

Dr. Mátyus Edit

ELTE, Kémiai Intézet

Molekuláris Kvantumdinamika Kutatócsoport

1117 Budapest, Pázmány Péter sétány 1/A.

Prof. Dr. Kégl Tamás

Pécsi Tudományegyetem, Kémiai Intézet

Általános és Szeretlen Kémia Tanszék

7624 Pécs, Ifjúság útja 6.

Válaszok Prof. Dr. Kégl Tamás bírálatára

From Molecular Spectroscopy to Molecular Physics MTA doktori értekezés

Tisztelt Professzor Úr!

Hálás köszönettel olvastam a Magyar Tudományos Akadémia Doktori Titkárságának benyújtott értekezésemhez írt bírálatát. Úgy érzem, hogy nem tudom eléggé megköszönni az idejét, amelyet az anyag, valamint a csatolt közlemények áttanulmányozásával, majd a bírálat megfogalmazásával töltött.

Ebben a levélben szeretnék válaszolni a bírálatában megfogalmazott kérdésekre és észrevételekre: idézem a Bíráló kérdését, majd az idézet alatt válaszolok a kérdésre.

“Sebességben és a befektetett munka mennyiségében hogyan viszonyul egymáshoz a GENIUSH algoritmus és a Wigner D függvényeket alkalmazó Wang-Carrington módszer?”

- Sebességben egy kettes faktoron belül van a két módszer, ami óriási dolog!

A humán munkát illetően, az első Wigner-D-s ‘molekulára szabott’ programokat (1990-es évek), és az első GENIUSH-szerű, numerikus kinetikus energia operátort (KEO) használó programokat (2000-es évek) megírni kb. egy PhD-nyi munkát jelentett.

Az utóbbi erőfeszítéseknek az a célja, hogy az előbbit ne kelljen minden egyes molekulára elvégezni..., hanem egy univerzális utat lehessen találni, amit idővel egyre jobba és hatékonyabbá lehet tenni.

Az én PhD kutatásaim (2006–2009) orozslánrésze volt a GENIUSH első verziójának kifejlesztése. Akkoriban azt gondoltam, hogy éppen a lazán kötött molekulakomplexek lesznek azok a rendszerek, amin el fog bukni az eljárás (a kinetikus operátor szingularitásai miatt). 2014-ben a cambridge-i posztdok tanulmányaim elején kísérleti jelleggel

implementáltam a metán-víz rendszer rezgési modelljét a meglévő programomba. Ez pár nap munkát jelentett, majd további pár nap számítás után már a kezünkben volt az alsó közel $200 J = 0, 1, 2$ forgási kvantumszámhoz tartozó rezgési-forgási állapot. Az ottani főnököm elismerően nézett rám, és azt mondta, hogy ő a 90-es években a teljes PhD-ját azzal töltötte, hogy egy speciálisan, a víz dimer rendszerre szabott Wigner-D-s kódot fejlesszen ki és kiszámítsa a zérusponyi energia alagútfelhasadását, hat legalsó rezgési energiaszint. A GENIUSH-sal végzett számítások révén sikerült megfejtenuk a 90-es években, a Berkeley-n mért, és azóta asszignálatlanul heverő kísérleti adatsorokat...

Az számítási eredmények nem voltak tökéletesen konvergensek, bár a kísérleti spektrum megfejtéséhez ez elegendő volt, és ekkor (ismét) azt hittem, hogy igazán pontos eredmények számításhoz mégis kell egy egyedi Wigner-D-s kód. De pár évvel később tudtuk alkalmazni egy másik kutatócsoport fejlesztését, amelynek köszönhetően az egyedi kódok pontossága és hatékonysága a mi univerzális eljárásunk számára is 'karnyújtásnyira' került.

“A GENIUSH programnál teszteltek a Lánczos-algoritmuson kívül más sajátérték- megoldó módszert is?”

- Kísérleti jelleggel kipróbáltunk más iteratív eljárásokat is (pl. Arnoldi, FEAST), de komolyan csak a Lánczos algoritmussal foglalkoztunk.

“A tézisfüzetben az 1-es és a 9-es hivatkozások nem szerepelnek a dolgozatban. Ez véletlen, vagy volt valami oka? Kérdezem amiatt is, hogy az 1-es hivatkozás „alapműnek” számít.”

- Azt hiszem, hogy mindegyik szerepel a dolgozatban, csak más sorrendben. Ha jól látom, akkor a következő tézisfüzet → dolgozat megfeleltetés tehető: [1] → [41], [2] → [52], [3] → [53], [4] → [51], [5] → [30], [6] → [31], [7] → [33], [8] → [32], [9] → [34].

“A dolgozat megjelenése óta sikerült a pontosság további növelése a variációs és/vagy perturbációs relativisztikus energiák meghatározása során?”

- Köszönöm a kérdést. Igen, 2022. ősze óta sikerült növelni a konvergenciát további két-három nagyságrenddel. Például a hélium atom alap és első gerjesztett állapotának no-pair Dirac–Coulomb–Breit energiáját jelenleg közel $pE_h = 10^{-12} E_h$ szintig tudjuk konvergáltatni. Van ötlet további az algoritmus fejlesztésére is, de egyelőre ezt a pontosságot szeretnénk kiaknázni, amelynek néhány fontos következménye már látszik.

(1) Pontosan meg tudjuk határozni a variációszámításból, hogy a perturbatív eljárásnak milyen α^4 , $\alpha^4 \ln \alpha$ rendű együtthatókat kellene kapnia, és kezdjük látni az α^5 -es járulékokat (az utóbbiakra nagyságrendi becslés adható). Az $\alpha^4 \ln \alpha$ rend egyezik a perturbatív

eredményekkel ('nrQED'), de az α^4 rend nrQED levezetése komplikált, ennek a tesztelése kulcsfontosságú lesz. Van egy évek óta fennálló szignifikáns eltérés a kísérlet és az elmélet (nrQED) között a hélium atom esetén. Nem találják az eltérés okát, jóllehet aktív kutatás tárgya mind elméleti, mind kísérleti oldalon. A mi eredményeinkkel most lehetővé válik, a rendkívül komplikált perturbatív eljárás (egy fontos részének) a letesztelése. Ha eltérést találunk, akkor vélhetően valamit rosszul számoltak, esetleg elvi hibát vétettek. Ha minden egyezik, akkor az ismét egy nagy lépés előre, és lehet folytatni a munkát, a mi esetünkben a (2)-es ponttal. Azt gondolom, hogy ez a teszt a perturbatív eljárás számára lesz igazán kritikus. A perturbatív eljárásban divergens mennyiségeket szelídítettek meg (dimenziós regularizáció) alkalmazásával, hosszú, bonyolult kézzel végzett számolásokban és (magnövelt pontos aritmetikát igénylő) számításokban. A mi no-pair variációs számításainkban egyáltalán nincsenek divergenciák és 'mindent' a számítógép csinál.

(2) A nagy pontosságú no-pair energia referenciaként szolgál a pár-, retardációs- és a radiatív korrekciók kiszámításához. Egyelőre perturbatív úton (és úton-útfélen próbálkozva az adott mennyiség felösszegzésével). Lehetőségünk nyílik az inherens(nek tűnő) QED divergenciákon gondolkodni, amelyek a tömeg- és töltés-renormálással kapcsolatosak. Nagyon izgalmas kérdések ezek. Ennek a nagyobb kutatási programnak az lesz a célja, hogy végső soron teljesen leváltsuk a nem-relativisztikus referenciát (nrQED) a kísérletek tesztelésében, és minden folyamatot relativisztikus referenciával tudjunk számolni. Rengeteg nyitott elvi és számításos kérdés van jelenleg. De talán a végén közelebb kerülünk, legalább néhány további járulék variációs figyelembevételéhez.

“Mind a GENIUSH, mind a QUANTEN program esetén: tud a Jelölt egy-egy durva becslést adni, hogy a közeljövőben ezen módszerek mekkora rendszerekre lehetnek alkalmazhatók?”

- A GENIUSH esetén kb. 20-30 csatolt szabadsági fokig el lehetne jutni fél évtizeden belül, emellett pedig a rutinszerű alkalmazhatóság lenne a cél, a programok nyílt elérhetősége, stb. Ez utóbbi inkább programozástechnikai és csak kisebb mértékben fundamentális alapkutatási kérdés.

A QUANTEN esetén kis rendszerekre is óriási kihívások előtt állunk. Például jó lenne megoldani a jelenleg nyitott 'helium atom puzzle'-t. A kísérletek az egyre nagyobb pontosság felé haladnak, részben az atomórák fejlődése húzza ezt a területet. Kis rendszerek esetén lehet esély fenntartani a lépést a kísérlettel pontosság tekintetében, és erre kísérleti részről is jelentős igény mutatkozik.

“Egy kritikai megjegyzés: véleményem szerint, hangyasav esetében nem beszélhetünk cisz és transz

izomerekről, legkevésbé *cisz-transz izomerizációról. Tisztában vagyok vele, hogy a Szerző által hivatkozott korábbi művekben is többször előfordul cisz és transz hangyasav, ennek ellenére szerintem nem szerencsés, ha keverjük a geometriai és a konformációs izomériát. Szerencsésebb lenne *s-cisz és s-transz konformerekről beszélni. (Esetleg ciszoid, vagy transzoid, bár ez a terminológia már kiment a divatból.)*”*

- Köszönöm az észrevételt. 2022. ősze óta sikerült egy eddiginél konvergensebb és nagyobb számítás elvégezni, az alap és deuterált izotopológokra, egy kísérleti csoporttal történő együttműködés keretében. Jelenleg a cikk írása folyamatban, javasolni fogom a kollégáknak a terminológia megfontolását.

“Második kritikai megjegyzésem: a tézispontok alapján, de a teljes mű tartalmát tekintve is, igen jelentős szerepe volt a módszerfejlesztésnek. Noha jelen esetben nyilván nem választható el egymástól a fejlesztői és az alkalmazói rész, mégis hiányolom a kifejlesztett programok alaposabb technikai jellemzését. Ezért tisztelettel kérném a Jelöltet, hogy a védés során, a kérdések megválaszolásakor térjen ki az alábbiakra:”

- Először a GENIUSH-sal kapcsolatban válaszolok. Majd ugyanezt megteszem a QUANTEN-nel.

“Milyen a programok felépítése? (Forráskód mérete, függvények (szubrutinok) száma, ezek hierarchiája.)
”

- GENIUSH: Alapvetően Fortran nyelven íródott, az első (rezgési) verzió a PhD kutatásaim során, Prof. Dr. Császár Attila témavezetésével. A teljes programrendszer junior és szenior kutatók sok éves munkája eredményeként alakult. A teljesség igénye nélkül szeretnék felsorolni néhány hivatkozát, amely meghatározó volt az általam használt és továbbfejlesztett verzió alakulásában:

E. Mátyus, G. Czakó, and A. G. Császár, *J. Chem. Phys.* 130, 134112 (2009).
C. Fábri, E. Mátyus, and A. G. Császár, *J. Chem. Phys.* 134, 074105 (2011).
J. Sarka, A. G. Császár, S. C. Althorpe, D. J. Wales, and E. Mátyus, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 18, 22816 (2016).
J. Sarka, A. G. Császár, and E. Mátyus *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2, 15335 (2017).
G. Avila and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 150, 174107 (2019).
G. Avila and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 151, 154301 (2019).
G. Avila, D. Papp, G. Czakó, and E. Mátyus, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 22, 2792 (2020).
A. Martín Santa Daría, G. Avila, and E. Mátyus, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 23, 6526 (2021).
A. Martín Santa Daría, G. Avila, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 154, 224302 (2021).
A. Martín Santa Daría, G. Avila, and E. Mátyus, *J. Mol. Spectrosc. (J. K. G. Watson Special Issue)* 385, 111617 (2022).
G. Avila, A. Martín Santa Daría, and E. Mátyus, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 25, 15183 (2023).

A program főbb részei:

- geniush.f90 (kb. 1500 sor): főprogram
- input olvasó

- 1D-s DVR gridek számítása, esetleg optimalása
- numerikus KEO számoló a griden (300-500 sor, néhány verzió / opció), ehhez:
 - * cartesiancalc: user-defined rezgési modell (különböző verziók, megnövelt pontosságú)
 - * véges numerikus differencia számoló rutinok (megnövelt pontosságú)
- potenciális energia számító a griden, ehhez
 - * külső PES subroutine, és ehhez user-defined interface
- iteratív sajátértékmegoldó (kb. 1000 sor, több opció)
 - * ehhez Hamilton-mátrix-vektor szorzó szubrutin (néhány verzió), OpenMP parallelizáció
 - * a Smolyak verzió teljesen különálló szorzó szubrutint használ (kb. 1000 sor), mert a multidimenziós bázis és a grid szerkezete
- további kiegészítő programok a számított hullámfüggvény elemzéséhez, átmeneti momentumok számításához (tensint.f90, kb. 1000 sor + kisebb szubrutinok)
- A GENIUSH magja 30-50 szubrutinból áll. A programhoz az összes eddig implementált rezgési modell és PES, beleértve a Braams-Bowman PES könyvtárat, linkelve van, ami egy nagyobbacska programrendszeré teszi. Az aktuális verzióban közel 300 szubrutin található.

“Fordítóként a Jelölt gfortran-t használt, vagy esetleg valamilyen kereskedelmi Fortran fordítót?”

- Az Intel fordító (talán a hatékony Math Kernel Library-nak is köszönhetően) gyorsabb futtatható fájl eredményezett, ezért ezt használjuk (jelenleg egy néhány évvel ezelőtt megvásárolt license alapján).

“A GENIUSH esetében szerepelt az 1-es hivatkozásban, hogy MPI-t használt a párhuzamosításhoz. Próbálkoztak esetleg többszálú implementációval is? Ugyanez a kérdés vonatkozik a QUANTEN programra is.

- 2008-ban (az első publikáció készítésekor) kísérleteztem MPI párhuzamosítással, azonban a jelentős kommunikációs overhead miatt ennek az alkalmazását akkor elhalasztottuk (úgy hallottam, hogy az elmúlt években talán Sarka János dolgozott ilyen irányú fejlesztéseken). Ehelyett a jóval egyszerűbb OpenMP párhuzamosítást használjuk (legfőképpen a mátrix-vektor szorzás részben). A skálázódás nem tökéletes, de egy sokmagos szerveren

kb. 30-40-szeres gyorsulást el lehet így érni. Ezzel együtt azonban a memória- és diszk-igény is olyan jelentőssé válik, hogy leginkább az algoritmus fejlesztésén kell gondolkoznunk (ld. grid-levágási módszerek).

“Milyen hardverigénnyel kell számolni a dolgozatban szereplő példák esetében (CPU, memória, tárhely)?

- A nagyobb számítások 100 GB-os memória- és diszk-igénnyel bírnak, és akár 2 hónap számítási időt igényelnek (40-50 CPU magon).

“Próbálkoztak-e GPU-ra optimalizált változattal (CUDA-Fortran)?

- Nem próbálkoztunk GPU optimalizálással, mert látható volt, hogy az algoritmuson van még mit fejleszteni (ld. grid-levágás). De tudok olyan kutatócsoportról, amely dolgozik egy GENIUSH-hoz hasonló algoritmus újraírásán GPU klaszterre optimalizálva.

“Mennyire munkaigényes az input összeállítása és milyen futásidőkkel kellett számolni?”

- 2023. szeptemberében érkezett a csoportba egy ügyes japán posztdok, aki korábban relativisztikus kvantumkémia fejlesztéssel foglalkozott, és kb. 1 hét alatt tudott implementálni egy teljesen új molekulát a programba. Ennek része egy (vagy több) rezgési koordinátarendszer definíciója, egy alkalmas PES linkelése (+interface), és egy input fájl (magtömegek, grid típusa, gridpontok száma, Lanczos paraméterek, forgási kvantumszám, stb.). Egy tapasztalt felhasználó általában néhány óra és 1-2 nap között el tudja végezni ezt a feladatot (a koordinátadefiníció bonyolultságától és a PES linkelésével kapcsolatban felmerülő nehézségektől függően).

A futásidő, a rezgési dimenziók számától és a számítandó sajátértékek számától függően, lehet pár másodperc vagy két hónap vagy akár több is, de általában 2 hónavnál hosszabb jobokat nem tervezünk. A számítás természetesen újraindítható (pl. áramszünet után, vagy ha kiderül, hogy több sajátállapotra van szükségünk...).

Milyen a programok felépítése? (Forráskód mérete, függvények (szubrutinok) száma, ezek hierarchiája.)

- QUANTEN: Fortran nyelven íródott. A nulladik verziója (ekkor még nem volt neve) a 2010-11 ETH Fellow-ként végzett kutatásaimhoz kapcsolódik Zürichben, ekkor kezdtem foglalkozni néhánytest kvantumrendszerek variációs számításával, nagyrészt a Suzuki & Varga, Stochastic Variational Approach to Quantum-Mechanical Few-Body Problems, Springer (1998) könyv alapján. Azóta volt lehetőségem Varga Kálmánnal személyesen is beszélgetni néhány alkalommal, ami mindig nagyon jó élmény volt!

Hasonlóan a GENIUSH-hoz, de itt talán még inkább igaz, hogy egymagam nem tudtam volna olyan szintre fejleszteni a programot, ahol most tart. A programra kezdettől fogva jellemző az absztrakt adattípusok használata (ami fontos az aritmetika pontosságának globális állításához), és a modulárisabb szerkezet. Jeszenszki Péter programozási tapasztalatának köszönhetően, 2020. óta a csoportos programozás elősegítése lendületet kapott, és egy belső, github jellegű felületen (bitbucket) történik a közös fejlesztés, és minden új funkcióhoz igyekszünk teszteket definiálni. A szubrutinok komplexitására jellemző, hogy vannak olyan részei a programnak (integrálrutinok), amelyeket, a csoporton belül készült két független implementáció segítségével tudunk csak hibátlanul beprogramozni.

Fontos hivatkozások:

- E. Mátyus, J. Hutter, U. Müller-Herold, and M. Reiher, *Phys. Rev. A* 83, 052512 (2011).
E. Mátyus, J. Hutter, U. Müller-Herold, and M. Reiher, *J. Chem. Phys.* 135, 204302 (2011).
E. Mátyus and M. Reiher, *J. Chem. Phys.* 137, 024104 (2012).
E. Mátyus, *J. Phys. Chem. A* 117, 7195 (2013).
E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 149, 194111 (2018).
E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 149, 194112 (2018).
E. Mátyus, *Mol. Phys.* 117, 590 (2019).
D. Ferenc and E. Mátyus, *Phys. Rev. A* 100, 020501(R) (2019).
D. Ferenc and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 151, 094101 (2019).
D. Ferenc, V. I. Korobov, and E. Mátyus, *Phys. Rev. Lett* 125, 213001 (2020).
E. Mátyus and P. Cassam-Chennai, *J. Chem. Phys.* 154, 024114 (2021).
P. Jeszenszki, D. Ferenc, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 154, 224110 (2021).
R. T. Ireland, P. Jeszenszki, E. Mátyus, R. Martinazzo, M. Ronto, and E. Pollak, *ACS Physical Chemistry Au* 2, 23 (2022).
P. Jeszenszki, R. T. Ireland, D. Ferenc, and E. Mátyus, *Int. J. Quant. Chem. (I. Mayer Special Issue)* (2022).
P. Jeszenszki, D. Ferenc, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 156, 084111 (2022).
D. Ferenc, P. Jeszenszki, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 156, 084110 (2022).
E. Mátyus and D. Ferenc, *Mol. Phys. (L. Wolniewicz Special Issue)* e2074905 (2022).
D. Ferenc and E. Mátyus, *Chem. Phys. Lett. (K. Kuchitsu Special Issue)* 801, 139734 (2022).
D. Ferenc, P. Jeszenszki, and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 157, 094113 (2022).
M. Ronto, P. Jeszenszki, E. Mátyus, and E. Pollak, *Phys. Rev. A* 107, 012204 (2023).
D. Ferenc and E. Mátyus, *J. Phys. Chem. A* 127, 627 (2023).
E. Saly, D. Ferenc, and E. Mátyus, *Mol. Phys. (Wim Ubachs Special Issue)* e2163714 (2023).
P. Jeszenszki and E. Mátyus, *J. Chem. Phys.* 158, 054104 (2023).
D. Ferenc and E. Mátyus, *Phys. Rev. A* 107, 052803 (2023).
Á. Margócsy and E. Mátyus (2024). arXiv:2312.13887

A program főbb jellemzői, részei:

- közös munka bitbucket-es tárhelyen keresztül, jelenleg kb. 30 branch, amelyből egy tucat viszonylag aktív
- az aktuális fő ágban ('development') kb. 500 szubrutin és 80 modul
- változtatható valós, komplex (és integer) adattípus a teljes programban (kreal, kcplx, kint)
- quanten.F90: főprogram
- input olvasó, bázisparaméter és hullámfüggvény olvasó (input)
- bázisparaméter és hullámfüggvény író (output)

- variációs eljárások valamilyen célfüggvényre (leggyakrabban energia, illetve többféle Hylleraas funkcionál)
 - * sztochasztikus paraméter-generálás, gyors sajátérték update (ha releváns)
 - * determinisztikus paraméterfinomítás a célfüggvény minimalizálására a Powell-algoritmus alapján
- mátrixelem-számoló: átfedés, Hamilton-mátrix, stb. összeállítása az elemi integrálrutinok felhasználásával, különbség a nemrelativisztikus és perturbatív relativisztikus, illetve a kételektron-relativisztikus (16-komponensű) számítások esetén
- integrálrutinok: elemi ECG integrálrutinok gyűjteménye
 - * speciális elemi mátrixműveletek az integrálrutinokhoz (trace, direkt-szorzat mátrixok speciális mátrix-mátrix, mátrix-vektor szorzása, stb.)
 - * speciális függvények numerikusan stabil Fortran implementációja (pl. kis argumentumértéknél), pl. erf, erfz, DawsonF, komplex exponenciális-integrálfüggvény, stb.
- pontcsoportszimmetria-leképezések (ECG paraméterezés transzformációjával, speciális implementáció a 16-komponensű spinorábrázolásban)
- permutációs szimmetria leképezések (ECG paraméterezés és spinfüggvények transzformálásával)
- általánosított sajátértékmegoldóhoz interfész LAPACK rutinok hívásához (valós szimmetrikus, komplex hermitikus, komplex szimmetrikus, általános komplex)
- házilag módosított LAPACK.f és BLAS.f rutinok (általános adattípus, részleges OpenMP párhuzamosítás)

“Fordítóként a Jelölt gfortran-t használt, vagy esetleg valamilyen kereskedelmi Fortran fordítót?”

- Leggyakrabban Intel fordítót használunk, kezdetben a hatékony OpenMP Math Kernel Library-t (MKL) erősen kihasználva.
Alkalmanként a gfortran-t is használtuk, mert a beépített 10-byte-os adattípus engedett egy picikét tovább menni a 8-byte-os (dupla pontos) pontosságon csekély CPU-idő növekedéssel. Az Intel hatékony MKL-jével sajnos az a baj, hogy nem elérhető a forráskódja, és csak dupla (vagy szimpla) pontosság választható. Házilag nem lehetséges megnövelt pontosságra módosítani a (lineáris algebrai) számításokat.
A BLAS, és a LAPACK könyvtárak forráskódja természetesen nyilvánosan elérhető, ezért nagy

előrelépést jelentett, hogy idő közben átírtuk a BLAS.f és LAPACK.f könyvtárakat egyénileg definiált adattípusra (kreal=8-byte, 16-byte, vagy 10-byte vagy más). Egészen friss eredmény pedig, hogy Nonn Ádám OpenMP párhuzamosította az általánosított valós szimmetrikus ($Hv = ESv$) típusú sajátértékfeladatokhoz tartozó lineáris algebra szubrutinokat. Van még tér további fejlesztésre (hatékonyabb párhuzamosítás, további adattípusok, stb.), de a jelenleg elérhető kb. 3-4-szeres gyorsulás már lehetővé teszi, hogy négyszeres pontos számábrázolás mellett el tudunk végezni egy sor fontos számítási feladatot.

“A GENIUSH esetében szerepelt az 1-es hivatkozásban, hogy MPI-t használt a párhuzamosításhoz. Próbálkoztak esetleg többszálú implementációval is? Ugyanez a kérdés vonatkozik a QUANTEN programra is.”

- Kizárólag OpenMP-t használunk párhuzamosításra. A QUANTEN esetén az MPI jól kiaknázható lenne (a mátrixelem-számolás majdnem triviálisan párhuzamosítható), de mindig akadt fontosabb feladat, és még nem volt rá égető szükség. Az OpenMP nagyobb szabadságot hagy a kód (gyors) átformálásában, ahogy haladunk az elméleti megértéssel.

“Többszálú futtatás esetén vizsgálták a skálázódást?”

- Igen, a legtöbb számítást 16-32 magon optimális elvégezni (további magok már nem hoznak érdemi gyorsulást). A négyszeres pontos számításoknál jelenleg 4-8 magon ideális számolni.

“Milyen hardverigénnyel kell számolni a dolgozatban szereplő példák esetében (CPU, memória, tárhely)?”

- A számítások leginkább CPU-igényesek. Van egy rokon területen dolgozó kutatócsoport, amely évekig használ szuperszámítógépeket.

“Próbálkoztak-e GPU-ra optimalizált változattal (CUDA-Fortran)?”

- Nem még nem. Mindig akadt bőven (elvi) feladat. Jelenleg a megnövelt számábrázolás melletti hatékony lineáris algebra lenne a következő fontos programozási feladat.

“Mennyire munkaigényes az input összeállítása és milyen futásidőkkel kellett számolni?”

- Az input összeállítása viszonylag egyszerű, de érdemes hozzá a forráskódot is figyelni. Kutatási együttműködésben (Weizmann Institute of Science, Glasgow University) hozzánk érkezők 1-2 héten belül magabiztosan megtanulták használni a programot (a számukra fontos részét), és módosítani a nekik szükséges szubrutinokat. A tipikus futásidők néhány másodperctől 2-3 hónapig terjednek (ennél hosszabb job-okat nem szoktunk tervezni).

Budapest, 2024. január 16.

Tisztelettel,

Mátyus Edit

Mátyus Edit