

УДК 519.6

УНИФИЦИРОВАННАЯ СИСТЕМА GeomGrid2 ДЛЯ ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПРЕПРОЦЕССИНГА ДВУМЕРНЫХ ЗАДАЧ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

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

Сервисная система GeomGrid2 предназначена для подготовки, формирования и расчета начальных данных двумерных задач механики сплошной среды. GeomGrid2 является подсистемой программного комплекса БАЗИС. Подсистема GeomGrid2 позволяет в визуальном интерактивном режиме формировать начальную геометрию задачи, строить расчетные сетки (структурированные и неструктурированные) и поля точечных масс (частиц), задавать физические свойства для расчетов двумерных задач механики сплошной среды.

Ключевые слова: РНД, начальная геометрия, формат СДР, разрез, формат XML, AutoCAD, счетная область, физическая подобласть, структурированная сетка, неструктурированная сетка, физические величины.

Введение

В технологической цепочке процесса прикладного численного моделирования сложных физических систем одним из ответственных этапов является этап подготовки и расчета начальных данных (РНД).

Системы подготовки начальных данных (ГРАДИС, ПИРС-БТ), использовавшиеся ранее в РФЯЦ-ВНИИТФ некоторыми комплексами программ математического моделирования, стали неэффективными. Это связано с увеличивающейся сложностью задач, моделируемых в институте, а также с ростом вычислительных мощностей: время проведения расчетов двумерных задач механики сплошной среды (МСС) значительно сократилось, тогда как время подготовки данных для расчета осталось неизменным. Отсутствие унификации при задании начальных данных в различных комплексах программ численного моделирования РФЯЦ-ВНИИТФ вызывало проблемы при обмене результатами расчетов между комплексами, а также при формировании сложных задач на основе данных, полученных от нескольких комплексов. Таким образом, современные условия выдвинули серьезные требования к повышению эффективности выполнения этапа РНД.

С учетом вышесказанного и в связи с необходимостью обновления отечественного программного обеспечения в РФЯЦ-ВНИИТФ была поставлена задача — создать принципиально новую единую многофункциональную систему, которая позволила бы значительно оптимизировать и ускорить процесс подготовки начальных данных для расчета. В 2009 г. в рамках программного комплекса БАЗИС [1] началась разработка системы, которая получила название GeomGrid2 [2]. Система GeomGrid2 разрабатывалась так, чтобы была возможность ее использования не только как отдельной вкладки в рамках программного комплекса БАЗИС (в виде UserControl), но и автономно, как самостоятельного приложения.

Процесс формирования и подготовки данных для расчета в системе GeomGrid2 разделен на несколько логических этапов: формирование начальной геометрии, формирование иерархии данных задачи (блоки, области и др.), построение расчетных сеток в областях и блоках, задание газодинамических параметров и запись данных в файлы. Такой подход к формализации данных позволяет минимизировать количество действий и ошибок, снизить трудозатраты поль-

зователя на подготовку данных и ускорить процесс создания задачи.

Многие годы в РФЯЦ-ВНИИТФ для задания геометрии задач использовалась система автоматизированного проектирования (САПР) AutoCAD, в связи с чем в системе GeomGrid2 был реализован импорт/экспорт геометрических данных из этой системы.

Для обмена данными расчетов задач МСС между различными комплексами программ численного моделирования в РФЯЦ-ВНИИТФ используется двоичный унифицированный формат СДР (стандартный двумерный разрез). При формировании новых разрезов задач иногда возникает необходимость использовать часть данных уже существующих файлов СДР. Для этого в системе GeomGrid2 разработаны соответствующие методы и эргономичный интерфейс пользователя.

В РФЯЦ-ВНИИТФ различные комплексы программ численного моделирования используют для расчета задач МСС как структурированные (регулярные), так и неструктурированные (нерегулярные) сетки, поэтому в системе GeomGrid2 реализовано построение расчетных сеток обоих типов.

Для начала расчета задач МСС используются данные, записанные в определенных форматах, которые, как правило, для разных программных комплексов различаются. Чтобы исключить из технологии этапа РНД программы-конверторы для преобразования одного формата в другой, в системе GeomGrid2 поддерживается широкий спектр форматов хранения данных.

Пользовательский интерфейс системы

Основными компонентами пользовательского интерфейса системы GeomGrid2 являются дерево объектов, таблица свойств объектов и графическое окно. Дерево объектов предназначено для формирования структуры задачи (блоки, области, подобласти) и отражает всю геометрию системы. Таблица свойств содержит информацию о параметрах, выбранных в дереве объектов (геометрических, сеточных, физических и др.). В графическом окне происходит визуализация всего процесса формирования данных задачи.

Современные средства разработки — платформа .Net Framework, языки программирования C# и C++ — позволили создать в системе GeomGrid2 современный и эргономичный интерфейс пользователя. Для графических опера-

ций используется библиотека в открытых кодах NPlot [3]. Для операций над геометрическими объектами задействована библиотека в открытых кодах OpenCASCADE [4].

На рис. 1 представлен вид пользовательского интерфейса системы GeomGrid2, который содержит панели меню и инструментов, графическое окно, дерево объектов, таблицу свойств и информационную строку.

Функциональность системы GeomGrid2

Для подготовки, формирования и расчета двумерных данных в рамках системы GeomGrid2 разработана функциональность системы, необходимая для решения основных задач препроцессинга. Функциональность системы позволяет:

- формировать начальную геометрию:
 - создавать геометрические объекты (точки, отрезки, дуги, окружности, эллипсы, составные кривые) аналитическим и графическим способами;
 - редактировать геометрические объекты аналитическим и графическим способами;
 - отменять/возвращать действия по созданию, удалению и редактированию геометрических объектов (протокол отмены/возврата действий UnDo/ReDo);
 - загружать данные из файлов СДР;
 - загружать данные из САПР AutoCAD;
- формировать блоки, счетные области и физические подобласти;
- строить расчетные сетки:
 - регулярные [5];
 - нерегулярные [6];
- формировать поля частиц;
- задавать газодинамические параметры;
- сохранять данные в файлах разных форматов.

Формирование начальной геометрии

Для формирования начальной геометрии в системе GeomGrid2 разработан широкий инструментарий для создания и редактирования геометрических объектов.

В целом методы создания геометрических объектов можно разделить на аналитические и графические. Для создания геометрических объектов аналитическим методом был разработан эр-

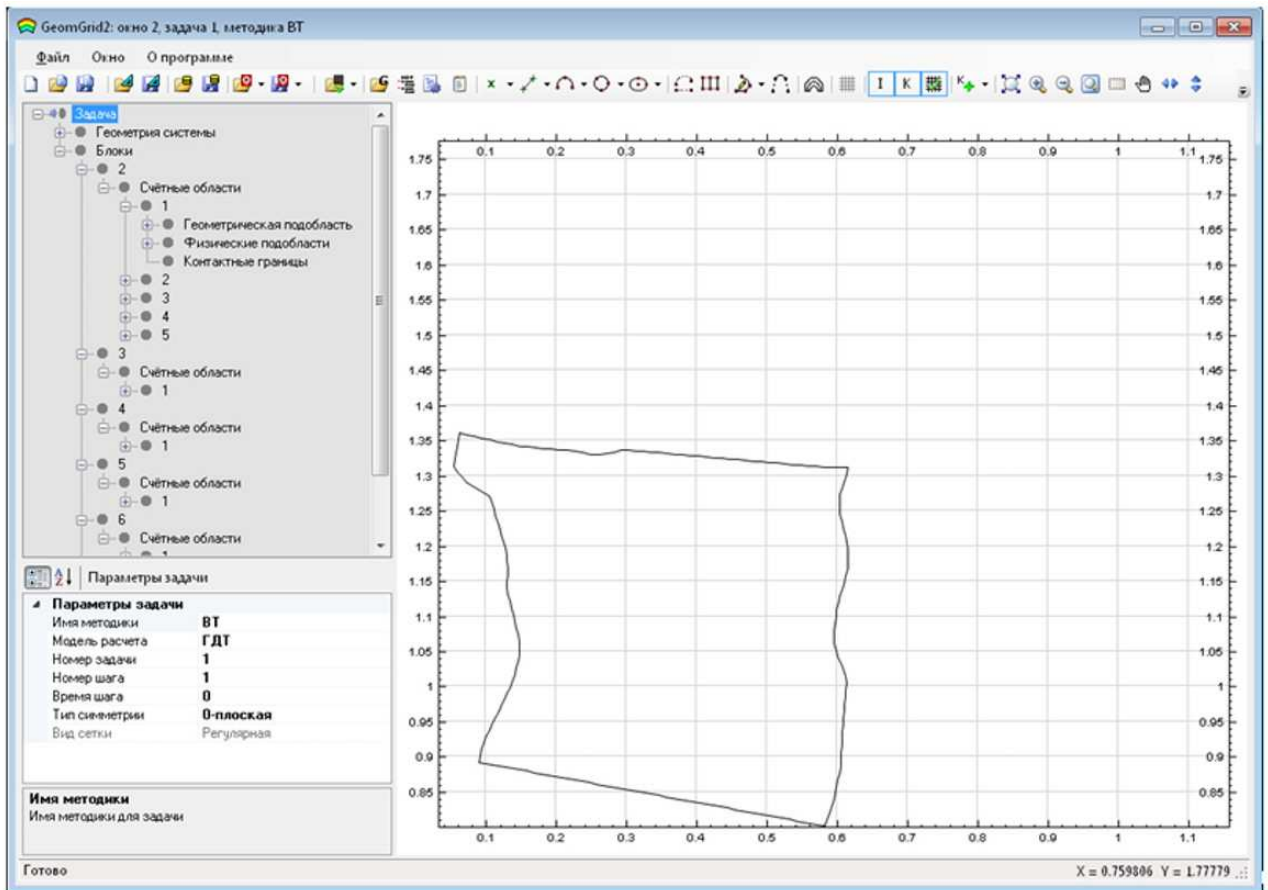


Рис. 1. Общий вид пользовательского интерфейса системы *GeomGrid2*

гономичный интерфейс пользователя, при помощи которого задаются координаты точек геометрических объектов, значения радиусов, углов и т. д. Создание геометрических объектов графическим методом осуществляется в интерактивном режиме при помощи *мыши* и графического окна системы. При создании объектов графическим методом в системе реализована "привязка" создаваемого объекта к точкам начала, конца и центра существующих в системе геометрических объектов. Кроме того, имеется графический метод для создания геометрических объектов — точек, дуг и отрезков — пересечением выбираемых в графическом окне объектов системы.

Для работы с данными файлов СДР разработан инструмент, при помощи которого можно осуществлять загрузку:

- границ областей (алгоритм восстановления границ по граничным точкам сеток);
- сеточных линий (алгоритм формирования составных кривых на основе узлов сеток областей);

– линий раздела веществ и изолиний (алгоритм восстановления этих линий по концентрациям).

В системе *GeomGrid2* реализованы функции для импорта данных о геометрии из САПР *AutoCAD*.

Можно объединять части чертежей САПР *AutoCAD*, части файлов СДР, а также дополнять их необходимыми геометрическими объектами и редактировать с помощью инструментов системы *GeomGrid2*. Геометрия системы отображается в одном графическом окне, что позволяет визуально контролировать корректность и согласованность создаваемой геометрии задачи. На рис. 2 продемонстрировано добавление данных из чертежа *AutoCAD* к уже созданной в системе *GeomGrid2* геометрии.

Загруженные и построенные геометрические объекты можно редактировать аналитическим и графическим способами. При аналитическом способе применяется сервис, разработанный для редактирования численных данных (координат

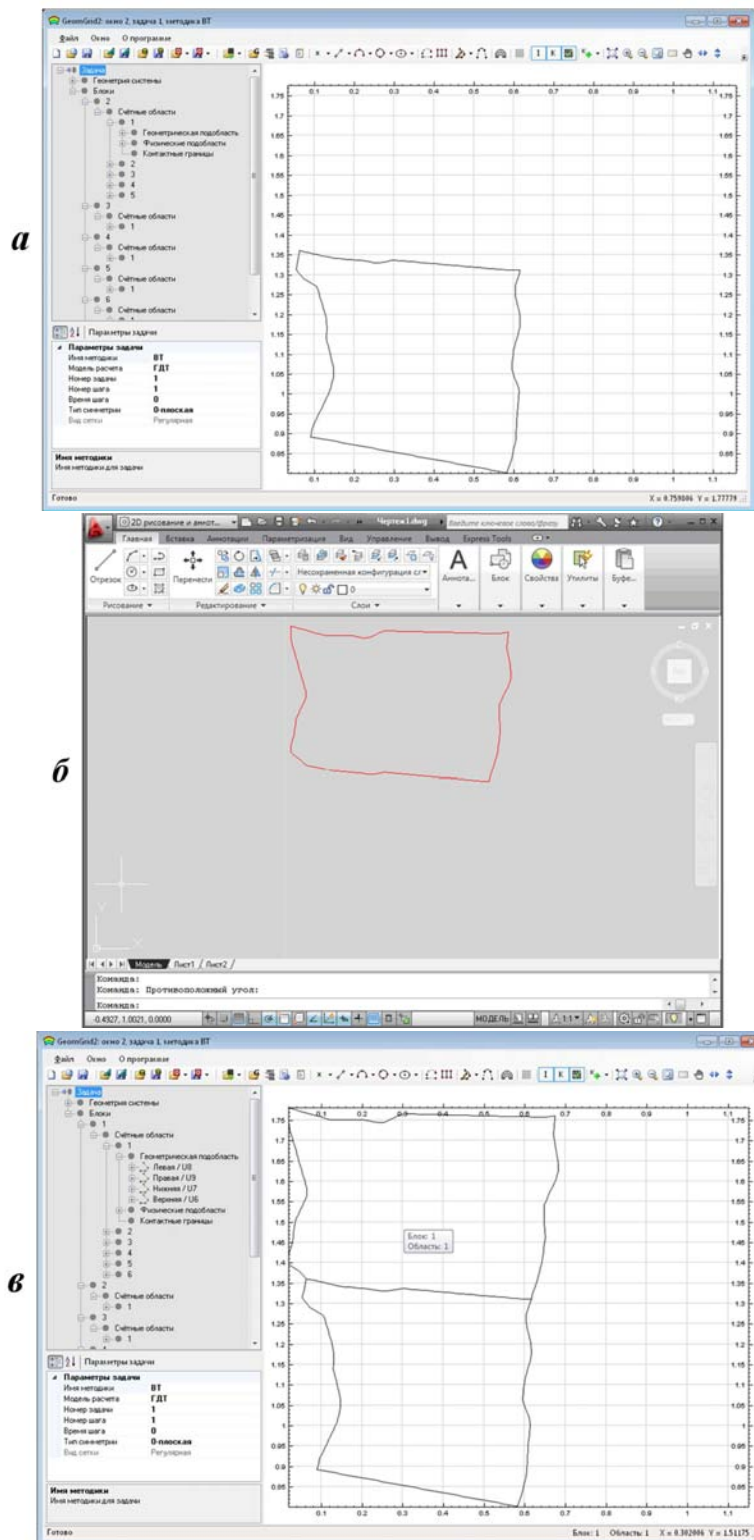


Рис. 2. Добавление данных из AutoCAD в систему GeomGrid2: а — начальная геометрия в системе GeomGrid2; б — геометрия в САПР AutoCAD; в — объединенная геометрия

точек объектов, радиусов, дуг и др.) существующих в системе геометрических объектов. При графическом способе используется набор

инструментов для изменения с помощью мыши в графическом окне системы данных геометрических объектов (длины, угла наклона), а также

параллельного переноса вдоль одной или обеих осей координат.

Для отмены или возврата действий по созданию, редактированию или удалению геометрических объектов разработан инструмент Undo/ReDo, который включает в себя пошаговую отмену/возврат действий, а также протокол изменений, при помощи которого можно осуществлять выбор группы отдельных шагов для отмены или возврата.

В системе реализовано несколько способов выделения группы объектов:

- выбором узлов в дереве с помощью мыши и клавиш Ctrl и Shift;
- интерактивно в графическом окне при помощи мыши и клавиш Ctrl и Shift;
- интерактивно в графическом окне при помощи действий мышью на "резиновый прямоугольник".

Группа выбранных объектов визуализируется в графическом окне. Целью группового выбора объектов является последующее выполнение для всех них одной из команд: копирования, удаления, сдвига и др.

Все изменения данных (создание, редактирование, удаление, отмена/возврат действия и др.) интерактивно отображаются в графическом окне системы.

Формирование блоков и областей

Загруженные и построенные данные начальной геометрии используются как конструктивные элементы при формировании блоков и областей новой задачи. Для формирования структуры задачи (блоков и областей) используются команды контекстного меню дерева объектов. С помощью этих команд создаются блоки/области, физические подобласти задачи, контактные границы и др. Для упрощения и ускорения формирования счетных областей и физических подобластей разработан алгоритм автоматического определения замкнутых контуров областей.

Построение, диагностика и улучшение качества расчетных сеток

В системе *GeomGrid2* для загрузки генераторов построения и оптимизации двумерных сеток используется технология подключаемых мо-

дулей — плагинов. Такая технология позволяет удалять, заменять, добавлять отдельные модули без изменения основного кода и необходимости повторной перекомпиляции приложения. Это могут делать как основные разработчики *GeomGrid2*, так и другие программисты в процессе эксплуатации системы. В настоящее время в системе существует 6 генераторов для построения регулярных расчетных сеток и 3 генератора — для нерегулярных. В одной задаче возможно построение сеток разного типа.

В системе *GeomGrid2* имеется инструмент для загрузки сеточных данных из файлов СДР, при помощи которого можно осуществлять выборку отдельных блоков/областей из файлов либо фрагментов областей, ограниченных заданными сеточными линиями.

Для анализа построенной либо загруженной из файлов СДР сетки в *GeomGrid2* разработан инструмент проверки качества ячеек сетки с помощью мер оценки качества [7]. В *GeomGrid2* на данном этапе существует 9 различных критериев оценки качества ячеек сетки, которые осуществляют проверку ячейки на вытянутость, выпуклость, изогнутость. В диалоге, представленном на рис. 3, можно задать один или несколько критериев (в этом случае будет считаться среднее значение по выбранным критериям).

После выполнения оценочных алгоритмов появляется диалоговое окно (рис. 4), в котором содержится статистическая информация о качестве ячеек сетки. Кроме того, для ускорения обнаружения "плохих" ячеек каждая ячейка закрашивается своим цветом (на черно-белом рис. 4 — оттенками серого) в соответствии с рассчитанным для нее коэффициентом качества.

Инструмент анализа реализован как для регулярных, так и нерегулярных сеток.

Минимизировать количество плохих ячеек можно с помощью одного из имеющихся оптимизаторов или воспользовавшись локальной корректировкой ячеек сетки. С помощью инструментов навигации по плохим ячейкам пользователь может выбрать участок сетки для корректировки и в некоторой окрестности перестроить сетку с использованием одного из генераторов сеток (рис. 5), добиваясь улучшения ее качества.

Генерация полей точечных масс (частиц)

Некоторые комплексы программ численного моделирования для дискретизации модели ис-

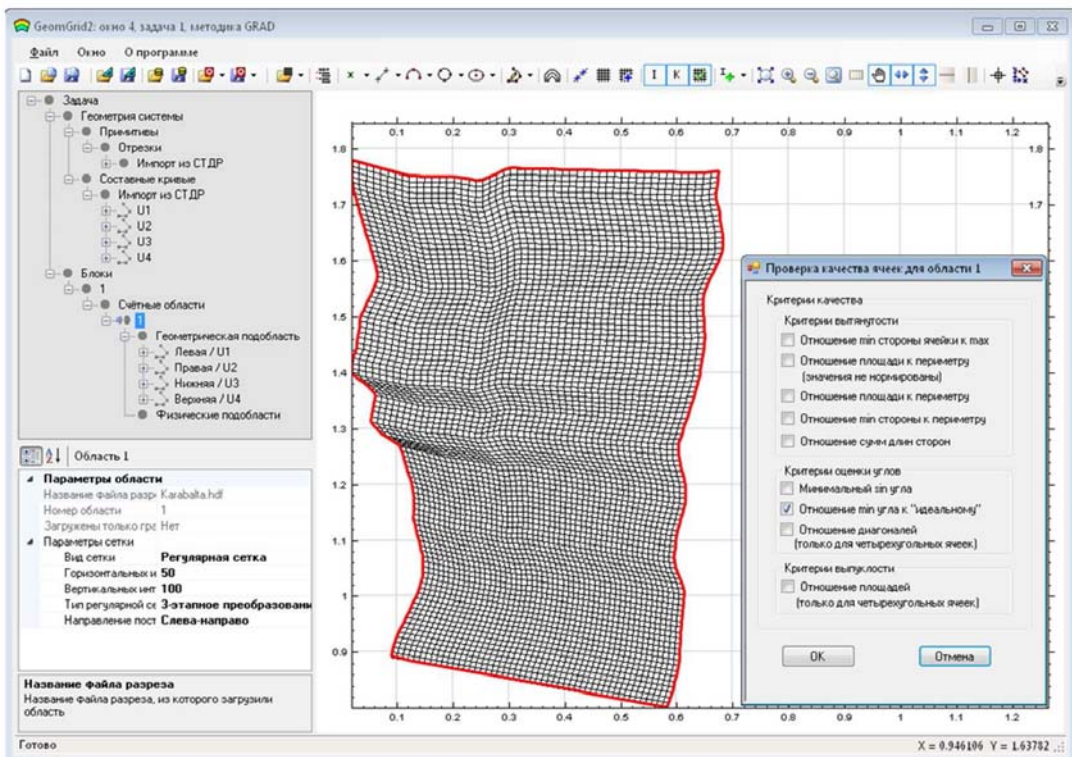


Рис. 3. Выбор критериев для оценки ячеек регулярной сетки

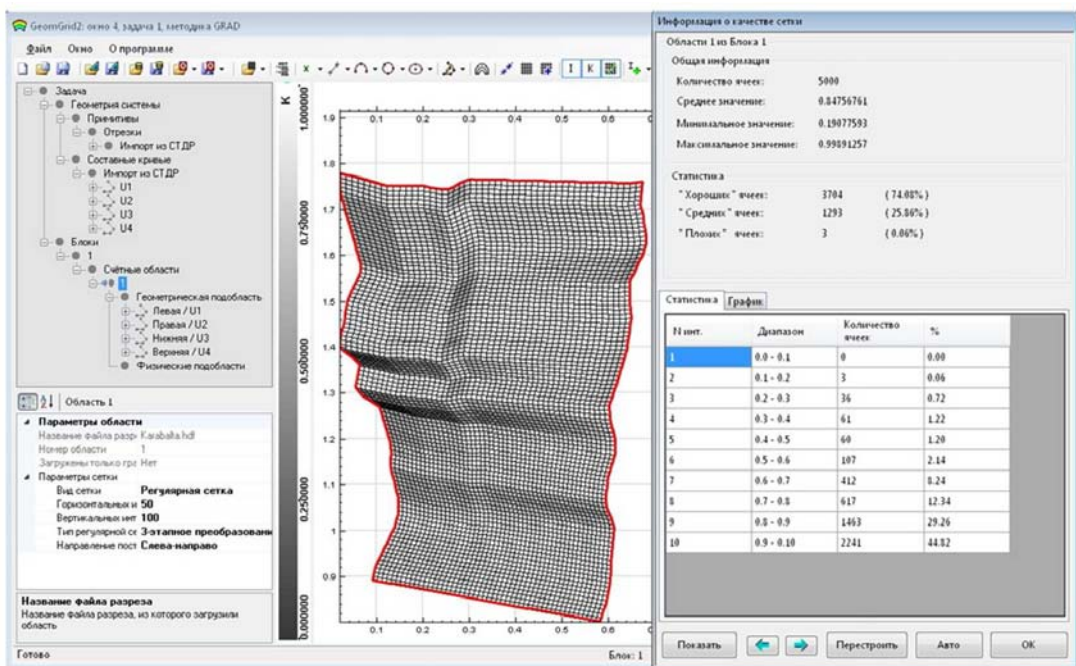
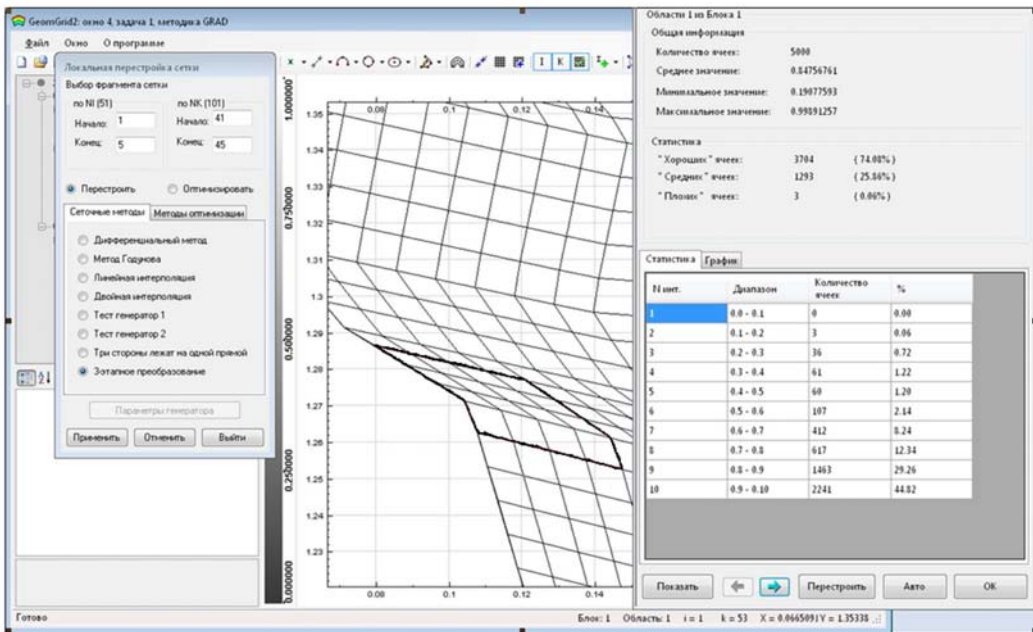


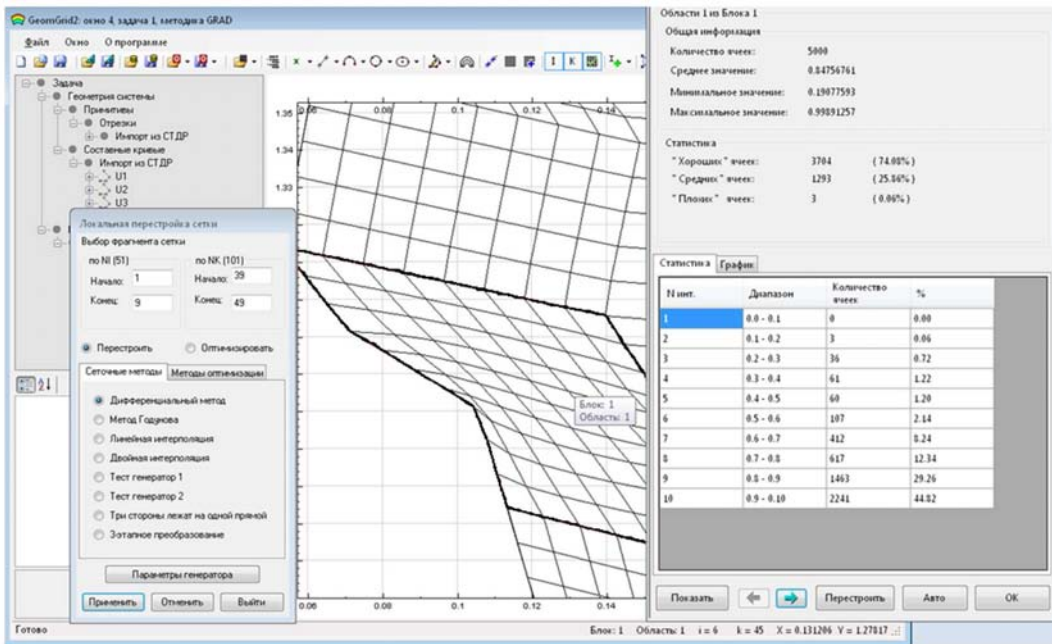
Рис. 4. Визуализация результата и статистическая информация после проверки качества сетки

пользуют поля точечных масс (частиц). Построение поля частиц в рамках системы GeomGrid2 возможно двумя способами. Первый способ заключается в генерации поля частиц внутри за-

мкнутого контура области, в которой не построена расчетная сетка. При втором способе генерация частиц происходит внутри ячеек регулярной



a



б

Рис. 5. Локальная перестройка регулярной сетки в окрестности плохой ячейки: *a* — окрестность до перестройки сетки; *б* — окрестность после перестройки сетки

сетки, построенной в области либо загруженной из файла СДР.

Построение поля частиц возможно с адаптацией или без адаптации к границе области. В случае с адаптацией к границе в окрестности этой

границы будет построено более подробное поле частиц.

На рис. 6 (см. также цветную вкладку) представлен пример построенных полей частиц в области с сеткой, а также в областях без сетки с адаптацией к границам и без нее.

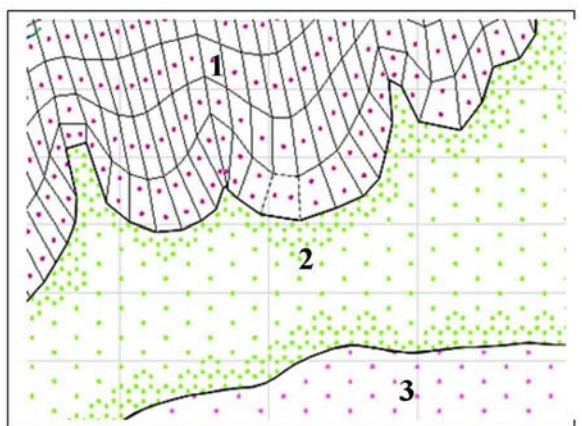


Рис. 6. Пример построенных полей частиц: 1 — в области с сеткой; 2 — в области без сетки с адаптацией к границам; 3 — в области без сетки без адаптации к границам

Задание газодинамических параметров

В системе GeomGrid2 реализованы задание и расчет следующих газодинамических параметров: объема, массы, плотности, энергии, скорости, температуры, массовых и объемных концентраций веществ.

Данные о веществах задаются в физических подобластях счетных областей при помощи инструментов интерфейса пользователя. Физических подобластей в счетной области может быть несколько. В связи с этим возникает необходимость распределения данных о веществах на единой расчетной сетке счетной области.

В рамках системы GeomGrid2 разработано два алгоритма для распределения данных о веществах, заданных в физических подобластях, по ячейкам сетки счетной области. Первый способ заключается в задании контактных границ между физическими подобластями, которые разделяют вещества счетной области. Второй способ заключается в задании замкнутых контуров всех физических подобластей счетной области.

Для геометрического разделения в областях физических подобластей в системе реализована визуализация контактных границ (маркерных линий). На рис. 7 представлена область с отображением в ней двух контактных границ, которые выделены другим цветом.

Существуют комплексы программ, которым для расчета задач МСС необходима интерпретация контактных границ не как набора геометрических объектов, а как набора точек. Для этого в системе GeomGrid2 разработаны алгорит-

мы для расстановки точек (узлов) на геометрических объектах, заданных в областях контактными границами. После расстановки узлы визуализируются в графическом окне и затем передаются в виде набора точек для расчета.

В процессе выполнения первого алгоритма распределения веществ по ячейкам сетки в окрестностях пересечения или совпадения контактных границ физических подобластей могут образовываться смешанные ячейки.

На рис. 8 (см. также цветную вкладку) представлена визуализация веществ, заданных в области, разделенной контактными границами. Цвет, которым закрашена часть области, соответствует номеру вещества, заданному в палитре. Это позволяет визуально оценить попадание вещества в ту или иную ячейку сетки.

Второй алгоритм распределения веществ в области заключается в вычислении пересечений ячеек сетки счетной области с геометрическими объектами контура физической подобласти. Ячейки, попадающие внутрь контура физической подобласти и не имеющие с ним пересечения, являются чистыми, и им назначается вещество той физической подобласти, внутрь контура которой они попали. Ячейки, имеющие пересечение с геометрическими объектами контуров физических подобластей, становятся смешанными. Для смешанных ячеек осуществляется расчет объемных и массовых концентраций в зависимости от площадных или объемных долей веществ в ячейке. Площадь и объем пересечения ячеек с контурами физических подобластей вычисляются при помощи функций библиотеки OpenCASCADE [4].

В системе GeomGrid2 разработан также инструмент, обеспечивающий задание для веществ наборов УРСов и пробегов.

Сохранение данных в файлах разных форматов

В программных комплексах численного моделирования задач МСС для начала расчета используется файл с данными, подготовленными на этапе РНД. В одних используется СДР, в других — разработанные специалистами различных комплексов внутренние форматы данных. В системе GeomGrid2 обеспечивается обработка файлов данных разных форматов (XML, СДР, DWG, GEO, G97 и др.). Это позволяет исключить из процесса подготовки данных программы-конверторы.

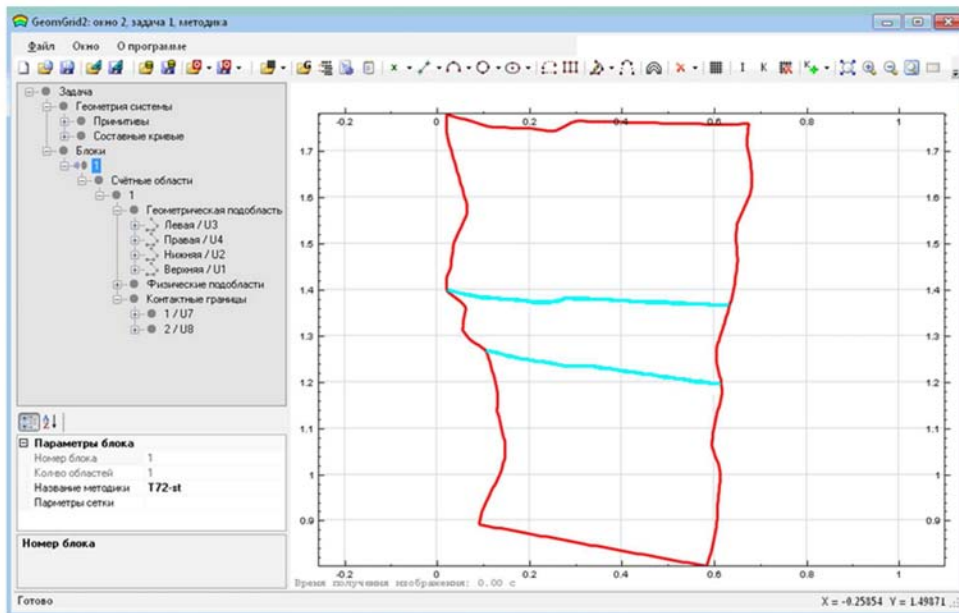


Рис. 7. Визуализация контактных границ

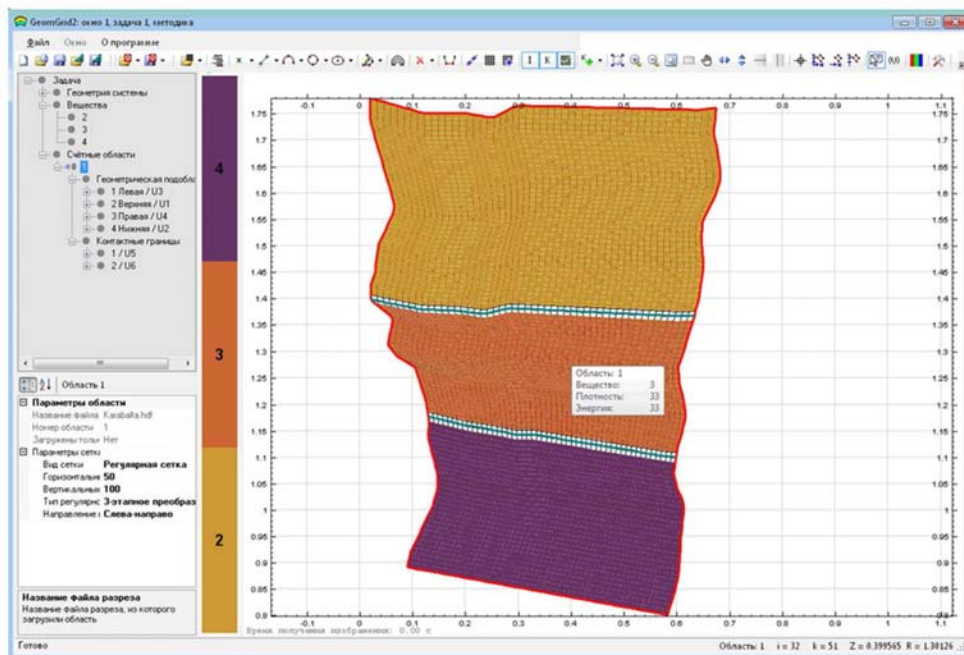


Рис. 8. Визуализация веществ

Текущее состояние задачи сохраняется в текстовом формате XML. Затем, в следующем сеансе работы с системой GeomGrid2, это состояние можно восстановить, загрузив данные XML-файла. Для проверки данных XML-файла на корректность разработана структура XSD-схемы.

Заключение

В результате научно-исследовательской и практической работы в РФЯЦ-ВНИИТФ создана сервисная система GeomGrid2, с помощью которой успешно решаются основные задачи препроцессинга в интегрированной программной оболочке.

Использование системы GeomGrid2 в технологическом процессе позволило:

- сократить время подготовки данных для расчета более чем в два раза;
- снизить вероятность задания ошибочных данных для расчета задач МСС;
- объединить визуализацию геометрии из разрезов СДР и чертежей AutoCAD в одном графическом окне;
- систематизировать средства для построения геометрии, регулярных и нерегулярных сеток, а также полей частиц в интерактивном режиме в единой оболочке;
- обеспечить комплексы программ численного моделирования РФЯЦ-ВНИИТФ современной и эргономичной средой для задания, формирования и расчета начальных данных.

Список литературы

1. 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.
2. Беломестных О. В., Гагарин С. В., Галицова А. В. и др. Программа GeomGrid2 для задания геометрии, построения сеток и формирования начальных данных двумерных задач // Тез. докл. межд. семинара "Супервычисления и математическое моделирование". Саров, 3–7 октября 2011 г. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2012. С. 91.
3. Home Page — NPLLOT Charting Library for .NET. <http://www.nplot.com>.
4. OpenCASCADE Technology, 3D Modeling & Numerical Simulation. <http://www.opencascade.org>.
5. Игнатъев А. В. Построение регулярных криволинейных сеток с помощью механической аналогии. www.spbcas.ru/cfd/techn/1_grid.htm.
6. Сквепень А. В. Усовершенствованный алгоритм построения нерегулярных четырехугольных сеток. Снежинск: РФЯЦ-ВНИИТФ, 2004.
7. Прокопов Г. П. Об организации сравнения алгоритмов и программ построения регулярных двумерных разностных сеток // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1989. Вып. 3. С. 98–108.

Статья поступила в редакцию 18.07.14.

GeomGrid2 UNIFIED SYSTEM FOR PREPROCESSING OF 2D MATHEMATICAL MODELING PROBLEMS / O. V. Belomestnykh, S. V. Gagarin, D. V. Mogilenskikh, E. A. Prib, A. A. Ushkova (FSUE "RFNC-VNIITF", Snezhinsk, Chelyabinsk region).

The purpose of the GeomGrid2 service system is to prepare, form and calculate the input data of 2D continuum mechanics problems. GeomGrid2 is a subsystem of the BAZIS program complex. The GeomGrid2 subsystem enables forming the initial problem geometry, build computing grids (structured and non-structured) and the mass point (particle) fields, set the physical properties for the 2D continuum mechanics problem calculation, in the visual interactive mode.

Keywords: IDC, initial geometry, SDR format, XML format, AutoCAD, computed domain, physical sub-domain, structured grid, non-structured grid, physical values.