

Управление посредством семантической сети прикладным программным комплексом для решения задач математической физики

Л. А. Голубева, В. С. Горшунов, В. П. Ильин

Численное решение задач математической физики с использованием ЭВМ можно разбить на несколько этапов: построение геометрической модели расчётной области, построение сеточной модели, аппроксимация функций, производных и интегралов, а также решение уравнений. Существует множество сеточных генераторов и алгоритмов для построения двумерных и трехмерных сеток, программ для решения систем уравнений, аппроксиматоров, средств геометрического моделирования. При создании прикладного программного комплекса для решения задач математической физики, базирующегося на концепции базовой системы моделирования, каждый из этапов решения задачи можно представить в виде отдельного модуля. Каждый модуль, в свою очередь, может представлять из себя набор алгоритмов и подпрограмм. Такой программный комплекс обеспечивает целостность решения вычислительной задачи благодаря широкому набору инструментов для прохождения любого из вычислительных этапов и позволяет варьировать входные параметры, выбирать наиболее подходящие алгоритмы на разных этапах. Более того, такая система позволяет осуществлять декомпозицию исходной расчётной области на подобласти при построении геометрии и генерацию квазиструктурированной сеточной модели. Однако при включении новых алгоритмов и программ в вычислительный комплекс неизбежно возрастает сложность его использования. Таким образом, возникает потребность в проектировании надсистемы, которая позволит определить наилучший с точки зрения некоторых критериев качества, определённых заранее, набор алгоритмов решения подзадач на каждом из этапов. Цель настоящей работы – разработать и описать такую модель управления данным вычислительным комплексом с помощью базы знаний, представленной в виде семантической сети.

Ключевые слова: математическая физика, геометрическая структура данных, сеточная структура данных, функциональная структура данных, БСМ, семантические сети, базы знаний.

1. Введение

База знаний (БЗ) – это особого рода база данных, разработанная для оперирования знаниями (метаданными). База знаний содержит структурированную информацию, покрывающую некоторую область знаний. Современные базы знаний работают совместно с системами поиска информации, имеют классификационную структуру и формат представления знаний.

Представление знаний – вопрос, связанный с подбором представления конкретных и обобщённых знаний, сведений и фактов для накопления и обработки информации в ЭВМ. Основная проблема – научиться хранить знания таким образом, чтобы программы могли эффективно обрабатывать их. Для представления знаний можно использовать семантические сети [1]. Каждый *узел* такой сети представляет часть вычислительного алгоритма, а *дуги* используются для определения отношений между узлами.

Одна из проблем в представлении знаний, связанная с искусственным интеллектом (ИИ) – хранение и обработка знаний в информационных системах. Примеры применения ИИ – экспертные системы, машинный перевод, компьютеризированное техническое обслуживание и системы извлечения и поиска информации, пользовательские интерфейсы баз данных [2].

В настоящей статье описывается подход к построению базы знаний для управления программным комплексом для решения 3-мерных задач математической физики на основе концепции базовой системы моделирования (БСМ) [3].

2. Описание семантической сети, моделирующей управление вычислительным процессом

При решении задач математической физики можно выделить три этапа: построение геометрической модели, построение сеточной модели, аппроксимация и решение уравнений [4]. Составим семантическую сеть, которая будет включать в себя в качестве подсетей 3 семейства узлов, связанных последовательно, каждое из которых ответственно за один из следующих этапов вычислительного процесса:

1. «Вороной» – задачи геометрического и функционального моделирования.
2. «Делоне» [5] – генерация сеток.
3. «Чебышёв» [6] – аппроксимация исходных уравнений.

Каждая из трёх подсетей, в свою очередь, также является семантической сетью. Связи между узлами в этой семантической сети предоставляют возможность организовать конкретный вычислительный процесс. На каждом из трёх этапов решения задачи, представленных в виде подсети, возможны различные варианты развития событий. Модель управления предполагает построение пути в сети, который представляет вычислительный процесс. Прохождение по этому пути гарантирует решение задачи. В зависимости от того, какие условия накладываются на качество решения на каждом из этапов, мы можем либо принять такой подход, либо выбрать иной путь построения решения в любой из трёх подсетей.

3. Описание узлов семантической сети

Каждый узел в семантической сети представляет определённый алгоритм. Узлы в сети могут быть одного из трёх типов в зависимости от того, к какой подсети они принадлежат. От типа узла зависит набор входных и выходных данных.

Все три подсети последовательно связаны между собой: «Вороной» – «Делоне» – «Чебышёв». В свою очередь, узлы внутри каждой из подсетей тоже могут между собой быть связаны, такое утверждение основывается на принципе декомпозиции расчётной области на подобласти. Цель декомпозиции – использование наиболее подходящего алгоритма генерации сетки в каждой из подобластей с точки зрения качества получаемого решения задачи во всей области. Опишем каждую из трёх подсетей.

3.1. «Вороной»

Подсеть «Вороной» ответственна за построение и визуализацию геометрии, а также за формирование геометрической структуры данных (ГСД) и функциональной структуры данных (ФСД) [7]. Входные данные для узлов подсети – описание расчётной области для конкретной решаемой задачи, которое может быть задано при помощи диалогового окна либо в виде текста на соответствующем языке описания геометрии. Выходные данные – различные ФСД, ГСД и их графическое представление. ФСД включает в себя данные, необходимые для

функционирования узлов других подсетей, например, граничные значения, начальные разбиения границ для построения сеток и т.д.

Узлы могут иметь различное представление ГСД. Однако для каждой из ГСД можно построить общее внутреннее представление на основе какой-либо платформы с возможностью визуализации геометрии. В качестве такой платформы в настоящей работе используется «Гербарий» [8] – инженерно-исследовательская программная платформа. В «Гербарии» реализована возможность построения и визуализации геометрии. Геометрическая модель в «Гербарии» представляет собой набор примитивов, к которым применены булевы операции объединения, вычитания. Под набором примитивов в данном случае понимаются объёмные фигуры, полученные путём выдавливания или вращения криволинейной плоской замкнутой линии.

3.2. «Делоне»

Задачей узлов этой подсети ставится построение сеточной модели. Для каждого такого узла существует определённый набор входных значений – некоторые ГСД и ФСД, сформированные в подсети «Вороной», и набор выходных данных – сеточная структура данных (ССД) [7].

ССД, которая представляет сеточную модель, может включать в себя набор сеточных вершин, сеточных рёбер, сеточных граней и т.д. ССД каждого из узлов может различаться, но также, как и в случае с ГСД, может быть сведена к некоторой общей ССД, а значит, и иметь одно графическое представление на выбранной платформе, в нашем случае в «Гербарии».

Также сеточная модель обладает различными свойствами: качество сетки, структурированность, адаптивность [7]. Качественными характеристиками могут служить максимальный и минимальный угол по всем элементам, их отношение; максимальная и минимальная длина ребра; радиус вписанной или описанной окружности. В зависимости от условий, накладываемых на качество, можно выбрать тот или иной путь при управлении вычислительным процессом.

3.3. «Чебышёв»

Целью функционирования подсети является аппроксимация исходных уравнений и решение исходной задачи. Решение задачи будем называть алгебраической структурой данных (АСД) [9]. Входными данными служат результаты, полученные на предыдущих этапах (в предыдущих подсетях): ССД и ФСД.

В зависимости от постановки исходной задачи её решением может быть решение некоторой системы дифференциальных, интегральных или линейных алгебраических уравнений в узлах или ячейках сеточной модели [10].

3.4. Пример семантической сети

На каждом этапе решения исходной задачи можно ввести критерии аварийной остановки, когда результат прохождения этапа неудовлетворителен и необходимо выбрать иной путь (см. рис. 1). Так, при декомпозиции геометрической модели на подобласти последние могут быть описаны в несовместимых форматах. Важно отметить, что такой случай может возникнуть при построении геометрии для генерации на ней квазиструктурированной сетки [7]. В качестве такого критерия остановки для работы подсети «Делоне» можно рассматривать качественные характеристики сетки. От подсети «Чебышёв» можно требовать соответствия решения уравнений определённым условиям. Каждый способ задания геометрии, построения сетки, аппроксимации и решения уравнений – это отдельный узел сети.

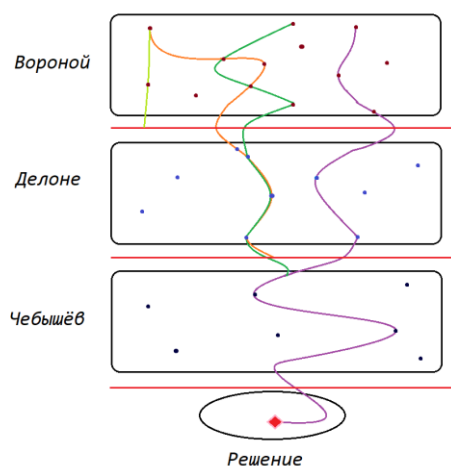


Рис. 1. Визуальное представление сети

Несмотря на то, что путь в некоторых подсетях может совпадать, итоговое решение задачи может различаться с точки зрения качества.

4. Использование БЗ для управления вычислительным комплексом

Опишем ГСД, ФСД, необходимые для функционирования некоторых сеточных генераторов, а также ССД, полученные в результате работы таких генераторов, и приведём пример использования описанной концепции.

CubDat – сеточный генератор, способный строить структурированные сетки с равномерным шагом в трёхмерных областях, состоящих из параллелепипедов [11].

Базовые координаты (БК) – упорядоченный набор уникальных значений координат для каждой из координатных осей.

ГСД и ФСД CubDat выглядит следующим образом:

nx, ny, nz – число БК для каждой из осей координат;

$k_1, k_2, \dots, k_{nk}$ – список БК по каждой из трёх осей. Здесь и далее $k = x | y | z$;

$sk_1, sk_2, \dots, sk_{nk-1}$ – список числа шагов разбиения между базовыми координатами;

sk_i – задает число шагов разбиения между БК k_i и k_{i+1} ;

$nmat$ – число материалов в расчетной области, не может быть меньше 1;

nsd – число подобластей (параллелепипедов) в расчетной области, не может быть меньше 1;

$sd_{1.t}$ – номер материала подобласти;

$sd_{1.p}$ – номер приоритета подобласти;

$sd_{1.kb}, sd_{1.ke}$ – номера БК оси O_k начала и конца подобласти соответственно, нумерация ведется с 0;

$sd_{1.bc_{kb}}, sd_{1.bc_{ke}}$ – номера граничных условий на гранях подобласти $k = k_{sd1.kb}$ и $k = k_{sd1.ke}$ соответственно;

$ndbc_i$ – номер значения условия Дирихле, соответствующий узлу сетки;

n_dbc – число значений условий Дирихле;

$Vdbc_i$ – значения условия Дирихле.

В ССД CubDat содержится описание узлов:

$nnode$ – число узлов в расчетной области;

x_i, y_i, z_i – декартовы координаты узлов;

$ntet$ – число тетраэдров в расчетной области;

n_i, n_j, n_k, n_l – номера узлов – вершин тетраэдра, нумерация узлов идет с 0;

bc_i, bc_j, bc_k, bc_l – номера граничных условий на гранях тетраэдра.

NetGen – универсальный сеточный генератор. Входные данные для NetGen должны быть записаны в формате .stl, .geo, .step. Выходной формат данных – .vol. Описание этих форматов доступно в открытых источниках [12].

В программном комплексе [3] посредством «Гербария» формируется внутренняя ГСД, входные данные для которой задаются с использованием графического интерфейса в виде диалогового окна. ГСД «Гербария» может быть преобразована на уровне программного кода в формат, понятный другим узлам семантической сети: CubDat и NetGen. Более того, соответствующая ГСД будет иметь визуальное представление в Демонстраторе «Гербария». То же справедливо и для ССД.

4.1. Задание геометрии, формирование входных данных и ФСД для сеточного генератора CubDat. Модуль «Вороной»

Создадим для примера геометрическую модель, представленную в виде двух тел кубической формы, указав начальные и конечные координаты диагонали каждого из тел (рис. 2).

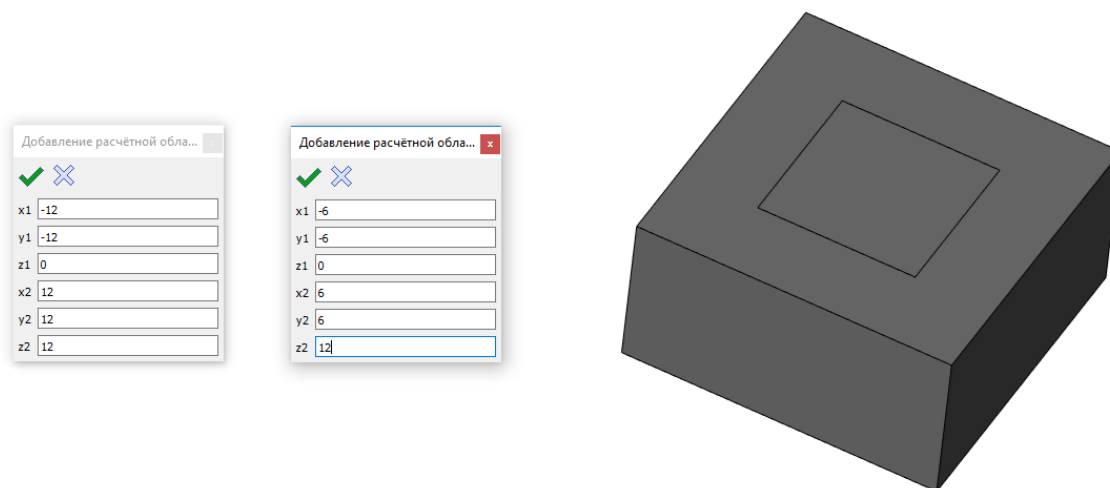


Рис. 2. Задание геометрии

Зададим отношение между телами с помощью булевых операций, ФСД и параметры генерации сетки (рис. 3).

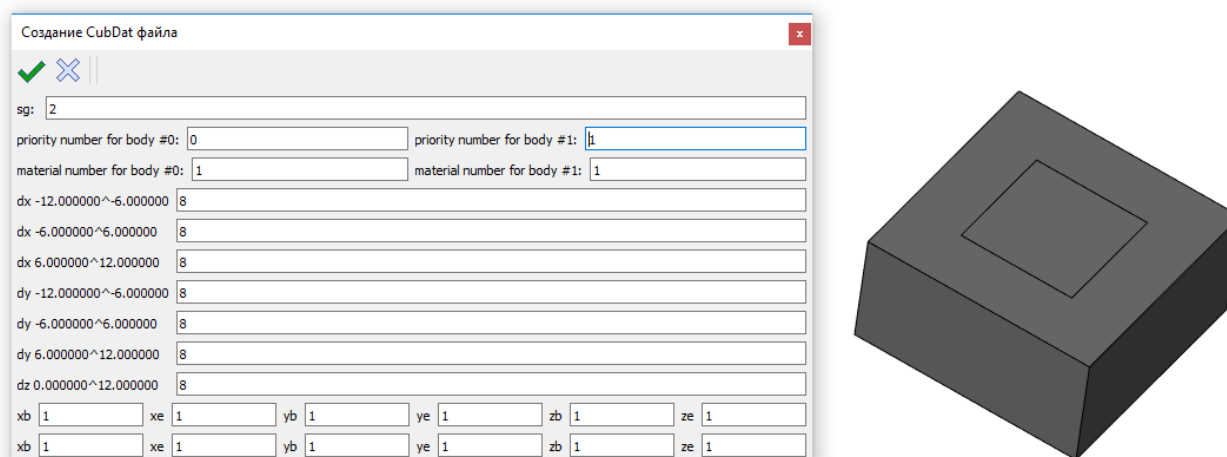


Рис. 3. Параметры генерации сетки

4.2. Генерация сетки. Модуль «Делоне»

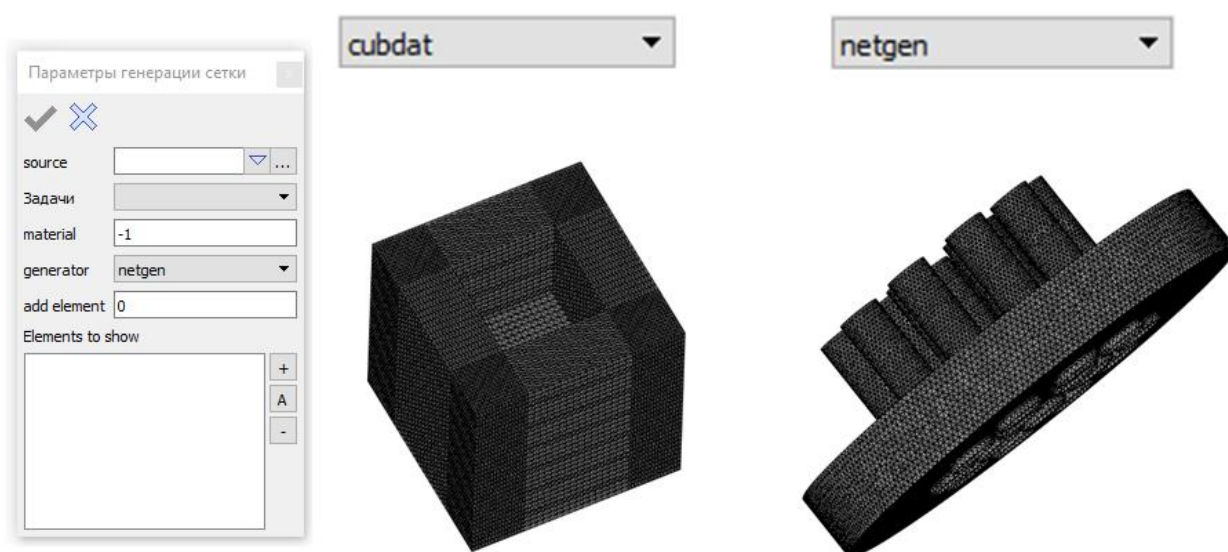


Рис. 4. Сеточные генераторы

Указав источник генерации сетки, получим визуальное представление построенной сеточной модели (рис. 4). При формировании квазиструктурированных сеток [7] (рис. 5) необходимо указывать свой источник для каждой из подобластей, выбирая соответствующие подобласти посредством ниспадающего списка «Задачи». Далее вызывается программа для аппроксимации уравнений и построения решения (Модуль «Чебышёв»). Визуализация полученного решения находится в разработке.

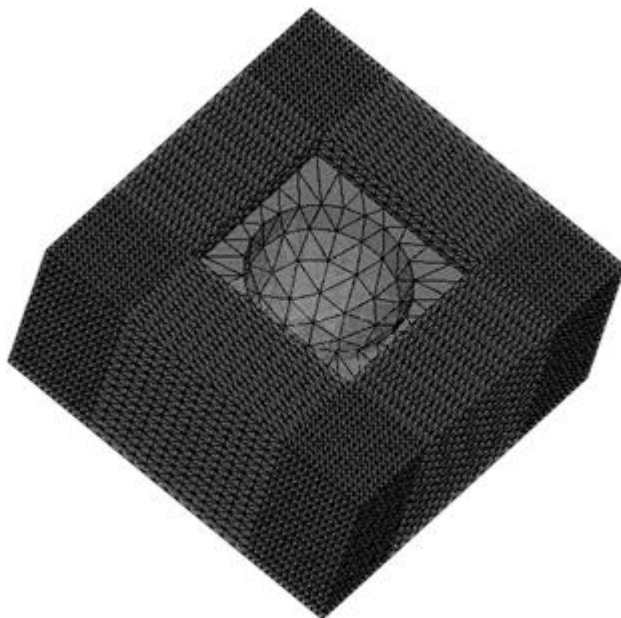


Рис. 5. Квазиструктурированная сетка

5. Заключение

В настоящей работе представлена модель управления вычислительным комплексом на основе семантической сети. Узлы этой сети описаны и классифицированы по трём типам семейств: «Вороной», «Делоне», «Чебышёв». Такой способ управления опробован на программном комплексе для решения 3-мерных задач математической физики на основе концепции БСМ [7]. В дальнейшем предполагается расширение этой сети путём добавления новых узлов в каждую подсеть.

Литература

- 1 Загоруйко Ю. А., Загоруйко Г. Б. Инженерия знаний: учебное пособие. Новосибирск: РИЦНГУ, 2016. 93 с.
- 2 Basic Research Needs Workshop for Scientific Machine Learning Core Technologies for Artificial Intelligence // Prepared for Department of Energy Advanced Scientific Computing Research. February 10, 2019.
- 3 Ильин В. П., Гладких В. С. Базовая система моделирования (БСМ): концепция, архитектура и методология // Тр. конф. «Современные проблемы математического моделирования, обработки изображений и параллельных вычислений» (СПММОИиПВ), Ростов-на-Дону, ДГТУ, 2017. С. 151–158.
- 4 Ильин В. П. Фундаментальные вопросы математического моделирования // Вестник Российской Академии Наук. 2016. Т. 86, № 4. С. 26–36.
- 5 Ильин В. П. DELAUNAY: технологическая среда генерации сеток // СибЖИМ. 2013. Т. 16. С. 83–97.
- 6 Бутюгин Д. С., Ильин В. П. CHEBYSHEV: принципы автоматизации построения алгоритмов в интегрированной среде для сеточных аппроксимаций начально-краевых задач // Труды Международной конференции ПАВТ'2014, Челябинск, ЮУрГУ, 2014. С. 42–50.
- 7 Голубева Л. А., Горишунов В. С., Ильин В. П., Эрдыниева Э. Б. Программный комплекс для решения 3-мерных задач математической физики на основе концепции БСМ // Труды Международной конференции «Вычислительная математика и математическая геофизика» к 90-летию со дня рождения академика А. С. Алексеева, 2018. С. 126–132.
- 8 «ГЕРБАРИЙ» [Электронный ресурс]. URL: <http://tflex.ru/about/publications/detail/index.php?ID=3846> (дата обращения: 30.06.2019).
- 9 Бутюгин Д. С., Гурьева Я. Л., Ильин В. П., Первозкин Д. В., Петухов А. В., Скопин И. Н. Функциональность и технологии алгебраических решателей в библиотеке Krylov // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Вычислительная математика и информатика». 2013. Т. 2, № 3. С. 92–105.
- 10 Ильин В. П. Математическое моделирование: Ч. 1: Непрерывные и дискретные модели. Новосибирск: Изд. СО РАН, 2017. 429 с.
- 11 Gurieva Ya. L., Il'in V. P. Program package for 3D boundary-value elliptic Problem // Bull. NCC, series: "Num. Anal.". 2002. Iss. 11. P. 35–52.
- 12 NETGEN [Электронный ресурс]. URL: <https://ngsolve.org/docu/latest/> (дата обращения: 30.06.2019).

Статья поступила в редакцию 05.07.2019;
переработанный вариант – 09.08.2019.

Голубева Людмила Андреевна

к.ф.-м.н., доцент, научный сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН (630090, Новосибирск, просп. Ак. Лаврентьева, 6),
e-mail: golubeva@labchem.sscs.ru.

Горшунов Василий Сергеевич

инженер Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
e-mail: basil.gorshunov@gmail.com.

Ильин Валерий Павлович

д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, e-mail: ilin@sscs.ru.

Management of an application software package for solving problems of mathematical physics via semantic network

L. A. Golubeva, V. S. Gorshunov, V. P. Il'in

The numerical solution of mathematical physics problems using a computer can be divided into several stages: geometric model of the computational domain construction, grid model construction, function approximation, derivatives and integrals, as well as equations solving. There are many grid generators and algorithms for constructing two-dimensional and three-dimensional grids, programs for systems of equations solving, approximators and geometric modeling tools. While creating an application software package for solving problems of mathematical physics based on the concept of basic modeling system, each stage of the problem solving representing as a separate module. Each module, in turn, can be a set of algorithms and subroutines. Such a software package ensures the integrity of the solution to a computational problem thanks to a wide range of tools for going through any of the computational stages and allows you to vary the input parameters and choose the most suitable algorithms at different stages. Moreover, such a system allows the decomposition of the initial computational domain into subdomains when constructing the geometry and the generation of a quasistructured grid model. However, when new algorithms and programs are included into the computing complex, the complexity of its use increases inevitably. Thus, there is a need for the design of a supersystem allowing us to determine the best set of algorithms for subtasks solving at each stage in terms of some quality criteria defined in advance. The purpose of this work is to develop and describe such a model for managing this computing complex using a knowledge base presented in the form of semantic network.

Keywords: mathematical physics, geometric data structure, grid data structure, functional data structure, BMS, semantic networks, knowledge bases.