

АРХИТЕКТУРА МОДУЛЬНОЙ ИНТЕГРАЦИОННОЙ ПЛАТФОРМЫ ЛОГОС

А. Г. Надуев, А. Д. Черевань, Д. А. Кожяев

Российский федеральный ядерный центр –
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, Саров

Модульная интеграционная платформа (ЛОГОС-МИП) является программным комплексом для интеграции расчетных модулей умеющих моделировать задачи газодинамики, гидродинамики, термодинамики, механики твердого тела и т. д., с целью проведения связанного и сопряженного расчета задач мультифизики, параметрических и оптимизационных исследований.

В докладе представлена общая концепция ЛОГОС-МИП, назначения компонент ЛОГОС-МИП и принципы их взаимодействия, а так же уровни интеграции расчетных модулей в ЛОГОС-МИП.

Ключевые слова: ЛОГОС-МИП, ЛОГОС-Платформа, интеграция расчетных модулей, связанный расчет, сопряженный расчет.

Назначение и цели модульной интеграционной платформы ЛОГОС

Назначением модульной интеграционной платформы ЛОГОС («ЛОГОС-Платформа») является объединение расчетных модулей суперкомпьютерного моделирования и систем инженерного анализа в рамках пакета программ ЛОГОС, для подготовки и расчета комплексных мультидисциплинарных задач и проведения параметрических и оптимизационных исследований.

При проектировании «ЛОГОС-Платформа» разработчики ставили перед собой следующие цели:

- Обеспечение сопряженного и связанного мультифизического моделирования на высокопараллельных вычислительных системах;
- Обеспечение возможности проведения параметрических и оптимизационных исследований;
- Создание унифицированной среды разработки для разработчиков ЛОГОС и разработчиков отраслевых и авторских расчетных модулей;
- Объединение расчетных модулей пакета программ ЛОГОС с авторскими и отраслевыми расчетными модулями в единой графической оболочке интегрированной платформы.

Состав модульной интеграционной платформы ЛОГОС

Для обеспечения поставленных целей в состав «ЛОГОС-Платформа» входят следующие компоненты, выполняющие определенные задачи:

- Интегратор – графический интерфейс конфигурирования модулей МИП;
- Обработчик сценария – программная среда выполнения расчетного задания (сценария);
- Модули обработчика сценария – модули, реализующие логику этапов расчетного сценария;
- Модуль сопряжения – модуль подключения механизмов МИП к основным расчетным модулям;
- Подключаемые расчетные модули – модули, подключаемые к основным расчетным модулям и расширяющие их функциональные возможности;

- Транспортный уровень – настраиваемая среда, обеспечивающая взаимодействие между основными расчетными модулями в процессе связанного расчета мультидисциплинарных задач;
- Обработывающие функции (ОФ) – компоненты для настройки транспортного уровня;
- Файловый контейнер обмена данными – модуль взаимодействия основных расчетных модулей в процессе поэтапного расчета мультидисциплинарных задач.

Уровни интеграции в модульную интеграционную платформу ЛОГОС

При необходимости внедрения сторонних расчетных модулей в «ЛОГОС-Платформа» следует учитывать возможность следующих уровней интеграции, которые наследуют друг от друга необходимые действия по мере повышения уровня:

1. Интеграция расчетного модуля в Интегратор – этот уровень не требует изменения исходного кода интегрируемого расчетного модуля. Должен быть подготовлен SPEC файл в формате Интегратора, в котором содержится информация об объектах проекта расчетного модуля и правилах их редактирования во внешних утилитах (например, САПР, препроцессоры и т. д.);

2. Использование механизма пользовательских функций (ПФ) – начиная с этого уровня интеграции, требуется изменение исходного кода интегрируемого расчетного модуля:

- Интеграция библиотеки модуля сопряжения;
- Реализация коннекторов ПФ в расчетном модуле;
- Реализация сервисной функции, предоставляющей доступ к коннекторам ПФ.

SPEC файл должен содержать информацию о коннекторах ПФ расчетного модуля. Отдельно, должны быть разработаны динамические библиотеки с ПФ и SPEC файлы к ним;

3. Взаимодействие расчетного модуля с подключаемыми расчетными модулями – в расчетном модуле должны быть реализованы:

- Точки передачи управления модулю сопряжения;
- Сервисные функции, предоставляющие доступ к данным расчетного модуля.

SPEC файл должен содержать информацию о точках передачи управления и сервисных функциях. Отдельно, должны быть разработаны динамические библиотеки с подключаемыми расчетными модулями и SPEC файлы к ним;

4. Взаимодействие расчетного модуля в связанном расчете мультидисциплинарной задачи с использованием транспортного уровня – должны быть разработаны подключаемый расчетный модуль осуществляющий взаимодействие с транспортным уровнем и динамические библиотеки с ОФ, а так же и SPEC файлы к ним.

Схема взаимодействия компонент «ЛОГОС-Платформа» при всех уровнях интеграции представлена на рис. 1.

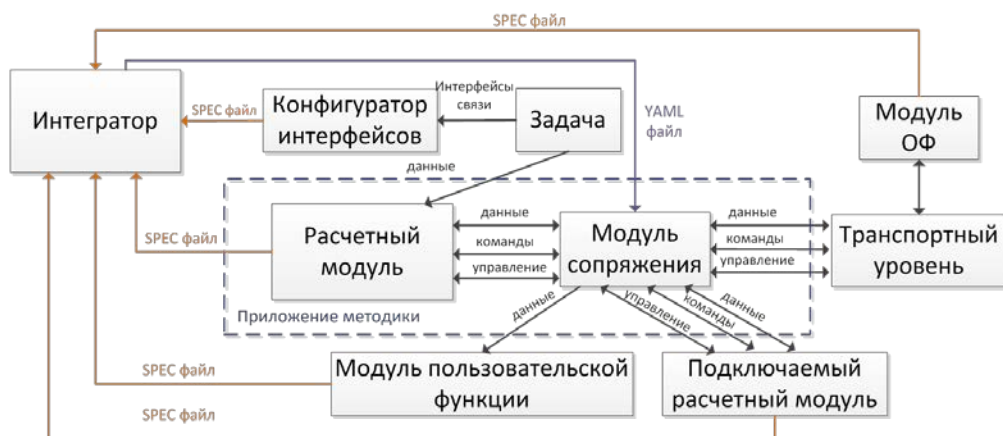


Рис. 1. Схема взаимодействия компонент «ЛОГОС-Платформа» при всех уровнях интеграции

Интегратор модульной интеграционной платформы ЛОГОС

Интегратор это приложение, предоставляющее графический интерфейс пользователя и обеспечивающее:

- Динамическую интеграцию расчетных модулей с использованием SPEC файлов;
- Подготовку задач расчетных модулей с возможностью вызова соответствующих САПР, препроцессоров, конвертеров как внешних утилит;
- Настройку механизма ПФ отраслевых методик, для использования ПФ при расчете задач;
- Объединение задач расчетных модулей в связанную мультидисциплинарную задачу с выбором интерфейсов взаимодействия и возможностью их настройки с использованием схемного редактора;
- Подготовку сценариев расчета задач оптимизационных и параметрических исследований с использованием схемного редактора;
- Запуск обработчика сценария для выполнения подготовленных сценариев с контролем хода расчета сценария;
- Анализ полученных результатов с возможностью вызова постпроцессоров как внешних утилит.

Пример графического интерфейса Интегратора во время расчета связанной задачи на локальном компьютере представлен на рис. 2.

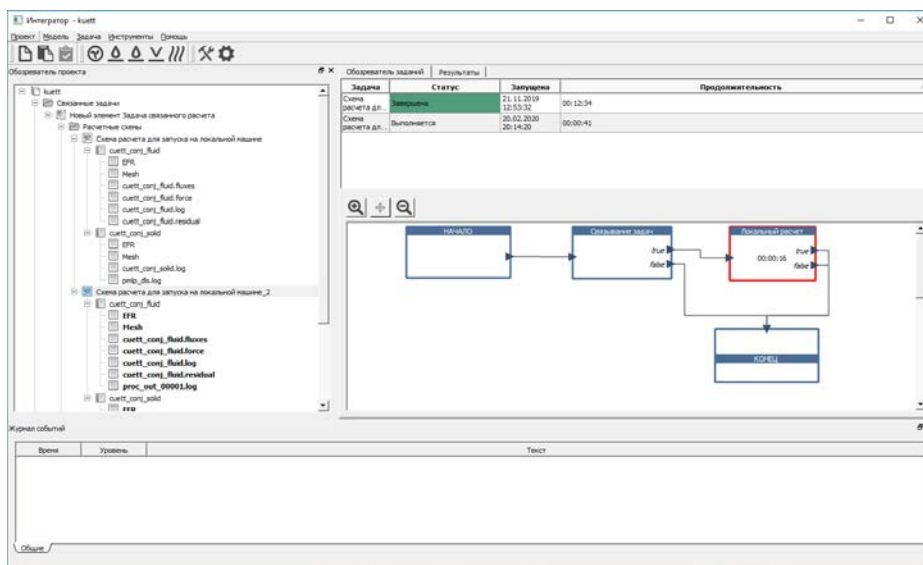


Рис. 2. Пример графического интерфейса Интегратора во время расчета связанной задачи

Обработчик сценария модульной интеграционной платформы ЛОГОС и его модули

Обработчик сценария модульной интеграционной платформы ЛОГОС и его модули предназначены для выполнения расчетных заданий (сценариев) подготовленных в схемном редакторе Интегратора.

В процессе исполнения расчетного задания обработчик сценария производит передачу управления своим модулям в соответствии с логикой сценария, а те, в свою очередь, реализуют логику отдельных этапов, вызывая для этого внешние программы и используя возможности языка программирования Python [1];

Интегратор в процессе расчета сценария обработчиком, взаимодействует с его БД и журналом событий, отображает ход расчета, предоставляет пользователю интерфейс для оценки результатов расчета и возможность досрочной остановки расчета сценария.

Пример сценария одного шага параметрического исследования, подготовленный в схемном редакторе Интегратора представлен на рис. 3.

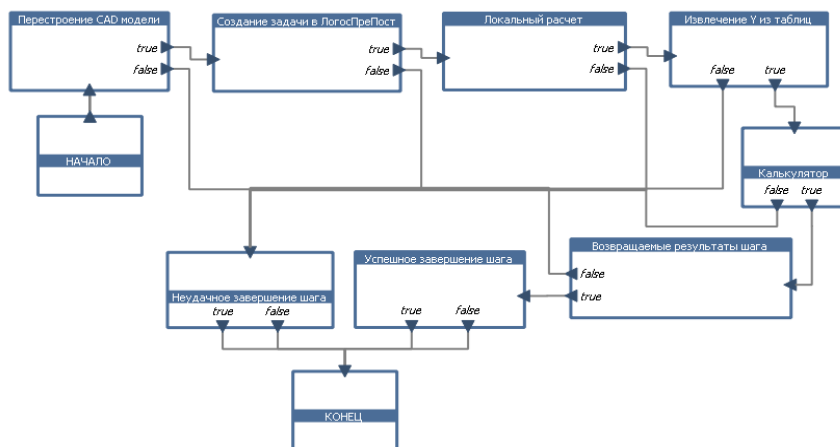


Рис. 3. Пример сценария одного шага параметрического исследования, подготовленный в схемном редакторе Интегратора

Модуль сопряжения модульной интеграционной платформы ЛОГОС

Модуль сопряжения является статической библиотекой, которая должна быть интегрирована в расчетный модуль, для обеспечения взаимодействия с другими компонентами ЛОГОС-Платформа.

Расчетный модуль взаимодействует с модулем сопряжения путем вызова его функций с целью выполнения следующих задач:

- Инициализация модуля сопряжения, во время которой происходит: считывание конфигурационного файла, загрузка динамических библиотек подключаемых расчетных модулей и ПФ и настройка механизмов их вызова;
- Создание локального MPI [2] коммуникатора для обменов данными между MPI процессами расчетного модуля вне обменов через транспортный уровень;
- Передача управления модулю сопряжения в определенных точках выполнения расчета задачи («начало расчета», «конец расчета», «начало модельного шага», «конец модельного шага» и т. д.). После которой модуль передачи делегирует управление подключаемым расчетным модулям, зарегистрированным в этой точке, а те в свою очередь рассчитывают свою часть задачи, используя сервисные функции расчетного модуля, для обмена данными с его внутренними структурами.

Схема взаимодействия расчетного модуля с компонентами «ЛОГОС-Платформа» через модуль сопряжения представлена на рис. 4.

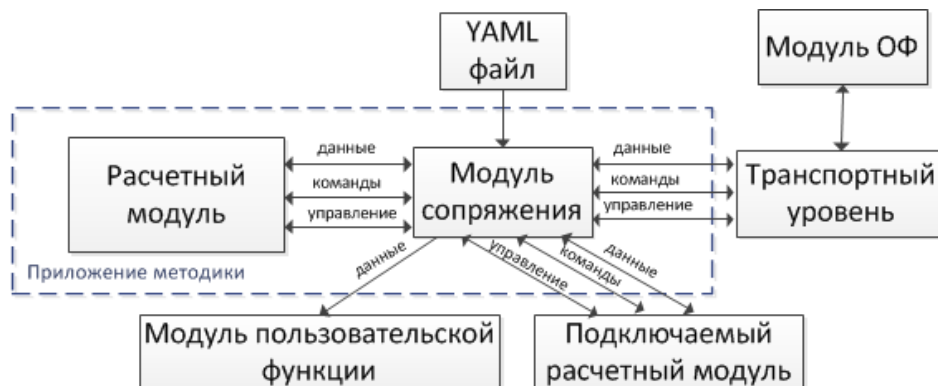


Рис. 4. Схема взаимодействия расчетного модуля с компонентами «ЛОГОС-Платформа» через модуль сопряжения

Подключаемые расчетные модули модульной интеграционной платформы ЛОГОС и его модули

Подключаемые расчетные модули расширяют функциональные возможности расчетных модулей, при этом разработка подключаемых расчетных модулей может осуществляться независимыми командами разработчиков, так как подключаемые расчетные модули являются автономными компонентами, а взаимодействие между расчетным модулем и подключаемыми расчетными модулями ведется посредством сервисных функций, предоставляющих доступ к данным расчетного модуля.

Набор подключаемых расчетных модулей и стратегия их подключения настраиваются в Интеграторе и могут меняться в зависимости от решаемой задачи.

Схема взаимодействия расчетного модуля с подключаемыми расчетными модулями через модуль сопряжения представлена на рис. 5.

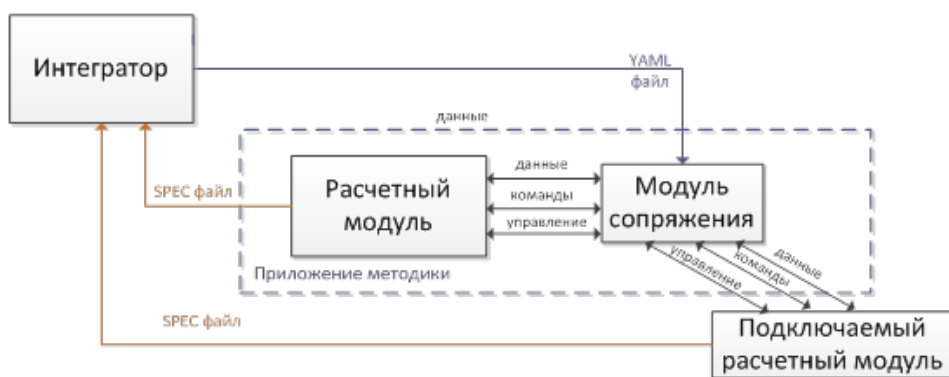


Рис. 5. Схема взаимодействия расчетного модуля с подключаемыми расчетными модулями через модуль сопряжения

Транспортный уровень и обрабатывающие функции интеграционной платформы ЛОГОС

Транспортный уровень является программной средой, обеспечивающей взаимодействие между основными расчетными модулями в процессе связанного расчета мультидисциплинарных задач.

Интерфейсы транспортного уровня, динамически настраиваемые с помощью обрабатывающих функций (ОФ) и при необходимости подключения новых расчетных модулей пользователи в схемном редакторе Интегратора должны произвести настройку их взаимодействий с использованием существующих или вновь разработанных ОФ (среди которых, например, могут быть конвертеры, интерполяторы и т. д.).

Взаимодействие между расчетными модулями с помощью транспортного уровня может осуществляться с использованием протоколов MPI или TCP/IP [3], т. е. расчетные модули могут рассчитывать мультидисциплинарную задачу, как на общем расчетном поле супер-ЭВМ, так и с подключением к такому расчету расчетных модулей работающих на других компьютерах, под другими операционными системами. При этом взаимодействие может осуществляться с теоретически неограниченным количеством расчетных модулей по неограниченному количеству интерфейсов.

Схема транспортного уровня для взаимодействия расчетного модуля с неограниченным количеством расчетных модулей по неограниченному количеству интерфейсов представлена на рис. 6.

Схема взаимодействия расчетных модулей по интерфейсу транспортного уровня с использованием ОФ представлена на рис. 7.

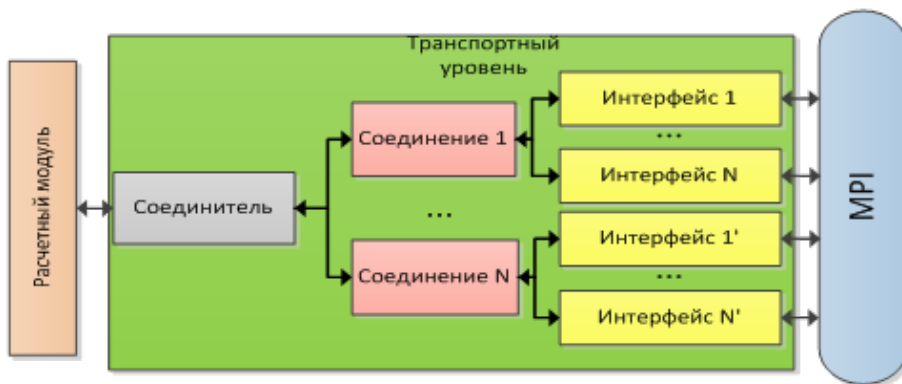


Рис. 6. Схема транспортного уровня для взаимодействия расчетного модуля с неограниченным количеством расчетных модулей по неограниченному количеству интерфейсов

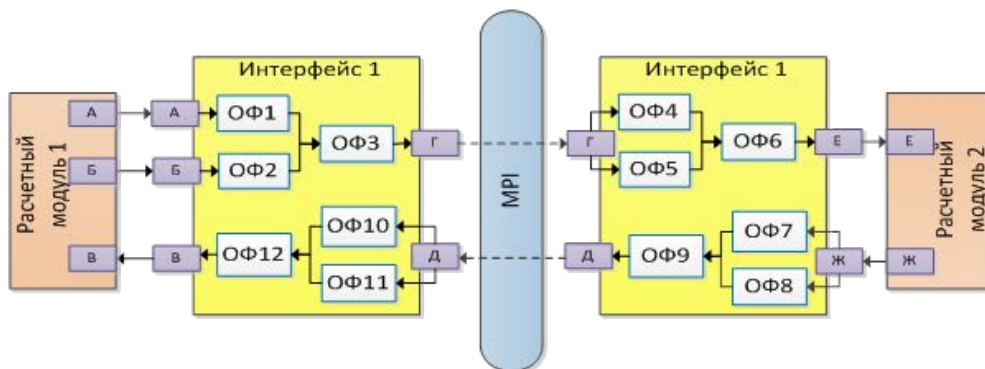


Рис. 7. Схема взаимодействия расчетных модулей по интерфейсу транспортного уровня с использованием ОФ

Файловый контейнер обмена данными интеграционной платформы ЛОГОС

Файловый контейнер обмена данными - модуль взаимодействия расчетных модулей в процессе поэтапного расчета мультидисциплинарных задач, базирующийся на возможностях библиотеки ЕФР; Библиотека ЕФР предоставляет:

- Единый функциональный интерфейс для коллективной работы с файловыми данными – данные расчетной математической сетки, распределенные между счетными процессорами, могут сохраняться в общий файловый контейнер, при этом загрузка данных возможна на любое количество счетных процессоров;

- Единый формат представления расчетных данных – формат является абстрактным, что позволяет подстраивать его для использования различными расчетными модулями и продолжать счет в рамках одного расчетного модуля или передачу данных в другой расчетный модуль.

Для реализации механизма поэтапного расчета мультидисциплинарных задач используются два подключаемых модуля:

- Сериализатор – извлекает с помощью сервисных функций расчетного модуля данные, необходимые для передачи и сохраняет их в файловом контейнере ЕФР;

- Десериализатор – восстанавливает данные, сохраненные в файловом контейнере ЕФР, интерполирует их на математическую сетку и передает их в сервисные функции расчетного модуля.

Схема использования файлового контейнера для обмена данными в процессе поэтапного расчета мультидисциплинарных задач представлена на рис. 8.

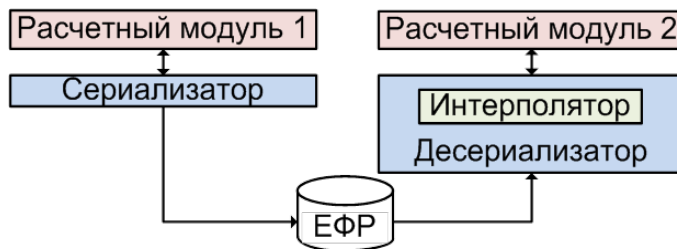


Рис. 8. Схема использования файлового контейнера для обмена данными в процессе поэтапного расчета мультидисциплинарных задач

Литература

1. Язык программирования Python [Электронный ресурс]: Python Software Foundation. – Virginia, USA, [2001-2017] – Режим доступа: <https://docs.python.org/3/index.html>.
2. MPI Forum [Электронный ресурс]. Режим доступа <http://www.mpi-forum.org>.
3. Internet Standards [Электронный ресурс]. Режим доступа <https://ietf.org/standards>.

ARCHITECTURE OF THE “LOGOS” MODULAR INTEGRATION PLATFORM

A. G. Naduev, A. D. Cherevan, D. A. Kozhaev

Russian Federal Nuclear Center –
All-Russian Scientific Research Institute of Experimental Physics, Sarov

The Modular Integration Platform LOGOS-MIP is a set of programs integrating gas dynamics, hydrodynamics, thermodynamics, solid mechanics, and other computational modules to perform coupled and conjugate multiphysics simulations and parametric and optimization analysis.

The paper presents a general concept of LOGOS-MIP, functionality of its components and principles of their interaction, and levels of integration of the computational modules in LOGOS-MIP.

Key words: LOGOS-MIP, Logos Platform, integration of computational modules, coupled simulation, conjugate simulation.