



Resolviendo la Ecuación de Onda mediante la Transformada de Fourier Acelerada

30 de Agosto de 2025

Organización del Computador II

Integrante	LU	Correo electrónico
Polonuer, Joaquin	1612/21	jtpolonuer@gmail.com



Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Universidad de Buenos Aires

Ciudad Universitaria - (Pabellón I/Planta Baja)

Intendente Güiraldes 2610 - C1428EGA

Ciudad Autónoma de Buenos Aires - Rep. Argentina

Tel/Fax: (+54 +11) 4576-3300

<http://www.exactas.uba.ar>

Índice

1. Introducción	2
1.1. La Ecuación de Onda	2
1.2. La Transformada de Fourier	2
1.3. Resolución de la Ecuación de Onda mediante la Transformada de Fourier	2
1.4. Transformada Discreta de Fourier	3
1.5. Transformada Rápida de Fourier (Cooley-Tukey)	3
1.5.1. Algoritmo Recursivo FFT	4
1.5.2. Algoritmo Iterativo FFT	4
1.6. Transformada de Fourier Bidimensional	5
1.6.1. Aplicación a la Ecuación de Onda	6
2. Metodología	6
2.1. Implementación Propuesta	7
2.1.1. Initialize	7
2.1.2. Add Wave Source	7
2.1.3. Step	7
2.1.4. Get Intensity	8
2.1.5. Get Real Part	8
2.2. Python y NumPy	8
2.2.1. Python puro	8
2.2.2. NumPy	8
2.3. C	8
2.3.1. create_wave_simulation	9
2.3.2. add_wave_source	9
2.3.3. wave_sim_step	9
2.4. C + ASM	10
2.4.1. Uso de la pila x87 para operaciones matemáticas	10
2.4.2. Representación de números complejos	11
2.5. C + AVX	11
2.5.1. Representación de números complejos	12
2.5.2. Implementación del Ciclo Butterfly	12
3. Experimentos	12
3.1. Visualización Interactiva	13
3.2. Rendimiento por Tamaño de Grilla	13
4. Conclusiones	14

1. Introducción

1.1. La Ecuación de Onda

La ecuación de onda representa uno de los fenómenos físicos más fundamentales en la naturaleza, describiendo la propagación de perturbaciones en medios continuos. Desde ondas sonoras y electromagnéticas hasta vibraciones mecánicas, este modelo matemático encuentra aplicación en campos tan diversos como la acústica, la óptica, la sismología y la ingeniería estructural.

La ecuación de onda unidimensional se expresa como:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad (1)$$

donde $u(x, t)$ representa el desplazamiento de la onda en el punto x y tiempo t , y c es la velocidad de propagación característica del medio. Esta ecuación en derivadas parciales de segundo orden describe fenómenos como:

- Vibraciones de cuerdas tensadas
- Propagación de ondas sonoras en tubos
- Ondas electromagnéticas en líneas de transmisión

Naturalmente, su extensión a dos dimensiones espaciales es:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) = c^2 \nabla^2 u \quad (2)$$

Esta formulación bidimensional modela fenómenos como:

- Vibraciones de membranas (tambores, diafragmas)
- Ondas superficiales en líquidos
- Propagación de ondas sísmicas en planos
- Ondas electromagnéticas

1.2. La Transformada de Fourier

La Transformada de Fourier constituye una herramienta matemática fundamental para el análisis de fenómenos ondulatorios, permitiendo descomponer señales complejas en sus componentes frecuenciales básicas. Esta transformación resulta especialmente poderosa en el contexto de la resolución de ecuaciones diferenciales parciales.

La Transformada de Fourier continua de una función $f(x)$ se define como:

$$\hat{f}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-i\omega x} dx \quad (3)$$

y su transformada inversa:

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{f}(\omega) e^{i\omega x} d\omega \quad (4)$$

1.3. Resolución de la Ecuación de Onda mediante la Transformada de Fourier

La aplicación de la Transformada de Fourier a la ecuación de onda permite convertir la ecuación en derivadas parciales en una ecuación diferencial ordinaria, lo que simplifica notablemente su resolución. Para abordar la ecuación (1), se aprovechan propiedades fundamentales de la transformada de Fourier relacionadas con las derivadas:

Propiedad 1: La transformada de Fourier de la derivada n -ésima de una función es igual a la multiplicación por $(i\omega)^n$ de la transformada de la función original. En particular, para $n = 1$ se obtiene el caso de la derivada simple.

$$\mathcal{F} \left\{ \frac{\partial^n f}{\partial x^n} \right\} = (i\omega)^n \hat{f}(\omega) \quad (5)$$

Propiedad 2: Cuando se transforma respecto a una variable diferente a la que se deriva, la derivada parcial se convierte en una derivada ordinaria de la transformada:

$$\mathcal{F}_x \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} \right\} = \frac{\partial \hat{f}}{\partial t} \quad (6)$$

donde \mathcal{F}_x denota la transformada de Fourier respecto a la variable x .

Es por estas dos propiedades que al aplicar la Transformada de Fourier espacial, obtenemos:

$$\frac{\partial^2 \hat{u}}{\partial t^2} = -c^2 \omega^2 \hat{u} \quad (7)$$

donde $\hat{u}(\omega, t)$ es la transformada de Fourier de $u(x, t)$ respecto a x .

Que es ecuación diferencial ordinaria con solución analítica conocida:

$$\hat{u}(\omega, t) = A(\omega)e^{i\omega t} + B(\omega)e^{-i\omega t} \quad (8)$$

Los coeficientes $A(\omega)$ y $B(\omega)$ se determinan a partir de las condiciones iniciales, y la solución final se obtiene aplicando la transformada inversa.

1.4. Transformada Discreta de Fourier

Para implementaciones computacionales, la Transformada de Fourier continua debe discretizarse. La Transformada Discreta de Fourier (DFT) de una secuencia finita $x[n]$ de N elementos se define como:

$$\hat{x}[k] = \sum_{n=0}^{N-1} x[n]e^{-i2\pi kn/N}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1 \quad (9)$$

donde $\hat{x}[k]$ representa los coeficientes espectrales discretos. La transformada inversa se expresa como:

$$x[n] = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} \hat{x}[k]e^{i2\pi kn/N}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1 \quad (10)$$

La implementación directa de la DFT requiere $O(N^2)$ operaciones complejas, lo que resulta computacionalmente prohibitivo para secuencias largas. Esta limitación motivó el desarrollo del algoritmo Fast Fourier Transform.

1.5. Transformada Rápida de Fourier (Cooley-Tukey)

El algoritmo FFT, desarrollado por Cooley y Tukey en 1965, reduce la complejidad computacional de $O(N^2)$ a $O(N \log N)$ mediante la estrategia de divide and conquer. Para $N = 2^m$, el algoritmo descompone la DFT en DFTs más pequeñas.

El algoritmo DIT (Decimation-in-Time) separa la secuencia de entrada en muestras pares e impares:

$$\hat{x}[k] = \sum_{n \text{ par}} x[n]e^{-i2\pi kn/N} + \sum_{n \text{ impar}} x[n]e^{-i2\pi kn/N} \quad (11)$$

Sustituyendo $n = 2r$ para índices pares y $n = 2r + 1$ para impares:

$$\hat{x}[k] = \sum_{r=0}^{N/2-1} x[2r]e^{-i2\pi kr/(N/2)} + e^{-i2\pi k/N} \sum_{r=0}^{N/2-1} x[2r+1]e^{-i2\pi kr/(N/2)} \quad (12)$$

Definiendo:

$$\hat{x}_{\text{par}}[k] = \sum_{r=0}^{N/2-1} x[2r]e^{-i2\pi kr/(N/2)} \quad (13)$$

$$\hat{x}_{\text{impar}}[k] = \sum_{r=0}^{N/2-1} x[2r+1]e^{-i2\pi kr/(N/2)} \quad (14)$$

La ecuación se simplifica a:

$$\hat{x}[k] = \hat{x}_{\text{par}}[k] + W_N^k \cdot \hat{x}_{\text{impar}}[k] \quad (15)$$

donde $W_N^k = e^{-i2\pi k/N}$ es el factor de giro (twiddle factor).

Aprovechando la periodicidad $\hat{x}_{\text{par}}[k + N/2] = \hat{x}_{\text{par}}[k]$ y la simetría $W_N^{k+N/2} = -W_N^k$:

$$\hat{x}[k] = \hat{x}_{\text{par}}[k] + W_N^k \cdot \hat{x}_{\text{impar}}[k] \quad (16)$$

$$\hat{x}[k + N/2] = \hat{x}_{\text{par}}[k] - W_N^k \cdot \hat{x}_{\text{impar}}[k] \quad (17)$$

Este proceso se aplica recursivamente hasta obtener DFTs de un solo elemento.

1.5.1. Algoritmo Recursivo FFT

El algoritmo recursivo implementa directamente la estrategia divide and conquer descrita anteriormente:

```
def fft_recursive(x):
    n = len(x)
    if n <= 1:
        return x

    # Dividir en pares e impares
    x_par = [x[2*i] for i in range(n//2)]
    x_impar = [x[2*i+1] for i in range(n//2)]

    # Aplicar FFT recursivamente
    y_par = fft_recursive(x_par)
    y_impar = fft_recursive(x_impar)

    # Combinar resultados
    y = [0] * n
    for k in range(n//2):
        w = exp(-2j * pi * k / n)
        y[k] = y_par[k] + w * y_impar[k]
        y[k + n//2] = y_par[k] - w * y_impar[k]

    return y
```

Este algoritmo recursivo tiene complejidad $O(N \log N)$ pero presenta overhead significativo debido a:

- Creación de múltiples listas temporales
- Llamadas recursivas con overhead de stack
- Acceso no secuencial a memoria

Por esta razón, las implementaciones prácticas utilizan versiones iterativas optimizadas que mantienen la misma complejidad algorítmica pero con mejor rendimiento en la práctica.

1.5.2. Algoritmo Iterativo FFT

La versión iterativa evita el overhead de la recursión mediante el uso de bit-reversal y bucles anidados:

```
def fft_iterative(x):
    n = len(x)
    if n <= 1:
        return x

    # Bit-reversal permutation
    j = 0
    for i in range(1, n):
        bit = n >> 1
        while j & bit:
```

```

    j ^= bit
    bit >>= 1
j ^= bit
if i < j:
    x[i], x[j] = x[j], x[i]

# FFT iterativa
length = 2
while length <= n:
    w = exp(-2j * pi / length)
    for i in range(0, n, length):
        wn = 1 + 0j
        for j in range(length // 2):
            u = x[i + j]
            v = x[i + j + length // 2] * wn
            x[i + j] = u + v
            x[i + j + length // 2] = u - v
            wn *= w
        length <<= 1

return x

```

Esta implementación iterativa presenta varias ventajas sobre la versión recursiva:

- **Acceso secuencial a memoria:** Mejor utilización de la jerarquía de cache
- **Sin overhead de recursión:** Elimina el costo de las llamadas a función
- **Menor uso de memoria:** No requiere múltiples copias de los datos
- **Mejor paralelización:** Los bucles pueden ser optimizados por el compilador

El algoritmo mantiene la misma complejidad $O(N \log N)$ pero con constantes significativamente menores, lo que resulta en mejor rendimiento en la práctica.

1.6. Transformada de Fourier Bidimensional

Para la resolución numérica de la ecuación de onda en dos dimensiones, es necesario extender la Transformada de Fourier al caso bidimensional. La Transformada Discreta de Fourier en 2D de una matriz $x[m, n]$ de dimensiones $M \times N$ se define como:

$$\hat{x}[k, l] = \sum_{m=0}^{M-1} \sum_{n=0}^{N-1} x[m, n] e^{-i2\pi(km/M + ln/N)} \quad (18)$$

donde $k = 0, 1, \dots, M-1$ y $l = 0, 1, \dots, N-1$.

La transformada inversa se expresa como:

$$x[m, n] = \frac{1}{MN} \sum_{k=0}^{M-1} \sum_{l=0}^{N-1} \hat{x}[k, l] e^{i2\pi(km/M + ln/N)} \quad (19)$$

Una propiedad fundamental de la FFT bidimensional es su separabilidad, que permite descomponer el cálculo en aplicaciones consecutivas de FFT unidimensionales:

$$\hat{x}[k, l] = \sum_{m=0}^{M-1} e^{-i2\pi km/M} \left[\sum_{n=0}^{N-1} x[m, n] e^{-i2\pi ln/N} \right] \quad (20)$$

Esto se puede implementar eficientemente mediante el siguiente algoritmo de dos pasos:

1. **FFT por filas:** Aplicar FFT 1D a cada fila de la matriz de entrada:

$$\hat{y}[m, l] = \sum_{n=0}^{N-1} x[m, n] e^{-i2\pi ln/N} \quad (21)$$

2. **FFT por columnas:** Aplicar FFT 1D a cada columna del resultado anterior:

$$\hat{x}[k, l] = \sum_{m=0}^{M-1} \hat{y}[m, l] e^{-i2\pi km/M} \quad (22)$$

Esto se implementa en C de la siguiente manera:

```
static void fft2d(Complex *data, int rows, int cols, int inverse)
{
    Complex *temp = (Complex *)malloc(cols * sizeof(Complex));

    for (int i = 0; i < rows; i++)
    {
        memcpy(temp, &data[i * cols], cols * sizeof(Complex));
        fft_1d(temp, cols, inverse);
        memcpy(&data[i * cols], temp, cols * sizeof(Complex));
    }

    temp = (Complex *)realloc(temp, rows * sizeof(Complex));
    for (int j = 0; j < cols; j++)
    {
        for (int i = 0; i < rows; i++)
        {
            temp[i] = data[i * cols + j];
        }
        fft_1d(temp, rows, inverse);
        for (int i = 0; i < rows; i++)
        {
            data[i * cols + j] = temp[i];
        }
    }

    free(temp);
}
```

1.6.1. Aplicación a la Ecuación de Onda

En el contexto de la resolución de la ecuación de onda bidimensional, la FFT 2D permite transformar el operador Laplaciano ∇^2 del dominio espacial al dominio frecuencial:

$$\nabla^2 u(x, y) \xrightarrow{\text{FFT 2D}} -(\omega_x^2 + \omega_y^2) \hat{u}(\omega_x, \omega_y) \quad (23)$$

donde $\omega_x = 2\pi k_x/L_x$ y $\omega_y = 2\pi k_y/L_y$ son las frecuencias espaciales discretas, y L_x, L_y son las dimensiones del dominio computacional.

Esta transformación convierte la ecuación diferencial parcial en una ecuación algebraica en el dominio frecuencial, facilitando significativamente su resolución numérica mediante métodos espectrales.

2. Metodología

Se propone implementar un simulador físico que permita visualizar la evolución de una onda a través de un campo. Para esto, se desarrollaron las interfaces ‘WaveSimulation2D’ y ‘WaveVisualizer’ (ver sección experimental). A su vez, la interfaz ‘WaveSimulation2D’ se implementó en varios backends distintos: Python, NumPy, C, C + ASM (Assembly), y C + AVX.

El objetivo es evaluar el rendimiento de cada implementación midiendo la variable *steps per second* (pasos por segundo), que indica cuántos pasos de simulación puede procesar cada backend en un segundo. Esta métrica es fundamental para evaluar la eficiencia computacional de diferentes enfoques de implementación.

2.1. Implementación Propuesta

Con el objetivo de facilitar la experimentación, se propone utilizar un diseño comun a todos los backends. A modo de ejemplo, se muestra la implementacion de uno de ellos:

```
class ASMWaveSimulation2D:
    def __init__(self, size=256, domain_size=10.0, wave_speed=1.0, dt=0.01):
        self.c_core = c_backend_asm
        self._sim_ptr = self.c_core.create_simulation(size, domain_size, wave_speed, dt)

    def add_wave_source(self, x_pos, y_pos, amplitude=1.0, frequency=3.0, width=0.5):
        self.c_core.add_wave_source(self._sim_ptr, x_pos, y_pos, amplitude, frequency, width)

    def step(self):
        self.c_core.step_simulation(self._sim_ptr)

    def get_intensity(self):
        return self.c_core.get_intensity(self._sim_ptr)

    def get_real_part(self):
        return self.c_core.get_real_part(self._sim_ptr)
```

La clase principal está hecha en Python, porque facilita la visualización. Sin embargo, toda la lógica y el procesamiento se realiza en C y Assembler. A continuación se muestra un diagrama:

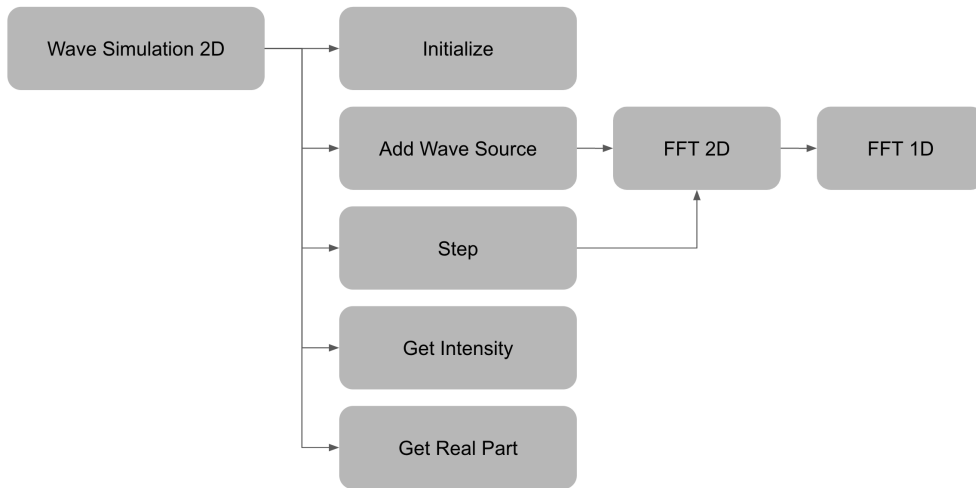


Figura 1: Diagrama de arquitectura del simulador de ondas

2.1.1. Initialize

Establece el escenario matemático de la simulación: crea una grilla 2D que representa el espacio físico donde se propagarán las ondas, prepara las herramientas matemáticas (transformadas de Fourier) y define los parámetros fundamentales como la velocidad de propagación.

2.1.2. Add Wave Source

Introduce perturbaciones localizadas en el dominio, como "tirar una piedra al agua". Genera patrones de ondas circulares que se propagan desde un punto específico, con una amplitud y frecuencia determinadas. Cada fuente crea ondas concéntricas que luego interactúan entre sí y con las ondas ya existentes.

2.1.3. Step

Hace avanzar el tiempo de la simulación resolviendo la ecuación de ondas. Calcula cómo cada punto de la grilla cambia su altura/amplitud basándose en la física de propagación de ondas. Utiliza métodos espectrales que transforman el problema al

dominio de frecuencias, donde es más eficiente calcular la evolución temporal.

2.1.4. Get Intensity

Calcula la intensidad.^o densidad de energía en cada punto del dominio. Representa qué tan "fuerte.^{es} la onda en cada ubicación, siempre como valores positivos. Es útil para visualizar dónde se concentra la energía de las ondas y observar patrones de interferencia constructiva.

2.1.5. Get Real Part

Extrae la parte real del campo de ondas complejo, representando el desplazamiento físico real que veríamos. Puede ser positiva (cresta) o negativa (valle), mostrando las oscilaciones reales de la superficie. Es la representación más directa de .^{altura} de la onda.^{en} cada punto del espacio.

Como se ve en el diagrama, necesitamos calcular la transformada de fourier para cada paso de la simulacion. Es por esto que la propuesta del trabajo es tratar de optimizar el algoritmo a distintos niveles y comparar sus rendimientos.

2.2. Python y NumPy

Para establecer un baseline de rendimiento, implementamos dos versiones en Python:

2.2.1. Python puro

La implementación utiliza el algoritmo iterativo FFT descrito en la sección 1.5, utilizando listas de números complejos. Esta versión sirve como referencia para entender cuánto más rápido funcionan las implementaciones en C y las librerías optimizadas como NumPy.

Esta implementación presenta limitaciones inherentes de Python:

- Lentitud en operaciones numéricas
- Uso ineficiente de memoria, ya que las listas se almacenan de forma dispersa en memoria

2.2.2. NumPy

Implementación optimizada que aprovecha las operaciones vectorizadas y bibliotecas optimizadas de álgebra lineal. En lugar de implementar la FFT manualmente, utilizamos directamente la función optimizada de NumPy:

```
def fft2(self, x):  
    return np.fft.fft2(x)
```

Como se observará en los resultados experimentales, la implementación de NumPy es extremadamente rápida y difícil de superar, aunque lograremos un rendimiento bastante similar con nuestras implementaciones optimizadas en C.

2.3. C

Como se ve en `ASMWaveSimulation2D`, la clase implementada en Python es simplemente una fachada, y toda la lógica y estructuras de datos utilizadas para correr la simulación se manejan desde C. Esto funciona así en el backend de C puro, como en el de C + AVX y C + Assembler.

En el archivo `c.backend.c` definimos dos structs fundamentales: `Complex` y `WaveSimulation`.

```
typedef struct  
{  
    double real;  
    double imag;  
} Complex;
```

```
typedef struct  
{
```

```

Complex *wave;
Complex *wave_k;
double *grid_coords;
double *k_grid_coords;
double *K;
int size;
double domain_size;
double wave_speed;
double dt;
double dx;
} WaveSimulation;

```

WaveSimulation funciona de la siguiente manera:

- **grid_coords**: Es una grilla cuadrada de un tamaño determinado (**size**). En cada posición guarda un valor (x, y) que determina a qué punto del dominio equivale esa posición. En la práctica, los valores se guardan todos contiguos en memoria: $[x_0, y_0, x_1, y_1, \dots]$.
- **k_grid_coords**: Es exactamente lo mismo pero en el dominio de las frecuencias. Recordemos que la transformada de Fourier permite resolver la ecuación diferencial fácilmente al cambiar el dominio del espacio a las frecuencias.
- **wave** y **wave_k**: Funcionan en conjunto con **grid_coords** y **k_grid_coords**. Tienen, para cada valor de la grilla, el valor de la función en ese punto. Básicamente, $\text{wave}[i][j] = \text{phi}(\text{grid_coords}[i][j])$.
- **K**: Matriz que almacena, para cada punto en el dominio de las frecuencias, el valor de $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, necesario para la evolución temporal de la ecuación de onda en el dominio espectral.
- Los demás elementos son parámetros que manejan el paso del tiempo y la velocidad de las olas. El primero no afecta la precisión de la simulación, dado que la solución utilizada es analítica. El segundo, **wave_speed**, es un parámetro de la ecuación diferencial.

Este struct funciona gracias a tres métodos principales: **create_wave_simulation**, **add_wave_source** y **wave_sim_step**.

2.3.1. create_wave_simulation

- Reserva memoria para la estructura **WaveSimulation** y sus arrays: **wave** y **wave_k** de números complejos ($\text{size}^2 \times \text{Complex}$), **grid_coords** y **k_grid_coords** ($\text{size}^2 \times 2 \times \text{double}$), y **K** ($\text{size}^2 \times \text{double}$)
- Inicializa **grid_coords** con coordenadas espaciales en formato plano $[x_0, y_0, x_1, y_1, \dots]$ centradas en el dominio
- Calcula **k_grid_coords** usando frecuencias FFT con desplazamiento de frecuencias negativas para valores $j, i \geq \text{size}/2$
- Computa magnitudes **K** como $k_{mag} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \times 2\pi$, evitando división por cero en $k=0$ con valor $1e-10$

2.3.2. add_wave_source

- Itera sobre todo el grid calculando la distancia radial $r^2 = (x - x_0)^2 + (y - y_0)^2$ desde la posición de la fuente
- Genera una envolvente gaussiana ($\text{amplitude} \times e^{-r^2/\text{width}^2}$) y fase radial ($\text{frequency} \times r$)
- Suma al array **wave** valores complejos $\text{envelope} \times (\cos(\text{phase}) + i \times \sin(\text{phase}))$ usando **complex_add**
- Copia **wave** a **wave_k** y aplica FFT2D directa para obtener la representación en k-space

2.3.3. wave_sim_step

- Calcula evolución temporal en k-space: para cada punto obtiene $\omega = \text{wave_speed} \times K[\text{idx}]$ y $\text{phase} = -\omega \times \text{dt}$
- Multiplica **wave_k[idx]** por factor de fase $\text{complex}(\cos(\text{phase}) + i \times \sin(\text{phase}))$ usando **complex_mul**
- Copia **wave_k** a **wave** y aplica FFT2D inversa para transformar de vuelta al espacio real
- La función preserva la ecuación de onda dispersiva aplicando el operador de evolución temporal $e^{-i\omega t}$

Estos métodos son fundamentales y, como se mencionó previamente, son la base necesaria que nos permite acelerar la simulación en todos los backends. Ya aclarado esto, la implementación de la transformada de Fourier:

```

static void fft_1d(Complex *x, int n, int inverse)
{
    assert(n > 0 && (n & (n - 1)) == 0 && "La longitud debe ser potencia de 2");

    bit_reverse(x, n);

    for (int len = 2; len <= n; len <= 1)
    {
        double angle = 2.0 * M_PI / len * (inverse ? 1 : -1);
        Complex w = {cos(angle), sin(angle)};

        for (int i = 0; i < n; i += len)
        {
            Complex wn = {1.0, 0.0};
            for (int j = 0; j < len / 2; j++)
            {
                Complex u = x[i + j];
                Complex v = complex_mul(x[i + j + len / 2], wn);
                x[i + j] = complex_add(u, v);
                x[i + j + len / 2] = complex_sub(u, v);
                wn = complex_mul(wn, w);
            }
        }
    }

    if (inverse)
    {
        for (int i = 0; i < n; i++)
        {
            x[i].real /= n;
            x[i].imag /= n;
        }
    }
}

```

2.4. C + ASM

La motivación de esta optimización es que necesitamos calcular la transformada todo el tiempo para volver desde el dominio de las frecuencias al dominio espacial, y esto requiere calcular la transformada en cada paso de la simulación.

La implementación en Assembler puede entenderse fácilmente haciendo un paralelismo línea por línea con la implementación en C. Sin embargo, hay algunos detalles interesantes que vale la pena mencionar.

2.4.1. Uso de la pila x87 para operaciones matemáticas

La arquitectura x86-64 incluye una pila de registros especializada, conocida como la **pila x87**, diseñada para operaciones matemáticas en punto flotante. Esta pila, compuesta por ocho registros de 80 bits (st0–st7), permite realizar cálculos complejos de manera eficiente, especialmente en operaciones trigonométricas y exponenciales, que son fundamentales para la Transformada de Fourier.

En la implementación en Assembly, la pila x87 se utiliza para calcular funciones como seno y coseno de un ángulo, aprovechando instrucciones dedicadas como `fsin` y `fcos`. El flujo típico consiste en cargar el ángulo en la pila, calcular el seno (dejando el ángulo aún disponible en la pila), almacenar el resultado en memoria, y luego calcular el coseno sobre el mismo ángulo. Finalmente, ambos resultados se transfieren a registros xmm para su uso vectorizado.

El siguiente fragmento ilustra este proceso, equivalente a la operación en C `Complex w = cos(angle), sin(angle)`:

```

.declarar_w:
fld      st0                ; Copio el angulo devuelta en st0, st1 = angulo
fsin     ; st0 = sin(ang)   (ángulo sigue en st1)
fstp     qword [rsp]        ; guardar sin en memoria
movhpd   xmm6, [rsp]        ; xmm6 = [?, w_i]

```

```
fcos                                ; st0 = cos(ang)
fstp    qword [rsp]                ; guardar cos
movlpd   xmm6, [rsp]               ; xmm6 = [w_r, w_i]
; (pila x87 vacía)
```

En este código, se observa cómo la pila x87 permite calcular ambas funciones trigonométricas sin necesidad de recalculer el ángulo ni acceder repetidamente a memoria, optimizando así el rendimiento en operaciones matemáticas intensivas.

2.4.2. Representación de números complejos

Dado que la Transformada de Fourier trabaja con números complejos, es fundamental definir cómo vamos a manejarlos en Assembler. Como vimos en la implementación de C, la función recibe un puntero a un arreglo de complejos. Como ya vimos antes, el tipo de dato `Complex` ocupa 128 bits, o dos doubles, por lo que resulta ideal usar registros xmm para operar con ellos. En este trabajo, trabajamos con números complejos en los registros xmm de la siguiente manera:

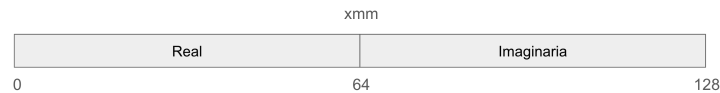


Figura 2: Representación de números complejos en memoria para la implementación en Assembly

Esta representación no solo permite hacer solo una lectura de memoria por cada complejo, lo cual es razonable, sino que además permite aprovechar las instrucciones de packed double para paralelizar sumas y restas, es decir, al sumar dos números complejos, la suma de la parte real e imaginaria se realiza simultáneamente.

```
; ----- x[i + j] = complex_add(u, v) -----
movapd   xmm11, xmm0                ; xmm11 = u_r, u_i
addpd    xmm11, xmm4                ; xmm11 = u_r + v_r, u_i + v_i
movapd   [rdi], xmm11
```

Otro detalle interesante de la implementación en Assembler es la utilización de una macro para el cálculo de la multiplicación compleja, dado que la misma se utiliza más de una vez. Esto resulta conveniente porque:

- Facilita la edición del código si queremos hacer optimizaciones posteriores
- Al añadirse al código al momento de compilar, no tiene efectos en la performance, como sí tendría utilizar una función

La macro se define de la siguiente manera:

```
; Macro para multiplicación compleja: result = a * b
; Parámetros: a, b, result
; Fórmula: (a_r + a_i*i) * (b_r + b_i*i) = (a_r*b_r - a_i*b_i) + (a_r*b_i + a_i*b_r)*i
%macro COMPLEX_MUL 3
    movapd   %3, %1                ; t1 = a
    mulpd    %3, %2                ; t1 = [ar*br, ai*bi]
    xorpd    %3, [rel COMPLEX_NEGHI] ; t1 = [ar*br, -(ai*bi)]

    movapd   xmm15, %1
    shufpd   xmm15, xmm15, 1        ; xmm15 = [ai, ar]
    mulpd    xmm15, %2              ; xmm15 = [ai*br, ar*bi]

    haddpd   %3, xmm15              ; %3 = [ar*br - ai*bi, ai*br + ar*bi]
%endmacro
```

Y utiliza una máscara definida en la sección `.rodata` que permite negar la parte imaginaria del número.

2.5. C + AVX

Como se mencionó en la sección anterior, cada número complejo ocupa 128 bits, por lo que el uso de los registros xmm, a pesar de permitir paralelizar las operaciones efectivamente, solo soporta operar sobre un elemento del arreglo a la vez. Es por esto que se propone utilizar AVX para acelerar el ciclo interno de la transformada, habitualmente llamado *butterfly*.

AVX2 (Advanced Vector Extensions 2) es una extensión del conjunto de instrucciones x86-64 introducida por Intel en 2013. Los registros introducidos duplican el ancho de los registros SSE (128 bits), por lo que permiten operar sobre 4 valores double precision simultáneamente.

2.5.1. Representación de números complejos

El uso de estos registros es analogo al explicado en la implementacion de C + ASM, solo que guardando dos numeros complejo por cada registro ymm:

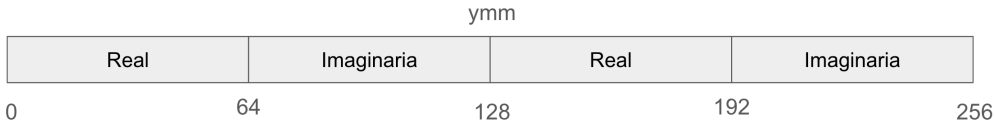


Figura 3: Esquema del ciclo butterfly vectorizado con AVX para la FFT

Para simplificar la implementación y aprovechar las optimizaciones realizadas por el compilador, utilizamos C para añadir estas operaciones *inline*.

2.5.2. Implementación del Ciclo Butterfly

La implementación AVX mantiene la misma estructura algorítmica que las versiones anteriores, con la diferencia clave en el ciclo butterfly, donde se procesan múltiples elementos simultáneamente. Las funciones que permiten esta aceleración son:

- `_mm256_loadu_pd`: Carga 256 bits de memoria como 4 packed doubles.
- `_mm256_setr_pd`: Carga 4 doubles en un registro avx.
- `_mm256_add_pd` y `_mm256_sub_pd`: Similares a `addpd` y `subpd` de Assembler, suma 4 packed doubles, posición a posición.
- `_mm256_mul_pd`: Multiplica 4 packed doubles, posición a posición.
- `_mm256_hadd_pd` y `_mm256_hsub_pd`: Realizan sumas y restas horizontales entre pares de elementos del registro.
- `_mm256_storeu_pd`: Guarda 4 packed doubles en memoria.

Y vale la pena detenerse a considerar la implementación de `complex_mul_simd`, dado que utiliza operaciones interesantes:

```
// Recibe: z1 = [a1, b1, a2, b2], z2 = [c1, d1, c2, d2]
// Devuelve: [(a1*c1-b1*d1), (a1*d1+b1*c1), (a2*c2-b2*d2), (a2*d2+b2*c2)]
static inline __m256d complex_mul_simd(__m256d z1, __m256d z2)
{
    __m256d ac_bd = _mm256_mul_pd(z1, z2);           // ac_bd = [a1*c1, b1*d1, a2*c2, b2*d2]
    __m256d z2_swapped = _mm256_shuffle_pd(z2, z2, 0x5); // z2_swapped = [d1, c1, d2, c2] (intercambio real/imag)
    __m256d ad_bc = _mm256_mul_pd(z1, z2_swapped);    // ad_bc = [a1*d1, b1*c1, a2*d2, b2*c2]

    __m256d real_parts = _mm256_hsub_pd(ac_bd, ac_bd); // real_parts = [a1*c1-b1*d1, a1*c1-b1*d1, a2*c2-b2*d2, a2*c2-b2*d2]
    __m256d imag_parts = _mm256_hadd_pd(ad_bc, ad_bc); // imag_parts = [a1*d1+b1*c1, a1*d1+b1*c1, a2*d2+b2*c2, a2*d2+b2*c2]

    return _mm256_unpacklo_pd(real_parts, imag_parts); // Resultado = [a1*c1-b1*d1, a1*d1+b1*c1, a2*c2-b2*d2, a2*d2+b2*c2]
}
```

3. Experimentos

Se realizaron experimentos para evaluar el rendimiento de cada backend implementado. Para cada backend, testearmos el correcto funcionamiento mediante una simulacion interactiva, y medimos el rendimiento en distintos tamaños.

Los experimentos se realizaron en un sistema con las siguientes especificaciones:

- **Procesador:** Intel x86-64 con soporte para AVX2
- **Sistema Operativo:** Linux 6.8.0-78-generic

- **Compilador:** GCC sin optimizaciones específicas (compilación por defecto)
- **Parámetros de simulación:**
 - Tamaño del dominio: 8.0 unidades
 - Velocidad de onda: 2.0 unidades/segundo
 - Intervalo de tiempo: 0.02 segundos
 - Pasos de simulación: 50 (para medición de rendimiento)

Se evaluaron seis implementaciones diferentes:

1. **Python:** Implementación en Python puro como baseline
2. **NumPy:** Utilizando la biblioteca NumPy optimizada
3. **C:** Implementación en C con optimizaciones del compilador
4. **C + ASM:** C con rutinas críticas en Assembly x86-64
5. **C + AVX:** Utilizando extensiones AVX para paralelización vectorial

3.1. Visualización Interactiva

Obviamente, una parte fundamental del trabajo es poder visualizar interactivamente la simulación. Por ese motivo, se implementó una visualización que permite agregar ondas haciendo clic en cualquier lugar del campo.

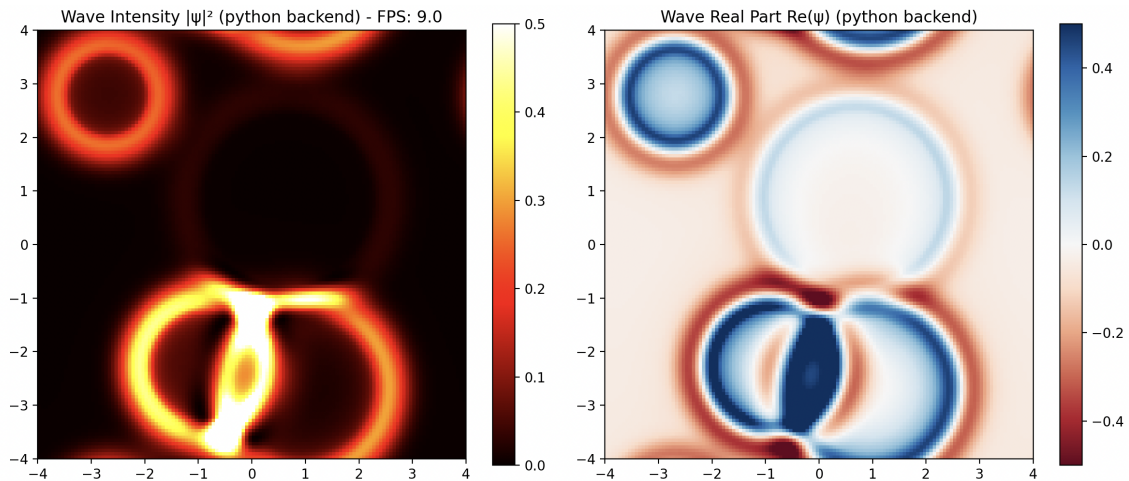


Figura 4: Visualización interactiva del simulador de ondas 2D

3.2. Rendimiento por Tamaño de Grilla

Una vez verificado el correcto funcionamiento de cada backend, decidimos medir más precisamente la performance. Para esto, dejamos de lado la visualización y simplemente medimos cantidad de pasos que puede computar la simulación por segundo. Básicamente, nos importa cuánto tarda en correr la función `step` en cada uno de los backends.

Un paréntesis importante es que, a los efectos de la visualización, las implementaciones en C tienen un pequeño *overhead* porque deben convertir su grilla a un numpy array y esto consume un tiempo extra. En este trabajo evitamos lidiar con eso y simplemente medimos el tiempo que tarda en correr cada paso de la simulación, porque es lo que decidimos optimizar.

Los resultados experimentales presentados en 1 revelan patrones interesantes en el rendimiento de las diferentes implementaciones:

- **Python vs. Implementaciones Optimizadas:** La implementación en Python puro muestra un rendimiento dramáticamente inferior, siendo hasta 1.000 veces más lenta que las implementaciones optimizadas.
- **NumPy:** A pesar de ser una biblioteca de alto nivel, NumPy demuestra un rendimiento excepcional, especialmente en grillas grandes. Las bibliotecas altamente optimizadas pueden superar implementaciones custom, especialmente en problemas de gran escala.

Cuadro 1: Rendimiento de diferentes implementaciones (steps per second)

Método	16×16	32×32	64×64	128×128	256×256	512×512	1024×1024
Python	629,3	155,0	37,3	9,1	2,1	0,5	0,1
ASM	58.661,6	17.405,2	4.397,7	1.088,5	243,1	58,0	13,4
C	78.603,9	22.248,6	5.091,3	1.186,9	261,5	61,0	14,1
C+AVX	82.695,3	23.736,9	5.697,9	1.335,2	296,9	68,7	15,3
Numpy	19.689,7	12.918,3	5.707,2	1.617,4	380,6	85,4	15,8

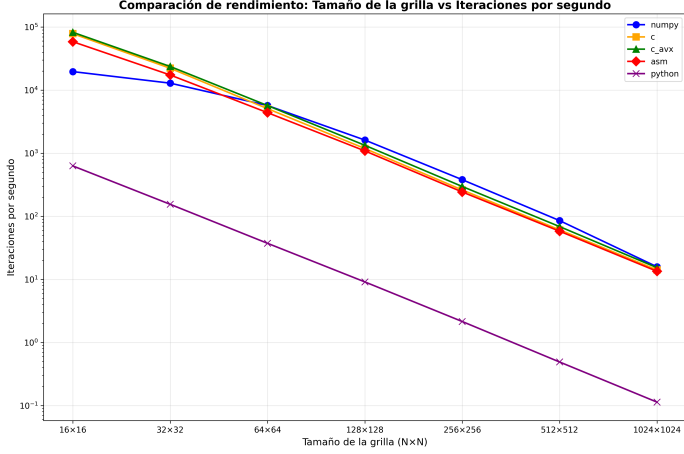


Figura 5: Comparación rendimiento entre los distintos back-ends. Se utiliza escala logarítmica en ambos ejes.

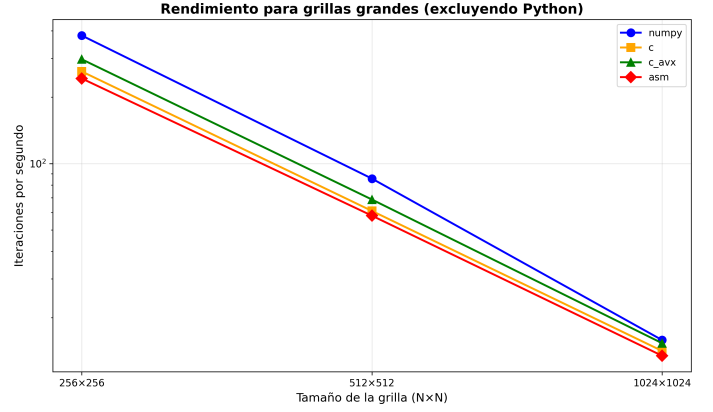


Figura 6: Comparación detallada del rendimiento de las implementaciones rápidas en grillas grandes.

- **C+AVX:** Esta implementación representa el mejor rendimiento entre las implementaciones custom, siendo en promedio 20-25 % más rápida que C puro. El uso de registros AVX de 256 bits permite procesar 4 elementos double precision simultáneamente, mostrando que las extensiones AVX proporcionan mejoras significativas de rendimiento cuando se implementan correctamente. Sin embargo, requieren mayor esfuerzo de desarrollo.
- **C vs. ASM:** Contrariamente a la expectativa inicial, la implementación en Assembly puro (ASM) resulta ligeramente más lenta que la versión en C. Esto puede atribuirse a:
 - Optimizaciones avanzadas del compilador GCC, que pueden superar implementaciones manuales en Assembly en muchos casos.
 - Mejor manejo de registros y pipeline por parte del compilador.
 - Posibles ineficiencias en la implementación manual de Assembly.

4. Conclusiones

Este trabajo ha explorado la implementación y optimización de un simulador de ondas 2D basado en la Transformada de Fourier, evaluando diferentes enfoques de implementación desde Python puro hasta optimizaciones vectoriales con AVX. Los resultados experimentales proporcionan insights valiosos sobre el rendimiento de diferentes técnicas de optimización.

Los experimentos demuestran que las técnicas de optimización pueden generar mejoras dramáticas de rendimiento. La implementación en Python puro exhibe un rendimiento base que sirve como referencia, pero resulta inadecuado para aplicaciones que requieran cálculos en tiempo real. Las implementaciones en C muestran mejoras de hasta dos órdenes de magnitud respecto al baseline de Python.

La implementación C+AVX emerge como la más eficiente entre las implementaciones desarrolladas, logrando un 20-25 % de mejora respecto a C puro gracias al paralelismo a nivel de instrucción. Esto demuestra el valor de las extensiones vectoriales modernas cuando se aplican correctamente a problemas computacionalmente intensivos.

Sorprendentemente, NumPy supera consistentemente a todas las implementaciones custom en grillas grandes (256×256 y superiores), evidenciando la efectividad de bibliotecas altamente optimizadas que incorporan décadas de optimizaciones y técnicas avanzadas como BLAS y LAPACK.

Contrario a las expectativas iniciales, la implementación en Assembly puro no superó a la versión en C. Este resultado subraya una realidad importante en la optimización moderna: los compiladores actuales incorporan optimizaciones sofisticadas que

pueden superar implementaciones manuales en muchos escenarios. Las optimizaciones automáticas del compilador incluyen scheduling de instrucciones, manejo inteligente de registros, y aprovechamiento del pipeline del procesador.

Los resultados tienen implicaciones importantes para el desarrollo de software científico:

Selección de herramientas: Para la mayoría de aplicaciones científicas, bibliotecas maduras como NumPy ofrecen el mejor balance entre facilidad de desarrollo y rendimiento.

Optimización custom: Cuando se requieren optimizaciones específicas, las extensiones AVX proporcionan un camino viable, especialmente en aplicaciones que procesan grandes volúmenes de datos regulares.

Desarrollo iterativo: La estrategia de implementar primero en lenguajes de alto nivel y optimizar posteriormente las secciones críticas resultó efectiva para identificar cuellos de botella reales.

Este trabajo abre varias direcciones para investigación adicional:

- **Paralelización multi-core:** Explorar OpenMP o threading manual para aprovechar múltiples núcleos de procesamiento.
- **Optimizaciones de memoria:** Investigar técnicas de cache-blocking y prefetching para mejorar el rendimiento en grillas muy grandes.
- **GPU Computing:** Evaluar implementaciones en CUDA o OpenCL para problemas de mayor escala.
- **Precisión mixta:** Analizar el trade-off entre precisión numérica y rendimiento usando aritmética de precisión reducida.

En conclusión, este trabajo demuestra que la optimización efectiva requiere un entendimiento profundo tanto del problema matemático como de la arquitectura del procesador, y que las bibliotecas especializadas representan una opción competitiva frente a implementaciones custom para muchas aplicaciones científicas.

Referencias

- [1] Cooley, J. W., & Tukey, J. W. (1965). An algorithm for the machine calculation of complex Fourier series. *Mathematics of computation*, 19(90), 297-301.
- [2] Frigo, M., & Johnson, S. G. (2005). The design and implementation of FFTW3. *Proceedings of the IEEE*, 93(2), 216-231.
- [3] Lawson, C. L., et al. (1979). Basic linear algebra subprograms for Fortran usage. *ACM Transactions on Mathematical Software*, 5(3), 308-323.
- [4] Dagum, L., & Menon, R. (1998). OpenMP: an industry standard API for shared-memory programming. *IEEE computational science and engineering*, 5(1), 46-55.
- [5] Muchnick, S. (1997). *Advanced compiler design and implementation*. Morgan Kaufmann.