



**Дьяченко С.В., Гасилова И.В.,
Дорофеева Е.Ю.**

Разработка конвертера
данных из интегрированной
CAD-CAE системы Salome в
прикладной код для
численного решения
начально-краевых задач
методом сеток

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Дьяченко С.В., Гасилова И.В., Дорофеева Е.Ю. Разработка конвертера данных из интегрированной CAD-CAE системы Salome в прикладной код для численного решения начально-краевых задач методом сеток // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2012. № 36. 25 с. URL: <http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2012-36>

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук

С.В.Дьяченко, И.В.Гасилова, Е.Ю.Дорофеева

**Разработка конвертера данных
из интегрированной CAD-CAE системы
Salome в прикладной код для численного
решения начально-краевых задач
методом сеток**

Москва — 2012

С.В.Дьяченко, И.В.Гасилова, Е.Ю.Дорофеева

Разработка конвертера данных из интегрированной CAD-CAE системы Salome в прикладной код для численного решения начально-краевых задач методом сеток

Для выполнения расчетов в областях нетривиальной геометрии посредством РМГД-кода MARPLE 3D выбрано программное обеспечение SALOME. Отличия SALOME от типичных CAD-систем состоят в поддержке большого выбора средств для разметки элементов различных размерностей на геометрическом и сеточном уровнях и поддержка различных способов интеграции со сторонним программным обеспечением. SALOME нацелена на подготовку расчетной области для проведения численного эксперимента и на анализ полученных в ходе вычислений результатов. Данное обстоятельство явилось стимулом к созданию средств препроцессинга, обеспечивающих импорт данных из SALOME в прикладной программный комплекс MARPLE 3D. В настоящей работе отражен опыт разработки конвертера данных из SALOME в прикладной код. Работа конвертера проиллюстрирована примерами сеток, подготовленных с помощью системы SALOME и импортированных в MARPLE3D.

Ключевые слова: высокопроизводительные ЭВМ, объектно-ориентированное программирование, CAD-CAE платформа SALOME, конвертер геометрических данных, газовая динамика, магнитная газовая динамика

S.V.Dyachenko, I.A.Gasilova, E.Yu. Dorofeeva

Development of a data converter from the integrated CAD-CAE system Salome into an application code for the mesh-based numerical solution of initial-boundary value problems

To perform the calculations in domains of complex shapes by RMGD code MARPLE 3D we use the CAD-CAE platform SALOME. SALOME differs from typical CAD-systems in support of a variety of tools for marking of the elements of various dimensions both at the geometry and mesh levels. SALOME can also be used as a platform for integration of the external third-party software. SALOME is primarily aimed at preparation of a computational domain for the numerical simulation and analysis of numerical results. This circumstance was the impetus for the creation of a data converter which is used as a preprocessing tool providing import of data from SALOME into the application software package MARPLE3D. In this paper we discuss the experience of this data converter development. The work of the converter is illustrated by examples of computational meshes produced by SALOME and imported into the MARPLE3D.

Key words: high-performance computing, object-oriented programming, CAD-CAE platform Salomé, geometric data conversion, gasdynamics, magnetogasdynamics

Оглавление

Введение.....	4
Краткие сведения о коде MARPLE.....	6
Архитектура и модель данных кода MARPLE.....	7
Краткие сведения о системе SALOME.....	12
Конвертер данных SALOME-MARPLE3D	13
Пример подготовленных входных данных	16
Заключение	23
Литература.....	25

Введение

Разработка прикладного программного обеспечения включает создание цепочки средств подготовки данных: описание геометрии расчетной области, разметку расчетной области, задание начальных и краевых условий, построение сетки, перенос на нее исходных данных задачи, решение задачи с последующей визуализацией и представлением результатов в виде, допускающем сравнение с данными экспериментов или наблюдений. Программное обеспечение (ПО), предназначенное для расчетно-теоретических работ по сопровождению физических экспериментов, должно быть универсальным в такой мере, чтобы его можно было быстро адаптировать к изменившимся условиям. Создание и эксплуатация кодов, предназначенных для трехмерного моделирования с применением высокопроизводительной параллельной техники, является весьма трудоемким процессом. Особенно это касается кодов на основе комплексных математических моделей, например, так называемой "мультифизики". Поэтому качество современного ПО для научных исследований в том, что касается поддержки труда пользователей, должно быть на уровне "индустриальных" кодов.

Для ввода данных, соответствующих трехмерным моделям, необходимо использование средств компьютерного моделирования геометрических объектов, графических интерфейсов и т.п., развитие которых – отдельная дисциплина программирования, с которой разработчики исследовательских кодов, как правило, не знакомы. Поэтому модель данных исследовательского кода для высокопроизводительных вычислений должна быть совместимой с CAD-CAE системами, т.е. обеспечивать усвоение геометрической информации, создаваемой такими системами.

Настоящая работа была выполнена с целью создания конвертера данных, подготовленных с применением средств одной из интегрированных CAD-CAE платформ численного анализа – SALOME, активно развиваемой в настоящее время в качестве платформы для численного анализа ряда прикладных проблем, в частности, возникающих в области проектирования ядерно-энергетических устройств. Проект поддерживается 22-мя научно-исследовательскими и конструкторскими организациями из 14-и европейских стран (NURISP project – www.nuresim.com).

Работа поддержана отделением математических наук РАН (ПФИ 3.6 ОМН РАН) и Российским фондом фундаментальных исследований (проекты 11-07-93939-Джн8_а, 11-02-01027-а). Расчеты выполнены на суперкомпьютерах ЛОМОНОСОВ (НИВЦ МГУ) и МВС-100К (МСЦ РАН).

Система SALOME, задуманная как программное обеспечение для интеграции систем [CAD-CAE](#), представляет собой набор средств (модулей, утилит), применяемых в различных приложениях, ориентированных на численное моделирование, вплоть до поддержки вычислений на современной высокопроизводительной технике. В основе SALOME прежде всего лежит концепция [объектно-ориентированного программирования](#).

САПР-средства в SALOME имеют достаточно тесную связь с платформой [Open CASCADE Technology](#). Продукты марки SALOME распространяются на условиях [GNU Lesser General Public License](#). Платформа SALOME используется как база для проекта [NURESIM](#) (European Platform for NUclear REactor SIMulations), который предназначен для полномасштабного моделирования [ядерных реакторов](#).

Целью настоящей работы явилось создание конвертера данных, создаваемых средствами системы SALOME для описания начально-краевой задачи в области нетривиальной геометрии. Конвертер был разработан для того, чтобы обеспечить усвоение данных, создаваемых на платформе SALOME, в прикладном коде MARPLE3D [1], предметная область которого – задачи динамики плазмы высокой плотности энергии. Код MARPLE предназначен для расчетов плазмодинамических процессов, с учетом геометрии устройств, в которых эти процессы реализуются. Ввиду этого, основу пакета MARPLE составляют программные средства, поддерживающие работу с нерегулярными сетками произвольной структуры.

Первый раздел работы содержит общие сведения о коде MARPLE. Во втором разделе представлено описание архитектуры и модели данных, составляющих основу MARPLE. Далее, в третьем разделе, обсуждаются критерии, на основе которых был сделан выбор платформы SALOME в качестве базового средства подготовки исходных данных при описании начально-краевых задач. Четвертый раздел содержит описание основных характеристик созданного конвертера. В пятом разделе представлены примеры использования конвертера для поддержки вычислительных экспериментов, выполненных средствами кода MARPLE.

Работа поддержана отделением математических наук РАН (ПФИ 3.6 ОМН РАН) и Российским фондом фундаментальных исследований (проекты 11-07-93939-ДжИ8_а, 11-02-01027-а). Расчеты выполнены на суперкомпьютерах ЛОМОНОСОВ (НИВЦ МГУ) и МВС-100К (МСЦ РАН).

Краткие сведения о коде MARPLE

В предметную область кода MARPLE в первую очередь входят задачи, связанные с сильноточными импульсными разрядами [1]. Существующая в настоящее время версия кода может применяться для трехмерного моделирования комплекса взаимосвязанных процессов магнитной гидродинамики (МГД) и лучистого теплообмена. Решается система уравнений магнитной гидродинамики в полной трехмерной постановке задачи, в декартовой системе координат. В рамках кода имеется возможность выполнять расчеты задач в одномерной и двумерной постановках с использованием аппарата периодических граничных условий. Возможно также решение одномерных и двумерных задач в цилиндрической системе (R-Z геометрия), что реализуется посредством периодических граничных условий и вычислений с модифицированными метрическими коэффициентами.

Код представляет собой совокупность солверов систем уравнений базовых физико-математических моделей и вычислительной среды (инфраструктуры), поддерживающей выполнение расчетов начально-краевых задач математической физики на массивно-параллельных системах с распределенной памятью.

Код включает следующие основные солверные модули:

1) Подготовка данных. Этот модуль выполняет построение геометрической модели физической расчетной области, генерацию расчетной сетки, а также усвоение начальных и граничных условий;

2) Модуль решения трехмерных идеальных (т.е. в приближении отсутствия диссипации) уравнений магнитной гидродинамики для расчетов в декартовой координатной системе;

3) Модуль расчета физических свойств плазмы (термодинамическое состояние вещества, коэффициенты переноса, коэффициенты поглощения и излучения);

4) Модуль расчета диссипативных процессов;

5) Модуль расчета лучистого теплообмена;

6) Модуль управления расчетом, включая определение параметров расчетной методики, процедуры управления итерационными процессами и продвижением решения по времени, диагностику, а также обработку промежуточных результатов расчета в режиме реального времени.

Кроме того, в коде содержится большое число вспомогательных модулей, обеспечивающих полноценную работу физической и вычислительной инфраструктур MARPLE3D. Следует заметить, что суммарный объем исходного кода вспомогательных (сервисных) модулей существенно превышает объем исходного кода основных солверных модулей.

Код написан на языке C++. Параллельные вычисления поддерживаются средствами библиотеки MPI.

Структуры данных кода MARPLE предназначены для генерации либо усвоения трехмерных расчетных сеток, построения на них разностных схем и поддержки распределенных вычислений.

В данной работе речь пойдет о способах использования сторонних средств подготовки геометрических расчетных данных (построение собственно геометрической модели, разметка расчетной области для задания начальных и краевых условий и ввода негеометрических входных данных, генерация сетки).

Архитектура и модель данных кода MARPLE

Материал этого раздела работы основан на описании кода, данного в статье [1] и в настоящей работе представлен в качестве справочных сведений, приводимых для удобства читателей. Мотивация настоящей работы обусловлена назначением кода MARPLE как исследовательского средства, ввиду чего разработчики спроектировали архитектуру кода настолько общей (расширяемой), насколько это возможно. В первую очередь это отразилось на модели данных, которые обрабатываются кодом.

Согласно принципам объектно-ориентированного проектирования, реализация проекта была разделена на разработку модулей в следующих разделах: аппроксимация, работа с сетками, солверы для расчета физических процессов, модели описания граничных условий и состояния вещества. Блочное построение кода существенно для поддержки коллективной работы на всех этапах выполнения проекта (проектирование, программирование, верификация и апробация, моделирование, сопровождение и развитие кода).

Код MARPLE создан как унифицированное ПО, обеспечивающее поддержку геометрической информации, используемой как в препроцессоре, так и в солвере. В коде используются смешанные сетки нерегулярной структуры. Обобщенная реализация классов, диаграмма которых представлена на рисунке 1, позволяет применять их для описания дискретизаций областей любой размерности.

В соответствии со сказанным, ядро кода составляют:

- ◆ Структурированная база данных, включающая всю информацию о постановке задачи (описание расчетной области, свойства среды и материалов, настроечные параметры алгоритмов) и о текущем состоянии процесса (вычисляемые физические величины и вспомогательные функции).
- ◆ Набор функциональных модулей, взаимодействующих с этой базой данных (в т.ч. препроцессор, вычислительные блоки, средства первичной обработки и анализа результатов).

Взаимодействие между этими структурами организуется управляющим модулем, получающим информацию из управляющих файлов. Открытые структуры допускают дополнения и изменения, в том числе (с необходимыми ограничениями) квалифицированным пользователем. Иерархия классов в модулях, а также отношения между ними, представлены на рисунке 1. Здесь показаны только существенные классы и отношения, рамками выделены модули.

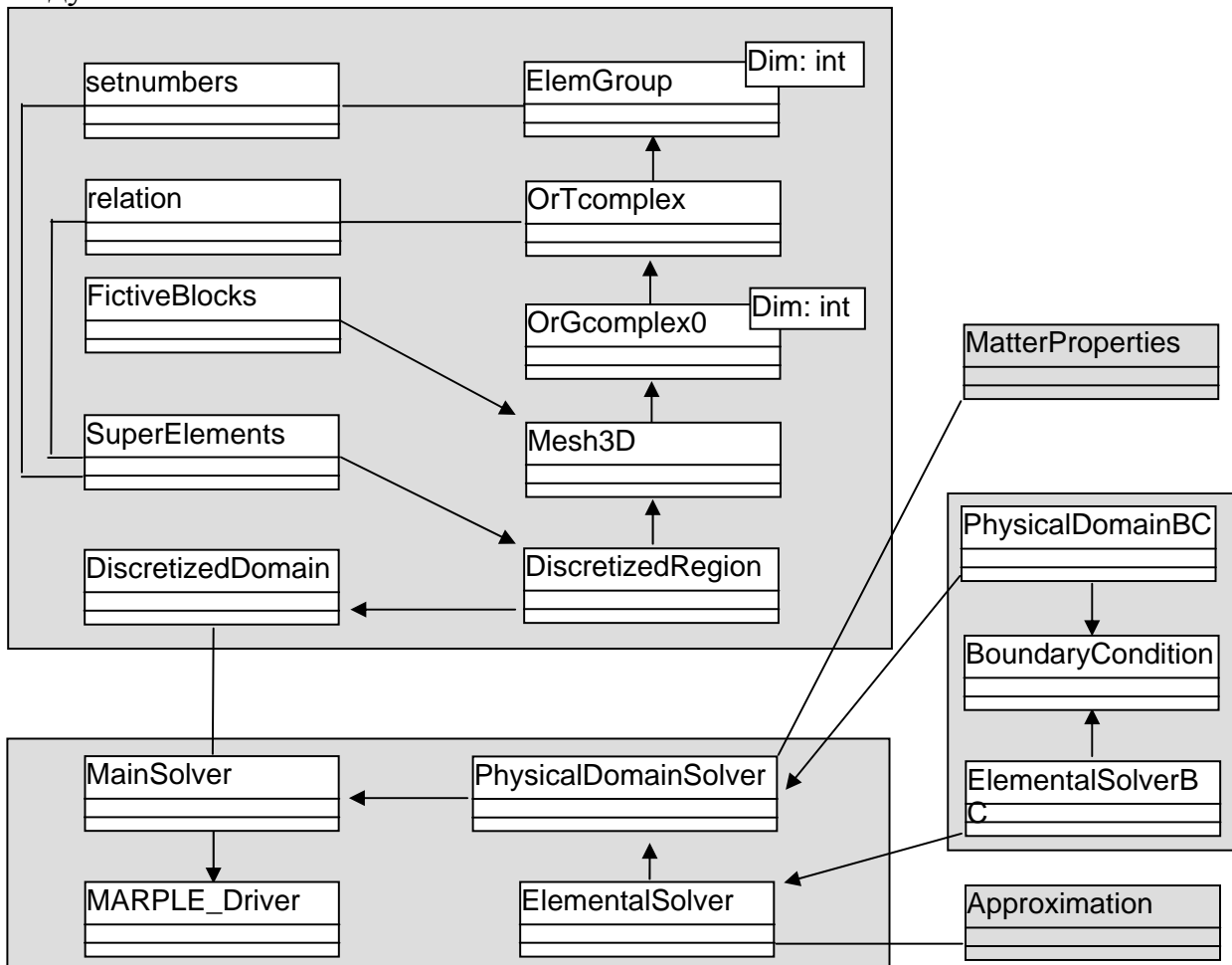


Рис. 1. Диаграмма классов UML: архитектура MARPLE.

- ◆ главные солверы (MainSolver) – совокупность физических солверов, выполняют операции верхнего уровня с физическими подобластями, реализуют схему суммарной аппроксимации и схемы аппроксимации по времени;
- ◆ физические солверы (PhysicalDomainSolver) – совокупность элементарных солверов, решают систему уравнений в одной физической подобласти;
- ◆ элементарные солверы (ElementalSolver) отвечают за решения какого-либо уравнения или системы уравнений;

- ◆ элементарные граничные условия (ElementalSolverBC), свои для каждого элементарного солвера, учитывают специфику решаемых элементарным солвером уравнений на границе;
- ◆ сложные граничные условия (PhysicalDomainBC) уровня физической подобласти используются только в том случае, когда не удастся разложить заданное граничное условие на множество элементарных граничных условий, находящихся ниже в иерархии (ElementalSolverBC);
- ◆ аппроксимации (Approximation) предоставляют унифицированный доступ ко всем необходимым для работы элементарных солверов аппроксимациям;
- ◆ свойства вещества (MatterProperties) предоставляют унифицированный доступ к уравнениям состояния для каждой физической подобласти.

Выделение аппроксимаций в отдельный модуль с унифицированным интерфейсом позволяет различным вычислительным объектам (солверам и самим аппроксимациям) пользоваться одними и теми же объектами для схожих операций.

Подготовка данных для решения начально-краевой задачи методом сеток состоит в предоставлении дискретного описания расчетной области с назначением граничных условий и распределением начальных значений, а также других негеометрических атрибутов задачи. Модель расчетной области и сетки как геометрических и топологических комплексов [3] обеспечивает унифицированное описание геометрии, топологии и атрибутов гетерогенных объектов. Объект может быть определен произвольным представлением (функциональным или конструктивным представлением геометрии), который обеспечивает корректную дискретизацию. В описание объекта включены его негеометрические атрибуты, а также отношения между его элементами. Основными отношениями, характеризующими расположение элементов объекта, являются отношения двух типов – "граница" и "включение". Негеометрические атрибуты описываются независимо с помощью функциональной или клеточной модели и ассоциируются с ячейками неявного комплекса через отношение атрибутов. Представление на базе комплекса содержит всю информацию, необходимую для численного моделирования.

В общем случае геометрическая модель включает также описание пересекающихся объектов одной размерности, или представление объекта в виде набора перекрывающихся ячеек (неявный комплекс [3]). Это могут быть фрагменты расчетной области, выделяемые при описании их физических свойств, при создании полей обмена данных для параллельных вычислений, и другие. Вычислительные технологии с перекрывающимися ячейками и сетками в настоящее время активно развиваются для решения задач механики сплошных сред. Частными случаями неявных комплексов являются симплицальные, полиэдральные и клеточные комплексы, состоящие из

неперекрывающихся ячеек. Симплициальные комплексы, например, сетки нерегулярной структуры, состоят, как следует из названия, из симплексов – отрезков, треугольников, тетраэдров. Полиэдральные комплексы формируются из различных многогранников, а клеточные комплексы – из криволинейных полиэдров. Комплексы первых двух типов, как правило, используются для описания неструктурированных расчетных сеток. Клеточные комплексы преимущественно применяются для описания кусочно-аналитических кривых и поверхностей, а также для построения граничных моделей 3D объектов. Клеточные комплексы применяются также и для задания сеток, состоящих из нелинейных элементов.

Негеометрические свойства (атрибуты) объекта и его геометрия описываются независимо.

Технология объектно-ориентированного программирования, применяемая нами, дает возможность независимой реализации главных компонентов неоднородной модели, основанной на неявном комплексе (топологии, геометрии и негеометрических атрибутов неявного комплекса).

Система отношений дает унифицированное описание различных связей между отдельными ячейками, коллекциями ячеек и целыми комплексами. Отношения используются для операций по назначению атрибутов. Использование операций над отношениями дает возможность менять структуры данных динамически, адаптируя их для специфических приложений. Программная реализация геометрического комплекса включает механизм динамического создания и удаления отношений, эффективный для проектирования многокомпонентных моделей, для работы с клеточными комплексами и сетками.

Предполагается, что комплексы можно менять во время вычислений. Данные, связанные с ячейками геометрического комплекса, не predeterminedены заранее и могут меняться от одного приложения к другому. Применяемые нами методики обработки событий позволяют поддерживать непрерывную нумерацию ячеек и сохранять связи между ячейками, а также связи ячеек с данными, ассоциированными с ними.

Код может выполнять вычисления на неструктурированных сетках, состоящих из 3D элементов разных типов: шестигранник, тетраэдр, призма с треугольным основанием, пирамида с четырехугольным основанием. Грани указанных 3D элементов могут быть неплоскими (они считаются билинейными). Поддерживаемые 2D элементы: треугольник, четырехугольник.

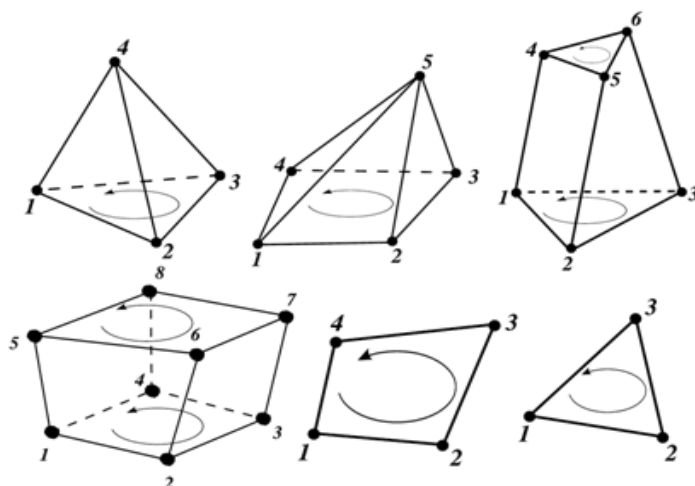


Рисунок 2. Виды сеточных элементов и пример расчетной сетки нерегулярной структуры.

Организация параллельного вычислительного процесса в коде MARPLE основана на известном подходе геометрического параллелизма. Средства подготовки данных выполняют декомпозицию расчетной области, т.е. ее разбиение на вычислительные домены, каждый из которых обрабатывается отдельным счетным ядром. Поддержка геометрического параллелизма встроена в дискретную модель в виде блоков фиктивных элементов (FictiveBlocks и Mesh3D на рисунке 1) и средств эффективного обновления расчетных величин в этих блоках (актуализации). Фиктивный блок каждого вычислительного домена содержит сеточные элементы из соседних доменов со специальной маркировкой, позволяющей вычислительным объектам отличать "свои" элементы от "чужих".

Фиктивные блоки также применяются нами для описания различных симметрий в расчетных областях, например, периодических граничных условий.

Наличие нескольких физических подобластей в расчетной области отражено в иерархии классов дискретной модели (DiscretizedRegion и DiscretizedDomain на рисунке 1). Объект класса DiscretizedRegion описывает дискретизацию одной физической подобласти на одном вычислительном домене. Для постановки граничных условий между различными физическими подобластями, а также для выделения границ расчетной области применяются т.н. "суперэлементы", представляющие собой списки сеточных элементов, принадлежащих границам (SuperElements на рисунке 1).

Баланс загрузки вычислительных ядер обеспечивается размещением на каждом из них фрагментов всех имеющихся в расчетной области физических подобластей. Для этого расчетная сетка из M физических подобластей при расчете на N вычислительных ядрах разбивается на $(M \cdot N)$ фрагментов (каждая физическая подобласть разбивается на N фрагментов). Список дискретизаций

физических подобластей содержится в объекте класса `DiscretizedDomain` (см. рисунок 1) и обрабатывается в главном солвере (объекте класса `MainSolver`).

Краткие сведения о системе SALOME

Все средства для проведения вычислительного эксперимента из цепочки, описанной в первом разделе, должны быть снабжены графическим или текстовым интерфейсом, отчуждаемы от разработчика и удобны в работе для конечного пользователя. С учетом этого, для подготовки расчетной области, имеющей сложную геометрию, как часть этой цепочки было выбрано программное обеспечение SALOME. SALOME — открытая интегрируемая платформа, объединяющая модули пре- и постпроцессинга данных для вычислительного эксперимента.

Некоторые из причин, по которым система SALOME была выбрана для подготовки расчетной области, представлены ниже:

- ◆ SALOME свободно распространяется по лицензии GNU LGPL;
- ◆ SALOME имеет гибкую архитектуру, объединяющую различные программные модули;
- ◆ SALOME – кроссплатформенная система;
- ◆ SALOME активно развивается;
- ◆ SALOME предоставляет развитый графический интерфейс;
- ◆ SALOME поддерживает открытые распространённые стандарты хранения данных: STEP, IGES, внутренний иерархический формат данных HDF (и базирующийся на HDF формат хранения сеточных данных MED), STL, VTK;
- ◆ SALOME предоставляет большой выбор средств для разметки элементов различных размерностей на геометрическом и сеточном уровнях;
- ◆ SALOME поддерживает различные способы интеграции со сторонним программным обеспечением (сеточные генераторы, солверы).

SALOME может быть использовано как отдельное приложение для создания CAD моделей, их подготовки для вычислительного эксперимента и последующего анализа полученных в ходе проведенного эксперимента данных.

SALOME также может быть использовано в качестве связующего программного обеспечения между сторонними вычислительными кодами для создания новых приложений, поддерживающих полный жизненный цикл CAD моделей.

Основное отличие платформы SALOME от существующих CAD систем, используемых для построения сложных геометрий расчетных областей состоит в том, что она в первую очередь нацелена на подготовку области для проведения численного эксперимента в ней и на анализ полученных в ходе

вычислений результатов. Среди специальных возможностей модуля препроцессинга для разметки расчетной области можно выделить следующие:

- ◆ определение граничных условий непосредственно в исходной модели (на уровне элементов модели);
- ◆ определение граничных условий непосредственно на сетке (на уровне сеточных элементов);
- ◆ автоматический и ручной перенос граничных условий с уровня исходной модели на сеточный уровень;
- ◆ корректировка граничных условий на обоих уровнях, в том числе и после автоматического переноса из модели в сетку;
- ◆ определение граничных условий на субэлементах исходной модели за счет разбивки элементов на субэлементы (т.е. имеется возможность единую грань модели побить на логические составляющие и разметить их по отдельности).

Аналогичные средства доступны при разметке расчетной области на внутренние подобласти (субрегионы).

Проанализировав вышеперечисленные особенности SALOME, было решено использовать систему в качестве средства подготовки и дискретизации расчетных областей со сложной геометрией для пакета MARPLE3D, а также как средство работы с произвольными расчетными областями, полученными в других CAD-CAE системах, поддерживающих открытые форматы хранения данных.

Конвертер данных SALOME-MARPLE3D.

Перечислим основные способы интеграции SALOME со сторонним программным обеспечением:

- ◆ конвертация только сеточных данных парсингом непосредственно сеточного формата MED;
- ◆ парсинг общего внутреннего формата HDF и извлечение из него только сеточной информации;
- ◆ извлечение сеточных данных из MED формата с подключением специальных MED модулей SALOME в MARPLE3D;
- ◆ извлечение информации о расчетной области с помощью скриптов на Python, представляющих запросы к сеточным и геометрическим данным.

После проведения анализа вышеперечисленных способов интеграции SALOME в MARPLE3D было решено использовать подход, основанный на Python скриптах, исполняющихся непосредственно в самой среде, по следующим причинам:

- ◆ отсутствие дополнительных зависимостей от новых библиотек или модулей;
- ◆ использование внутренних Python интерфейсов SALOME;

- ◆ прямые запросы только к структурам SALOME;
- ◆ извлечение только тех данных, которые необходимы для описания Discretized Domain (Discretized Domain на рисунке 1 – внутренняя структура MARPLE3D, содержащая описание расчетной области, сетки и сеточных атрибутов);
- ◆ возможность добавления новых запросов, например, к геометрическим данным, без внесения принципиальных изменений в работу конвертера;
- ◆ возможность добавления MARPLE3D плагина на Python непосредственно в систему SALOME.

С учетом особенностей внутренних структур MARPLE3D, в первую очередь сеточных, было определено какие конкретно данные необходимы для успешного автоматизированного конвертирования из SALOME в Discretized Domain MARPLE3D.

Далее было определено какую часть обработки полученных от SALOME данных практически целесообразно провести в Python-скрипте (т.е. внутри самой системы SALOME), а какую часть – непосредственно в конвертере на Си++ (внутри пакета MARPLE3D).

Исходя из вышеперечисленного, был точно определен формат выходных данных Python-скрипта, что равносильно формату входных данных для Си++ конвертера (выходные данные последнего – это полностью собранный Discretized Domain, а входные данные скрипта – загружаемый в SALOME HDF файл).

Таким образом, конвертация данных расчетной области из SALOME в MARPLE3D представляет из себя следующую последовательность действий:

- 1) Выполнение Python скриптов в среде SALOME;
- 2) Запись извлеченных данных в промежуточный текстовый формат;
- 3) Выполнение С++ модуля MARPLE3D для сборки Discretized Domain;
- 4) Последующее разбиение сетки в формате Discretized Domain для распределенных вычислений.

Общая схема работы конвертера представлена на рисунке 3.

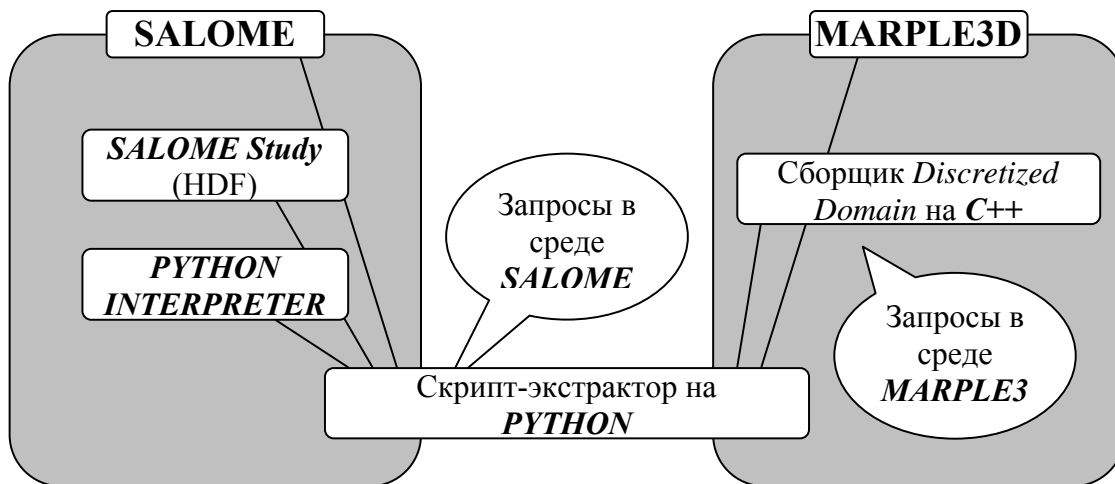


Рисунок 3. Схема работы конвертера данных из SALOME в MARPLE3D.

Разберем подробнее этапы работы конвертера. Для извлечения с помощью Python скриптов данных из HDF файла, который содержит описание расчетной области, созданной в SALOME, используются стандартные запросы SALOME к внутренним структурам данных: *FindOrLoadComponent*, *GetYDs*, *GetElementType*, *GetElementGeomType*, *GetElemNodes*, *GetNodeXYZ*, *GetNodesID*, *GetNodeInverseElements*, *NbNodes*, *NbEdges*, *NbFaces*, *NbVolumes*, *GetType*, *Open* и др., которые можно найти в документации к продукту [3]. Извлеченные данные первично обрабатываются путем записи в некоторый строго определенный набор текстовых файлов:

- ◆ S2M.<сетка>.N.txt – узлы сетки;
- ◆ S2M.<сетка>.E.txt – отношение элемент-узлы;
- ◆ S2M.<сетка>.N2E.txt – отношение узкл-элементы;
- ◆ S2M.<сетка>.VG.<регион>.txt – регионы (физические);
- ◆ S2M.<сетка>.FG.<граница>.txt – границы регионов;
- ◆ S2M.log – журнал работы экстрактора;
- ◆ S2M.catalog.txt – каталог всех файлов.

Здесь параметры <сетка>, <регион> и <граница> принимают множественные значения в соответствии со входным файлом HDF. Далее этот набор текстовых файлов совместно с необходимыми конфигурационными файлами идет на вход C++ модуля *MARPLE_3D_salome_to_marple*, после выполнения которого на выходе получается сетка во внутреннем формате пакета MARPLE3D *Discretized Domain*. Файл *Discretized Domain* затем разбивается на необходимое число частей (соответственно по числу процессоров, на которых пойдет счет) и идет на вход солверам MARPLE3D.

Система SALOME в общем случае не поддерживает задание периодических и симметричных граничных условий, т.е. не поддерживает установку связей между симметричными сеточными элементами на соответствующих гранях. Возможность задания таких граничных условий была

реализована в C++ части конвертера, для чего модулю MARPLE_3D_salome_to_marple требуется дополнительный конфигурационный файл. Конфигурационный файл представляет из себя небольшой текстовый файл определенного формата, в котором пользователь указывает дополнительную информацию для корректной установки связей между сеточными элементами соответствующих граней. Дополнительный конфигурационный файл требуется в случае необходимости задания периодических или симметричных граничных условий. Во избежание ошибок, участие пользователя в работе конвертера по возможности сводится к минимуму.

Пример подготовленных входных данных

К настоящему времени с помощью разработанного конвертера выполнена подготовка данных для ряда методических и прикладных расчетов. Разработанное программное обеспечение было использовано для расчетов газовых и плазменных течений в областях со сложной геометрией, таких как ударные трубы и термоядерные устройства. Данная методика интеграции современных пре- и постпроцессорных САД средств с развитыми исследовательскими кодами в CFD и HEDP выглядит многообещающе.

Ниже в данном параграфе представлены некоторые из областей, подготовленных с помощью SALOME и конвертера MARPLE3D, и произведенные на них расчеты.

На рисунках 4 – 6 поэтапно представлен методический расчет дивертора токамака. Первичный расчет проводился на полной области, далее была построена более подробная сетка в секторе 30 градусов с наложением периодических граничных условий.

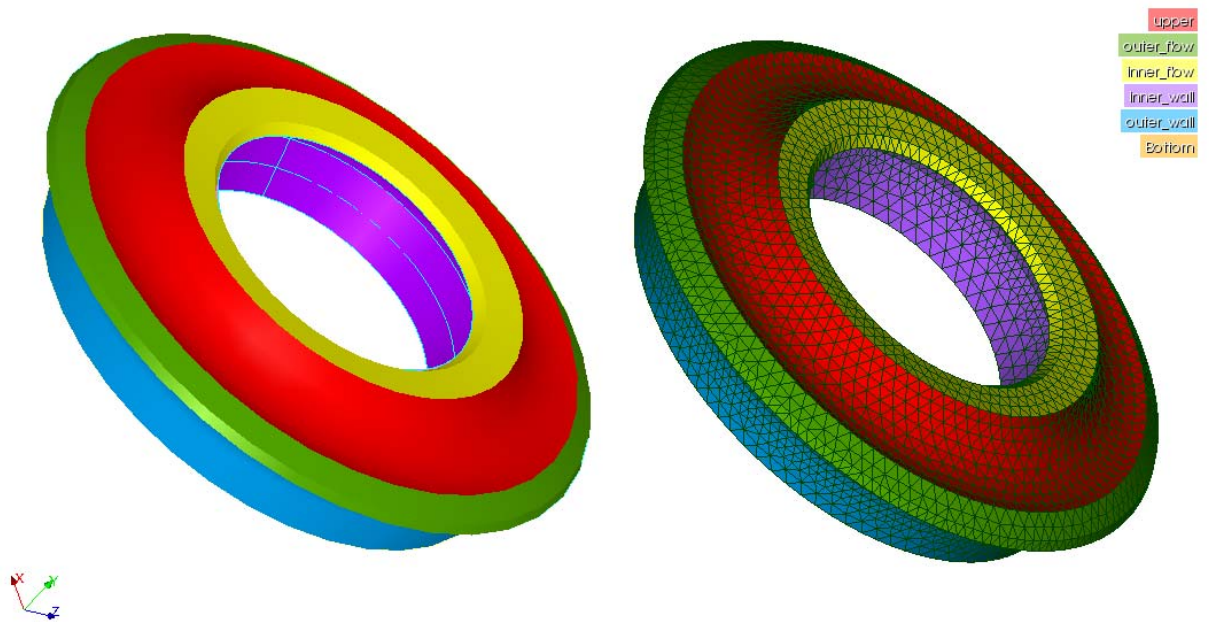


Рисунок 4. Геометрия и сетка дивертора с разметкой граничных элементов

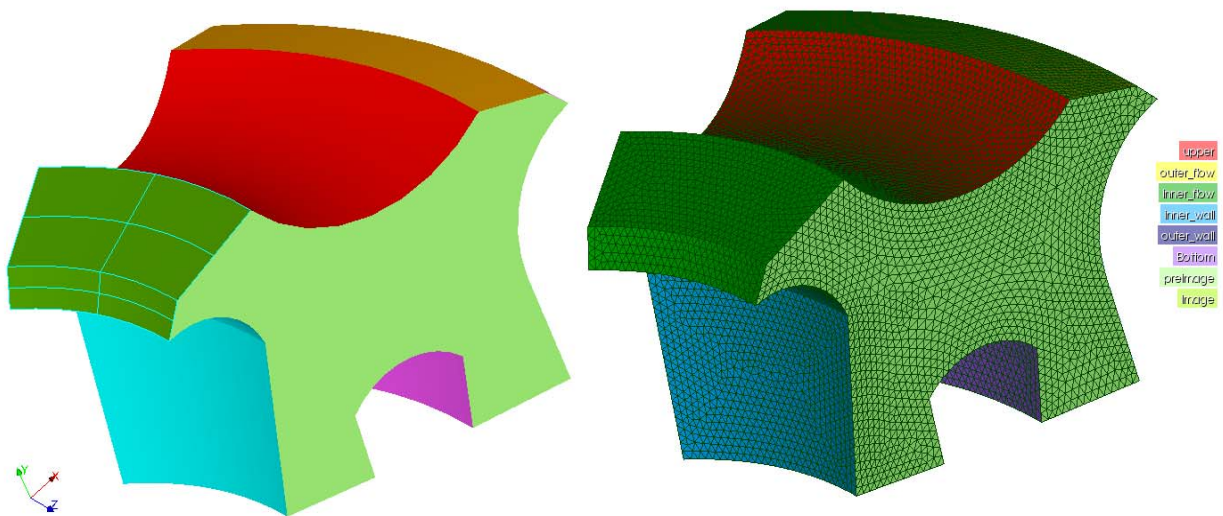


Рисунок 5. Геометрия и сетка дивертора в секторе 30 градусов с разметкой граничных элементов

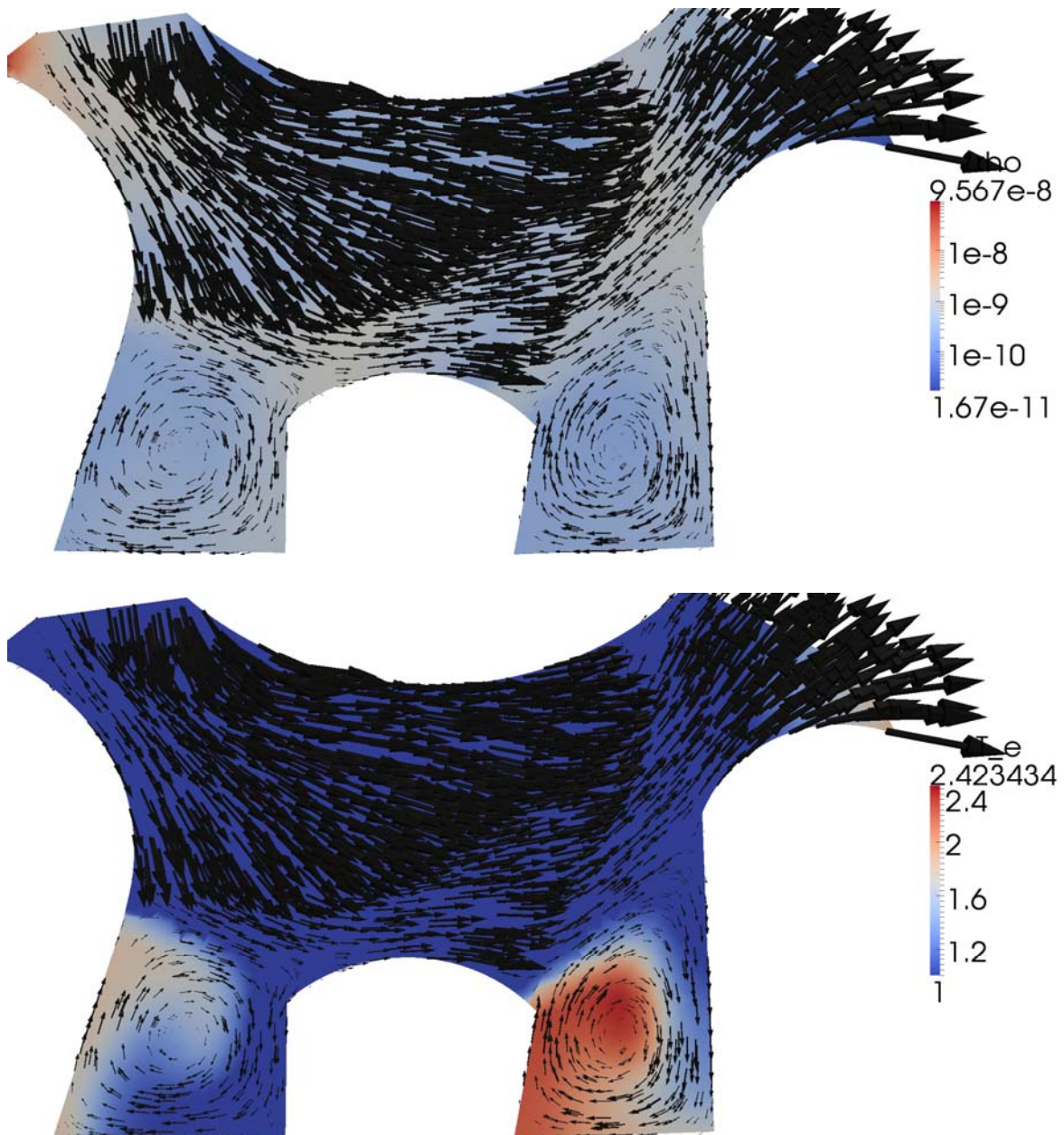


Рисунок 6. Результат расчета дивертора на подробной сетке с периодическими граничными условиями, импортированной из SALOME

На рисунках 7 – 12 поэтапно представлен модельный расчет ударной трубы с помещенным в нее объектом.

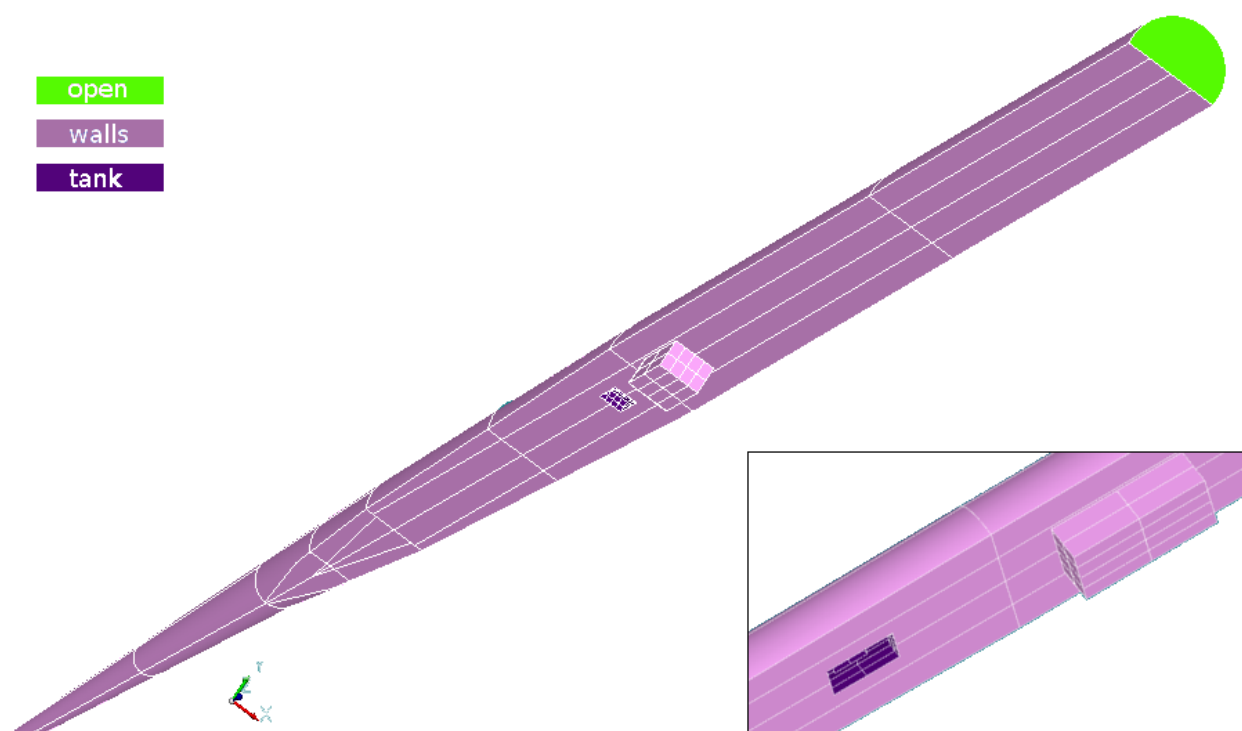


Рисунок 7. Полная геометрия ударной трубы с разметкой граничных элементов

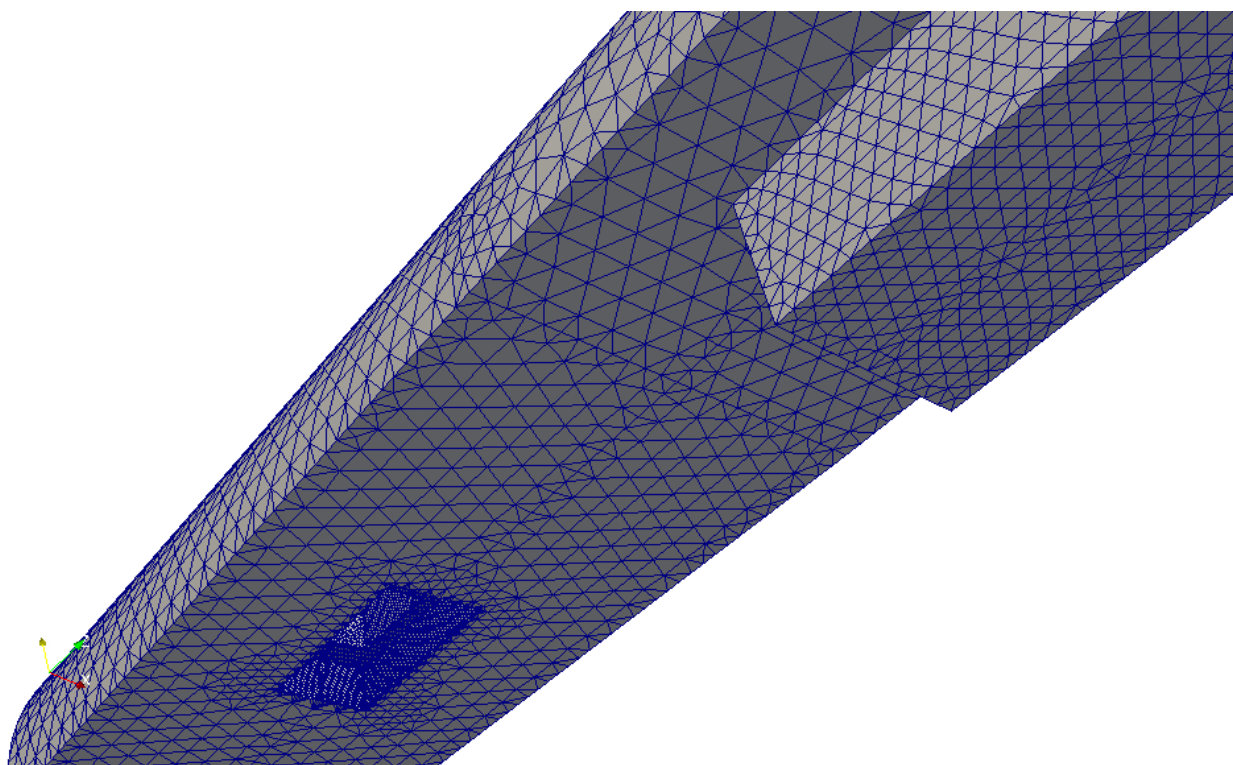


Рисунок 8. Детализация сетки в области со сложной геометрией

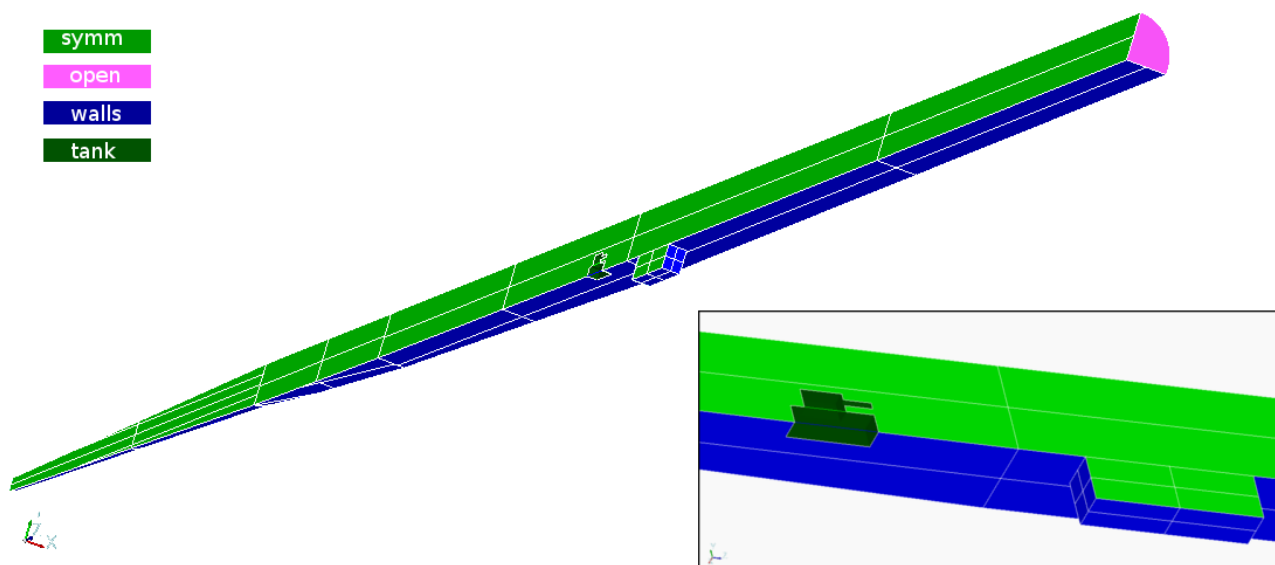


Рисунок 9. Геометрия ударной трубы с разметкой граничных элементов в симметричной постановке

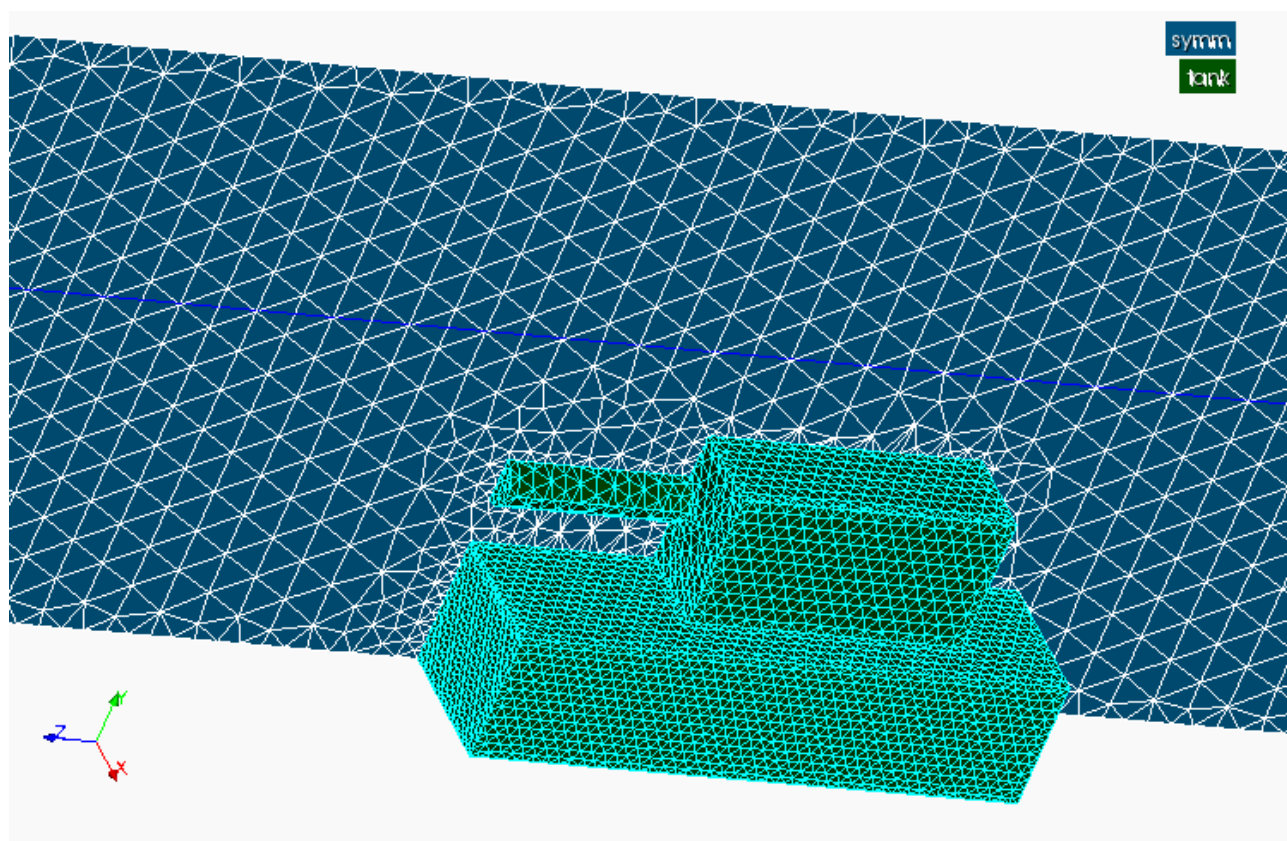


Рисунок 10. Детализация сетки в областях со сложной геометрией

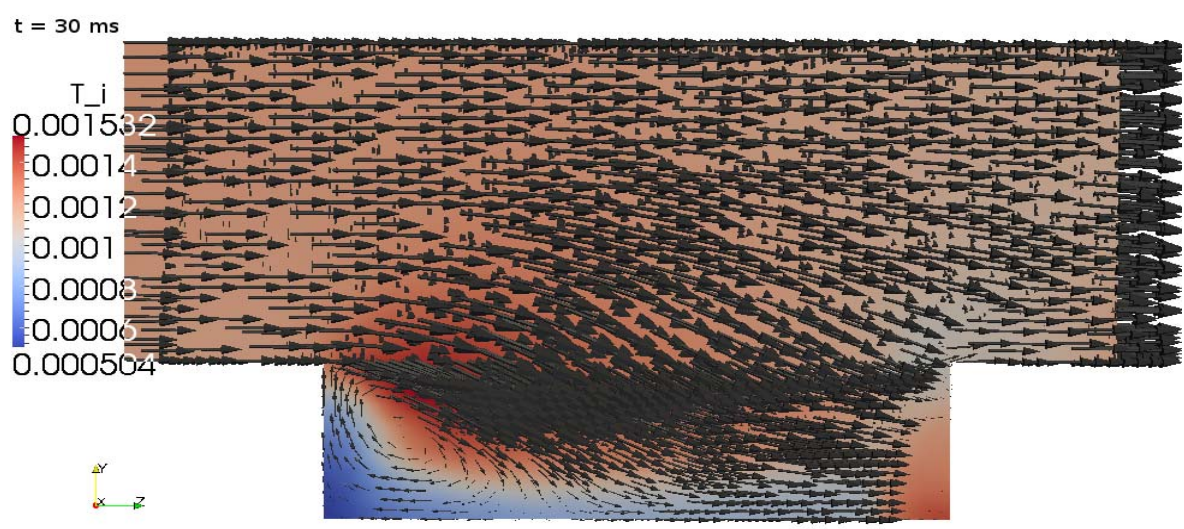
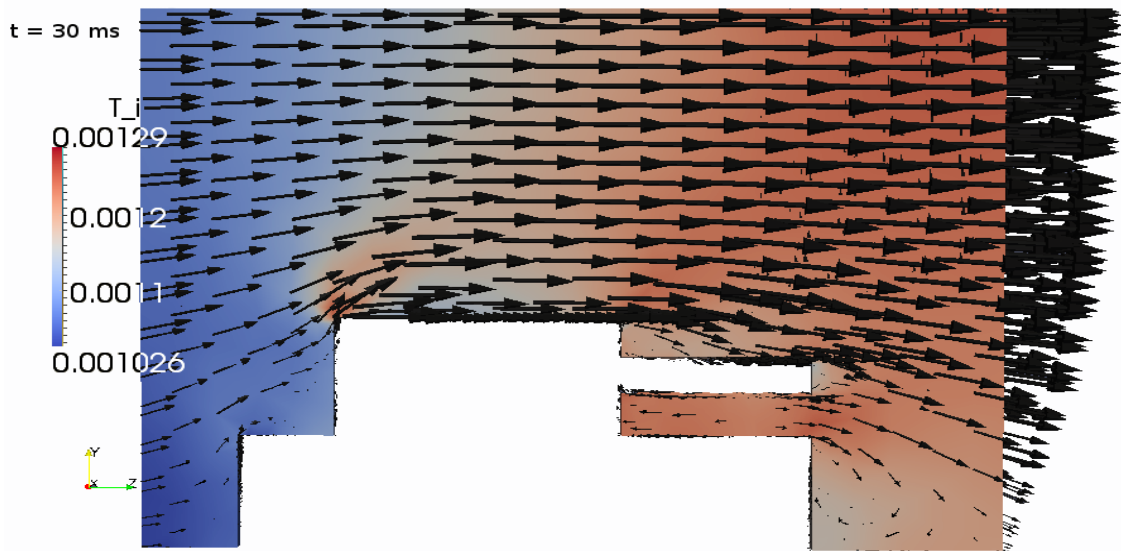
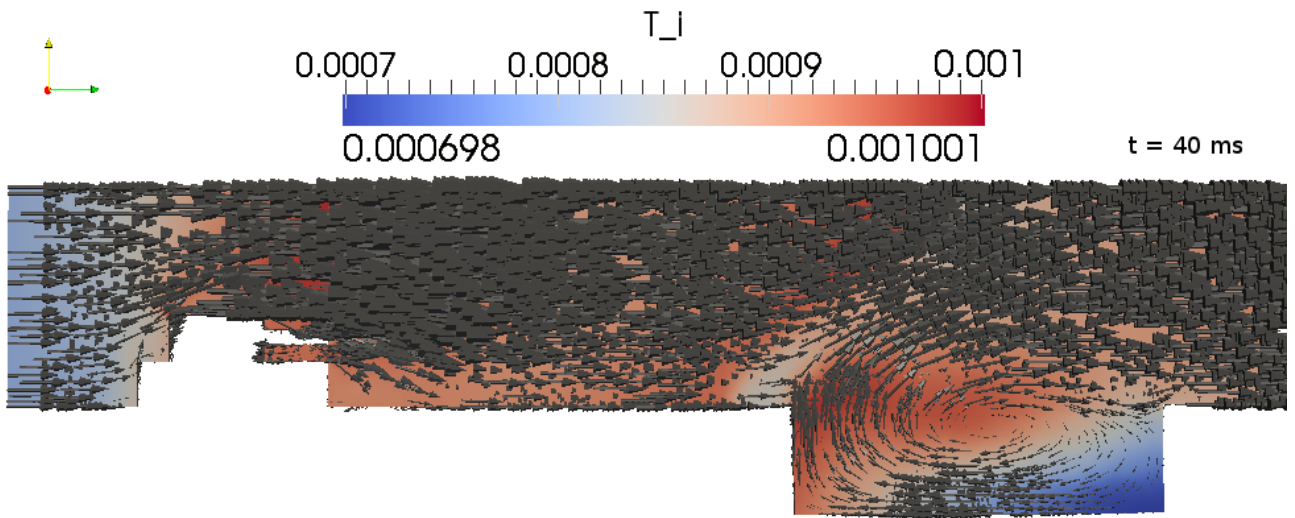
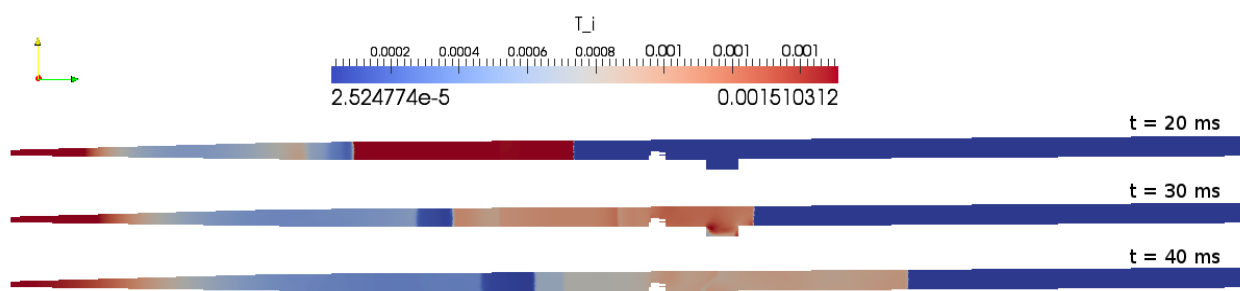


Рисунок 12. Детализация расчета ударной трубы в областях со сложной геометрией



t = 40 ms

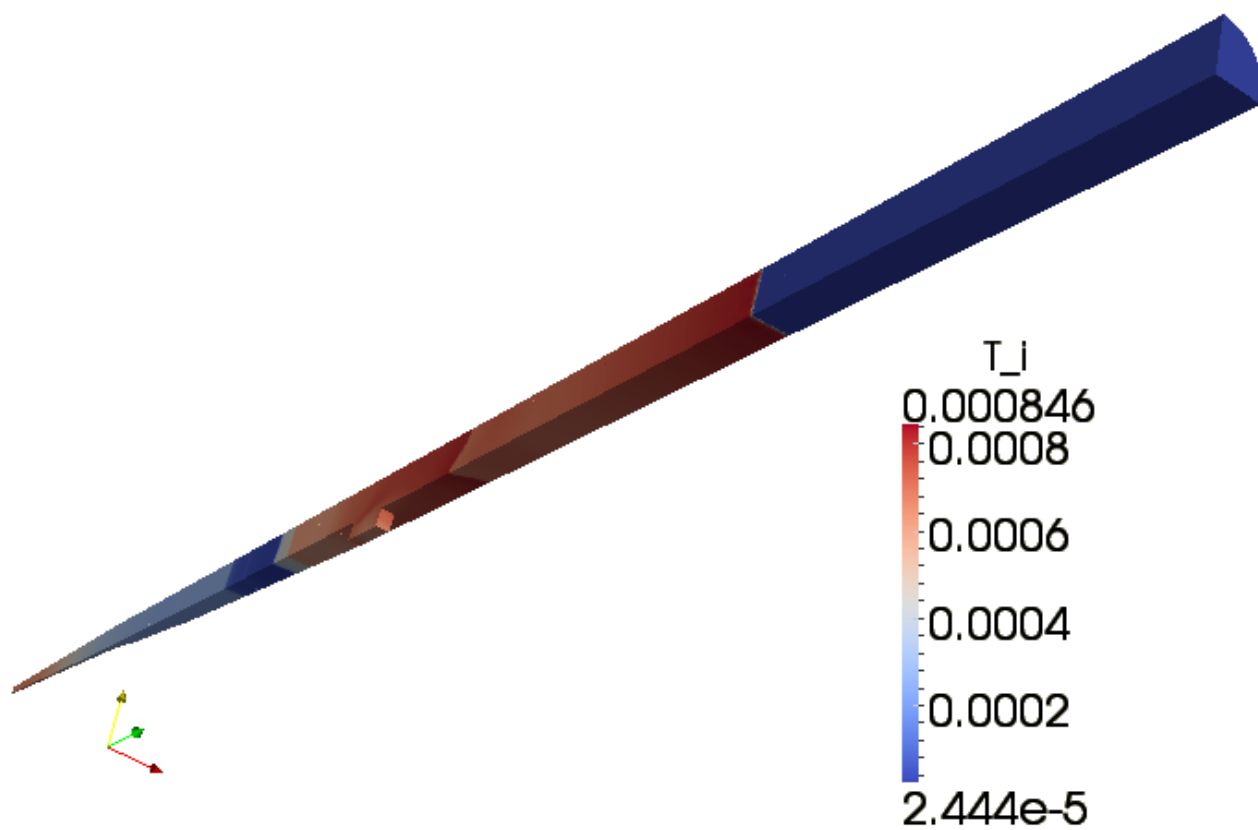


Рисунок 12. Расчет ударной трубы

Заключение

Трехмерные постановки задач механики сплошных сред необходимы для полноценного анализа многих физических явлений, приводящих к появлению сложных геометрических структур в потоках вещества (например, из-за влияния гидродинамической неустойчивости, возникновения турбулентности, и т.д.) Кроме того, изучение как прикладных, так и фундаментальных, "академических" проблем может потребовать детального описания геометрических форм областей, в которых развиваются физические процессы. Поэтому расширение сферы применения трехмерных кодов ведет к повышению значимости и увеличению доли программных средств геометрического моделирования в соответствующем программном обеспечении. Практическим результатом разработки конвертера данных SALOME-MARPLE3D явилось создание программного обеспечения, которое может быть использовано для исследования новых постановок задач вычислительной гидродинамики с применением высокопроизводительной вычислительной техники. Конвертер реализован с помощью современных средств разработки программного обеспечения с использованием языков C++ и Python. Опыт разработки конвертера может быть полезен для создания новых образцов программного обеспечения высокопроизводительных вычислительных систем, предназначенного для исследований так называемых "больших", т.е. высокочувствительных по вычислительным ресурсам комплексных задач механики сплошных сред.

Существенным обстоятельством, способствовавшим разработке конвертера, оказался выбор объектно-ориентированного подхода к проектированию и реализации программного комплекса MARPLE3D. В ОО подходе особое значение придается объектам и субъектам конкретного действия, в отличие от алгоритмического (или структурного) подхода, когда внимание концентрируется на порядке происходящих событий [4]. Объектная модель представляет собой совокупность взаимодействующих друг с другом объектов, причем каждый объект рассматривается как экземпляр определенного класса, а классы образуют иерархию, тогда как структурная модель оперирует подпрограммами (алгоритмами) и данными. ОО проектирование предоставляет удобные средства организации кода для обеспечения многовариантности вычислительных моделей и методов. Например, многообразие геометрических данных наиболее естественным образом описывается на языке объектов. Кроме того, в программном комплексе MARPLE наряду с геометрическими объектами используются объекты – вычислительные солверы, аппроксимации, граничные условия и др. Для реализации программного комплекса MARPLE был выбран объектный язык программирования C++. Реализованный в нем аппарат производных классов, виртуальных функций и шаблонов оказался весьма эффективным средством

для создания вычислительных процедур решения прикладных задач с использованием техники нерегулярных расчетных сеток. Широкая распространенность языка упрощает переносимость кода, а упор разработчиков стандарта на совместимость упрощает поддержку. В частности, в рамках проекта MARPLE была разработана иерархия классов дискретной модели (DiscretizedRegion и DiscretizedDomain), полностью описывающих дискретизацию расчетной области с выделением граничных сегментов и физических подобластей. Эти классы используются как солверами MARPLE, так и утилитами генерации и декомпозиции сеток. Эти же классы были использованы в конвертере SALOME-MARPLE.

Таким образом, эффективность методологии объектного проектирования в разработке кодов вычислительной гидродинамики получила практическое подтверждение.

Авторы признательны своим коллегам – участникам разработки кода MARPLE [1] за плодотворные дискуссии о программных средствах геометрического моделирования, пре- и постпроцессинга, итогом которых явилась идея данной работы.

Литература

1. [В. А. Гасилов](#), [А. С. Болдарев](#), [С. В. Дьяченко](#), [О. Г. Ольховская](#), [Е. Л. Карташева](#), [С. Н. Болдырев](#), [Г. А. Багдасаров](#), [И. В. Гасилова](#), [М. С. Бояров](#), [В. А. Шмыров](#). Пакет прикладных программ MARPLE3D для моделирования на высокопроизводительных ЭВМ импульсной магнитоускоренной плазмы. – Матем. моделирование, 2012, [Т. 24, номер 1](#), с. 55–87.
2. Kartasheva E., et al. An Implicit Complexes Framework for Heterogeneous Objects Modelling, in Heterogeneous Objects Modelling and Applications. // Lecture Notes in Computer Science, vol. 4889, Springer-Verlag, pp.1-41, 2008.
3. SALOME – открытая интегрированная платформа для численного моделирования. – <http://www.salome-platform.org/>
4. Буч Г. Объектно-ориентированный анализ и проектирование с примерами приложений на C++ // 2-е изд., СПб.: "Невский диалект", 2001.