

"Manipulation de champs" dans SALOME : orientations générales

AVERTISSEMENT : Le document original de référence H-I2C-2009-03595-FR intitulé "Manipulation de champs" dans SALOME : orientations générales est une note interne EDF à accès restreint EDF. Cependant, elle peut être obtenue sur demande à l'équipe SALOME EDF (contacter guillaume.boulant@edf.fr). On donne ci-après uniquement le résumé de la note.

Résumé :

Lorsqu'on réalise une étude, l'ingénieur est souvent amené à effectuer des opérations sur les champs que ce soit pour le pré-traitement dans la mise en œuvre d'une simulation ou bien au cours de schémas de calcul ou bien encore pour le post-traitement. Pour répondre à ces besoins, les codes de calcul proposent en interne des fonctions de manipulation de champs qui sont générales ou bien plus spécifiques à la physique traitée. L'étendue des possibilités offertes dans chaque code est variable d'un logiciel à l'autre.

Dans ce contexte, l'objectif du lot 4 « Manipulation de champs » du projet MAILLAGE (P10RK0) est de développer dans un environnement commun, la plate-forme SALOME, des outils pour calculer des champs. Il s'agit ici de mutualiser des opérations standard (addition de champs, calcul de maximum,...) ou plus avancées (calcul d'intégrales, interpolation de champs) utilisées dans les études réalisées à EDF. Ce document constitue le livrable MAN1 « Cahier des charges » du lot 4 qui a pour mission de répondre aux trois questions suivantes :

Quelle est la structure de données appropriée ?

Quelles sont les opérations retenues ?

A quel niveau de SALOME seront intégrées ces opérations ?

On résume ci-dessous les différents choix effectués.

Le travail sur la manipulation de champs est réalisé en collaboration avec le CEA, qui a déjà développé dans la bibliothèque MED_MEMOIRE quelques opérations sur les champs, dont un module d'interpolation. Notre choix s'est donc porté vers cette même bibliothèque pour intégrer de nouvelles opérations de manipulation, qui seront accessibles uniquement depuis SALOME. La mission du projet MAILLAGE est également de s'assurer de la capacité de MED_MEMOIRE à porter ces opérations. Cette étape peut conduire à des adaptations éventuelles de cette bibliothèque. Notons, enfin, que les données d'entrée à fournir à ce composant sont des maillages et des champs, relevant des classes de MED.

En ce qui concerne les fonctionnalités de manipulation de champs, elles ont été divisées en deux groupes :

1) Les opérations nécessitant un calcul numérique, classées en trois grandes catégories, elles-mêmes classées en sous-catégorie. Pour résumer, on propose les fonctionnalités suivantes :

- Opérations arithmétiques locales qui comportent les deux sous-catégories :

Calcul sur des scalaires : addition, multiplication,...

Calcul sur des vecteurs ou tenseurs d'ordre 2 : calcul d'un déterminant, changement de repère, calcul de normes,...

- Opérations d'interpolation qui comportent les deux sous-catégories :

Changement d'entité : un champ connu sur une entité d'un maillage est interpolé sur une autre entité du même maillage

Interpolation (ou projection) d'un champ connu sur un maillage sur un autre maillage

- Opérations globales qui comportent les trois sous-catégories :

Calcul d'extremum spatial
Calcul d'extremum temporel
Calcul d'intégrale

2) Des options applicables sur les champs créés ou modifiés. Ces options sont au nombre de six : création, modification, restriction, prolongement spatial, changement de nom et enfin chargement et sauvegarde d'un champ.

Enfin, on envisage deux niveaux principaux d'intégration dans SALOME : des opérations disponibles en ligne de commande python et/ou à travers l'interface graphique de SALOME. Actuellement, le choix du niveau n'est pas arrêté (excepté pour la catégorie « calcul sur des scalaires » où les deux niveaux seront développés) et se fera en fonction des opérations. Par ailleurs, ce nouveau module « manipulation de champs » doit être appellable depuis le module de couplage YACS.

Deux réflexions non abordées dans ce travail restent à mener dans le projet autour de la manipulation de champs, à savoir :

- 1) La possibilité d'avoir du MED_MEMOIRE distribué afin de prendre en compte les grands volumes de données (maillage et champ).
- 2) La possibilité de passer facilement de la structure de données MED_MEMOIRE à la bibliothèque NUMPY (pour python), qui propose un ensemble d'opérations efficaces sur des tableaux multidimensionnels.

Le projet se concentrera à développer, en premier, les opérations classées sous la catégorie « Calcul sur un scalaire », qui constituent les services de base lorsqu'on souhaite manipuler un champ. La seconde catégorie d'opérations à développer et à instruire en 2010 est l'interpolation de champs.

La suite de ce travail est de définir, pour début 2010, un programme de travail détaillé pour la catégorie « calcul sur un scalaire », qui comprendra les trois points suivants : spécification des différents développements, répartition des tâches entre EDF et le CEA et, enfin, réalisations attendues pour fin 2010. Le projet conduira une étude d'impact présentée à l'Atelier des Développeurs de SALOME (ADS) pour validation par le projet NEPAL2.

Enfin, le projet devra également définir en 2010 quel type d'interpolation sera intégré en premier dans SALOME et développé dans le cadre du projet MAILLAGE. Sans anticiper sur cette réflexion, on propose de commencer par une interpolation de champs définis aux nœuds du maillage.