

課題名 (タイトル) :

変形 QRPA 計算コードの並列化

利用者氏名 : 吉田 賢市

所属 : 和光研究所 仁科加速器研究センター 理論研究部門 中務原子核理論研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

理研 RIBF をはじめとする新世代の RI ビーム加速器の稼働とともに、不安定核の研究領域は大きな質量数をもった原子核へと広がっていく。この状況に鑑み、理論的には、広い質量数領域にある原子核の量子構造（基底状態、励起状態）を統一的な枠組みでかつ定量的に記述することが求められる。

その候補の一つとして、原子核密度汎関数法が挙げられる。最新の実験結果との比較、生の核力から出発した第一原理計算結果との対応関係などから、普遍的な原子核密度汎関数を構築することが、大きな課題となっている。

その状況の中で、時間に依存した密度汎関数法に基づいて、不安定原子核の励起状態の性質を系統的に計算するコードを開発することが本課題の大きな目的である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

励起状態を記述する時間依存密度汎関数法の線形近似である、準粒子 RPA 計算コードを昨年度構築した。その新しく開発したコードを用い、系統的な計算を行うためには、計算時間の短縮のため、二体相互作用に対する行列要素の計算部分及び RPA 行列の対角化を並列化する必要がある。

そこで、本年度は ScaLAPACK を用いて行列要素の計算及び対角化を行った。

3. 結果

テスト計算として、中性子過剰 ^{20}O 核の四重極モードを対象とした。図 1 に使用したコア数と、そのときの行列要素の構築・対角化・逆行列の計

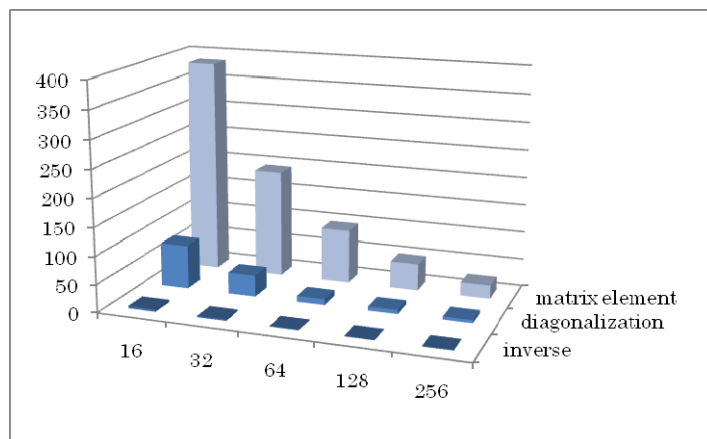


図 1 : 計算時間 (秒) と計算に使用したコア数の関係

算にそれぞれ要した時間 (秒) を示す。行列は 4393 次元で、実対称、密行列である。表 1 は、並列化効率をまとめたものである。計算の大部分

表 1 : 並列化効率

#proc	matrix element	diag.	inverse	total
2	1.00	0.747	1.03	0.978
4	1.04	0.480	0.699	0.962
8	1.10	0.481	0.802	1.01
16	1.10	0.306	0.892	0.931
32	1.10	0.310	0.775	0.897
64	1.10	0.567	1.03	0.905
128	1.09	0.407	0.550	0.769
256	1.09	0.265	0.332	0.593

を占める行列要素計算が良い並列化効率を示している。そのおかげで、計算全体の並列化効率も 256 並列のときに 0.5 を超えている。

4. まとめ

準粒子 RPA 計算コードを ScaLAPACK を用いて並列化した。行列要素の計算が全体の大部分を占めるときには、良い並列化効率を示すことが分

かった。

5. 今後の計画・展望

ScaLAPACK のサブルーチンを使う限り、対角化・逆行列の計算の部分は、コア数の増加とともに並列化効率は悪くなる。そこで、ブロック行列の次元数依存性について調べたい。また、別のルーチンを使う可能性を模索したい。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況（どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか）や、継続して利用する際に行う具体的な内容

解くべき行列の次元が増えれば、行列要素の計算にかかる時間はその 2 乗で大きくなる。その際の並列化効率を、より大きな並列数で調べる。また、対角化・逆行列計算の並列化効率悪化にどこまで耐えられるか（計算全体の並列化効率が 0.5 以上得られる最大の並列数と行列の次元の関係性）も合わせて調べる。