

О задачах визуализации в обобщенном вычислительном эксперименте

А.Е. Бондарев

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

ORCID: 0000-0003-3681-5212, bond@keldysh.ru

Аннотация

Современное развитие вычислительных комплексов и технологий позволяет организовать построение обобщенного вычислительного эксперимента при моделировании задач вычислительной газовой динамики. Построение такого эксперимента базируется на численных параметрических исследованиях и решении задач оптимизационного анализа. Решение подобных задач предполагает многократное решение прямой задачи численного моделирования газодинамического процесса при различных входных данных, где в качестве входных данных используются различные наборы определяющих параметров. Определяющие параметры класса задач, такие как характерное число Маха, число Рейнольдса, геометрические параметры и т.п., варьируются в определенных диапазонах с некоторым шагом разбиения. В итоге получаемое решение представляет собой многомерный объем данных. Для анализа этого объема необходима визуализация. В работе проведена попытка систематизации и краткого описания некоторых типов задач, возникающих при обработке результатов обобщенного вычислительного эксперимента. Целью работы является начало широкого обсуждения задач визуализации в обобщенном вычислительном эксперименте и методов их решения.

Ключевые слова: обобщенный вычислительный эксперимент, вычислительная газовая динамика, многомерные данные, визуализация, визуальный анализ.

1. Введение

Современное развитие высокопроизводительных вычислительных кластеров и широкое распространение параллельных вычислительных технологий открывает ряд новых возможностей для решения задач математического моделирования в вычислительной газовой динамике. К числу таких новых возможностей относятся полноценное проведение параметрических исследований и решение задач оптимизационного анализа. Параметрические исследования предполагают многократное решение прямой задачи математического моделирования при вариации определяющих параметров задачи. К определяющим параметрам задачи можно отнести характерные числа, такие как число Маха, число Рейнольдса, число Струхала и т.п., и геометрические параметры задачи. Каждый из определяющих параметров варьируется в определенном диапазоне изменения с некоторым шагом разбиения. Задачи оптимизационного анализа являются более сложными с вычислительной точки зрения. Они предполагают в каждой точке разбиения пространства определяющих параметров решение обратной задачи, которая имеет своей целью нахождение экстремума того или иного ценного функционала (оптимальная форма, минимальное сопротивление, и т.д.). Параметрические исследования и задачи оптимизационного анализа являются основой обобщенного вычислительного эксперимента. Обобщенный вычислительный эксперимент позволяет получить в дискретном виде решение не только для одной, отдельно взятой, задачи, но для целого класса задач. Здесь класс задач определяется диапазонами изменения определяющих параметров.

Однако само по себе дискретное решение не может обеспечить понимание полученных результатов. Здесь необходимо широкое и творческое использование инструмен-

тов научной визуализации [1,3] и визуальной аналитики [8–12]. При визуализации результатов обобщенного вычислительного эксперимента необходимо сочетать использование классических методов визуализации и анимации трехмерных скалярных и векторных полей с инструментами визуальной аналитики, предназначенными для анализа многомерных данных. С одной стороны, задача существенно усложняется, но с другой стороны, в перспективе есть возможность получения решения для класса задач. Развитию инструментов научной визуализации посвящено множество работ, в том числе [1,3]. Различные аспекты построения обобщенного вычислительного эксперимента рассматриваются достаточно подробно в работах [2, 4-6, 14]. Разработке процедур анализа результатов обобщенного вычислительного эксперимента, представленными в виде многомерного объема данных, посвящены работы [7,13,15]. Данная работа имеет своей целью систематизацию задач визуализации, возникающих при реализации обобщенного вычислительного эксперимента и начало широкого обсуждения подобных задач и методов их решения.

2. Обобщенный вычислительный эксперимент

Формальное описание обобщенного вычислительного эксперимента достаточно подробно приведено в работах [2, 4-6, 14]. Приведем ниже краткое формальное описание, следуя [14].

Согласно [14], обобщенный вычислительный эксперимент предполагает разбиение каждого из определяющих параметров задачи внутри некоторого диапазона. Таким образом, формируется сеточное разбиение для некоторого многомерного параллелепипеда, составленного из определяющих параметров рассматриваемой задачи газовой динамики. Для каждой точки этой сетки в пространстве определяющих параметров проводится расчет задачи. Формально это можно записать следующим образом.

Предположим, что имеется надежный численный метод решения двумерных и трехмерных нестационарных задач вычислительной газовой динамики. Тогда мы можем для любой точки пространства счетной области и в любой момент времени получить численное решение $F(x, y, z, t, A_1, \dots, A_N)$, где x, y, z - пространственные координаты, t - время, A_1, \dots, A_N - определяющие параметры задачи. В качестве определяющих параметров задачи будем иметь в виду характерные числа, описывающие свойства рассматриваемого течения, такие как числа Маха, Рейнольдса, Прандтля, Струхала и т.п., и характерные геометрические параметры. Каждый из характерных параметров ограничен в некотором диапазоне:

$$A_i^{min} \leq A_i \leq A_i^{max}, \quad i = 1, \dots, N$$

Разобьем каждый из параметров A_i на $k-1$ частей, таким образом, мы получим для каждого параметра разбиение, состоящее из k точек. Объем N -мерного пространства, образованного набором определяющих параметров A_i , заполнен набором из k^N точек. Обозначив точку из данного набора как (A_1^*, \dots, A_N^*) , мы приходим к тому, что для каждой точки набора необходимо получить численное решение газодинамической задачи $F(x, y, z, t, A_1^*, \dots, A_N^*)$. Это потребует решения k^N газодинамических задач, что невозможно без применения параллельных вычислений в многозадачном режиме. Здесь мы сформулировали классическую задачу параметрического исследования. Параметрические численные исследования позволяют получать решение не для одной конкретной задачи математического моделирования, а для класса задач, заданного в многомерном пространстве определяющих параметров. Также подобная формальная постановка позволяет численное исследование задач оптимизационного анализа, когда обратная задача решается в каждой точке сеточного разбиения многомерного пространства определяющих параметров. Оба типа подобных задач рассмотрены в цикле работ [2, 4-6, 14].

3. Задачи визуализации результатов обобщенного вычислительного эксперимента

Итак, в результате проведения обобщенного вычислительного эксперимента мы получаем численное решение газодинамической задачи $F(x, y, z, t, A_1^*, \dots, A_N^*)$ для каждой точки пространства в любой момент времени и для каждой точки разбиения пространства определяющих параметров (A_1, \dots, A_N) . Попробуем систематизировать возникающие задачи визуального представления этих данных. При систематизации будем исходить из типов рассматриваемых данных.

А) Здесь F представляет собой вектор газодинамических функций, таких как давление, плотность, температура, компоненты скорости. Для каждой точки разбиения пространственной счетной области (x, y, z) в момент времени t мы имеем целый набор решений, соответствующих каждой точке из разбиения пространства определяющих параметров. С практической точки зрения польза таких данных невелика, однако такая информация может оказаться весьма полезной при оценке вклада определяющего параметра A_i в общую дисперсию в каждой точке расчетной области и в любой момент времени. Здесь для визуализации в каждой точке целесообразно использовать классическую лепестковую диаграмму с нормировкой на диапазон изменения определяющего параметра.

Б) Для каждой точки разбиения пространства определяющих параметров (A_1^*, \dots, A_N^*) мы имеем рассчитанную картину течения в выбранной области пространства (расчетной области). Это дает возможность применить весь богатый набор методов и программных средств научной визуализации [1,3], разработанный для задач газовой динамики ранее. К возможным типам информативных визуальных представлений можно отнести:

- построение картины скалярных и векторных полей в параллельных сечениях расчетной области и кросс-сечениях;
- анимацию скалярных и векторных полей в построенных сечениях;
- построение комбинированных визуальных представлений.

На рисунке 1 представлен пример визуального представления с помощью кросс-сечений процесса распространения воздушной струи малой скорости в расчетной области [1]. На рисунке 2 приведен пример комбинированного представления - сочетание распределения температур в параллельных сечениях с поверхностями, «натянутыми» на вектора скорости [1].

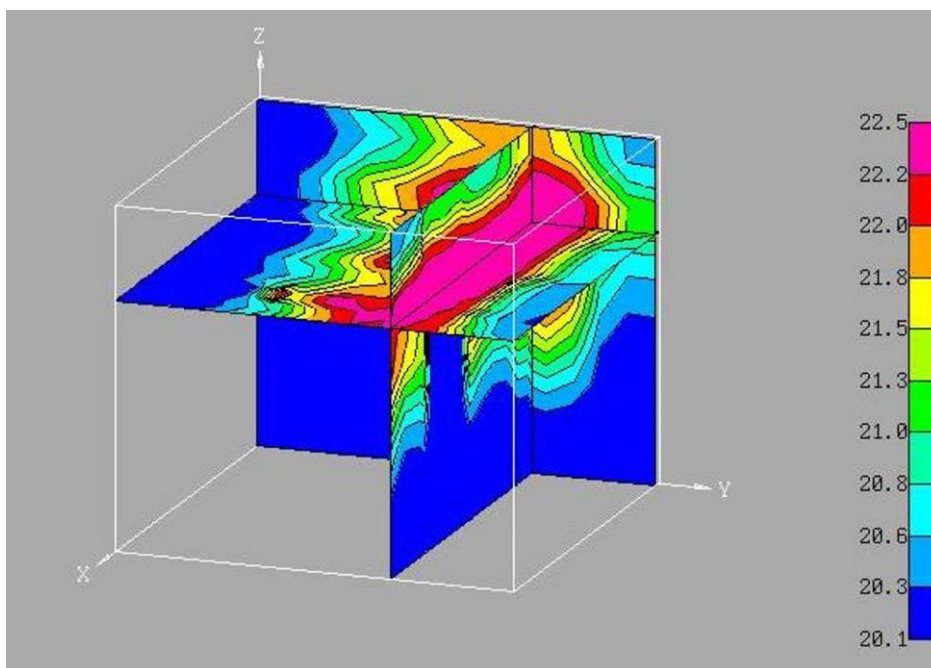


Рис. 1. Пример использования кросс-сечений [1].

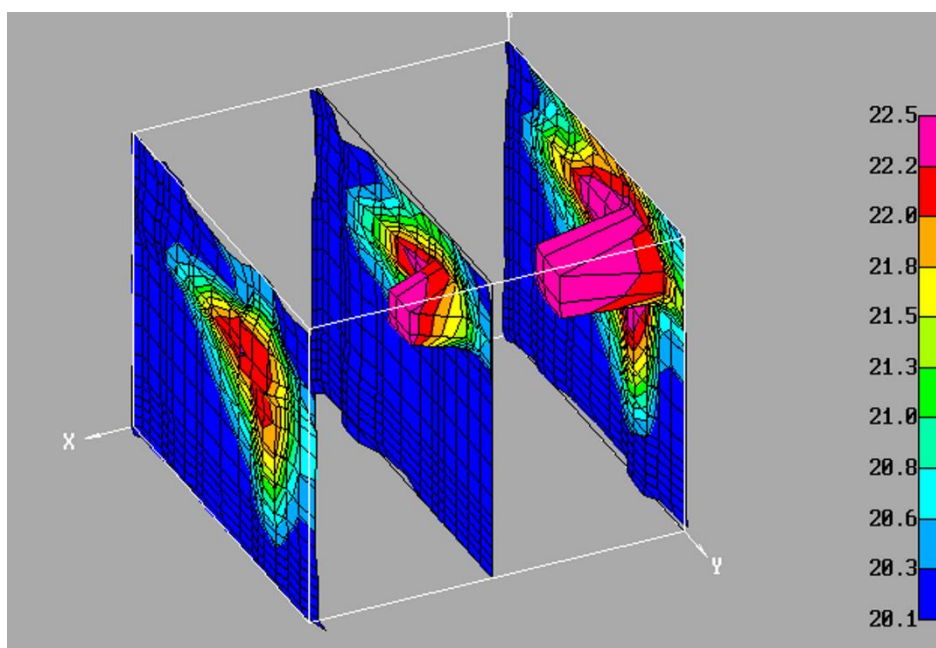


Рис. 2. Комбинированное представление - сочетание распределения температур в параллельных сечениях с поверхностями, «натянутыми» на вектора скорости [1].

Подобные представления мы можем создавать в самых различных комбинациях для каждой фиксированной точки разбиения пространства определяющих параметров (A_1^*, \dots, A_N^*) .

Здесь у нас появляется новая возможность построения границ изменения интересующих нас определяющих параметров от A_i^{min} до A_i^{max} для каждого A_i . Это может быть полезно, например, при визуализации отрывных течений, где можно выделять предельные границы изменения положения зон отрыва в зависимости от выбора определяющего параметра. Следует отметить, что подобные визуальные представления для конкретного класса задач можно создавать на основе уже имеющихся методов и алгоритмов, реализованных во многих программных комплексах, таких, например, как ParaView, VizIt, TecPlot.

В) С практической точки зрения, при решении задач вычислительной газовой динамики первоочередной интерес для пользователя, как правило, представляют собой ценные функционалы, рассчитываемые при помощи уже вычисленных газодинамических функций в расчетной области. Роль такого функционала может играть общее сопротивление тела в потоке или сопротивление трения для вязких задач. В случае анализа условий возникновения и распада пространственно-временных структур в поле течения таким функционалом может служить характерное время существования структуры.

Здесь мы приходим к классическим задачам визуальной аналитики [8-12], где целью является получение максимальной информации о многомерном массиве данных $\Phi(A_1, \dots, A_N) = \Phi(F(x, y, z, t, A_1, \dots, A_N))$ и скрытых взаимосвязей между его определяющими параметрами. Для этих целей разработано достаточное количество подходов [8-10]. Одним из возможных подходов, представленных в [6,13-15], является понижение размерности изучаемого пространства определяющих параметров до трех, визуальное представление полученной для $\Phi(A_1, \dots, A_N)$ зависимости и аппроксимация этой зависимости с помощью набора геометрических примитивов. Целью такого подхода является представление зависимости $\Phi(A_1, \dots, A_N)$ в аналитическом виде. В случае успеха это дает возможность построения полученных результатов математического моделирования в виде физического закона для рассматриваемого класса задач. Данная область исследований предполагает разработку большого количества подходов и программных инструментов.

4. Заключение

Современное развитие вычислительных комплексов и технологий позволяет организовать построение обобщенного вычислительного эксперимента при моделировании задач вычислительной газовой динамики. Построение такого эксперимента базируется на численных параметрических исследованиях и решении задач оптимизационного анализа. Решение подобных задач предполагает многократное решение прямой задачи численного моделирования газодинамического процесса при различных входных данных. Определяющие параметры класса задач, такие как характерное число Маха, число Рейнольдса, геометрические параметры и т.п., варьируются в определенных диапазонах с некоторым шагом разбиения. В итоге получаемое решение представляет собой многомерный объем данных. Для анализа этого объема необходима визуализация. В работе проведена попытка систематизации и краткого описания некоторых типов задач, возникающих при обработке результатов обобщенного вычислительного эксперимента. Целью работы является начало широкого обсуждения задач визуализации в обобщенном вычислительном эксперименте и методов их решения.

5. Литература

[1] Bondarev A. E. and Bondarev E. N. Visualization Functions in Computational Fluid Dynamics / *Obshcheros. NauchnoTekhn. Zh. Polet (Mashinostr, Moscow, 2000)*, No. 10, pp. 53–60 [in Russian].

[2] Бондарев А.Е. Оптимизация гибридной разностной схемы с учетом влияния вязкости и турбулентности на основе решения обратных задач // Сборник трудов конференции «Высокопроизводительные вычисления в задачах механики и физики», Москва, 2009. С.39-44.

[3] Bondarev A.E., Galaktionov V.A., Chechetkin V. M. Analysis of the Development Concepts and Methods of Visual Data Representation in Computational Physics / *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2011, Vol. 51, No. 4, pp. 624–636.

[4] Bondarev A.E. Analysis of unsteady space-time structures using the optimization problem solution and visualization methods // *Conference proceedings of 22-th International*

Conference on Computer Graphics and Vision, Lomonosov Moscow State University, October 01-05, 2012, p.184-188.

[5] Bondarev A.E., Galaktionov V.A. Analysis of Space-Time Structures Appearance for Non-Stationary CFD Problems / Proceedings of 15-th International Conference On Computational Science ICCS 2015 Rejkjavik, Iceland, June 01-03 2015, Procedia Computer Science. Vol. 51. P. 1801–1810.

[6] Bondarev A.E., Galaktionov V.A. Multidimensional data analysis and visualization for time-dependent CFD problems / Programming and Computer Software. 2015. Vol. 41. №. 5. P. 247–252. DOI: 10.1134/S0361768815050023

[7] Bondarev A.E., Galaktionov V.A., Shapiro L.Z. Processing and visual analysis of multidimensional data / Scientific Visualization. V.9, № 5, c.86-104, 2017, DOI: <http://doi.org/10.26583/sv.9.5.08>

[8] Thomas J. and Cook K. Illuminating the Path: Research and Development Agenda for Visual Analytics. IEEE-Press, 2005.

[9] Kielman, J. and Thomas, J. (Guest Eds.) (2009). Special Issue: Foundations and Frontiers of Visual Analytics / Information Visualization, Volume 8, Number 4, p. 239-314.

[10] Keim D., Kohlhammer J., Ellis G. and Mansmann F. (Eds.) Mastering the Information Age – Solving Problems with Visual Analytics, Eurographics Association, 2010.

[11] Gorban A., Kegl B., Wunsch D., Zinovyev A. (Eds.), Principal Manifolds for Data Visualisation and Dimension Reduction, LNCSE 58, Springer, Berlin – Heidelberg – New York, 2007.

[12] Gorban A.N., Zinovyev A. Principal manifolds and graphs in practice: from molecular biology to dynamical systems / International Journal of Neural Systems. 2010. Vol. 20. №. 3. P. 219–232. DOI: 10.1142/S0129065710002383

[13] Bondarev A.E., Galaktionov V.A. and Shapiro L.Z. Processing and visual analysis of multidimensional data / Scientific Visualization, 9(5) 2017, p 86-104.

[14] Bondarev A.E. On the Construction of the Generalized Numerical Experiment in Fluid Dynamics // Mathematica Montisnigri, Vol. XLII, 2018, p. 52-64.

[15] A.E. Bondarev, A.V. Bondarenko, V.A. Galaktionov (2018) Visual analysis procedures for multidimensional data. Scientific Visualization 10.4: 109 - 122, DOI: 10.26583/sv.10.4.09

On visualization problems in a generalized computational experiment

A.E. Bondarev

Keldysh Institute of Applied Mathematics RAS

ORCID: 0000-0003-3681-5212, bond@keldysh.ru

Abstract

Modern development of computing systems and technologies allows to organize the construction of a generalized computational experiment in modeling problems of computational gas dynamics. The construction of such an experiment is based on numerical parametric studies and the solution of optimization analysis problems. Solving such problems implies a multiple solution to the direct problem of numerical simulation of a gas-dynamic process with different input data, where different sets of defining parameters are used as input data. The defining parameters of a class of problems, such as Mach number, Reynolds number, geometric parameters, etc., vary in certain ranges with a certain partitioning step. As a result, the resulting solution is a multidimensional volume of data. To analyze this volume, visualization is necessary. The paper attempts to systematize and briefly describe some types of visualization problems arising from processing the results of a generalized computational experiment. The aim of the work is to begin a broad discussion of the tasks of visualization and methods for their solution in a generalized computational experiment.

Keywords: generalized computational experiment, CFD, multidimensional data, visualization, visual analysis.

References

- [1] Bondarev A. E. and Bondarev E. N. Visualization Functions in Computational Fluid Dynamics / *Obshcheros. NauchnoTekhn. Zh. Polet (Mashinostr, Moscow, 2000)*, No. 10, pp. 53–60 [in Russian].
- [2] Bondarev A. E. Optimization of hybrid difference scheme taking into account the influence of viscosity and turbulence based on the solution of inverse problems // Conference proceedings « High performance computing in problems of mechanics and physics», Moscow, 2009. p. 39-44.
- [3] Bondarev A.E., Galaktionov V.A., Chechetkin V. M. Analysis of the Development Concepts and Methods of Visual Data Representation in Computational Physics / *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 2011, Vol. 51, No. 4, pp. 624–636.
- [4] Bondarev A.E. Analysis of unsteady space-time structures using the optimization problem solution and visualization methods // Conference proceedings of 22-th International Conference on Computer Graphics and Vision, Lomonosov Moscow State University, October 01-05, 2012, p.184-188.
- [5] Bondarev A.E., Galaktionov V.A. Analysis of Space-Time Structures Appearance for Non-Stationary CFD Problems / *Proceedings of 15-th International Conference On Computational Science ICCS 2015 Rejkjavik, Iceland, June 01-03 2015, Procedia Computer Science*. Vol. 51. P. 1801–1810.
- [6] Bondarev A.E., Galaktionov V.A. Multidimensional data analysis and visualization for time-dependent CFD problems / *Programming and Computer Software*. 2015. Vol. 41. No. 5. P. 247–252. DOI: 10.1134/S0361768815050023

- [7] Bondarev A.E., Galaktionov V.A., Shapiro L.Z. Processing and visual analysis of multidimensional data / Scientific Visualization. V.9, № 5, c.86-104, 2017, DOI: <http://doi.org/10.26583/sv.9.5.08>
- [8] Thomas J. and Cook K. Illuminating the Path: Research and Development Agenda for Visual Analytics. IEEE-Press, 2005.
- [9] Kielman, J. and Thomas, J. (Guest Eds.) (2009). Special Issue: Foundations and Frontiers of Visual Analytics / Information Visualization, Volume 8, Number 4, p. 239-314.
- [10] Keim D., Kohlhammer J., Ellis G. and Mansmann F. (Eds.) Mastering the Information Age – Solving Problems with Visual Analytics, Eurographics Association, 2010.
- [11] Gorban A., Kegl B., Wunsch D., Zinovyev A. (Eds.), Principal Manifolds for Data Visualisation and Dimension Reduction, LNCSE 58, Springer, Berlin – Heidelberg – New York, 2007.
- [12] Gorban A.N., Zinovyev A. Principal manifolds and graphs in practice: from molecular biology to dynamical systems / International Journal of Neural Systems. 2010. Vol. 20. №. 3. P. 219–232. DOI: 10.1142/S0129065710002383
- [13] Bondarev A.E., Galaktionov V.A. and Shapiro L.Z. Processing and visual analysis of multidimensional data / Scientific Visualization, 9(5) 2017, p 86-104.
- [14] Bondarev A.E. On the Construction of the Generalized Numerical Experiment in Fluid Dynamics // Mathematica Montisnigri, Vol. XLII, 2018, p. 52-64.
- [15] A.E. Bondarev, A.V. Bondarenko, V.A. Galaktionov (2018) Visual analysis procedures for multidimensional data. Scientific Visualization 10.4: 109 - 122, DOI: 10.26583/sv.10.4.09