

Quelques applications de la technologie XML dans le domaine de la Simulation Numérique

G. Dejonghe

CEA /DAM Ile-de-France /DCS A

Gerard.Dejonghe@cea.fr

1



Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote

18/09/01

Plan

- Le Contexte DCSA (Département de Conception et de Simulation des Armes)
- Le langage XML comme langage de description des Entrées des Codes
- Le langage XML et la modélisation des Données Numériques
- Le langage XML et la persistance d'objets du langage C

2



Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote

18/09/01

Contexte

- *Codes de simulation de DCSA*

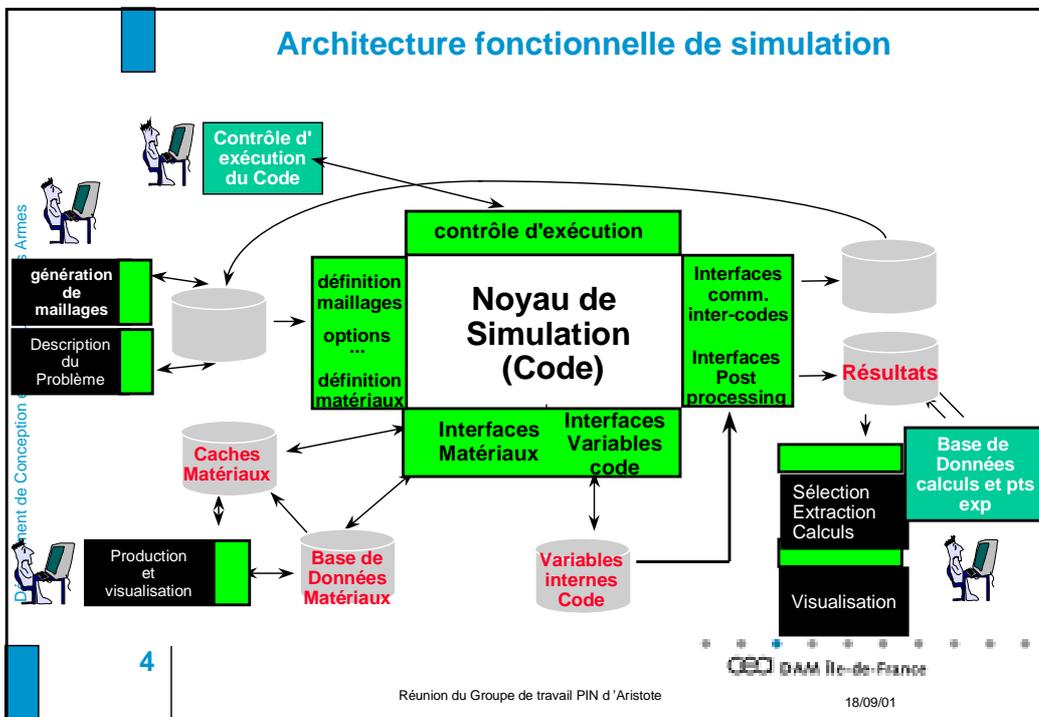
- **Données Textuelles**

- Entrées des codes, choix des options
 - + valeurs numériques des paramètres, faibles volumes

- **Données Numériques**

- Consommées et/ou produites par les codes
- Valeurs numériques
 - Tableaux de nombres (entiers ou réels), gros volumes
- + Méta-données (structuration)
 - Structures plus complexes, faibles volumes

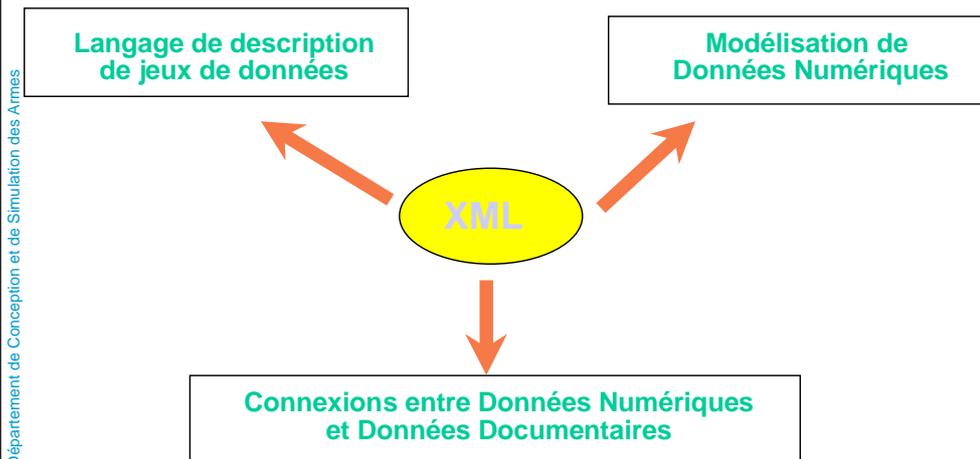
Architecture fonctionnelle de simulation



Intérêts du langage XML

- **Données lisibles, portables et éditables (ASCII)**
- **Données structurées autodécrites (hiérarchie d'éléments XML)**
 - *Spécifications non ambiguës (grammaire DTD)*
 - *Contrôle de cohérence (DTD et outils associés)*
- **Passerelles entre diverses représentations**
 - *Feuilles de style CSS, XSL, ...*
- **Navigation facilitée (disponibilité de «Parsers» XML)**
- **Outils de présentation des données**
 - *Domaine public (Internet Explorer 5, Netscape 6)*
 - *Développements spécifiques facilités (IHM)*

Axes de travail



Entrées de Codes, approche classique

- «Langages» textuels spécifiques
 - “Cartes” de données, mots-clés, options, valeurs numériques
- Saisie des données et vérifications
 - *Par programmation classique spécifique*
 - Programmation lourde
 - **Gestion des erreurs «utilisateur» à soigner**
 - » (données incorrectes, options incompatibles, types numériques incorrects ...)
- Evolutions difficiles
 - Ajout/ Suppression/ Modification d'options :
 - **Reprogrammation**
 - **Suivi de la documentation utilisateur**
- *Développements longs et fastidieux, problèmes de maintien de la cohérence en évolution*

XML comme langage de description de jeux de données (1)

- Intérêts
 - *Simplification de la saisie et des vérifications*
 - utilisation d'un Parser XML validant
 - *Clarté de la structuration des mots-clé et options*
 - hiérarchie des options, options exclusives, mots-clés définis dans la DTD
 - *Programmation de passerelles facilitée*
 - vers la documentation associée
 - vers des interfaces interactives de saisie (GUI)
 - Filtrages et tris divers

XML comme langage de description de jeux de données (2)

○ Les manques

- *Pas de typage des données*
 - Contournement par l'utilisation d'outils connexes (XMLSchema, ...)
- *Règles de vérification des données (expressions numériques)*
 - Fonctions actuellement réalisées par un moteur d'inférence (VERCODE)
 - A remplacer par un fichier XML de règles et traitements spécifiques

9



Applications : Entrées de Codes, fichiers de configuration

○ Nouveau code DCSA

- *Technologie XML retenue pour les entrées de ce code*
- *Plate-forme de test des outils XML*

○ Procédures de tests d'API

- *Génération et suivi de jeux de cas tests*
- *Options en XML activant des scénarii d'utilisation*

○ Fichiers de configuration de GUI

- *Définition des variables et traitements par fichiers externes XML*
- *Définition d'éléments d'interfaces (IHM) par fichiers XML*
 - Approche IHM : vers génération automatique GUI ...

10



Exemple d'Entrées de Code : Jeu de données

○ Structuration du jeu de données :

- utilisation de la DTD ou de XMLSchema

```
<?xml version='1.0'>
<jeu-de-donnees>
  <hydro>
    <deltat-minimum> 1.2 </deltat-minimum>
    <deltat-maximum> 1.7 </deltat-maximum>
    <resolution type= ' gradient-conjugue '>
      <max-iterations> 20 </max-iterations>
      <epsilon> 5 </epsilon>
    </resolution>
  </hydro>
  <photonique type=' Pascal '>
  </photonique>
  <depouillement>
    <variable> Pression </variable>
    <variable groupe=' Zone1 '> Densite </variable>
  </depouillement>
</jeu-de-donnees>
```

11



Exemple d'Entrées de Code : Typage des données

○ Problème : nécessité d'un typage des données

- Au moins les types numériques de base (entiers, flottants, ...)

```
<?xml version=' 1.0 '>
<element name=' hydro '>
  <element name='deltat-minimum ' type='double '/>
  <element name='deltat-maximum ' type='double '/>
</element>
```

○ Utilisation de XMLSchema

12



Exemple d'Entrées de Code: Contraintes logiques

○ Contraintes plus fines : développements spécifiques

```

<contrainte>
<description> deltat-maximum doit être supérieur à deltat-minimum
et les deux doivent être positifs </description>
<expression operateur=' ET '>
  <expression operateur=' supérieur '>
    <operande> hydro/deltat-maximum </operande>
    <operande> hydro/deltat-minimum </operande>
  </expression>
  <expression operateur=' supérieur '>
    <operande> hydro/deltat-minimum </operande>
    <operande> 0. </operande>
  </expression>
</expression>
</contrainte>

```

13



Exemple de Fichier de configuration : Unités, systèmes d'unités

```

<?xml version='1.0'>
<Ensemble_d_Unites Domaine=' EOS '>
<Ensemble_de_Dimensions>
<!-- **** définition des dimensions **** -->
<Dimension nom=' Energie_massique '>
  <UnitesAlternatives default=' erg.g-1 '>
    <Liste_d_Unites> J.kg-1 erg.g-1 </Liste_d_Unites>
    <Conversion de=' J.kg-1 ' vers=' erg.g-1 ' coeff=' 1.E+4 '/>
  </UnitesAlternatives>
</Dimension>
.....
</Ensemble_de_Dimensions>
<!-- **** définition des systèmes d'unités **** -->
<Systeme_d_Unites nom=' SI '>
  <UniteDuSysteme dimension=' Energie_massique ' valeur=' J.kg-1 '/>
.....
</Systeme_d_Unites>
</Ensemble_d_Unites>

```

14



Axe de travail : Données Numériques

- Définition d'un **référentiel commun métier** utilisable par l'ensemble des codes de simulation et logiciels d'interprétation des données
 - Vers un Modèle de Données Numériques normalisé
 - Approche pragmatique incrémentale
 - Travail à long terme
 - Faire converger nos propres modèles ...
 - Suivre les travaux de la communauté internationale

15



Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote

18/09/01

Nature des Données Numériques

- Espace des variables, supports
 - Un espace de variables E:
 - Géométrie (1D, 2D, 3D), temps
 - mais aussi : Energies, directions angulaires, températures, densités, ...
 - Un support S inclus dans E
- Grandeurs
 - Une grandeur (un champ)
 - Scalaire, vectorielle, tensorielle ...
 - ou une famille de grandeurs
- Discrétisation du support (maillage)
 - Valeurs aux nœuds, aux surfaces, aux mailles, ...

==> Gros tableaux numériques

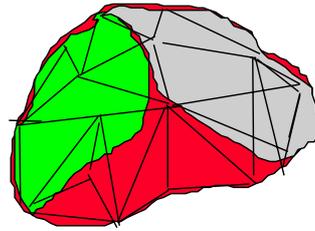
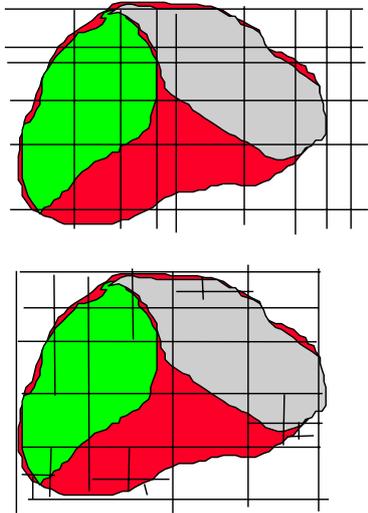
16



Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote

18/09/01

Discretisation du support (maillage)



17

Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote

CEA DAM Île-de-France

18/09/01

Exemple de modélisation d'un champ $E=f(V,T)$ sur un maillage rectilinéaire

```

<Support1D nom='GrilleV ' >
  <Grandeur> <Volume_massique unite=' cm3.g-1 '/> </Grandeur>
  <!-- **** discrétisation en V **** -->
  <TableauDeReels> ..... </TableauDeReels>
</Support1D>
<Support1D nom='GrilleT ' >
  <Grandeur> <Temperature unite=' K'/> </Grandeur>
  <!-- **** discrétisation en T **** -->
  <TableauDeReels> ..... </TableauDeReels>
</Support1D>

<Fonction nom='Uranium#Energie ' >
  <Grandeur> <Energie_massique unite=' erg.g-1'/> </Grandeur>
  <DomaineProduit>
    <Domaine support=' GrilleV ' variete=' NCEUD '/>
    <Domaine support=' GrilleT ' variete=' NCEUD '/>
  </DomaineProduit>
  <!-- **** matrice des valeurs aux nœuds **** -->
  <TableauDeReels> ..... </TableauDeReels>
</Fonction>
  
```

18

Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote

CEA DAM Île-de-France

18/09/01

Axe de travail : Données Numériques

- *Travail à court et moyen terme :*

- **Faciliter les échanges de données numériques**
 - *Définition de formats*
 - *Passerelles assurant les conversions de format*
- **Structuration a posteriori d'anciennes données**
 - *Saisie a posteriori de la structuration (implicite) de fichiers*
 - *inclusion des valeurs numériques en utilisant les ENTITY XML*
- **Connexions avec les outils de visualisation scientifique**
 - *Passerelles vers les formats internes de ces outils*

19



Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote

18/09/01

XML pour la modélisation des Données Numériques (1)

- **Les manques**
 - *Pas de typage des données*
 - contournement : Eléments XML spécifiques à définir (cf. XMLSchema)
 - types numériques de base (entiers, flottants) et Tableaux
 - Traitement soigné de la représentation ASCII (nombre de chiffres significatifs) et des programmes de lecture/écriture ASCII
 - *Les performances*
 - représentation ASCII/représentation binaire = 5 à 10
 - en encombrement (volumes)
 - en temps d'accès (lecture/écriture et communications)

20



Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote

18/09/01

XML pour la modélisation des Données Numériques (2)

○ Intérêts intrinsèques à XML

- Structuration, lisibilité, éditabilité

○ Bases de Données Numériques

- La représentation binaire reste privilégiée (pour les gros volumes)
- Utilisation d'une représentation XML à des fins d'importation/exportation de données limitées (un petit ensemble d'objets)
- Mise en place de passerelles automatisées entre les représentations binaire et XML des objets numériques

21



Applications : Données Numériques

○ Interfaçage d'un code de calcul de sections efficaces neutroniques avec les bases de données nucléaires

- *Les données produites par le code sont créées au format XML*
- *Un processus externe assure la reprise des données et la mise en base (binaire)*

○ Analyse et conception d'une base de données pour les équations d'état

- *Description XML des modèles et de leurs arguments*
- *modélisation XML de l'architecture de la future base de données*

○ Importateur générique de données dans un logiciel de visualisation

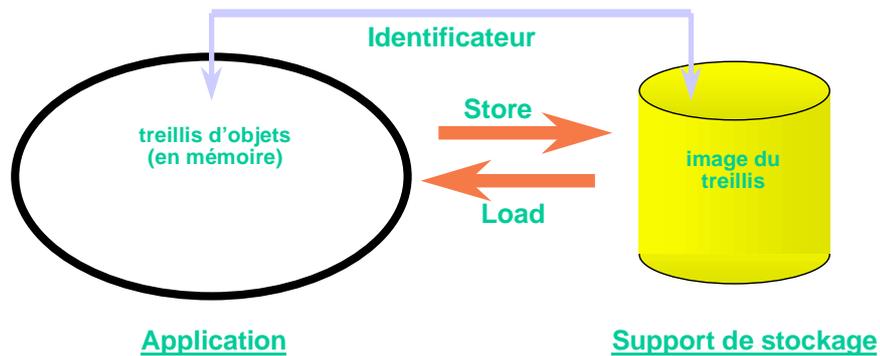
- *Notions de grandeurs, unités, grilles et fonctions multivariées décrites en XML*
- *Configuration automatique du logiciel*
- *Importation/Exportation de données valides*

22



Persistence d'objets du langage C

- Lecture ou écriture d'un treillis d'objets d'une application informatique vers un support de stockage



Département de Conception et de Simulation des Armes

Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote

CEA DAM Ile-de-France

Correspondance biunivoque objet C <-> objet XML

Objet en langage C

Représentation XML

```
ObjType obj;
```

declaration d'un objet *obj*
de type *ObjType* (instance)

```
struct ObjType
{
  ObjType_ID* id;
  fieldType_1 field_1;
  .....
  fieldType_q field_n;
};
```

définition du type *ObjType*

```
<ObjType>
  <ObjType_ID ..... />
  <ObjType.field_1>
    <fieldType_1>
      .....
    </fieldType_1>
  </ObjType.field_1>
  .....
  <ObjType.field_n>
    <fieldType_q>
      .....
    </fieldType_q>
  </ObjType.field_n>
</ObjType>
```

Département de Conception et de Simulation des Armes

Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote

CEA DAM Ile-de-France

Objet en langage C

Représentation XML

Département de Conception et de Simulation des Armes

```
struct Axe
{
    char* nom;
    union
    {
        int len;
        float* val;
    }grille;
};

struct Nappe
{
    NappeID* id;
    Axe* axeX;
    Axe* axeY;
    union
    {
        int len;
        float* val;
    };
};

struct Nappe D
{
    char* grandeur;
    char* materiau;
};
```

```
<Nappe>
  <NappeID grandeur="Opacité" materiau="Au"/>
  <Nappe.axeX>
    <Axe>
      <Axe.nom value="Densité"/>
      <Axe.grille>
        <FloatArray>1. ... 10. </FloatArray>
      </Axe.grille>
    </Axe>
  </Nappe.axeX>
  <Nappe.axeY>
    <Axe>
      <Axe.nom value="Température"/>
      <Axe.grille>
        <FloatArray>1. ... 100. </FloatArray>
      </Axe.grille>
    </Axe>
  </Nappe.axeY>
</Nappe.f>
<FloatArray>3. 12. ....</FloatArray>
</Nappe.f>
</Nappe>
```

CEA DAM Île-de-France

Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote

Chargement dans une structure C d'un élément XML

```
Nappe* maNappe=NULL;
Axe *axeT, *axeRo;
NappeID ident;
int ir;

ident.grandeur="Opacité";
ident.materiau="Au";

ir = OPA_LoadXML_Nappe (
    myXmlFile,
    &ident,
    &maNappe);

axeRo = maNappe->axeX;
axeT = maNappe->axeY;
.....
```

Sauvegarde d'une structure C dans un fichier XML

```
Nappe maNappe;
Axe axeT, axeRo;
NappeID ident;
int ir;

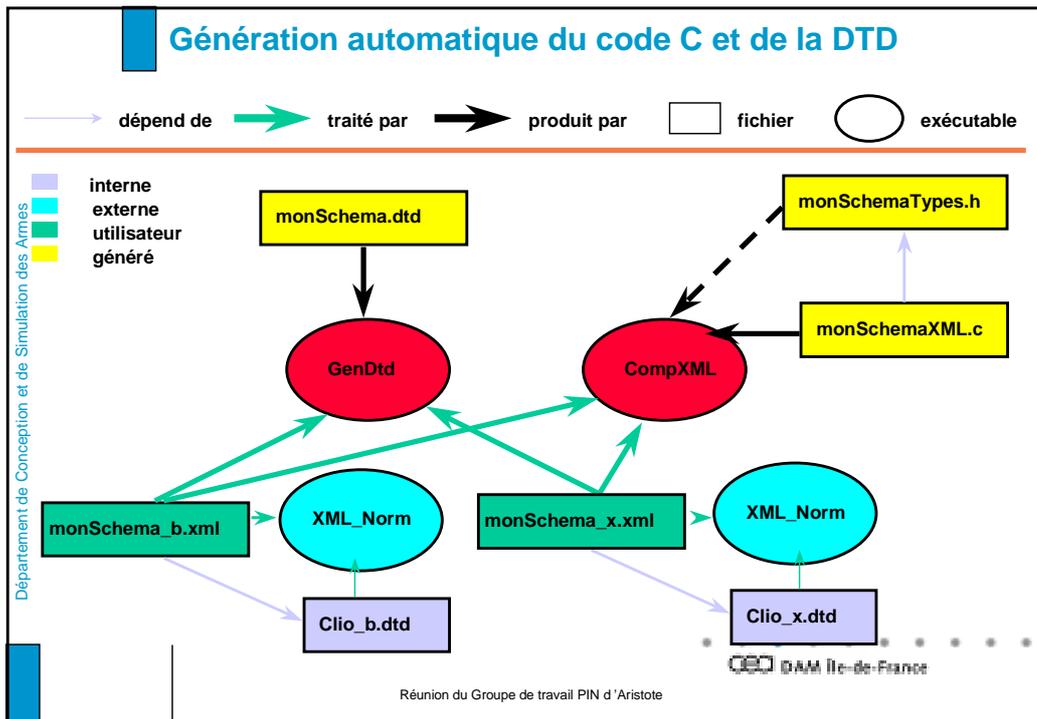
axeT.nom="Température";
axeRo.nom="Densité";
.....
maNappe.axeX=&axeRo;
maNappe.axeY=&axeT;
.....

ident.grandeur="Opacité";
ident.materiau="Au";

ir = OPA_StoreXML_Nappe (
    myXmlFile,
    &ident,
    &maNappe);
```

CEA DAM Île-de-France

Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote



Conclusion : Gestion des Données Scientifiques

- **Nouveaux besoins : établir des liens entre les données numériques et les données documentaires**
 - Vers un accès plus complet à l'ensemble de l'information
 - *Rapports fiches descriptives*
 - *Données expérimentales et calculées, données de modélisation*
 - *Exemple : fiches matériaux*
- **Généraliser l'utilisation de XML dans les entrées des codes**
- **Poursuivre l'effort sur les données numériques**
 - Utilisation de XML pour la définition de standards
 - Utilisation de XML pour la réalisation d'interfaces

Réunion du Groupe de travail PIN d'Aristote
 DAM Île-de-France
 18/09/01