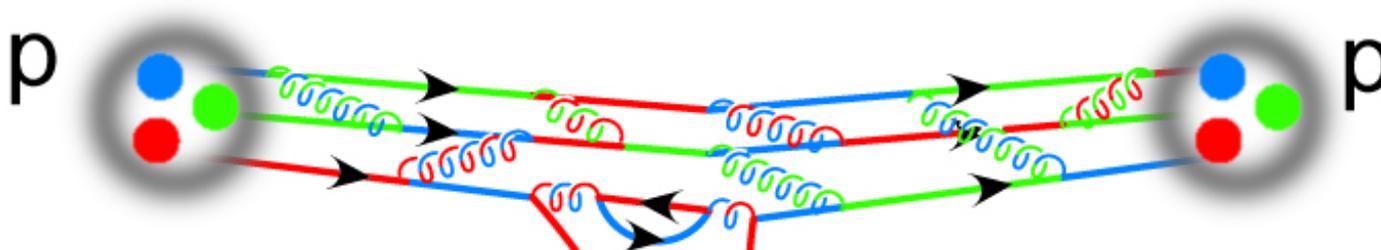


HPCIシンポジウム
2013年3月5日(5-6日)
富士ソフトビル、東京

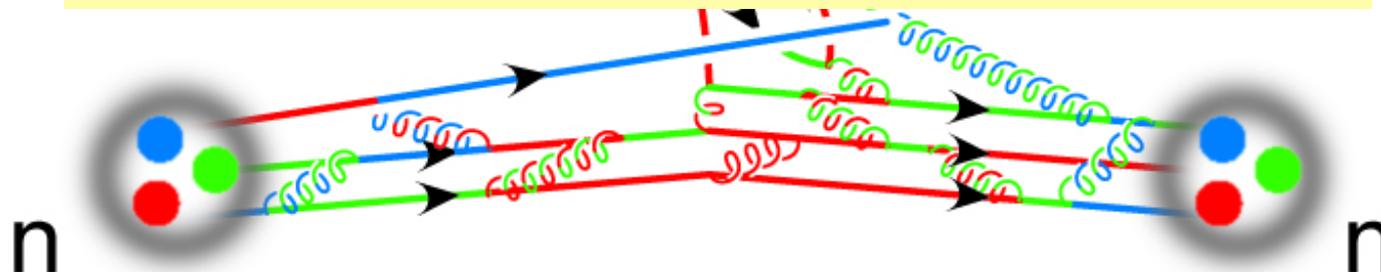
課題2 大規模量子多体計算による 核物性解明とその応用

開発課題責任者
東京大学大学院理学系研究科
大塚孝治

基本理念



複雑な核力から出発しつつ、大型殻模型計算により、
様々な規則性を示す原子核の構造に結び付ける。
さらに、素粒子、宇宙、エネルギーなどの問題へ応用。



殻模型計算による原子核構造の計算

■ 核力にもっとも忠実に物理量を計算、予言能力

ハミルトニアン の 行列要素 $\langle \varphi_1 | H | \varphi_2 \rangle$

φ_1, φ_2 スレーター行列式

この行列を対角化して、固有エネルギー、固有状態の波動関数を求める
その波動関数から種々の物理量を計算

必要なスレーター行列式の総数 = (殻模型計算の) **次元**

次元が大きくなると計算が大型化

ハミルトニアン行列を直接対角化できるのは次元が10億位まで
今後がんばっても数百億

■ 学術的、或いは、応用面から重要なものはその先に沢山ある

モンテカルロ殻模型(MCSM) (東大グループのオリジナリティ)

次元の制約ははるかにゆるい

対称性の回復、励起状態の計算 (一般のモンテカルロでは保証されない)



方法論の発展、プログラムチューニング

HPCI戦略分野5課題2

核力に忠実に、エキゾチック核まで含めた核構造の探求、予言

事業協力者リスト

大塚 孝治 (開発課題責任者)

清水 則孝 (東大CNS)

吉田 亨

岩田 順敬

江幡 修一郎

富樫 智章

阿部 喬 (東大理)

本間 道雄 (会津大)

宇都野 穰 (JAEA)

角田 直文 (東大理)

角田 佑介 (東大理)

中務 孝 (理研)

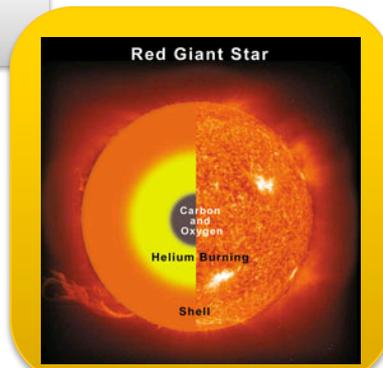
鈴木 俊夫 (日大)

中田 仁 (千葉大)

梶野 敏貴 (天文台)

James Anderson (北京大)

水崎 高浩 (専修大)



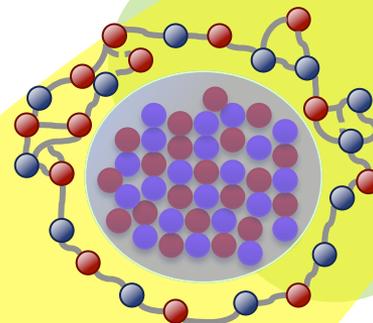
モンテカルロ殻模型
p殻核、 ${}^4\text{He} \sim {}^{12}\text{C}$, sd殻核
=> 天体核反応に重要
 ${}^{12}\text{C}$ Hoyle stateなどにも
多角的に挑戦

軽い核の
第一原理計算



核力

密度汎関数法



中重核の励起モードを
系統的に計算

モンテカルロ殻模型
Cr, Ni, Sn, Xe, Nd, ...
=> r-process, 二重ベータ崩壊, 原子力工学, ...

中重核の
微視的記述を
系統的に行う

中重核殻模型計算への
インプットを提供すると
共に、核力に基づく核
構造の理解を目指す。

有効相互作用の構築
IM-SRG, Extended KK

Building blocks of shell model 殻模型の構成要素

Model space (set of orbits for active particles) 模型空間

→ Combination of the model space 模型空間 and the number of nucleons 粒子数 determines the **dimension** 次元

Effective Interaction 有効相互作用

$$H = \sum_i \epsilon_i n_i + \sum_{i,j,k,l} v_{ij,kl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k$$

Single Particle Energy (SPE)

Two-Body Matrix Element (TBME)

History of the shell model 殻模型の歴史

larger dimension より大きな次元 many-body structure

more precise TBME より精確な相互作用 nuclear forces

interplay between structure and force → **paradigm**

Dimension 次元

Matrix of Hamiltonian \mathbf{H}

→ diagonalized

Slater determinants

$$\phi_1 = \mathbf{a}_\alpha^+ \mathbf{a}_\beta^+ \mathbf{a}_\gamma^+ \dots | \mathbf{0} \rangle$$

$$\phi_2 = \mathbf{a}_{\alpha'}^+ \mathbf{a}_{\beta'}^+ \mathbf{a}_{\gamma'}^+ \dots | \mathbf{0} \rangle$$

$$\phi_3 = \dots$$

shell-model dimension 次元

$\mathbf{H} =$

$$\langle \phi_1 | \mathbf{H} | \phi_1 \rangle \quad \langle \phi_1 | \mathbf{H} | \phi_2 \rangle \quad \langle \phi_1 | \mathbf{H} | \phi_3 \rangle \quad \dots$$

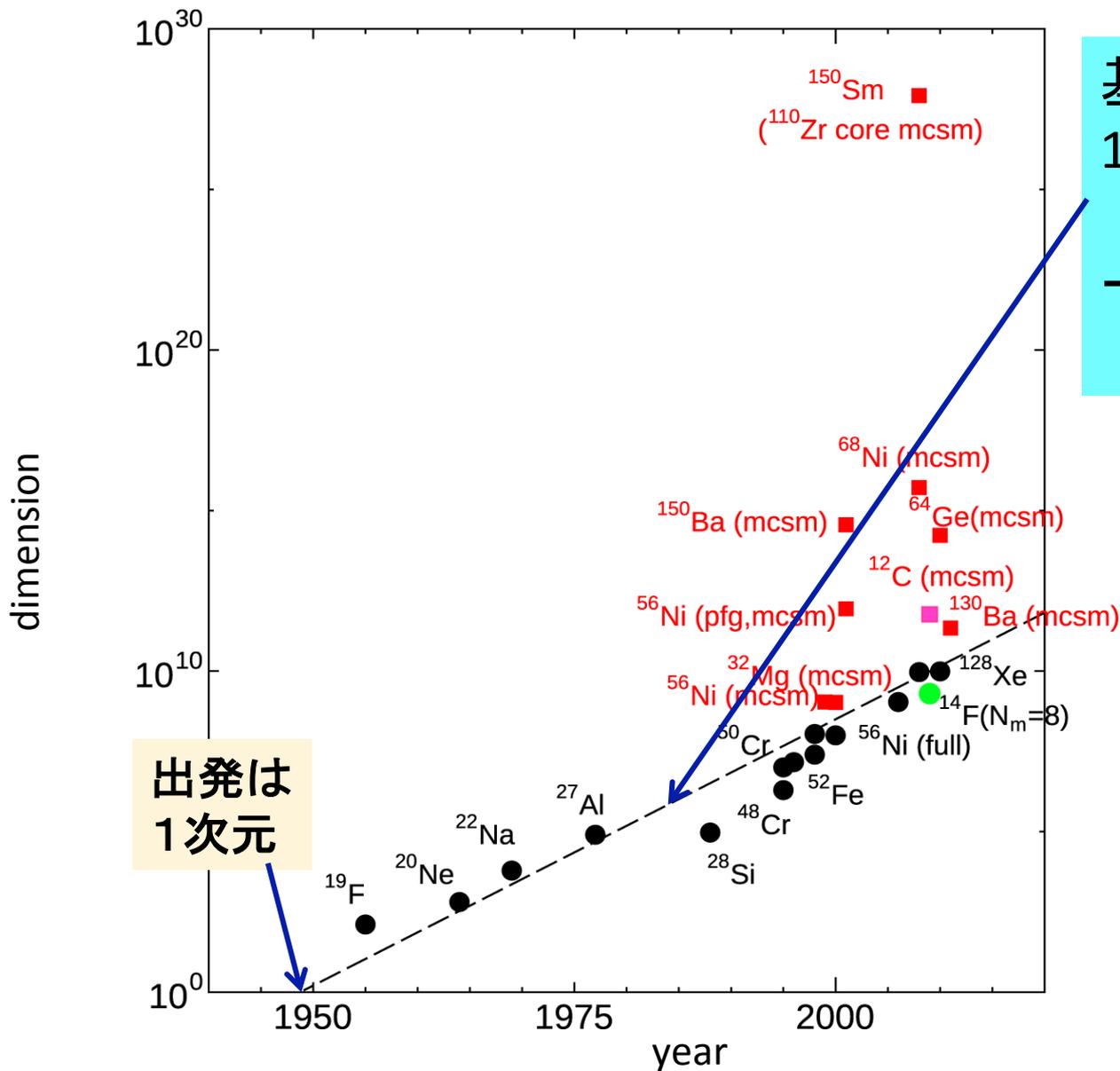
$$\langle \phi_2 | \mathbf{H} | \phi_1 \rangle \quad \langle \phi_2 | \mathbf{H} | \phi_2 \rangle \quad \langle \phi_2 | \mathbf{H} | \phi_3 \rangle \quad \dots$$

$$\langle \phi_3 | \mathbf{H} | \phi_1 \rangle \quad \langle \phi_3 | \mathbf{H} | \phi_2 \rangle \quad \langle \phi_3 | \mathbf{H} | \phi_3 \rangle$$

$$\langle \phi_4 | \mathbf{H} | \phi_1 \rangle \quad \cdot \quad > \dots \cdot \quad \cdot$$

$$\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot$$

Increase of shell-model dimension 殻模型(最大)次元の発展



基本トレンド:
10⁵ 倍 / 30 years

→ 10億次元
@ 2009年

black, green
circles :
conventional
shell model

red circles :
Monte Carlo
shell model

About TBME (two-body matrix element)

At the beginning, χ^2 fit is made as usual. 初めはフィット

Example : $0^+, 2^+, 4^+$ in ^{18}O (oxygen) : d5/2 & s1/2

$\langle d5/2, d5/2, J, T=1 | V | d5/2, d5/2, J, T \rangle,$

$\langle d5/2, s1/2, J, T=1 | V | d5/2, d5/2, J, T \rangle,$ etc.

Arima, Cohen, Lawson and McFarlane (Argonne group) 1968

Later and till now, combination between fit and microscopic calculations is the major way. 今は、微視的理論計算とフィットによる補正

Example : USD interaction by Wildenthal & Brown

sd shell d5/2, d3/2 and s1/2

63 matrix elements

3 single particle energies

Changes by the fit : big or small ?

TBME

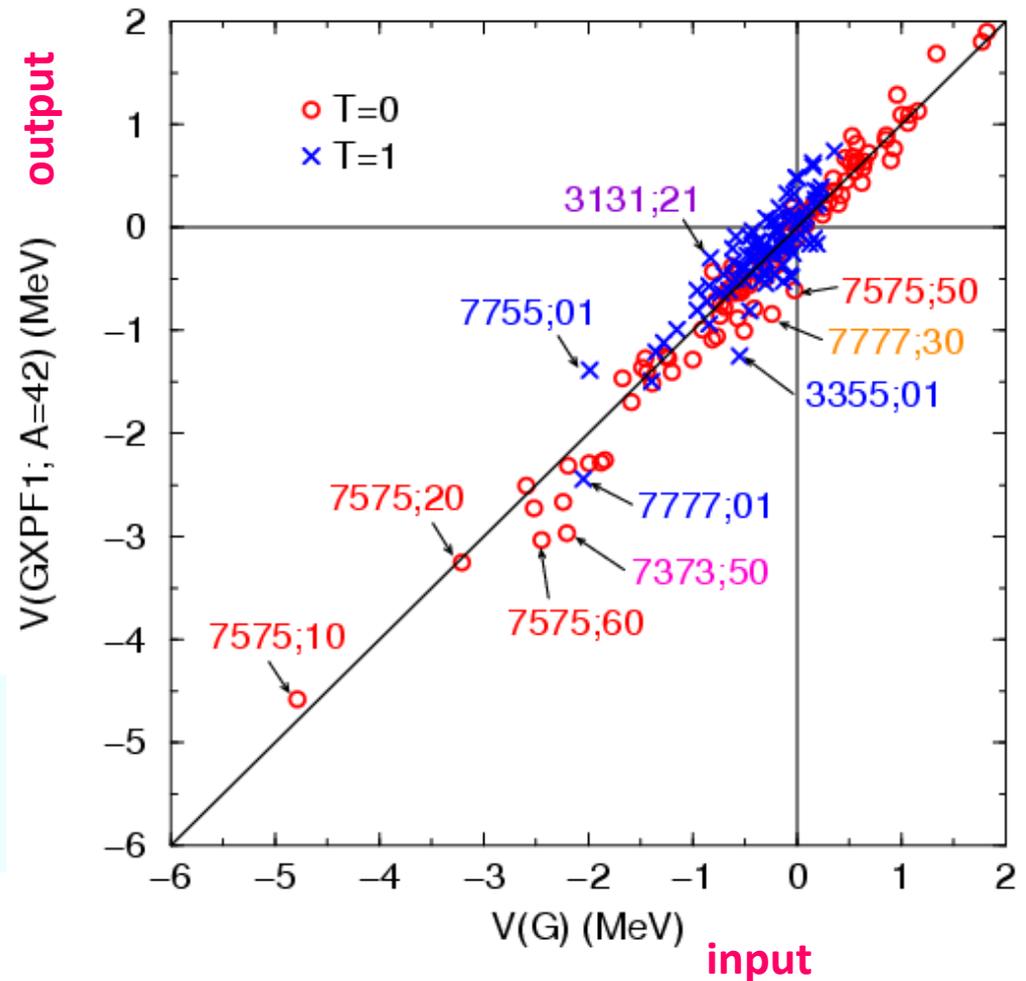
two-body matrix element

$$\langle ab; JT | V | cd; JT \rangle$$

$$7 = f_{7/2}, \quad 3 = p_{3/2}, \quad 5 = f_{5/2}, \quad 1 = p_{1/2}$$

By the fit,

- T=0 ... more attractive
- T=1 ... more repulsive



For two-body interaction, our understanding from microscopic basis (i.e. nucleon level) has been advanced enormously
核力に関する理論はこれまでにかなりの進歩

NN interaction potentials from scattering 散乱実験データから
(Hamada-Johnston to CD-Bonn),
EFT, Lattice QCD

期待すること (実験データ少ない) :
3体力
2体LS力 比較的早く?

Renormalization G-matrix, SRG, MBPT
Renormalization Persistency

USD family sd shell
KB3 family pf shell
GXPF1 family pf shell
SDPF-M sd-f7p3
SDPF-U sd-pf
.....

*Recent interactions
are more independent of
fit*

モンテカルロ殻模型

$$H = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & \cdot & \cdot \\ * & * & * & * & \cdot & \cdot & \cdot \\ * & * & * & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ * & * & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{diagonalization}} \begin{pmatrix} \epsilon_1 & & & & & & 0 \\ & \epsilon_2 & & & & & \\ & & \epsilon_3 & & & & \\ & & & \cdot & & & \\ & & & & \cdot & & \\ & & & & & \cdot & \\ 0 & & & & & & \cdot \end{pmatrix}$$

Conventional Shell Model
all Slater determinants

$$H \approx \begin{pmatrix} * & * & * & \cdot \\ * & * & * & \cdot \\ * & * & \cdot & \\ \cdot & \cdot & & \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{diagonalization}} \begin{pmatrix} \epsilon_1' & & 0 \\ & \epsilon_2' & \\ 0 & & \cdot \end{pmatrix}$$

Monte Carlo Shell Model
bases important for a specific eigenstate

optimized basis vectors selected by quantum Monte Carlo method
and by variational method

基底ベクトルを量子モンテカルロ法と変分法で最適化

基底ベクトルの決定プロセス

N_B : number of basis vectors (dimension)

N_p : number of (active) particles

N_{sp} : number of single-particle states

$$|\Psi(D)\rangle = \sum_{n=1}^{N_B} f_n P^{J,\Pi} |\phi(D^{(n)})\rangle$$

射影演算子

$$|\phi(D^{(n)})\rangle = \prod_{\alpha=1}^{N_p} \left(\sum_{i=1}^{N_{sp}} c_i^\dagger D_{i\alpha}^{(n)} \right) |-\rangle$$

n番目の基底ベクトル
(スレーター行列式)

Deformed single-particle state

$$E(D) = \langle \Psi(D) | H | \Psi(D) \rangle$$

Minimize $E(D)$ as a function of D utilizing qMC and conjugate gradient methods

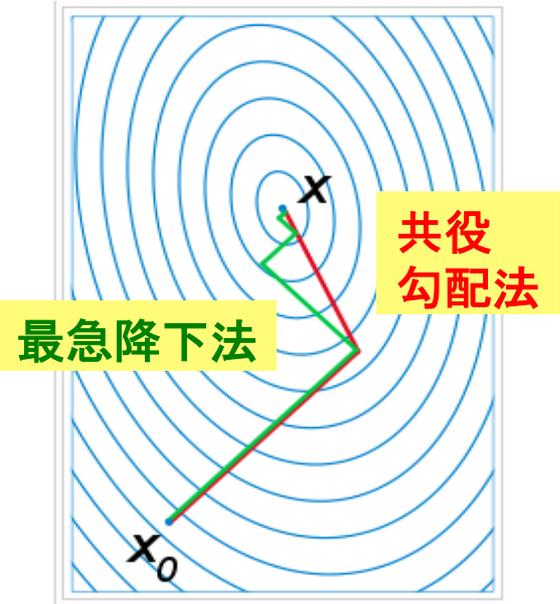
ステップ1: 補助場MC法により基底の候補を多数生成

$$|\phi(\sigma)\rangle = \prod e^{\Delta\beta \cdot h(\sigma)} \cdot |\phi^{(0)}\rangle$$

エネルギー期待値が下がるものを選ぶ

ステップ2: エネルギー期待値をDの関数としてとらえ、共役勾配法により最適化

ステップ1、2を繰り返して基底ベクトルを生成する。
 $E(D)$ が収束するまで基底数Nを増やしていく

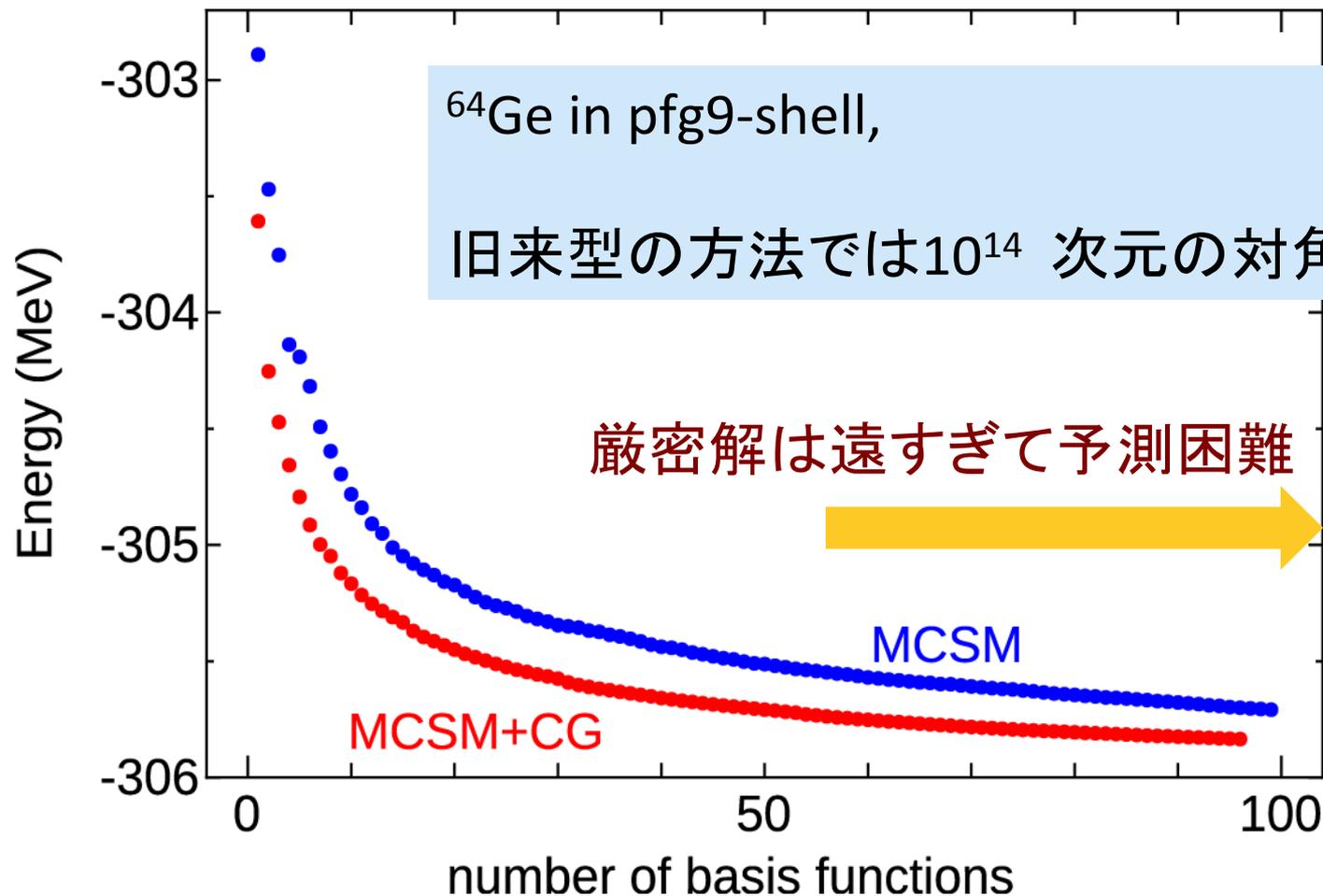


Conjugate gradient taken from wikipedia

新外挿法

Energy Variance による

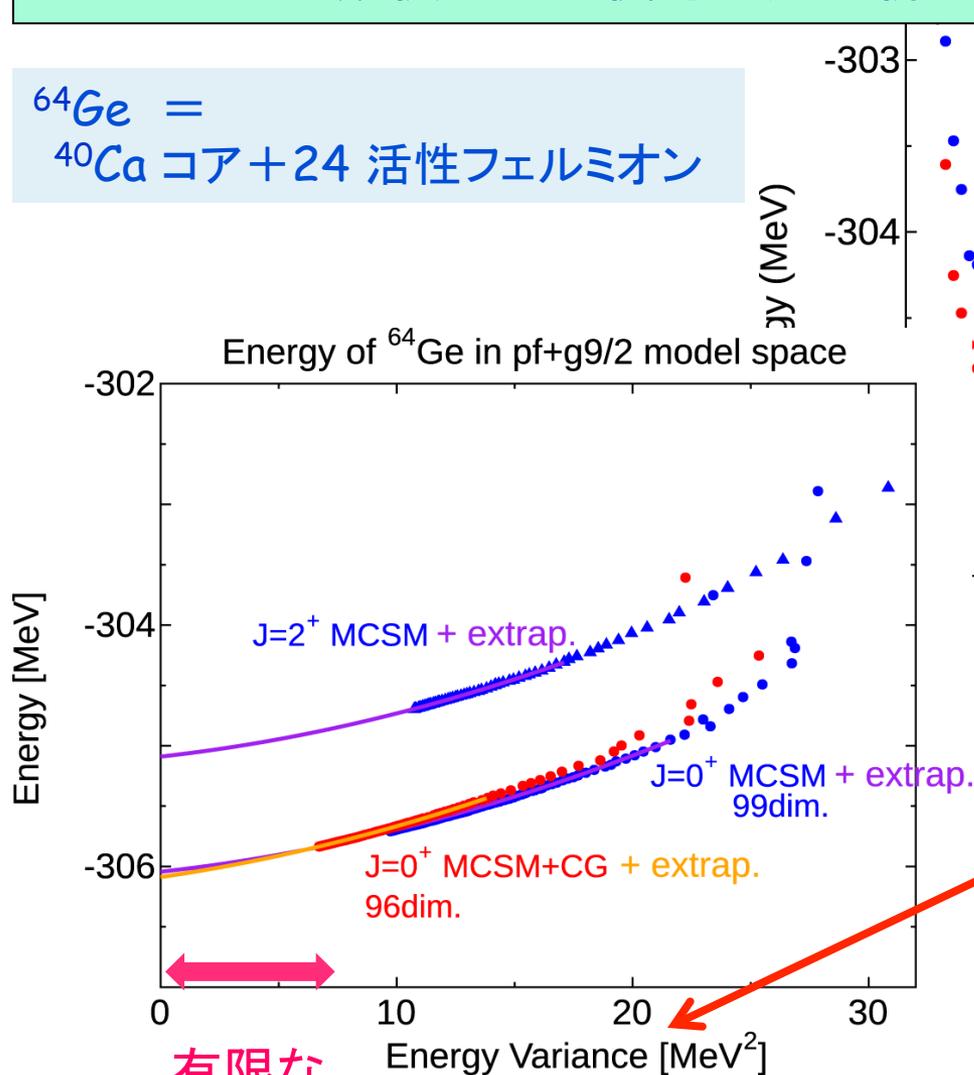
MCSM 計算の例



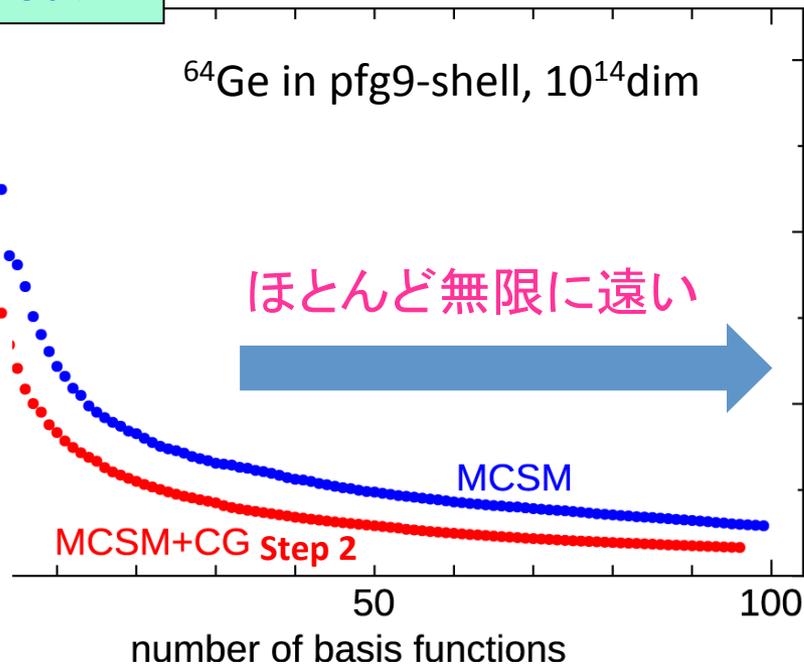
最適化された基底ベクトル(スレーター行列式)の数

モンテカルロ殻模型 + 共役勾配法 + 新外挿法

$^{64}\text{Ge} =$
 ^{40}Ca コア + 24 活性フェルミオン



有限な
範囲

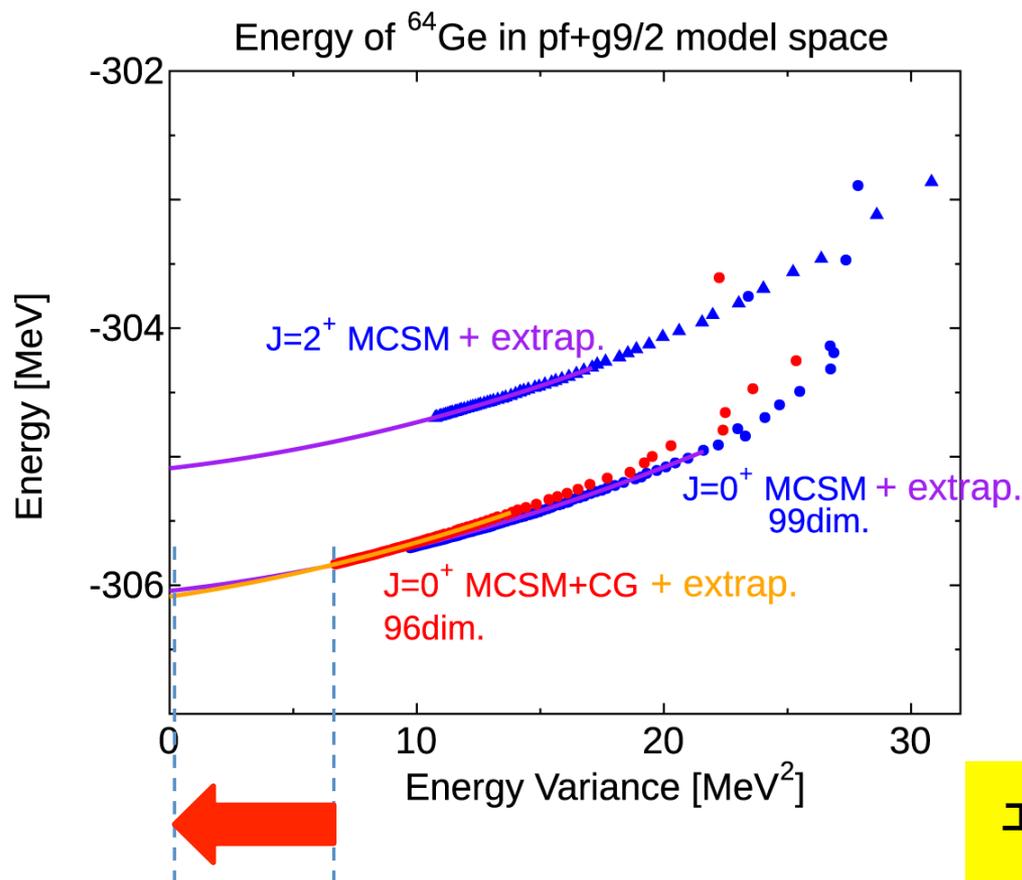


Variance : $\langle \Delta H^2 \rangle = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$

$$\langle H \rangle = E_0 + a \langle \Delta H^2 \rangle + b \langle \Delta H^2 \rangle^2 + \dots$$

N. Shimizu, et al.,
 Phys. Rev. C 82, 061305(R) (2010).

殻模型計算コード開発とアルゴリズム改良



この短い区間の外挿が
できればいい

最新のアルゴリズムのまとめ

1. 量子モンテカルロ法を基礎にした最適な基底ベクトル群の探索 (精度は粗い)
2. 共役勾配法による基底ベクトルの精密な改良
3. 最終的には外挿で厳密解を推定

← 旧来法では 10^{15} 次元の
ハミルトニアン行列の対角化に相当

エネルギー分散: $\langle \Delta H^2 \rangle = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$

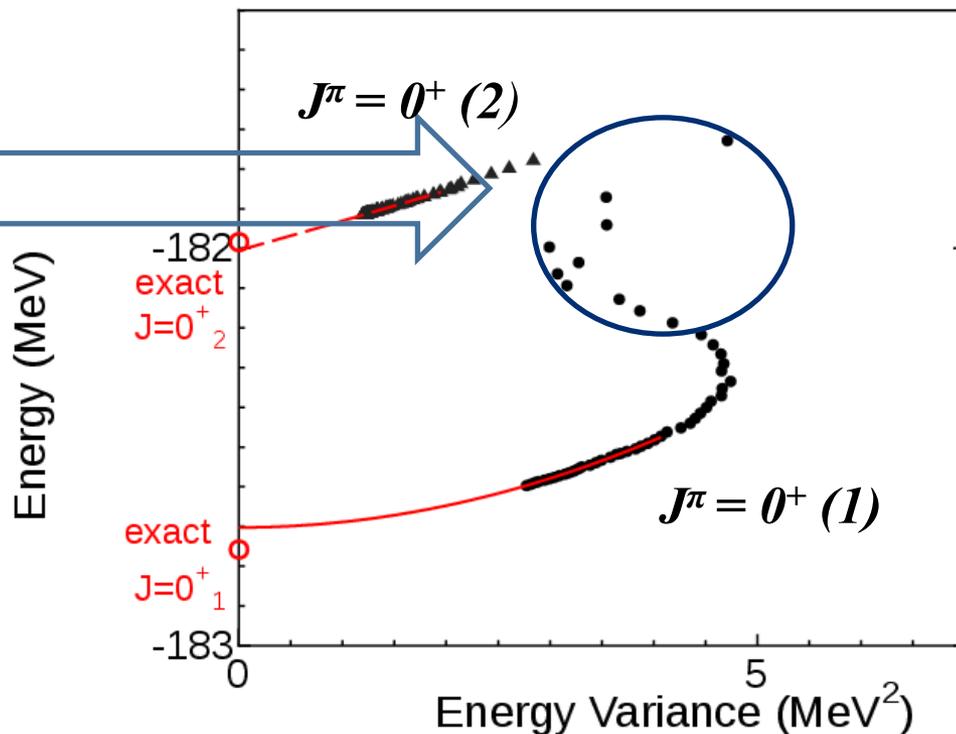
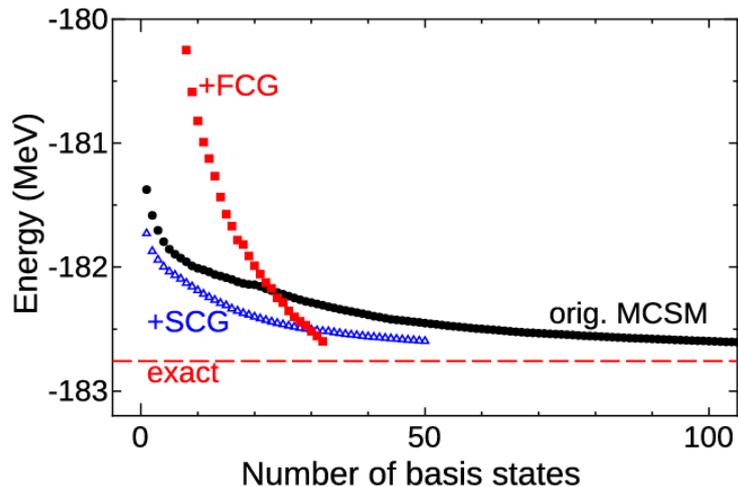
新しい外挿法

$$\langle H \rangle = E_0 + a \langle \Delta H^2 \rangle + b \langle \Delta H^2 \rangle^2 + \dots$$

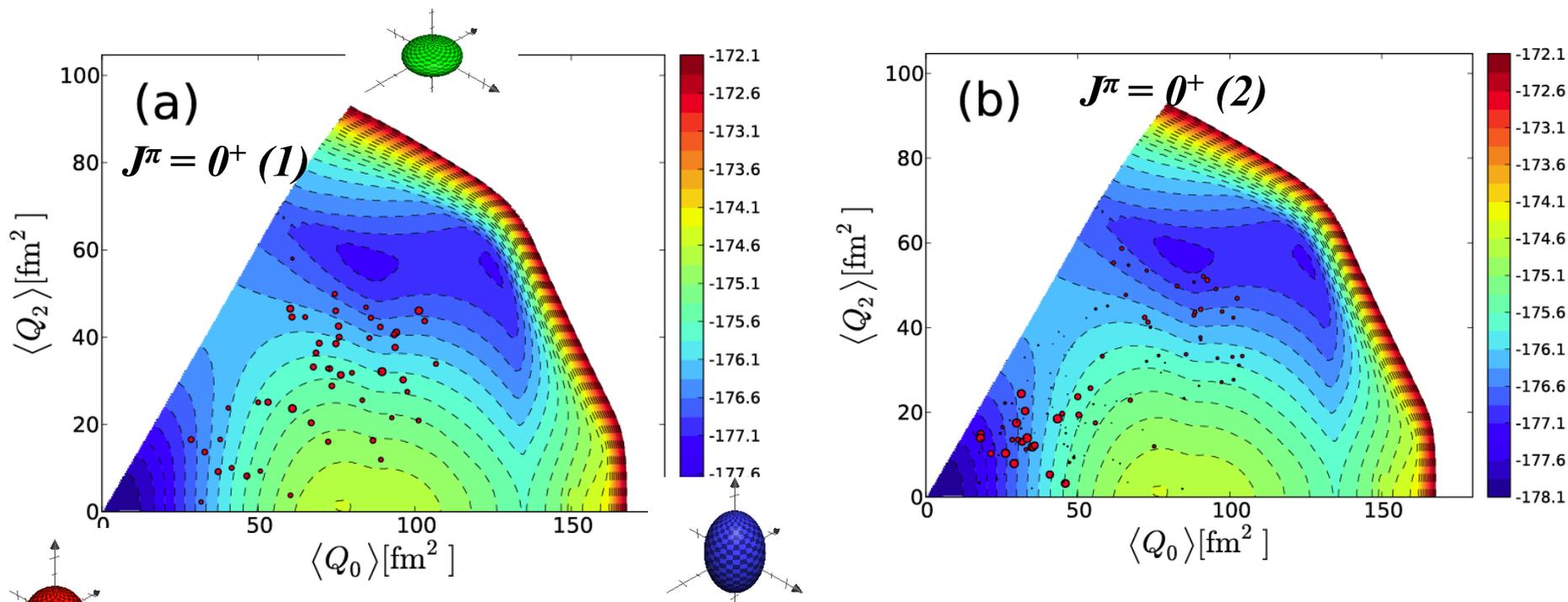
外挿法のさらなる改良 : トラップ問題について

^{72}Ge in $f5pg9$ -shell, JUN45 int.

始めの 0^+_1 状態は、 0^+_2 状態に
 トラップされてしまい、外挿図に
 「曲がり」ができる。



「形の共存」によるバンド交差



$$|\Psi_N\rangle = c_1^{(N)}|\phi_1\rangle + c_2^{(N)}|\phi_2\rangle + c_3^{(N)}|\phi_3\rangle + \dots + c_N^{(N)}|\phi_N\rangle$$

$$\langle \phi_k | Q_2 | \phi_k \rangle, \langle \phi_k | Q_0 | \phi_k \rangle$$

$$S \propto |\langle \Psi_N | \phi_k \rangle|^2$$

強い配位混合効果により
多数のスレーター行列の
かさねあわせが必要



少数のスレーター行列式が
よい近似となる

基底の並び替えによる 外挿の改善

Ansatz: エネルギー・エネルギー分散による外挿は、基底の順序によらずいつでも厳密解を示す。

1連の近似波動関数

$$|\Psi_1\rangle = c_1^{(1)} |\phi_1\rangle$$

$$|\Psi_2\rangle = c_1^{(2)} |\phi_1\rangle + c_2^{(2)} |\phi_2\rangle$$

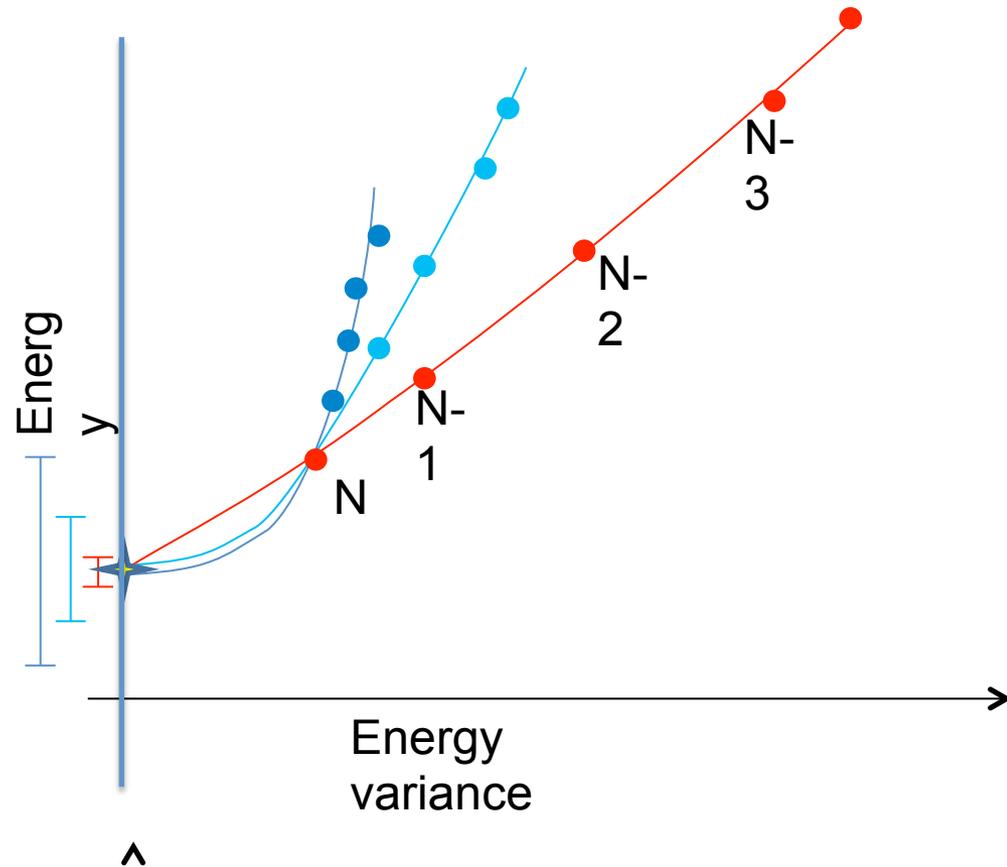
$$|\Psi_3\rangle = c_1^{(3)} |\phi_1\rangle + c_2^{(3)} |\phi_2\rangle + c_3^{(3)} |\phi_3\rangle$$

$$\dots$$
$$|\Psi_N\rangle = \sum_{i=1}^N c_i^{(N)} |\phi_i\rangle$$

基底を並び替えることにより、

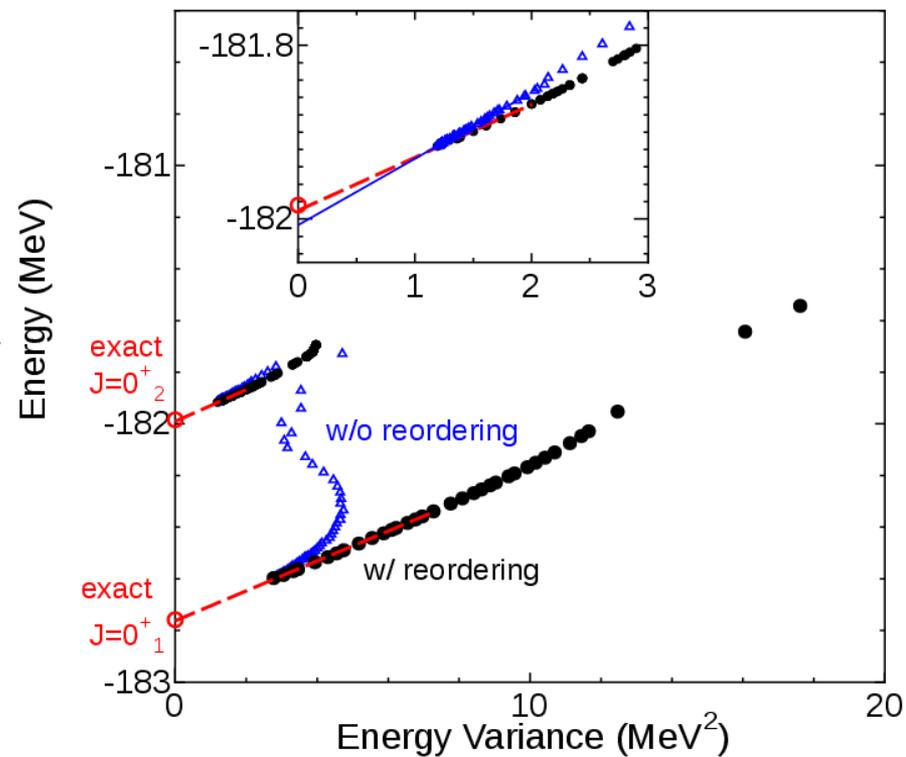
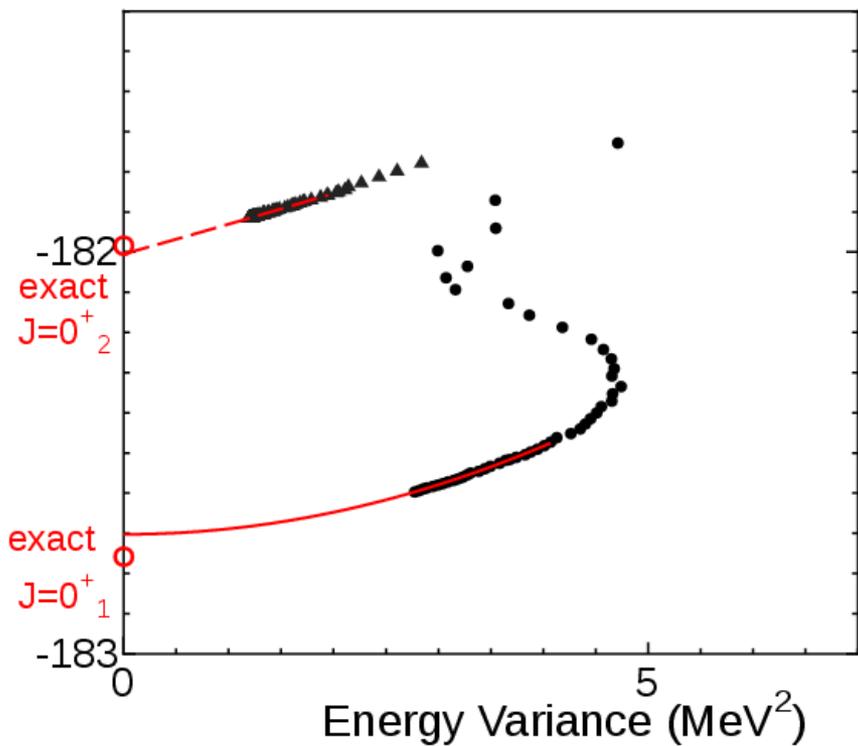
$$|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_2\rangle, \dots, |\phi_N\rangle$$

他の近似波動関数列を得ることができる。



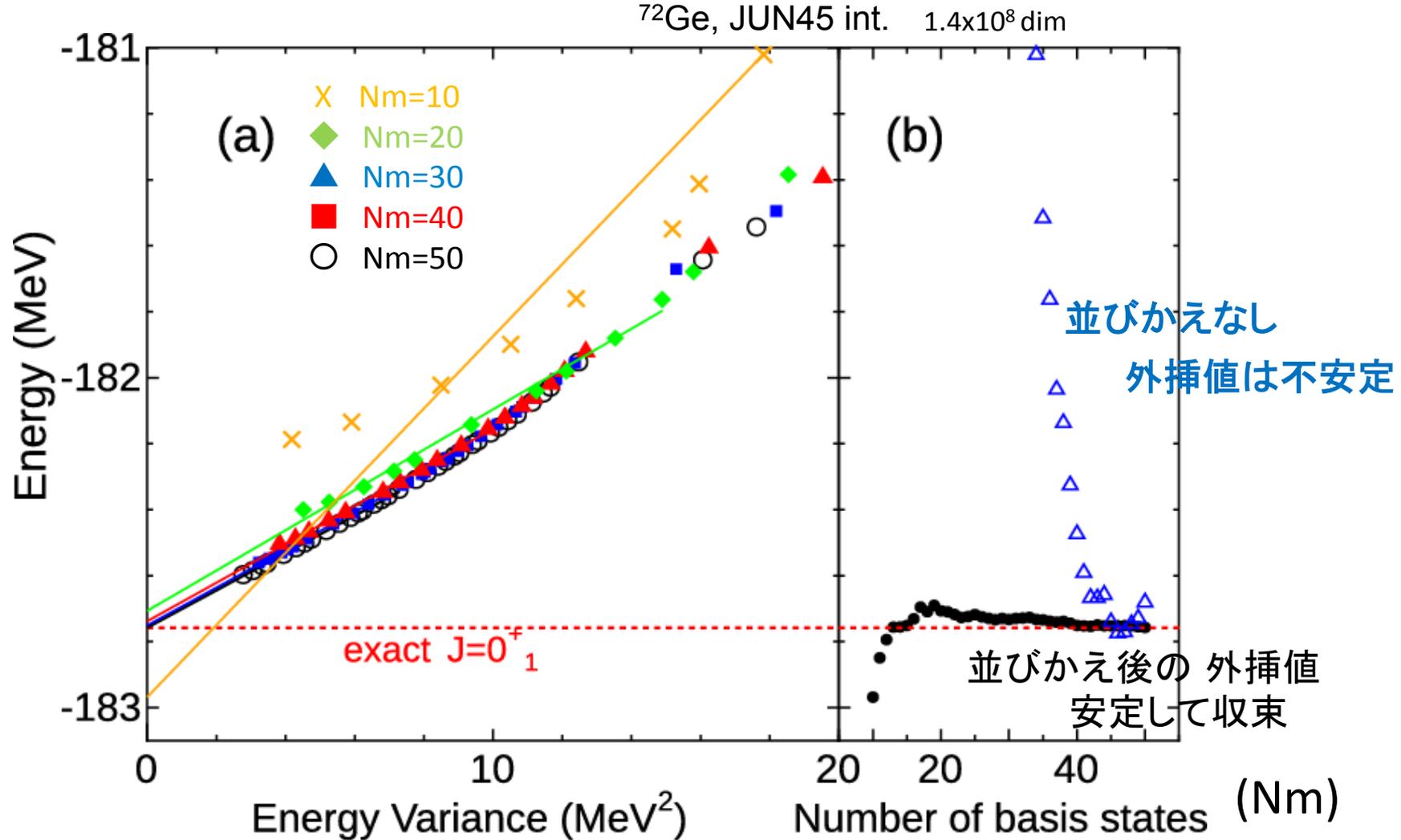
勾配が小さくなるような基底順序を選んでいくことにより、最も線形に近い点列を生成する。

^{72}Ge , JUN45 int. 1.4×10^8 m-scheme dim.



基底並びかえにより、より精密な
エネルギー期待値を得られた！

基底並びかえにおける外挿値の収束性

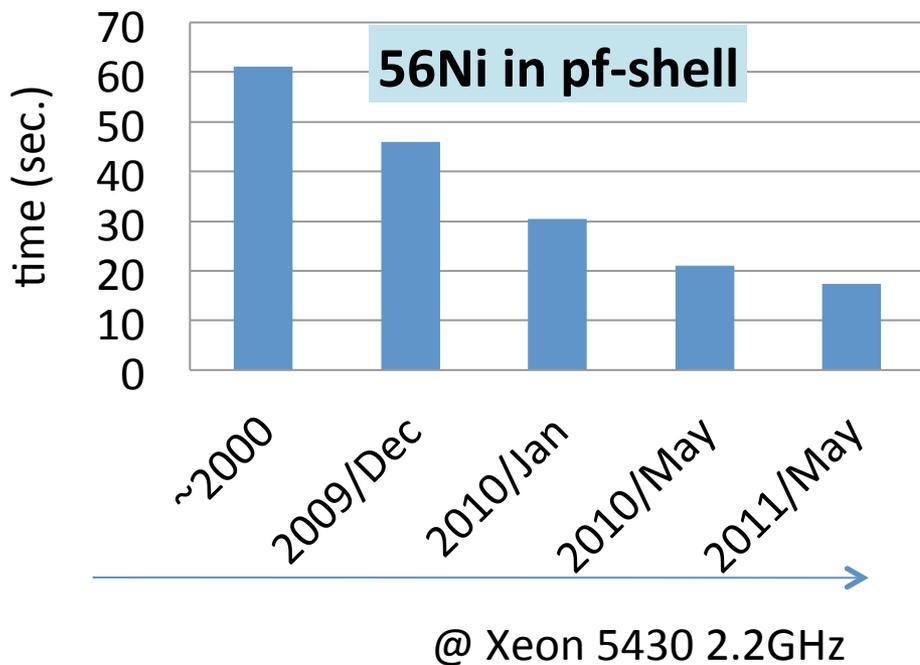


Ref. N. Shimizu, Y. Utsuno, T. Mizusaki, M. Honma, Y. Tsunoda, and T. Otsuka,
Phys. Rev. C **85**, 054301, (2012).

平成24年度は新しいアルゴリズムの実装とコードのチューニング

MCSM法コードの 単体性能チューニング状況

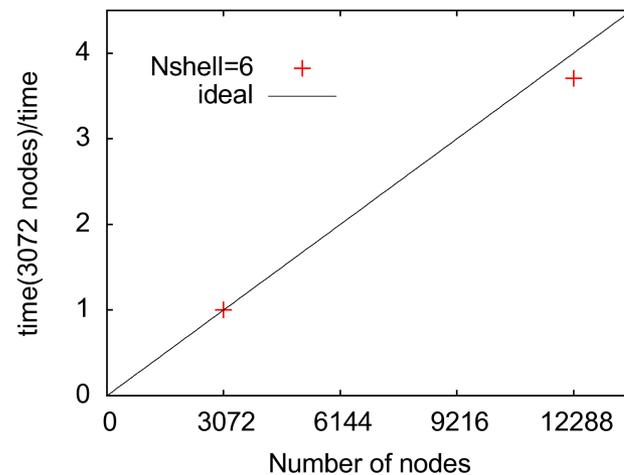
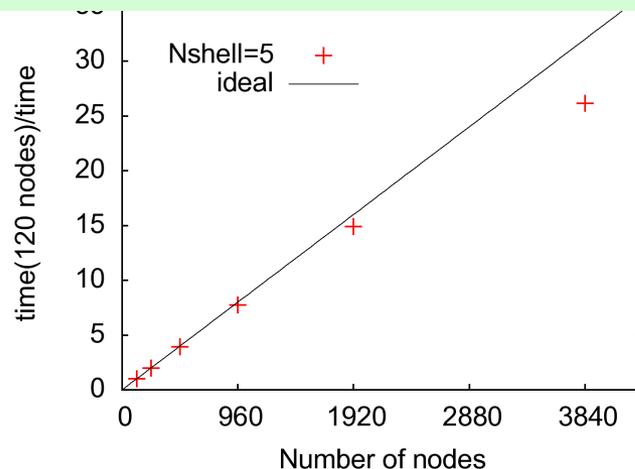
行列×ベクトルの行列積化による高速化



アルゴリズムチューニングにより3.5倍の速度向上を達成。no-core計算では、10倍の速度向上

Ref. Y. Utsuno, N. Shimizu, T. Otsuka and T. Abe, Comp. Phys. Comm. 184, 102 (2013).

MCSM法コードの京計算機上での 並列効率チューニング状況



5主殻計算では約4000ノードまで、
6主殻計算では12000ノードまでの
ストロングスケーリング良好

実行効率の実績

H24年度通期で課題2では **23.2%**

計算の本体(固有値の計算)

- 軽い核の第一原理計算
 - 5主殻模型空間の系統的計算
3840ノード 実行効率～**35%** (ストロングスケーリング90%)
 - 6主殻模型空間でのベンチマーク的計算
12000ノード 実行効率～**40%** (ストロングスケーリング90%)
- 中重核の殻模型計算
 - 中性子過剰領域の系統的計算 実行効率～**20%**
ストロングスケーリング 1920ノードで90%、3800ノードで85%

外挿のための分散計算 (H^2) :

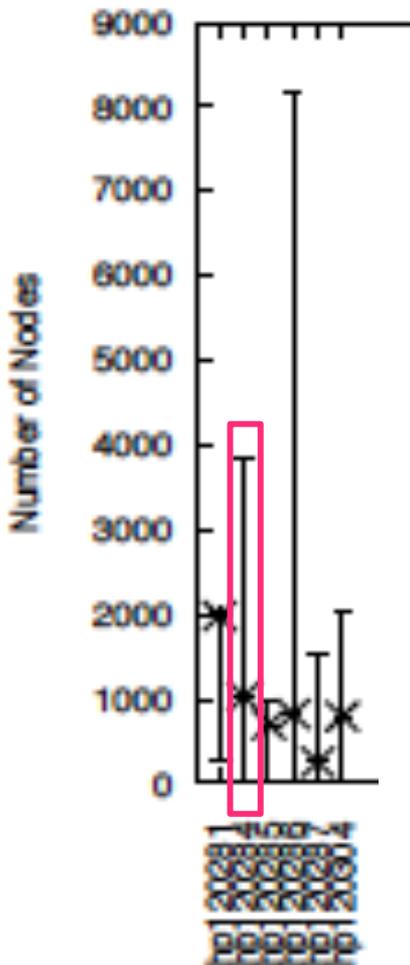
計算時間全体の 1/3 程度

実行効率は最高で64%まで行った

計算性能の開発成果

AICS サマリーレポート

ノード数



計算効率

+ 課題2

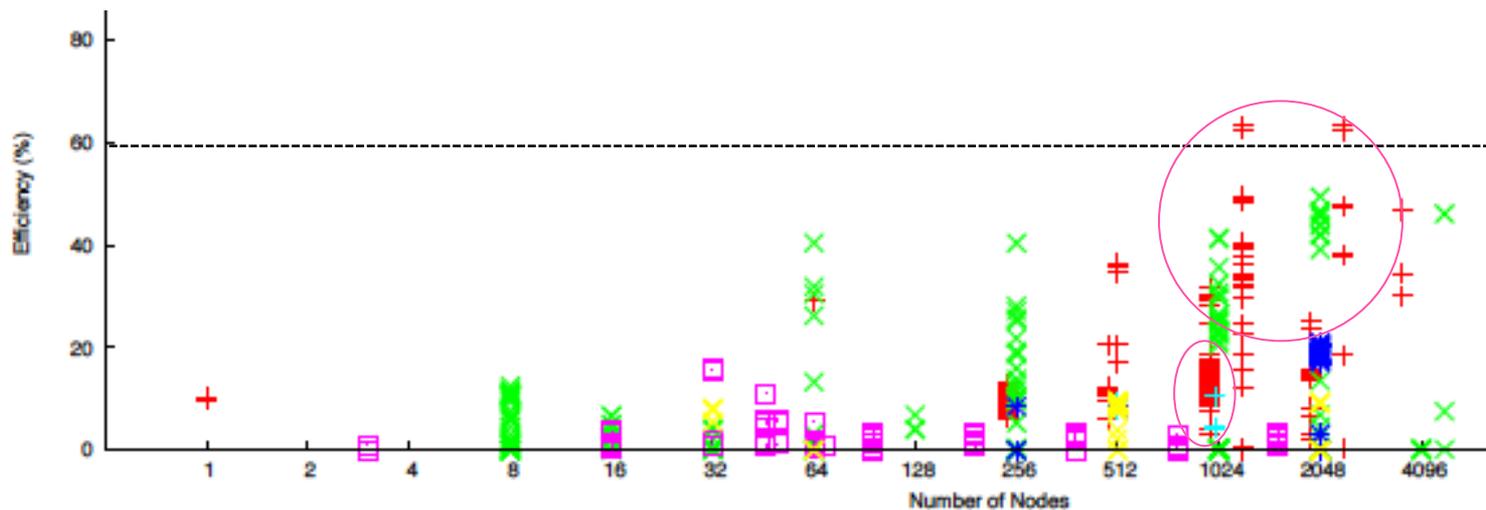
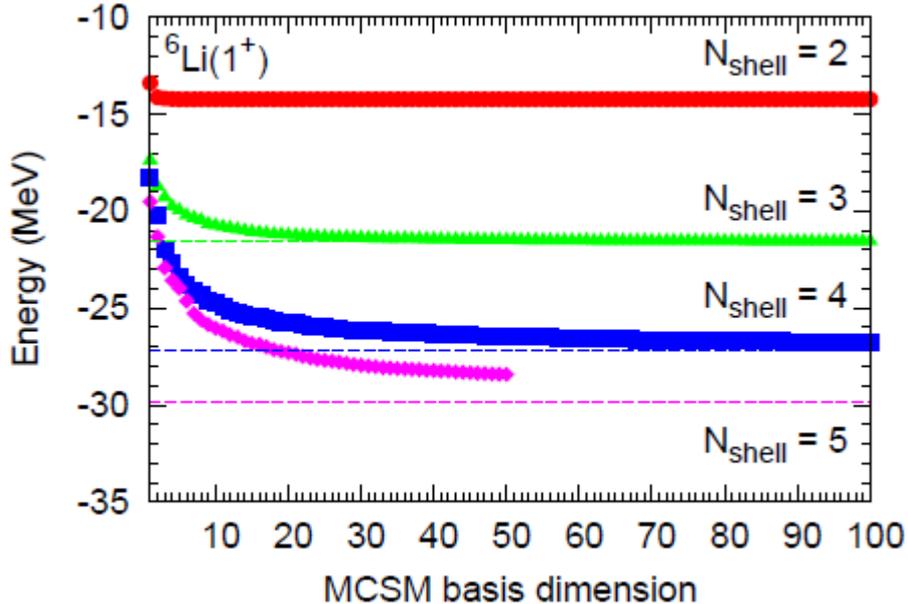


図5 ノードあたりの平均実行効率 (ノード数別)

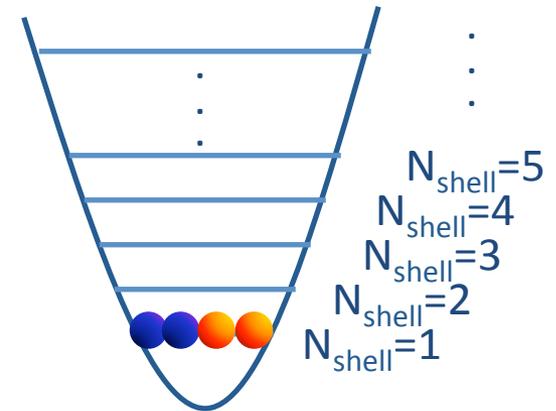
すべてのジョブをノード数と実行効率でプロットしています。実行効率の上位10グループはマークを変え

軽い核でのモンテカルロ殻模型計算 (no-core shell model approach)

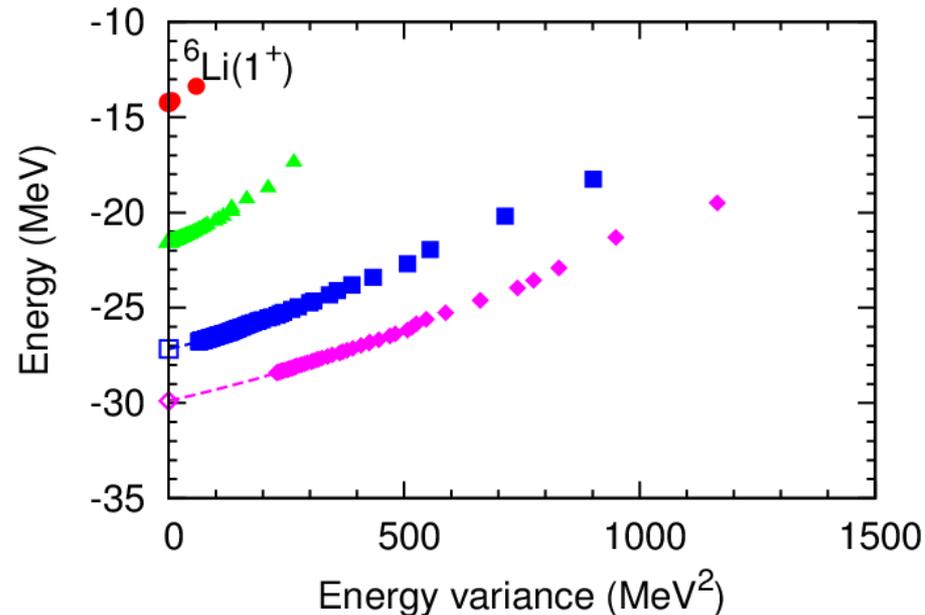
Convergence vs. number of basis states



T. Abe, P. Maris, T. Otsuka, N. Shimizu,
Y. Utsuno, and J. P. Vary,
Phys. Rev. C 86 054301 (2012)

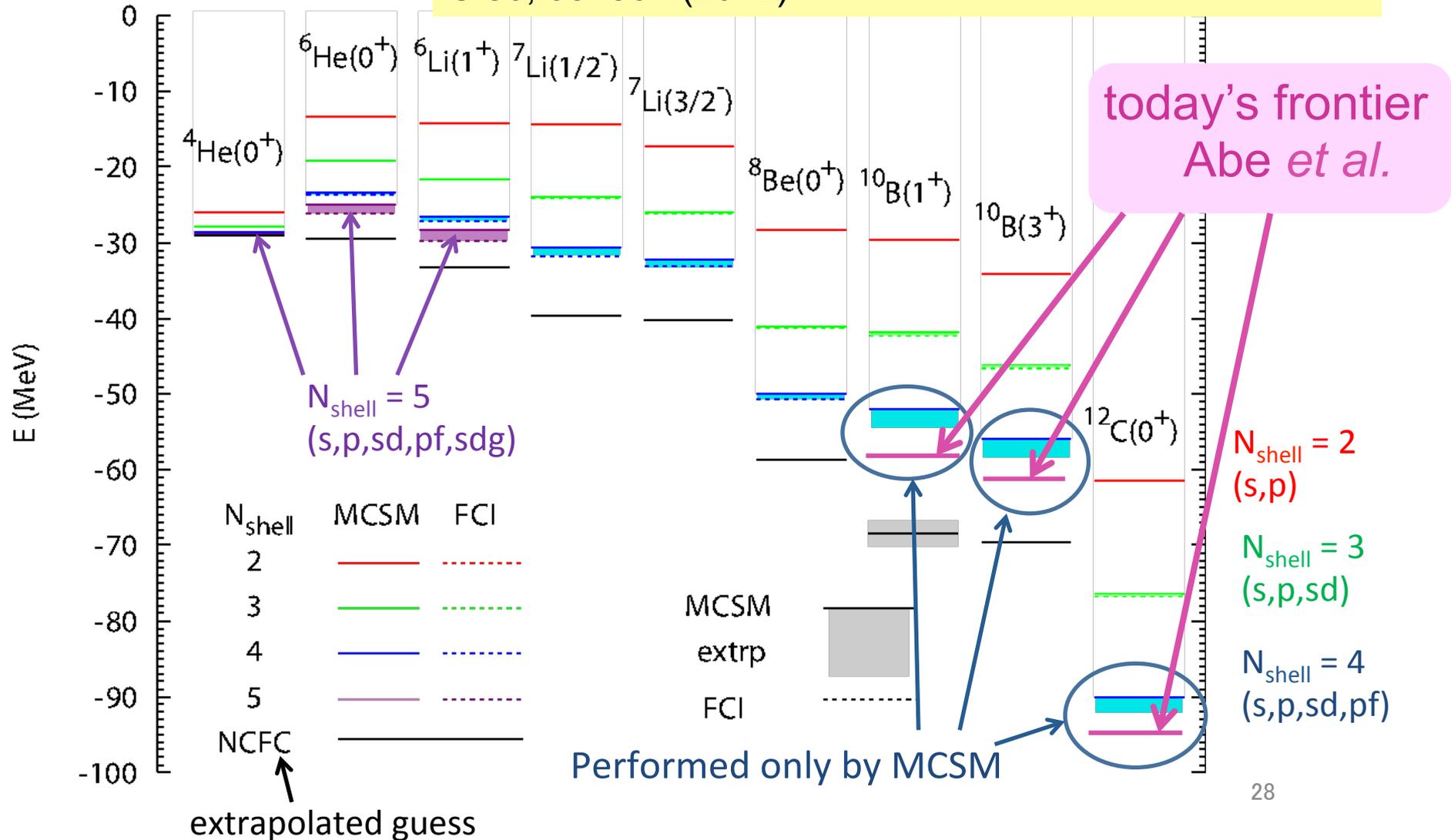


Energy variance extrapolation



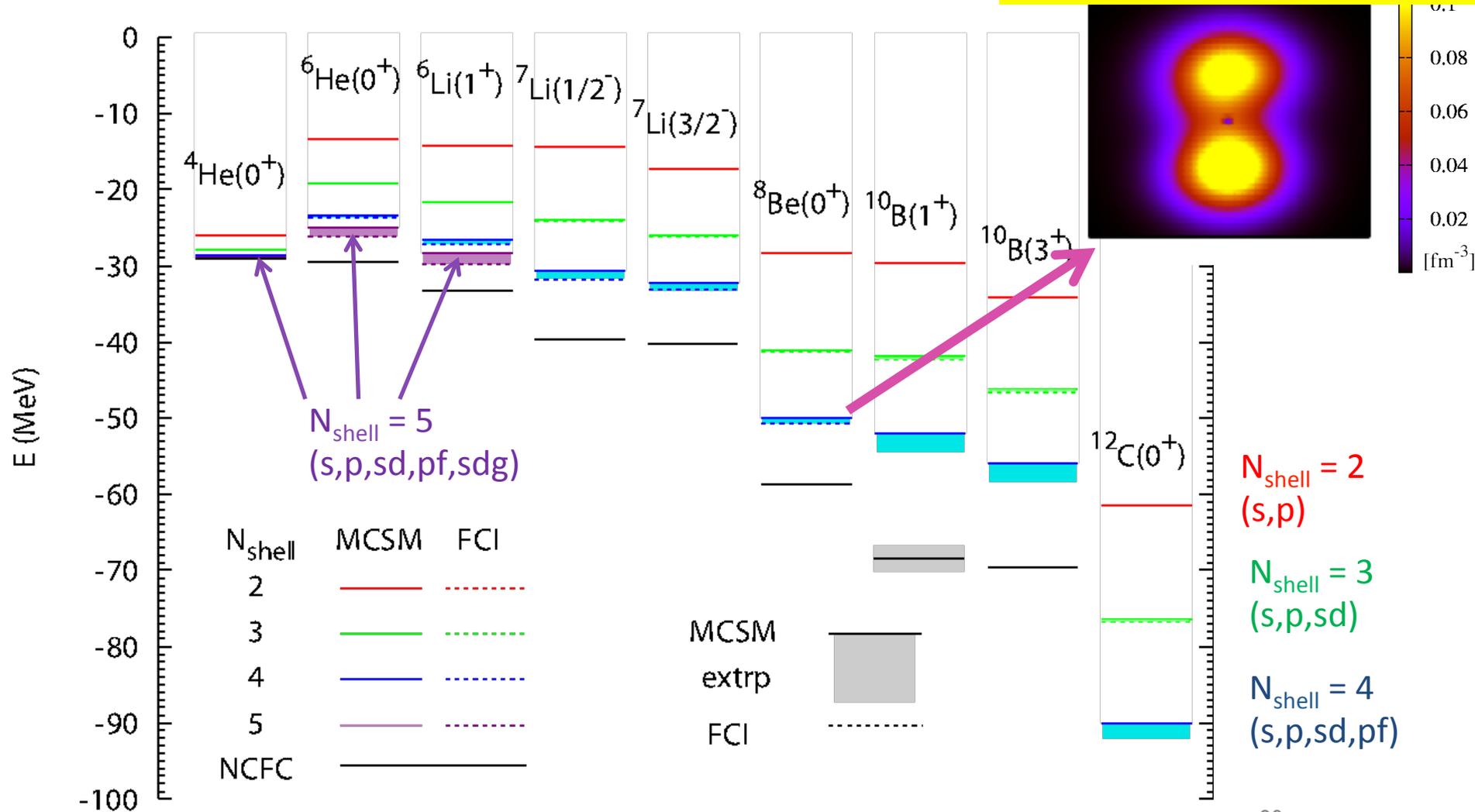
Benchmark for energy levels of p-shell nuclei

Abe, Maris, Otsuka, Shimizu, Utsuno, Vary, Phys. Rev. C 86, 054301 (2012).



Density profile of the intrinsic state of ^8Be

Abe, Maris, Otsuka, Shimizu, Utsuno, Vary, Phys. Rev. C 86, 054301 (2012).



中重核の微視的記述

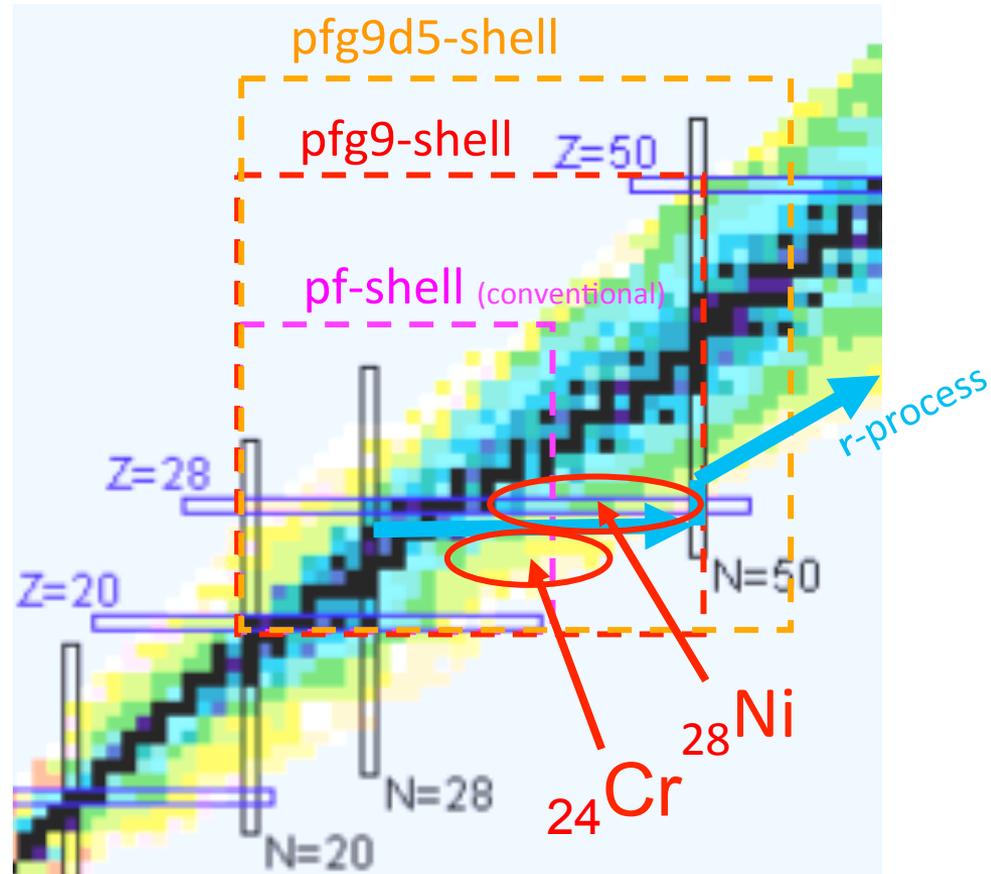
pf-shellにおける殻模型計算では、エキゾチック核での構造の大きな変化が出せない。



pfg9d5-shell という大きなヒルベルト空間で、核力の性質を取り込んだ精密計算で統一的記述と予言へ

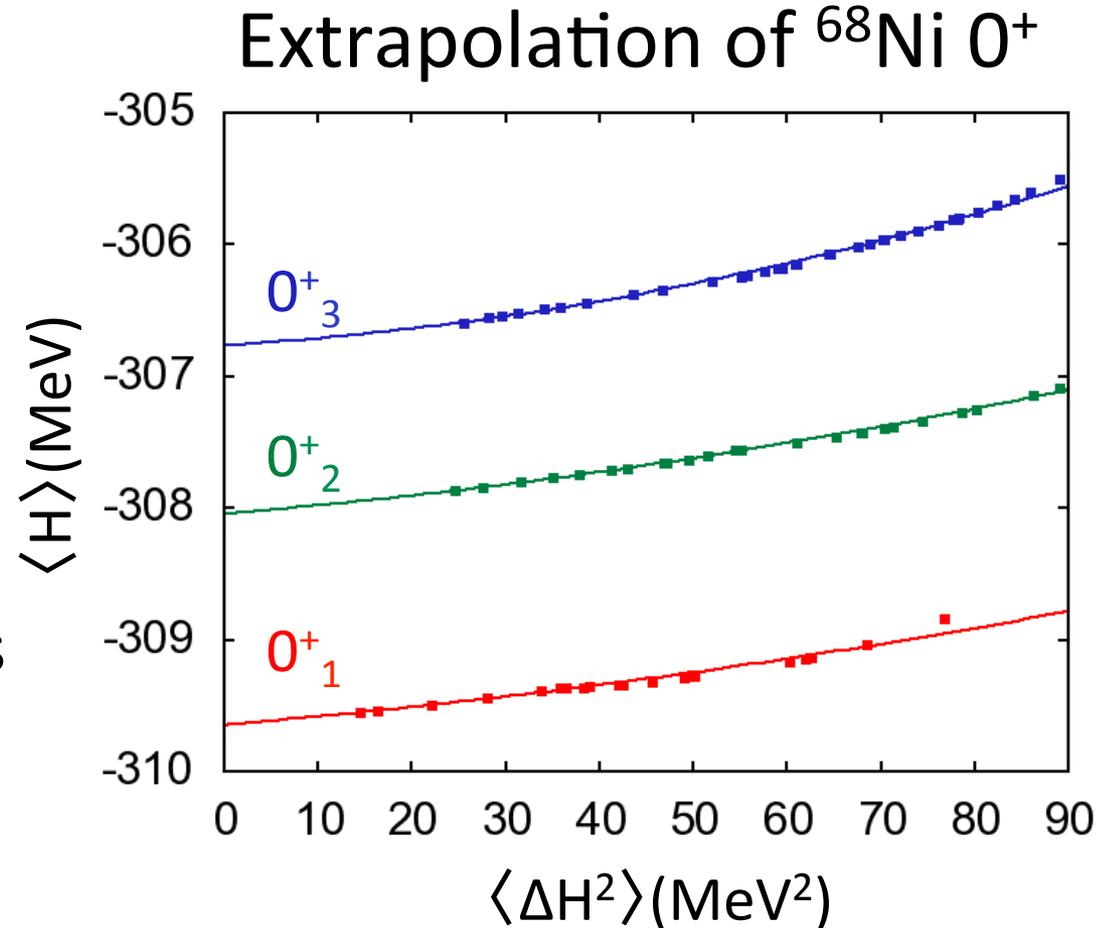
形の相変化についての新しい描像

核図表



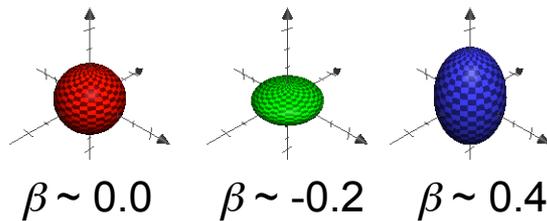
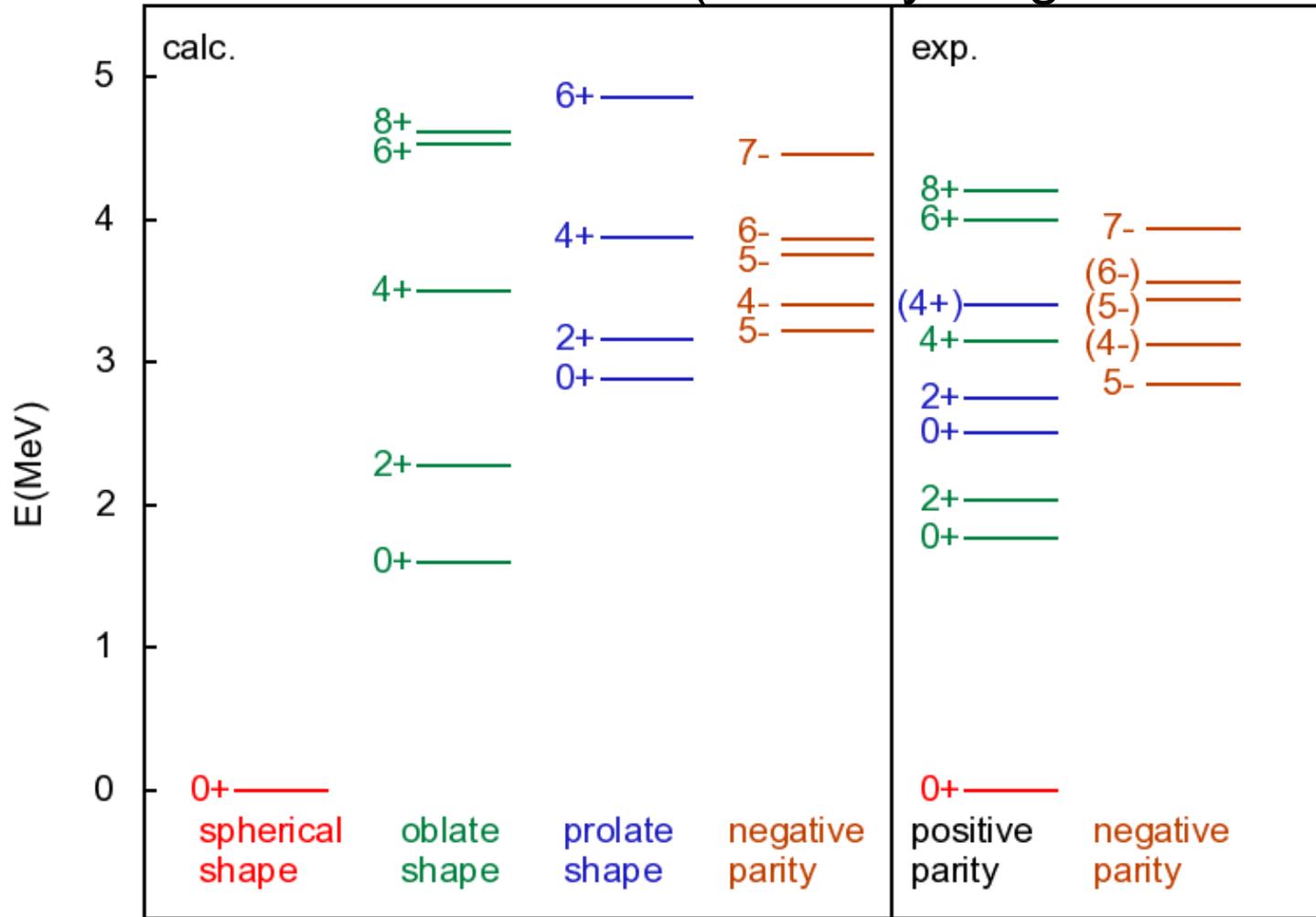
Energy-variance extrapolation

- Second-order extrapolation using energy variance
 $\langle \Delta H^2 \rangle = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$
- Points are calculated with each number of bases



N. Shimizu, Y. Utsuno, T. Mizusaki, T. Otsuka,
 T. Abe, and M. Honma, Phys. Rev. C **82**, 061305(R) (2010)

Level scheme of ^{68}Ni (a doubly magic nucleus)

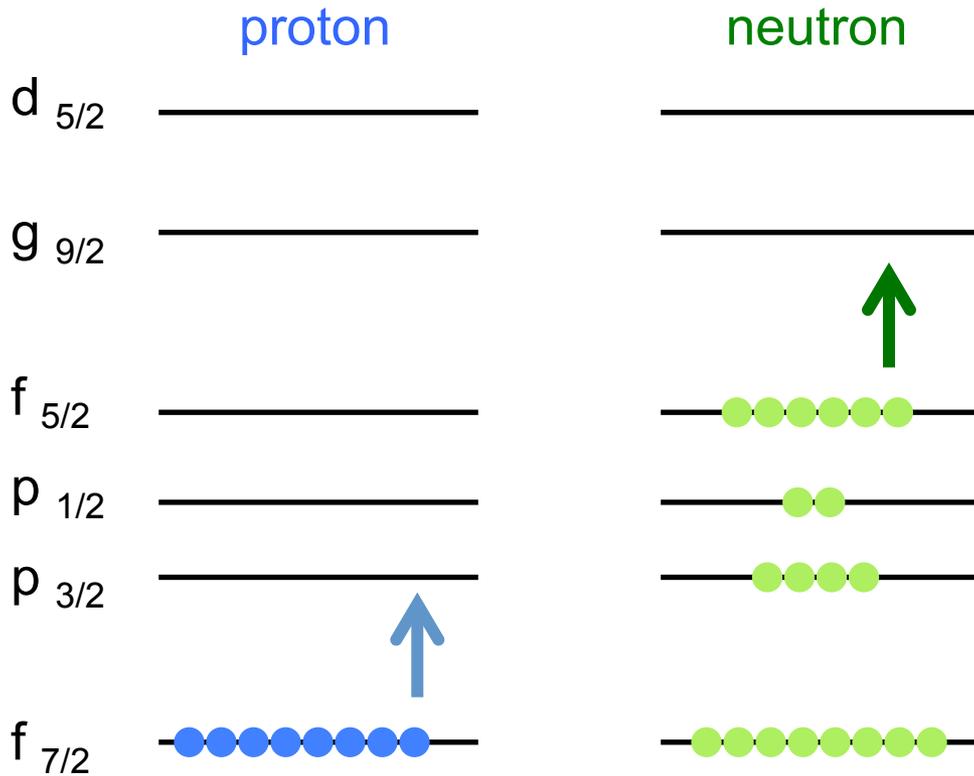


^{68}Ni in pf + g9 + d5 ... 5×10^{15} M-scheme dimension

粒子の配位



particle-hole
excitation



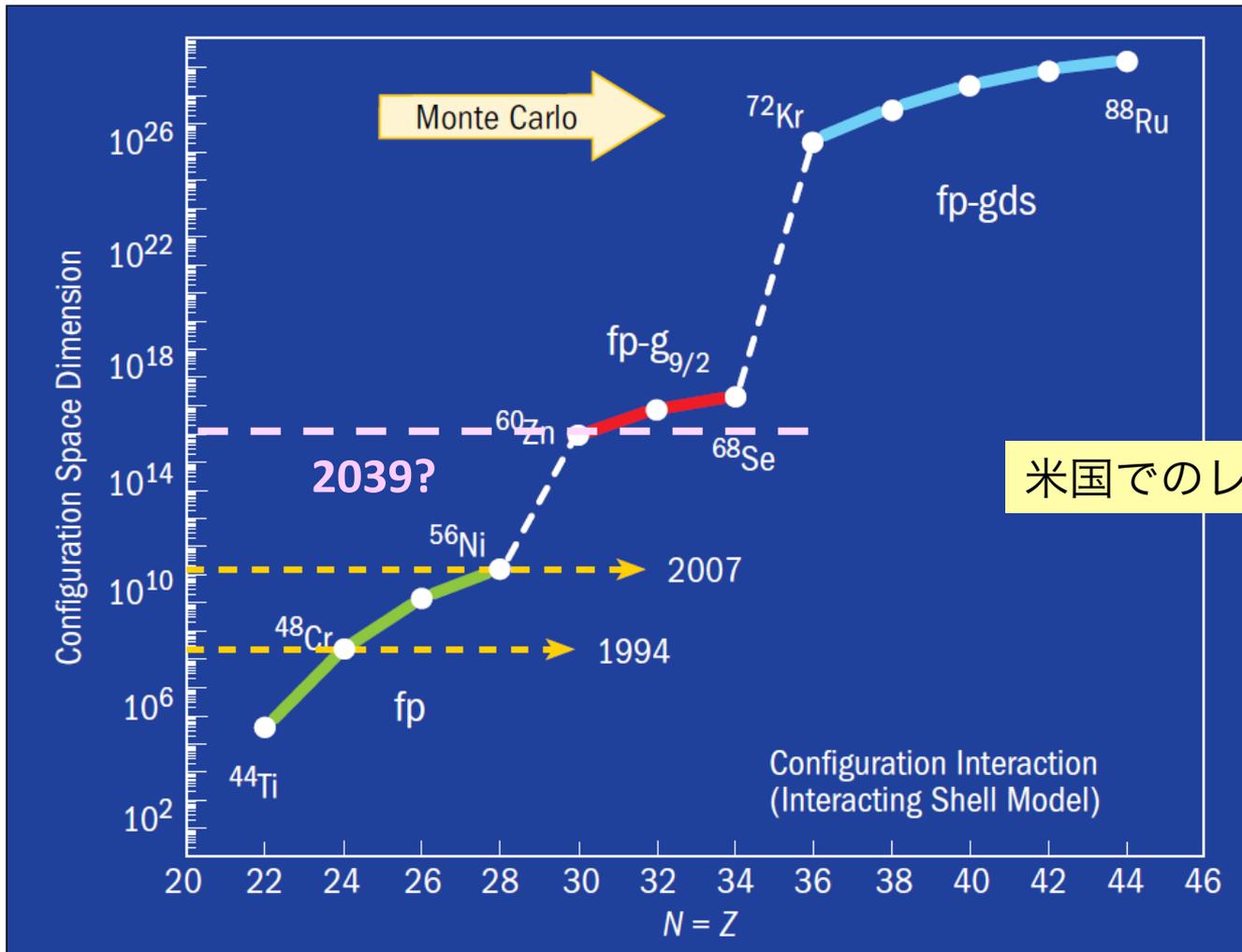
0 ⁺ state	proton	neutron
1 st	0.21	1.00
2 nd	0.72	2.39
3 rd	2.57	4.56

全く構造の異なる状態が
エネルギーの狭い範囲に
現れる

→ 形の相転移は
active particle の数を
order parameter

相転移3重点に似た状況

大型計算で質的に新しい物理
(他では不可能)



Shell-model dimension (without symmetry consideration) for the pf- to pf-g- shell nuclei.

SciDAC Review, winter issue 2007 + personal hunch.

計画(5ヶ年)

	H23	H24	H25	H26	H27
チューニング、 アルゴリズム 改良		「京」でのチューニング アルゴリズムの改良	アルゴリズムの改良		
軽い核の第一 原理計算 (質量数 <30)		4主殻 p殻核	5主殻 核力から媒質補正なしに(軽い)原子核をつくる Beクラスター構造 ^{12}C ホイル状態 (宇宙: 元素合成) sd殻核		6主殻 ホイル状態
閉殻芯を仮定 した中重核計 算(質量数 6 0~150)	1バレンス殻計算 有効相互作用の確立		2バレンス殻 有効相互作用の確立 ⇒ 核力から作る原子核へ向けて rプロセス核 $^{126}\text{Sn}, ^{129}\text{I}, ^{135}\text{Cs}, \dots$ $^{130}\text{Te}, ^{150}\text{Nd}, \dots$ (宇宙: 元素合成) (社会: 原子力ニーズ) (素粒子: 2重ベータ崩壊)		
3体力の効果 (新規提案)			3体力効果の探求 (有効2体力近似)		3体力フル計算

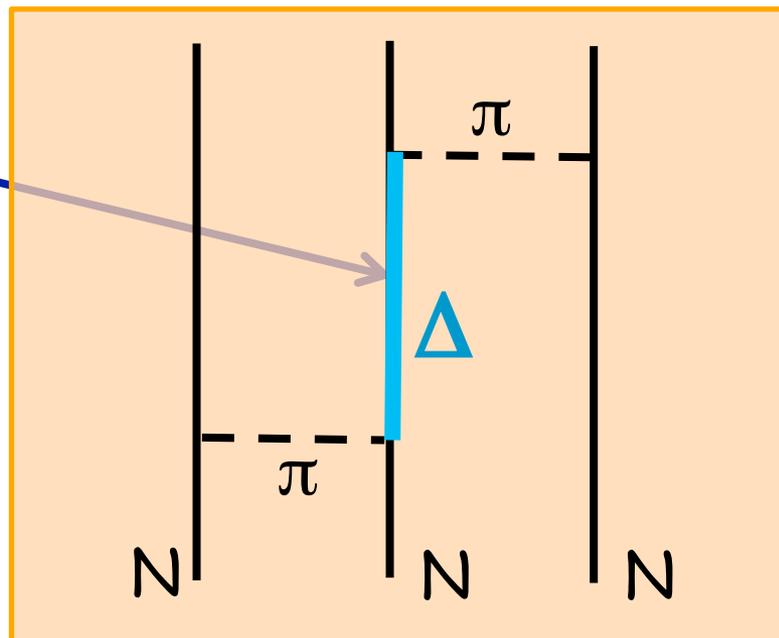
新テーマの追加 : 3体力の効果

核子間の2体力に3体力を加えて、その効果を探究

主要項 : 藤田-宮沢力

他の項 :
EFT,
Lattice QCD,
など

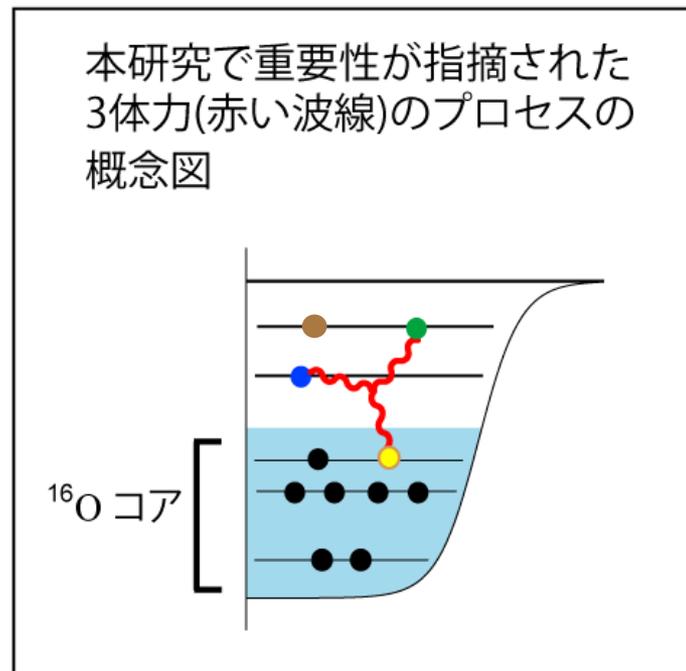
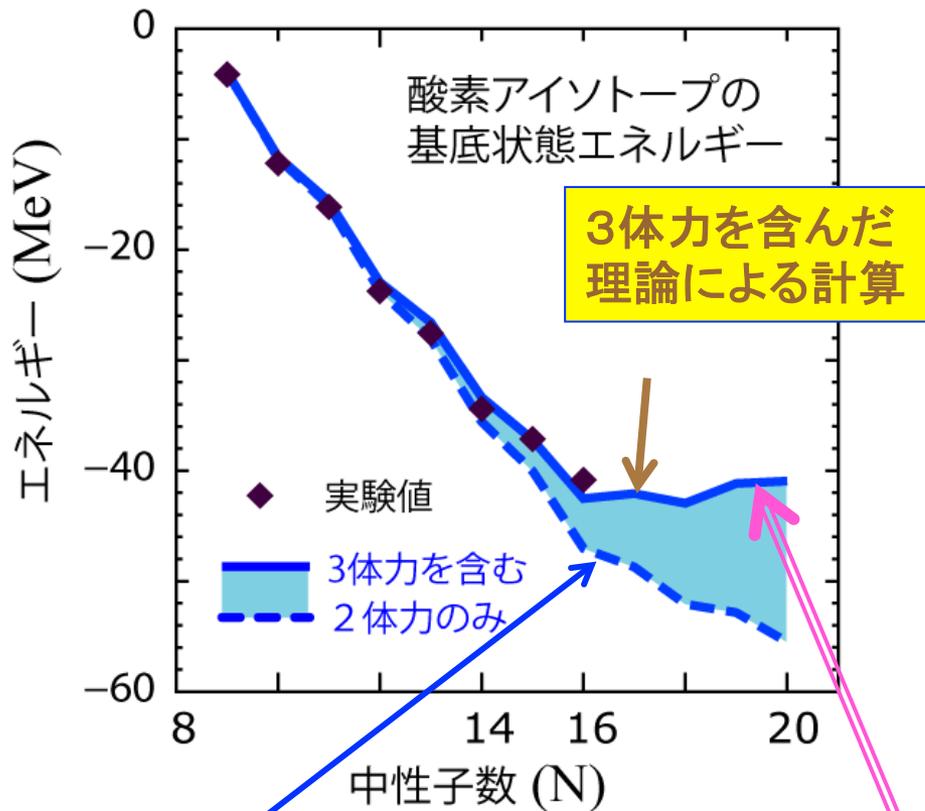
Δ particle
 $m=1232$ MeV
 $S=3/2, I=3/2$



3個の核子の内の1個分について何らかの平均値で置き換え

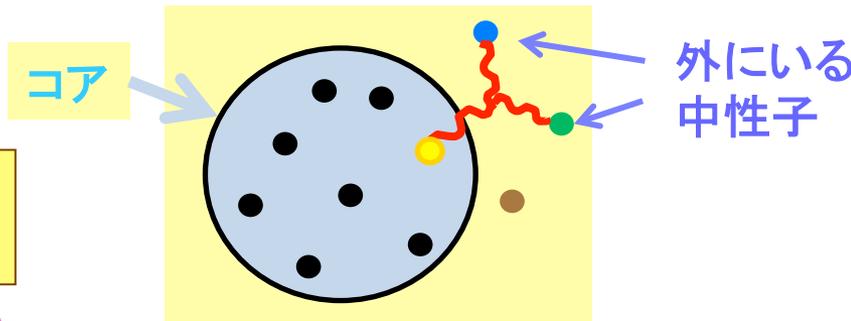
→ 十分良い近似、実行可能

3体力に関する先行研究：酸素アイソトープの存在限界(ドリップライン)



2体力だけによる旧来の理論による計算

結合エネルギーが打ち消される



Otsuka et al., PRL 105, 032501 (2010)

まとめ

1. 計算アルゴリズム、コードの開発

京での実用段階に到達

通期で実行効率 23.2% を達成

2. 軽い原子核の ab initio 計算は高度化

クラスター構造の自然な発現 → 吉田

3. 重い原子核 計算進行中

形の相転移に関して3重点のような状況が大型計算を活かして実現
→ 角田

4. 密度汎関数法による計算 → 江幡

明日の講演から（課題2 関連）

セッション1 9:50-10:10 <江幡 修一郎> (15+5)
時間依存密度汎関数法を用いた核ダイナミクスの研究

セッション3 13:20-13:40 <吉田亨> (15+5)
モンテカルロ殻模型計算で得られた軽い原子核の密度分布

セッション5 15:30-15:50 <角田 佑介> (15+5)
大規模殻模型計算による $Z=28$ 近傍核の研究