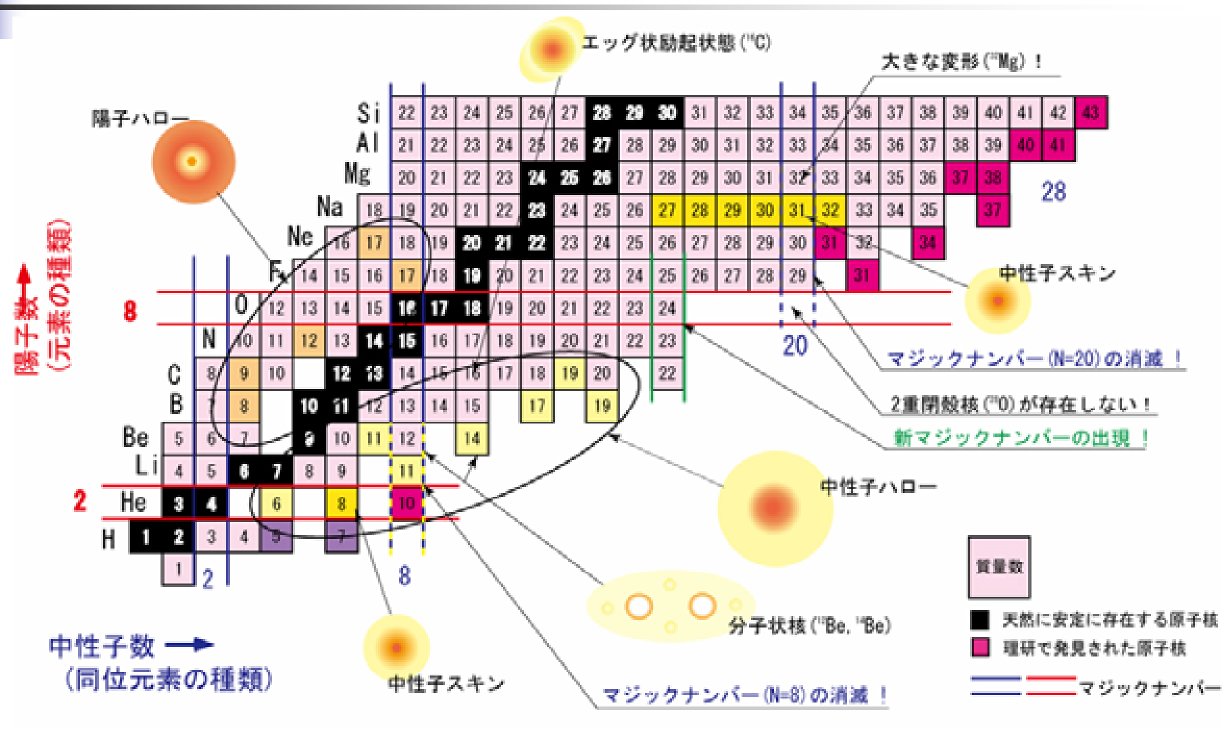
大型計算機による中性子過剰核の研究

木村真明 (筑波大), 延與佳子 (京都大)
谷口億宇 (京都大), 古立直也 (東京理科大)

1. 中性子過剰核の物理とは？
   何が面白いか、何を目指すか
2. どのようにして研究、計算するのか？
3. どのような成果を得たか？
4. CMC, RCNPへの謝辞、要望

中性子過剰核の物理とは?



- 従来の核物理の常識(教科書)を書き換える様々な現象が数多く発見されてきた('80～)
- 他の分野との密接な関係(例: 天体核反応、元素合成、Lattice QCD, …)
- 次世代加速器RIビーム・ファクトリーの稼動開始により、核物理の対象が飛躍的に広がった

どのようにして計算するのか？

1. 多体Schrödinger方程式 $\hat{H}\Phi = E\Phi,\ \hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$

2. Vとして、有効相互作用を用いる(Gogny, Modified Volkov)

$$\hat{V} = \sum_{n=1}^{2}\sum_{i<j}(W_n - B_n P_\sigma + H_n P_\tau - M_n P_\sigma P_\tau)\exp(-a_n r_{ij}^2) + v\sum_{i<j}(1 + xP_\sigma)\rho^\alpha(R)\delta(r_1 - r_2)$$

3. 波動関数ΦをSlater行列式の和で近似する
   i. Slater行列式をランダムに生成する

$$\Phi_{Slater} = \mathbf{A}\{\phi_1(r_1), \phi_2(r_2), \dots, \phi_A(r_A)\},\ \phi_i(r_j) \propto \exp\{-v(r_j - Z_i)^2\}$$

   ii. Slater行列式の重ねあわせをΦとする
      a. パリティの射影 – 二つのSlater行列式の重ね合わせ

$$\Phi = (1 \pm \hat{P}_x)/2 \cdot \Phi_{Slater}$$

      b. 角運動量の射影 – 2000～6000個のSlater行列式の重ね合わせ

$$\Phi = \int d\Omega\, D_{MK}^{J\pi *}(\Omega)\, \hat{R}(\Omega)\, \Phi^\pi$$

4. エネルギー期待値Eを最小にする波動関数Φを求める (変分計算)

$$dZ_i / dt = C_{ij}\quad (d\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle / dZ_j^*)$$

5. 異なる条件下で求まった多数のΦを用いてHamiltonianを再計算し、固有値方程式を解く

$$\left\{\langle\Phi_i|\hat{H}|\Phi_j\rangle - E\langle\Phi_i|\Phi_j\rangle\right\} f_{ij} = 0$$

どのようにして研究、計算するのか？

変分計算、及びHamiltonianの評価を繰り返し行う必要がある

1. Matrix element一つ一つの評価はベクトル計算機と相性が良い
   有限range 2体力項

$$\langle\Phi_i|\hat{V}|\Phi_j\rangle = \sum_{ijkl} B_{ki}^{-1} B_{lj}^{-1}\left[X_{ijkl} B_{ik} B_{jl} \exp\left\{-\alpha(Z_i^* - Z_j^* + Z_k - Z_l)^2\right\} - (k \leftrightarrow l)\right]$$

   式中の配列を一次元化。長いベクトルにしてベクトル計算の効率を稼ぐ

   密度依存項

$$\langle\Phi_i|\hat{V}|\Phi_j\rangle \approx \int dR\, \rho^{\alpha+2}(R)$$

   空間積分をgrid上の評価点の和に置き換える

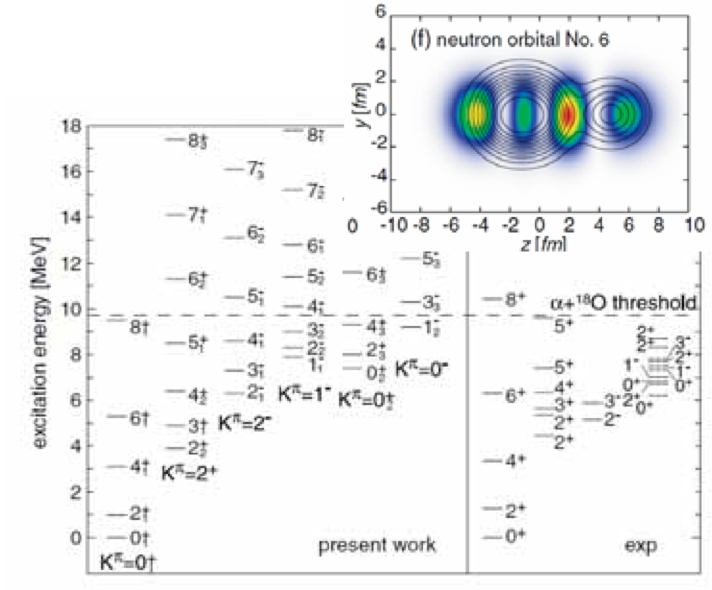
2. Matrix element 評価の反復
   - Parity射影後の変分計算
     前回の評価結果に次回の評価結果が依存する
     node間通信量 大
   - 角運動量射影後の変分計算
     前回の評価結果への依存性が無い、若しくはほとんど無視できる
     node間通信料 小

どのような結果が得られたか？

Example 1: ^{22}Neの分子構造の予言

M. Kimura, PRC75, 037303(2007)

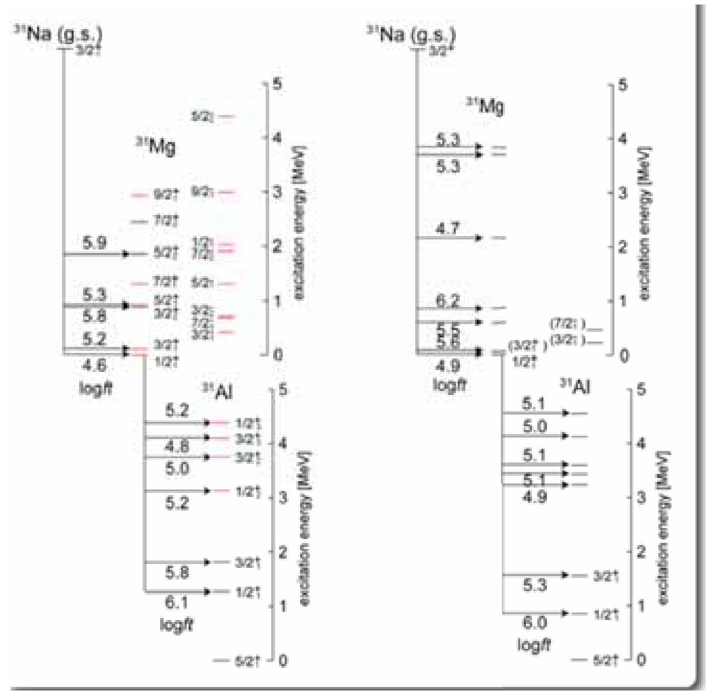
- ^{22}Neの励起状態に分子構造が現れる
- ^{4}He+^{16}Oのクラスター芯の周りを余剰中性子が運動
  (Ionの周りの電子の運動に類似)



Example 2: ^{31}Mgでの魔法数の破れ現象

M. Kimura, PRC75, 041302(2007)

- 観測データをはじめて再現した上で、多くの未知の励起状態の存在を予言



計算機の利用形態

- AMD計算のPlatform
  - パソコン (Pentium Core 2 Duo, etc…)
  - ベクトル型計算機 (SX8@CMC(RCNP), YITP)
  - 並列型計算機 (BlueGene@KEK, RSCC(Lunuxクラスタ)@RIKEN,Altix3700@YITP)
- AMD計算の使用言語
  - Fortran 90/95, C - パソコン、大型計算機双方での運用
  - C++, Python - パソコンでの解析、Fortranコードのデバッグ

1. Programの開発　　パソコン、各Platformでのデバッグ、試験運用
2. 本運用
   1. 変分計算
      角運動量射影前の変分計算 – 計算の条件を変え反復計算
      → ベクトル型計算機での反復計算が有効
      角運動量射影後の変分計算 – 反復数は少ない
      → 並列型計算機での計算が有効
   2. 得られた波動関数の解析
      → パソコンでの解析が有効

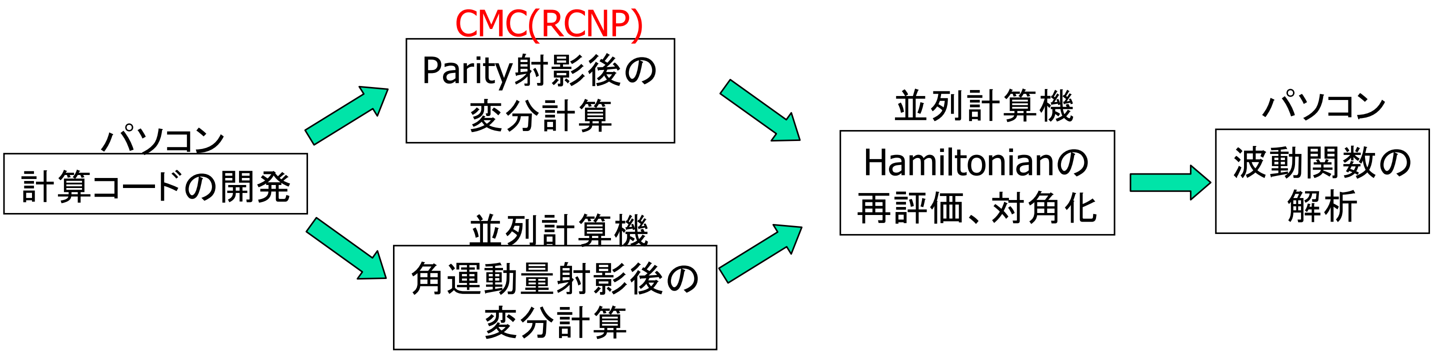
CMC(RCNP)の利用形態

角運動量射影前の変分計算を行う

- 試行波動関数を変えて複数回行う
- 変分計算に適用する拘束条件を変えて複数回行う

→ 単一CPUのqueueで数多くのjobを走らせる

- 1 jobあたり、15min〜2 hr.
- 原子核ひとつに対して、1000〜5000 jobs



CMC, RCNPへの謝辞、要望

userの要望

1. 極限まで計算機の性能を生かした研究をやりたい
2. スパコンを使うことで、最先端の研究を容易に実現したい

1 Userから見たCMC(RCNP)の計算機システムの大きな特徴

- 優秀なコンパイラ、移植性の高い言語仕様
  - 最適化をある程度任せることができる(特にFortran)
  - スパコン⇔パソコン間のコードの共有が容易
- Userにとって使いやすい運用形態
  - 利用に際して、詳細なCPU時間の見積もり等が必要ない
    民主主義的運営
  - 必要な時に必要に応じてjobをenqueueできる

⇓

- 初学者にも扱えるシステム
- 研究分野の動向に応じて、すばやく研究を立ち上げ、完了することができる

SX4以降、AMDによる研究は多くをCMC(RCNP)に依存してきました。
今後とも同様の運用形態が続くことを切に希望いたします。