

УДК 519.6

ПРОГРАММА EFRVIEWER ДЛЯ ЧИСЛОВОГО АНАЛИЗА НАЧАЛЬНЫХ И РАСЧЕТНЫХ ДАННЫХ В ЗАДАЧАХ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Н. В. Попова, А. К. Меньшикова
(РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров)

Описывается прикладная программа EFRVIEWER. Программа предназначена для просмотра, редактирования и обработки данных, которые являются результатами численного моделирования физических процессов по прикладным программным комплексам РФЯЦ-ВНИИЭФ и представляются в виде бинарных файлов унифицированного формата ЕФР. Являясь своего рода сервисной утилитой, EFRVIEWER через графический интерфейс открывает пользователю доступ к двоичному коду задачи в удобной форме посредством гипертекста, таблиц и графиков.

Ключевые слова: библиотека ЕФР, формат ЕФР, пользовательский интерфейс, разрез, задача, область, временной шаг, массив, сетка, числового анализа, просмотр, редактирование, поиск, сравнение, неоднородный вычислительный комплекс.

Введение

Важную роль в решении задач численного моделирования физических процессов на разностных сетках играют средства анализа результатов счета. Эффективная визуальная проверка дает возможность оценить качество сеток в задачах, получить информацию о распределении веществ на сетках, об изменениях функций физических величин во времени и пространстве (программы ZOOM [1], ScientificView [2], ParaView [3], ЛОГОС.ПРЕПОСТ [4]). Параллельно с графическими данными, определенными на структурированных или неструктурных сетках, для более детального анализа используется их табличное представление [5–7].

Программа EFRVIEWER [8], описание которой приводится ниже, помимо всех указанных возможностей, обладает средствами модификации и обработки данных. К таким средствам авторы относят арифметическое преобразование, замену значений на константу, числовое сравнение, поиск экстремальных значений и значений по условию отношения к константе, вычисление интегральных величин, выделение фрагмента расчетной сетки с распределением величин, объединение фрагментов различных задач в единый разрез.

Приложение EFRVIEWER предназначено для работы на ПЭВМ под управлением операционной системы MS Windows. В основу программы заложены объектно-ориентированная библиотека визуальных компонентов VCL [9] и библиотека прямого доступа к разрезам ЕФР [10]. Библиотека VCL используется для создания пользовательского интерфейса и взаимодействия с операционной системой. Библиотека ЕФР обеспечивает доступ к массивам значений физических величин и т. п. Доступ к удаленным файлам неоднородного вычислительного комплекса (НВК) РФЯЦ-ВНИИЭФ возможен, например, через программный сервер Samba [11] по протоколу SMB/CIFS, для которого EFRVIEWER выступает в роли клиента.

Классификация функциональных возможностей программы

На рис. 1 изображена модульная структура программы EFRVIEWER. Под модулем понимается программная реализация множества функциональных возможностей, классифицированных с точки зрения области применения.

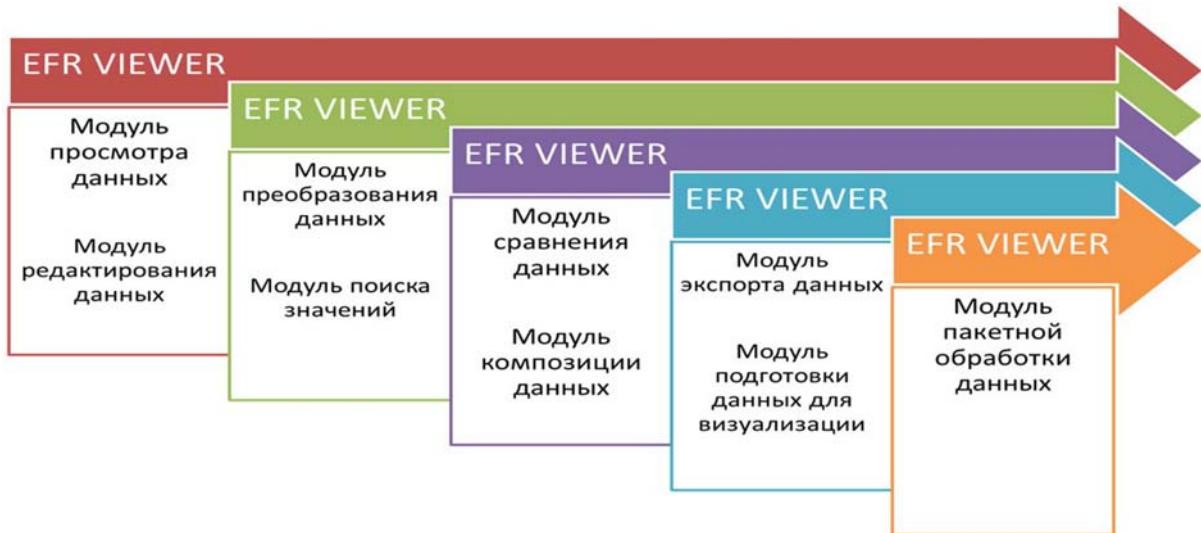


Рис. 1. Модульная структура программы

Модуль просмотра данных реализует возможности табличного просмотра массивов и списков областей, а также получения информации о структуре разреза задачи в виде гипертекста, поддерживающего ассоциативные связи между объектами, выделенными на экране.

Модуль редактирования данных содержит средства модификации параметров, характеризующих задачу, счетные области и их объекты, а также средства коррекции элементов массивов и списков и средства восстановления данных.

Модуль преобразования данных состоит из функций арифметического преобразования элементов целого или вещественного типов, а также функций смещения данных вдоль одного из пространственных направлений структурированной сетки, задаваемых индексами i, j, k .

Модуль поиска значений содержит средства:

- поиска экстремумов величин, определенных на сетке в заданном множестве узлов или ячеек, включая поиск таких значений для заданного набора веществ;
- расчета интегральных и усредненных по области величин с заданием фрагмента счетной области;
- поиска множества элементов, удовлетворяющих заданному условию отношения к константе, и вывода на экран таблицы данных из массивов и списков с выделением маркером найденных значений или печати этих значений в окне вывода.

Модуль сравнения данных обеспечивает сопоставление данных, полученных по различным прикладным программным комплексам или при разных режимах счета, с предоставлением результата сравнения в текстовом или гипертекстовом протоколе.

Модуль композиции данных позволяет скомпоновать новый файл формата ЕФР из множества разрезов задач, в том числе объединить данные из разрезов различных прикладных комплексов.

Модуль экспорта данных обеспечивает возможность сохранения данных из разреза в текстовом файле, который может быть открыт любым текстовым редактором или приложением MS Excel для дальнейших действий (составления отчетов, дополнительных расчетов, построения графиков), а также позволяет выделять фрагмент структурированной сетки задачи с сохранением в отдельном файле формата ЕФР.

Модуль подготовки данных для визуализации содержит средства по формированию данных, определенных на трехмерных структурированных сетках, о счетной области, сечении, слое, изоповерхности для отображения средствами программы графического анализа ZOOM. В него также включаются средства подготовки графиков функций одной переменной (временные зависимости, профили величин) для отображения визуализатором APS [12].

Модуль пакетной обработки данных позволяет выполнять:

- обработку данных, взятых из набора временных разрезов, для уменьшения трудозатрат пользователей;
- подготовку данных о границах счетных областей для создания анимации физических процессов;
- расчет интегральных и усредненных по области величин с возможностью сохранения в разрезах.

Пользовательский интерфейс

Программа EFRVIEWER является приложением с многодокументным интерфейсом, представленным в виде форм. Форма — типичное окно Windows, *контейнер*, в котором размещаются другие компоненты. Родительская форма приложения состоит из главного меню, панелей инструментов, панели состояния, окна диагностики и клиентской области для размещения дочерних форм. Каждая дочерняя форма представляет разрез задачи. Такая модель приложения позволяет работать с множеством разрезов в одном экземпляре программы.

Табличный просмотр данных. Ключевым средством анализа числовых данных, предоставляемым программой, является просмотр значений массивов и списков из разреза, выведенных на экран в табличном виде (рис. 2).

Для перехода к произвольному элементу массива или списка предусмотрены графические компоненты для задания матричных индексов или порядкового номера элемента. Предусмотре-

ны компоненты для управления транспонированием таблицы и порядком нумерации строк и столбцов (по возрастанию или убыванию).

Для просмотра трехмерных и кратных массивов данных, определенных на структурированной сетке, или трехмерных массивов данных, не связанных с сеткой, предусмотрены компоненты выбора пространственного индекса и значения кратности. Под кратностью подразумевается дополнительное измерение сеточного массива. Кратность используется в том случае, когда каждому элементу массива соответствует несколько однотипных величин, объединенных в одну группу имен (например, объемная или массовая концентрация вещества в ячейке). Количество таких величин определяет кратность.

Вещественные числа отображаются в таблице в одном из трех возможных форматов. Формат задается в настройках приложения.

Редактирование начальных данных задач. Для модификации составляющих разреза в программе EFRVIEWER реализованы:

- редактирование параметров задачи, области, массива или списка;
- замена значений, выделенных в таблице, на другое значение;
- замена значений фрагмента, заданного индексами, на другое значение;
- множественная замена значений по условию сравнения;
- копирование и вставка значений.

Для исключения ошибочных ситуаций предусмотрен режим оповещения пользователя о его

	I 1	I 2	I 3	I 4	I 5
J 1	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 2	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 3	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 4	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 5	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 6	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 7	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 8	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 9	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 10	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 11	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 12	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 13	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 14	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 15	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 16	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 17	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 18	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 19	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02
J 20	2.000000000000e+02	1.000000000000e+02	1.1111111111111e+02	1.2222222222222e+02	1.3333333333333e+02

Рис. 2. Табличный просмотр данных разреза

намерении внести изменение в разрез, а также средство восстановления исходных данных — возврат на один шаг назад.

Преобразование данных. В программе реализованы следующие способы преобразования данных:

- преобразование по арифметическому выражению для данных целого и вещественного типов (рис. 3);
- смещение данных, определенных на структурированной сетке, вдоль одного из пространственных направлений, задаваемых индексами.

Параметры арифметического преобразования задаются во вспомогательном диалоге. Параметрами являются знак арифметической операции и константа в качестве правого инфиксного операнда. Программа производит сложение, умножение, вычитание или деление и сохраняет новые значения в файле-разрезе.

Множественный поиск значений по условию. Одним из методов числового анализа является поиск элементов массивов и списков счетных областей по условию отношения к заданному значению. Параметрами поиска являются константа, операция отношения к константе (больше, меньше, равно, не равно, больше или равно, меньше или равно), точность сравнения вещественных чисел. Возможен последовательный поиск элементов, а также поиск всех элементов.

Результат представляется двумя способами: отображением значений в окне вывода или выделением маркером в таблице данных (рис. 4). В окне вывода значения характеризуются матрич-

ными индексами элементов с указанием объекта, счетной области и временного шага.

Сравнение данных задач. Средствами программы EFRVIEWER производится числовое сравнение:

- содержимого разрезов по математической постановке задач;
- содержимого разрезов по физической постановке задач;
- директорий.

Сравнение разрезов по математической постановке подразумевает *строгое* и *нестрогое* сопоставление данных, а также попарное сравнение объектов. В роли объектов выступают область, временной шаг, массив, список. Строгое сопоставление означает сравнение файлов по структурам: размерность и другие параметры задачи; количество областей, идентификаторы областей, размер, тип сетки и другие параметры области; количество временных шагов, номера шагов интегрирования, количество массивов и списков каждого шага; идентификаторы массивов и списков, их размер, тип данных и другие параметры; значения элементов. Нестрогое сопоставление означает сравнение содержимого файлов по объектам с одинаковыми идентификаторами.

Сравнение разрезов по физической постановке подразумевает расчет разницы между значениями физических величин (массы, объема, плотности, внутренней энергии, кинетической энергии) для каждого вещества. Протокол сравнения формируется в html-формате с рассчитанными балансами и результатом сопоставления физических величин.

The screenshot shows the EFRVIEWER software interface. On the left, a dialog box titled 'Преобразование данных' (Data Transformation) is open. It contains a numeric keypad with buttons for addition (+), subtraction (-), multiplication (x), division (/), and decimal point (.). There are also buttons for pi and +/-, and a text input field containing '0.005'. To the right of the dialog box is a table titled 'Массив 4000 X (MIN = 100.000000; MAX = 200.000000)'. The table has three columns labeled 'I 4', 'I 5', and 'I 6'. The first column contains values like 1.111e+02, 1.111e+02, 1.111e+02, etc. The second column contains values like 1.22222222222222e+02, 1.22222222222222e+02, 1.22222222222222e+02, etc. The third column contains values like 1.33333333333333e+02, 1.33333333333333e+02, 1.33333333333333e+02, etc. The entire screenshot is framed by a thick black border.

Рис. 3. Арифметическое преобразование данных

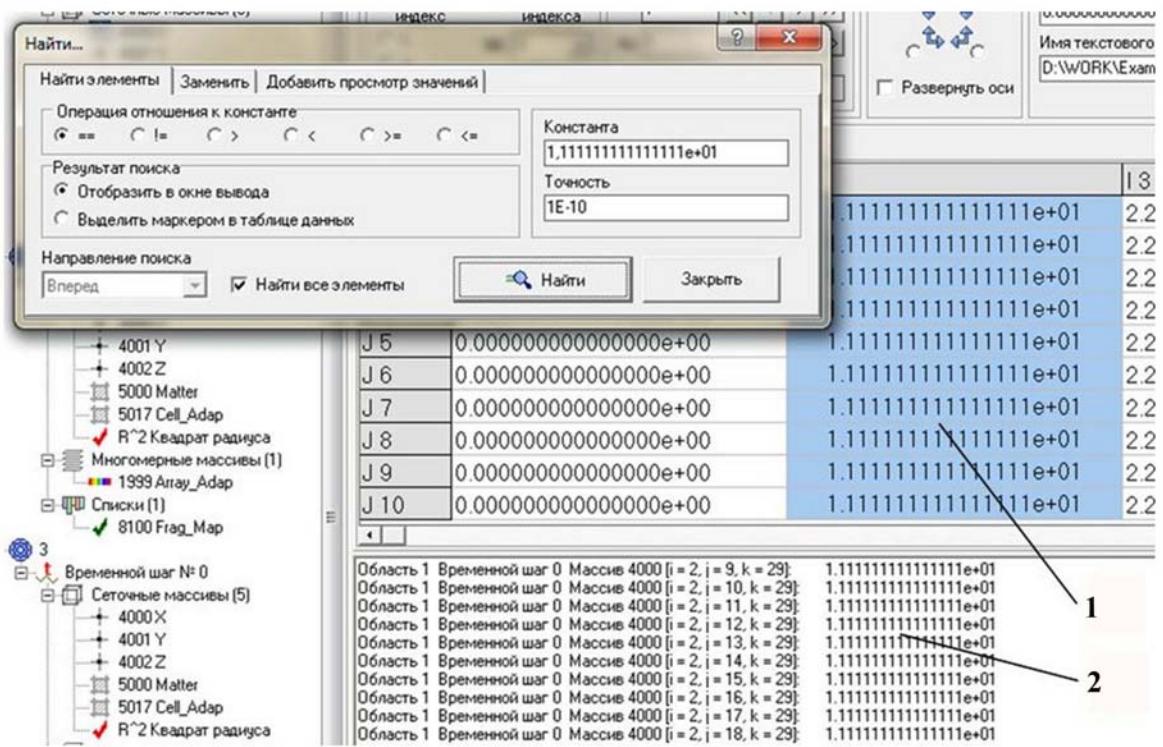


Рис. 4. Поиск значений по условию с выделением маркером (1) и отображением в окне вывода (2)

Сравнение директорий — сопоставление содержимого множества разрезов одной директории и содержимого множества разрезов другой директории. Разрезы сравниваются по принципу *каждый с каждым* или по идентичным названиям.

Параметры сравнения задаются пользователем через компоненты графического интерфейса программы. Но часто требуется проводить автоматическое сопоставление разрезов без участия пользователя, например, в процессе тестирования некоторого счетного комплекса при обновлении эталона в качестве валидации полученных результатов. Поэтому модуль сравнения выделен в отдельную программу с интерфейсом командной строки для использования на НВК РФЯЦ-ВНИИЭФ.

Выделение слоя структурированной сетки. Актуальной является функция выделения слоя трехмерной структурированной сетки в отдельный файл ЕФР. Под слоем сетки размерностью $NI \times NJ \times NK$ узлов понимается одно из множеств $\{(i = \text{const}, j, k): 1 \leq i < NI, 1 \leq j < NJ, 1 \leq k < NK\}$; $\{(i, j = \text{const}, k): 1 \leq i < NI, 1 \leq j < NJ, 1 \leq k < NK\}$; $\{(i, j, k = \text{const}): 1 \leq i < NI, 1 \leq j < NJ, 1 \leq k < NK\}$. Параметрами являются номер счетной области с

расчетной сеткой (или весь набор счетных областей) и номер слоя по одному из пространственных направлений. Реализовано множественное выделение данных.

Композиция данных. В программе реализован модуль для составления (*композиции*) файла ЕФР из объектов, входящих в состав произвольных разрезов (рис. 5). В роли объектов выступают счетные области, массивы значений физических величин. Пользователю для удобства предоставлен некий базовый разрез, к которому можно добавлять фрагменты данных, а также их исключать.

При добавлении области пространственная размерность сетки должна соответствовать размерности задачи. При добавлении сеточного массива его размер должен соответствовать параметрам сетки области.

Представление об иерархии объектов составляемого разреза можно получить с помощью структурированного дерева, выводимого в окне диалога для задания параметров композиции. Полную информацию о параметрах объектов дает предварительный просмотр в виде гипертекста, который формируется по нажатию соответствующей кнопки диалога.

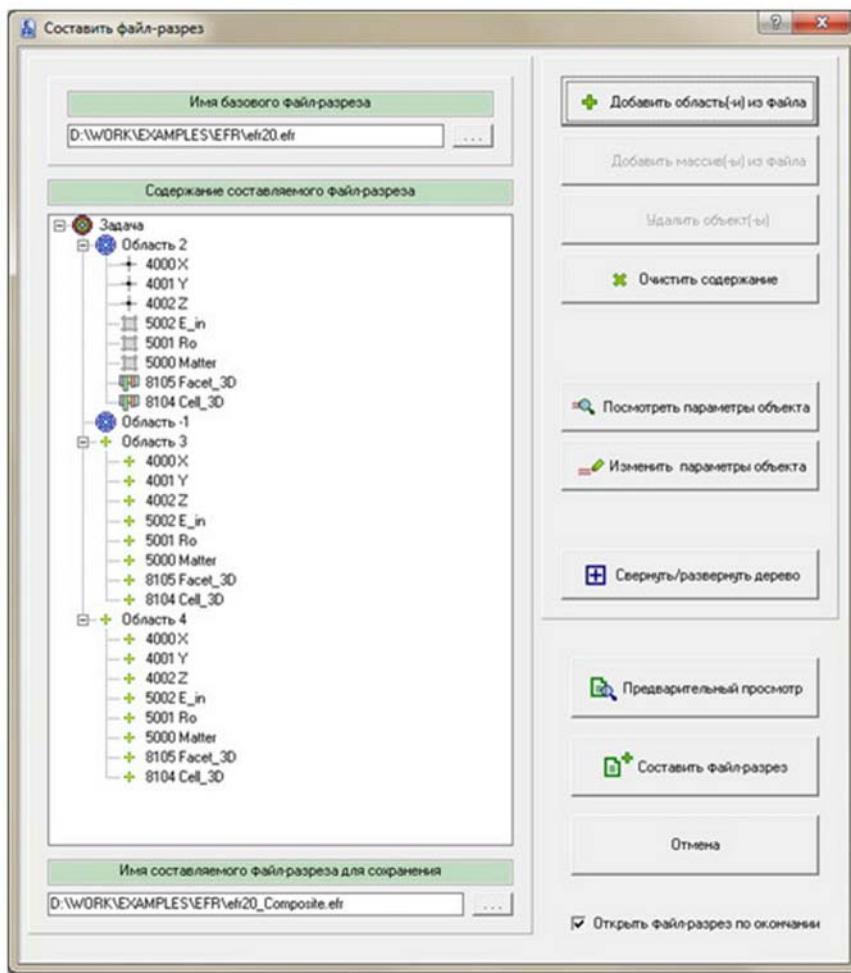


Рис. 5. Диалог для задания параметров композиции данных

Заключение

Описано сервисное приложение EFRVIEWER, которое предоставляет средства анализа и проверки начальных и расчетных данных, имеющих двоичное представление в формате ЕФР, в удобном для пользователя виде посредством дружественного графического интерфейса.

Программа, пройдя стадии формирования требований, проектирования, реализации, тестирования и внедрения, находится на этапе эксплуатации и сопровождения в течение девяти лет. Авторы благодарят специалистов прикладных программных комплексов РФЯЦ-ВНИИЭФ за ее использование в их научной деятельности.

Список литературы

1. Царева Т. В., Башуров В. В. Графический визуализатор ZOOM // Науч. конф.

"XI Нижегородская сессия молодых специалистов": Тез. докл. Красный плес, 22 мая — 25 мая 2006 г. С. 41—42.

2. 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.
3. Henderson A., Ahrens J., Law C. et al. The ParaView Guide. USA, Kitware Inc., 2004.
4. Фархутдинов В. Ф., Тарасов В. И., Соловьев А. Н. и др. Обзор возможностей по обработке геометрий и построению сеточных моделей в ЛОГОС.ПРЕПОСТ // Сб. докл. XIII межд. семинара "Супервычисления и математическое моделирование". Саратов: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2011. С. 524—533.

5. *Абдеев П. А., Артамонов М. В., Бахарах С. М. и др.* Интегрированная система сопровождения счета задач в пакете программ ЛЭГАК-3D // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2010. Вып. 4. С. 35–43.
6. *Гагарин С. В., Дедкова К. В., Комоско В. В. и др.* Сервисная система для многозадачного анализа результатов счета задач математической физики // Там же. 2005. Вып. 1. С. 111–116.
7. *Будников В. И., Линник Д. М.* Пакет сервисных программ для трехмерного параллельного комплекса Д // Там же. 2001. Вып. 4. С. 65–68.
8. *Попова Н. В., Деманова А. К.* Программа EFRVIEWER как средство быстрого анализа результатов численного моделирования физических процессов // Сб. докл. VI науч.-техн. конф. "Молодежь в науке". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2007. С. 155–159.
9. *Архангельский А. Я.* Программирование в C++Builder 6. М.: Изд-во БИНОМ, 2003.
10. *Волгин А. В., Красов А. В., Кузнеццов М. Ю., Тараков В. И.* Библиотека ЕФР для универсального представления расчетных данных // Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ. 2007. Вып. 11. С. 130–135.
11. *Бруксбэнк Э., Хабербергер Дж., Доул Л. Samba.* Руководство системного администратора. Сер. Для профессионалов. С.-Пб.: Питер, 2001.
12. *Гребенников А. Н., Фарафонтов Г. Г., Алексеев А. В. и др.* Технология подготовки групповых и макроскопических констант и методика их уточнения в процессе расчета задач переноса нейтронов // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2005. Вып. 4. С. 15–24.

Статья поступила в редакцию 27.12.12.