

Реализация компонент системы компьютерного моделирования высокоскоростного взаимодействия твердых тел

К.К. Абгарян, Е.С. Гаврилов
МАИ, Москва, Россия; ФИЦ ИУ РАН, Москва, Россия

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.

В основе разработанной архитектуры системы компьютерного моделирования высокоскоростного взаимодействия твердых тел [1] лежит принцип интеграции разнородных расчетных модулей функционального наполнения системы, управляющих и информационных компонент на базе хорошо известных и достаточно распространенных технологий 3-х уровневой модели клиент-серверного взаимодействия [2].

Для решения поставленной задачи на атомно-кристаллическом уровне применяется расчетный модуль, базирующийся на модели ионно-атомных радиусов [3] и программный комплекс VASP (<https://www.vasp.at/>) с помощью которого проводятся квантово-механические расчеты в рамках теории функционала электронной плотности с использованием базиса плоских волн и PAW-потенциалов [4,5]. На микроскопическом уровне работает дискретно-элементный расчетный модуль [1] в основе которого лежит молекулярно-динамический подход с применением современных потенциалов межатомного взаимодействия и расчетный модуль в котором реализован кинетический метод Монте-Карло. На макроскопическом уровне используются программные модули, построенные на базе континуальных моделей, в том числе модели сплошнородного динамического взаимодействия гетерогенных тел.

Для апробации созданных моделей, их верификации по экспериментальным данным, а также для подготовки, манипулирования, хранения и сравнительного анализа значительного объема расчетных и экспериментальных данных, используются современные технологии проектирования систем реляционных баз данных (БД). Кроме того, планируется проведение большого количества параметрических исследований и анализа различных вариантов. При этом, дружелюбность интерфейса будет обеспечиваться развитой сервисной оболочкой.

Для высокоскоростной обработки данных применяются высокопроизводительные вычислительные комплексы кластерной архитектуры. Применительно к вычислительным алгоритмам используются методы распараллеливания, которые сочетаются с развитыми средствами информационной поддержки решаемых задач в контурах распределенной архитектуры с выделением средств хранения, манипулирования и апробации данных.

Пользовательский интерфейс реализуется на технологии WPF, что дает возможность совмещать быстрое и удобное прототипирование интерфейса с привязкой входных и выходных данных к объектной модели предметной области. Это позволяет достаточно быстро адаптировать в контур системы новые приложения вместе с необходимым для его работы набором данных и унифицировать операции работы с единой базой данных для загрузки информации по материаловедению и кристаллографии из системных справочников. Таким образом, формируются формы пользовательского интерфейса, которые зависят от выбранной задачи, но имеют общую структуру, повторно используемые компоненты XAML, схожий набор обработчиков доступных событий и действий, а также единые источники загружаемых данных.

Компоненты программной логики и семантики системы располагаются на сервере приложений под управлением IIS. Программный интерфейс компонент оформлен в виде REST сервисов и реализует основные операции выборки, сохранения входных параметров и результатов вычислительных экспериментов. Работа с базой данных организована с помощью LINQ to SQL с использованием аспектно-ориентированного подхода для управления транзакциями, авторизации доступа к сервисам и протоколирования работы сервера.

Слой хранения информации реализуется в виде специализированной базы данных (БД) под управлением СУБД MS SQL Server. Логическими блоками данной схемы являются универсальные для всех приложений справочники и модульно-ориентированные подсхемы БД, соответствующие конкретным задачам с поддержкой специальных операций их обработки. Категорийная иерархия БД позволяет манипулировать как первичными данными для расчетов, так и агрегированными информационными объектами, прошедшими апробацию расчетами.

В настоящее время реализован рабочий прототип системы компьютерного моделирования высокоскоростного взаимодействия твердых тел, который объединяет приложения материаловедения и имеющиеся расчетные модули.

1. Абгарян К.К., Журавлев А.А., Загордан Н.Л., Ревизников Д.Л. Дискретно-элементное моделирование внедрения шара в массивную преграду// Компьютерные исследования и моделирование. 2015 г., т.7, №1. С.66-75.
2. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С., Марасанов А.М. Информационная поддержка задач компьютерного моделирования высокоскоростного взаимодействия твердых тел//International Journal of Open Information Technologies.2014. т.2, № 12
3. 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.
- 4.W. Kohn, Nobel Lecture: Electronic structure of matter — wave functions and density functionals, Rev. Mod. Phys., 71, No. 5, pp. 1253-1266 (1999)
5. G. Kresse and J. Furthmüller. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. Comput. Mat. Sci., 6:15, 1996.