

低次元化モデルによる原子核構造計算

Nuclear structure calculation using reduced order modeling

日野原 伸生

筑波大学計算科学研究センター

1. 研究目的

準粒子乱雑位相近似 (QRPA) は密度汎関数理論を出発点として原子核の励起状態を記述する手法の 1 つであり、巨大共鳴、低励起状態の記述、ベータ崩壊など原子核構造分野に様々な応用がある。QRPA は 10 万~100 万オーダーの大次元行列の固有値問題であり、変形原子核などで空間対称性を用いて次元を減らすことができない場合は計算が大規模となる。外場が存在する状況下において行列対角化ではなく線形方程式の反復解法によって QRPA の解を求める有限振幅法がこれまでに構築されてきた。複素エネルギー面での周回積分によって有限振幅法で離散エネルギーの低励起状態を求めることも可能であるが、積分経路設定のため、外場のエネルギーを変更した多数の有限振幅法計算による極の位置の推定が必要であり、必ずしも効率的ではない。本研究ではパラメータを含む大次元固有値問題を低次元化する手法として広く使われている縮約基底法(RBM)を有限振幅法と組み合わせて用いることで、QRPA 計算の計算コスト削減を図る。

2. 研究成果の内容

RBM を用いて低エネルギー励起状態のテスト計算を進めた。これまでに学際共同利用の課題として進めてきた二重ベータ崩壊 (およびベータ崩壊) では、有限振幅法で非エルミートの外場演算子を用いるにも関わらず、縮約基底法が機能することが確認できた。二重ベータ崩壊の原子核行列要素計算では一体の崩壊演算子はニュートリノの運動量のような連続変数および、多くの角運動量量子数の関数となっている。そのため、縮約基底を構成する際に用いる演算子の選び方が重要であることがわかった。また、離散エネルギー解が重要となる例として、 ^{240}Pu の自発核分裂の慣性質量のテスト計算を行った。対称核分裂と関連する四重極変形に関する慣性質量を求め、異なる計算コードを用いた有限振幅法の周回複素積分による先行研究の慣性質量の値を定性的に再現できることを示した。また、重い変形核の β 振動励起状態の計算を系統的に実施し、興味あるエネルギー領域の QRPA 解が高速に求められることを示した。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

縮約基底を構成する際に必要な有限振幅法の計算は大規模計算となり、学際共同利

用プログラムの利用が重要な役割を果たしている。

4. 今後の展望

RBM を用いた QRPA 計算に関する手法の論文をまとめ、核分裂慣性質量、二重ベータ崩壊の原子核行列要素の計算の他、 β 崩壊や低励起振動状態などの様々な励起モードの系統的な計算を実行する。

5. 成果発表

(1) 学会発表

1. 日野原 伸生、大石 知広、吉田 賢市、「スピン M1 励起のエネルギー重率和則とテンソル相関」、日本物理学会第 79 回年次大会, 北海道大学札幌キャンパス, 2024 年 9 月 16 - 19 日.
2. Nobuo Hinohara, “Nuclear spin current and spin-M1 excitation”, RCNP-CENuM-OMEG Symposium on Nuclear Structure, Reaction, and Astrophysics (NuSRAP2024), RCNP, Osaka University, Ibaraki, Japan, December 18 - 20, 2024.
3. Nobuo Hinohara, “Linear-response emulator for nuclear excited state calculations” International symposium: TRIP Usecase: Nuclear Transmutation 2025, RIKEN Nishina Center, Wako, Japan, March 10 - 12, 2025.
4. Nobuo Hinohara, “Reduced-order emulator for nuclear time-dependent DFT calculations” iTHEMS-RCNP Workshop Third Workshop on Density Functional Theory: Fundamentals, Developments, and Applications (DFT2025), RIKEN, Kobe, Japan, March 25 - 27, 2025.

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	追加配分
Cygnus	○	560		0
Pegasus				
Wisteria/BDEC-01	○	28000		0
※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。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				