Применение Roofline-модели для анализа производительности двух алгоритмов численного моделирования квантовых систем*

В.Д. Волокитин, Е.А. Козинов, Т.В. Лаптева, А.В. Линев

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

Введение. В работе представлены результаты анализа производительности параллельных реализаций двух методов численного моделирования квантовых систем. Показано, что в результате алгоритмической оптимизации преобладающая часть вычислений может быть выполнена посредством операций матричного умножения, эффективно использующих ресурсы наиболее современных серверных процессоров Xeon (Skylake) и Xeon Phi (Knights Landing).

Метод вычисления Флоке-состояний определяет неравновесные собственные состояния периодически модулируемой закрытой квантовой системы, описываемой уравнением Шредингера. Параллельная версия алгоритма позволяет моделировать системы с $N=10^4$ бозонами. *Метод волновой функции Монте-Карло с группировкой траекторий* обеспечивает вычисление аттрактора открытой квантовой системы, описываемой уравнением Линдблада с кусочно-постоянными гамильтонианом и диссипаторами. Выполненная реализация позволяет моделировать системы с $N=10^3$ состояниями. Для обоих методов разработаны параллельные алгоритмы, в которых основное время занимают умножения комплексных матриц размера NxN [1-3]. В качестве тестовой модели используется димер Бозе-Хаббарда [4] с числом частиц N=1000.

Вычисление Флоке-состояний закрытой квантовой системы. Предполагается, что гамильтониан системы представлен в виде $H(t)=H_0+f(t)*H_{mod}$, где $f(t)$ – периодическая скалярная функция, H_0 и H_{mod} – не зависящие от времени эрмитовые операторы.

Основные этапы алгоритма.

1. Вычисление базиса собственных векторов матрицы H_0, вспомогательных матриц, коэффициентов функции Бесселя $J_l(r)$ и коммутаторов для разложения Магнуса.

2. Интегрирование единичной матрицы на время периода T посредством применения последовательности M одношаговых разложений Магнуса на временных интервалах размера T/M. Используемый в разложении Магнуса экспоненциальный оператор, в свою очередь, вычисляется через полиномиальное разложение Чебышева.

3. Численная диагонализация матрицы, полученной на этапе 2.

Наиболее вычислительно трудоемким является этап приближения матричной экспоненты полиномиальным представлением Чебышева, ядром которого является операция умножения комплексных матриц. На этом шаге реализована независимая параллельная обработка равномерно распределенных блоков матриц на нескольких узлах.

Метод волновой функции Монте-Карло. Идея метода заключается в усреднении по многим реализациям результатов интегрирования во времени волновой функции с помощью неэрмитовых гамильтонианов специального вида [5]. В случае кусочно-линейной правой части уравнения Линдблада можно использовать две ускоряющие модификации метода.

1. Интегрирование во времени волновой функции с помощью предварительно вычисленного набора экспоненциальных операторов [2].

2. Одновременное интегрирование во времени групп траекторий, позволяющее использовать вместо операций умножения матрицы на вектор матричные умножения [3]. В этом случае 95% времени вычислений выполняются операции умножения комплексных матриц.

Благодаря естественному параллелизму алгоритмов Монте-Карло модифицированный метод распараллеливается на несколько узлов с линейной эффективностью. В связи с этим важно оптимизировать производительность реализации при выполнении на одном узле.

* Исследования выполнены при поддержке гранта РФФИ 18-37-00277 с использованием вычислительных ресурсов МСЦ РАН и СК Intel Endeavor.

Результаты вычислительных экспериментов. В первой задаче выполняется расчет Флоке-состояний для димера Бозе-Хаббарда с N=1000 бозонами, измеряется полное время работы метода. Во второй задаче выполняется интегрирование 1000 траекторий для системы с N=1000 состояниями, измеряется число траекторий, проинтегрированных на 1 период за 1 секунду.

Тесты запускались на двух системах: 2x Intel Xeon Gold 6148, 2.40 GHz, 40 ядер (СК Intel Endeavor), Intel Xeon Phi 7290, 1.50 GHz, 72 ядра (СК МСЦ РАН). Сбор данных для Roofline-модели производился с помощью инструмента Intel Advisor из пакета Parallel Studio XE 2018. Результаты экспериментов частично представлены в Таблицах 1-2 (лучшие и показательные значения). Показатели Roofline приводятся для запуска с максимальной производительностью.

Таблица 1. Время выполнения расчета состояний Флоке (сек.)

# процессов	# MKL потоков	Intel Xeon Gold	Intel Xeon Phi
1	40/72	498,9	614,2
2	20/36	529,8	697,6
4	10/18	467,2	673,5
8	5/9	470,5	729,7

Roofline-модель показывает арифметическую интенсивность (AI) реализации 1,32 FLOP/Byte и производительность до 1674,52 GFlops для системы Xeon Gold, 1,46 FLOP/Byte и 1027,52 GFlops для Xeon Phi. Для сравнения, используемая реализация умножения комплексных матриц, функция zgemm() библиотеки MKL, для N=1000 показывает характеристики 1,34 FLOP/Byte и 1867,00 GFlops (Xeon Gold), 1,50 FLOP/Byte и 1239,37 GFlops (Xeon Phi). Максимальная производительность систем – 3046,28 GFlops (Xeon Gold), 3230,5 GFlops (Xeon Phi).

Таблица 2. Число траекторий, проинтегрированных на 1 период за 1 секунду

# процессов	# OpenMP потоков	# MKL потоков	Intel Xeon Gold	Intel Xeon Phi
1	1	40/72	8,09	6,19
1	40/72	1	15,31	6,22
1	20/36	2	16,80	9,14
2	1	20/36	15,04	7,50
2	20/36	1	17,52	11,12
4	10/18	1	13,75	10,63
20/36	1	2	10,96	12,79
20/36	2	1	11,84	13,44
40/72	1	1	16,20	13,14

Характеристики реализации: 0,96 FLOP/Byte и 1406,22 GFlops на системе Intel Xeon Gold, 0,65 FLOP/Byte и 1284,78 GFlops на системе Intel Xeon Phi.

Анализ данных Roofline-модели позволяет утверждать, что выполненные реализации показывают высокие характеристики арифметической интенсивности и производительности, близкие к значениям основного вычислительного ядра – умножения комплексных матриц.

Литература

1. Laptyeva T.V. et al. Calculating Floquet states of large quantum systems: A parallelization strategy and its cluster implementation // Computer Physics Communications, vol. 201, p.85 (2016).
2. Volokitin V., Liniov A., Meyerov I., Hartmann M., Ivanchenko M., Hanggi P., Denisov S. Computation of the asymptotic states of modulated open quantum systems with a numerically exact realization of the quantum trajectory method // Phys. Rev. E, Vol. 96, 053313 (2017).
3. Liniov A., Volokitin V., Meyerov I., Ivanchenko M., Denisov S. Increasing Performance of the Quantum Trajectory Method by Grouping Trajectories. In: Voevodin V., Sobolev S. (eds) Supercomputing. RuSCDays 2017//Communications in Computer and Information Science, 2017, vol 793.
4. Leggett A.J. Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts // Rev. Mod. Phys. 73, 307 (2001).

5. Molme K., Castin Y., Dalibard J. Monte Carlo wave-function method in quantum optics // Journal of the Optical Society of America B, March 1993. P. 524-538.