

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС GIMM ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ С ПОМОЩЬЮ СОВРЕМЕННЫХ МНОГОПРОЦЕССОРНЫХ СИСТЕМ ЗАДАЧ МЕХАНИКИ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ

С.В. Поляков, Э.М. Кононов, О.А. Косолапов, Т.А. Кудряшова

В данной работе представлен программный комплекс GIMM для решения задач механики сплошной среды как в двумерном, так и в трехмерном пространстве. Данный комплекс содержит инструменты, позволяющие пользователю решить конкретную задачу от начала (проектирование расчетной области, задание граничных условий) до конца (просмотр конечных результатов). GIMM ориентирован на использование современных многопроцессорных систем. Комплекс состоит из 4 основных компонентов: редактор геометрии, генератор сеток, визуализатор результата и оболочка, которая объединяет 3 остальных компонента в едином интерфейсе и управляет передачей данных между ними и многопроцессорной системой. Архитектура комплекса позволяет вместо встроенных в него инструментов подключать и использовать внешние средства. Решение любой задачи состоит из 4 основных этапов: проектирование расчетной области и задание граничных условий в редакторе, создание подходящей сетки с помощью генератора сеток, запуск расчета на вычислительном кластере, просмотр результатов во встроенном визуализаторе. Все эти этапы могут быть пройдены с помощью оболочки GIMM.

1. Введение

В настоящей работе представлены возможности программного комплекса GIMM для моделирования задач механики сплошной среды. GIMM содержит набор инструментов, позволяющих решить определенную задачу от начала (задание геометрии области решения, граничных условий) до конца (просмотр результата), позволяет решать задачи как в двумерном, так и в трехмерном пространстве. Эти инструменты ориентированы на использование параллельных алгоритмов и современных многопроцессорных систем, но могут работать и на персональном компьютере. Основной идеей при разработке архитектуры комплекса была возможность простого встраивания внешних инструментов вместо стандартных. GIMM состоит из 4 компонентов: редактор для задания геометрии расчетной области и граничных условий, генератор сеток, визуализатор для удобного представления результатов вычислений в разных формах и оболочка, которая объединяет 3 других компонента в одном графическом интерфейсе и управляет передачей данных между клиентской машиной и многопроцессорной системой. Схема взаимодействия этих компонентов приведена на рисунке 1.

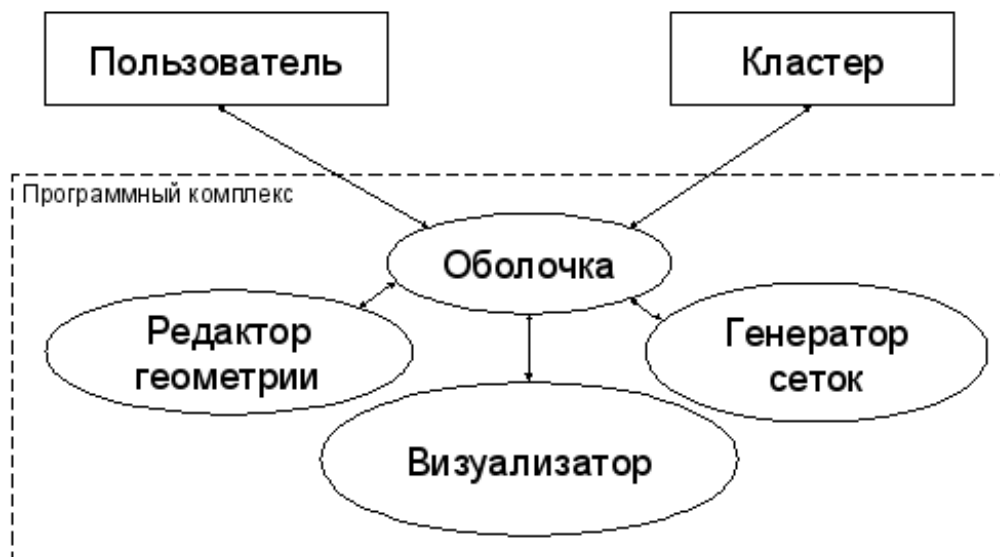


Рис. 1 Схема взаимодействия компонентов комплекса

Пользователь напрямую взаимодействует только с оболочкой, т.е. ему не нужно знать, как остальные компоненты взаимодействуют между собой и с многопроцессорной системой. Для нахождения решения задачи используются внешние программы на вычислительном сервере (расчетные модули), которые не входят в состав комплекса GIMM. Управление и обмен данными с расчетными модулями осуществляется посредством локального и удаленных скриптов (bash-скрипты в Linux и bat-файлы в Windows). Данные передаются по протоколу SSH. Помимо передачи данных, эти скрипты должны выполнять необходимые преобразования, чтобы расчетный модуль смог корректно обработать переданные данные. Для каждого расчетного модуля должен быть свой удаленный скрипт. Локальный скрипт один для всех модулей. На рисунке 2 показана схема взаимодействия GIMM с вычислительным кластером.



Рис. 2. Схема взаимодействия комплекса GIMM с вычислительным кластером

2. Проектирование геометрии расчетной области и построение сетки

Проектирование геометрии расчетной области происходит в редакторе геометрии (рисунок 3), который позволяет создавать или изменять геометрию двумерной или трехмерной области решения, выполнять с ней различные операции. Позволяет как создавать объекты самому, так и использовать импортированные из внешних файлов (поддерживается несколько популярных форматов файлов: .3ds, .mesh, .plt и др.). В редакторе есть инструменты, позволяющие производить различные операции с объектами, чтобы в результате придать им требуемый для конкретной задачи вид. Поддерживается экспорт объектов в различные популярные форматы. Для построения подходящих для решения задачи сеток есть встроенный генератор сеток, используемый по умолчанию. Он позволяет строить сетки с различной степенью детализации, которая определяется значениями входных параметров, а также строить сетки не только используя ресурсы локальной машины, но и на кластере. Кроме того, оболочка GIMM предоставляет интерфейс для использования внешних генераторов сеток. В этом случае на этапе построения сетки пользователю нужно только выбрать нужный генератор и задать необходимые для него параметры.

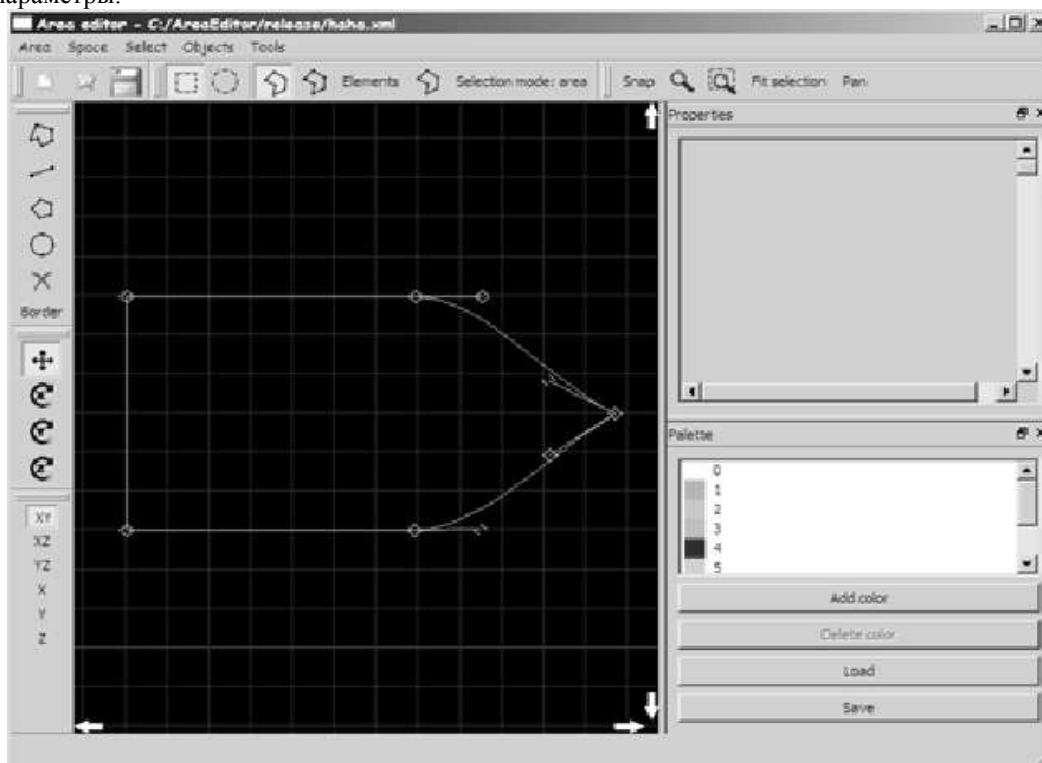


Рис. 3. Редактор геометрии

3. Оболочка и просмотр результатов

Оболочка организует процесс решения конкретной задачи и управляет многопроцессорными системами, на которых пользователь может производить свои расчеты.

Основные задачи оболочки GIMM:

- конструктор приложения (настройка внешней расчетной программы);
- конструктор задачи (запуск расчета на кластере с заданными параметрами);
- управление расчетами (остановка, получение состояния, продолжение с контрольной точки);
- организация взаимодействия между компонентами комплекса;
- получение результатов расчетов.

На первом этапе работы необходимо определить геометрию расчетной области (двумерную или трехмерную). Ее можно построить самому с помощью встроенного редактора или выбрать уже существующий файл, в котором она определена. Следующий этап - построение сетки, подходящей для решения задачи. При этом по выбору пользователя может использоваться встроенный генератор сеток или внешний. Построенную сетку можно просматривать во встроенном редакторе и, если она по каким-то причинам не подходит для дальнейших расчетов, изменить параметры генерации и сгенерировать ее заново.

Список доступных кластеров хранится в конфигурационном файле. Для внесения в него изменений можно использовать графический интерфейс оболочки GIMM. После того как расчетная сетка окончательно построена, можно выбрать один из доступных кластеров и запустить на нем расчет задачи. Пока производятся вычисления на кластере, их можно в любой момент остановить или узнать состояние задачи. После остановки или окончания расчета пользователь может получить список результатов и отобразить желаемый результат во встроенном визуализаторе. Также есть возможность продолжить расчет с одной из контрольных точек, которые определяет внешняя расчетная программа.

Визуализатор отображает на экране результаты расчетов в наглядном виде, которые поступают к нему от расчетного модуля в виде файла PLT.

Оболочка предоставляет графический интерфейс для удобного использования в комплексе внешних генераторов сеток и визуализаторов.

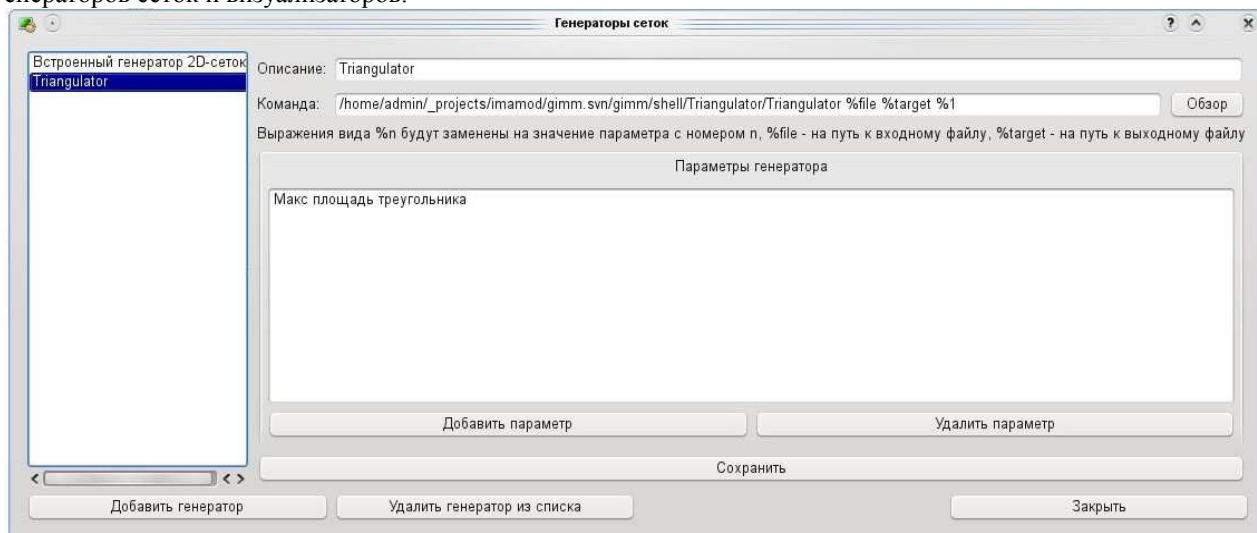


Рис. 4. Интерфейс оболочки для регистрации внешних генераторов сеток

Данные о доступных генераторах сеток и визуализаторах сохраняются в конфигурационном файле, состав этих компонентов можно легко менять, используя графический интерфейс оболочки. При решении задачи на соответствующем этапе нужно будет просто выбрать из списка нужный компонент.

В оболочке GIMM всегда доступен список завершенных и выполняющихся расчетов. Устаревшие задачи исключаются из него автоматически или по желанию пользователя. Из списка всегда можно узнать состояние расчета, когда он был запущен, с какими параметрами, на каком кластере, просмотреть его результаты, а также другую полезную для пользователя информацию. Список задач, за которыми следит оболочка GIMM, хранится локально в конфигурационном файле.

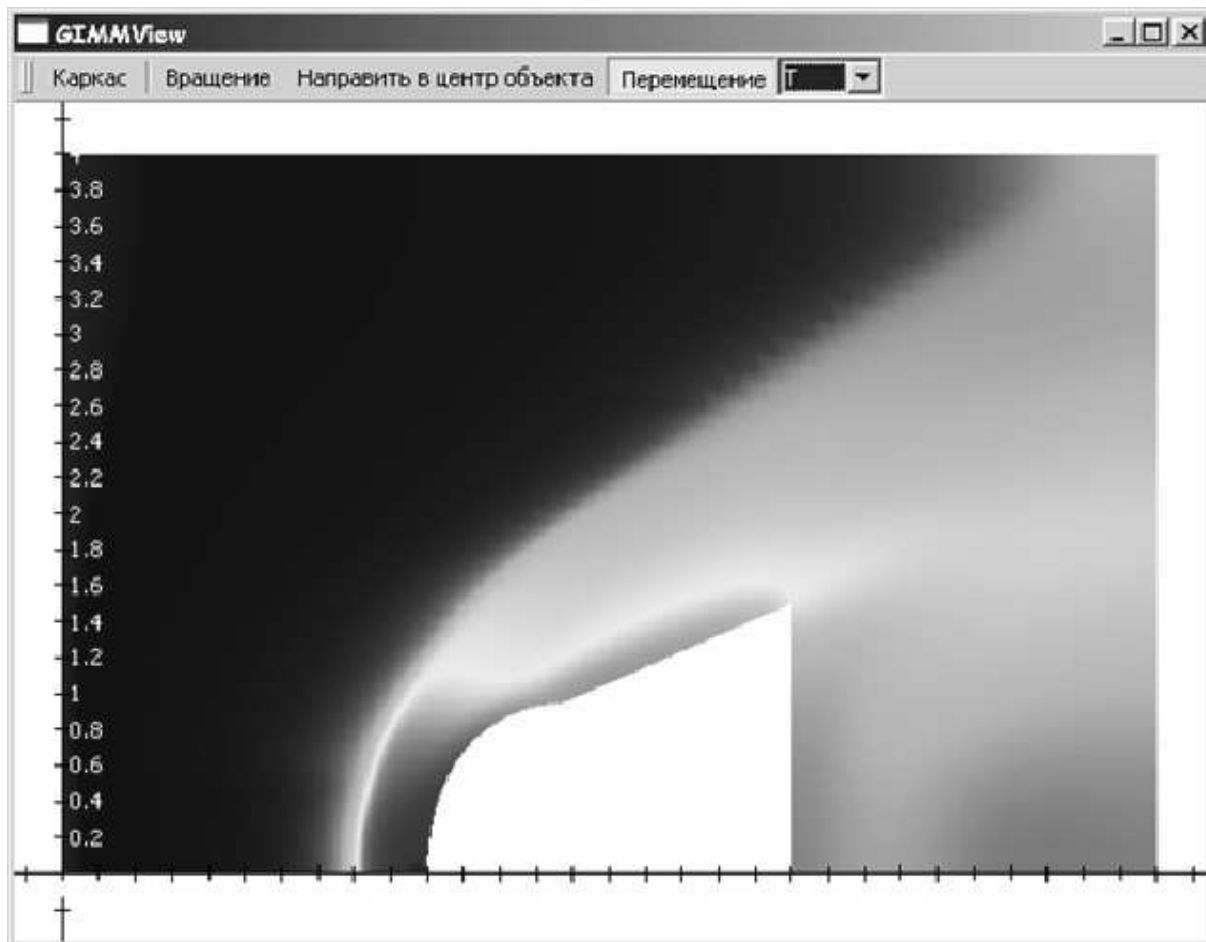


Рис. 5. Отображение результатов расчетов в визуализаторе

4. Расчет течения в трехмерном пространстве

Для демонстрации возможностей комплекса возьмем задачу расчета течения в трехмерном пространстве. Для этого подключаем к GIMM расчетную программу, которая решает данный тип задач. Расчетная область представляет параллелепипед в трехмерном декартовом пространстве. В использованном нами расчетном модуле для описания потока газа используются уравнения квазигазовой динамики (КГД) и множество граничных условий. Эта система связывает вместе параметры динамики газа: плотность, ускорение, энергию. На одной стороне расчетной области заданы граничные условия, представляющие наплывающий

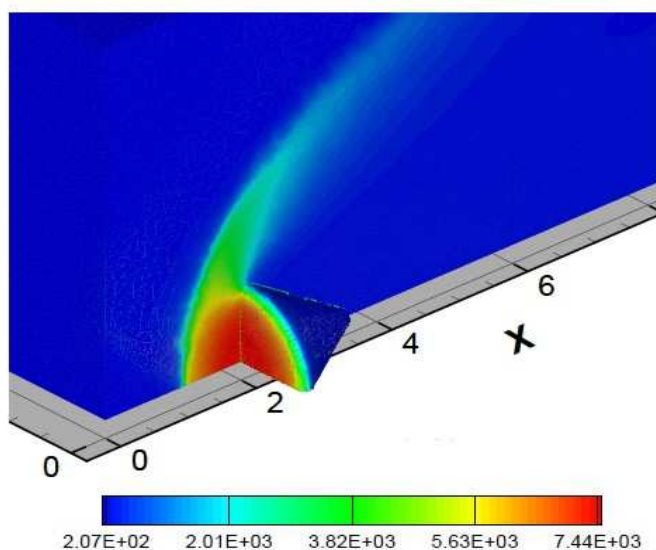


Рис. 6. Распределение плотности для модели космического аппарата Apollo

поток. Все остальные границы области позволяют газу беспрепятственно вытекать из области. Для поверхности

объекта граничные условия заданы так, чтобы не позволить газу проходить сквозь объект. Поток считается квазистационарным и вычисляется до тех пор, пока не будет достигнуто устойчивое состояние.

Для численного решения системы уравнений КГД используются локально-сгущенные сетки из тетраэдров и метод контрольных объемов. Результаты вычислений для распределения плотности показаны на рисунках 6, 7.

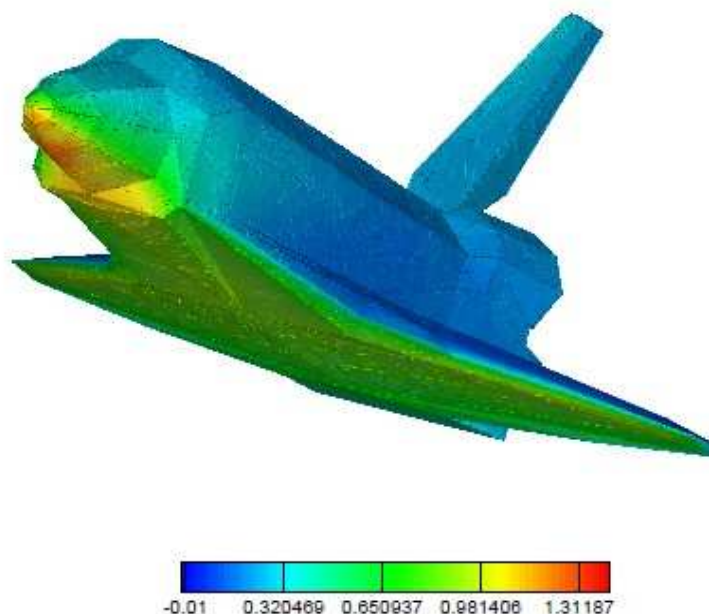


Рис. 7. Распределение плотности для модели американского космического шаттла
Количество узлов в использованных сетках изменяется от 10^5 до $2 \cdot 10^6$.

5. Выводы

В настоящей работе был разработан комплекс программ GИММ, позволяющий произвести решение задачи механики сплошной среды от начала до конца в двумерном или трехмерном пространстве с помощью внешнего расчетного модуля, а также управлять и следить за расчетами в процессе их выполнения. Отличительной особенностью данного комплекса является его ориентированность на параллельные вычисления и многопроцессорные системы, простота встраивания внешних инструментов вместо стандартных. Весь программный код написан на языке C++ с использованием библиотеки Qt и может быть скомпилирован как на компьютерах под управлением Windows, так и на компьютерах, где используется Linux.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Y. Saad. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. 1st edition. PWS, 1996.
2. Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков, Э.М. Кононов. Расчет поля радиационного излучения вокруг спускаемого аппарата. // Математическое моделирование. 2008. 20(10). 63-74.
3. Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков, А.А. Свердлин. Расчет параметров течения газа вокруг спускаемого аппарата. // Математическое моделирование. 2008. 20(8). 119-128.
4. The Message Passing Interface (MPI) standard. <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/>.
5. MPICH-A Portable Implementation of MPI. <http://www-unix.mcs.anl.gov/mpi/mpich1/>.
6. PETSc Web page, 2001. <http://www.mcs.anl.gov/petsc>.
7. Metis - Serial Graph Partitioning and Fill-reducing Matrix Ordering. <http://glaros.dtc.umn.edu/gkhome/metis/metis/overview>.
8. Tetgen: A Quality Tetrahedral Mesh Generator. <http://tetgen.berlios.de>.