

Параллельный алгоритм вычисления Флоке-состояний квантовой системы на гибридных кластерах с GPU*

Е.А. Красикова, В.Д. Волокитин, М.В. Иванченко, Т.В. Лаптева, А.В. Линева,
И.Б. Мееров

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского

Введение. В работе представлен анализ производительности параллельной реализации численного алгоритма вычисления Флоке-состояний квантовой системы, использующей технологию CUDA для выполнения расчетов на графических процессорах. Вычислительное ядро алгоритма представлено в виде последовательности операций над матрицами, эффективно использует возможности гибридных кластеров с графическими ускорителями NVIDIA Kepler K20 и позволяет моделировать системы размером до $N=5120$.

Вычисление Флоке-состояний закрытой квантовой системы. Флоке-состояния – неравновесные собственные состояния периодически модулируемой закрытой квантовой системы, – определяются как собственные векторы Флоке-оператора, выполняющего эволюцию произвольного состояния системы на время периода.

Квантовая система описывается уравнением Шредингера $i\hbar\partial_t|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$. Предполагается, что ее гамильтониан представлен в виде $H(t) = H_0 + f(t) * H_{mod}$, где $f(t)$ – периодическая скалярная функция с периодом T , H_0 и H_{mod} – не зависящие от времени эрмитовы операторы. Вычисление Флоке-оператора выполняется посредством интегрирования единичной матрицы на время периода T . На каждом из M шагов интегрирования отдельного вектора на временном интервале (t_{k-1}, t_k) размера $h = T/M$ выполняются следующие операции.

1. Вычисление приближения разложения Магнуса с точностью $O(h^7)$.

$$\Omega(t_{k-1}, t_k) = \alpha_1 + \frac{1}{12}\alpha_3 + \frac{1}{240}[-20\alpha_1 - \alpha_3 + C_1, \alpha_2 + C_2],$$

$$\alpha_j = \frac{h^j}{(j-1)!} \frac{d^{j-1}H(t_{k-1} + h/2)}{dt^{j-1}}, C_1 = [\alpha_1, \alpha_2], C_2 = -\frac{1}{60}[\alpha_1, 2\alpha_3 + C_1],$$

где $[A, B]$ – обозначение операции матричной коммутации: $[A, B] = AB - BA$.

2. Смещение и нормирование оператора $\Omega(t_{k-1}, t_k)$.

$$\tilde{\Omega}(t_{k-1}, t_k) = \frac{\Omega(t_{k-1}, t_k) - E \cdot (\Delta\Omega + \Omega_{min})}{\Delta\Omega}, \Delta\Omega = \frac{\Omega_{max} - \Omega_{min}}{2},$$

где $\Omega_{min/max}$ – минимальное и максимальное собственные значения оператора $\Omega(t_{k-1}, t_k)$.

3. Вычисление компонент разложения Чебышева по рекурсивной формуле.

$$|\psi_0(t_k)\rangle = |\psi(t_{k-1})\rangle, |\psi_1(t_k)\rangle = -i\tilde{\Omega}(t_{k-1}, t_k)|\psi_0(t_k)\rangle,$$

$$|\psi_{l+1}(t_k)\rangle = -2i\tilde{\Omega}(t_{k-1}, t_k)|\psi_l(t_k)\rangle + |\psi_{l-1}(t_k)\rangle, l = 2, \dots, L$$

4. Вычисление значения вектора в следующий момент времени.

$$|\psi(t_k)\rangle = e^{-\frac{i\beta h}{\hbar}} \sum_{l=0}^L a_l |\psi_l(t_k)\rangle,$$

где $\beta = \Delta\Omega + \Omega_{min}$, $a_0 = J_0\left(\frac{h\Delta\Omega}{\hbar}\right)$, $a_l = 2J_l\left(\frac{h\Delta\Omega}{\hbar}\right)$, и $J_l(x)$ – функции Бесселя первого рода.

Собственные вектора матрицы, полученной в результате интегрирования, являются Флоке-состояниями исходной системы.

Для упрощения вычислений операторы системы предварительно приводятся в базис собственных векторов оператора H_0 . Подробное описание метода и анализ производительности реализации для CPU представлены в работах [1-2].

* Исследования выполнены при поддержке грантов РФФИ 18-37-00277 (В.Д.Волокитин), 18-32-20221 (М.В.Иванченко, И.Б.Мееров), гранта Фонда "Базис" № 18-1-3-66-1 (Т.В.Лаптева) с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютера «Лобачевский» ННГУ им.Н.И.Лобачевского.

Описание параллельного алгоритма и его реализации. Разработанный алгоритм ориентирован на применение в системах с распределенной памятью с графическими ускорителями. Реализация использует технологии MPI, OpenMP и CUDA, а также библиотеки MKL и cuBLAS. Число создаваемых MPI-процессов равно количеству выделенных узлов, число потоков OpenMP в каждом процессе – числу GPU на узле.

Алгоритм включает следующие основные этапы.

1. Предварительные операции: загрузка базиса собственных векторов матрицы H_0 , вычисление вспомогательных матриц, коммутаторов разложения Магнуса, коэффициентов разложения Чебышева. Выполняются на CPU независимо в каждом MPI-процессе.

2. Вычисление Флоке-оператора.

Интегрируемая единичная матрица разбивается на блоки столбцов равного размера по общему числу используемых GPU. На каждый GPU загружаются его блок начальных векторов и предвычисленные матрицы и вектора. Метод и алгоритм адаптированы таким образом, что все шаги являются операциями над комплексными матрицами, которые выполняются непосредственно на GPU с помощью функций cuBLAS. По окончании интегрирования на время периода результат копируется из памяти GPU в RAM и передается на MPI-процесс с ранком 0.

Данный этап является наиболее вычислительно трудоемким.

3. Вычисление собственных значений и собственных векторов Флоке-оператора. Производится на MPI-процессе с ранком 0 посредством вызова функции MKL LAPACKE_zgeev().

Результаты вычислительных экспериментов. Выполнялся расчет Флоке-состояний для димера Бозе-Хаббарда с N бозонами [3]. Проведена серия экспериментов для систем с различной размерностью N , функцией модуляции $f(t) = \cos(\pi t)$, шагом по времени $h = T/5000$, количеством полиномов в разложении Чебышева $L = 50$. Измерялось общее время выполнения расчета (столбец «Итого»), а также суммарные времена вычисления разложений Магнуса и Чебышева. Ввиду того, что целью проведения экспериментов являлась оценка производительности, выполнялось 100 шагов интегрирования по времени вместо 5000. Время работы для произвольного числа шагов можно оценить, линейно масштабируя время этапа интегрирования.

Эксперименты выполнялись на 16 узлах 2x Intel E5-2660, 2.2 GHz, 8 ядер, 64 GB RAM, 3x NVIDIA Kepler K20X (2688 потоковых процессоров, 6 GB GDDR5), QDR Infiniband, Intel Parallel Studio XE 2017, CUDA Toolkit 8.0. Результаты представлены в Таблице 1.

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

N	1 MPI-процесс, 1 GPU			1 MPI-процесс, 3 GPU			16 MPI-процессов, 3 GPU		
	Магнус	Чебышев	Итого	Магнус	Чебышев	Итого	Магнус	Чебышев	Итого
256	0.02	1.05	3.21	0.02	0.69	3.82	0.02	0.63	3.79
512	0.08	6.10	9.42	0.08	2.79	7.11	0.08	1.27	5.49
1024	0.29	41.32	48.30	0.29	15.31	22.99	0.29	2.57	10.46
2048	1.14	308.37	333.28	1.14	107.02	133.43	1.14	12.08	38.47
4096	2.54	1024.62	1094.46	2.53	344.49	419.19	2.54	25.12	102.67
5120	Недостаточно памяти GPU			7.03	1584.63	1851.1	7.03	123.03	388.90

Результаты экспериментов показывают, что в реальных расчетах этап вычисления Флоке-оператора будет занимать около 95% времени, эффективность его масштабирования при максимальных N составляет 75-80%. Производительность каждого GPU на данном этапе достигает 1,135 TFlops (86,6% от теоретически возможных 1,31 TFlops). Полное время моделирования системы размера $N=5120$ на 16 узлах занимает 6675 с.

Литература

1. Lapyeva T.V. et al. Calculating Floquet states of large quantum systems: A parallelization strategy and its cluster implementation // Computer Physics Communications. – 2016. – Т. 201. – С. 85-94.
2. Волокитин В.Д. и др. Применение Roofline-модели для анализа производительности двух алгоритмов численного моделирования квантовых систем // Суперкомпьютерные дни в России: Труды международной конференции. – М.: Изд-во МГУ, 2018. – С. 1009-1011.

3. Leggett A.J. Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts //Reviews of Modern Physics. – 2001. – Т. 73. – №. 2. – С. 307.