

## **МОДУЛЬНАЯ ИНТЕГРАЦИОННАЯ ПЛАТФОРМА ЛОГОС. ТЕХНОЛОГИЯ ПОДГОТОВКИ И ВЫПОЛНЕНИЯ МУЛЬТИФИЗИЧНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ НА ОСНОВЕ СВЯЗАННО-СОПРЯЖЕННОГО РАСЧЕТА**

*К. К. Олесницкая, А. В. Дьяков, Н. А. Побуринная, А. А. Тюндина*

Российский федеральный ядерный центр –  
Всероссийский НИИ экспериментальной физики, Саров

Модульная интеграционная платформа (ЛОГОС-МИП) – это единая среда для проведения сквозного мультифизического моделирования на основе связанных, сопряженных и поэтапных расчетов, параметрических и оптимизационных исследований. Платформа включает в себя: программные средства интеграции; легковесные модули; транспортный уровень; обрабатывающие функции; файловый контейнер и специализированные библиотеки. Ключевой задачей программных средств является обмен данными между расчетными модулями при совместном моделировании. Обмен может осуществляться как через память, так и через файловый контейнер. А используемые специализированные библиотеки (такие как интерполяторы и конверторы) в процессе передачи данных позволяют выполнять их преобразование из одного формата представления в другой.

*Ключевые слова:* ЛОГОС-МИП, платформа, связанно-сопряженный расчет, мультифизическое моделирование, расчетные и легковесные модули, адаптер связи, сериализатор, десериализатор, менеджер шагов, интерполяторы.

### **Введение**

ЛОГОС-МИП – это модульная интеграционная платформа (далее Платформа), которая представляет собой единую среду для проведения сквозного мультифизического моделирования на основе связанных, сопряженных и поэтапных расчетов, параметрических и оптимизационных исследований.

Под мультифизическим моделированием понимается математическое моделирование физических процессов, при котором происходит объединение в совместном расчете различных областей физики: газодинамики, гидродинамики, термодинамики, механики твердого тела и т. п.

В докладе представлена технология сквозного мультифизического моделирования на основе связанно-сопряженного расчета по программным модулям пакета программ ЛОГОС [1]. Под связанным расчетом понимается совместный расчет нескольких программных модулей, при котором выполняется двухсторонний обмен данными через память. Под сопряженным расчетом понимается совместный расчет нескольких программных модулей, при котором выполняется односторонняя передача данных через файловый контейнер.

### **Ключевые компоненты Платформы**

По сути, Платформа является конструктором для цифрового моделирования, где детали – это программные модули, а соединительные элементы – это средства, которые позволяют объединять детали в единое целое.

Ключевыми компонентами технологии связанно-сопряженного расчета являются:

- Расчетные модули – программные модули численного моделирования физических процессов (например, ЛОГОС-Аэро (газодинамика), ЛОГОС-Тепло (термодинамика), ЛОГОС-ПА (механика твердого тела) и т. п.).
- Программные средства интеграции (например, модуль связи, точки передачи управления, сервисные функции, коннекторы, функции вызова и т. п.).
- Легковесные модули – это динамически подключаемые модули, которые работают только в связке с расчетными модулями, расширяя их функциональные возможности (например, Адаптеры связи, Сериализатор, Десериализатор, Менеджер временных шагов и т. п.).
- Транспортный уровень – это настраиваемая коммуникационная среда, которая обеспечивает обмен данными между расчетными модулями.
- Обработывающие функции – это программные модули, для обеспечения согласованности обменных данных Транспортного уровня.
- Файловый контейнер – это обменные данные расчетных модулей в формате единого файлового разреза (ЕФР) [2].
- Специализированные библиотеки (например, интерполяторы, конвертеры, библиотеки файлового доступа и т. п.).

### **Интеграция расчетного модуля в Платформу**

Для интеграции расчетного модуля в Платформу необходимо выполнить следующее:

- Подключить модуль связи (статическую библиотеку `scf_bridge`).
- Реализовать функцию получения сервисных функций `root_service_function`.
- Добавить вызов функции инициализации модуля связи `scf_bridge_init`.
- Добавить вызов функции завершения работы с модулем связи `scf_bridge_finalize`.
- Сформировать файл спецификаций.

### **Интеграция легковесного модуля в Платформу**

Для интеграции легковесного модуля в Платформу необходимо выполнить следующее:

- Реализовать интерфейсную функцию получения коннекторов `service_function_connector`.
- Реализовать интерфейсную функцию вызова `invoke`.
- Собрать легковесный модуль как динамическую библиотеку.
- Описать интерфейс необходимых сервисных функций.
- Описать обрабатываемые точки передачи управления.
- Сформировать файл спецификаций, который содержит настройки подключения к расчетному модулю и шаблон настроек управления работой.

### **Поддержка легковесного модуля в расчетном модуле**

Для поддержки легковесного модуля в расчетном модуле необходимо выполнить следующее:

- Добавить сервисные функции, необходимые легковесному модулю.
- Скорректировать функцию получения сервисных функций.
- Добавить вызов функции передачи управления модулю связи `scf_bridge_invoke` для точек передачи управления, которые поддерживает легковесный модуль.

Теперь, при необходимости использования функциональных возможностей легковесного модуля, он может подключаться к расчетному модулю.

## Подключение легковесных модулей к расчетному модулю

Подключение легковесных модулей к расчетному модулю осуществляет модуль связи на этапе инициализации. Без инициализации модуль связи работает в “холостом” режиме, то есть сразу возвращает управление расчетному модулю, а расчетный модуль работает в автономном режиме без использования легковесных модулей.

На рис. 1 представлена схема связи расчетного и легковесного модулей. Инициализация модуля связи выполняется при наличии конфигурационных файлов в директории исполняемого файла расчетного модуля. В процессе инициализации анализируются входные данные из конфигурационных файлов и, на основе информации о подключении легковесных модулей к расчетному модулю, выполняется следующее:

- Загрузка необходимых легковесных модулей.
- Связывание расчетного модуля с необходимыми легковесными модулями (на рис. 1 эта связь выделена сплошной стрелкой).
- Связывание необходимых легковесных модулей с расчетным модулем (на рис. 1 эта связь выделена пунктирной стрелкой).
- Формирование последовательности вызовов легковесных модулей для всех точек передачи управления модулю связи.

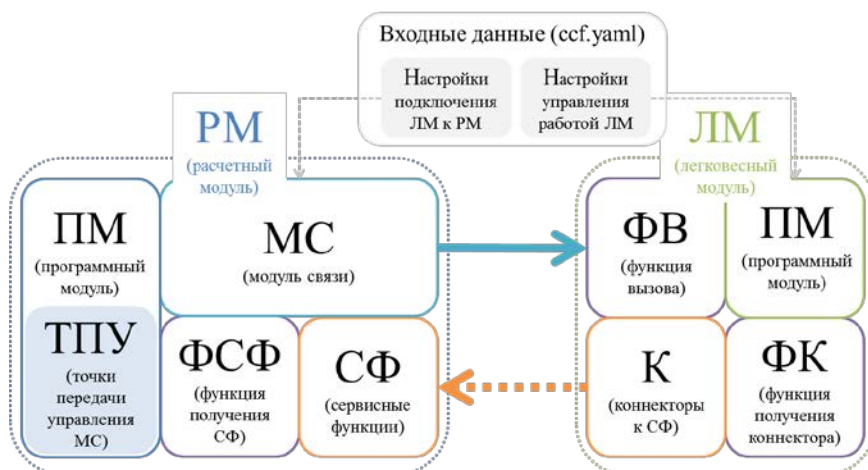


Рис. 1. Схема связи расчетного и легковесного модулей

В точке передачи управления модуль связи выполняет вызов необходимых легковесных модулей. При завершении работы с модулем связи выполняется отключение легковесных модулей от расчетного модуля.

## Общая схема связанно-сопряженного расчета

На рис. 2 представлена общая схема сквозного мультифизического моделирования на основе связанно-сопряженного расчета с использованием расчетных модулей ЛОГОС-Аэро, ЛОГОС-Тепло и ЛОГОС-ПА.

Первым этапом моделирования выполняется связанный расчет с использованием расчетных модулей ЛОГОС-Аэро и ЛОГОС-Тепло, при котором на каждом расчетном шаге происходит обмен данными. В конце этапа расчетные модули сохраняют данные, необходимые для сопряжения с расчетным модулем ЛОГОС-ПА в файловый контейнер данных.

Вторым этапом моделирования выполняется передача данных из файлового контейнера в расчетный модуль ЛОГОС-ПА и сопряженный расчет.

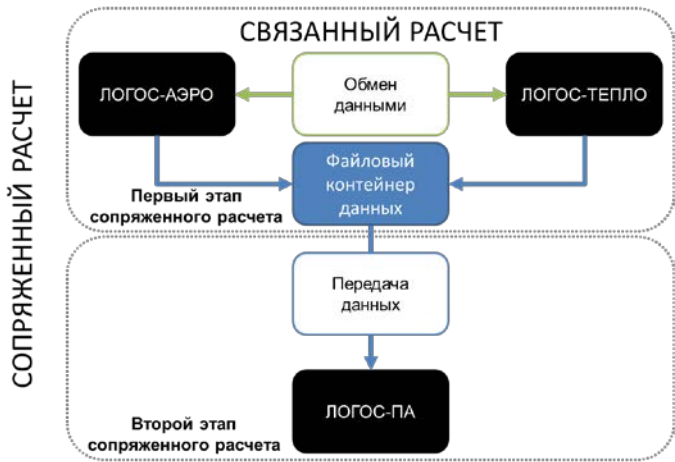


Рис. 2. Общая схема связанно-сопряженного расчета

Главной задачей обмена и передачи данных между расчетными модулями является их преобразование из специализированного формата представления данных одного расчетного модуля к специализированному формату представления данных другого расчетного модуля.

### Схема связанно-сопряженного расчета на базе Платформы

Рассмотрим подход к решению этой задачи на базе Платформы. На рис. 3 представлен аналог схемы связанно-сопряженного расчета. Суть подхода заключается в подключении к расчетным модулям легковесных модулей.

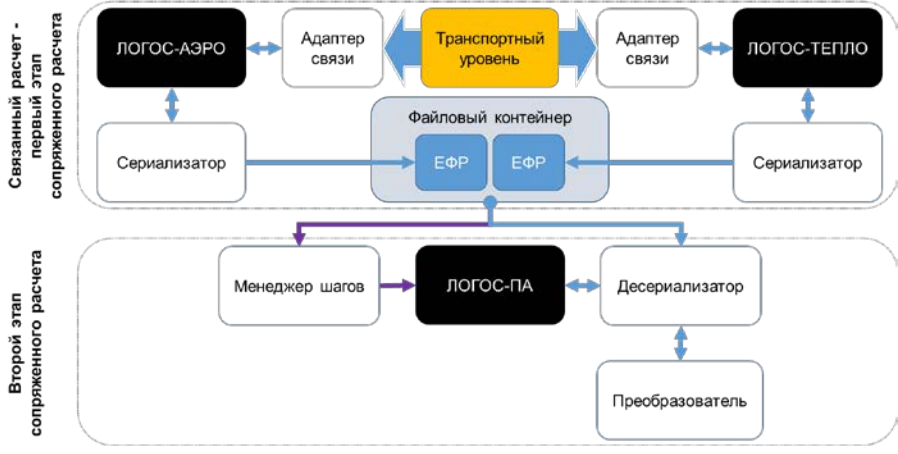


Рис. 3. Схема связанно-сопряженного расчета на базе Платформы

Первым этапом моделирования выполняется связанный расчет с использованием расчетных модулей ЛОГОС-Аэро и ЛОГОС-Тепло. С помощью Адаптеров связи, Транспортного уровня и обрабатывающих функций Платформа обеспечивает взаимодействие расчетных модулей во время счета, а именно межпроцессорный обмен данными по MPI между ЛОГОС-Аэро и ЛОГОС-Тепло. С помощью легковесного модуля Сериализатор Платформа обеспечивает сохранение расчетных данных ЛОГОС-Аэро и ЛОГОС-Тепло в файловый контейнер в формате единого файлового разреза ЕФР [2]. Файловый контейнер содержит информацию, необходимую для сопряжения с расчетным модулем ЛОГОС-ПА.

Вторым этапом моделирования выполняется сопряженный расчет с использованием расчетного модуля ЛОГОС-ПА. С помощью легковесных модулей Менеджер шагов и Десериализатор Платформа обеспечивает сопряжение расчетного модуля ЛОГОС-ПА с ЛОГОС-Аэро и ЛОГОС-Тепло.

Сопряжение осуществляется по расчетному времени. Менеджер шагов предоставляет ЛОГОС-ПА информацию о том, сколько расчетных шагов было рассчитано на первом этапе и на какие моменты времени были сохранены расчетные данные ЛОГОС-Аэро и ЛОГОС-Тепло в файловый контейнер. Десериализатор выполняет выборку необходимых данных из файлового контейнера и преобразование их к данным расчетного модуля ЛОГОС-ПА, далее расчетный модуль выполняет сопряженный расчет.

Ключевыми средствами обмена и передачи данных между расчетными модулями являются легковесные модули (Адаптер связи, Сериализатор, Десериализатор, Менеджер шагов) и Транспортный уровень.

### **Адаптер связи**

Адаптер связи обеспечивает обмен данными между расчетным модулем и Транспортным уровнем согласно логике взаимодействия с другими расчетными модулями.

К основным этапам работы Адаптера относятся:

- Начальная инициализация.
- Обработка начала шага расчета.
- Обработка конца шага расчета.
- Завершение расчета.

На этапе начальной инициализации Адаптер связи получает из конфигурационного файла список интерфейсов обмена, инициализирует Транспортный уровень и менеджер времени для каждого активного интерфейса.

На этапе обработки начала шага расчета Адаптер связи выполняет следующее:

- Определяет активные интерфейсы.
- Получает из расчетного модуля обменные данные активных интерфейсов.
- Передает в Транспортный уровень обменные данные активных интерфейсов для отправки другим расчетным модулям.
- Передает в Транспортный уровень команду начала обмена.

На этапе обработки конца шага расчета Адаптер связи выполняет следующее:

- Определяет активные интерфейсы.
- Получает из Транспортного уровня обменные данные для активных интерфейсов от других расчетных модулей.
- Передает в расчетный модуль обменные данные для активных интерфейсов.

На этапе завершения расчета Адаптер связи передает в Транспортный уровень команду остановки процесса обмена.

### **Транспортный уровень и обрабатывающие функции**

Транспортный уровень – это настраиваемая коммуникационная среда, которая обеспечивает обмен данными между расчетными модулями. На этапе инициализации Транспортного уровня для каждого расчетного модуля, участвующего в связанном расчете формируется структура объектов, которая представлена на рис. 4.

Узловым элементом структуры, через который расчетный модуль (через адаптер связи) взаимодействует с Транспортным уровнем, а далее с другими расчетными модулями (через их адаптеры связи), является Соединитель. Соединитель может содержать в себе несколько Соединений. Одно Соединение соответствует одному расчетному модулю, с которым текущий расчетный модуль осуществляет обмен данными. Таким образом, для каждой пары взаимодействующих расчетных модулей создается свое Соединение. Такой подход позволяет обмениваться данными одновременно более чем с двумя расчетными модулями, с использованием нескольких Интерфейсов связей для каждой пары Соединений.

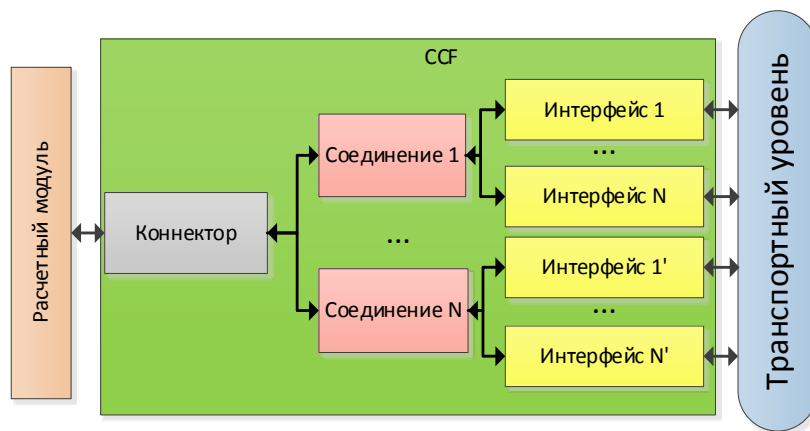


Рис. 4. Структура объектов транспортного уровня

Интерфейс является настраиваемым модулем, с помощью которого организуются цепочки обрабатывающих функций (ОФ) для обеспечения согласованности данных, передаваемых от одного расчетного модуля в другой. Общая схема Интерфейса представлена на рис. 5.

В качестве обрабатывающих функций выступают функции конверторов, интерполяторов и логгеров, которые конвертируют физические параметры, интерполируют сеточные величины с расчетной модели одного расчетного модуля на расчетную модель другого, и помогают анализу данных, проходящих через Транспортный уровень, соответственно.

Обрабатывающие функции располагаются в динамических библиотеках. Информация об именах динамических библиотек ОФ и последовательность их вызовов для каждого Интерфейса связи описывается в конфигурационном файле.

На рис. 6 представлен пример схемы взаимодействия объектов Интерфейса связи при связанном расчете двух расчетных модулей.

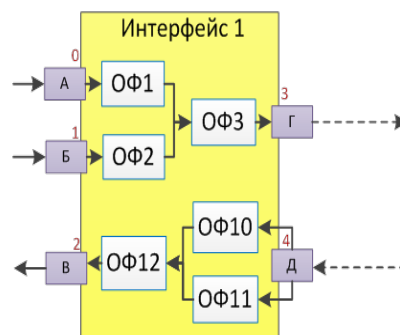


Рис. 5. Общая схема Интерфейса

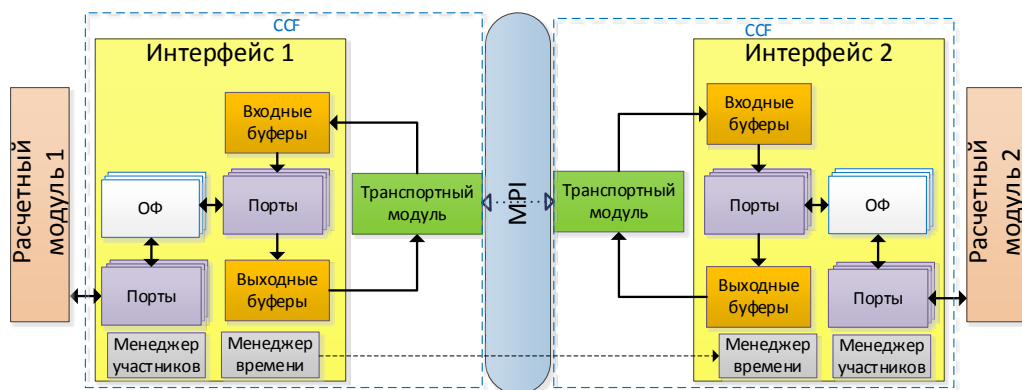


Рис. 6. Пример схемы взаимодействия объектов Интерфейса связи при связанном расчете двух расчетных модулей

### Легковесный модуль Сериализатор

Легковесный модуль Сериализатор предназначен для чтения данных в специализированном формате из расчетного модуля, преобразования и записи данных в унифицированном формате в файловый контейнер в формате ЕФР.

К основным этапам работы Сериализатора относятся:

- Проверка шага расчетного модуля на соответствие стратегии работы.
- Выборка данных из расчетного модуля (например, вся или часть объемной сетки, вся или часть поверхностной сетки).
- Преобразование данных расчетного модуля (например, преобразование системы координат, преобразование системы единиц и т. п.).
- Запись данных в файловый контейнер средствами библиотеки ЕФР.

### **Преобразования системы координат**

Подготовка расчетных моделей может осуществляться независимо для каждого расчетного модуля с учетом его специфических особенностей. И, следовательно, расчетные модели могут быть построены в различных системах координат и не совпадать геометрически, что приведет к возникновению проблем при передаче данных с одной расчетной модели на другую интерполяционными методами. Поэтому как в Сериализаторе, так и Десериализаторе поддерживается предобработка расчетной модели источника, которая включает в себя следующие способы преобразований:

- Смещение вдоль оси OX.
- Смещение вдоль оси OY.
- Смещение вдоль оси OZ.
- Поворот вокруг оси OX.
- Поворот вокруг оси OY.
- Поворот вокруг оси OZ.

Если несогласованность расчетных моделей выявлена после первого этапа сопряженного расчета (получен файловый контейнер обменных данных), то преобразования систем координат можно настроить в Десериализаторе. Данная возможность не потребует повторного расчета, но преобразованная расчетная модель источника не сохраняется, и, следовательно, отсутствует возможность визуальной оценки, как корректности выполнения преобразования, так и корректности задания параметров преобразования.

### **Легковесный модуль Менеджер шагов**

Легковесный модуль Менеджер шагов предназначен для сопряжения данных нескольких файловых контейнеров в формате ЕФР. Сопряжение может осуществляться как по номерам расчетных шагов, так и по времени расчетных шагов. В результате работы Менеджера шагов, расчетный модуль получает полную информацию о том, сколько в файловом контейнере временных шагов и на какие моменты времени.

### **Легковесный модуль Десериализатор**

Легковесный модуль Десериализатор предназначен для чтения данных унифицированного формата из файлового контейнера в формате ЕФР и преобразования их в данные специализированного формата расчетного модуля.

К основным этапам работы Десериализатора относятся:

- Проверка шага расчетного модуля на соответствие стратегии работы.
- Выборка и чтение данных из файлового контейнера средствами библиотеки ЕФР.
- Преобразование данных файлового контейнера (например, преобразование системы координат, преобразование системы единиц и т. п.).
- Выборка данных из расчетного модуля (например, вся или часть объемной сетки, вся или часть поверхностной сетки).
- Преобразование данных файлового контейнера к данным расчетного модуля.
- Установка преобразованных данных в расчетный модуль.

## Преобразование данных файлового контейнера к данным расчетного модуля

Основной задачей Десериализатора является преобразование данных файлового контейнера к данным расчетного модуля. На текущий момент поддержано несколько методов преобразования, которые отличаются целевым назначением:

- Чтение по локальным индексам (без интерполяции).
- Чтение по глобальным индексам (без интерполяции).
- С помощью поверхностного интерполятора FSI.
- С помощью универсального интерполятора POINTS.

### Чтение по локальным индексам (без интерполяции)

Данный метод предназначен для продолжения счета в рамках расчетного модуля. Метод не является универсальным и может применяться, при условии, что расчетная модель и декомпозиция расчетной модели соответствуют расчетной модели и декомпозиции расчетной модели в обменных файлах.

### Чтение по глобальным индексам (без интерполяции)

Данный метод предназначен для перезапуска счета в рамках расчетного модуля. Метод не является универсальным и может применяться, при условии, что расчетная модель соответствует расчетной модели в обменных файлах. Доступ к данным в обменных файлах осуществляется по глобальным индексам сеточных элементов, которые являются уникальными для конкретной расчетной модели.

### С помощью поверхностного интерполятора FSI

Данный метод предназначен для передачи данных с поверхностной расчетной модели из одного расчетного модуля в другой. На текущий момент поддержано два способа интерполяции:

- Из центров ячеек сетки источника в центры ячеек сетки приемника (применяется метод обратных взвешенных расстояний для центральных точек).
- Из центров ячеек сетки источника в узлы ячеек сетки приемника (применяется метод взвешенных площадей пересечения поверхностей).

### С помощью универсального интерполятора POINTS

Это интерполятор по точкам, соответственно источником и приемником являются множества точек. Для интерполяции данных используется метод обратных взвешенных расстояний. Чем точка источник ближе к точке приемнику, тем больше ее вклад (вес) в интерполируемое значение.

Вес точки источника – обратная функция расстояния во второй степени.

Универсальность интерполятора заключается в том, что нет ограничения на способы поиска точек в сетке источнике и сетке приемнике и нет ограничений на сетки источника и приемника (поверхностная или объемная). Таким образом, интерполятор подходит для работы, как с поверхностной, так и с объемной сеткой.

На текущий момент поддержаны следующие способы интерполяции:

- Из центров ячеек сетки источника в центры ячеек сетки приемника.
- Из центров ячеек сетки источника в узлы ячеек сетки приемника.
- Из узлов ячеек сетки источника в центры ячеек сетки приемника.
- Из узлов ячеек сетки источника в узлы ячеек сетки приемника.



## Подготовка задачи связанно-сопряженного расчета в Интеграторе

Интегратор – это графический интерфейс пользователя, который позволяет настраивать одиночные, связанные, сопряженные задачи, обеспечивает локальный и удаленный запуски задач с контролем хода расчета и возможностью анализа полученных результатов.

Подготовка задачи связанно-сопряженного расчета в общем виде выполняется в 4 этапа:

- Подготовка одиночных задач, которая включает в себя подключение и настройку легковесных модулей: Сериализатор, Десериализатор, Менеджер шагов).
- Подготовка связанной задачи, которая включает в себя: настройку общей схемы связанного расчета, связывание доступных обменных интерфейсов, конфигурирование связанных обменных интерфейсов.
- Подготовка сопряженной задачи;
- Создание и конфигурирование схемы расчета.

Для запуска задачи нужно выделить схему расчета и из контекстного меню выбрать пункт меню «Запустить расчет».

### Опыт практического применения

Отработка связанно-сопряженного расчета на базе Платформы с использованием расчетных модулей ЛОГОС-Аэро, ЛОГОС-Тепло и ЛОГОС-ПА была выполнена на тестовой задаче о деформировании клапана под действием потока газа в канале. На рис. 7 представлена схема связанно-сопряженного расчета. На рис. 8 представлены исходные данные на втором этапе сопряженного расчета, результаты передачи данных интерполяционными методами с помощью легковесного модуля Десериализатор и результат расчета по расчетному модулю ЛОГОС-ПА.

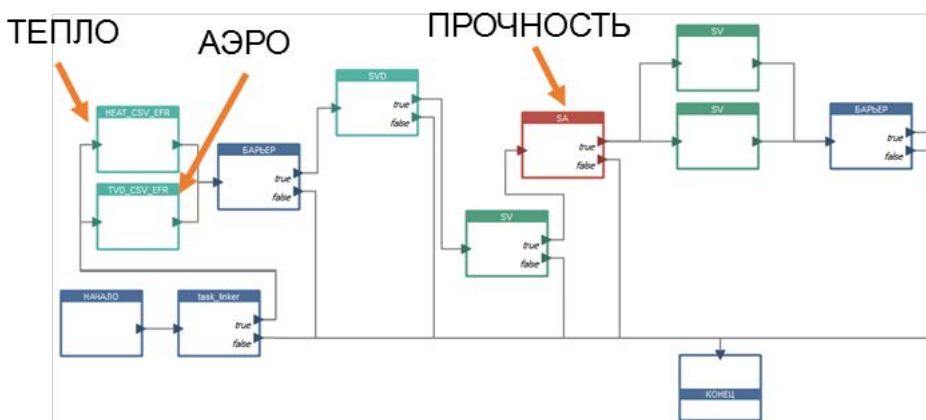


Рис. 7. Схема связанно-сопряженного расчета

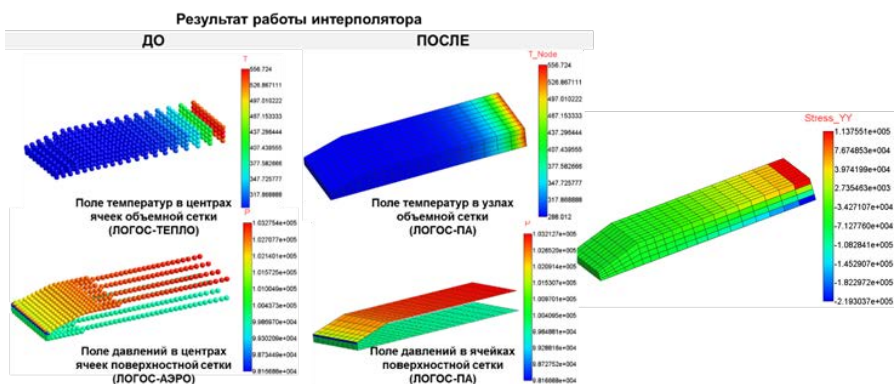


Рис. 8. Результаты связанно-сопряженного расчета тестовой задачи

## Литература

1. Дерюгин Ю. Н., Козелков А. С., Спиридонов В. Ф., Циберев К. В., Шагалиев Р. М. Многофункциональный высокопараллельный пакет программ ЛОГОС для решения задач тепломассопереноса и прочности // Сборник тезисов докладов Санкт-Петербургского научного форума "Наука и общество", Санкт-Петербург, 2012.
2. Олесницкая К. К., Антипин И. А., Петрова М. А. Коллективный доступ к файловым данным на вычислительных системах с различной архитектурой в библиотеке ЕФР // XVII Международная конференция "Супервычисления и математическое моделирование": Сборник докладов. Саров, 15–19 октября, 2010. С. 392–400.

### **“LOGOS” MODULAR INTEGRATION PLATFORM. TECHNOLOGY FOR SETTING UP AND EXECUTING MULTIPHYSICS SIMULATIONS BASED ON COUPLED AND CONJUGATE CALCULATIONS**

*K. K. Olesnitskaya, A. V. Dyakov, N. A. Poburinnaya, A. A. Tyundina*

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

Modular integration platform (LOGOS-MIP) is an integrated environment for end-to-end multiphysics simulations based on coupled, conjugate and step-by-step calculations and parametric and optimization analysis. The platform includes: software-based integration tools; light-weight modules; transport layer; processing functions; file container and ad-hoc libraries. The key function of the software-based tools is to enable communication between computational modules during joint simulations. The communication can be performed both through the memory and through the file container. The ad-hoc libraries (like interpolators and converters) enable data format conversion during communication.

*Key words:* LOGOS-MIP, platform, coupled and conjugate simulation, multiphysics simulation, computational and lightweight modules, communication adapter, serializer, deserializer, step manager, interpolators.