

DOI: 10.51790/2712-9942-2024-5-2-04

РЕАЛИЗАЦИЯ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ КОШИ С РАЗЛИЧНЫМИ КОНФИГУРАЦИЯМИ ПОЛЕЙ НАЧАЛЬНЫХ ДАННЫХ И ВИЗУАЛИЗАЦИИ РЕЗУЛЬТАТОВ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ТЕЧЕНИЯ ТЯЖЕЛОЙ ПРИМЕСИ

А. Д. Смородинов^{1,2,a}, Т. В. Гавриленко^{1,2,b}, А. О. Дубовик^{1,2,c}, Д. А. Моргун^{1,2}

¹ Сургутский филиал Федерального государственного учреждения «Федеральный научный центр Научно-исследовательский институт системных исследований Российской академии наук», г. Сургут, Российская Федерация

² Сургутский государственный университет, г. Сургут, Российская Федерация

^a ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9324-1844>, ✉ sachenka_1998@mail.ru

^b ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-3243-2751>, taras.gavrilenko@gmail.com

^c ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4158-9646>, alldubovik@gmail.com

² ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0692-1583>, morgun_da@office.niisi.tech

Аннотация: в работе представлен метод подготовки данных и последующая визуализация решения задачи Коши, которая возникает при моделировании динамики примеси в потенциальных течениях, а также при моделировании динамики примеси в вязкой несжимаемой жидкости в цилиндрической области течения. Задача Коши решалась с использованием метода Рунге–Кутты 4-го порядка точности. Разработано программное обеспечение для решения задачи Коши в трехмерном пространстве, которое в автоматическом режиме визуализирует полученные результаты. Такая постановка задачи может применяться для моделирования динамики течения безынерционной недиффундирующей примеси, растворенной в жидкости, в случае, когда векторное поле \vec{V} , являющееся решением задачи Коши, удовлетворяет уравнениям гидродинамики. Задача Коши рассматривается на целом множестве начальных данных, задающем поле распределения примеси в начальный момент времени. Разработанное программное обеспечение позволяет проводить вычисления с распределением по доступным ядрам ЭВМ на основе технологии OpenMP. В качестве средства визуализации использовалась библиотека MathGL. Представлены результаты тестирования программного обеспечения.

Ключевые слова: математическое моделирование, уравнение Навье–Стокса, метод Рунге–Кутты, задача Коши.

Благодарности: работа выполнена в рамках государственного задания ФГУ ФНЦ НИИСИ РАН по теме № FNEF-2024-0001 «Создание и реализация доверенных систем искусственного интеллекта, основанных на новых математических и алгоритмических методах, моделях быстрых вычислений, реализуемых на отечественных вычислительных системах» (1023032100070-3-1.2.1).

Для цитирования: Смородинов А. Д., Гавриленко Т. В., Дубовик А. О., Моргун Д. А. Реализация программного обеспечения для решения задачи Коши с различными конфигурациями полей начальных данных и визуализации результатов математического моделирования течения тяжелой примеси. *Успехи кибернетики*. 2024;5(2):35–45. DOI: 10.51790/2712-9942-2024-5-2-04.

Поступила в редакцию: 06.05.2024.

В окончательном варианте: 10.06.2024.

SOFTWARE FOR SOLVING THE CAUCHY PROBLEM AND VISUALIZING HEAVY IMPURITY FLOW SIMULATION RESULTS

A. D. Smorodinov^{1,2,a}, T. V. Gavrilenko^{1,2,b}, A. O. Dubovik^{1,2,c}, D. A. Morgun^{1,d}

¹ Surgut Branch of Federal State Institute “Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences”, Surgut, Russian Federation

² Surgut State University, Surgut, Russian Federation

^a ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9324-1844>, ✉ sachenka_1998@mail.ru

^b ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-3243-2751>, taras.gavrilenko@gmail.com

^c ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4158-9646>, alldubovik@gmail.com

^d ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-0692-1583>, morgun_da@office.niisi.tech

Abstract: this paper presents a method for data preparation and visualization of the solution to the Cauchy problem, which arises in simulating the dynamics of impurities in potential flows and in a viscous incompressible liquid within a cylindrical flow region. The Cauchy problem was solved using the 4th-order Runge-Kutta method. We developed software that solves the Cauchy problem in 3D space and automatically visualizes the results. This method can simulate the dynamics of an inertialess, non-diffusing impurity in a liquid, provided that the vector field \vec{V} , which solves the Cauchy problem, satisfies the hydrodynamics equations. The problem is considered for the entire set of initial data defining the impurity distribution at the initial time. The software performs calculations distributed over available computer cores using OpenMP. The MathGL library was employed for visualization. The paper also presents the results of software testing.

Keywords: simulation, Navier-Stokes equation, Runge-Kutta method, Cauchy problem.

Acknowledgements: this study is a part of the FNEF-2024-0001 government order contracted to the Scientific Research Institute for System Analysis of the Russian Academy of Sciences, project No.1023032100070-3-1.2.1 Development and Implementation of Trusted Artificial Intelligence Systems Based on new Mathematical Methods and Algorithms, Fast Computing Models for Domestic Computing Systems.

Cite this article: Smorodinov A. D., Gavrilenko T. V., Dubovik A. O., Morgun D. A. Software for Solving the Cauchy Problem and Visualizing Heavy Impurity Flow Simulation Results. *Russian Journal of Cybernetics*. 2024;5(2):35–45. DOI: 10.51790/2712-9942-2024-5-2-04.

Original article submitted: 06.05.2024.

Revision submitted: 10.06.2024.

Одной из ключевых задач в науке является качественное и эффективное представление результатов математического моделирования. Качественная визуализация позволяет оценить эффективность решения, определить наличие выбросов, ошибок и несоответствие параметризации.

В работе представлен метод подготовки данных и последующая визуализация решения задачи Коши, которая возникает при исследовании различных процессов, которые могут быть определены дифференциальным законом эволюции и начальным состоянием. В работе задача Коши используется при моделировании двух процессов: первый — моделирование динамики примеси в потенциальных течениях, второй — моделирование динамики примеси в вязкой несжимаемой жидкости в цилиндрической области течения. Для расчетов применялся метод Рунге–Кутты 4-го порядка точности [1–3].

Разработано программное обеспечение для решения трехмерной задачи Коши следующего вида:

$$\frac{d\vec{x}}{dt} = \vec{V}(\vec{x}), \quad (1)$$

начальное условие вида:

$$\vec{x}_{t=0} = (x_1^0, x_2^0, x_3^0),$$

где поле $\vec{V}(\vec{x})$ — произвольная функция, и в автоматическом режиме визуализирует полученные результаты без прямого участия исследователя. Уравнение (1) может быть использовано для описания динамики течения безынерционной недиффундирующей примеси, растворенной в жидкости, в случае, когда векторное поле $\vec{V}(\vec{x})$ удовлетворяет уравнениям гидродинамики. Тогда уравнение (1) рассматривается на целом множестве начальных данных, задающем поле распределения примеси в начальный момент времени.

Для проведения расчетов с распределением вычислений по доступным ядрам вычислительной машины использовалась технология OpenMP [4]. В качестве средства визуализации использовалась библиотека MathGL, которая предназначена для создания качественной научной графики на различных платформах, для быстрой обработки и отображения больших массивов данных. Кроме того, данная библиотека позволяет работать в графическом и консольном режимах и легко интегрируется в различное программное обеспечение [5].

В качестве системы разработки и тестирования была использована ЭВМ на базе процессора AMD Ryzen Threadripper 2990WX 32-Core-Processor, 32 Гб оперативной памяти с частотой 2 400 МГц под управлением ОС Debian.

Важной составляющей любого исследования является сохранение результатов и его повторяемость. Для этого в разработанном программном обеспечении предусмотрена возможность ввода/вывода и сохранения параметров эксперимента в файл конфигурации.

В программе модуль решения задачи Коши отделен от модуля визуализации. Параметры визуализации, такие как частота кадра, задаются в файле конфигурации. Общая схема работы программы решения задачи Коши представлена на рисунке 1.

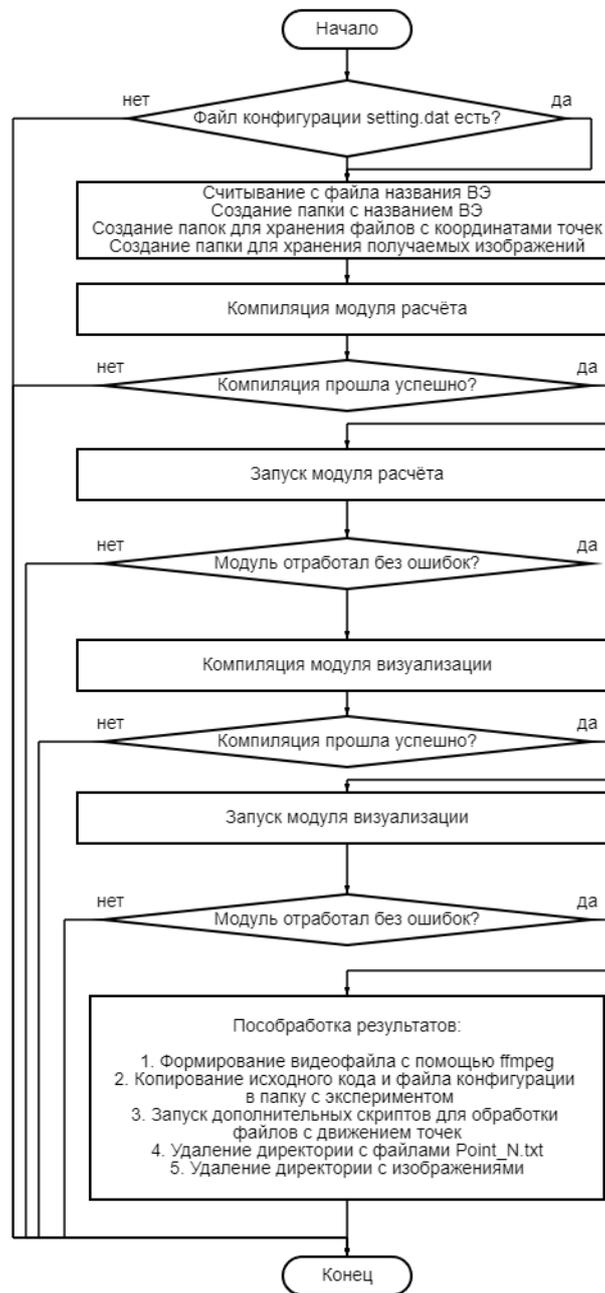


Рис. 1. Схема работы программы решения задачи Коши

Выполнение программы начинается с запуска скрипта автоматизации процессов расчета и визуализации. Работы данного программного комплекса можно условно разделить на 5 частей:

1. Подготовка параметров вычислительного эксперимента.
2. Решение задачи Коши.
3. Визуализация полученных данных.
4. Формирование видеофайлов из кадров для каждого момента времени.
5. Очистка временных файлов.

1 и 5 пункты выполняются средствами, предоставляемыми командной оболочкой `bash`. 4 пункт реализуется с использованием набора свободных библиотек для работы с аудио- и видеофайлами `Ffmpeg`.

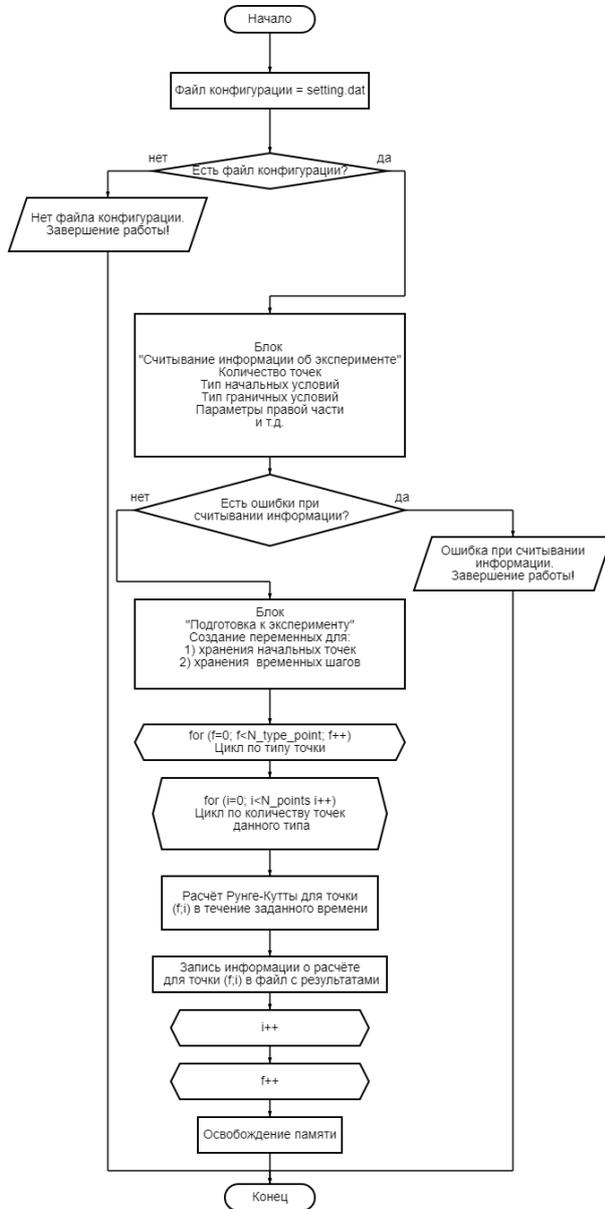


Рис. 2. Схема работы модуля расчета

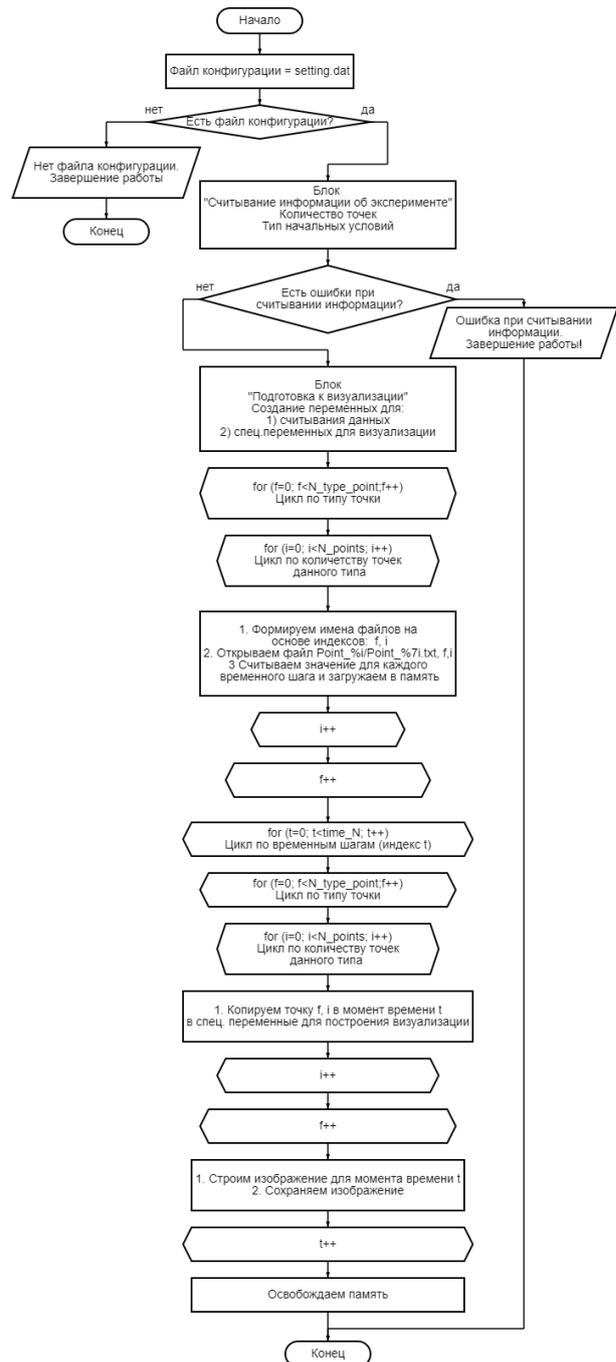


Рис. 3. Схема работы модуля визуализации

Схема работы 2 части программного комплекса представлена на рисунке 2. Работу данного модуля можно разделить на несколько этапов:

1. Ввод параметров расчета задачи.
2. Выделение памяти для вычислительного эксперимента.
3. Определение начальных точек согласно правилам, описанным в файле конфигурации.
4. Решение задачи Коши для каждой начальной точки и сохранение результатов в файл.
5. Освобождение памяти.

Решение задачи Коши для каждой начальной точки распределено между потоками процессора, каждую задачу решает один поток.

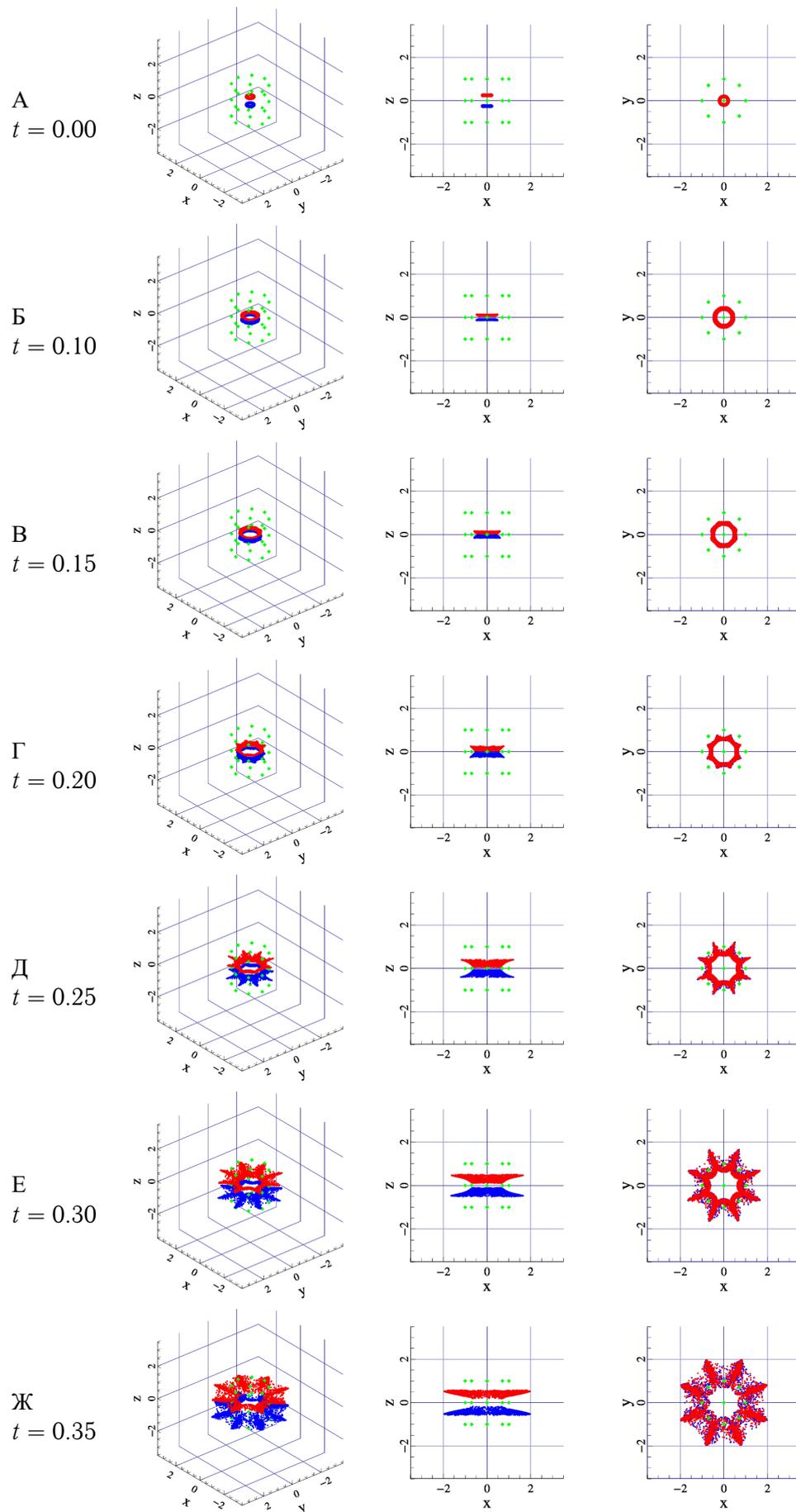


Рис. 4. Математическое моделирование столкновения двух потоков, заданного двумя мощными источниками и 24 источниками меньшей мощности, $0 \leq t \leq 0.35$

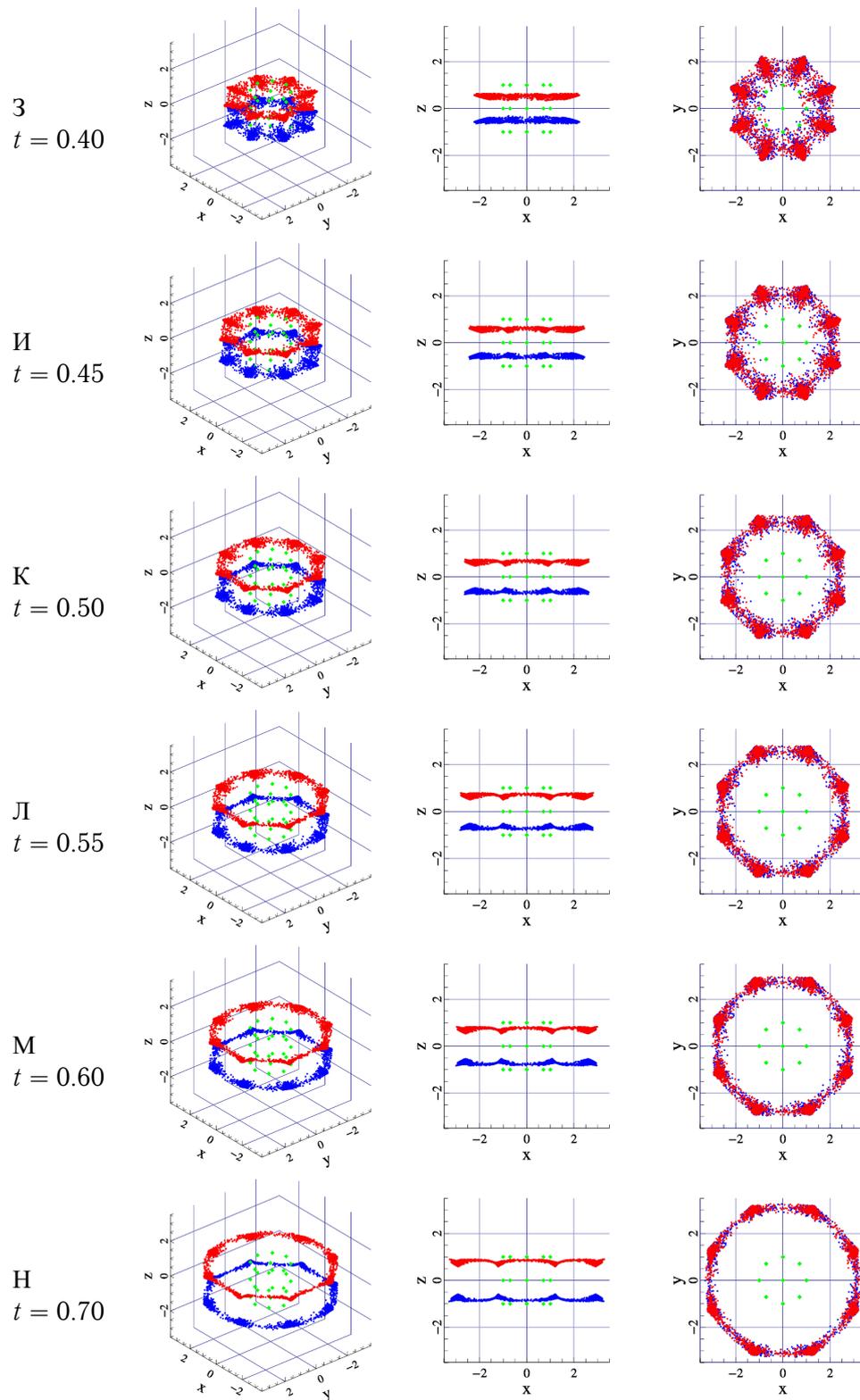


Рис. 5. Математическое моделирование столкновения двух потоков, заданного двумя мощными источниками и 24 источниками меньшей мощности, $0.40 \leq t \leq 0.70$

```
Name_experiment1: 26_istok_two_tor
#Условия_для_времени
Start_time: 0.0
End_time: 0.7
Step_time: 0.001
N_time: 701
#Количество_точек
#Если_0_то_одно_кол-во_точек_для_каждого_цвета
#Если_1_разное_кол_то_точек_для_каждого_цвета
all_type: 1
#Если_0_то_отсюда_считаем_количество_типов_точек
#Если_1_то_отсюда_считаем_количество_типов_и_сразу_кол_кол_точек
num_type_point: 2
5000 5000
#Если_0_то_одно_КОЛВО_ТОЧЕК_ЧИТАЕМ_ОТСЮДА
num_point: 644
#Тип_расположения_начальных_точек
type_pi: 3
#Тип_правой_части
type_gp: 2
#Сохраняем_каждый_X_шаг_по_времени
Time_save: 1
#Строим_каждую_X_картинку_по_времени
Time_save_img: 1
```

Рис. 6. Файл конфигурации для 1-го теста

Схема работы модуля визуализации представлена на рисунке 3. В работе модуля выделяются следующие этапы:

1. Ввод параметров экспериментов.
2. Выделение памяти для загрузки результатов прошлого расчета.
3. Визуализация расчетов для каждого момента времени и сохранение в формате png.
4. Освобождение памяти.

Данный модуль в некоторой части совпадает с модулем расчета, их можно объединить, чтобы визуализация выполнялась сразу после расчета. Но применяемый подход позволяет продолжить расчеты в случае сбоя, а также делает универсальным данный программный комплекс. При необходимости пользователь может провести только расчет, а затем визуализировать результат в любом другом визуализаторе, например, Paraview. В то же время пользователь, наоборот, может воспользоваться только визуализатором для визуализации полученных им данных.

Для тестирования представленной программы будем решать задачу, описываемую системой уравнений гидродинамики с условием скольжения на границе:

$$\begin{cases} \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \nabla, \vec{V}) + \frac{1}{\rho} \nabla P = \varepsilon^2 \Delta \vec{V}, \\ \operatorname{div} \vec{V} = 0, \\ (\vec{V}, \vec{n})|_{\partial D} = 0, \\ \frac{\partial N}{\partial t} + (\vec{V} \cdot \nabla) N = g \vec{k}. \end{cases}$$

Приведенная система позволяет моделировать движение безынерционных недиффундирующих примесей. Сначала рассмотрим случай, когда гравитация не учитывается, т. е. $g = 0$. В качестве теста возьмем решение задачи Коши заданной системой ДУ вида (1), рассмотренное в [6], в котором поле скоростей $\vec{V}(\vec{x})$ имеет вид:

$$\vec{V}(\vec{x}) = \nabla \left(\sum_{i=1}^k \frac{q_i}{\|\vec{x} - M_i\|} \right), \tag{2}$$

где $k = 26$, точки M_i имеют следующие координаты:

$$\begin{aligned} M_1 &= (0,0,1); & M_2 &= (0,0,-1); \\ M_i &= \left(\cos\left(\frac{i\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{4}\right), 0 \right), & i &= 3, \dots, 10; \\ M_i &= \left(\cos\left(\frac{i\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{4}\right), 1 \right), & i &= 11, \dots, 18; \\ M_i &= \left(\cos\left(\frac{i\pi}{4}\right), \sin\left(\frac{i\pi}{4}\right), -1 \right), & i &= 19, \dots, 26; \end{aligned}$$

q_i принимают значения: $q_1 = 5$, $q_2 = 5$, остальные $q_i = 0.05$.

В начальный момент времени генерируются стартовые положения точек случайным образом с использованием встроенного в язык программирования C++ генератора случайных чисел, по 5000 точек в окрестностях точек M_1 и M_2 , в форме тора, имитирующие струи по следующим правилам: количество точек — 5000 для каждой струи, шаг по времени — 1/1000, шагов по времени 700, радиус $R = 0.2$, радиус r изменялся от 0 до 0.05 для равномерного заполнения области. Центры торов находились в точках $(0; 0; -0.25)$ и $(0; 0; 0.25)$.

Результаты моделирования приведены на рисунках 4,5. Содержимое файла конфигурации эксперимента для данной задачи приведено на рисунке 6.

В качестве еще одного теста разработанного программного обеспечения рассмотрим поле $\vec{V}(\vec{x})$ следующего вида, с учетом действия силы тяжести:

$$V(x) = e^{-\lambda^2 \mu t} \frac{1}{\lambda^2} \begin{bmatrix} a_k J'_0(a_k p) \{x_2 \lambda \sin(b_k(x_3 - z_k)) + x_1 b_k \cos(b_k(x_3 - z_k))\} \\ a_k J'_0(a_k p) \{-x_1 \lambda \sin(b_k(x_3 - z_k)) + x_2 b_k \cos(b_k(x_3 - z_k))\} \\ a_k^2 J_0(a_k p) \sin(b_k(x_3 - z_k)) \end{bmatrix} - g \vec{k}. \quad (3)$$

Такое поле является точным решением уравнения Навье–Стокса и представлено в [7]. Отличие этого теста от предыдущего заключается в другой правой части системы (1). Векторное поле (3) описывает динамику примеси, растворенной в жидкости в поле тяготения.

В данном случае начальное положение точек задавалось в виде плоского цилиндра радиусом 2.709 и высотой 0.4, количество точек — 1000. Здесь в файле конфигурации дополнительно устанавливаются значения коэффициентов a_k , b_k , z_k , g , μ :

$$a_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad b_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \lambda^2 = a_1^2 + b_1^2, \quad \mu = 0.05, \quad g = 0.05, \quad z_k = 0.$$

Шаг по времени равен 0.01, количество шагов — 40 000.

Результаты моделирования представлены на рисунках 7,8.

Целью данного вычислительного эксперимента была проверка наличия выпадения осадка при движении примеси, что наблюдается в момент времени $t = 400$.

Файл конфигурации представлен на рисунке 9. В данном случае в файле конфигурации описываются не только правила для расчета по методу Рунге–Кутты, но и коэффициенты правой части. В прошлом тестовом расчете из-за большого количества параметров было удобнее реализовать ввод сразу через сохранение в массив.

Заключение

В ходе данной работы разработано программное обеспечение для подготовки проведения вычислительного эксперимента и визуализации решения задачи Коши. Проведен ряд вычислительных экспериментов для тестирования разработанного программного обеспечения на примере двух задач. Первая заключалась в моделировании и визуализации результатов динамики безынерционной примеси в потенциальных потоках, задаваемых кулоновскими потенциалами. Вторая задача заключалась в моделировании и визуализации результатов динамики примеси в вязкой несжимаемой жидкости в цилиндрической области течения. Полученный программный комплекс может быть оформлен в виде библиотеки программного обеспечения и применяться для моделирования и визуализации течения безынерционной недиффундирующей примеси, растворенной в жидкости.

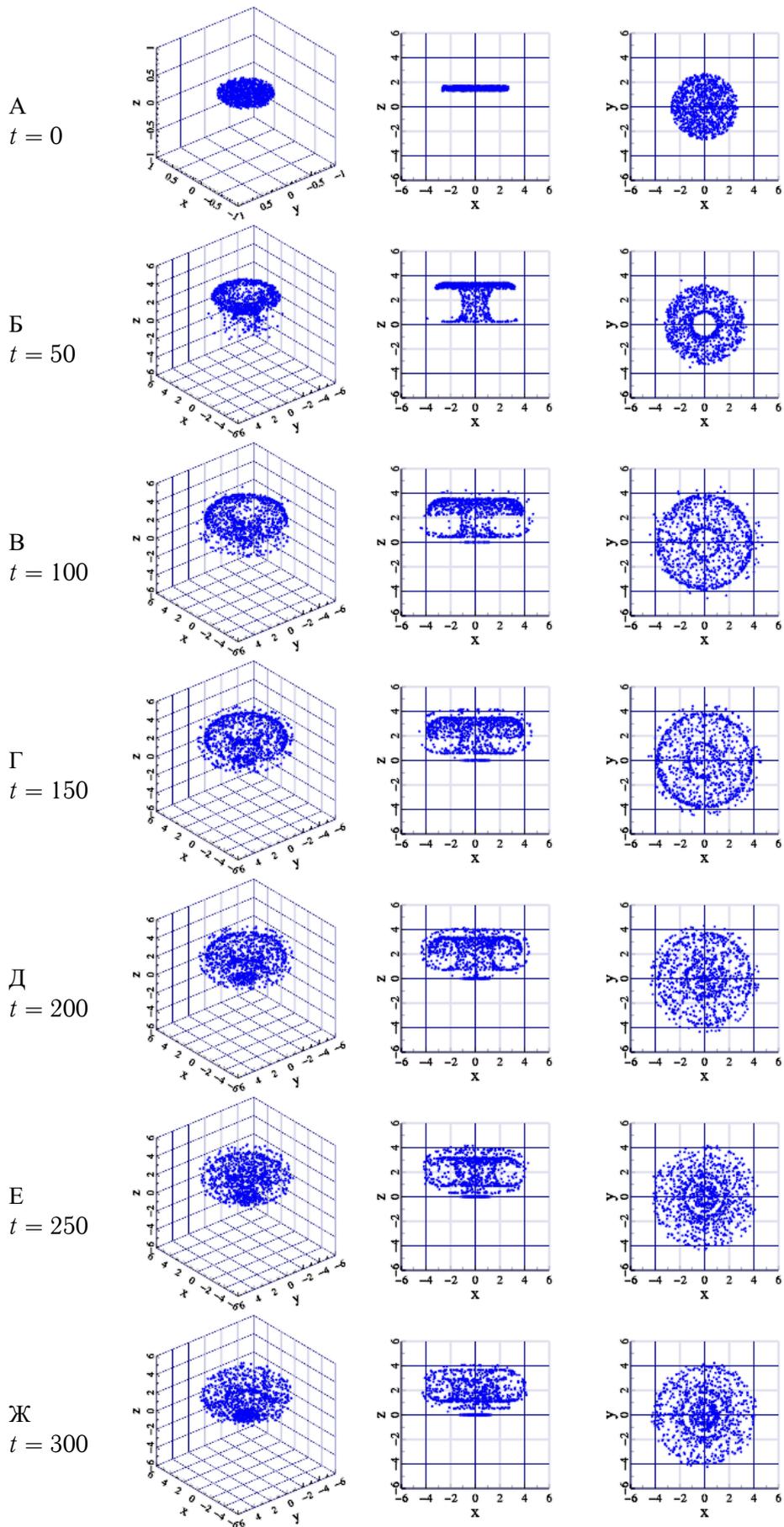


Рис. 7. Результаты моделирования движения примеси, $0 \leq t \leq 300$

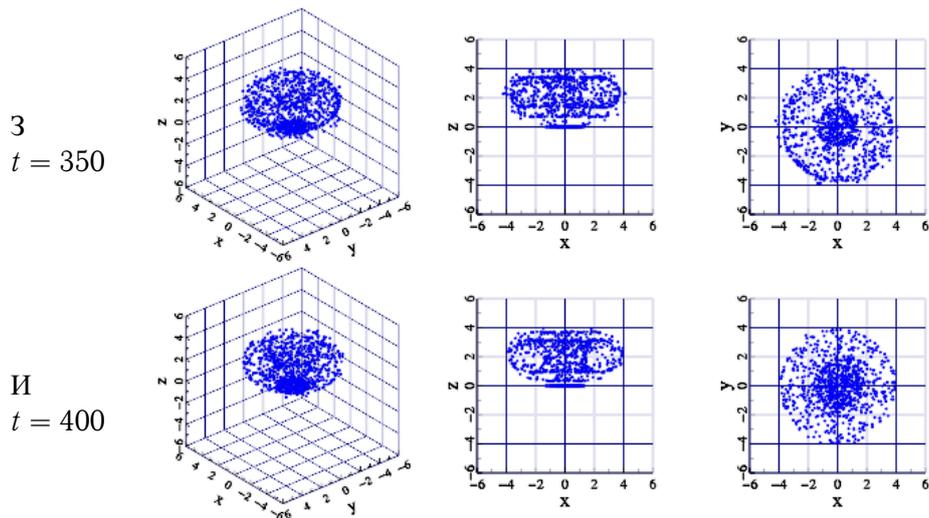


Рис. 8. Результаты моделирования движения примеси, $350 \leq t \leq 400$

```
Name_experiment1: test_img_naska
#Условия для времени
Start_time: 0.0
End_time: 400.0
Step_time: 0.01
N_time: 40001
#Количество точек
#Если 0 то одно кол-во точек для каждого цвета
#Если 1 разное кол то точек для каждого цвета
all_type: 1
#Если 0 то отсюда считаем количество типов точек
#Если 1 то отсюда считаем количество типов и сразу кол кол точек
num_type_point: 2
1000 1000
#Если 0 то одно КОЛВО ТОЧЕК ЧИТАЕМ ОТСЮДА
num_point: 644
#Тип расположения начальных точек
type_pi: 1
#Тип правой части
type_gr: 1
#Сохраняем каждый X шаг по времени
Time_save: 100
#Строим каждую X картинку по времени
Time_save_img: 1
#Гравитация одна для всего эксперимента отключить 0.0
Graviton_value: 0.0005
#Вязкость
Num_viscosity: 1
0.05
Lamda: 1
#####
#Для СУПЕРПОЗИЦИИ
super_Ak: 1
1 2 -1
ak: 1
0.707106
bk: 1
0.707106
zk: 1
0
```

Рис. 9. Файл конфигурации для 2-го теста

ЛИТЕРАТУРА

1. Демидович Б. П., Марон И. А., Шувалова Э. З. *Численные методы анализа*. 3-е изд. М.: Наука; 1967. 368 с.
2. Ильина В. А., Силаев П. К. Численные методы для физиков-теоретиков. Ч. 2. М.–Ижевск: Институт компьютерных исследований; 2004. 118 с.
3. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. М.: Лаборатория Базовых Знаний; 2001. 630 с.
4. *OpenMP*. Режим доступа: <https://www.openmp.org/>.
5. *MathGL*. Режим доступа: https://mathgl.sourceforge.net/doc_ru/Main.html.
6. Галкин В. А., Смородинов А. Д., Моргун Д. А. Решение уравнения Навье–Стокса для сталкивающихся потоков. *Успехи кибернетики*. 2023;4(2):8–15. DOI: 10.51790/2712-9942-2023-4-2-01.
7. Галкин В. А., Дубовик А. О. Об одном классе точных решений системы уравнений Навье–Стокса для несжимаемой жидкости. *Математическое моделирование*. 2023;35(8):3–13.