

УДК 519.6

## ИНТЕГРИРОВАННАЯ СИСТЕМА СОПРОВОЖДЕНИЯ СЧЕТА ЗАДАЧ В ПАКЕТЕ ПРОГРАММ ЛЭГАК-3D

П. А. Авдеев, М. В. Артамонов, С. М. Бахрах, С. В. Величко,  
В. Ф. Спиридонов, М. М. Пристап  
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Рассматривается сервисная часть пакета программ ЛЭГАК-3D, предназначенная для подготовки задач, сопровождения расчетов и постобработки результатов счета. Возможности представленной системы, помимо визуализации в различных видах и редактирования всех компонентов задачи, включают высокоуровневые операции над этими компонентами (конструирование) — перенос компонентов из одной задачи в другую с добавлением или заменой имеющихся. Анализ результатов счета задач обеспечивается как операциями контекстного меню в процессе отображения данных, так и отдельными инструментальными средствами (в том числе с использованием внешних приложений).

*Ключевые слова:* пакет программ ЛЭГАК-3D, сопровождение расчетов, обработка результатов счета задач, разрез задачи.

### Введение

В условиях проведения массового счета задач на многопроцессорных вычислительных комплексах актуальным является повышение технологичности и эффективности проведения расчетов, а именно существенное сокращение трудозатрат на подготовку расчетов, их выполнение и постобработку результатов счета.

Пакет программ ЛЭГАК-3D предназначен для расчета сложных газодинамических течений сплошной среды с большими деформациями контактных границ в двумерной и трехмерной постановках и состоит из счетной и сервисной частей [1]. Счетная часть обеспечивает моделирование физических процессов на многопроцессорных вычислительных комплексах (суперЭВМ) и персональных компьютерах (ПК). Сервисная часть (или просто сервис) — система, предназначенная для подготовки задач, сопровождения расчетов и постобработки результатов.

Сервис является Windows-приложением и функционирует только на ПК. При этом в нем специально предусмотрены и реализованы средства, обеспечивающие обработку результатов счета больших задач в многопроцессорном режиме.

Сервисная часть пакета программ ЛЭГАК-3D является интегрированной системой. Интеграция сервиса означает:

- обработку данных на всех этапах проведения расчета;
- многофункциональную обработку в едином интерфейсе всех данных, включая управляющие и структурные (несеточные) компоненты;
- необходимые средства для обработки (включая чтение, запись) данных в сторонних форматах;
- взаимодействие с внешними приложениями для необходимой обработки данных в автоматическом режиме.

Настоящая статья является первой, обзорной публикацией по сервисной части пакета программ ЛЭГАК-3D.

### Основные задачи сервиса

Сервис пакета программ ЛЭГАК-3D является единым инструментом для подготовки задач, сопровождения расчетов и постобработки.

Сервис обеспечивает следующие основные функции:

1. Подготовка расчета. Обеспечивается задание параметров веществ (УРСы, пробеги и др.), списка счетных программ и их параметров, таблицы прерываний (директив управления счетом) и т. п. При этом большое значение имеют высокоуровневые операции над компонентами задачи — перенос компонентов из одной задачи в другую с добавлением или заменой имеющихся. Такие операции позволяют существенно сократить трудозатраты при подготовке серий расчетов.
2. Отображение данных в числовом и графическом видах. Предоставляется широкий набор операций по обработке данных и настройке видов отображений.
3. Анализ результатов счета задач. Обеспечивается как операциями в процессе отображения данных, так и отдельными инструментальными средствами (в том числе с использованием внешних приложений).
4. Внешние связи с другими приложениями, требуемыми для подготовки данных, выполнения расчетов, обработки и визуализации. Такие связи реализуются через файлы различных форматов. Многие из этих приложений можно вызвать из сервиса в полуавтоматическом режиме.
5. Получение справочной информации. Кроме стандартных средств помощи (всплывающие подсказки, подсказки в строке состояния, справка о функциональности, вызываемая клавишей F1), обеспечиваются дополнительные возможности — получение справочной информации по пакету программ ЛЭГАК-3D и расширенное описание некоторых компонентов.

### Основные принципы и особенности реализации

Сервис пакета программ ЛЭГАК-3D предназначен для обработки как трехмерных, так и двумерных задач. При проектировании и реализации сервиса учитывался накопленный опыт реализации и развития сервиса пакета программ ЛЭГАК-2D [2].

Основные принципы, используемые при реализации:

1. Виртуальное чтение. Это означает, что распределение памяти под ресурсоемкие компоненты и непосредственное чтение таких

компонентов из файла выполняется только тогда, когда в этом появляется необходимость. Как только необходимость в компоненте отпадает, занятая им память освобождается. Указанный принцип реализуется прежде всего для величин, определенных на счетной сетке.

2. Фрагментация данных, определенных на регулярной счетной сетке. В силу возможного большого объема подобных данных их обработка осуществляется пофрагментно. В общем случае для визуализации (как числовой, так и графической) используется фрагмент данных, определяемый заданными в каждом конкретном случае начальными и конечными индексами строк, столбцов и, в трехмерном случае, листов счетной сетки.
3. Полное сохранение возможностей двумерной визуализации величин (как числовой, так и графической), имеющихся в сервисе пакета программ ЛЭГАК-2D. Визуализация трехмерных компонентов предоставляется для их двумерных сечений (т. е. при фиксированном значении одного из индексов). Для трехмерной визуализации используются программы РФЯЦ-ВНИИЭФ общего назначения.
4. Контроль целостности и непротиворечивости данных задачи.

### Интерфейс пользователя

Интерфейс с пользователем обеспечивается в терминах компонентов разреза задачи. Здесь и далее *разрез* — совокупность данных задачи на определенный момент времени, *компонент* — связанная совокупность этих данных (например, *Шапка задачи*, *Шапка области*, *массив*, *счетная программа и ее параметры*). Многооконный интерфейс предоставляет возможность работать одновременно с несколькими разрезами, данными из разных областей, отображать данные в числовом и графическом видах.

Подавляющая часть редакторов компонентов разреза, реализованных с помощью диалоговых окон, работает в *модальном* режиме. Вызвав модальное диалоговое окно, пользователь не может работать с другими средствами сервиса, пока не закроет это окно. Вместе с тем для некоторых диалоговых окон в сервисе реализован *немодальный* режим.

Для удобства работы в сервисе пользователю предоставляются панели инструментов (как главная, так и локальные в окнах просмотра), контекстные меню. Некоторые параметры интерфейса могут быть настроены пользователем и сохранены для последующих сеансов. Многие операции с данными могут быть выполнены различными способами (по выбору пользователя): с помощью мыши, клавиатуры, специальных кнопок и т. д.

### Общий состав данных

В разрезе ЛЭГАК-3D содержатся компоненты более 30 различных типов. Компоненты одного типа объединены в списки. Разрез имеет иерархическую структуру, схематический вид которой показан на рис. 1. Помимо иерархических связей, между некоторыми компонентами имеются логические связи. Например, ряд счетных программ требует наличия в разрезе необходимых этим программам массивов и/или наборов констант (рис. 2). В общем случае компоненты в файле разреза размещены последовательно в определенном порядке.

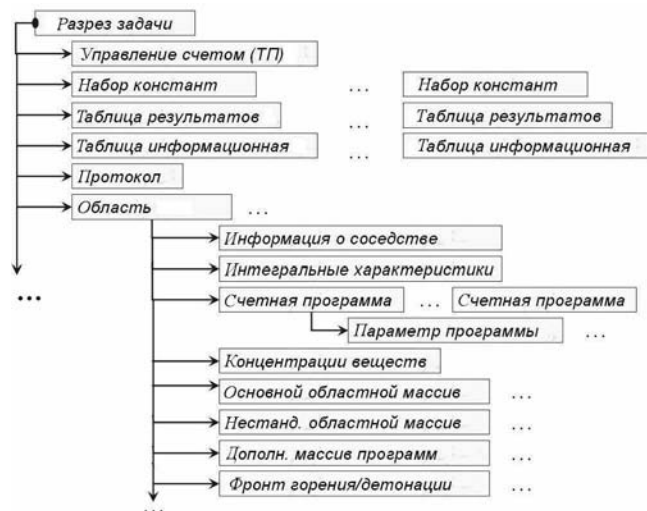


Рис. 1. Общая структура данных разреза ЛЭГАК-3D

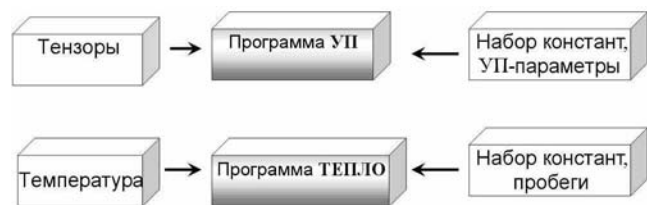


Рис. 2. Зависимости компонентов разреза ЛЭГАК-3D

### Главное окно

При открытии разреза на экран выводится главное окно разреза (рис. 3). Окно состоит из двух частей. В левой части окна в виде иерархической древовидной структуры отображаются компоненты разреза — дерево разреза. В правой части окна в текстовом виде отображаются некоторые данные по задаче.

Помимо отображения состава разреза, дерево разреза имеет важное функциональное назначение. Оно служит для реализации альтернативных операций вызова средств просмотра/редактирования (так называемый быстрый вызов). Кроме того, некоторые элементы дерева разреза можно перемещать из одного разреза в другой с добавлением или заменой существующих компонентов. Такая возможность позволяет существенно сократить трудозатраты на подготовку серий расчетов.

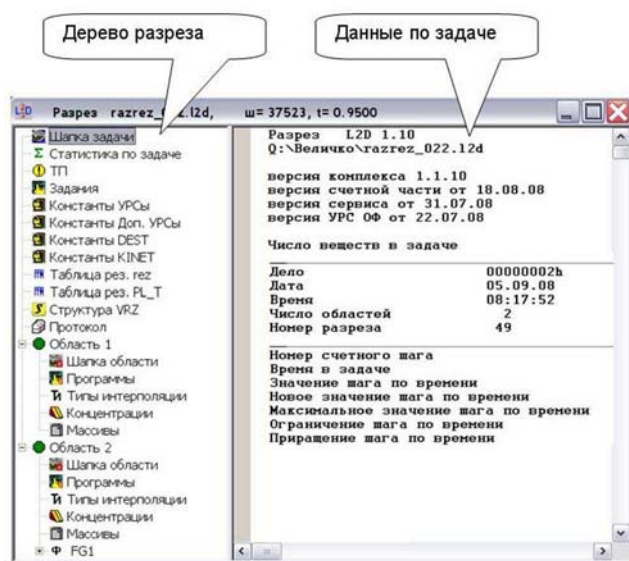


Рис. 3. Главное окно разреза

### Просмотр и редактирование компонентов

Для просмотра и/или редактирования компонентов разреза используются соответствующие диалоговые окна и окна просмотра. Рассмотрим некоторые из них.

**Таблица прерываний (ТП).** Служит для управления счетом задачи по пакету программ

ЛЭГАК-3D. ТП состоит из операторов. Каждый оператор включает в себя условие и приказы. Как условия, так и приказы могут иметь параметры.

Основной диалог для редактирования ТП отображается в окне (рис. 4). В левой части диалогового окна размещены три списка. Верхний список содержит допустимые условия прерывания, следующий — допустимые приказы, нижний — параметры для текущего (выбранного в ТП) приказа.

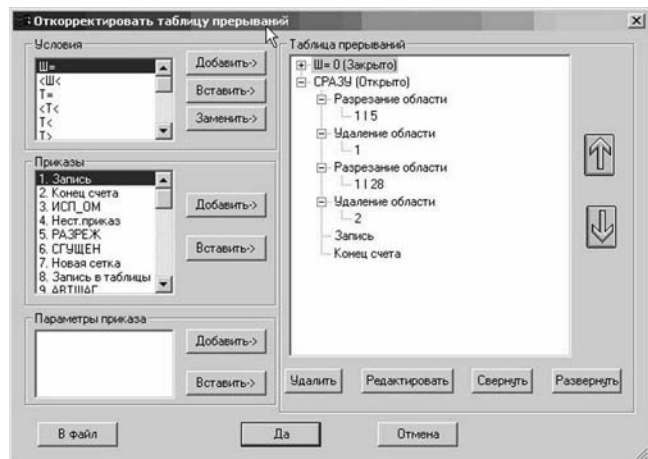


Рис. 4. Основное диалоговое окно для редактирования ТП

**Наборы констант.** Окно просмотра и редактирования набора констант имеет панель инструментов, полосу заголовков столбцов и поле для отображения групп констант. Для этого окна имеется также контекстное меню (рис. 5).

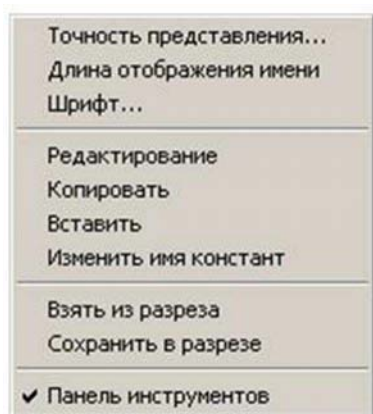


Рис. 5. Контекстное меню окна просмотра и редактирования набора констант

Команды *Копировать* и *Вставить*, имеющиеся в контекстном меню и на панели инструментов сервиса, позволяют соответственно скопировать выделенные группы констант, а затем вставить их вместо других групп констант в текущем или другом разрезе. Это можно выполнить и с помощью технологии *Drag and Drop* (перемещение с помощью мыши).

**Таблицы результатов.** Предназначены для накопления результатов счета задачи по выбору пользователя. Сервис обеспечивает следующие операции с таблицами: создание, создание по образцу, редактирование структуры таблицы, удаление таблицы, удаление всех записей таблицы, экспорт в текстовый файл, просмотр.

**Протокол.** При анализе проведения расчета полезно знать, в какой момент расчета какие параметры задачи были изменены. Протокол предназначен для автоматизации отслеживания изменений. Занесение в протокол информации происходит при изменении пользователем компонентов задачи в сервисе.

Для просмотра протокола изменений компонентов задачи следует в меню *Данные* выбрать пункт *Протокол* или выбрать соответствующий элемент дерева в главном окне разреза.

**Параметры счетных программ.** Список счетных программ области определяется независимо для каждой области и отражает состав и последовательность вызова счетных программ для данной области, а также список параметров каждой программы. В диалоговом окне (рис. 6) для просмотра/редактирования данного компонента отображаются:

- имя текущего разреза;
- номер текущей области;
- список зарегистрированных счетных программ;
- список программ для данной области;
- список параметров текущей (отмеченной) программы;
- окно подсказки (справа от списка параметров программы);
- кнопки выполнения операций.

С помощью полей, отображающих имя разреза и область, можно переключаться на редакти-



Рис. 6. Редактор списка счетных программ и их параметров

рование другой области (другого разреза). Редактор программ работает в немодальном режиме. Это значит, что одновременно пользователь может работать с несколькими редакторами. Редактор позволяет добавлять и удалять программы в списке, изменять последовательность вызова программ, их статус ("+" — программа включена, "-" — выключена), изменять значения параметров, дублировать программу в списке.

**Величины на счетной сетке.** Для просмотра в числовом виде величин на счетной сетке и/или их редактирования следует задать контекст просмотра с помощью диалогового окна (рис. 7), содержащего окна:

- с именем текущего разреза;
- выбора величины из списка древовидной структуры;
- выбора вида отображения;
- текущих настроек;
- выбора номера области;
- выбора фрагмента счетной сетки.

Для просмотра фрагмента следует задать необходимые диапазоны строк/столбцов/листов и значения дополнительных размерностей (для кратных величин, имеющих, кроме основных размерностей сетки, дополнительные). При этом для трехмерных величин можно фиксировать

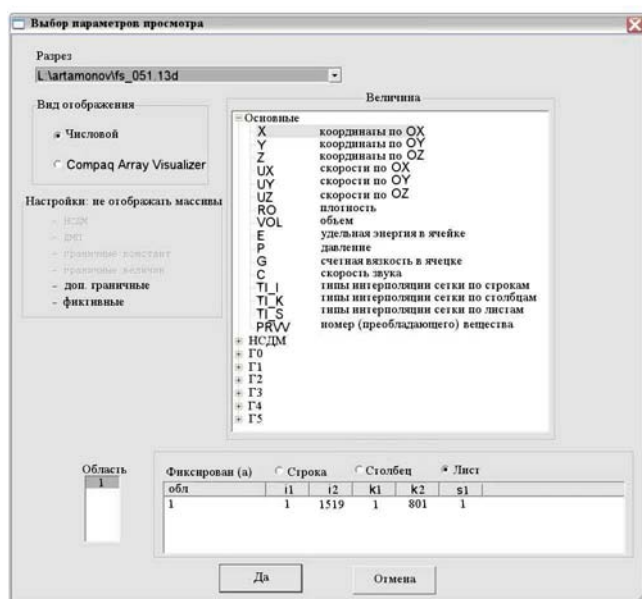


Рис. 7. Диалоговое окно для выбора величины

один из индексов: лист (по умолчанию), строку или столбец.

При просмотре величины обеспечиваются, в частности, следующие функции:

- определение минимального и максимального значений в массиве, их индексов и переход к максимальному или минимальному значению в окне отображения — команда *Интервал значений*;
- возможность изменения любого элемента или прямоугольного блока массива при включении редактирования;
- переключение при просмотре вещественного массива на просмотр:
  - радиусов узлов сетки — команда *Радиусы R*;
  - радиальной компоненты скорости — команда *Радиальные скорости UR*;
  - компоненты скорости, ортогональной радиальной компоненте и параллельной листу, — команда *Тангенциальные скорости UT*;
  - компоненты скорости, ортогональной листу, — команда *Ортогональная листу компонента скорости UTO*;
  - модуля скорости — команда *Модуль скорости |U|*;
- вычисление интеграла от величины по фрагменту в предположении, что ее значения

во всех листах совпадают со значениями в отображаемом листе — команда *Интеграл по блоку*;

- отображение разности массивов, если есть другой открытый разрез и в нем есть массив с теми же параметрами (область, размеры), что и у просматриваемого, — команда *Вычитание*.

**Концентрации веществ.** Просмотр значений концентраций веществ аналогичен просмотру сеточных величин. Однако редактирование осуществляется по-другому. Редактировать в отдельности любую величину, связанную с концентрациями, запрещено. Можно отредактировать лишь набор величин в целом по ячейке.

Диалоговое окно для редактирования концентраций показано на рис. 8. Оно содержит список веществ области, где для каждого вещества, кроме его номера, указаны объемная концентрация, плотность, удельная энергия и массовая плотность. В данном списке можно менять объемные концентрации, плотности и удельные энергии веществ. С помощью диалога можно изменить также значения концентраций в блоке ячеек, т. е. в ячейках с заданными диапазонами индексов. При этом будут вычислены остальные величины и во все ячейки блока будут занесены новые данные о концентрациях. При вычислении остальных величин производится контроль корректности введенных данных.

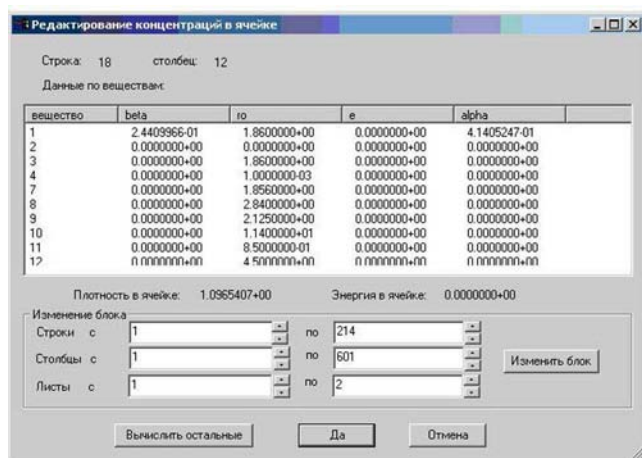


Рис. 8. Диалоговое окно для редактирования концентраций в ячейке

**Линии (поверхности) инициирования/детонации.** Поверхности инициирования/детонации представляют собой одномерные массивы координат точек и вспомогательных величин (например, времен задержек инициирования/детонации) и используются в соответствующих счетных программах. В пакете программ ЛЭГАК-3D они называются *фронтами*.

После выбора нужной области и фронта отображается окно для просмотра и редактирования фронта.

На рис. 9 приведено контекстное меню окна просмотра и редактирования фронта.

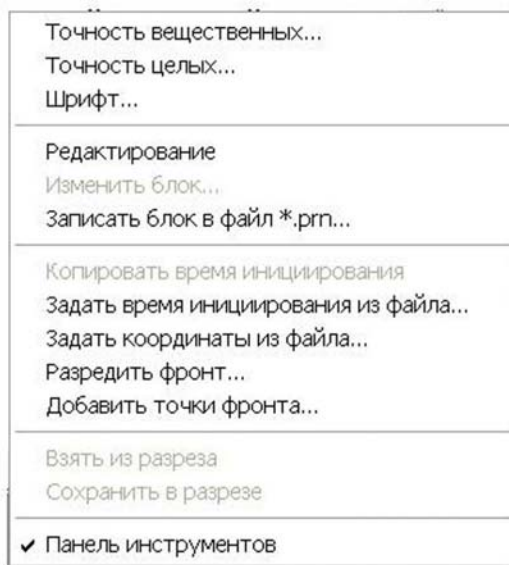


Рис. 9. Контекстное меню окна просмотра и редактирования фронта

## Накопление результатов

Подсистема накопления результатов пакета программ ЛЭГАК-3D включает следующие возможности:

- регистрацию заданий на накопление результатов;
- формирование заданий на накопление результатов счета в сервисной части. Задания на накопление сохраняются в разрезе;
- накопление результатов в процессе проведения расчета в счетной части и их запись в разрез;
- визуализацию полученных результатов в сервисной части.

Результаты по заданиям в зависимости от типа задания накапливаются либо в массивах, либо в таблицах результатов. Вызов просмотра накопленных по заданиям результатов выполняется из редактора заданий. Редактор заданий аналогичен редактору списка счетных программ и их параметров (см. рис. 6).

Для отображения накопленных в массиве результатов в числовом виде используется стандартное окно просмотра массивов. При выборе типа просмотра *Compaq Array Visualizer* вызывается приложение *Compaq Array Visualizer*, в котором будет представлено числовое и графическое отображение массива с соответствующими накопленными результатами по заданию. На рис. 10 показан вид окна приложения на примере некоторого накопленного результата.

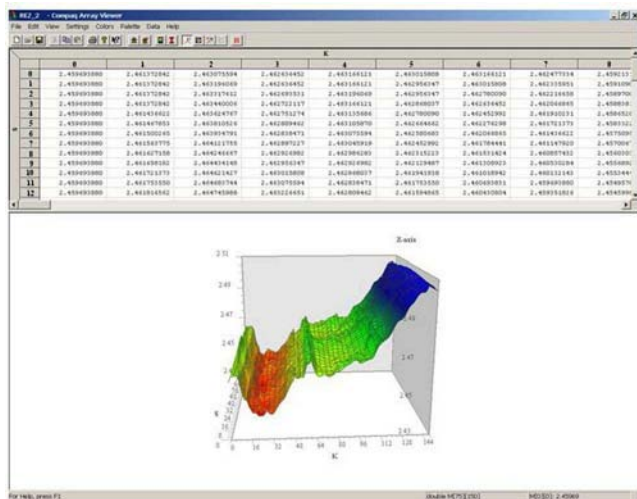


Рис. 10. Отображение накопленных по заданию результатов с помощью приложения *Compaq Array Visualizer*

## Инструментальные средства

**Графические отображения.** В сервисе ЛЭГАК-3D реализован просмотр нескольких видов двумерных графических отображений начального разреза и результатов счета, которые можно совмещать, а именно:

- сетки — отображаются ячейки счетной сетки в виде незакрашенных четырехугольников;
- декомпозиции задачи по процессорам — отображается не вся сетка, а только грани-

цы частей сетки, обчислываемых на каждом процессоре;

- распределения веществ (так называемого *поля веществ*) — каждый четырехугольник сетки отображается цветом, связанным с веществом, находящимся в ячейке, если ячейка чистая, т. е. содержит одно вещество. Смешанные ячейки, т. е. ячейки, содержащие более одного вещества, могут отображаться белым или черным цветом или цветом, связанным с веществом, имеющим в ячейке наибольшую объемную концентрацию, а также возможно их отображение с восстановленной методом Янга контактной границей;
- распределения значений ячеечных величин (так называемая *пиксельная графика*) — каждый четырехугольник сетки отображается цветом, зависящим от значения выбранной величины (массива) в этой ячейке;
- изолиний — отображаются линии уровня выбранной ячеечной величины (массива). Цвет линии зависит от значения величины на этом уровне.

Нельзя совмещать сетку и декомпозицию задачи по процессорам, а также поле веществ и пиксельную графику. Для просмотра всегда фиксируется один из индексов (лист, строка или столбец) и для каждой области выбираются диапазоны по остальным индексам (фрагмент). При всех видах графического просмотра может отображаться сетка целиком, только по строкам, только по столбцам или декомпозиция задачи по процессорам. При этом изображение можно масштабировать. Можно также выбрать прямоугольный фрагмент для просмотра с помощью мыши или явно, задав координаты области просмотра. Интерфейс с пользователем при любом виде графического просмотра единый.

Функциональность при просмотре графических отображений обеспечивается (с помощью панели инструментов и контекстного меню), в частности, командами, позволяющими:

- изменять параметры отображения;
- отображать проекцию на плоскость  $XU$ , сетку, декомпозицию задачи, контуры, фронты;
- отображать сетку стандартно, по строкам или по столбцам;
- задавать список величин для просмотра;
- изменять цвета веществ;

- определять динамическую палитру для пиксельной графики и изолиний;
- редактировать, копировать, вставлять концентрации;
- строить профиль величины по отрезку;
- отображать расстояние между точками;
- сохранять в формате BMP, JPG;
- сформировать список файлов для фильма;
- создавать фильм.

**Конвертирование.** Управление конвертированием разрезов формата ЛЭГАК-3D в формат ЕФР [3, 4] осуществляется при помощи диалогового окна, показанного на рис. 11.

По умолчанию конвертируются значения трех массивов координат счетной сетки и массива признаков веществ в ячейках. Конвертирование всех остальных массивов производится по выбору пользователя.

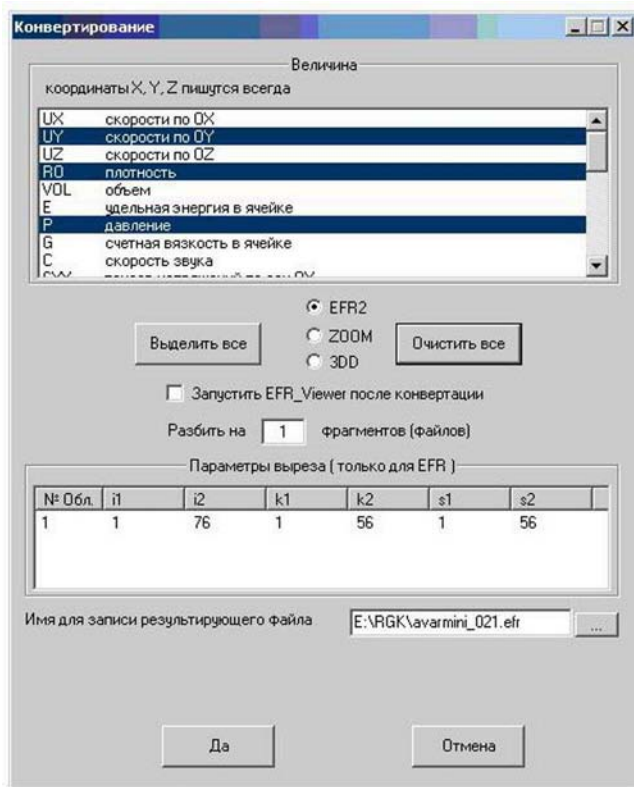


Рис. 11. Управление конвертированием

**Сравнение разрезов.** Сравнение двух разрезов заключается в нахождении абсолютных минимумов и максимумов разностей сеточных

величин (массивов) и разностей некоторых скалярных величин. Сравнение разрезов происходит в отдельном потоке, поэтому при выполнении этой операции можно продолжить работу с сервисом. Но запустить сравнение разрезов можно только в одном экземпляре. Результат сравнения разрезов отображается в диалоговом окне.

**Поиск экстремальных значений величин.** Поиск экстремальных значений заключается в нахождении и отображении абсолютных минимумов и максимумов сеточных величин (массивов) и отображении некоторых скалярных величин разреза. Диалог поиска экстремальных значений разреза аналогичен диалогу сравнения разрезов.

**Групповая обработка.** Групповая обработка разрезов предназначена для автоматизированного получения необходимой информации при постобработке результатов счета задач из множества разрезов. Обеспечено два вида групповой обработки:

- выборка заданных величин с возможностью автоматического вызова MS Excel для просмотра полученных результатов. Если в диалоге включен флаг *Построить диаграмму*, вместе с данными на рабочий лист MS Excel будет выведена точечная диаграмма по этим данным;
- конвертирование разрезов в формат ЕФР.

**Оценка декомпозиции.** Данная возможность позволяет предварительно оценить сбалансированность расчета задачи на том или ином числе процессоров. При этом допустимо задание как фиксированного числа процессоров, так и произвольного диапазона.

## Заключение

Кратко описаны основные функциональные возможности сервиса ЛЭГАК-3D по подготовке задач к счету, сопровождению расчетов и постобработке результатов расчетов. Функциональность сервиса ЛЭГАК-3D обеспечивает массовый счет основного класса задач в двумерной и трехмерной постановках.



Имеющаяся в сервисе ЛЭГАК-3D возможность читать данные в формате ЕФР позволяет применять его пользователям других счетных комплексов, использующим регулярную четырехугольную или шестигранную счетную сетку.

### Список литературы

1. *Бахрах С. М., Величко С. В., Спиридонов В. Ф. и др.* Методика ЛЭГАК-3D расчета трехмерных нестационарных течений многокомпонентной сплошной среды и принципы ее реализации на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2004. Вып. 4. С. 41–50.
2. *Авдеев П. А., Артамонов М. В., Бахрах С. М. и др.* Комплекс программ ЛЭГАК для расчета нестационарных течений мно-

гокомпонентной сплошной среды и принципы реализации комплекса на многопроцессорных ЭВМ с распределенной памятью // Там же. 2001. Вып. 3. С. 14–18.

3. *Волгин А. В., Тарасов В. И., Красов А. В., Кузнецов М. Ю.* Единый файловый разрез (ЕФР) для универсального представления расчетных данных // Прикладная геометрия, построение расчетных сеток и высокопроизводительные вычисления. Т. 2. М.: ВЦ им. А. А. Дородницына РАН, 2004. С. 220–225.
4. *Волгин А. В., Тарасов В. И., Красов А. В., Кузнецов М. Ю.* Библиотека ЕФР для универсального представления расчетных данных // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2007. Вып. 11. С. 130–135.

Статья поступила в редакцию 27.04.10.

---