"シミュレーションで探る基礎科学:素粒子の基本法則から元素の生成まで"

JICFuS

2021年度第2回HPCIC計算科学フォーラム 2022/03/28, Zoom online

## CI(Configuration Interaction)計算と その発展的手法による大規模原子 核構造計算



東京大学理学系研究科 附属原子核科学研究センター 清水 則孝



Center *for* Nuclear Study

阿部喬(理研)、宇都野穰(原研)、大塚孝治(東大理・理研)、 角田佑介(東大原子核セ)、吉田亨(RIST)

T. Otsuka, T. Abe, T. Yoshida, Y. Tsunoda, N. Shimizu, N. Itagaki, Y. Utsuno, J. Vary, P. Maris and H. Ueno, accepted.

T. Abe, P. Maris, T. Otsuka, N. Shimizu, Y. Utsuno, and J.P. Vary, Phys. Rev. C 104, 054315 (2021). N. Shimizu, Y. Tsunoda, Y. Utsuno, and T. Otsuka, Phys. Rev. C 103, 014312 (2021).

#### 富岳成果創出加速プログラム "シミュレーションで探る基礎科学:素粒子の基本法則から元素の生成まで"



## Contents

- 研究目的
- ・原子核CI計算とは
- モンテカルロ殻模型・準粒子真空殻模型
   エネルギー分散期待値による外挿法
  - 角運動量射影
  - 密行列積を利用したアルゴリズム実装
- 研究成果
  - 軽い核の第一原理計算と炭素12のホイル状態
    - ・クラスター状態の解析
  - ネオジム同位体の"形の相転移"
    - ニュートリノレスニ重ベータ崩壊核行列要素



### 原子核の存在限界(中性子ドリップライン)と



@ Oakforest-PACS, 京計算機

N. Tsunoda, T. Otsuka, K. Takayanagi, N. Shimizu, T. Suzuki, Y. Utsuno, S. Yoshida, and H. Ueno, Nature **587**, 66 (2020)

# 軽い核の第一原理CI計算 (no-core MCSM)

- 調和振動子ポテンシャルの固有状態で空間を展開する。
- 主殻の数(N<sub>shell</sub>)を設定し、その中で許されるあらゆる配位を考える。





 $\langle v \rangle = v_1 | m_1 \rangle + v_2 | m_2 \rangle$ 



原子核における第一原理CI計算

• 原子核の波動関数は、多数の「配位」の線形結合で表される。



 $|\Psi\rangle = v_1 | m_1 \rangle + v_2 | m_2 \rangle + v_3 | m_3 \rangle + \cdots$ シュレディンガー方程式は、ハミルトニアン行列の固有値問題に帰着する

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

許される基底(|m<sub>i</sub>))の数がハミルトニアン行列の次元に相当する。

大次元(≤10<sup>11</sup>)疎行列の固有値・固有ベクトルをランチョス法により求める。 量子化学における FCI (Full Configuration Interaction)に相当。 多様な量子多体問題(強相関電子系、分数量子Hall系など)に類似な手法。

### 核図表:原子核理論模型の適用領域



原子核殻模型計算は、適 用領域を中重核から大き く広げつつある。

模型空間を広げて、原子 核の存在限界や、エキゾ チックな殻構造の理解、 高励起状態の統計的性 質、さらには応用に向け た研究を進めている。



#### Taken from UNEDF project, 2009

ハミルトニアン行列: 大次元疎行列



N. Shimizu, T. Mizusaki, Y. Utsuno, and Y. Tsunoda, Comput. Phys. Comm. 244, 372 (2019). 9

## 軽い核のCI計算とハミルトニアン行列次元

• 対称性を仮定しなければ、対角化すべき行列の次元は

 $_{N_{sp}(\pi)}C_Z \times _{N_{sp}(\nu)}C_N$ 

- 模型空間と粒子数に依存して、組み合わせ爆発で増えていく。



T. Abe, P. Maris, T. Otsuka, N. Shimizu, Y. Utsuno, and J. P. Vary, Phys. Rev. C 104, 054315 (2021)

### モンテカルロ殻模型・準粒子真空殻模型

- CI計算:多数の単純な多体基底の線形結合で波動関数を表現。
- より効率的な少数の基底の線形結合で表現



## モンテカルロ殻模型(MCSM)の概念図

 効率的な基底を選択することによって、少数の基底によって固有 状態を精度良く表現する。



Review : N. Shimizu, T. Abe, M. Honma *et al.*, Phys. Scr. **92**, 063001 (2017) 12

#### 「近似の良さ」の指標としてのエネルギー分散期待値

- シュレディンガー方程式を固有値問題として解く。  $Hv = Ev \quad (v^Tv = 1)$
- エネルギー期待値

$$E = \langle H \rangle = v^T H v$$

- エネルギー分散期待値  $\langle \Delta H^2 \rangle = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2 = v^T H^2 v - E^2$
- もしvが厳密にHの固有ベクトルなら、 $H^2 v = E^2 v$ より、 $\langle \Delta H^2 \rangle = 0$
- vが固有ベクトルからわずかにずれていると、〈ΔH<sup>2</sup>〉は小さな値を とる。エネルギー分散期待値は「近似の良さ」の指標となる。

#### MCSMにおけるエネルギー分散期待値による外挿法

変分計算において、基底数を増やしていくと、エネルギー期待値がゆるや かに下がっていく。エネルギー分散期待値  $\langle \Delta H^2 \rangle = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$ を求める ことにより、収束の判定や外挿による精密な物理量の推定を可能とした。





- 角運動量射影:
  - -「変形」して回転対称性を破った状態(スレーター行列式)を用意する。
  - あらゆるオイラー角(実際には30,000点程度)に回転させ、重ね合わせることにより、角運動量が良い量子数となる空間へ射影する。
- •「自発的対称性の破れ」と、破れた対称性の回復。
- 核構造計算において、古くから使われてきた。
  - 強相関電子系や量子化学の計算にも、スピン射影が用いられる。

e.g. T. Mizusaki and M. Imada, Phys. Rev. B 69 125111 (2004).

計算のボトルネック:  
二体相互作用行列要素の計算  

$$\langle \psi_a | VP^J | \psi_b \rangle = \sum_{\alpha} W_{\alpha} \sum_{i < j,k < l} v_{ijkl} (\rho_{ki}^{\alpha} \rho_{lj}^{\alpha} - \rho_{li}^{\alpha} \rho_{kj}^{\alpha})$$
  
  
初期の疑似コード  
 $v_{ijkl}: \land \exists \mu = 2 \end{pmatrix}$   
 $v_{ijkl}: \land \exists \mu =$ 



Y. Utsuno, N. Shimizu et al., Comput. Phys. Comm. 184, 102 (2013)

## 原子核構造計算とモンテカルロ殻模型、その発展



富岳において、モンテカルロ殻模型は1,000ノードまで 準粒子真空殻模型では15,000ノードまでの良好な並列性能を達成。

18

### 京・富岳成果創出加速プログラムによる成果 I

#### 軽い核の第一原理計算とクラスター構造



実験室系の密度分布 (8Be 基底状態)

#### 物体固定座標系の密度分布



角運動量射影 P<sub>MK</sub>

モンテカルロ殻模型の波動関数



重ね合わせにより、「形の揺らぎ」を記述する。 Wave function =  $f_1$  +  $f_2$  +  $f_3$  + .....

強相関電子系における Path Integral Renormalization Group method, Resonating Hartree-Fock などに類似。

#### 京・富岳成果創出加速プログラムによる成果 Ⅱ



#### ニュートリノレスニ重ベータ崩壊の核行列要素

#### 通常の二重ベータ崩壊(2vββ)

限られた特別な原子核は、 2つのニュートリノと2つの電子を 放出して崩壊する。



ニュートリノレス 二重ベータ崩壊(0vββ)

ニュートリノを放出しない特別なモード 存在は未確認。



ニュートリノレス二重ベータ崩壊探索実験が 世界中で行われているが、いまだ発見され ていない。半減期が計測されたとすると、そ の値からニュートリノ有効質量を求めるには 、原子核構造計算によって核行列要素と呼 ばれる物理量を精密に求める必要がある。 半減期:



ニュートリノ粒子がマヨラナ粒子であるかを 明らかにし、物質優勢宇宙の解明のカギと なる

探索実験の対象となっている原子核: <sup>48</sup>Ca, <sup>76</sup>Ge, <sup>82</sup>Se, <sup>96</sup>Zr, <sup>100</sup>Mo, <sup>116</sup>Cd, <sup>124</sup>Sn, <sup>130</sup>Te, <sup>136</sup>Xe, <sup>150</sup>Ndなど 2



Engel & Menéndez, Rep. Prog. Phys. 80, 046301 (2017)より改変

## Summary

- 原子核のCI計算(殻模型計算)は、陽子・中性子を構成要素とする
   原子核を量子多体問題として解く最も有力な数値計算手法の一つ。
- 1千億次元を超えるような巨大な疎行列の対角化が必要となる。この困難を回避するためにモンテカルロ殻模型(MCSM)、準粒子真空殻模型(QVSM)を開発、密行列積を用いるように計算アルゴリズムを改良し、京・富岳を用いて研究を進めている。
  - エネルギー分散期待値による外挿法
  - Lebedev quadrature の導入による角運動量射影の計算量削減
  - 密行列積利用によるアルゴリズムの改善
- 従来困難であった、軽い核の第一原理CI計算によるクラスター構造の記述や、芯を仮定したCI計算による質量数150程度の重い 核の系統的な研究が可能となりつつある。