



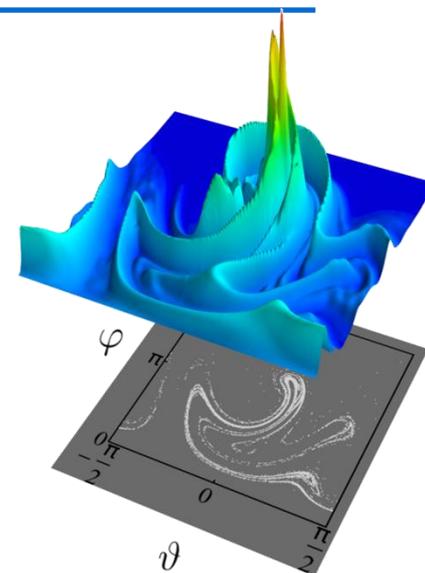
Нижегородский государственный университет
им. Н.И.Лобачевского

Институт Информационных Технологий, Математики и Механики

Оптимизация производительности в методе квантовых траекторий

А. Линев, В. Волокитин, И. Мееров,
М. Иванченко, С. Денисов

Москва, 25-26 сентября, RSCD-2017



Содержание

- Метод квантовых траекторий
- Оптимизация вычислительного алгоритма
- Уровни параллелизма
- Результаты экспериментов
- Выводы



Область исследований

- Поиск асимптотических состояний периодически модулируемых открытых квантовых систем
- Уравнение Линдблада

$$\dot{\rho} = -i[H(t), \rho] + \sum_{k=1}^K \gamma_k D_k(\rho), \quad \rho, H, D_k \in \mathbb{Z}^{N \times N}$$

$$D_k(\rho) = V_k \rho V_k^* - \frac{1}{2} \{V_k^* V_k, \rho\}$$

- Рассматриваются системы с кусочно-постоянной правой частью
- $N=1000+$



Тестовая модель

- Система (N-1) неразличимых взаимодействующих бозонов, перемещающихся между вершинами димера, подвергающаяся внешнему воздействию

$$H(t) = -J(b_1^* b_2 + b_2^* b_1) + \frac{U}{2(N-1)} \sum_{g=1,2} n_g (n_g - 1) + \varepsilon(t)(n_2 - n_1),$$

$$V = (b_1^* + b_2^*)(b_1 - b_2)$$

$$\varepsilon(t) = \varepsilon(t+T) = \mu_0 + \mu_1 \theta(\omega t)$$

- $\theta(\omega t)$ – кусочно-постоянная периодическая функция
- $N=1000+$



Метод квантовых траекторий/ волновой функции Монте-Карло(1)

- Уравнение Линдблада для матрицы плотности заменяется уравнением для квантовых траекторий (векторов)
- Выполняется независимое интегрирование множества квантовых траекторий с использованием вероятностного механизма квантовых скачков
- Для любого момента времени матрица плотности исходного уравнения может быть получена усреднением по множеству траекторий

$$\dot{\rho} = -i[H(t), \rho] + \sum_{k=1}^K \gamma_k D_k(\rho)$$



$$|\dot{\psi}\rangle = -i\tilde{H}(t)\psi, \quad \psi \in \mathbb{Z}^N$$

$$\tilde{H}(t) = H - \frac{i}{2} \sum_{k=1}^K \gamma_k V_k^* V_k$$



$$\rho_L(t) = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L \frac{|\psi_l(t)\rangle \langle \psi_l^*(t)|}{\|\psi_l(t)\|^2}$$



Метод квантовых траекторий/ волновой функции Монте-Карло(2)

■ Для каждой траектории (реализации)

1. Вычисляется $\eta = U(0,1)$

2. Уравнение траектории интегрируется, пока не выполнится условие $\|\psi(t)\| \leq \eta$

3. Восстанавливается норма вектора $\|\psi(t)\|$

4. Вычисляются вероятности рассеивания каналов p_k , разбивающие единичный отрезок

$$p_k = \frac{\gamma_k \|A_k |\psi(t)\rangle\|}{\sum_k \gamma_k \|A_k |\psi(t)\rangle\|}$$

5. Вычисляется $\xi = U(0,1)$, выбирающее номер канала m

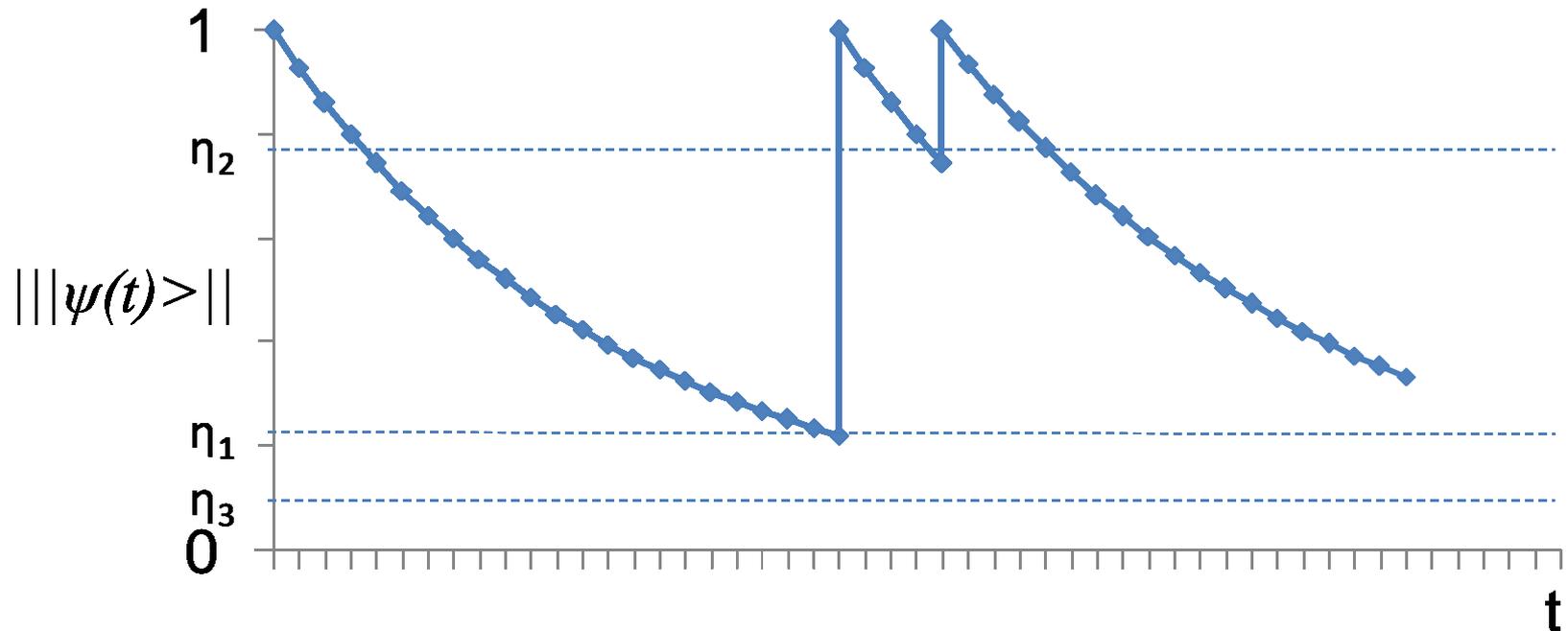
6. Реализуется «квантовый скачок» в m -ом канале

$$|\psi(t)\rangle = \frac{A_m |\psi(t)\rangle}{\|A_m |\psi(t)\rangle\|}$$

7. Переход на шаг 1



Метод квантовых траекторий/ волновой функции Монте-Карло(3)

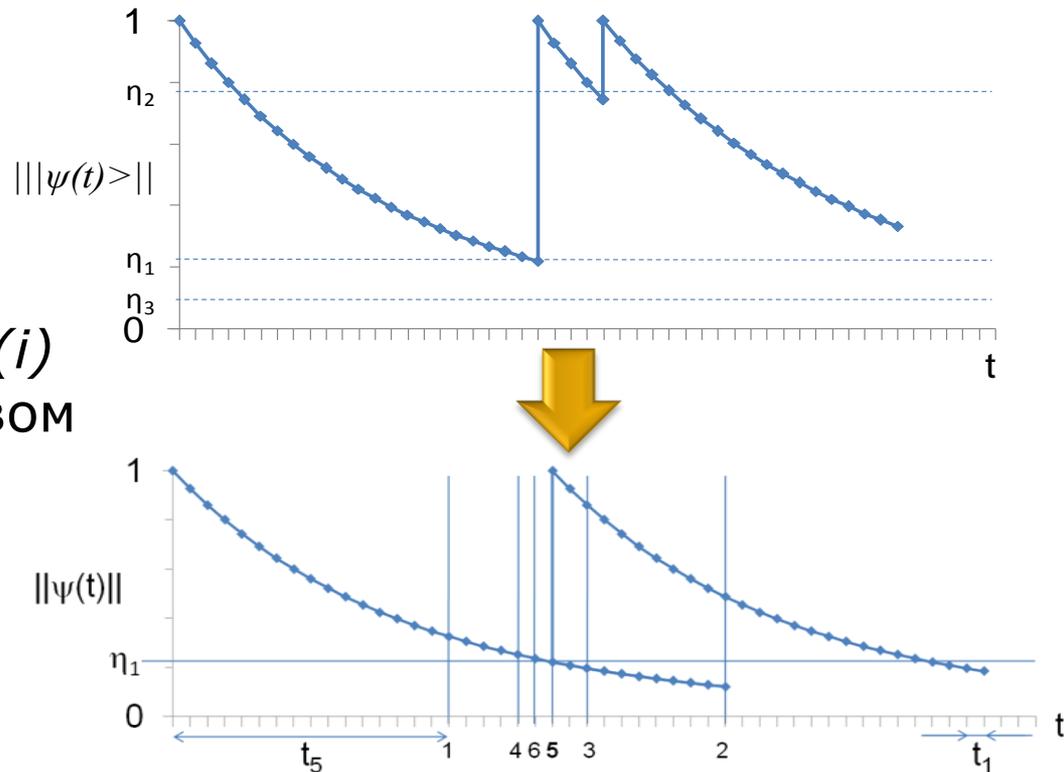


■ Интегрирование квантовой траектории

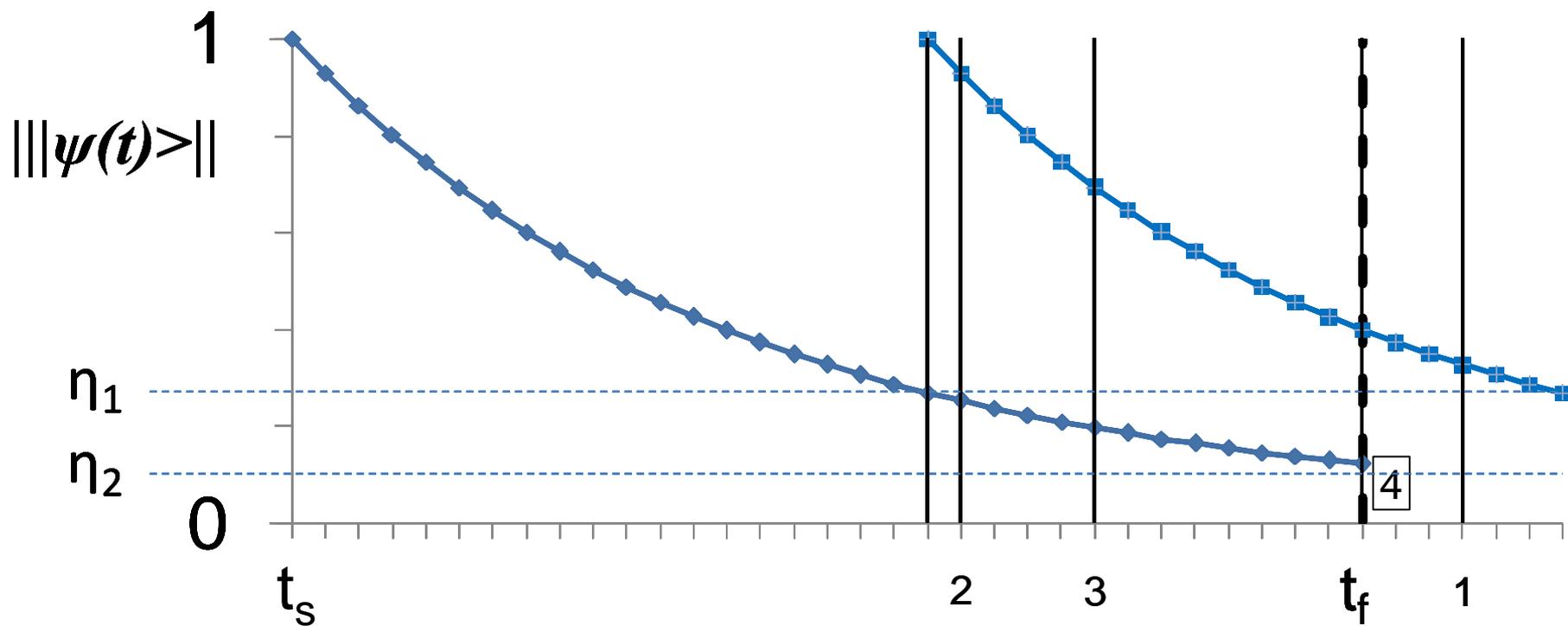


Оптимизация 1. Уменьшение числа операций (1)

- Для кусочно-постоянных гамильтониана и диссипаторов можно выполнить интегрирование квантовой траектории с использованием экспоненциальных операторов и метода двоичного поиска
- Интегрирование на интервале длины $\delta t(i)$ выполняется посредством оператора $P_{\delta t(i)} = e^{-iH\delta t(i)}$
- **Требует $\log_2 M$ шагов вместо M**



Оптимизация 1. Уменьшение числа операций (2)



Оптимизация 2. Повышение вычислительной интенсивности(1)

- Самая затратная операция алгоритма – умножение матрицы на вектор
- Простое объединение вычислений по разным траекториям невозможно (они интегрируются по времени с различной скоростью, зависящей от моментов выполнения скачков)
- На каждом шаге можно объединять траектории в группы и частично заменить матрично-векторные умножения на умножения матриц
 - Выполняется на интервалах постоянного значения гамильтониана и диссипаторов

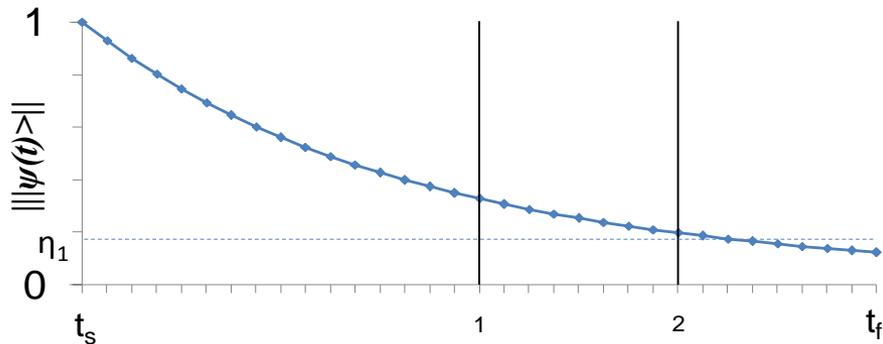


Оптимизация 2. Увеличение вычислительной интенсивности(2)

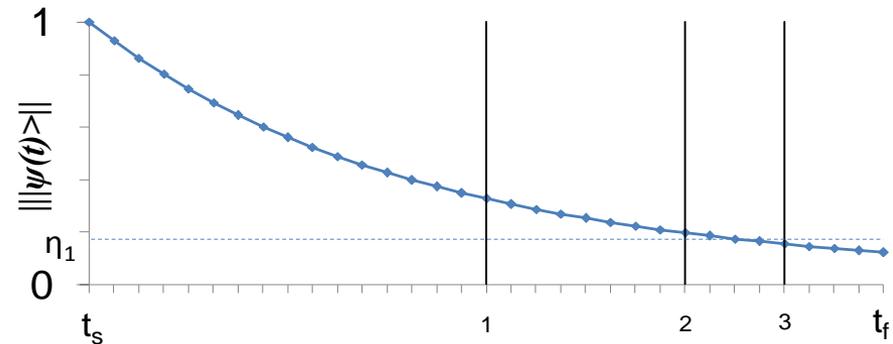
- Состояния траекторий (на текущем интервале постоянного значения правой части уравнения)
 - A. Может выполнить скачок до завершения интервала
 - B. Выполнит скачок до завершения интервала
 - C. Не выполнит скачок до завершения интервала
 - D. Достиг правой границы интервала
- Каждый шаг интегрирования выполняется для групп траекторий одного типа (A, B, C)



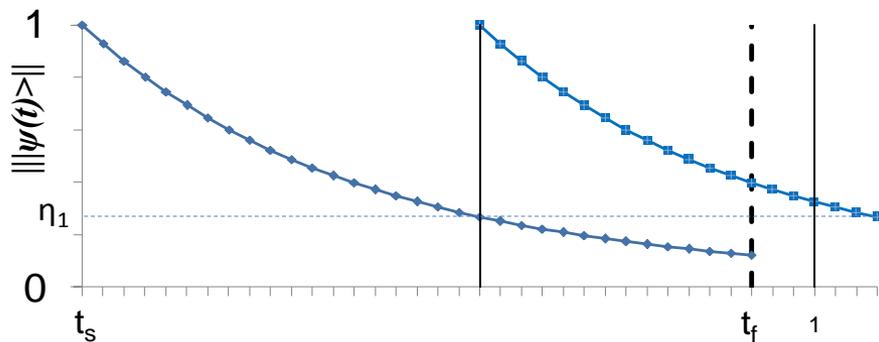
Оптимизация 2. Увеличение вычислительной интенсивности(3)



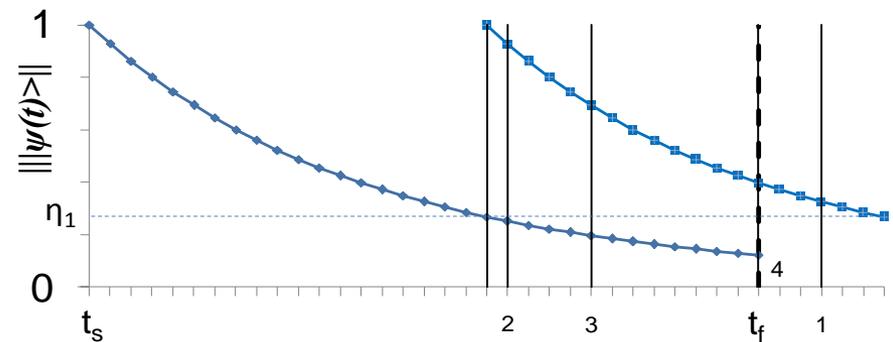
(A)



(B)



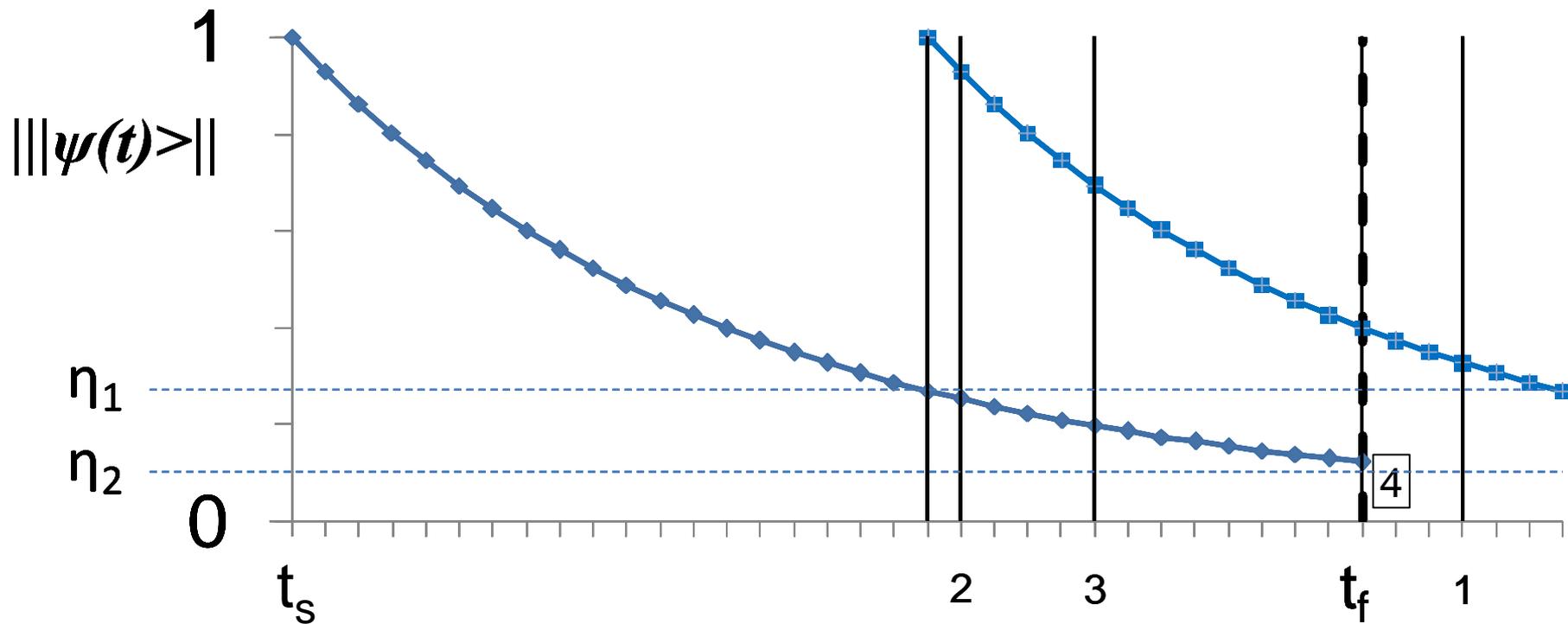
(C)



(D)



Оптимизация 2. Увеличение вычислительной интенсивности(4)



A -> B -> A -> C -> D



Уровни параллелизма

- **Распределенная память: MPI**
 - Каждый процесс интегрирует независимый набор траекторий
 - 100% масштабируемость, не требуется управление распределением нагрузки
- **Разделяемая память: MPI+OpenMP+parallel MKL**
 - MPI – для локализации взаимодействующих компонент в NUMA-архитектурах
 - OpenMP – каждый поток OpenMP интегрирует независимый набор траекторий; число потоков может быть меньше числа ядер CPU
 - Параллельные функции MKL – потоки OpenMP могут использовать многопоточные версии функций MKL
- **SIMD: векторизация циклов, интринсики, использование векторизованных функций MKL**



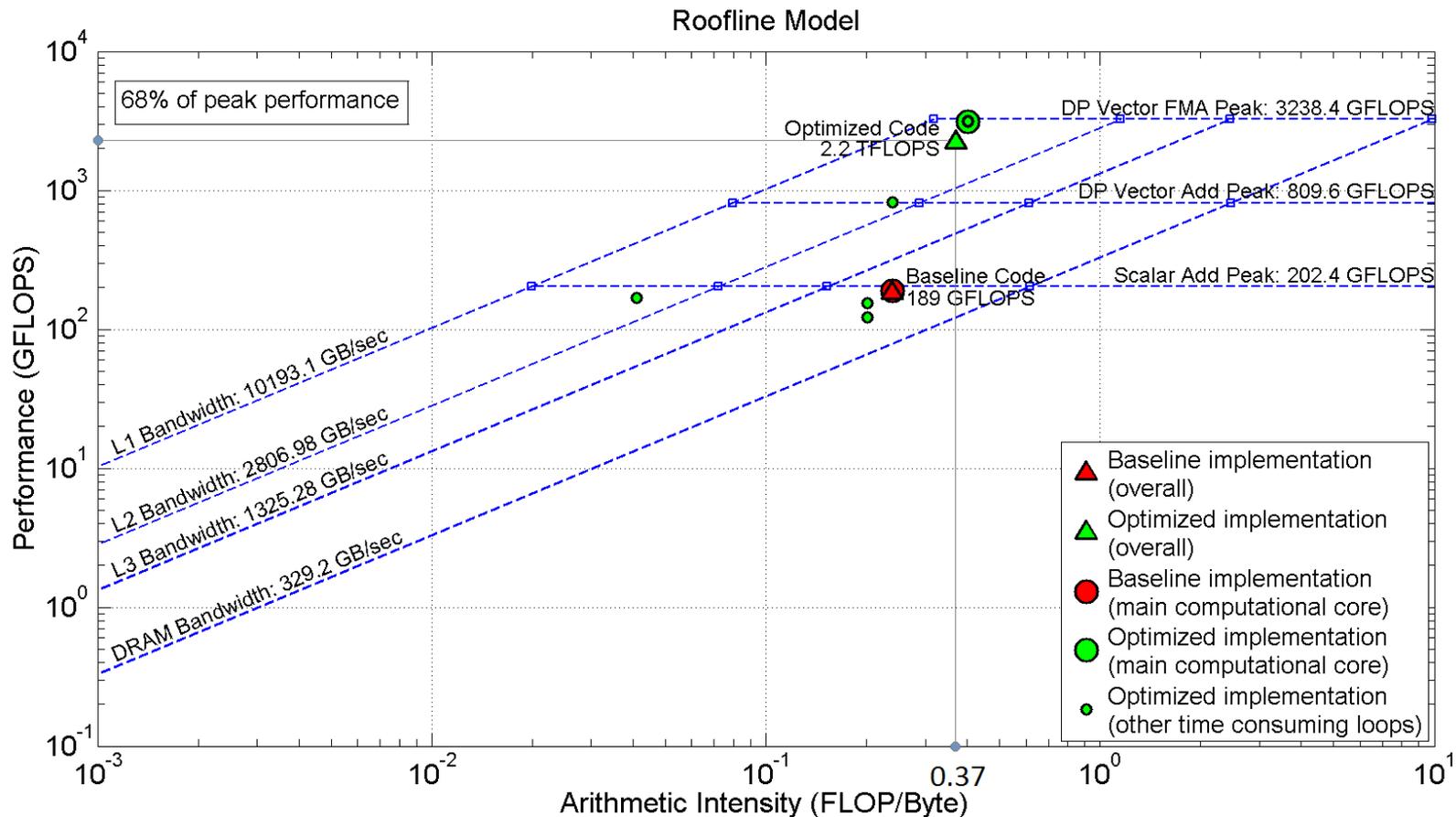
Результаты экспериментов

- Тестовые системы (Intel Endeavor, СК МСЦ РАН)
 - 4x 24-core Intel Xeon E7-8890v4 (Broadwell), 2.2 GHz
 - Xeon Phi 7290, 1.50 GHz
 - Intel MKL, Intel MPI, Intel C++ Compiler (Intel Parallel Studio XE Cluster Edition 2017)
- Тестовая задача – димер, $N=1000$
- Метрика производительности – число траекторий (реализаций), проинтегрированных на 1 период за 1 с



# процессов	# OpenMP потоков	# MKL потоков	Baseline 4x Xeon E7-8890v4 2.2 GHz	Optimized 4x Xeon E7-8890v4 2.2 GHz	Baseline Xeon Phi 7290 1.50 GHz	Optimized Xeon Phi 7290 1.50 GHz
1	1	96/72	-	5,57	-	6,19
1	96/72	1	0,80	27,60	1,55	6,22
2	1	48/36	-	11,69	-	7,5
2	48/36	1	0,63	28,07	1,68	11,17
4	1	24/20	-	21,58	-	9,33
4	24/20	1	1,69	29,09	1,64	10,63
8	1	12/9	-	16,32	-	11,20
8	12/9	1	1,49	25,75	1,66	11,00
24/20	1	4/4	-	27,33	-	12,40
24/20	4/4	1	1,39	20,48	1,49	12,80
48/36	1	2/2	-	13,99	-	12,79
48/36	2/2	1	1,36	16,87	1,01	13,44
96/72	1	1	1,35	13,78	0,84	13,14

The Roofline Model: 4x Intel Xeon E7-8890v4

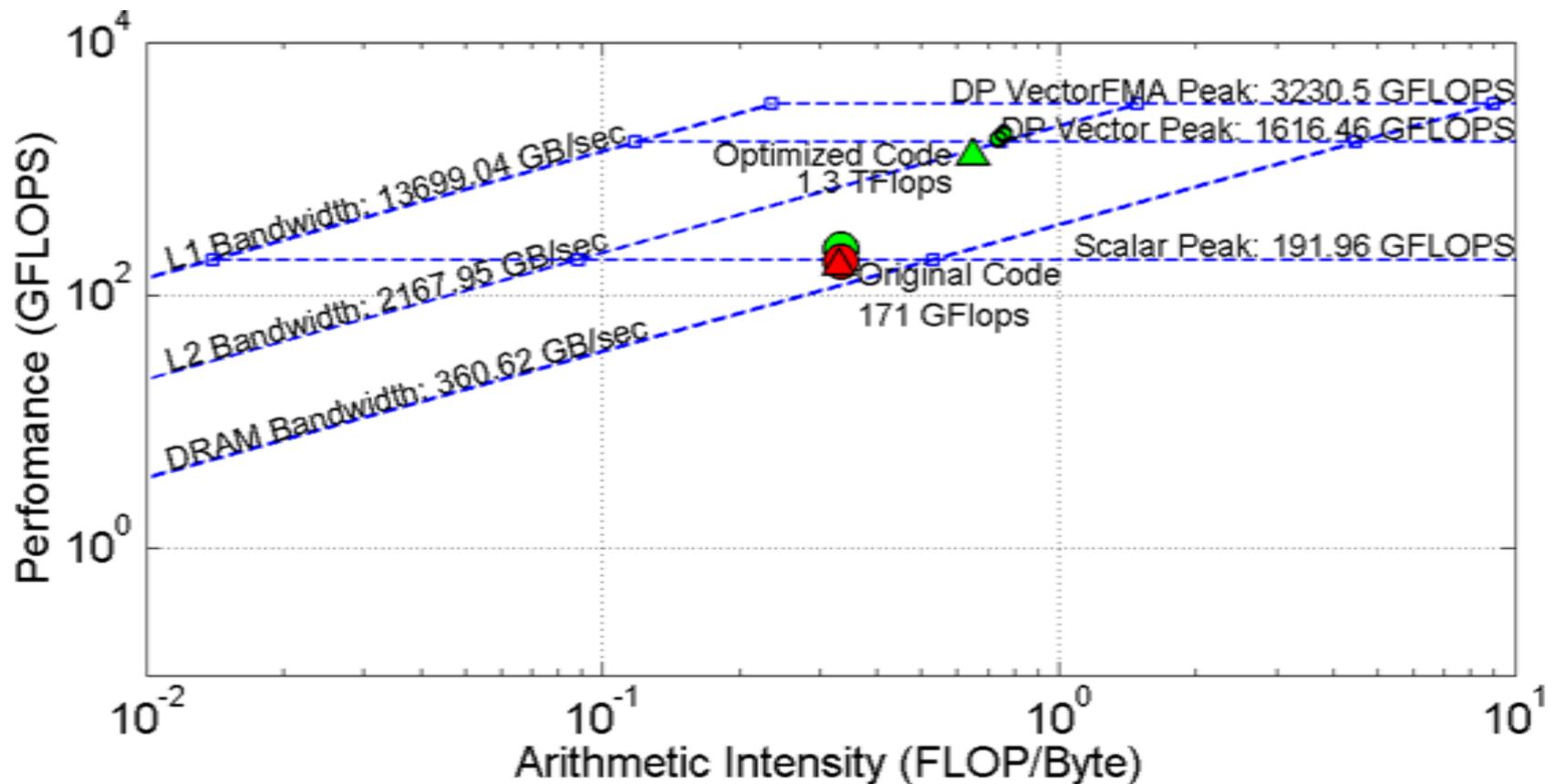


■ Результаты собраны Intel Advisor

■ Достигнутая производительность – 2,2 TFlops



The Roofline Model: Intel Xeon Phi 7290



- Результаты собраны Intel Advisor
- Достигнутая производительность – 1,3 TFlops



Заключение

- Предложен оптимизированный вариант метода квантовых траекторий для систем с кусочно-постоянными гамильтонианом и диссипаторами
- На тестовой модели (димер, $N=1000$) оптимизированный метод показал ускорение 17x (Intel Xeon E7-8890v4), 8x (Intel Xeon Phi 7290)



Контакты и благодарности

- Алексей Линев (alin@unn.ru)
- Работа поддержана грантом РФФ 15-12-20029
- Авторы благодарят МСЦ РАН и компанию Intel за предоставление доступа к вычислительным ресурсам

