

Визуализация научных данных с применением интерполяционных методов и плагина NVIDIA IndeX в пакете ParaView

А.А. Горбач, М.А. Бутенко

Волгоградский государственный университет

Аннотация: В работе представлено решение проблемы ускорения процесса визуализации результатов численного моделирования. Объемы таких данных могут быть весьма велики и разработка средств, позволяющих ускорить процесс анализа результатов моделирования, является актуальной задачей. В данной статье предложено решение задачи, основанное на разработке комплекса программ, автоматизирующих процесс обработки однотипных научных данных большого объема для создания высококачественной визуализации результатов численного моделирования. Результаты приведены на примере решения задач астрофизики, но предложенная методика может быть достаточно легко применена и к другим предметным областям, в которых используются модели, основанные на динамике системы частиц.

Ключевые слова: Визуализация данных, триангуляция Делоне, ускорение визуализации, ParaView, NVIDIA IndeX, VTK.

Введение

В наши дни решение широкого круга задач невозможно без применения численного моделирования. Динамическое моделирование физических процессов с применением алгоритмов, реализованных на ЭВМ, производит большое количество однотипных данных, которые нуждаются в дальнейшей обработке и визуализации [1]. Рассмотрен формат VTK (Visualization Toolkit), который позволяет хранить различные виды данных, а также взаимодействовать с их выводом [2], так как файлы состояния моделируемой системы часто создаются в форматах удобных для хранения, но при этом ни одно из распространенных средств визуализации не может его прочитать. Формат VTK поддерживается многими широко распространенными платформами для моделирования (например, Palabos) и визуализации (например, ParaView и ParaViewWeb) [3]. Для визуализации данных используются такие математические методы, как: трансформация, фильтрация, интерполяция, спектральный анализ и прочие [4].

Как правило, любая математическая модель описывает реальный объект с некоторой степенью приближения [5]. Для сеточных методов

моделирования, примеры которых приведены в работах [6, 7], результаты могут быть отображены посредством довольно стандартных функций, которые реализованы во многих программах и библиотеках, используемых для визуализации данных. Иначе обстоят дела с бессеточными методами, результат работы которых представляет собой облако точек, обладающий рядом характеристик. К таким методам относятся, например, Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) [8] или результаты гравитационной динамики N тел [9]. Именно визуализации результатов моделирования такими методами посвящена эта работа.

Пакет для анализа и визуализации данных ParaView [10] предоставляет обширные возможности для интерполяции точечных данных. Реализовать ее можно как специальными фильтрами точечной интерполяции, так и с помощью триангуляции Делоне. Триангуляция Делоне достаточно широко используется, так как сводит ошибки интерполяции к минимуму [11].

Производить анализ результатов численного моделирования, не применяя средства ускорения и автоматизации, в текущих реалиях не представляется возможным. Компания NVIDIA совместно с Kitware разработала плагин NVIDIA IndeX для внедрения в ParaView [12], который задействует CUDA ядра графических процессоров NVIDIA, а также пиксельные шейдеры, доступные в Direct3D [13] и позволяет предоставить пользователю обширные возможности взаимодействия с визуализируемым объектом в реальном времени [14]. В работе показана эффективность применения плагина для визуализации интерполированных данных.

Процесс визуализации должен быть автоматизирован, насколько это возможно [15]. Учитывая, что для анализа используется набор однотипных данных, нет необходимости выставлять одни и те же настройки для каждого файла, содержащего разный временной срез, вручную. Можно существенно сэкономить время, организовав пакетную обработку данных и задавая все

необходимые параметры программными средствами. На выходе написанный скрипт создает анимированную визуализацию высокого качества.

Подготовка данных для визуализации в пакете ParaView. Разработка программы-конвертера

В работе использованы 2 набора файлов с одинаковой структурой. В одном наборе файлы имеют размер 9.79 МБайт, а в другом 49.53 МБайт. В рассмотренных файлах содержатся результаты двух различных моделирований астрофизических объектов. В рамках данной работы какой астрофизический объект моделируется не имеет значения, если в результате получается облако точек и набор их характеристик, как в методе SPH.

Данные из каждого файла описывают состояние газовой подсистемы моделей галактик в некоторый момент времени t , которые имеют скалярные и векторные характеристики. Значения из пунктов 3-6 в перечислении ниже представлены массивами, в которых содержится n элементов.

Файлы содержат следующие параметры систем:

1. n , переменная типа `int`. Содержит в себе количество точек с известной плотностью газа.

2. t , переменная типа `double`. Описывает момент расчетного времени.

3. $pos.x$, $pos.y$, $pos.z$, три переменных типа `double`. Описывают положение точки с известной плотностью газа.

4. $pos.w$, переменная типа `double`. Значение плотности в записанной ранее точке.

5. $vel.x$, $vel.y$, $vel.z$, три переменных типа `double`. Векторная величина, скорости движения частицы газа в трех различных направлениях.

Данные представлены в двоичном виде (формат `bin`), это позволяет обеспечить высокий уровень сжатия [16]. Такие файлы занимают меньше места в памяти компьютера. Их необходимо преобразовать в специальный формат для дальнейшей визуализации с использованием ParaView.

Структура *pos*, Position (позиция) содержит скалярные характеристики системы, а структура *vel*, Velocity (Скорость) содержит векторные величины и их атрибуты.

Эти данные необходимо преобразовать в файловый формат, который понятен ParaView. Основным форматом, с которым работает ParaView – это VTK. Файлы в формате VTK состоят из пяти основных частей, которые приведены на рис.1.

Версия	# vtk DataFile Version 5.0
Заголовок	Example 3D regular grid VTK file.
Формат	ASCII
Тип данных	DATASET UNSTRUCTURED_GRID
Атрибуты	POINTS 262144 float
	-59.9278 -5.96601 1.02955
	-59.3658 -3.90248 -1.77194

Рис. 1. – Структура файла формата VTK

В процессе описанной здесь работы создана программа на языке C++ для конвертации набора данных из описанных файлов бинарного формата. Конвертер может преобразовывать как один файл, так и некоторое множество однотипных файлов в заданном пользователем диапазоне. На рис.2 приведена блок-схема программы-конвертера.

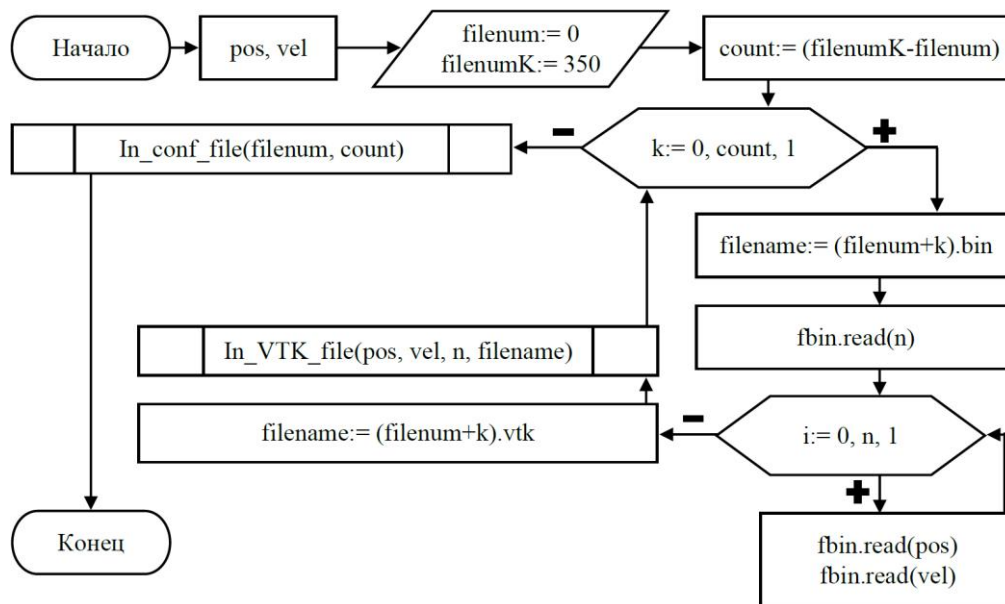


Рис. 2. Алгоритм работы программы, конвертирующей данные из бинарных файлов заданной структуры в файлы формата VTK

Применение фильтров точечной Volume интерполяции в пакете ParaView

Пакет визуализации ParaView предлагает 2 вида точечной интерполяции: алгоритм, который подходит для любых точечных данных, а также алгоритм интерполяции, который применим только для результатов SPH моделирования.

Интерполяция Volume в обоих случаях позволяет отобразить данные в объемном виде (в виде облака), воссоздавая отсутствующие значения в пространстве между точками. Примеры работы Point Volume Interpolator и SPH Point Volume Interpolator фильтров представлены на рис.3.

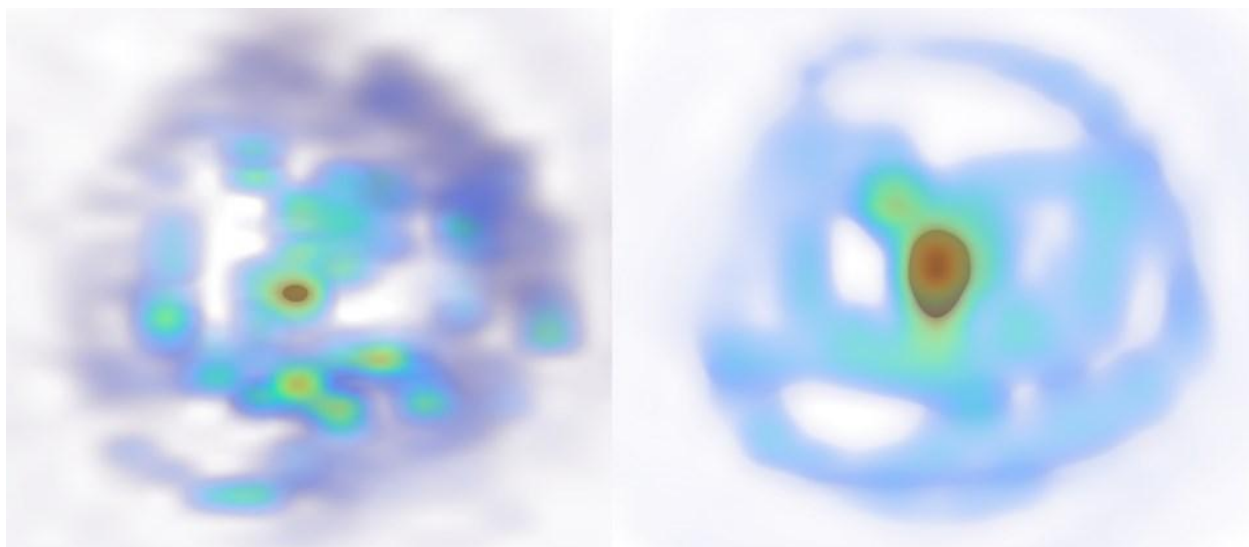


Рис. 3. Визуализация состояния модели газовой подсистемы галактики в некоторый момент расчетного времени t с использованием Point Volume Interpolator (слева) и SPH Point Volume Interpolator (справа) фильтров

Триангуляция Делоне создает сетку, в которой нет вершин внутри окружностей, описывающих треугольники сетки [17]. Описывающая окружность соединяет три вершины соответствующего треугольника [17]. Простой пример триангуляции Делоне приведен на рис.4, где сетка представлена фиолетовыми вершинами и ребрами, а описывающие окружности показаны зеленым. Эта сетка является сеткой Делоне, поскольку

вершины сетки не присутствуют внутри описывающих их окружностей. Понятие триангуляции Делоне является очень общим. Оно может быть обобщено на измерения более высокого порядка. Например, триангуляция Делоне в трех измерениях получается при замене треугольника на тетраэдр, круга на сферу и 2D-плоскости на 3D-пространство [18].

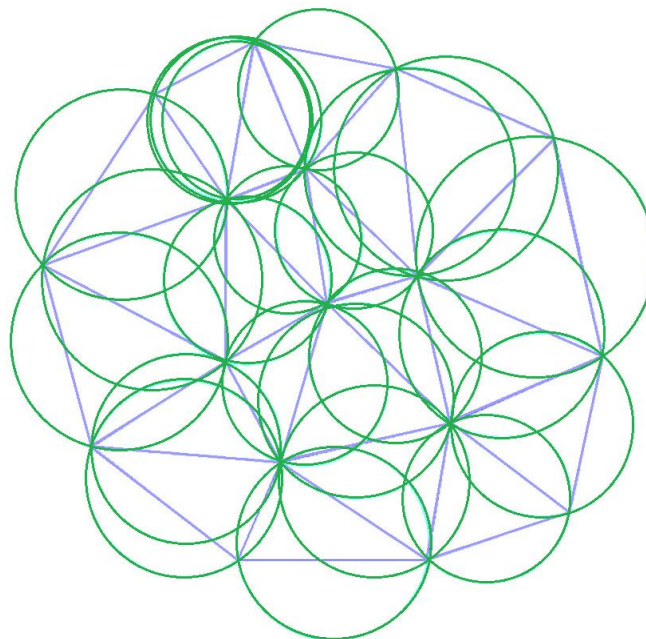


Рис. 4. Триангуляция Делоне для 17 точек

На рис.5 приведен пример применения фильтра Delaunay 3D для визуализации результатов численного моделирования для файлов меньшего размера. Модель представляет собой динамику спиральной галактики, газовая подсистема моделируется методом SPH. Можно отметить, что детализация данного метода интерполяции гораздо выше, чем детализация стандартных для ParaView методов.

Помимо высокой точности данного метода интерполяции точечных данных, метод триангуляции Делоне имеет низкую производительность, так как генерирует большое количество данных в отличие от других методов интерполяции (таблица 1). Интерполяция файла большего размера (49.53 Мбайт) производилась около 5 минут на ЭВМ со следующими аппаратными

характеристиками: CPU – AMD Ryzen 5800X3D, GPU – GeForce RTX 3070 Ti, ОЗУ – 32 Гбайт DDR4 3600 МГц. На выходе получен файл размером 467.95 Мбайт, что показывает увеличение объема данных почти на порядок. В таблице 1 приведены размеры исходных файлов и данных после интерполяции для сравнения.

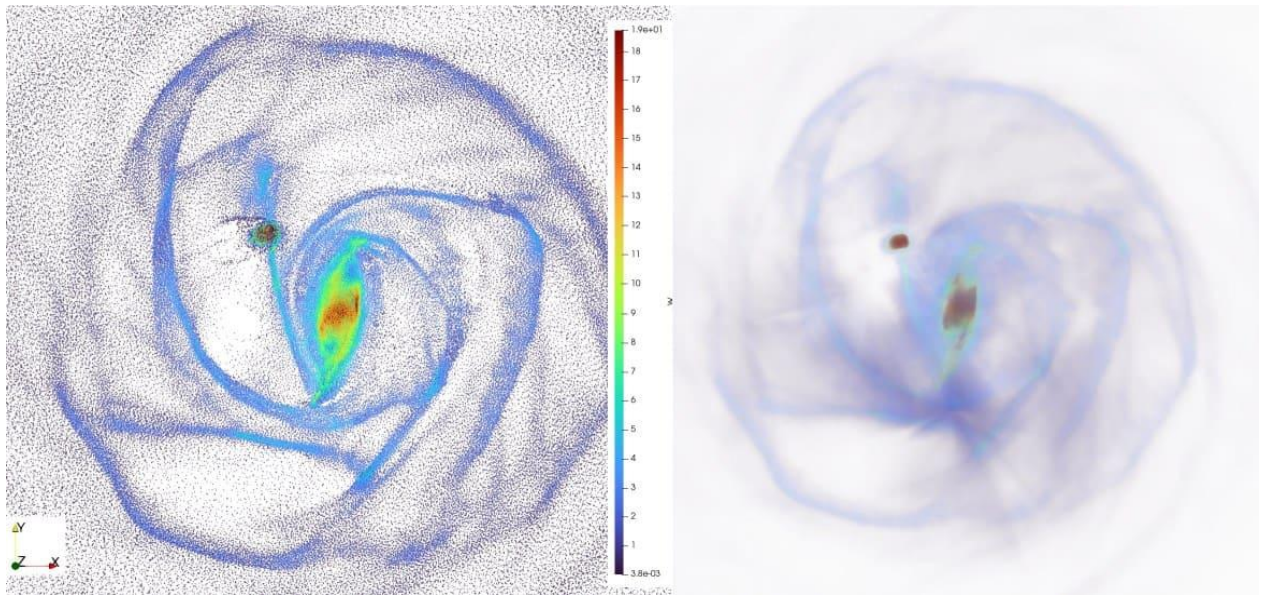


Рис. 5. Результаты трехмерного моделирования газовой подсистемы спиральной галактики в точечном представлении с произведенными настройками параметров отображения (слева) и представление NVIDIA IndeX для триангулированных данных (справа)

Таблица № 1

Размеры файлов с исходными данными и с интерполированными данными

	Файл большого размера, МБ	Файл малого размера, МБ
Исходный VTK файл	49.53	9.79
PointVolumeInterpolator	20.12	24.15
SPHPointVolumeInterpolator	24.15	28.17
Delaunay3D	467.95	82.80

Использование плагина NVIDIA IndeX для ускорения визуализации

Плагин NVIDIA IndeX использует технологию CUDA, а также пиксельные шейдеры, доступные в Direct3D [13], позволяя повысить производительность на видеокартах от компании NVIDIA [12]. Плагин добавляет представление, схожее с представлением Volume, но имеет дополнительный функционал для повышения качества визуализации. На рис.6 продемонстрированы разные типы фильтрации (алгоритм, позволяющий отобразить модель с малым количеством шумов и с более качественным отображением), показана разница в цветовой интенсивности между Volume представлением и результатами, полученными с помощью плагина NVIDIA IndeX.

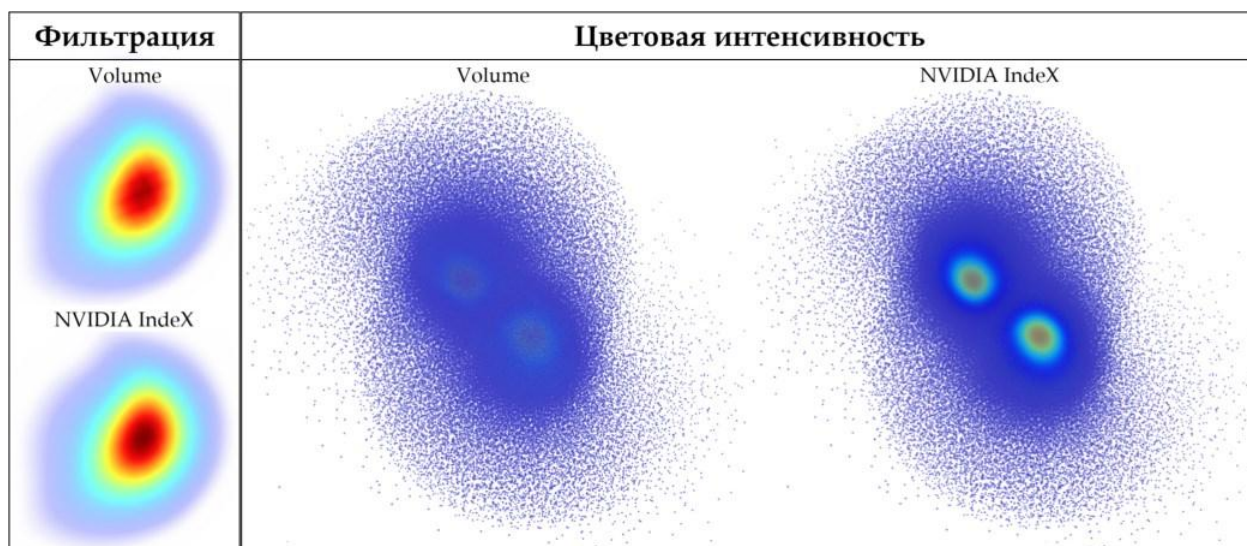


Рис. 6. Пример применения алгоритмов фильтрации и более высокая цветовая интенсивность с использованием плагина от NVIDIA

Отображение триангулированных данных в представлении Volume при условии понижения верхней границе цветовой шкалы происходит некорректно. Помимо этого, процесс происходит слишком медленно и приводит к зависаниям системы на несколько секунд. В отличии от стандартного Volume-представления, плагин от NVIDIA выполнил свою работу хорошо, пример результатов представлен на рис.8. Для автоматизации

процесса визуализации триангулированных данных создан скрипт, который подготавливает набор файлов графического формата для создания анимации, таким образом можно, например, вращая камеру, рассмотреть трехмерную модель с разных сторон, или отсекая части объекта, увидеть его внутреннюю структуру.

Был написан скрипт на языке Python, который создает 4 набора по 60 графических файлов: NVIDIA IndeX view (вращение камеры), NVIDIA IndeX clip (анимация отсечения), Volume view, Volume clip. Скрипт производит замеры время, которое уходит на создание анимации каждого вида. Диаграмма деятельности, описывающая алгоритм работы скрипта, приведена на рис.7.

Результаты визуализации большого файла для наборов NVIDIA IndeX view и NVIDIA IndeX clip представлены на рис.8. В изображенный момент времени на экране демонстрируется модель поведения частиц газа в космосе после столкновения множества сферических галактик со спиральной галактикой. Для отображения использован плагин NVIDIA IndeX. Первый графический файл (рис.8 слева) создан при помощи скрипта в процессе вращения камеры вокруг модели, второй графический файл (рис.8 справа) создан тем же скриптом при создании пошагового отсечения по оси Z средствами плагина от компании NVIDIA.

Анализ эффективности плагина NVIDIA IndeX для ускорения визуализации

Для анализа эффективности ускорения визуализация использовались два сценария: анализировалась производительность для модели с данными большего размера с использованием разных аппаратных платформ, и производилось сравнение производительности для моделей с большими и меньшими размерами выходных файлов на одной ЭВМ.

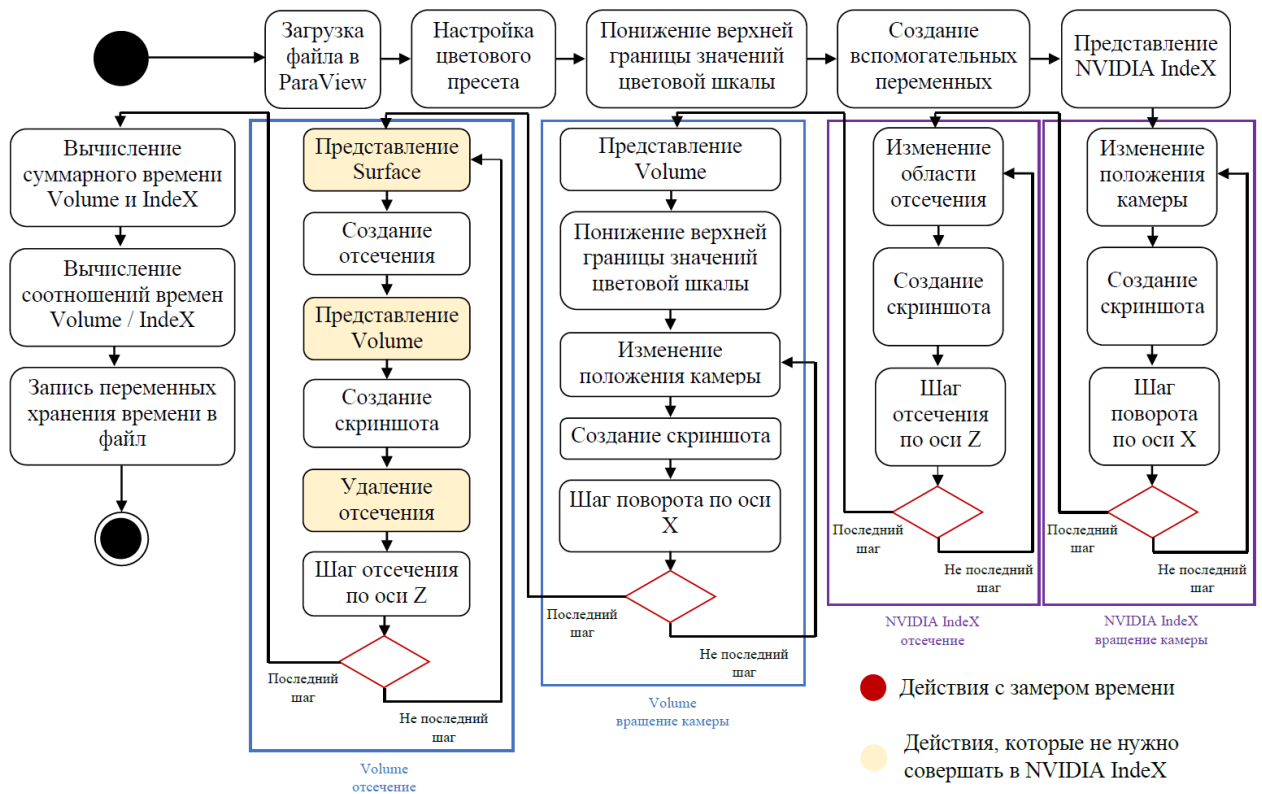


Рис. 7. UML-диаграмма деятельности скрипта для создания анимации

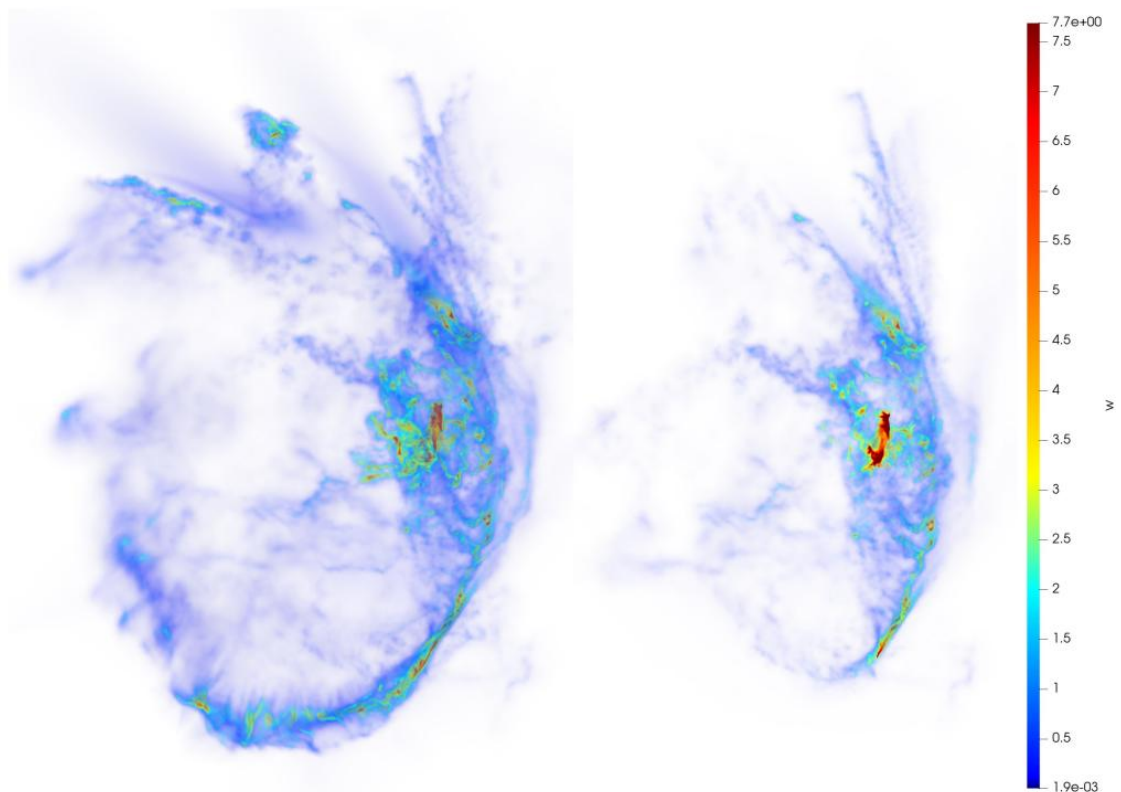


Рис. 8. Результат визуализации файла с расчетным временем t равным 43 для набора NVIDIA IndeX view (слева) и NVIDIA IndeX clip (справа)

Результаты замеров времени отрисовки файла большого размера приведены в таблице 2. Для сравнения производительности при замерах использованы 2 GPU: NVIDIA GeForce GTX 1070 и NVIDIA GeForce RTX 3070 Ti.

Таблица № 2

Результаты замеров времени для двух GPU: GTX 1070 и RTX 3070 Ti

		Volume, мин.	IndeX, мин.	Volume/IndeX
GTX 1070	View time	26.49	4.09	6.47
	Clip time	83.16	2.82	29.50
	Sum time	109.65	6.91	15.87
RTX 3070 Ti	View time	24.72	1.73	14.30
	Clip time	78.29	0.91	86.34
	Sum time	103.01	2.64	39.09

Анализ показал, что плагин NVIDIA IndeX значительно эффективней, чем Volume алгоритм как при вращении камеры, так и при создании отсечений. Оба GPU позволили сэкономить более часа времени и создали 120 файлов графического формата менее, чем за 10 минут.

Также имеет смысл оценить разницу затрат времени для двух GPU: RTX 3070 Ti показывает себя многократно производительнее более старой модели. На поворот камеры затрачено в 2.36 раза меньше времени, а на создание отсечений в 3.1 раза с использованием NVIDIA IndeX. Для представления Volume можно сделать обратный вывод, превосходство более мощной модели GPU на уровне погрешности (в пределах 5-10%). Результаты замеров указывают на эффективность технологии создания отсечений от компании NVIDIA, а также эффективность плагина в целом для ускорения визуализации для файлов большого размера.

Помимо файлов крупного размера, часто необходимо визуализировать файлы среднего и малого размера. В связи с этим, необходимо понимать целесообразность использования плагина NVIDIA IndeX в разных случаях.

Для сравнения производительности плагина при замерах использованы 2 ранее описанных файла: размер первого 467.95 МБайт, второго – 82.80 МБайт. Результаты замеров времени работы с использованием NVIDIA GeForce RTX 3070 Ti представлены в таблице 3.

Таблица № 3

Результаты замеров времени для двух файлов размерами 467.95 МБайт и 82.80 МБайт

		Volume, мин.	IndeX, мин.	Volume/IndeX
Файл 467.95 МБайт	View time	24.72	1.73	14.30
	Clip time	78.29	0.91	86.34
	Sum time	103.01	2.64	39.09
Файл 82.80 МБайт	View time	3.83	1.23	3.12
	Clip time	4.87	1.12	4.33
	Sum time	8.70	2.35	3.70

С учетом уменьшения размера файла почти в 6 раз без явного прироста скорости работы ParaView, можно сделать следующие выводы:

1. Плагин NVIDIA IndeX предназначен для работы с данными больших размеров. Наблюдается медленное снижение производительность при отрисовке. На создание анимации из набора файлов графического формата для малого файла с данными затрачено всего на 11% меньше времени.

2. Производительность стандартного Volume-представления падает очень быстро. При увеличении файла в 6 раз скорость отрисовки снижается почти на 92%.

Анализ результатов показал, что эффективность использования плагина растет с увеличением размера файла с обрабатываемыми данными нелинейно. При этом Volume-представление с определенного момента становится непригодным для анализа больших данных, хотя и неплохо справляется с небольшими файлами.

Литература

1. Koronen J., Hilden J. Data Visualization Handbook – Helsinki : Aalto University Foundation, 2019. – 352 p.
 2. Liu Z. A prototype framework for parallel visualization of large flow data // Advances in Engineering Software. – 2019. – Vol. 130. – P. 14-23.
 3. Oblak R., Bohak C., Marolt M. Web-Based Vascular Flow Simulation Visualization with Lossy Data Compression for Fast Transmission // Augmented Reality, Virtual Reality, and Computer Graphics. – Cham : Springer International Publishing, 2018. – Vol. 10851. – P. 3-17.
 4. Боргоякова Т.Г., Лозицкая Е.В. Системный анализ и математическое моделирование // Инженерный вестник Дона, 2018, №1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2018/4763/.
 5. Шаповалов В.А., Аджиева А.А., Бачиев Б.А., Машуков И.Х. Модель визуализации для данных численного моделирования конвективного облака // Инженерный вестник Дона, 2023, №4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2023/8326/.
 6. Butenko M.A., Belikova I.V., Kuzmin N.M., Khokhlova S.S., Ivanchenko G.S., Ten A.V., Kudina I.G. Numerical simulation of the galaxies outer spiral structure: the influence of the dark halo non-axisymmetry on the gaseous disk shape // Mathematical Physics and Computer Simulation. – 2022. – Vol. 25, – № 3. – pp. 73-83.
 7. Pejch M.M., Morozov A.G., Khoperskov A.V. Modeling a double-hump gas rotation curves in the axisymmetric gravitational field of galaxies // Mathematical Physics and Computer Simulation. – 2023. – Vol. 26, – № 3. – pp. 91-104.
 8. Titov A., Khoperskov A., Khrapov S. Major merging of galaxies in multicomponent numerical models: mass loss and exchange // Journal of Physics: Conference Series. – 2021. – Vol. 2103. – pp. 1-6.
-

9. Khoperskov A.V., Khrapov S.S., Sirotin D.S. Formation of Transitional cE/UCD Galaxies through Massive/Dwarf Disc Galaxy Mergers // Galaxies. – 2024. – Vol. 12, – № 1. – pp. 1-29.
 10. Tso Y. Thermal Freetop a Free Open-Source Spacecraft Thermal Analysis Software Package – Morehead : ProQuest, 2018. – 81 p.
 11. Rier E. Generation and segmentation of 3D models of bone from CT images based on 3D point clouds // McMaster University. – 2021. – Vol. 1. – pp. 1-223.
 12. Favre J.M., Blass A. A comparative evaluation of three volume rendering libraries for the visualization of sheared thermal convection // Parallel Computing. – 2019. – Vol. 88. – pp. 1-8.
 13. Witschi R., Gunther T. Implicit Ray Casting of the Parallel Vectors Operator // 2020 IEEE Visualization Conference (VIS). – Salt Lake City, UT : IEEE Computer Society, 2020. – Vol. 1. – pp. 31-35.
 14. Bruhwiler D.L., Bruhwiler K., Moeller P., Nagler R., Hoffmann C. M., Morgan Z.J., Savici A.T., Tucker M.G., Kuhn A., Mensmann J., Messmer P., Nienhaus M., Roemer S., Tatulea D. Rapid Browser-Based Visualization of Large Neutron Scattering Datasets // International Particle Accelerator Conference (12th). — Campinas, SP : JACoW Publishing, 2021. – Vol. 1. – pp. 2494-2497.
 15. Simon, P. The Visual Organization: Data Visualization, Big Data, and the Quest for Better Decisions – New York, NY : John Wiley & Sons, 2014. – 240 p.
 16. Kim Y., Choi S., Lee D., Jeong J., Kwak J., Lee J., Lee G., Lee S., Park K., Jeong J., Kexin W., Song Y.H. Low-Overhead Compressibility Prediction for High-Performance Lossless Data Compression // IEEE Access. – 2020. – Vol. 8. – pp. 37105-37123.
-

17. Cheng S.-W., Dey T.K., Shewchuk J., Sahni S. Delaunay Mesh Generation // Algorithms and Mathematical Analysis. London: CRC Press LLC, 2012. – Vol. 1. – pp. 1-404.

18. Lo S.H. 3D Delaunay triangulation of 1 billion points on a PC // Finite Elements in Analysis and Design. – 2015. – Vol. 102-103. – pp. 65-73.

References

1. Koponen J., Hilden J. Data Visualization Handbook. Helsinki, Aalto University Foundation, 2019. 352 p.

2. Liu Z. A Prototype Framework for Parallel Visualization of Large Flow Data. Advances in Engineering Software, 2019, vol. 130, pp. 14-23.

3. Oblak R., Bohak C., Marolt M. Web-Based Vascular Flow Simulation Visualization with Lossy Data Compression for Fast Transmission. Augmented Reality, Virtual Reality, and Computer Graphics. Cham, Springer International Publishing, 2018, vol. 10851, pp. 3-17.

4. Borgoyakova T.G., Lozitskaya E.V. Inzhenernyj vestnik Dona, 2018, №1. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n1y2018/4763/.

5. Shapovalov V.A., Adzhieva A.A., Bachiev B.A., Mashukov I.Kh. Inzhenernyj vestnik Dona, 2023, №4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2023/8326/.

6. Butenko M.A., Belikova I.V., Kuzmin N.M., Khokhlova S.S., Ivanchenko G.S., Ten A.V., Kudina I.G. Numerical simulation of the galaxies outer spiral structure: the influence of the dark halo non-axisymmetry on the gaseous disk shape. Mathematical Physics and Computer Simulation, 2022, vol. 25, no. 3, pp. 73-83.

7. Pejch M.M., Morozov A.G., Khoperskov A.V. Modeling a Double-Hump Gas Rotation Curves in the Axisymmetric Gravitational Field of Galaxies. Mathematical Physics and Computer Simulation, 2023, vol. 26, no. 3, pp. 91-104.

8. Titov A., Khoperskov A., Khrapov S. Journal of Physics: Conference Series, 2021, vol. 2103, pp. 1-6.
 9. Khoperskov A.V., Khrapov S.S., Sirotin D.S. Galaxies, 2024, vol. 12, no. 1, pp. 1-29.
 10. Tso Y. Thermal Freetop a Free Open-Source Spacecraft Thermal Analysis Software Package. Morehead, ProQuest, 2018. 81 p.
 11. Rier E. Generation and Segmentation of 3D Models of Bone From CT Images Based on 3D Point Clouds. McMaster University, 2021, vol. 1, pp. 1-223.
 12. Favre J.M., Blass A. A Comparative Evaluation of Three Volume Rendering Libraries for the Visualization of Sheared Thermal Convection. Parallel Computing, 2019, vol. 88, pp. 1-8.
 13. Witschi R., Gunther T. Implicit Ray Casting of the Parallel Vectors Operator. 2020 IEEE Visualization Conference (VIS). Salt Lake City, UT, IEEE Computer Society, 2020, vol. 1, pp. 31-35.
 14. Bruhwiler D.L., Bruhwiler K., Moeller P., Nagler R., Hoffmann C.M., Morgan Z.J., Savici A.T., Tucker M.G., Kuhn A., Mensmann J., Messmer P., Nienhaus M., Roemer S., Tatulea D. Rapid Browser-Based Visualization of Large Neutron Scattering Datasets. International Particle Accelerator Conference (12th). Campinas, SP, JACoW Publishing, 2021, vol. 1, pp. 2494-2497.
 15. Simon P. The Visual Organization: Data Visualization, Big Data, and the Quest for Better Decisions. New York, NY, John Wiley & Sons, 2014. 240 p.
 16. Kim Y., Choi S., Lee D., Jeong J., Kwak J., Lee J., Lee G., Lee S., Park K., Jeong J., Kexin W., Song Y.H. Low-Overhead Compressibility Prediction for High-Performance Lossless Data Compression. IEEE Access, 2020, vol. 8, pp. 37105-37123.
 17. Cheng S.-W., Dey T.K., Shewchuk J., Sahni S. Delaunay Mesh Generation. Algorithms and Mathematical Analysis. London, CRC Press LLC, 2012, vol. 1, pp. 1-404.
-



18. Lo S.H. 3D Delaunay Triangulation of 1 Billion Points on a PC. Finite Elements in Analysis and Design, 2015, vol. 102-103, pp. 65-73.

Дата поступления: 8.03.2024

Дата публикации: 18.04.2024