2024年2月27日

1. 设计一个容器,能够读取模拟前自行输入的各类参数,并以多叉树的方式进行存储和组织,基本需求分析如下。

1.1 STL容器一般包含哪些基本方法:

vector容器的API主要包含:赋值、拷贝、插入(头插、尾插、中间插)、删除(头删、尾删、中间删)、函数重载(删除、插入函数)、容量、清空、判断是否为空、重指定大小、返回头元素、返回尾元素、返回中间某元素、查找某元素的位置、查找某位置的元素、修改某位置的元素、替换某元素为、返回某元素的数量、输出元素等。

deque (双端队列)容器的API主要包括 (除上述以外):头插、头删、无容量capacity、

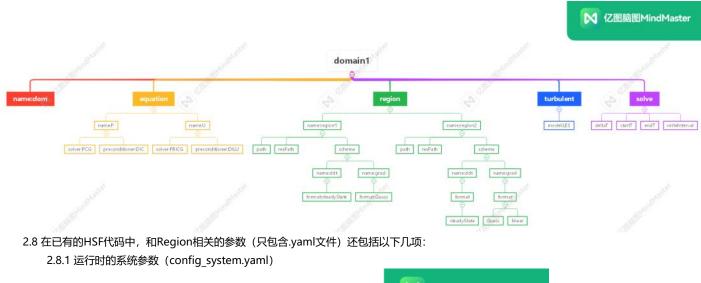
list (列表【双向循环链表】) 容器的API主要包括 (除上述意外): 元素互换等

- 1.2 本容器需要包含的方法:
 - (1) 基本方法:添加节点,节点赋值,获取指定索引的节点值,获取指定节点的子节点,删除节点,修改节点,更新树。
 - (2) 文件读取方法:从指定的YAML文件中加载指定的参数树,解析YAML文件并构建参数树,递归解析YAML节点,将YAML节点值转化为参数树的节点。
- 该容器是用来存储有限元输入的参数的,其内部存储数据结构是多叉树类型,可以使用标准容器。
 那么现在主要任务是明确需要输入哪些参数,各个参数都是什么数据类型。
 - 2.1 是否需要根据具体问题确定不同的参数, 即物理场数据
 - (1) 热传导问题
 - (2) 电磁学问题
 - (3) 结构力学问题
 - (4) 流体力学问题
 - 2.2 是否需要根据不同子域和影像区划分确定不同的参数
 - 2.3 几何信息、拓扑信息是否需要设定为参数
 - 2.4 数值计算方法为FEM、FVM
 - 2.5 在《项目策划书》中,Domain为时域,而Region为空间域,Parameter类(控制参数模块)定义在Domain中,



图 1: 非结构框架基础层次结构↔

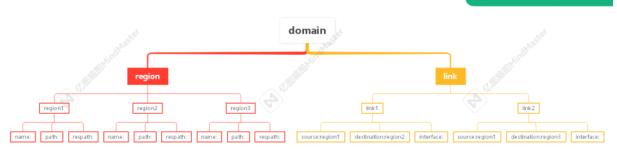
- (1) Domain需要通过指针管理下面所有的Region,通过Region的名字进行索引;
- (2) FieldField集合指针,如cell、face、node等,上面可能会存储一些速度场数据;
- (3) MatrixMatrix集合指针, 定义在cell上的U方程的系数矩阵;
- (4) Patch集合指针, patchType是Patch的分类, 如cell、face、node等, patchName—般定义成邻近进程号;
- (5) Equation集合指针: equName代表方程名字,如速度U方程,压力P方程等;
- (6) 存储Region之间的通信对;
- (7) Domain内需要封装一系列方法,包括创建通信对createCommPair(),创建方程,通过键值对获取相应数据,启动求解等。
- 2.6 在《项目策划书》中,Region是在一个空间域内具有相同计算流程的网格集合,Region中定义了额外的类,其中:
 - (1) 所有Region内定义有内部网格单元类Mesh和物理边界网格单元类Boundary, 网格单元Mesh类存储网格拓扑以及格点坐标等网格信息,物理边界网格存储在其派生类Boundary中;
 - (2) 由于Region平铺在不同进程上,进行Region内网格分块与负载均衡后,不同进程间存在进程边界,进程边界网格在程序初始化时将从内部网格单元类Mesh中剥离出来存储在通信拓扑类Patch中;
 - (3) Region内部流场信息由流场类Field进行管理;
 - (4) 对于Region内网格的几何信息,例如网格面面积、法向量,网格单元体积、体心坐标等几何信息存储在网格信息类MeshInfo中;
 - (5) 系数矩阵信息存储在Matrix类中,该类包含行列坐标,流场信息等;
- 2.7 在《项目策划书》中,Parameter类是用来读取配置参数的,本框架采用YAML语言,根据YAML控制参数文件格式,可得以下树形数据结构:



domain

parallel processnum threadnum scheme

2.8.2 网格片拓扑相关信息 (config_topo.yaml)

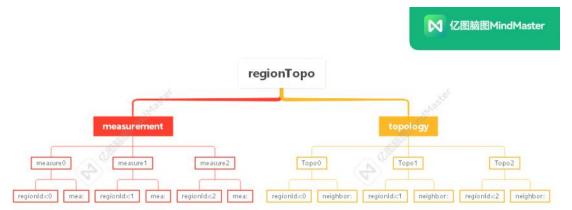


✓ 亿图脑图MindMaster

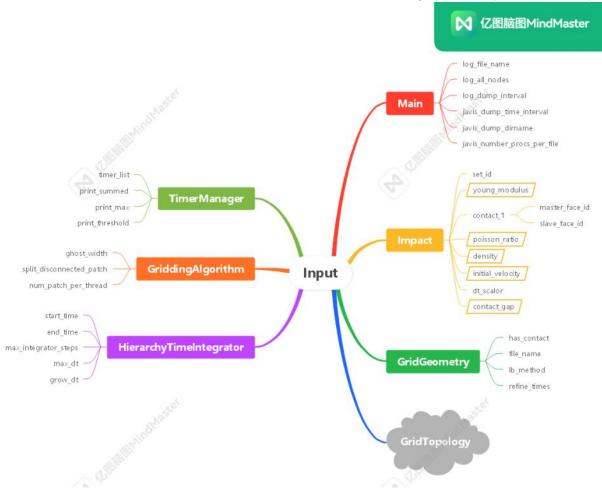
2.8.3 常数信息 (constant.yaml)



2.8.4 regionTopo.yaml



2.9 在实际模拟的示例中,用户往往需要输入额外的参数来解决具体执行的案例,此部分参考jaumin的examples中接触例子的Input。



3容器实际结构和所包含的功能

3.1 容器 (container) 的数据结构

整体思路:设计一个以多叉树(N-ray tree)为通用数据结构的容器,能够读取六个不同的yaml文件,而每个yaml文件包含不同的内容。

- (1) 由于上述六个yaml文件的数据组织架构类似,均是明显的多叉树形式,其共同特点如下:
 - ①树中需要存储多种类型的数据类型,包括整型、浮点数、字符型和布尔值;
 - ②参数分类比较多,如果用树型数据结构来描述就是,节点的度比较大,但是树的高度/深度不大;
 - ③每个节点下的子树高度不统一。

根据上述描述,我们需要自定义一个多叉树结构,用来灵活存储多种数据类型。

(2) 为了解决以上问题,目前提出以下方案:

①使用std::variant模板类用于存储不同类型的数据。

```
std::variant<int, double, bool, std::string> value;
```

- ②自定义树的节点,每个节点可以包含一个std::variant类型的数据,和一个子节点列表。其中该节点的子节点列表计划使用std::map容器来存储子节点
- ③采用已给的PARAFILE示例中的st_tree库,这是一个第三方的开源库,同时兼容STL接口。需要使用特定的C++标准(如C++ 11、14、17)进行构建。

设计容器中包含6种不同的子类,分别对应上述6个yaml文件,6种子容器分别命名状况如下:

3.2 解析YAML文件

整体思路:使用一个YAML解析库,计划使用yaml-cpp/yaml.h开源库,需要通过cmake进行构建和编译。

读取yaml文件格式内容: yamlfile_name["name"].as<string>()

yaml-cpp/yaml.h

3.3 容器类设计

设计一个容器类,需要包含六个'YamlNode'实例,分别对应六个不同的YAML文件。提供方法加载、查询和操作文件。

```
class YamlContainer {
private:
    std::map<std::string, std::shared_ptr<YamlNode>> files;
public:
    void loadFile(const std::string& name, const std::string& filename) {
        auto rootNode = std::make_shared<YamlNode>();
        parseYamlFile(filename, rootNode);
        files[name] = rootNode;
    }
    // 提供查询和操作YamlNode的方法
};
```

3.4 容器的使用

- (1) 使用容器进行加载文件,判断文件类型、读取文件内容<mark>结构</mark>以创建对应的数据结构类型。
- (2) 读取文件内容, 对树中的各个节点赋值。
- (3) 使用容器进行查询或修改操作。

3.5 容器读取工程数据库中的内容

在数值模拟中,除了mesh文件中的数据有专门的读取接口以外,我们往往需要自定义大量的物性参数,这个定义的往往是在实例过程中的输入文件中。

我们可能会输入的工程数据库主要包括以下几类:

- (1) 材料数据库:主要包含各种工程材料的物理化学性质,如材料的密度分布、力学性质、热传导性质、电性质和材料模型。
- (2) 流体数据库: 如流体的物理性质 (粘度、密度等) 、湍流模型。
- (3) 边界条件和初始条件数据库:存储以给定的边界条件和初始条件。
- (4) 实验数据优化参数数据库:存储实测模型的数据集,用于修正或者对比验证模拟结果。

目前由于暂未确定此类工程文件以何种方式存储(以什么数据格式存储,存储在何种文件格式中),故暂时不考虑如何读取和组织此类数据。