

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

**«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»**

Кафедра Математического и компьютерного моделирования

Автоматизация проведения

численных экспериментов

АВТОРЕФЕРАТ МАГИСТЕРСКОЙ РАБОТЫ

студента 2 курса 247 группы

направление 09.04.03 — Прикладная информатика

механико-математического факультета

Бодрилова Павла Александровича

Научный руководитель
доцент, к.т.н.

И.А. Панкратов

Зав. кафедрой
зав. каф., д.ф.-м.н., доцент

Ю.А. Блинков

Саратов 2020

ВВЕДЕНИЕ

Исследование основных задач механики сплошных сред, в частности гидродинамики, представляет интерес в связи с изучением ряда геофизических явлений и решением практических задач, связанных с обтеканием тел и протеканием жидкостей в областях со сложной геометрией. Лабораторные и натурные экспериментальные исследования дорогостоящи и их успешное применение возможно лишь в простейших ситуациях. Важная роль в изучении течений вязких несжимаемых жидкостей принадлежит численному моделированию.

Для проведения численных экспериментов в работе используется пакет OpenFOAM. Пакет OpenFOAM представляет собой открытую объектно-ориентированную библиотеку, написанную на языке C++ и предназначенную для проведения расчетов в области МСС посредством численных методов. Открытость исходных кодов данного пакета предоставляет широкие возможности по изучению и модификации реализованных в нем математических и вычислительных моделей. При этом платформа OpenFOAM лишена встроенных средств взаимодействия. Она предусматривает использование только командной строки и требует от специалиста знания команд, предназначенных для запуска утилит-команд OpenFOAM, необходимых для управления численными исследованиями, а также структуры каждого расчетного случая (задачи МСС) и свойств задач МСС в служебных файлах. При существующем подходе специалисты вынуждены работать с расчетным случаем через командную строку и вручную редактировать служебные файлы. Указанный подход весьма неудобен и требует существенных временных затрат.

Решением данного вопроса является использование графического интерфейса. Графические интерфейсы являются важнейшим элементом человеко-компьютерного взаимодействия. Коммерческое программное обеспечение преимущественно поставляется со встроенными графическими средствами взаимодействия. Однако не все они обладают удобным и понятным интерфейсом пользователя, поэтому требуются специальные навыки и значительные ресурсы рабочего времени на освоение.

1 Общая структура работы

1.1 Актуальность работы

В данной работе рассматривается вопрос автоматизации проведения численных экспериментов на платформе OpenFOAM. Данная платформа, предназначенная для проведения расчетов в МСС, обладает существенным недостатком - отсутствие классического оконного графического интерфейса. При существующем подходе специалисты вынуждены работать с расчетным случаем через командную строку и вручную редактировать служебные файлы. Указанный подход весьма неудобен и требует существенных временных затрат. Настоящее исследование предназначено для реализации решения данной проблемы.

1.2 Цели и задачи работы

Целью данной работы является разработка базовой версии GUI для платформы OpenFOAM, при помощи которой будет осуществляться подготовка расчета исследования с применением решателей isoFoam (несжимаемый ламинарный поток) и pisoFoam (нестационарный несжимаемый турбулентный поток), производство расчетов, обработка и сохранение полученных результатов в БД.

1.3 Практическая значимость

Полученные в работе теоретические и практические результаты позволяют автоматизировать процесс расчета численных экспериментов. Данная практическая часть позволяет производить подготовку исследования из оконного графического интерфейса, расчет эксперимента, обрабатывать полученные результаты, а также позволяет сохранения полученные результаты в базу данных.

2 Содержание магистерской работы

2.1 Численные эксперименты

На современном этапе научных исследований вычислительный эксперимент является одним из важных направлений при изучении задач аэродинамики, тепломассообмена и горения. Информация, полученная с помощью численных расчетов, позволяет не только правильно осмыслить и понять физические эффекты, наблюдаемые, например, на экспериментальных установках, но и в некоторых случаях заменить физический или натуральный эксперимент компьютерным, как более дешевым.

В настоящее время широкое распространение получили пакеты вычислительной гидродинамики, тепломассообмена и электродинамики для проведения инженерных расчетов. По уровню полноты большую часть из них относят к коммерческим профессиональным CFD-комплексам для решения широкого спектра задач механики сплошных сред и тепломассообмена.

На определенном этапе указанные пакеты сыграли положительную роль, однако сейчас все заметнее их тормозящее влияние на развитие численных исследований в научной и учебной сферах по причине не только монополизации производителей, но и в закрытости самих исходных кодов, а также их стоимости. Альтернатива коммерческим пакетам заключается в использовании свободного программного обеспечения. В области численного моделирования задач МСС широкое распространение и популярность получила программная среда (ПС) OpenFOAM с открытым исходным кодом.

OpenFOAM – это прежде всего набор средств языка программирования C++ для настройки и расширения численных решателей для задач механики сплошной среды, включая вычислительную гидродинамику (CFD). Он поставляется с растущим набором написанных решателей, применимых к широкому кругу задач.

Виртуальные функции используются, например, для задания различных граничных условий. В пакете можно строить свои решатели для задач МСС, готовить новые граничные условия, разрабатывать служебные утилиты и т.д.

2.2 Существующие GUI интерфейсы

Интерфейс – это связь между программой и пользователем. Пользовательский интерфейс является одной из важных частей функционирования программного продукта. В построении интерфейса основой являются графические формы, которые размещают в себе компоненты программного продукта.

Платформа OpenFOAM является свободно распространяемым инструментарием для проведения расчетов в МСС посредством численных методов, но не предусматривает наличие GUI, а лишь использование командной строки и требует от специалиста знания команд, предназначенных для запуска утилит-команд OpenFOAM, необходимых для управления численными исследованиями.

Альтернативой данному подходу является классический оконный графический интерфейс, благодаря которому численный эксперимент на основе платформы OpenFOAM будет осуществляться с применением окон и элементов управления: кнопок, выпадающих списков, текстовых полей и т. д. Некоторые зарубежные IT-компании разработали собственные графические оболочки для OpenFOAM. Среди них рассмотрим в таблице 2.1 такие программные продукты как SimFlow, Visual-CFD, CastNet, которые позволяют на базе платформы OpenFOAM выполнять все этапы построения цифровых моделей задач МСС – препроцессинг, решение, постпроцессинг.

Создание перечисленных GUI вызвало неоднозначную реакцию специалистов. С одной стороны, пользователи получили возможность отказаться от традиционного проведения численного моделирования, а с другой - были обнаружены недостатки, такие как необходимость оплаты лицензии и консультационных услуг, отсутствие полноценной документации так как разработчики представленных программных решений заинтересованы в том, чтобы потенциальные заказчики оплачивали техническую поддержку. Из-за данных недостатков не все пользователи оказались готовыми к переходу от традиционного подхода к оконному интерфейсу.

2.3 Проектирование ИС

Успешность разработки программного обеспечения напрямую зависит от того насколько точно и грамотно удалось поставить задачу. Необходимо очертить круг задач, выполняемых разрабатываемой системой, затем, разработать модель системы, и определить способы реализации. Разработка информационной системы это разработка детализированных моделей системной архитектуры. Для разработки такой информационной системы используются средства языка моделирования UML, которые позволяют выразительно и легко произвести предварительную разработку ИС, и методически сопроводить весь ход ее разработки, включая и весь жизненный цикл как программного продукта. Для графического представления набора элементов воспользуемся такой конструкцией, как диаграммы.

Диаграмма вариантов использования (use-case diagrams) является исходным концептуальным представлением системы в процессе ее проектирования и разработки. Суть данной диаграммы в том, что проектируемая система представляется в виде множества сущностей или актеров, взаимодействующих с системой с помощью вариантов использования. При этом актером (actor) или действующим лицом называется любая сущность, взаимодействующая с системой извне. Вариант использования (use case) служит для описания сервисов, которые система предоставляет актеру. Каждый вариант использования определяет некоторый набор действий, совершаемый системой при диалоге с актером.

Диаграмма состояний (state machine diagrams) – это технология описания поведения системы. Она определяет все возможные состояния конкретного объекта, процесс смены состояний из-за влияния некоторых событий. Диаграмма представляет собой состояния, соединенные переходами. Состояние может быть конкретным значением атрибутов объекта, при этом изменение их отдельных значений будет отражать изменение состояния моделируемого объекта. Данная диаграмма полезна при моделировании жизненного цикла объекта. От других она отличается тем, что описывает процесс изменения состояний только одного экземпляра определенного класса - одного объекта, поведение которого характеризуется его реакцией на внешние события.

Диаграмма последовательности — диаграмма, на которой для некоторого набора объектов на единой временной оси показан жизненный цикл определённого объекта и взаимодействие действующих лиц ИС в рамках определённого прецедента. Диаграмма фокусируется на обмене сообщениями между несколькими линиями жизнеобеспечения. Ключевым моментом является динамика взаимодействия объектов во времени. Основными элементами диаграммы являются вертикальные «линии жизни», прямоугольники деятельности объекта, стрелки, показывающие обмен сообщениями между объектами.

2.4 Выбор инструментов разработки

Разрабатываемая графическая оболочка является программным средством, то есть набором файлов с программным кодом. Для его написания применяется специальный инструментарий, который включает язык программирования и среду разработки.

Выбранный язык программирования должен обладать хорошей читаемостью и удобством. Принято решение реализовать логику работы программы с помощью языка Python, который по итогам 2018 года укрепил свои позиции и считается одним из наиболее популярных средств описания логики работы настольных и веб-приложений. Это мощный язык программирования, предусматривающий использование стандартных типов данных, а также поддерживающий многочисленные библиотеки для решения широкого перечня задач программирования.

Элементы графического интерфейса предложено реализовать за счет подключения библиотеки PyQt5 и использования соответствующих ей программных инструкций. PyQt — набор «привязок» графического фреймворка Qt для языка программирования Python, выполненный в виде расширения Python. Использование языка Python позволяет на порядок ускорить процесс разработки приложения для Qt по сравнению с альтернативной разработкой на C++. Qt Designer — кроссплатформенная свободная среда для разработки графических интерфейсов программ, позволяющая создавать графические интерфейсы пользователя при помощи ряда инструментов.

Еще одним важным аспектом является выбор среды разработки для написания, отладки и запуска программного кода. В последние годы среди Python-разработчиков пользуется популярностью интегрированная среда разработки PyCharm. Она позволяет для каждого проекта определить нужную версию интерпретатора Python, а также в режиме реального времени установить необходимые пакеты и расширения, в том числе PyQt.

В качестве базы данных для экспериментов в OpenFoam выбрана MongoDB в связи с тем, что в MongoDB не имеет схемы, то есть основана на коллекциях различных документов и имеет понятную структуру каждого объекта. MongoDB — документоориентированная система управления базами данных (СУБД) с открытым исходным кодом, не требующая описания схемы таблиц. Это документная база данных, которая позволяет не только хранить, но и опрашивать вложенные данные, предъявляя произвольные запросы. Схема базы данных не навязывается, поэтому один документ может содержать поля или типы, отсутствующие во всех остальных документах коллекции.

2.5 Система автоматизации проведения численных экспериментов

Для отказа от ввода консольных команд OpenFOAM, отвечающих за подготовку и запуск расчетного эксперимента разработана программа с графическим интерфейсом, с применением автоматизации данного процесса. Данная программа имеет возможность подготовки параметров существующего расчетного случая, установки своих значений параметров (коэффициента вязкости, начального и конечного времени, шага по времени), генерации модели сеток средствами OpenFOAM при помощи встроенной утилиты blockMesh, запуска и остановки численного эксперимента, и создания таблицы БД для файлов параметров расчетного случая.

При подготовке расчетного случая необходимо взять за основу конкретную задачу. Исходя из этого была реализована функцию publ, в которой создается диалоговое окно, при помощи которой происходит выбор расчетной модели. Данная форма реализована при помощи функционала PyQt5.

Одним из важных моментов для получения результатов эксперимента является построение его геометрической сетки. В OpenFOAM за данный момент отвечает утилита blockMesh. В соответствии с данной задачей была реализована функция blkMesh вызова данной утилиты при помощи функционала Python с применением PyQt5.

После получения результатов расчета геометрической сетки следующим важным этапом является запуск конкретного решателя для выбранной задачи. В соответствии с данной задачей была реализована функция solveRun выполнения выбранного решателя при помощи Python с применением PyQt5.

Полученные результаты исследования необходимо сохранить для их дальнейшего применения. Кроме того, необходимо добавить краткую информацию об проведенном исследовании. В соответствии с данной задачей реализована функция funcDataInput, при помощи Python с применением PyQt5, добавляющая данные в MongoDB.

Основное окно интерфейса содержит вкладки, в которой отображается основной функционал. На вкладке «Основное» происходит выбор эксперимента. Так же реализована возможность внесения корректировки данных в расчетные файлы. При возникновении вопроса к функционалу имеется минимальная справка.

На вкладке «Решение» имеется возможность внесения изменений в файл с геометрией и свойствами сетки, установки времени расчета, шаг по времени, коэффициент вязкости, выбора соответствующего эксперименту решателя. По каждому решателю имеется минимальная справка для пользователя.

На вкладке «Расчет» представлена команда выполнения построения геометрии эксперимента. Имеется возможность выполнить команду для расчета задачи и выполнение выбранного ранее решателя.

На вкладке окна «Сохранение» представлена возможность сохранения результатов расчетов и запись данных в БД. Сохранённые данные в базу данных MongoDB по численным экспериментам произведенных в OpenFOAM отображаются в таблице со следующими полями: название исследования, дата проведения исследования, полученные результаты и комментарии к исследованию. Имеется возможность сортировки по каждому из данных полей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе реализована графическая оболочка для проведения численных исследований на базе OpenFOAM в которой основное программное окно имеет следующие блоки: основной блок программы, блок подготовки решения, блок расчета и блок сохранения данных.

В основном блоке программы реализована возможность выбора эксперимента, внесение корректировки данных в расчетные файлы и получения минимальной справки по соответствующим вопросам. В блоке подготовки решения реализована возможность внесения изменений в файл с геометрией и свойствами сетки, установки времени расчета, шага по времени, коэффициента вязкости, выбора решателя и получение по каждому решателю минимальной справки. В блоке расчета реализована возможность выполнения построения геометрии эксперимента, выполнения команд для расчета задачи и выбранного решателя. В блоке сохранения данных реализована возможность сохранения полученных результатов в БД для их дальнейшего использования.