

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 5 月 17 日現在

機関番号：12601

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2013～2016

課題番号：25870168

研究課題名(和文)大規模並列計算時代における原子核殻模型計算法の探求と開発

研究課題名(英文) Research and development on the method of nuclear shell-model calculations for massive parallel computations

研究代表者

清水 則孝 (Shimizu, Noritaka)

東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・特任准教授

研究者番号：30419254

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：近年のスーパーコンピュータは大規模並列計算が主流である。これに対応して原子核構造研究を飛躍的に進めるため、大規模並列向けの原子核殻模型計算プログラム「KSHELL」を開発した。このプログラムは、単一ノードのパソコンでも効率的に動作する。このプログラム用に使いやすいユーザーインターフェースを用意し、実験研究者を含む原子核研究者向けに広く公開している。原子核殻模型計算では、固有値問題を解く手法として通常ランチョス法が採用されるが、KSHELLではそれに加えてブロックランチョス法と櫻井杉浦法を実装されるなど多くの機能が実装されている。

研究成果の概要(英文)：In order to use recent massive parallel computers efficiently, I developed a nuclear shell-model calculation code "KSHELL" for massive parallel computation. This code runs efficiently also on a single node. It is equipped with a user-friendly interface and is openly distributed via the internet for nuclear-physics researchers including experimentalists. For solving an eigenvalue problem in nuclear shell-model calculations, I implemented thick-restart block-Lanczos and Sakurai-Sugiura methods in addition to the conventional Lanczos method.

研究分野：原子核理論

キーワード：原子核殻模型 大規模並列計算 不安定核 クリロフ部分空間法

### 1. 研究開始当初の背景

原子核構造の理論研究における有力な手段の一つとして、原子核殻模型計算が知られている。理化学研究所のRI ビームファクトリ加速器施設において不安定核構造の実験研究がさかに行われている中で、殻模型計算による理論研究の重要性はますます増していた。

原子核殻模型計算において量子多体問題を解くことは、巨大な次元をもつハミルトニアン行列の固有値問題を数値的に解くことに帰着される。このハミルトニアン行列は疎行列なので、ランチョス法という効率の良い計算手法が知られている。当時いくつか公開された殻模型計算コードも存在したが、並列計算環境に対応した公開コードはなかった。しかしながら、対角化すべきハミルトニアン行列の次元は活性粒子数の増加に伴って爆発的に増加するため、適用範囲が限られてきた。一方、近年のスーパーコンピュータの発展は、大規模並列化によって支えられており、殻模型計算コードの大規模並列化は急務であった。

### 2. 研究の目的

近年の大規模並列計算機を有効活用できるような原子核殻模型計算のソフトウェア開発と、それに基づいた新たな手法の開発を目的とする。まず、旧来型手法である殻模型対角化コードの大規模並列化をおこなう。開発されたコードをベースにした新たな計算手法の開発をめざし、原子核対角化計算では不可能な領域への適応を可能にする。

### 3. 研究の方法

原子核殻模型計算では、巨大な疎行列となるハミルトニアン行列の固有値問題をランチョス法によって解くことによって原子核の構造を求めることができる。しかしながら、取り扱うべきハミルトニアン行列の次元 (M スキーム配位と呼ばれる量子多体基底の取りうる数に相当) が莫大になることが常に困難としてつきまとう。本研究では、莫大な数の M スキーム配位を一粒粒子軌道占有数で分類し、これを並列に扱うことによって、大規模並列計算ソフトウェアを開発する。さらに、標準的に使われるランチョス法以外のアルゴリズムも検討し、大規模並列計算時代における新たな殻模型計算パッケージの開発をおこなう。

具体的な並列計算の実装方法は、ハミルトニアン行列を、縦・横でプロセスの数だけのブロック行列に分割し、各ブロックを各計算ノードで分担する。メモリー容量節減の観点から、すべての行列要素をメモリーに陽には保存せず、ランチョス法アルゴリズム内の行列・ベクトル積で必要となる分だけをオンザフライで生成するアルゴリズムを採用する。

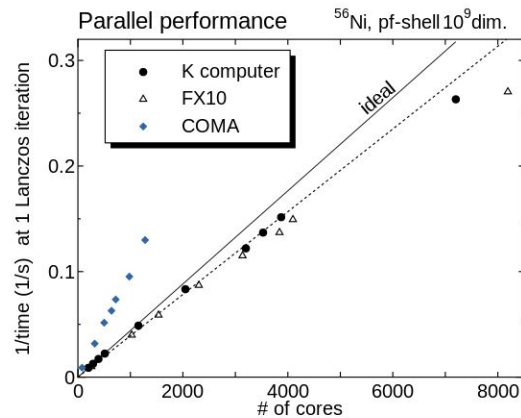
さらに、開発されたコードを用いて大規模

殻模型計算を実行し、これまで計算が困難であった中重核領域のエキゾチックな核構造を明らかにする。

### 4. 研究成果

近年のスーパーコンピュータは大規模並列化され、ソフトウェアに要求される並列数は大きくなる一方である。大規模並列計算機に対応したランチョス法による M スキーム原子核殻模型計算プログラムの作成と、そのプログラムの並列効率の向上を図った。

プログラム開発における進展は、開発解指示はハミルトニアン行列の行方向のみを分割して並列計算をおこなっていたが、これを列方向にも分割して、並列計算するようアルゴリズムの修正をおこなった。この修正により、並列効率が大きく向上し、7000 コア程度までの良好な並列効率を達成した。下図は、ランチョス法においてボトルネックとなる行列・ベクトル積 1 回にかかった時間を、さまざまな並列度で計測したものであり、ストロングスケールと呼ばれる。



横軸に CPU コア数、縦軸に行列積にかかる計算時間の逆数をとったものである。黒丸が京計算機、白抜き三角形が東京大学 FX10 スーパーコンピュータ、青ひし形が筑波大学 COMA スーパーコンピュータ上で計測した計算時間を示す。pf 殻模型空間でのニッケル 56 原子核の計算であり、およそ 10 億次元の行列の固有値問題を解くことに相当している。CPU 数を増やしていくと、それに比例して計算時間が短縮されていることが見て取れる。実際に、FX10 を 8192 コア用いた計算により、前述のニッケル 56 の基底状態の計算を 145 秒でおこなうことができた。

本プログラムを「KSHELL」と名づけ、インターネット上で広く公開している。使いやすいユーザーインターフェースを用意し、バッチスクリプトの生成に対話型インターフェースを設けることや、遷移確率などを直接計算することにより、初学者にも使いやすいソフトウェアを実現している。さらに、マニュアルを日英版両方用意し、その使い方を紹介する講習会をおこなった。実験研究者を含む多数からの問い合わせを受けており、研究者

コミュニティにおいて知名度を得つつある。さらに、1粒子分光学的因子や2粒子分光学的因子、ベータ崩壊の研究に必要なフェルミ遷移・ガモフテラー遷移・第一禁止遷移の遷移行列要素、ニュートリノレス二重ベータ崩壊核行列要素などさまざまな物理量の期待値を計算できるようなコード実装をおこなった。これらの物理量は、エキゾチックな原子核構造の解明や、元素合成過程の理解につながる重要なものである。

実際に、このコードは最先端の中重核構造の理論研究にも使われて着実に成果につながっている。たとえば、カルシウム同位体のE1励起研究に用いられており、微視的な理解を可能とした。

また、中性子過剰領域におけるクロム・鉄の高スピン状態の原子核殻模型計算による解明がおこなわれた。この状態は変形の様態について議論があったがプロレート変形であることを示した。また、硫黄44原子核におけるイラスト4+励起状態が、Kアイソマーになっていることを示すために、本プログラムを用いた解析がおこなわれた。

殻模型計算における固有値問題を解く手法としてランチョス法を採用するのが標準的であったが、Thick-restart Block Lanczos法を実装し、計算の効率化を図った。32本のベクトルをまとめてブロック化し、行列・ベクトル積を同時に実行することにより、pf殻を模型空間とするクロム48の殻模型計算の例では、行列-ベクトル積1回あたりの速度を4.6倍(Intel CPU)、9.5倍(京コンピュータ)に高速化した。このブロック化されたコードは、櫻井杉浦法をベースとした確率的な固有値密度推定法と組み合わせることにより、ニッケル58の準位密度のパリティ平衡問題の解決につながった。

さらに、ランチョス強度関数法の機能を追加し、E1、E2、M1、ガモフテラー、スピン双極子など様々な型の励起を取り扱えるようなコード拡張を行った。これにより、元素合成r過程の原子核の電子捕獲反応の計算が可能となるなど、適応領域を大きく広げている。加えて、カルシウム48のニュートリノレス二重ベータ崩壊の核行列要素計算の成功にもつながった。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 3件)

N. Shimizu, Y. Utsuno, Y. Futamura, T. Sakurai, T. Mizusaki and T. Otsuka, “Stochastic estimation of nuclear level density in the nuclear shell model: An application to parity-dependent level density in  $^{58}\text{Ni}$ ”, Phys. Lett. B 753, 13 (2016)、査読有、

DOI: 10.1016/j.physletb.2015.12.005

Y. Iwata, N. Shimizu, T. Otsuka, Y. Utsuno, J. Menéndez, M. Honma, and T. Abe, “Large-Scale Shell-Model Analysis of the Neutrinoless Decay of  $^{48}\text{Ca}$ ”, Phys. Rev. Lett. 116, 112502 (2016)、査読有  
DOI: 10.1103/PhysRevLett.116.112502

Y. Utsuno, N. Shimizu, T. Otsuka, T. Yoshida and Y. Tsunoda, “Nature of Isomerism in Exotic Sulfur Isotopes”, Phys. Rev. Lett. 114, 032501 (2015)、査読有  
DOI: 10.1103/PhysRevLett.114.032501

〔学会発表〕(計 13件)

清水則孝、富樫智章、大塚孝治、宇都野穰、吉田聡太、“ベイズ統計による殻模型計算解析”、日本物理学会第72回年次大会、大阪大学(大阪府豊中市)、2017年3月17日、一般講演

N. Shimizu, “Nuclear shell-model calculations in HPC”, First Tsukuba-CCS-RIKEN joint workshop on microscopic theories of nuclear structure and dynamics、筑波大学計算科学研究センター(茨城県つくば市)、2016年12月15日、一般講演

N. Shimizu, “Large-scale shell-model studies for exotic nuclei and nuclear level densities”, International Conference Nuclear Theory in the Supercomputing Era 2016, Pacific National University (Khabarovsk, Russia), 2016年9月21日、招待講演

N. Shimizu, “Shape phase transition and shell evolution in large-scale shell-model calculations”, 8th Workshop on Quantum Phase Transitions in Nuclei and Many-Body Systems (QPTn 2016), Charles University (Prague, Czech Republic), 2016年6月6日、招待講演

N. Shimizu, “Nuclear structure and excitations clarified by Monte Carlo Shell Model calculation on K computer”, International symposium on Quarks to Universe in Computational Science (QUCS 2015), 奈良春日野国際フォーラム(奈良県奈良市)、2015年11月4日、招待講演

N. Shimizu, “Stochastic estimation of level density in nuclear shell-model calculations”, The 5th International

Workshop on Compound-Nuclear Reactions and Related Topics (CNR\*15), 東京工業大学・大岡山キャンパス (東京都目黒区), 2015年10月20日、一般講演

清水則孝, 二村保徳, 櫻井鉄也, 水崎高浩, 宇都野穰, 大塚孝治, “ 殻模型計算における確率論的な準位密度計算法 ”, 日本物理学会 2015 年秋季大会, 大阪市立大学杉本キャンパス (大阪府大阪市), 2015 年 9 月 27 日、一般講演

N. Shimizu, “ Large-scale shell model calculations on E1 spectra in medium-heavy nuclei ”, The 5th international conference on Collective Motion in Nuclei under Extreme Conditions (COMEX5), AGH University (Krakow, Poland), 2015 年 9 月 15 日、招待講演

N. Shimizu, “ Introduction to shell model code KSHELL ”, Progress in nuclear shell-model calculations in CNS-RIKEN collaboration, RIKEN Nishina Center (埼玉県和光市), 2014 年 11 月 26 日、一般講演

N. Shimizu, Y. Utsuno, T. Togashi, T. Otsuka and M. Honma, “ Shell model description of E1 excitation ”, American Physical Society, 4th Joint Meeting of the APS Division of Nuclear Physics and the Physical Society of Japan, Hotel Waikolowa, (Hawaii, USA), 2014 年 10 月 11 日、一般講演

清水則孝, “ 大規模並列計算に向けたランチョス法による原子核殻模型計算コードの開発 ”, 日本物理学会第 69 会年次大会, 東海大学湘南キャンパス (神奈川県平塚市), 2014 年 3 月 29 日、一般講演

清水則孝, “ 大規模殻模型計算によるカルシウム同位体の E1 励起の研究 ”, ミニワークショップ「原子核 E1 応答と核物質の状態方程式」, 東京工業大学大岡山キャンパス (東京都目黒区), 2014 年 2 月 24 日、一般講演

清水則孝, 宇都野穰, 江幡修一郎, 本間道雄, 水崎高浩, 大塚孝治, “ カルシウム同位体の E1 励起の大規模殻模型計算 ”, 日本物理学会 2013 年秋季大会, 高知大学 (高知県高知市), 2013 年 9 月 22 日、一般講演

〔図書〕(計 0 件)

〔産業財産権〕

出願状況 (計 0 件)

取得状況 (計 0 件)

〔その他〕

開発されたソフトウェア「KSHELL」とソフトウェアマニュアルの公開ページ  
<https://sites.google.com/a/cns.s.u-tokyo.ac.jp/kshell/>

プレプリント

N. Shimizu, “ Nuclear shell model code KSHELL ”,  
<http://arxiv.org/abs/1310.5431>

6. 研究組織

(1) 研究代表者

清水 則孝 (SHIMIZU, Noritaka)  
東京大学・理学系研究科・特任准教授  
研究者番号 : 30419254