

Современные направления развития визуализации данных

А.Е.Бондарев, В.А. Галактионов
Институт прикладной математики им. М.В.Келдыша РАН
Москва, Россия
bond@keldysh.ru; vlgal@gin.keldysh.ru

Аннотация

Данный доклад представляет собой обзор современных направлений развития визуализации данных. Отмечены факторы, определяющие общие тенденции развития анализа численных данных. Рассматриваются примеры синтеза методов и подходов, применяемых в различных разделах анализа и обработки данных. Обсуждаются перспективы применения подобного синтеза к результатам математического моделирования задач вычислительной физики.

Ключевые слова: научная визуализация, задачи вычислительной физики, математическое моделирование

1. ВВЕДЕНИЕ

Данная работа представляет собой авторский взгляд на основные современные тенденции развития методов, алгоритмов и подходов визуального представления численных данных. Под численными данными подразумеваются результаты математического моделирования задач вычислительной физики, а точнее, вычислительной механики жидкости и газа. В данной обзорной работе использованы материалы трудов международной конференции Графикон за последние годы, а также работы, опубликованные в журнале «Научная визуализация».

Визуальное представление численных данных, являющихся результатами научных исследований или прикладных, инженерных и технологических расчетов, на сегодняшний день представляет собой важнейшую отрасль знания и технологического развития. Без использования современных концепций, методов и программных средств научной визуализации невозможно провести полный и достоверный анализ результатов численного моделирования сложных физических и технологических процессов, проводимый на современной вычислительной технике.

Алгоритмы визуального представления численных результатов развивались сообразно необходимости отображать решения прямых задач математического моделирования – преимущественно двумерных и трехмерных нестационарных процессов. По мере развития алгоритмов численного решения подобных задач развивались алгоритмы визуализации. Эволюция основных концепций, методов и подходов научной визуализации для задач вычислительной механики жидкости и газа и основные стадии исторического развития подробно рассмотрены в обзорной работе [1].

Для прямых задач математического моделирования общая схема проведения вычислительного эксперимента выглядит традиционно. Выбирается математическая модель и

численный метод ее реализации, затем проводится численный расчет. Визуальное представление результатов расчета обеспечивает пользователю возможность анализа и адекватной трактовки результатов. Одновременно с этим визуализация позволяет верифицировать полученные результаты и при необходимости вносить коррективы в математическую модель и метод расчета. Подобная схема вычислительного эксперимента складывалась на протяжении долгого времени. Однако в последние годы стремительное развитие технологий, алгоритмов и математических методов выдвигает новые задачи, вызванные появлением новых вычислительных возможностей.

2. ОСНОВНЫЕ ФАКТОРЫ ВЛИЯНИЯ

Можно выделить несколько главных факторов, определяющих современные направления развития математического моделирования и связанные с ними новые задачи визуального представления результатов.

Основополагающим фактором является интенсивное развитие высокопроизводительных вычислений и параллельных алгоритмов. Параллельные вычисления позволяют не только увеличить скорость расчетов и обеспечить применение подробных сеток. Они также предоставляют возможность проведения параметрических исследований и решения мультидисциплинарных и обратных задач. Эти задачи постепенно выходят на первый план ввиду их перспективности. Мультидисциплинарные задачи предполагают проведение численного эксперимента с использованием различных моделей. Решение обратных задач имеет своей целью поиск причин, вызывающих изучаемое физическое явление. Параметрические численные исследования позволяют получать решение не для одной конкретной задачи математического моделирования, а для класса задач, заданного в многомерном пространстве определяющих параметров. Также применение параллельных алгоритмов на высокопроизводительной вычислительной технике предоставляет возможность численного исследования задач оптимизационного анализа, когда обратная задача решается в каждой точке сеточного разбиения многомерного пространства определяющих параметров.

Основная особенность с точки зрения задач визуализации в подобных вычислениях заключается в том, что их результаты представляют собой многомерные массивы, размерность которых соответствует количеству определяющих параметров. Эти массивы нуждаются в обработке и визуальном представлении для анализа данных. Для этого необходима интеграция алгоритмов визуального представления с методами Data Analysis в целях понижения

размерности [2], так как устоявшихся концепций визуализации многомерных данных на сегодняшний день нет. Также необходимо учесть, что большинство вышеперечисленных задач рассматриваются в оптимизационной постановке. Это приводит к необходимости организации визуального отображения оптимизационного процесса в вычислениях.

Другим не менее важным фактором в последнее десятилетие явилась произошедшая революция в экспериментальной визуализации физических процессов [3], которая заключалась в переходе от аналоговых механических и электронных технологий к цифровым технологиям в методах регистрации изображений полей течений и представления результатов экспериментальных исследований. Согласно [3], это привело к стремительному сближению визуализации результатов численного моделирования с визуализацией результатов экспериментов. В связи с внедрением цифровых технологий в методы регистрации и анализа потоков стало возможным проведение прямого сравнения результатов расчетов и результатов экспериментальной визуализации полей течений. Это обстоятельство открывает новые возможности применения методов обработки и анализа изображений для выделения скрытых структур и их трассировки.

Третьим важным фактором является интенсивно развивающийся в последние годы синтез подходов, алгоритмов и математических методов, разработанных в различных областях знания. Подобный синтез обеспечивает получение новых результатов. Так, например, для проявления скрытых структур в результатах газодинамических расчетов могут применяться методы анализа и обработки изображений [7,8]. В задачах идентификации и управления течениями с использованием сопряженных уравнений визуальное представление сопряженных параметров и управляющего функционала позволяет реализовать контроль процесса [10]. Или наоборот, использование сопряженных параметров применяется для создания полностью управляемого изображения [9]. Также в целях выявления скрытых взаимосвязей и классификации полученных данных широко применяются алгоритмы кластерного и факторного анализа, метод главных компонент и его модификации для существенно нелинейных случаев. Подобное взаимообогащение методов и подходов является весьма характерным и несет в себе огромный потенциал.

3. СОВРЕМЕННЫЕ ТЕНДЕНЦИИ

В данном разделе приведены некоторые новые направления исследований и классы задач, требующих решения, возникающие вследствие влияния вышеперечисленных факторов. Также приводятся отдельные примеры исследований в этих направлениях.

Проблемы решения задач оптимизационного анализа и визуализации результатов, получаемых в виде многомерного объема данных, рассмотрены в работах [2,4]. В этих работах представлен приближенный подход, предназначенный для исследования процессов образования пространственно-временных структур в нестационарных задачах вычислительной механики жидкости и газа с помощью параллельных вычислений. Применение подхода позволяет проводить быструю приближенную оценку зависимости

возникновения нестационарных структур в потоке от определяющих параметров задачи, выраженную в виде квазианалитических соотношений. Приводится пример решения конкретной задачи исследования образования пространственно-временных структур при взаимодействии нестационарных потоков. Полученные результаты представляют собой решение для класса задач, заданного в многомерном объеме определяющих параметров.

Решение подобных задач делает крайне важным смежное направление – реализацию поиска, выделения, визуального представления и трассировки образующихся в течениях нестационарных структур, а именно, вихревых зон и разрывов. Для непосредственного решения поиска вихрей необходимо использование математического аппарата, разработанного в математической физике для этих целей. Подробный обзор методов и подходов, применяемых для исследования процессов анализа и визуализации вихревых течений, приведен в работе [5]. Представленные методы позволяют эффективно проследивать критические точки течения, контролировать нестационарные процессы зарождения и распада вихрей в потоке. Конкретный пример применения данных методов для решения практических задач локализации и визуального представления вихревых структур в нестационарных трехмерных течениях представлен в работе [6].

Не менее важной задачей для общего анализа течений является обнаружение, визуализация и трассировка разрывов. Это направление исследований является ярким примером синтеза методов и подходов, разработанных в различных прикладных областях. Локализация структур в результатах газодинамических расчетов, полученных методами сквозного счета без выделения разрывов, является чрезвычайно актуальным и интенсивно развивающимся направлением. Впервые способ выделения структур в решении, основанный на применении алгоритмов обработки изображений к полю данных, полученных в процессе решения задач математической физики, был предложен в работе [7]. В данном подходе предлагалось рассматривать газодинамические функции как интенсивность изображения, а значения функций в каждой точке как элементы изображения (пиксели). Суть основной проблемы заключается в необходимости обнаружения тонких структур течения, которые нельзя обнаружить другими средствами, в том числе и прямой визуализацией. Необходимо применять методы обработки изображений, чтобы «проявить» визуально эти структуры на обычном изображении данных. Данный подход получил развитие, представленное в работе [8], где реализовано обобщение подхода на трехмерный случай с использованием методов вейвлет анализа. Также в [8] рассмотрено применение разработанного алгоритма к вязким моделям и построению адаптивных сеток на основании обнаруженных скрытых разрывов. Данная работа чрезвычайно расширяет область применения основного подхода [7].

Полученные с помощью вышеуказанных подходов нестационарные структуры течения нуждаются в верификации путем сравнения с результатами физических экспериментов. Современный уровень методов экспериментальной визуализации представлен в обзорной работе [3], где рассматривается анализ возможностей, предоставляемых при использовании сравнения

экспериментальных изображений потоков, полученных различными оптическими методами, с численной визуализацией газодинамических течений. В работе [3] приведены характеристики основных современных методов экспериментальной визуализации потоков: оптические методы, базирующиеся на рефракции, рассеянии, поглощении, переизлучении, поляризации излучения; методы поверхностной визуализации (PSP – Pressure Sensitive Paints); трассирование (включая PIV - Particle Image Velocimetry модификации). Показана возможность проведения прямого сравнения экспериментальных и численных результатов. Также в [3] приведен пример анализа течений с импульсным энергокладом в поток на основе сравнения теневых, ТФМ (теневой фоновый метод) и расчетных изображений визуализированных ударно-волновых конфигураций.

Отдельным важным направлением являются задачи, основанные на синтезе математического аппарата теории сопряженных операторов и уравнений и методов визуального представления. Применение сопряженных параметров вкупе с решением оптимизационных задач позволяет создавать новые эффективные алгоритмы визуального представления. Подход, представленный в работе [9], позволяет создавать эффективные, полностью управляемые и физически точные (основанные на решении уравнений Навье-Стокса) визуальные представления распространения дыма и свободных поверхностей жидкости. Использование сопряженных уравнений позволяет решать широкий спектр обратных задач вычислительной механики жидкости и газа, в том числе задачи идентификации течения и управления течением. Непосредственная визуализация градиента целевого функционала и связанных с ним полей сопряженных параметров, подобно представленной в [10], позволяет получать новую информацию, являющуюся ключевой для рассматриваемой конкретной задачи. В задачах управления течением, идентификации течения (определения начальных или граничных условий, коэффициентов) поле управляющих параметров и градиент целевого функционала используются для поиска зон наиболее эффективного контроля или для выбора зон измерения. Примеры реализации такого подхода представлены в работе [10], где особо отмечается перспективность используемых методов для практического решения актуальных задач верификации и валидации.

Важным и перспективным направлением является интеграция современных методов анализа данных (Data Analysis) и методов визуализации применительно к исследованию многомерных объемов данных, являющихся результатами численного моделирования задач вычислительной механики жидкости и газа. Применение методов и подходов анализа данных позволяет проводить в исследуемом многомерном объеме выявление основных факторов влияния и скрытых взаимосвязей между ними, понижать размерность объема, решать задачи классификации объектов внутри объема. Однако простое механическое применение методов анализа данных к результатам газодинамических вычислений является затруднительным в силу специфики задач. Перспективным направлением реализации такой интеграции может служить адаптация и реализация методов Data Analysis в рамках подхода функционального представления исследуемых объектов, представленного в работах [11,12]. Огромным преимуществом данного подхода является возможность изначального представления исследуемых данных в виде функций многих переменных и построения

системы операторов, позволяющих определять преобразования объектов и отношения между ними.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные выше направления и примеры исследований совместно с четко наметившейся тенденцией слияния и синтеза методов, подходов и алгоритмов из различных областей дают основание полагать, что в будущем возможно создание совокупности алгоритмов, программных и технических средств, дающей возможность реализовать *обобщенный вычислительный эксперимент*. Подобный эксперимент, опирающийся на прямые задачи математического моделирования, реализующий алгоритмы поиска и трассировки нестационарных структур в течениях, использующий обратные и оптимизационные постановки задач и верифицируемый путем прямого сравнения с результатами экспериментов, позволит получать численные решения для классов задач. Полученные результаты позволят решать практические задачи контроля и управления нестационарными процессами в вычислительной механике жидкости и газа.

В выстраиваемой технологической цепочке предполагаемого эксперимента основополагающую роль для исследования, обработки, трактовки и верификации численных результатов будет играть визуализация данных. Используемая на всех стадиях вычислительного эксперимента, она предполагает реализацию по следующим направлениям: визуализация решений прямых задач, визуализация результатов поиска нестационарных структур в течениях, визуализация процесса оптимизации, визуальное представление скрытых взаимосвязей в многомерном объеме данных, обработка и прямое сравнение экспериментальных и численных результатов с целью верификации и совершенствования моделей расчета и эксперимента.

5. БЛАГОДАРНОСТИ

Данная работа выполнена при поддержке РФФИ (проект № 13-01-0367А)

6. ЛИТЕРАТУРА

- [1] Бондарев А.Е., Галактионов В.А., Четкин В.М. *Анализ развития концепций и методов визуального представления данных в задачах вычислительной физики / Журнал вычислительной математики и математической физики, 2011, Т. 51, N 4, С. 669–683.*
- [2] Бондарев А.Е., Галактионов В.А. *Анализ многомерных данных в задачах многопараметрической оптимизации с применением методов визуализации / Научная визуализация. Т.4, № 2, с.1-13, 2012, URL: <http://sv-journal.com/2012-2/01.php?lang=ru>*
- [3] Знаменская И.А. *Взаимодействие численной и экспериментальной визуализации потоков / Научная визуализация. Т.5, № 3, 2013.*
- [4] Bondarev A.E., Galaktionov V.A. *Parametric Optimizing Analysis of Unsteady Structures and Visualization of*

Multidimensional Data // International Journal of Modeling, Simulation and Scientific Computing, Vol. 4, suppl. issue 1, 2013, DOI: 10.1142/S1793962313410043
<http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S1793962313410043>

[5] Tricoche X., Garth C. *Topological Methods for Visualizing Vortical Flows // Mathematical Foundations of Scientific Visualization, Computer Graphics, and Massive Data Exploration, Ed. by Möller T., Hamann B., Russell R., Springer-Verlag, 2009, pp.89-108.*

[6] Ilina T.V., Lutsky A.E. *Numerical Simulation And Visualization Of Wing Vortices / Proc. of PSFVIP-8: The 8th Pacific Symposium on Flow Visualization and Image Processing, Moscow, , 2011*

[7] Базаров С.Б. *Применение цифровой обработки изображений для визуализации результатов газодинамических расчетов // «Применение методов научной визуализации в прикладных задачах», Сб. науч. тр., Москва, МГУ, 2000, с.39-42.*

[8] Афондинов А.Л., Луцкий А.Е., Плёнкин А.В. *Применение вейвлет анализа для выделения структур в расчетах газодинамических течений и для адаптации сеток / Научная визуализация. Т.4, № 3, с.8-25, 2012, URL: <http://sv-journal.com/2012-3/02.php?lang=ru>*

[9] McNamara A., Treuille A., Popovic Z., Stam J. *Fluid control using the adjoint method / ACM Transactions on Graphics (SIGGRAPH 2004), 23(3), August 2004.*

[10] Алексеев А.К., Бондарев А.Е. *Применение сопряженных уравнений и визуальное представление сопряженных параметров в задачах идентификации и управления течением, верификации и валидации расчетов / Научная визуализация. Т.4, № 3, с.1-24, 2011, URL: <http://sv-journal.com/2011-3/01.php?lang=ru>*

[11] Pasko A., Adzhiev V., Malikova E., Pilyugin V. *Scientific Visualization and FRep Geometric Modeling: a Survey / Proc. 22th International Conference on Computer Graphics & Vision GRAPHICON'2012, Moscow, 2012, p.189-192.*

[12] Пилюгин В.В., Маликова Е.Е., Пасько А.А., Аджиев В.Д. *Научная визуализация как метод анализа научных данных / Научная визуализация. Т.4, № 4, с.8-25, 2012, URL: <http://sv-journal.com/2012-4/06.php?lang=ru>*

Об авторах

Бондарев Александр Евгеньевич – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
E-mail: bond@keldysh.ru

Галактионов Владимир Александрович – д.ф.-м.н., профессор, заведующий отделом компьютерной графики ИПМ им. М.В. Келдыша РАН.
E-mail: vlgal@gin.keldysh.ru

STATE-OF-THE-ART IN DATA VISUALIZATION

Abstract

The article presents a review of main modern trends for data visualization. The main factors of influence are marked for these trends. The examples of methods and approaches combination for different fields of research are considered. The perspectives of combined approaches application to numerical results in computational physics are discussed.

Keywords: *scientific visualization, computational physics, mathematical modeling*