–наличие средств создания вычисляемых полей и параметризации отчетов;
– наличие средств работы с графикой (вставка изображений, представление отчета в виде диаграмм и т.д.).

В настоящее время разработана автоматизированная информационная система, в базе данных которой хранится большой объем информации, которую необходимо представлять в различных видах отчетности. На основе данной системы и будет проводиться сравнительный анализ и тестирование различных средств генерации отчетов.

Литература

1. Определение генератора отчетов [Электронный ресурс].– https://ru.wikipedia.org/wiki/Генератор_отчетов
2. Классификация отчетов [Электронный ресурс].– http://compress.ru/article.aspx?id=10013&iid=418
3. Скорость выполнения запросов SQL [Электронный ресурс].– http://ts-soft.ru/blog/sql-optimization-1

А.С. Широканев

ВЕКТОРНЫЙ АЛГОРИТМ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ИДЕНТИФИКАЦИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК НА ОСНОВЕ ГРАДИЕНТНОГО МЕТОДА С ПОСТОЯННЫМ ШАГОМ

(Самарский университет)

Введение

В современное время кристаллические наноструктуры используются во многих предметных областях: медицина, строительство, электротехника. Исследование структур кристаллов является неотъемлемо важной задачей. В частности, анализ кристаллических структур обеспечивается решением задачи параметрической идентификации кристаллических решёток [1-8]. С решением данной задачи связаны работы [1-6], в которых представлены существующие алгоритмы оценивания параметров моделей кристаллических решёток.

Важной характеристикой алгоритмов параметрической идентификации является точность идентификации, которая может быть увеличена различными модификациями известных алгоритмов. В работе [8] представлен алгоритм параметрической идентификации, который позволяет улучшить точность параметрической идентификации по сравнению с алгоритмами, представленными в работах [2, 3, 4]. Недостатком разработанного алгоритма является высокая вычислительная сложность.

Цель настоящего исследования заключается в разработке векторного алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток, позволяющего устранить недостаток высокой вычислительной сложности соответствующего последовательного алгоритма.

1 Алгоритм параметрической идентификации кристаллических решёток на основе градиентного метода

Идея представленного в работе [7] алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток заключается в следующем: для модели Браве узлы идеальной кристаллической решётки задаются векторами трансляции $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$ [9], но при этом проходят через периодически повторяющиеся плоскости. Это свойство позволяет разбить задачу оптимизации векторов трансляций на три независимые задачи оптимизации векторов, описывающих периодически повторяющиеся плоскости [6, 7]. Периодически повторяющиеся плоскости описываются нормалью к плоскости и периодом между плоскостями. Таким образом, искомый вектор должен иметь такое же направление, как и нормаль к плоскости, а норма вектора должна совпадать с периодом между плоскостями.

Для одной независимой задачи оптимизации целевая функция принимает вид (1). Алгоритм, описанный в [7], основывается на градиентном методе наискорейшего спуска.

$$E\left(\vec{d}\right)=\sum_{l=1}^{L}\left[\left(\vec{x}_l,\vec{d}\right)-i_l\left\|\vec{d}\right\|^2\right]^2, \tag{1}$$

где $i_l=\arg\min\limits_{i}\left[\left(\vec{x}_l,\vec{d}\right)-i\left\|\vec{d}\right\|^2\right]$.

Для целевой функции (1) градиент будет находиться из выражения (2).

$$\nabla E=2\sum_{l=1}^{L}\left(\left(\vec{x}_l,\vec{d}\right)-i_l\left(\vec{d},\vec{d}\right)\right)\left[\vec{x}_l-2i_l\vec{d}\right]. \tag{2}$$

В настоящей работе ограничимся градиентным методом с постоянным шагом. Таким образом, итерационный процесс будет представлять собой формулу (3).

$$\vec{d}^{\,k+1}=\vec{d}^{\,k}-\lambda\nabla E\left(\vec{d}^{\,k}\right). \tag{3}$$

Алгоритм предполагает связь между базисом векторов трансляции и новым базисом «независимых» векторов. Для простоты введём следующие обозначения: $\vec{p}_1=\vec{a}$, $\vec{p}_2=\vec{b}$, $\vec{p}_3=\vec{c}$. Переход от базиса векторов трансляции к базису независимых векторов осуществляется посредством СЛАУ (4). Обратный переход осуществляется посредством выражения (5).

$$D\vec{p}_i=\left\|\vec{d}_i\right\|^2\vec{e}_i, i=\overline{1,3}, \tag{4}$$

где $D=\left(\vec{d}_1,\vec{d}_2,\vec{d}_3\right)^T$.

$$\vec{d}_i=\left(\left[\vec{p}_k\times\vec{p}_l\right],\vec{p}_i\right)\Big/\left\|\left[\vec{p}_k\times\vec{p}_l\right]\right\|^2, k\neq l\neq i=\overline{1,3}. \tag{5}$$

2 Разработка векторного алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток

Градиентный метод с постоянным шагом исключает необходимость вычисления на каждой итерации коэффициента спуска λ. С учётом данного упрощения легко распараллеливается вычисление элементов сумм в формулах (1) и (2). Тогда каждая задача представляет собой последовательность следующих действий:

$$i_l := \arg\min_i \left[\left(\vec{x}_l, \vec{d} \right) - i \left\| \vec{d} \right\|^2 \right];$$

$$w_l := \left(\vec{x}_l, \vec{d} \right) - i_l \left(\vec{d}, \vec{d} \right);$$

$$\vec{c}_l := \left[\vec{x}_l - 2 i_l \vec{d} \right];$$

$$\vec{u}_l := \begin{pmatrix} w_l \vec{c}_l \\ w_l \end{pmatrix};$$

Каждая задача функционирует исключительно с одним узлом решётки. После выполнения всех задач необходимо провести редукцию результатов, то есть вычислить сумму векторов $\vec{u}_l$, чтобы окончательно сформировать результаты целевой функции и градиента по формулам (1) и (2). Редукция на GPU реализована по схеме «Разделяй и властвуй» с устранением конфликтов по банкам [10].

Основная реализация векторного алгоритма на GPU предполагает использование глобальной памяти для проведения операции редукции на самой видеокарте и проверки критериев останова. Реализация предполагает, что видеокарта будет занята большую часть времени.

Помимо реализации CUDA-алгоритма с глобальной памятью для сравнения был реализован алгоритм, комбинирующий использование CPU и GPU. Функция, выполняемая на GPU, вычисляет локальные суммы для каждого CUDA-блока. Суммирование оставшихся элементов и проверку критериев останова производит процессор. Таким образом, процессор многократно вызывает функцию на GPU, пока не выполнятся критерии останова.

3 Результаты исследования ускорения разработанного векторного алгоритма параметрической идентификации кристаллических решёток

Ключевой характеристикой параллельного алгоритма является его ускорение по сравнению с последовательным алгоритмом. Проведём экспериментальное исследование на различных размерностях задачи. Под размерностью задачи будем понимать количество узлов по одной из осей трёхмерной решётки. Результаты исследования приведены на рисунке 1.

Эксперименты проводились на видеокарте GeForce NVidia M840 и процессоре Intel Core i7-4710MQ. Для используемых мобильных устройств теоретическое ускорение примерно равно 10-ти. По результатам экспериментов было показано, что ускорение исследуемых алгоритмов доходит фактически до 8,5 при высоких размерностях задачи. Алгоритмы оказываются непригодными при размерностях, меньших 6-ти, что соответствует 216-ти узлам решётки. Следовательно, при количестве узлов, меньших 200-т следует использовать обычный последовательный алгоритм.

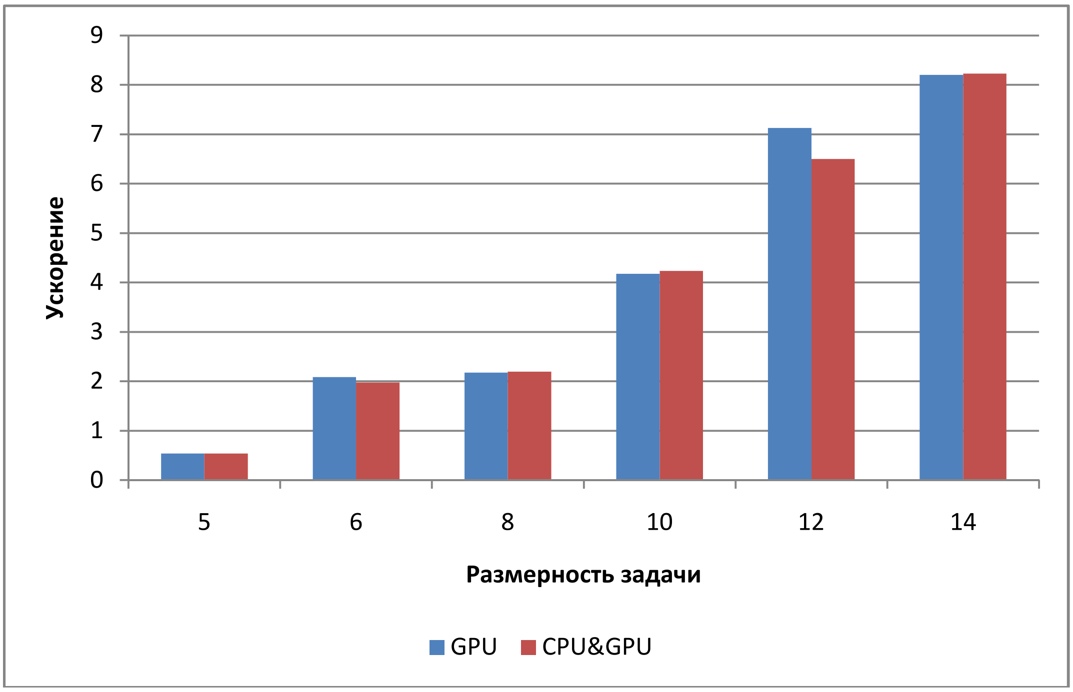

Рис. 1. Результаты исследования ускорения двух параллельных алгоритмов

Заключение

В результате проделанной работы разработан векторный алгоритм параметрической идентификации кристаллических решёток на основе градиентного метода с постоянным шагом с применением технологии CUDA. Результаты показали, что при большом количестве узлов можно достичь 8-микратного ускорения при 10-тикратном теоретическом.

Обе версии векторного алгоритма оказываются непригодными при размерностях задачи, меньших 6-ти. Рекомендуется использовать обычный последовательный алгоритм при количестве узлов, меньших 200.

Литература

1. Kupriyanov A.V., Kirsh D.V. Estimation of the Crystal Lattice Similarity Measure by Three-Dimensional Coordinates of Lattice Nodes. Optical Memory & Neural Networks (Information Optics). – 2015; 24(2). – P. 145-151.

2. Куприянов, А. В. Оценка меры схожести кристаллических решёток по координатам их узлов в трёхмерном пространстве / А. В. Куприянов, Д. В. Кирш // Компьютерная оптика. – 2012. –36(4). – С. 590-595.

3. Kirsh D.V., Kupriyanov A.V. Crystal lattice identification by coordinates of their nodes in three dimensional space. Pattern recognition and image analysis, 2015; 25(3). – P. 456-460.

4. Kirsh D.V., Kupriyanov A.V. Identification of Three-Dimensional Crystal Lattices by Estimation of Their Unit Cell Parameters. CEUR Workshop Proceedings, 2015; 1452. – P. 40-45.

5. Солдатова, О. П. Применение нечётких нейронных сетей для определения типа кристаллических решёток, наблюдаемых на наномасштабных изображениях / О. П. Солдатова, И. А. Лёзин, И. В. Лёзина, А. В. Куприянов, Д. В. Кирш // Компьютерная оптика. – 2015. –39(5). – С. 787-795.

6. Kirsh D.V., Kupriyanov A.V. Modeling and Identification of Centered Crystal Lattices in Three-Dimensional Space. CEUR Workshop Proceedings, 2015; 1490. P. 162-170.

7. Shirokanev A.S., Kirsh D.V., Kupriyanov A.V., Application of gradient steepest descent method to the problem of crystal lattice parametric identification. CEUR Workshop Proceedings, 2016; 1638. – P. 393-400.

8. Shirokanev, A.S. Development of the crystal lattice parameter identification method based on the gradient steepest descent method / A. S. Shirokanev, D. V. Kirsh, A. V. Kupriyanov // Computer Science Research Notes. - 2016. - Vol. 2603. – P. 65-68.

9. Шаскольская М.П. Кристаллография. - Учеб. пособие. - 2-е изд., перераб. и доп. - М.: Высш. шк., 1984. - 376 с.

10. Боресков А.В., Харламов А.А. Основы работы с технологией CUDA. – М.: ДМК Пресс, 2010. – 232 с.

Л.В. Яблокова, Д.Л. Головашкин, О.В. Калюжная

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ПИРАМИД ПРИ РАЗНОСТНОМ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ДАЛАМБЕРА НА ГРАФИЧЕСКОМ ПРОЦЕССОРЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ЯЗЫКА MATLAB

(Самарский университет, Институт систем обработки изображений РАН)

Введение

Глубокая взаимосвязь оптики и вычислительной техники обусловлена их взаимным влиянием, в ходе которого на рубеже 70-х и 80-х годов прошлого века возникли две самостоятельные отрасли науки: компьютерная оптика, связанная разработкой численных методов расчета и моделирования оптических устройств на ЭВМ и оптическая системотехника, в рамках которой создаются оптические элементы вычислительных устройств. Рост актуальности упомянутых отраслей в настоящее время обусловлен совершенствованием архитектуры ЭВМ (многопоточность, многоядерность, векторизация вычислений) и технологий формирования оптических элементов (переход от микро- к нано размерам). Первая особенность позволила задействовать для расчетов нано размерных элементов оптических процессоров методы строгой теории дифракции [1], характеризующиеся высокой вычислительной сложностью.

Среди численных методов строгой теории дифракции широкой популярностью заслуженно пользуется метод FDTD [1], характеризующийся высокой универсальностью (уравнения Максвелла описывают все волновые электромагнитные процессы) и простотой понимания (основан на замене производных разностными отношениями). Последнее обстоятельство позволяет записывать вычислительные процедуры метода в ясном виде на популярном языке матричных вычислений MATLAB [2].