

Информационная поддержка задач компьютерного моделирования высокоскоростного взаимодействия твердых тел

К.К. Абгарян, Е.С. Гаврилов, А.М. Марасанов

Аннотация — Для решения ресурсоемких задач компьютерного моделирования высокоскоростного взаимодействия твердых тел применяются современные информационные технологии. Описываются разработанные для решения данного класса задач средства информационной поддержки, с включенными в ее контур вычислительными модулями, ориентированными на высокопроизводительные вычислительные комплексы.

Ключевые слова — информационные технологии, высокопроизводительные вычисления, расчетные модули, квантово-механические и молекулярно-динамические расчеты.

I. ВВЕДЕНИЕ

Применение и активное развитие информационных технологий в решении ресурсоемких задач структурного материаловедения на базе теории кристаллографии и технологии молекулярной динамики является важной и востребованной проблемой. В настоящее время, наметилась устойчивая тенденция интеллектуализации вычислительного эксперимента и создания комфортных условий его проведения, что подтверждает актуальность разработки средств информационной поддержки с включенными в ее контур вычислительными алгоритмами и модулями, ориентированными на высокопроизводительные ЭВМ.

В последнее время все больший интерес проявляется к детальному изучению механизмов высокоскоростного взаимодействия твердых тел. Мощным средством проведения работ в данном направлении является компьютерное моделирование. При этом необходимо применять методы многоуровневого математического моделирования, учитывающие сложный комплекс протекающих в ходе внедрения взаимосвязанных физико-химических процессов, учитывающих структуру и химический состав взаимодействующих тел [1]. На текущий момент наибольшее распространение получили модели, основанные на законах сохранения для сплошных сред [2-4]. Однако весьма перспективным в настоящее время

представляется использование дискретно-элементного подхода для компьютерного моделирования задач высокоскоростного взаимодействия твердых тел, базирующегося на методах молекулярной динамики. Использование современных потенциалов, учитывающих характер химических связей взаимодействующих твердых тел при молекулярно-динамическом моделировании, дает возможность существенно повысить точность моделирования [5-7]. При этом, задача параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия является весьма сложной и затратной с точки зрения вычислительных ресурсов [8]. Для проведения квантово-механических расчетов атомно-кристаллической структуры и электронных свойств многокомпонентных соединений [9] широко применяется программный комплекс VASP (<http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>).

С одной стороны, компьютерное моделирование в задачах молекулярной динамики требует подготовки, манипулирования и хранения значительного объема достоверных данных, что предполагает активное использование современных технологий проектирования систем реляционных баз данных (БД), проведение большого количества параметрических исследований и анализа различных вариантов. При этом, дружелюбность интерфейса должна обеспечиваться развитой сервисной оболочкой.

С другой стороны, при решении задач структурного материаловедения активное развитие получили идеи высокоскоростной обработки на базе высокопроизводительных вычислительных комплексов кластерной архитектуры. Количество прикладных программ, адаптируемых в вычислительную среду многопроцессорных и многоядерных систем, постоянно растет. Методы активного распараллеливания, применяемые к вычислительным алгоритмам, должны сочетаться с развитыми средствами информационной поддержки этих задач в контурах распределенной архитектуры с выделением средств хранения, манипулирования и апробации данных в локальные и, по возможности, автономные подсистемы.

При создании средств информационной поддержки компьютерного моделирования высокоскоростного взаимодействия твердых тел применялись следующие принципы [10]:

- всесторонний анализ информационных потребностей предметной области;

К.К.Абгарян работает в ВЦ РАН и МАИ (e-mail: kristal83@mail.ru).
М.А.Марасанов работает в МАИ (e-mail: mar@mail.ru).
Е.С.Гаврилов работает в ВЦ РАН и МАИ(e-mail: eugavrilov@gmail.com)

- активное использование технологий проектирования систем реляционных баз данных;
 - учет необходимости функционирования системы в различных режимах (локальные и удаленные параметрические исследования, апробация данных и др.);
 - гибкость информационного обеспечения;
 - учет специфики прикладных модулей (их классификация, реакция на внешнее управление, характер и свойства итерационных алгоритмов, загрузка исходных данных, сохранение значимых результатов расчетов);
 - ясность и понятность пользователю, логичность процесса моделирования;
 - надежность и информативность функционирования.
- Эти принципы позволили выработать понятийный базис, ограничить круг рассматриваемых процессов, выделить минимальный объем необходимых данных и разработать соответствующую архитектуру системы.

II. АРХИТЕКТУРА СИСТЕМЫ

Архитектура информационной поддержки разработана на базе известного подхода "stand alone". В ее основу положен принцип автономной и по возможности независимой подготовки различных типов данных с их последующим согласованием на этапе формирования расчетного варианта (рис.1).

Данные были декомпозированы по их свойствам на ряд подмоделей: справочники, варьируемые параметры, числовые массивы. Эта семантическая классификация была обобщена для всех задач, охватываемых информационной поддержкой. На ее основе был определен состав, назначение и функции соответствующих подсистем информационной поддержки (см. рис. 1), а также порядок обработки входных и выходных данных, стратегия обращений к базе данных и к файлам обмена данными с расчетными модулями.

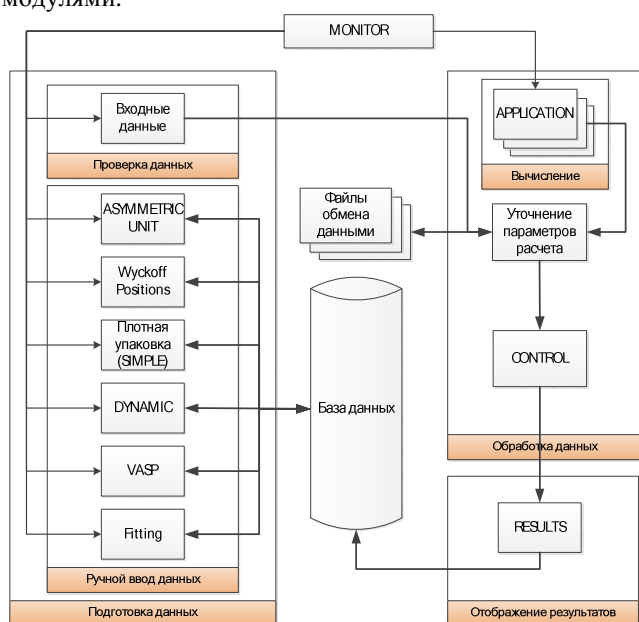


Рис. 1. Макро - архитектура системы

Связь по управлению в системе осуществляется системным монитором. Asymmetric Unit и Wyckoff positions - подсистемы поддержки справочников

кристаллографических данных. Блоки информационной поддержки "Плотной упаковки", "Динамического взаимодействия", "VASP" и "Fitting"(в перспективе) обеспечивают задание начальных данных расчета с выгрузкой из БД, согласованного с задачей контента.

Компонента архитектуры APPLICATION определяет каталог задач функционального наполнения системы. При необходимости, поддерживается режим импорта/экспорта данных между этапами вычислительного эксперимента, а также "обратная связь" от вычислительных модулей. Она предназначена для оперативного изменения варьируемых входных параметров, влияющих, например, на скорость или сходимость расчета.

Логическая компонента CONTROL включена в архитектуру информационной поддержки для выполнения важнейшей операции по согласованию ранее подготовленных данных. Если в подсистемах подготовки данных контроль правильности задания информации осуществляется по правилам ограниченной целостности в рамках соответствующей подмодели данных, то подсистема CONTROL этот контроль осуществляет на основе требований прикладной задачи. В ее функции входит также согласование данных, входящих в различные модели. В результате у пользователя появляется возможность уточнить некоторые параметры расчетного варианта. Например, в задаче моделирования двух взаимодействующих с разными скоростями тел, можно базовый цилиндр "заострить" на конус.

Компонента обобщенной архитектуры системы информационной поддержки RESULT позволяет визуализировать графическое или текстовое представление результатов расчетов на всех этапах моделирования. При необходимости результаты сохраняются в базу данных.

III. ТРЕБОВАНИЯ ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ ИНФОРМАЦИОННОЙ ПОДДЕРЖКИ

Сбор требований при разработке проекта информационной системы включает стадии опроса экспертов предметной области и изучение программных модулей, составляющих функциональное наполнение проекта. Основным средством формализации требований, понятным как пользователям, так и разработчикам является UML. Нотации диаграмм прецедентов, состояний, последовательностей и деятельности достаточно наглядно демонстрируют функциональные возможности, ограничения и алгоритмы рассматриваемой предметной области.

На рис. 2 представлена основная диаграмма прецедентов информационной поддержки задач молекулярной динамики для главной роли системы - роли пользователя. Сплошной стрелкой показан поэтапный стандартный сценарий работы от выбора решаемой задачи до обработки результатов. В качестве базовых функций системы (см. рис.2) выбраны операции манипулирования входными и выходными данными, импорт/экспорт параметров из/в файлы или передача данных в последующие стадии вычислительного эксперимента. Расширениями базовых функций системы являются такие операции, как работа с оглавлением моделей данных, хранящихся в

соответствующих разделах базы данных, сохранение ранее загруженных данных под новым именем, печать результатов расчетов и исходных данных, а также очистка полей форм ввода-вывода и контроль согласованности параметров при вводе данных.



Рис. 2 Диаграмма прецедентов (UseCase) функциональных возможностей информационной поддержки

в случае неверно указанных входных данных или нарушении порядка стадий вычислительного эксперимента. Для оперативного контроля за текущим состоянием вычислительного модуля предусмотрена функция журналирования сеанса работы с выводом на активную форму времени счета, данных о старте и остановке модуля и другой служебной информации.

На этапе проектирования информационной поддержки были также проанализированы основные состояния системы и последовательности переходов и возвратов, сохраняющие непротиворечивость данных. На рис. 4 представлена соответствующая диаграмма.

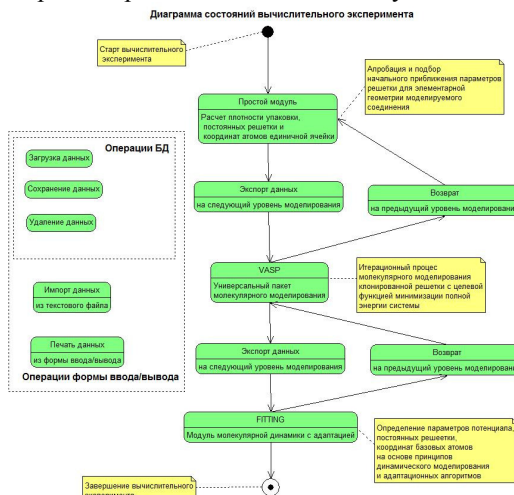


Рис. 4 Диаграмма состояний вычислительного эксперимента

На заключительной стадии сбора проектных требований был построен прототип пользовательского интерфейса в виде главной(стартовой) формы системы информационной поддержки(рис. 5).

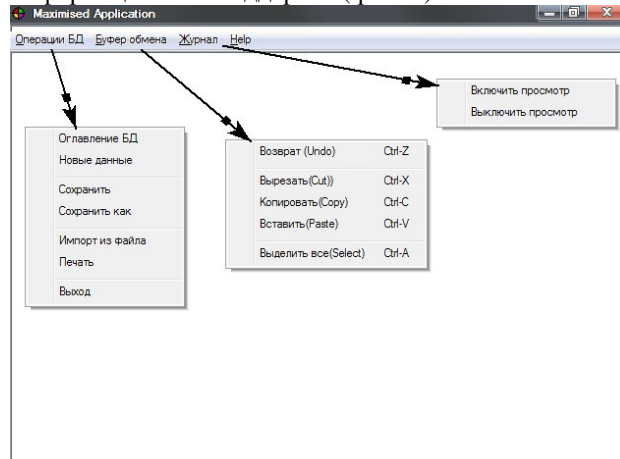


Рис. 5 Прототип начальной экранной формы

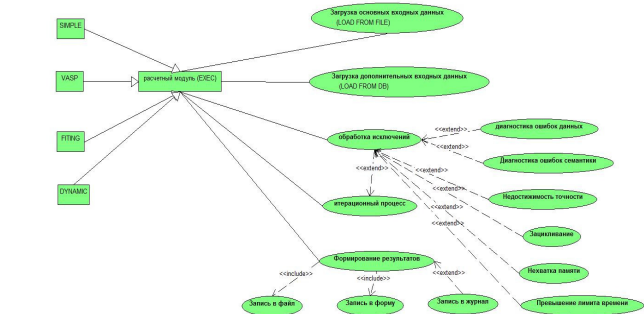


Рис. 3 Диаграмма прецедентов (UseCase) функциональных возможностей вычислительных модулей в информационной поддержке

На рис. 3 представлена диаграмма прецедентов, в которой центральную роль играют вычислительные модули задач кристаллографии и молекулярной динамики, условно именуемые SIMPLE, VASP, FITTING и DYNAMIC. Эти обозначения соответствуют задачам расчета плотной упаковки по пространственным группам и позициям Уайкова, подготовки данных и запуска на удаленном супер-вычислителе задачи расчета кристаллической структуры с использованием пакета VASP, задачи уточнения параметров расчета при варьировании функции потенциала взаимодействия и расчета молекулярного взаимодействия динамических объектов при их столкновении с учетом материала их изготовления или покрытия. Помимо традиционных функций загрузки начальных данных расчета(из формы ввода и базы данных) и графической или текстовой визуализации результатов, на диаграмме представлены функциональные возможности обработки исключительных ситуаций. Такое возможно, например,

Главное меню пользовательского интерфейса иллюстрирует возможности перехода к операциям с моделями данных, ранее сохраненных в БД, а также стандартные функции работы с буфером обмена и журналом системы.

IV.ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Был проведен цикл исследований по проектированию и частичной реализации средств информационной поддержки задач структурного материаловедения и молекулярной динамики,

ориентированных на многоэтапные вычислительные эксперименты.

Разработана обобщенная архитектура системы, спроектирована и реализована с использованием стандартной СУБД расширенная концептуальная схема базы данных предметной области.

В контексте объектно-реляционного подхода на основе понятийного базиса конечного пользователя разработаны и реализованы в виде демонстрационного прототипа средства информационной поддержки двух характерных задач прикладной области.

Реализован механизм согласования данных и управления для выбранного расчетного модуля, настройка на его информационные потребности (необходимый экспорт данных), предусмотрена возможность проведения длительных расчетов с сохранением информации в базе данных, а также визуализация и отображение полученных результатов.

Основными результатами НИР являются: проектирование и реализация программных средств информационной поддержки задач математического и компьютерного моделирования в кристаллографии, ориентированных на высокопроизводительные вычислительные комплексы с сильно выраженной параллельной архитектурой.

БИБЛИОГРАФИЯ

- [1] Абгарян К.К., Хачатуров В.Р., Компьютерное моделирование устойчивых структур кристаллических материалов// Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2009. Т. 49. № 8. С. 1517-1530.
- [2] Л.П. Орленко. Физика взрыва и удара. М.: Физматлит, 2006, 304 с.
- [3] Высокоскоростное взаимодействие тел. Под ред. В.М. Фомина. Новосибирск: Изд. СО РАН, 1999, 600 с.
- [4] Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Физматлит, 2008, 656 с.
- [5] K.Abgaryan , D.Bazanov, I.Mutigillin. The simulation of the nitridation of the sapphire surface (001). Materials XXI International Conference "Interaction of ions with the surface"VIP 2013, T.2. с. 99-103.
- [6] Powell D. Elasticity, Lattice Dynamics and Parameterisation Techniques for the Tersoff Potential Applied to Elemental and Type III-V Semiconductors : дис. University of Sheffield, 2006.
- [7] J.Tersoff, Empirical interatomic potential for silicon with improved elastic properties. Phys. Rev. B.1988, V.38, P.9902-9905.
- [8] К.К.Абгарян, М.А.Посыпкин. Применение оптимизационных методов для решения задач параметрической идентификации потенциалов межатомного взаимодействия.// Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2014, Т. 54. № 12. С.1994-2001.
- [9] W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133, 1965.
- [10] Гаврилов Е.С. Моделирование процесса разработки программного обеспечения. Материалы XV Международной конференции по механике и современным прикладным программным системам (ВМСППС'2007), 25-31 мая 2007 г. Алушта. - М.: Вузовская книга, 2007. - С. 134-135

Support task computer simulation of high-speed interaction of solids

K.K. Abgaryan, E.S.Gavrilov, A.M.Marasanov

Abstract – To solve the demanding tasks of computer simulation of high-speed interaction of solids using modern information technology. This paper describes the solutions developed for this class of information management tools, with the inclusion in its path computation modules focused on high-performance computing systems.

Keywords–information technology, high-performance computing, computational modules, quantum mechanical and molecular dynamics calculations.