



| | |
|--------------|---|
| Title | スーパーコンピューターと不安定原子核・超重核 |
| 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, 69, p. 39-44 |
| Version Type | VoR |
| URL | https://hdl.handle.net/11094/65776 |
| rights | |
| Note | |

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

スーパー コンピューターと 不安定原子核・超重核

大阪大学 核物理研究センター 西 村 道 明

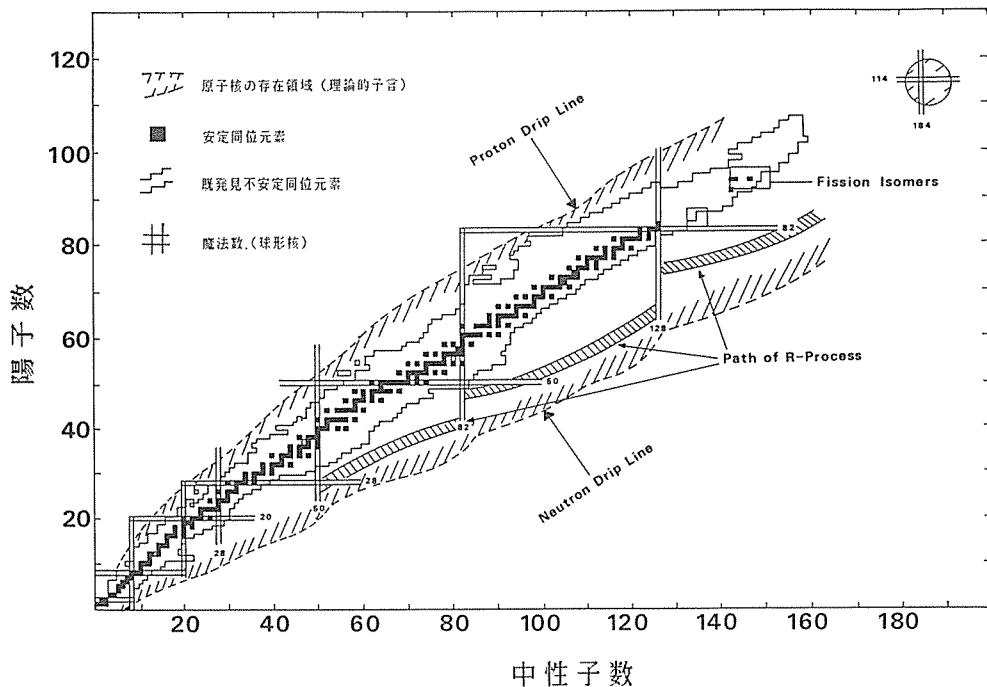
1. はじめに

近年スーパー コンピューターの導入による計算速度の飛躍的な向上によって、様々な分野での研究及び計算機用途に質的な変化をもたらしつつある。そのスピードゆえにして初めて実用できる対象として例えば天気予報が上げられる。現時点までの気象データをインプットして例えば明日の朝の天気を予測する場合、計算速度が十分でなければ次の日の午後になってやっと今日の朝は雨だったという結果しか得られないことになる。計算の原理そのものは複雑でなくとも、より精密な予測を必要とするための大容量のデータを用いた計算が必要であり、計算スピードが要求されるのである。

筆者の研究分野である原子核物理においては上の例のような計算機の速度が直接的な理由で要求される事は滅多はない。我々の研究速度からして半日（あるいは一日）遅れで結果がでたとしてもなんら差障りはない。むしろ第二義的な理由、計算費、の制約によって我々の研究手法が限られてくる事がしばしば問題になる。一体場近似の方法によるハートリーフォック計算に話を限って進めるならば、我々の良く知っている安定な原子核で質量数が200程度のものぐらいまでは、スーパー コンピューターでなくても計算可能であった。しかしながらまだ我々がその存在を確認していない超重核（質量数～300）、あるいは中性子と陽子の数が極端に異なる非常に不安定な原子核になると多大な計算のための基底空間が要求され、従ってスーパー コンピューターでないと（先の第二義的な意味で）計算ができないことになる。

このような原子核物理における計算はただ単により大きな空間で計算できるかできないかという問題にとどまらない。それは新しい実験データとこれらの計算を疊み合わせながら、原子核を作り上げる強い相互作用について我々が現在理解していることに対する精密化及び修正等を安定な原子核では得にくい良い効率で行うことができる、即ち質的に新しい展望にたった研究が行える事を意味する。このため現在日本¹⁾、フランス²⁾ 及びアメリカ³⁾ によって進められている重イオシンビーム核反応による不安定核の実験⁴⁾ とあいまってスーパー コンピューターによるハートリーフォック計算は現時点で最も重要なものの一つとして考えられている。

図1として原子核図と呼ばれるものを示した。安定な原子核はこの図で黒く塗りつぶされたほぼ一つの線上に乗っている。中性子過剰核と呼ばれる不安定原子核はこの線より下方でNeutron Drip Lineまでの間にあり、最近の実験ではかなりこのLineに近いところまで調べられるよ



うになってきている（但し陽子数<20）。右上に丸く囲ってあるのは存在するかも知れないと考えられている超重核の“島”を示している。

ここではこれらの中性子過剰核及び超重核の研究においてスーパーコンピューターの果たし得る役割について考察してみる。第2章にここで用いた変形ハートリーフォック計算のコードについて簡単に紹介する。第3章では基底空間を大きくした場合にSXでどの程度時間を消費するかを示して、超重核の計算の可能性を議論する。第4章ではSXを用いて計算した中性子過剰核の変形度・核半径の結果について紹介する。

2. 超重核（不安定核）へのプログラムコード

SXで用いた計算コードは変形核ハートリーフォックプログラムと呼ばれるもので、原子核が変形することの多様性を柔軟に追って行ける計算コードになっている。不安定な原子核及び超重核においては通常の安定な原子核以上に変形している可能性があり、このようなコードが必要になる。このハートリーフォック計算の定式化及びプログラムコードの概要については、第4回SXプログラミング研究会の際に紹介しているので資料⁴⁾を参照されたい。SXのためのベクト

ル化に付いても本質的に同一であるので説明を省略する。文献 4 を参照されたい。

ここで新しく行った変更は、超重核にも適用可能にするために基底空間を任意の大きさに設定できる様にした事である。オリジナルなコードでは事実上基底空間を張る直交関数の次数は 10 ~ 16 の間の値しかとれなかった。原子核が大きくなればなるほどそれを入れる器である基底空間も大きくする必要がある。超重核でなくとも非常に重たい原子核になればどの程度の基底空間で十分かという判断はしにくいが、ここではこの大きさを 20 として SX でどの程度の計算時間が必要であるか、また実際の超重核の研究において信頼性の高い計算を行うことが現在の計算機で可能かどうかなどの議論をする。不安定核である中性子過剰核を調べる際にはたとえ原子核の質量数が小さくとも通常の原子核に比べて大きく変形している可能性があり、様々な原子核の変形のもどうを正しく追って行くためにはやはり大きな基底空間が必要である。いくつかの中性子過剰核でこのコードによって計算した半径・変形度についてもその結果を簡単に紹介する。

3. 超重核（広い基底空間）でのベクトル計算

超重核の研究のためにループ長を 20 とした場合の計算速度をここで紹介する。文献 4 で紹介したベクトル計算の結果と比較しながら、より大きい基底空間での計算の可能性を議論する。

表 1 にこのハートリーフォック計算における各計算部分に要した時間を秒単位で示した。比較のためにループ長が 10 及び 16 の場合も並べて示している。これらの計算ではループ長が 10 、

表 1

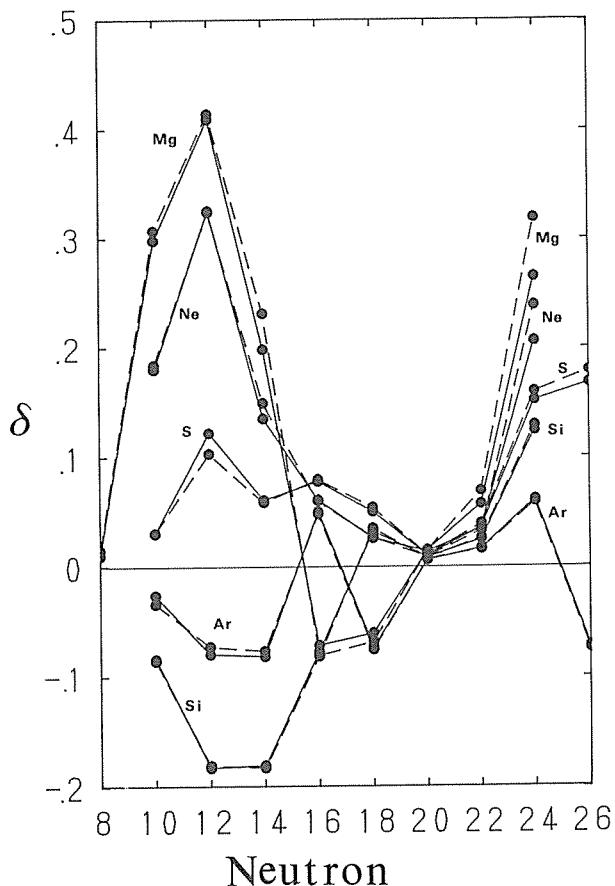
| Parts \ ループ長 | 10 | 16 | 20 | 20/16 |
|---------------------|-------|-------|--------|-------|
| BASE and READIN | 0.013 | 0.020 | 0.036 | 1.80 |
| MAT. EL | 0.076 | 1.156 | 4.433 | 3.83 |
| DIAGON N | 0.018 | 0.204 | 0.631 | 3.09 |
| P | 0.020 | 0.203 | 0.638 | 3.14 |
| LEVOC | 0.002 | 0.004 | 0.033 | 8.25 |
| DENSY | 0.132 | 1.854 | 7.596 | 4.10 |
| COUL POT. | 0.024 | 0.099 | 0.197 | 1.99 |
| NEW POT. | 0.003 | 0.007 | 0.011 | 1.57 |
| TOTAL INT. | 0.027 | 0.106 | 0.208 | 1.96 |
| TOTAL for ITERATION | 0.276 | 3.529 | 13.540 | 3.84 |

16及び20と異なる各々で計算する対象の原子核をSi、Ca及び超重核（質量数=298）と変えてある。ベクトル化率、ベクトル計算の速度等を議論する際にはループ長以外の条件と同じにしておくべきだが、この場合現実の原子核（超重核）の計算が可能かどうかを見るためにはこのような条件で考察した方が良いと考えられる。但し計算時間そのものは、ループ長と同じにしておく限り対象の原子核を（例えば超重核からCaに）変えたとしても大きな変化はない。

表1の計算時間はハートリーフォック計算の一回だけの iteration についてのものである。

一つの Iteration 全体の時間についてそれぞれループ長が10、16、20と増加するにつれて増大する時間の比をとると、10から16の場合約1.3、16から20の場合約1.4と大幅に小さくなっている。ACOSあるいはスカラープロセッサーの場合この増加率はほぼ2.0と一定であることを考えると（文献4参照）ベクトル計算の効力が大きく発揮されていることがわかる。ループ及び演算のベクトル化率についてはループ長が16の場合から余り変化していないので、ここではそれらの数字は載せない（文献4参照）。

ループ長が20の場合に対する一回の iteration では約1.3～1.4秒という短い時間で計算が終了しているが、収束した答えを得るまでには最低数10回、普通（構造がよくわかっていないものに対して）100回程度はこの iteration を繰り返す必要がある。従ってループ長を20より少し大きくして収束した答えを得ようとすると、全体の計算で約一時間弱のRUNが必要であることがわかる。超重核の研究を行うには有効相互作用のいくつかのセットによって、超重核の島の辺りのいくつかの原子核を調べる必要があるので、この研究全体には少なくともこれの数10倍は計算時間が必要である。今回のprojectでは結果らしい結果を出すには無理であった。このような計算はただやみくもに行うのではなく、将来このような領域



で可能となるであろう重イオン反応等の実験と歩調を合わせて進めることが重要である。このように困難はまだ存在するが、S X によって超重核の計算がほとんど現実に可能になりつつあることをここでの解析は示している。

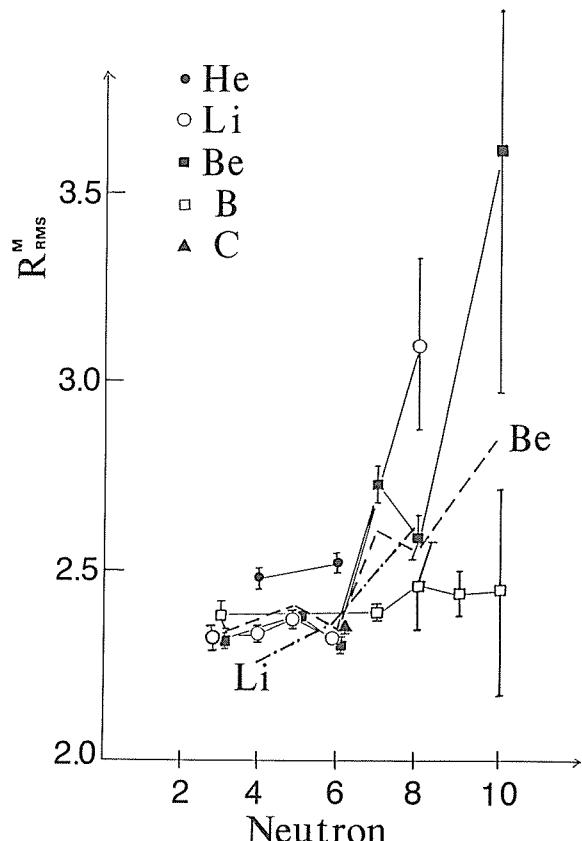
4. 不安定原子核（中性子過剰核）の半径及び変形度

中性子過剰核の様な不安定な原子核になると、外側の中性子が非常に柔らかくなつて様々に変形する可能性がでてくる。実験的にもまだ調べられていない領域のために、どの様に変形しているかいろいろな可能性を調べる必要がある。このような場合当然大きな基底空間で調べる必要がある。普通原子核が変形する場合、葉巻型に変形する場合と皿型に変形する場合の二つの可能性が同じ様な確率で存在する（ポテンシャルの深さがほぼ同じぐらいになる）ため狭い基底空間で計算を行うとその変形の型に対する判断が間違ってしまうからである。

図2にハートリーフォック計算で得られた変形度の計算結果を示す。正の δ は葉巻型の変形、負の δ は皿型の変形を意味する。これらの原子核は安定な領域でかなり変形している原子核であるが、中性子の数が多くなつて20程度になると球形になりそれ以後はまた大きく変形するようになっている。この再び大きく変形する辺りが Neutron drip line であり、外側の中性子の層はかなり柔らかくなつていると考えられる。このような変形を実験で測られるようになると、より興味深い研究の可能性が広がると思われる。

図3に軽い中性子過剰核の半径の実験値とハートリーフォック計算の結果⁵⁾を示した。実験値は谷畠達¹⁾によって得られたものである。特に Be のアイソトープに関しては実験値の中性子数の関数としての振舞いがよく再現されている。ここで

¹¹Be (N = 7) の半径が¹²Be (N = 8) の半径より大きくなつてるのは¹¹Beの原子核が大きく変形しているためである。殻模型の立場でこの



原子核のスピン及びパリティを考えると $1/2^-$ となるが、実験で測定されたものは $1/2^+$ であった。この変形ハートリーフォック計算では ^{10}Be が大きく変形していることのためにスピン・パリティが正しく $1/2^+$ になる事が理解できた。

一方 ^{11}Li の原子核の半径はあまり良く再現されていないと思われる。この原子核では変形核ハートリーフォック計算でも球形にしかならず、大きな核半径を得ることができない。このような Neutron drip line の近くの原子核では連続状態からの寄与が（安定核の場合と違って）大きくなることが考えられる。これは従って一体場近似を元にしたハートリーフォック計算には含まれていない短距離相関の効果をきちんと取り入れなければ実験値を正しく再現できないことを意味する。このような意味で第1章に述べたように Neutron drip line の近くの原子核の研究は（この例では原子核半径を調べることによって）我々が蓄積してきた有効相互作用の精密化及び修正を効率良く進めると期待される。

5. おわりに

この報告では最近進められている原子核の一つの研究分野である中性子過剰核及び超重核を例にとってスーパーコンピューターの能力・果たし得る役割について考察した。ハートリーフォック計算による超重核の計算が SX によって現実に可能なレベルになっていることを示した。また中性子過剰核でのスーパーコンピューターによる変形ハートリーフォック計算が非常に重要な事と、変形度・核半径の計算結果をいくつかの原子核を例にとって紹介し、neutron drip line 近傍の原子核の構造の発現が核内核子間の有効相互作用に非常に敏感である事から、有効相互作用の研究に大きな役割を果たし得ることを示した。

最後に、いくつかの trouble shooting の際に田村圭介氏（阪大・理・森田研究室）のお世話をした。ここに厚くお礼を述べたい。

参考文献

- 1) I. Tanihata et al., Phys. Rev. Lett. 55 (1985) 2676; I. Tanihata, preprint RIKEN-AF-NP-60 and private communications.
- 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) D. J. Vieira et al., Phys. Rev. Lett. 57 (1986) 3253.
- 4) 西村道明 大阪大学大型計算機センターニュース Vol. 17 № 4 1988-2
- 5) M. Nishimura, Third International Conference on Nucleus Nucleus Collisions, Saint-Malo France, June, 1988, Contribution Paper.