Разработка построителя сеточных моделей для платформы OpenFOAM, применяемой на машиностроительных предприятиях

Д. И. Читалов^а, младший научный сотрудник, cdi9@yandex.ru

С. Т. Калашников^{а,б}, канд. техн. наук, зав. отделом, главный ученый секретарь, src@makeyev.ru

^аФедеральное государственное бюджетное научное учреждение «Южно-Уральский научный центр»,
Россия, Челябинская обл., 456317, г. Миасс, Ильменский заповедник

^бГРЦ им. Макеева, Россия, Челябинская обл., 456300, г. Миасс, ш. Тургоряжское, 1

Аннотация. Рассматриваются особенности разработки построителя расчетных сеточных моделей, необходимого при проведении численного моделирования на базе платформы OpenFOAM, применяемой на машиностроительных предприятиях. Приведена сравнительная характеристика существующих программ-аналогов, выявлены их недостатки. Определена актуальность исследования, сформулированы его цели и задачи. Представлен необходимый инструментарий и описаны основные аспекты разработки. На одной из учебных задач, входящих в дистрибутив платформы OpenFOAM, протестирована работа построителя. Сформулированы результаты работы, определена ее научная новизна и практическая ценность.

Ключевые слова: OpenFOAM, численное моделирование, сеточные модели, механика сплошных сред, интерфейс пользователя, открытое программное обеспечение, язык программирования Python.

Введение

Производство многокомпонентных изделий, таких как двигатели, автомобили, самолеты, космические корабли, баллистические ракеты, представляет собой сложный технологический процесс, требующий значительных временных и финансовых затрат. К этому процессу предъявляются особые требования по качеству результата на каждом этапе.

В производстве задействованы специалисты различных направлений, в том числе проектировщики и конструкторы, от которых во многом зависит итоговый результат. Использование информационных технологий в процессе производственного цикла способствует экономии времени и финансовых затрат на создание готовой продукции. На стадии проектирования изделия информационные технологии позволяют с высокой точностью создать его модель и избежать дальнейших корректировок.

Компьютерная модель представляет собой точную электронную копию изделия, на основе которой осуществляется исследование характеристик потенциального продукта. Трехмерные модели, полученные с помощью современных программных комплексов, открывают возможности для повышения качества как простых, так и многокомпонентных изделий.

Этап проектирования летательных аппаратов, автомобилей, двигателей включает не только определение характеристик изделия, но и исследование особенностей его поведения при взаимодействии с жидкостями и газообразными веществами. Перечисленные проблемы изучаются в разделе механики и физики сплошных сред, посвященном движению газообразных, жидких и деформируемых твердых тел, а также особенностям силовых взаимодействий в данных телах. Также это раздел называют разделом механики сплошных сред (МСС) [1]. Задачи МСС анализируются на основе компьютерных (цифровых) моделей, созданных на базе численных методов.

При этом применяется ряд известных коммерческих программных продуктов от компаний ANSYS, ESI Group, ТЕСИС. Высокая стоимость коммерческих решений и услуг по их сопровождению вынуждает специалистов переходить к открытым программным средствам, например, к OpenFOAM [2]. Это платформа со свободно распространяемым исходным кодом, не уступающая по функциональным возможностям коммерческим решениям.

В число пользователей OpenFOAM входят известные производители автомобилей (Toyota, Volvo, Audi, Ford), энергетического оборудования и топлива (Shell Oil) [3]. Платформа OpenFOAM также используется предприятиями судостроения и ядерной промышленности. Одним из российских предприятий, на котором начато освоение данного программного продукта, является АО «ГРЦ Макеева» [4]. Это предприятие входит в список лидеров оборонно-промышленного комплекса страны и реализует проекты ракетно-космической тематики. Кроме того, это передовая инновационная площадка, где применяются современные информационные технологии.

Главный недостаток OpenFOAM заключается в том, что это консольное программное решение, не имеющее встроенного графического интерфейса. Поэтому от пользователя требуется знание большого перечня консольных утилит, отвечающих за запуск этапов численного эксперимента и знание особенностей подготовки служебных файлов сеточных моделей (СМ) и других служебных файлов задач МСС. Моделирование задачи МСС с применением платформы OpenFOAM включает этап препроцессинга, этап решения и этап постпроцессинга. Особенности использования платформы OpenFOAM для решения различных задач МСС приведены в работах [5-9].

На этапе препроцессинга выполняется, например, подготовка СМ, определяющая точность результатов численного исследования, и являющаяся неотъемлемым элементом численного исследования. Настоящая работа посвящена особенностям проектирования программного средства с графической оболочкой для подготовки различных типов СМ на базе встроенных в платформу OpenFOAM стандартных утилит:

blockMesh. Отвечает за создание СМ с градуировкой и изогнутыми краями.

snappyHexMesh. Отвечает за создание трехмерных СМ, состоящих из стандартных и разделенных шестигранников.

foamyHexMesh. Отвечает за создание трехмерных гексагональных доминирующих СМ на основе триангулированных и аналитических поверхностей.

foamyQuadMesh. Отвечает за создание гексагональных доминирующих СМ на основе триангулированных и аналитических поверхностей в 2D-формате. Статья является продолжением исследования, описанного в работе [10].

Создание СМ перечисленных типов требует подготовки соответствующих служебных файлов и запуска ряда команд. Решение этих задач упрощается посредством рассматриваемой в настоящей работе графической оболочки, которая называется OpenFOAM_mesh_builder и заменяет “ручное” редактирование служебных файлов и выполнение команд генерации СМ.

1. Актуальность проблемы

Об актуальности проблемы отсутствия графических средств работы с платформой OpenFOAM свидетельствует интерес к проблеме со стороны мирового сообщества исследователей и разработчиков, которые предложили собственные подходы к решению проблемы и реализовали оригинальные программные решения для работы с OpenFOAM. Например, разработка российских программистов И. Евдокимова, Д. Меньшикова и А. Борисова, предложивших в 2017 году на международной конференции OpenConf собственный вариант оконного интерфейса для взаимодействия с платформой [11].

Кроме того, к вопросу создания приложения с оконным интерфейсом для платформы OpenFOAM проявили интерес и некоторые зарубежные компании, результатом чего стало создание программных продуктов Salome [12], Helyx-OS [13], Visual-CFD [14] и ряда других. Представленные программные средства нашли свое применение на некоторых промышленных предприятиях, но оказались не лишены недостатков, к которым относится прежде всего необходимость приобретения услуг по технической поддержке и консультированию. Кроме того, у представленных программных продуктов отсутствуют русскоязычные версии графического интерфейса и русскоязычная документация.

В таблице 1 представлена сравнительная характеристика перечисленных программных продуктов по ряду параметров:

Таблица 1. Сравнительная характеристика программных средств с оконным интерфейсом для платформы OpenFOAM

Название	Лицензия	Техническая поддержка	Поддержка утилит генерации СМ
Salome	ПО с открытым кодом	Не предусмотрена	blockMesh snappyHexMesh
Helyx-OS	ПО с открытым кодом	Предусмотрена, платная	blockMesh snappyHexMesh
Visual-CFD	Бесплатная версия на 30 дней	Предусмотрена, платная	blockMesh snappyHexMesh

В каждой из приведенных графических оболочек возможность программной подготовки СМ предусмотрена, но пользователям доступны только стандартные утилиты генерации СМ: blockMesh и snappyHexMesh.

2. Постановка целей и задач

Цель исследования, описываемого в данной работе, заключается в разработке программного средства с классическим оконным интерфейсом (OpenFOAM_mesh_builder) для централизованной подготовки СМ с помощью утилит платформы OpenFOAM: стандартных СМ (blockMesh, snappyHexMesh) и специализированных (foamyHexMesh, foamyQuadMesh). Необходимо разработать данное приложение в качестве десктопной (настольной) программы.

Для достижения поставленной цели перед авторами сформулирован список задач:

По структуре интерфейса программы:

1) Реализовать для программы главное окно с пятью основными элементами: служебной панелью инструментов, основной панелью инструментов, панелью редактирования параметров СМ, панелью визуализации результатов, панелью отображения служебных сообщений.

2) В служебную панель инструментов встроить кнопку открытия окна выбора проекта задачи, для которой требуется выполнить подготовку СМ и кнопку открытия окна для указания языковой версии интерфейса.

3) В главную панель встроить кнопку открытия окна выбора типа СМ. При этом в окне должна быть предусмотрена возможность выбора опции подготовки СМ как средствами OpenFOAM (4 утилиты), так и опции загрузки подготовленного с помощью стороннего ПО msh-файла с параметрами сетки и последующей генерации СМ на его основе. Также окно должно предусматривать возможность выбора для редактирования одной из текущих СМ и автоматического определения ее типа. Также в главной панели необходимо реализовать кнопки запуска генерации СМ соответствующего типа и запуска отображения результатов на основе пакета ParaView.

4) В панель редактирования параметров СМ встроить окно с блоком форм для определения параметров соответствующей сеточной модели.

5) В панель отображения результатов встроить окно визуализации содержимого сформированных служебных файлов с параметрами СМ.

6) В панели вывода служебной информации реализовать механизм информирования пользователя о результатах численного моделирования с подсветкой сообщений.

По механизму работы приложения:

- 1) Реализовать возможность генерации новых СМ и корректировки параметров любой из существующих СМ.
- 2) Реализовать возможность подготовки любого количества СМ для текущего расчетного случая.
- 3) Реализовать возможность подготовки СМ не только с помощью утилит OpenFOAM, но и с помощью msh-файлов СМ, созданных в сторонних программных средствах.
- 4) Для элементов управления экранных форм, в частности полей ввода, реализовать проверку допустимости типа вводимых данных.
- 5) Реализовать проверку наличия каждого блока параметров СМ выбранного типа, т.е. наличия заполненной и сохраненной соответствующей формы набора.
- 6) Реализовать версии интерфейса программы на русском и английском языках.

В рамках выполнения сформулированного комплекса задач авторами проведено изучение официальной документации для платформы OpenFOAM [15] и учебных примеров [16].

3. Теоретическая часть

3.1 Определение инструментария разработки

Авторами принято решение использовать высокоуровневый язык программирования Python 3.4 для описания механизма работы приложения. Это один из наиболее популярных языков программирования, наряду с Java и C/C++, который успешно применяется при создании настольных программных продуктов.

Язык Python отличается простотой освоения, наличием многочисленных библиотек и поддержкой различных типов данных, таких как словари, кортежи, списки. Это превращает язык Python в полноценный инструмент разработки ПО.

Для описания элементов графической составляющей программы авторами принято решение использовать фреймворк PyQt4. Его возможности предусматривают создание привычных оконных интерфейсов с привлекательным дизайном. Особенности использования языка программирования Python и фреймворка PyQt изучены авторами на основе учебной литературы [17-19] и официальной документации [20].

В качестве среды разработки используется свободно распространяемая среда PyScripter, предусматривающая подсветку кода, возможность запуска, отладки программ и приведения кода к стандарту PEP-8. Полный список необходимого программного обеспечения приведен в таблице 2.

Таблица 2. Список необходимого программного обеспечения

ОС	Интерпретатор	Сторонние модули	ПО
Linux	Python 3.4	PyQt4	PyScripter OpenFOAM 4.0, ParaView [21] (визуализация результатов)

3.2 Структура и логика работы приложения

Приложение OpenFOAM_mesh_builder реализовано по модульному принципу, т.е. программа включает файлы-модули, содержащие исходный код на языке Python (рис 1).

Рис. 1. Структура приложения OpenFOAM_mesh_builder.

Программа OpenFOAM_mesh_builder представляет собой настольное программное приложение, которое распространяется в виде каталога с исполняемым файлом run.py и набором каталогов, содержащих служебные файлы.

В первом каталоге – windows, находятся файлы, соответствующие модальным окнам программы и описывающие внешний вид окон и механизм их работы; второй каталог – forms, содержит папки, каждая из которых связана с набором форм для определенной утилиты платформы OpenFOAM; в третьем каталоге – threads, находится программный код потоков запуска bash-скриптов с командами-утилитами платформы OpenFOAM; в четвертом каталоге – functions, находится программный код функций для генерации служебных файлов, связанных с определенным типом СМ; в пятом каталоге – matches, находятся шаблоны служебных файлов для различных типов СМ; шестой каталог – styles, содержит файл с инструкциями, определяющими стилизацию элементов оконного интерфейса.

На рис. 2 представлена диаграмма, демонстрирующая механизм работы программы.

Рис. 2. Диаграмма механизма работы приложения OpenFOAM_mesh_builder.

Работая с приложением OpenFOAM_mesh_builder пользователь может выбрать один из двух способов подготовки СМ. Первый – генерация СМ на основе msh-файла, созданного с помощью стороннего ПО. При этом используется команда fluent3DMeshToFoam платформы OpenFOAM. Второй способ, которому посвящена настоящая статья, заключается в подготовке СМ средствами OpenFOAM. Он подразумевает выбор типа СМ, указание соответствующих параметров и запуск процесса генерации сеточной модели.

В текущей версии приложения OpenFOAM_mesh_builder пользователю доступна возможность подготовки четырех типов СМ, соответствующих утилитам blockMesh, snappyHexMesh, foamyHexMesh, foamyQuadMesh платформы OpenFOAM. Также у пользователя существует возможность выбора одной из существующих СМ и редактирования ее параметров. После завершения подготовки СМ выполняется визуализация результатов с помощью пакета ParaView.

4. Практическая часть

4.1 Результаты исследования

Результатом исследования, описанного в настоящей статье, является программное приложение с графическим интерфейсом пользователя для подготовки СМ при постановке численных экспериментов с помощью платформы OpenFOAM. На рис. 3-6 приведены изображения главного окна программы на этапах выбора типа СМ, завершения редактирования параметров СМ и сохранения соответствующего файла параметров, завершения генерации СМ, запуска визуализации результатов с

помощью пакета ParaView. Работа программы протестирована на примере одной из учебных задач по подготовке СМ типа foamyHexMesh, входящих в дистрибутив платформы OpenFOAM.

Рис. 3. Главное окно программы с загруженным окном выбора типа СМ.

Рис. 4. Главное окно программы на этапе завершения редактирования параметров СМ и сохранения соответствующего файла параметров.

Рис. 5. Главное окно программы на этапе завершения генерации СМ.

Рис. 6. Главное окно программы на этапе запуска визуализации результатов с помощью пакета ParaView.

Разработанное программное приложение расширяет исходный код платформы и внедрено на АО “ТРЦ Макеева” для постановки численных экспериментов при реализации проектов ракетно-космического направления. Программа является универсальной и может применяться на других промышленных предприятиях, использующих в работе платформу OpenFOAM. Демонстрационная версия приложения опубликована на сервисе GitHub [22].

4.2 Научная новизна исследования

В рамках обоснования научной новизны проекта авторами сформулированы следующие положения:

1. Реализована возможность подготовки не только типовых СМ на базе утилит blockMesh и snappyHexMesh, но и специализированных СМ на базе утилит foamyHexMesh и foamyQuadMesh платформы OpenFOAM.

2. Для служебных файлов СМ различных типов реализованы наборы форм для редактирования параметров сеток. Каждому блоку параметров файла соответствует отдельная форма набора. В формах реализовано отделение их внешнего представления (интерфейса) от логики работы. Тем самым упрощен процесс последующей модификации форм и расширения их функциональных возможностей.

3. Реализована возможность создания любого количества СМ различных типов для одного проекта задачи МСС (расчетного случая). Для этого использован механизм сериализации (“упаковки”) и последующего восстановления “упакованных” данных с помощью Python-модуля Pickle [23].

4. Программный запуск консольных команд платформы OpenFOAM реализован за счет механизма создания и выполнения bash-сценариев с OpenFOAM-командами [24].

5. Реализована система защиты от неверных действий пользователя, что упрощает процесс проведения численного моделирования в платформе OpenFOAM.

4.3 Практическая значимость исследования

Постановка экспериментов по численному моделированию задач МСС с использованием приложения OpenFOAM_mesh_builder дает специалистам ряд преимуществ, по сравнению с классическим подходом, предусматривающим использование терминала:

1. Снижение затрат рабочего времени на численное моделирование. Каждый из шагов подготовки СМ осуществляется с помощью программы с графическим интерфейсом. Пользователю не требуется запоминать сложные консольные команды, а также структуру и необходимые параметры служебных файлов СМ.

2. Снижение количества возможных ошибок в численном эксперименте. В предложенной программе предусмотрена система проверки типа вводимых данных и проверки комплектности необходимых файлов и содержащихся в них параметров СМ.

3. Снижение затрат рабочего времени на освоение платформы OpenFOAM. В программе OpenFOAM_mesh_builder реализован русскоязычный интерфейс пользователя с информативными описаниями элементов интерфейса и прилагается документация на русском языке.

Заключение

Одной из важнейших актуальных тенденций развития промышленности является информатизация производственного цикла, способствующая экономии времени на выпуск единицы продукции и минимизации возможного брака вследствие возникновения ошибок на этапе проектирования и производства.

Настоящая работа посвящена проблеме совершенствования платформы OpenFOAM, которая позволяет эффективно проводить численное моделирование задач МСС на этапе проектирования изделий. Платформа OpenFOAM дает возможность создавать адекватные реальным объектам 3D-модели и анализировать характеристики этих объектов и особенности их взаимодействия с различными средами.

В настоящей работе предложен и описан подход к разработке приложения с графическим интерфейсом для проведения одного из этапов препроцессинга численного моделирования – этапа подготовки СМ.

Программа реализована на базе языка программирования Python 3.4 и фреймворка PyQt4 под нужды АО “ГРЦ им. Макеева”. Вместе с тем, для представленной программы характерна универсальность применения на предприятиях не только ракетно-космического направления, но и других отраслей. Программа внедрена и успешно применяется при проведении численных исследований с помощью платформы OpenFOAM. Базовая версия приложения находится в свободном доступе на ресурсе GitHub.

Программа обладает научной новизной по сравнению с приложениями-аналогами: расширен список типов создаваемых сеточных моделей, реализована возможность работы с любым количеством СМ для одного расчетного случая.

Авторы предполагают проведение дальнейших исследований в данном направлении, а именно создание новых приложений с графическим интерфейсом для упрощения выполнения других задач в процессе численного моделирования с помощью платформы OpenFOAM.

Литература

1. Механика сплошных сред. [Online]. Available: <https://dic.academic.ru/dic.nsf/ruwiki/32500>.
2. OpenFOAM. The open source CFD toolbox. [Online]. Available: <https://www.openfoam.com/>.
3. The open packages possibilities for solving of continuum mechanics problems. [Online]. Available: <http://www.unicluster.ru/conf/2010/docs/Unicluster.Strizhak%20S.V.%20Kraposhin%20M.V.pdf>. (in Russian).
4. JSC “SRC Makeyev”. [Online]. Available: <http://www.makeyev.ru>. (in Russian)

5. J. S. Jayakumar and V. P. Chithra, "CFD analysis of heat transfer in simultaneously developing region of a square duct using OpenFOAM," 2017 2nd International Conference for Convergence in Technology (I2CT), Mumbai, 2017, pp. 1144-1149. doi: 10.1109/I2CT.2017.8226307.
6. M. V. Kraposhin, D. A. Ryazanov, E. V. Smirnova, T. G. Elizarova and M. A. Istomina, "Development of OpenFOAM Solver for Compressible Viscous Flows Simulation Using Quasi-Gas Dynamic Equations," 2017 Ivannikov ISPRAS Open Conference (ISPRAS), Moscow, 2017, pp. 117-123. doi: 10.1109/ISPRAS.2017.00026.
7. H. Al-Jelawy, S. Kaczmarczyk, D. AlKhafaji, S. Mirhadizadeh, R. Lewis and M. Cross, "A Computational Investigation of a Turbulent Flow over a Backward Facing Step with OpenFOAM," 2016 9th International Conference on Developments in eSystems Engineering (DeSE), Liverpool, 2016, pp. 301-307. doi: 10.1109/DeSE.2016.47.
8. K. Chai, M. S. Liew and H. E. Lee, "Numerical wave tank modelling of regular waves propagation using OpenFOAM," 2017 3rd International Conference on Power Generation Systems and Renewable Energy Technologies (PGSRET), Johor Bahru, 2017, pp. 185-190. doi: 10.1109/PGSRET.2017.8251825.
9. A. E. Kuvshinnikov and A. E. Bondarev, "Comparative Study of the Accuracy for OpenFOAM Solvers," 2017 Ivannikov ISPRAS Open Conference (ISPRAS), Moscow, 2017, pp. 132-136. doi: 10.1109/ISPRAS.2017.00028.
10. Читалов Д.И., Меркулов Е.С., Калашников С.Т. Разработка графического интерфейса пользователя для программного комплекса OpenFOAM. Программная инженерия, вып. 12, 2016 г., стр. 568-574. DOI: 10.17587/prin.7.568-574.
11. OpenConf Peer Review & Conference Management System. [Online]. Available: <https://www.openconf.com>.
12. Salome The Open Source Integration Platform for Numerical Simulation. [Online]. Available: <http://www.salome-platform.org>.
13. Helyx-OS The market leading open-source GUI for OpenFOAM. [Online]. Available: <http://engys.com/products/helyx-os>.
14. Visual-CFD for OpenFOAM. [Online]. Available: <https://www.esi-group.com/software-solutions/virtual-environment/cfd-multiphysics/visual-cfd-openfoam>.
15. OpenFOAM. User Guide. [Online]. Available: <http://foam.sourceforge.net/docs/Guides-a4/OpenFOAMUserGuide-A4.pdf>.
16. OpenFOAM. Tutorial Guide. [Online]. Available: <https://www.openfoam.com/documentation/tutorial-guide/index.php>.
17. Prohorenok, N.A. 2012. Python 3 and PyQt. Application Development. St. Petersburg: BHV-Petersburg. - 704 p. 2012. (in Russian)
18. Marc Lutz. Programming on Python, 4th edition. SPb: Symbol-Plus, 2011, V.1, 992 pp., (in Russian)
19. Marc Lutz. Programming on Python, 4th edition. SPb: Symbol-Plus, 2011, V.1, 992 pp., (in Russian)
20. PyQt4 Reference Guide. [Online]. Available: <http://pyqt.sourceforge.net/Docs/PyQt4/>.

21. ParaView. [Online]. Available: <https://www.paraview.org>.

22. OpenFOAM_mesh_builder. Available:
https://github.com/DmitryChitalov/OpenFOAM_mesh_builder.

23. Serialization of Python objects. [Online]. Available: <http://python-3.ru/page/module-pickle-python>.
(in Russian).

24. The art Bash-scripts writing. [Online]. Available:
https://www.opennet.ru/docs/RUS/bash_scripting_guide. (in Russian).