

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

理研での所属研究室名 : 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や核力から出発した第一原理計算の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、今日の原子核物理学の大きな課題の一つとなっている。

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できるコード開発のための準備が本課題の目的である。

2. 具体的な利用内容、計算方法

励起状態を記述するための理論的方法として、時間依存密度汎関数法の線形近似である、準粒子 RPA(QRPA)法が標準的なものとして知られている。QRPA 計算を行うためには、その出発点となる基底状態の波動関数を知る必要がある。基底状態は、密度汎関数法に基づく Kohn-Sham 方程式を解くことで得られる。原子核系では、超流動性が特に重要であるので、次の Kohn-Sham-Bogoliubov (KSB) 方程式を解くことが標準的となっている：

$$\begin{pmatrix} h^q(\mathbf{r}, \sigma) - \lambda^q & \tilde{h}^q(\mathbf{r}, \sigma) \\ \tilde{h}^q(\mathbf{r}, \sigma) & -(h^q(\mathbf{r}, \sigma) - \lambda^q) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{1,i}^q(\mathbf{r}, \sigma) \\ \varphi_{2,i}^q(\mathbf{r}, \sigma) \end{pmatrix} = E_i \begin{pmatrix} \varphi_{1,i}^q(\mathbf{r}, \sigma) \\ \varphi_{2,i}^q(\mathbf{r}, \sigma) \end{pmatrix}$$

どの空間的に広がった構造を記述できるため、この KSB 方程式を、円筒座標をメッシュに離散化して解く。この KSB ハミルトニアンは、幾つかの良い量子数をもつので、その量子数に応じてブロック対角となる。したがって、ブロック対角な各セクターを複数の CPU に分配しそれぞれ対角化することで、計算時間を短くすることができる。

今年度は、この KSB 方程式に四重極変形の拘束条件を付け、変形に対するポテンシャルエネルギー曲面を描くことを試みた。

3. 結果

KSB 方程式は非線形である。すなわち、計算で得られた密度を用いてハミルトニアンを更新し、エネルギー等の物理量が収束するまで繰り返す必要がある。昨年度報告したように、平衡点では、対角化を数十～百回程度反復させれば良い収束が得られたが、非平衡点では時に解が発散することがあった。その原因はまだ特定できていない。

4. まとめ

昨年度開発した並列化 KSB 方程式を、非平衡変形状態の記述へ拡張したが、時に解が発散することがある。

5. 今後の計画・展望

収束した解が得られるよう、まずは、発散の原因を詳細に分析する。

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

並列化効率の良い計算コードを 3 年間かけて開発してきた。中重原子核における集団運動の微視的かつ系統的記述に向けて、順調に進んでいる。将来的には、核分裂のダイナミクスを記述できる展望もひらいてきた。

平成 21 年度 RICC 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

1. K.Yoshida and N. Hinohara, "Shape changes and large-amplitude collective dynamics in neutron-rich Cr isotopes", *Physical Review C*, Volume 83, Issue 6, 061302(R) (2011).
2. K.Yoshida and T.Natsukasa, "Dipole responses in Nd and Sm isotopes with shape transitions", *Physical Review C*, Volume 83, Issue 2, 021304(R) (2011).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. 吉田賢市、中務孝、" Dipole responses in Nd and Sm isotopes with shape transitions"、日本物理学会 2011 年秋季大会、弘前大学（2011 年 9 月 16 日-19 日）
2. K. Yoshida, " Collective modes of excitation in exotic nuclei", Symposium on Frontier of Gamma-ray Spectroscopy: gamma11, RIKEN, Wako, Saitama (30 June - 2 July, 2011).
3. K. Yoshida, " Skyrme energy-density functional approach to collective dynamics with HPC", Annual UNEDF Collaboration Meetings, Michigan State University, Michigan, USA (19 - 24 June, 2011).
4. K. Yoshida, " Collective modes of excitation in deformed neutron-rich nuclei", the first International Conference on Advances in Radioactive Isotope Science, Leuven, Belgium (29 May - 3 June, 2011).

【その他】

無し