

ДОПОЛНЕНИЕ NADRA-3D ADD-ON ДЛЯ ПРОГРАММНОГО КОМПЛЕКСА BLENDER

Аннотация. Рассмотрен пакет дополнения Nadra-3D add-on для программного комплекса Blender, позволяющий использовать программные пакеты Blender, TetGen, ParaView для пред/постобработки данных конечно-элементного решателя Nadra-3D, предназначенного для моделирования пространственных процессов фильтрации, теплопроводности, изменения напряженно-деформированного состояния.

Ключевые слова: моделирование, метод конечных элементов, свободное программное обеспечение, пред/постобработка данных.

ВВЕДЕНИЕ

При разработке новых математических моделей, вычислительных алгоритмов и построенных на их основе программ-решателей одной из проблем тестирования и дальнейшего применения последних для решения практических задач является подготовка входных данных — создание моделей геометрии сложной структуры и построение расчетных сеток для них.

Написание собственного программного обеспечения для этих целей — не очень хорошая идея, поскольку требует значительного времени на создание кода и еще большего — на его отладку. Вместе с тем существует достаточное количество качественного свободного программного обеспечения, позволяющего построить как модель геометрии, так и разнообразные расчетные сетки для нее. Однако при этом возникает ряд проблем, связанных с передачей данных между независимыми программами, каждая из которых имеет свой формат входных и выходных файлов. В этом случае актуальна задача организации совместной работы различных программных систем, и желательно — с автоматизацией процессов конвертации и пересылки данных между ними.

Далее рассмотрена схема организации совместной работы нескольких программных пакетов для решения задач конечно-элементного моделирования.

ЭТАПЫ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ

Этапы численного моделирования физических процессов с использованием метода конечных элементов можно представить схемой, приведенной на рис. 1. Программные пакеты численного моделирования обычно предоставляют наборы инструментов для каждого из этих этапов, объединенные под общей оболочкой, или совмещенные инструменты пред/постобработки и построения расчетной сетки, а также набор конечно-элементных решателей, специализирующихся на моделировании конкретных физических процессов.

В данной работе рассмотрена технология моделирования пространственных процессов фильтрации, теплопроводности, изменения напряженно-деформирован-

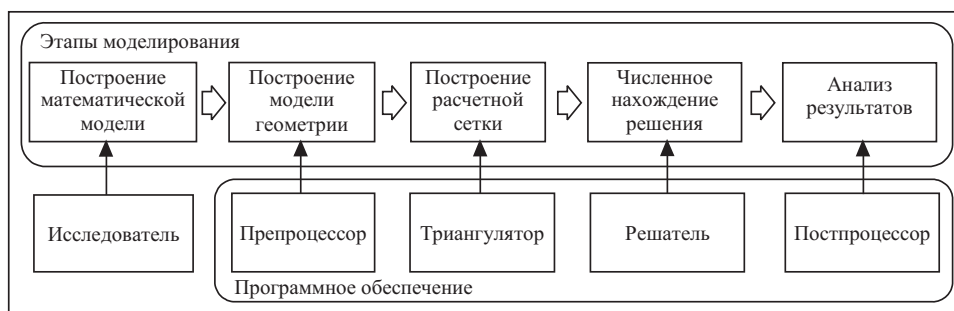


Рис. 1. Схема этапов численного моделирования

© М.В. Белоус, 2016

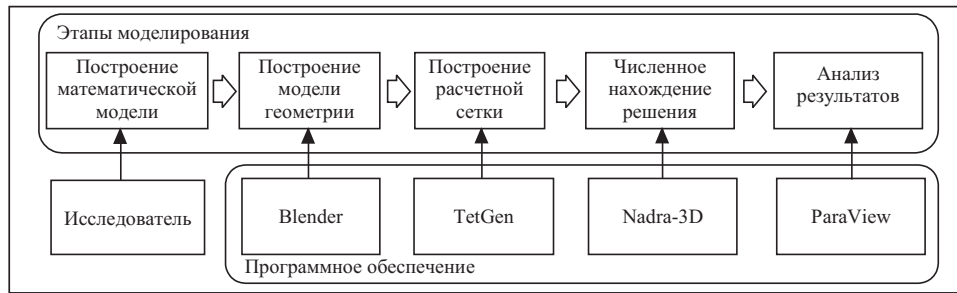


Рис. 2. Схема использования программных пакетов

ного состояния многокомпонентных объектов с помощью разработанного в Институте кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины конечно-элементного решателя Nadra-3D и программных пакетов Blender, TetGen и ParaView. Таким образом, приведенная схема (см. рис. 1) принимает вид, показанный на рис. 2, где:

- Blender [1] — программный пакет для создания трехмерной компьютерной графики, включающий средства моделирования, анимации, рендеринга, постобработки и монтажа видео со звуком. Инструменты моделирования позволяют работать с геометрическими примитивами (полигональными моделями, кривыми Безье, поверхностями NURBS), а также конфигурировать интерфейс, писать управляющие скрипты и создавать инструменты на скриптовом языке Python. Распространяется под лицензией GNU GPL, официальный сайт <http://www.blender.org>;

- TetGen [2] — генератор сеток триангуляции, разработанный в Институте прикладного анализа и стохастики имени Вейерштрасса, позволяет строить сетки тетраэдров (триангуляцию Делоне с ограничениями) для произвольной трехмерной геометрии. Распространяется под лицензией Gnu Affero Public License v.3.0, сайт проекта <http://www.tetgen.org>;

- ParaView [3] — программный пакет с открытым исходным кодом для визуализации и анализа результатов научных вычислений, в том числе полученных с использованием метода конечных элементов, выполняется как на однопроцессорных машинах, так и на многопроцессорных системах с распределенной и разделяемой памятью под управлением Windows, Mac OS X, Linux, SGI, IBM Blue Gene, Cray, Unix. Разрабатывается с 2000 г. совместно Kitware Inc., Los Alamos National Laboratory, Sandia National Labs и US Army Research Laboratory. Пакет доступен для загрузки под лицензией BSD с официального сайта <http://www.paraview.org>.

В рассматриваемой далее схеме совместного применения этих программных комплексов в качестве графической среды для работы пользователя используется среда программного пакета 3D-моделирования Blender. Инструменты пакета, позволяющие создавать модели объектов довольно сложной геометрии, дополнены написанным на скриптовом языке Python модулем дополнения Nadra-3D add-on, предоставляющим панель управления этапами моделирования. С помощью этой панели осуществляется наполнение библиотеки параметров математической модели, привязка этих параметров к элементам геометрии, задается конфигурация и запуск на выполнение пакетов TetGen и Nadra-3D. Для управления файлами ввода/вывода этих пакетов написан набор утилит. Анализ результатов проводится в пакете визуализации научных вычислений ParaView. Подготовка файлов данных в формате *.vtk для этого пакета осуществляется встроенными методами решателя Nadra-3D.

КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНЫЙ РЕШАТЕЛЬ NADRA-3D

Предназначенный для численного моделирования стационарных и нестационарных процессов в многокомпонентных средах в двумерных и трехмерных постановках конечно-элементный решатель Nadra-3D [4] разработан в Институте кибернетики имени В.М. Глушкова НАН Украины.

Базовыми возможностями данной программы является решение следующих задач:

- эллиптического типа (задачи стационарной фильтрации, теплопроводности, упругости в двумерных и трехмерных постановках);

- параболического типа (задачи нестационарной фильтрации, теплопроводности в двумерных и трехмерных постановках);
 - гиперболического типа (задачи нестационарной теории упругости в двумерных и трехмерных постановках);
 - стационарной фильтрации воды в пространственно-плановой постановке.
- Кроме того, в решателе реализован ряд сервисных функций для работы с файлами данных и результатов, их просмотра и конвертации в различные форматы:
- сравнение двух файлов результатов;
 - генерирование эталонного файла результатов на основании файла данных;
 - конвертация файла вывода из бинарного формата в текстовый;
 - генерация на основании файлов данных и результатов файла в формате *.vtk;
 - сохранение сгенерированных матрицы и вектора правой части в файлы;
 - умножение матрицы на вектор (входные данные из файлов);
 - перенумерация узлов расчетной сетки по обратному алгоритму Катхилла–Макки;
 - экспорт нумерации узлов расчетной сетки из файла *.tgl в файл нумерации *.num;
 - импорт нумерации узлов расчетной сетки из файла *.num в файл *.tgl;
 - вычисление максимальной разности номеров двух соседних узлов (т.е. принадлежащих одному конечному элементу).

Передача данных и возврат результатов осуществляется через файлы. Настройки вычислительной последовательности и параметров счета задаются пользователем в файле паспорта задачи.

Поддерживаются различные алгоритмы решения результирующих систем линейных алгебраических уравнений с большим числом неизвестных (размерность систем порядка 10^6 – 10^7 неизвестных), использующие параллельные вычисления и вычисления на графических процессорах [5].

Среда выполнения — Windows или Linux с библиотекой MPI. Для работы части алгоритмов необходимы графические процессоры, поддерживающие технологию CUDA.

ПАКЕТ ДОПОЛНЕНИЯ NADRA-3D ADD-ON ДЛЯ BLENDER

Назначение дополнения. Программный пакет Blender имеет мощные средства создания моделей геометрии и рендеринга. Однако при подготовке данных для конечно-элементного решателя необходимо также выполнять разметку этой геометрии для программы триангуляции и делать привязку физических характеристик моделируемых процессов к элементам геометрии, для чего и применяется дополнение Nadra-3D add-on для Blender.

Инструментальные панели дополнения содержат набор операторов для создания и редактирования библиотек параметров (материалов среды, внешних нагрузок, эталонных значений решения, краевых условий), инструменты настройки триангулятора, операторы управления запуском утилит, обрабатывающих последовательность подготовки файлов.

Состав дополнения. Рассматриваемое дополнение содержит набор скриптов на языке Python:

```

__init__.py
nadra3d_boundary_selectors.py
nadra3d_collections.py
nadra3d_data.lib.py
nadra3d_execute.py
nadra3d_export.py
nadra3d_filtration3d.py
nadra3d_groups.py
nadra3d_markers.py
nadra3d_solver.py

```

а также пакетные файлы nadra3d.bat, nadra3d.start и набор утилит в виде исполняемых файлов.

Набор утилит дополнения предназначен для работы с файлами данных программных комплексов TetGen, Nadra-3D и ParaView. Утилиты можно запускать из командной строки, однако предполагается, что основной способ работы

с ними — графический интерфейс комплекса Blender. Приведенные далее утилиты выполняют следующие операции:

- ply2smesh.exe конвертирует описание области моделирования из формата *.ply в формат *.smesh триангулятора TetGen;
- gsm.exe осуществляет перенумерацию сетки триангуляции, переданной во входном файле формата *.tgl, по обратному алгоритму Катхилла–Макки (перенумерацию созданной сетки также можно осуществлять запуском решателя Nadra-3D с соответствующими ключами);
- tetgen2tgl.exe генерирует на основе файлов с данными о сетке триангуляции в формате триангулятора TetGen файл с описанием сетки триангуляции в формате *.tgl;
- tgl2prm.exe генерирует на основе файлов с данными о сетке триангуляции в формате *.tgl, библиотеки параметров и файла индексов в формате *.ply файл параметров в формате *.prm;
- TaskInf.exe предоставляет графический интерфейс для редактирования паспортов задач TaskInf.ini и пакетных файлов nadra3d.bat и nadra3d.start, может запускаться как из графического интерфейса Blender, так и в автономном режиме.

Установка дополнения. Для этого необходимо выполнить следующие шаги:

- распаковать архив с дополнением и скопировать папку nadra3d-addon в папку с дополнениями Blender (на компьютере под управлением Windows это обычно папка C:\Users\username\AppData\Roaming\Blender Foundation\Blender\2.74\scripts\addons или C:\Program Files\Blender Foundation\Blender\2.74\scripts\ addons);
- скопировать папку nadra3d-utilities в любое удобное место, настройку путей к этой папке необходимо выполнить на панели дополнения Paths после завершения его установки;
- запустить Blender, открыть редактор настроек из меню File → User Preferences (Ctrl Alt U), в открывшемся окне выбрать вкладку Add-ons;
- в списке Categories выбрать категорию User или Object, в открывшемся списке доступных дополнений установить флажок активации напротив nadra3d.

В результате в системной консоли (открывается из меню Window → Toggle System Console) появится сообщение: “imported Nadra-3d add-on”, а на панели инструментов (панель на рабочем столе слева) — вкладка Nadra-3D (рис. 3).

Созданные с использованием дополнения Nadra-3D add-on библиотеки параметров при сохранении проекта Blender в файл *.blend будут автоматически за-

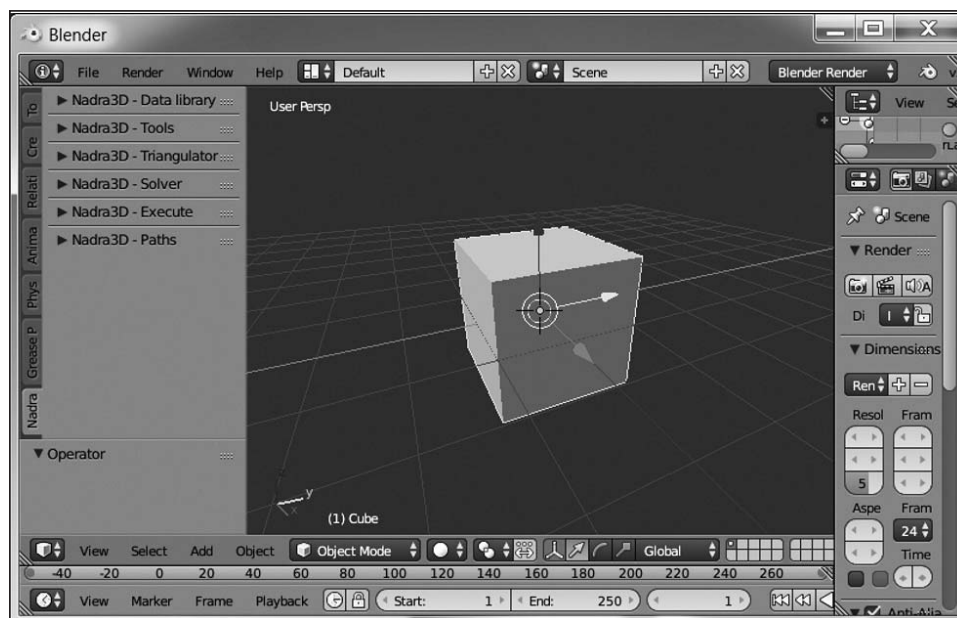


Рис. 3. Вид окна пакета Blender с установленным дополнением Nadra-3D

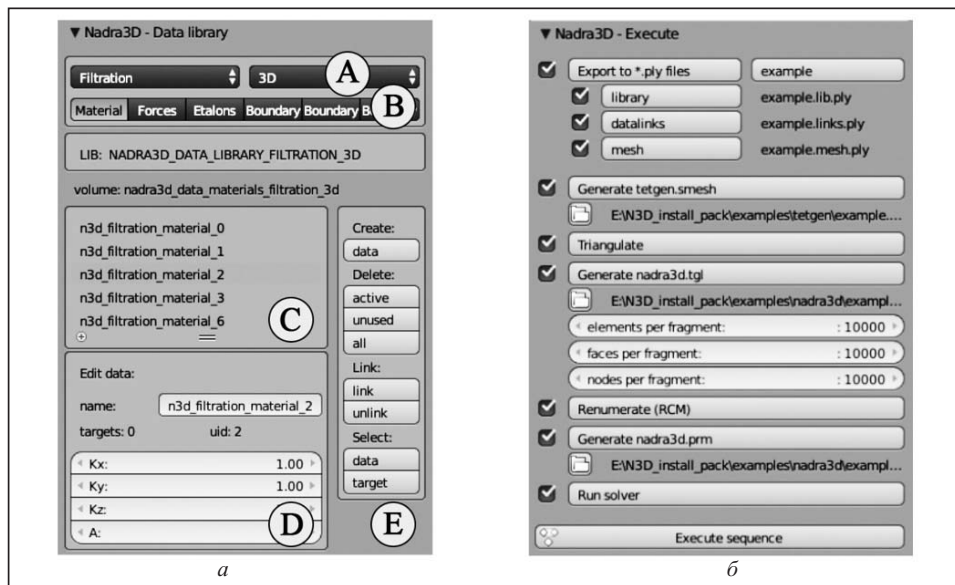


Рис. 4. Редактор библиотеки параметров (а) и редактор настроек для последовательности подготовки файлов данных (б)

писываться как данные проекта. Однако при открытии файла в пакете Blender без установленного дополнения они не загрузятся, так как в среде не зарегистрированы соответствующие свойства объектов. Поэтому, чтобы каждый раз при запуске Blender не устанавливать дополнения и не настраивать путей для запуска утилит, необходимо сохранить новые настройки по умолчанию: File → User Preferences, кнопка Save User Settings (Ctrl U).

Работа с дополнением. При подготовке данных для конечно-элементного решателя Nadra-3D работа пользователя в среде Blender состоит из следующих этапов:

- построение модели геометрии средствами Blender;
- наполнение библиотек параметров и их привязка к геометрии;
- разметка созданной модели для программы триангуляции;
- настройка последовательности подготовки данных;
- запуск последовательности подготовки данных на выполнение.

Инструментарий построения моделей геометрии рассмотрен в документации и обучающих материалах для программного комплекса Blender [1]. Далее рассмотрены некоторые инструменты дополнения Nadra-3D add-on.

Работа с библиотекой параметров. Создание, редактирование, привязка к элементам геометрии различных характеристик математической модели осуществляются на панели редактора библиотеки параметров Data library (рис. 4, а).

Сверху панели (см. рис. 4, а) расположены фильтры выбора моделируемого процесса и размерности задачи (А). Выбор этих значений определяет количество томов библиотеки. Например, для трехмерной задачи фильтрации имеется шесть томов: материалы, нагрузки (силы), эталонные значения, краевые условия на фрагментах поверхности границы, краевые условия на ребрах границы, краевые условия в узлах границы. Вообще говоря, для постановки задачи необходимо определять только значения материалов, нагрузок и краевых условий на фрагментах поверхности границы. Остальные тома опциональные, поскольку эталонные значения используются на этапе верификации модели, а краевые условия на ребрах и узлах — для задания дополнительных локальных ограничений. Переключение между томами библиотеки осуществляется кнопками на панели (В).

На панели (С) слева находится список записей в активном томе библиотеки, а под ним — контекстная панель (D) для редактирования параметров активной записи.

Панель (Е) справа содержит сгруппированные по разделам инструменты для создания записей в активном томе библиотеки и их привязки к элементам геометрии.

Настройка триангулятора и разметка геометрии. Данная процедура выполняется на панели Triangulator. Программа TetGen [2] для построения сетки триангуляции запускается с набором ключей командной строки. Подробное описание ключей и их возможных комбинаций можно найти в документации и на сайте проекта. В используемой связке Blender–TetGen–Nadra-3D применяется ограниченный набор этих ключей: часть из них закреплена в программном коде дополнения, часть — доступна для редактирования пользователем установкой на панели соответствующих флажков. В текстовой области вверху панели отображается сгенерированная командная строка, которая используется для запуска триангулятора. Для редактирования пользователю доступны следующие ключи: «-a» предназначен для установки ограничения на объем генерируемых тетраэдров; «-O» — для генерации сетки элементов для квадратичных базисных функций метода конечных элементов; «-V» — для подробного вывода в консоль.

Разметка геометрии для триангуляции выполняется инструментами region markers, hole markers и boundary, доступными на панели Tools.

Модель геометрии представляет собой набор замкнутых поверхностей. Программа TetGen позволяет строить триангуляцию с ограничениями, т.е. ребра построенного набора тетраэдров не пересекают исходных поверхностей. При этом существует возможность каждому объему, ограниченному замкнутой поверхностью, ставить в соответствие некоторый числовой индекс. Для этого в произвольное место ограниченного поверхностью пространства нужно поместить маркер со значением индекса, которое затем будет присвоено всем тетраэдрам, лежащим в этом пространстве. Аналогично ограниченное замкнутой поверхностью пространство можно отметить как пустое.

Инструментарий дополнения Nadra-3D add-on позволяет создавать такие маркеры, отмечающие пустоты (hole markers) и компоненты модели с различными свойствами (region markers) и ассоциировать с ними наборы физических характеристик.

Аналогично триангулятор TetGen осуществляет маркировку треугольников, лежащих на границе. Дополнение Nadra-3D add-on расставляет маркеры для границы автоматически, пользователю только нужно отметить элементы границы инструментом boundary и привязать к ним краевые условия.

Для примера рассмотрим некоторый набор поверхностей A , B , C (рис. 5) и выполним разметку таким образом, чтобы этот набор поверхностей описывал состоящее из двух компонентов тело, содержащее пустоту. Для этого внутри поверхности A , но вне поверхностей B и C , поместим маркер региона $*R1$, внутри поверхности C — маркер региона $*R2$, а внутри поверхности B — маркер пустоты $*H1$. После триангуляции получим сетку, заполняющую объем внутри поверхности A , но вне поверхности B , с проставленными тегами для двух подобластей: 1 — для подобласти с маркером $R1$ и 2 — для подобласти с маркером $R2$.

Подготовка данных для решателя Nadra-3D. Для выполнения расчетов решателю необходимо передать файл данных *.tgl с описанием сетки триангуляции, файл *.prm с описанием параметров математической модели, файл *.num с описанием нумерации узлов сетки (опционально) и паспорт задачи TaskInf.ini. Построение этих файлов дополнением Nadra-3D add-on для Blender осуществляется последовательным выполнением следующих этапов:

- Export to *.ply files — экспорт библиотек параметров и индексов их привязки к элементам геометрии в файлы формата *.ply (см. далее);

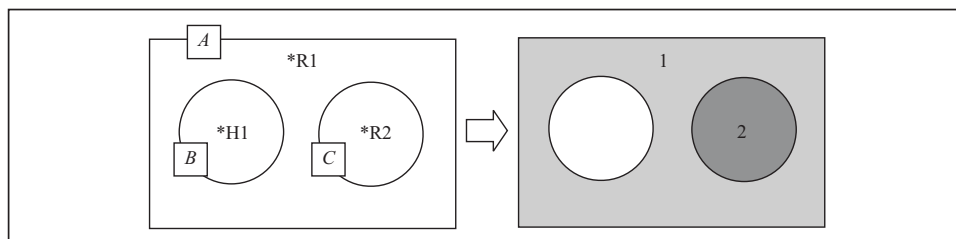


Рис. 5. Разметка области для триангулятора

- Generate tetgen smesh — экспорт описания модели геометрии и настроек триангуляции в файл формата *.smesh (файл данных триангулятора TetGen);
- Triangulate — запуск триангулятора TetGen;
- Generate nadra3d.tgl — конвертация построенной сетки триангуляции в формат *.tgl программного комплекса Nadra-3D;
- Renumerate (RCM) — перенумерация узлов сетки триангуляции;
- Generate nadra3d.prm — построение файла описания параметров в формате *.prm программного комплекса Nadra-3D;
- Run solver — запуск решателя.

Как правило, после подготовки данных пользователь проводит расчеты, поэтому в последовательность генерации файлов данных добавлен в качестве заключительного этапа автоматизированный запуск решателя Nadra-3D.

Любой приведенный этап можно исключить из выполнения, сняв на панели управления флажок возле кнопки с его названием. Например, если нужно сгенерировать несколько различных сеток триангуляции, этапы создания файлов в форматах *.ply и *.smesh незачем выполнять при построении каждой сетки, достаточно одного раза.

Редактирование настроек последовательности подготовки файлов данных осуществляется на вкладке Execute дополнения Nadra-3D add-on (см. рис. 4, б), на которой можно задать настройки для каждого этапа. Запуск выполнения последовательности осуществляется нажатием кнопки Execute sequence внизу вкладки. Каждый этап также можно выполнить отдельно, нажав на кнопку с его названием. Поток вывода и ошибок вызываемых утилит перенаправляются в системную консоль (открывается из меню Window → Toggle System Console), краткая информация о выполняемом этапе или ошибке дублируется в информационной панели Blender.

Отметим, что все этапы последовательности подготовки файлов данных, за исключением первого, выполняются не интегрированными в Blender скриптами, а утилитами из комплекта поставки Nadra-3D add-on. Таким образом, подготовив описание модели в виде соответствующих файлов в формате *.ply (например, экспортировав эти данные из собственного редактора), можно генерировать файлы данных решателя Nadra-3D и без использования пакета Blender.

Файлы формата *.ply. Экспорт библиотеки параметров, модели геометрии и индекса привязки элементов библиотеки к элементам геометрии осуществляется в файлы формата *.ply (Stanford Triangle Format) — открытого формата, разработанного в середине 90-х годов в лаборатории компьютерной графики Стенфордского университета для хранения набора трехмерных данных, получаемых с 3D-сканнеров. Преимуществом формата является его гибкость и простота — идентификация записанных данных осуществляется по заголовку файла, содержащему описание полей данных. Существуют текстовая версия формата: format ascii 1.0, и две двоичных: format binary_little_endian 1.0 и format binary_big_endian 1.0.

Для экспорта данных дополнение Nadra-3D add-on использует текстовую версию формата. Для каждой модели создаются три файла данных. Например, если имя модели modelName, то полученные файлы следующие: modelName.mesh.ply — файл описания поверхностей, составляющих модель, modelName.lib.ply — файл описания библиотеки параметров, modelName.links.ply — индекс привязки параметров к геометрии.

Автоматизированный запуск решателя Nadra-3D. Последним этапом последовательности генерации файлов данных является запуск конечно-элементного решателя Nadra-3D из графического интерфейса Blender с помощью командного файла nadra3d.bat. Далее приведен пример такого файла, выполняющего упаковку сгенерированных на рабочей машине под управлением Windows файлов данных в zip-архив, их пересылку на удаленный кластерный комплекс под управлением Linux и запуск на нем скрипта nadra3d.start, осуществляющего дальнейшую работу с этими данными:

```
:start
@echo off
title Nadra3D
if not exist %1 ( goto finish )
set local_data_dir=%1
```

```

set arhiver="C:\Program Files\7-Zip\7z"
set putty="E:\N3D_install_pack\PuTTY\putty"
set pscp="E:\N3D_install_pack\PuTTY\pscp"

set remote_commands="E:\N3D_install_pack\nadra3d_addon\exe-x32\
nadra3d.start"
set remote_data_dir="./nadra3d_ex/data"

set user=user_name
set password=user_password
set host=icybcluster.org.ua

:: zip data for upload
%arhiver% a -r %local_data_dir%\data.zip %local_data_dir%\*

:: upload data to cluster
%pscp% -pw %password% %local_data_dir%\data.zip
%user%@%host%:%remote_data_dir%

:: delete data.zip
del %local_data_dir%\data.zip"

:: start remote commands
%putty% -ssh %user%@%host% -pw %password% -m %remote_commands% -t

:finish

```

Для архивации файлов используется архиватор 7-zip, для пересылки — программа pscp, для выполнения удаленных команд — консоль putty.

Следующий скрипт nadra3d.start выполняет распаковку переданных на удаленный кластерный комплекс данных и запускает конечно-элементный решатель, перенаправляя стандартные потоки вывода и ошибок в соответствующие файлы:

```

cd ./nadra3d_ex/data;
unzip data.zip;
rm -f data.zip;
mv *.ini ../TaskInf.ini
cd ..
srun -n 1 -p scit4_lt n2d3d 1 > nadra3d.log 2 > nadra3d.err

```

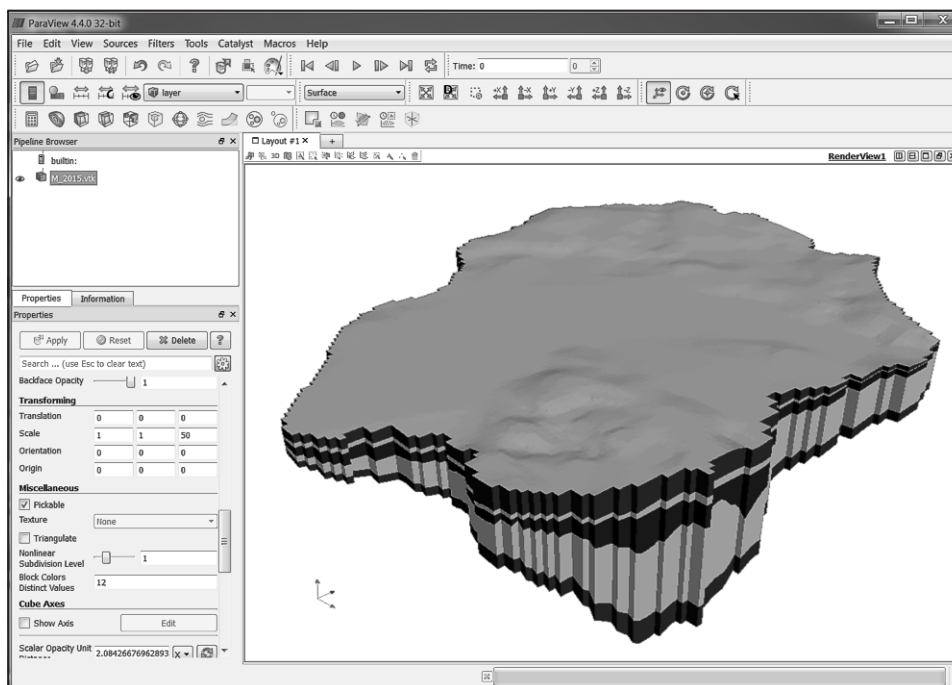


Рис. 6. Вид окна пакета ParaView с загруженной моделью Черниговского месторождения подземных вод

Постобработка результатов. После отработки решателя пользователь пересылает данные на персональный компьютер, где они визуализируются программным комплексом ParaView [3] (рис. 6). Для подготовки файлов в формате *.vtk, которые он позволяет импортировать, необходимо включить соответствующий этап в паспорт задачи решателя Nadra-3D, в результате из файлов *.tgl, *.tag, *.out будет собран файл в формате *.vtk.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрено использование программных пакетов Blender, TetGen, ParaView и Nadra-3D для моделирования пространственных процессов методом конечных элементов. Разработанная схема организации совместной работы этих пакетов предоставляет пользователю интерфейс управления последовательностью моделирования, автоматизирует процессы конвертации и передачи данных между пакетами, позволяет осуществлять удаленный запуск конечно-элементного решателя на многопроцессорных вычислительных комплексах. В результате пользователь работает с приведенными пакетами как с единым программным комплексом, предоставляющим инструментарий для всех этапов численного моделирования.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Программный пакет Blender. — <http://www.blender.org/>.
2. Si H. TetGen, a Delaunay-based quality tetrahedral mesh generator // ACM Trans. on Mathematical Software. — 2015. — 41 (2), Article 11. — 36 p.
3. Ayachit U. The ParaView guide: A parallel visualization application. — Kitware, 2015. — 276 p.
4. Білоус М. В. Скінченно-елементний розв'язувач Надра-3D // Матеріали II Міжнар. конф. «Клас-терні обчислення — 2013», Львів, 3–5 червня 2013 р. — С. 40–47.
5. Баранов А. Ю., Белоус М. В., Сергиенко И. В., Химич А. Н. Гибридные алгоритмы решения линейных систем для конечно-элементного моделирования процессов фильтрации // Кибернетика и системный анализ. — 2015. — 51, № 4. — С. 112–120.

Надійшла до редакції 29.02.2016

М.В. Білоус

ДОПОВНЕННЯ NADRA-3D ADD-ON ДЛЯ ПРОГРАМНОГО КОМПЛЕКСУ BLENDER

Анотація. Розглянуто пакет доповнення Nadra-3D add-on для програмного комплексу Blender, який дозволяє використовувати програмні пакети Blender, TetGen, ParaView для перед/постобробки даних скінченно-елементного розв'язувача Nadra-3D, призначеного для моделювання просторових процесів фільтрації, теплопровідності, зміни напружено-деформованого стану.

Ключові слова: моделювання, метод скінченних елементів, вільне програмне забезпечення, перед/постобробка даних.

M.V. Bilous

NADRA-3D ADD-ON FOR BLENDER SOFTWARE

Abstract. Nadra-3D add-on package for Blender software is considered. This add-on allows use of Blender, TetGen, ParaView software for data pre/post processing for finite element solver Nadra-3D, designed for simulation of spatial processes of filtration, heat transfer and changes in the stress-strain state of multicomponent media.

Keywords: simulation, finite element method, free software, pre/post-processing.

Белоус Максим Владимирович,

кандидат физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Института кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, Киев, e-mail: maksbilous@ukr.net.