Декомпозиция сеточной области при разностном решении уравнений Максвелла на графическом процессоре

С.А. МАЛЫШЕВА

ГОУ ВПО Самарский государственный аэрокосмический университет (национальный исследовательский университет), Самара e-mail: s-a-mal@yandex.ru

Д.Л. ГОЛОВАШКИН Институт систем обработки изображений РАН, Самара

In this paper, we apply the mesh domain decomposition in the finite-difference method solution of Maxwell's equations on GPU. The implementation of the algorithm for two-dimensional problem on graphics processor NVIDIA GeForce GT 240 using CUDA-technology demonstrates computational speedup in 15 times as against with computations has been made on central processor Intel Core Duo E6500. Mesh domain decomposition can reduce the duration of the calculations by reducing the number of arithmetic operations and removes the restrictions on the size of the problem associated with the size of memory on the GPU.

Введение

Математическое моделирование, основанное на разностном решении уравнений Максвелла, находит широкое применение в вычислительной практике. FDTD-метод был предложен в 1966 г. S.K. Yee [1] и развитый в работах А. Taflove [2], а применительно к решению задач компьютерной оптики — R.W. Ziolkowski [3], B.A. Coйфером [4], D.W. Prather [5 – 6] и др. [7 – 10].

Популярность метода объясняется универсальностью модели, содержащей основные уравнения электродинамики и строго описывающей волновые процессы, и простотой ее реализации, когда после задания характеристик области моделирования вычисления производятся по явной разностной схеме Yee. Однако его существенным недостатком является высокая вычислительная сложность и требования к объему оперативной памяти системы.

Одним из способов снижения длительности вычислений является векторизация алгоритма. С развитием GPU (Graphics Processing Unit) и появлением технологии CUDA появилась возможность их реализации на графических процессорах, что позволяет существенно ускорить вычисления. В работе [11] продемонстрировано ускорение относительно CPU в 25 – 42.9 раза в зависимости от размера задачи.

Однако, объем памяти доступных видеокарт невелик, что накладывает ограничения на размер сеточной области. Актуальность задачи снижения вычислительных затрат возрастает в приложении к оптике волноводов, где размеры вычислительной области измеряются сотнями и тысячами длин волн. Поэтому перспективной представляется применение идеи декомпозиции[12] сеточной области к FDTDметоду, предложенное в [13], позволяющее разделить область вычислений на несколько подобластей и изучать процесс дифракции отдельно в каждой из них. Применение этого подхода сокращает длительность вычислений и снимает ограничения на размер задачи, обусловленные объемом доступной памяти вычислительного устройства, что особенно важно при реализации на графических процессорах. Целью данной работы является применение идеи декомпозиции сеточной области к реализации FDTD-метода на графическом процессоре.

1. Одномерная декомпозиция двумерной сеточной области

Рассмотрим распространение ТЕ-волны в двумерной области D.

Пусть в узлах $\{(t_m, y_j, z_k) : t_m = mh_t, m = 0, 1, \dots, M = T/h_t, y_j = jh_y, j = 0, 1, \dots, J - 1(J = L_y/h_y), z_k = kh_z, k = 0, 1, \dots, K = L_z/h_z\}$ сеточной структуры D_h^2 , наложенной на D определена сеточная проекция электрического поля на ось $X - E_{x_{j,k}}^m$. Сеточная проекция магнитного поля на ось $Z - H_{z_{j+0.5,k}}^{m+0.5}$ определена в узлах $\{(t_{m+0.5}, y_{j+0.5}, z_k) : t_{m+0.5} = (m + 0.5)h_t, m = 0, 1, \dots, M - 1, y_{j+0.5} = (j + 0.5)h_y, j = 0, 1, \dots, J - 1, z_k = kh_z, k = 0, 1, \dots, K - 1\}$ и проекция магнитного поля на $Y - H_{y_{j,k+0.5}}^{m+0.5}$ в узлах $\{(t_{m+0.5}, y_j, z_{k+0.5}) : t_{m+0.5} = (m + 0.5)h_t, m = 0, 1, \dots, J - 1, z_{k+0.5} = (k + 0.5)h_z, k = 0, 1, \dots, K - 1\}$. В предложенной области индексы j, k обозначают узлы по пространственными $(h_y$ и $h_z)$ и временным (h_t) шагами сетки. Сеточное значение диэлектрической проницаемости $(\varepsilon_{j,k})$ характеризует изучаемый оптический элемент.

Тогда явная разностная схема Yee для системы уравнений Максвелла, описывающая распространение TE-волны в области D:

$$\mu_0 \frac{H_{y_{j,k+0.5}}^{m+0.5} - H_{y_{j,k+0.5}}^{m-0.5}}{h_t} = -\frac{E_{x_{j,k+1}}^m - E_{x_{j,k}}^m}{h_z} \ npu \ 0 \le j \le J-1, 0 \le k \le K-1;$$
(1)

$$\mu_0 \frac{H_{z_{j+0.5,k}}^{m+0.5} - H_{z_{j+0.5,k}}^{m-0.5}}{h_t} = \frac{E_{x_{j+1,k}}^m - E_{x_{j,k}}^m}{h_y} \ npu \ 0 \le j \le J-2, 1 \le k \le K-1;$$
(2)

$$\mu_0 \frac{H_{z_{J-0.5,k}}^{m+0.5} - H_{z_{J-0.5,k}}^{m-0.5}}{h_t} = \frac{E_{x_{0,k}}^m - E_{x_{J-1,k}}^m}{h_y} \ npu \ 1 \le k \le K-1;$$
(3)

$$\varepsilon_{0}\varepsilon_{j,k}\frac{E_{x_{j,k}}^{m+1}-E_{x_{j,k}}^{m}}{h_{t}} = \frac{H_{z_{j+0.5,k}}^{m+0.5}-H_{z_{j-0.5,k}}^{m+0.5}}{h_{y}} - \frac{H_{y_{j,k+0.5}}^{m+0.5}-H_{y_{j,k-0.5}}^{m+0.5}}{h_{z}} npu \ 1 \le j \le J-1, 1 \le k \le K-1;$$
(4)

$$\varepsilon_{0}\varepsilon_{0,k}\frac{E_{x_{0,k}}^{m+1}-E_{x_{0,k}}^{m}}{h_{t}} = \frac{H_{z_{0.5,k}}^{m+0.5}-H_{z_{J-0.5,k}}^{m+0.5}}{h_{y}} - \frac{H_{y_{0,k+0.5}}^{m+0.5}-H_{y_{0,k-0.5}}^{m+0.5}}{h_{z}} \ npu \ 1 \le k \le K-1.$$
(5)

Уравнения (3), (5) являются модификацией выражений (2) и (4) соответственно в виду использования циклических граничных условий на горизонтальных границах области D_h^2 (пунктирные линии на рис. 1).

Задавая на вертикальных границах граничные условия Дирихле, положим

$$E_{x_{j,0}}^m = 0 \ u \ E_{x_{j,K}}^m = 0 \ npu \ 0 \le m \le M, 0 \le j \le J - 1.$$
(6)

Начальное условие записывается как

$$E^{0}_{x_{j,k}} = 0 \ npu \ 0 \le j \le J - 1, 1 \le k \le K - 1.$$
(7)

Вычислительные процедуры для расчета полей по схеме (1) – (5) получаются переносом в правую часть всех сеточных функций, заданных на предыдущих временных слоях.

Разностная схема (1) – (7) имеет порядок аппроксимации $O(h_t^2, h_y^2, h_z^2)$ и устойчива при условии $h_t \sqrt{\frac{1}{h_y^2} + \frac{1}{h_z^2}} \leq \frac{1}{c}$, где c – скорость света в рассматриваемой среде [2].

Предложенная в [13] одномерная декомпозиция двумерной сеточной области основывается на том, что излишне производить расчет поля в тех частях сеточной области, где излучение уже устоялось,



Рис. 1. Сеточная область, наложенная на D. * — узлы, в которых расположено излучающее условие, ∨ — узлы, в которых производится регистрация прошедшего излучения, ∧ — узлы регистрации отраженного излучения

и в тех, куда еще не дошло. Будем производить разбиение вдоль одной координатной оси, считая что штрихи на ней (рис. 1) обозначают столбцы узлов, расположенных вдоль другой оси.

В узлах * формируется падающая волна, а в ∨ — регистрируется прошедшая. Разобьем исходную область на две пересекающиеся части (рис. 1). Найденное в результате эксперимента в первой подобласти значение напряженности электрического поля в узле регистрации (рис. 1а) используется в качестве падающей волны во второй подобласти (рис. 1б). Таким образом, после расчета половины временных слоев в первой подобласти осуществляется переход во вторую, где количество слоев по времени также составляет половину этого параметра для исходной сеточной области.

В случае неоднородной среды необходимо учитывать переотражения от оптических поверхностей, для чего алгоритм дополняется циклической частью, в которой с правого края первой подобласти вводится волна, зарегистрированная у левого края второй подобласти как отраженная на предыдущем шаге (рис. 1в). Регистрации подлежит отраженная в первой подобласти волна, которая вновь используется для задания падающей волны во второй подобласти (рис. 1г). Результирующая волна получается арифметическим сложением соответствующих комплексных амплитуд прошедших волн, согласно принципу суперпозиции.

Ниже приведен алгоритм декомпозиции сеточной области в нотации языка MATLAB:

```
% Первый проход волны через первую подобласть (рис. 1а)
Eps_m=1; % Дииэлектрическая проницаемость для вспомогательной задачи
Eps=Eps_1; % Дииэлектрическая проницаемость для основной зада задачи
A=exp(0.0*i)*ones(Ny,1);% Амплитуда падающей волны
Yee_2DD(1); % Расчет по разностной схеме Yee. Излучающее условие располагается в первом
%узле непоглощающей области
%Первый проход волны через вторую подобласть (рис. 16)
Eps_m=n*n; Eps=Eps_2;
A=Amp_right;% В качестве падающей волны задается волна, зафиксированная у правого края
%первой подобласти (Amp_right)
Yee_2DD(1);% Излучающее условие располагается в первом узле непоглощающей области
Amp_res=Amp_right;% В качестве результирующей волны регистрируется амплитуда,
%зафиксированная у правого края второй подобласти
% Цикл для учета G переотражений
for refl=1:G
  % Переотражение в первой подобласти (рис. 1в)
  A=Amp_left;% В качестве падающей волны задается волна, зафиксированная у левого края
  %второй подобласти как отраженная (Amp_left)
  Eps_m=n*n; Eps=Eps_1;
  Yee_2DD(Gr-1);% Излучающее условие располагается в последнем узле непоглощающей области
```

```
%(Gr - номер узла, с которого начинается поглощающий слой)
% Переотражение во второй подобласти (рис. 1г)
А=Amp_right;% В качестве падающей волны задается волна, зафиксированная у правого края
%первой подобласти как отраженная
Eps_m=n*n; Eps=Eps_2;
Yee_2DD(1);% Излучающее условие располагается в первом узле непоглощающей области
Amp_res=Amp_res+Amp_right;%Результирующая волна - сумма прошедшей ранее волны и
%прошедшей до правого края области на данном шаге
End
```

При реализации на GPU расчет проекций векторов электрического и магнитного полей внутри функции Yee_2DD()осуществляется в функциях ядра (kernel), между вызовами которых, осуществляется синхронизация.

2. Исследование метода

Изучая данный подход, рассмотрим сеточную область, наложенную на некоторую дифракционную решетку [13]. Выберем дискретизацию по пространству в 100 узлов на длину волны; шаг по времени таким, чтобы за 200 отсчетов по времени фронт волны в вакууме прошел расстояние в одну длину волны. В область вводится 200 длин волн.

В таблице 1 представлено время выполнения экспериментов с декомпозицией на две подобласти на CPU (CPU Intel Core Duo E6500) и GPU (GPU NVIDIA GeForce GT 240), а также без декомпозиции сеточной области.

Аппаратная база	Время, с		
	без декомпозиции	С декомпозицией на две подобласти	
		Число переотражений $G=0$	Число переотражений $G=1$
CPU	614.12	600.37	1209.41
GPU	44.46	41.07	77.92

Таблица 1 — Время выполнения экспериментов на СРU и GPU

Как видно из таблицы 1, реализация алгоритма на GPU дает ускорение в 14 – 15 раз относительно CPU для размерности задачи 250×800 отсчетов. Ускорение вычислительного процесса с декомпозицией по отношению к вычислительному процессу без таковой составляет 1.08 для GPU и для 1.02 для CPU при G = 0 и достигает 0.57 и 0.5 соответственно при G = 1.

Рассмотрим зависимость времени вычислений от размера задачи. Упрощая постановку эксперимента, исключим рассмотрение переотражений. Будем варьировать длину непоглощающей области, выбирая время вычислений таким, чтобы излучение распространилось до другого конца области. Результаты экспериментов представлены на рис. 2.

Задачи размером до K = 120000 отсчетов рассчитывались на GPU без применения декомпозиции сеточной области (*J* выбиралось равным 250 узлам). Далее график терпит разрыв в связи с ограниченностью объема памяти на видеокарте (512 Мб) и невозможностью поместить в нее задачу размером более K = 125000 отсчетов (31 миллион узлов сеточной области).

Декомпозиция сеточной области на две подобласти позволяет вновь использовать GPU в вычислениях, путем последовательного помещения в глобальную память и проведения расчета по каждой из подобластей. Разрыв функции объясняется сокращением числа арифметических операций при декомпозиции на две подобласти в отсутствие переотражений.

Ускорение вычислительного процесса при K = 125000 составляет 2.06. Рост ускорения с ростом размера задачи объясняется значительными накладными расходами на вызов ядра при небольшом объёме обрабатываемых данных (для задачи 250×800), когда большая часть мультипроцессоров GPU простаивает.



Рис. 2. Время выполнения алгоритма в зависимости от числа узлов сеточной области

3. Достоинства и недостатки метода декомпозиции. Перспективы использования

Выигрыш от применения декомпозиции имеет две стороны, связанные с уменьшением длительности вычислений: экономию памяти вычислительной системы и сокращение числа арифметических операций в $S = \frac{D^2}{(D+2(D-1)G)}$ раз [13], где D – число подобластей декомпозиции.

Существенный недостаток метода декомпозиции — узкая область применения: периодические оптические элементы, элементы с несколькими поверхностями. Это требование является основным, так как количество подобластей, на которое осуществляется декомпозиция, равно число оптических поверхностей и определяет ускорение алгоритма *S*.

Развитие технологии изготовления ДОЭ [14] вызвало новый интерес к применению метода декомпозиции. Идея декомпозиции сеточной области может быть применена при расчете полей в объемных дифракционных элементах. Облучение фемтосекундными импульсами позволяет легко рисовать световоды в объеме прозрачных кварцевых стекол, просто перемещая образец через фокальную область лазерного луча (рис 3).



Рис. 3. Локализация модифицированной области в кварце

Объемные дифракционные элементы, в отличие от классических ДОЭ с одной-двумя оптическими поверхностями, допускают декомпозицию на произвольное число подобластей: они могут быть рассчитаны и изготовлены таким образом, что границы между подобластями будут проходить по однородной среде, что является существенной чертой метода декомпозиции, а все неоднородности оптической плотности будут находиться внутри подобластей.

Выводы

Предложенный способ организации вычислений при разностном решении уравнений Максвелла на графическом процессоре позволяет снизить вычислительную сложность FDTD-метода за счет уменьшения числа арифметических операций. Декомпозиция преодолевает ограничения на объем памяти вычислительной системы, позволяя использовать GPU для решения задач, размер которых превосходит объем доступной памяти видеокарты, путем последовательного помещения в глобальную память и проведения расчета по каждой из подобластей.

Список литературы

- YEE K.S. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media // IEEE Trans. Antennas Propag., 1966. AP-14. P. 302–307.
- [2] TAFLOVE A., HAGNESS S. Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method. Boston:Arthech House Publishers, 2000. 852 p.
- JUDKINS J.B., ZIOLKOWSKI R.W. Finite-difference time-domain modeling of nonperfectly conducting metallic thin-film gratings // J. Opt. Soc. Am. A. 1995. Vol. 12. No. 9. P. 1974–1983.
- [4] ГОЛОВАШКИН Д.Л., ДЕГТЯРЁВ А.А., СОЙФЕР В.А. Моделирование волноводного распространения оптического излучения в рамках электромагнитной теории// Компьютерная оптика. 1997. Вып. 17. С. 5–9.
- [5] PRATHER D.W., SHI S. Formulation and application of the finite-difference time-domain method for the analysis of axially symmetric diffractive optical elements // J. Opt. Soc. Am. A. 1999. Vol. 16. No. 5. P. 1131–1142.
- [6] MIROTZNIK M.S., PRATHER D.W., MAIT J.N., BECK W.A., SHI S., GAO X. Three-Dimensional Analysis of Subwavelength Diffractive Optical Elements with the Finite-Difference Time-Domain Method // Applied Optics. 2000. Vol. 39. No. 17. P. 2871–2880.
- [7] ГОЛОВАШКИН Д.Л., КАЗАНСКИЙ Н.Л., САФИНА В.Н. Применение метода конечных разностей для решения задачи дифракции Н-волны на двумерных диэлектрических решетках // Компьютерная оптика. 2003. № 25. С. 36–40.
- [8] ГОЛОВАШКИН Д.Л. Дифракция Н-волны на двумерной идеально проводящей решётке // Математическое моделирование. 2005. Том 17. № 4. С. 53–61.
- [9] ГОЛОВАШКИН Д.Л., КАЗАНСКИЙ Н.Л. Методика формирования падающей волны при разностном решении уравнений Максвелла. Двумерный случай // Автометрия. 2007. Том 43. № 6. С. 78–88.
- [10] ГОЛОВАШКИН Д.Л., КАЗАНСКИЙ Н.Л. Решение задач компьютерной оптики на графических вычислительных устройствах // Перспективные информационные технологии для авиации и космоса (ПИТ-2010): избранные труды Международной конференции с элементами научной школы для молодёжи, 2010. С. 840– 844.
- [11] МАЛЫШЕВА С.А. Реализация FDTD-метода по технологии CUDA // Перспективные информационные технологии для авиации и космоса (ПИТ-2010): избранные труды Международной конференции с элементами научной школы для молодёжи, 2010. С. 554–559.
- [12] САМАРСКИЙ А.А., ВАБИЩЕВИЧ П.Н. Вычислительная теплопередача. М.: Едиториал УРСС, 2003. 784 с.
- [13] ГОЛОВАШКИН Д.Л., КАЗАНСКИЙ Н.Л. Декомпозиция сеточной области при разностном решении уравнений Максвелла // Математическое моделирование. 2007. Том 19. № 2. С. 48–58.
- [14] КОНОНЕНКО В.В., ПАШИНИН В.П., КОМЛЁНОК М.С., КОНОВ В.И. Модификация кварцевого стекла лазерными импульсами фемтосекундной длительности // Компьютерная оптика. 2009. Том 33. №3. С. 254– 259.