

$$succ(t_i)=\{t_j\in T,e_{ij}\in E\} \quad (5)$$

而 C 表示通信开销集合,可描述为 $C=\{c_{i,j}\}$,则任务 t_i 的上行权重可以表示为:

$$rank_u(t_i)=\bar{w}_i+\max_{t_j\in succ(t_i)}(\overline{c_{i,j}}+rank_u(t_j)) \quad (6)$$

代表着该任务到终点任务的关键路径长度。下行权重表示为:

$$rank_d(t_i)=\max_{t_j\in pred(t_i)}\{rank_d(t_j)+\overline{w_j}+\overline{c_{j,i}}\} \quad (7)$$

代表着开始任务到该任务的关键路径长度。其中,把没有前驱的任务称为入口任务,记为 t_{entry} ,没有后继的任务称为出口任务,记为 t_{exit} ,则 t_{entry} 的下行权重为 0,即 $rank_d(t_{entry})=0$, t_{exit} 的上行权重为平均计算开销,即 $rank_u(t_{exit})=\overline{w_{exit}}$ 。

上行权重值越大任务优先级越高,因此,可根据上行权重值对要执行的计算任务排序,优先执行级别高的任务。计算资源的选择采用基于插入策略的最早完成时间优先原则,在空闲的时间段上插入满足调度条件的任务,有效利用计算资源。

3 NNW 集成框架系统的应用

由于 CFD 相关问题的求解常常涉及多个参数且求解过程复杂,使用命令行的方式去执行任务计算对于用户而言并不友好,而基于 Web 的方式在图形化界面上设置任务计算需要的参数虽然可行,但当多个任务执行计算并进行调度时,网格文件、包含边界条件的文件和其他控制参数被加载,调度资源将在 Web 页面频繁的换入换出,容易导致程序的性能表现变差,因此,对于驱动整个流程的执行并不适用。

故通过实现客户端应用程序,在客户端的图形化交互界面上拖拽图形组件生成工作流流程图,双击组件即可进入新的界面来设置求解器相关参数,以耦合计算为例,具体的执行流程如图 7 所示。

其中,具体的作业提交及作业信息入库过程如图 8 所示。在客户端发起启动解算器的操作后,由工作流计算引擎向集群提交作业,并获取作业信息,为每个作业生成一个对应的 hvJobInfo 对象用于记录作业的状态信息。之后,工作流计算引擎将作业信息对象提交数据管理模块,由其将作业信息写入数据库。

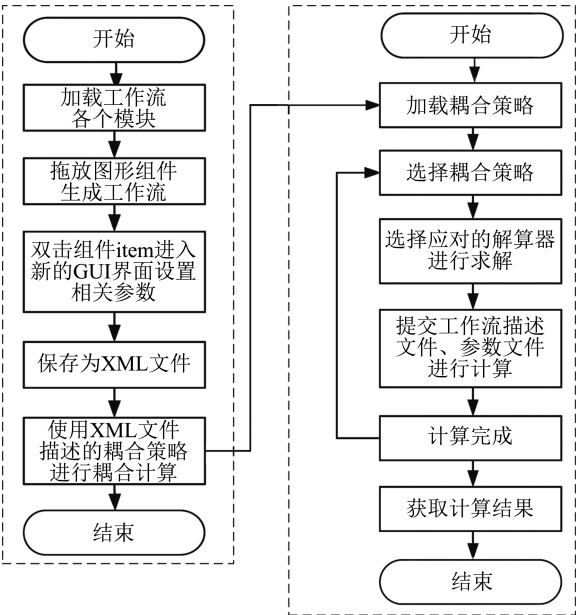


图 7 基于 workflow 模型的驱动流程

Fig.7 Driven process based on workflow model

实际的客户端操作界面如图 9 所示。在验证 workflow 模型的完整性和逻辑正确性以及接口一致性之后,客户端为其生成 xml 格式的工作流描述文件,通过面向服务的中间件连接客户端,解析 xml 文件中的节点信息、节点间连线信息、参数设置信息等,加载需要的网格文件,将其提交到高性能计算平台执行任务计算,并将获取的作业信息写入到数据库中,反馈给客户端来监控任务的执行状态和执行时间等信息。

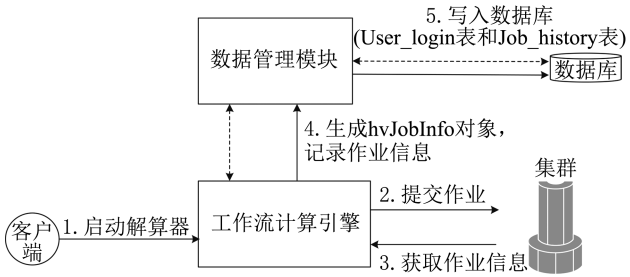


图 8 作业处理流程
Fig.8 Job processing flow

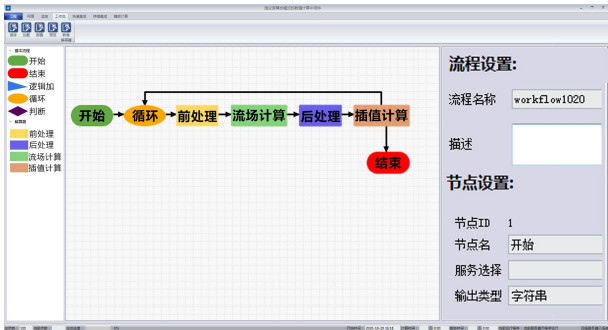


图 9 workflow 模型在客户端的界面实现

Fig.9 Implementation of workflow model in client interface

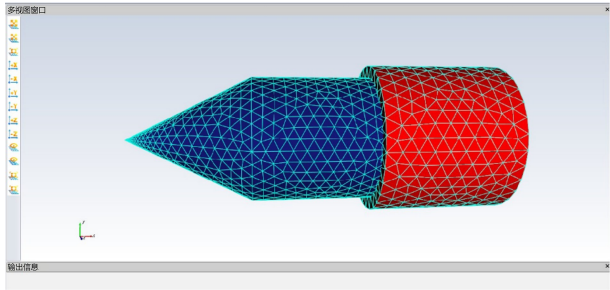


图 10 计算结果示例

Fig.10 An example of calculation results

此外,对于无依赖关系的单个可执行程序类的计算作业,用户使用相关命令提交到高性能计算平台执行计算后,无需实时关注作业在计算平台的执行情况。中间件通过与资源层的交互实时查询已提交的作业信息状态,并将获取的结果显示在 Web 界面上便于用户查询,如图 11 所示。

作业队列 (x86节点)

指定用户:		上次更新时间: 1分钟前				
作业号	作业名	状态	处理核数	QOS策略	执行或等待时间	用户名
527	dp-m8-a	PENDING	16	q_cxm	31:16	CXM
528	m219-ave	PENDING	32	q_zyf	17:36	ZYF
529	trip_f22	RUNNING	80	q_zyf	25:24	ZYF
530	overlap	RUNNING	8	q_zyf	27:16	ZYF
531	m219-ave	RUNNING	128	q_zyf	39:23	ZYF
532	m219-ave	RUNNING	64	q_zyf	29:18	ZYF

图 11 Web 端查询作业队列信息

Fig.11 Query job information on Web

为了评估该系统流程集成的有效性,我们分别对短作业任务与长作业任务进行手动执行计算和 workflow 驱动执行计算,并对其耗费的时间进行了对比,如图 12 和图 13 所示。

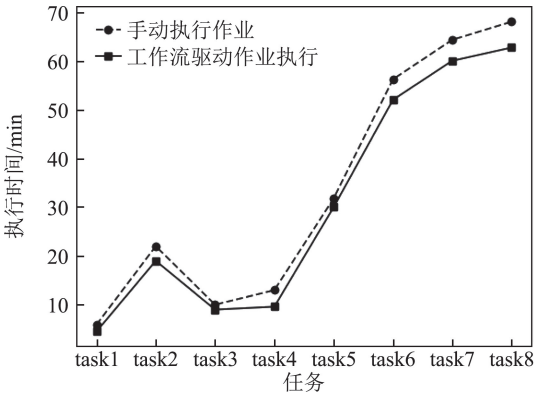


图 12 短作业任务的两种执行方式耗时对比

Fig.12 Time-consuming comparison of two execution methods for short job tasks

在该评估试验中,task 分为作业级任务和工作流级任务,我们定义执行时间小于 120 min 的 task 为短作业任务,大于 120 min 为长作业任务。首先对

8个执行不同CFD计算的短作业任务的两种执行方式进行分析,在图12中,task1和task5是作业级任务,其余task均为 workflow级任务。从图中可以看出,task1、task3和task5的两种执行方式耗费的时间较为接近,其余task的所有短作业依次执行的时间总和都要大于 workflow驱动作业执行的时间。

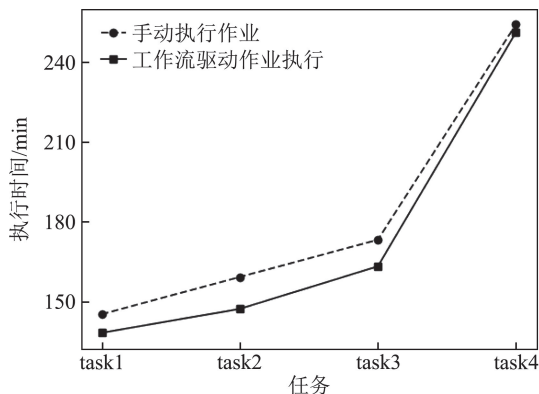


图13 长作业任务的两种执行方式耗时对比

Fig.13 Time-consuming comparison of two execution methods for long job tasks

在图13中,我们对4个包含多个长作业且执行并行计算的 workflow级任务进行了两种执行方式的耗时对比,从数据结果中可以看出,以 workflow驱动作业执行的任务耗时明显比依次执行任务中的作业的总耗时要少。从图中的实验数据和实际的操作过程来看,手动实现任务的多个作业执行操作较为繁复,操作者需要间隔地查看任务是否计算完成以及当前计算资源是否充足以支持计算,且不同操作者操作的熟练程度不同,容易导致操作时间存在一定的差异。而以 workflow的方式驱动作业执行能够实现流程的自动化执行,保证了流程集成的有效性,减少了某些人工操作的耗时,使操作人员更专注于问题的解决而不是流程的执行过程。

4 结论

为了提高研究人员的工作效率和软件的实用性,为气动相关问题的求解计算程序提供配套的前后处理平台,将前处理软件、求解计算程序、后处理软件集成于统一的集成环境,提供便于科学问题求解的科学计算环境,设计并实现了面向计算流体力学耦合计算和气动相关问题数值模拟的 NNW 集成框架系统,提供了基于 workflow及数据交换中间件的科学计算流程组装及流转控制功能、在高性能计算平台上自动化部署及任务调度的功能、数据文件管理和图形化交互等功能,目前已将其应用在 CFD 流场计算、热计算、力学计算等问题上。但对于 workflow层次的调度方法,暂

时还没有对其进行深入研究。后续工作将在该系统的基础上,研究如何最大化发挥高性能计算平台并行计算的能力。

参考文献:

- [1] 孙岩,江盟,孟德虹,等.国家数值风洞工程结构网格变形程序SGDP V1.0开发与应用[J].空气动力学学报,2020,38(4): 668-676.
SUN Y, JIANG M, MENG D H, et al. Development and application of structured grid deformation program SGDP V1.0 in national numerical windtunnel project [J]. Acta Aerodynamica Sinica, 2020, 38(4): 668-676.(in Chinese)
DOI:10.7638/kqdlxxb-2020.0048
- [2] 赵钟,何磊,何先耀.风雷(PHengLEI)通用CFD软件设计[J].计算机工程与科学,2020,42(2): 210-219.
ZHAO Z, HE L, HE X Y. Design of general CFD software PHengLEI[J]. Computer Engineering and Science, 2020, 42(2): 210-219.(in Chinese)
DOI:10.3969/j.issn.1007-130X.2020.02.004
- [3] VERMA M K, SAMUEL R, CHATTERJEE S, et al. Challenges in fluid flow simulations using exascale computing [J]. SN Computer Science, 2020, 1(3): 178.
DOI:10.1007/s42979-020-00184-1
- [4] 顾蓓蓓,武虹,迟学斌,等.国内外高性能计算应用发展概况分析[J].科研信息化技术与应用,2014,5(4): 82-91.
GU B B, WU H, CHI X B, et al. Analysis of development of high performance computing applications [J]. E-Science Technology & Application, 2014, 5(4): 82-91.(in Chinese)
DOI:10.11871/j.issn.1674-9480.2014.04.010
- [5] KROLL N, ABU-ZURAYK M, DIMITROV D, et al. DLR project Digital-X: Towards virtual aircraft design and flight testing based on high-fidelity methods[J]. CEAS Aeronautical Journal, 2016, 7(1): 3-27.
DOI:10.1007/s13272-015-0179-7[LinkOut]
- [6] GOLOVYNSKYI A, SIRENKO V, LAZARIEV T, et al. High performance computing system design for ANSYS CFD and mechanical codes[C]//15th International Conference on the Experience of Designing and Application of CAD Systems (CADSM). IEEE, 2019: 14-18.
- [7] 吴璨,王小宁,肖海力,等.高性能计算环境中中间件的优化设计与实现[J].计算机应用研究,2019,36(1): 163-167.
WU C, WANG X N, XIAO H L, et al. Design and implementation of high performance computing environment middleware[J]. Application Research of Computers, 2019, 36(1): 163-167.(in Chinese)
DOI:10.19734/j.issn.1001-3695.2017.11.0844
- [8] ALTINTAS I, BERKLEY C, JAEGER E, et al. Kepler: an extensible system for design and execution of scientific workflows[C]//16th International Conference on Scientific and Statistical Database Management, 2004: 423-424.
- [9] BARGA R, JACKSON J, ARAUJO N, et al. The trident scientific workflow workbench[C]//2008 IEEE 4th International Conference on eScience. IEEE, 2008: 317-318.
- [10] DEELMAN E, SINGH G, SU M H, et al. Pegasus: a framework for mapping complex scientific workflows onto distributed systems [J]. Scientific Programming, 2005, 13(3): 219-237.
DOI:10.1155/2005/128026

- [11] HULL D, WOLSTENCROFT K, STEVENS R, et al. Taverna: a tool for building and running workflows of services [J]. *Nucleic Acids Research*, 2006, 34(Web Server): W729-W732. DOI:10.1093/nar/gkl320
- [12] FREIRE J, SILVA C T, CALLAHAN S P, et al. Managing rapidly-evolving scientific workflows [M]//Provenance and Annotation of Data. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 2006: 10-18. DOI:10.1007/11890850_2
- [13] 徐良寅, 李云鹏, 陈枫松. 面向超大规模有限元计算的通用可视化系统 SiPESC.POST 的设计与实现[J]. *计算力学学报*, 2015, 32(2): 220-224, 231.
XU L Y, LI Y P, CHEN B S. Design and implementation of general visual system SiPESC.POST for large scale finite element computation [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2015, 32(2): 220-224, 231.(in Chinese) DOI:10.7511/jslx201502013
- [14] 陈枫松. 数值仿真软件集成平台 SiPESC 研发进展研究[J]. *科技创新导报*, 2016, 13(19): 178-179.
CHEN B S. Advancements of design and development for SiPESC - a software integration platform of numerical simulation[J]. *Science and Technology Innovation Herald*, 2016, 13(19): 178-179.(in Chinese) DOI:10.3969/j.issn.1674-098X.2016.19.099
- [15] SimCubeOnline. SimCube 5.0 软件产品说明书[EB/OL]. <https://mp.weixin.qq.com/s/hWZlf7Zj9-7IocGBZgBKzA> (2018-01-30).
- [16] ROMBERG M. The UNICORE architecture: seamless access to distributed resources[C]//HPDC '99: Proceedings of the 8th IEEE International Symposium on High Performance Distributed Computing. 1999. CAT No. 99TH8469, 1999: 287-293.
- [17] MCCORMACK R P, KOONTZ J E, DEVANEY J. Seamless computing with WebSubmit [J]. *Concurrency: Practice and Experience*, 1999, 11(15): 949-963. DOI: 10.1002/(sici)1096-9128(19991225)11:15<949::aid-cpe462>3.0.co;2-y
- [18] ATWOOD C A, GOEBBERT R C, CALAHAN J A, et al. Secure web-based access for productive supercomputing [J]. *Computing in Science & Engineering*, 2016, 18(1): 63-72. DOI:10.1109/mcse.2015.134
- [19] SUKHOROSLOV O, VOLKOV S, AFANASIEV A. A web-based platform for publication and distributed execution of computing applications[C]//2015 14th International Symposium on Parallel and Distributed Computing. IEEE, 2015: 175-184.
- [20] SUH Y K, RYU H, KIM H, et al. EDISON: a web-based HPC simulation execution framework for large-scale scientific computing software[C]//2016 16th IEEE/ACM International Symposium on Cluster, Cloud and Grid Computing (CCGrid). IEEE, 2016: 608-612.
- [21] 曹荣强, 王小宁, 卢莎莎, 等. 基于 Portlet 的高性能计算应用集成组件[J]. *科研信息化技术与应用*, 2017, 8(2): 18-30.
CAO R Q, WANG X N, LU S S, et al. High performance computing application integration toolkits based on portlet[J]. *E-Science Technology & Application*, 2017, 8(2): 18-30.(in Chinese) DOI:10.11871/j.issn.1674-9480.2017.02.002
- [22] 和荣, 王小宁, 卢莎莎, 等. 高性能计算环境通用计算平台[J]. *计算机系统应用*, 2019, 28(12): 55-62.
HE R, WANG X N, LU S S, et al. Platform for high performance computing environment[J]. *Computer Systems & Applications*, 2019, 28(12): 55-62.(in Chinese) DOI:10.15888/j.cnki.csa.007176
- [23] 迟学斌, 肖海力, 王小宁, 等. 面向科学计算的网格环境[J]. *集成技术*, 2012, 1(1): 68-76.
CHI X B, XIAO H L, WANG X N, et al. Scientific computing grid and SCE middleware [J]. *Journal of Integration Technology*, 2012, 1(1): 68-76.(in Chinese)
- [24] WAN S S, CAO J, YAN C. Aerodynamic design modeling and simulation by developing RFID middleware [J]. *Applied Mechanics and Materials*, 2014, 543-547: 1467-1470. DOI:10.4028/www.scientific.net/amm.543-547.1467[LinkOut]
- [25] QIU J, JHA S, LUCKOW A, et al. Towards HPC-ABDS: an initial high-performance big data stack[J]. *Building Robust Big Data Ecosystem ISO/IEC JTC*, 2014, 1: 18-21.
- [26] MADDINENI S, KIM J, EL-KHAMRA Y, et al. Distributed application runtime environment (DARE): a standards-based middleware framework for science-gateways[J]. *Journal of Grid Computing*, 2012, 10(4): 647-664. DOI:10.1007/s10723-012-9244-1
- [27] 汪春杰, 曹健. 面向科学工作流的应用集成框架[J]. *计算机工程*, 2009, 35(20): 258-260, 263.
WANG C J, CAO J. Scientific workflow-oriented application integration framework [J]. *Computer Engineering*, 2009, 35(20): 258-260, 263.(in Chinese) DOI:10.3969/j.issn.1000-3428.2009.20.091
- [28] 赵勇, 李有福, 李小龙, 等. 科学工作流与高性能计算集成方案[J]. *电子科技大学学报*, 2014, 43(3): 457-463.
ZHAO Y, LI Y F, LI X L, et al. An approach to integrate scientific workflow with high performance computing [J]. *Journal of University of Electronic Science and Technology of China*, 2014, 43(3): 457-463.(in Chinese) DOI:10.3969/j.issn.1001-0548.2014.03.024
- [29] LI F, SONG F G. A real-time machine learning and visualization framework for scientific workflows[C]//Proceedings of the Practice and Experience in Advanced Research Computing 2017 on Sustainability, Success and Impact, New Orleans LA USA. New York, NY, USA: ACM, 2017: 1-8. DOI:10.1145/3093338.3093380
- [30] 赵士操, 肖永浩, 段博文, 等. HSWAP: 适用于高性能计算环境的数值模拟 workflow 管理平台[J]. *计算机应用*, 2019, 39(6): 1569-1576.
ZHAO S C, XIAO Y H, DUAN B W, et al. HSWAP: numerical simulation workflow management platform suitable for high performance computing environment [J]. *Journal of Computer Applications*, 2019, 39(6): 1569-1576.(in Chinese) DOI:10.11772/j.issn.1001-9081.2018122606
- [31] WANG X V, XU X W. A collaborative product data exchange environment based on STEP [J]. *International Journal of Computer Integrated Manufacturing*, 2015, 28(1): 75-86. DOI:10.1080/0951192x.2013.785028
- [32] WIMMER H, YOON V Y, SUGUMARAN V. A multi-agent system to support evidence based medicine and clinical decision making via data sharing and data privacy[J]. *Decision Support Systems*, 2016, 88: 51-66. DOI:10.1016/j.dss.2016.05.008