

УДК 519.6

РАСЧЕТ НАЧАЛЬНЫХ ДАННЫХ ТРЕХМЕРНЫХ ЗАДАЧ ПО ПРОГРАММЕ 3D-РНД

В. И. Тарасов, С. В. Ребров, А. В. Волгин, А. Л. Потехин, П. В. Черенков,
Е. В. Потехина, В. И. Будников, А. В. Марунин, Н. С. Аверина
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Описываются особенности разработки программы 3D-РНД, позволяющей проводить в интерактивном режиме расчет начальных данных для трехмерных задач математической физики. Интерфейс с пользователем максимально унифицирован, что позволяет сократить время задания информации при проведении расчетов одной и той же задачи по разным методикам. Программа 3D-РНД позволяет рассчитывать начальные данные в двух режимах — скалярном на ПЭВМ и параллельном на многопроцессорных ЭВМ. В программе реализована работа с регулярными сетками (прямоугольной, сферической, цилиндрической) и нерегулярными сетками из тетраэдров.

В численных методиках для решения задач математической физики существуют собственные программы построения трехмерных пространственных сеток, задания информации о веществах и расчета распределения веществ на сетке. Большинство таких программ представляют собой обобщение методов расчета начальных данных (РНД) двумерных задач на трехмерный случай, т. е. предусматривают построение двумерной сетки в сечении тел и получение сетки внутри трехмерного тела путем вращения или параллельного переноса, что ограничивает возможности расчета несимметричных трехмерных конструкций. Как правило, программа РНД в методике жестко настроена на собственные требования и структуру хранения данных, что является существенным препятствием по использованию рассчитанных данных в другой методике.

Главной отличительной особенностью создаваемой программы 3D-РНД является то, что она позволяет проводить в интерактивном режиме РНД для трехмерных задач, не обладающих свойством симметрии. Одним из основных требований к программе 3D-РНД является максимальная обобщенность вводимых данных для сокращения времени задания информации при проведении расчетов одной и той же задачи по разным методикам. При этом особенности конкретной методики учитываются на этапах задания параметров сеток (регулярных или нере-

гулярных) и при расчете сеток и сеточных величин.

При создании программы 3D-РНД учитывалось, что требования к подробности сеточной аппроксимации трехмерной задачи таковы, что РНД в скалярном режиме, как правило, будет невозможен. В этом случае полномасштабный РНД должен проводиться на высокопроизводительных ЭВМ в параллельном режиме.

Проработка принципов построения единой программы РНД для трехмерных задач проводилась в течение ряда лет. Первоначально наиболее приемлемым способом задания информации о математической модели геометрии рассчитываемого объекта (далее просто геометрии) считался традиционный способ описания с помощью специальных языковых конструкций. Такой способ задания информации имеет ряд преимуществ, но не выдерживает требований к современным интерфейсам пользователя. На текущий момент оптимальным считается задание геометрии в графическом виде в одном из пакетов конструкторской графики. Такой способ дает возможность создавать независимо от методик банк данных о задачах, для которых проводятся расчеты.

В соответствии с выработанной концепцией РНД — технология, состоящая из нескольких этапов:

- построения геометрии в редакторе конструкторского пакета на ПЭВМ;
- задания наборов областей, параметров сетки, начальных и граничных условий в диалоговом режиме в программе 3D-РНД на ПЭВМ;
- построения сеток и расчета сеточных величин на ПЭВМ (*грубый* расчет);
- анализа рассчитанных данных с помощью интерактивной визуализации;
- подготовки на ПЭВМ промежуточных данных для передачи на многопроцессорную ЭВМ;
- завершающего РНД на многопроцессорной ЭВМ в параллельном режиме;
- записи результатов РНД в формате, доступном для всех методик.

Рассмотрим более подробно этапы задания начальных данных.

Использование специализированных программ построения трехмерной геометрии позволило существенно уменьшить сроки разработки 3D-РНД. Вообще трехмерную геометрию можно создавать в любом редакторе трехмерных геометрий. В этом случае необходимо решить задачу импортирования данных о геометрии в программу 3D-РНД. Основная часть программы 3D-РНД при этом будет неизменной. Авторами ведется разработка собственного редактора трехмерных геометрий SolidEditor [1] на базе открытой библиотеки Open CASCADE [2]. Его применение позволит наиболее простым способом решить задачи задания исходных геометрий, сложно реализуемых в других системах.

Для данных, передаваемых в программу 3D-РНД, был выбран формат, в котором, помимо информации об аналитических поверхностях, есть еще информация о поверхностной сетке из треугольников. Наличие триангуляции поверхностей позволяет существенно упростить работу с телами и убирает неоднозначности, например, при определении пересечения тел. Наличие же аналитического описания поверхностей позволяет провести РНД с необходимой точностью.

После считывания информации о геометрии программой 3D-РНД на экране монитора при помощи опорной триангуляционной сетки отображаются тела геометрии, как это показано на рис. 1.

Такое изображение геометрии позволяет легко идентифицировать тела на следующем этапе

задания начальных данных — задания физических областей. Каждая физическая область набирается из тел исходной геометрии и содержит одно вещество. При РНД для каждой физической области необходимо указать следующие параметры:

- уравнение состояния вещества. Основой для задания этой информации является библиотека уравнений состояний веществ УРС-ОФ [3];
- параметры упругопластики;
- начальную плотность вещества;
- начальную скорость вещества;
- термодинамические параметры в начальный момент времени.

Следующим этапом задания начальных данных является указание математических областей, в каждой из которых будет строиться сетка некоторого типа. Такое разбиение геометрии на области необходимо для того, чтобы в разных частях геометрии строить пространственную сетку разной подробности. У каждой методики свои требования к заданию математических областей. Например, одну и ту же задачу одна методика рассчитывает в нескольких математических областях, а другая — в одной.

В настоящее время с помощью программы 3D-РНД строятся следующие типы сеток:

- прямоугольная регулярная сетка, в которую "погружаются" все тела. В этом случае ячейки, в которые попали вещества нескольких тел, считаются смешанными. Вещества в смешанной ячейке различаются объемными концентрациями;

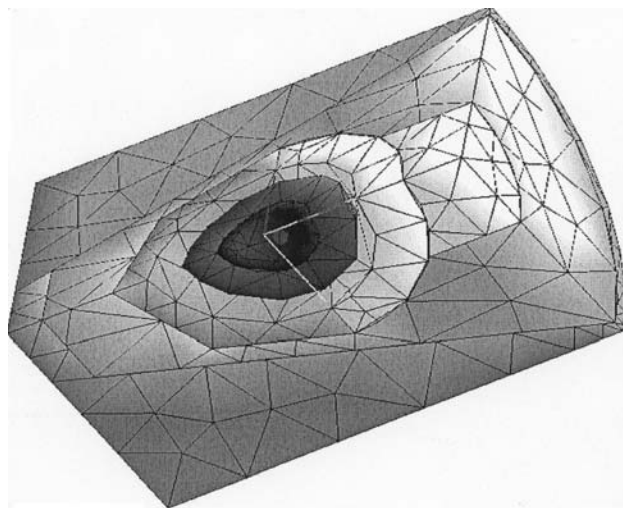


Рис. 1. Отображение геометрии при помощи опорной сетки из треугольников

- сферическая и цилиндрическая регулярные сетки, основанные на семействах лучей, выходящих из одной опорной точки или ортогональных опорному отрезку. В этом случае геометрия разбивается на отдельные области и в каждой области строится сетка с разными параметрами;
- нерегулярная сетка из тетраэдров, которые заполняют тела геометрии [4]. Сетка строится независимо в каждой физической области, содержащей одно вещество.

Способ разбиения исходной геометрии на математические области в первую очередь зависит от типа сетки, которая будет использоваться для дальнейших расчетов.

Вообще при построении сетки из прямоугольных параллелепипедов информация о поверхностях тел не нужна — достаточно знать размеры геометрии. Но при расчете распределения веществ (для определения их объемных концентраций) нужно рассматривать пересечения ячеек сетки и тел геометрии.

Сферические и цилиндрические сетки, с одной стороны, являются регулярными, как и сетки из параллелепипедов, но, с другой стороны, при их построении имеется возможность точно описать часть границ раздела веществ [5]. Тем не менее алгоритм расчета объемных концентраций необходим и для этих сеток.

В основе программ построения сеток и расчета объемных концентраций веществ лежат алгоритмы расчета пересечений луча и поверхностей, образующих тело. При нахождении точек пересечений луча и аналитической поверхности получается несколько точек, часть из которых являются "лишними", т. е. не принадлежат телу. Если анализ аналитического описания тел поверхностей не дает однозначного результата, используется поверхностная сетка из треугольников, которая строится с помощью пакета конструкторской графики.

Нужно отметить, что при использовании триангуляционной сетки возникают проблемы в расчете пересечений в окрестности ребер, разделяющих две поверхности. Как правило, сетка из треугольников строится независимо для каждой из поверхностей, что приводит к появлению щелей в окрестности ребер. Для точного расчета точек пересечений в этом случае был разработан специальный алгоритм коррекции узлов треугольников и расчета точек пересечений плоскости с ребрами.

Для расчета объемных концентраций предлагается много различных алгоритмов. Для сферических и цилиндрических сеток и сеток из прямоугольных параллелепипедов был разработан специальный алгоритм, основанный на том, что часть линий сетки являются прямыми. В ячейках дополнительно строится несколько лучей и рассматриваются их точки пересечения с поверхностью. Такой способ расчета концентраций позволяет учесть поверхность раздела веществ внутри ячейки и рассчитать не только объемные концентрации, но и распределение веществ на внутренней адаптивной сетке, которая используется в некоторых методах расчета смешанных ячеек. Меняя число внутренних лучей, можно управлять точностью расчета концентраций и временем вычислений.

На рис. 2, *a, б* представлены результаты РНД тестовой задачи на прямоугольной и сферической сетках.

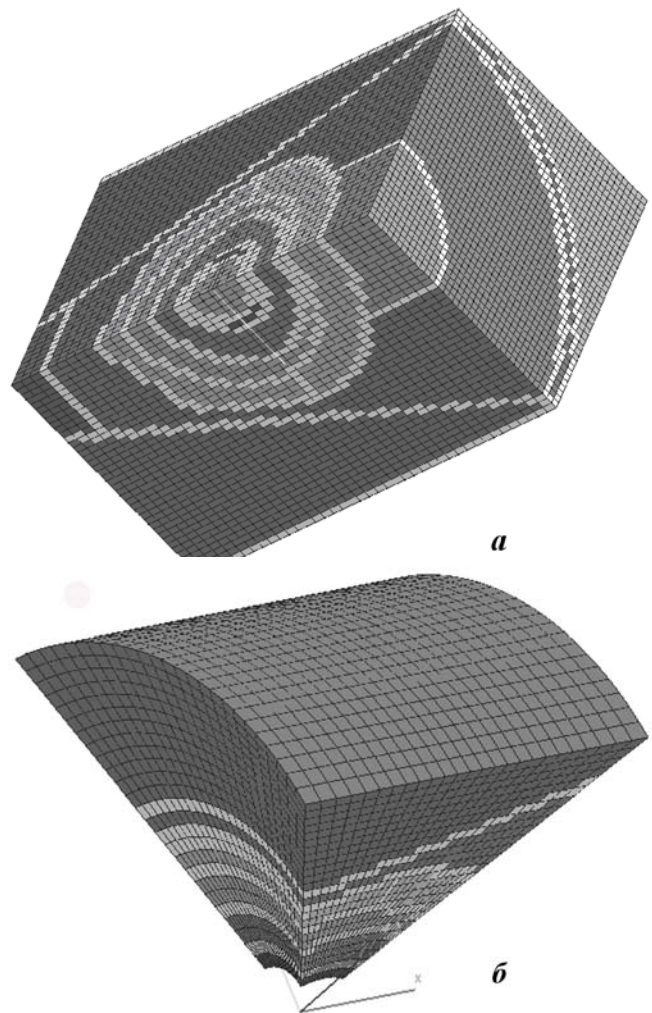


Рис. 2. Распределение веществ в тестовой задаче: *a* — на прямоугольной сетке; *б* — на сферической сетке

Для программы 3D-РНД разработан интерфейс с пользователем, который с помощью *мастеров* максимально упорядочивает действия пользователя при задании начальных данных. Это избавляет пользователя от сложной последовательности действий и, как следствие, позволяет избежать возникающих в связи с этим ошибок.

Центральным интерфейсным элементом является *Панель управления*, совмещающая в себе свойства мастера и *окна*. Панель управления последовательно проводит пользователя программы 3D-РНД по всем этапам задания начальных данных.

Интерфейс является расширяемым и настраиваемым на требования математических методик, для которых проводится РНД.

На рис. 3 показан общий вид рабочего окна программы. На рис. 4 показан интерфейс на этапе задания параметров регулярной сферической сетки.

Параллельно с мастерами и диалогами работает система визуализации программы 3D-РНД. Опорная точка отображается на геометрии в ви-

де сферы. Граничные углы по листам показываются с помощью плоскостей, а граничные углы по столбцам — с помощью конусов.

В рамках программы 3D-РНД разрабатывается система трехмерной визуализации объектов различных типов [6], которая позволяет интерактивно отображать информацию в графическом виде без промежуточного сохранения ее на диске для программ-визуализаторов и сделать изображение на экране контекстно-зависимым от данных, вводимых пользователем. На каждом этапе работы программы 3D-РНД пользователю предоставляется возможность визуально контролировать правильность задаваемой информации и результатов расчета с возможностью дополнительной фильтрации данных.

В программе 3D-РНД реализуются два последовательных этапа РНД:

- 1) интерактивный расчет геометрии задачи в первом приближении (грубый расчет) на ПЭВМ. Выполняется расчет объемов данных, которые помещаются в памяти используемой ПЭВМ для контроля вводимой информации, определения топологии разби-

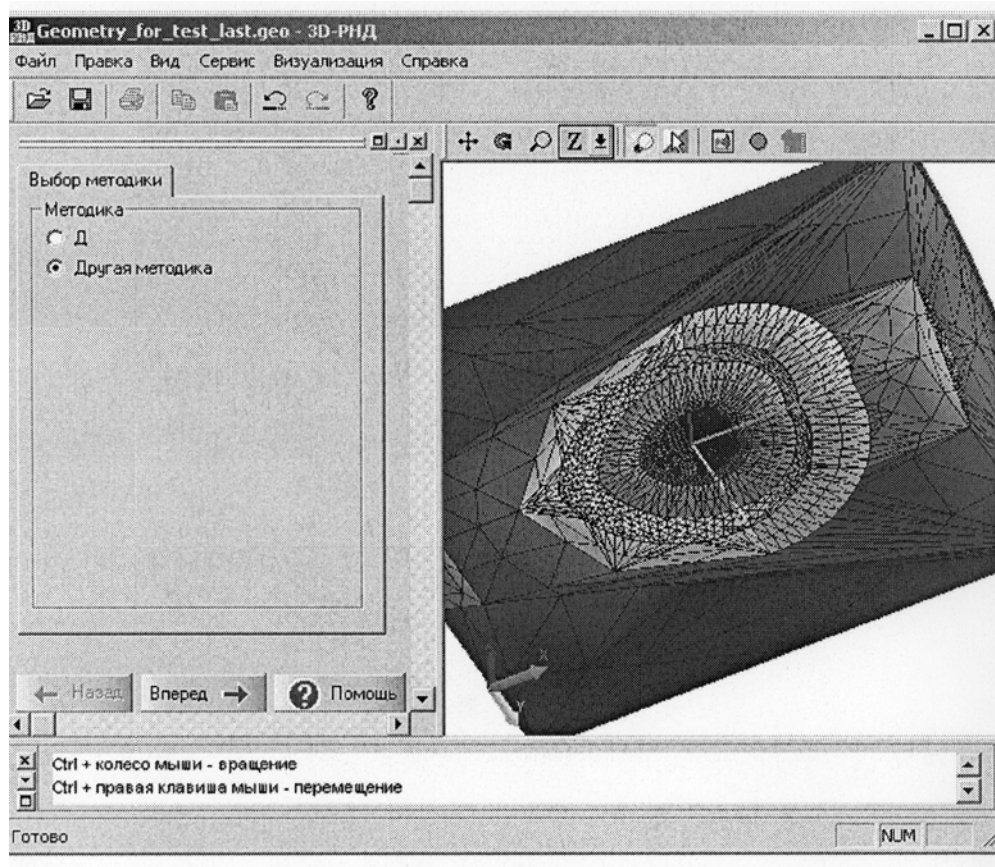


Рис. 3. Рабочее окно программы 3D-РНД

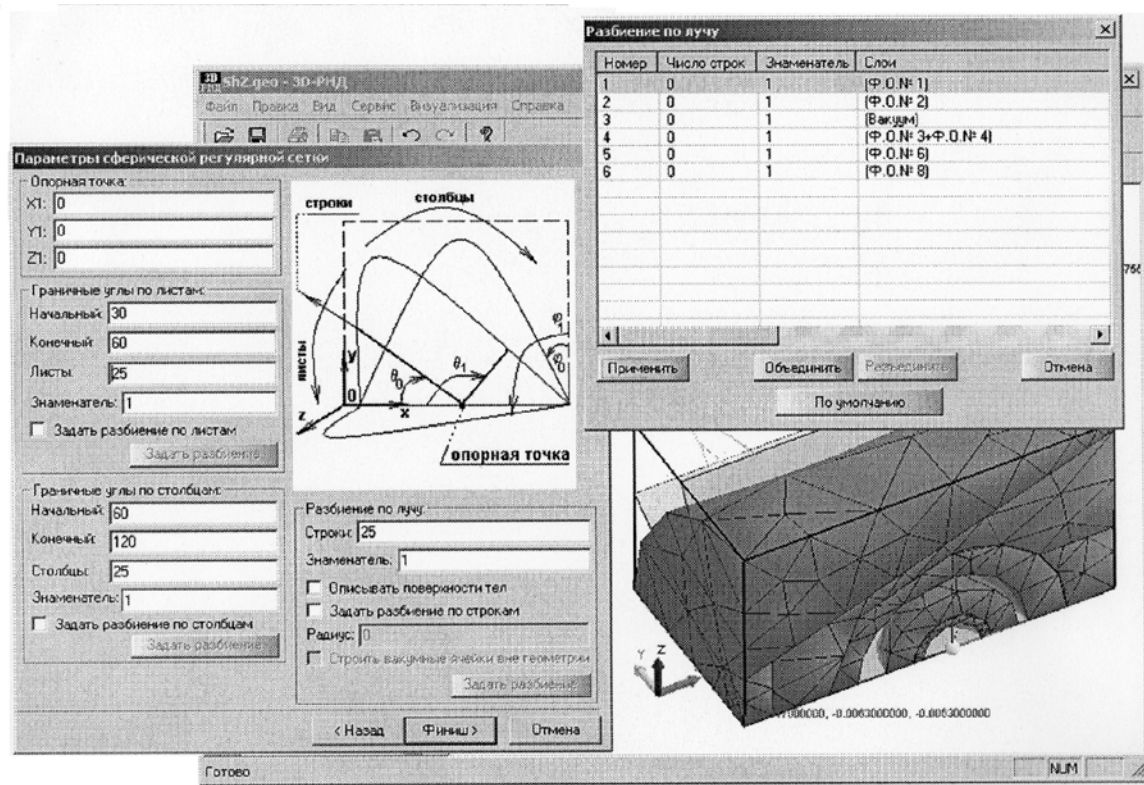


Рис. 4. Задание параметров регулярной сферической сетки

ния геометрии на счетные области и выбора оптимальных параметров построения счетных сеток. Все этапы грубого расчета сопровождаются интерактивной визуализацией. Результаты подобных расчетов можно использовать для отладочного счета на ПЭВМ и расчетов небольших задач в параллельном режиме;

- 2) полный РНД. Осуществляется на многопроцессорной ЭВМ и является завершающим этапом РНД. Данные, полученные на ПЭВМ, передаются на многопроцессорный вычислительный комплекс, где в параллельном режиме рассчитываются подробная сетка и распределение веществ в полученных ячейках.

Результаты РНД трехмерных задач сохраняются в едином формате, доступном для широкого набора математических методик. Такой способ работы позволяет существенно сократить время, необходимое на подготовку задачи, и снижает вероятность ошибки при задании информации для сравнительных расчетов.

По программе 3D-RND начаты РНД для сложных трехмерных задач. Для оценки возможно-

стей программы на ПЭВМ был проведен РНД трехмерной тестовой задачи на прямоугольной параллелепипедной сетке с числом ячеек более 100 млн. Визуальный и численный анализ результатов показал правильность распределения веществ по сетке и высокую точность расчета объемных концентраций.

Список литературы

1. Черенкова М. В., Черенков П. В. Прототип редактора для задания трехмерной геометрии на базе библиотеки Open Cascade // Сб. докл. науч.-тех. конф. "Молодежь в науке". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2003. С. 55–59.
2. Official site of Open CASCADE Technology. 2006. [www/opencascade.org](http://www.opencascade.org).
3. Воронов Г. И., Горев И. В., Леонова Н. И., Осенкова Г. С., Сураева З. В. Программное обеспечение функционирования пакета УРС-ОФ // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1999. Вып. 3. С. 56–58.

4. *Потехина Е. В.* Один из методов построения тетраэдрной сетки путем дробления шестигранников // Сб. докл. науч.-тех. конф. "Молодежь в науке". Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2004. С. 55–59.
5. *Потехина Е. В.* Модуль построения регулярных сеток в программе трехмерного РНД // Там же. Саров, 2003. С. 43–49.
6. *Потехин А. Л., Будников В. И.* Интерактивная система визуализации в программе трехмерного РНД // Там же. С. 39–42.

Статья поступила в редакцию 15.05.06.
