

Поиск оптимальной реализации метода FDTD

Д. Маркович, К. Ладутенко, П. Белов

January 21, 2013

В этом тексте приводится сравнение быстродействия реализаций метода конечных временных разностей (finite-difference time-domain method, FDTD) с помощью Fortran, C и C++ (с использованием библиотеки Blitz++) для разных аппаратных платформ (AMD, Intel i5, Intel Xeon). Кратко описываются особенности каждой из перечисленных реализаций, для заданных параметров вычислительной задачи указывается наиболее эффективная из них. + НЕКИЙ ВЫВОД

1 Краткое описание метода FDTD

Метод FDTD был предложен Кейном Йи в 1966 г. в оригинальной статье[?], однако название и аббревиатуру он получил от Аллена Тафлова, который сегодня считается одним из пионеров теории и практики метода[?]. По сути FDTD представляет собой сеточный метод решения уравнений Максвелла в дифференциальной форме. В общем случае эти уравнения имеют вид:

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\mu \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} - \sigma_m \mathbf{H} \quad (1)$$

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = \epsilon \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \sigma \mathbf{E} \quad (2)$$

Вводя прямоугольную сетку и пространственные коэффициенты связи полей [?], уравнения можно привести к алгоритму, позволяющему рассчитать значения компонентов полей в "следующий" момент времени $t+1$ в заданной точке пространства, если известны их значения в "предыдущий" момент времени t : - для 2D случая и для 3D случая. На практике более интересен 3D случай, однако в ряде задач работает и 2D случай, поэтому он не выбрасывается из рассмотрения.

2 Способы реализации метода FDTD

На практике возникает вопрос оптимальной реализации метода FDTD, а именно использование какого из языков программирования позволяет в однопоточном режиме просчитать задачу с заданными параметрами быстрее

всего. С момента своего появления (2-я половина 1950-х) и до начала 1990-х годов наиболее эффективным языком для научных и инженерных вычислений было принято считать Fortran, специально для этих целей и разработанный. Достаточно сказать, что в те времена программы, реализованные на Fortran были быстрее аналогов на C++ вплоть до десятка раз[?]. Таким образом, нередко вычислительная часть программ писалась на Fortran, а возможности C++, такие как перегрузка операторов а также объектно-ориентированное и шаблонное программирование использовались для всех остальных целей. Ещё одним весомым плюсом Fortran несомненно можно считать наличие огромного количества свободно распространяющихся библиотек. Тем не менее, улучшение оптимизации программного кода компиляторами C++ а также использование шаблонного программирования позволили ему уже во второй половине 1990-х годов сравняться с Fortran по производительности. В данной работе будет рассмотрена библиотека Blitz++[?], разработанная Тоддом Вельдхузенем в 1997 году. Эта библиотека использует технику шаблонного метапрограммирования на C++, оптимизируя математические операции с данными и сохраняя при этом традиционный синтаксис (схожий с такими аналогами, как Fortran или Matlab), значительно ускоряя вычислительную часть программы по сравнению со стандартной реализацией C++. Т.к. цель данной работы заключается в нахождении оптимальной реализации метода FDTD, то было решено проверить 3 способа : 1) Стандартный C++ 2) Fortran 3) Blitz++

2.1 Реализация на C++

Типичная реализация метода FDTD на C++ выглядит следующим образом (показан фрагмент функции для подсчёта поля H_x в "следующий" момент времени $t + 1$ в 2D случае):

```
for (int i = x1; i <= x2; ++i) {
    for (int j = y1; j <= y2; ++j) {
        data[1][kHx][i][j] = data[0][kChxh][i][j] *
            data[0][kHx][i][j] - data[0][kChxe][i][j] *
            (data[0][kEz][i][j + 1] - data[0][kEz][i][j]);
    }
}
```

Реализация математических операций $+$, $-$, \cdot , $/$ в стандартном C++ крайне неэффективна. Например, чтобы выполнить операцию $x = x_1 + x_2 + x_3$ необходимо сначала подсчитать временный результат сложения $t_1 = x_1 + x_2$, затем $t_2 = t_1 + x_3$, и наконец присвоить $x = t_2$. В процессе вычисления все временные результаты хранятся в памяти компьютера. Поэтому при выполнении математических операций над массивами, особенно небольшой длины, когда на сохранение временных данных тратится значительно больше времени, чем непосредственно на сами вычисления, C++ показывает низкую производительность.

Количественную оценку времени счёта задачи с заданными параметрами (количество шагов по времени и пространственный размер) можно получить, замеряя время выполнения соответственно 2D или 3D алгоритма для метода FDTD. Следует отметить, что приведённые результаты получены с использованием флагов оптимизации $-O2 -ftemplate-depth-30$ компилятора *gcc* 4.4, что несомненно ускоряет счёт, однако, как станет ясно из дальнейшего, времени выполнения всё равно остаются слишком большими.

2.2 Реализация на Fortran

Реализация вычислительного алгоритма на Fortran 90/95 имеет более компактный вид по сравнению с C++ благодаря встроенной возможности работать с частями массива:

```
data(1:size,1:size,Hx,1) = data(1:size,1:size,Chxh,0) *
                           data(1:size,1:size,Hx,0) -
                           data(1:size,1:size,Chxe,0) *
                           (data(1:size,2:(size+1),Ez,0) -
                            data(1:size,1:size,Ez,0))
```

Серьёзным отличием от приведённого выше фрагмента кода на C++ следует считать "неправильный" (с точки зрения C++) порядок расположения данных в памяти. Например, элементы матрицы в Fortran располагаются не построчно, как в C++, а по столбцово, а потому и эффективный алгоритм должен иметь отличающийся вид. Результаты измерений времени выполнения алгоритмов на Fortran с оптимизирующим флагом компиляции $-O2$ компилятора *gfortran* 4.4 представлены в Таблице 1. Как можно видеть, Fortran действительно в разы быстрее C++. Помимо уже упомянутых выше причин этому также способствует хорошая оптимизация компилятором Fortran программного кода.

2.3 Реализация на C++ с Blitz++

Реализация метода FDTD на C++ с использованием библиотеки Blitz++ (в дальнейшем просто "на Blitz++" для краткости) представляет особый интерес. Как уже упоминалось выше, эта библиотека решает большинство проблем с быстродействием C++ при помощи шаблонного метапрограммирования. Ускорение достигается за счёт того, что перегруженные математические операторы $+$, $-$, \cdot , $/$ не возвращают промежуточные значения при вычислениях, и операции выполняются значительно быстрее. Естественно, частично ускорение уменьшается из-за затрат времени на более сложный код, однако этот недостаток устраним при хорошей оптимизации компилятора C++. Также важно отметить наличие в библиотеке так называемой кэш-оптимизации. У современных процессоров имеется до трёх уровней кэша, т.е. промежуточного буфера, доступ к данным которого осуществляется быстрее чем к данным в оперативной памяти. 1-й уровень кэша является наименьшим по объёму, зато быстрым по скорости доступа, 2-й уровень кэша больше 1-го по объёму и медленнее

по скорости доступа и т.д. При реализации алгоритмов, как в методе FDTD, правильное расположение данных в памяти позволяет значительно увеличить частоту попадания данных в кэш, а следовательно ускорить вычислительную часть программы. Кэш - оптимизация Blitz++ основана не на методе разбиения массива на блоки, а на кривой Гильберта: код, при помощи техники шаблонного программирования, специальным образом преобразуется для максимальной частоты попадания данных в кэш в независимости от используемой платформы.

Реализовать алгоритм метода FDTD в Blitz++ позволяют две операции над массивами: *Range* и *Stencil*. Первая генерирует диапазон целых чисел, в котором меняется произвольный индекс массива, а затем выполняет действия над всеми элементами, указанными в диапазоне. Аналогичный приведённым выше фрагмент кода имеет вид:

```
const blitz::Range i(1, length_x);
const blitz::Range j(1, length_y);
data(1)(kHx, i, j) = data(0)(kChxh, i, j) * data(0)(kHx, i, j) -
                    data(0)(kChxe, i, j) *
                    (data(0)(kEz, i, j+1) - data(0)(kEz, i, j));
```

Stencil является более сложной операцией, не использующей явный вид индексации. Вместо этого *Stencil* сама определяет диапазон изменения индексов, основанный на размерах переданных ей в качестве аргумента массивов. Определённое неудобство доставляет невозможность работы с массивами размерности более 3, однако его можно обойти. Фрагмент кода с этой операцией имеет вид:

```
BZ_DECLARE_STENCIL5(update_field_Hx, kHx_next, kHx, kChxh, kChxe,
                    kEz)
kHx_next = kChxh * kHx - kChxe * (kEz(0, 1) - kEz);
BZ_END_STENCIL_WITH_SHAPE(blitz::shape(0, 0), blitz::shape(0, 1))

applyStencil(update_field_Hx(), kHx_next, kHx, kChxh, kChxe,
            kEz);
```

Сравнения времён выполнения для всех реализаций представлены ниже. Времена счёта для Blitz++ уменьшились в разы по сравнению со стандартным C++, и для большинства задач превосходят Fortran. Применение операции *Stencil* даёт лучшие результаты для 2D алгоритма, а *Range* — для 3D (Рис. ?? и Рис. ??).

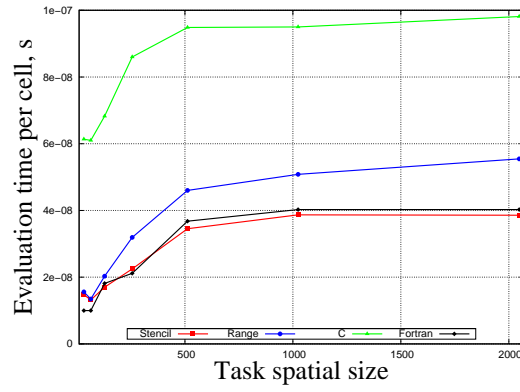


Figure 1: Сравнение времён выполнения 2D алгоритма и в зависимости от пространственного размера задачи для всех реализаций

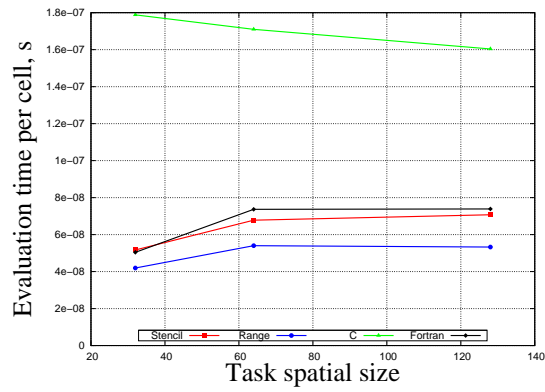


Figure 2: Сравнение времён выполнения 3D алгоритма и в зависимости от пространственного размера задачи для всех реализаций

Однако, существует возможность дальнейшего увеличения производительности за счёт дополнительных оптимизаций Blitz++ для некоторых специальных размеров задачи. Например, можно применять операции *Range* и *Stencil* для расчёта заданной области поблочно. Это позволит при правильном выборе размера блока для используемой платформы улучшить кэш-эффективность и получить дополнительное ускорение на размерах задачи, согласующихся с длиной кэш-линии. Это предположение было проверено соответствующей дополнительной реализацией FDTD алгоритма с разбиением счётной области на блоки. Размер блока для каждой задачи менялся от минимальных 8 элементов, до половины размера самой задачи. Времена выполнения 2D алгоритма для реализаций с блоками в сравнении со "стандартными" реализациями *Range* и *Stencil* для задачи 1024 x 1024 представлены на графике (Рис. ??).

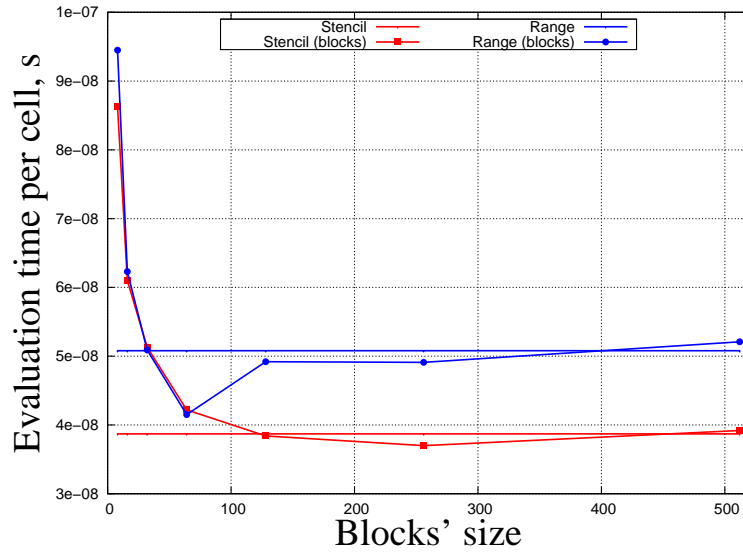


Figure 3: Время выполнения 2D алгоритма с блоками для реализации на Blitz++ для задачи 1024 x 1024

Для операции *Stencil* наблюдается лишь незначительное улучшение, в то время как для *Range* правильно подобранный размер блока улучшает время выполнения вплоть до 20%. В целом для всех исследуемых размеров сравнение реализаций показано на Рис. ??.

Как следует из графика, затраты на дополнительный код для реализации

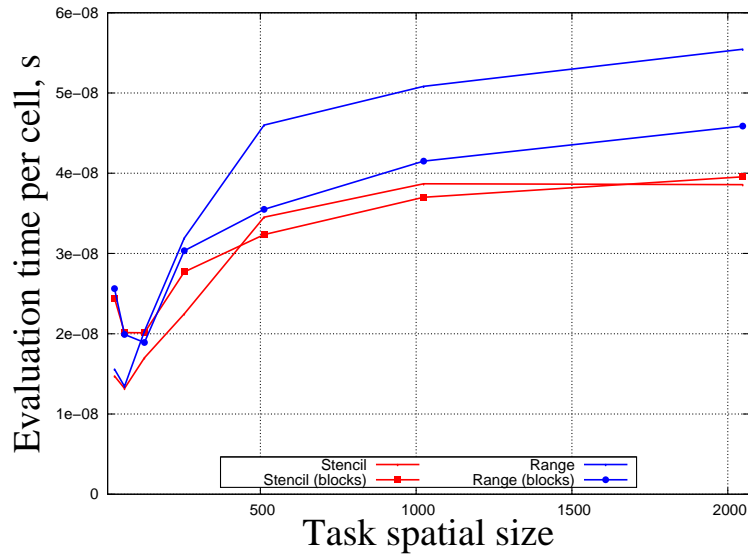


Figure 4: Время выполнения 2D алгоритма с блоками для реализации на Blitz++ в зависимости от пространственного размера задачи

блоков дают положительный выигрыш при размерах задачи от 256 x 256 элементов. Значительное ускорение при такой реализации наблюдается лишь для операции *Range*, а значит реализация алгоритма метода FDTD при помощи этой операции с оптимально подобранным количеством блоков может служить полезной дополнительной опцией, позволяющей быстрее обрабатывать задачи определённых размеров в 2D случае.

3 Заключение

C++ с использованием Blitz++ обладает сравнимой с Fortran'ом производительностью, являясь при этом гораздо более выразительным языком, подходящим для решения задач любого типа. Встроенные оптимизации библиотеки позволяют получать высокопроизводительные программы практически без дополнительных усилий со стороны пользователя. C++ вкупе с Blitz++ прекрасно подходят для реализации FDTD метода, обладая как необходимым быстродействием

и простотой реализации алгоритмов, так и всеми стандартными средствами C++ для обработки данных.

Список Литературы

- [1] Kane Yee (1966). "Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media". Antennas and Propagation, IEEE Transactions on 14: 302-307. DOI:10.1109/TAP.1966.1138693
- [2] Allen Taflov, Susan C. Hagness, Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method, Artech House, INC., 685 Canton Street Nordwood, MA, 02062
- [3] John B. Schneider, "Understanding the Finite-Difference Time-Domain Method"
- [4] Todd Veldhuizen, Scientific Computing: C++ versus Fortran
- [5] <http://sourceforge.net/projects/blitz/>