素核宇融合による計算基礎物理学の進展
\- ミクロとマクロのかけ橋の構築 -

No-Core Monte Carlo Shell Model at theHPCI Strategic Program

Takashi Abe @ CNS, Tokyo

in collaboration with
P. Maris (Iowa State), T. Otsuka (Tokyo), N. Shimizu (CNS),
Y. Utsuno (JAEA), J.P. Vary (Iowa State)

Village of Nemu
2011/12/3(Sat.) – 5(Mon.)

東京大学原子核科学研究センターにおけるHPCI戦略活動

革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築

次世代スーパーコンピュータ「京」を中核として、多様なユーザーニーズに応える革新的な計算環境を実現するHPCI(革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ)を構築するとともに、その利用を促進する。 H23年度から5年間の予定。

戦略分野及び戦略機関

	<戦略分野>	<戦略機関>
分野1	予測する生命科学・医療および創薬基盤	理化学研究所
分野2	新物質・エネルギー創成	東大物性研 (分子研、東北大金材研)
分野3	防災・減災に資する地球変動予測	JAMSTEC
分野4	次世代ものづくり	東大生産研 (JAXA、JAEA)
分野5	物質と宇宙の起源と構造	筑波大 (高エネ研、天文台)

計算基礎科学研究連携拠点(筑波大学CCS、KEK、天文台)

http://www.jicfus.jp/field5/jp/ 拠点長 青木慎也(筑波大)

		開発課題責任者
課題1	格子QCDによる物理点でのバリオン間相互作用の決定	(藏増嘉伸)
課題2	大規模量子多体計算による核物性の解明とその応用	(大塚孝治)
課題3	超新星爆発およびブラックホール誕生過程の解明	(柴田大)
課題4	ダークマターの密度ゆらぎから生まれる第1世代天体形成	(牧野淳一郎)
計算科学技術推進体制の構築		(橋本省二)

2011/12/01 東大ー理研連絡協議会

HPCI戦略分野5課題2
「大規模量子多体計算による核物性の解明とその応用」

事業協力者リスト

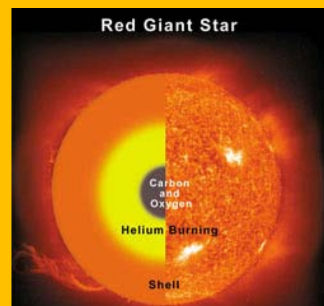
大塚　孝治 (開発課題責任者)

清水　則孝
阿部　喬
月山　幸志郎
江幡　修一郎
吉田　亨

初田　哲男（課題1担当者）
土井　琢身

(東大CNSに
H23.4.1着任
HPCI専従)

本間　道雄　（会津大）
宇都野　穣　（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 (東大理）



モンテカルロ殻模型
p殻核、^{4}He～^{12}C, sd殻核
=> 天体核反応に非常に重要な12C Hoyle stateなどにも多角的に挑戦

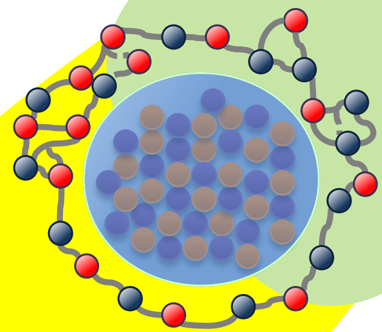
軽い核の
第一原理計算

This talk

中重核の励起モードを系統的に計算

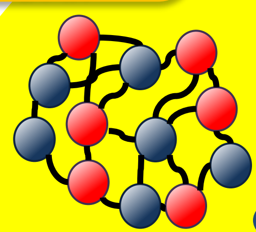
密度汎関数法

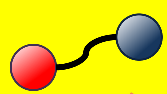
Ebata's talk



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





核力

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

Tsukiyama's talk

殻模型計算コード開発
アルゴリズム改良

大規模シュミレーションのフロンティアを開拓

Outline of this talk

- Motivation of the ab-initio calc
- Monte Carlo Shell Model (MCSM)
- Benchmark results by the No-Core MCSM
- Summary & outlook

Current status of ab inito approaches

- Major challenge of the nuclear structure theory

  - Understand the nuclear structures from the first principle of quantum many-body theory by *ab-initio* calc w/ realistic nuclear forces

  - Standard approaches: GFMC, NCSM (up to A ~ 12-14), CC (closed shell +/- 1,2)

→ demand for extensive computational resources

✓ *ab-initio*(-like) approaches (which attempt to go) beyond standard methods

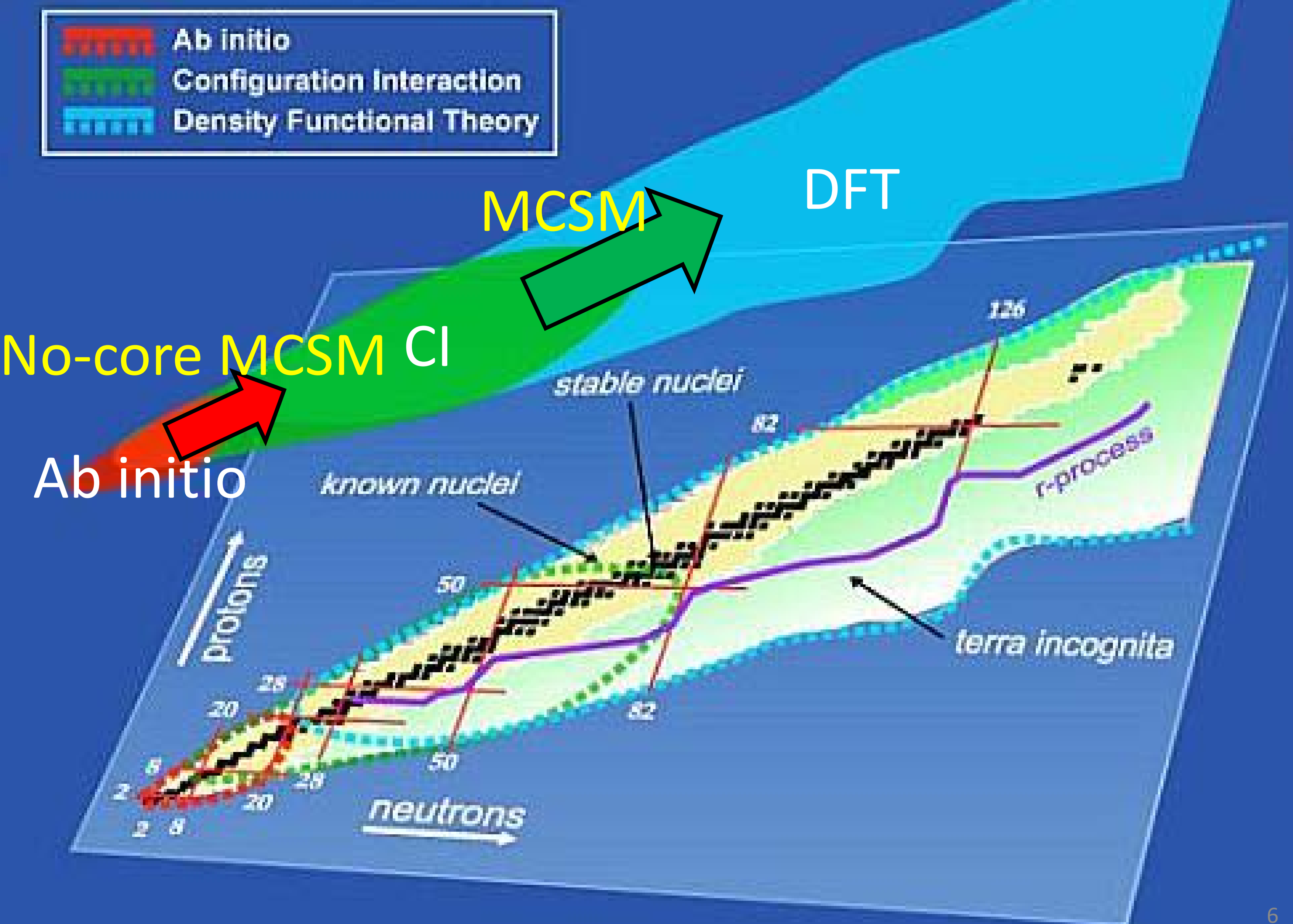
→ Our shell-model approach: No-core Monte Carlo shell model (MCSM)

✓ Another approaches beyond standard NCSM:

- IT-NCSM, IT-CI: R. Roth (TU Darmstadt), P. Navratil (TRIUMF)
- Sp-NCSM: T. Dytrych, K.D. Sviratcheva, J.P. Draayer, C. Bahri, and J.P. Vary (Louisiana State U, Iowa State U)

Nuclear Landscape

UNEDF SciDAC Collaboration: http://unedf.org/



Basics of the MCSM & recent developments

Review: T. Otsuka , M. Honma, T. Mizusaki, N. Shimizu, Y. Utsuno, Prog. Part. Nucl. Phys. 47, 319 (2001)

Monte Carlo shell model (MCSM)

- Importance truncation

Standard shell model

$$H = \begin{pmatrix} \star & \star & \star & \star & \star & \cdots \\ \star & \star & \star & \star & & \\ \star & \star & \star & & & \\ \star & \star & & \ddots & & \\ \star & & & & & \\ \vdots & & & & & \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} E_0 & & & & 0 \\ & E_1 & & & \\ & & E_2 & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & \end{pmatrix}$$

Diagonalization

All Slater determinants

d > O(10^{10})

Monte Carlo shell model

$$H \sim \begin{pmatrix} \star & \star & \cdots \\ \star & \ddots & \\ \vdots & & \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} E'_0 & & 0 \\ & E'_1 & \\ 0 & & \ddots \end{pmatrix}$$

Diagonalization

Important bases stochastically selected

d_{MCSM} ~ O(10-100)

Recent developments in MCSM

- Acceleration of the computation of two-body matrix elements

$$\langle \phi | \hat{V} | \phi' \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,k} \rho_{ki} \left(\sum_{j,l} v_{ijkl} \rho_{lj} \right) = \frac{1}{2} \sum_{(ki)} \rho_{(ki)} \left(\sum_{jl} v_{(ki),(lj)} \rho_{(lj)} \right)$$

Matrix product is performed w/ bundled density matrices by DGEMM subroutine in BLAS library

Y. Utsuno, N. Shimizu, T. Otsuka, and T. Abe, in preparation.

- Extrapolation method by the energy variance

$$\langle H \rangle = E_0 + E_1 \langle \Delta H^2 \rangle + E_2 \langle \Delta H^2 \rangle^2 + \cdots \qquad \langle \Delta H^2 \rangle = \langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2$$

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

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

(naively) 8-fold loops -> (effectively) 6-fold loops by the factorization

N. Shimizu, Y. Utsuno, T.Mizusaki, T. Otsuka, T. Abe, & M. Honma, Phys. Rev. C82, 061305(R) (2010)

Computation of the TBMEs

- hot spot: Computation of the TBMEs

(w/o projections, for simplicity)

$$\frac{\langle \Phi' | V | \Phi \rangle}{\langle \Phi' | \Phi \rangle} = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{ki} \rho_{lj}$$

c.f.) Indirect-index method
(list-vector method)

- non-zero ME: jz(i) + jz(j) = jz(k) + jz(l) -> jz(i) - jz(k) = - (jz(j) – jz(l))

$$\sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{ki} \rho_{lj} = \sum_{\Delta m} \left[\sum_{a \in J_z(a) = -\Delta m} \tilde{\rho}_a \left(\sum_{b \in J_z(b) = \Delta m} \tilde{v}_{ab} \tilde{\rho}_b \right) \right]$$

Operations: sparse matrix -> dense matrix

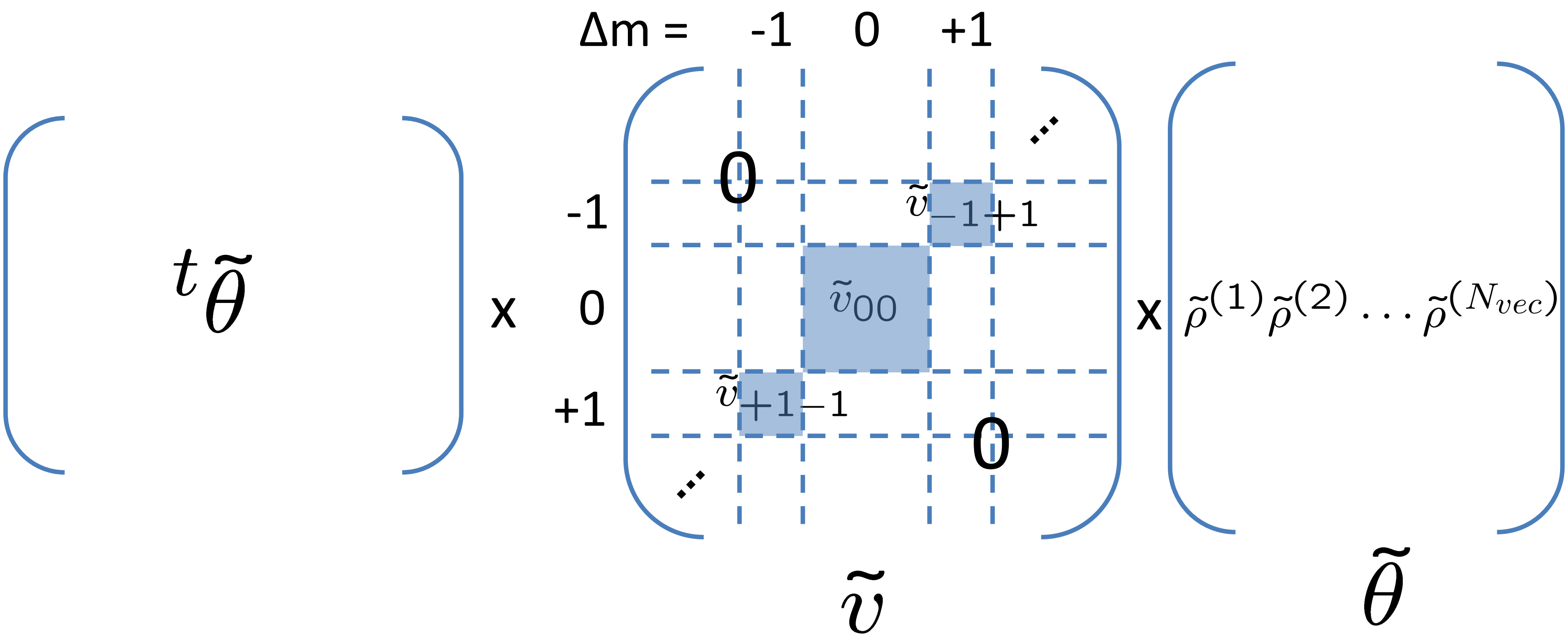
$$\bar{v}_{ijkl} \rightarrow \tilde{v}_{ab} \qquad \rho_{ki} \rightarrow \tilde{\rho}_a \qquad \rho_{lj} \rightarrow \tilde{\rho}_b$$

sparse dense

Schematic illustration of the computation of TBMEs

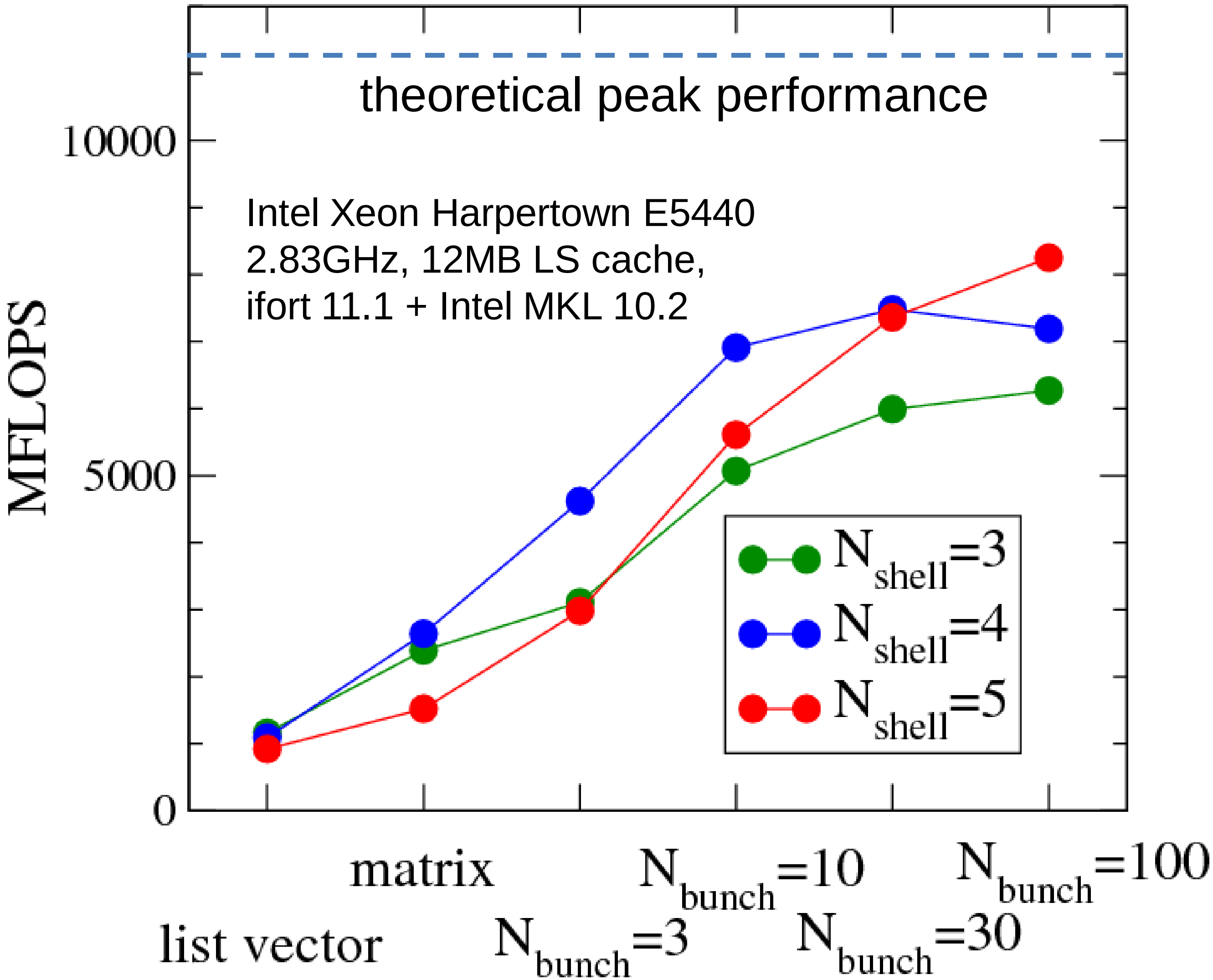
- Matrix-matrix method

$$\sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl}\rho_{ki}\rho_{lj} = \sum_{\Delta m}\left[\sum_{a\in J_z(a)=-\Delta m}\tilde{\rho}_a\left(\sum_{b\in J_z(b)=\Delta m}\tilde{v}_{ab}\tilde{\rho}_b\right)\right]$$



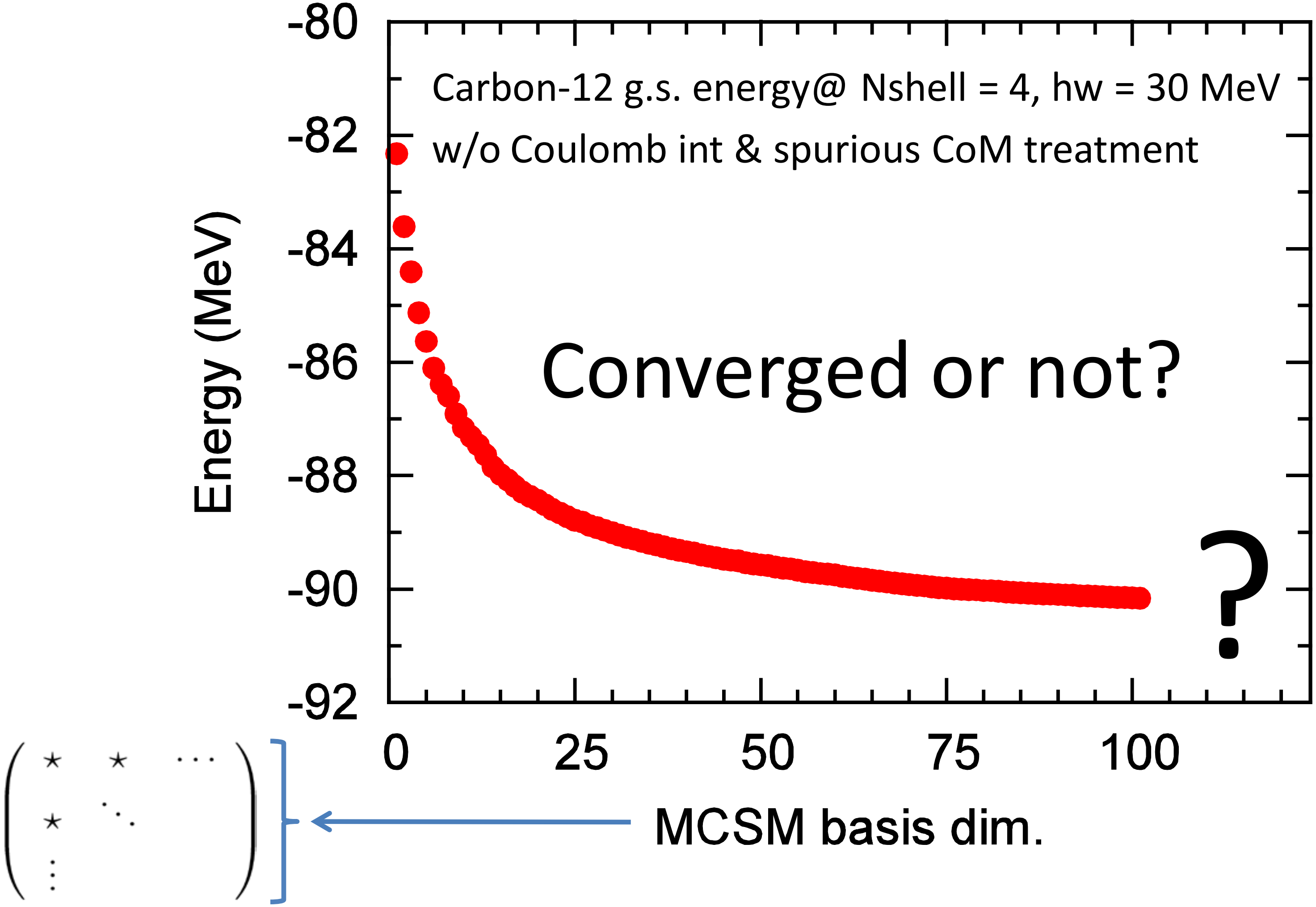
→ BLAS Level 3

Comparison of the performance



Y. Utsuno, N. Shimizu, T. Otsuka, and T. Abe, in preparation.

Energy-variance extrapolation



$D_M \sim 6 \times 10^{11}$

Numerical effort

8-folded loop
~O(Nsps^8)

$$\frac{\langle\Phi'|\hat{V}^2|\Phi\rangle}{\langle\Phi'|\Phi\rangle} = \sum_{ijkl\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{ijkl}\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}\Big[\frac{1}{4}(1-\rho)_{k\alpha}(1-\rho)_{l\beta}\rho_{\gamma i}\rho_{\delta j} + \rho_{\gamma\alpha}(1-\rho)_{l\beta}\rho_{ki}\rho_{\delta j} + \frac{1}{4}\rho_{ki}\rho_{lj}\rho_{\gamma\alpha}\rho_{\delta\beta}\Big]$$

$$= \frac{1}{4}\sum_{ij\alpha\beta}\left(\sum_{kl}\bar{v}_{ijkl}(1-\rho)_{k\alpha}(1-\rho)_{l\beta}\right)\left(\sum_{\gamma\delta}\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}\rho_{\gamma i}\rho_{\delta j}\right) + \mathrm{Tr}(\Gamma(1-\rho)\Gamma\rho) + \frac{1}{4}[\mathrm{Tr}(\rho\Gamma)]^2$$

6-folded loop
~O(Nsps^6)

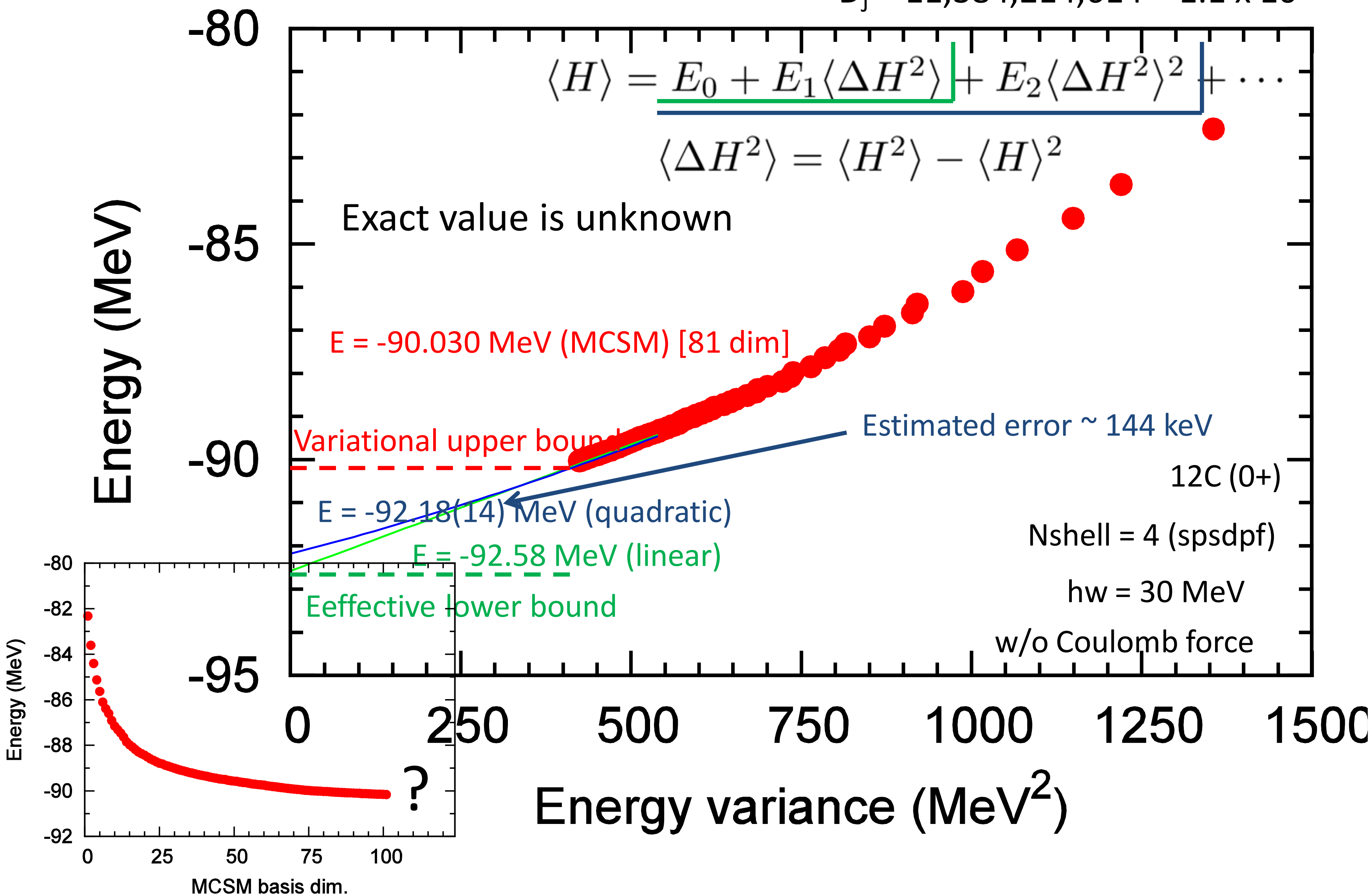
$$\rho_{\beta\alpha} = \frac{\langle\Phi'|c^\dagger_\alpha c_\beta|\Phi\rangle}{\langle\Phi'|\Phi\rangle} \quad \Gamma_{ik} = \sum_{jl}\bar{v}_{ijkl}\rho_{lj} \quad \frac{\langle\Phi'|V|\Phi\rangle}{\langle\Phi'|\Phi\rangle} = \frac{1}{2}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}\rho_{\gamma\alpha}\rho_{\delta\beta}$$

N. Shimizu, Y. Utsuno, T.Mizusaki, T. Otsuka, T. Abe, & M. Honma, Phys. Rev. C82, 061305(R) (2010)

$D_M \sim 6 \times 10^{11}$

Extrapolation of 12C Energy

D_J = 11,384,214,614 ~ 1.1×10^{10}

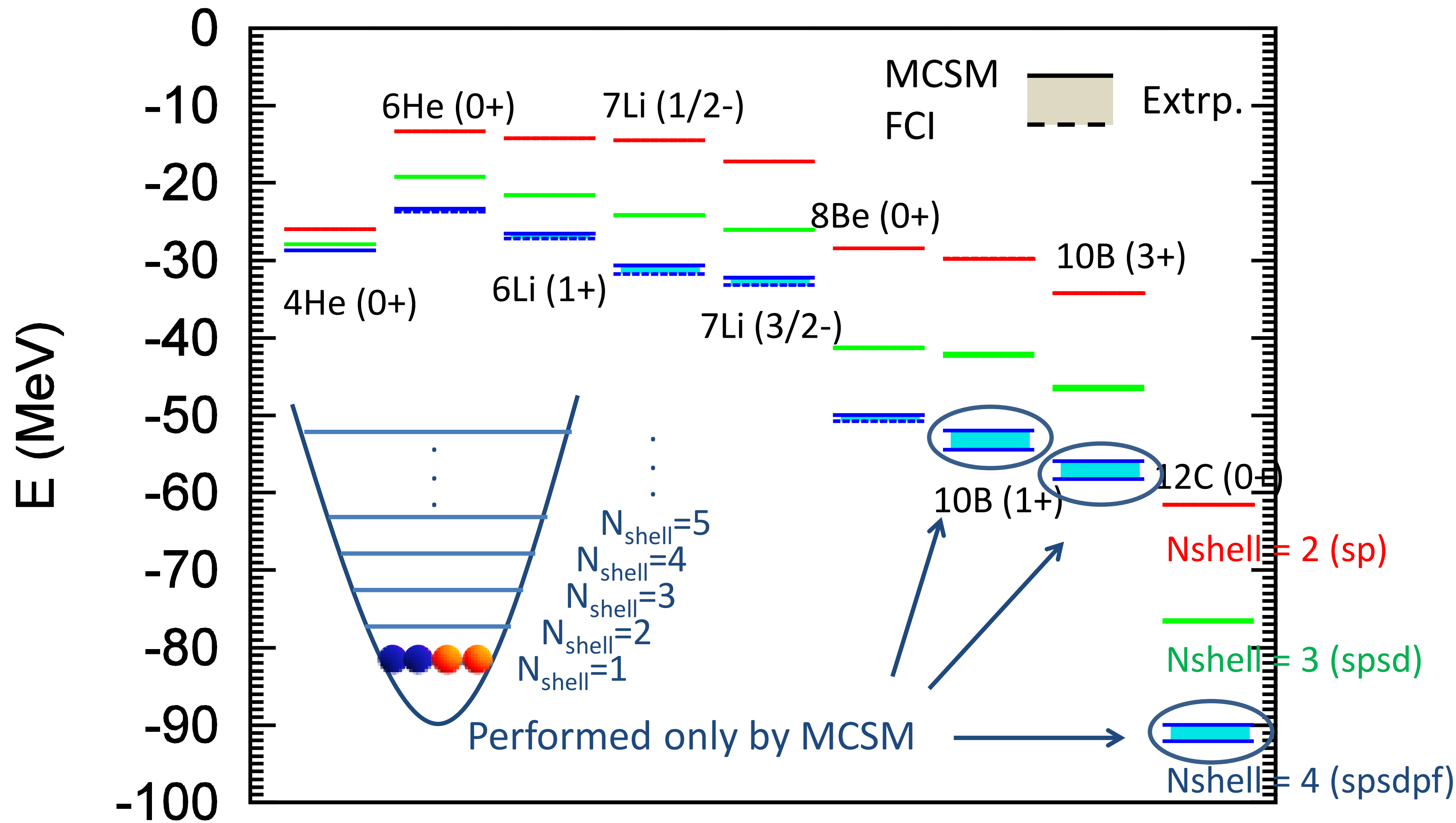


Benchmark results

- Energy
- RMS
- Q-moment
- μ-moment

T. Abe, P. Maris, T. Otsuka, N. Shimizu, Y. Utsuno, J. P. Vary

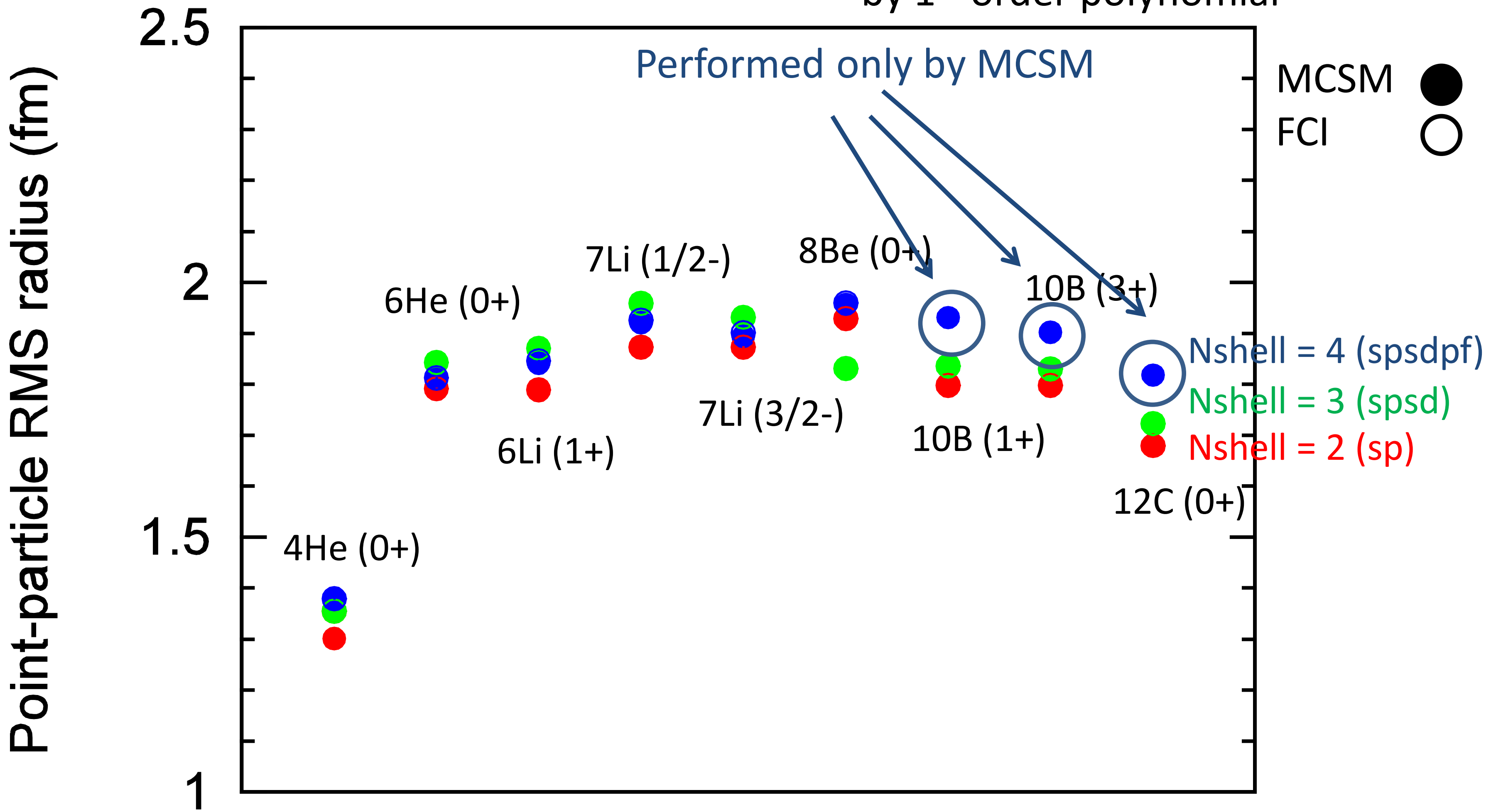
Energies of Light Nuclei



MCSM & FCI results are consistent within the size of lines

Point-particle RMS matter Radius

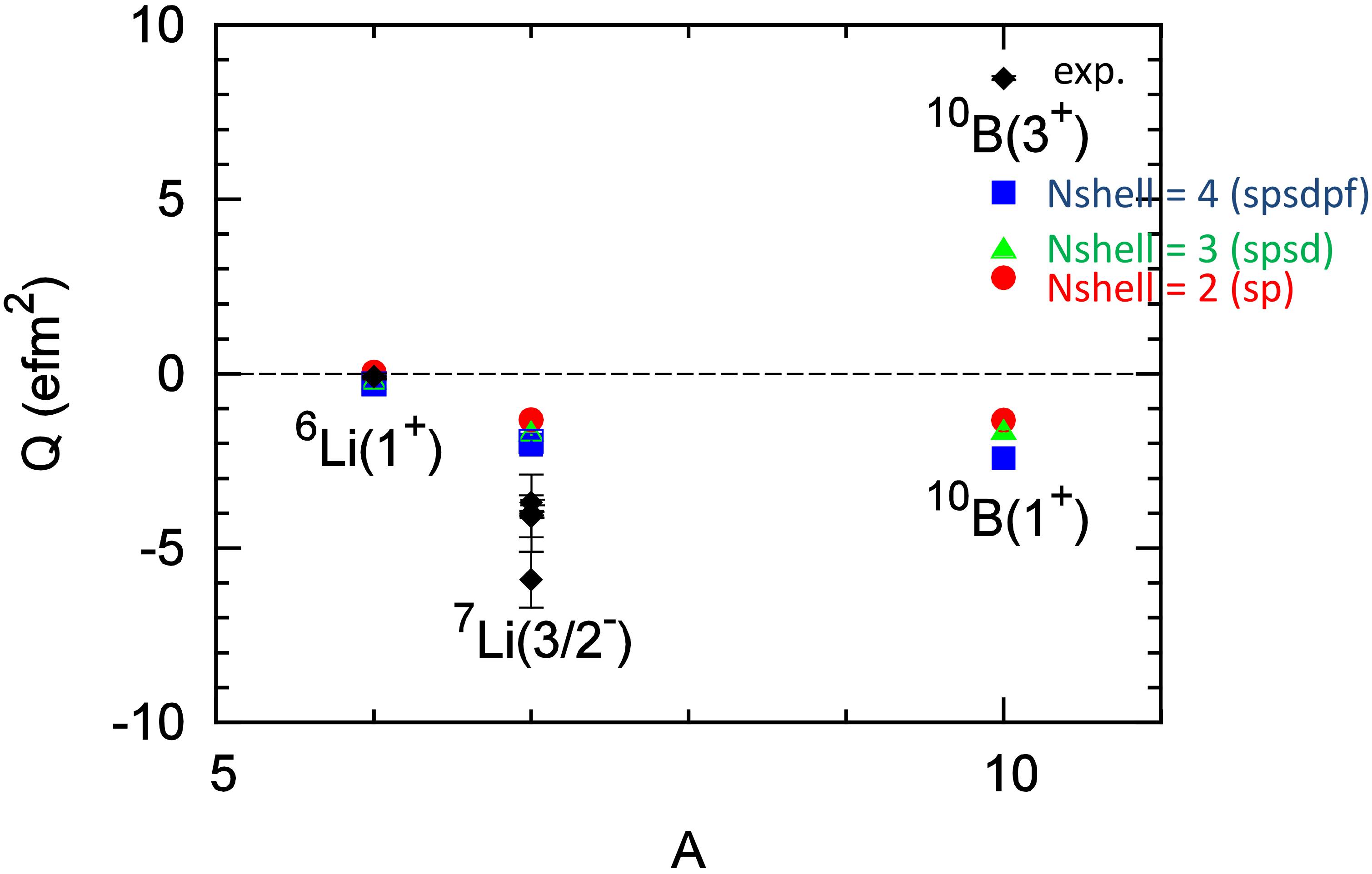
w/ energy-variance extrapolation
by 1st-order polynomial



MCSM & FCI results are consistent within the size of symbols

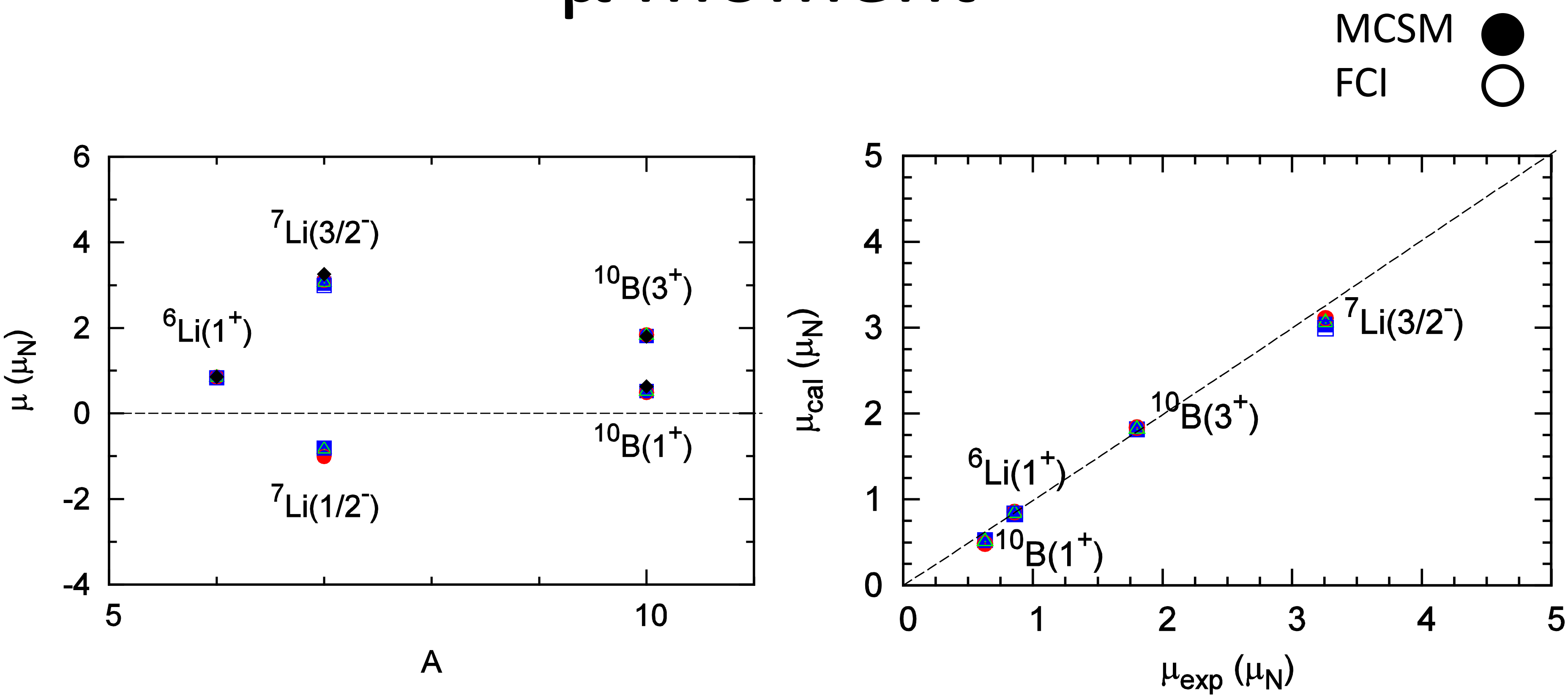
Q moment

MCSM ●
FCI ○



MCSM & FCI results are consistent within the size of symbols

μ moment



MCSM & FCI results are consistent with each other, and μ moments are well-reproduced even at small Nshell.

Summary

- Benchmarks for the p-shell nuclei

  - MCSM & FCI results are consistent with each other.

Outlook

- Larger model spaces (Nshell = 5, 6, …)

✓ Spurious CoM

✓ Coulomb force

- Genuine 3N force

- Tuning of the MCSM code on the K Computer

END