

ポスト京重点課題(9)
「宇宙の基本法則と進化の解明」



@千葉工業大学新習志野キャンパス
2016/06/04

モンテカルロ殻模型による 大規模原子核構造計算



原子核科学
研究センター

東大CNS 清水則孝

阿部喬(東大理)、宇都野穰(JAEA/東大CNS)、大塚孝治(東大理)、
富樫智章(東大CNS)、角田直文(東大CNS)、角田佑介(東大CNS)、
本間道雄(会津大)、水崎高浩(専修大)、吉田亨(東大CNS)

すこしだけ自己紹介

清水則孝

東京大学大学院理学系研究科
附属原子核科学研究センター



原子核科学
研究センター

2011~2015 HPCI戦略プログラム分野5課題2

2016~2019 ポスト京重点課題(9)「宇宙の基本法則と進化の解明」
サブ課題Bの原子核部分を担当



計算基礎科学連携拠点
Joint Institute for
Computational Fundamental Science

京/ポスト京を初めとするHigh Performance Computing
(HPC) を利用して、大規模殻模型計算による原子核
構造研究を推進



Plan of talk

- 原子核殻模型計算とは？
 - ランチョス法による直接対角化計算
- モンテカルロ殻模型
 - 多体基底のサンプリング
 - 対称性の回復(射影法)
 - 多体基底の最適化
 - エネルギー分散期待値による外挿法
- 原子核構造計算例

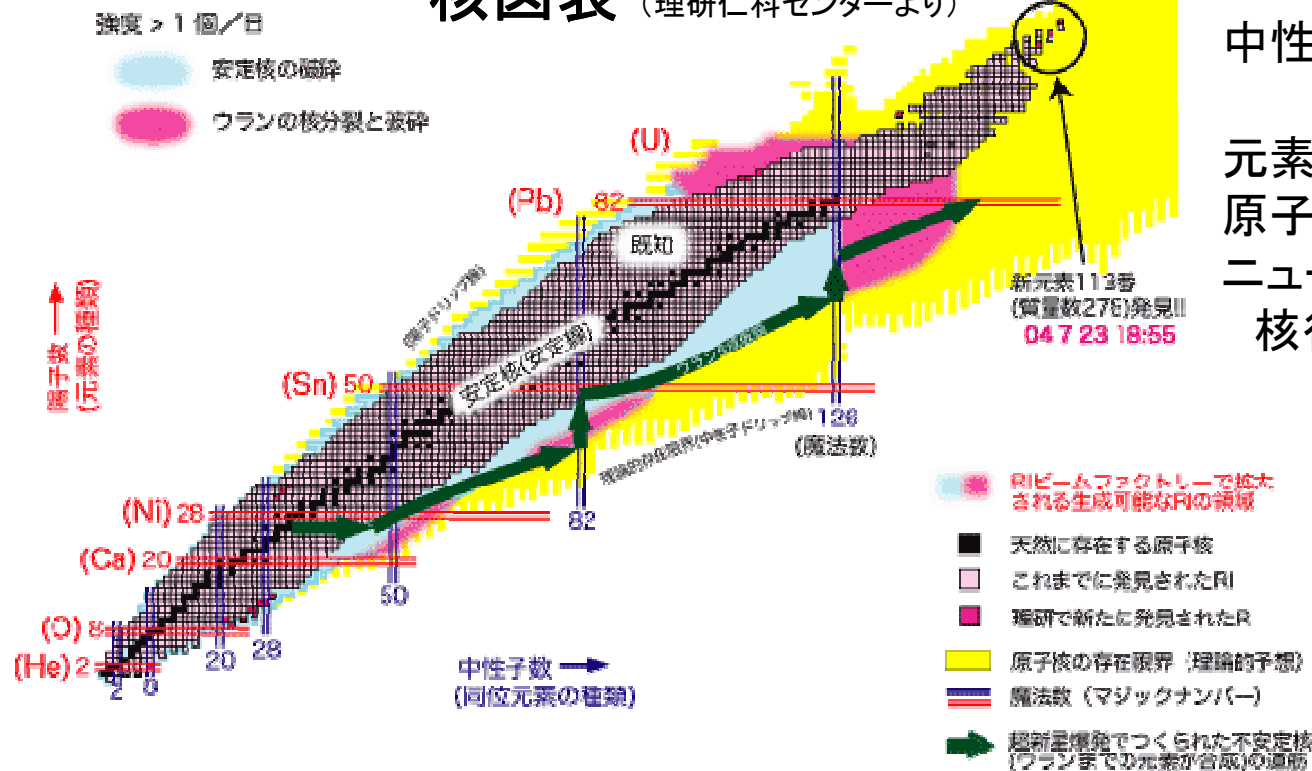
原子核構造計算

- 陽子と中性子を構成要素として原子核の構造を議論する。

⇒量子多体計算



核図表 (理研仁科センターより)

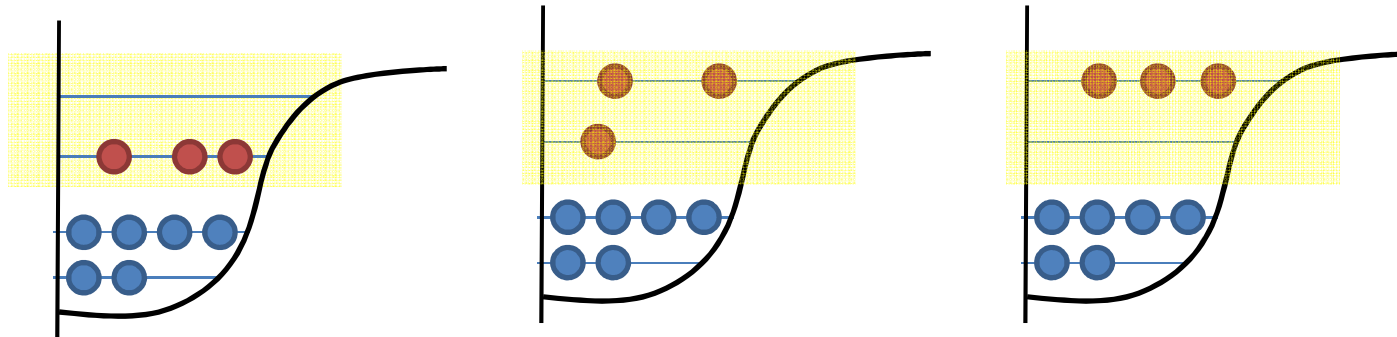


中性子過剰核の
エキゾチックな構造
元素合成 r過程の解明
原子力工学への基礎データ提供
ニュートリノレス2重ベータ崩壊の
核行列要素計算
etc. etc. ...



殻模型計算における配位混合

- Shell-model wave function



$$|\Psi\rangle = v_1|m_1\rangle + v_2|m_2\rangle + v_3|m_3\rangle + \dots$$

Combinatorial explosion

Feasible up to $\sim O(10^{11})$ configurations

原子核構造計算：陽子・中性子の多体問題を解く

シュレディンガー方程式

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad |\Psi\rangle = \sum_m v_m |m\rangle$$

大次元疎行列の固有値問題に変換、
ランチョス法によって数値計算をおこなう。

$$\sum_{m'} \langle m | H | m' \rangle v_{m'} = E v_m$$

原子核殻模型計算

より一般の多バレンス核子系では？

Solve Schrodinger's Equation

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \quad H = \sum_{i,j} \varepsilon_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{i,j,k,l} v_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k$$

平均場によって作られた多体基底で展開 $|\Psi\rangle = \sum_m u_m |m\rangle$
(e.g. 調和振動子 or Hartree-Fock basis)

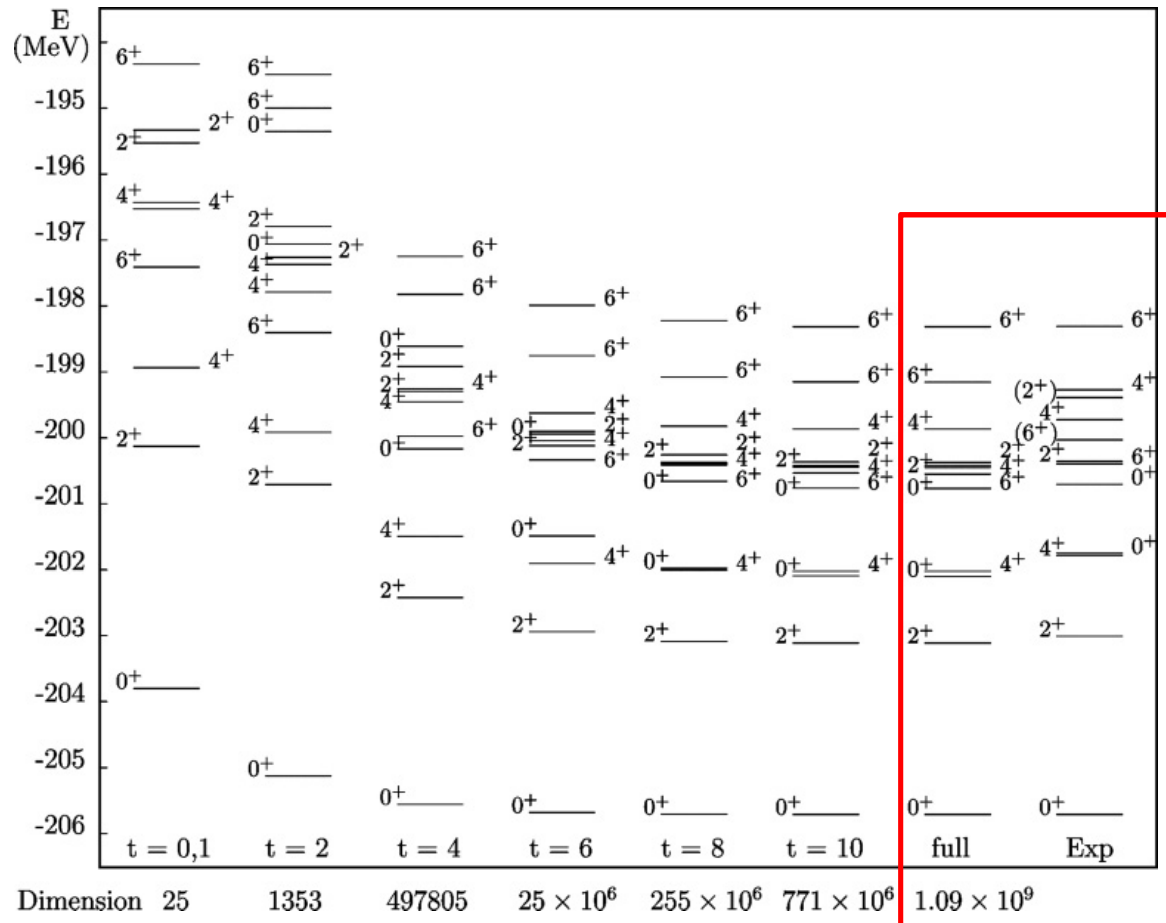
$$\langle m|H \sum_{m'} |m'\rangle \langle m'|\Psi\rangle = E \langle m|\Psi\rangle$$

$$\sum_{M'} H_{MM'} u_{M'} = E u_M$$

ハミルトニアン行列の固有値問題に帰着

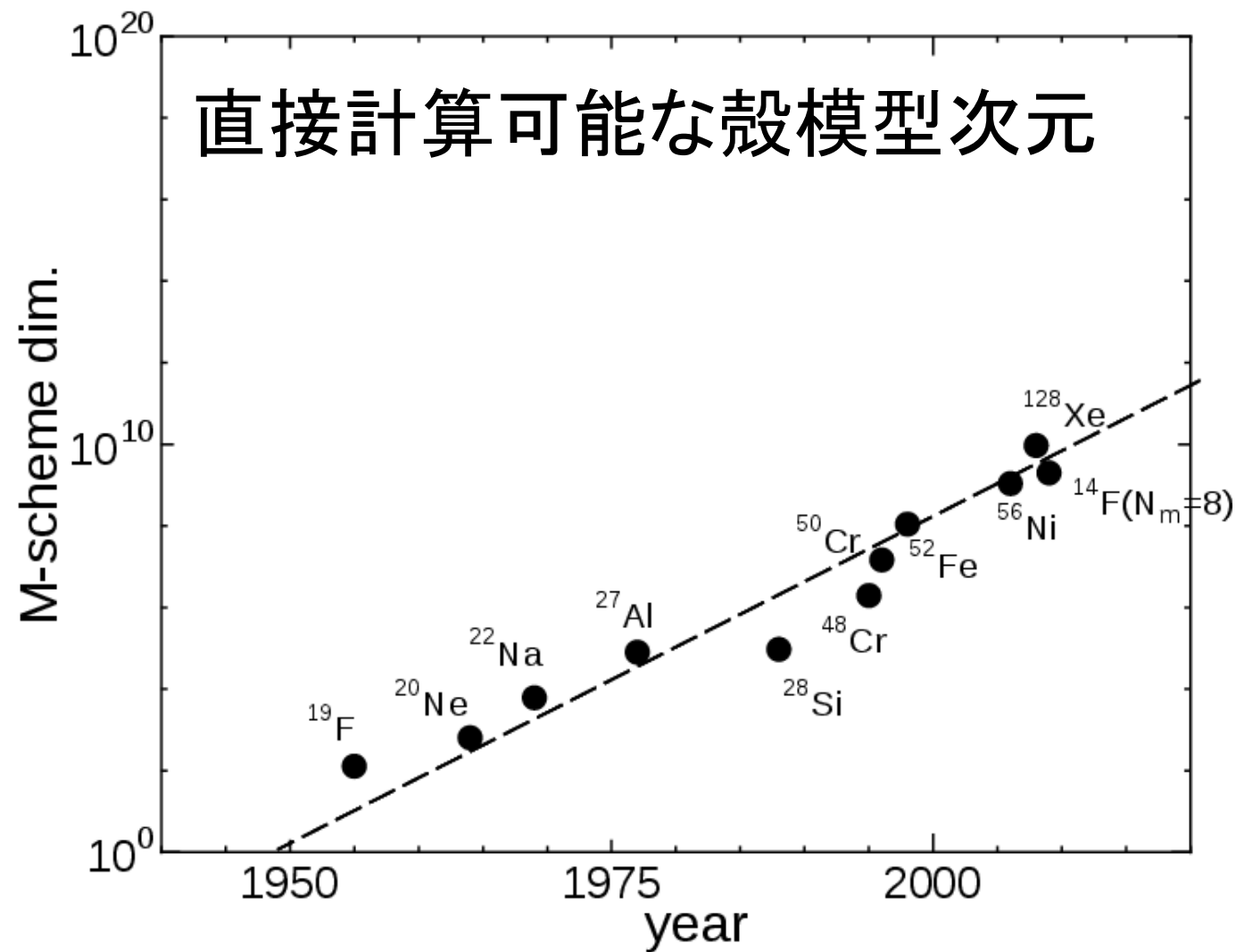
Lanczos method in shell-model calc.

^{56}Ni shell-model calc. 10^9 -dimension sparse matrix $\Rightarrow$ 4GB Lanczos vector



Excitation energies of ^{56}Ni

Ref. M. Horoi et al. Phys. Rev. C73 061305R (2006)



～1000億次元($\sim 10^{11}$)程度まではランチョス法による厳密対角化計算が可能

ランチョス法による殻模型計算の困難モンテカルロ殻模型

ランチョス法による殻模型計算の問題点

- 対角化可能である次元に制約がある。
現在では $\sim O(10^{11})$
- 非常に多数の配位の重ねあわせで表現されるので、背後の物理がわかりにくい



モンテカルロ殻模型を提唱

殻模型計算におけるさまざまな手法

- Lanczos法による厳密対角化 t -particle t -hole truncation scheme
- Pair-truncated shell model (Higashiyama, Yoshinaga)
- Shell Model Monte Carlo
(補助場量子モンテカルロ法)
- モンテカルロ殻模型(MCSM)
- Generator Coordinate Method, VAMPIR, and so on...

補助場量子モンテカルロ法

S.E.Koonin *et al.*, Phys. Rep. 278, 1 (1997)

虚時間発展 $|\text{g.s.}\rangle \propto \lim_{\beta \rightarrow \infty} e^{-\beta \hat{H}} |\phi_0\rangle$

ハミルトニアン H は 2 体演算子

Hubbard-Stratonovich 変換

$$e^{-\beta \hat{H}} |\phi_0\rangle \approx \int \prod_{\alpha} \prod_n d\sigma_{\alpha n} G(\sigma) e^{-\Delta \beta \hat{h}(\sigma)} |\phi_0\rangle$$

ハミルトニアン $h(\sigma)$
1 体演算子 + 補助場

× 負符号問題

補助場 σ はモンテカルロ積分される

量子モンテカルロ対角化法 (後にモンテカルロ殻模型)

M. Honma et al., Phys. Rev. Lett. 77 3315 (1996)

MCSM 基底を補助場モンテカルロ法に基づいた式から求める:

$$|\phi(\sigma)\rangle = \prod_i e^{\Delta\beta \cdot h_i(\sigma)} \cdot |\phi^{(0)}\rangle.$$

補助場 σ : ガウス分布に従って
発生させた乱数のセット

これらのMCSM基底によって作られた部分空間で
波動関数を記述する

$$|\Phi\rangle = \sum_{i=1}^{N_{MCSM}} c_i |\phi(\sigma)\rangle_i.$$

← MCSM基底の数 (~100)

これらのMCSM基底は、乱数に基づいて生成された多数の基底から
固有値を下げるように選ばれた少数の基底である。

MCSM基底

カノニカル多体基底

$c_i^\dagger \dots$ 調和振動子基底の生成演算子

Slater 行列式

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

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

一体ハミルトニアン演算によって
基底の表現を変えない
(Baker-Hausdorff theorem)

M. Honma, T. Mizusaki, and T. Otsuka, Phys. Rev. Lett. 77 3315 (1996)

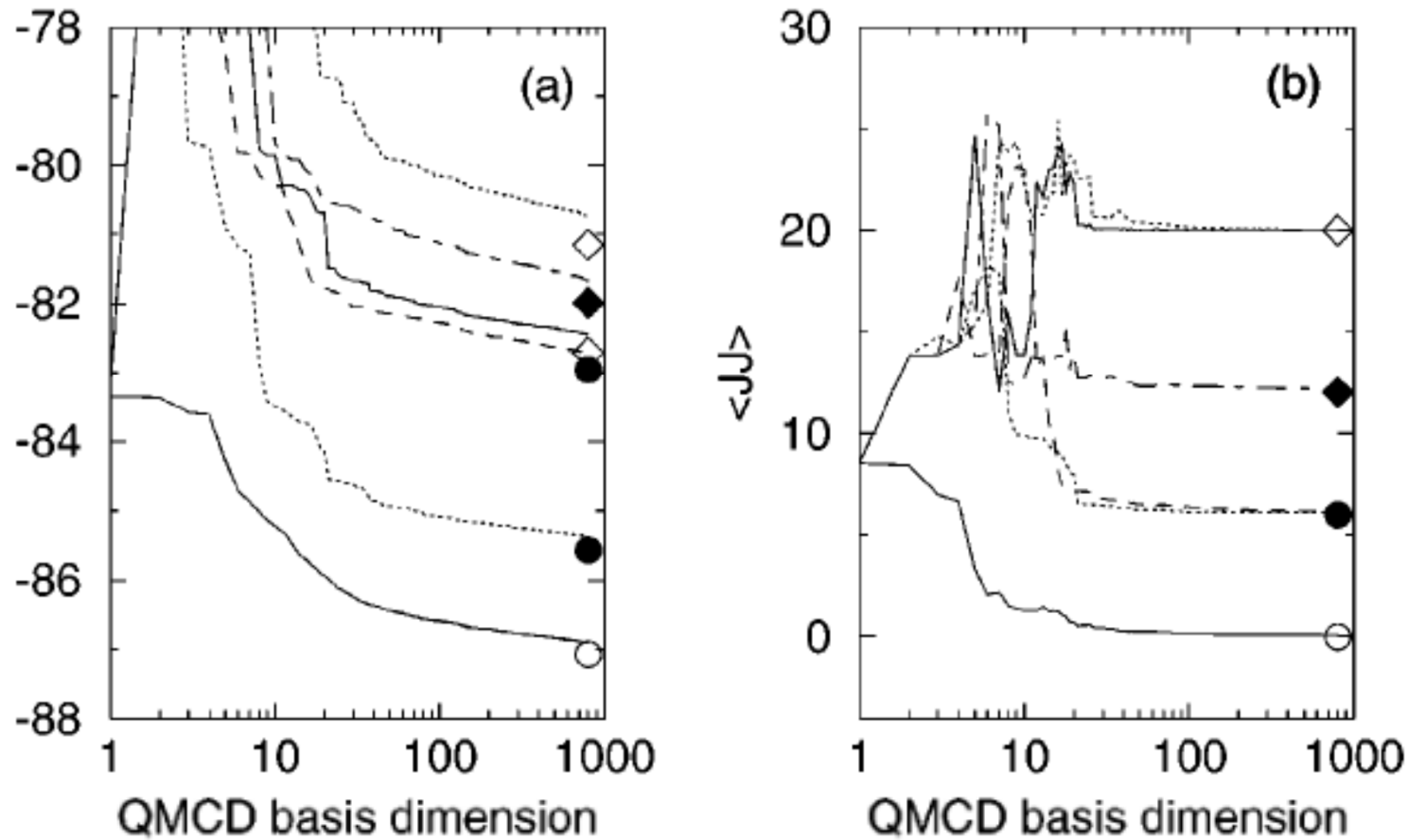
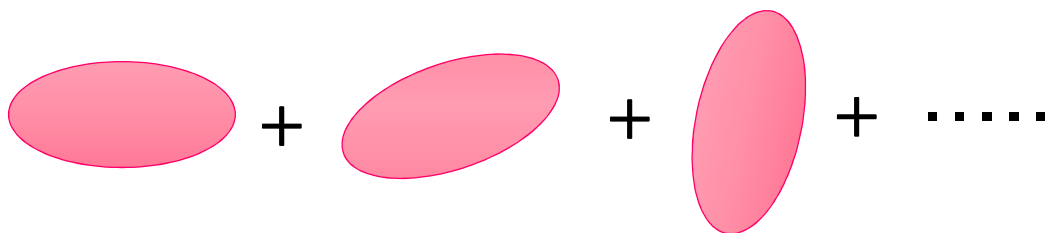


FIG. 1. (a) Energies and (b) expectation values of $J \cdot J$ of the lowest six states of ^{24}Mg plotted as a function of the QMCD basis dimension, with $N_t = 20$ and $\Delta\beta = 0.07$ (MeV^{-1}). The exact values are shown by symbols. Different symbols indicate different angular momenta.

角運動量射影

実験室系では、回転対称性を回復する必要がある。

⇒ オイラー角で回転したものの重ね合わせで表現



$$|\Psi(I, M)\rangle = \sum_{k=1}^{N_{MCSM}} f_k P_M^I |\phi(D^{(k)})\rangle$$

$$P_M^I = \sum_{K=-I}^I g_K \frac{2I+1}{8\pi^2} \int d\Omega D_{MK}^{I*}(\Omega) e^{i\alpha J_z} e^{i\beta J_y} e^{i\gamma J_z}$$

オイラー角: $\Omega = \{\alpha, \beta, \gamma\}$

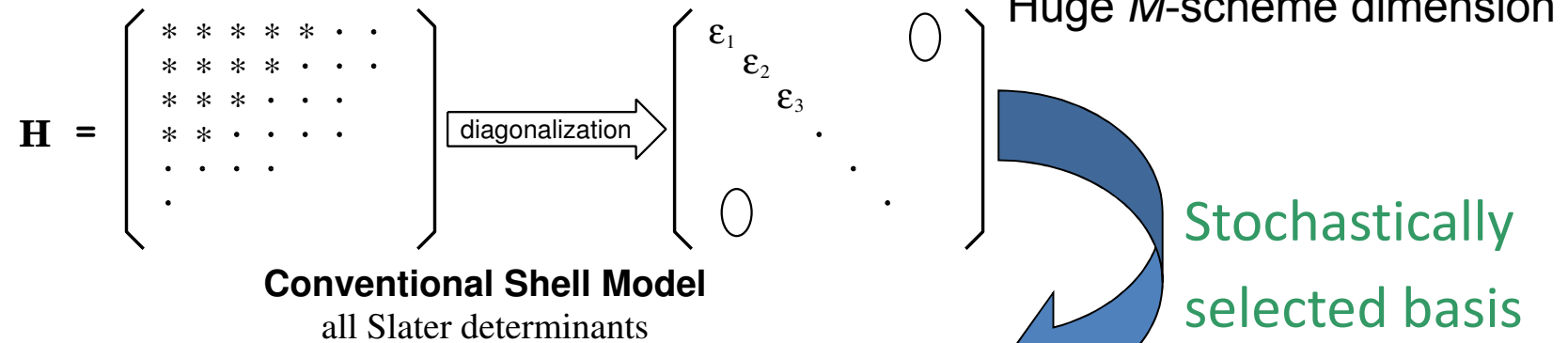
離散化して数値積分、~30,000 メッシュ点

計算が大変 → なるべく少ない基底数で表現したい。

Monte Carlo Shell Model

Otsuka, Honma, Mizusaki, Shimizu,
Utsuno, PPNP47, 319 (2001)

a tool to go beyond the conventional Lanczos diagonalization method
for Large-Scale Shell Model calculations



$$\mathbf{H} \approx \begin{pmatrix} * & * & * & \cdot \\ * & * & * & \cdot \\ * & * & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \xrightarrow{\text{diagonalization}} \begin{pmatrix} \epsilon'_1 & & 0 \\ & \epsilon'_2 & \\ 0 & & \cdot \end{pmatrix}$$

Monte Carlo Shell Model

bases important for a specific eigenstate

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

$\hat{h}(\sigma)$ one-body Hamiltonian

σ ... auxiliary fields

random numbers

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^{N_{MCSM}} f_k P^{J,\pi} |\phi_k\rangle$$

MCSM basis, deformed Slater det.

$$|\phi_k\rangle = \prod_{\alpha=1}^N \left(\sum_{i=1}^{N_{sp}} c_i^{\dagger} D_{i\alpha}^{(k)} \right) |-\rangle$$

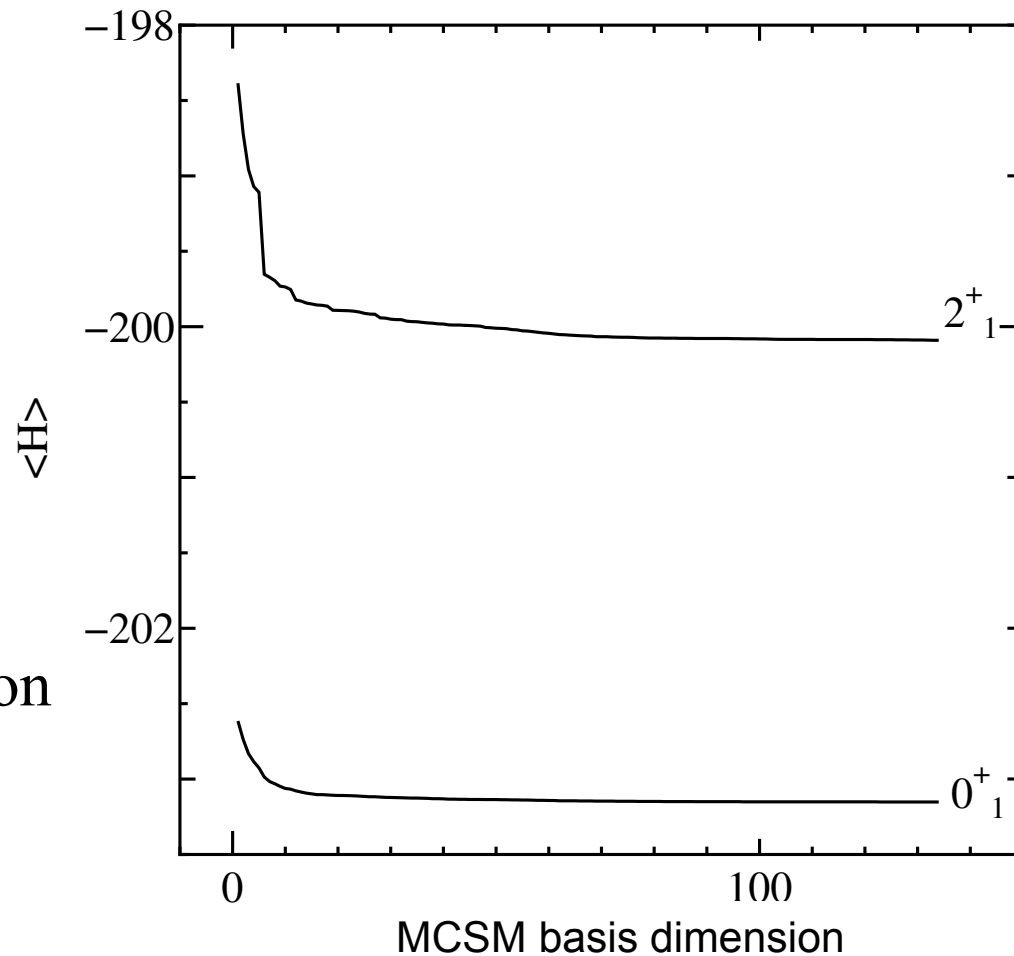
MCSMの収束性 with J projection

^{56}Ni MCSM results
(FPD6 interaction)

8 protons and 8 neutrons
in pf-shell

1.1×10^9 M-scheme dimension

Slater determinant MCSM basis



Ref. T.Otsuka, M.Honma, T.Mizusaki, N.Shimizu, and Y.Utsuno
Prog. Part. Nucl. Phys. 46 319(2001)

共役勾配法によるエネルギー最小化

変分法に基づいて、エネルギーを最小化する最小の基底数で状態を表現する

$$|\Psi(D)\rangle = \sum_{n=1}^{N_B} c_i P^{J,\Pi} |\phi(D^{(n)})\rangle \quad |\phi(D^{(n)})\rangle = \prod_{\alpha=1}^{N_p} \left(\sum_{i=1}^{N_{sp}} c_i^\dagger D_{i\alpha}^{(n)} \right) |-\rangle$$

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

共役勾配法を用いて、 D の関数として $E(D)$ を最小化する。

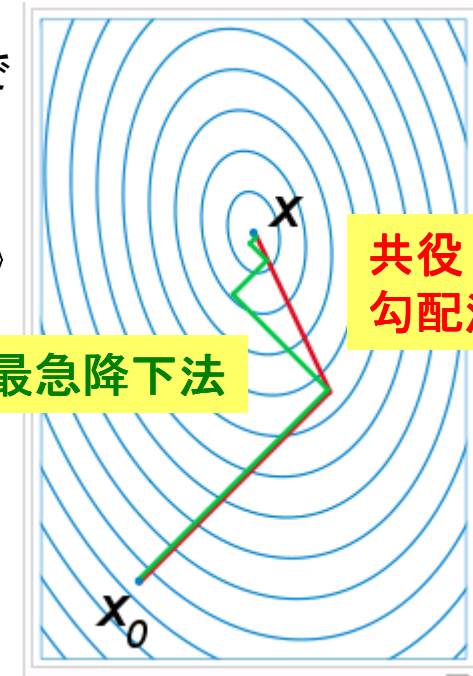
ステップ1: 補助場により基底の候補を多数生成

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

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、エネルギー期待値が収束するまで基底数 N を増やしていく

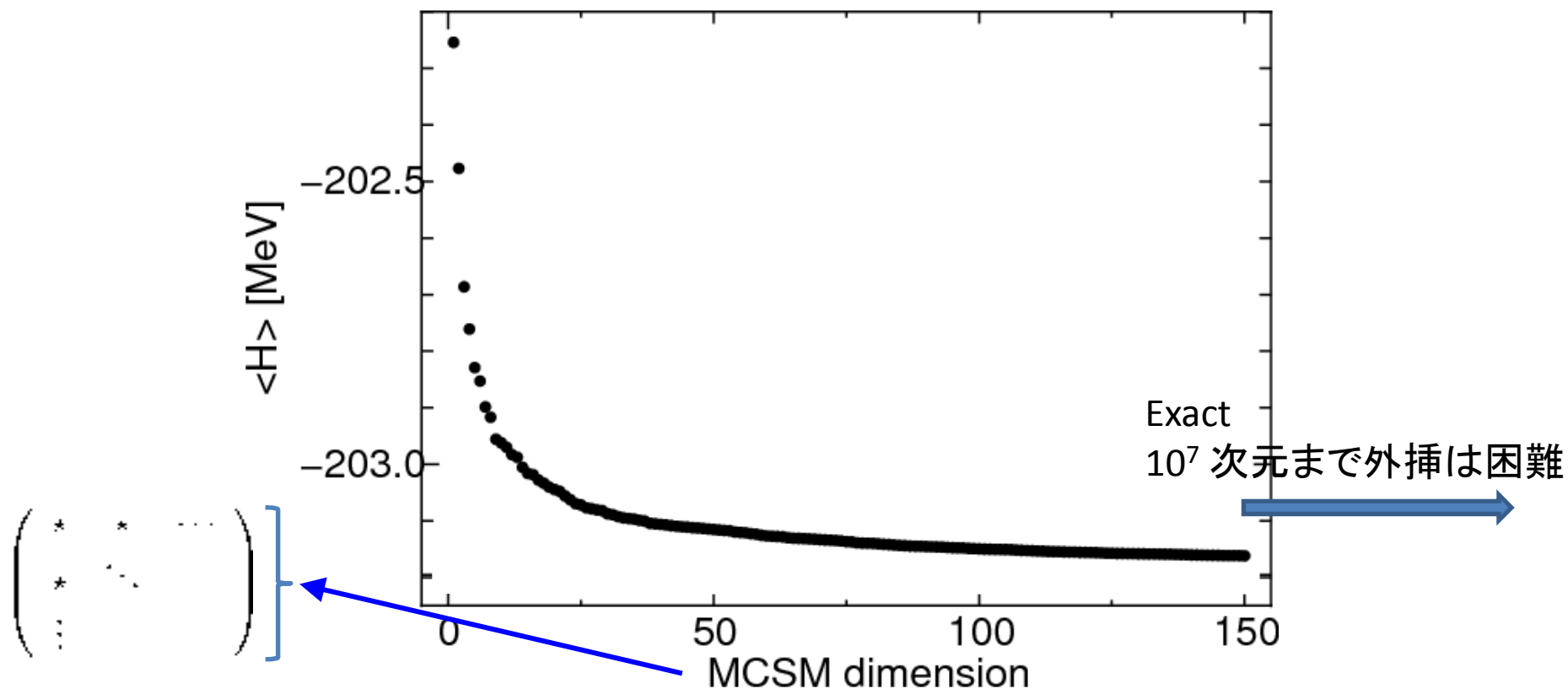


Ref. <http://en.wikipedia.org>

角運動量・パリティ射影し
多基底重ね合わせした
波動関数のエネルギー
期待値を変分する。

MCSMは良い近似法だが...

^{56}Ni in pf shell, 0^+_1 , 10^9 M-scheme dimension



変分原理に基づいており、厳密解のエネルギーの上限しか与えない
本当に収束しているのだろうか？

厳密解からどの程度はなれているか？

Extrapolation method using energy variance

Prepare a sequence of approximated wave function

$$|\Phi_1\rangle, |\Phi_2\rangle, \dots, |\Phi_i\rangle, \dots, |\Phi_N\rangle$$

better approximation

Energy variance is defined as

$$\langle \Delta H^2 \rangle_i = \langle H^2 \rangle_i - \langle H \rangle_i^2$$

If the wave function is the exact eigenstate of Hamiltonian, energy variance is zero

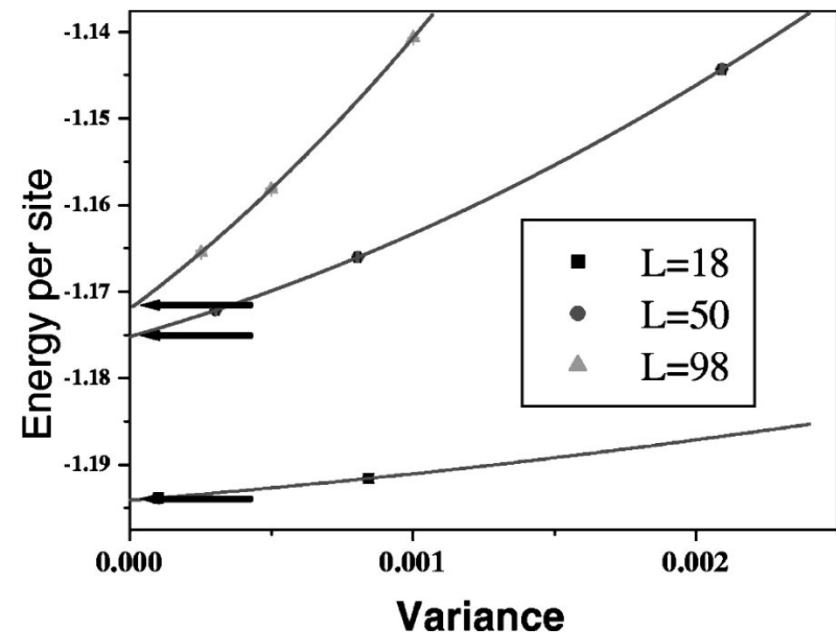
$$\langle \Delta H^2 \rangle = 0$$

If it is an approximate eigenstate,

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

With a sequence of approximate energies,

extrapolate $\langle \Delta H^2 \rangle \rightarrow 0$ so that $\langle H \rangle$ becomes E_0 , true energy.



Variational Monte Carlo in Hubbard model

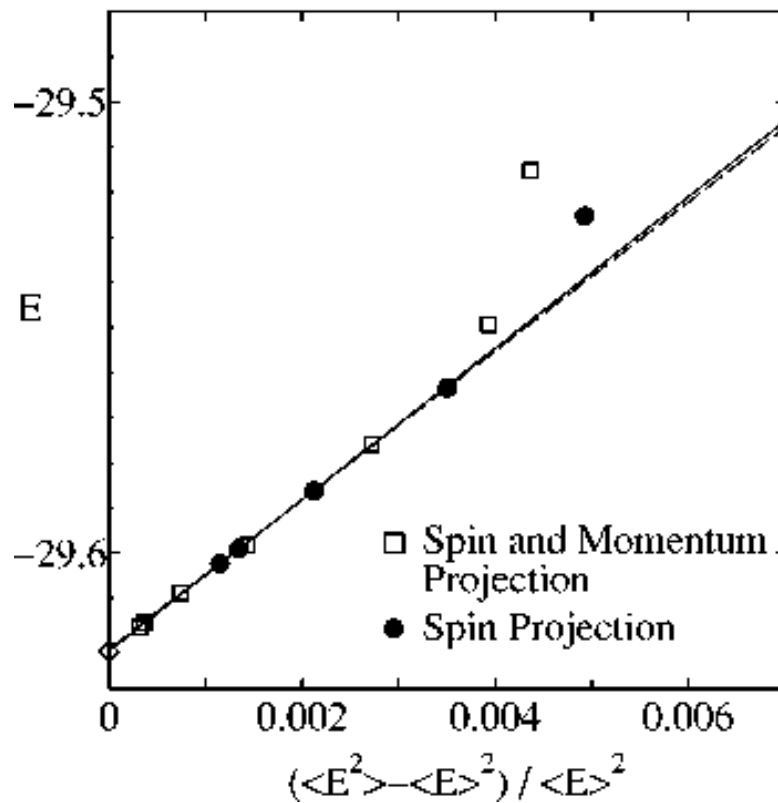
Ref. S. Sorella : cond-mat/0009149,

Phys. Rev. B **64**, 024512 (2001)

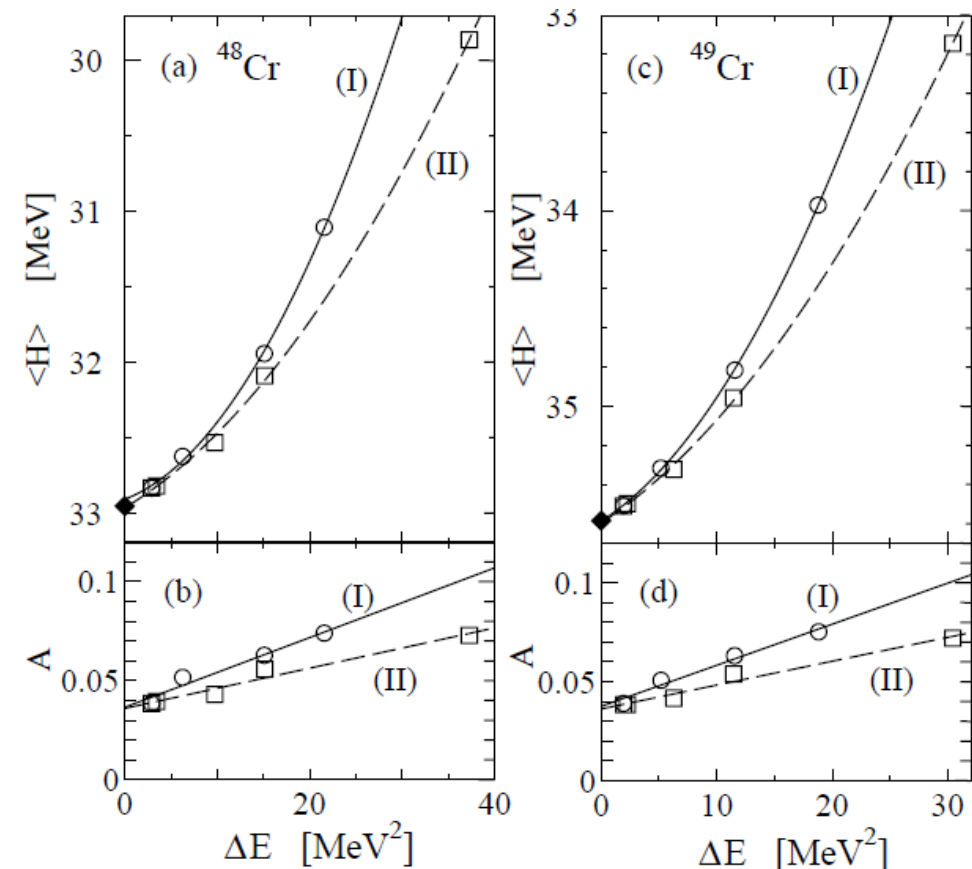
Extrapolation using energy variance

Path Integral Renormalization Group method

Hubbard $U=4$, 4×4 , energy extrapolation



Application to nuclear shell-model calculations



M. Imada and T. Kashima, J. Phys. Soc. Jpn. 69, 2723 (2000).

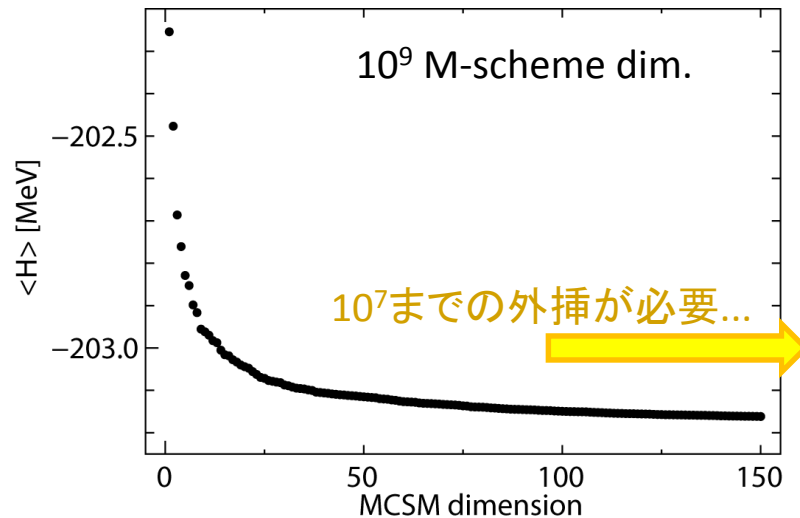
T. Mizusaki and M. Imada, PRB 69, 125110 (2004)

T. Mizusaki and M. Imada Phys. Rev. C65 064319 (2002)

T. Mizusaki and M. Imada Phys. Rev. C68 041301 (2003)

T. Mizusaki, Phys. Rev. C70 044316 (2004)

モンテカルロ殻模型で得られた波動関数にエネルギー分散外挿法を適用: ^{56}Ni in pf -shell

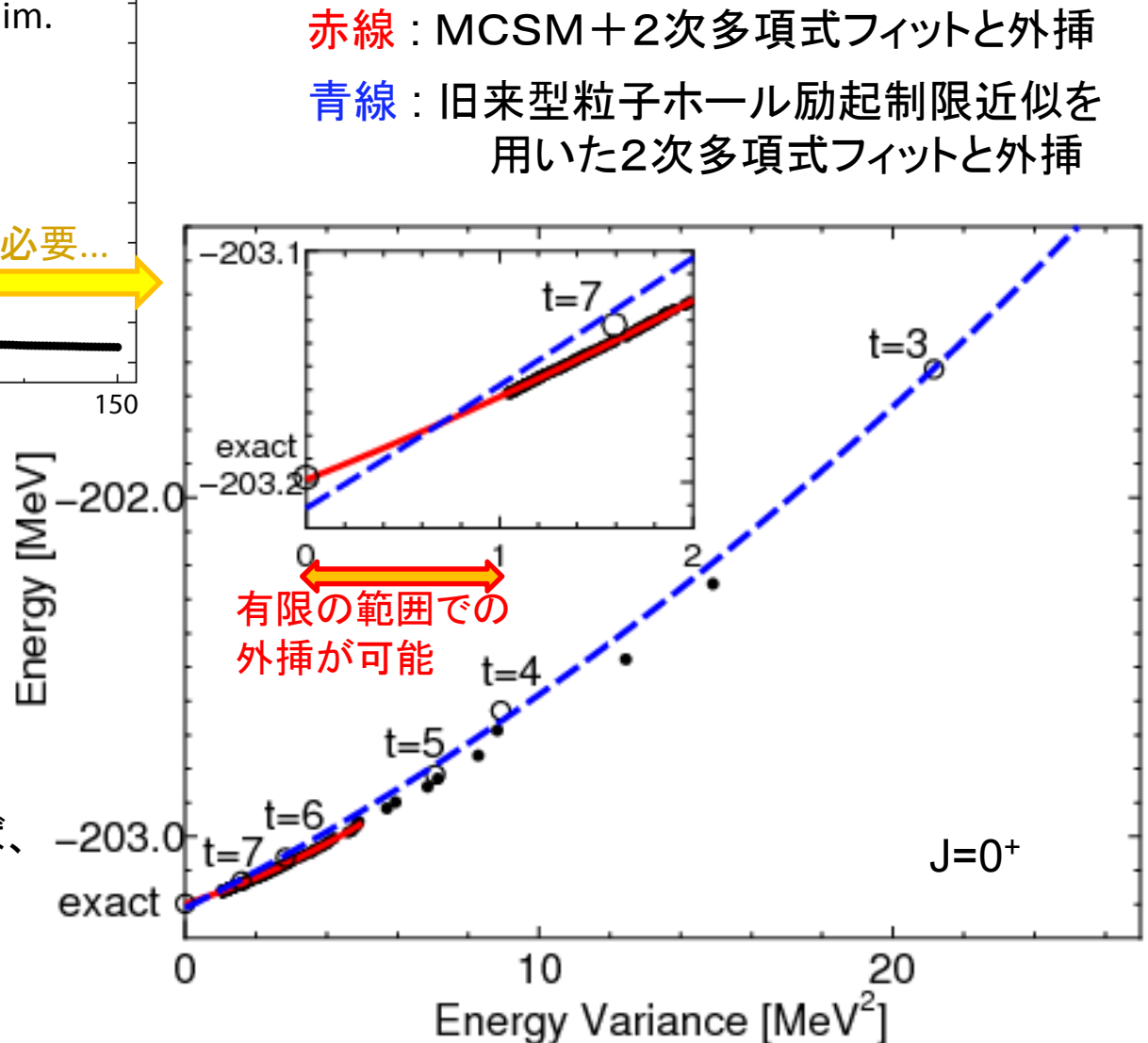


エネルギー分散期待値

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

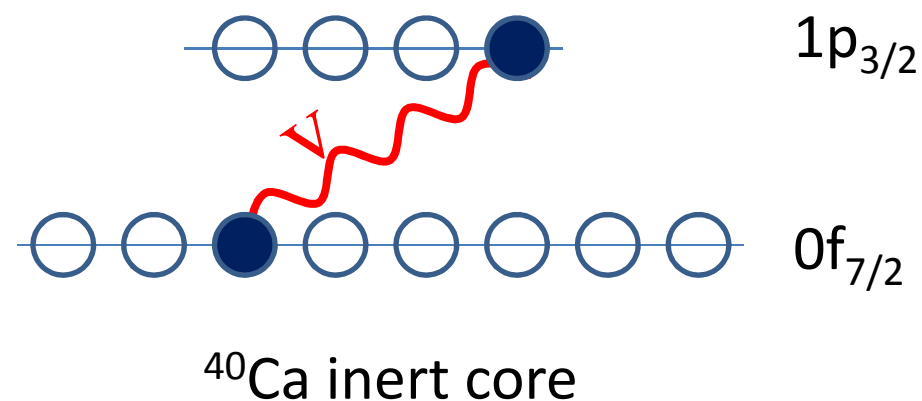
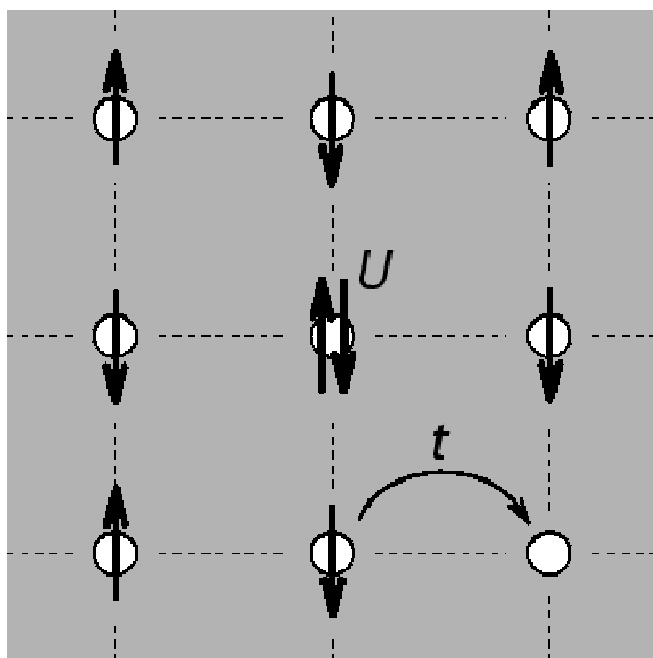
波動関数が厳密解と等しいならば、
エネルギー分散期待値は0となる

$$\langle \Delta H^2 \rangle = 0$$



強相関電子系

- ハバード模型と原子核殻模型計算は共通点が多いため、数値解法も比較される。



一般には、ハバード模型の相互作用の方がシンプル

強相関電子系における類似解法

- 経路積分繰り込み群法
 - M. Imada et al., J. Phys. Soc. Jpn. 69, 2723 (2000)
 - 補助場モンテカルロ法による基底の生成、エネルギー分散外挿
 - 射影法による対称性の回復
- 共鳴ハートリーフォック法
 - N. Tomita et al., J. Phys. Soc. Jpn. 62, 4338 (1993)
 - 多基底波動関数の射影後変分
- symmetry-entangled mean-field approach, and so on...

Obstacle of the MCSM+extrapolation: computation time for energy variance, $\langle H^2 \rangle$

The expectation value of general four-body operator in deformed Slater determinants is obtained by Wick's theorem :

$$\frac{\langle \phi | \hat{V}^2 | \phi' \rangle}{\langle \phi | \phi' \rangle} = \frac{1}{16} \sum_{ijkl\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{ijkl} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \left(\begin{aligned} & (1-\rho)_{k\alpha}(1-\rho)_{l\beta}\rho_{\gamma i}\rho_{\delta j} - (1-\rho)_{k\alpha}(1-\rho)_{l\beta}\rho_{\gamma j}\rho_{\delta i} \\ & (1-\rho)_{l\alpha}(1-\rho)_{k\beta}\rho_{\gamma i}\rho_{\delta j} + (1-\rho)_{l\alpha}(1-\rho)_{k\beta}\rho_{\gamma j}\rho_{\delta i} \\ & + \rho_{\gamma\alpha}(1-\rho)_{l\beta}\rho_{k i}\rho_{\delta j} - \rho_{\gamma\alpha}(1-\rho)_{k\beta}\rho_{l i}\rho_{\delta j} \\ & - \rho_{\gamma\alpha}(1-\rho)_{l\beta}\rho_{k j}\rho_{\delta i} + \rho_{\gamma\alpha}(1-\rho)_{k\beta}\rho_{l j}\rho_{\delta i} \\ & \rho_{\delta\alpha}(1-\rho)_{l\beta}\rho_{k i}\rho_{\gamma j} + \rho_{\delta\alpha}(1-\rho)_{k\beta}\rho_{l i}\rho_{\gamma j} \\ & + \rho_{\delta\alpha}(1-\rho)_{l\beta}\rho_{l j}\rho_{\gamma i} - \rho_{\delta\alpha}(1-\rho)_{k\beta}\rho_{l j}\rho_{\gamma i} \\ & - \rho_{\gamma\beta}(1-\rho)_{l\alpha}\rho_{k i}\rho_{\delta j} + \rho_{\gamma\beta}(1-\rho)_{k\alpha}\rho_{l i}\rho_{\delta j} \\ & + \rho_{\gamma\beta}(1-\rho)_{l\alpha}\rho_{k j}\rho_{\delta i} - \rho_{\gamma\beta}(1-\rho)_{k\alpha}\rho_{l j}\rho_{\delta i} \\ & + \rho_{\delta\beta}(1-\rho)_{l\alpha}\rho_{k i}\rho_{\gamma j} - \rho_{\delta\beta}(1-\rho)_{k\alpha}\rho_{l i}\rho_{\gamma j} \\ & - \rho_{\delta\beta}(1-\rho)_{l\alpha}\rho_{l j}\rho_{\gamma i} + \rho_{\delta\beta}(1-\rho)_{k\alpha}\rho_{l j}\rho_{\gamma i} \\ & + \rho_{k i}\rho_{l j}\rho_{\gamma\alpha}\rho_{\delta\beta} - \rho_{k i}\rho_{l j}\rho_{\delta\alpha}\rho_{\gamma\beta} - \rho_{l i}\rho_{k j}\rho_{\gamma\alpha}\rho_{\delta\beta} + \rho_{l i}\rho_{k j}\rho_{\delta\alpha}\rho_{\gamma\beta} \end{aligned} \right)$$

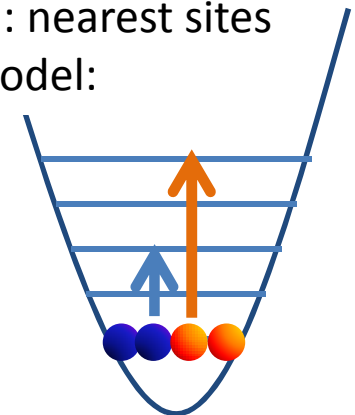
$$\rho_{ij} = \frac{\langle \phi | c_j^\dagger c_i | \phi' \rangle}{\langle \phi | \phi' \rangle}$$

$$\hat{V} = \sum_{i<j,k<l} v_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k$$

Note that v_{ijkl} is more complicated than simple Hubbard model.

Hubbard model: nearest sites

Nuclear shell model:



8-fold loops, 24 terms

$$\frac{\langle \phi | \hat{H}^2 | \psi \rangle}{\langle \phi | \psi \rangle} = \sum_{i<j,\alpha<\beta} \left(\sum_{k<l} v_{ijkl} \left((1-\rho)_{k\alpha}(1-\rho)_{l\beta} - (1-\rho)_{l\alpha}(1-\rho)_{k\beta} \right) \right) \left(\sum_{\gamma<\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} \rho_{\gamma i}\rho_{\delta j} - \rho_{\delta i}\rho_{\gamma j} \right)$$

Separability of H^2

$$+ \text{Tr}((t + \Gamma)(1 - \rho)(t + \Gamma)\rho) + \left(\text{Tr}(\rho(t + \frac{1}{2}\Gamma)) \right)^2 \quad \Gamma_{ik} = \sum_{jl} v_{ijkl} \rho_{lj}$$

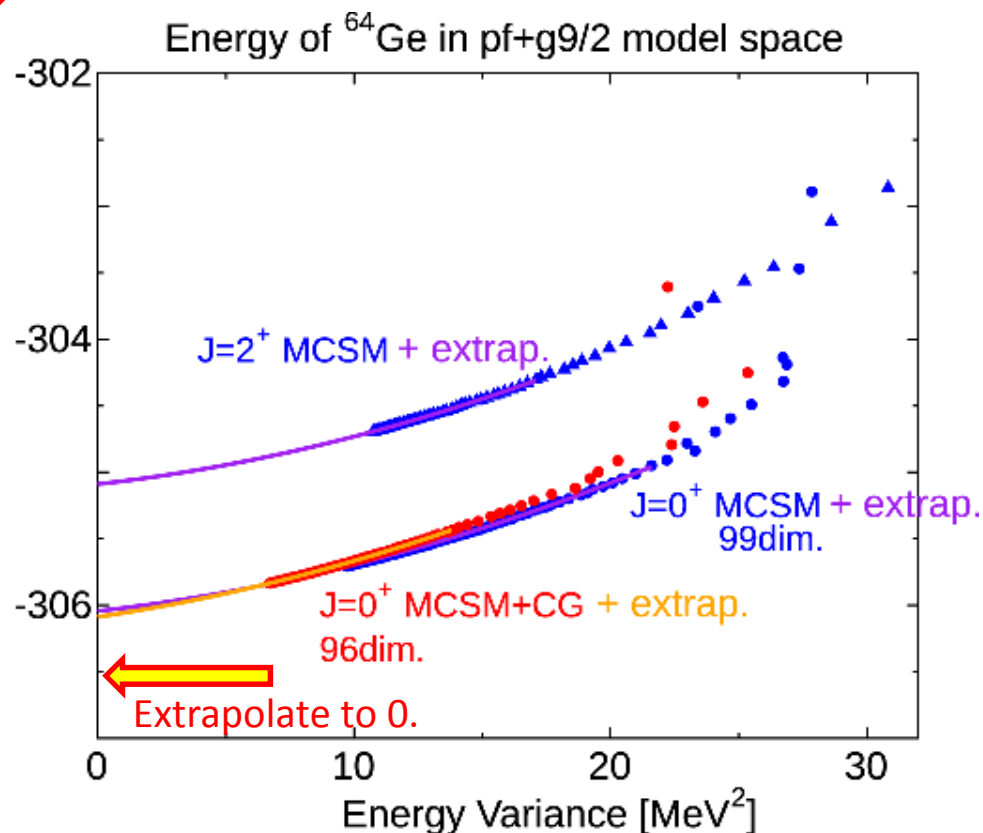
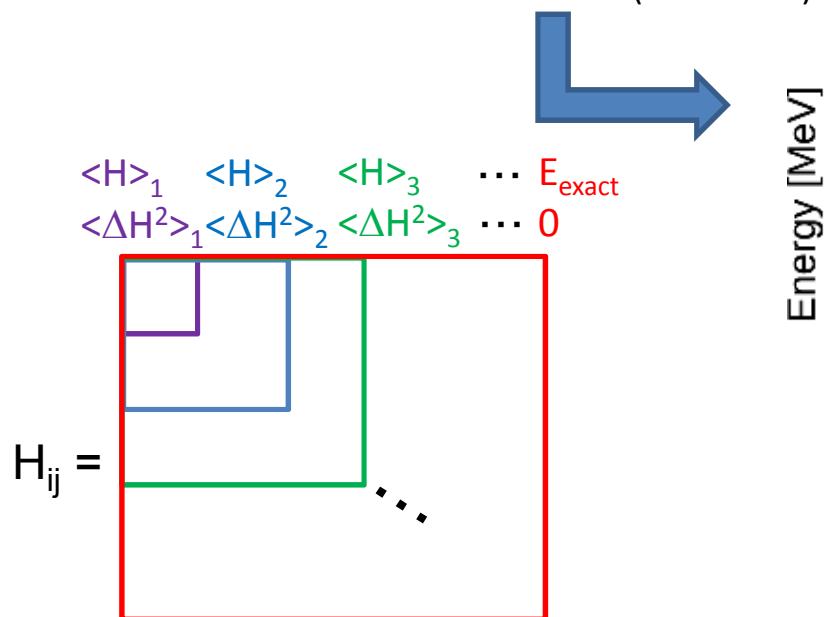
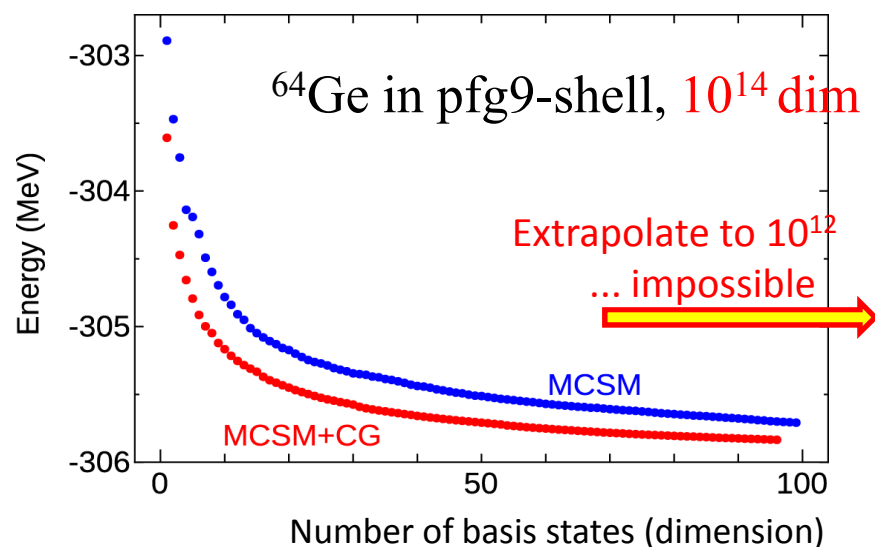
6-fold loops, products of dense block matrices

Energy variance extrapolation in the MCSM: ^{64}Ge in $pfg9$ -shell

Energy variance: $\langle \Delta H^2 \rangle = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$

As the number of basis states increases, the approximated w.f. approaches the exact one and the energy variance approaches zero.

Extrapolate towards $\langle \Delta H^2 \rangle \rightarrow 0$



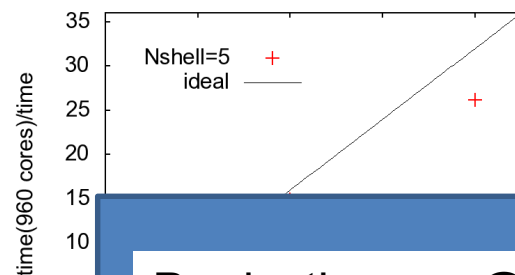
“Advanced” Monte Carlo Shell Model at K computer

T. Otsuka, M. Honma, T. Mizusaki, NS, and Y. Utsuno, Prog. Part. Nucl. Phys. **47**, 319 (2001).

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

PC cluster
100CPU

Parallel efficiency



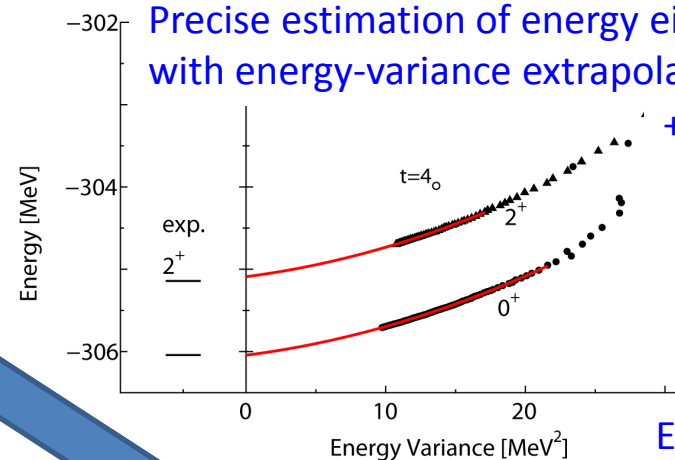
OpenMP

Production run @ K computer

1000~4800 nodes in parallel, 10~48 hours / a job

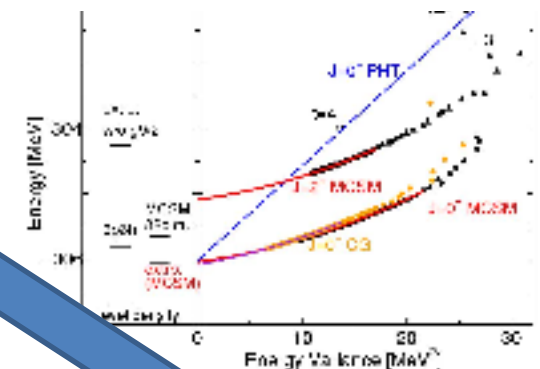
FLOPS performance / peak 15~40%
(average ~20%)

Precise estimation of energy eigenvalues
with energy-variance extrapolation
+ basis reordering technique

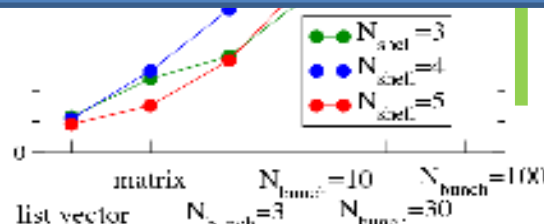


NS *et al.*, Phys. Rev. C **85**
054301(2012).

Energy gradient for
optimization of wave function



NS, T. Abe, Y. Utsuno, T. Otsuka, T. Abe, T. Otsuka, T. Mizusaki, M. Honma and T. Otsuka, Prog. Theor. Exp. Phys. **2012**
01A205 (2012).

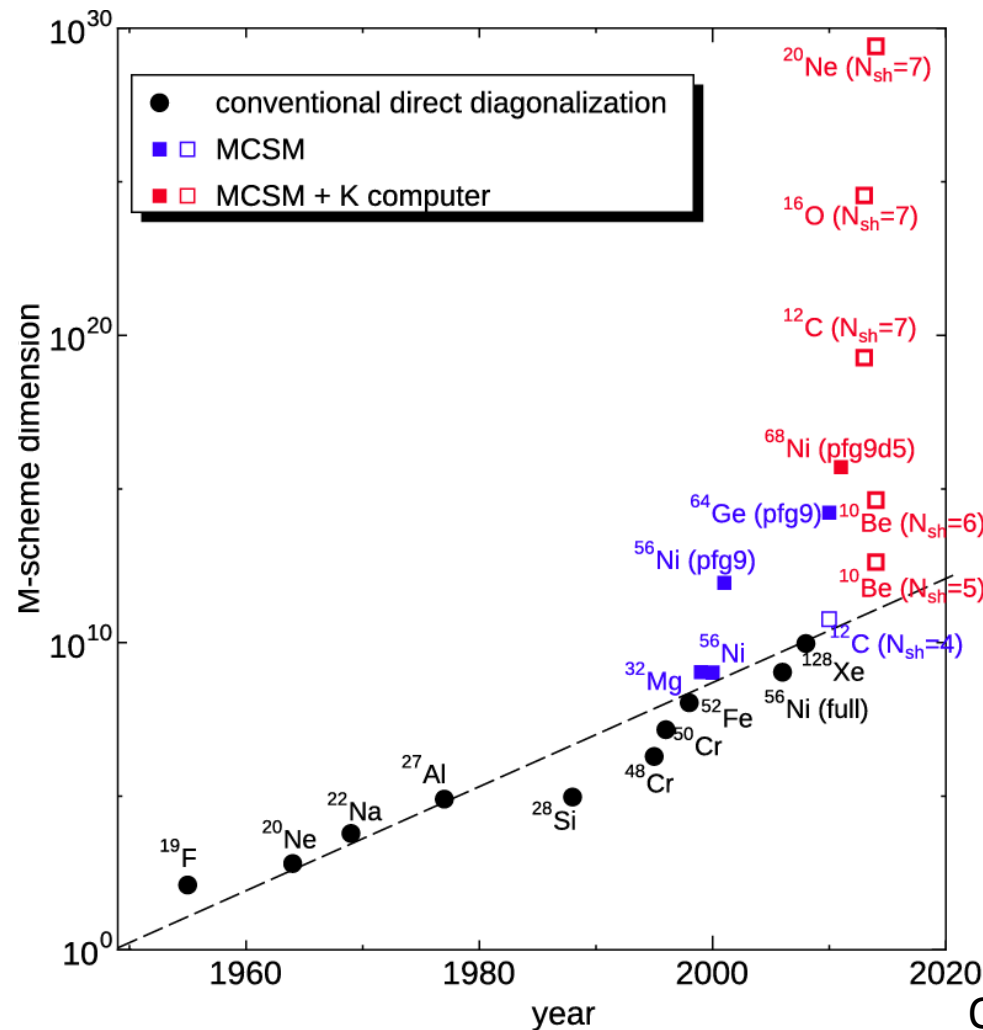


8 times
acceleration

Y. Utsuno, NS, T. Otsuka, and T. Abe,
Comp. Phys. Comm. **184** 102 (2013).



殻模型による原子核構造研究:二つの計算手法



ランチョス対角化計算コードKSHELL
+ 京計算機
~ 10^{11} 次元まで計算可能
KSHELL コードは公開

モンテカルロ殻模型

次元の制約を超える最も「精密な」
計算手法

O. Legza, et al., Phys. Rev. C 92, 051303(R) (2015)

approximation methods may be implemented. Among them, perhaps the most accurate is the Monte Carlo shell model (MCSM) that stochastically samples the Hilbert space to find the relevant basis states for the description of a particular

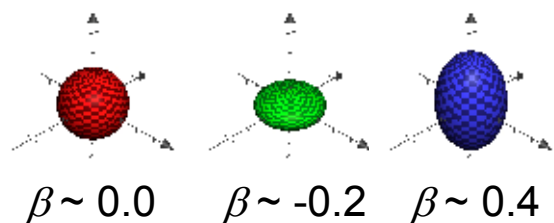
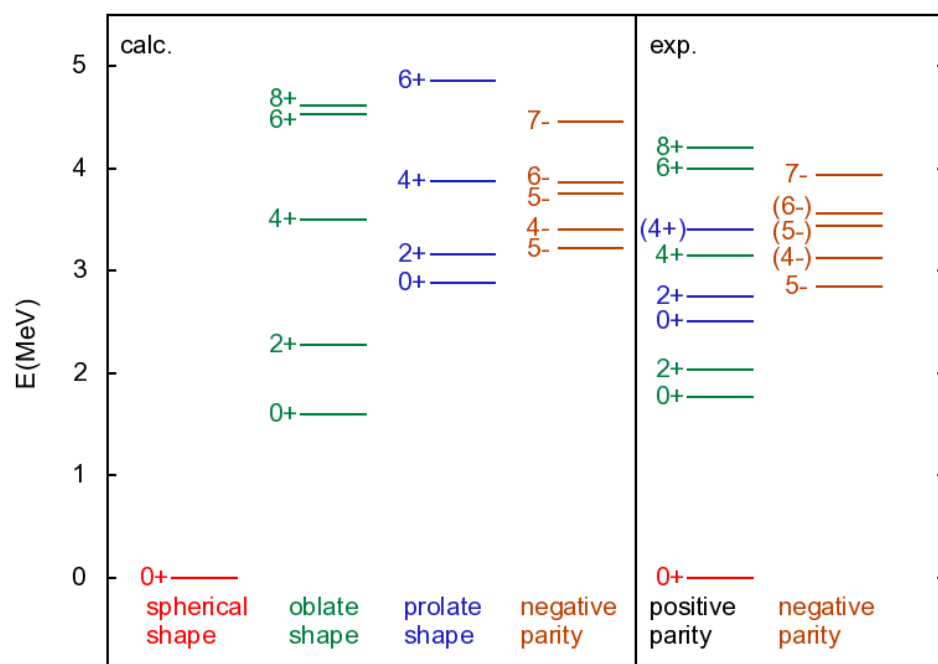
MCSMによる核構造計算

MCSMのNi領域への応用

• $^{68}\text{Ni}(Z=28, N=40)$ のバンド構造

- 低エネルギー領域で、3つの異なる「形」の共存が現れる

Y. Tsunoda, T. Otsuka, NS, M. Honma and Y. Utsuno,
Phys. Rev. C 89, 031301(R) (2014)

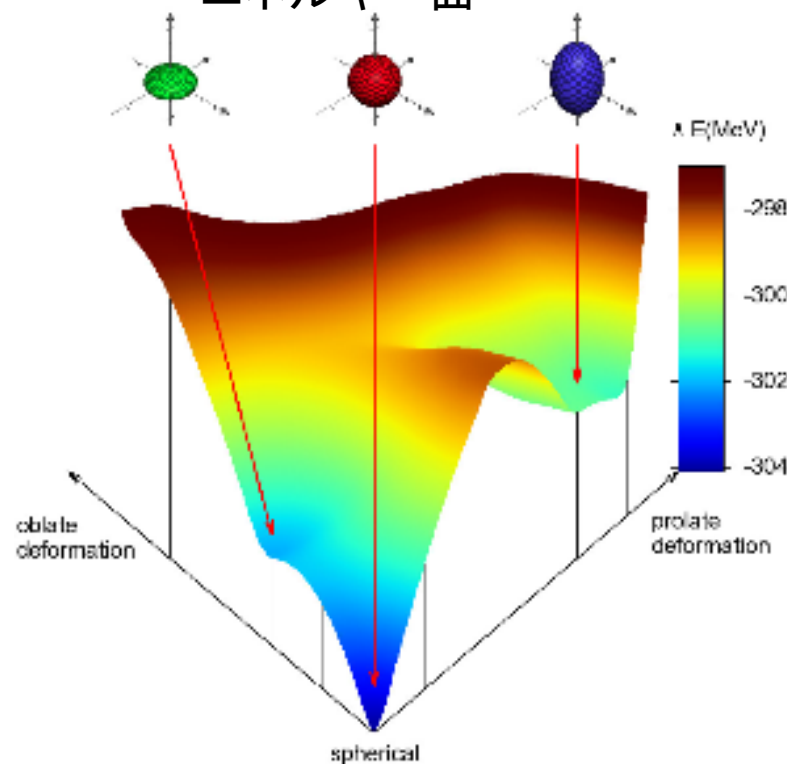


$pf + g_{9/2} + d_{5/2}$:

5×10^{15} M-scheme dimension

モンテカルロ殻模型 + 京で初めて計算可能に

四重極変形度による
エネルギー面

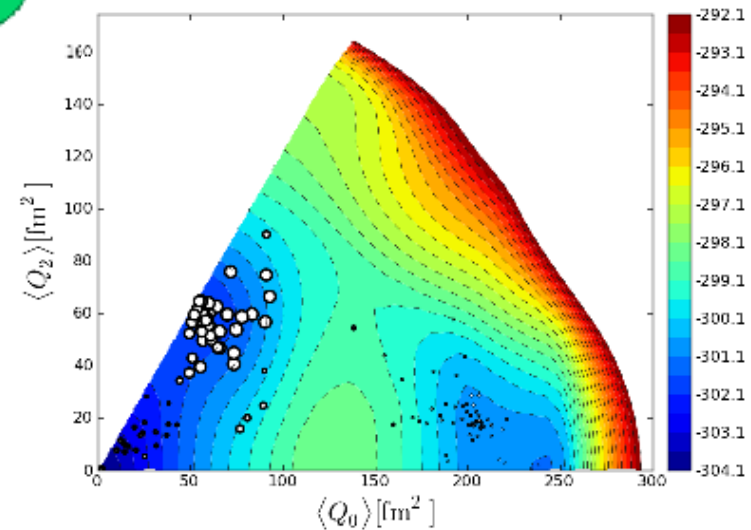


^{68}Ni 0^+ states $\Leftrightarrow$ different shapes

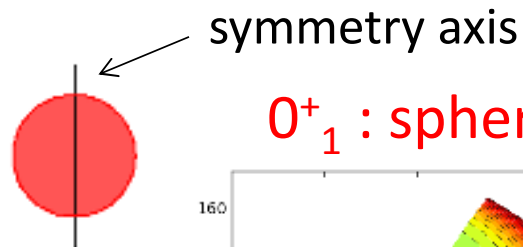
- Distribution of circles represents fluctuation of shapes in the many-body eigenstates
- A given eigenstate is a superposition of components of similar shapes



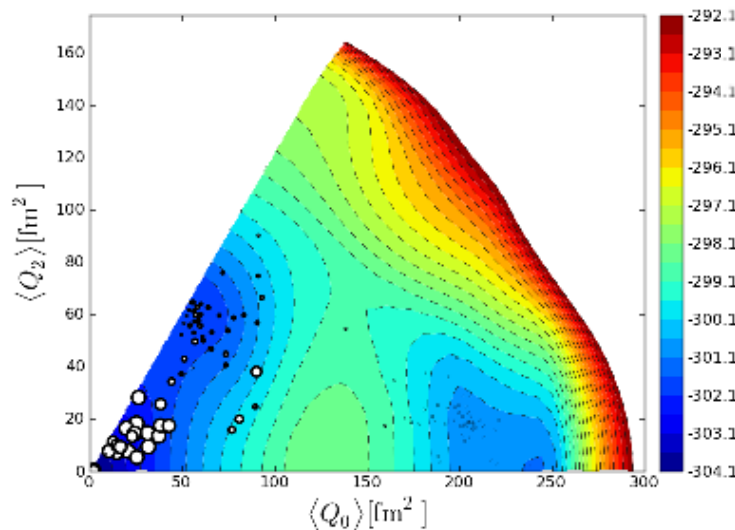
0^+_2 : oblate



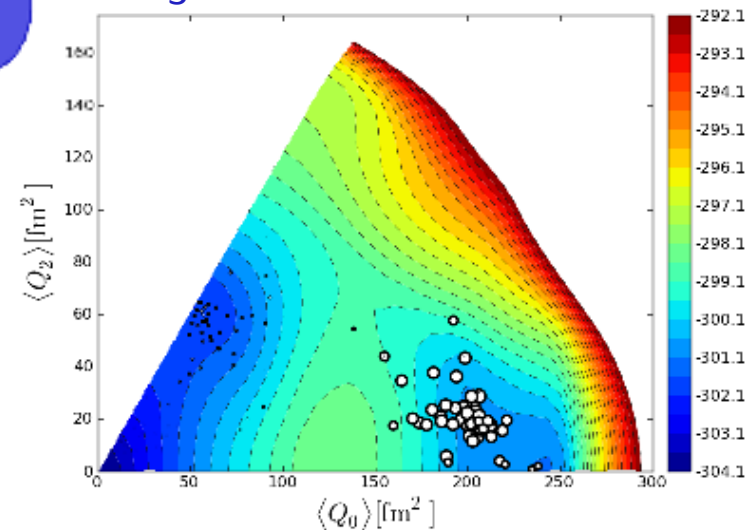
Shape
coexistence



0^+_1 : spherical



0^+_3 : strongly prolate



モンテカルロ殻模型による物体固定座標系波動関数の解析

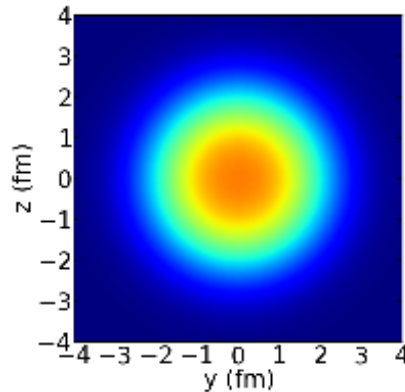
$$|\Psi(I, M)\rangle = \sum_{k=1}^{N_{MCSM}} f_k P_M^I |\phi^k\rangle = P_M^I \left(\sum_{k=1}^{N_{MCSM}} f_k |\phi^k\rangle \right)$$

実験室系の
波動関数

intrinsic state

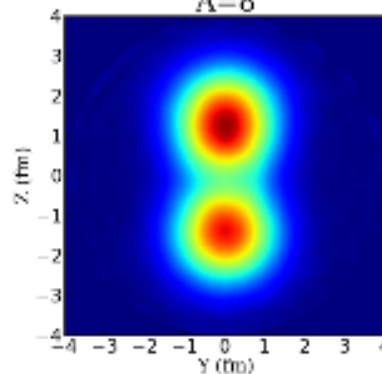
物体固定座標系の
波動関数

基底状態($J^+=0^+$)の密度分布
実験室系、ベリリウム8



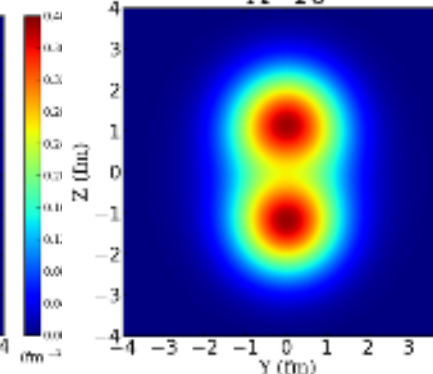
物体固定座標系
ベリリウム8

A=8



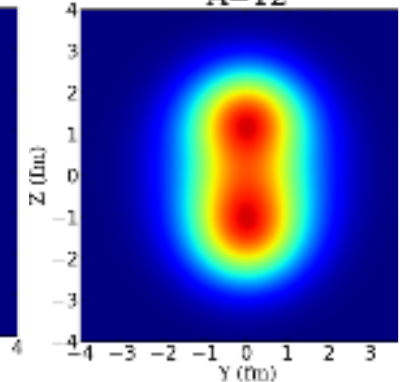
ベリリウム10

A=10



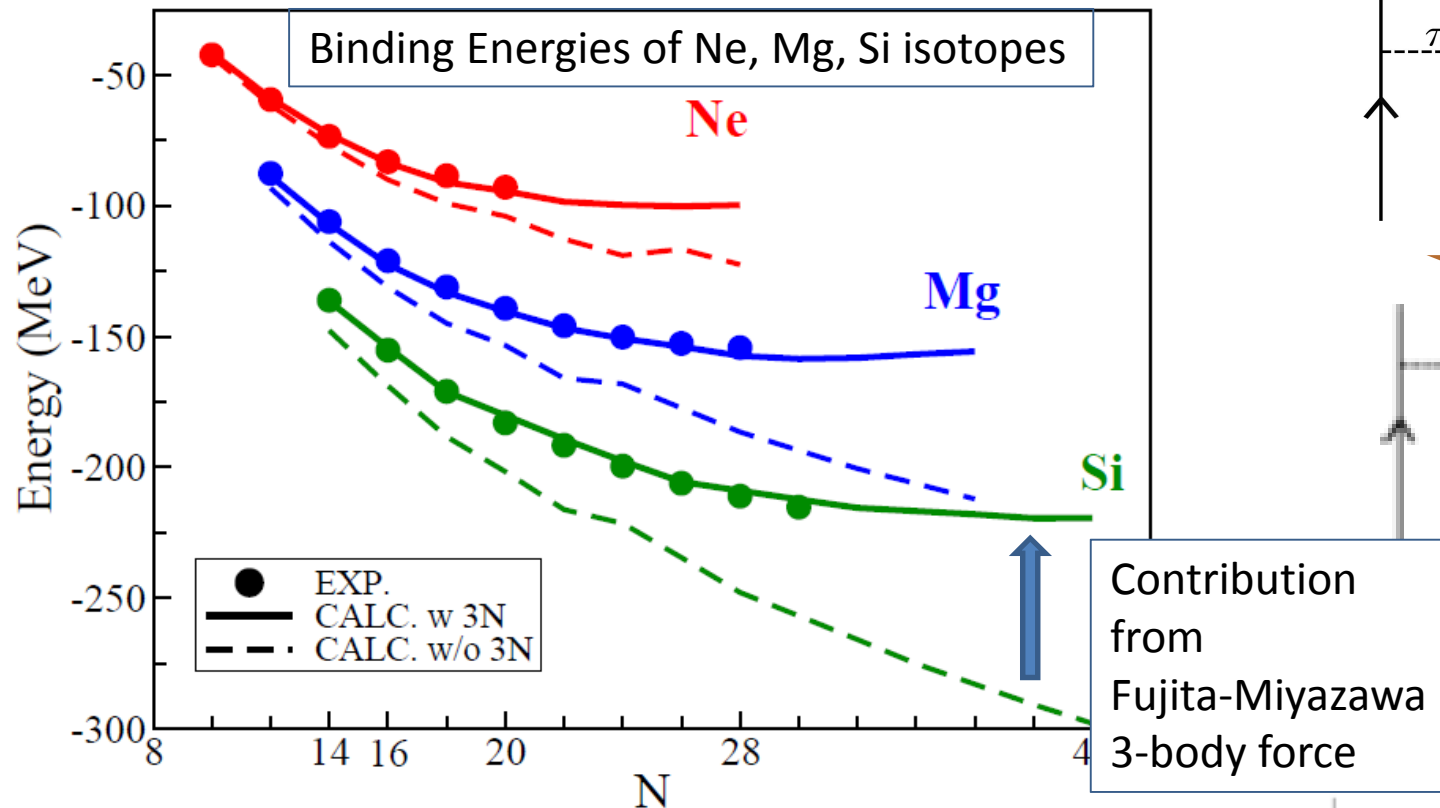
ベリリウム12

A=12



Microscopic derivation of effective interaction in medium-heavy nuclei

N. Tsunoda *et al.*, arXiv:1601.06442

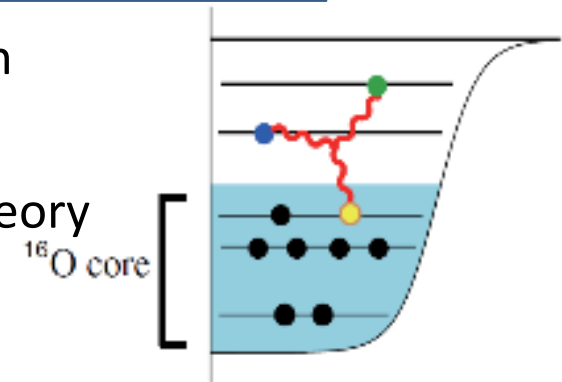


Effective interaction with phenomenological correction

⇒ microscopic derivation

from sophisticated many-body perturbation (EKK) theory

+ Fujita-Miyazawa three-body force



Summary

- 殻模型計算は、原子核の構造を求める有力な手段である。
- 大次元疎行列の固有値問題に帰着する。 $O(10^{11})$ 次元の行列の対角化計算が可能。
- モンテカルロ殻模型にエネルギー分散外挿を導入することによって、次元の制約をこえた大規模計算を可能とした。
- モンテカルロ殻模型の射影前波動関数に注目することにより、物体固定座標系の解析を可能とした。
- 中性子過剰ニッケル同位体の「形の共存」現象や、ベリリウム同位体のクラスター配位の発達などの解析に応用を広げている。