

Разработка специализированной системы расчета функций волновых катастроф

А. С. Крюковский, С. В. Рогачев.

Российский новый университет (РосНОУ), kryukovsky@rambler.ru,
rogachevsergei@gmail.com

В докладе рассмотрены основные подходы к созданию и развитию системы численного расчета специальных функций волновых катастроф. Система расчета представляет собой переносимое приложение, способное функционировать на большинстве современных операционных систем и выполняющая расчет СВК и их визуализацию с привлечением параллелизма, векторных вычислений и распределенных систем. Программный комплекс предназначен для внедрения в информационную систему «Волновые катастрофы в радиофизике, акустике и квантовой механике».

In the report the basic approaches to creation and development of system of numerical account of special functions of wave catastrophes are considered. The system is a portable application able to function with a wide number of modern operating systems, it performs calculation of wave catastrophes' special functions and their visualization using parallel computing, vector calculations and distributed systems approach. The complex of software is intended for usage in the information system "Wave catastrophes in radio-physics, acoustics and quantum mechanics".

Введение

Теория катастроф [1], современная область знаний, берущая своё начало в трудах Х. Уитни, посвященных особенностям дифференцируемых отображений, получила в последние десятилетия новое дыхание в связи с её применением к описанию фокусировок, дифракции и распространения волновых полей. В данной сфере многое сделано отечественными учеными: изучены и классифицированы особенности, характерные для процессов волновой природы, выработан ряд методов вычисления полей в окрестности данных особенностей (см., например, [2–4]). Тем не менее, реализации данных методов на ЭВМ носят частный характер, отсутствует законченная система, позволяющая исследовать особенности интерференционных и дифракционных фокусировок.

Разработка подобной системы – актуальная научная задача, состоящая в систематизации существующих методов, поиске наилучших и их многократной оптимизации. Также, существующие подходы и алгоритмы должны быть адаптированы к условиям, диктуемым временем: современные ЭВМ оснащаются многоядерными процессорами, арифметическими сопроцессорами и модулями векторных вычислений, в то время как большинство численных методов разработано еще во времена господства FORTRAN и ALGOL-68. К сожалению, большинство свободно распространяемых библиотек до сих пор содержат переписанные куски открытых библиотек того времени. С другой стороны, серьезные коммерческие пакеты численных и символьных вычислений, конечно, активно пользуются возможностями современных компьютеров, но являют собой полностью универсальные и невероятно сложные системы.

Уход от универсализма коммерческих сред к специализированной системе позволяет сконцентрироваться на оптимизациях, специфичных для задачи, отказаться от проблем с приобретением лицензий на использование сторонних продуктов, предоставить возможность расширения и развития системы всему заинтересованному сообществу.

Математические, алгоритмические и технические подходы

Для расчета специальных функций волновых катастроф(СВК)в случае простейших

особенностей применяется ряд известных методов, таких как контурный метод, метод равномерных асимптотик и метод суммирования рядов Тейлора [5]. В то же время, в случае сложных многопараметрических катастроф применение данных методов связано с большими трудностями.

СВК сложных катастроф могут быть вычислены с применением метода обыкновенных дифференциальных уравнений, являющегося развитием метода канонических уравнений. Суть метода состоит в получении системы обыкновенных дифференциальных уравнений (СОДУ) из систем канонических уравнений [6,7]. Для ряда катастроф данные СОДУ были получены, однако данные исследования не завершены, несмотря на усилия по автоматизации их вывода.

Результатом решения системы ОДУ является фундаментальный вектор (1), состоящий как из самой специальной функции особенности типа Σ , так и части её первых производных:

$$\vec{W} = (V_{\Sigma}, V_{\Sigma}^1, V_{\Sigma}^2, V_{\Sigma}^3, \dots, V_{\Sigma}^{\gamma-1}). \quad (1)$$

Остальные производные СВК по аргументам S_i выражаются через компоненты фундаментального вектора.

Значения фундаментального вектора в точке $\vec{S} = \vec{S}^1$ находится путём интегрирования системы вида (2) по t от 0 до 1, в предположении, что значение вектора в точке $\vec{S} = \vec{S}^0$ известно [5-8]:

$$\frac{d\vec{W}}{dt} = \vec{g}(\vec{W}, \vec{S}). \quad (2)$$

Для решения систем ОДУ возможно применение различных численных методов. В данной работе используется модифицированный метод Кутты-Мерсона. Этот метод обладает четвертым порядком точности интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений, шаг интегрирования автоматически корректируется, таким образом, точность вычислений значительно повышается [9].

Как уже было упомянуто выше, каждая задача обладает своей спецификой, и, что естественно, данная специфика отражается в решении задачи. СВК сложных катастроф описываются довольно большими системами ОДУ, следовательно, и вычисление таких систем особенно для большого числа точек может занимать длительное время. Для повышения производительности разрабатываемой программной платформы используется тот факт, что интегрирование в отдельных точках выполняется независимым образом, – это позволяет производить интегрирование на различных интервалах в отдельных вычислительных потоках. За счет простоты синхронизации в данном случае удается достичь практически чистого прироста производительности пропорционального количеству процессоров или вычислительных ядер центрального процессора. Для большинства катастроф это решает проблему длительности вычислений на современных компьютерах, поскольку практически все выпускаемые ныне процессоры семейства X86 обладают как минимум двумя вычислительными ядрами, максимальное число физических ядер в процессорах, доступных на рынке, достигает восьми.

На данном этапе открывается еще одна техническая возможность – использование графических процессоров, предоставляющих десятки ядер, которые могут быть использованы для вычислений, в том числе для оптимизации самого численного метода интегрирования [10], но вопрос использования GPU и APU пока не рассматривался и

оставлен в качестве возможного направления развития.

Далеко не все персональные компьютеры, обладают столь серьезной аппаратной базой, с целью увеличения скорости расчета в таком случае решено использовать подход кластеризации. Вычислительный модуль представляет собой программу на языке С, написанную переносимом стиле. Таким образом, она может быть собрана для большинства аппаратных архитектур и операционных систем: стандартными средствами в современных Unix-системах и с привлечением перенесенных Unix-окружений (Cygwin, MinGW) в MSWindows. Данная программа может одновременно выступать как в качестве узла вычислительной сети, так и в качестве сервера балансировки нагрузки, распределяющего задания между отдельными узлами. Клиентская программа, обладающая своей собственной встроенной реализацией системы численного расчета СВК способна использовать удаленные узлы вычислительной сети столь же прозрачно, как и встроенную реализацию. Клиент позволяет вычислять СВК из заданного набора с различными входными параметрами и изучать график, представленный в виде трехмерной визуализации (рис. 1). Код клиента также переносим и может быть собран для большинства доступных систем.

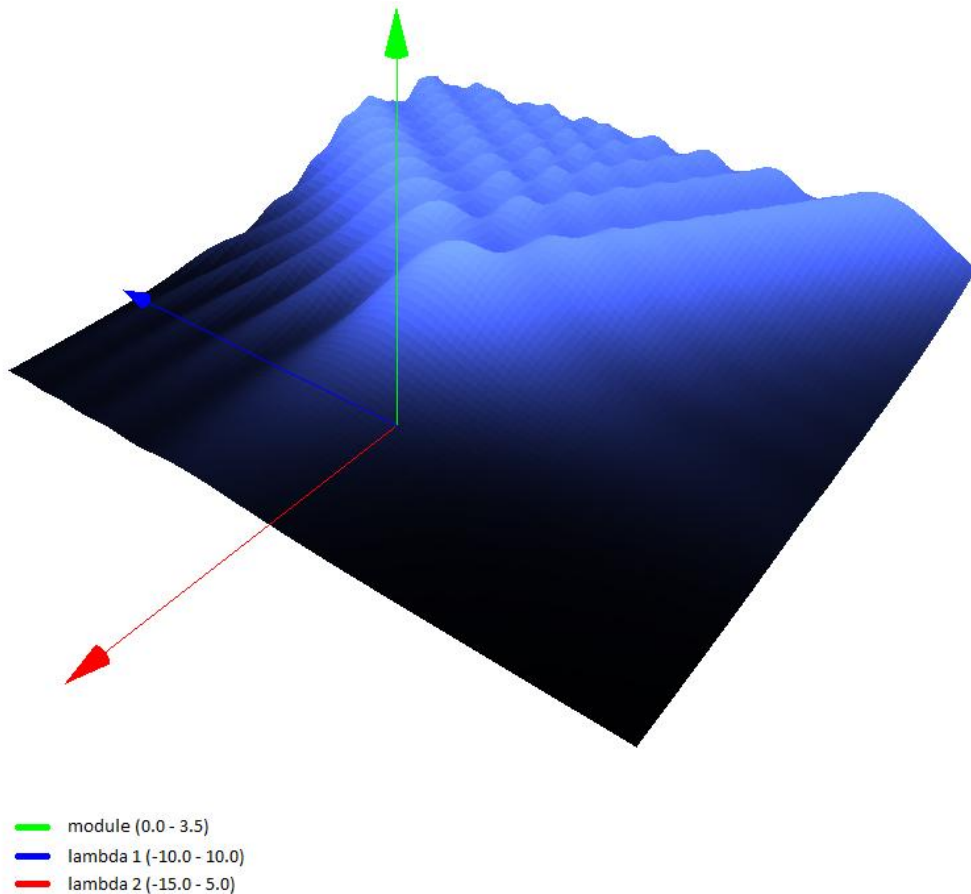


Рис. 1. Катастрофа A_1^4 [5,11], амплитуда (визуализация, построенная системой).

Также используется подход с предупреждающим вычислением и кешированием значений СВК в отдельных точках, смежных с рассматриваемым интервалом. Данные вычисления производятся в фоновом режиме и не мешают просмотру графика особенности, в то же время, при необходимости вычисления СВК в соседних точках, готовый результат предоставляется немедленно.

Реализация методов, подобных алгоритму Кутты-Мерсона, предполагает многократные операции умножения элементов векторов. Данный факт может быть использован для оптимизации за счет использования векторного сопроцессора. X86 обладает рядом расширений, позволяющих работать с целой и не целой векторной арифметикой. Процессоры архитектуры ARM также позволяют обрабатывать векторы чисел за счет расширения NEON.

Алгоритм интегрирования требует небольших изменений с целью получения большего выигрыша производительности от использования векторных вычислений. На данном этапе в системе применяется автоматическая векторизация, но планируется добиться большего эффекта за счет ручного использования инструкций векторных вычислений.

Клиентская часть комплекса позволяет экспортировать данные, полученные в процессе расчета, в формате csv, таким образом, построение графика СВК можно выполнять, в том числе и сторонними приложениями (рис.2, рис. 3).

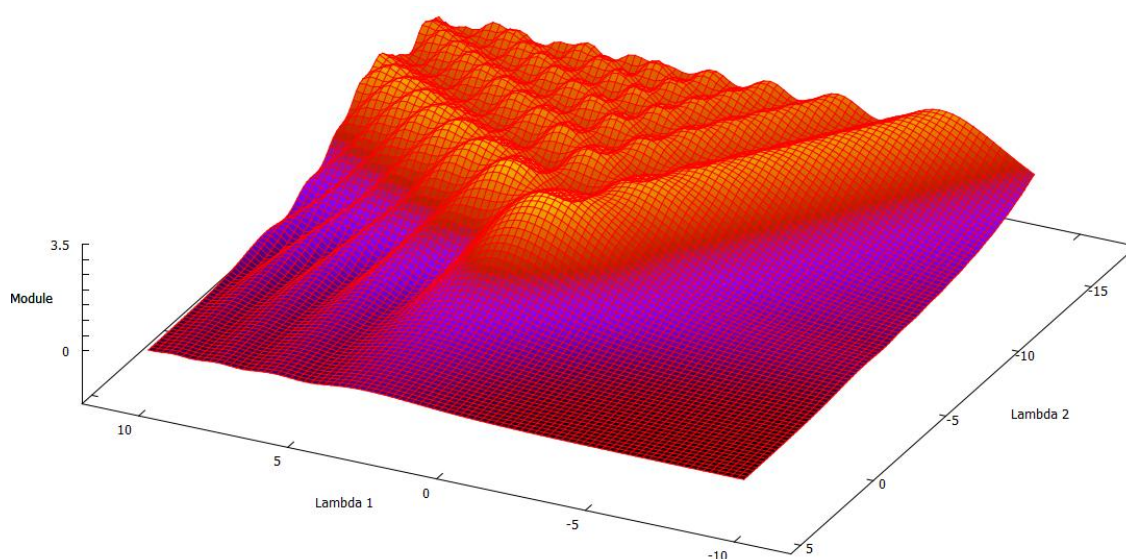


Рис. 2. Катастрофа типа A_1^4 , амплитуда (GnuPlotplotengine).

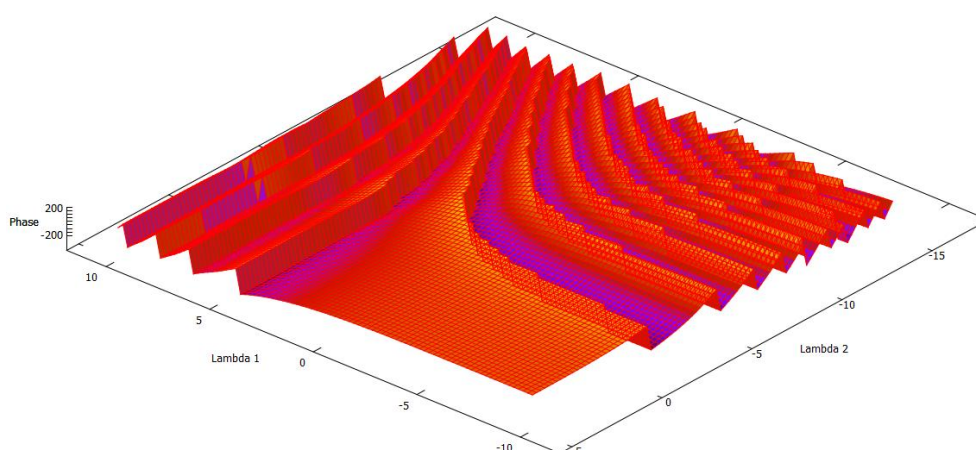


Рис. 3. Катастрофа A_1^4 , фаза (GnuPlot plot engine).

Направления развития

Данная специализированная система позволяет формализовать лишь некоторый

класс катастроф. Таким образом, многие катастрофы оказываются не охваченными. Чтобы решить данную проблему планируется внедрение двух механизмов, позволяющих расширять возможности системы и добавлять в нее возможность расчета СВК катастроф, не рассматриваемых при ее создании.

Первый механизм, механизм плагинов, представляет собой набор интерфейсов, за счет которого становится возможным динамически загружать бинарные модули, реализующие вычисление той или иной СВК за счет механизмов, поддерживаемых системой. Такие модули могут разрабатываться независимо от основной системы и расширять ее функциональность.

Второй механизм предполагает еще более простой способ расширения возможности пакета за счет встраивания в систему JIT-интерпретатора простого императивного языка программирования. Если в первом случае для разработки расширений требуется привлечение таких внешних средств, как компилятор и редактор связей, то данный подход не требует никаких внешних программ; тем не менее, есть и недостатки – на трансляцию программы на встроенном языке программирования тратится время, а любой, даже хорошо оптимизированный JIT-интерпретатор, выполняет код несколько медленнее, чем честный машинный код.

С целью повышения производительности вычислительной сети предполагается возможность организации узлов сети на основе экзоядерной операционной системы. Подобные архитектуры, в отличие от операционных систем общего назначения, обладают минимальным набором абстракций над оборудованием, и, следовательно, являются чрезвычайно производительными, а их адаптация под нужды конкретных задач упрощена за счет высокой степени свободы программиста. Производительность в ряде задач, исполняемых на экзоядерной системе, может возрастать до девяти раз по сравнению со стандартными операционными окружениями [12].

Литература

1. Арнольд В. И. Теория катастроф. – М.: Наука, 1990. – 80с.
2. Kryukovskii A.S., Lukin D.S., Palkin E.A., Rastyagaev D.S Wave catastrophes: types of FOCUSING in DIFFRACTION and propagation of electromagnetic waves. //Journal of Communications Technology and Electronics, 2006. –Т. 51. – № 10. –С. 1087.
3. Крюковский А.С., Лукин Д.С., Растягаев Д.В. Классификация и равномерное асимптотическое описание пространственно-временных трехмерных краевых фокусировок волновых полей. // Радиотехника и электроника, 2005. – Т.50. – №10. – С. 1221-1230.
4. Крюковский А.С. Локальные равномерные асимптотики волновых полей в окрестности основных и краевых каспидных каустик. // Радиотехника и электроника, 1996. – Т.41. – № 1. – С. 59-65.
5. Крюковский А. С., Лукин Д. С., Палкин Е. А. Краевые и угловые катастрофы в задачах дифракции и распространения волн. Казань: Каз. авиационный ин-т, 1988. – 199 с.
6. Крюковский А. С. Метод обыкновенных дифференциальных уравнений для расчета специальных функций волновых катастроф (СВК) // Дифракция и распространение электромагнитных волн: Межведомственный сборник научных трудов – М.: Московский физико-технический институт, 1992 – С. 29 — 48.
7. Крюковский А.С., Лукин Д.С. Теория расчета эталонных фокальных и дифракционных электромагнитных полей на основе специальных функций волновых катастроф. // Радиотехника и электроника, 2003. – Т.48. – №8. – С. 912-921.
8. Дорохина Т. В., Крюковский А. С., Малышенко А. Б. Разработка численных алгоритмов расчета и визуализации волновых катастроф // Вестник РосНОУ.

- Управление вычислительная техника и информатика. – М.: Российский новый университет, 2008. – Вып. 3. – С. 25 – 47.
9. Shampine L. F. Error Estimation and Control for ODEs // Mathematics Department. Southern Methodist University. – Dallas, 2004.
10. Murray L. GPU Acceleration of Runge-Kutta Integrators // IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems. – 2012. – V. 23. –№ 1. – P. 94 –101.
11. Крюковский А.С., Растягаев Д.В. Классификация унимодальных и бимодальных угловых катастроф // Функциональный анализ и его приложения. 1992. – Т.26. Вып.3. – С. 77-79.
12. Wallah D. A. High-Performance Application-Specific Networking // Department of Electrical Engineering. – Massachusetts, 1997. – 112p.