ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 88 за 2014 г.

Шалыга Д.К.

О точном вычислении кубо-линейного отношения кривых Пеано

О р д е н а   Л е н и н а
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Р о с с и й с к о й   а к а д е м и и   н а у к

Д.К.Шалыга

О точном вычислении кубо-линейного отношения кривых Пеано

Москва — 2014

Шалыга Д.К.

О точном вычислении кубо-линейного отношения кривых Пеано

В работе представлены результаты точного вычисления кубо-линейного отношения правильных фрактальных трёхмерных кривых восьмого рода. Помимо этого, в работе описана теоретическая часть и даётся описание алгоритма вычислений. При исполнении данного исследования была написана программа на языке C++ с использованием библиотеки MPI, для точных вычислений использовалась гибридная машина МВС-Экспресс с коммутирующим модулем. В работе описаны способы решения проблем, связанных с использованием памяти, и методы улучшения использования кэш-памяти процессора. Были найдены точные значения кубо-линейных отношений для всех кривых из рассматриваемого класса. Подробно рассмотрены характеристики кривой, обладающей оптимальными свойствами локальности, а также был предложен новый метод кодирования фрактальных кривых.

Ключевые слова: фракталы, кривые Пеано, библиотека MPI, МВС-Экспресс

Dmitriy Konstantinovich Shalyga

On precise evaluation of Peano curves' cube-linear relation

The paper contains results of precise evaluation of cube-linear relation for three-dimensional fractal curves of eight's kind. Besides pure numbers paper contains theoretical part and description of evaluation algorithm. Within this research a C++ program was written. It uses MPI library and machine MVS-express was used for calculations. Also problems of memory and cache use are described, along with solutions. As a result of research precise numbers were calculated for each curve from the presented class. The characteristics of the curve with the optimal locality were observed. The new method of encoding of the fractal curves has been proposed as well.

Key words: fractals, Peano curves, MPI library, MVS-express

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 14-21-00025).

Введение

Непрерывные отображения отрезка на квадрат и куб, называемые в честь открывшего их итальянского математика Джузеппе Пеано кривыми Пеано, находят многочисленные приложения в computer science (см. [1])

Важной характеристикой трёхмерных кривых Пеано является так называемое *кубо-линейное отношение*. Для пары точек оно равняется отношению куба расстояния между образами к расстоянию между прообразами. Верхняя грань кубо-линейных отношений для всевозможных пар различных точек кривой называется кубо-линейным отношением кривой. Для приложений представляют интерес кривые с возможно меньшим кубо-линейным отношением. В данной статье речь будет идти только о трёхмерных кривых Пеано.

Правильной фрактальной кривой Пеано, согласно [2], называется отображение отрезка на куб, допускающее разбиение области определения на несколько равных отрезков (фрактальных периодов), таких, что ограничение кривой на любой из ее фрактальных периодов подобно всей кривой. Минимально возможное количество фрактальных периодов называется *фрактальным родом* кривой. Образы этих равных отрезков называют *фракциями*. Кривая Пеано-Гильберта является единственной (с точностью до симметрии и подобия) кривой фрактального рода 4. В данной статье исследуются только непрерывные правильные кривые, имеющие фрактальный род 8.

Из определения кривой следует, что каждая фракция ограничена кубом (т.к. каждая фракция подобна всей кривой, а та в свою очередь заполняет куб). Отметим точками центры всех фракций. Далее в порядке обхода кривой данных фракций соединим отмеченные точки. Получили ломаную, которая примерно показывает, в каком порядке кривая обходит куб. Полученная ломаная называется *прототипом* кривой.

Отметим в пространстве все точки входа, а также последнюю точку выхода (т.е. конец кривой). Соединим эти точки отрезками в порядке прохождения кривой через них. Полученную кривую будем называть *кривой обхода.*

Из определения правильных фрактальных кривых следует, что каждая фракция может быть получена из всей кривой посредством аффинного преобразования координат. Для каждой фракции такое преобразование обычно отличается от преобразований для других фракций. Если рассматривать только те фракции, что имеют прообразом отрезки максимальной длины, то список их преобразований координат будет называться *базовыми преобразованиями*.

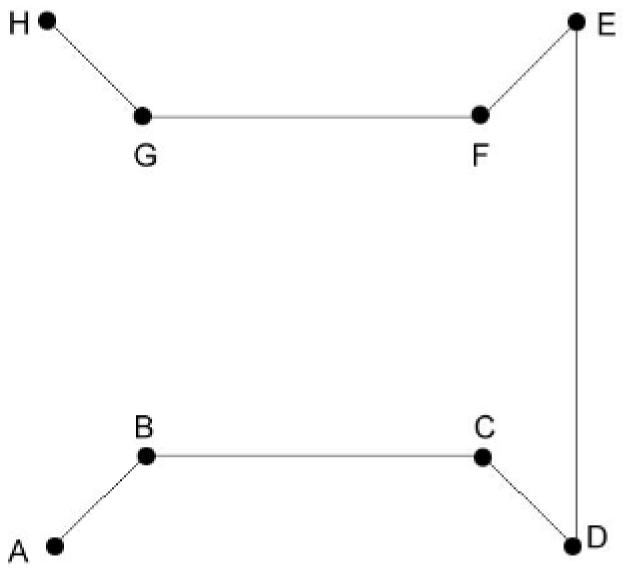
Таким образом, для полного определения конкретной кривой Пеано требуется указать её прототип и базовые преобразования. Более подробно этот факт рассмотрен и доказан в [2].

Автор хотел бы выразить благодарность Е.В. Щепину за постановку задачи и помощь в работе.

Способы записи кривых

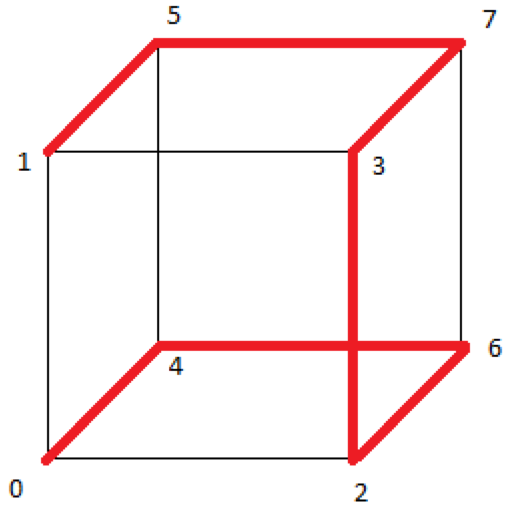
На практике для представления кривых Пеано используются разные методы. Так, в [3] описывается способ записи кривой, задающий положение и поворот каждой следующей фракции относительно предыдущей. Иными словами – вводится прямоугольная система координат с осями i,j,k. Отрицательное направление принято обозначать названием соответсвующей оси, написанным заглавной буквой, т.е. IJK. Для записи прототипа указываются направления движения от одной вершины прототипа к другой. Назовём такой метод представления *относительным*.

Следующая кривая фрактального рода 8 была подробно изучена в дипломной работе Сергея Токарева [4]. Прототип KikjKIk.



Этот метод удобен для теоретических выкладок, но для численного анализа он не подходит. Причина в том, что положение каждой точки при этой записи выражается через положение предыдущей. Таким образом, для вычисления положения последней точки требуется пройти по всем предыдущим.

Был придуман иной подход: для каждой вершины куба задать число, соответствующее данной вершине, и прототип будет записываться как набор из восьми чисел, описывающих порядок обхода вершин. Т.к. используется единичный куб, то координаты вершин по любой из осей равны либо 1, либо 0. Таким образом, естественно задать в соответствие вершинам числа, двоичная запись которых совпадает с координатами данных вершин. Назовём данный метод записи *абсолютным*.



На рисунке изображён прототип всё той же кривой Токарева, но с нумерацией вершин. Запись прототипа выглядит так: 04623751.

Для записи базовых преобразований тоже можно использовать как относительный, так и абсолютный метод. В первом случае записывается новое положение координатных осей относительно старой системы координат, а именно, для каждой оси указывается, в какую ось она переходит. Например, преобразование ij jK Ki показывает, что ось i переходит в ось j, ось j переходит в ось k и при этом меняет направление на противоположное, ось k переходит в ось i со сменой направления. Иногда есть возможность использовать сокращённую запись их трёх букв вместо шести. Тем не менее, такая запись применима не всегда – ниже будут приведены примеры.

Далее приведена таблица, описывающая одну и ту же кривую (в данном случае – кривую Токарева) двумя указанными выше методами.

Параметр	Относительное	Абсолютное
Базовый прототип	KikjKIk	04623751
1я вершина	jKi	02315764
2я вершина	Kji	57640231
3я вершина	Kji	73154026
4я вершина	kKiIjj	73154026
5я вершина	kKiIjj	01546732
6я вершина	kjI	32675401
7я вершина	kjI	01546732
8я вершина	jkI	32675401

Как уже было упомянуто выше – относительная запись удобна для теоретических исследований и сложноприменима для компьютерных вычислений. Таким образом, была создана абсолютная запись для базовых преобразований. Она предполагает запись прототипа в старой системе координат, но уже после применения преобразования к прототипу. При такой записи экономится вычислительная мощность в силу того, что нам будет изначально известно новое положение фракции.

Модель для вычислений

Вычисление кубо-линейного отношения кривой происходит в несколько этапов. Изначально строится прототип кривой, т.е. восемь точек в пространстве, и указывается порядок обхода. Таким образом получается первое *подразделение* кривой. Далее вместо каждой из этих точек строится восемь точек, к которым применяется базовое преобразование, соответствующее фракции, которой они принадлежат, с обязательным указанием порядка обхода. Данная пара, множество точек и порядок обхода, образуют второе подразделение. Этот процесс можно повторять и дальше. Если повторять его до бесконечности, то в итоге будет получена описываемая кривая. В силу того, что вычислительная техника имеет ограниченный запас памяти, абсолютно точное представление кривой получить невозможно. Тем не менее, Е.В. Щепин доказал (см. [6]), что кубо-линейное отношение кривой достигается на определённом подразделении и далее уже не изменяется. Обычно, если кубо-линейное отношение не изменяется на трёх подразделениях подряд, то это означает, что достигнут максимум и далее увеличений значения не будет. В данный момент важно отметить, что на сходимость влияет метрика, по которой определяется расстояние. На практике обычно применяется евклидова и мажоритарная метрики. Тем не менее, все указанные факты верны и для других метрик.

Изначально предполагалось вычислять кубо-линейное отношение посредством постоянного вычисления образов и прообразов перебираемых точек. Именно такой подход был применён в работе С. Токарева. Сильной стороной этого подхода является простота реализации и низкие требования к ЭВМ. Слабой же стороной этого метода является очень высокое время исполнения. Причина в том, что для вычисления координат каждой точки постоянно требуется находить координаты образа.

Во избежание таких промежуточных затрат происходит предподготовка данных. А именно, вычисления происходят следующим образом:

1. выбирается подразделение, на котором будет происходить поиск кубо-линейного отношения;
2. строятся все образы точек в трёхмерном пространстве;
3. каждую точку приближаем к её «идеалу» –– той точке, которой она стала бы при абсолютной точности, т.е. из одной точки в центре куба

(образа точки на отрезке) мы создаём восемь углов и сопоставляем им восемь прообразов на отрезке. В итоге имеется массив пар вида <точка на отрезке, точка в пространстве>.

Последний шаг задаёт разительное отличие от всех исследований, которые были проделаны ранее. Причина в том, что исследователи брали точные значения положения точек только при теоретических исследованиях. На практике обычно использовались значения координат, полученных при построении подразделений (метод был описан выше). Т.е. исследователям требовалось построить подразделение намного более высокого порядка для получения точных данных. Например, кривая Токарева имеет *глубину* 3. Говорят, что кривая имеет глубину N, если на данном подразделении имеются стыки фракций, не изоморфные стыкам фракциям на более ранних подразделениях, и при этом данное условие не должно выполняться для следующего подразделения. Нередко удаётся доказать (см.[6]), что если кривая имеет глубину N, то максимум кубо-линейного отношения достигается на подразделении N+3, что верно и для кривой Токарева. Для обработки седьмого подразделения требуется построить 8^7 точек и перебрать, соответственно, $8^{14} = 4.3 * 10^{12}$ пар точек. Такое количество вычислений в целом не являетя чем-то запредельным для современных ЭВМ, но сложности возникают в том случае, когда встречаются кривые большой глубины. Так, например, есть кривые глубины 7 (т.е. максимум кубо-линейного отношения будет достигнут лишь на десятом подразделении), и для них нужно перебрать $8^{20} = 1.1 * 10^{18}$ пар точек, что уже намного сложнее. Даже перебирая миллиард пар в секунду, на это потребовалось бы более тридцати лет.

Для того чтобы избежать этих массивных вычислений, исполняется третий шаг описанного выше алгоритма. Он позволяет нередко найти кубо-линейное отношение кривой уже на уровне глубины кривой, т.е. зачастую на три подразделения меньше, чем положено по теории в общем случае.

Тем не менее, возникает проблема иного рода: для хранения всех пар значений требуется огромное количество памяти. Для некоторых случаев это более 60 ГБ. Но, как уже было сказано выше, полный перебор требуется не всегда. При расчёте нового подразделения на границе фракции образуется стык. Если стык новый, то есть не является изоморфным ни одному стыку из предыдущих подразделений, то в данном моменте кубо-линейное отношение может улучшиться. Если же он старый, то кубо-линейное отношение не может дать значений, которых не было ранее. Таким образом, посредством сравнения стыков отбрасывается огромное количество заведомо плохих вариантов. Для хранения всех предыдущих стыков используется хэш-таблица. В таблице элементами являются списки (если быть точным – бинарные деревья) стыков, указатели на которые расположены в памяти по адресу, равному значению функции CRC32 от данного стыка. Такой метод позволяет быстро проверять наличие стыка в предыдущих подразделениях.

В таблице ниже приведены результаты вычисления кубо-линейного отношения на подразделениях разного порядка для кривой Токарева. В качестве метрики использовалось расстояние Минковского с p=1,2,Inf.

Подразделение	p = 1	p = 2	p = Inf
1	63	15.4805	11.0769
2	98.3415	23.6364	18
3	98.3415	26.0767	22.9091
4	98.3415	26.2324	24.1437
5	98.3415	26.2324	24.1437
6	98.3415	26.2324	24.2071
7	98.3415	26.2324	24.2151
8	98.3415	26.2324	24.2161

Как видно, с использованием указанного метода кубо-линейное отношение было получено уже на четвёртом подразделении для евклидовой метрики. Обычно этот показатель является самым важным на практике.

Согласование модели с теорией

Если более подробно исследовать метод вычисления, предложенный в предыдущей части, то станет видно, что если делать всё строго описанным образом, то получится не совсем правильная модель – будет достаточно много лишних точек. Если говорить иначе, то у модели будут точки, имеющие одинаковый образ и разные прообразы. Для лучшего понимания рассмотрим пример с той же кривой Токарева – возьмём её второе подразделение. Возьмём любую точку из этого подразделения, лежащую не на грани большого куба (т.е. внутри). Эта точка является вершиной восьми маленьких кубиков. И если взять идеальную кривую (а не её приближения), то в каждом из этих кубиков будет расположена часть кривой, и есть точки, которые будут приближаться к нашей взятой – в каждом из восьми кубиков. Таким образом, мы получаем, что в нашей примерной модели будет восемь пар точек с одинаковыми координатами в пространстве, но разными на отрезке. Решение этой проблемы было исполнено посредством введения хэш-таблицы для образов.

Оптимизация

Как известно из теории, описанной в [6], не требуется перебирать все пары точек на отрезке, чтобы узнать максимальное кубо-линейное отношение. Изначально предполагалось сравнивать большие отрезки на предмет того, возможно ли в принципе на них достичь максимум (берётся отношение максимального расстояния в пространстве к минимальному расстоянию между прообразами) и пропускать заведомо «плохие» участки. Далее возникла идея о том, что если на подразделении N в некоторых моментах достигалось высокое значение кубо-линейного отношения, то и на подразделении N+1 в окрестности этого момента тоже будет высокое кубо-линейное отношение. Т.к. для кривой Токарева некоторые значения были уже известны из теории, то при исследовании и создании тестовой версии было удобно именно на ней проверять верность результатов.

Таким образом, был создан вспомогательный массив, который хранил в себе отрезки с наибольшим кубо-линейным отношением. При обработке очередного подразделения алгоритм проходит не по всем прообразам, а лишь по тем, что укладываются в «хорошие» отрезки. Алгоритм выбора таких отрезков в данной работе не будет рассмотрен в силу своей сложности и отдалённости от основной темы.

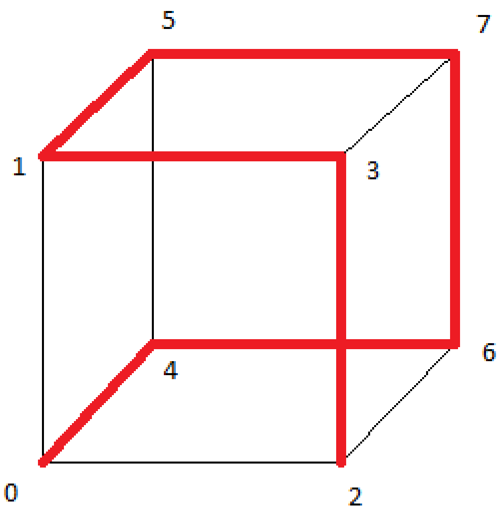
Теория показывает (а практика подтверждает), что кубо-линейное отношение может увеличиться лишь в том случае, когда изменяется хотя бы один стык между фракциями. Всего при переходе к новому подразделению образуется семь новых стыков (для кривых рода 8). Их не восемь по той причине, что кривая не замкнута и не образуется ещё одного стыка между концом и началом. Новые они с точки зрения существования в пространстве, но с точки зрения изоморфности остальным стыкам в кривой новых может не быть ни одного. Таким образом, исследование приходит к задаче сравнения (или поиска) новых стыков при создании нового подразделения. Проблема такой оптимизации состоит в том, что при подразделениях высокого порядка длина стыка, на котором достигается максимум кубо-линейного отношения, исчисляется миллионами точек, так что сильного сокращения вычислений не происходит.

Данные, полученные на практике

При исполнении данного исследования была написана программа на языке C++ с использованием библиотеки MPI, для вычислений использовалась машина МВС-Экспресс. Всего существует 1792 правильных непрерывных кривых Пеано рода 8. Все они были обработаны и ниже представлены данные о некоторых интересных случаях.

Достижение наилучшего кубо-линейногно отношения

По итогам вычислений была найдена кривая, дающая наилучшее значение кубо-линейного отношения. Если быть точным – было найдено 128 таких кривых. Все они обладают сходной структурой. Рассмотрим одну из них подробнее:



Прототип: KijIkiJ.
Базовые преобразования: KjI iKJ jKI KjI kIJ kIJ iKJ JIk.
Угловые моменты: 0 47/224 9/28 3/7 4/7 19/28 177/224. 1
КЛО: $\sqrt{508032/841}$ = 504/29 $\sqrt{2}$ ~ 24.5781.

Наилучшее КЛО достигается на 4 подразделении на следующей паре точек:

Прообразы: 1115/14336 и 9007/114688;
Образы: (3/85/16 3/16) и (1/8 1/4 1/4).

Неминимальные кривые

Стоит заметить, что существует всего три возможных прототипа кривой:

1. KikjIKi;
2. KijIkiJ;
3. KikjKIk.

Эти прототипы следует рассматривать каждый в отдельности, т.к. кривые, основанные на них, сильно отличаются. Так, например, не существует непрерывных кривых, основанных на первом прототипе. По этой причине мы не будем его рассматривать в дальнейшем.

На втором прототипе основаны кривые, дающие наилучшее кубо-линейное отношение среди кривых рода 8; одна из них была рассмотрена выше. Ниже будут рассмотрены кривые, которые можно основать на третьем прототипе.

Одна из них, кривая Токарева, была разобрана в дипломной работе С. Токарева. Стоит заметить, что эта кривая имеет наилучшее кубо-линейное отношение среди кривых, основанных на третьем прототипе. Помимо кривой Токарева, есть только одна кривая, дающая такое же значение кубо-линейного отношения. Рассмотрим её:

Прототип: KikjKIk.
Базовые преобразования: iKJ KiJ KiJ IjK IjK KIj KIj ikj.

Угловые моменты: 0 11/63 41/126 25/63 38/63 85/126 52/631

КЛО: $\sqrt{5215408884 / 7579009}$ = 8694/2753 $\sqrt{69}$ ~ 26.2324.

Наилучшее КЛО достигается на 5 подразделении на следующей паре точек:

Прообразы: 997/32256 и 130369/4128768.

Образы: (1/8 1/4 0) и (3/8 9/32 1/16).

Тут важно отметить, что прототип и угловые моменты этой кривой совпадают с угловыми моментами кривой Токарева. Тем не менее, базовые преобразования иные.

Вычисления в рациональных числах

Как известно из теории, все значения кубо-линейного отношения укладываются во множество корней степени K рациональных чисел, где K – степень для метрики. Таким образом, для получения абсолютной точности достаточно уметь работать с рациональными числами. При написании программы были протестированы такие библиотеки, как Boost/Numeric и GMP (GNU Multiple Precision Arithmetic Library), т.е. лидеры в этой области. Несмотря на мощность этих решений, они являются универсальными и тратят много промежуточных вычислений на действия, которые не требуются в данной задаче. Например, знаменатель рациональной дроби никогда не будет равен нулю в нашем случае (он равен расстоянию между точками, и в данной программе написан перебор точек без включения границ). Постоянное выделение и освобождение памяти при вызове конструктора и деструктора тоже тратит много ненужного времени. На практике использование данных библиотек замедлило исполнение программы в сотни раз по сравнению с использованием типа double. Таким образом был сделан вывод, что следует реализовать свою небольшую библиотеку для работы с рациональными числами.

По сравнению с работой с типом double, в среднем время на выполнение увеличилось в 10-15 раз при использовании написанной библиотеки. Для случая с евклидовой метрикой понадобилось 220.8 секунд на полный перебор всех кривых (вычисления происходили на МВС-Экспресс), в итоге была найдена кривая с квадратом кубо-линейного отношения, равным $508032 / 841$. Напомню, что т.к. в евклидовой метрике используется квадратный корень, то его надо извлечь из этого числа для получения реального значения.

Вычисления в действительных числах

В действительных числах абсолютная точность недостижима. В нашем случае в среднем ошибка начинается с 14-го знака после запятой, что вполне вписывается в ошибки машинной точности. В результате тестирования на разных метриках были полчены следующие результаты:

Метрика	Время (секунды)	Лучшее КЛО
Dist1	0.001	98.3414
Dist2	16.355	24.5781
Dist3	15.532	24.2162
DistInf	19.434	24.2161

Заметим, что время на манхэттенскую метрику очень мало. Объясняется это тем, что процесс сходится уже на 3 подразделении для всех кривых.

Тем не менее, вычисления в действительных числах очень полезны для оценки сходимости. С помощью таких быстрых вычислений есть возможность выяснить, когда ожидается сходимость, и уже на проверенном подразделении вычислять с абсолютной точностью.

Помимо положительных результатов, были получены и отрицательные. Так, например, было доказано, что описанным выше методом невозможно найти кубо-линейное отношение кривой для мажоритарной метрики.

Заключение

Данная работа была выполнена до появления статьи Хэверкорта [5], в которой проведена классификация трехмерных кривых Пеано фрактального рода 8 с вычислением кубо-линейных отношений (locality) по трем основным метрикам. Основное отличие полученных в данной работе результатов от Хэверкорта заключаются в их точности. Как мы видим, минимальное кубо-линейное отношение для правильных кривых (mono-Hilbert) вообще является квадратичной иррациональностью, поэтому не может быть точно вычислено методами, применяемыми в [5]. Помимо вычисления кубо-линейных отношений для всех рассмотренных кривых, были определены их глубины, что позволяет во многих случаях строго доказать абсолютную точность полученных для кубо-линейных отношений результатов. Что, в частности, относится к кривой Токарева. Проведённые вычисления позволяют строго доказать, что найденное Токаревым максимальное значение кубо-линейного отношения действительно является максимальным.

При исполнении данного исследования была написана программа на языке C++ с использованием библиотеки MPI, для вычислений использовалась гибридная машина МВС-Экспресс с отдельным коммутирующим модулем. Каждый узел машины содержит 64 ГБ оперативной памяти, что позволило обойтись без перераспределения памяти даже в случаях кривых с большой глубиной.

Список литературы

[1] Michael Bader, *Space-Filling Curves. An Introduction with Applications in Scientific Computing* , Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2013.

[2] Е.В. Щепин, *О фрактальных кривых Пеано.* // Труды МИАН, 2004, т. 247, С. 204–303.

[3] Е.В. Щепин, К.Е. Бауман, *Минимальная кривая Пеано* // Труды МИАН, 2008, т. 263, С. 1-21.

[4] С. Токарев, *Кубическая кривая Пеано*, выпускная квалификационная работа, факультет информационных технологий МГППУ, 23 мая 2010 года, (электронная публикация: www.researchgate.net/publication/268513832_A_Cubic_Peano_Curve)

[5] Herman Haverkort, *An inventory of three-dimensional Hilbert space-lling curves* September 13, 2011 arXiv:1109.2323v1 [cs.CG] 11 Sep 2011

[6] Е.В. Щепин, *О достижении максимума кубо-линейного отношения трехмерных кривых Пеано* (электронная публикация: www.researchgate.net/publication/268564876_On_achievement_of_the_maximum_of_the_cube-to-linear_ratio_for_3D_Peano_curves).

Оглавление