Informatikai elemzések a Helmholtz-egyenlet megoldásához

HEGEDŰS GÉZA

Széchenyi István Egyetem
hegedus@georgikon.hu

Kulcsszavak: Helmholtz-egyenlet, Sommerfeld-féle határfeltétel, direkt módszer, ritka mátrix

A hangtan, az optika és az elektromágneses hullámelmélet számos fizikai jelensége skalár hullámegyenlet által tárgyalható. Az adott frekvenciatartományban ezt a hullámegyenletet nevezik Helmholtz-egyenletnek. Az alkalmazott Sommerfeld-féle sugárzási feltétel a Helmholtz-egyenlethez használatos. Az alábbi tárgyalásban a kétdimenziós Helmholtz-egyenletből indulunk ki. E cikkben téglalap alakú tartományon, véges differenciák alkalmazásával keressük a megoldást. A rendszer mátrixa nagy, de ritka, komplex együtthatókkal. Számítástechnikai módszerekkel próbáljuk minimalizálni a futásidőt.

1. Bevezetés

Meglehetősen sok valós jelenség tárgyalható úgy, hogy hullámtermészetet tulajdonítunk neki. Ilyenek a rádióhullámok, a látható fény, a gammasugárzás stb. A tiszta hullámtulajdonság azt jelenti, hogy a rendszer elemeinek állapota folyamatosan változik, de meghatározott időintervallumonként ugyanabba az állapotba kerül. A hullámtermészetnek megfelelő viselkedés folytonos függvényeket tartalmazó differenciálegyenletekkel írható le.

E tárgykörben alapvető fontosságú a 2. szakaszban bemutatásra kerülő Helmholtz-egyenlet. Az egyenlet egy adott időpillanatra vonatkozóan összefüggést ad meg a tér bizonyos pontjában a függvény értéke és annak változása (talán még pontosabban: változásának a változása) között. Az egyenlet megoldása azt mondja meg, hogy bizonyos peremfeltételek esetén a térben hol mekkora lesz a hullámfüggvény értéke. Ha tudjuk a tér vizsgált tartományának egyes pontjaiban a hullámfüggvény értékeit, valamint a határfeltételeket, akkor a hullámegyenlet meghatározza a határon belüli állapotokat. Egy lehetséges határfeltétel a Sommerfeld-féle, mely azt rögzíti, hogy a vizsgált zárt tartományba nem jön kívülről sugárzás.

Mivel kivitelezhető analitikus megoldás nem lehetséges, ezért marad a numerikus megoldás lehetősége. A tárgyalt numerikus módszer sok ismeretlenes lineáris egyenletrendszert eredményez, melynek mátrixa – ennek megfelelően – nagy, de ritka, speciálisan ötátlós, mely kihasználható a gyakorlati alkalmazásra szánt számítógépes megoldó programban. Mivel az operatív tár kezelése nagyságrendekkel gyorsabb, mint a háttértáraké, ezért a számítási gyorsaság szempontjából alapvető, hogy minél több térinformációt a memóriában helyezzünk el. Ily módon a számítandó tér nagysága, és a téradatok memóriában történő tömörebb ábrázolásának bonyolultsága között kell ideális optimumot találni a leghatékonyabb megoldáshoz. Ennek fokozatait elemezzük a 3. szakaszban. A gyakorlati megoldást tekintve, az elkészített számítógépes megoldó programmal szemben állított alapvető követelmény, hogy belátható, elviselhető időn belül szolgáltasson eredményt. Nyilván ez az idő szoros összefüggésben van a végrehajtandó műveletek számával. A következő szakaszban megvizsgáljuk a futásidő csökkentésének módjait, majd az 5. szakasz a hullámtér résztartományokra bontásának előnyeit tárgyalja. Amennyiben a hardver és természetesen az operációs rendszer támogatja a párhuzamos feladat-végrehajtást, akkor érdemes ezt kihasználni képes algoritmust készíteni a feladat megoldásához, mellyel kapcsolatos ismeretekről az utolsó szakaszban lesz szó.

2. A modell

2.1. A folytonos modell

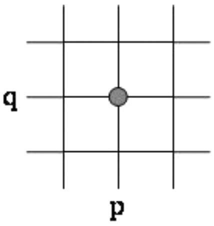
A hullámfüggvény egy hullámtulajdonsággal rendelkező komplex értékű folytonos függvény [1], mely a mostani tárgyalásunkban téglalap alakú tartományon van értelmezve. A hullámtér-állapotot a Helmholtz-egyenlet szolgáltatja, melynek változója a hullámfüggvény. Ha a végtelen tér egy véges tartományát vizsgáljuk (mert gyakorlatilag csak ez lehetséges), akkor a határt úgy kell kezelnünk, hogy ne módosítsa a tényleges hullámteret a határolt tartományon [2]. Ezt a határvonal pontjaira megfogalmazott határfeltétellel igyekszünk biztosítani. Egy lehetséges ilyen előírás a Sommerfeld-féle határfeltétel [3]. Ahhoz, hogy a hullámegyenletet és a határfeltételt kielégítő hullámfüggvényt meghatározzuk az adott tartományon, szükséges megadni magát a függvény értékét a tartomány bizonyos pontjaiban.

2.2. A diszkrét modell

A vizsgált téren értelmezett folytonos hullámfüggvény meghatározása numerikus módszerekkel csak valamilyen közelítéssel lehetséges [4]. Azt várjuk el, hogy a tartomány bizonyos diszkrét pontjaiban a függvény értéke egyezzen meg a folytonos modell szerinti hullámfüggvény-értékekkel. Nyilván minél sűrűbb a tartományon ez az értékmeghatározás, annál pontosabb a diszkrét modell. Praktikusan egyenközű rács-lefedést alkalmazunk a hatékony számítástechnikai megoldás érdekében.

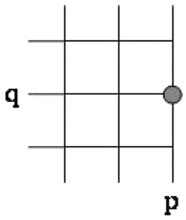
Mivel csak a rácspontokhoz tartozó függvényértékekkel operálhatunk, ezért a hullámegyenletben és a határfeltételben szereplő differenciálok közelítését is ezek felhasználásával határozzuk meg. Tekintsünk az alábbiakban egy-egy példát a három különböző rácspont-típusra [5]. A *p* és *q* koordináták a rácspont azonosítására szolgálnak a lefedő rácsban.

A tartomány belsejében:



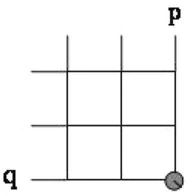
1. ábra
A tartomány belső pontja

A tartomány peremén (kivéve a sarkokat):



2. ábra
Egy keleti perempont

A tartomány sarkain:



3. ábra
A dél-keleti sarokpont

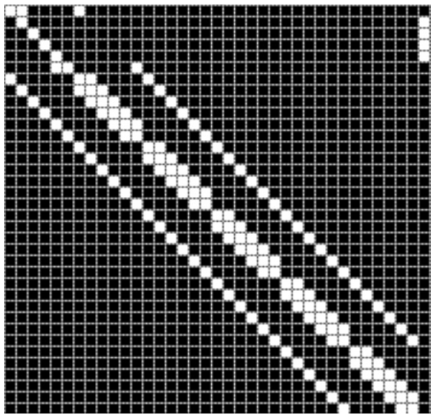
Minden rácspontra egy egyenlet írható fel. Az összes egyenlet egy komplex együtthatós lineáris egyenletrendszert alkot, melynek ismeretlenjei a rácspontok hullámfüggvény értékei. Ha valamely rácspontban, vagy rácspontokban ismerjük a függvény értékét, így lehet ez például adott hullámforrás esetén, akkor az egyenletrendszer megoldásával megkapjuk a többi rácsponthoz tartozó értéket is.

3. Optimális tárolás a memóriában

A numerikus matematikai modell tehát egy egyenletekből álló rendszert eredményez, melynek lényegi része egy mátrix. Ez nem más, mint komplex számok táblázata, melynek kezelésére régóta fejlett programozási eszközök állnak rendelkezésre.

Ezen mátrixon végzett műveletekkel kapjuk meg a megoldást. A műveletek elvégzéséhez be kell tölteni a mátrixot a memóriába. Az elv egyszerű, azonban viszonylag kis hullámtér esetén is szembesülünk azzal a problémával, hogy túl nagy a mátrix mérete a rendelkezésre álló memóriakapacitáshoz képest. Mit lehet tenni?

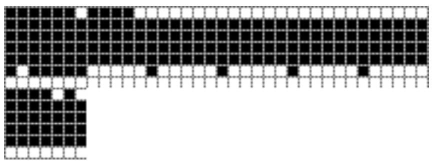
Megfelelő sorrendben írva az egyenleteket, a *4. ábrának* megfelelő mátrix keletkezik, ahol a fehér négyzetek zérustól különböző, míg a feketék zérus értékeket jelentenek. Az ábra egy meglehetősen kis méretű modellt érzékeltet, ahol a lefedő rács 5x5-ös.



4 .ábra
Az egyenlet mátrixának klasszikus ábrázolási módja

Az érdemi információt nyilván a nem zérus elemek hordozzák, így mondhatjuk azt, hogy ezeket tároljuk, a többit nem, azok zérusok. Az első szakaszban bemutatott modell egy speciális mátrixot eredményez: öt átlós sorban és az utolsó oszlopban lehetnek zérustól különböző értékek, és ez tényleg elenyésző része a teljes mátrixnak. Azonban gondolni kell arra is, hogy az átmeneti számítási értékeknek is helyet kell biztosítani a kiindulási értékek mellett.

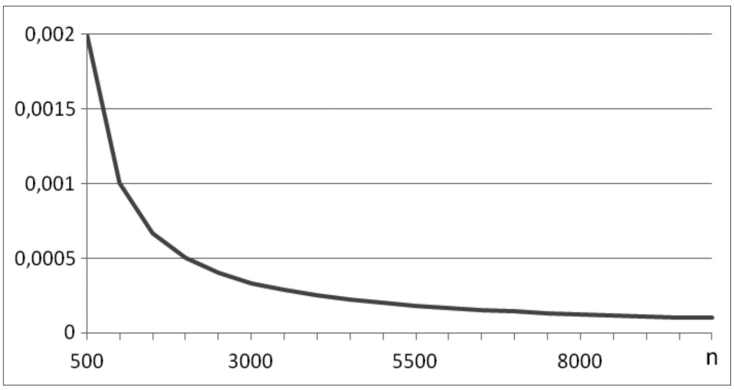
Ebből a megfontolásból külön tárolva az utolsó oszlopot és a két alsó értékes átlót, az *5. ábrának* megfelelő struktúrára transzformálhatjuk a 4. ábra szerinti mátrixot.



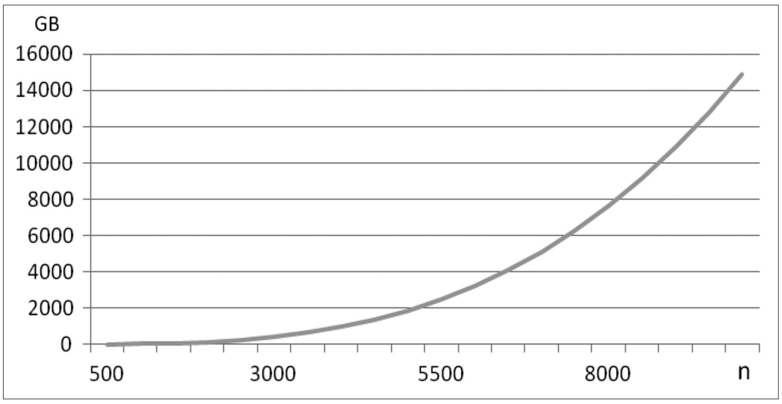
5. ábra
A mátrix egy részének optimális tárolási módja

Ez jelentős tártakarékosságot jelent. A *6. ábra* egy *n* x *n* -es lefedő rács esetén mutatja a takarékosabb tárolási méret arányát az eredetihez képest.

6. ábra
Takarékosabb tárolási méret viszonya az eredetihez



A *7. ábra* a takarékosabb tárolási mód esetén, $n \times n$-es lefedő rácsot feltételezve érzékelteti a tényleges operatív tárigényt GByte-ban. Látható, hogy nagyobb n esetén ez gyakorlatilag teljesíthetetlen.



7. ábra Tárigény optimális tárolási mód esetén

4. A futásidő

A 3. szakaszban tárgyalt operatív tárkapacitással kapcsolatos problémára jó megoldásnak tűnhet a RAM kiterjesztése a háttértár virtuális memóriakezelésével, hiszen könnyedén biztosítható a merevlemezek a memóriánál nagyságrendekkel nagyobb tármérete. Azonban egyszerű mérésekkel is igazolható, hogy ha csak a minimális adatot és műveleti tárterületet igyekszünk biztosítani a RAM-ban (például extrém esetben a 4. ábra szerinti öt nem zérus átló vektorát) és eközben rászorulunk a folyamatos háttértár-kezelésre, akkor reménytelenül nagy számítási idők jelentkeznek, hiszen a merevlemez írási-olvasási ideje nagyságrendekkel nagyobb, mint az átlagos memóriaműveleté. Persze nem kell ezért teljesen elvetni a háttértár bevonását, úgy kell meghatározni a szerepét, hogy ne hátráltassa, ne várakoztassa a memóriában zajló folyamatokat. Erre látunk majd megoldást az 5.3 szakaszban.

A futásidő és a szükséges műveletszám között szoros összefüggés van, a szorzó faktort az igénybevett számítógép paramétere (alapvetően a processzor gyorsasága) határozza meg. A mátrix speciális voltát kihasználva, a fölösleges műveletek kiküszöbölésével lényeges időmegtakarítás érhető el. A *8. ábra* a teljes mátrixú általános megoldás műveletigényéhez viszonyítja a specialitást kihasználó szükséges műveletigényt. Látható, hogy kombinatorikus robbanáshoz vezetne, ha nem élnénk ezzel a lehetőséggel.

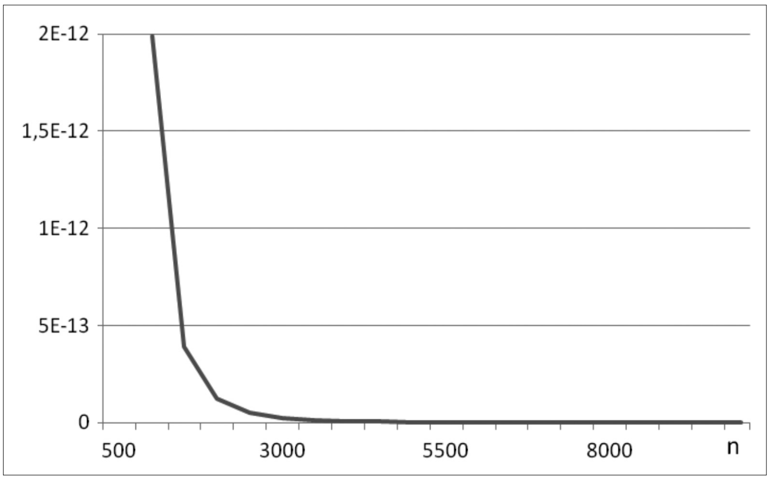
A szükségesre szorítkozó tényleges műveletigényt a *9. ábra* érzékelteti. Ez gyakorlatilag azt jelenti, hogy a skála elején lévő n-ekre is – átlagos asztali számítógépet tekintve – napokat vehet igénybe a program futása, a rácspontok számát növelve azonban egyre használhatatlanabbá válik a programunk a hosszú megoldási idő miatt.

5. A tartomány felosztása

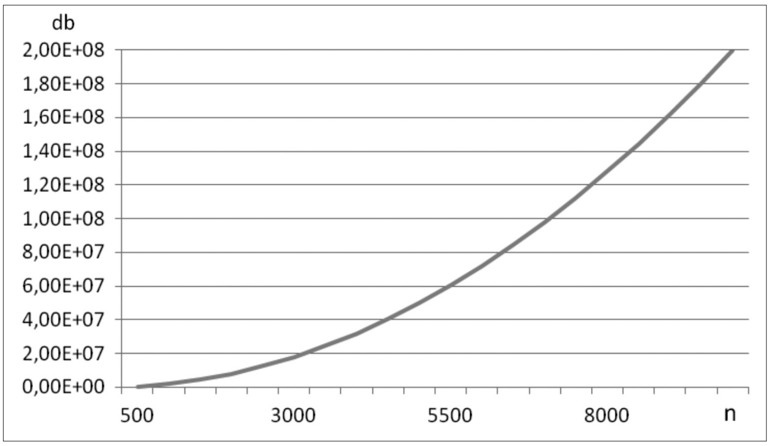
A hullámtér résztartományokra osztásával – talán meglepő módon – mind az igényelt memóriakapacitás, mind a szükséges műveletigény jelentős csökkentése érhető el. Az egyes résztartományokon a számítások külön-külön végezhetők, de természetesen biztosítani kell, hogy a szomszédosak a hullámterjedési információkat egymásnak átadják. Ezen okból a tartományokon végzett számítások sorrendjét a hullámterjedés határozza meg.

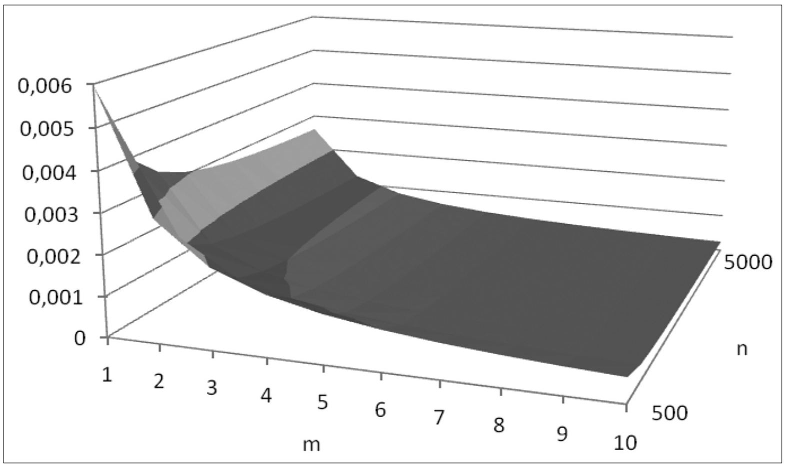
A *10. ábra* szemlélteti az m résztartomány összes adatának az osztatlan tartomány adatmennyiségéhez viszonyított arányát. Látható, hogy felosztással, az összes térinformációt egyidejűleg a memóriában tartva is jelentős megtakarítás érhető el, természetesen a betöltött résztartományok arányában ez a kapacitásszükséglet tovább csökkenthető.

8. ábra
A redukált műveletszám és az eredeti aránya



9. ábra A redukált műveletigény





10. ábra
Résztartományokra bontásos és az osztatlan kapacitásszükséglet aránya

6. Párhuzamos feladatvégrehajtás

6.1 Kihasználatlan számítási kapacitás

A közelmúltig elsősorban a processzorok órajelének folyamatos növelésével javították a számítógépek számítási teljesítményét, majd manapság már – döntően a termelődő hő okozta problémák miatt – inkább a műveletvégző egységek: magok, processzorok számának többszörözésével kívánják a hatékonyságot fokozni. Azonban mit sem ér a fejlett hardver és operációs rendszer, ha a problémamegoldó algoritmus nem tudja kihasználni ezeket.

A *11. ábra* egy szekvenciális algoritmusú program futását mutatja egy kétprocesszoros, processzoronkénti 8 magos számítógépen.

6.2. Szuperpozíció

Ha a hullámtér több forrást tartalmaz, akkor az egyes források által keltett hullámtér külön-külön, a többiektől függetlenül számítható, majd az eredmények – mint komplex számtáblázatok – összeadódnak, jelentését tekintve a keltett hatások egymásra rakódnak.

A forrásonkénti számításigényt a *12. ábra* szemlélteti. Látható, hogy a lefedő rács méretét meghatározó *n* növelésével bekövetkező műveletigény-növekedést le lehet szorítani a résztartományok *m* számának növelésével.

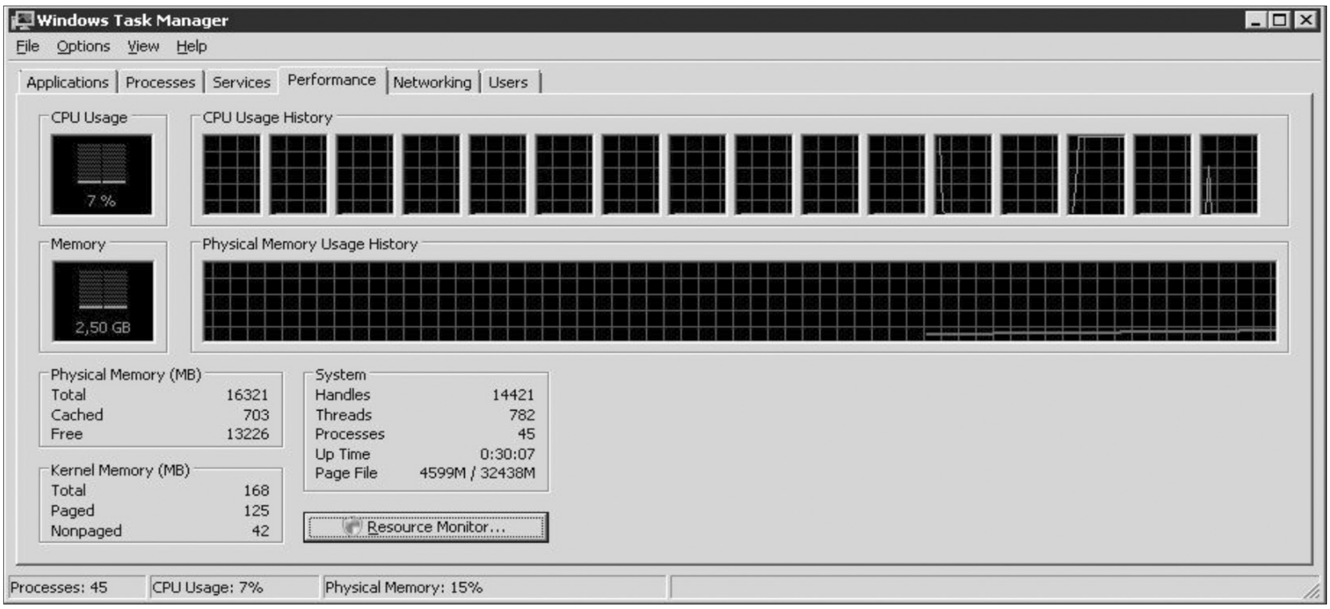
6.3. Virtuális memória használata

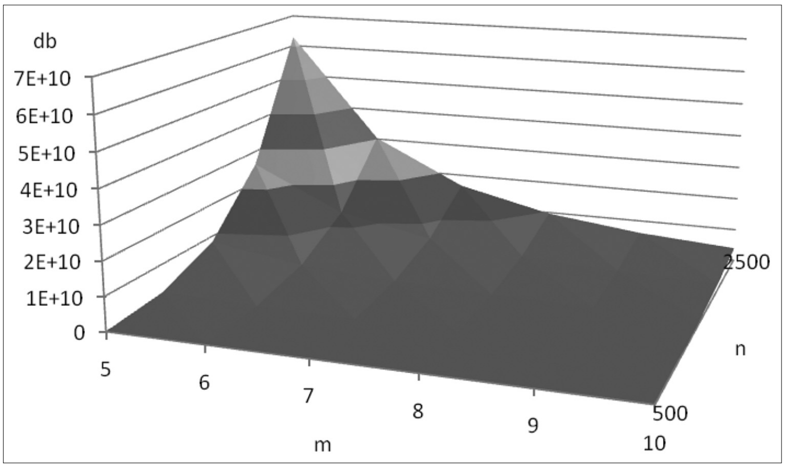
A 4. szakaszban vázoltuk a virtuális memória használatának problematikáját. Az 5. és 6.2 szakasz alapján elérhető, hogy résztartományokra osztással, illetve a különböző források független számításával a memóriába töltött feladategységek megoldási ideje összemérhető a háttértár kezelési idejével. Ekkor célszerű külön végrehajtó szálat biztosítani a háttértár és memória közti adattöltés céljára, míg a többi szálon elindított részfeladat számítása folyhat. Természetesen szükség van egy figyelő-ütemező vezérlő modulra, mely az egyes résztartományi megoldókat elindítja, ha rendelkezésre állnak a neki szükséges adatok, illetve bekéri a résztartományi alapadatokat a háttértárról.

6.4. Résztartományok párhuzamos számítása

Az 5., 6.1., valamint 6.3. pontokban tárgyaltak szerint résztartományi számítások és adattöltős feladatok oszthatók ki egyidejűleg a különböző processzormagokra. Nem igaz az azonban, hogy a teljes futásidő osztódik a magok számával, valójában ennél a hányadosnál nagyobb, az egyszálú megoldás idejénél pedig kisebbre kell számítani. A teljes megoldási idő függ az eddig tárgyalt összes paramétertől, beleértve még a források elhelyezkedését is. Általánosan csak az előző – számítási időre vonatkozó – alsó és felső korlát mondható ki.

11. ábra Kihasználatlan processzorkapacitás

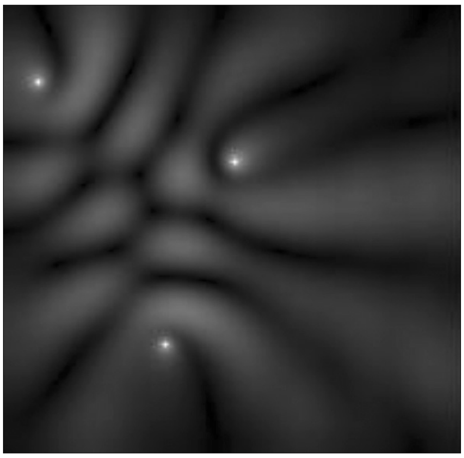




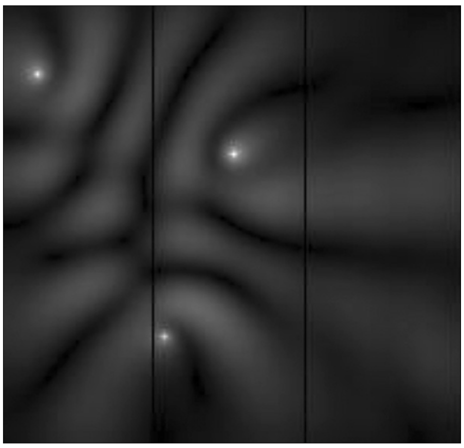
12. ábra
Forrásonkénti számításigény m *és* n *függvényeként*

A *13. ábra* egy 200x200-as ráccsal lefedett, három forrással rendelkező hullámtér megoldásának intenzitását szemlélteti. Egy átlagosnak tekinthető (négymagos) asztali számítógépen, párhuzamosítás nélkül, osztatlan tartománnyal a megoldási idő 97 másodperc (védett kódú programmal).

Ugyanezen tér megoldása három résztartományra bontással, párhuzamosítás nélkül 19 másodperc. A résztartományok határait a *14. ábra* érzékelteti. Csak külön az első résztartomány számítási ideje a benne lévő forrásra szorítkozva 3 másodperc (párhuzamosítás nélkül). A teljes tér számítása párhuzamosítással 12 másodperc.



13. ábra
Megoldás osztatlan tartományon



14. ábra
Megoldás résztartományokra bontással

7. Összefoglalás

Az iteratív számítási módszerek nagy előnye az általános direkt módszerrel szemben a jóval gyorsabb végrehajtás, azonban specialitások kihasználásával a direkt módszer is hatékonyabbá tehető, mint azt ebben a cikkben is láttuk. Ez a modell is, – mint általában minden modell – számos hibával terhelt, nyilván közelítő megoldást szolgáltat. A 3-6. szakasz megfontolásai érzékeltetik a megoldáshoz szükséges belső ábrázolásmód, a résztartományokra bontás és a párhuzamosíthatóság jelentőségét, figyelembevételükkel kialakítható az optimális módszer.

Bár a koncepció és az összefüggések azt sugallják, hogy a minél tömörebb tárolással és a még több tartományra osztással nő a hatékonyság, sajnos ezek előnytelen hatást eredményezhetnek, így a megoldás hűségromlását is. Ezzel együtt sok esetben, bizonyos paraméter-határok között jól alkalmazhatók az e cikkben tárgyalt technikák.

A szerzőről

HEGEDŰS GÉZA a József Attila Tudományegyetemen szerzett matematika-fizika-számítástechnika tanári diplomát, 2001-től a Pannon Egyetem Georgikon Karának Gazdaságmódszertani Tanszékén tanít. Keszthelyen képelemzési megoldásokkal támogatja a helyi kutatásokat. A Széchenyi István Egyetem Multidiszciplináris Műszaki Tudományi Doktori Iskolájának PhD hallgatója, kutatási területe a hullámegyenlet numerikus megoldásainak vizsgálata.

Irodalom

[1] Simonyi K, Fodor Gy.,
Villamosságtan,
Tankönyvkiadó, Budapest, Vol. 2 (1967), pp.290–364.

[2] Arnold S.,
Mathematische Theorie der Diffraction,
Math. Ann., 47 (1896), pp.317–374.

[3] A. Sommerfeld,
Die Greensche Funktion der Schwingungsgleichung
Jhrber. Deutsch. Math.-Verein, 21 (1912), pp.309–353.

[4] Iványi A.,
Folytonos és diszkrét szimulációk
az elektrodinamikában,
Akadémia Kiadó, Budapest (2003), pp.180–240.

[5] Strand, B.,
Summation by parts for finite difference approximation
for dldx. J. Comput. Phys., (1994), pp.47–67,110.

Hírek

A Cisco olyan továbbfejlesztett funkciókat mutatott be adatközponti termékportfóliójához, amelyekkel hatékonyabb adatvédelem és nagyobb hibatűrés érhető el, továbbá csökkenthető a tárolóhálózatok (SAN-ok) költsége és összetettsége. A fejlesztések a Cisco MDS 9000 sorozatra terjednek ki:

– gyorsabb nagy távolságú adatforgalom: Cisco XRC Acceleration
– adatközpontok közötti adatbiztonság: Cisco TrustSec Fibre Channel Link Encryption
– gyorsabb biztonsági mentések és adat-visszaállítás: Cisco Input/Output (I/O) Accelerator
– nagyméretű tárolóhálózatok kezelése: Cisco SAN Fabric Manager

Az új funkciókkal az IBM System z nagygépes tárolókörnyezetet, valamint nyílt rendszerű SAN-okat használó ügyfelek nagyobb távolságokon is fokozott biztonságot és gyorsabb adatforgalmat érhetnek el. Az új megoldás illeszkedik a Cisco Data Center 3.0 stratégiájába, amelynek révén a változó üzleti igényekre gyorsan reagáló, új generációs adatközpontok építhetők ki.

A Cisco közzétette a skóciai Aberdeenben, valamint a kaliforniai San Joséban folytatott HealthPresence program eredményeit, amelyekből kiderül, hogy a betegek 90%-a elégedett a programban alkalmazott távorvoslási szolgáltatással és másoknak is ajánlaná azt.

A Cisco HealthPresence egy olyan betegellátási modell, ahol az orvos és betege különböző – egymástól akár több ezer kilométerre található – helyszínen tartózkodik. A konzultációra egy valósághű találkozást idéző videokonferencia keretében kerül sor, miközben az orvos – a HealthPresence-hez kapcsolódó távdiagnosztikai eszközök (sztetoszkóp, vérnyomásmérő, pulzoximéter) segítségével – valós idejű információkat, adatokat kap a páciens állapotáról. A Cisco megoldásával az egészségügyi szolgáltatók hatékonyabb módon nyújthatnak szolgáltatásokat a sok esetben szűkös klinikai erőforrások optimális felhasználása révén olyan betegeknek is, akik a földrajzi távolság miatt ezeket egyébként nem vehetnék igénybe. Az egységet egy orvosi eszközök kezelésében jártas személy működtetheti, aki a valós idejű kapcsolat segítségével a központban dolgozó orvos instrukció alapján kezeli a műszereket.

A Cisco a dolgozók és orvosok pozitív visszajelzéseit követően a cég valamennyi USA-beli irodájára ki szeretné terjeszteni a szolgáltatást.

Az iGO My way 2009 iPhone-ra kifejlesztett navigációs megoldásának verziói már elérhetők az iTunes weboldalon. A legfrissebb Navteq és Top-Map térképeket kínáló Észak-Amerika, Nyugat-Európa és Európa csomagok az iTunes & AppStore oldalon vásárolhatók meg. A termék ára magába foglalja a 2010 végéig ingyenes, negyedéves térképfrissítéseket is. A Nav N Go ezzel az elsők között kínál valósághű, 3D-s, turn-by-turn navigációt az Apple népszerű telefonjára.

A magyar fejlesztőcég a nemrégiben bemutatott, iGO amigo szoftverét dolgozta át az iPhone-os alkalmazásra, így a felhasználók egy igazán egyszerű kezelőfelülettel és menüvel rendelkező programot használhatnak, az iPhone-on már megszokott funkciók integrálásával és trendi képi megjelenítéssel. Az alkalmazás az egyetlen olyan, iPhone-ra fejlesztett navigációs szoftver, amely a 3D-s épületmodellek és nevezetességek mellett 3D-s domborzati térképeket és tereptárgyakat is kínál, így nyújtva még valósághűbb látványt a navigációs képernyőn.

Tekintettel arra, hogy a térképek tárolása a készüléken történik, a felhasználókat nem érinti a mobilhálózat lefedettsége. A rendszeres és ingyenes térképfrissítések révén ugyanakkor mindig a legfrissebb térképekhez juthatnak, így tökéletes felhasználói élményben részesülhetnek. Ez azt jelenti, hogy nincs többé fehér folt még a legtávolabbi helyeken sem, és ami még fontosabb, nincsenek havi díjak vagy rejtett adatátviteli költségek.

Az iGO My way 2009 Európa szoftver 40 ország, köztük Magyarország részletes térképét tartalmazza és 29 nyelven kínál hangnavigációt, beleértve cirill és görög betűs nyelveket is. A Nyugat-Európa kiadásban 22 ország térképe szerepel, míg az Észak-Amerika verzióban az Egyesült Államok és Kanada részletes térképe érhető el.

A funkciók teljes listája a *www.igomyway.com* honlapon tekinthető meg.