

doi: 10.3969/j.issn.1007-7162.2014.03.013

融合云计算和超级计算的 CAE 软件集成系统的设计

林欣达, 林 穗

(广东工业大学 计算机学院 广东 广州 510006)

摘要: 云计算和超级计算是信息化时代发展的产物. 针对普通用户使用 CAE 软件及其复杂业务进行高性能计算的需求问题, 提出融合云计算和超级计算的 CAE 软件集成系统的架构设计及其实现的关键技术.

关键词: 云计算; CAE 软件; 集成系统; 超级计算

中图分类号: TP393

文献标志码: A

文章编号: 1007-7162(2014)03-0072-05

Design of CAE Software Integrated System Based on Integration of Cloud Computing and Super Computing

Lin Xin-da, Lin Sui

(School of Computers, Guangdong University of Technology, Guangzhou 510006, China)

Abstract: Cloud computing and super computing are the products of information age. Aiming at the users' needs in their use of CAE software and its complex business for high performance computing, it proposes the architecture design and the key technology of implementation of the CAE software system, based on integration of cloud computing and super computing, and gives an example to illustrate that.

Key words: cloud computing; CAE software; integrated system; super computing

20 世纪 60 年代, Clough RW 首次使用有限元法这一名称. 随后, 有限元法在发展其自身的理论和方法外, 还应用于机械、汽车、船舶、航天航空、土木及海洋工程等领域. 因此, 有限元法^[1]成为现代机械产品设计、制造以及结构疲劳分析的重要工具.

有限元法是科学计算中非常重要的一种方法, 其求解过程如图 1 所示. 它的基本思想是: 首先, 对研究对象的分析区域进行网格划分, 并且对其进行数学建模; 然后, 对数学模型进行求解并且计算分

析; 最后把求解的结果转化成网格图形, 对其分析. 总之, 有限元法的实质是把连续体或连续结构进行划分, 并且按照一定的方式结合在一起形成平衡方程, 再加上边界条件进行求解^[2-3]. 因此, 有限元的求解过程可以归结为求解方程组的过程, 而此类方程组具有稀疏性并且计算规模非常庞大. 在有限元法的理论和实践分析可知, 大部分时间都是耗费在数值计算上, 也就是说在工程问题中, 大部分时间是花费在方程组的求解上.

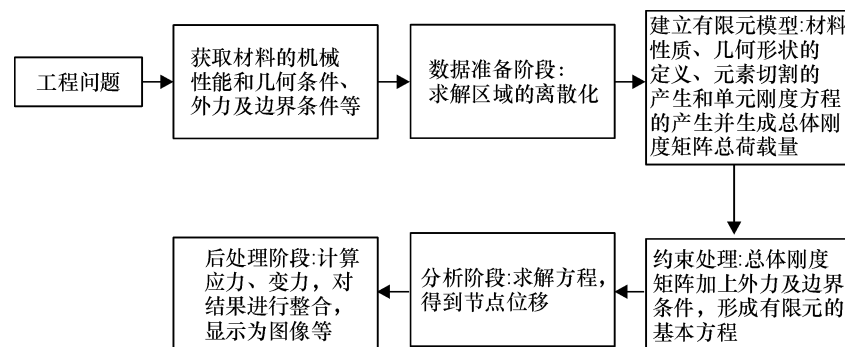


图 1 有限元分析流程图

Fig. 1 Flow chart of finite element analysis

收稿日期: 2014-04-14

基金项目: 广东省自然科学基金资助项目(S2012040006729); 广州市科技计划项目(2012Y2-00040)

作者简介: 林欣达(1989-) 男, 硕士研究生, 主要研究方向为云计算、并行与分布式计算.

由于求解方程组的速度决定着整个有限元法的求解效率,而传统计算机由于受到CPU的计算速度和存储空间限制,在使用有限元软件进行有限元求解时,常常因为问题规模的庞大,存储空间的不足导致计算时间过长,甚至无法计算分析^[4]。超级计算机的诞生在一定程度上可以解决这个问题,但是在超级计算机上使用有限元软件有一定的局限性。超级计算机仅支持Linux版本的有限元软件,而现实中企业由于操作的方便性,更青睐于Window版本的有限元软件。另外,超级计算机一般服务于大型企业、科研机构,还有一些大型的国营企业,小型民营企业、创业起步阶段企业无法承受使用超级计算机的费用。最重要的是,在超级计算机上进行高性能计算,需要企业自行配置专业人员进行软件安装、测试、监控等等,这些专业人员不仅需要行业专业知识,又要具备计算机专业知识,用人门槛高。而通过统一接口将CAE软件集成起来,利用融合云计算和超级计算的平台将这些资源提供给企业共享,不仅可以节约资源和成本让企业各取所需,还可以缩短企业使用CAE软件进行作业的时间。此外,小型企业也可以付出较小的费用获得高性能计算服务。因此,本文提出融合云计算和超级计算的CAE集成平台架构设计。

1 相关工作

在工业设计领域,CAE平台的并行化已经成为一个热点问题,我国在超级计算机系统与CAE软件之间的集成技术上,缺乏研究的基础和工程实践的基础^[5-6]。

大型工程问题,比如飞机、轮船等都是结构极其复杂,数据仿真极其困难,普通的单机、工作站很难完成其结构和功能的优化设计。因此,需要超级计算机技术来解决此类问题^[7-9]。

国内外有不少关于有限元求解器移植到超级计算机的尝试。文献[10]提出了在Linux集群技术构建的高性能计算平台下,Ansys^[11]分布式计算的关键配置和应用,并对如何发挥其并行优势提出了建议。在有限元软件并行化方面,上海超算中心联合上海交大进行的有限元并行应用改造试验^[12-13]。他们使用商业有限元软件Nastran在“神威I”超级计算机系统进行了移植和并行计算功能的二次开发。在分布式计算、网格计算和并行计算的快速发展下,尤其是虚拟技术、多核处理器和分布式存储的高速发展,云计算产生了。企业只需要为所要的资源付费,就可以使用部署在云端的资源,这节约了企业购置硬件配置、软件,还有软件和硬件的维护费用,可以

让企业集中投资到研发中。荷兰高性能计算与e-science服务中心SARA,提出了开发高性能云系统,并且处于测试阶段。该系统只是针对不能运行在超级计算中心而可以运行在本地集群、工作站运行的应用软件。文献[14-15]介绍了采用云架构打造HPC平台的方法,但是并未提出具体的应用是如何运作的。因此,以云计算和超级计算为平台集成CAE软件是搭建并且使用集成系统的一种必然趋势,是适应CAE软件需要高性能求解技术快速发展的必然产物,是实现大型工程及其复杂产品解决其多目标优化设计的必然途径。

2 架构设计

基于云计算和超级计算平台的CAE集成系统,主要目的在于让工业设计人员可以选择最优的CAE软件进行作业,择优选取CAE软件进行工业产品的设计、疲劳分析、计算、实验和仿真等等,并且让设计人员可以通过互联网快捷地使用该平台,平台内部框架如图2所示。

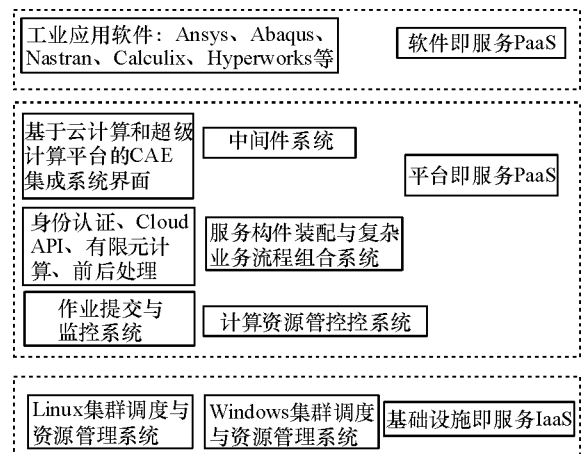


图2 平台框架图

Fig.2 Platform framework map

软件即服务层为用户提供基本的软件使用;平台即服务层为用户提供用户的安全登录、身份认证,中间件系统是为复杂业务流程提供数据转换的一个转换系统,而是否启用复杂业务流程系统在于用户是否需要使用不同的CAE软件。基础设施即服务层提供最基本的硬件和系统支持,根据用户所选软件版本选择不同的操作系统进行作业。其主要流程有:

(1) 数据的前后处理

有限元求解流程中,前处理将产生一个有限元模型几何体的全过程,可以输入物理特性、描述边界条件和载荷来对模型进行修正,将直接影响整个作业的优劣,其主要流程包括:导入模型、设置参数、前处理结果的导出、网格划分、载荷的施加等等。网格

的划分直接影响计算结果^[16]。后处理可将计算结果以粒子流迹显示、梯度显示、彩色等值线显示、立体切片显示、矢量显示、透明及半透明显示等图形方式显示,也可将计算结果以图表、曲线形式显示或输出。

(2) CAE 软件的求解器应用

该应用的大流程主要是生成作业、作业提交、作业执行、作业监控、结果生成^[17]。各种求解器的求解方法是不同的,但都是接收前处理后的文件,生成数学模型,通过 I/O 读取矩阵文件,调用函数对矩阵进行预处理,预处理后再进行求解。这里的求解方法主要是直接法^[18]和迭代法^[19]两种。这里仅介绍直接法求解过程。

① Communicate。从文件中读取矩阵数据。矩阵的读取方式如下:首行是矩阵的行数、矩阵的列数和读取的矩阵元素的数目。接下来的行则为行坐标、列坐标以及所对应的非零元素。以上是读取实矩阵的方式。若读取复矩阵则需要用四列来存储矩阵,则将矩阵元素的实部和虚部分开存储即可。

② Reorder。对矩阵使用多元最小度算法、广义嵌套剖分算法和近似最小度算法等进行排序,使得矩阵获得低填充来减少求解方程的时间。

③ Factor。根据矩阵的特征对矩阵进行分解。这里只举例 LU 分解。根据克劳特算法将矩阵分解为 3 个矩阵, L 为下三角矩阵, D 为对角矩阵, U 为上三角矩阵。在分解过程中,可以选择使用主元法来确保数值的稳定性和精确性。

④ Solve。前面已经将线性方程 $Ax = b$ 分解为 $LDUx = b$ 。通过上三角形矩阵、对角矩阵和下三角矩阵来解矩阵方程是件轻而易举的事,并且解方程的时间大大减少。只需解线性方程 $Ly = b$,再解方程 $Dz = y$,最后解 $Ux = b$ 将 x 求出即可。

(3) CAE 软件的复杂业务应用

对于组合的复杂业务流程,比如流体固体耦合、CAE 参数的迭代优化和电液一体化联合仿真等等。

(4) CAE 软件的数据转换

为了使不同的 CAE 软件之间进行沟通,实现数据共享,利用不同 CAE 软件的优势,提高作业效率和资源的利用率。CAE 软件的国际标准格式是 iges 格式,很多 CAE 软件都支持该格式,通过中间格式 iges 和 step 进行数据文件转换^[20],不会受软件类别和版本的限制,有较强的通用性。

3 平台实现的关键技术

3.1 前端系统

前端系统采用基于 C/S (Client/Server) 模式的 CAE 软件平台,使用户能够更好在 PC 上使用部署

在融合云计算和超级计算机平台的各种 CAE 软件,实现在本地机上实时地使用 CAE 集成系统,功能模块如图 3 所示。

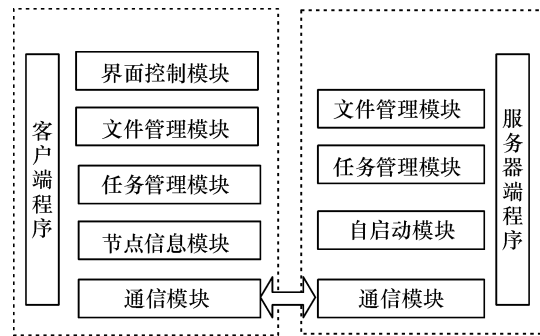


图 3 基于 C/S 模式的 CAE 平台功能模块

Fig. 3 The CAE platform function module based on C/S model

客户端可以让用户实时方便的上传提交任务,设置需要申请的 CAE 软件及其计算节点数和核数。用户使用互联网登录时,服务器端程序就会自动启动,实时检测用户需求,并且反馈结果给客户端。

3.2 组网方案

云计算和超级计算都是需要聚集各种计算资源,形成超大规模的计算资源。但不同的是它们的应用模式。超级计算主要应用于比较专业性的领域,而云计算服务于各种分散的应用需求。所以,云计算和超级计算的融合,不仅要考虑不同资源的结合,又要考虑资源的可分离性。各种资源以松耦式进行连接,使它们可以独立应用,又可以聚集为一个整体,达到按需扩展的目的。融合云计算和超级计算的平台连接着计算资源和应用,承担着存储和高性能计算的责任,如图 4 所示。

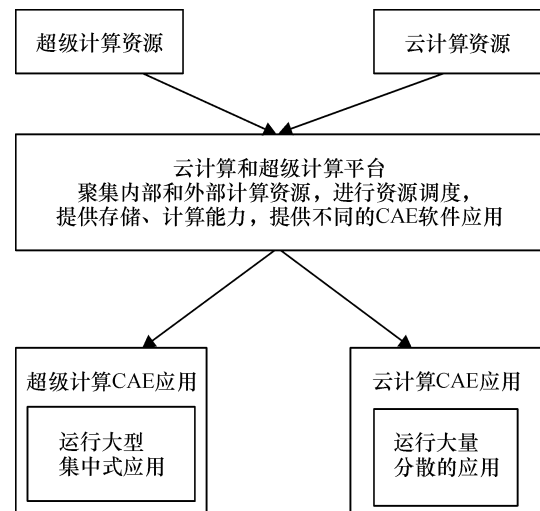


图 4 融合云计算和超级计算平台功能示意

Fig. 4 Functions of the platform for integrating cloud computing and super computing

该平台由内外部资源构成,内部资源是计算节点和存储节点,外部资源为各种企业、科研机构的计算集群与服务器等等。外部资源是可以动态接入的,对于大规模集群则可使用光纤通道接入,而分散的计算节点可以使用高速以太网接入。

融合云计算和超级计算的CAE集成系统是在IaaS和超级计算机节点的基础上实现的,提供了资源存储、资源调度和高性能计算等功能。在PaaS层上看,所有资源都是虚拟机的形式,负责取得虚拟资源,按照客户的意愿配置应用环境。

3.3 CAE软件的部署

融合云计算和超级计算平台的CAE集成系统,使用虚拟技术屏蔽不同软件需要的操作系统,部署各种CAE软件。虚拟机的搭建见文献[21],在不同的虚拟机上搭建CAE软件,由于Windows版本的CAE软件操作容易,不做介绍。以下介绍开元CAE软件Calculix的平台搭建:

(1) 下载Calculix、Spooles、Arpack的源代码,然后通过网络上传源码到用户目录。

(2) 修改Arpack源码里的ARmake.inc文件,让其指向正确的编译器,保存后编译源生成libarpack_SUN4.a文件,修改Spooles源码,添加MPI支持库函数。

(3) 用基于MPI改造后的Calculix部分文件代替原有文件,重置Calculix的makefile文件,指向Arpack和Spooles目录,编译器指向MPICC。编译Calculix后在src目录生成名字为ccx_2.6的文件,添加src目录至系统环境变量。

3.4 CAE软件的数据转换

本文介绍有限元软件Abaqus处理有限元分析的前后处理,用有限元求解器Calculix处理有限元计算部分的任务,其流程如图5所示。首先,使用联网的计算机通过前端系统,选择使用服务构件装配与复杂业务流程组合系统,选择Abaqus和Calculix作为组合。然后系统自动执行任务,使用Abaqus软件,产生一个划分完网格的有限元模型,通过中间件将Abaqus产生的前处理数据模型转化为.inp格式传输给Calculix进行数据计算,Calculix就收到数据模型后生成数学模型,调用平台上基于MPI开发的并行求解程序,通过并行I/O读取矩阵文件,求解结果采用快速文件接口输出,完成整个计算分析过程,再通过中间件进行数据格式转换,将数据传输给Abaqus进行后处理。最后,当整个有限元分析流程结束时,提醒用户下载结果到本机进行结果分析。利

用不同的CAE软件进行作业,可以发挥不同CAE软件的优点,达到更优的计算结果。

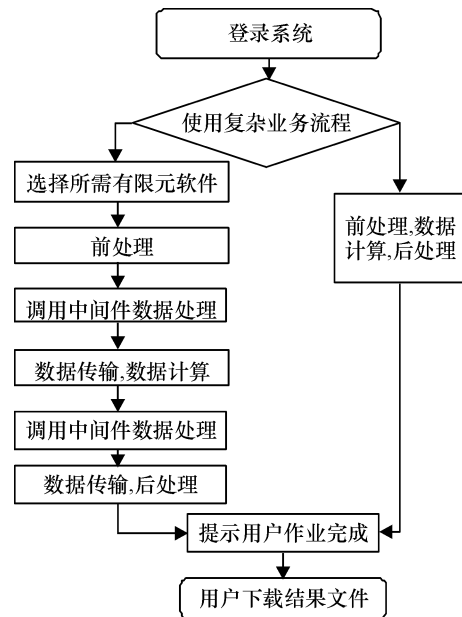


图5 平台运作流程

Fig. 5 Platform operation process

4 结束语

本文提出的融合云计算和超级计算平台的CAE集成系统可以实现用户的需要,获取自己所需的CAE软件,也可以实现普通用户进行工业设计等以较低的代价获取高性能计算,还可以实现并行计算完成单机环境下无法求解的复杂模型。但是,本文并未提出平台上数据存储、网络传输和用户使用安全策略。

参考文献:

- [1] 尹硕辉,余天堂,刘鹏等.基于等几何有限元法的功能梯度板自由振动分析[J].振动与冲击,2013,32(24):180-186.
Yin S H, Yu T T, Liu P, et al. Free vibration analysis of functionally graded plates using isogeometric finite element method [J]. Journal of Vibration and Shock, 2013, 32 (24): 180-186.
- [2] Dhatt G, Touzot G. Finite Element Method [M]. New York: John Wiley & Sons, 2012.
- [3] Nguyen-Thoi T, Phung-Van P, Rabczuk T. et al. Free and forced vibration analysis using the n-sided polygonal cell-based smoothed finite element method (nCS-FEM) [J]. International Journal of Computational Methods, 2013, 10 (1): 1-19.
- [4] 陈林,秦忠国.基于Linux机群的大型结构并行有限元系

- 统研究[J]. 水利与建筑工程学报 2006 4(3):77-79.
Chen L, Qin Z G. Research on the parallel finite element system for large structures based on linux cluster[J]. Journal of Water Resources and Architectural Engineering, 2006 4(3):77-79.
- [5] 田荣. 中国 CAE 软件发展的新契机[J]. 计算机辅助工程 2011 20(1):141-143, 147.
Tian R. New opportunity for CAE software development in China[J]. Computer Aided Engineering, 2011, 20(1): 141-143, 147.
- [6] Sun N H; Kahane D; Chen D. High-performance computing in China: research and application[J]. International Journal of High Performance Computing Applications, 2010 24(04):363-409.
- [7] 丁峻宏, 李根国, 金先龙, 等. 基于高性能计算的 CAE 技术在大型盾构施工仿真中的应用[J]. 计算机辅助工程, 2011 20(1):163-167.
Ding J H, Li G G, Jin X L, et al. Application of CAE technology based on high performance computing in large-scale shield construction process[J]. Computer Aided Engineering, 2011 20(1): 163-167.
- [8] Kasper T, Meschke G. On the influence of face pressure, grouting pressure and TMB design in soft ground tunneling[J]. Tunneling & Underground Space Technology, 2006, 21(2):160-171.
- [9] Schmitt J, Pfitsch M, Gattermann J, et al. Numerical investigations to the influence of rearrangement of ground pressure for shield tunneling[C]//Proc ICOSSAR 2005. Rotterdam: Mill Press 2005:1317-1323.
- [10] 魏存祥, 龚建春, 洪洪云. 基于 ANSYS 的并行计算发展及实现[J]. 机械工程师, 2007, 10(2):95-96.
Wei C X, Gong J C, Zhang H Y. Development and Realization of Parallel Computation Based on the ANSYS[J]. Mechanical Engineer 2007, 10(2):95-96.
- [11] 刘昆, 彭美春, 林怡青, 等. 基于 ANSYS Workbench 鼓式制动器冲焊蹄的有限元分析[J]. 广东工业大学学报, 2013, 30(1):92-96.
Liu K, Peng M C, Lin Y Q, et al. Finite Element Analysis of Drum Brake Stamping-welding Shoes Based on ANSYS Workbench[J]. Journal of Guangdong University of Technology 2013, 30(1):92-96.
- [12] Li G G, Cai G X, Li Y Y. Parallel development of commerce FEA software on SW-1 supercomputer[J]. Structural Engineers, 2003, 66(02):318-323.
- [13] 李丽君, 金先龙, 李渊印, 等. 有限元软件结构分析模块的并行开发及应用[J]. 上海交通大学学报 2004, 38(8):1354-1357.
Li L J, Jin X L, Li Y Y, et al. Parallel development and application of FEA software structural analysis module[J]. Journal of Shanghai Jiaotong University, 2004, 38(8):1354-1357.
- [14] 张如花, 陈晓华. 云如何重塑超级计算机[C]//第18届全国信息存储技术学术会议论文集. 江苏: 江苏人民出版社 2012:342-345.
- [15] 徐晓麟, 吴松, 石宣化. CRANE: 面向科学计算与企业信息化的云计算平台[J]. 集成技术 2012, 1(4):4-13.
Xu X L, Wu S, Shi X H. CRANE: A cloud platform for scientific computing and enterprises[J]. Journal of Integration Technology, 2012, 1(4):4-13.
- [16] 刘德仿, 李丽英, 周临震, 等. 基于 ANSYS 的建模及分析方法研究[J]. 制造业自动化, 2011, 33(19):140-142, 149.
Liu D F, Li L Y, Zhou L Z, et al. Research of modeling and analysis method based on ANSYS[J]. Manufacturing Automation, 2011, 33(19):140-142, 149.
- [17] 邓子云, 杨晓峰, 黄婧. 基于 ESB 的 SOA-BPM 系统集成平台关键技术研究及实现[J]. 科学技术与工程, 2010, 10(3):798-803.
Deng Z Y, Yang X F, Huang J. The Key Technology Research and Implementation of SOA-BPM System Integration Platform Based on ESB[J]. Science Technology and Engineering, 2010, 10(3):798-803.
- [18] Tinney W F, Walker J W. Direct solutions of sparse network equations by optimally ordered triangular factorization[J]. Proceedings of the IEEE, 1967, 55(1):1801-1809.
- [19] Yousef Saad, Henk A van der Vorst. Iterative solution of linear systems in the 20th century[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics 2000, 123(1):1-33.
- [20] 尹作重, 李江华, 李晨希, 等. 一种 CAD 和 CAE 数据集成方式研究[J]. 制造业自动化 2013, 35(06):8-9.
Yin Z Z, Lin J H, Li C X, et al. A CAD and CAE data integration approach[J]. Manufacturing Automation, 2013, 35(06):8-9.
- [21] 曾龙海, 张博锋, 张丽华, 等. 基于云计算平台的虚拟集群构建技术研究[J]. 微电子学与计算机 2010, 27(8):31-35, 40.
Zeng H L, Zhang B F, Zhang L H, et al. Virtual cluster constructing based on cloud computing platform[J]. Microelectronics & Computer, 2010, 27(8):31-35, 40.