

Sammanfattning av kandidatarbetet

”Feasibility of FPGA-based Computations of Transition Densities in Quantum Many-Body Systems”

0.1 Teori och bakgrund

Målsättningen att beskriva atomkärnans egenskaper har gjorts möjlig av den kvantfysikaliska formalism som byggts upp under det senaste seklet. Inom denna formalism beskrivs atomkärnans tillstånd med en vågfunktion ψ vars egenskaper representeras av operatorer \hat{V} . Om ψ inte är en egenfunktion till \hat{V} , är det dock omöjligt att associera \hat{V} med ett deterministiskt värde, utan endast ett väntevärde, vilket ges av

$$\bar{V} = \langle \psi | \hat{V} | \psi \rangle. \quad (1)$$

Drivkraften i denna studie är att kunna beräkna sådana väntevärden, eller generaliserat, matriselement mellan ett initialtillstånd och ett finaltillstånd hos en atomkärna,

$$V_{if} = \langle \psi_f | \hat{V} | \psi_i \rangle. \quad (2)$$

Om det finns analytiska uttryck för ψ och \hat{V} är utvärderingen av dessa uttryck tämligen rättfram. Vågfunktioner av intresse är dock i allmänhet egenfunktioner till det studerade systemets Hamiltonoperator, och bortsett från ytterst enkla fall saknas i allmänhet analytiska uttryck för sådana. Vidare finns inga exakta uttryck för den nukleära Hamiltonianen, och en jämförelse mellan beräkningar och experiment blir därför ett mått på hur väl den använda Hamiltonianen svarar mot verkligheten.

En konventionell metod för att finna energiegenfunktionerna för en atomkärna bestående av A partiklar och med en realistisk potential, utgörs av att expandera tillståndsrummet i en flerkroppsbas. Med detta menas en A -faldig tensorprodukt av enpartikeltillstånd α , det vill säga vågfunktioner som kan användas för att beskriva ett system bestående av en nukleon. Flerkroppsbasen betecknas då

$$|\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_A\rangle, \quad (3)$$

med den fysikaliska tolkningen att $\alpha_1, \dots, \alpha_A$ är ockuperade tillstånd. Pauliprincipen medför att α_i skall vara distinkta, det vill säga att ett enpartikeltillstånd bara får förekomma en gång i ett flerkroppstillstånd. Av detta följer att eftersom partiklarna i en atomkärna, det vill säga neutroner och protoner, är fermioner, måste baelementet i (1.3) vara antisymmetriskt med avseende på permutation av två enpartikeltillstånd.

Utgående från denna flerkroppsbas kan vi skapa matrisrepresentationen av Hamiltonianen och diagonalisera denna, och på så vis finna egenvektorer ψ . Eftersom en fullständig bas har oändlig dimension är det i praktiska beräkningar nödvändigt att trunkera basen för att erhålla ändlig dimension. En sådan trunkering kommer dock alltid att påverka noggrannheten med vilken vi kan beräkna egenfunktionerna, och i slutändan också V_{if} . Redan för relativt lätta kärnor med $A = 10$ krävs en bas av dimension ca 10^9 för att erhålla tillförlitliga resultat, vilket innebär matriser med 10^{18} element, det vill säga ohyggligt stora matriser.

En effektiv representation av problemet erhålls med hjälp av den kvantfysikaliska formalismen ”second quantization”. I denna formalism använder man sig av så kallade skapelse- och förintesoperatorer, $a_{\alpha_i}^\dagger$ och a_{α_i} vars verkan på ett flerkroppstillstånd av typ (3) är att skapa respektive förinta enpartikeltillståndet α_i , förutsatt att tillståndet inte finns respektive finns flerkroppstillståndet,

$$a_{\alpha_i}^\dagger a_{\alpha_j} |\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_A\rangle = \begin{cases} \pm |\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_i \dots \alpha_A\rangle, & \text{om } j \in 1, 2, \dots, A \text{ och } i \notin 1, 2, \dots, A \\ 0, & \text{annars} \end{cases} \quad (4)$$

där tecknet avgörs av hur tillståndet eventuellt måste ordnas om. Ur detta förstår vi att ett matriselement av typen

$$\langle \alpha'_1 \alpha'_2 \dots \alpha'_A | a_{\alpha_i}^\dagger a_{\alpha_j} | \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_A \rangle \quad (5)$$

är nollskilt endast om den enda skillnaden mellan flerkroppselementen är tillstånden α_i och α_j . Om detta är uppfyllt säger vi att flerkroppstillstånden kopplar till varandra. Vår studie har syftat till att undersöka lämpligheten i att använda FPGA-hårdvara för att hitta alla sådana kopplingar.

I studien har vi begränsat oss till så kallade enkroppoperatorer (betecknas med \hat{O} som i one-body operator), som med hjälp av second quantization kan skrivas enligt

$$\hat{O} = \sum_{\alpha_i \alpha_j} O_{\alpha_i \alpha_j} a_{\alpha_i}^\dagger a_{\alpha_j} \quad (6)$$

Ekvation (2) kan då uttryckas

$$O_{if} = \langle \psi_f | \hat{O} | \psi_i \rangle = \sum_{\alpha_i \alpha_j} \langle \alpha_i | O | \alpha_j \rangle \langle \psi_f | a_{\alpha_i}^\dagger a_{\alpha_j} | \psi_i \rangle. \quad (7)$$

Den stora fördelen med denna variant är att termen $\langle \psi_f | a_{\alpha_i}^\dagger a_{\alpha_j} | \psi_i \rangle$, ett s.k. matriselement för övergångs-sannolikhet, är samma för alla enkroppoperatorer. Om man beräknar dessa får man därför en beräknings-mässig betydligt enklare summering för att kunna beräkna matriselement för en mängd olika observabler. Slutprodukten för beräkningarna utgörs därför av $\langle \psi_f | a_{\alpha_i}^\dagger a_{\alpha_j} | \psi_i \rangle$ eller ännu hellre en reducerad variant av sådana, där hänsyn till \hat{O} :s symmetrier har tagits.

0.2 Avgränsning och modellrum

En viktig aspekt för att effektivt kunna utföra de ovan beskrivna beräkningarna, är att välja en lämplig bas. Till att börja med behövs enpartikeltillstånd som svarar mot en välbestämd energi. I beräkningarna har vi använt tillstånd svarande mot en tredimensionell harmonisk oscillator, det vill säga tillstånd med kvanttalen $\alpha_i = (n_i, l_i, j_i, m_{j_i})$, vars energikvanta ges av $N = 2n + l$. Flerkroppsbasen kan därefter konstrueras som en tensorprodukt av dessa, som förutom Pauliprincipen tar hänsyn till följande trunckeringar och villkor:

- Summan av energierna för de ingående enpartikeltillstånden får inte överstiga ett givet värde N_{tot} , det vill säga

$$\sum_{i=1}^A N_i \leq N_{\text{tot}}. \quad (8)$$

- Flerkroppstillstånden har en välbestämd paritet, det vill säga antingen + eller -. Tack vare den harmoniska oscillatorns egenskaper kan detta uttryckas som att $\sum_{i=1}^A l_i$ modulo två skall ha en viss rest (antingen 0 eller 1).
- Flerkroppstillstånden har en välbestämd total projektion av rörelsemängdsmomenta, M . Detta innebär att projektionerna för enpartikeltillståndens enskilda rörelsemängdsmoment måste uppfylla

$$\sum_{i=1}^A m_{j_i} = M. \quad (9)$$

Om ett enpartikeltillstånd i ett flerpartikeltillstånd byts, måste det därför verifieras att dessa villkor är uppfyllda för att det nya tillståndet skall vara giltigt och därmed ge upphov till en koppling.

0.3 Metod

För att undersöka lämpligheten av att FPGA-implementera beräkningen av övergångstätheter, har vi utformat ett antal strategier för hur en FPGA kan användas för att identifiera alla kopplingar i en flerkroppsbas. Dessa implementerades på en FPGA, vilket i aktuellt fall skett med hjälp av ett högnivå-programmeringsspråk, utvecklat av Maxeler. Därefter utvärderades dessa med avseende på korrekthet hos

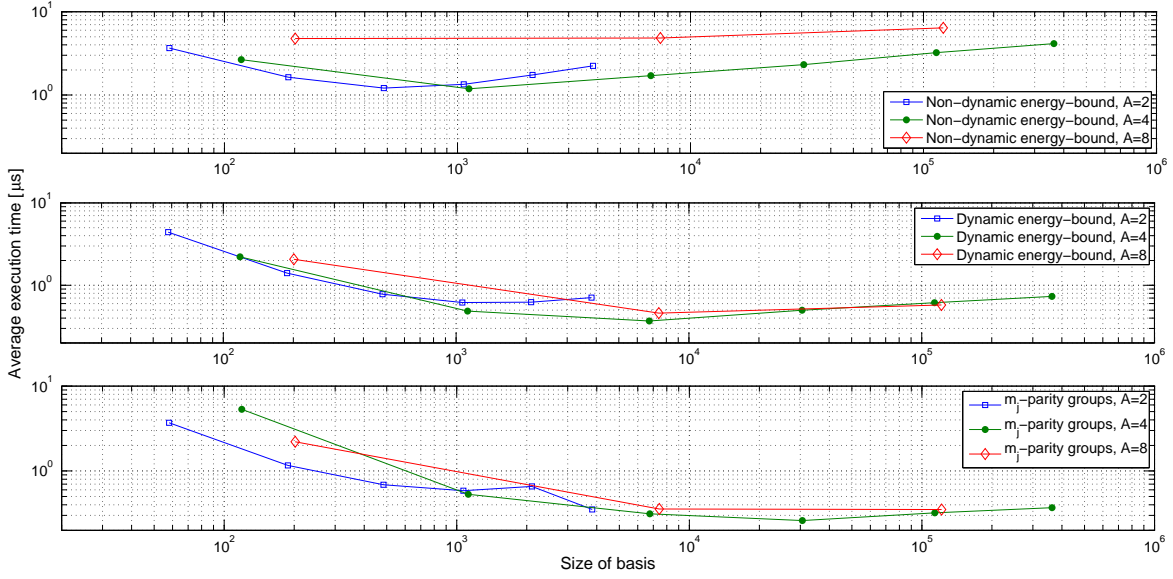


Figure 1: Genomsnittliga exekveringstid per mångkroppstillstånd som funktion av storleken på mångkroppsbasen för olika algoritmer och partikelantal.

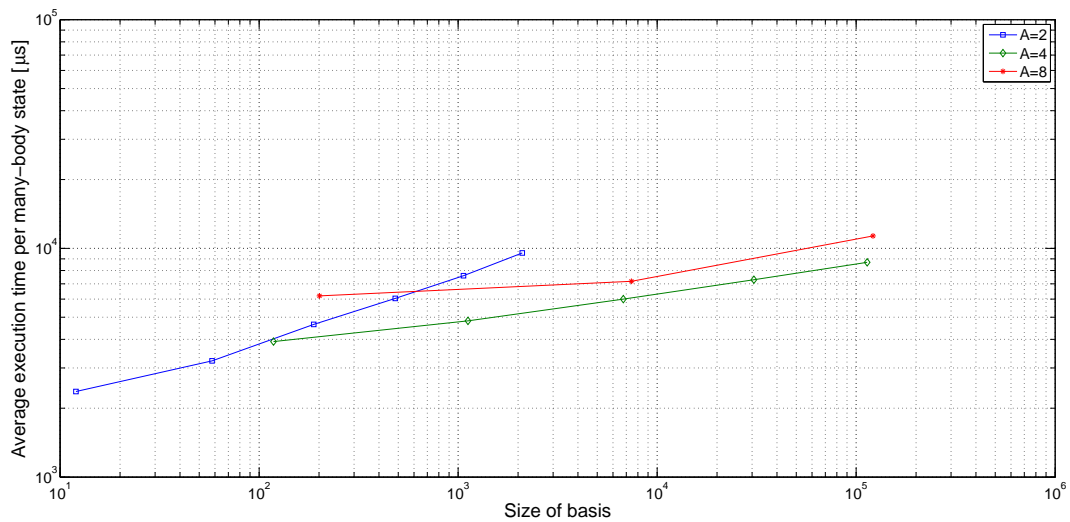
de beräknade resultaten, samt prestandan hos denna beräkning. Till den FPGA-implementerade beräkningen utformades även en Matlab-kod för att kunna omvandla utdataformatet, från oreducerad till reducerad form. Prestandan för FPGA-beräkningen tillsammans med omvandlingen jämfördes slutligen med motsvarande prestanda för en kod som beräknar den reducerade representationen för övergångstätheter med hjälp av CPU-baserade beräkningskluster, TRDENS, tillhandahållet av forskargruppen för subatomär fysik verksamma vid institutionen för fundamental fysik, Chalmers.

0.4 Algoritmer

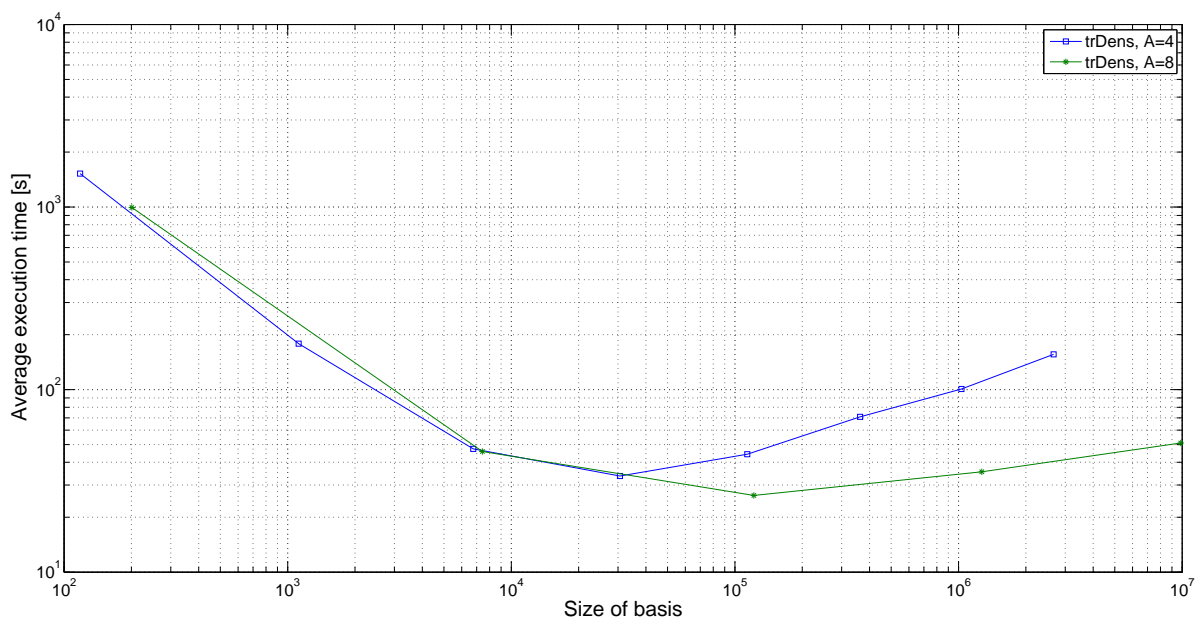
Inom ramen för detta arbete har vi utformat tre olika algoritmer:

- En algoritm, med vilken vi utför utbyten av enpartikeltillstånd, svarande mot olika α_i i ett flerpartikel-tillstånd parallellt, detta genom att använda en kedjad struktur av räknare till att parametrisera ersättande enpartikel-tillstånds kvanttal, utan några former av förberäknade kontrollsignaler.
- En variant av ovanstående algoritm där vi för varje flerpartikel-tillstånd beräknar den maximala energi som ett ersättande enpartikel-tillstånd kan ha för att energi-trunkeringsvillkoret inte skall brytas och använder detta för att begränsa antalet enpartikeltillstånds utbyten som testas.
- En algoritm där vi istället för att parametrisera ersättande enpartikeltillstånds kvanttal, betecknar enpartikeltillstånden med ett index, i i en uppräknings. I denna uppräknings har de grupperats i grupper med samma paritet och värde på m_j , samt med avtagande energi som en funktion av index, inom varje m_j -paritets grupp. Om ett utbyte av enpartikel-tillstånd, inom en sådan grupp, sker från ett tillstånd med lägre till högre index, uppfylls såväl villkoret för paritet, projektion av magnetiskt moment samt energi. Att endast betrakta utbyten av enpartikel-tillstånd från lägre till högre index leder också till att

De olika algoritmerna medför olika sannolikheter för att FPGA-hårdvaran, i en given klockcykel, skall finna ett nollskilt matriselement. De strategier som använder kontrollsignaler kommer generellt ha en högre sådan sannolikhet, vars fördelar dock måste vägas mot det extra behovet av beräkning av kontrollsignaler.



Figur 2: Genomsnittlig exekveringstid för MATLAB att behandla alla nollskilda element med sitt ursprung ur ett och samma mångkroppstillstånd.



Figur 3: Genomsnittlig exekveringstid för TRDENS att utföra hela beräkningen av reducerade matrisrepresentationen. Även denna är per mångkroppstillstånd i basen som skickas in för att kunna jämföras med FPGA-värdena.

0.5 Implementation och utvärdering

För att utvärdera prestandan har exekveringstiden för FPGA-implementationerna mätts då de behandlat tillstånden i flerkroppsbaser med olika trunkering och identifierat alla nollskilda matriselement. Resultaten från detta har sammanställts i figur 1 som en processhastighet, alltså en genomsnittlig exekveringstid per mångkroppstillstånd. Figuren visar att $2 \cdot 10^5 - 4 \cdot 10^6$ nollskilda matriselement identifieras varje sekund för system av de studerade storleksordningarna. Från figur 1 framgår även att användandet av kontrollsignaler i implementationerna ökar effektiviteten upp till en faktor tio.

Motsvarande processhastighet för beräkningen av den reducerade övergångstätheten, baserat på de nollskilda matriselement som FPGA-hårdvaran hittar, visas i figur 2. Denna är upp till 10^4 gånger långsammare än identifieringen av element. Dessa beräkningar har utförts på i MATLAB på en CPU.

En jämförelse med motsvarande jämförelsetal för TRDENS, återfunna i tabell 3, visar att identifikationen av nollskilda matriselement som sker på FPGA-hårdvaran, är runt två storleksordningar snabbare än den totala beräkningen med TRDENS. Efterbehandlingen av datan, i och med omvandlingen till en reducerad representation på CPU, är dock betydligt långsammare varmed implementationen som en helhet blir långsammare än TRDENS.

Resultatet tyder på att om hela beräkningen kan utföras på en FPGA skulle den vara snabbare än TRDENS då de extra beräkningarna inte skulle påverka exekveringstiden i någon större utsträckning, tack vare den pipelinade-beräkningsstrukturen. Clebsch-Gordan coefficienter kan behandlas genom förberäkna dessa och sedan utföra look-ups i minne.

0.6 Generaliseringar

Naturliga generaliseringar av arbetet inom detta projekt utgörs av att utvidga de FPGA-implementerade algoritmerna till att kunna behandla system bestående av både neutroner och protoner, vilket ej gjordes i denna studie. Detta kan ske med rättframma metoder, varvid ett femte kvanttal, isospin, introduceras och, i fallet med de två första algoritmerna, behandlas analogt med de övriga kvanttalen. För den tredje algoritmen, erfordrar användandet av isospin att enpartikeltillstånden sorteras om.

En annan möjlig generalisering utgörs av att utforma FPGA-algoritmer som identifierar nollskilda matriselement för två- och trekropps-operatorer, vilka behövs för att beskriva många fysikaliska egenskaper. Dessa operatorer kopplar tillstånd där inte bara ett, utan två respektive tre enpartikeltillstånd skiljer mellan flerkroppstillstånden. För att göra detta kan algoritmerna ett och två användas, fast där ett större antal storheter parametreras. Istället för att låta denna parametrering ske med räknare vore det dock bättre att lagra egenskaper relaterade till nya enpartikeltillstånd i ROM-minne, på FPGA-hårdvaran. Vinsterna med att i likhet med den andra algoritmen använda förberäknade kontrollsignaler för att öka sannolikheten att en klockcykel hittar ett nollskilt matriselement ökar också.

0.7 Slutsats

Studien visar att identifikationen av nollskilda element, på en FPGA, kan ske med god prestanda jämfört med prestandan för TRDENS. Detta gäller trots att de utförda implementationerna var drabbade av I/O-begränsningar som skulle kunna lösas genom att överge Maxelers programmeringsinterface, till fördel för ett HDL. Det visade sig dock att omvandlingen av utdatan från FPGA-hårdvaran, till en reducerad representation av övergångstätheten, var en större flaskhals i beräkningen, som även gjorde att dess övergripande prestanda blev sämre än för TRDENS. Detta beror troligtvis på att denna del av beräkningen implementerats i MATLAB och inte varit föremål för optimering.

Det finns även förutsättningar för att utvidga den del av beräkningen som utförs på FPGA-hårdvaran till att även inbegripa en större del av övergångstäthetens omvandling till en reducerad representation. Eftersom FPGA-hårdvaran har en pipeline-beräkningsstruktur ökar tillägget av de extra beräkningarna inte exekveringstiden markant. Detta pekar på att det borde vara möjligt att använda en FPGA för att accelerera beräkningen av övergångstätheter trots att studiens implementationer inte explicit kunnat påvisa detta.