Развитие средств численной диагностики в коде marple

А.М. Котельников1, О.Г. Ольховская2, Г.А. Багдасаров2, М.В. Якобовский2

1Московский физико-технический институт (государственный университет), Москва,  
 Россия  
2Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Москва, Россия

Код MARPLE [1], созданный в ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, представляет собой каркас (framework) для построения приложений, предназначенных для численного моделирования  
с использованием высокопроизводительных параллельных вычислений в трехмерных областях сложной геометрической формы на неструктурированных эйлеровых сетках.  
Код предоставляет различные средства и программные интерфейсы для упрощения  
и ускорения создания конечных приложений, такие как средства построения и импорта расчетных сеток, а также инструменты для разбиения сеток и работы с фиктивными (ghost) сеточными элементами на границах подобластей (для поддержки геометрического параллелизма), интерфейсы для реализации «параллельных» алгоритмов (явных и неявных)  
с помощью технологий MPI и CUDA. Код включает базу вычислительных объектов для аппроксимации различных дифференциальных операторов, средства для работы  
с различными материалами с помощью аналитических и/или таблично заданных уравнений состояния (УРС), модули экспорта результатов вычислений для последующего анализа  
и многое другое. На данный момент с использованием этих и других средств разработаны приложения для численного моделирования двухтемпературных односкоростных ГД- и МГД-течений с учетом диссипативных процессов, для моделирования динамики флюидов  
в месторождениях углеводородов и для моделирования разрушения материалов под воздействием интенсивных потоков энергии.

Данная работа посвящена развитию инструментов численной диагностики расчетов, соответствующих экспериментальным средствам. В частности, представлена модель «цифровой камеры-обскуры», описан алгоритм ее работы и детали реализации в рамках кода MARPLE, приведены результаты работы и сравнения с экспериментальными результатами. Также представлен инструмент для подключения программных УРС в сторонние приложения с помощью интерпретируемого языка программирования Python.

Камера-обскура сегодня является одним из сравнительно немногих способов получать изображения в рентгеновских лучах, так как данный вид излучения плохо фокусируется  
с помощью линз. Она широко используется для снимков плазмы, получаемой в ходе экспериментов. Разработанная «цифровая камера-обскура» предназначена для непосредственного сравнения результатов вычислительных и натурных экспериментов,  
что позволяет физикам-экспериментаторам более эффективно работать с результатами численного моделирования.

Python-интерфейс к программной реализации УРС позволяет проводить сколь угодно сложный анализ результатов расчета непосредственно из соответствующих приложений (ParaView, Tecplot и др.) при существенном сокращении объема выходных данных. Действительно, имея доступ к программной реализации УРС, достаточно сохранить лишь базовые расчетные величины (плотность, температура, скорость), а все зависимые величины (давление, энергия, коэффициенты проводимости и теплопроводности и т.д.) вычислять по мере необходимости.

Работа поддержана грантами РФФИ №№ 14-01-31154 и 14-07-00712-а.

Литература

1. Гасилов В.А. и др. Пакет прикладных программ MARPLE для моделирования на высокопроизводительных ЭВМ импульсной магнитоускоренной плазмы. Математическое моделирование, т. 24, н. 1, сс. 55-87, 2012.