

УДК 519.6

ТЕХНОЛОГИЯ ГЛОБАЛЬНОЙ ПЕРЕСТРОЙКИ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СЕТКИ И ПЕРЕСЧЕТА СЕТОЧНЫХ ВЕЛИЧИН НА ПРИМЕРЕ ДВУМЕРНЫХ РАСЧЕТОВ ПО МЕТОДИКЕ КОРОНА

В. И. Тарасов, А. Г. Козуб, И. В. Сырова, Н. В. Чухманов,
А. К. Меньшикова, Е. А. Фролова, А. М. Овчинников, А. Ю. Овсянников
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Приводится общая схема организации глобальной перестройки сетки и пересчета сеточных величин в рамках единой технологии. Дается описание этапов технологии, для каждого из них демонстрируется удобный диалоговый интерфейс пользователя.

Применимость технологии, ее широкие возможности по изменению топологии расчетных сеток, приемлемое качество пересчета сеточных величин продемонстрированы на примере перестроек сетки в многообластных двумерных расчетах по методике КОРОНА.

Ключевые слова: единая технология, расчетная сетка, глобальная перестройка, программа пересчета сеточных величин InterVal-2D, методика КОРОНА, многообластные двумерные расчеты.

Введение

Для математических методик РФЯЦ-ВНИИЭФ разработана технология глобальной перестройки пространственной сетки и пересчета сеточных величин в двумерном случае. Необходимость создания такой технологии была обусловлена двумя основными причинами:

1. Требовалось решить проблему обмена расчетными данными между различными методиками, по которым выполняется численное моделирование одной и той же задачи. В первую очередь необходимость такого обмена вызвана тем, что каждая из математических методик ориентирована на решение определенного класса задач, а зачастую при проведении расчетов требуется решать задачи, входящие в различные классы. При этом каждая из методик использует различные типы пространственных сеток (структурированные и неструктурированные) и методы решения (на основе метода концентраций, дробных сеток, составных ячеек и т. п.). Становится весьма актуальным решение вопроса передачи результатов выполнения некоторого этапа счета по од-

ной методике для продолжения счета на следующих этапах по другой методике.

2. Даже в рамках одной методики при проведении сложных расчетов нередко возникают ситуации, когда либо вырождаются отдельные фрагменты (счетные области) задачи, либо пространственная сетка в отдельных областях становится непригодной для дальнейшего счета. В большинстве таких ситуаций оказывается достаточным иначе разбить систему на счетные области и расставить в них сетку, адекватно отражающую характер процессов текущего этапа счета задачи. Операцию коррекции сетки принято называть *глобальной перестройкой*. Пример такой перестройки для расчета по методике [1], позднее получившей название КОРОНА, приведен на рис. 1.

Для проведения глобальной перестройки расчетной сетки с пересчетом сеточных величин необходимо было разработать и программно реализовать алгоритмы выполнения следующих операций:

- восстановление границ веществ, в том числе внутри смешанных ячеек, в *родительской* задаче (задача с исходными данными);

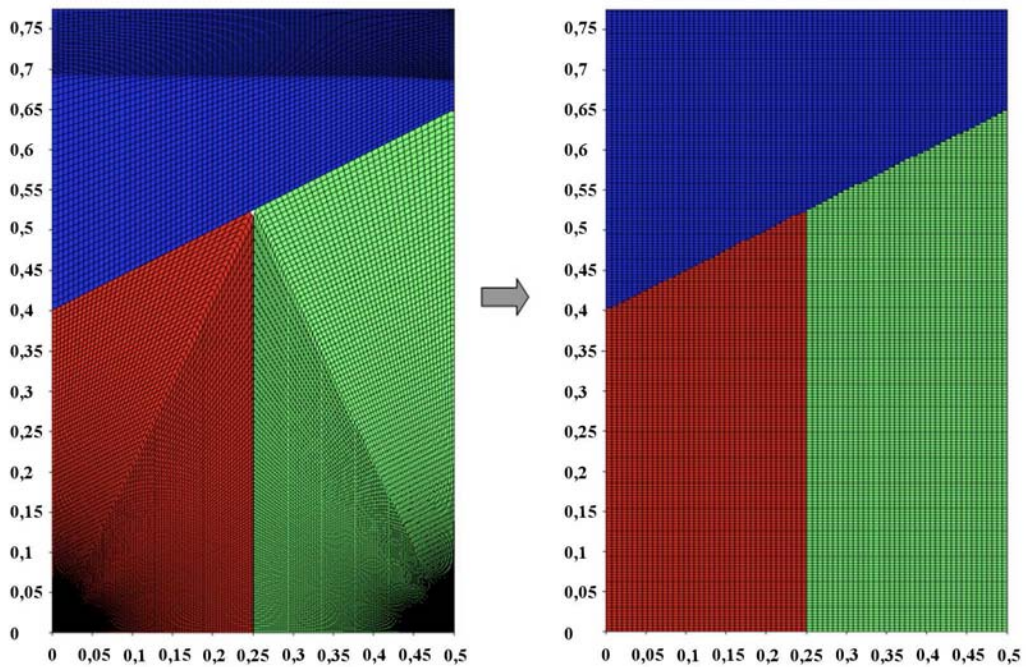


Рис. 1. Пример перестройки сетки для расчета по методике КОРОНА

- построение расчетной сетки с учетом восстановленных границ веществ для *дочерней* задачи (задача, на пространственную сетку которой будут пересчитываться величины);
- пересчет сеточных величин с одной сетки на другую с учетом восстановленных границ веществ;
- формирование выходного файла-разреза¹ для конкретной методики;
- контроль точности пересчета.

В совокупности обозначенный набор алгоритмов и программ, а также правил работы с ними составляет технологию как передачи сеточных данных из одной методики в другую, так и глобальной перестройки расчетной сетки и пересчета сеточных величин внутри одной методики. Разработанная технология в той или иной мере применяется для различных математических методик РФЯЦ-ВНИИЭФ. В данной статье эта технология будет описана на примере двумерных расчетов по методике КОРОНА.

Данная технология реализована в рамках программы EFR VIEWER [2] в виде *мастера*, который шаг за шагом предоставляет специалисту возможность осуществить установку, обновление

¹Файл, содержащий данные задачи на текущий момент времени.

версий и запуск на выполнение пакета программ математического отделения РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Мастер обеспечивает доступ к следующему общему программному обеспечению: Contact-803, Contact-821, SolidEditor2D [3], VisualEditor2D, 2D-РНД [4], InterVal-2D, визуализаторы ScientificView [5], ParaView [6].

Общая схема организации глобальной перестройки расчетной сетки и пересчета сеточных величин

Технология глобальной перестройки и пересчета сеточных величин представляет собой совокупность последовательно выполняемых действий с применением нескольких программных приложений. Ниже приведены этапы технологии (рис. 2):

1. Проверка наличия пространственно-временного разреза родительской задачи. В качестве него выступает разрез в формате EFR-2 (единый для всех методик математического отделения РФЯЦ-ВНИИЭФ стандарт для записи пространственно-временных разрезов) [7], данные из которого будут пересчитываться на расчетную сетку дочерней задачи (шаг 0).
2. Формирование дочерней задачи:

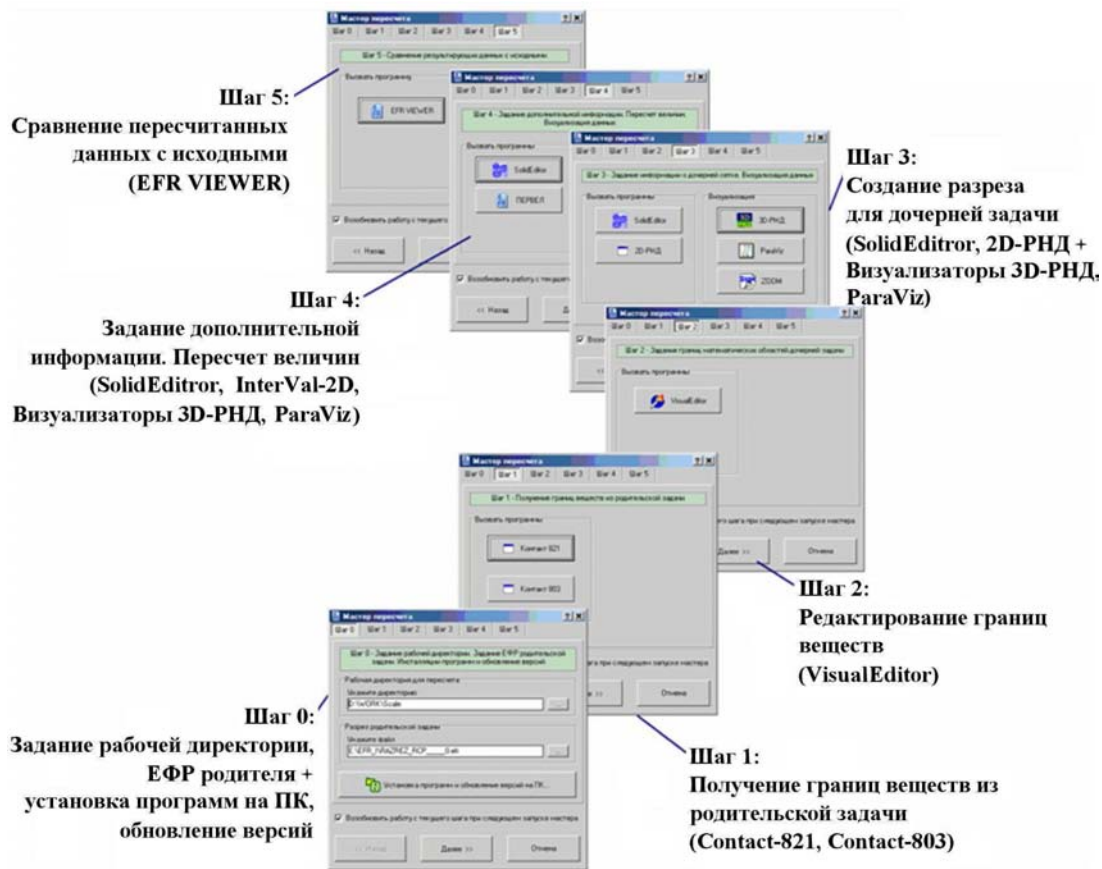


Рис. 2. Глобальный пересчет величин в едином интерфейсе

- формирование контуров границ физических веществ². Выполняется программой Contact-803, создающей файл в формате ЕФР-2 (шаг 1);
- *экспертное* редактирование сформированных контуров в приложении VisualEditor2D (шаг 2). Заключается в сглаживании ломаных, удалении мелких контуров, выполнении необходимых для конкретной математической методики дополнительных построений и т. п.;
- задание в визуальном редакторе SolidEditor2D начальных данных для дочерней задачи (разбиение на математические области, параметры расчетной сетки) с использованием в качестве начальной геометрии контуров границ веществ. Запуск исполняемого файла 2D-РНД после окончания подготовки

начальных данных. Результатом является запись разреза с рассчитанными данными дочерней задачи в формате ЕФР-2 (шаг 3). Отметим, что при имеющихся контурах границ веществ этап формирования начальных данных дочерней задачи не зависит от того, из какой методики получены эти контуры.

3. Выполнение программы глобального пересчета сеточных величин InterVal-2D, в которой задаются параметры пересчета и пересчитываются величины с расчетной сетки задачи-родителя на расчетную сетку дочерней задачи. Результат записывается в файл в формате ЕФР-2 (шаг 4).
4. Контроль качества пересчета: проверка балансов, построение профилей пересчитанных величин, визуальный анализ при помощи графических приложений или аналитический анализ (шаг 5).
5. Продолжение счета в методике, создавшей дочерний файл-разрез.

²Здесь и далее по тексту под контурами границ физических веществ понимаются замкнутые ломаные линии, внутри каждой из которых содержится только одно вещество.

Управление параметрами пересчета с использованием интерфейса программы InterVal-2D

Ключевой частью технологии является программа интерполяции газодинамических величин InterVal-2D. Она создана на базе геометрического метода нахождения объемов пересечения, основанного на явном нахождении вкладов ячеек родительской сетки в ячейки дочерней сетки. Главные принципы пересчета — выполнение законов сохранения массы, импульса и внутренней энергии.

Для проведения пересчета величин необходимо иметь два файла, записанных в формате ЕФР-2. В одном файле — двумерная сетка, на которую будет производиться пересчет величин (необходимым условием является только наличие ее геометрии), в другом — двумерная сетка с полным набором сеточных данных, с этого файла будет производиться пересчет. Результатом работы программы глобального пересчета является файл-разрез в формате ЕФР-2, имя которого можно указать при задании параметров пересчета либо оно сформируется автоматически добавлением к имени файла дочерней задачи окончания `_2D`.

Все параметры пересчета задаются посредством диалога в рамках программы InterVal-2D

(рис. 3). Диалоговое окно представляет собой многостраничную панель вкладок для указания параметров пересчета.

Посредством диалога обеспечиваются следующие возможности:

- выбор файловых разрезов родительской и дочерней задач;
- задание соответствия математических областей;
- формирование списка соответствия номеров веществ в разрезах;
- задание соответствий для копирования областей из родительского ЕФР в результирующий;
- определение фрагментов областей, для которых задаются дополнительные ограничения по пересчету;
- задание интервалов на дочерней сетке, в которые попадает ограниченное количество веществ задачи-родителя;
- указание дополнительных признаков для пересчета (*С учетом начальных данных дочерней задачи, С пересчетом скоростей, С сохранением полной энергии, С подсчетом балансов величин, Переход к другой системе единиц, Пересчет всей задачи* и т. п.).

Для каждой вкладки имеется возможность добавлять, удалять, изменять, сохранять в файле,

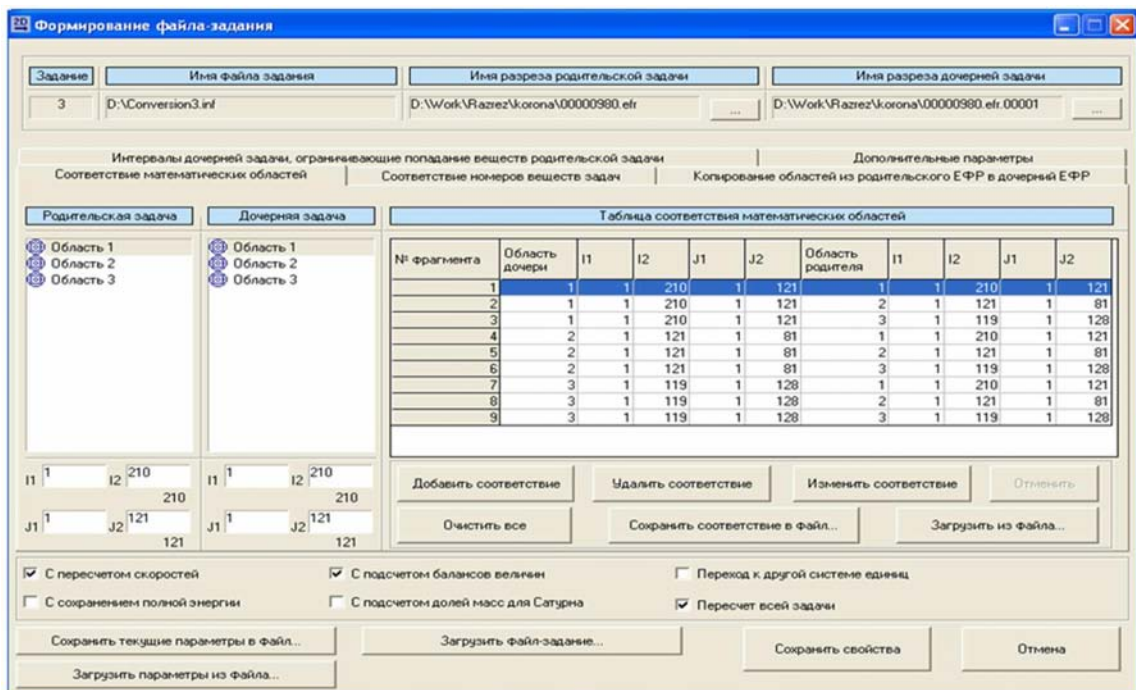


Рис. 3. Диалог задания параметров пересчета

загружать данные из созданных ранее файлов для быстрого и удобного пользования программой. Для задания всех возможных соответствий необходимо отметить признак *Пересчет всей задачи*.

Для контроля точности выполненного пересчета реализована возможность автоматического подсчета балансов массы, объема, внутренней, кинетической и полной энергий.

Следует отметить, что программа InterVal-2D позволяет пересчитывать сеточные величины как в последовательном, так и в параллельном режиме выполнения на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью. Результаты пересчета в обоих режимах полностью совпадают. Эффективность в среднем составляет 60 %, при этом ускорение пересчета зависит от типа задачи и количества процессоров. Время, затрачиваемое на пересчет, зависит от количества точек в задачах и для типичных задач (около 600 тыс. точек) при использовании *последовательного* варианта программы составляет от 10–30 минут до 2 часов на ПК типа Pentium IV 2.4 GHz.

Тестирование программ технологии

Тестирование программы глобального пересчета проводилось неоднократно при подключении к ней новых математических методик.

Отметим, что после модификации программных компонентов технологии и их отладки все этапы глобальной перестройки и пересчета сеточных величин выполнялись исполнителями расчетов без привлечения разработчиков программ пересчета.

Применение технологии будет демонстрироваться на примере расчетов по методике КОРОНА. Эйлера-лагранжева методика КОРОНА расчета двумерных многокомпонентных газодинамических течений разработана для решения многомерных (двумерных, трехмерных) нестационарных задач механики сплошной среды в параллельном режиме на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью.

Здесь приводятся результаты применения данной технологии для двух сложных (многообластных) расчетов.

Пример 1. В качестве первой модельной задачи использовался тест о сходящейся цилиндрической ударной волне [8]. Была выбрана начальная пространственная сетка, нестандартная для данного теста, но типичная для многих

двумерных задач, расчеты которых проводятся в рамках методики КОРОНА. С подобной пространственной сеткой ранее тестировались программы двумерного пересчета сеточных величин при глобальной перестройке расчетной сетки в методике РАМЗЕС [9].

Задача была разбита на три счетных фрагмента. По физической сути вещества в каждом счетном фрагменте одинаковы (идеальный газ), но имеют различные номера. Для первого фрагмента выбрана цилиндрическая сетка, для второго и третьего — сферическая. Начальная пространственная сетка и поле веществ задачи приведены на рис. 4 (см. также цветную вкладку: каждому номеру вещества соответствует свой цвет).

Для проверки функционирования программных компонентов технологии на момент времени $t = 0,3$ была выполнена глобальная перестройка пространственной сетки, заключающаяся в переходе к однофрагментной постановке с приведением сетки к цилиндрическому виду (шаги 0–4 схемы на рис. 2). На рис. 1 приведены расчетные сетки родительской и дочерней задач на момент перестройки.

При выполнении глобального пересчета в программе InterVal-2D были заданы все необходимые параметры. На рис. 5 (см. также цветную

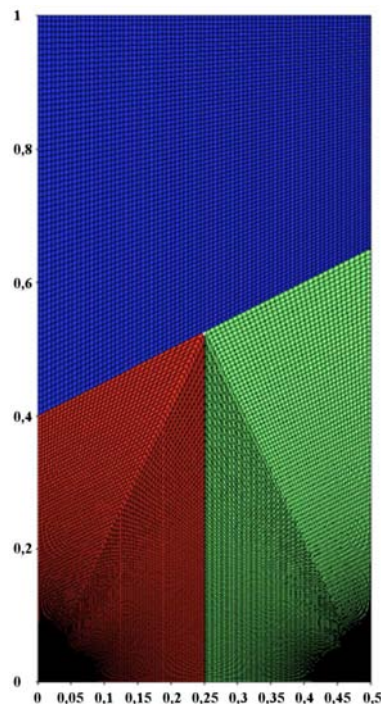


Рис. 4. Расчетная сетка и поле веществ задачи

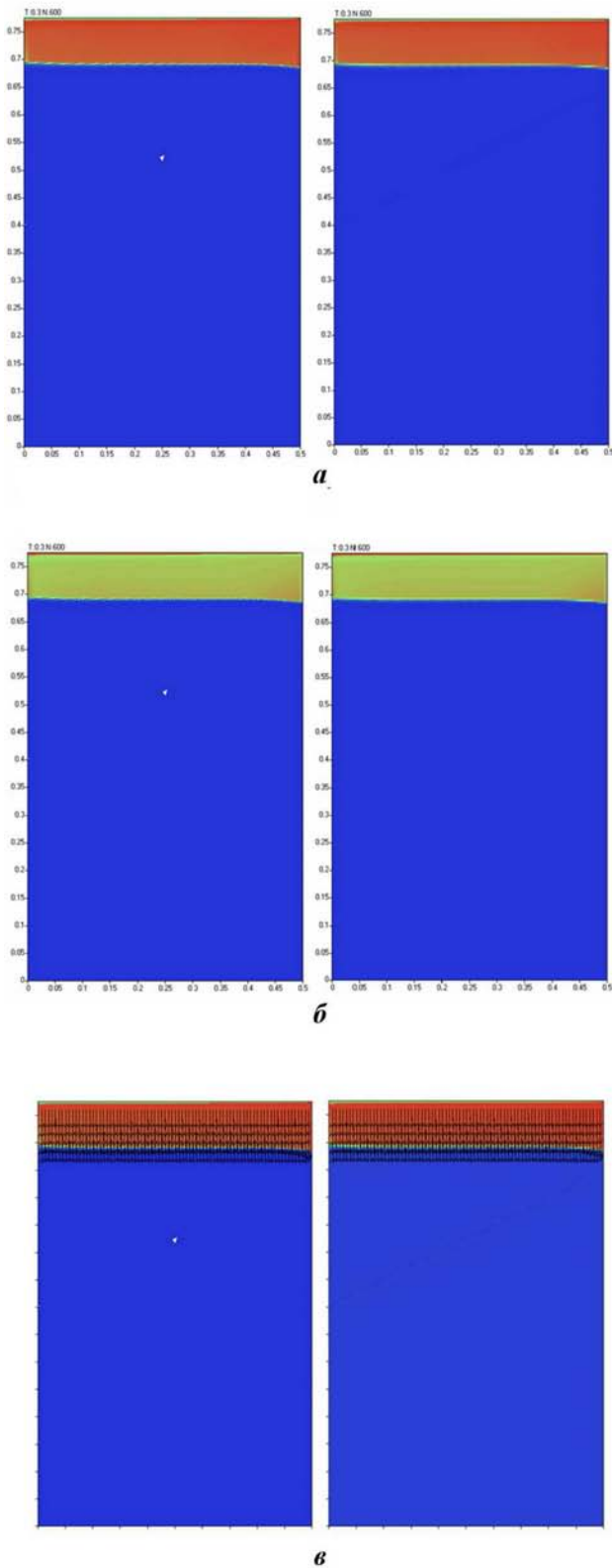


Рис. 5. Поля распределения величин: *a* — плотность; *б* — внутренняя энергия; *в* — скорость, слева — до пересчета; справа — после пересчета

вкладку) приведены поля плотностей, удельных внутренних энергий и скоростей родительской и дочерней задач до и после пересчета сеточных величин. Из рисунка видно приемлемое качество пересчета величин, как скалярных (плотность и внутренняя энергия), так и векторных (скорость).

После визуального контроля качества пересчета был выполнен старт в рамках методики КОРОНА с перестроенного и пересчитанного разреза. Анализ балансных величин, уже в методике КОРОНА, показал практическое сохранение массы и энергии веществ: различия в массе не превышают 0,01 %, а в полной энергии — 0,1 %.

Пример 2. В качестве второй задачи, на которой представлена отработка технологии перестройки, была взята задача, подготовленная по методике Д [10] (задача Хворостина, являющаяся модификацией задачи Steven Test [11]).

На рис. 6, 7 (см. также цветную вкладку) представлены поля плотностей и веществ, а также фрагмент разностной сетки пространственно-временного разреза расчета этой задачи по методике Д, выступающего в качестве родительского.

В соответствии с описанной технологией были выполнены шаги 0–4 схемы, приведенной на рис. 2, т. е. построены контуры веществ из рас-

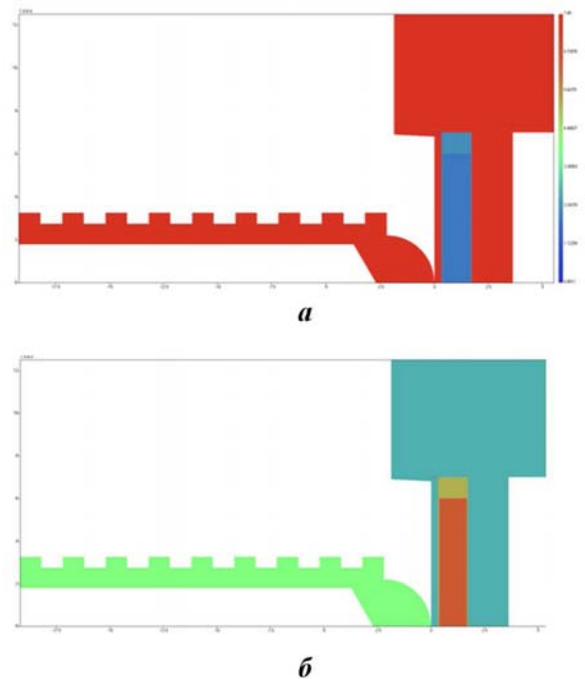


Рис. 6. Поля плотностей (*a*) и веществ (*б*) при расчете тестовой задачи Хворостина по методике Д

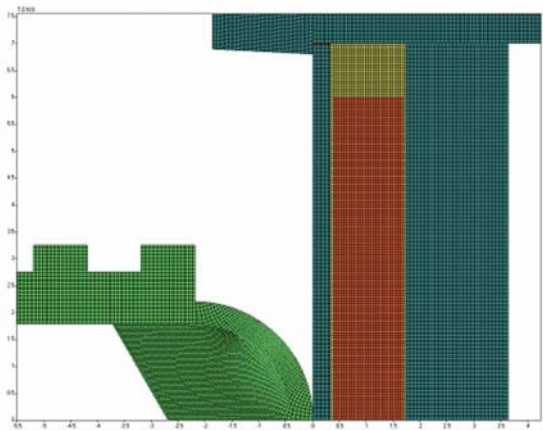


Рис. 7. Фрагмент пространственной сетки в расчете по методике Д

чета по методике Д, и на их основе создан файл-разрез для продолжения расчета по методике КОРОНА. На рис. 8 приведена расчетная сетка дочерней задачи.

При выполнении глобального пересчета в программе InterVal-2D были заданы все необходимые параметры. На рис. 9 приведены поля веществ и плотностей результирующей задачи после пересчета сеточных величин (пустота, имеющаяся в разрезе, полученном по методике Д, после расчета по методике КОРОНА заполнена воздухом). В результате пересчета массы и энергии веществ сохранены с точностью до долей процента.

Сравнение рис. 6 и 9 демонстрирует как приемлемость точности пересчета величин, так и применимость описанной технологии.

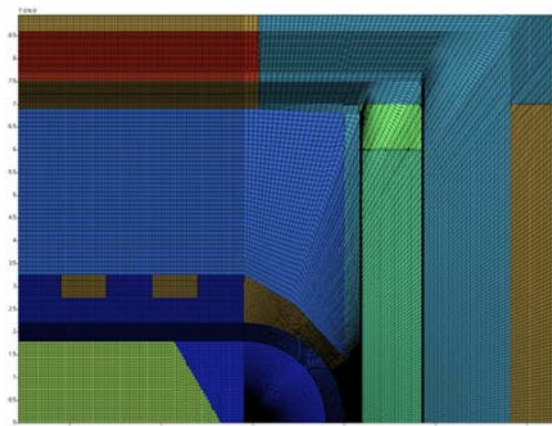
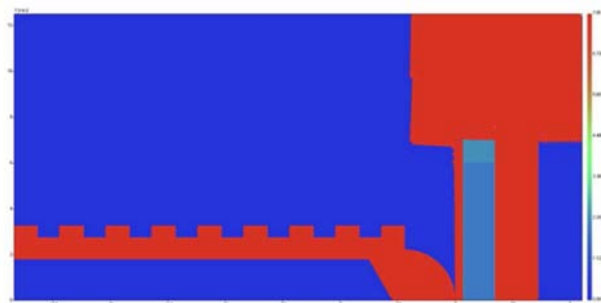
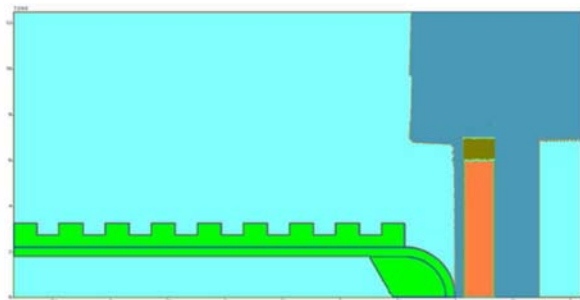


Рис. 8. Фрагмент пространственной сетки в расчете по методике КОРОНА



a



б

Рис. 9. Результирующие поля плотностей (а) и веществ (б) после расчета тестовой задачи Хворостина по методике КОРОНА

Заключение

Полученные результаты дают основание сделать следующий вывод: в настоящий момент все программные компоненты представленной технологии находятся в состоянии, позволяющем применять глобальную перестройку расчетной сетки с пересчетом сеточных величин при проведении сложных многообластных расчетов в рамках методики КОРОНА.

Следует также отметить, что все этапы глобальной перестройки и пересчета сеточных величин в настоящее время выполняются исполнителями расчетов в режиме, отчужденном от разработчиков программ.

Список литературы

1. Скрипник С. И., Рудько Н. М., Королёв Р. А. и др. Численное решение двумерных уравнений газовой динамики с теплопроводностью с использованием переменного по размеру разностного шаблона // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Мате-

- матическое моделирование физических процессов. 2007. Вып. 1. С. 14–26.
2. *Попова Н. В., Деманова А. К.* Программа EFR VIEWER как средство быстрого анализа результатов численного моделирования физических процессов // Сб. докл. VI науч.-тех. конф. "Молодежь в науке". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2007. С. 155–159.
 3. *Черенков П. В., Борисенко О. Н., Черенкова М. В. и др.* Технология подготовки в унифицированном виде начальных данных двумерных задач по программам SolidEditor и 2D-РНД // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 1. С. 60–67.
 4. *Борисенко О. Н., Сергеева А. С.* Программа расчета начальных данных двумерных задач // Сб. докл. VI науч.-тех. конф. "Молодежь в науке". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2007. С. 28–31.
 5. *Потехин А. Л., Тарасов В. И., Фирсов С. А. и др.* ScientificView — параллельная система постобработки результатов, полученных при численном моделировании физических процессов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2008. Вып. 4. С. 37–45.
 6. *Henderson A., Ahren J., Law Ch. et al.* The ParaView guide. Kitware Inc., 2004.
 7. *Волгин А. В., Красов А. В., Кузнецов М. Ю., Тарасов В. И.* Библиотека ЕФР для универсального представления расчетных данных // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2007. Вып. 11. С. 130–135.
 8. *Бондаренко Ю. А., Воронин Б. Л., Делов В. И. и др.* Описание системы тестов для двумерных газодинамических методик и программ. Ч. 1. Требования к тестам. Тесты 1–7 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 2. С. 3–9.
 9. *Козуб А. Г., Пронина О. А.* Глобальная перестройка расчетной сетки и пересчет величин в комплексе программ РАМЗЕС // Там же. 2000. Вып. 1. С. 55–61.
 10. *Софронов И. Д., Делов В. И., Дмитриева Л. В. и др.* Методика Д для расчета многомерных задач механики сплошной среды в переменных Лагранжа на регулярной сетке // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2001. Вып. 1. С. 102–113.
 11. *Idar D. J., Lucht R. A., Scammon V. R. et al.* PBX 9501 High Explosive Violent Response / Low Amplitude Insult Project: Phase I. LANL report LA-13164-MS, 1997.

Статья поступила в редакцию 27.08.10.