



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 99 за 2013 г.



Галанин М.П.,
Горбунов-Посадов М.М.,
Ермаков А.В., Лукин В.В.,
Родин А.С., Шаповалов К.Л.

Архитектура программной
платформы сопровождения
вычислительного
эксперимента Теметос

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Архитектура программной платформы сопровождения вычислительного эксперимента Теметос / М.П.Галанин [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2013. № 99. 23 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2013-99>

**Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук**

**М.П. Галанин, М.М. Горбунов-Посадов, А.В. Ермаков,
В.В. Лукин, А.С. Родин, К.Л. Шаповалов**

**Архитектура программной платформы
сопровождения вычислительного
эксперимента Теметос**

Москва — 2013

**Галанин М.П., Горбунов-Посадов М.М., Ермаков А.В., Лукин В.В.,
Родин А.С., Шаповалов К.Л.**

Архитектура программной платформы сопровождения вычислительного эксперимента Теметос

Представлены архитектура, интерфейсы и форматы входных и выходных данных платформы, реализованные пилотные версии инструментальных и проблемно-ориентированных модулей программной платформы Теметос для сопровождения вычислительного эксперимента. Платформа Теметос предназначена для полномасштабного математического моделирования в прикладных и фундаментальных областях. Она предоставляет возможности подготовки геометрической и физической моделей исследуемой конструкции или физического процесса к расчету, инструменты настройки внешних или встроенных проблемно-ориентированных модулей, позволяет осуществлять запуск, контроль прохождения и анализ результатов расчетов.

Ключевые слова: математическое моделирование; вычислительный эксперимент; программная архитектура; интегрированная программная платформа; неоднородные среды

Mikhail Pavlovich Galanin, Mikhail Mikhailovich Gorbunov-Possadov, Aleksei Viktorovich Ermakov, Vladimir Vladimirovich Lukin, Aleksandr Sergeevich Rodin, Kirill Ladislavovich Shapovalov

Architecture of the software environment for numerical experiments Themetos

The architecture, interfaces, data formats and pilot versions of the problem-oriented modules for numerical experiment software environment Themetos are presented. Themetos platform is designed for full-scale mathematical modeling in a variety of basic and applied problems. It provides tools for the geometrical and physical modeling of the constructions or physical processes, configuration tools for external or embedded problem-oriented numerical codes. The crossplatform graphical user interface of the platform contains tool-kit for visualization and analysis of the scientific data.

Key words: mathemaical modeling; numerical experiment; software architecture; integrated software environment; inhomogeneous media

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проекты №№ 12-01-31193, 12-01-00109, 12-02-00687), а также гранта по поддержке ведущих научных школ НШ-1434.2012.2. Авторы выражают благодарность А.В. Плеханову, М.А. Семериковой, П.В. Тюфягину за сотрудничество в выполнении данной работы и В.А. Гасилову за полезные обсуждения и советы, а также реализованный пакет MARPLE3D.

1. Введение. Идеи и задачи платформы Теметос

Для решения широкого класса инженерных и прикладных научных задач становятся все более востребованными физически, математически и вычислительно сложные модели, требующие применения высокоточных методов [1,2,3,4,5]. Подобные методы ведут к большому объёму вычислительной работы, поэтому математическое моделирование в научно-технических приложениях требует высокой эффективности разрабатываемых алгоритмов, включая распараллеливание вычислений [6,7].

С другой стороны, многие этапы построения, программной реализации и исследования математической модели (задание геометрии области, построение сеток, ввод начальных и граничных данных модели, запуск и отслеживание работы параллельной версии расчетных процедур, визуализация и анализ полученного решения) являются общими для задач из различных областей теории и практики. По сути, речь идет о различных подвидах и элементах общего процесса моделирования физического процесса или технической системы. К таким подвидам моделирования можно отнести следующие [1,8].

1. Геометрическое моделирование: задание пространственной (вообще говоря, трехмерной) модели исследуемого объекта, его основных геометрических параметров.
2. Задание расчетной области и дискретизация геометрической модели: введение упрощенных элементов (полигональная аппроксимация [9]) геометрии объекта и конечномерных носителей для неизвестных физических параметров модели – сеток.
3. Физическое моделирование свойств сред и материалов: задание моделей прочностных свойств конструкционных материалов, электромагнитных характеристик проводников и диэлектриков и проч.
4. В узком смысле математическое моделирование: выбор системы уравнений, описывающих протекающие внутри моделируемого объекта процессы.
5. Имитация внешней среды и условий функционирования объекта: задание начальных и граничных условий для рассматриваемой модели.
6. Численное моделирование: определение численных методов и их настроечных параметров, используемых для решения уравнений модели, реализация методов в виде эффективных прикладных программных комплексов.
7. Визуальная имитация протекания процесса или напряженного состояния конструкции по результатам проведенных вычислений, позволяющая провести анализ возникающих нагрузок, выявление физических эффектов, характеристик моделируемого объекта.

Важным в такой ситуации становится создание интегрированной программной платформы, позволяющей задействовать высокоэффективные (в том числе параллельные) численные алгоритмы для решения задач различной

размерности, содержащих уравнения разных типов и разного физического содержания (в рамках связанных задач).

Существует большое количество вычислительных программных платформ, позволяющих решать стандартные задачи математической физики в различных областях инженерной и прикладной научной практики. Большая часть из них является коммерческими (такие как ANSYS [10], Nastran, Abaqus, Fluent и ряд других), имеет продвинутый пользовательский интерфейс, включает пре- и постпроцессор, а также множество закрытых проблемно-ориентированных *модулей-решателей* для моделирования термомеханических, газовых и других процессов с применением метода конечных элементов (МКЭ) и (реже) метода конечных разностей (МКР). Обычно подобные системы создаются как универсальные, применимые для широкого круга практически важных областей. Универсальность подобных программных платформ приводит к большим трудностям при попытках решения в рамках таких пакетов физически и математически сложных задач в областях, включающих разного рода неоднородности физических параметров или геометрических характеристик. При этом, как правило, квалифицированный пользователь не имеет возможности эффективным образом включать в состав платформы собственные проблемно-ориентированные программные модули, поскольку многие из интерфейсов обработки геометрии расчетной области и исходных данных являются также закрытыми.

В последнее время активно развиваются открытые программные платформы для проведения инженерных и, реже, научных расчетов (например, OpenFOAM [11], Salome, Code-Aster, Code Athena, Zeus3D и др.), создаваемые сообществами программистов из разных стран, зачастую не объединенных в коммерческие корпорации. Подобные программные пакеты изначально строятся на открытых интерфейсах обработки данных, обеспечивая универсальность применения пакета и позволяя группам разработчиков расширять возможности платформы за счет включения собственных МКЭ или МКР расчетных кодов. В то же время в рамках подобных платформ реализованы, как правило, наиболее стандартные подходы к решению задач математической физики без учета особенностей конкретных постановок практически значимых задач. Среди таких особенностей – необходимость применения методов повышенного порядка аппроксимации, контроль консервативности расчетной схемы и др., т.е. все то, что чаще всего отличает авторские прикладные программные комплексы, разрабатываемые под специальные задачи. Кроме того, задание геометрии области, начальных и краевых данных в подобных платформах часто необходимо осуществлять без использования графической оболочки путем правки текстовых конфигурационных файлов, что существенно усложняет вспомогательные технические вопросы математического моделирования. Близки к такого рода платформам и более специализированные программные пакеты, направленные

на решение задач из конкретной физической области, в частности, разрабатываемый в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН пакет MARPLE3D [12].

В данной работе представлены результаты разработки прототипа интегрированной программной платформы для сопровождения вычислительного эксперимента в комплексных задачах математического моделирования – кроссплатформенной графической инструментальной среды Теметос. Платформа предназначена для построения и исследования математических моделей объектов и процессов, включая моделирование электромагнитных, тепловых, упругих и газодинамических полей в областях, содержащих геометрически сложные подобласти с резко неоднородными свойствами. Основная цель разработки платформы заключается в создании программного окружения, позволяющего с помощью ряда открытых интерфейсов передачи данных и управления расчетом оснастить авторский проблемно-ориентированный модуль-решатель инструментами подготовки, проведения и анализа результатов вычислительного эксперимента. Данная работа посвящена описанию архитектуры платформы и основных идей ее расширения.

2. Общая структура платформы Теметос

В соответствии с выделенными этапами моделирования блок-схема платформы сопровождения вычислительного эксперимента состоит из групп процедур, представленных на рис. 1.

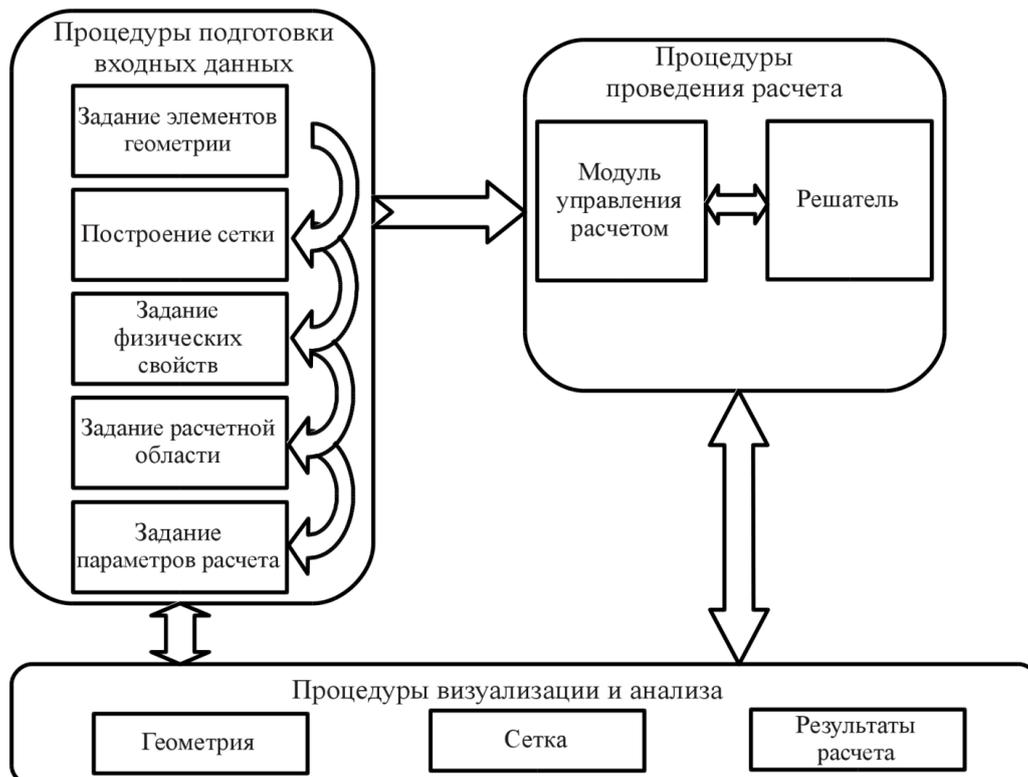


Рис. 1. Процедурная блок-схема платформы Теметос.

Эта блок-схема включает в себя все основные этапы создания, реализации, исследования и численного анализа математической модели технического объекта или физического процесса, за исключением выбора исходной системы уравнений – этот этап плохо поддается формализации и сводится (в инструментальном плане) к выбору или созданию проблемно-ориентированного модуля-решателя. К прочим, более формализуемым, этапам обычно относятся:

1. определение геометрии – задание пространственной области, в которой решается задача расчета поведения исследуемого объекта;
2. дискретизация расчетной области, введение полигональных структурированных или неструктурированных сеток;
3. задание набора моделей физических свойств исследуемых в задаче сред и конструкций;
4. тонкая настройка модуля-решателя под задачу – включая выбор конкретных параметров расчетной схемы, шагов и проч.;
5. проведение расчета, формальный и содержательный контроль телеметрических данных о прохождении расчета;
6. визуализация и анализ полученных результатов.

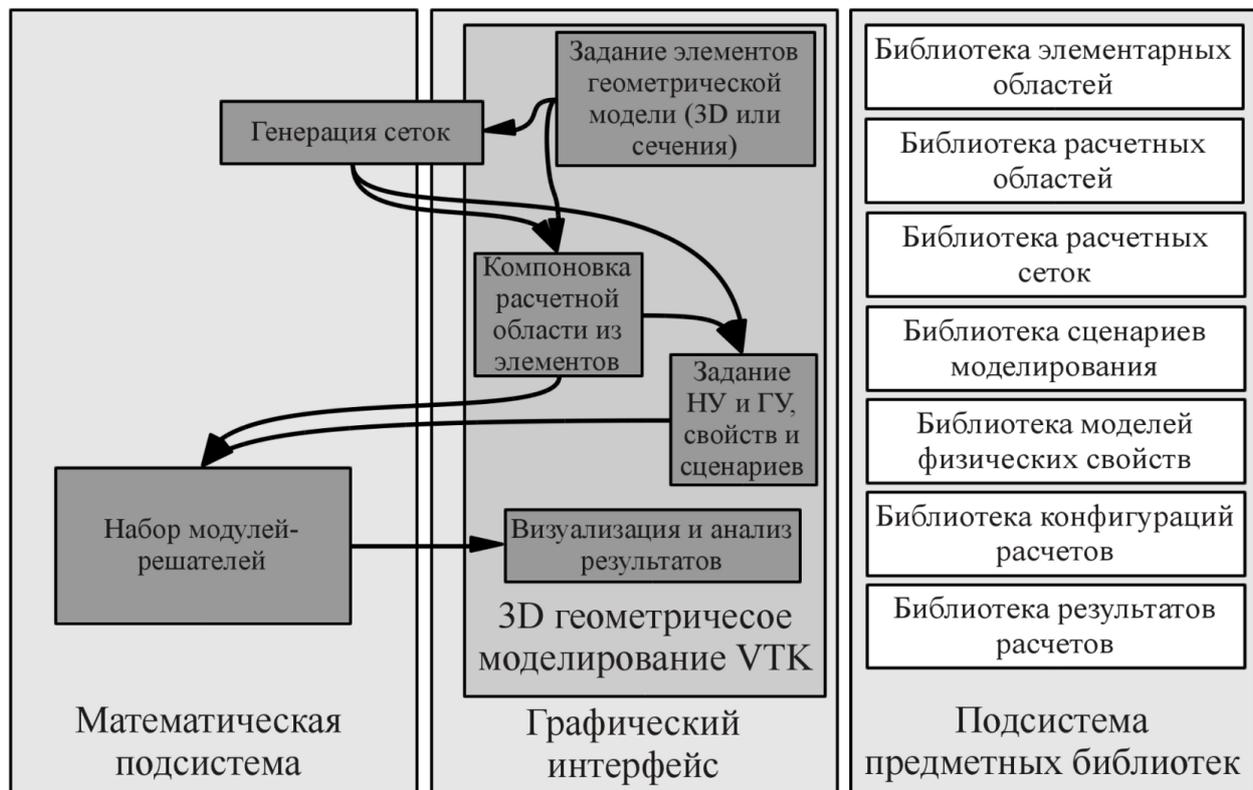


Рис. 2. Подсистемы платформы Теметос.

С системной точки зрения программная платформа Теметос состоит из трех основных подсистем (см. рис. 2).

1. *Математическая подсистема.* Включает в себя основные средства проведения моделирующих расчетов, прежде всего набор программ-решателей, реализующих выбранные методы решения систем уравнений той или иной предметной области: уравнений магнитной гидродинамики, связанной термомеханики и др. Также подсистема содержит набор программ-построителей сеток (двумерных треугольных и четырехугольных; трехмерных). Подсистема состоит из набора консольных утилит. При этом утилиты могут быть как встроенными в платформу, так и исходно внешними (независимыми). Для этого разработаны интерфейсы, обеспечивающие трансформацию данных, которыми оперирует платформа, в форматы входных данных модулей-решателей.

2. *Инструментальная графическая подсистема.* Обеспечивает визуальную (трехмерную) подготовку геометрической модели рассматриваемого объекта или процесса, в случае необходимости – компоновку сложной расчетной области из простых подобластей, задание начальных и граничных условий, запуск расчета, визуализацию полученных результатов, а также взаимодействие с полным набором используемых для моделирования предметных библиотек. С программной точки зрения подсистема является кроссплатформенной, написана на языке C++ с использованием программной библиотеки оконного интерфейса Qt [13] и технологии трехмерной визуализации VTK [14]. Перечисленные библиотеки и технологии являются открытыми и свободно распространяемыми.

3. *Подсистема предметных библиотек.* Содержит структурированную пополняемую иерархическую базу знаний о моделируемых объектах и физических процессах, в частности, наборы исследуемых расчетных областей и соответствующих им сеток, реализованные в виде программных модулей модели физических свойств материалов и сред, а также средства и стандарты взаимодействия библиотек и работы с ними. В основу подсистемы положен стандарт описания данных XML. Структура библиотек фиксирована в файловой системе платформы Теметос.

В процессе расчета взаимодействие пользователя с каждой из подсистем может осуществляться как через графическую среду, так и непосредственно. Осуществление вычислительного эксперимента для конкретной математической модели в платформе Теметос представляется в виде последовательной работы с рядом библиотек, осуществляемой в рамках единого интерфейса.

3. Подсистема предметных библиотек

Моделирование процесса или явления состоит, как уже было отмечено, из ряда взаимосвязанных, но в целом допускающих вариации стадий. Так, одно и то же физическое явление может рассматриваться в разных пространственных областях, на разных сетках, при несколько отличающихся начальных и граничных условиях протекания процессов, при разных физических моделях

параметров среды. В этом случае процесс исследования явления включает в себя процедуру конструирования полной модели явления из различных – уже существующих или вновь создаваемых – элементов-конструктов (геометрическая модель, дискретная модель, физическая модель, математическая модель, численная модель). Каждый из типов таких конструктов может быть рассмотрен отдельно и требует от программной платформы наличия специальных инструментов разработки.

С другой стороны, выбор программных средств при разработке интегрированной платформы сопровождения вычислительного эксперимента направлен на обеспечение возможности простого расширения набора моделируемых объектов, физических и математических моделей, используемых сеток, модулей-решателей. Для этого используется концепция безболезненного роста программы [15], причем точки роста платформы предполагается оформлять в виде предметных библиотек, которые могут содержать как текстовые (XML) файлы описания данных, так и скомпилированные программные библиотеки, подключаемые к платформе при помощи стандартизуемых интерфейсов.

Информационная структура платформы Теметос основана на системе расширяемых предметных библиотек, призванных охватить базу знаний о классе моделируемых объектов и явлений. В рамках данной базы осуществляется поддержка задания геометрически элементарных составляющих области моделирования, компоновки сложных расчетных областей, реализации моделей физических свойств сред и материалов, определения сценариев моделирования (начальных и граничных условий, временных и пространственных распределений источников и стоков и проч.). Пополнение предметных библиотек позволяет описывать и моделировать полный набор исследуемых объектов. Наполнение библиотек определяется прежде всего областью моделирования и, соответственно, используемым решателем. Содержимое библиотек хранится в файлах расширяемого формата представления данных XML, что делает их структуру прозрачной и позволяет осуществлять их редактирование и пополнение как с помощью разработанных редакторов библиотек, так и вручную в любом текстовом редакторе.

Элементы библиотек связаны друг с другом принципом соответствия, подобным применяемому в реляционных базах данных. Разработана система работы с набором предметных библиотек, позволяющая на каждой стадии подготовки расчета конструкции получать полную информацию обо всех составляющих элементах модели.

В состав платформы входят следующие библиотеки.

1. Геометрическая библиотека элементарных областей (БЭО), содержащая наиболее общее (векторное) описание используемых при моделировании геометрических областей (в случае инженерных расчетов – элементов конструкций: лопаток, шестерней и проч.).

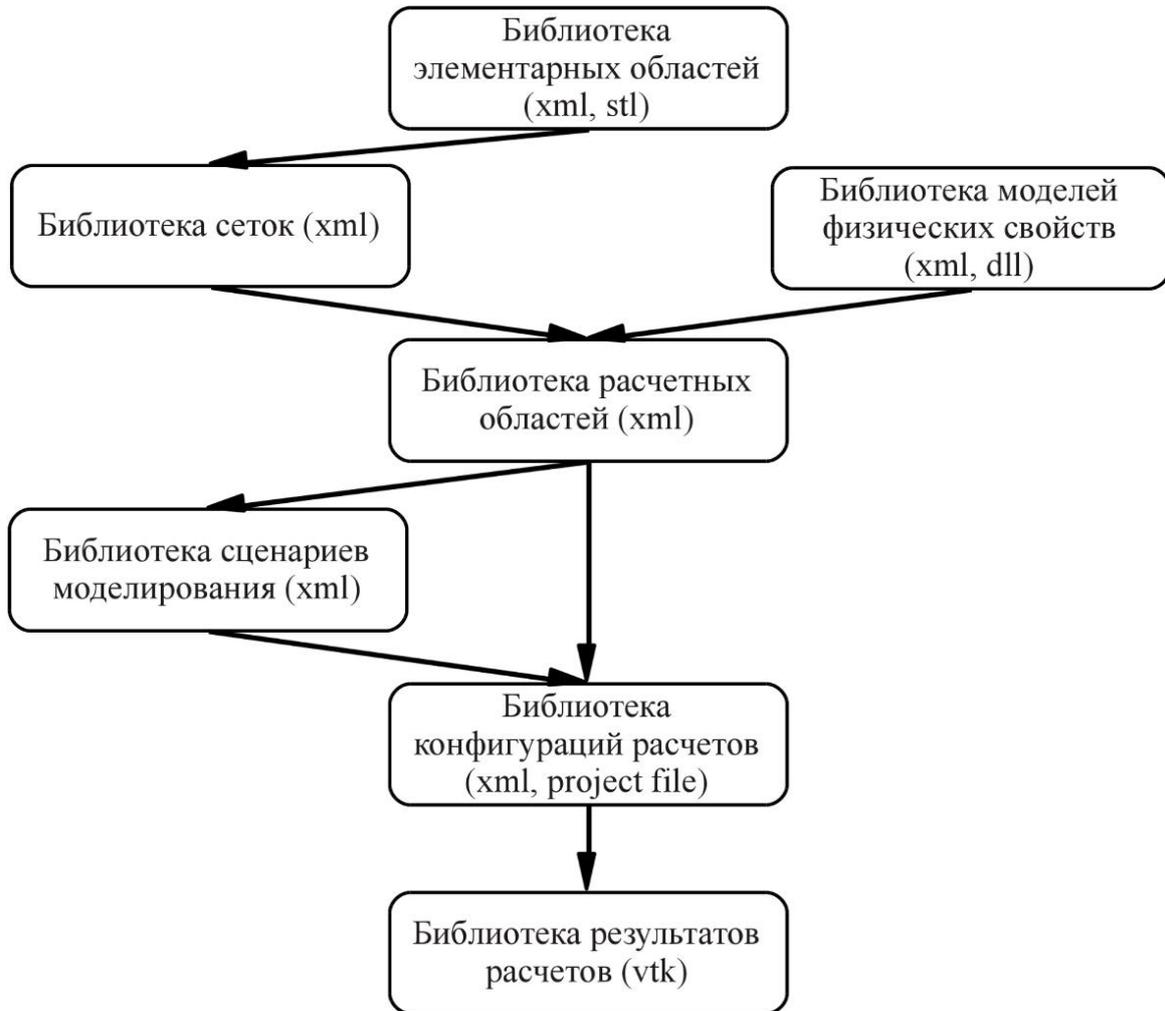


Рис. 3. Иерархия предметных библиотек

2. Библиотека сеток (БС), содержащая сетки, заданные в элементарных областях из БЭО.
3. Библиотека моделей физических свойств (БМФС), включающая как xml-описание физических свойств моделируемых материалов и сред в простых случаях, так и скомпилированные dll-библиотеки подпрограмм, описывающих сложное поведение параметров среды (теплопроводности, пористости, электрической проводимости и др.); набор доступных для описания физических параметров определяется возможностями конкретного модуля-решателя.
4. Библиотека расчетных областей (БРО), содержащая скомпонованные расчетные области, состоящие из относительно простых элементов, хранящихся в БЭО, вместе с выбранными для каждого элемента сеткой из БС и заданными моделями среды из БМФС.
5. Библиотека сценариев моделирования (БСМ), содержащая наборы входных данных, начальных и граничных условий, временных и пространственных распределений источников для расчета объекта, компоновка которого содержится в БРО.

6. Библиотека конфигураций расчетов (БКР), содержащая наборы настроек модуля-решателя, включая составляющие решаемых систем уравнений, настройки численных методов и алгоритмов (в том числе параллельных), применяемых к расчету объекта из БРО с заданным сценарием моделирования из БСМ.
7. Библиотека результатов расчетов (БРР), содержащая полный набор выходных данных решателя при проведении расчета из БКР.

Иерархические связи предметных библиотек показаны на рис. 3. Взаимосвязи элементов различных библиотек применительно к конкретному объекту моделирования и конкретной постановке расчетной задачи фиксируются в xml-файле проекта.

3.1. Библиотека элементарных областей

В основе системы геометрического моделирования платформы Теметос лежит идея элементарных областей, которые в рамках целевой модели рассматриваются как независимые тела или заполняемые сплошной средой объемы со своими геометрическими, физическими и модельными параметрами. При этом каждая расчетная область, в которой отыскивается численное решение уравнений математической модели, состоит из стандартизованного (в рамках семейства моделей) набора элементарных областей. Это обстоятельство определяет необходимость формирования базы данных элементарных областей, различая их по геометрической форме.

Библиотека элементарных областей состоит из файлов формата xml описания трехмерных областей или соответствующих осевых сечений трехмерных тел, имеющих цилиндрическую симметрию. Реализованы различные способы задания геометрии областей. В наиболее общем виде область описывается набором примитивов и логических операций над ними.

3.2. Библиотека сеток

В данной библиотеке хранятся сетки для каждой из элементарных областей. В описание сетки стандартно входят: параметры сетки (шаги, сгущения, особенности оптимизации сетки); координаты точек сетки; описание ячеек сетки как совокупностей узлов, информация о связности сетки; описание элементов границы (они имеют размерность на единицу меньшую, чем элементы основной сетки).

3.3. Библиотека моделей физических свойств

Библиотека моделей физических свойств является одной из основных точек роста программной платформы Теметос, поэтому опишем ее более подробно.

Описание модели того или иного материала строится на возможных (используемых в рамках решателя) классах моделей. В БМФС хранится

конкретная конфигурация программной библиотеки, описывающей способ учета того или иного материала в решателе.

В соответствии с общей идеей платформы Теметос, каждой элементарной области, входящей в расчетную область, соответствует свой материал или среда, для которой записываются уравнения математической модели. В расчете каждый материал и каждая среда предстает в качестве совокупности моделей отдельных свойств и характеристик (например, модуль Юнга, коэффициент Пуассона, коэффициент теплопроводности, электрическое сопротивление и т.д.). Набор используемых свойств и характеристик определяется текущими настройками и возможностями программы-решателя. Каждое из свойств и характеристик может быть задано в виде:

1. константного значения или набора значений (вектора значений);
2. подпрограммы, вычисляющей по текущим значениям переменных задачи физические свойства материала (например, зависимость прочностных характеристик от температуры).

Возможность подключения внешних программных модулей, реализующих те или иные модели физических свойств материала, и является точкой роста платформы Теметос. Подключение внешних расчетных модулей производится с помощью технологии динамических библиотек (dll в Windows-системах, shared-lib – в Linux). Разработан стандартный модуль с использованием библиотеки Qt, отвечающий за загрузку в проблемно-ориентированный решатель описаний программно-заданных свойств материалов на этапе запуска расчета. При этом внешние расчетные модули могут разрабатываться любыми сторонними исследователями, что, впрочем, требует их определенной адаптации. В основе системы подключения внешних модулей к решателю лежит следующая идея.

Каждый внешний программный модуль оформляется как Набор свойств (PropertySet) и должен содержать два файла, имеющие одинаковые имена, но разные расширения: скомпилированную программную библиотеку (dll или shared-lib) и xml-файл описания тех процедур и моделей, которые эта библиотека содержит. Обмен данными основного кода FROST с внешними процедурами производится посредством четырех массивов:

1. InputReals – одномерный массив входных (относительно модельной процедуры) данных с плавающей запятой;
2. InputIntegers – одномерный массив целочисленных входных данных;
3. OutputReals – одномерный массив выходных (полученных внутри модельной процедуры) данных с плавающей запятой;
4. OutputIntegers – одномерный массив выходных целочисленных данных.

Принято соглашение, что данные с плавающей запятой имеют двойную точность. Процедуры в программной библиотеке могут использовать локальные и глобальные (в рамках библиотеки) переменные. Доступ к глобальным переменным модуля-решателя для библиотеки закрыт. Все массивы передаются по ссылке, что ускоряет обмен данными между основным

расчетным кодом и внешними модулями. Список данных, записываемых в выходные массивы, строго регламентирован по набору и по порядку следования – это требование необходимо, чтобы программа-решатель могла адекватно использовать данные, выдаваемые сторонними модулями. Список же входных данных должен быть описан в xml-файле описания Набора свойств и упорядочивается по зарезервированным идентификаторам решателя и порядку следования данных.

Каждый из модельных материалов в библиотеке создается на основе шаблона материала. Шаблоны могут быть сформированы исходя из тех свойств различных материалов и сред, которые учитываются в процессе расчета в программе-решателе (например, физическое свойство модуль Юнга относится к материалам шаблона «конструкционный элемент», но не относится к материалам шаблона «обтекающая жидкость»). Таким образом, при подготовке к расчету модельного материала нет необходимости указывать для него «фиктивные» (не соответствующие реальным) свойства. Кроме шаблонов материалов, соответствующих реальным элементам конструкции, введены так называемые абстрактные материалы (не участвующие непосредственно в расчетах), которые обеспечивают единообразное задание физических свойств, не относящихся непосредственно к тому или иному конструктивному элементу. К таким шаблонам могут относиться, например, среды, которым не соответствуют отдельные уравнения в математической модели, но свойства которых входят как параметры в уравнения для других материалов и сред. Например, такой средой является теплоноситель в тепловой машине с модельными свойствами «коэффициент теплоотдачи», «давление», «температура».

Абстрактные материалы и среды не соответствуют никакой элементарной области в модели, их можно назначить расчетной области в целом. В расчете их свойства чаще всего учитываются в граничных условиях, но механизм подключения внешних программных библиотек для них остается таким же, как и для материалов реальных.

3.4. Библиотека расчетных областей

Расчетная область описывается как совокупность заранее подготовленных элементарных областей вместе с соответствующими им сетками и наборами физических свойств материала или среды. Включение элементарной области в расчетную область может производиться группой или одиночно. При создании расчетной области указывается ее положение в пространстве, а также взаимное положение ее частей.

3.5. Библиотека сценариев моделирования

Библиотека сценариев моделирования может содержать наборы входных данных для проблемно-ориентированного решателя, включая начальные

условия, граничные условия, а также ряд физических свойств материалов, не учтенных в используемых решателем моделях.

3.6. Библиотека конфигураций расчетов

Конфигурации конкретных расчетов сохраняются в xml-файле. Данный файл содержит указание необходимых для расчета параметров:

- типа решаемой задачи (двумерная, трехмерная);
- конкретной расчетной области из БРО вместе с геометрическими моделями элементарных областей из БЭО, сетками из БС и материалами из БМФС;
- набора и вида решаемых систем уравнений;
- настроек используемых численных методов (явные, неявные, линейное приближение, итерационное уточнение и т.д.).

4. Система проектов

Подготовка, конструирование и исследование модели физического процесса в рамках платформы Теметос осуществляется визуально в рамках проекта, содержащего набор взаимосвязанных элементов предметных библиотек. Проект представляет собой полный набор данных и моделей, соответствующих определенной расчетной области, эти данные могут быть импортированы из соответствующих предметных библиотек. Непосредственная работа в этом случае осуществляется не со всем множеством уже спроектированных и доступных пользователю в библиотеках элементарных областей, сеток, расчетных областей, физических моделей и условий моделирования, а с некоторым содержательно-связным набором такого типа данных. Например, к одному проекту могут относиться расчеты одной и той же инженерной конструкции в нормальных условиях эксплуатации и в условиях, моделирующих различные проектные аварии. К проекту же относятся и все результаты выполненных в его рамках расчетов. Тем самым, пользователю предоставляется возможность систематизировать процесс расчета и анализа свойств исследуемого объекта.

Основным компонентом проекта является расчетная область, хотя система Теметос не накладывает требования единственности расчетной области в проекте. Тем не менее, с содержательной точки зрения, именно компоновкой расчетной области (иначе – расчетной схемой) задается единство модели и серии расчетов. При этом часть параметров может меняться, не меняя в корне модель, но обеспечивая многовариантность моделирования. В частности, могут варьироваться:

- используемые сетки – позволяют исследовать сходимости методов расчета модели;

- используемые модели для отдельных физических свойств материалов – позволяет сравнивать эффективность различных способов описания материала и физических моделей;
- наборы условий и сценариев моделирования;
- настройки расчетного модуля: учет или неучет тех или иных физических процессов, использование различных вариаций численных методов (линейные и нелинейные, явные и неявные методы).

Все изменения элементов модели являются локальными и происходят только в рамках текущего проекта. Результаты разработки проекта, которые могут быть использованы в других проектах (элементарные области вместе с сетками, подготовленные модели материалов), могут быть экспортированы в соответствующие библиотеки.

5. Инструментальная графическая подсистема

Задача платформы Теметос – оснастить исследователя, разрабатывающего собственный или использующего готовый проблемно-ориентированный модуль-решатель, максимально удобными (прежде всего, графическими) средствами подготовки и проведения вычислительного эксперимента с применением этого решателя. В состав платформы включены графические редакторы предметных библиотек, а также инструменты, позволяющие «собрать» из заранее подготовленных единиц (геометрических моделей, моделей физических свойств, сеток, конфигураций решателя) расчет, произвести его запуск и отслеживание, проанализировать его результаты.

Сразу после запуска платформы пользователь попадает в редактор элементарных трехмерных областей (рис. 4). Описание геометрии расчетной области исследуемого объекта ведется на различных, но взаимосвязанных, уровнях. Полная расчетная область описывается в два этапа:

1. задание чертежей элементарных областей в виде трехмерных или плоских областей (с учетом осевой симметрии) с указанием всех размеров и подробным заданием формы каждого элемента;
2. формирование из предварительно подготовленного набора элементарных областей своеобразной схемы-сборки расчетной области с указанием положения и набора физических моделей для каждого из элементов.

Подобный подход оказывается удобным в ряде случаев моделирования конструкций. В частности, численный алгоритм термомеханического решателя с учетом контакта и мультиконтакта упругих тел позволяет моделировать различные элементы инженерной конструкции как независимые твердые тела, взаимодействующие через поверхности контакта. Это позволяет независимо задавать геометрию, физические и модельные свойства каждого элемента, и моделирование конструкции в целом начинается именно с проектирования (введения в соответствующие библиотеки) индивидуальных элементов с наиболее подробным учетом особенностей их формы. Реализован импорт

трехмерных областей, заданных в формате STL, который используется с этой целью во многих популярных CAD-системах.

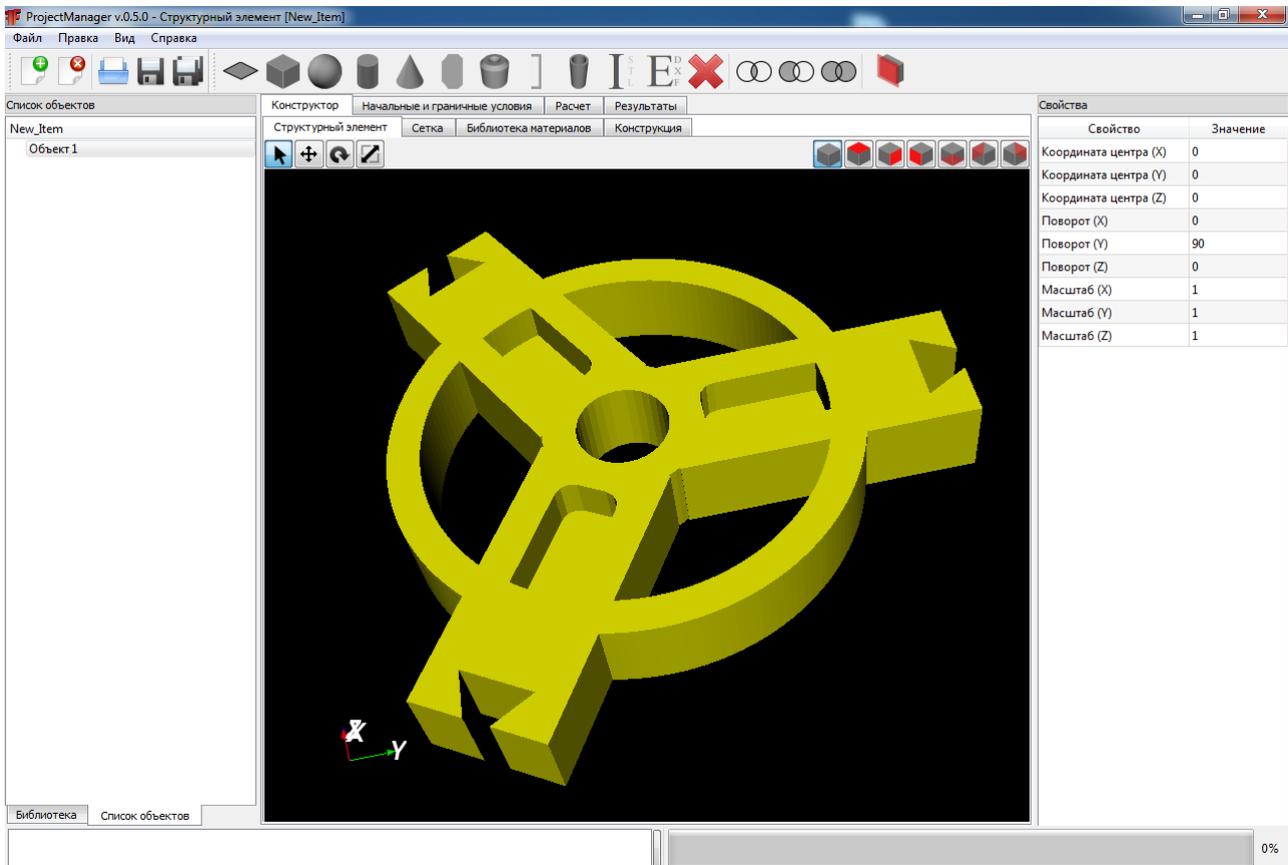


Рис. 4. Редактор элементарных трехмерных областей платформы Теметос

Окно графической подсистемы меняется в зависимости от того, с каким именно блоком в данный момент работает пользователь. Работа с каждым из блоков представляет собой просмотр, редактирование и выбор для расчета элементов соответствующей блоку предметной библиотеки.

Для каждой элементарной подобласти пользователь может задать одну или несколько сеток (рис. 5), причем одна и та же подобласть может входить в состав расчетной области многократно, имея при этом разные сетки. Платформа Теметос позволяет визуально и численно (используя ряд критериев) оценить качество сетки и при необходимости провести ее оптимизацию.

Далее пользователь производит выбор физических моделей сред и материалов, которые будут использоваться в расчете. Каждая среда представляется набором физических свойств, каждое из которых может быть задано либо непосредственно численно (значения сохраняются в xml-файле среды), либо указанием функции в подключаемой dll-библиотеке (ссылка на библиотеку и функцию также указывается в xml-файле среды). Модуль-решатель должен поддерживать подключение внешних библиотек. В рамках работы над платформой разработан унифицированный интерфейс подключения

материальных библиотек, который может быть реализован в виде API платформы, доступного для использования во внешних решателях.

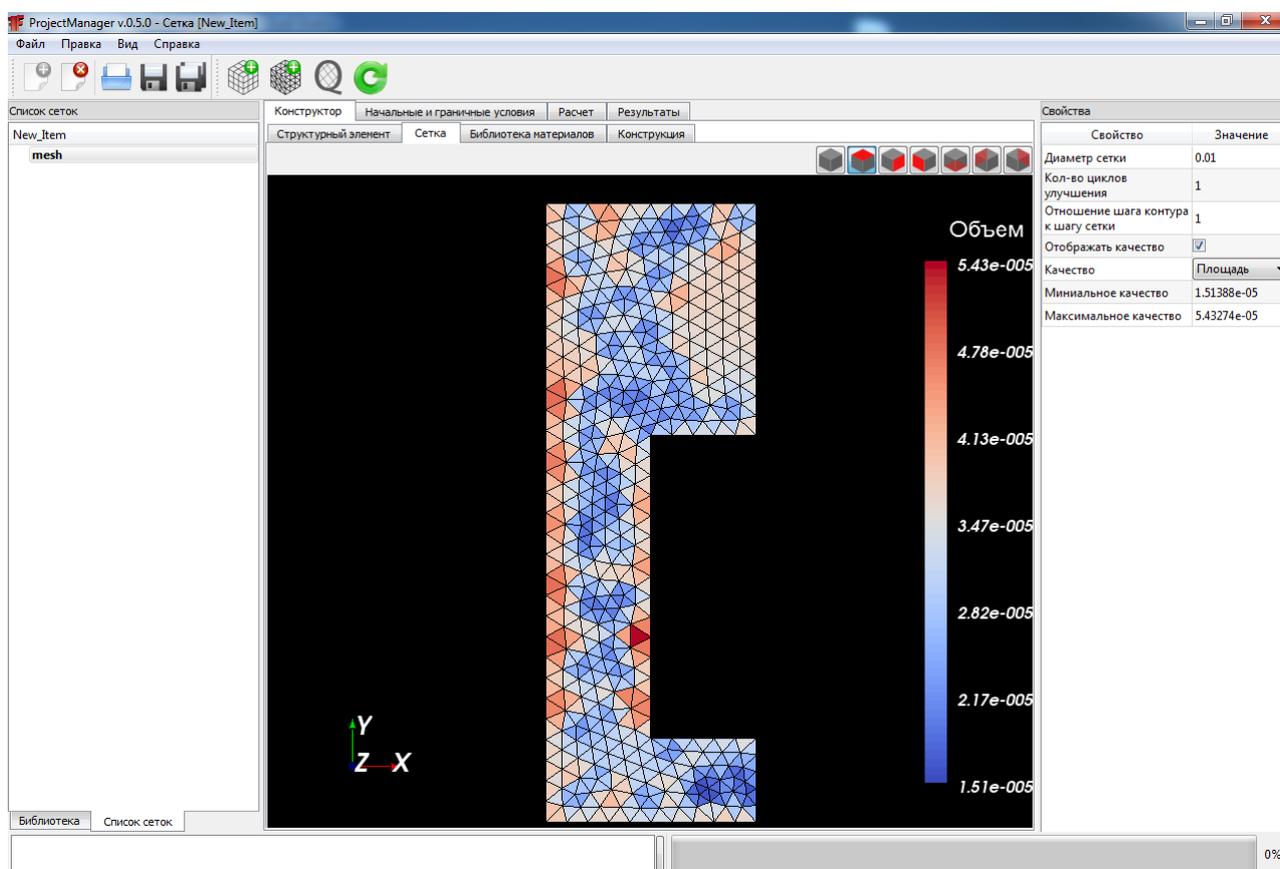


Рис. 5. Задание треугольной сетки в произвольной области

Из подготовленных элементарных подобластей с выбором для каждой из них сетки и набора физических свойств осуществляется сборка расчетной области в соответствующем редакторе (см. рис. 6). Далее для выбранной расчетной области (конструкции) задаются начальные и граничные условия, сценарий моделирования, распределения объемных и поверхностных источников. Для реализации этой возможности создан редактор сценариев, включающий парсер формул библиотеки VTK.

После того, как задана расчетная область, определены используемые модели материалов и сценарий моделирования, производится настройка и запуск на расчет решателя. В соответствующем блоке платформы задаются параметры численного метода, используемые классы физических и математических моделей, осуществляется выбор моделируемой конструкции, соответствующего ей сценария нагружения, а также общие параметры расчета, такие как конечное время, размерность задачи и проч. В процессе расчета предоставляется соответствующая телеметрическая информация.

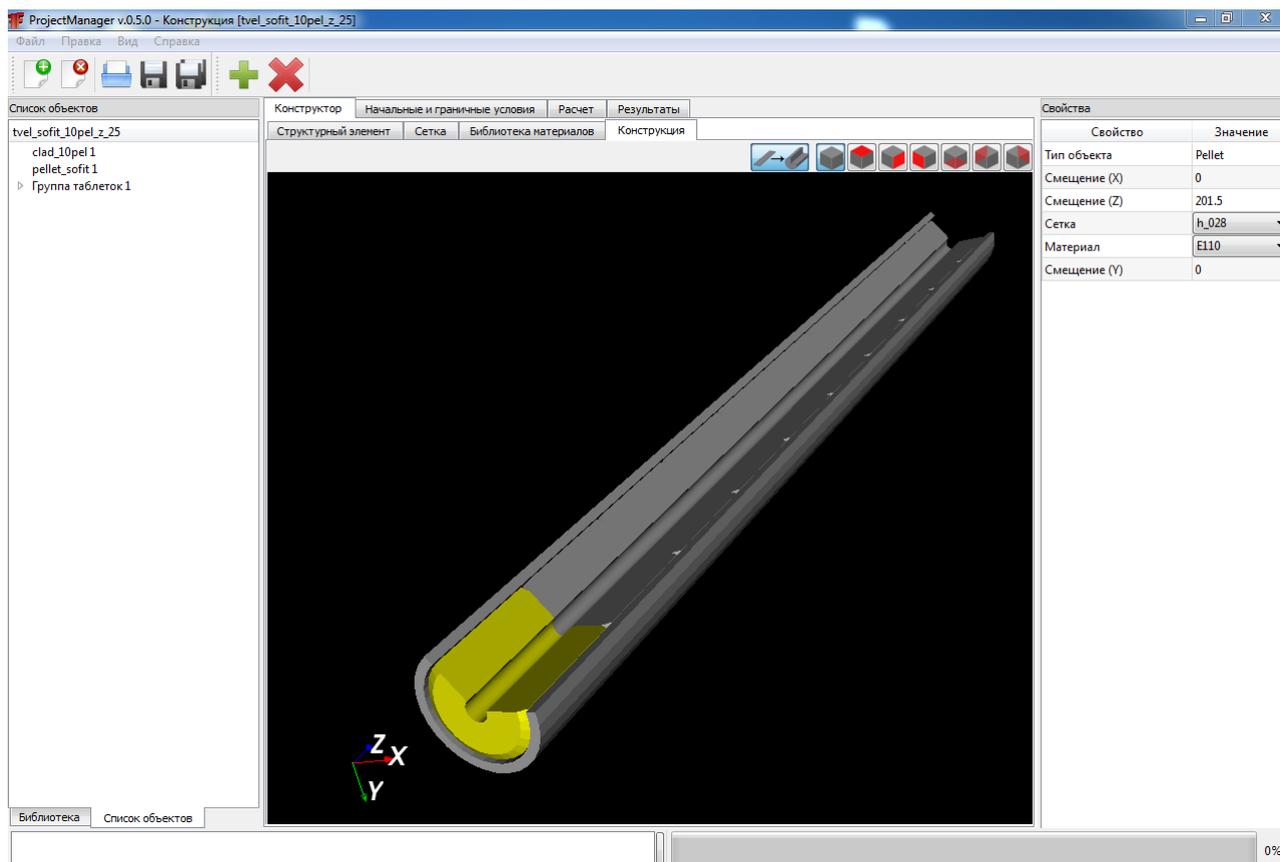


Рис. 6. Редактор расчетных областей – трехмерная форма отображения конструкции

Доступно как двумерное, так и трехмерное (в т.ч. двумерное осесимметричное) отображение результатов расчетов. Кроме того, разработаны средства по трансформации способа отображения результатов – инструменты по созданию контурных графиков распределений физических величин, отображению векторных полей, соответствующих переменным задачи, а также генерации результирующей формы конструкции путем смещения узлов сетки на соответствующий вектор перемещения.

6. Математическая подсистема

Математическая подсистема платформы Теметос включает основные расчетные программы и комплексы, используемые для проведения вычислительного эксперимента – программы-построители сеток и модули-решатели, реализующие методы численного исследования систем уравнений, соответствующих выбранной физической задаче. Архитектурой платформы Теметос предусмотрено, что каждая расчетная программа является независимой, обмен данными между расчетной программой и платформой производится только через файлы входных данных и настроек, при наличии входных файлов расчетная программа может быть запущена непосредственно из командной строки вне графической оболочки. При этом предполагается, что

порядок запуска расчетной программы и состав входных файлов описываются в отдельном интерфейсном файле xml-формата.

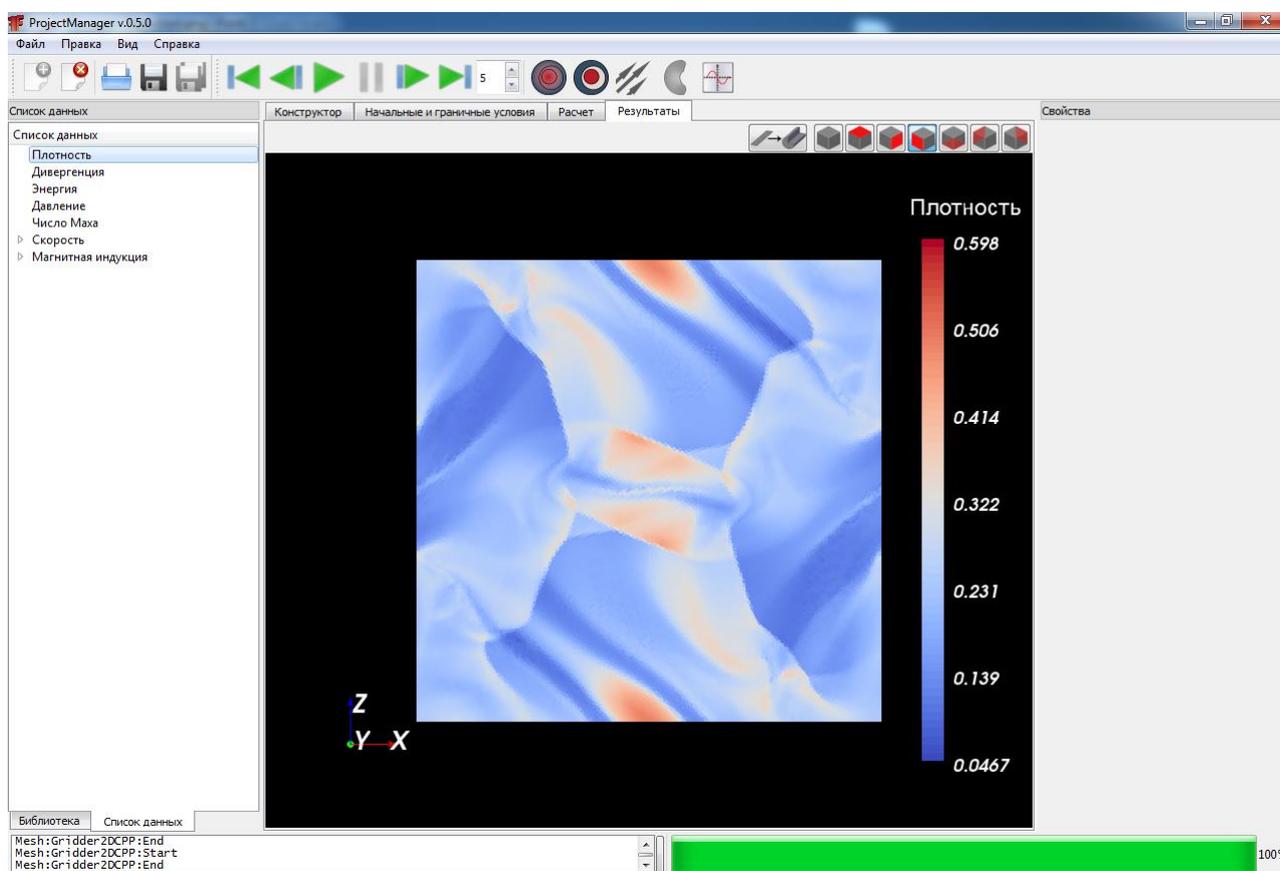


Рис. 7. Окно представления результатов расчетов

На данный момент платформа Теметос включает несколько построителей неструктурированных и структурированных сеток, причем каждый из них является независимым программным продуктом, а платформа содержит необходимые конвертеры для преобразования данных о геометрии в формат построителя и получаемых данных о сетке в другие используемые форматы. Поддерживается построение как неструктурированных треугольных (программа Gridder 2D [9]), так и четырехугольных сеток [16] различных видов – как в областях общего вида, так и в специальных областях, соответствующих специфике задачи.

На пилотном этапе разработке к платформе адаптируются два расчетных модуля – параллельный программный комплекс для решения двумерных задач идеальной магнитной гидродинамики RKDG-методом и термомеханический программный комплекс, включающий математические модели термоупругопластичного материала и хрупкого разрушения. Платформа применяется для задания расчетной области, запуска последовательного расчета и анализа получаемых результатов. Предполагается, что в дальнейшем в состав комплекса Теметос будут включены инструменты подготовки и

проведения расчета на параллельных вычислительных комплексах, включая кластерные системы (К-100 ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, УЭВК кафедры «Прикладная математика» МГТУ им. Н.Э. Баумана [3] и др.).

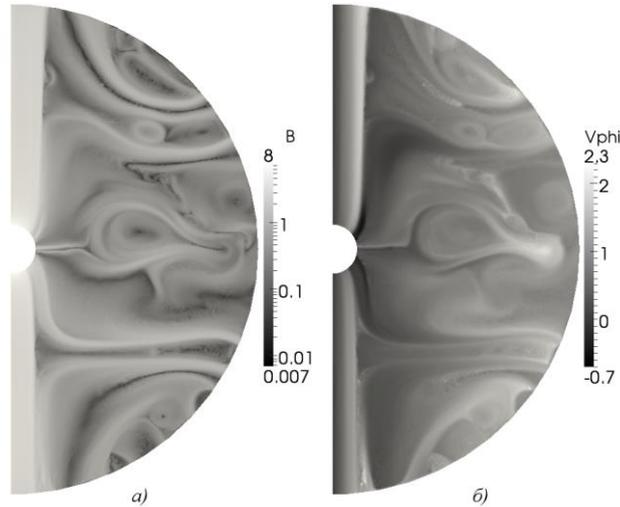


Рис. 8. Моделирование МРН в аккрецирующей плазме: модуль магнитного поля (а) и азимутальная скорость течения плазмы (б)

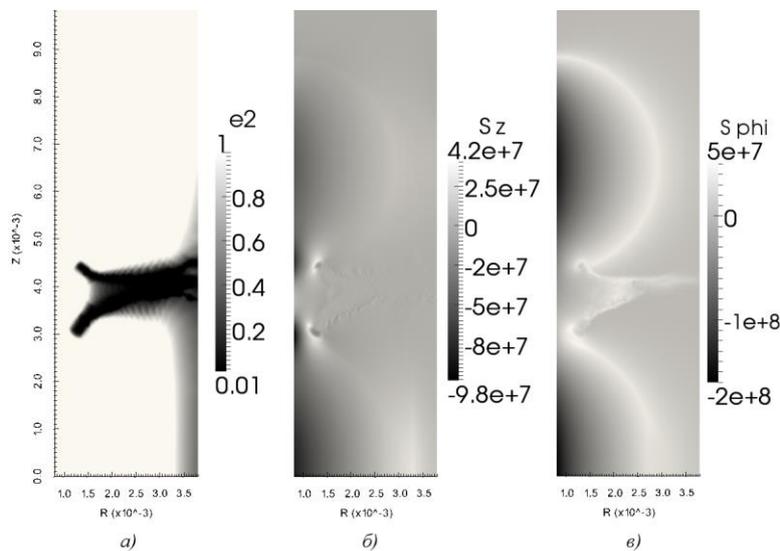


Рис. 9. Моделирование разрушения хрупкой конструкции под действием тепловой нагрузки в рамках модели размазанных трещин. а) – распределение функции памяти e_2 , эффективным образом описывающей появление трещины в материале ($e_2 = 1$ – неповрежденный материал, $e_2 = 0$ – полностью разрушенный). б) и в) – компоненты тензора напряжений σ_{zz} и $\sigma_{\phi\phi}$ соответственно.

Результаты расчетов в двумерной осесимметричной постановке для задач о развитии магнито-ротационной неустойчивости (МРН) в аккрецирующей околозвездной плазме (постановку задачи см. в [17]) и задаче о разрушении

цилиндрической конструкции под действием тепловой нагрузки при нагревании [18] приведены на рис. 8 и 9.

7. Заключение

Представлен прототип интегрированной программной платформы для сопровождения вычислительного эксперимента в комплексных задачах математического моделирования. Предложена архитектура платформы, состоящая из трех подсистем различного назначения – математической, графическо-инструментальной и подсистемы семи предметных библиотек. Оформление в виде пополняемых библиотек элементов исследуемой модели – расчетных областей, физических свойств сред, сценариев моделирования – открывает возможности безболезненного расширения платформы. При этом каждая такая библиотека требует создания форматов данных и интерфейсов подключения внешних, не зависящих от платформы Теметос, потоков данных и процедур.

На данный момент в качестве базовых решателей для платформы адаптированы два модуля.

1. Параллельный программный комплекс для решения двумерных задач идеальной магнитной гидродинамики разрывным методом Галеркина (RKDG-метод) [6]. Модуль используется для моделирования процессов развития магнито-ротационной неустойчивости в околосредней плазме.

2. Термомеханический решатель [2], позволяющий, в частности, исследовать прочность конструкций в рамках связанной термоупругопластической задачи с разрушением [18].

Модуль используется для численного моделирования элементов конструкций, испытывающих высокие тепловые нагрузки, а также, с определенными изменениями и расширениями – для исследования работы магнитного компрессора.

Дальнейшее развитие платформы будет осуществляться по следующим основным направлениям:

1. развитие и унификация форматов данных, прежде всего двумерных и трехмерных смешанных неструктурированных сеток;
2. развитие редактора задания сценария моделирования, адаптация его к различным предметным областям;
3. создание инструментария управления расчетом на удаленных машинах, в том числе на суперкомпьютерах кластерного типа;
4. реализация запуска параллельных версий модулей-решателей с получением подробной телеметрии параллельного расчета;
5. адаптация и включение в состав платформы новых модулей-решателей, превращение платформы в мультифизичный программный комплекс математического моделирования.

Список литературы

- [1] Галанин М.П., Савенков Е.Б. Методы численного анализа математических моделей. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2010. 591 с.
- [2] Богатырь С.М., Галанин М.П., Крупкин А.В., Кузнецов В.И., Лукин В.В., Новиков В.В., Родин А.С., Станкевич И.В., Яковлев М.Е. Математическое моделирование термоупругого контактного взаимодействия осесимметричных тел. // Инженерный журнал: наука и инновации, 2013, вып. 4. URL: <http://engjournal.ru/catalog/mathmodel/hidden/667.html>.
- [3] Лукин В.В., Марчевский И.К., Морева В.С., Попов А.Ю., Шаповалов К.Л., Щеглов Г.А. Учебно-экспериментальный вычислительный кластер. Ч.2. Примеры решения задач // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Естественные науки. 2012. № 4. С. 82-102.
- [4] Лукин В.В., Шаповалов К.Л. Применение RKDG метода второго порядка для решения двумерных уравнений идеальной магнитной гидродинамики // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Естественные науки. 2012. Спец. выпуск № 2 «Математическое моделирование в технике». С. 98-108.
- [5] Богатырь С.М., Галанин М.П., Горбунов-Посадов М.М., Гусев А.С., Еременко А.С., Ермаков А.В., Кузнецов В.И., Лукин В.В., Новиков В.В., Родин А.С., Салатов А.В., Сыпченко М.В., Фальков А.А., Шаповалов К.Л. Комплекс программ для вероятностных расчетов термомеханики тепловыделяющих элементов. // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Естественные науки. 2012. Спец. выпуск №1 "Прикладная математика и механика". С. 66-75.
- [6] Галанин М.П., Лукин В.В., Шаповалов К.Л. Параллельный алгоритм RKDG метода второго порядка для решения двумерных уравнений идеальной магнитной гидродинамики // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2013): труды международной научной конференции (1-5 апреля 2013 г., г. Челябинск). Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. 2013. С. 116-126.
- [7] Галанин М.П., Лукин В.В., Чечеткин В.М. Моделирование астрофизических струйных выбросов на гибридных вычислительных системах с общей памятью // Параллельные вычислительные технологии (ПаВТ'2012): труды международной научной конференции (Новосибирск, 26 - 30 марта 2012 г.). 2012. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ. С. 99-110.
- [8] Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. -М.: Физматлит, 2002. - 320 с.
- [9] Щеглов И.А. Программа для триангуляции сложных двумерных областей Gridder2d // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2008. № 60. 32 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2008-60>
- [10] ANSYS // ANSYS, Inc. Режим доступа: <http://www.ansys.com/> (дата обращения: 29.05.2013).
- [11] OpenFOAM // The OpenFOAM Foundation. Режим доступа: <http://www.openfoam.org> (дата обращения: 29.05.2013).
- [12] Гасилов В.А., Болдарев А.С., Дьяченко С.В. и др. Пакет прикладных программ MARPLE3D для моделирования на

высокопроизводительных ЭВМ импульсной магнитоускоренной плазмы // Матем. Моделирование. 2012, Т. 24, №1. С. 55-87.

[13] Qt // Digia. Режим доступа: <http://qt.digia.com/> (дата обращения: 29.05.2013).

[14] The Visualization Toolkit // Kitware. Режим доступа: <http://www.vtk.org/> (дата обращения: 29.05.2013).

[15] Горбунов-Посадов М.М. Как растет программа // ИПМ им. М.В. Келдыша РАН. Режим доступа: <http://www.keldysh.ru/gorbunov/grow.htm> (дата обращения: 29.05.2013).

[16] Sarrate J., and Huerta A. Efficient unstructured quadrilateral mesh generation. // International Journal for Numerical Methods in Engineering. 2000. Vol. 49. Pp. 1327-1350.

[17] Велихов Е.П., Сычугов К.Р., Чечеткин В.М., Луговский А.Ю., Колдоба А.В. Магниторотационная неустойчивость в аккрецирующей оболочке протозвезды и образование крупномасштабной структуры магнитного поля // Астрономический журнал. 2012. Т. 89, №. 2. С. 107-119.

[18] Семерикова М.А. Математическое моделирование хрупкого материала под действием тепловых нагрузок // Молодежный научно-технический вестник. МГТУ им. Н.Э. Баумана: Электрон. журн. 2013. № 3. Режим доступа: <http://sntbul.bmstu.ru/file/505616.html> (дата обращения: 29.05.2013).

Оглавление

1. Введение. Идеи и задачи платформы Теметос.....	3
2. Общая структура платформы Теметос.....	5
3. Подсистема предметных библиотек.....	7
3.1. Библиотека элементарных областей	10
3.2. Библиотека сеток.....	10
3.3. Библиотека моделей физических свойств	10
3.4. Библиотека расчетных областей.....	12
3.5. Библиотека сценариев моделирования	12
3.6. Библиотека конфигураций расчетов	13
4. Система проектов	13
5. Инструментальная графическая подсистема.....	14
6. Математическая подсистема	17
7. Заключение.....	20
Список литературы.....	21