

原子核のための大規模線形ならびに非線形計算

概要

原子核の励起状態を求めるための比較的大型の計算例を、技術的な面に比重をおいて示す。用いられる方法は準粒子乱雑位相近似である。主要な部分の方程式は、ハミルトニアン行列の固有方程式であり、その行列要素の計算が最も計算量を要する部分で、スケール化した大規模並列計算によって求められる。行列要素計算の前の段階で、非線形方程式も解かれる。

キーワード

原子核、準粒子乱雑位相近似、Hartree-Fock-Bogoliubov 近似、非線形問題、対角化、MPI、スケール性

1. 序

本報告で紹介する計算の目的は、原子核の励起状態のエネルギーと基底状態への遷移強度を求めることで、用いる方法は準粒子乱雑位相近似 (QRPA) であり、そこで用いられるエネルギー密度汎関数 (相互作用) はスキルム型 (接触相互作用、核子の粒子-空孔相関に用いられる) と接触型対エネルギーである。計算可能な原子核は、陽子数、中性子数がともに偶数で、軸対称変形 (球形を含む) をもち、かつパリティが保たれるものに限られる。この制約のもとで、計算資源が許す限り、どんなに大きい質量数の核も計算可能である。本報告では主に ^{172}Yb (陽子数70、中性子数102) の計算過程の技術的な詳細を示す。プログラムで用いられる言語はfortran90とMPIであり、以下に示すcpu-hourは、Cray XT-5を用いた例である。理論の数学的性質を利用したこのプログラムの詳細なチェックは文献[1]に示されている。

最終的なアウトプットを得るまでに用いられる主要なプログラムは四つである。第一は基底状態を求めるためのもの (第二節参照)、第二は、QRPA ハミルトニアン行列要素を計算するプログラム (第三節参照) である。この段階が最も計算量が多く、そのスケール性が重要である。この性質は第四節で示される。その次の段階はハミルトニアン行列の対角化 (第五節参照)、そして最後はその解を用いた遷移強度の計算である。

2. 基底状態

計算の第一段階は、基底状態を求めることで、これはハートリー-フォック-ボゴリューボフ近似によって行う。説明の簡単化のため、対相関とフォック項を無視した力学方程式をかくと、それは一核子波動関数 $\varphi_i(\mathbf{r})$ に対して、

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + v(\mathbf{r})\right\}\varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\varphi_i(\mathbf{r}), \quad (1)$$

とかかれ、 $v(\mathbf{r})$ は核によってつくられる一体場

$$v(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{r}' V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\rho(\mathbf{r}'), \quad (2)$$

である。ここで、 $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は核子間の二体相互作用であり、 $\rho(\mathbf{r})$ は、核の一体密度分布で、0でない占拠確率をもつ $\varphi_i(\mathbf{r})$ の寄与の和である。 $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ と $v(\mathbf{r})$ はスピン演算子を含む。

計算にとっての要点は、方程式(1)が非線形ということで、私の用いているプログラムでは、反復法によって解かれる。すなわち、ある $\varphi_i(\mathbf{r})$ を用いて $\rho(\mathbf{r})$ を計算し、それを用いて $v(\mathbf{r})$ を求める。次にそれを代入することによって方程式(1)を解き新しい $\varphi_i(\mathbf{r})$ を求め、この過程を $\varphi_i(\mathbf{r})$ が収束するまで続ける。この方法で必ず解が求まるという数学的保証はないが、経験的には、以下のような工夫をすることで、解はいつでも得られる。

- 1) なるべく解に近い初回の波動関数を選ぶ。これは原子核の現象論的一体場から求められる。
- 2) 反復過程を新旧密度の混合によって遅らせる。これは、新しく求めた密度分布 $\rho_{\text{new}}(\mathbf{r})$ とその前の $\rho_{\text{old}}(\mathbf{r})$ をある割合で混ぜて次の段階に進むというやり方で、例えば、

$$0.8\rho_{\text{old}}(\mathbf{r}) + 0.2\rho_{\text{new}}(\mathbf{r})$$

のように、古いほうの割合を大きくするのが普通である。 $\rho_{\text{new}}(\mathbf{r})$ の割合を大きくすると反復過程における $\varphi_i(\mathbf{r})$ の変化が唐突になって解が求まらないことが多い。

軸対称性を利用することによって、数値計算で扱う座標は動径 ϱ と z であり、関数の座標依存性は B-spline を用いて表現される。 ^{172}Yb の計算では、数値計算に用いられる空間の範囲は、 $0 \leq \varrho \leq 20\text{fm}$ 、 $-20\text{fm} \leq z \leq 20\text{fm}$ であり、B-spline のサンプルメッシュポイントの数は、各次元の 0 から 20fm の範囲で、42 である。B-spline は同じ数のサンプルポイントを用いた等間隔メッシュの方法よりも微分や積分の精度がよい。方程式(1)は離散化した座標-スピン表示で 11,000×11,000 の行列 20 個で構成され、対角化によって $\varphi_i(\mathbf{r})$ が求まる。計算に使うため保存される解は全部で 3,500 個位である。この対角化は効率化のため、行と列を半分のサイズにした複素行列化という技法を用いて行われる。150-200 回の反復計算によって十分な精度の解が得られ、一つの核の計算に 20cpu×90-120h=1800-2400 cpu-hour を要している。

20 個の行列の対角化は、それぞれ独立に 1cpu を用いて行われているのであるが、この部分の並列化が今後の課題である。B-spline を用いているため、この行列は非対称で、これを扱える並列ライブラリサブルーチンはない。専門家の支援を要する部分である。

この計算で得られた核の基底状態の一体密度分布と対テンソル（対相関に関係した一種の密度分布）が非書式化ファイルに出力され、次の QRPA 計算で用いられる。このファイルの大きさは高々 1Mb である。 $\varphi_i(\mathbf{r})$ を格納したファイルはテキスト書式で 200Mb 余りである。

3. QRPA—行列要素の計算

次に、これらのデータを用いて QRPA 計算を行うが、この方程式はハミルトニアン行列の固有方程式で表される。そのサイズは粒子空孔励起を表現するため式 (1) のそれよりはるかに大きい。 ^{172}Yb の $K^\pi=2^+$ (K は核の角運動量の z 軸成分、 π はパリティ) 励起状態を求めるのに用いた行列のサイズは、 $56,000 \times 56,000$ である。これは、低励起状態解が収束するまでサイズを拡張した結果である。他の K^π ではこのサイズが 100,000 以上になることもある。ハミルトニアン行列のサイズが $N \times N$ のとき、 $N^2/4$ 個のオーダーの行列要素を計算しなければならない。この行列要素の計算が最も cpu-hour を要する部分なのであるが、それは二体力の行列要素の計算であって、

$$\int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 X_1^\dagger(\mathbf{r}_1) X_2^\dagger(\mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) X_3(\mathbf{r}_1) X_4(\mathbf{r}_2),$$

とかける。 $X_i(\mathbf{r})$ はカノニカル準粒子の波動関数で先にでてきた $\varphi_i(\mathbf{r})$ の 2 倍の数の成分をもつ。ハートリーフォック-ボゴリューボフ計算の際と同様、 $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ の成分の多くが $\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ に比例し、数値計算で扱われる座標は ρ と z なので、大部分の計算は 2 次元積分によって行われる。1cpu で一つの行列要素を計算するのに 0.13-0.16 秒かかっている。

計算の大規模化に伴って考慮や試行錯誤をした点は以下のとおりである。

1) 読み込んだ波動関数のデータの分配には、MPI の集団的通信サブルーチンを用いるのが最も簡単で効率がよい。これらのサブルーチンはアーキテクチャに合わせて最適化されているとの専門家の助言があった。

2) 行列要素の計算時間はどれも同じではなく、ある cpu が比較的長い計算時間を要する行列要素を多く受け持つような偏りがあると他の cpu にはデッドタイムが生じて非効率となる。あらかじめどの行列要素がどれだけの計算時間を要するかわからない状況下で、このようなデッドタイムを極力減らす方法は計算する行列要素の

cpu への割り振りを乱雑化することと考え、ScaLAPACK で用いられるブロックサイクリック分配法に似たやり方を試みたが、その割り振りのための計算時間が無視できず、総合的に効率が上がらないということが判明し採用しなかった。

3) 計算された行列要素は、逐次ひとつのマスタプロセスに集められ、非書式化直接接続ファイルに出力される。後で複数の cpu が一部を読み込むために、この形式のファイルが最も効率がよい。

4) 現在のやり方では、どの cpu も同じ波動関数のデータセットを保持している。用いられた計算機では、1cpu あたり 1.3Gb のメモリーしかなく、もし将来はるかにより大規模な計算を行おうとすれば、このメモリー問題がネックになってくるであろう。この可能性を取り除くため、波動関数のデータセットを分割してそれぞれの cpu にそのひとつのサブセットのみをもたせ、保持していない波動関数が必要になったら他の cpu から送ってもらうというやり方を試みた。結果はその通信に多大の時間がかかりすぎ、このやり方は採用しなかった。空間メッシュ上に表現された波動関数の通信は比較的重い操作であって、その回数は極力減らす必要がある。

4. スケール性

個々の行列要素の計算は独立にできるので、I/O や通信を効率よく行えば、この計算は高度にスケール化可能である。このことを表に示す。

#cpu	#matrix element calculated	Real time (h)	Cpu-sec/matrix element
20,000	7.8×10^8	1.5	0.14
80,000	3.5×10^9	2.0	0.16

二つの計算例（異なる核で得られた）。#cpu はその計算で同時に用いられた cpu の総数、#matrix element calculated は計算された行列要素数、real time は計算実時間、cpu-sec/matrix element は 1 行列要素の計算に要した cpu-sec である。

Cpu の数を 20,000 から 80,000 へ 4 倍増やしたとき、1 行列要素の計算に要した cpu-sec（これは計算速度の逆数といえる）は 14% しか増加しておらず、スケール性は高い。

5. QRPA—ハミルトニアン行列の対角化

この計算は ScaLAPACK のサブルーチン pdsygvx を用いて、第三のプログラムによって行われる。Cpu は、仮想的に二次元上に配置され、各々がハミルトニアン行列の一部を保持する。そこで各 cpu は行列要素データファイルの必要な部分のみを読み込むようにした。直接接続ファイルはこのために必要である。この対角化に要した

cpu 数は $K^{\pi}=2^{\pi}$ の計算で 28×28 で、これは計算速度よりもむしろ 1cpu で使えるメモリー制限から決まった数である。(cpu 数を多くしたほうが 1cpu で必要なメモリーが減る。) $56,000 \times 56,000$ の行列の対角化に入出力を含めて 20 分要する。従って、計算量は 260cpu-hour 程度であり、第一、第二段階に比べてかなり少ない。この部分の計算がスケールしているかどうかは調べていない。得られた固有ベクトルは励起状態を表し、あるカラムの cpu に分割して得られる。これらはマスタープロセスに集められた後、ファイルに出力される。さらにその後このデータを用いた遷移強度の計算が、第四のプログラムによって行われる。この部分については説明を略す。

6. まとめ

本報告では、私が最近開発した軸対称変形核用の QRPA プログラムを用いた計算例を技術的な面に比重をおいて説明した。このプログラム開発ならびに計算において一貫した考えはできるだけ正確に解を求めるということであり、用いられた技術的パラメータ (たとえば空間のサイズ) は、メモリーをできるだけ節約するということよりも、いつでも十分精度よく計算するためにはどれだけ必要かという観点から決められている。計算の効率についていえば、最も計算量の多い行列要素の計算の高いスケール性が強調される。すなわちこの計算は並列計算に適しており、もしいへん強力な並列計算機が使えれば、計算実時間を短縮することによって多数の核の計算が可能である。効率をさらに向上させる余地はまだあるが、プログラム開発にのみ多大の時間を割けないという総合的かつ現実的な理由で、ある時点でその作業を終了した。

参考文献

- [1] J. Terasaki and J. Engel. Phys. Rev. C **82**, 034326 (2010).