

量子3体系・4体系精密計算コードのライブラリ開発と応用研究

—— その III：VPP5000 と eServer-p5 の計算時間比較 ——

上村正康 (理化学研究所 /九州大学 理学部物理学科)

報告書その I [1] で述べたように、九州大学原子核理論グループでは、1996 年以来、九州大学情報基盤センターのライブラリ開発の一環として、量子論的 3 体系・4 体系の束縛状態の精密計算コードを作成し、登録してきた。また、それらを利用し発展させて、原子核、ハイパー核、クォーク系、エキゾチック原子分子など各種の応用研究を行って来た。

今回の無料キャンペーン期間には、筆者等は、新たな応用研究として、反水素－水素反応の 4 体計算に取り掛かり、準備的研究を行った。この研究は、科研費特定領域研究「反陽子を用いた反物質科学」の一翼を担うものであり、将来、反水素の実用的大量生成が可能になったとき（“物理学実験的な意味”での大量生成は既に可能になった）に備えて、反水素と貯蔵容器との間の消滅反応、基本的には反水素－水素反応 $\bar{H} + H \rightarrow (\bar{p}p)_{NL} + (e^-e^+)_{1S}$ の確率を、 $\bar{p}$ (反陽子)、 p (陽子)、 e^- (電子)、 e^+ (陽電子) の量子力学的 4 体問題として精密計算することが主目的である。

今回は、準備的な研究として、複素レンジガウス関数 [2,3] を用いて、反陽子－陽子 ($\bar{p}p$) 原子、つまり protonium、の高励起状態（主量子数 $N=25$ 程度の高振動状態）の波動関数の精密な記述を検討し、満足な成果を得た。しかし、この報告書では、その成果の説明は割愛し、この準備的研究のもう 1 つの目的であった「VPP5000 と eServer-p5 の計算時間比較」について、報告する。

我々の 3 体系・4 体系計算は、ベクトル機に非常に適しているので、すべて VPP5000 および VPP700、VP200 等の先行ベクトル機を用いて行われてきた。しかし、九大情報基盤センターの VPP5000 は今年末には、次期計算機と置き換えられるので、今後のことを考え、VPP5000 からスカラー並列機への乗り替えを検討する必要に迫られている。

今回の無料キャンペーンで VPP5000 と eServer-p5 の双方が使えるので、期間中に、従来の VPP 用のプログラムを eServer-p5 用書き換えること、および 2 つの計算機の計算時間を比較することにも力を注いだ次第である。

1. ベクトル機に適した九大の GEM 理論

物理学には、数値計算上「少数粒子系のシュレーディンガー方程式を精密に解くこと」に帰着する課題が多い。これにより新しい物理的知見が得られる場合もある。この目的に役立つ強力な方法の 1 つとして、九州大学原子核理論グループが提唱し発展させて来たガウス関数展開法 (Gaussian Expansion Method、GEM) がある [2,3]。量子力学的な 3 体系・4 体系の計算方法として、計算精度、速度、適用範囲の広さ、使い易さにおいて、最も高い評価を受けている方法の 1 つである。

GEM のアルゴリズムの利点として、ガウス型基底関数の関数系の特徴により [2,3]、行列要素計算において、**最内側の do loop の長さが長大であることである**

(通常、数万から 100 万)。これは、ベクトル計算に最適である。

GEM を最初に適用したミュオン分子の計算 (1988、FACOM VP200) は、当時、標準的に行われていた計算法による計算よりも約 200 倍速かった [3]。この差の原因は、標準的な計算法が、上記 c) に適さず 非直交性が大きく 4 倍精度計算を必要としたこと (倍精度計算機であるベクトル機には載らない) にある。かつ、GEM のアルゴリズムがベクトル機に理想的に適合していることにある。

我々の、VPP5000 におけるパラレル計算の方法は、次のような全く初歩的な (しかし、計算時間は ほぼ CPU 数に比例する) 方法である。 行列要素を求める行列の大きさ N は、通常、 $N = \text{数千} \sim 2 \text{ 万次元}$ である。対称行列なので求める個数は $\sim N^2/2$ である。分かり易いように、今 8 CPU を使う例を考える。基底関数の性質 (角運動量) により行列要素を分類し、8 つのグループに分割する。それぞれのグループを 1 つずつの CPU で計算させる (プログラムは共通)。

今回のベンチマークテストでは、ここまでの計算で計算時間を調べるが、実際の研究時の VPP 計算では、さらに、その行列要素を 8 つの各 CPU の中で中間データ file に書き込み、引き続く独立な計算でその 8 組のデータを読み取って合成し、もとの大きさの行列にする。これを、対角化として、固有値、固有ベクトルを求める—という手順になる。このデータ入出力分は、課金計算時間としては微かである。今回の VPP5000 計算における VP 率は 98 % である。 一方、eServer-p5 のパラレル計算は、自動並列化に頼った。

2. VPP5000 と eServer-p5 の計算時間比較

テストに使ったプログラムは、筆者等が九大情報基盤センターライブラリに登録したミュオン分子計算プログラム tbs1.f (報告その I[1] の文献 [1]) である。行列要素を求める部分だけを採用し、SSL による一般化行列固有値問題の部分は外した。基底関数の数は $N = 18300$ である。VPP5000 での実行時のメモリは 各 CPU で 4.0 GB である。

行列要素を計算する時間を CPU 数を変えて測定した。結果を Table 1 に示す。まず、非パラレル計算 (1 CPU) で、VPP5000 は eServer-p5 よりも 14 倍速いことが分かる。因みに、基底関数の数を 1/2、1/4 にして計算したが速度比は同じである。ベクトル機の利点と 我々の基底関数・アルゴリズムがベクトル計算に非常に適していることの結果である。

Table 1: 九大情報基盤センターのライブラリプログラム tbs1.f (ミュオン分子)。

	VPP5000	eServer-p5	相対比
非並列 (1 CPU)	77.0 秒	1100.9 秒	14.3

次に、CPU 数を、4, 8, 16 にして計算させた結果を見ると、計算速度比は 非パラレルの時とほぼ同じであり、計算時間は CPU 数に ほぼ反比例 (1CPU/16CPU の時間比は、両者とも 13~14 倍) と言えよう。我々の通常の (ベクトル機に適した)

Table 2: VPP5000 と eServer-p5 の計算時間比較。テストプログラムは、筆者らが登録した九大情報基盤センターのライブラリプログラム tbs1.f (量子力学的 3 体系束縛状態のエネルギーと波動関数 — その I: ミューオン分子)。並列化方法は本文参照。次元数 18300 の行列の要素を計算する時間を CPU 数を変えて測定した。

	VPP5000	eServer-p5	相対比
1 CPU	77.0 秒	1100.9 秒	14.3
4 CPU	19.1 秒	284.7 秒	14.9
8 CPU	11.2 秒	140.5 秒	12.5
16 CPU	5.85 秒	78.4 秒	13.4

計算で見る限り、ひと言で言えば、計算時間においては、「VPP5000 の 1 CPU」と「eServer-p5 の 16CPU」とが同程度の性能である。

もちろん、両計算機は課金・運営方法が異なるので、計算費予算の効率的運用や JOB の turn-around time という観点からは別角度の考察が必要である。VPP5000 は、今年末には次期機に更新されるそうであるが、我々 VP 派にとっては離れがたい名機である。我々の計算においても、次期機が VPP5000 を優に上回るものであることを期待したい。

3. VPP5000 と eServer-p5 の SSL の計算時間比較

我々の通常の計算では、上記の行列要素計算の後、一般化行列固有値問題の SSL subroutine を呼んで、固有値、固有ベクトルを求める作業が続く。そこで、両計算機で使える SSL の一般化行列固有値問題の subroutine の計算時間を比較して見た。行列要素は、上記のミューオン分子計算で基底関数の数 $N = 4366$ としたものである。

一般化行列固有値問題の SSL は、VPP5000 用には DGSEG2 を使った。これは、固有値と固有ベクトルの両方を、個数を（下から、または上から）指定して求める形式である。eServer-p5 用には DSYGV を使った。こちらは、固有値のみ または固有値と固有ベクトルを全て求める形式である。テストでは、a) 固有値と固有ベクトルを全て求めるケース、b) eServer-p5 では 固有値のみ全て求めるケース、c) VPP5000 では、下から 4 個の固有値と固有ベクトルを求めるケース（下から数個というのが我々の実用上最も多いケース）を調べた。筆者の目では、c) のケースが eServer の SSL で見出せなかったのが残念である。Table 2 に計算時間を載せる。

最終行の 固有値とベクトルを全て求めるケースでは、VPP5000 の速度は eServer-p5 の 1.5 倍程度であり、Table 1 で見た 14 倍より 1 桁遅い。というよりも、eServer-p5 用の DSYGV が優れたアルゴリズムになっていると見るべきか。しかし、我々にとって実用的な「下から数個の固有値と固有ベクトルを求めること」が DSYGV ではできないので（全て求める以外ない）、この目的のためには、78 : 515 の差がついて

Table 3: VPP5000 と eServer-p5 の計算時間比較。一般化行列固有値問題。4366 次元。

	VPP5000 (DGSEG2)	eServer-p5 (DSYGV)
固有値とベクトル（下から 4 個）	78 秒	–
固有値のみ（全 4366 個）	–	186 秒
固有値とベクトル（全 4366 個）	305 秒	515 秒

しまう。この経験から、次期計算機では、一般化行列固有値問題の SSL プログラムには DGSEG2 と同様に 任意の個数の固有値と固有ベクトルが求められるものが入っていてほしい。

最後に、連立 1 次方程式の SSL プログラムをテストした結果を Table 3 に示す。Table 2 と同じ課題を、inverse-iteration 法により最低エネルギーの固有値と固有ベクトルを求める。これは実質的に連立 1 次方程式を多数回解く方法であるので、その計算時間テストになる。連立方程式を初めの 1 回解いた時の時間を測定した。使用した subroutine 名は Table 中にある。SSL の速度比較については、Table 2 の固有値問題のテストと同じ感想を持つ。

Table 4: VPP5000 と eServer-p5 の計算時間比較。連立 1 次方程式。4366 元。(ミューオン分子)。

VPP5000 (DVLAX)	VPP5000 (DLAX)	eServer-p5 (DGEF + DGES)
6.2 秒	11.9 秒	12.4 秒

参考文献

- [1] 肥山詠美子, 「量子 3 体系・4 体系計算コードのライブラリ開発と応用研究
—その I: 世界初の Ξ ハイパー核発見の可能性の理論予測—」, 九州大学情報基盤
センター広報 全国共同利用版 Vol.6, No.2 (掲載予定)(2006).
- [2] E. Hiyama, Y. Kino and M. Kamimura, Prog. Part. Nucl. Phys. **51** (2003)
223. (GEM のレビュー論文)
- [3] 肥山詠美子, 木野康志, 上村正康, 日本物理学会誌 **61** (2006) No.1, 29.
(GEM の解説記事)