Інститут проблем математичних машин та систем НАН України

Difference Scheme TESTing (DSTEST) - навчальна бібліотека чисельних методів розв’язання рівняння адвективно-дифузійного переносу

Керівництво користувача

(версія: xx.2018)

Автори:

Ківва С.Л., Майстренко С.Я., Донцов-Загреба Т.О., Ковалець І.В.

м. Київ - 2018

Резюме

Розглядається актуальна задача комп'ютерного моделювання навколишнього середовища та пропонується вебсервіс для навчання студентів та аспірантів сучасним чисельним схемам розв'язання рівняння адвективно-дифузійного транспорту. Вебсервіс створено на базі програмного коду, що реалізує бібліотеку Difference Scheme TESTing (DSTEST). Реалізовані в системі чисельні схеми описані у звіті *Ківва С.Л. Чисельні методи розв'язання рівняння адвективно-дифузійного переносу: приклади схем та їх тестування. К.: ІПММС НАН України, 2017 р*, [1]. Бібліотека дозволяє отримувати розв'язки з використанням сучасних чисельних схем для різних початкових умов, різних полів швидкості, що, у свою чергу, дозволяє порівнювати нові схеми, які розробляються за найкращими сучасними аналогами при ідентичних умовах розрахунку. Використання сучасних вебтехнологій забезпечує такі важливі властивості сучасних інформаційних систем, як розподіленість, мультиплатформеність та доступ через Інтернет. Система розроблена з використанням вільного програмного забезпечення. Планується подальший розвиток створеного вебсервісу для виконання розрахунків у хмарній інфраструктурі.

Зміст

Резюме 2

Огляд бібліотеки 3

Реєстрація та авторизація в системі 7

Головне вікно системи 9

Журнал проведених розрахунків користувача 11

Видалення з журналу розрахунків, що втратили актуальність 21

Посилання 22

Огляд бібліотеки

Одним з найбільш важливих напрямків розвитку комп'ютерного моделювання в прикладних дослідженнях є підвищення швидкодії та точності чисельних методів розв'язання математичних моделей навколишнього середовища. Наприклад, у моделюванні повітряного та водного середовища однією з найбільш важливих задач є розв'язання адвективно-дифузійного рівняння, яке описує транспорт речовин. У середині минулого сторіччя С.К. Годунов показав, що для рівняння переносу не існує лінійної та монотонної схеми розв'язку, що має порядок апроксимації адвективного оператору вище першого. З того часу продовжується розробка ітераційних (нелінійних) схем розв'язання таких рівнянь, які поєднують високу точність з монотонністю розв'язків. Однак, досі не існує схеми, яка б однаково добре працювала для задач різної розмірності, лінійних та нелінійних рівнянь, забезпечувала усі вимоги консервативності, була достатньо швидкодійною. Тому в даній галузі тривають активні дослідження. За останні 10 років тільки видавництвом Elsevier було опубліковано понад 5000 статей на тему розробки схем адвективно-дифузійного транспорту.

Навчання студентів сучасним методам моделювання навколишнього середовища також потребує координації щодо реалізації, тестування та порівняння чисельних схем і зручного доступу до обчислювальних ресурсів. Групою дослідників ІПММС проведена попередня робота з інтегрування математичних моделей навколишнього середовища у ряді вебсистем, розроблено вебсервіс прогнозування погоди на детальних сітках для довільної області на території Земної кулі [2, 3]. У даному керівництві представлений вебсервіс, розроблений на основі програмного коду **Difference Scheme TESTing (DSTEST)** [1] для дослідження, тестування та порівняння чисельних схем розв'язання рівнянь математичних моделей навколишнього середовища на основі розв'язання модельних задач адвективно-дифузійного перенесення.

Основні етапи створення навчально-дослідної грід-платформи

При створенні навчально-дослідної грід-платформи для дослідження та тестування нових чисельних методів, що застосовуються в задачах моделювання навколишнього середовища необхідно виконати наступні завдання:

1. Провести планування модельних задач, у першу чергу для рівняння адвективно-дифузійного перенесення та, можливо, й інших;
2. Сформулювати вимоги та протоколи введення/виведення даних для майбутніх розробників, що стосуються:
   - початкових, граничних умов, параметрів сіток, параметрів виведення, деяких керуючих параметрів, які задаються в уніфікованому форматі, визначеному для даної платформи;
   - уніфікованого формату та параметрів для виведення результатів;
   - вимог щодо використання певних бібліотек лінійної алгебри;
   - вимог стосовно мови програмування для реалізації (C/C ++, Fortran) та компіляторів;
   - вимог стосовно документації методу;
3. Створити початкову версію платформи (програмна реалізація декількох методів та тестування кейзів, що відповідають модельним задачам);

4. Залучити сторонніх користувачів та фахівців для початкового тестування і наповнення платформи та корегувати платформу з урахуванням досвіду такої роботи, отриманих коментарів та зауважень.

Архітектура вебдодатку

При проектуванні вебдодатку вирішувались такі завдання, як вибір архітектури, проектування бази даних, вибір стеку технологій та ін.

Даний вебсеріс реалізовано з використанням архітектури клієнт-сервер, включає вебвузли з інтерактивним інформаційним наповненням, що взаємодіють з базою даних, з одного боку, і з клієнтом - з іншого, функціонуючи в даному проекті за допомогою технологій Java та PHP.

Переваги використання таких сучасних мов програмування, як Java та PHP у сфері веброзробок і, відповідно, сумісних з ними технологій і стандартів досить істотні. Так, Java визначається її об'єктно-орієнтованою моделлю, розвинутими засобами створення додатків, мобільністю коду, і найголовніше, багатоплатформеністю Java-програм [4]. Java-кросплатформна мова на рівні виконання, тобто її виконувані файли можна запускати на різних платформах без попередньої перекомпіляції; PHP - кросплатформна мова, що інтерпретується, її інтерпретатори існують для багатьох платформ. Слід зазначити, що PHP - скриптова мова програмування загального призначення, інтенсивно застосовується для розробки вебдодатків. У даний час підтримується більшістю хостинг-провайдерів і є однією з лідерів серед мов програмування, що застосовуються для створення динамічних вебсайтів.

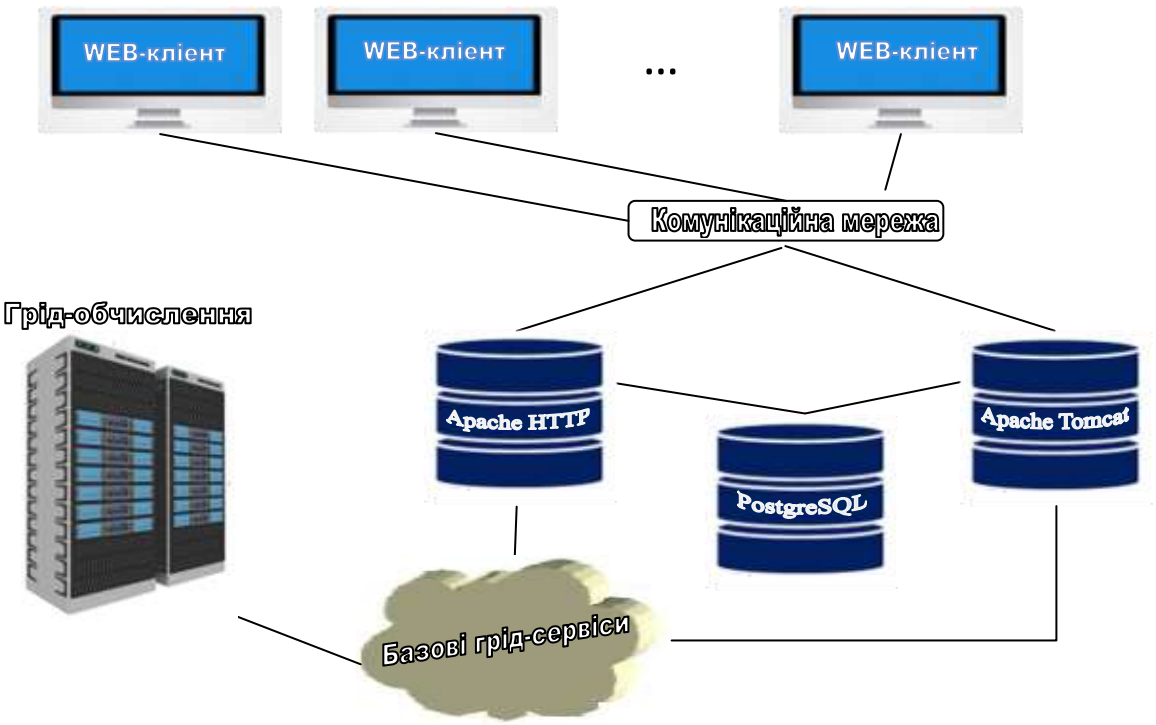


Рисунок 1 – Архітектура грід-платформи

У якості середовища розробки клієнтської частини обрано Notepad++, для серверної частини обрано IntelliJ IDEA [5]. Ці середовища розробки доповнюються плагінами, що робить їх потужними та доступними інструментами для розробки потрібного функціоналу. Зокрема, вибір саме IntelliJ IDEA був пов'язаний з необхідністю підтримки Java EE (jsp, servlets).

Вебсервер реалізовано як поєднання Apache HTTP Server [6], що генерує статичний і динамічний контент та є надійним і швидким HTTP-сервером, і Apache Tomcat [7], оскільки звичайний сервер Apache HTTP не підтримує технології Java-сервлетів. Крім того, проведені дослідження показали, що використання серверу Apache Tomcat для статичних вебсторінок менш ефективне, ніж Apache HTTP .

Отже, модель Apache HTTP Server + Apache Tomcat дозволяє нам отримати переваги від обох серверних компонент, що шляхом компенсації слабких сторін одного сильними сторонами іншого підвищує загальну продуктивність і швидкодію. Архітектура системи схематично наведена на рис.1. Усі описані засоби дозволяють зробити систему відносно дешевою, надійною та кросплатформенною.

Інтерфейс користувача вебсервісу

Для проведення розрахунку користувач повинен задати необхідні параметри для проведення розрахунків [1]: тип схеми розв'язку (монотонна та центрально-спрямована схеми першого і другого порядку апроксимації за часом та метод частинок); тип початкової умови (циліндр, конус, пагорб); тип умов швидкості (обертання, деформація); розмір сітки (100x100, 200x200, 300x300, 400x400); проміжок часу моделювання та проміжок часу виведення результатів.

Початковий та кінцевий моменти розрахунку будуть присутні обов'язково. Крім того, користувач може задати до 5 проміжних моментів часу, на які буде виконуватись розрахунок.

Інформація стосовно проведених користувачем розрахунків зберігається в журналі БД і може використовуватись для перегляду результатів прогнозування за вимогою.

Для проведених розрахунків у вебсервісі присутня можливість перегляду результатів у вигляді: схеми швидкості обертання (рис.2); ізолінії та ізоповерхні.

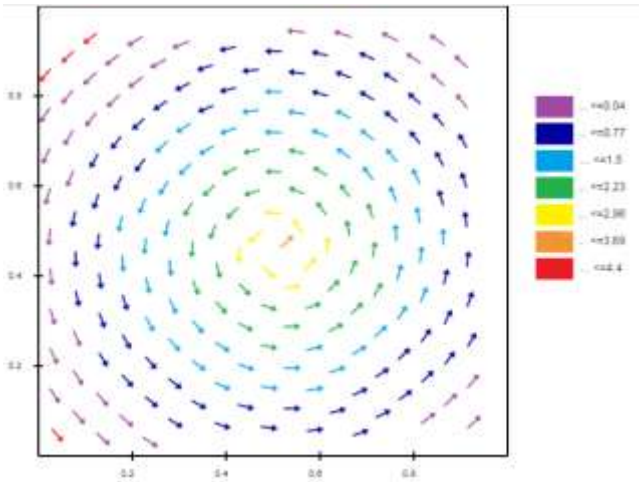


Рисунок 2 – Швидкість обертання

Для забезпечення можливості порівняння результатів на різні моменти часу, градація виконується відповідно до значення максимальної концентрації для всіх моментів розрахунку. На рис. 3 наведено результат розрахунку для монотонної схеми розв'язку, умов швидкості обертання, початкової умови у формі циліндра, розміру сітки 100x100 на початковий та кінцевий моменти.

При необхідності дані, для яких виконано візуалізацію, можуть бути експортовані в файли формату XLSX/TXT.

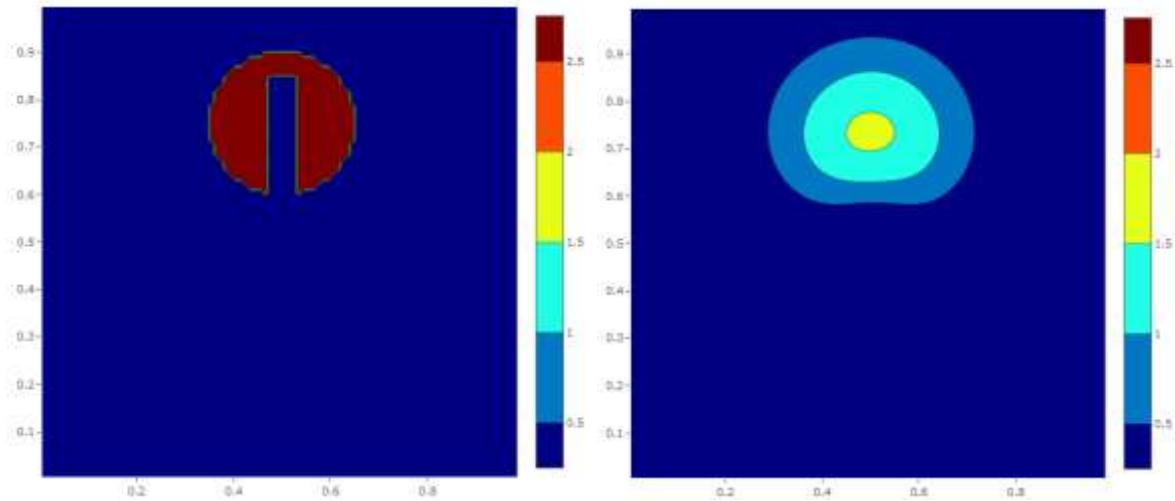


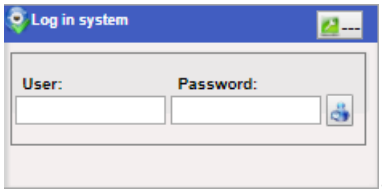
Рисунок 3 – Візуалізація результатів розрахунку для різних моментів часу: зліва – початкові умови; справа – результати після одного періоду обертання (T=1.0 с)

Реєстрація та авторизація в системі

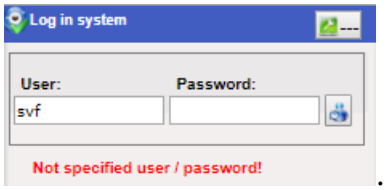
Для авторизації в системі попередньо необхідно зареєструватись. Для цього у вікні авторизації натиснути кнопку та , заповнивши поля, натиснути кнопку .

.

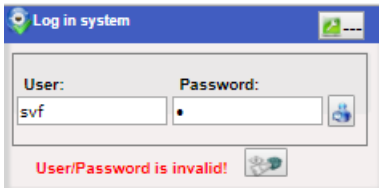
Отримавши підтвердження надання прав на користування системою, користувач може авторизуватись у системі для подальшої роботи:



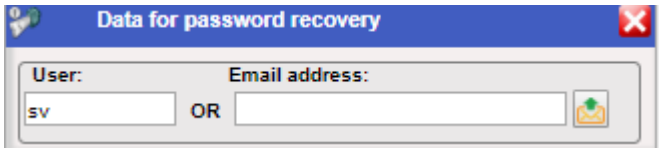
Якщо користувач не заповнить поля для авторизації, у вікні з'явиться повідомлення:



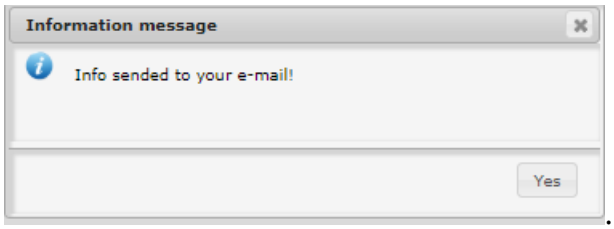
Якщо користувач невірно заповнить поля для авторизації, у вікні з'явиться повідомлення та кнопка для змінення паролю у разі потреби :



Натиснувши кнопку , у наступному вікні необхідно заповнити одне з двох полів та натиснути :

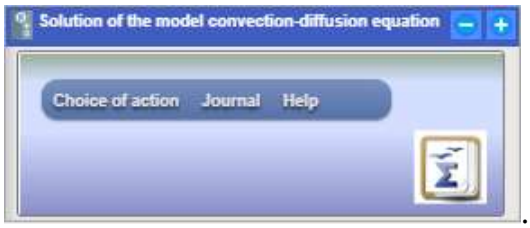


Буде видано повідомлення:



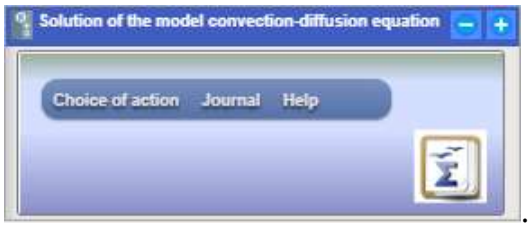
Після натисканні на посилання у повідомленні на екран буде завантажено вікно для вводу нового паролю.

Після авторизації на екрані з'являється головне вікно системи:



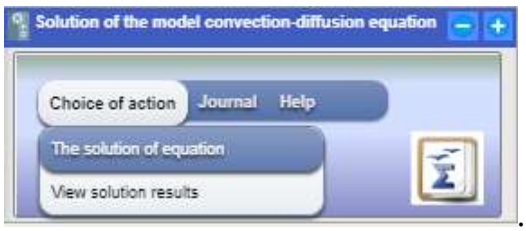
Головне вікно системи

Головне вікно містить меню для визначення дій користувача.



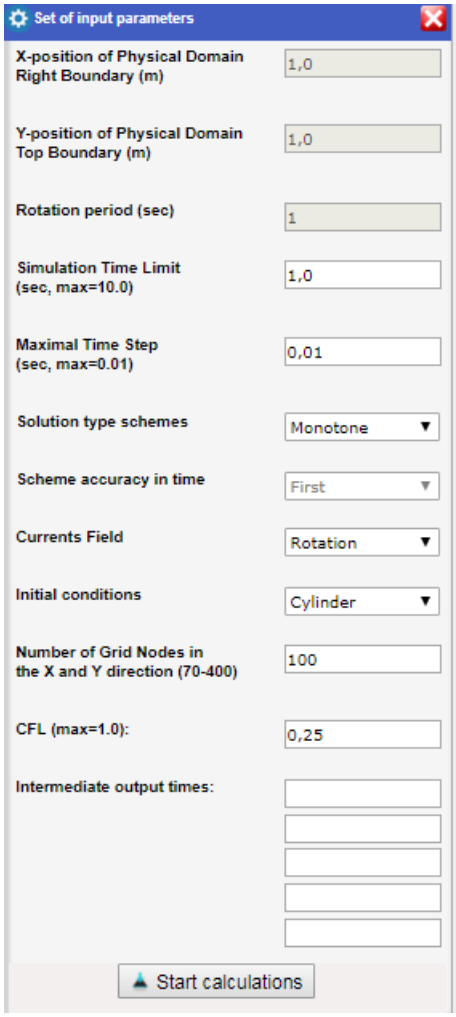
.

Для виконання нового розрахунку необхідно вибрати пункт меню « **The solution of equation**»

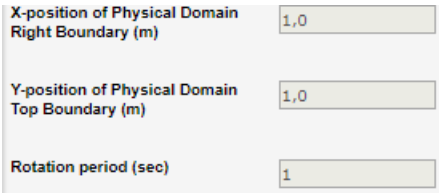


.

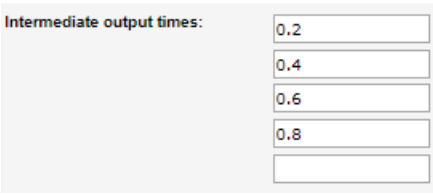
У наступному вікні необхідно задати параметри для проведення розрахунків:

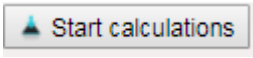


Інформаційні поля без права змінення надають користувачу інформацію про стаціонарні параметри системи:

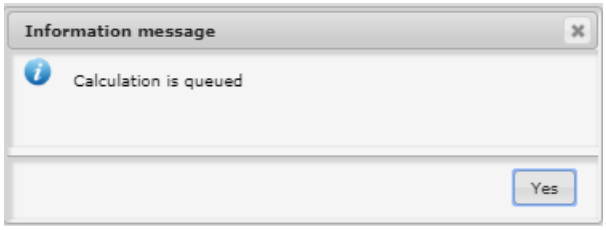


Початковий та кінцевий моменти розрахунку будуть присутні обов’язково. Крім того, у полях для вводу «**Intermediate output times**» користувач може задати до 5 проміжних моментів часу, на які буде видаватись інформація (значення полів не можуть перевищувати значення поля «**Simulation Time Limit**» та повинні містити значення у порядку збільшення):



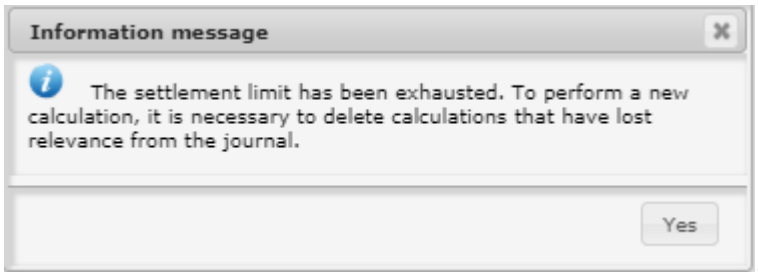
Після вибору параметрів та натискання кнопки 

, на екрані буде видано повідомлення



.

Зауваження: оскільки збереження одного розрахунку в БД вимагає значних ресурсів, у системі введено обмеження:



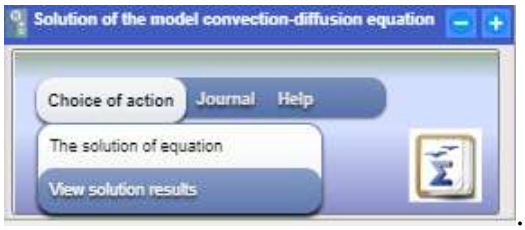
.

Для проведення нового розрахунку спочатку необхідно видалити з журналу розрахунки, що втратили актуальність (пункт меню **«Journal»**).

Журнал проведених розрахунків користувача

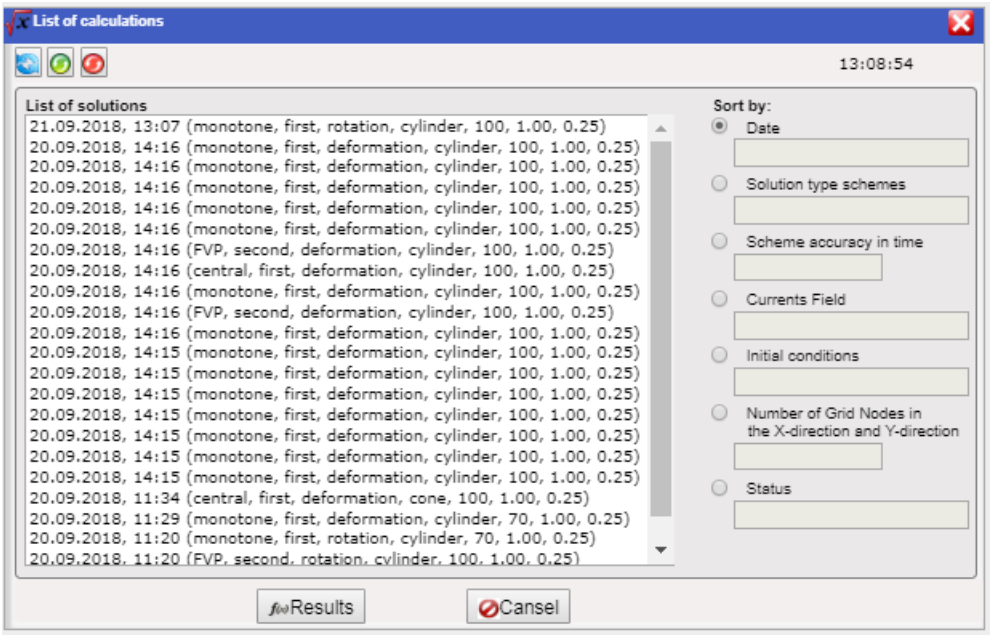
Інформація стосовно проведених користувачем розрахунків зберігається в журналі БД і може використовуватись для перегляду результатів прогнозування.

Для перегляду виконаних розрахунків необхідно застосувати пункт меню «**View solution results**»:



.

На екрані з’явиться вікно з переліком розрахунків:



.

У вікні з переліком розрахунків користувача можна відслідковувати статус виконання розрахунку.

Для цього можна скористатись кнопкою для разового оновлення переліку. Або ініціювати періодичне оновлення за допомогою кнопки . Для припинення періодичного оновлення переліку необхідно натиснути кнопку .

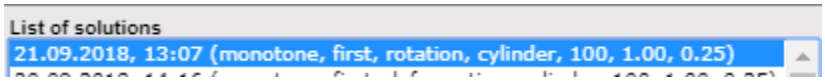
Можливі статуси виконання прогнозу:

- в черзі;
- виконано;
- неможливо.

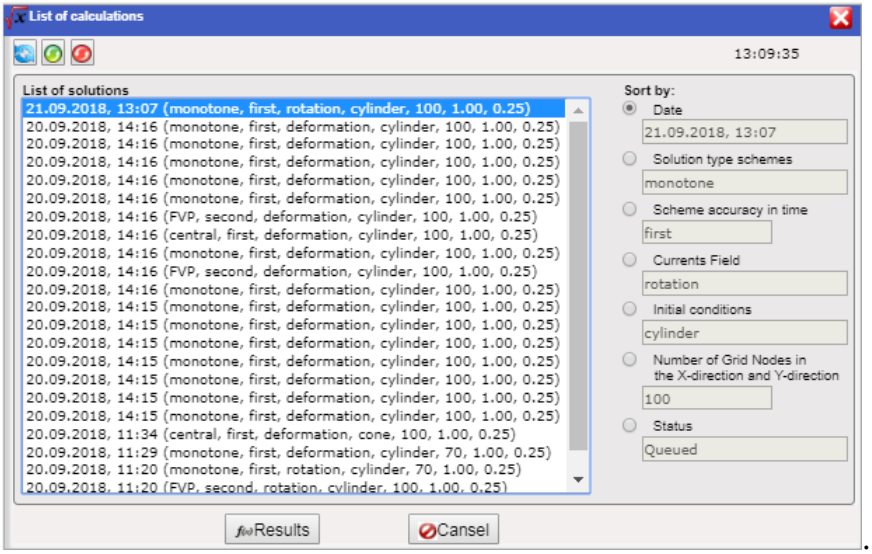
Для сортування розрахунків призначена панель:

.

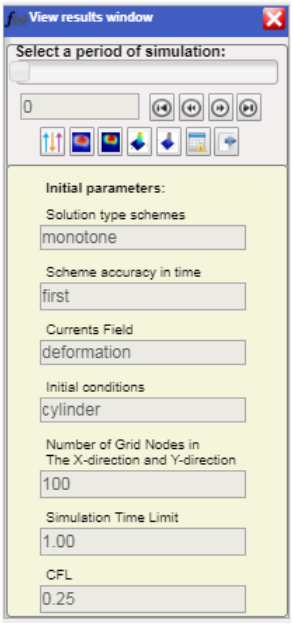
Кожний рядок переліку містить інформацію про дату ініціювання розрахунку, Solution type schemes, Scheme accuracy in time, Currents Field, Number of Grid Nodes in the X and Y direction, Simulation Time Limit, коефіцієнт CFL:



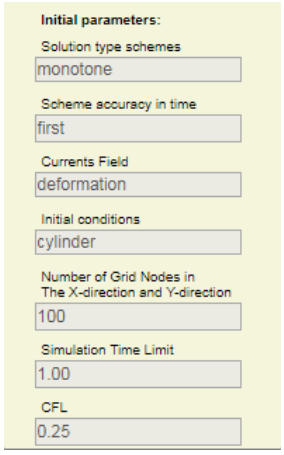
У разі успішного виконання розрахунок отримає статус «**Виконано**». Після цього користувач може переглянути результати отриманого розрахунку на екрані. Для цього необхідно вибрати з переліку потрібний розрахунок та натиснути кнопку Results:

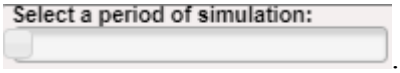


На екрані з’явиться вікно для перегляду результатів розрахунку:



У нижній частині вікна відображаються параметри, вибрані користувачем для проведення розрахунку:



Для перегляду результатів необхідно вибрати момент розрахунку за допомогою слайдера: 

. Використовуючи або кнопки вибору .

- на початковий момент розрахунку.

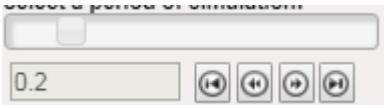
- на попередній момент розрахунку з переліку моментів.

- на наступний момент розрахунку з переліку моментів.

- на останній момент розрахунку з переліку моментів.

Вибраний момент часу буде відображено в полі

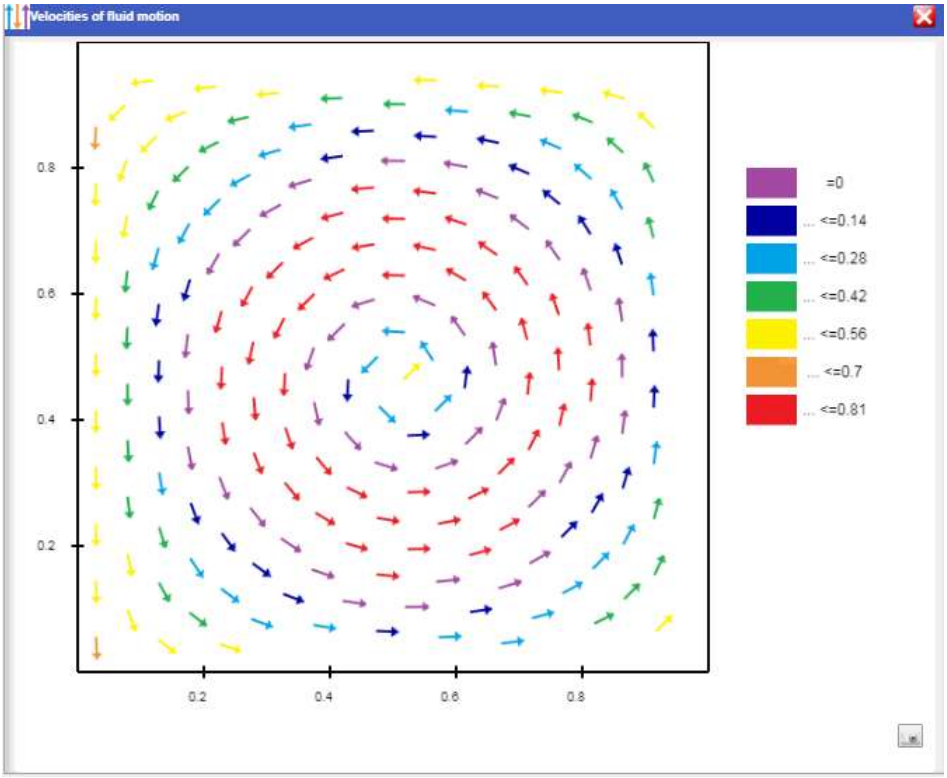
:



Для візуалізації результатів на вибраний момент використовуються кнопки:

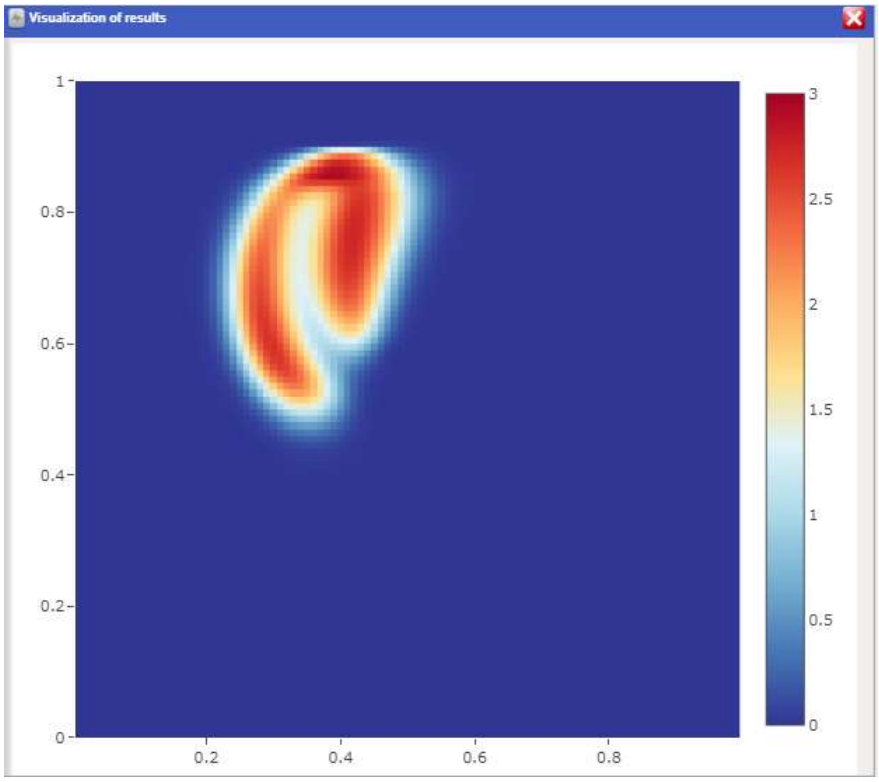
.

- "Velocities of fluid motion":



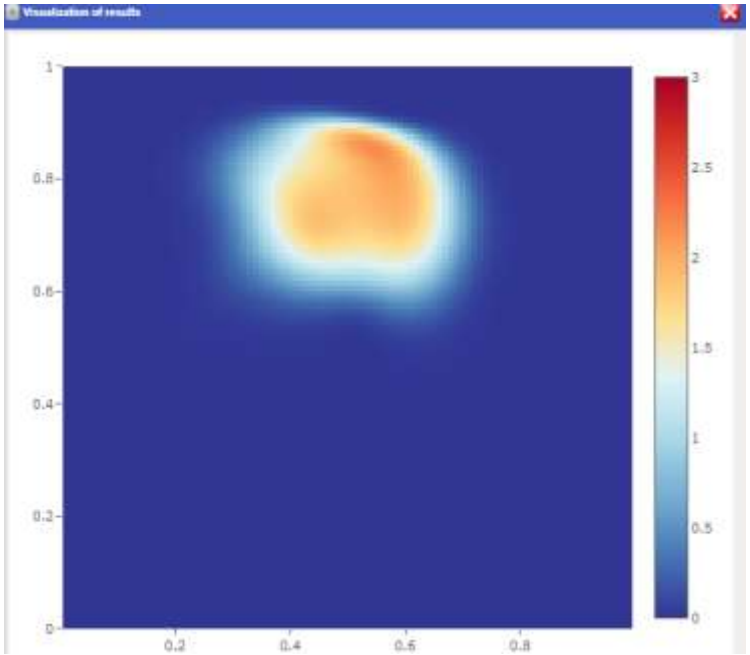
Для збереження результату у файл формату png необхідно використати кнопку: .

- "Build Heatmap":



.

Зауваження: градація виконується відповідно до значення максимальної концентрації для всіх моментів розрахунку для забезпечення можливості порівняння результатів на різні моменти часу. Наприклад, для моменту 1.0:

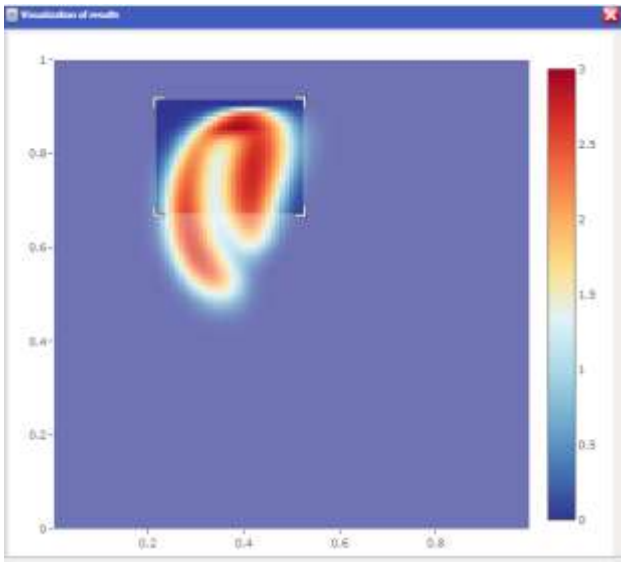


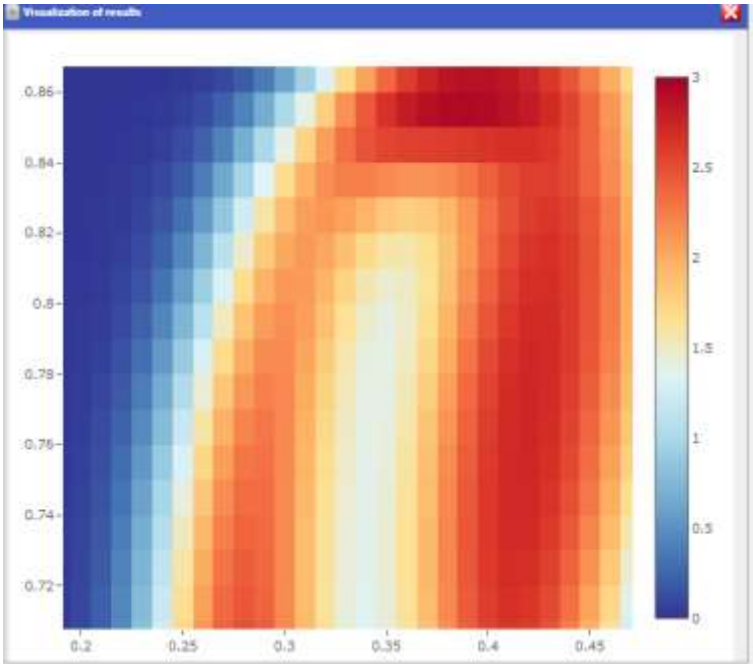
При наведенні маркера миші в верхній правий кут вікна буде відображено панель кнопок для додаткової функціональності:

. Наприклад, для збереження результату у файл формату png необхідно використати кнопку «Download plot as a png»:

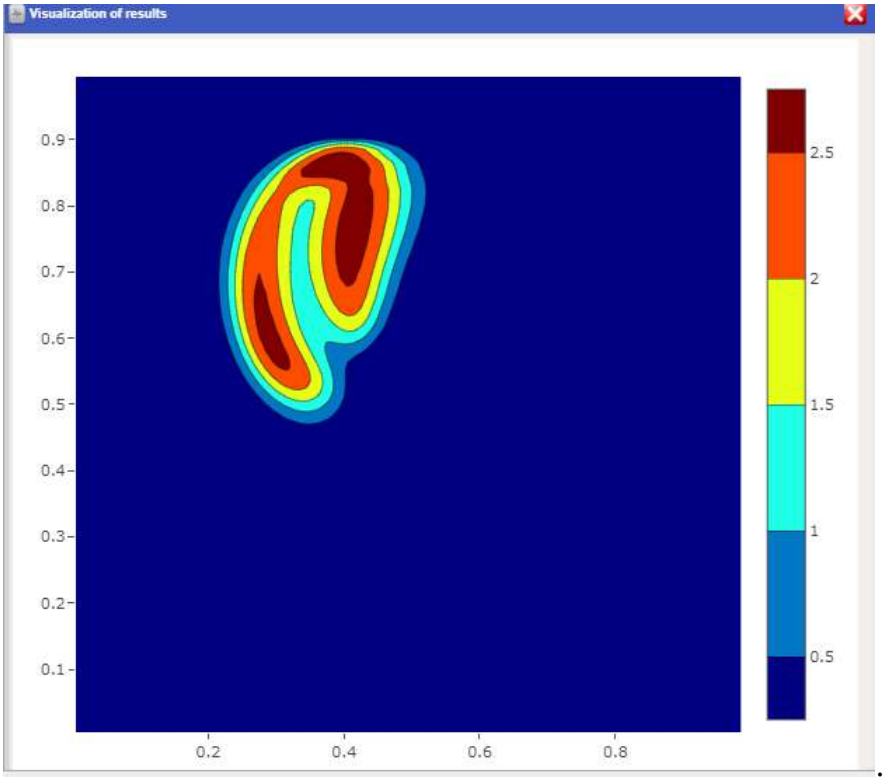
.

Також можна збільшити зображення для конкретної вибраної області та ін.:

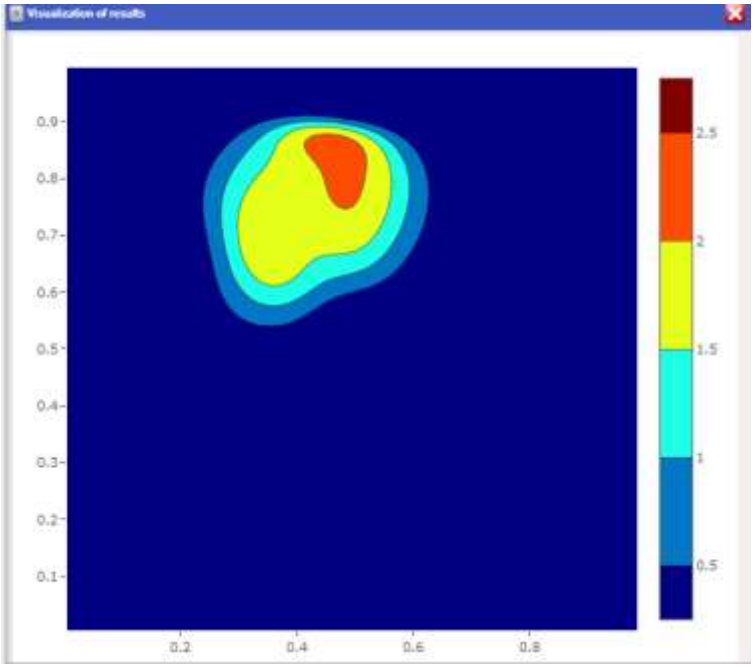


Результат збільшення: 

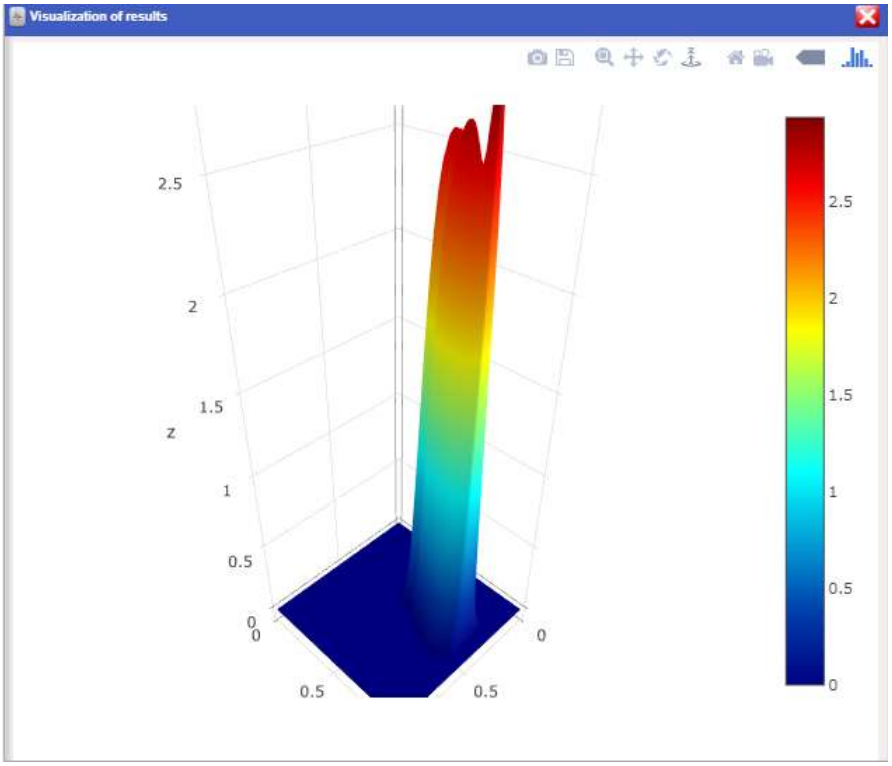
Для наступних типів відображення результатів також присутня можливість, аналогічна до .

-"Build isolines": 
.

Зауваження: градація ізоліній виконується відповідно до значення максимальної концентрації для всіх моментів розрахунку для забезпечення можливості порівняння результатів на різні моменти часу. Наприклад, для моменту 0.9:



-"Build 3D mash plots":



-"Simulation errors in the table":

N	imbalance	h_{min}	h_{max}	$L^{\infty}error$	$n(L^{\infty})$	L^1error	$n(L^1)$	L^2error	$n(L^2)$
100		0.0	2.1807705003187[illegible]	2.3441854220374[illegible]		0.15953408992[illegible]		0.43203371[illegible]	

-"Export data":

Data export

X	Y	Concentration	X-direction Flow Velocity	Y-direction Flow Velocity
0.005	0.005	0	0.00001	-0.00001
0.015	0.005	0	0.00007	-0.00002
0.025	0.005	0	0.00019	-0.00004
0.035	0.005	0	0.00038	-0.00005
0.045	0.005	0	0.00062	-0.00007
0.055	0.005	0	0.00093	-0.00008
0.065	0.005	0	0.00129	-0.0001
0.075	0.005	0	0.00171	-0.00011
0.085	0.005	0	0.00219	-0.00013
0.095	0.005	0	0.00272	-0.00014
0.105	0.005	0	0.0033	-0.00015
0.115	0.005	0	0.00392	-0.00016
0.125	0.005	0	0.0046	-0.00017
0.135	0.005	0	0.00532	-0.00019
0.145	0.005	0	0.00608	-0.00019
0.155	0.005	0	0.00688	-0.0002
0.165	0.005	0	0.00771	-0.00021
0.175	0.005	0	0.00858	-0.00022
0.185	0.005	0	0.00947	-0.00023
0.195	0.005	0	0.01039	-0.00023

Pages: 1 2 3 4 5 ... Next Last 1 of 500

Export to XLSX Export to TXT

При виборі однієї з колонок заголовку можна відсортувати таблицю у прямому та зворотному порядку:

Data export

X	Y	Concentration	X-direction Flow Velocity	Y-direction Flow Velocity
0.005	0.015	0	0.00002	-0.00006
0.005	0.005	0	0.00001	-0.00001
0.005	0.985	0	-0.00002	-0.00006

Для експорту даних у файл формату XLSX: Export to XLSX.

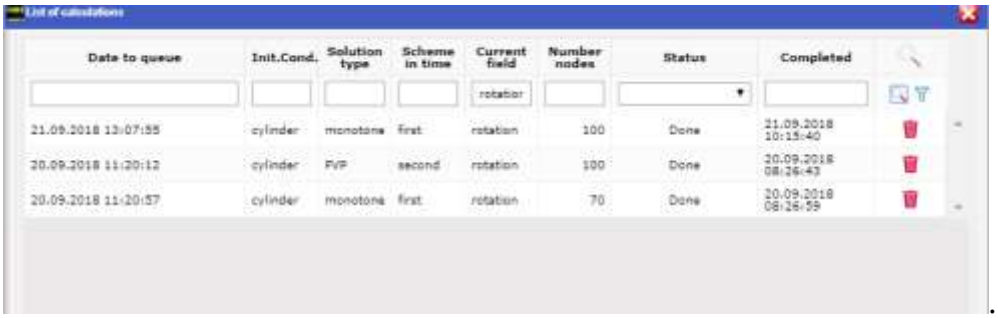
Для експорту даних у файл формату TXT: Export to TXT.

Видалення з журналу розрахунків, що втратили актуальність

Для видалення з бази даних розрахунків, що втратили актуальність необхідно застосувати пункт меню **«Journal»**:

Для пошуку розрахунку можна використати поля, наприклад,

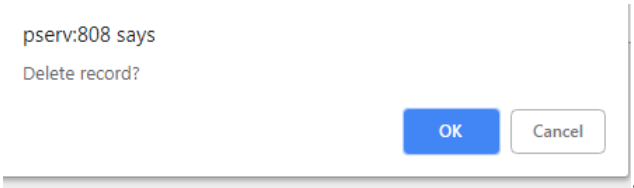
та натиснути . У вікні буде відображено результати фільтрації:



.

Для видалення розрахунку необхідно вибрати даний розрахунок із переліку та натиснути кнопку .

При приборі **«Ok»** розрахунок буде видалено з БД:



.

Посилання

1. Ківвa С.Л. (2017) Чисельні методи розв’язання рівняння адвективно-дифузійного переносу: приклади схем та їх тестування // К.:ІПММС НАН України, 2017.
2. Майстренко С.Я. , Ковалець І.В., Беспалов В.П. ,Загреба Т.О. , Хурцилава К.В. (2016) Прототипна версія системи «Повітря» для розрахунку зон уражень внаслідок викидів небезпечних речовин в атмосферу на основі використання скринінгових моделей та Web-технологій // Математичні машини і системи. – 2016. – № 4. – С. 33 – 41.
3. Ковалець І.В., Майстренко С.Н, Загреба Т.О., Полонський О.О., Хурцилава К.В. "Веб-система прогнозування метеорологічних умов для довільної території на детальних сітках" // Математичні машини та системи. – 2018. - №1.
4. Герберт Шилдт Java 8. Полное руководство: Вильямс. - 2016. - 1376 с.
5. Руководство пользователя IntelliJ IDEA. Основы и установка [Електронний ресурс]. – Режим доступу: https://javarush.ru/groups/posts/734-rukovodstvo-poljhzovatelja-intellij-idea-osnovih-i-ustanovka.
6. The Apache HTTP Server Project [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://httpd.apache.org/.
7. Apache Tomcat [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://tomcat.apache.org/.