

Title	スーパーコンピュータによる変形原子核のハートリーフォック計算：中性子過剰核における2中性子分離エネルギーの計算
Author(s)	西村, 道明
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1988, 68, p. 35-48
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/65768
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

スーパーコンピューターによる変形原子核のハートリーフォック計算 —中性子過剰核における2中性子分離エネルギーの計算—

大阪大学 核物理研究センター 西村道明

1. はじめに

最近のスーパーコンピューターの登場を含めた大型計算機の飛躍的な進歩は、単に計算時間及びコストを少なくするという量的な変化だけにとどまらず、計算量及び計算速度の物理的制約のために色々な問題において不可能であったアプローチの方法を可能にするという、科学の本質に触れた変革を様々な研究分野にもたらしつつある。構成する粒子の数が2個から2百数十個の広範囲に及ぶ原子核物理の研究においてもその例外ではない。このような粒子数の物理系においては、1粒子的及び多粒子が関与した集団的現象が複雑に絡み合って出現する。またこのような粒子（核子）の間に働く強い相互作用の性質のために、特に反応などの動的な現象においては、相互作用を司る（構成粒子以外の）中間子の自由度が重要な役割をする。このような物理系においては、解析的な関数で書き下せる研究にはかなり致命的な近似を強いられる場合が少なくない。誕生してからようやく半世紀を迎えようとしている原子核物理の進展に、計算機そして数値計算の飛躍的向上が大きく関わってきたことは確かである。

最近フランス、アメリカ及び日本のグループによって、通常には存在しない不安定な原子核の質量^{1,2)}及び半径³⁾が測定されるようになってきた。通常不安定な原子核は、構成粒子である中性子と陽子の数が大体比例関係にあるその狭い帯の上に存在する（図1）。不安定核の研究は、中性子と陽子の数の関数として、二次元的なより広い領域で原子核を調べようとするもので、単にどのような核種が原子核として存在し得るかという問いにとどまらない。Shell closureの効果として安定核にみられた魔法数がこのような不安定核において消失すること、又 Neutron drip line 近傍にみられる大きな shape transition 等をとおして、核構造の解明そして核内核子の有効相互作用の研究を目的としている。

従来不安定な原子核の基底状態を記述する為の最も信頼性の高い計算として考えられているのがハートリーフォック計算である。電子散乱によって原子核の電荷密度、Valence Nucleon 軌道の半径などが測定できるが、原子番号の広い範囲にわたってこれらの実験値と比較できる計算は、ハートリーフォック計算以外にはない。He, Be, C等の非常に軽い中性子過剰核については、球形のハートリーフォック計算が行われている⁴⁾。現実の原子核は一般的には変形しているため、変形した基底を用いて原子核を記述した方が良い状態、即ち変分法の言葉でいえばより深く束縛された状態が得られやすい（収束が早い）。筆者はこの変形核ハートリーフォック計算のコードを

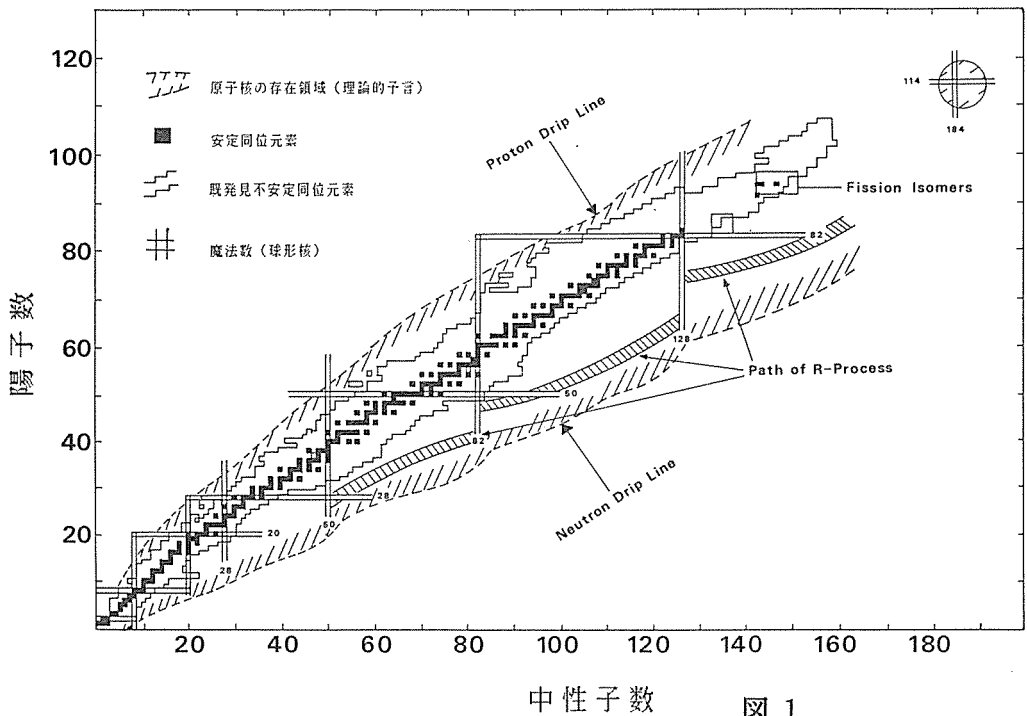


図 1

SX-1 の適用の対象とし、ベクトル計算に即した修正を行い、それによって得られた高速化率、ベクトル化率等について調べた。

第 2 章においてこの変形核ハートリーフォック計算の概要を、定式化及びプログラムコードについて述べる。第 3 章では、ベクトル演算に即した変更を加えたコードによって従来の計算機等との比較を行い、ベクトル化率と計算速度の相関を述べる。第 4 章で、実際の応用例として 2 中性子分離エネルギーの計算を紹介する。

2. 変形核ハートリーフォック計算

2.1 定式化の概要

A 個の核子でできている原子核の基底状態は、フォック空間でのベクトルとして考えられるが、ハートリーフォック計算ではこれを個々の核子の波動関数 ϕ_i の Slater determinant Φ によって表す。

$$\Phi(x_1, x_2, \dots, x_A) = \det |\phi_i(x_j)| / \sqrt{A!} \quad (1)$$

ここで x_i はフェルミ粒子としての核子が持つ空間、スピン及び荷電スピン座標を意味する。

この系の全エネルギーの期待値は次のように運動エネルギーと相互作用エネルギーの和としてかける。

$$E = \langle \phi | T+V | \phi \rangle = \int H(r) d^3 r \quad (2)$$

ここで相互作用Vは2体及び3体が関与する部分からなっている。Skyrme⁵⁾は2体相互作用の部分を実距離展開を用いて簡単化を行い、これを2つの核子のOverlap density、相対運動量、及びスピンの和によって表した。3体相互作用の部分は3つの核子のOverlap densityだけによると仮定されている。このSkyrme相互作用を用いるとエネルギー密度H(r)は核子密度 $\rho_q(r)$ 、運動エネルギー密度 $\tau_q(r)$ 及びスピン密度 $J_q(r)$ の解析的な関数としてかける⁶⁾。これらの量は核子の波動関数に次のように依存する。

$$\rho_q(r) = \sum_i |\phi_i(r, \sigma, q)|^2$$

$$\tau_q(r) = \sum_i |\nabla \phi_i(r, \sigma, q)|^2 \quad (3)$$

$$J_q(r) = (-i) \sum_i \phi_i^*(r, \sigma, q) [\nabla \phi_i(r, \sigma, q) \times \langle \sigma | \sigma | \sigma \rangle]$$

エネルギー密度の式は、一般的には少し複雑になるので、中性子数(N)と陽子数(Z)が等しい場合の表式を例として次に示す。

$$H(r) = \hbar^2 / 2 m \tau + 3 / 8 t_0 \rho^2 + 1 / 16 t_3 \rho^3 + 1 / 16 (3 t_1 + 5 t_2) \rho \tau + 1 / 64 (9 t_1 - 5 t_2) (\nabla \rho)^2 - 3 / 4 W_0 \rho \nabla \cdot J \quad (4)$$

ここで t_i 等は現象論的に定められたパラメータで、広い範囲の安定核の基底状態を調べることによっていくつかのセットが得られている。ハートリーフォック方程式は式(2)に核子の波動関数による変分原理を用いることによって次のように得られる。

$$[-\nabla \cdot \hbar^2 / (2 m^*_q(r)) \nabla + U_q(r) + W_q(r) \cdot \nabla \times \sigma] \phi_i = \epsilon_i \phi_i \quad (5)$$

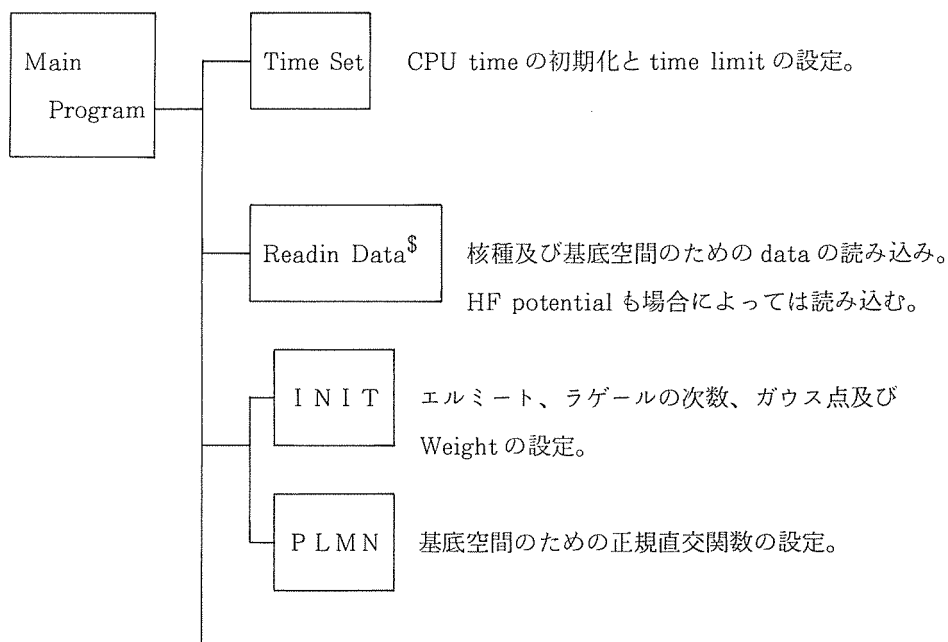
ここで有効質量 $m^*_q(r)$ は核子密度 $\rho_q(r)$ だけに依存する量である。一方ポテンシャル $U_q(r)$ は運動エネルギー密度 $\tau_q(r)$ 及びスピン密度 $\nabla \cdot J_q(r)$ にも依存する。通常このポテン

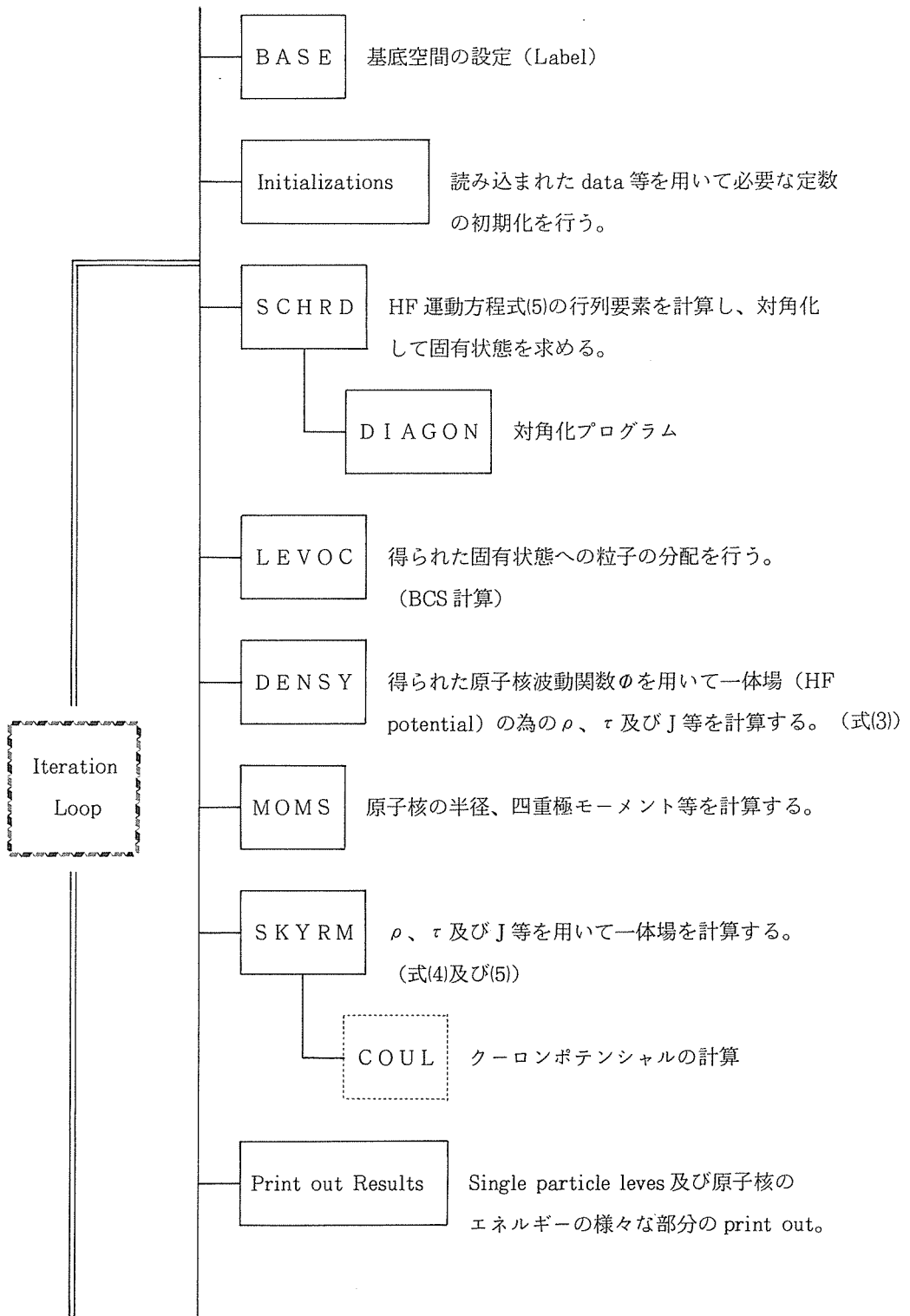
シャルにはクーロン相互作用も含まれている。スピナー軌道ポテンシャル $W_q(r)$ は核子密度 $\nabla\rho_q(r)$ とスピン密度 $J_q(r)$ でかけている。

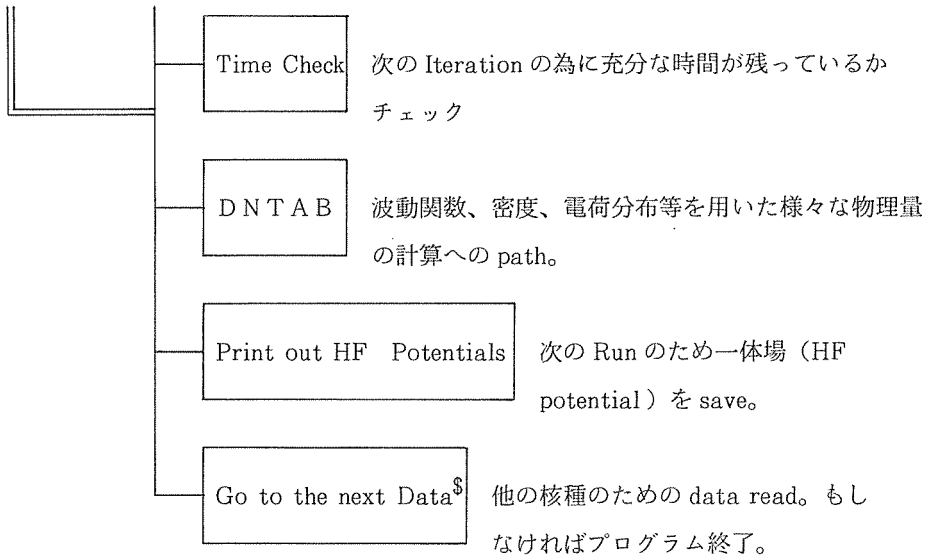
変形核に対して運動方程式(5)を解く場合、我々は通常時間反転に対して不変かつ軸対称に変形している状態を考える。この軸対称に変形している系を解くために、対称軸とそれに直行した2次元成分に分解し、異なった scale の調和振動子の固有関数で状態を記述する。即ち、ハートリーフォックの波動関数をエルミート多項式とラゲール陪関数によって展開し、その展開係数による固有値問題を解く。従って、このハートリーフォック計算における基本となる量である $\rho(r)$ 、 $\tau(r)$ 、 $\nabla^2\rho(r)$ 等の密度を式(3)等を用いて計算する際に、この基底空間を張る足による二重の和を行わなければならない。同様のループ計算は、2次元の空間上で定義された ρ 、 τ 、 J 等を用いて固有値問題を解くときの行列要素を求めるためにも、また得られた固有状態によって一体場を計算する場合にも必要である。変形核ハートリーフォック計算においてこの部分が最も重要な部分であり、また最も計算時間を消費する。

2.2 プログラムコード

実際に用いたコードは Dominique Vautherin (フランス オルセイ)⁶⁾ によって作られ、後にカナダのマクマスター大学⁷⁾で minor な修正が加えられたものである。このプログラムのブロックダイアグラムを示すと次のようになる。







このプログラムによって数多くの原子核における結合エネルギー、荷電分布及び密度分布が計算されてきている。又四重極モーメント、変形核の同一回転バンド間における四重極遷移振幅なども計算されてきている。最近では電子散乱において測定される電氣的及び磁氣的形状因子が計算されている。

ここでは、第四章にベクトル計算の例として Neutron-rich な原子核における 2 中性子分離エネルギーの計算を行い、最近得られた実験値との比較を行う。

3. ハートリーフォック計算のベクトル化

ベクトル計算ではループ計算がそのベクトル化そして高速化の対象となるので、この変形核ハートリーフォック計算のコードのループの部分に限って話を進める。ハートリーフォック計算における特徴的なループは原子核の核子数（もっと正確に言えば原子核の一体場を記述するのに必要な状態数）によるものと、それぞれの状態を記述するために必要な基底の空間の大きさによるものの二つがある。普通ハートリーフォック計算においては Skyrme 力に代表される様な密度依存力を用いている為、これらのループは複雑に絡み合わなくて基底空間を張るためのループが常に内側に位置する。この原子核の空間は、Z 軸（対称軸）とそれに直行した面（X-Y 平面）の二つの自由度によって変形の自由度が入るように張られている。このコードではこれらのループ以外に中性子と陽子の自由度による大きさ 2 のループがこれに前後して存在する。

これらのループはハートリーフォック計算に特徴的であるばかりでなく、同時にその計算時間の大きな部分を占めている。従ってこの計算のコードは元々ベクトル計算に適した形をしている。

事実ベクトル計算をするに当たって筆者が行った修正は、最も内側に位置していた陽子中性子のループを基底空間のループの外側に置いたことがそのほとんどである。ベクトル計算による高速化のため別のアルゴリズムを作成して新しくループを作る必要はなかった。他に行った minor な修正は compiler によって設定されたループ長に関するものだった。ループ長が不定の時ループ内にある array の大きさによってループ長が設定される。Equivalence 文によってつなげられた小さな array を用いて arrays 全体の処理を行っていたため、実行段階で止まってしまった。このための若干の修正が必要であった。

さてこの様な修正によって得られたプログラムの主な subprogram に関して表 1 にベクトル化率が示されている。これは例として ^{28}Si の原子核について計算を行ったもので、SX-1 のベクトルアナライザーによって得られたものである。但しこれらの数字は最も内側のループの大きさによって若干異なってくる。ここにあげた値はループサイズが10の場合のものである。

表 1

	TIME(%)	EXEC COST(%)	V.RATIO	V.LOOP RATIO	V.OP.RATIO
COUL	8.21	3.14	98.47	100.00	93.0
DENSY	44.83	56.25	89.14	100.00	87.5
DIAGON	12.40	9.36	80.94	98.32	70.1
SCHRD	26.14	30.53	91.91	99.94	82.1

また異なる compiler による消費時間の比較も行った。この結果は表 2-1 に秒単位で示されている。一番右の欄には A P と C P の速度の比を示した。表 2-1 における消費時間の測定はプログラム内におかれた clock によって行われていて、subprograme 単位よりはむしろ計算ブロック単位で測られているため表 1 の分類と少し異なる。しかしながら最も時間がかかる部分の内の 3 つは互いに一致しているため、表 1 と 2-1 による比較検討が行える。この 3 つの場合について C P と A P に於て消費した時間の比を V.OP.RATIO (α) の関数としてプロットすると大体

$$T_{CP}/T_{AP} = \{ (1 - \alpha) + \alpha / r \}^{-1} \quad (6)$$

の曲線の上に乗る。これによって得られたベクトル/スカラ性能比 r の平均値は約 6 であった。

この例で用いられた最も内側の基底空間のためのループの大きさは10であるため、この r の値は大きな原子核において必要なより大きな基底の元で計算すると更に大きくなることが予想される。

ループの大きさを16にした計算を ^{40}Ca の場合で行ったが、この場合のベクトル/スカラ性能比 r の平均値は15以上になった。このときの計算時間の比較を表 2-2 に示す。ちなみにここで最も効率の良かった function COUL は、ベクトル化可能な IF 文を 2 つ含んだ 1 つの二重ループだけで構成されている。また最も時間のかかる DENSY で V.Loop Ratio は 100 % あるのに V.OP.Ratio が 90% に満たないのは、このルーチンはその主要部分が二つの自由度による二重ループで構成されているが、この内の外側のループが GO TO 文及び WRITE 文を含んだ IF 判定をしている為にベクトル化されていないからだと思われる。ループサイズをもっと大きくすれば当然この Ratio は 90% を越えると考えられる。ACOS、CP 及び AP の各々でループサイズが 10 と 16 の場合の計算時間の比を Iteration 全体の時間についてとると、前者の二つの場合はどちらも 20 前後であるのに対して AP の場合は 13 近くまで小さくなっていることが分かる。

表 2-1

Parts\Processor	ACOS	CP	AP	CP/AP
BASE and READIN	0.062	0.032	0.013	2.46
MAT.EL	0.542	0.194	0.076	2.55
DIAGON N	0.094	0.043	0.018	2.39
P	0.110	0.047	0.020	2.35
LEVOC	0.021	0.008	0.002	4.00
DENSY	0.848	0.460	0.132	3.48
COUL POT.	0.348	0.118	0.024	4.92
NEW POT.	0.008	0.004	0.003	1.33
TOTAL INT	0.357	0.123	0.027	4.56
TOTAL for ITERATION	1.980	0.880	0.276	3.19

表 2 - 2

Parts\Processor	ACOS	CP	AP	CP/AP
BASE and READIN	0.096	0.050	0.020	2.50
MAT.EL	12.693	4.950	1.198	4.13
DIAGON N	1.736	0.961	0.215	4.47
P	1.784	0.981	0.215	4.56
LEVOC	0.042	0.019	0.004	4.75
DENSY	20.227	11.258	1.962	5.74
COUL POT.	2.260	0.761	0.104	7.32
NEW POT.	0.027	0.012	0.007	1.71
TOTAL INT.	2.289	0.774	0.112	6.91
TOTAL for ITERATION	38.780	18.946	3.706	5.11

4. 2 中性子分離エネルギーの計算

さてここで、このハートリーフォックのコードを用いた計算例を紹介する。最近フランス及びアメリカのグループ等によって中性子を余分に持った軽い原子核の 2 中性子分離エネルギーが測られている¹⁾²⁾。この 2 中性子分離エネルギーは、核子数を A、原子数を Z とする原子核の質量を $M(A,Z)$ 及び中性子の質量を m_n として次のように定義されるものである。

$$S_{2n} = -M(A,Z) + M(A-2,Z) + 2 m_n \quad (7)$$

この測定された原子核の領域では、質量数が変わるにつれてその形は丸いものから変形したものへ、或はまた丸いものへ戻るといった変化をする。ただ一つの相互作用から出発してこれらの変化に富んだ原子核の基底状態を調べるには、この変形核ハートリーフォック計算がうってつけである。詳しいことは省いて結果だけを紹介する⁸⁾。

図 2 に計算された 2 中性子分離エネルギーを、原子核の中性子数の関数として実験値²⁾と一緒に示した。白丸が最近測定された不安定核のデータである。1つの線は1つのアイソトープ（同じ陽子数を持った原子核）に相当し、実線は実験値、破線は計算値を結んだものである。計算の都合上理論値は A、Z 共に偶数の場合だけを図 2 に載せている。これらの計算において式(4)の t_i 等

のパラメータセットは、Skyrme 3 と呼ばれるものを用いている。又これらの計算値はループの数が16の場合の値である。これらの線がぎくしゃくして滑らかな質量数依存性を示していないのは、原子核の Shell effect に加えて変形の度合が中性子の数と共に大きく変化しているためである。

O と Ca の各々のアイソトープで $N = 8 - 10, 20 - 22$ の所にみられる大きな分離エネルギーの差は、ここを境にして原子核の殻が閉じているために起こる。この為に 8, 20 などの数字を(陽子数と中性子数の両方で)魔法数と呼ぶ。ところが、たとえ中性子の数が 20 でも、陽子の数が 20 よりもかなり小さい場合(つまり Mg や Si 等の不安定核)には、このような分離エネルギーの大きなギャップはみられない。このことを魔法数の消滅という。この傾向は一方の核子数が 8 の場合の不安定核でも見られる。

この計算では、 ^{22}C 、 ^{26}O 、及び ^{32}Ne (^{34}Ne) が Neutron drip line に非常に近いところで存在する可能性のあることを示している。 ^{22}C 、 ^{30}Ne までは確認されているようだが、その他にここにあげた原子核については(筆者の知る限り)まだ確認の報告はない。ハートリーフォック計算では中性子数が 22 を越えると Ne, Mg, Si 等で変形度が急激に増加する。それが原因となって、 $N = 24$ の分離エネルギーが 22 以前に比べてほんの少ししか減少しなくなる。(Mg の場合には増加している)。この辺りの原子核が測定できるようになって、変形の度合まで分かるようになれば、これらの理論計算との比較は非常に興味深くなるであろう。

Ne, Si 及び Ar の安定核の辺りで、ハートリーフォックの計算は実験をあまりよく再現していない。これは、これら一体場近似の計算では入っていない近距離相関 (α 相関) の為であると考えられている。例えば ^{20}Ne は $^{16}\text{O} + \alpha$ として記述した方がよりよく説明されることが分かっている。また α 粒子 (^4He) 自身もハートリーフォックでは説明できないことはよく知られている⁴⁾。

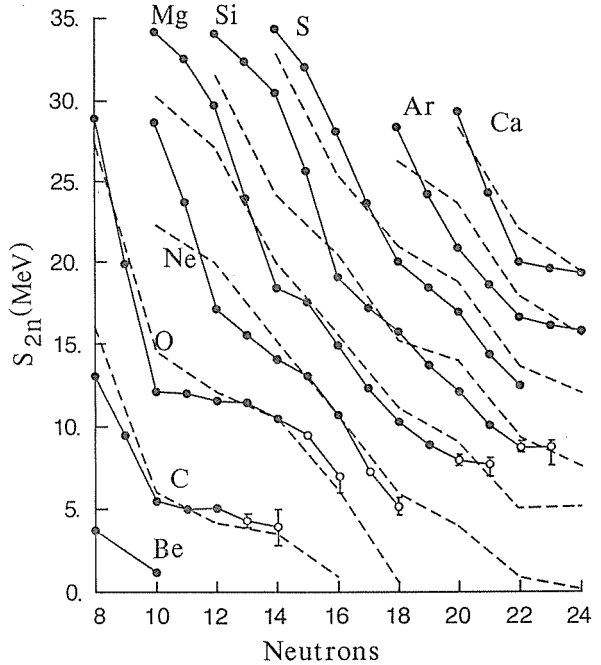


図 2

2 中性子分離エネルギー以外にも、核半径、変形度、個々の核子のエネルギースペクトルなど興味ある研究対象は多い。特に核半径については、C以下の軽い原子核で測られるようになってきて³⁾、筆者も得られた実験データと変形核ハートリーフォック計算の比較及び分析を現在行っている段階である。

5. おわりに

ここで示した計算は軽い原子核が対象であるためひとつひとつの計算はそんな大きな物ではない。これらの計算例における次元数（ループの大きさ）は10ないし16である。ベクトル化におけるループサイズの判定基準が5であることから分かるように大きなベクトル化の効果が期待できる場合ではない。しかしながらこの場合でも ACOS にくらべて既に10倍程度早くなっており、しかも図2の計算全体で八千秒程度消費していることを考えると、ベクトル計算による高速化が本質的な問題として関わっていることが分かる。²⁰⁸Pb の様な重い原子核になれば、より信頼性のある計算をするためにループサイズをもっと大きくしてやる必要がある。この様な計算においては、ベクトル演算による高速化が威力を一層発揮すると同時に避けたい課題になる。

現在までに、この SX-1 のベクトル計算用に開発したプログラムについて研究会あるいは報告書の形で、既にいくつか報告されている。その多くはアルゴリズムのレベルから、もしくは少なくともプログラムの構造を、大幅に変更することによって得られたベクトル化の効果を報告したものであった。しかしながらここで紹介した例は、既にループ構造が元々本質的な部分をつくっている計算であり、ベクトル演算用の変更は殆ど minor なものであった。ベクトル演算が威力を発揮し始めるのは V.OP.Ratio が90%辺りからであるが（式(6)、文献9)）、この条件がまだ十分に達成されていないサブルーチン（DENSY, SCHRED 等）を元々の構造から変更することによってベクトル化率を高め、もう少し計算速度を速くする余地は残っている。あえてこのような minor な変更にとどめたのは、この段階で初期の目的である高速化が充分得られていることと、プログラム管理に余分な神経を使わなくてよいことなどが理由である。プログラムによっては、ここに紹介したように非常に簡単にベクトル演算に適した変更ができるということ、スーパーコンピューターを使ったことのない人にまで広く知って頂けるとしたら（多くの方は既にご存じだとしても）、これをもって非常に未熟な形でしか SX-1 を使い切れていないこと、及び怠惰なベクトル化しかなかったことに対する筆者の自己弁護にさせて頂きたい。

最後に、筆者にとってこれらの計算が ACOS 及び SX-1 を使用する殆ど始めての機会であった。システムに不慣れな分、多大に田村圭介（阪大・理・森田研究室）、越桐国雄（大阪教育大・理）の両氏にお世話になった。ここに厚くお礼を述べたい。

参考文献

- 1) D.J. Vieira et al., Phys. Rev. Lett. 57(1986)3253.
- 2) A. Gillibert et al., Phys. Lett. 192B(1987)39.
旭耕一郎 日本物理学会誌 42(1987)799.
- 3) I. Tanihata et al., Phys. Rev. Lett. 55(1985)2676 ; I. Tanihata, preprint RIKEN-AF-NP-59 and private communications.
- 4) H. Sagawa and H. Toki, J. Phys. G13(1987)453.
H. Sato and Y. Okuhara, Phys. Rev. C34(1987)61.
- 5) T.H.R. Skyrme, Phil. Mag. 1(1956)1043; Nucl. Phys. 9(1959)615.
- 6) D. Vautherin and D.M. Brink, Phys.Rev. C5(1972)626.
D. Vautherin, Phys. Rev. C7(1973)296.
- 7) D. Berdichevsky et al., to be published.
- 8) M. Nishimura, to be published.
- 9) 渡辺貞 他、スーパーコンピュータSX-1の概要、大阪大学計算機センターニュース、Vol.15, No.4 (1986).

