

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 仁科加速器センター 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)、又は Hartree-Fock-Bogoliubov) 方程式を解くことが標準的となっている:

本課題では、原子核の変形や、中性子スキンな

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

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、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。ここで、密度を計算する際に、通信が必要となる。しかし、対角化を数十~百回程度反復させるのに比べ、この通信時間が無視できるため、全体としての計算時間は短くすることができた。

4. まとめ

方程式の性質を利用し、計算コードの並列化を行った。計算時間を大幅に縮小することに成功した。

5. 今後の計画・展望

昨年度並列化した変形 QRPA 計算コードと、今年度開発した計算コードとを結合させることにより、原子核の励起状態の系統的な計算がよいよ可能となる。

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

平成 22 年度 RICC 利用報告書

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 2 年間かけて
開発してきたが、RICC の稼働率が高くなかなか
本格的な計算を遂行するのが難しい。

平成 22 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, "Roles of deformation and neutron excess on the giant monopole resonance in neutron-rich Zr isotopes", *Physical Review C*, Volume 82, Issue 3, 034324 (2010).

【国際会議、学会などでの口頭発表】

1. K. Yoshida, "Pygmy resonance and giant resonance in deformed nuclei", Second EMMI-EFES Workshop on Neutron-Rich Exotic Nuclei, RIKEN, Wako, Saitama (16-18 June, 2010).
2. K. Yoshida, "Exotic modes of excitation in deformed neutron-rich nuclei", *Nuclear Structure 2010*, University of California Berkeley, California, USA (8-13 August, 2010).
3. K. Yoshida, "Skyrme energy-density functional approach to collective excitations in medium-mass to heavy nuclei", JAPAN-ITALY EFES Workshop on Correlations in Reactions and Continuum, INFN Torino, Italy (6-8 September, 2010).
4. K. Yoshida, "Skyrme-QRPA approach to collective modes of excitation in deformed nuclei", University of Aizu-JUSTIPEN-EFES Symposium "Cutting-Edge Physics of Unstable Nuclei", University of Aizu, Fukushima (10-13 November, 2010).
5. K. Yoshida, "Pygmy and giant resonances in neutron-rich nuclei", SAMURAI workshop 'Towards first experiments', RIKEN, Wako, Saitama (22-23 November, 2010).
6. K. Yoshida, "Nuclear density-functional theory for collective dynamics", International Symposium 'From Quarks to Supernovae', Izu, Shizuoka (28-30 November, 2010).
7. K. Yoshida, "Skyrme energy-density functional approach to collective dynamics", International EFES-IN2P3 conference 'Many body correlations from dilute to dense nuclear systems', Paris, France (15-18 February, 2011).
8. 吉田賢市, "Skyrme energy-density functional approach to nuclear collective dynamics", 基研研究会「大振幅集団運動の微視的理論」, 京都大学, 2010 年 10 月 24 日 - 26 日.

【その他】

吉田賢市, "Skyrme energy-density functional approach to collective excitations in medium-mass to heavy nuclei", 京都大学基礎物理学研究所セミナー, 京都大学, 2010 年 10 月 22 日