

УДК 519.6

ТЕХНОЛОГИЯ ПРОВЕДЕНИЯ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ДАННЫХ ДВУМЕРНЫХ РАСЧЕТОВ В ПРОГРАММНОМ КОМПЛЕКСЕ "БАЗИС"

С. В. Гагарин, Н. В. Галицкая, О. В. Беломестных, С. И. Кузьмина,
Д. В. Могиленских, Е. А. Приб, А. А. Ушкова
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ", г. Снежинск Челябинской области)

Программный комплекс БАЗИС предназначен для формирования начальных данных расчетов двумерных задач механики сплошной среды, а также подготовки и проведения глобальной интерполяции данных с одной структурированной разностной сетки на другую. Программный комплекс состоит из восьми подсистем. В данной статье демонстрируется работа подсистем графического и табличного представления данных двумерного разреза, запуска пересчета, сравнения графических изображений разрезов, а также расчета средних (балансовых) значений физических величин.

Ключевые слова: механика сплошной среды, разрез, СДР, интерполяция, начальная геометрия, разностная сетка, физические величины.

Введение

При математическом моделировании физических процессов механики сплошной среды, основанном на лагранжевых методиках, в процессе расчета модели разностная сетка может деформироваться настолько, что дальнейший счет становится невозможным. В этом случае пользователь (расчетчик) должен создать новую сетку, как правило, с сохранением геометрии математических областей модели и запустить программу, осуществляющую интерполяцию (пересчет) физических величин со старой разностной сетки на новую.

Для выполнения пересчета физических величин при численном решении задач в двумерной постановке в РФЯЦ-ВНИИТФ разработана программа REDOS (редактирование данных основного счета). Алгоритмы пересчета величин, используемые этой программой, в настоящей статье не рассматриваются. Программа является консольным приложением, и задание для нее содержится в текстовом файле. В этом файле задаются пути к файлу расчетных данных двумерной задачи (разрезу¹-источнику)

и файлу с новой разностной сеткой (разрезу-приемнику). Оба файла-разреза хранятся в двоичном представлении в унифицированном формате СДР (*стандартный двумерный разрез*), который используется в РФЯЦ-ВНИИТФ для хранения расчетных данных двумерной задачи. Кроме путей к файлам, в задании на пересчет указывается, какие области или фрагменты областей и какие вещества требуется пересчитать. Для выполнения полного пересчета программа REDOS может запускаться несколько раз для разных областей или их фрагментов и разных условий пересчета.

Для подготовки текстового файла с заданием пользователю необходимо проанализировать исходные расчетные данные и новую разностную сетку. В результате анализа должно стать понятным, какие области разреза-источника с какими областями разреза-приемника пересекаются и какие вещества при этом попадают в ячейки новой разностной сетки. От этого зависит правильность формирования задания на выполнение пересчета. Для анализа разрезов в графическом виде в РФЯЦ-ВНИИТФ используется программа VIZI-2D [1]. Эта программа обладает развитыми возможностями по визуализации данных, но не рассчитана на интерактивную подготовку задания для пересчета.

¹Разрез задачи — совокупность физических величин, характеризующих состояние рассчитываемой системы на определенный момент времени.

В связи с этим была поставлена задача создать программу, объединяющую в единой оболочке как средства графического и текстового представления расчетных данных двумерных задач, так и средства интерактивной подготовки задания на пересчет, проведения пересчета и анализа его результатов.

Функциональные возможности программного комплекса БАЗИС

Программный комплекс (ПК) БАЗИС разработан на платформе .Net Framework с использованием языков программирования C#, C++ и состоит из нескольких подсистем, каждая из которых предназначена для выполнения определенной задачи (функции). На рис. 1 приводятся подсистемы ПК БАЗИС [2–4].

В интерфейсе пользователя каждая подсистема отображается в своем окне. Реализована технология *плавающих* окон, при которой пользователь сам настраивает их расположение.

Подсистема подготовки и расчета начальных данных (GeomGrid2) [5] предназначена для задания начальной геометрии, построения разностных сеток, расчета начальных физических данных и формирования начальных разрезов двумерных задач. Этой подсистеме будет посвящена отдельная статья. С помощью подсистемы GeomGrid2 готовится разрез-приемник.

Подсистема табличного представления данных разреза предназначена для отображения физических величин двумерного разреза в виде таблиц. В этой подсистеме реализованы раз-

личные операции над данными, включая их редактирование, поиск значений в заданном диапазоне, проверку и сравнение физических величин из разных разрезов. Для больших таблиц имеется возможность задать виртуальное окно меньшего размера для повышения скорости вывода таблицы на экран. В дальнейшем пользователь может перемещать это окно по всей таблице с помощью клавиатуры или манипулятора *мышь*.

Подсистема графического представления разрезов предназначена для графической интерпретации данных двумерного разреза. Реализованы функции заливки ячеек сетки цветом в соответствии со значениями выбранной физической величины, рисование изолиний и другие операции. Реализован инструмент *луна*, особенно полезный для просмотра и анализа разрезов с мелкой сеткой. Между подсистемами табличного и графического представления имеется взаимная связь. Ячейку, выбранную в таблице, программа может показать на графическом изображении и наоборот.

Подсистема сравнения графических изображений разрезов предназначена для визуального сравнения изображений нескольких разрезов в согласованной системе координат, т. е. при переходе от одного фрагмента изображения к другому для одного разреза выполняется переход к соответствующему фрагменту и для других разрезов. При этом изображения разрезов можно видеть как в отдельных окнах, так и в совмещенном окне. Реализована возможность рисования разрезов с использованием управляемой прозрачности, когда один из разрезов рисуется



Рис. 1. Подсистемы ПК БАЗИС

непрозрачным, а другие, поверх него, — с заданной прозрачностью.

Подсистема подготовки задания на интерполяцию предназначена для интерактивного формирования задания на пересчет. Подсистема находит пересечения областей разреза-источника с областями разреза-приемника и формирует дерево пересечений. Используя эту подсистему, пользователь в интерактивном графическом режиме анализирует пересечения областей и попадания веществ в области разреза-приемника. При этом он отмечает в дереве пересечений области и вещества, которые требуется пересчитать в процессе интерполяции. Результатом работы подсистемы является автоматически сформированный программой текстовый файл с заданием на пересчет.

Подсистема сборки разреза из фрагментов других разрезов предназначена для формирования разреза из частей других разрезов. При этом можно выбирать отдельные области, фрагменты областей, объединять области, разбивать области на подобласти, прореживать сетку. Эта подсистема в данной статье не рассматривается.

Подсистема запуска процесса интерполяции предназначена для запуска пересчета на локальном компьютере пользователя или на удаленном вычислительном сервере. Пересчет запускается в отдельном процессе, так что пользователь мо-

жет продолжить работу с другими подсистемами. По окончании пересчета пользователю выводится отчет о выполнении.

Подсистема расчета средних (балансовых) значений физических величин рассчитывает по выбранному пользователем областям разреза или веществам различные интегральные и усредненные физические величины, такие как масса, объем, плотность и др. Это позволяет сравнить балансовые значения физических величин в разрезах до и после пересчета. Результаты расчета могут быть экспортированы в среду MS Excel или Matlab для дальнейшего анализа.

Пользовательский интерфейс

Унифицированная программная оболочка ПК БАЗИС позволяет открывать двумерные разрезы и листы трехмерных разрезов с листовой геометрией. На рис. 2 показан интерфейс пользователя ПК БАЗИС с двумя открытыми разрезами. В левой части главного окна приложения отображается дерево объектов. Каждый разрез представлен иерархическим деревом объектов разреза — блоков, математических областей, массивов физических величин и т. д.

При выборе объекта в дереве объектов его свойства отображаются в левой нижней части окна. В центральной части рис. 2 видны ре-

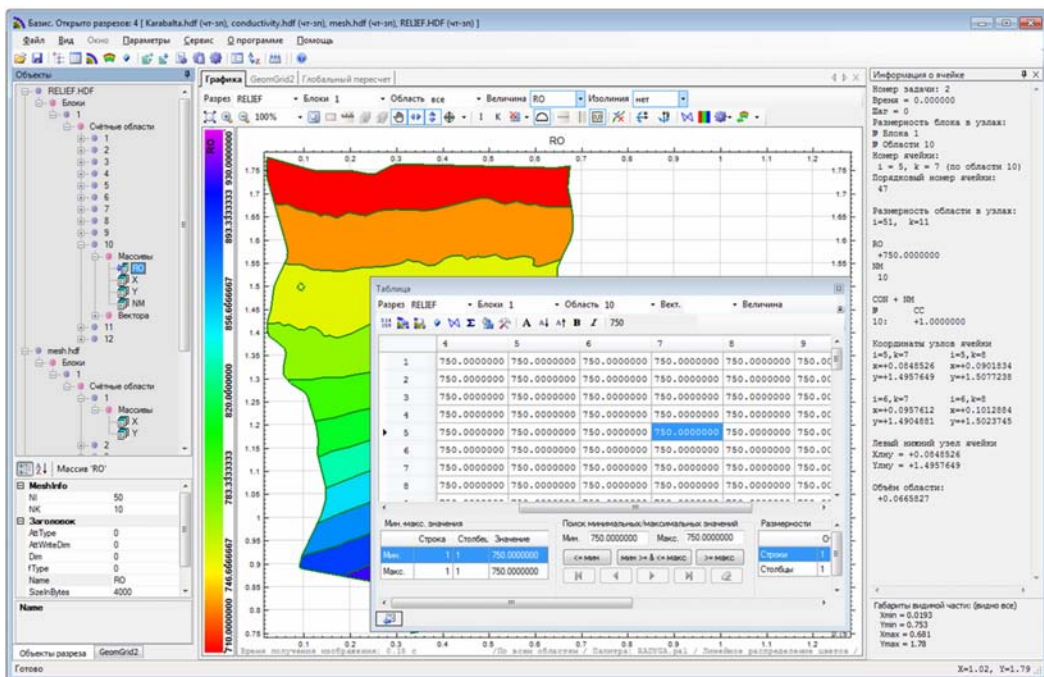


Рис. 2. Подсистемы графического и табличного представления двумерных данных

зультаты работы подсистем графического (закладка *Графика* подразумевает графическое изображение) и табличного представления данных. Для заливки ячеек сетки используется открытая графическая библиотека OpenGL [6]. Табличное представление показано для примера в виде плавающего окна (его можно перемещать с помощью мыши). В правой части окна представлена информация о выбранной ячейке. Выбор ячейки сетки на графическом изображении сразу же приводит к выбору соответствующей ячейки в таблице и наоборот, что удобно при анализе информации.

Подсистема подготовки задания на интерполяцию

На рис. 3 приведены изображения разреза-источника и разреза-приемника. Требуется подготовить задание для интерполяции (пересчета). Для этого оба разреза с помощью несложного диалога добавляются в подсистему подготовки пересчета.

На первом этапе программа должна определить области разреза-источника и разреза-приемника, которые пересекаются. Эта информация потребуется для построения дерева пересечений областей. Для ускорения процесса поиска пересечений каждая область разреза-приемника разбивается на треугольники, кото-

рые образуются с использованием механизма тесселяции² OpenGL [6]. Программа выполняет предварительное рисование и с помощью функций обратного вызова получает координаты вершин треугольников (рис. 4).

По окончании этого процесса в левой части экрана программа строит дерево пересечений областей (рис. 5). На первом уровне иерархии отображаются номера областей разреза-приемника (с новой сеткой), а на втором — номера областей разреза-источника (с физическими величинами), которые пересекаются с данной (на первом уровне) областью разреза-приемника. В правой части экрана выводятся изображения обоих разрезов. Вид изображения меняется в зависимости от выбранной под деревом пересечений закладки. На рис. 5 (см. также цветную вкладку) выбрана закладка *По областям*. В дереве пересечений выбран показ пересечения области 4 разреза-источника с областью 2 разреза-приемника. Участок изображения, обведенный малиновым контуром, показан в увеличенном виде в окне лупы. Для заливки области 4 выбран желтый цвет, а для области 2 — голубой, причем область с голубым цветом выводится с прозрачностью $\sim 50\%$. Общая часть (пересечение) областей в данном случае закрашивается зеленым цветом. Для того чтобы лучше увидеть, какие части областей пересекаются

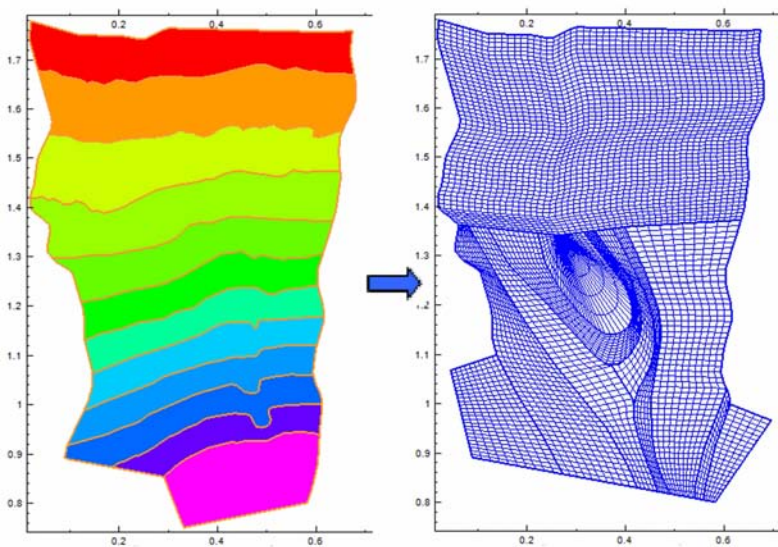


Рис. 3. Разрез-источник (слева) и разрез-приемник (справа)

²Тесселяция (tessellation) — получение мозаичного представления многоугольника в виде набора треугольников.

и каким образом, пользователь может менять прозрачность от 0 до 100 %, перемещая с помощью мыши бегунок в правой нижней части экрана.

Для вычисления контура (контуров) пересечения областей используется библиотека в открытых кодах OpenCascade [7]. Результат поиска пересечений на рис. 5 (см. также цветную вкладку) отображен контуром красного цве-

та. В строке состояния программа выводит суммарную площадь всех контуров. Если контуров несколько, то программа позволяет быстро переходить от одного к другому, выводя их последовательно на экран. Основная цель просмотра контуров пересечений — определить, действительно ли области пересекаются или пересечение вызвано погрешностью построения сетки. В последнем случае "пересекающуюся" пару областей можно исключить из пересчета, убрав соответствующую отметку ("галочку") в дереве пересечений.

Кроме пересекающихся областей, пользователь может увидеть, какие вещества разреза-источника попадают в выбранную им область разреза-приемника. На рис. 6 (см. также цветную вкладку) в левой нижней части экрана (под деревом пересечений) выбрана закладка *По веществам*. Левее графического представления разреза показана палитра с номерами веществ. Область разреза-приемника по-прежнему вся заливается голубым цветом, но ячейки разреза-источника теперь имеют цвет, соответствующий номеру вещества в палитре. Если ячейка содержит несколько веществ, т. е. является смешанной, она закрашивается пропорционально доле каждого вещества.

Если требуется пересчитать не всю область, а конкретный фрагмент, он выбирается с помощью диалога, показанного на рис. 7.

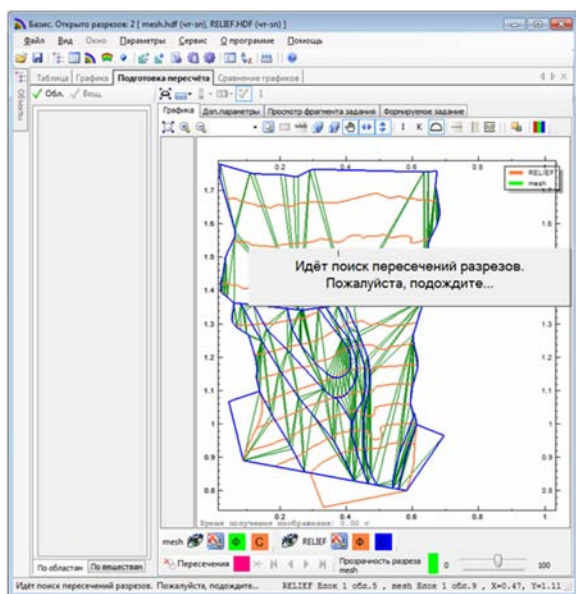


Рис. 4. Поиск пересечений областей разрезов с использованием тесселяции OpenGL

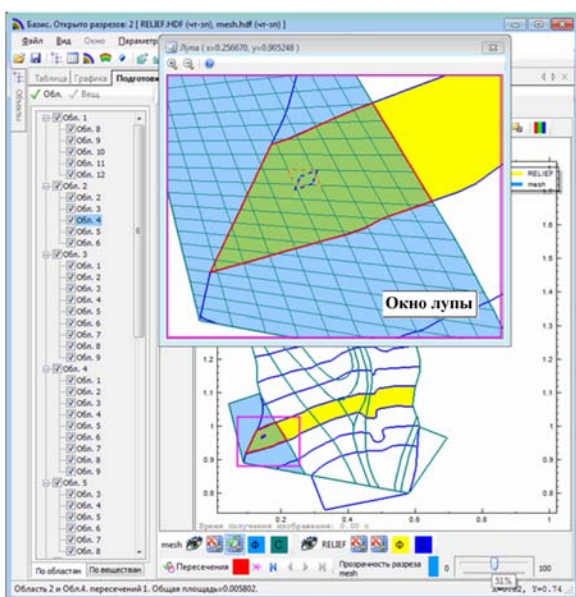


Рис. 5. Результат поиска пересечений областей при выбранной закладке *По областям*

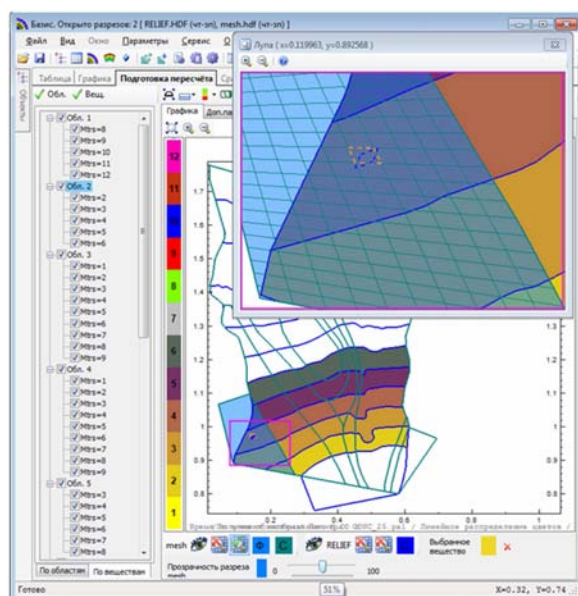


Рис. 6. Результат поиска пересечений областей при выбранной закладке *По веществам*

Для более точного анализа того, как определенное вещество попадает в ячейки области разреза-приемника, можно использовать инструмент для управления прозрачностью изображений разрезов. На рис. 8 (см. также цветную вкладку) показано попадание вещества 4 разреза-источника в область 2 разреза-приемника. На изображении слева область 2 разреза-приемника полностью непрозрачна. При этом заливка ячеек сетки разреза-приемника полностью перекрывает заливку ячеек сетки по веществам для разреза-источника. На изображении справа область разреза-приемника полностью прозрачна. Видна только заливка ячеек сетки для вещества 4 разреза-источника. На центральном изображении прозрачность заливки областей разреза-приемника составляет ~50%, поэтому сквозь изображение заливки

ячеек сетки области разреза-приемника видна заливка ячеек для вещества 4 разреза-источника. Если в результате анализа делается вывод, что доля какого-то вещества разреза-источника, попавшего в выбранную пользователем область разреза-приемника, незначительна или это попадание вызвано погрешностями построения сетки, то данное вещество можно исключить из пересчета, убрав в дереве пересечений областей соответствующую ему отметку.

Подсистема подготовки пересчета позволяет при необходимости заменить номера некоторых веществ на другие (переименовать вещества), а также указать дополнительные параметры для пересчета. Например, указать номер вещества и его плотность для тех ячеек разреза-приемника, в которые не попадает ни одно вещество разреза-источника. И наконец, пользователь может просмотреть автоматически сформированное задание (рис. 9) и сохранить его в файле для последующего выполнения в подсистеме запуска пересчета. В задание может быть добавлено несколько фрагментов для пересчета разных областей или разных условий пересчета.

Подсистема запуска задания

После того как файл с заданием сформирован, пользователь переходит в подсистему запуска пересчета (рис. 10).

В этой подсистеме он может взять из выбранного файла задание на пересчет, при необходимости сохранить его в архиве заданий или

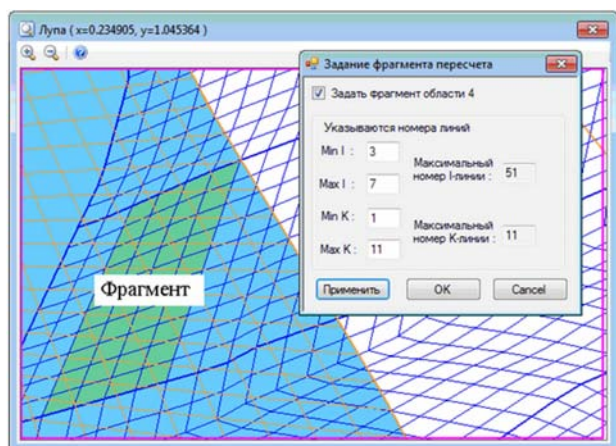


Рис. 7. Задание фрагмента области

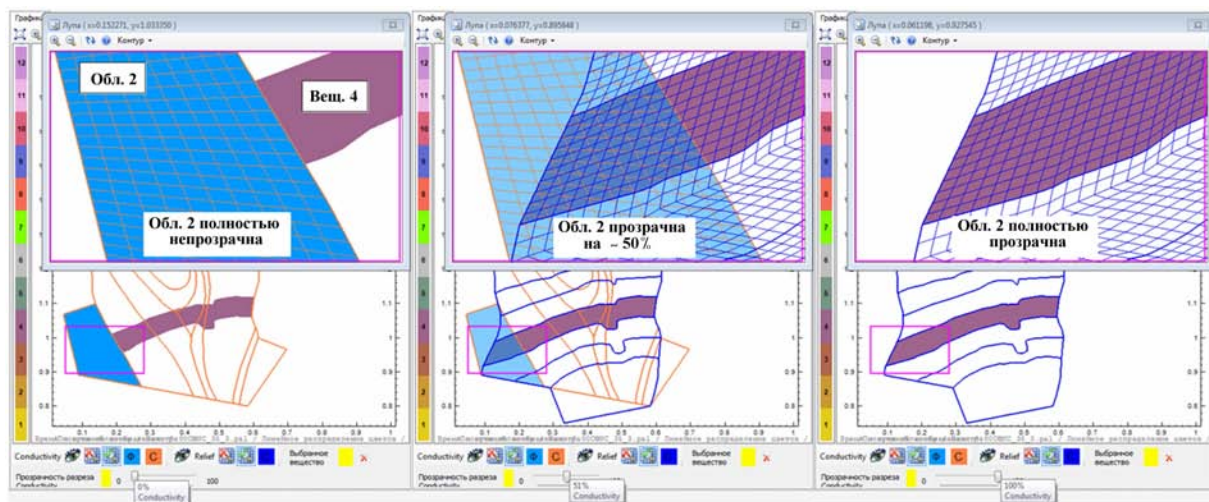


Рис. 8. Использование управляемой прозрачности для анализа попадания веществ

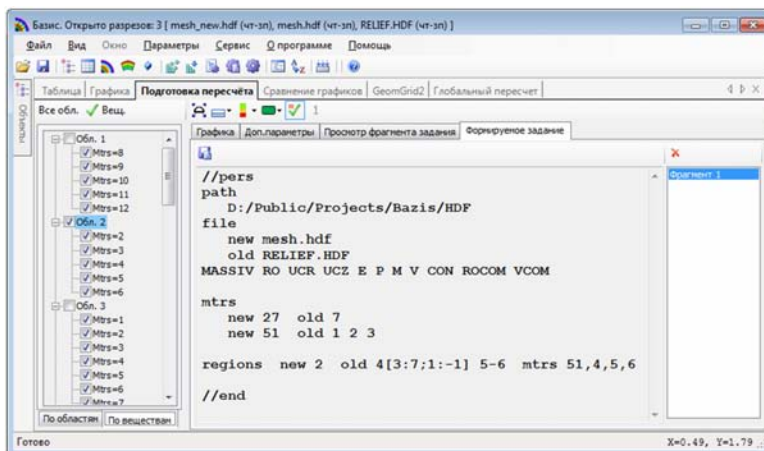


Рис. 9. Просмотр сформированного задания

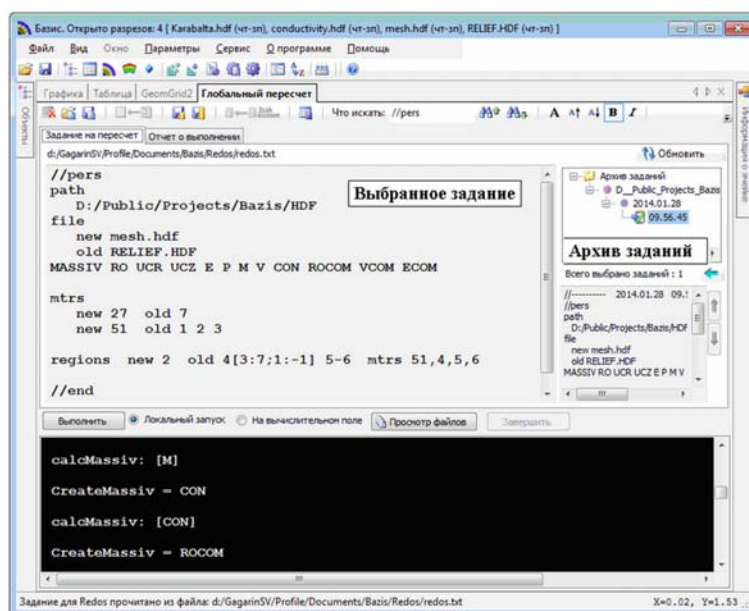


Рис. 10. Запуск программы пересчета (REDOS)

выбрать задание из архива. Здесь допускается вносить любые изменения и добавления в текст задания. Нажатием кнопки *Выполнить* пользователь запускает программу REDOS либо на локальном компьютере, либо на удаленном вычислительном сервере. При этом на его экран выдается консольный вывод программы, а по окончании пересчета — отчет о выполнении.

После завершения выполнения программы REDOS и анализа отчета о результатах ее выполнения пользователь может сравнить исходный разрез с разрезом, полученным после его пересчета (интерполяции) на новую сетку. Для этого используются подсистема сравнения графических изображений разрезов и подсистема расчета средних значений.

Подсистема сравнения изображений разрезов

Подсистема сравнения графических изображений разрезов позволяет получить на одном экране изображения нескольких разрезов. Изображения могут выводиться как в отдельных окнах, так и в совмещенном окне с использованием управляемой прозрачности. Таким образом, можно сравнить разрез-источник (до пересчета) и результирующий разрез (после пересчета). Изображения разрезов выводятся на экран в согласованной системе координат. То есть изменение масштаба изображения в одном окне приводит к такому же изменению масштаба в других окнах для других разрезов.

На рис. 11 (см. также цветную вкладку) изображения разрезов показаны в совмещенном окне. В результирующем разрезе после пересече-

та имеются смешанные ячейки. Для разреза-источника выбрана физическая величина NM (номер вещества), а для разреза-приемника —

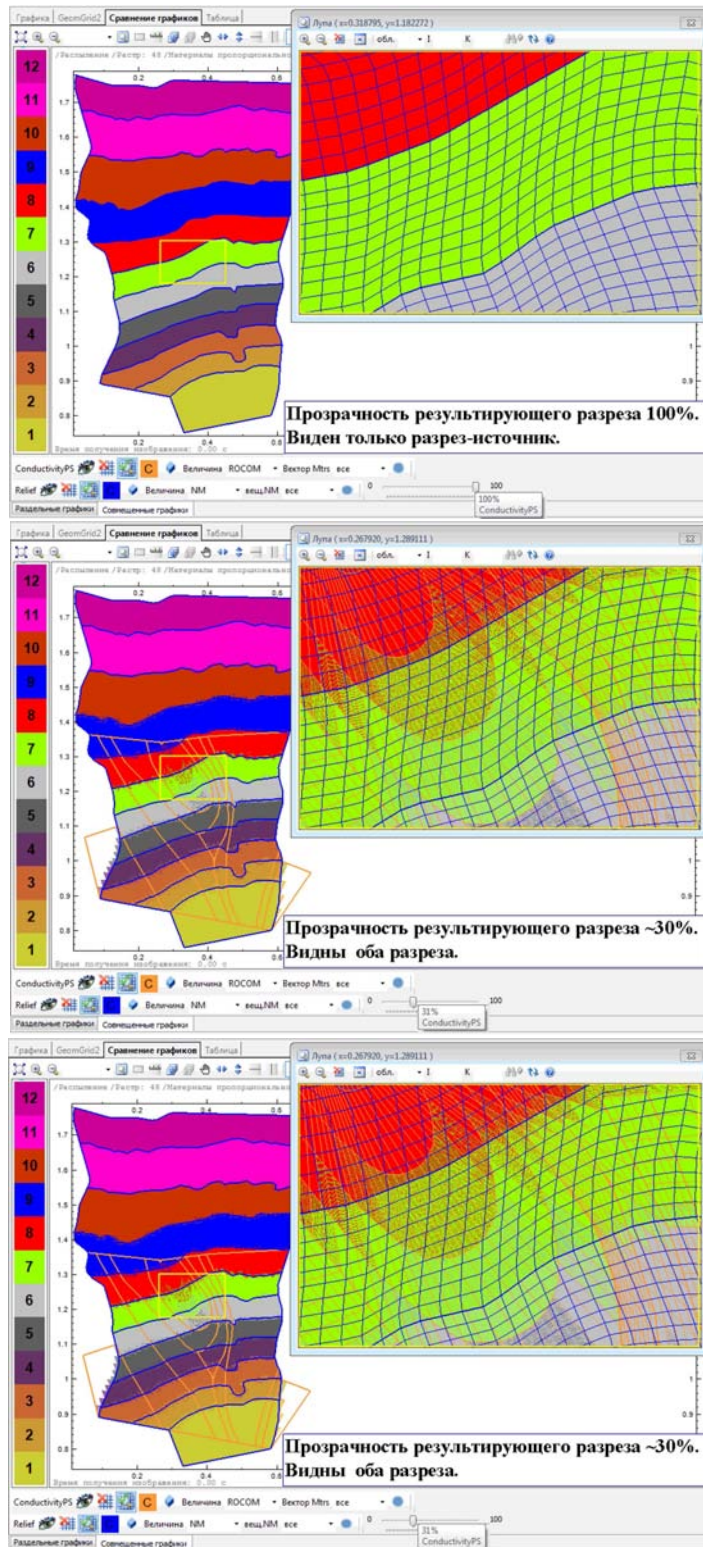


Рис. 11. Сравнение изображений разрезов в совмещенном окне с использованием управляемой прозрачности

ROCOM (плотность компонентов вещества). Для заливки ячеек цветом используется одна и та же палитра. При этом можно использовать управляемую прозрачность. Один из разрезов изображается полностью непрозрачным, а другой — с заданной прозрачностью. Этот порядок можно менять. На рис. 11 сверху прозрачность результирующего разреза 100 %, поэтому виден только разрез-источник. На рис. 11 снизу прозрачность результирующего разреза 0 %, он полностью перекрывает разрез-источник. На рис. 11 в центре прозрачность результирующего разреза $\sim 30\%$, видны оба разреза. Перемещая с помощью мыши бегунок, регулирующий прозрачность, можно визуально оценить качество пересчета.

Реализована возможность показа значений различных физических величин в выбранной пользователем точке пространства разрезов (рис. 12, см. также цветную вкладку). Цвет контуров окон с информацией о ячейке совпадает с цветом сетки, это помогает лучше ориентироваться. Видно, что в ячейке разреза-источника плотность $RO = 830,0$, ячейка не смешанная. В этой же точке в ячейке результирующего разреза плотность $RO = 834,3$, причем ячейка смешанная, в нее попали вещества 5 и 6.

Подсистема расчета средних значений

Подсистема расчета средних (балансовых) значений физических величин позволяет численно сравнить разрезы до и после пересчета. На рис. 13 показаны рассчитанные физические величины — масса, объем и плотность — по областям и всему разрезу до пересчета, на рис. 14 — после пересчета. Из выведенных на экран таблиц, например, видно, что масса системы до пересчета равна ~ 3357 , а после пересчета ~ 3309 . Объяснение такого большого расхождения следует из рис. 15 (см. также цветную вкладку). Часть области разреза источника (обведенная зеленым контуром) вообще не попала в области разреза-приемника.

Имеется также возможность рассчитать выбранные пользователем физические величины по веществам. На рис. 16, 17 средние значения массы, объема и плотности показаны по областям и всему разрезу до пересчета и после него с раскладкой по веществам. В таблицах в первой колонке выводится название объекта расчета (разрез, область, сумма выбранных областей и т. д.). Во второй колонке — номера веществ, причем цвет вещества в этой колонке совпадает с цветом закрашки вещества с тем

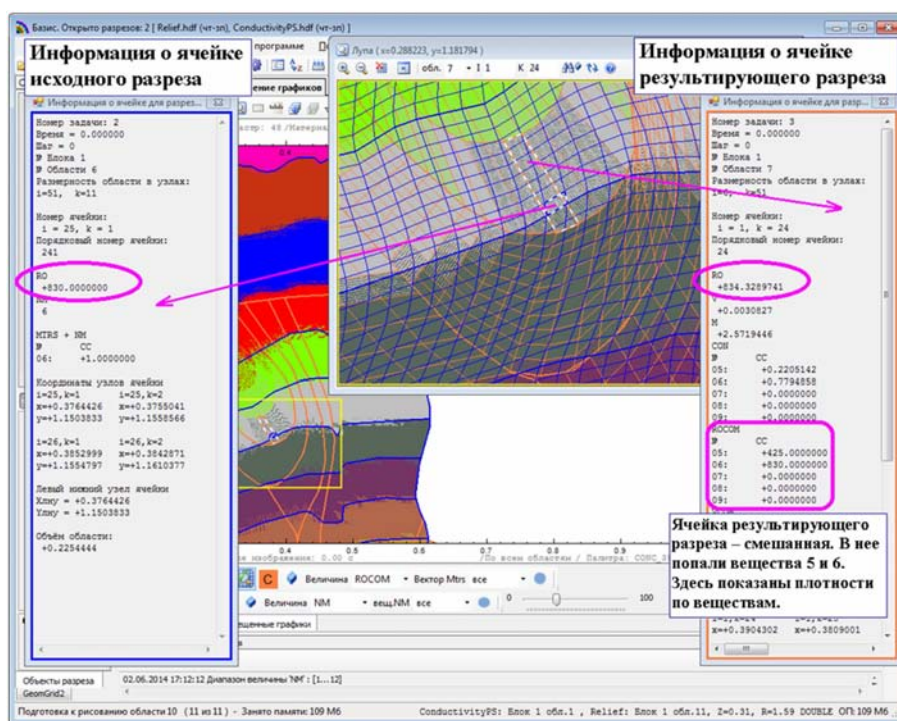


Рис. 12. Просмотр информации в ячейках разреза-источника и результирующего разреза, попадающих в заданную точку пространства разрезов (пунктиром выделены пересекающиеся ячейки)

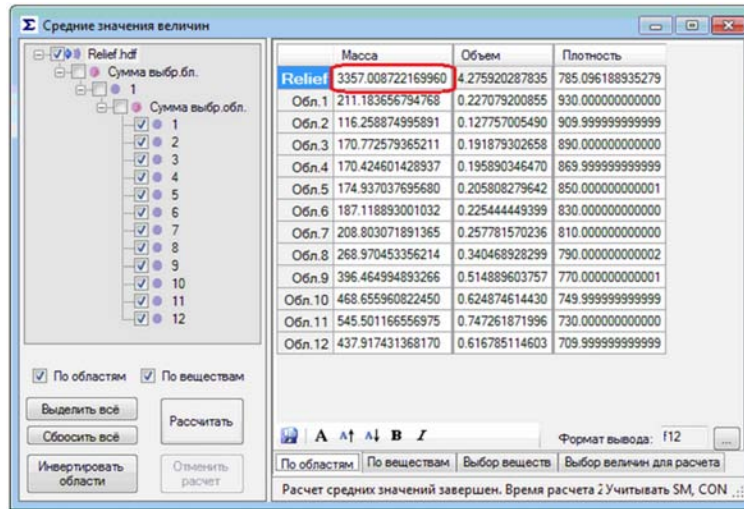


Рис. 13. Средние значения массы, объема и плотности по областям и всему разрезу до пересчета

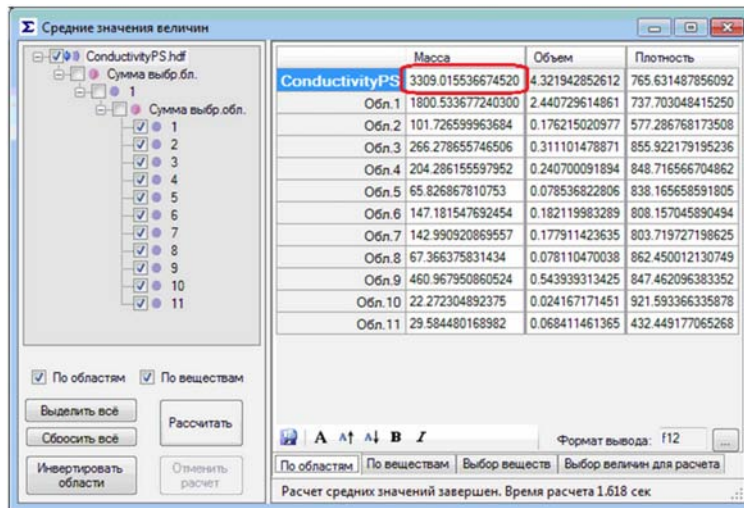


Рис. 14. Средние значения массы, объема и плотности по областям и всему разрезу после пересчета

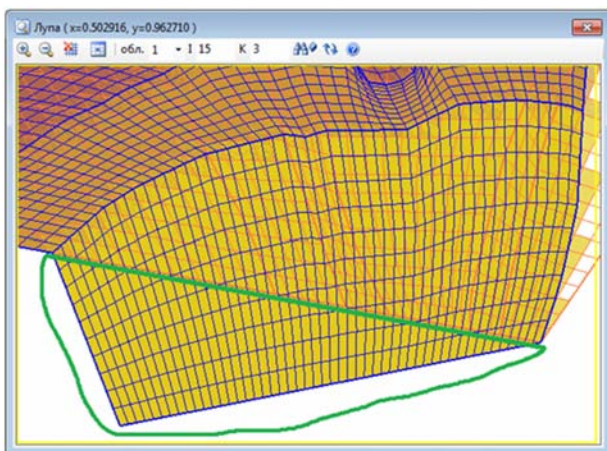


Рис. 15. Иллюстрация для объяснения расхождения по массе

же номером на графическом изображении разреза. В последующих колонках выводятся значения физических величин для каждого вещества и в целом по объекту расчета (разрезу, области и т. д.).

Расчитанные значения могут сохраняться в формате приложений MS Excel и Matlab. Анализ полученных балансовых значений позволяет пользователю сделать вывод о степени успешности проведенной интерполяции.

Заключение

Описаны возможности ПК БАЗИС по проведению интерполяции данных при расчете двумерных задач.

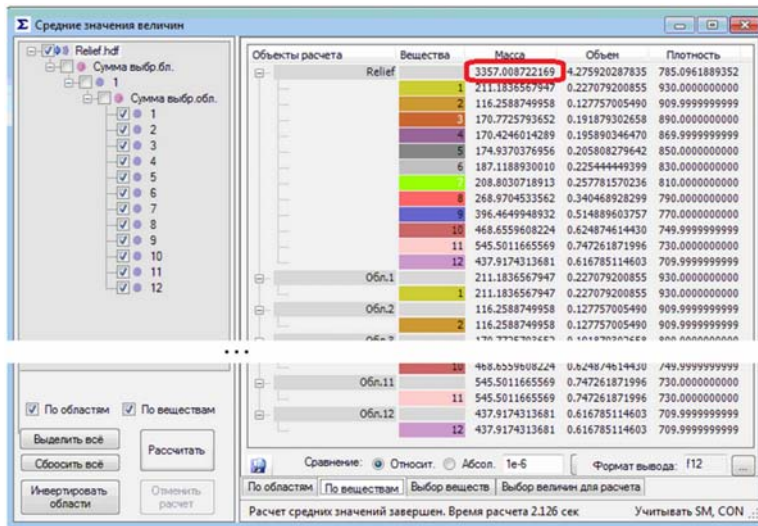


Рис. 16. Средние значения массы, объема и плотности по областям и всему разрезу до пересчета с раскладкой по веществам

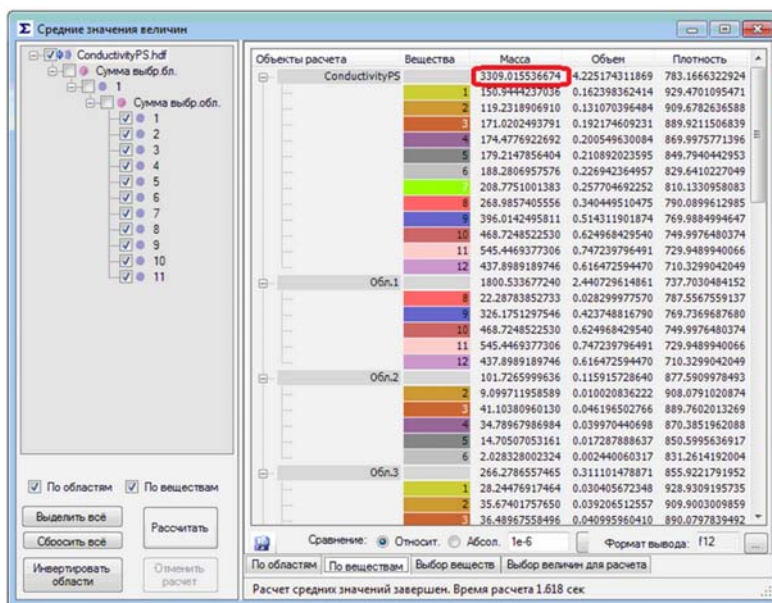


Рис. 17. Средние значения массы, объема и плотности по областям и всему разрезу после пересчета с раскладкой по веществам

ПК БАЗИС позволяет:

- визуализировать данные расчета двумерной задачи в разрезе-источнике (до пересчета) в текстовом и графическом виде;
- формировать с помощью подсистемы GeomGrid2 разрез-приемник с новой сеткой;
- в интерактивном графическом режиме готовить задание на интерполяцию данных;
- запускать процесс интерполяции на локальном компьютере пользователя или удален-

ном вычислительном сервере;

- анализировать результаты интерполяции в графическом и текстовом виде.

Внедрение в эксплуатацию ПК БАЗИС позволило сократить время, затрачиваемое на проведение интерполяции разрезов, и уменьшило вероятность ошибок на этапе пересчета.

Авторы благодарят специалистов прикладных программных комплексов РФЯЦ-ВНИИТФ за использование ПК БАЗИС в их практической работе.

Список литературы

1. Мельникова С. Н., Могиленских Д. В., Павлов И. В. и др. Принципы построения и функциональное содержание системы визуализации для анализа скалярных и векторных полей, заданных на двумерных регулярных сетках // Межд. семинар "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 18—21 сентября 2000 г.: Препринт № 172. Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2000. С. 53—55.
2. Гагарин С. В., Беломестных О. В., Галицкая Н. В. и др. Комплексный подход и методы повышения эффективности подготовки и расчета данных для численного моделирования двумерных задач. Программный комплекс БАЗИС // Тез. докл. межд. конф. "Забабахинские науч. чтения". Снежинск, 16—20 апреля 2012 г. Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2012. С. 307.
3. Гагарин С. В., Беломестных О. В., Галицкая Н. В. и др. Комплексный подход и методы повышения эффективности подготовки и расчета данных для численного моделирования двумерных задач в программном комплексе БАЗИС // Мат. 9-й всеросс. конф. "Сеточные методы для краевых задач и приложения". Казань, 17—22 сентября 2012 г. Казань: "Отечество", 2012. С. 386.
4. Гагарин С. В., Беломестных О. В., Могиленских Д. В. и др. Программный комплекс 2D РНД БАЗИС. Повышение эффективности подготовки и расчета данных для численного моделирования // Тез. докл. XIII межд. семинара "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 3—7 октября 2011 г. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2012. С. 100.
5. Беломестных О. В., Гагарин С. В., Галинова А. В. и др. Программа GeomGrid2 для задания геометрии, построения сеток и формирования начальных данных двумерных задач // Там же. С. 91.
6. Ву М., Девис Т., Нейдер Дж., Шрайнер Д. OpenGL. Руководство по программированию. 4-е изд. С.-Пб.: Питер, 2006.
7. Open CASCADE Technology. <http://www.opencascade.org>.

Статья поступила в редакцию 18.07.14.

2D SIMULATION DATA INTERPOLATION TECHNOLOGY IN THE BAZIS PROGRAM PACKAGE / S. V. Gagarin, N. V. Galitskaya, O. V. Belomestnykh, S. I. Kuzmina, D. V. Mogilenskikh, E. A. Prib, A. A. Ushkova (FSUE RFNC-VNIITF, Snezhinsk, Chelyabinsk region).

BAZIS is a program package intended for initial data generation for 2D continuum mechanics simulations and setting up and performing of global data interpolation from one structured difference grid to another. The program package consists of eight subsystems. The paper demonstrates the performance of the subsystems for graphic and tabulated representation of 2D view data, remap initiation, comparison of view graphics and calculation of mean (balance) values of physical quantities.

Keywords: continuum mechanics, view, STDV (standard two-dimensional view), interpolation, initial geometry, difference grid, physical quantities.