

## 原子核および中性子星の量子ダイナミクス

### Quantum dynamics in nuclei and neutron stars

中務 孝

筑波大学計算科学研究センター

#### 1. 研究目的

核子多体系である原子核を、核子の自由度から量子力学的に理解する微視的研究は、最近の計算機能力の発展に伴い質的な変貌を遂げている。特に、重い原子核から中性子星内部の巨大原子核・無限核物質を対象にできる密度汎関数理論(DFT)による記述が近年目覚しく発展している。また、重力波による中性子星合体の観測と重元素合成を示唆するデータの観測など、中性子星の観測データも近年大きな発展を見せている。そこで本研究プロジェクトでは、DFTに基づく原子核の励起構造・反応機構の研究を進め、ミクロな原子核の研究をマクロな中性子星パルサーの観測データと結びつけ、核子多体系の量子ダイナミクスに対する理解を深めることを目的とする。特に、時間依存密度汎関数理論(TDDFT)に基づく核分裂・核融合・移行反応過程の研究、中性子星インナー・クラストの構造と自由中性子の対相関・超流動ダイナミクスの研究を進める。この目的のため、メニーコア・プロセッサを用いた高効率のコード開発を行う。

#### 2. 研究成果の内容

##### Oakforest-PACS

対称性の制限を一切排除したフル3次元実空間基底の有限温度ハートレー・フォック・ボゴリューボフ(HFB)計算のコード開発とチューニングを推進し、シフト法を用いた反復解法や、松原振動数に対応する極の寄与を除去する方法などに、複数の方法を試験的に実装し、最も効率の良い方法を見つけ出した。準粒子軌道を計算せず、また大次元の行列対角化にもよらずに計算する新しい有限温度HFBの計算手法である。拡張されたグリーン関数を用いて、複素エネルギー平面上での周回積分から通常密度・対密度を決定し、最大で空間格子点の4倍の数までのノード数において、これまでにない高い並列効率が得られる。シフト法を用いることで、計算コストを大幅に軽減することが可能であり、いくつかの候補の中から、shifted conjugate orthogonal conjugate residual (COCR) method と shifted conjugate orthogonal conjugate

gradient (COCG) method が特にパフォーマンスが良いことがわかった。

メニーコアプロセッサ

(Knights Landing アーキテクチャ) でのコード開発を進め、有限温度におけるいくつかのベンチマーク計算を実施した。Ba 原子核における八重極変形の温度依存性、水銀のアイソトープにおける変形共存現象の温度に対する依存

性、中性子星のインナー・クラストにおける超流動中性子の役割とパスタ構造において、これまでの研究結果を再現するとともに、新しい現象を予言することができた。この成果は、PRC に出版が決定している。

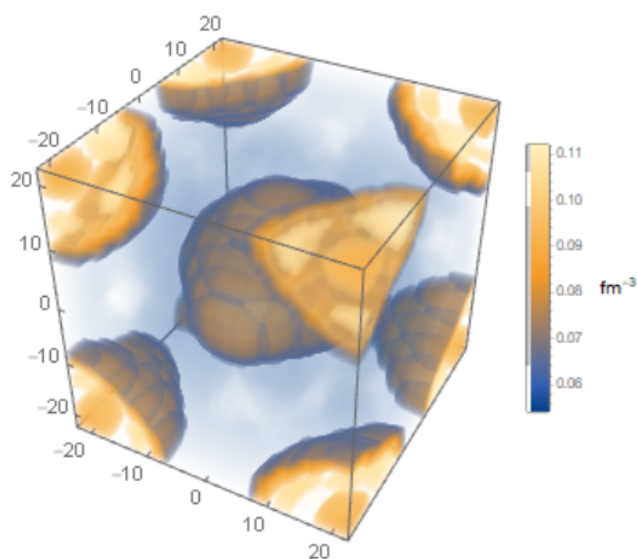


図 1 中性子星インナー・クラストの構造計算例。温度  $T = 200$  keV。超流動中性子の海の中に、変形した中性子過剰  $N_o$  核が出現している。

### Cygnus

Cygnus の GP-GPU を用いたテスト計算を実施する予定であったが、本年度は実施できなかった。

### 3. 学際共同利用が果たした役割と意義

2019 年度から、HPCI プロジェクトにおいて、Oakforest-PACS を用いたプロジェクトが採択されているが、学際共同利用プログラムとの併用によって計算資源を十分に確保することができた。また、2018 年度までの学際共同利用プログラムによる無償利用があったおかげで、HPCI のプロジェクトにつなげることができた。学際共同利用無しには実現できなかったプロジェクトである。

### 4. 今後の展望

今後は、現状の Oakforest-PACS の利用を推進するとともに、スパコン富岳の利用に向けたコードの変更・チューニング、Cygnus などの GP-GPU を利用した計算に向けたコード開発を実施していく予定である。

### 5. 成果発表

(1) 学術論文

- ① Y. Kashiwaba and T. Nakatsukasa, “Self-consistent band calculation of slab phase in neutron-star crust”, Phys. Rev. C 100 (2019) 035804 (16 pages).
- ② G. Scamps, Y. Hashimoto, “Density-constrained time-dependent Hartree-Fock-Bogoliubov method”, Phys. Rev. C 100 (2019) 024623 (8 pages).
- ③ N. Hinohara, “Energy-weighted sum rule for nuclear density functional theory”, Phys. Rev. C 100 (2019) 024310 (15 pages).
- ④ K. Wen, T. Nakatsukasa, “Collective inertial masses in nuclear reactions”, Front. Phys. 8 (2020) 16 (8 pages).
- ⑤ K. Washiyama, K. Sekizawa, “TDHF and a Macroscopic Aspect of Low-Energy Nuclear Reactions”, Front. Phys. 8 (2020) 93 (7 pages).
- ⑥ K. Wen and T. Nakatsukasa, “Coordinate-space solver for finite-temperature Hartree-Fock-Bogoliubov”, Phys. Rev. C in press; arXiv:2001.07842.
- ⑦ T. Nakatsukasa, Y. Kashiwaba, F. Ni, K. Washiyama, K. Wen, and N. Hinohara, “Nuclear structure and reaction with quantum shape fluctuation”, JPS Conf. Proc. In press; arXiv:1909.01537.
- ⑧ J. Ha, T. Sumikama, F. Browne, N. Hinohara, A. M. Bruce, S. Choi, I. Nishizuka, S. Nishimura, “Shape evolution of neutron-rich 106,108,110Mo isotopes in the triaxial degree of freedom”, Phys. Rev. C in press.

(2) 学会発表（プロジェクト代表者による招待講演のみ記載）

- ① T. Nakatsukasa, “Green’s function method in nuclear structure theory”, International workshop on new generation nuclear density functionals, Nov. 18-22, Beijing, China (招待講演).
- ② T. Nakatsukasa, “Self-consistent description of the inner crust of neutron stars”, International workshop “Microscopic Approaches to Nuclear Structure and Reactions” (Gogny2019), Nov. 12-15, Livermore, CA, USA (招待講演).
- ③ T. Nakatsukasa, “Collective motion, GCM, and requantization of TD mean field”, Nuclear Physics Symposium “Challenges in theory of heavy nuclei”, July 17-20, York, UK (招待講演).
- ④ T. Nakatsukasa, “Energy density functional approach to nuclear dynamics”, XVII Workshop on Nuclear Physics (WONP2019), April 1-5, Havana, Cuba (招待講演).

その他、国際会議講演:12（うち招待講演 4）、国内会議講演:9（うち招待講演

演 2)

(3) その他

① 受賞 : Kai Wen、ANPhA/AAPPS-DNP award for young scientist

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース*	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	5000	
Oakforest-PACS	○	225000	
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			