

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: 東大理 大塚孝治

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



阿部喬(東大理), 岩田順敬(東大CNS), 宇都野穰(JAEA),
江幡修一郎(北大MeMe), 大塚孝治(東大理), 角田直文(東大CNS),
角田佑介(東大理), 富樫智章(東大CNS), 本間道雄(会津大),
水崎高浩(専修大), 吉田亨(東大CNS)

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

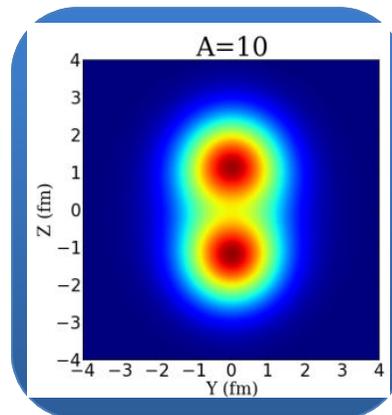
事業協力者リスト

大塚 孝治 (開発課題責任者)

東大CNS

清水 則孝
吉田 亨
岩田 順敬
富樫 智章
角田 直文

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)



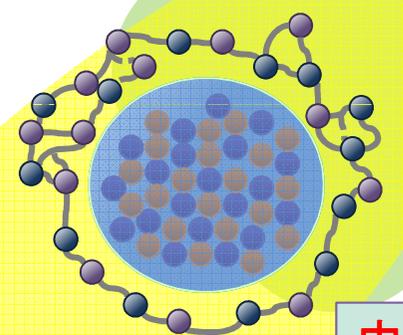
中重核の励起モードを系統的に計算

密度汎関数法

エキゾチック核構造
元素合成
二重ベータ崩壊,
原子力工学, ...

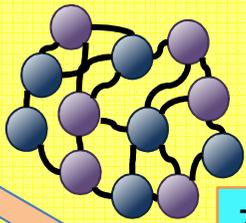
清水則孝講演
宇都野穰講演
富樫智章講演

内部コアの無い (No-core)
モンテカルロ殻模型
p殻核、 $^4\text{He} \sim ^{12}\text{C}$, sd殻核



重い核のための
内部コアを設定しての
モンテカルロ殻模型
Ni, Sn, Xe, Nd, ...

軽い核の
第一原理計算
阿部喬講演



中重核の微視的記述を
系統的に行う

有効相互作用の構築
3体力効果、Extended KK
角田直文講演

核力

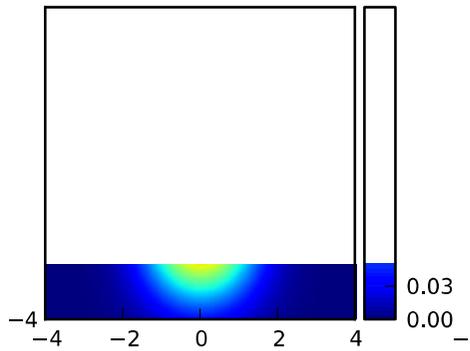
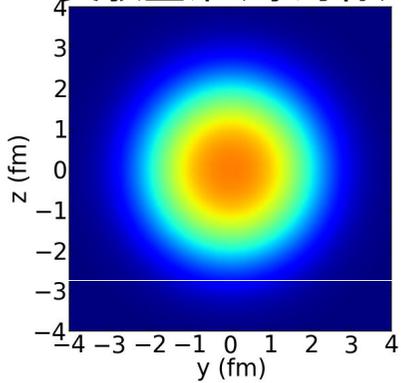


軽い核殻

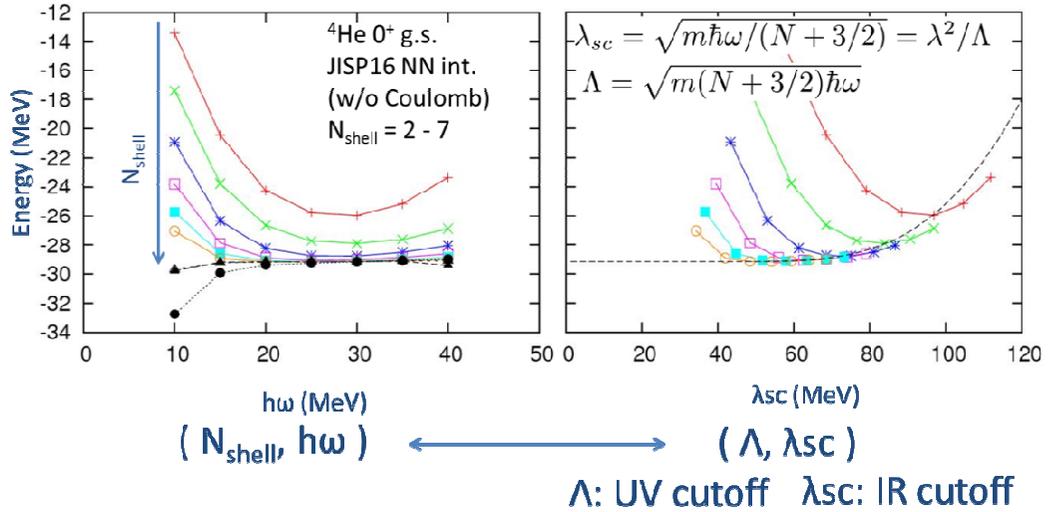
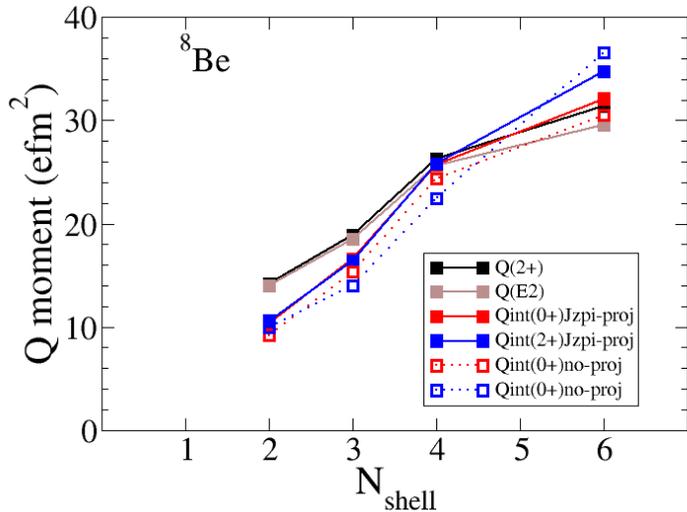
モンテカルロ
物体固有座標

^8Be

実験室系 (球対称)



四重極変形度とRotor model



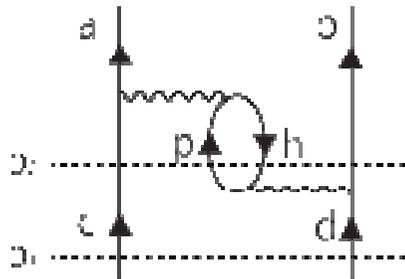
Extended Kuo-Krenciglowa method and Fujita-Miyazawa three-body force

EKK method

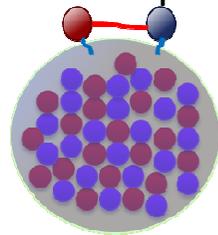
“bare” nuclear force



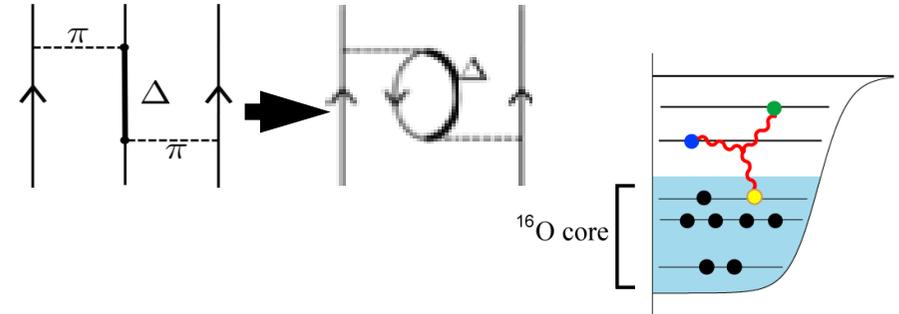
Effective interaction inside model space



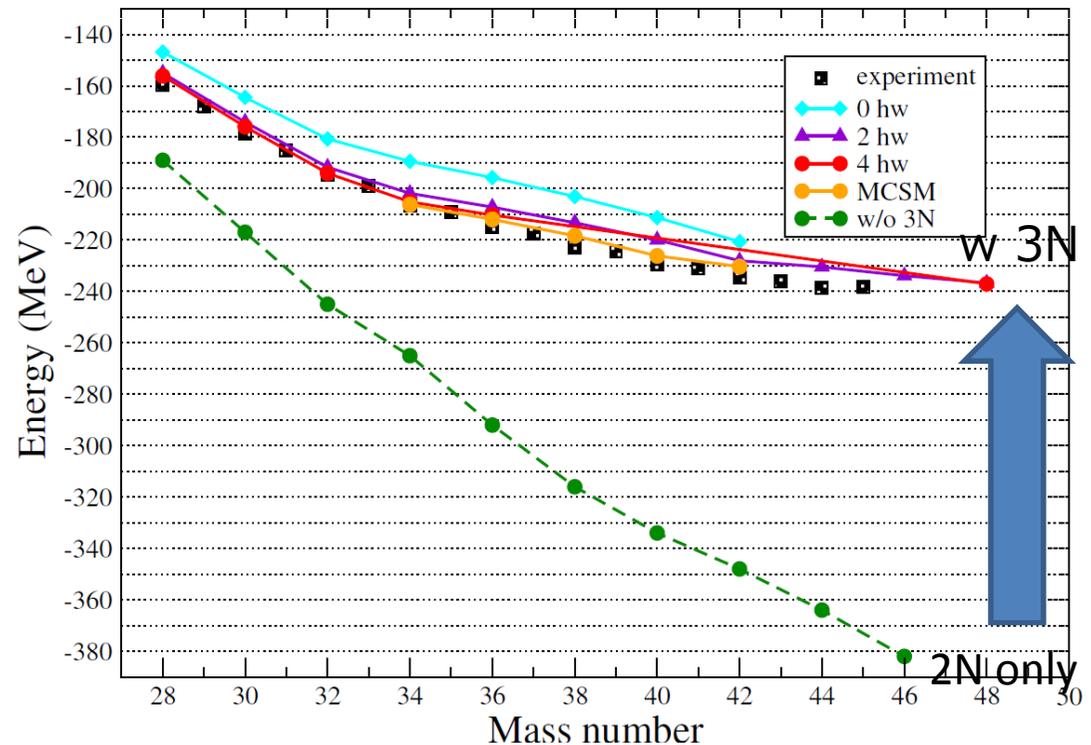
$$E = \epsilon_a + \epsilon_b + \epsilon_c + \epsilon_d$$



FM 3-body force



Ground-state energy of Si isotopes



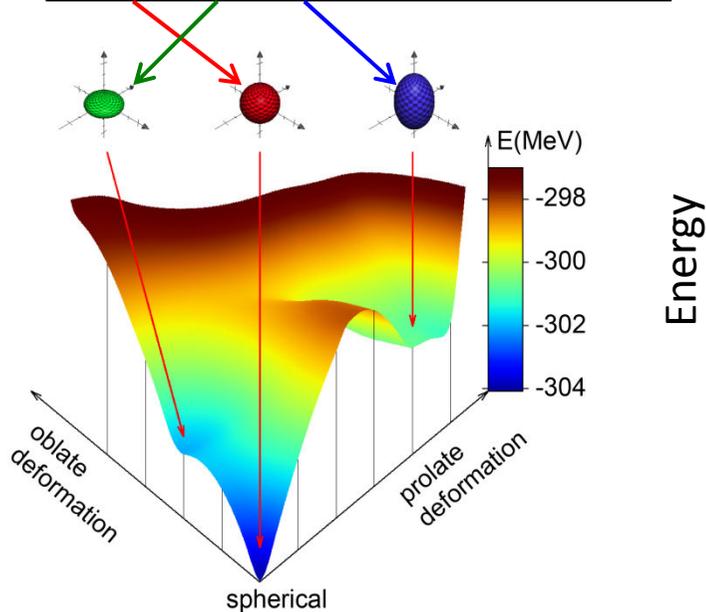
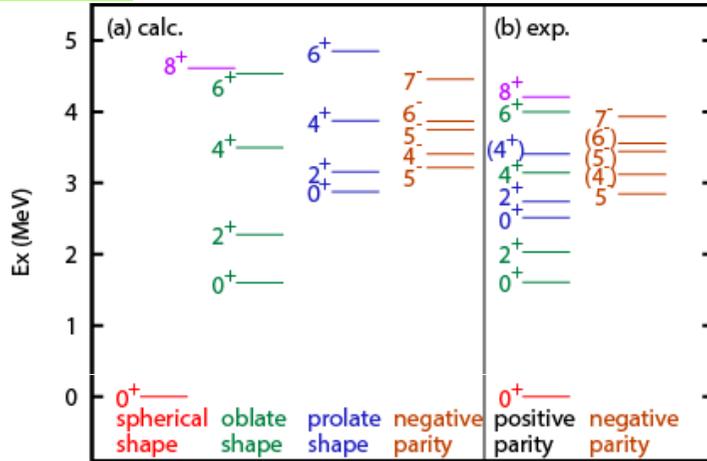
setups	model space: sd-pf-shell N3LO (Vlowk 2.0 fm ⁻¹) MBPT up to 3rd order P+Q space: 17 hw w and w/o 3N force SPE modified
--------	--

Neutron-rich Ni isotopes and shell evolution

Y. Tsunoda *et al.*

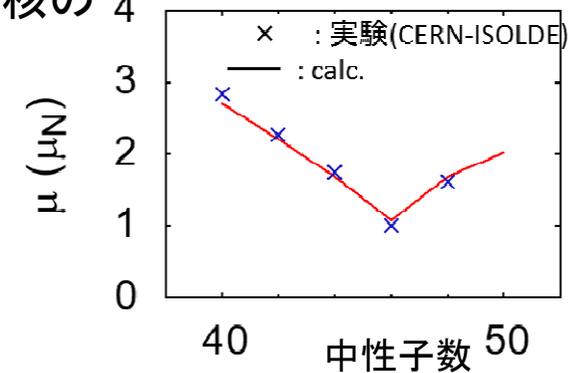
pf-shell + g9/2, d5/2 orbits w/o truncation
 ... 5.1×10^{15} M-scheme dim.

^{68}Ni "Triple shape coexistence"

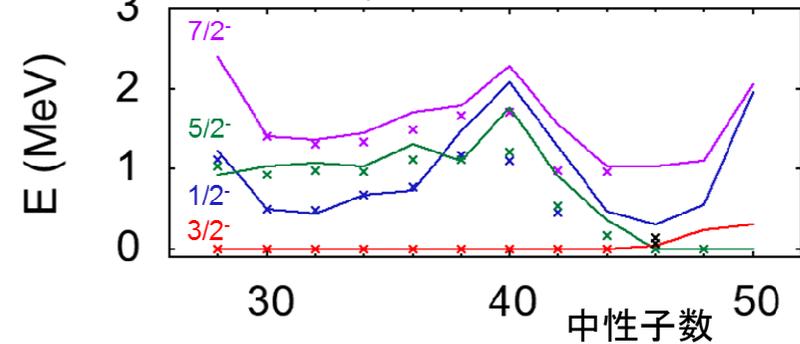


"Type-II shell evolution" の提唱
 Ni, Cu, Zn の中性子過剰核の
 エキゾチックな構造を
 系統的に計算

Cu同位体の磁気能率



Cu同位体の励起エネルギー



実験との共同研究、データ提供

RIKEN RIBF, SEASTAR collaboration,
 MSU NSCL, CERN ISOLDE,
 KU Leuven nuclear exp. group 他、
 10件以上

ニュートリノレス二重β崩壊の核行列要素の大規模殻模型計算

Y. Iwata et al.

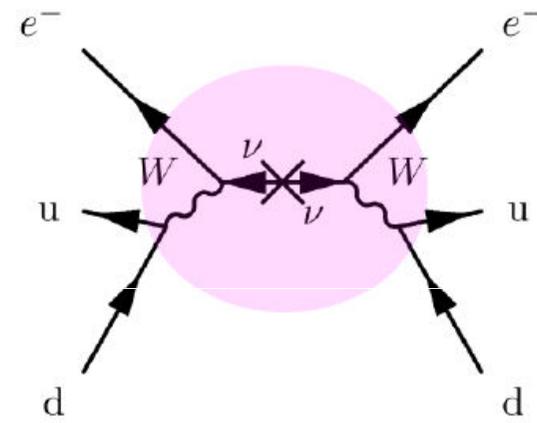
$$M^{0\nu} = \left\langle f \left| \sum_{a,b} \tau_a^+ \tau_b^+ \left\{ -(g_V/g_A)^2 H_F(r) + \sigma_a \cdot \sigma_b H_{GT}(r) - (3(\sigma_a \cdot r)(\sigma_b \cdot r) - \sigma_a \cdot \sigma_b) H_T(r) \right\} \right| i \right\rangle$$

Fermi type Gamow-Teller type >> Tensor type

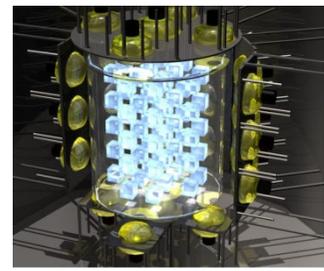
[既存の計算から] Tensor type の寄与はFermi typeの寄与の5%未満

マヨラナ粒子かどうか？

ニュートリノレス二重β崩壊



CANDLES実験



ニュートリノ有効質量の値は？

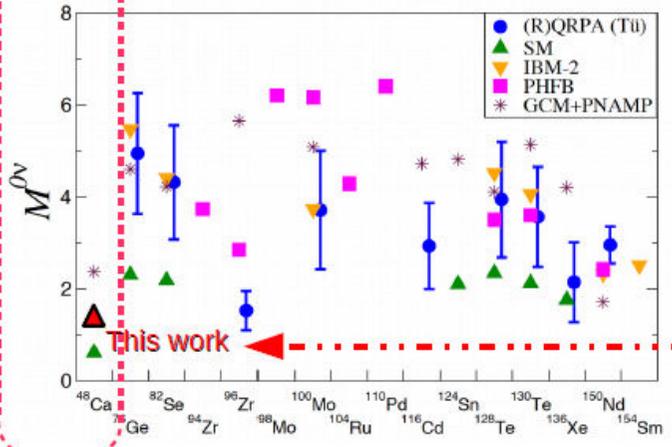
有効ニュートリノ質量と二重β崩壊の半減期との関係：

$$[T_{1/2}^{0\nu}]^{-1} = G_1^{0\nu} |M^{0\nu}|^2 \left(\frac{\langle m_{\beta\beta} \rangle}{m_e} \right)^2$$

↑
半減期
(未観測)

↑
核行列要素

種々の理論による核行列要素の計算値



Faessler, arXiv:1203.3648

⁴⁸Caの核行列要素：既存の計算と大規模計算との比較

	一主殻 (0hw)	二主殻 (≤2hw)	二主殻 + SRC (CD-Bonn)
M_F	-0.207	-0.292	-0.312
M_{GT}	0.677	0.947	0.986
$M^{0\nu}$	0.810	1.133	1.185

終状態 |f> に対する
対角化次元

$10^{5.8}$

$10^{9.3}$

SRC: 短距離相関

モンテカルロ殻模型による核変換研究

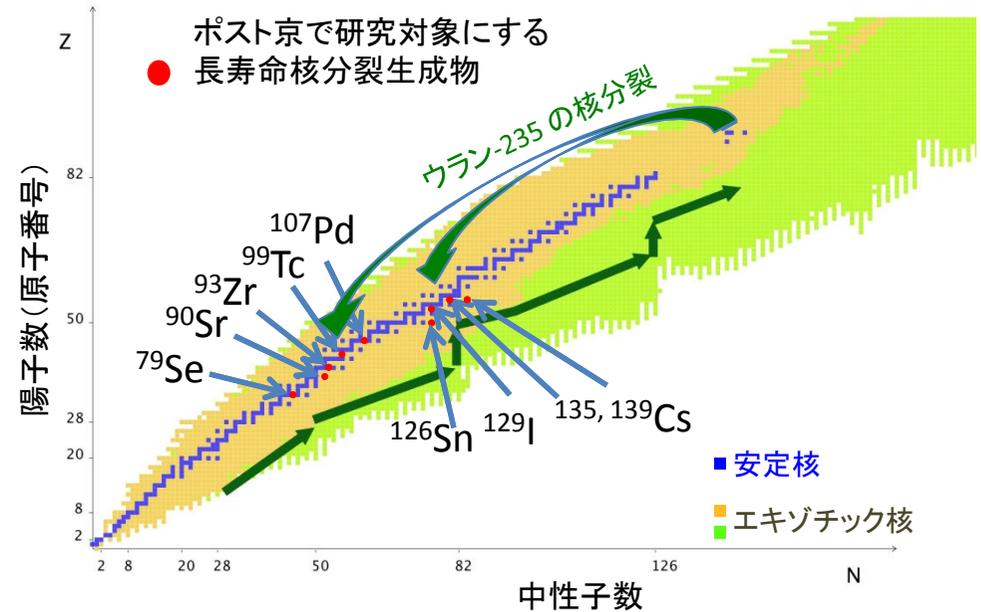
宇都野穰さん、富樫智章さん講演

核変換：核廃棄物に含まれる長寿命核分裂生成物を照射プロセスなどにより別の原子核に変換

その研究に必要な原子核の量子構造や反応に関する基礎データの、現実的な核力と動的な相関を取り込んだ計算が、最近可能になった

理論物理、アルゴリズム、計算機アーキテクチャの3つの進歩が必要で、その組み合わせが実現
→ 京コンピュータでのHPCIで原理実証研究
(重点課題として平成26年度に実施)

ポスト京では右図にあるような、重要な長寿命核分裂生成物に関する精度の良いデータの取得を目指す

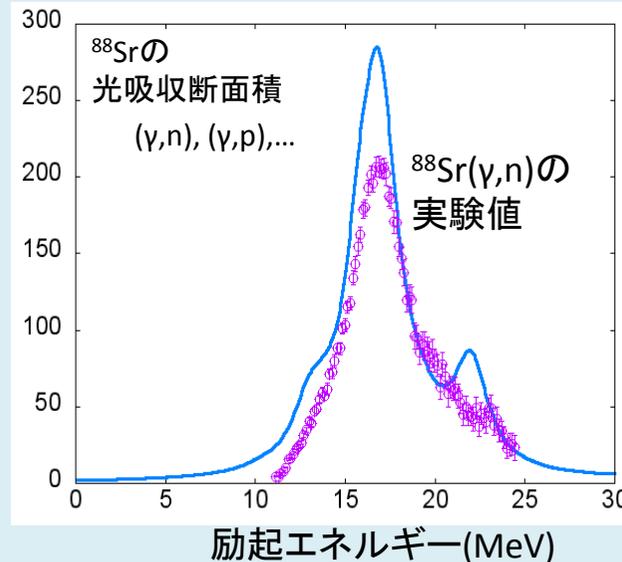


右図は光吸収断面積の計算例
(原理実証研究の成果)

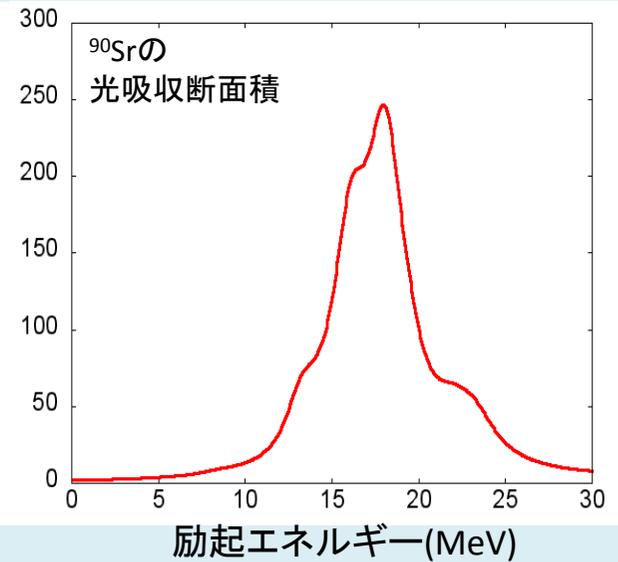
右側にあるストロンチウム-90
は長寿命核分裂生成物の一つ

基礎データの提供により、核変換
研究の様々な局面に貢献が
期待される

断面積(mb)



断面積(mb)



原子核殻模型計算による E1励起の記述

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



宇都野穰(JAEA), 江幡修一郎(北大MeMe), 大塚孝治(東大理),
富樫智章(東大CNS), 本間道雄(会津大), 水崎高浩(専修大)

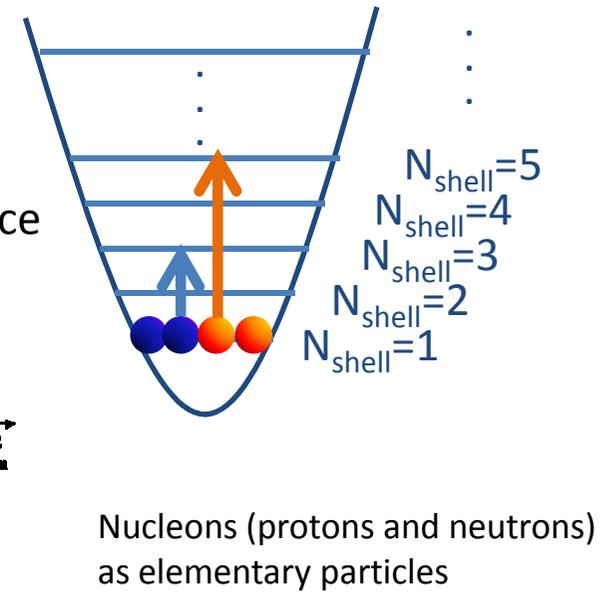
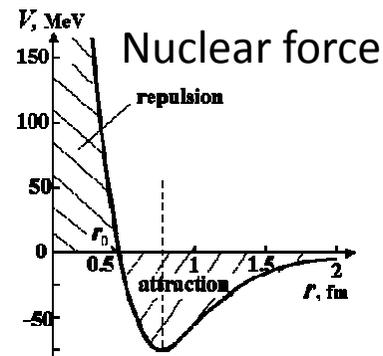
Outline

- Lanczos 法による原子核殻模型計算コードの開発
- 原子核殻模型計算によるカルシウム同位体のE1 励起

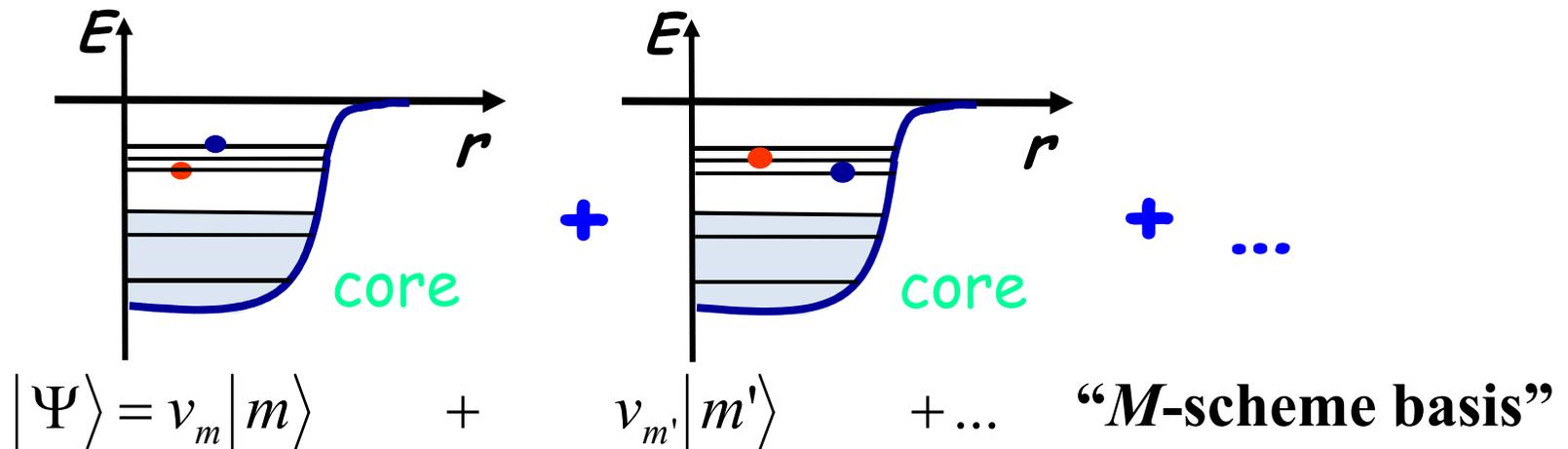
Nuclear shell model calculations

(Configuration Interaction approach)

- No-core shell-model calc.
 - Harmonic oscillator basis
 - Renormalization of short-range repulsion

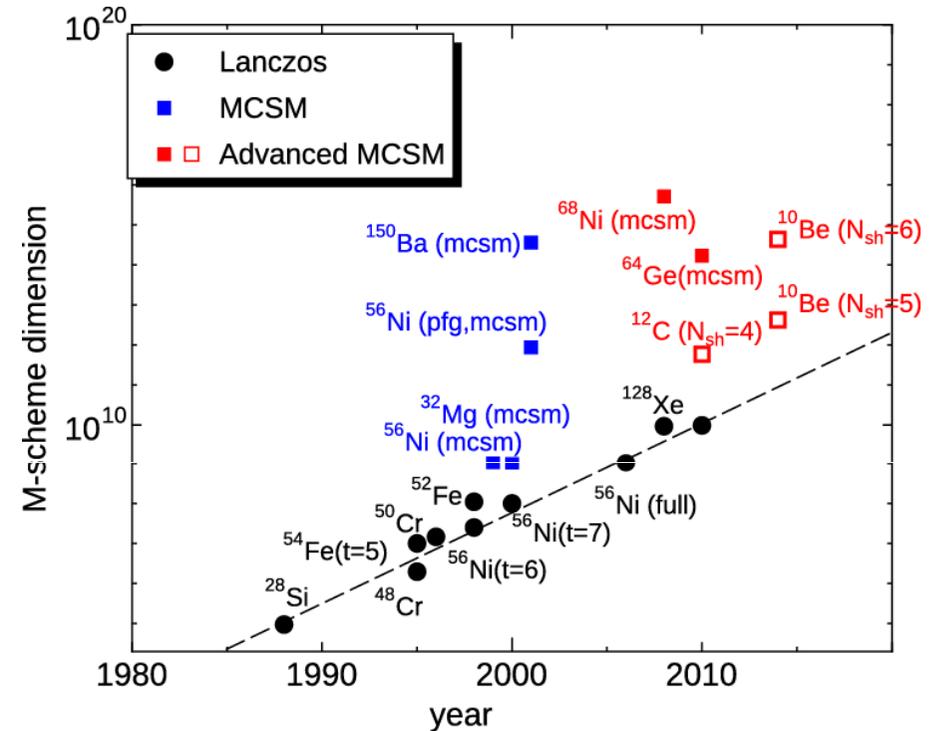


- Conventional shell-model calc.
 - model space, effective interaction by perturbation



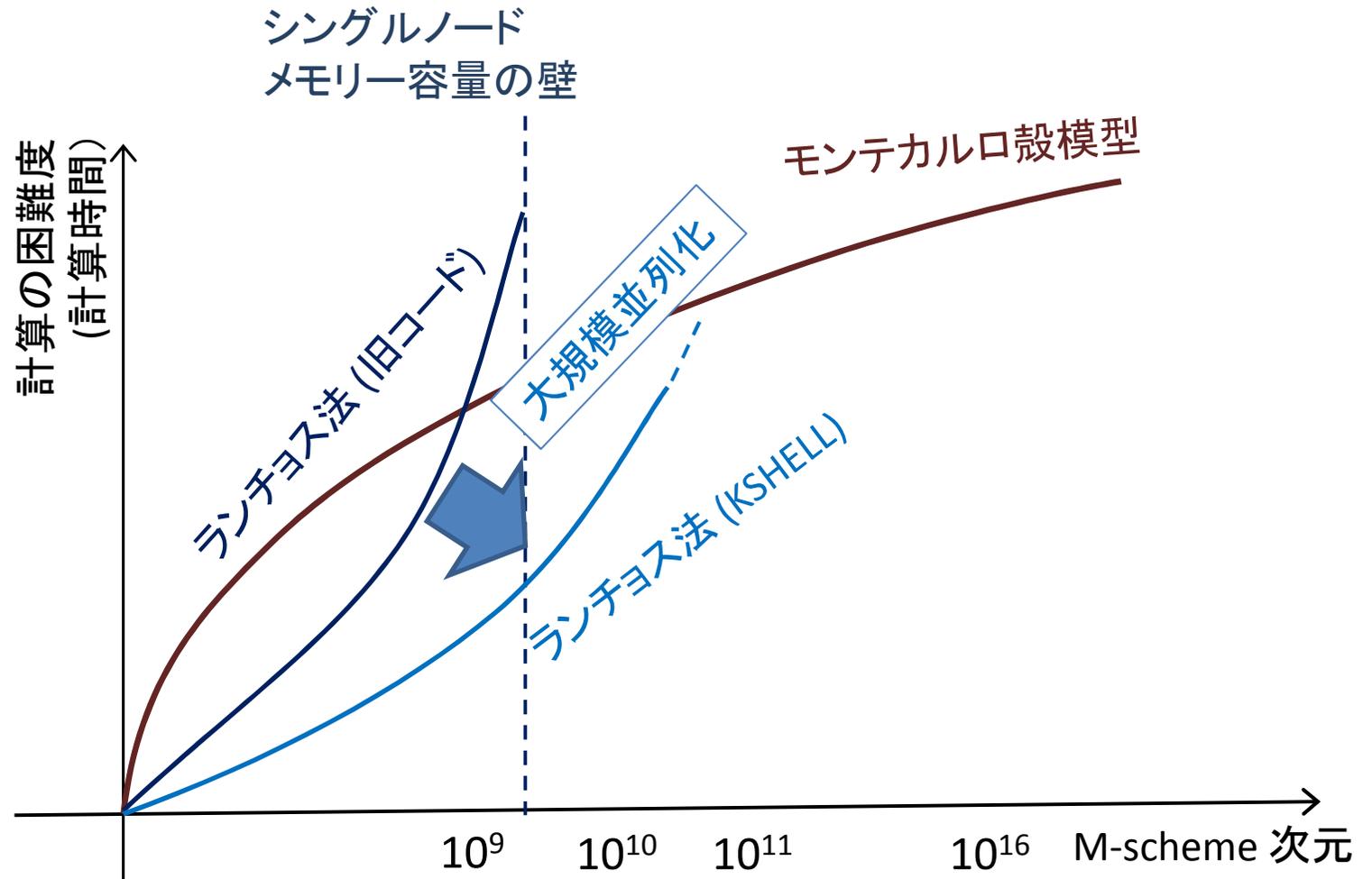
モンテカルロ殻模型 vs 直接対角化計算

- 原子核殻模型計算 => 巨大次元疎行列の固有値問題
- モンテカルロ殻模型により、これまで不可能だった大次元の系がチャレンジ可能に
 - エネルギー分散外挿などの慎重な取り扱いが必要
 - コード開発は一段落
 - 高励起状態の遷移強度分布計算法を開発中



- 従来型ランチョス法による対角化計算を高速に計算することも同様に重要 (10¹⁰次元以下)
 - 取扱いの簡便さ、高励起状態、高精度な波動関数、、、
 - 有効相互作用の検証には、大量の試行計算が必要
 - 並列計算コードを作成するにはDisk I/O、メモリー容量などに配慮が必要

ランチョス法による直接対角化計算とモンテカルロ殻模型

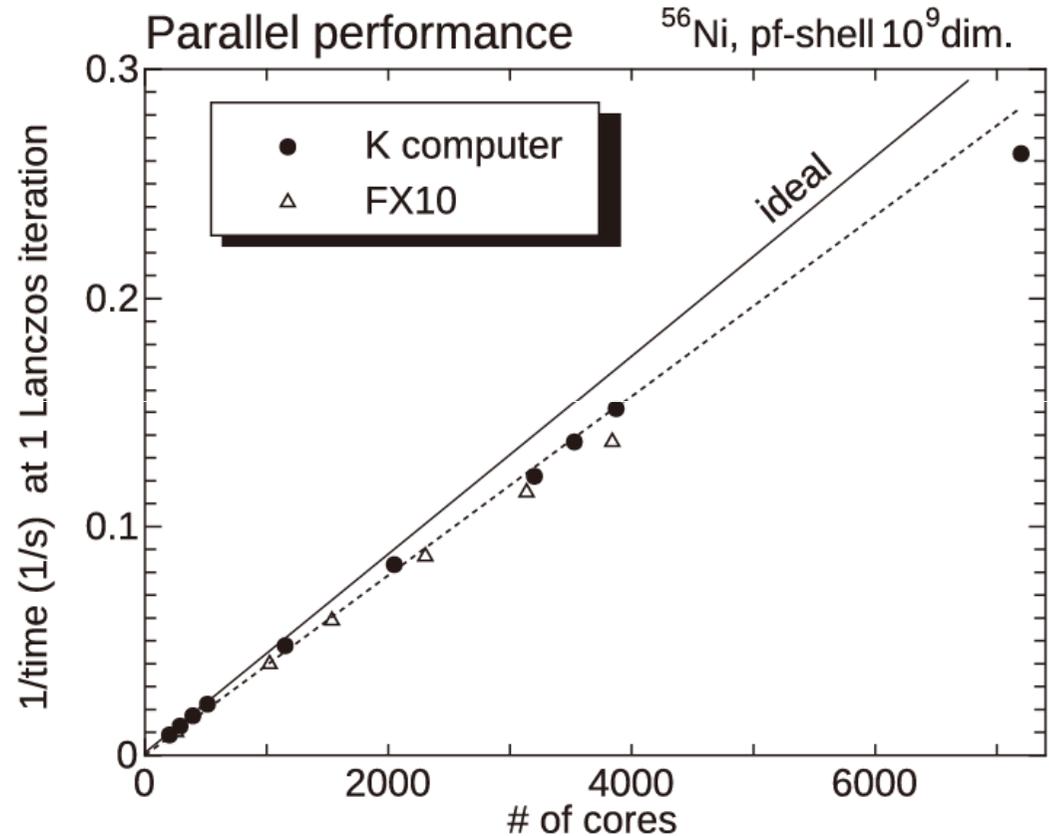


“計算可能ならば”、ランチョス法による直接対角化計算をした方がよい！

モンテカルロ殻模型を“支えている”直接対角化計算

大規模並列計算向け殻模型計算コード “KSHELL”

- ^{50}Ca 3 $\hbar\omega$ calc. requires eigenvalue problem of $\sim 10^{10}$ dim.
=> parallel computation
- *M*-scheme + “on the fly” computation of Hamiltonian matrix elements ... similar to *MSHELL64*, but code was written from scratch for OpenMP+MPI hybrid parallel
- parallel in “partition”, or Slater determinant is categorized by occupation numbers of single-particle orbits
- ランチョスベクトルを各ノードで分散配置することにより、大次元計算を可能とした



実効性能(理論性能比) ~ 3%

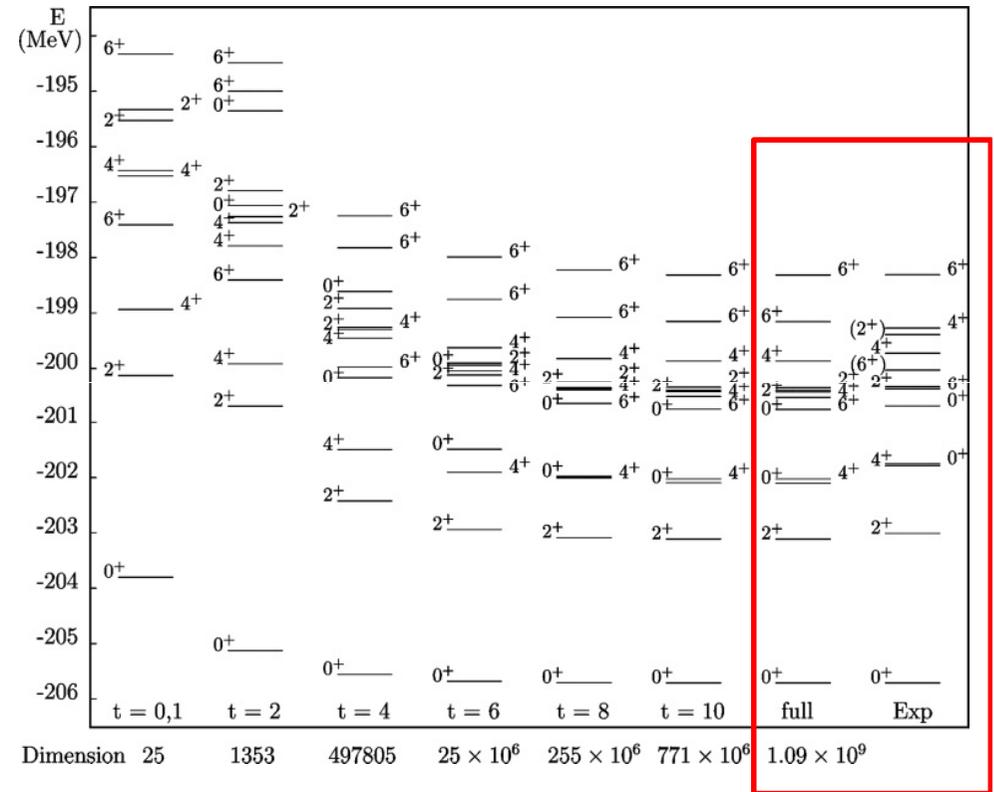
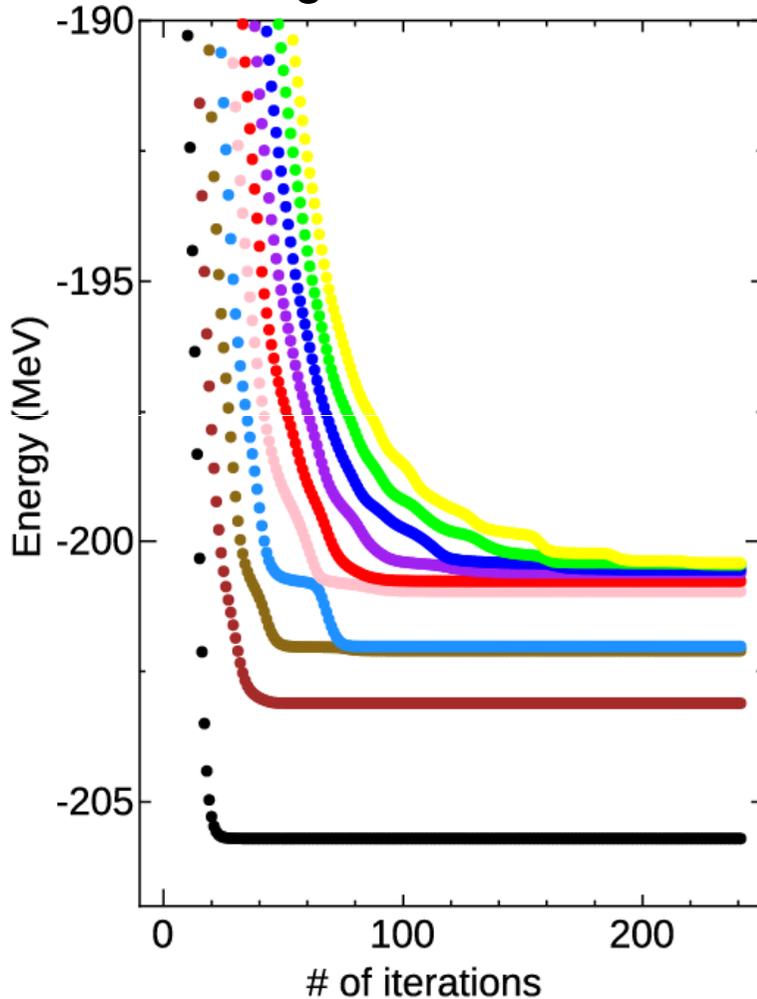
^{56}Ni in pf殻 1回のランチョスiteration:: 25分 (16cores) ➡ 3.8秒 (7200cores)

^{50}Ca 3 $\hbar\omega$ のGDR 計算 ... 50000ノード時間@FX10 (SPARC IX 16core)

Lanczos method in shell-model calc.

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

10 lowest eigenvalues ... 241 iterations



Excitation energies of ^{56}Ni

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

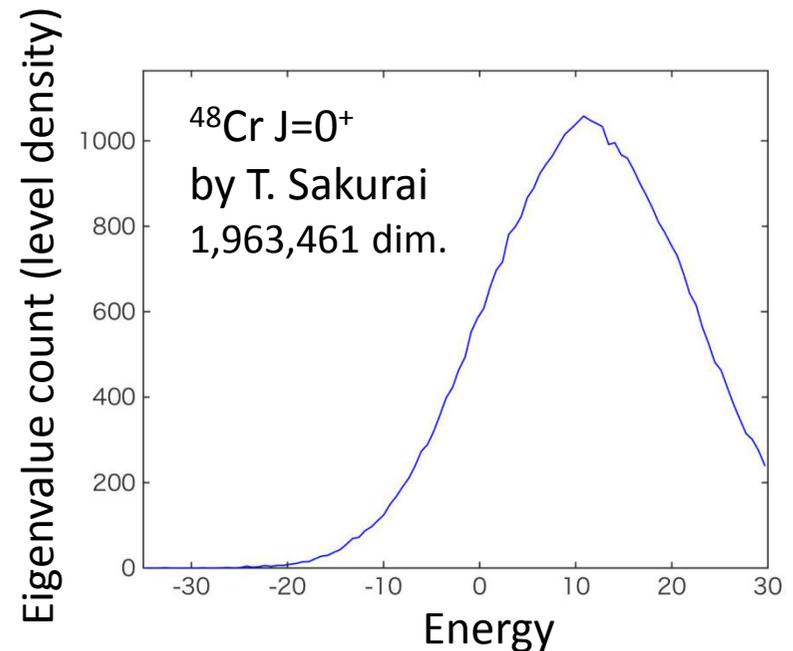
code "kshell" (N. Shimizu et al.)

9 sec/iteration @FX10 240 nodes (SPARC 64 IXfx, 3840 cores), total 35min.

殻模型計算コード“KSHELL”の開発

<https://sites.google.com/a/cns.s.u-tokyo.ac.jp/kshell/>

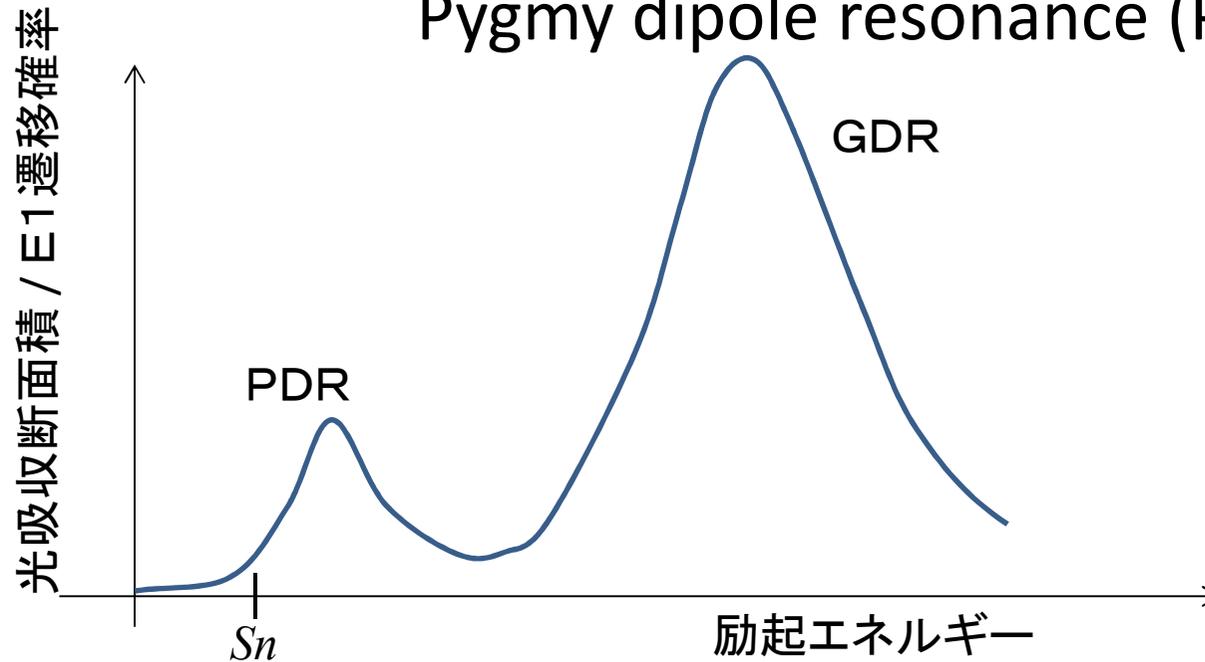
- 単体PCから、京計算機まで、同じ使い勝手を実現。
- OpenMP+MPI ハイブリッド並列、京およそ1000ノードまでの良好な並列効率。
- 使いやすい対話型インターフェース。
 - 実験研究者にも使いやすく。
- Ongoing: Sakurai-Sugiura法による状態密度の確率的計算
(筑波大 櫻井鉄也、二村保徳)
- Lanczos restart 法の検討
(KEK 松古栄夫)



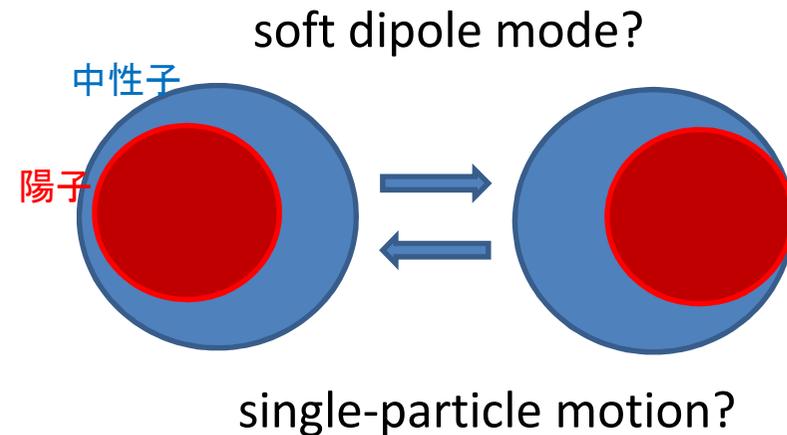
Outline

- Lanczos 法による原子核殻模型計算コードの開発
- 原子核殻模型計算によるカルシウム同位体のE1 励起

E1励起: Giant dipole resonance (GDR) と Pygmy dipole resonance (PDR)



- PDRは中性子過剰核に現れる傾向。
(断面積にして数%)
 - 中性子スキンとの相関?
 - neutron-matter equation of state



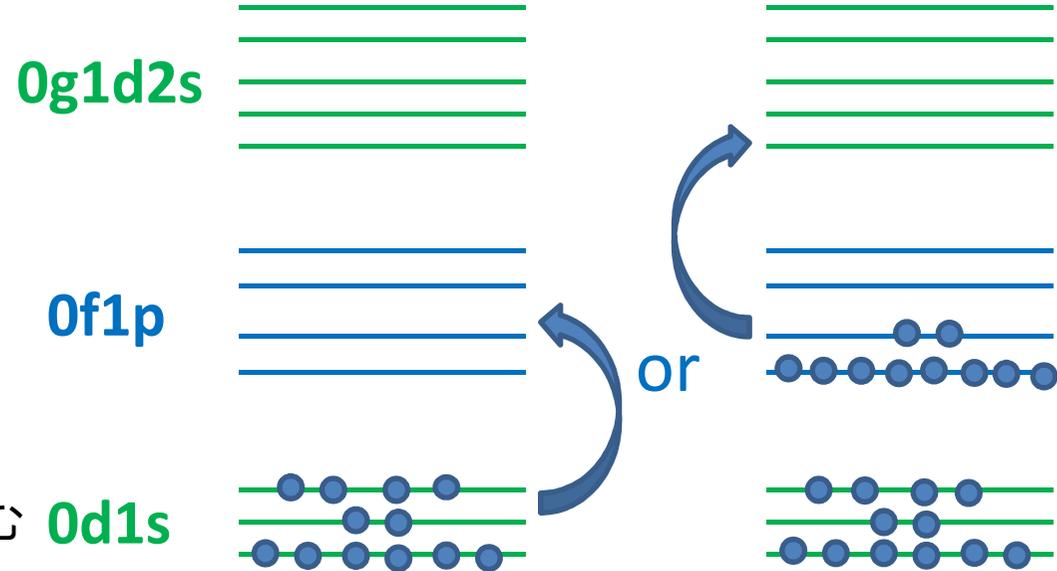
目的

様々な多体相関をとりこんだ大規模殻模型計算により、
中重核領域(例:カルシウム同位体)のGDR/PDRの記述を目指す。

殻模型計算による ^{48}Ca の光吸収断面積

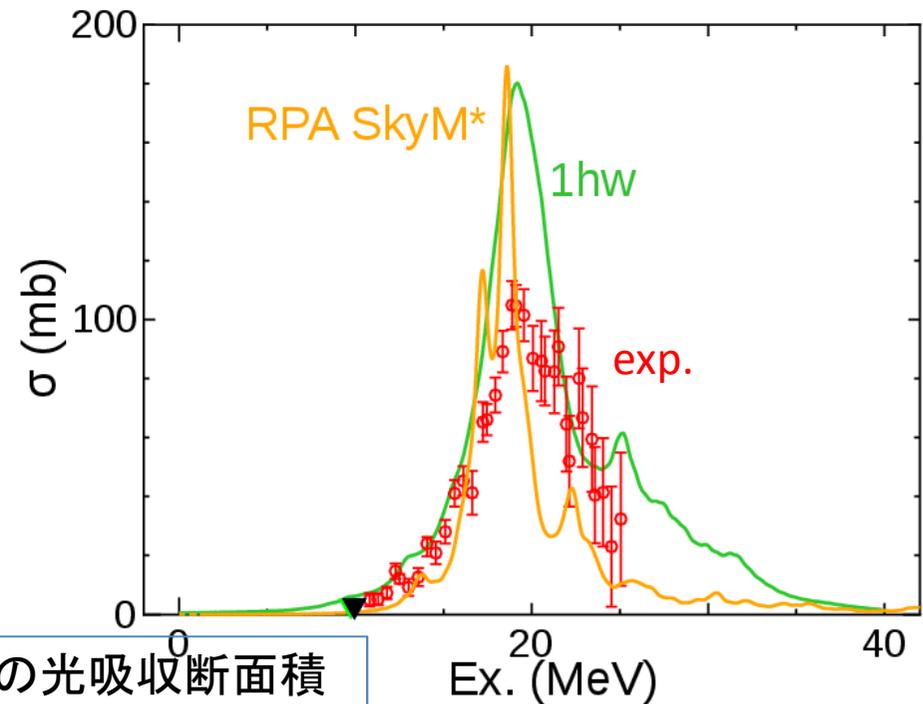
- 模型空間
 - full *sd-pf-sdg* shell, ^{16}O コア

- $1\hbar\omega$ truncation
 - 正パリティ状態は $0\hbar\omega$
 - 負パリティ状態は $1\hbar\omega$
 pf殻内のすべての配位混合を含む



- 有効相互作用
 - USD+GXPF1B+VMU
 - カルシウム同位体の3-状態を再現する
 - bare effective charge
 - ランチョス強度関数法

1 $\hbar\omega$ 小規模殻模型計算: 4.1×10^6 次元



^{48}Ca の光吸収断面積

殻模型計算による ^{48}Ca の光吸収断面積

- 模型空間

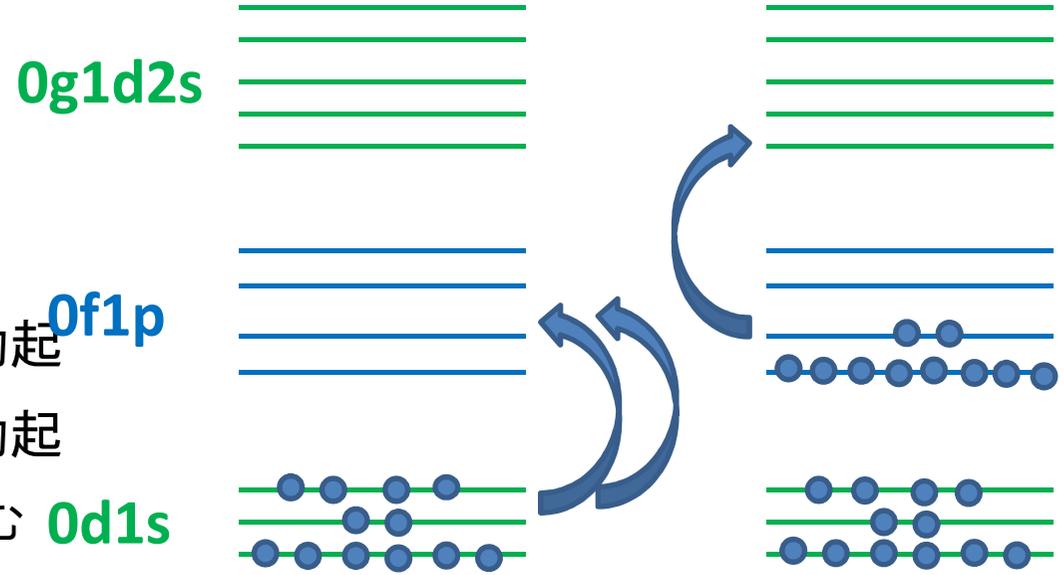
- full *sd-pf-sdg* shell, ^{40}Ca コア

- $3\hbar\omega$ truncation

- 正パリティ状態は $(0+2)\hbar\omega$ 励起

- 負パリティ状態は $(1+3)\hbar\omega$ 励起

pf殻内のすべての配位混合を含む



- 有効相互作用

USD+GXPF1B+VMU

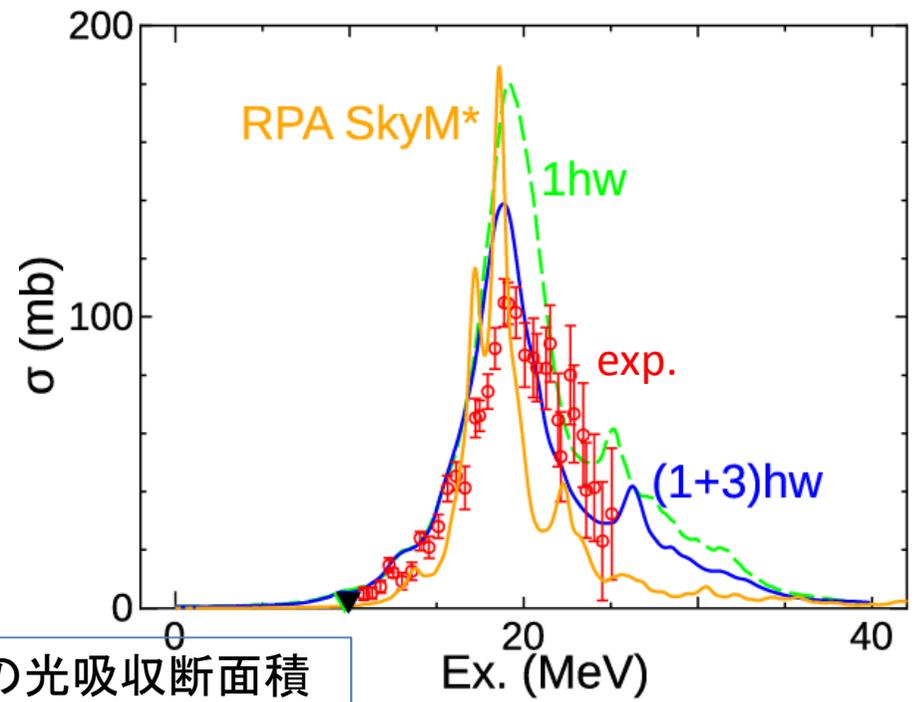
カルシウム同位体の3-状態を再現する

bare effective charge

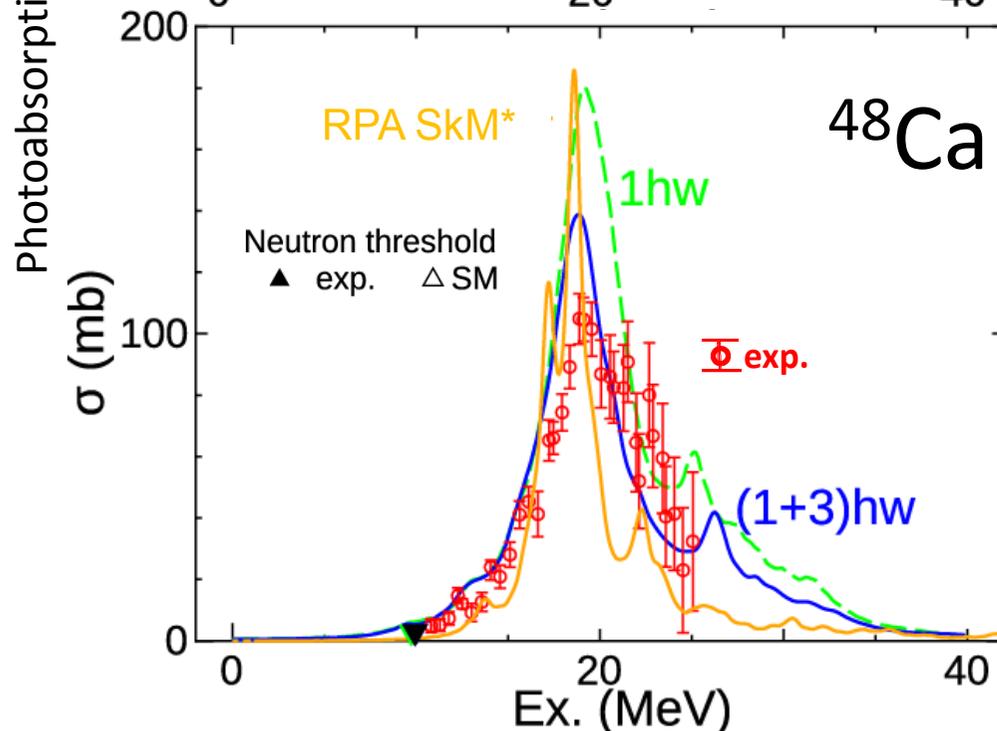
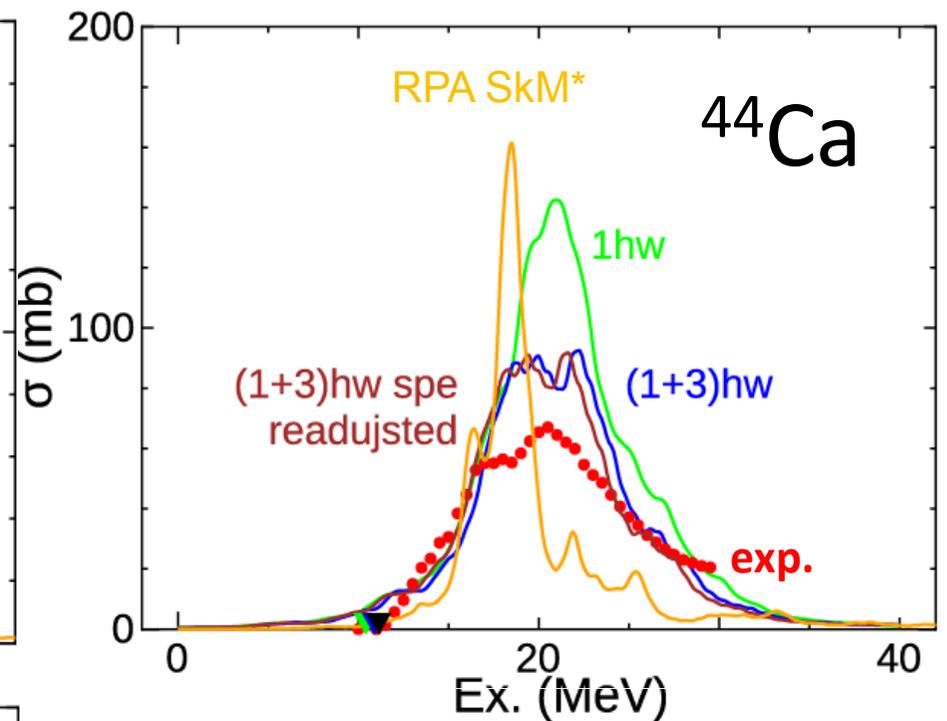
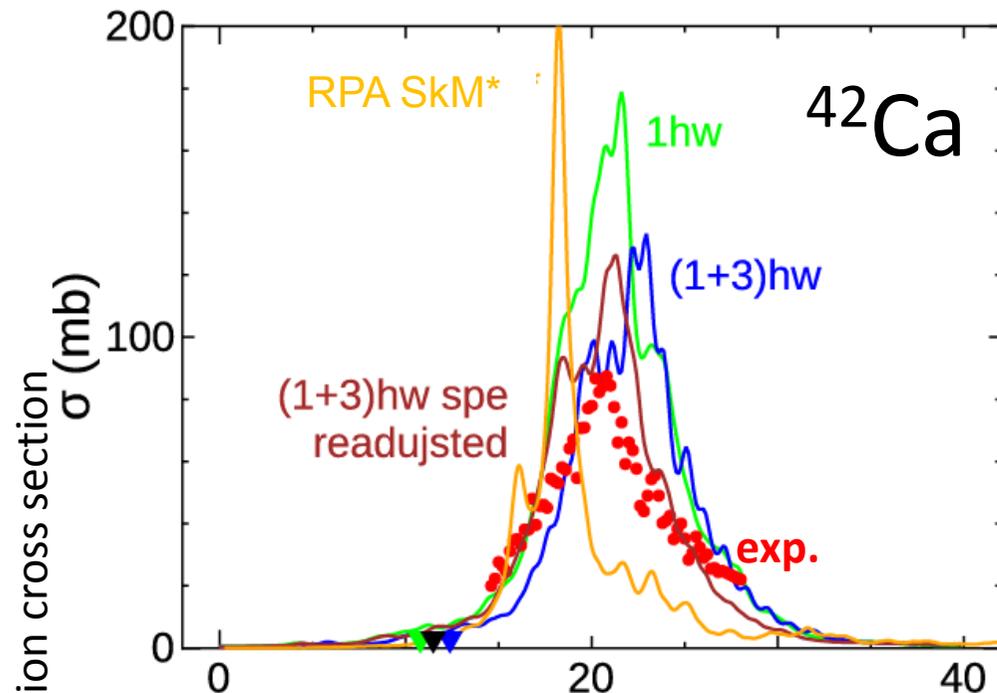
ランチョス強度関数法

$1\hbar\omega$ 小規模殻模型計算: 4.1×10^6 次元

$3\hbar\omega$ 大規模殻模型計算: 1.2×10^{10} 次元



^{48}Ca の光吸収断面積



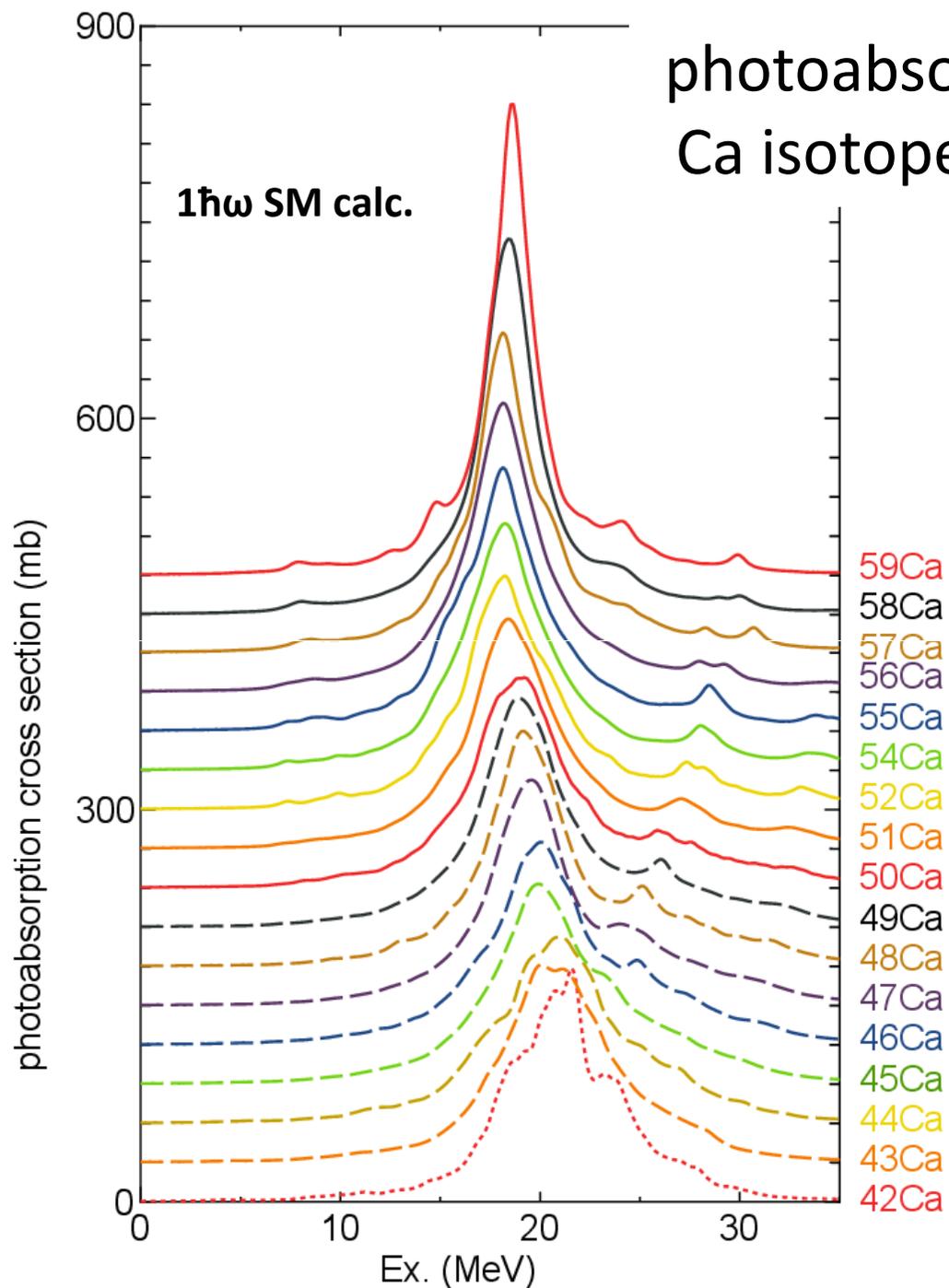
Photoabsorption cross section of Ca isotopes

SM calc. well reproduce exp.
GDP peak position and width

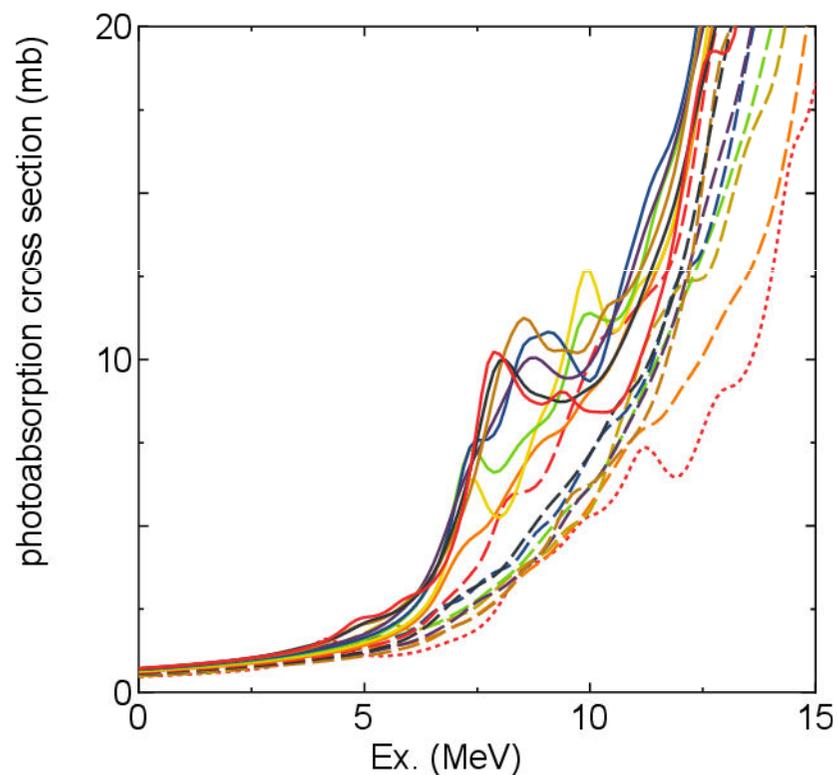
- GDR (1+3) $\hbar\omega$ essential
- Ex. < 15MeV 1 $\hbar\omega$ enough

RPA: Cb-TDHFB by Ebata, 5fm 3D sphere, 1fm mesh

photoabsorption cross section of Ca isotopes including odd nuclei



Low-energy region



Dashed lines : 42Ca – 49Ca
Solid lines : 50Ca – 59Ca

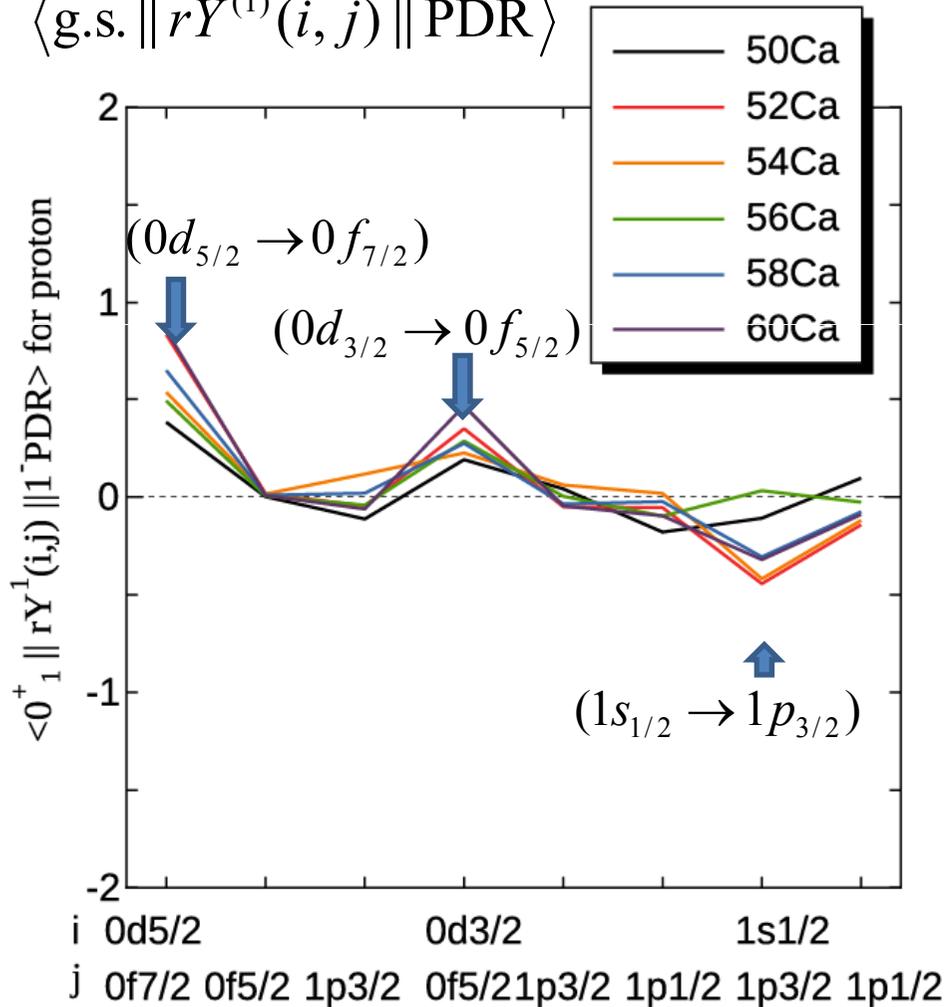
rY1 matrix element for proton

$$B(E1) = \left(e_{tz} \sum_{i,j} \langle \text{g.s.} \| rY^{(1)}(i,j,tz) \| 1^- \rangle \right)^2$$

PDR state

$|\text{PDR}\rangle$... large B(E1) state in low energy

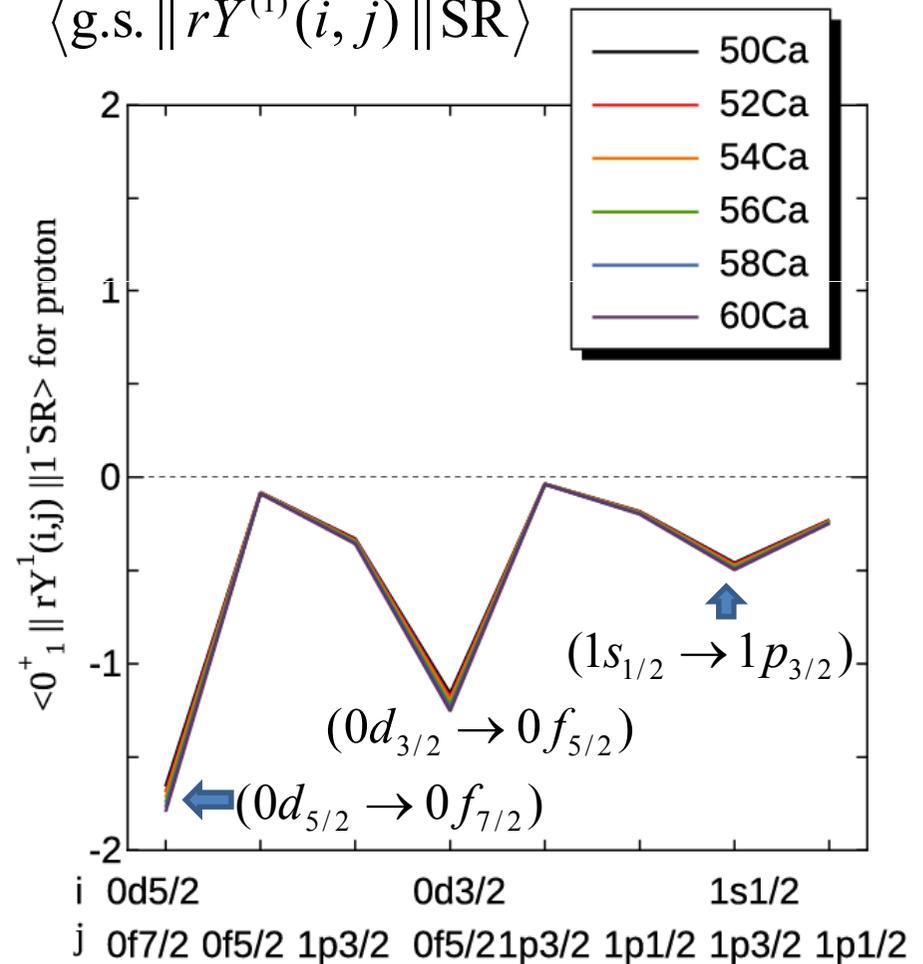
$$\langle \text{g.s.} \| rY^{(1)}(i,j) \| \text{PDR} \rangle$$



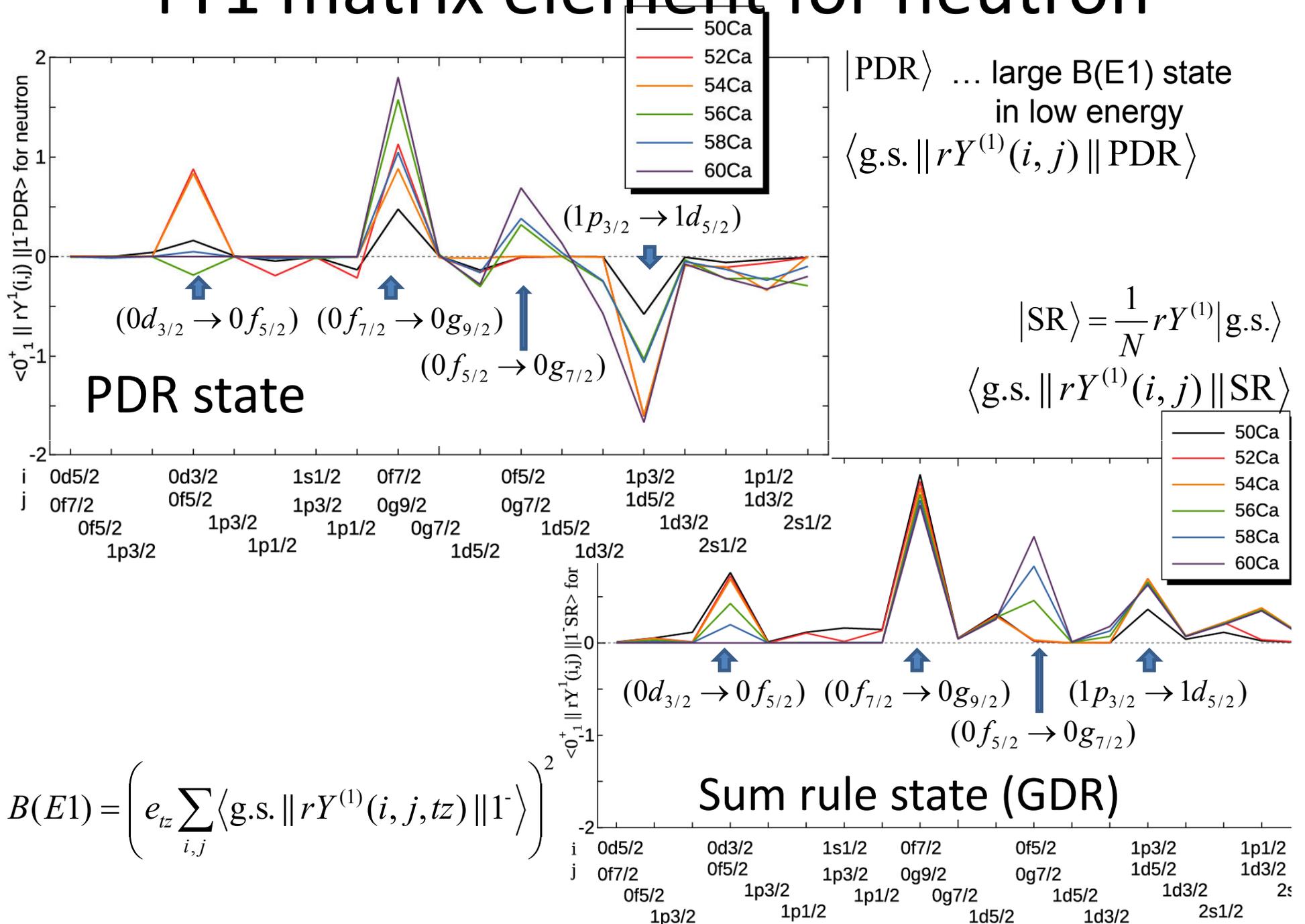
Sum rule state (GDR)

$$|\text{SR}\rangle = \frac{1}{N} rY^{(1)} |\text{g.s.}\rangle$$

$$\langle \text{g.s.} \| rY^{(1)}(i,j) \| \text{SR} \rangle$$



rY1 matrix element for neutron

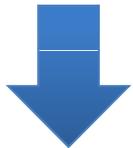


E1 excitation described by Monte Carlo shell model

Benchmark test

Lanczos calc. (exact)

M-scheme dimension
3,844,499



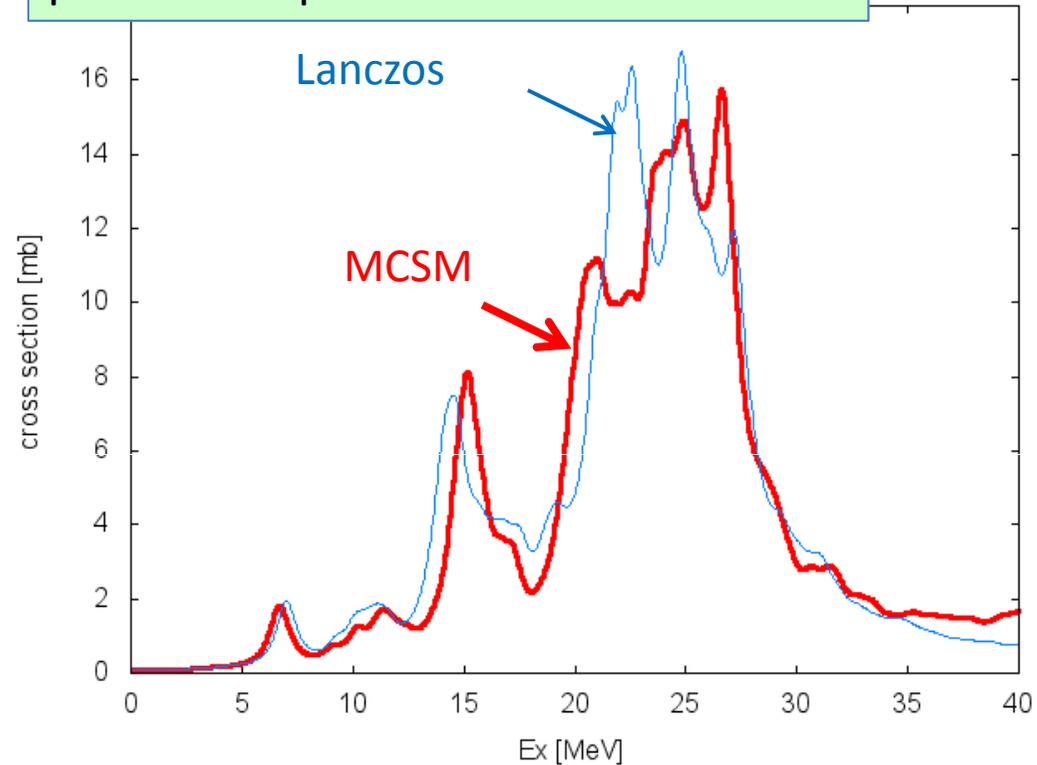
Monte Carlo shell model
(MCSM)

600 MCSM basis

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=1}^{N_{MCSM}} f_k P^{J,\pi} |\phi_k\rangle \quad |\phi_k\rangle = \prod_{\alpha=1}^N \left(\sum_{i=1}^{N_{sp}} c_i^\dagger D_{i\alpha}^{(k)} \right) |-\rangle$$

¹⁸O with p-sd shell
psdwbt int.

photoabsorption cross section of ¹⁸O



モンテカルロ殻模型により、中重核領域の強度関数の取り扱いが可能になりつつある

Summary

- ランチョス法による原子核殻模型計算コード “KSHELL” の開発
 - PCから、1万コア程度までの良好な並列効率
 - 実験研究者にも使える対話型インタフェース
- 殻模型計算によるカルシウム同位体のE1励起の微視的な記述に成功。
 - 奇核も同精度で計算可能。
 - 中性子過剰側では、小さなピグミー共鳴(PDR)を予言。
 - E1演算子の既約行列要素を見ると、特定の一粒子軌道間の遷移がPDRに寄与
- モンテカルロ殻模型を用い、中重核領域の核廃棄物(長寿命核分裂生成物)の計算へ。(明日の講演)