

Неформальное введение в программирование на видеокартах-2

А. Фролов (OpenCL); Д. Левков, А. Худяков (CUDA)

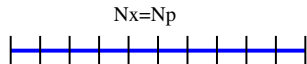
25 сентября 2012 г.

Решение нестационарного уравнения Шредингера

$$H = p^2/2 + V(x)$$

$$\Psi_{\Delta t} = e^{-i\hat{H}\Delta t/\hbar}\Psi_0 = e^{-i\hat{p}^2\Delta t/4\hbar} \cdot e^{-iV(\hat{x})\Delta t/\hbar} \cdot e^{-i\hat{p}^2\Delta t/4\hbar} \cdot \Psi_0 + O(\Delta t^2)$$

Алгоритм:



$$\Psi_0(x) \xrightarrow{\text{FFT}} \Psi_0(p) \rightarrow \underbrace{e^{-ip^2\Delta t/2\hbar} \cdot \Psi_0(p)}_{\Psi_1(p)}$$
$$\xrightarrow{\text{FFT}} \Psi_1(x) \rightarrow e^{-iV(x)\Delta t/\hbar} \cdot \Psi_1(x) \rightarrow \dots$$

Нужно делать FFT & умножать!

Библиотека CUFFT

- ▶ Руководство:
<http://developer.nvidia.com/cuda/nvidia-gpu-computing-documentation>
- ▶ Поддерживаемые типы:
`cufftReal = float`, `cufftDoubleReal = double`,
`cufftComplex`, `cufftDoubleComplex`
- ▶ 1D, 2D, 3D
- ▶ Множественные FFT
- ▶ Алгоритмы `Cooley-Tukey` и `Bluestein`.
- ▶ Лучший результат: $N = 2^n \cdot 3^m \cdot 5^k \cdot 7^l$
- ▶ ...

CUFFT: Программа

```
#include <cuda_runtime.h>
#include <cufft.h>
...
__global__ multiply(cudaDoubleComplex *M, cudaDoubleComplex *psi);

int main()
{
    cufftHandle plan;
    cudaDoubleComplex *psi;
    cufftPlan1d(&plan, Nx, CUFFT_Z2Z, 1);
    ...
    cufftExecZ2Z(plan, psi, psi, CUFFT_FORWARD);
    cudaDeviceSynchronize();
    multiply<<NB, 256>>(exp_k, psi);
    cudaDeviceSynchronize();
    cufftExecZ2Z(plan, psi, psi, CUFFT_REVERSE);
    cudaDeviceSynchronize();
    multiply<<NB, 256>>(exp_v, psi);
    cudaDeviceSynchronize();
    ...
    cufftDestroy(plan);
}
```

Команды cuFFT

- ▶ `cufftPlan1d(&plan, Nx, CUFFT_Z2Z, 1);`
2d, 3d, Many R2C, D2Z, ...
- ▶ `cufftExecZ2Z(plan, psi, psi, CUFFT_FORWARD);`
R2C, D2Z, ... INVERSE
- ▶ `cufftDestroy(plan);`
- ▶ `cufftSetCompatibilityMode(CUFFT_COMPATIBILITY_NATIVE);`

Время исполнения

Накладные расходы. FORTRAN: <1%, CUDA: 1-20%

