有効2体化3体力を含んだ中重核領域の計算

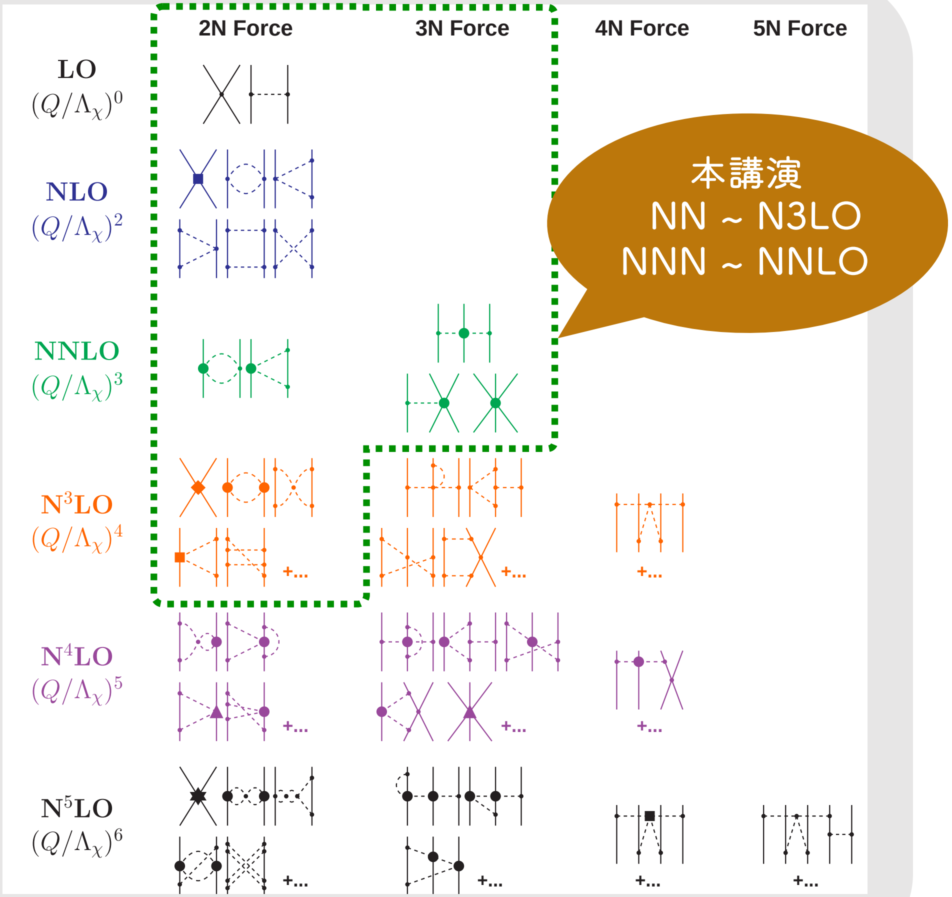
核力に基づいた原子核の構造と反応 2021/12/07-12@京大基研

宇都宮大学

吉田 聡太

syoshida@cc.utsunomiya-u.ac.jp

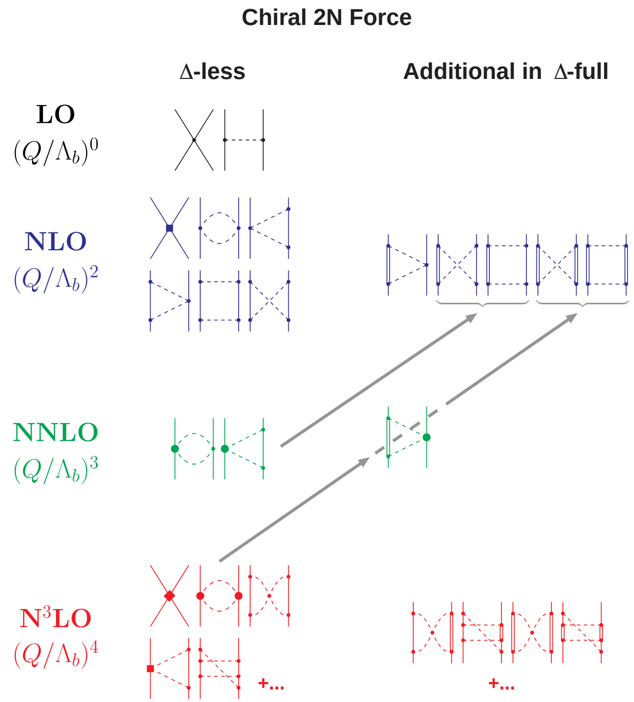
χ EFTによる核力の記述



本講演
NN ~ N3LO
NNN ~ NNLO

EMN, PRC 96, 024004 (2017)

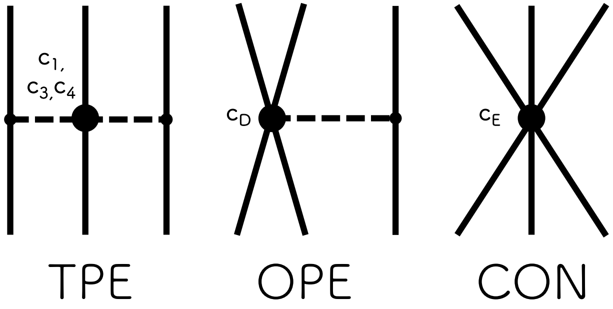
c.f. Δ-full ※こちらは今回考慮しない



EMN, arXiv:2107.06452
PRC 104, 054001 (2021).

- Idaho: Entem, Machleidt, Nosyk
- LENPIC collaboration

NNN@NNLOと、その"有効2体化"



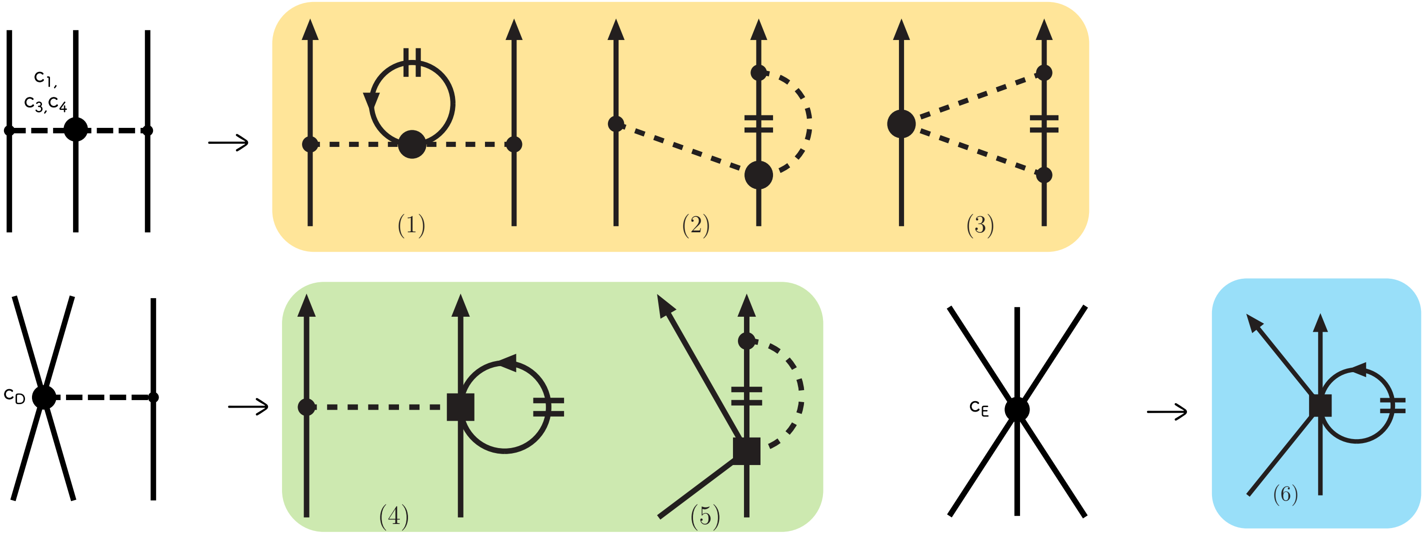
$$V^{(2\pi)}_{3N} = \sum_{i\neq j\neq k} \frac{g_A^2}{8f_\pi^4} \frac{\vec{\sigma}_i\cdot\vec{q}_i\,\vec{\sigma}_j\cdot\vec{q}_j}{(\vec{q}_i^{\,2}+m_\pi^2)(\vec{q}_j^{\,2}+m_\pi^2)} F^{\alpha\beta}_{ijk}\tau_i^\alpha\tau_j^\beta,$$

$$V^{(1\pi)}_{3N} = -\sum_{i\neq j\neq k} \frac{g_A c_D}{8f_\pi^4\Lambda_\chi} \frac{\vec{\sigma}_j\cdot\vec{q}_j}{\vec{q}_j^{\,2}+m_\pi^2}\vec{\sigma}_i\cdot\vec{q}_j\,\vec{\tau}_i\cdot\vec{\tau}_j,$$

$$V^{(\mathrm{ct})}_{3N} = \sum_{i\neq j\neq k} \frac{c_E}{2f_\pi^4\Lambda_\chi}\vec{\tau}_i\cdot\vec{\tau}_j,$$

$$\langle \boldsymbol{k}_1'\sigma_1'\tau_1',\boldsymbol{k}_2'\sigma_2'\tau_2'|V_{12(3)}|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\tau_1,\boldsymbol{k}_2\sigma_2\tau_2\rangle_A \equiv \sum_{\boldsymbol{k}_3,\sigma_3\tau_3} \langle \boldsymbol{k}_1'\sigma_1'\tau_1',\boldsymbol{k}_2'\sigma_2'\tau_2',\boldsymbol{k}_3\sigma_3\tau_3|\ V_{123}|\boldsymbol{k}_1\sigma_1\tau_1,\boldsymbol{k}_2\sigma_2\tau_2,\boldsymbol{k}_3\sigma_3\tau_3\rangle_A.$$

* TPEのLECs(c_1,c_3,c_4)はNNと共通
**運動量積分の上限は例えばk_F=1.35 fm^{-1}



JW Holt, Kaiser, Weise, PRC 81, 024002 (2010)
M. Kohno, PRC 88, 064005 (2013)
SY Master thesis (2017)

c.f. Genuine NNN

※こちらは今回考慮しない

antisymmetrized Jacobi:

$$|N_{\mathrm{cm}(3)} L_{\mathrm{cm}(3)}\rangle \otimes \underline{|N_1 N_2; [(L_1 S_1)J_1, (L_2 \tfrac{1}{2})J_2]J_{12}; (T_1 \tfrac{1}{2})T_{12}\rangle_a}$$

$$\underline{|E_{12} i_{12} J_{12} T_{12}\rangle_a} = \sum_{N_1' N_2' \alpha_{12}'} \delta_{(2N_1'+L_1'+2N_2'+L_2'),E_{12}} \delta_{J_{12}',J_{12}} \delta_{T_{12}',T_{12}} C^{i_{12}}_{N_1' N_2' \alpha_{12}'} \underline{|N_1 N_2; \alpha_{12}\rangle}$$

JT-coupled

$$\underline{{}_a\langle \tilde{a}\tilde{b}\tilde{c}; J_{ab} J; T_{ab} T |\, V \,|\tilde{a}'\tilde{b}'\tilde{c}'; J_{ab}' J; T_{ab}' T\rangle_a}$$
$$= 6 \sum_{N_1, N_2, \alpha} \sum_{N_1', N_2', \alpha'} \sum_{N_{\mathrm{c.m.}}, L_{\mathrm{c.m.}}} \sum_{i, i'} \delta_{T_{ab}, T_1} \delta_{T_{ab}', T_1'} \delta_{T, T_{12}} \delta_{T, T_{12}'} \delta_{J_{12}, J_{12}'}$$
$$\times\, T^{\tilde{a}\,\tilde{b}\,\tilde{c}\; J_{ab} J}_{N_1 N_2 \alpha N_{\mathrm{c.m.}} L_{\mathrm{c.m.}}}\; T^{\tilde{a}'\,\tilde{b}'\,\tilde{c}'\; J_{ab}' J}_{N_1' N_2' \alpha' N_{\mathrm{c.m.}} L_{\mathrm{c.m.}}}\; C^{i}_{N_1 N_2 \alpha}\; C^{i'}_{N_1' N_2' \alpha'}\, {}_a\underline{\left\langle E_{12} i\, J^{\pi}_{12} T_{12} \middle| V \middle| E_{12}' i' J^{\pi}_{12} T_{12} \right\rangle_a}$$

m-scheme

$$\underline{{}_a\langle abc |\, V \,| a'b'c'\rangle_a} = \sum_{J_{ab}, J_{ab}', J} \sum_{T_{ab}, T_{ab}', T} \left(\begin{array}{cc|c} j_a & j_b & J_{ab} \\ m_a & m_b & M_{ab} \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc|c} J_{ab} & j_c & J \\ M_{ab} & m_c & M \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T_{ab} \\ m_{ta} & m_{tb} & M_{Tab} \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc|c} T_{ab} & \frac{1}{2} & T \\ M_{Tab} & m_{tc} & M_T \end{array}\right)$$
$$\times \left(\begin{array}{cc|c} j_a' & j_b' & J_{ab}' \\ m_a' & m_b' & M_{ab}' \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc|c} J_{ab}' & j_c' & J \\ M_{ab}' & m_c' & M \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & T_{ab}' \\ m_{ta}' & m_{tb}' & M_{Tab}' \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc|c} T_{ab}' & \frac{1}{2} & T \\ M_{Tab}' & m_{tc}' & M_T \end{array}\right)$$
$$\times\, {}_a\underline{\langle \tilde{a}\tilde{b}\tilde{c}; J_{ab} J; T_{ab} T |\, V \,|\tilde{a}'\tilde{b}'\tilde{c}'; J_{ab}' J; T_{ab}' T\rangle_a},$$

→ on-the-fly必須

A. Calci, Ph.D thesis, TU Darmstadt (2014)

$e_1+e_2+e_3 = (2n_1+l_1) + \ldots \leqq E_{3\max}$

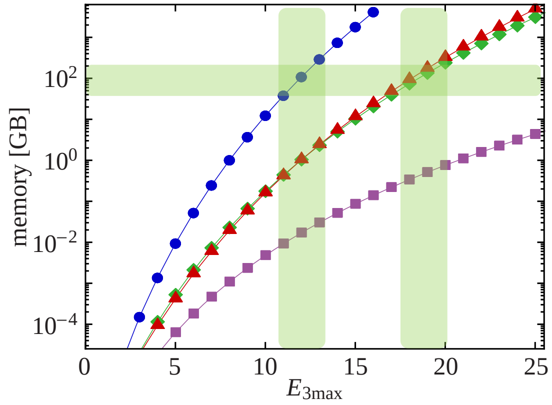
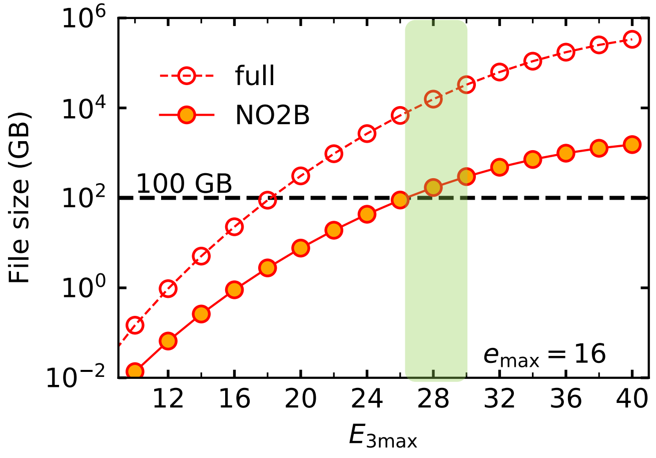


FIG. 1. (Color online) Memory required to store the T coefficients (◆), as well as the three-body matrix elements in the antisymmetrized-Jacobi (■), JT-coupled (▲), and m-scheme (●) representations as function of the maximum three-body energy quantum number $E_{3\max}$. All quantities are assumed to be single-precision floating point numbers.

R.Roth et al., PRC 90, 024325 (2014)

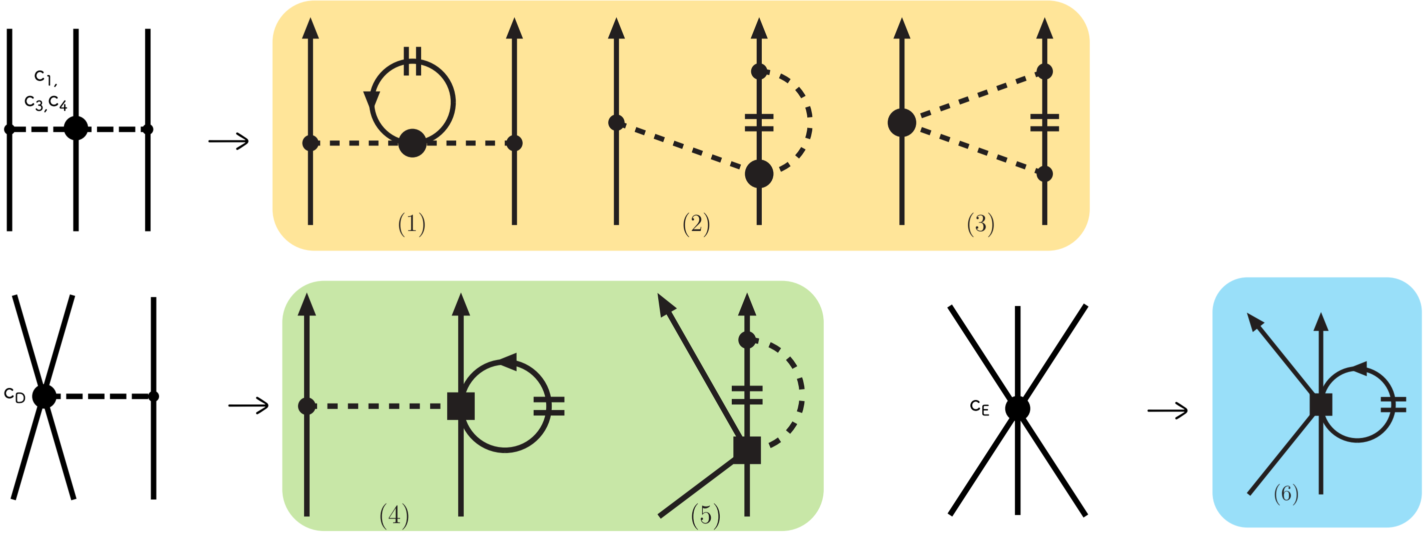


T.Miyagi et al., arXiv:2104.04688

Motivation

genuine 3NF は大変...

→ 有効2体化3体力でバルクな3体力効果を"mimic"できないか？



- c_D, c_Eのみをパラメータとする
  （$c_{1,3,4}$はNN-sectorで決まっている）
- 中重核領域でc_D, c_Eを"ベイズ最適化"でラフに決定
- 有効2体力の枠組みでの中重核領域の記述を検討

ChiEFTint.jl: Julia言語によるカイラル相互作用生成コード

Python(読み書きしやすい) × Fortran/C++の速度 (性能)

GitHub上で公開予定 https://github.com/SotaYoshida/ChiralEFTint.jl

※src未公開ですが、声をかけてもらえればお渡しします

- ✓ Entem-Machleidt型の2体力 (N3LO)
- ✓ 運動量空間でのSRG変換 (NN-only)
- ✓ 河野(+吉田)型の有効2体化3体力
- ✓ valence系の演算子を含むNN相互作用
  - ▶ IMSRG計算 → 殻模型有効相互作用

    →NCSMや殻模型計算 KSHELL / ShellModel.jl

    https://github.com/SotaYoshida/ShellModel.jl
  - ▶ その他...

SRG evolution of NN/NNN interaction

NN-only

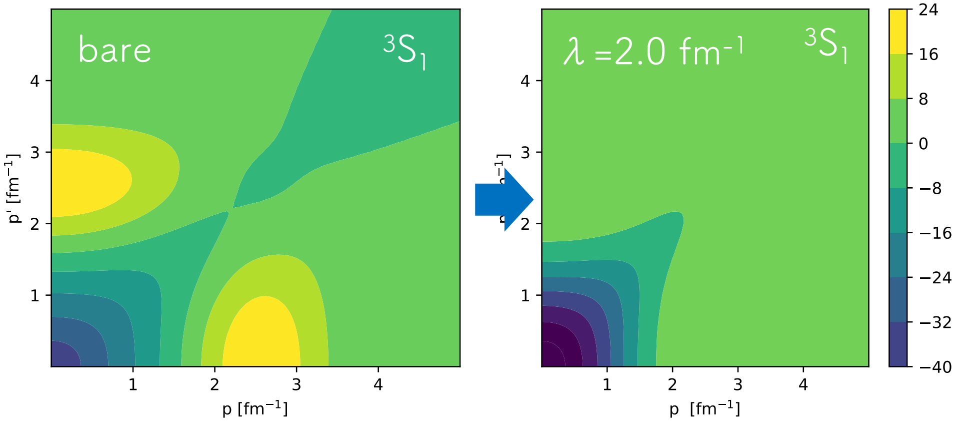
induced-3Nを無視

$$H(s) = U(s)H(0)U^\dagger(s) \qquad \frac{d}{ds}H(s) = [\eta(s), H(s)]$$

→ m×m行列の演算 + ODE(e.g. RK4)に帰着

m: 運動量メッシュ点の数

mom. space $< P_{cm} p' | V_{NN} | P_{cm} p >$



NNN, Jacobi **※こちらは今回考慮しない**

$$\frac{d}{d\alpha}\langle E_{12} i |\, H_\alpha | E'_{12} i'\rangle = (2\mu)^2 \sum_{E''_{12}, i''}^{E''_{12}\leqslant E_{\mathrm{SRG}}} \; \sum_{E'''_{12}, i'''}^{E'''_{12}\leqslant E_{\mathrm{SRG}}} \Big(\langle E_{12} i |\, T_{\mathrm{int}} | E''_{12} i''\rangle \, \langle E''_{12} i'' |\, H_\alpha | E'''_{12} i'''\rangle \, \langle E'''_{12} i''' |\, H_\alpha | E'_{12} i'\rangle$$
$$- 2 \langle E_{12} i |\, H_\alpha | E''_{12} i''\rangle \, \langle E''_{12} i'' |\, T_{\mathrm{int}} | E'''_{12} i'''\rangle \, \langle E'''_{12} i''' |\, H_\alpha | E'_{12} i'\rangle$$
$$+ \langle E_{12} i |\, H_\alpha | E''_{12} i''\rangle \, \langle E''_{12} i'' |\, H_\alpha | E'''_{12} i'''\rangle \, \langle E'''_{12} i''' |\, T_{\mathrm{int}} | E'_{12} i'\rangle \Big),$$

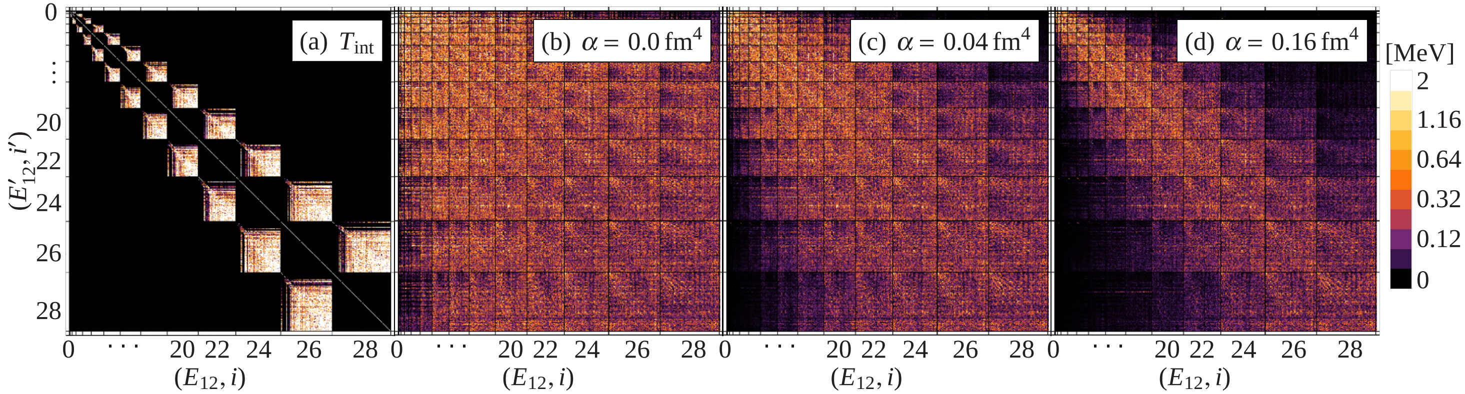


FIG. 2. (Color online) Matrix elements in the antisymmetrized HO Jacobi representation for the triton channel $(J_{12}^\pi, T_{12}) = (1/2^+, 1/2)$ for $\hbar\Omega = 24$ MeV. Plotted are the absolute values of the intrinsic kinetic-energy matrix elements (a), as well as the interaction part of the evolved chiral $NN + 3N$ Hamiltonian for flow parameters $\alpha = 0\ \mathrm{fm}^4$ (b), $\alpha = 0.04\ \mathrm{fm}^4$ (c), and $\alpha = 0.16\ \mathrm{fm}^4$ (d). The dark grid lines separate blocks of fixed energy quantum numbers E_{12} and E'_{12}.

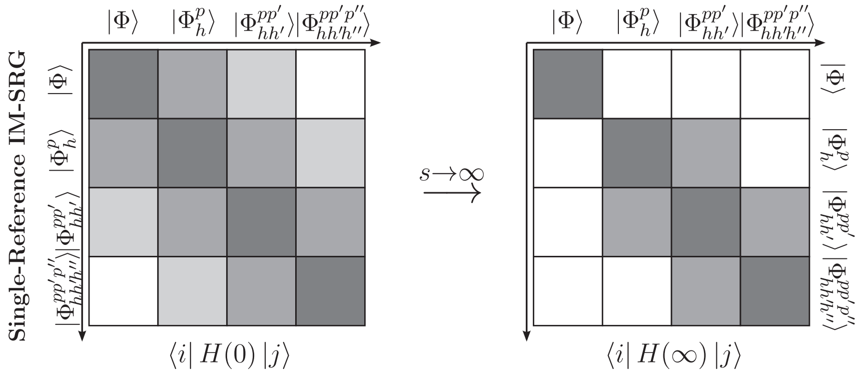
R.Roth et al., PRC 90, 024325 (2014)

In-medium Similarity Renormalization Group (IMSRG)

- reference state (通常HF)に対する

  p-h励起/相関を繰り込む (decouple)

$$H(s) = U(s)H(0)U^{\dagger}(s) \qquad \frac{d}{ds}H(s) = [\eta(s), H(s)]$$



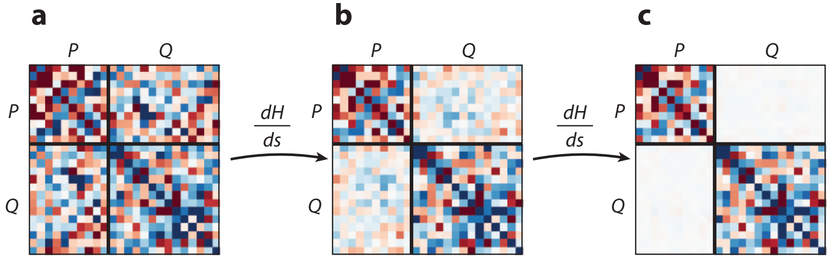
H.Hergert Phys. Scr. 92 (2017) 023002

$$H = E_0 + \sum_{ij} f_{ij} :a^{\dagger}_i a_j: + \frac{1}{4}\sum_{ijkl}\Gamma_{ijkl} :a^{\dagger}_i a^{\dagger}_j a_k a_l: + \frac{1}{36}\sum_{ijklmn} W_{ijklmn} :a^{\dagger}_i a^{\dagger}_j a^{\dagger}_k a_n a_m a_l:$$

$$\frac{dE_0}{ds} = [\eta(s), H(s)]_{0b} \qquad \frac{d\Gamma}{ds} = [\eta(s), H(s)]_{2b}$$

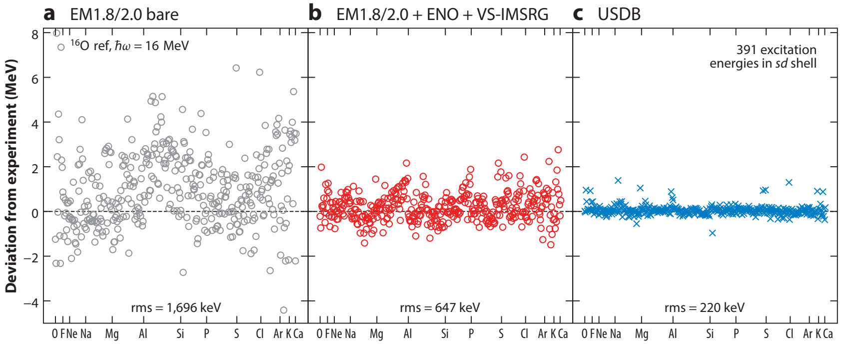
$$\frac{df}{ds} = [\eta(s), H(s)]_{1b} \qquad \cancel{\frac{dW}{ds} = [\eta(s), H(s)]_{3b}}$$

IMSRG(2)〜CCSD



- Hamiltonianと同様に
  任意のOperatorをevolveして
  期待値を計算できる (c.f. Magnus expansion)

- 上のf&Γのflow→模型空間上の
  殻模型有効相互作用を導出 (VS-IMSRG)

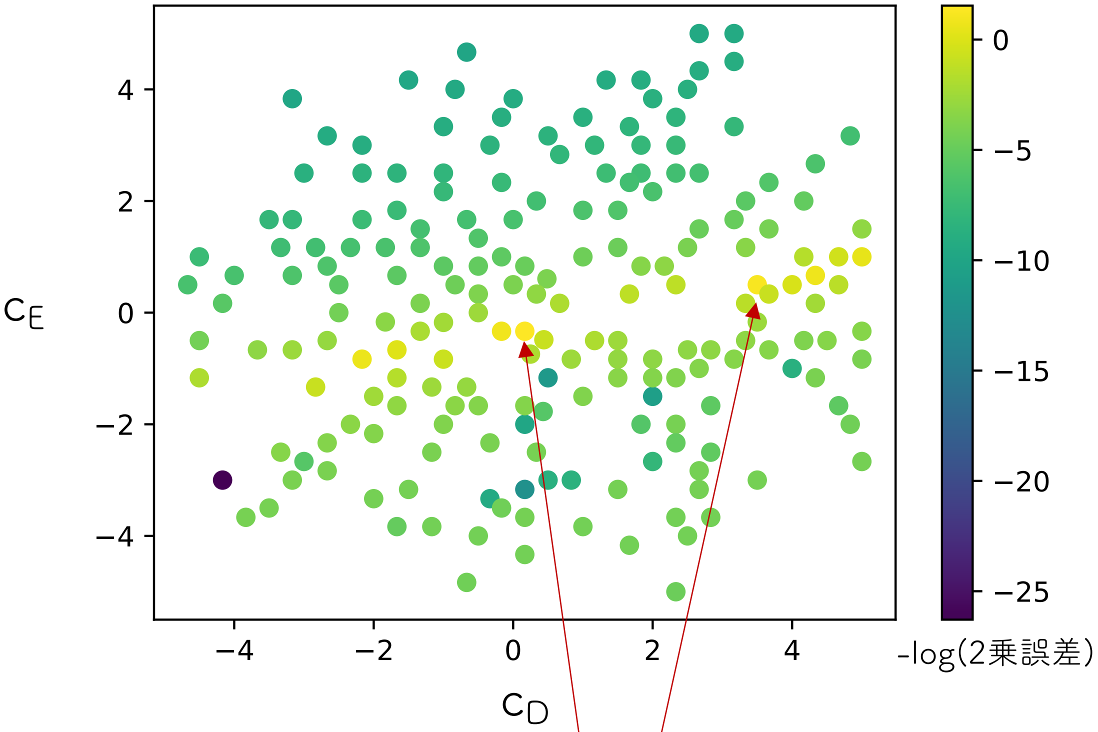


c.f. IMSRGコード (C++/Python)
https://github.com/ragnarstroberg/imsrg

S.R. Stroberg Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 2019. 69:307–62

cD,cEのベイズ最適化

有効2体化3体力を取り込んで、c_D,c_Eを中重核のg.s. energyでfit



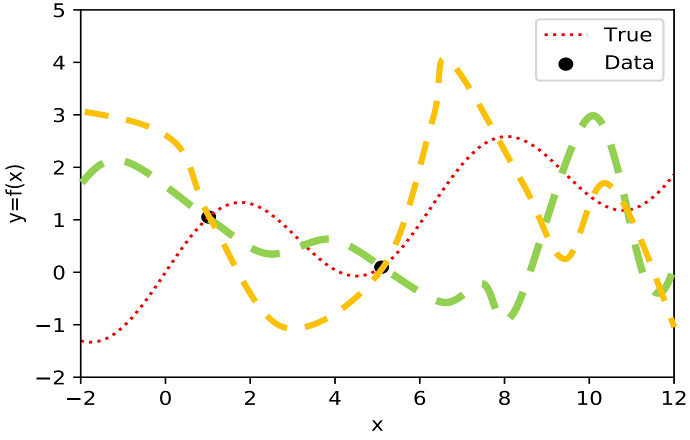
E_{gs} (^{40,48,52,54}Ca),
emax=10, HFMBPT(3)×0.93 →

A) c_D = 3.50, c_E = 0.50

B) c_D = 0.166, c_E = -0.333

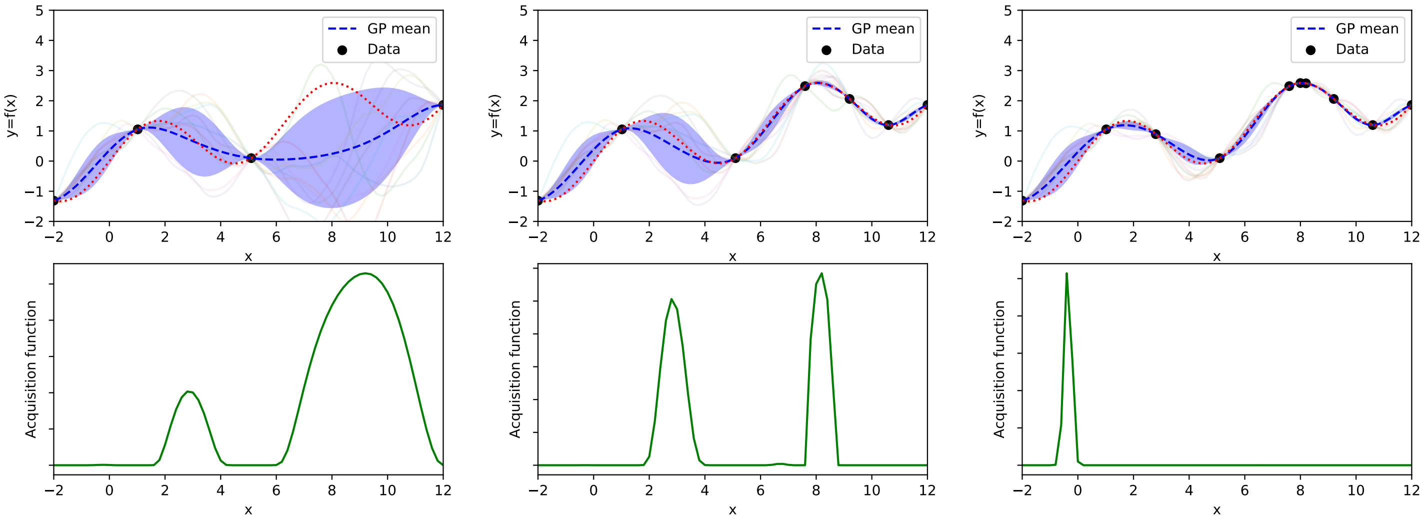
IMSRGコード (C++/Python)を使用 https://github.com/ragnarstroberg/imsrg

ベイズ最適化 (Bayesian Optimization): 探索と活用のトレードオフ



- 最適化したい関数がブラックボックス
- 探索回数をできるだけ減らしたい

今の場合:
探索=1回の大変な計算

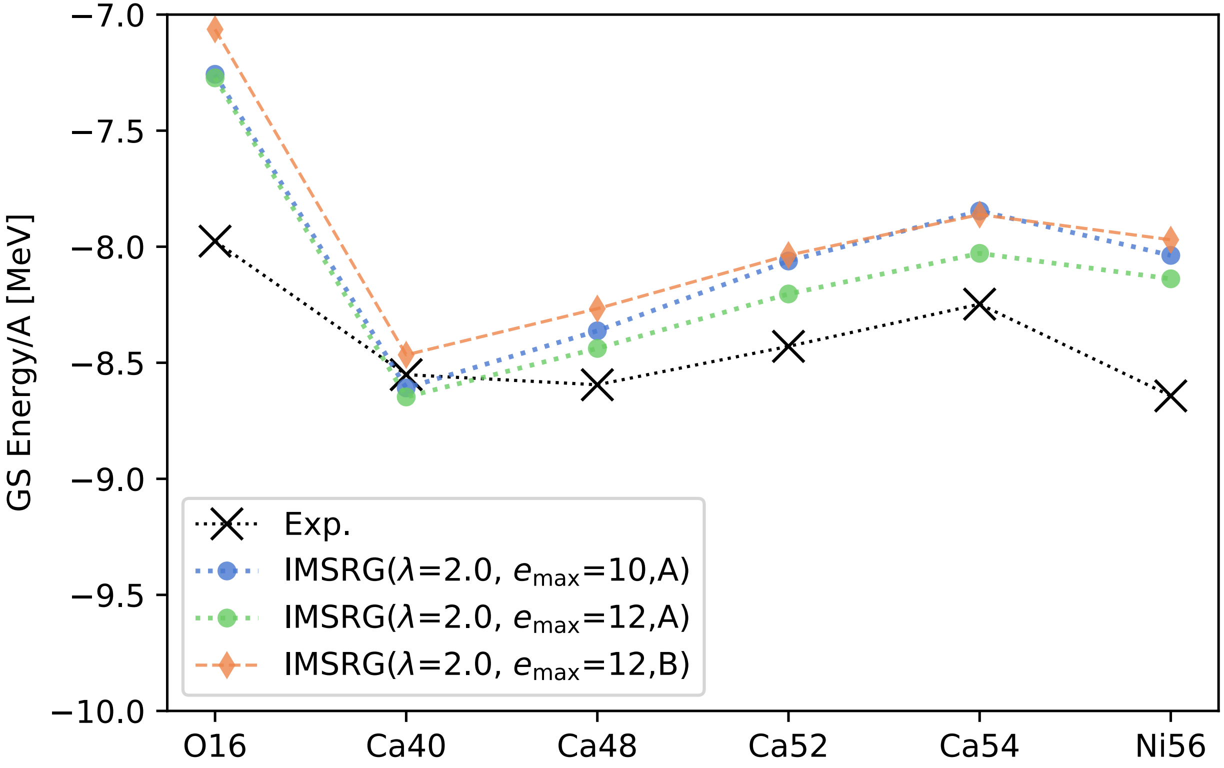


最小化/最大化したい関数(誤差関数/尤度)の振る舞いを、
Gaussian Processでsurrogateして、次の探索点を提案

※「Sota Yoshida ベイズ最適化 GitHub」で検索すると
授業で使うGoogle Colab.用Jupyter Notebookが見つかります

Ca領域の基底状態, IMSRG計算:

NN (N3LO, SRG evolved, λ =2.0 fm^{-1}, indχ) +3NF (NNLO, Fermi gas approx., not evolved)

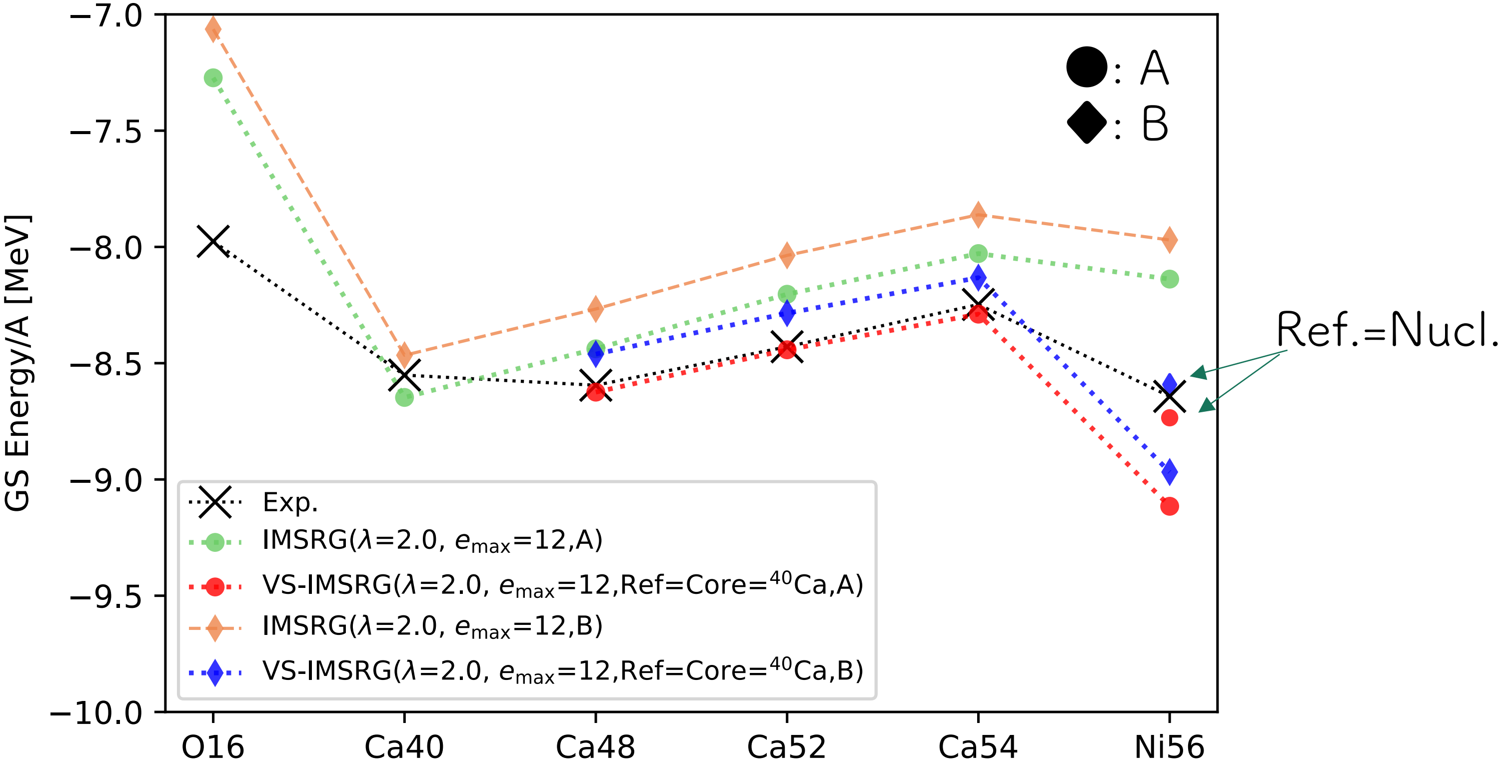


- Single-Ref. (Reference state = それぞれの核についてHF)
- e_{max}に対する収束の兆候 ~ emax=12 (emax=10●→12●)

- 有効2体化3体力の積分パラメータは固定(k_F = 1.35 fm^{-1})
  → ^{16}O とCa領域を両立しない

VS-IMSRG計算: g.s.

VS-IMSRGでpf shell(^{40}Caコア)の相互作用を導出し、 殻模型計算で厳密対角化



バレンス核子が多くなるにつれIMSRG/VS-IMSRGのgapが大きくなる

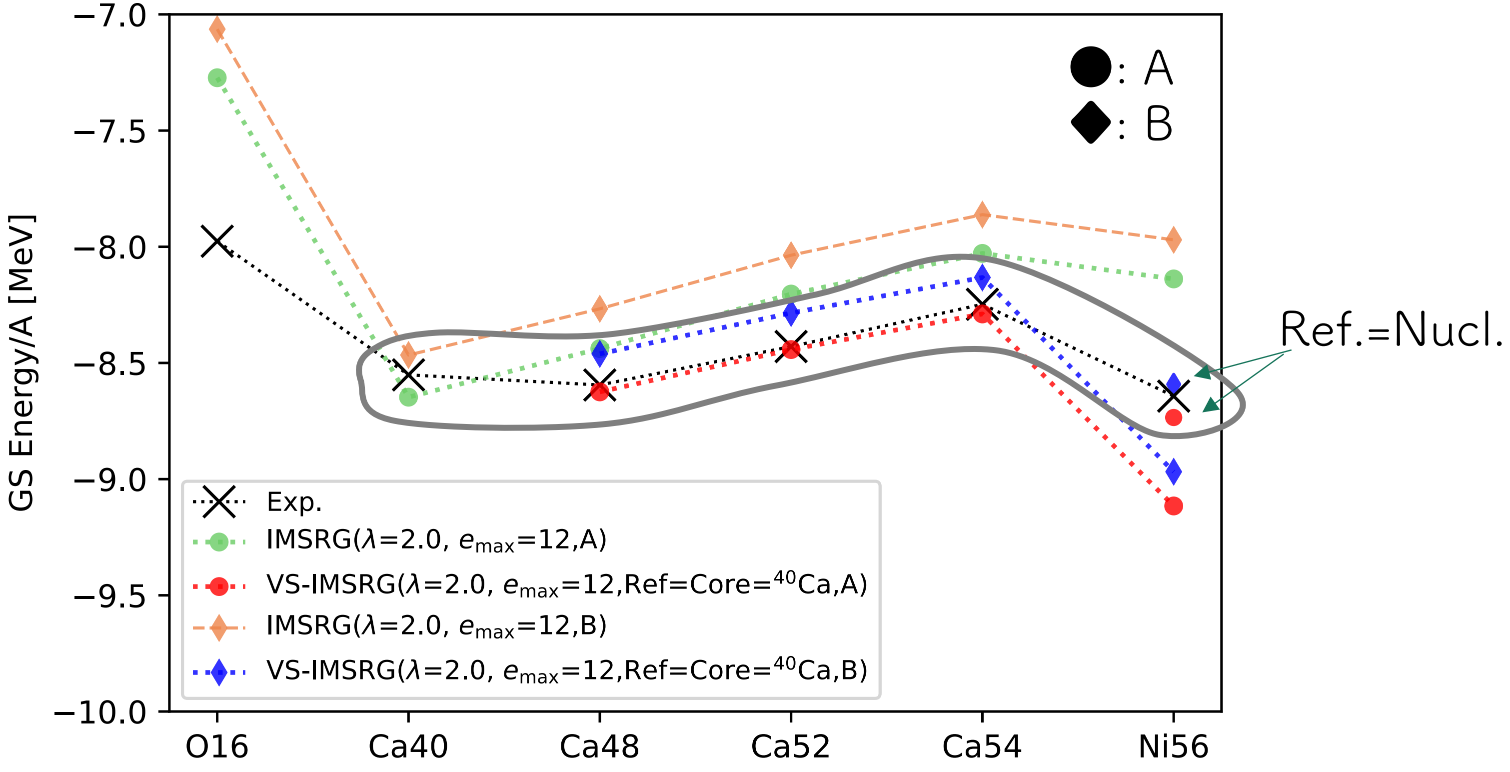
Ref.=Core →バレンス3体力の効果等を過小評価する

Ref.=Nucl.　<u>Ensemble Normal Ordering (ENO)</u>

Ref: S.R. Stroberg Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 2019. 69:307–62

VS-IMSRG計算: g.s.

VS-IMSRGでpf shell(^{40}Caコア)の相互作用を導出し、 殻模型計算で厳密対角化

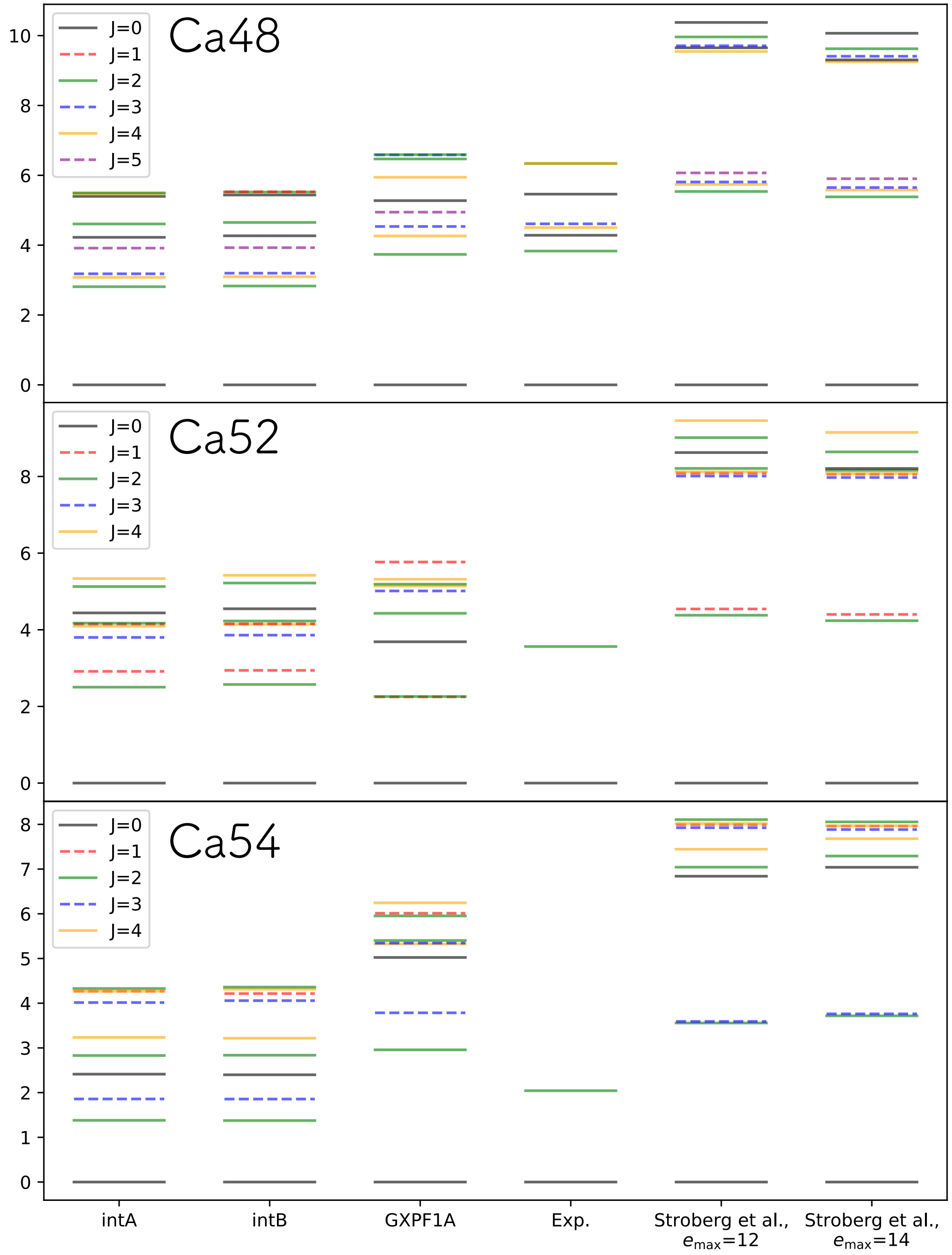


バレンス核子が多くなるにつれIMSRG/VS-IMSRGのgapが大きくなる

Ref.=Core →バレンス3体力の効果等を過小評価する
Ref.=Nucl.　Ensemble Normal Ordering (ENO)

Ref: S.R. Stroberg Annu. Rev. Nucl. Part. Sci. 2019. 69:307–62

VS-IMSRG計算: Ca (A=48,52,54)



- int A/Bともにスペクトル
  (g.s.と励起状態の相対的な関係)
  はほぼ同じ

3NF(OPE/CON)には強く依存しない

- genuine 3NFを含む計算(右2つ)と
  核力・近似の不定性の範囲でconsistent?

全てを上手く説明する核力は今のところ無い

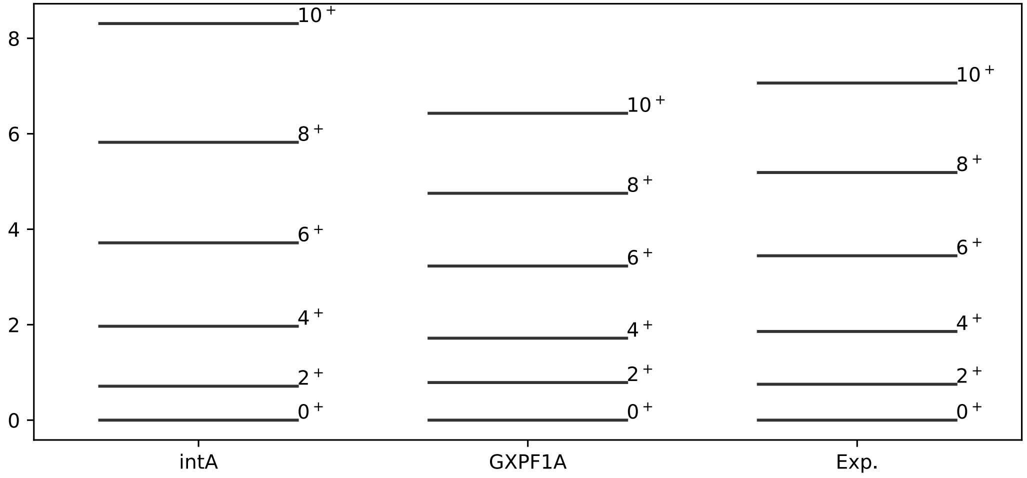
- 現象論的にはソコソコ...?

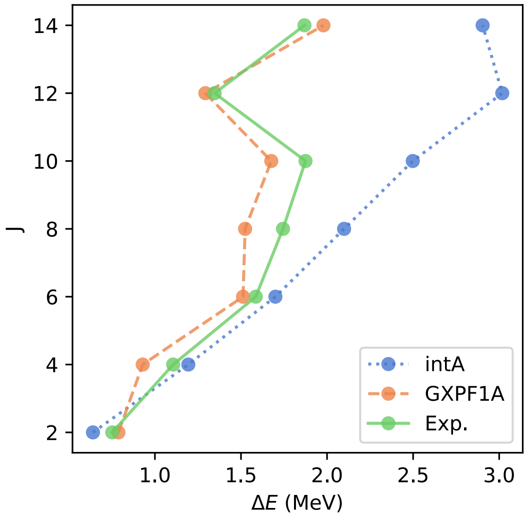
  T=1のmonopoleを見てみると
  GXPF1A(Bonn C, G行列+fit)
  に"似ている"

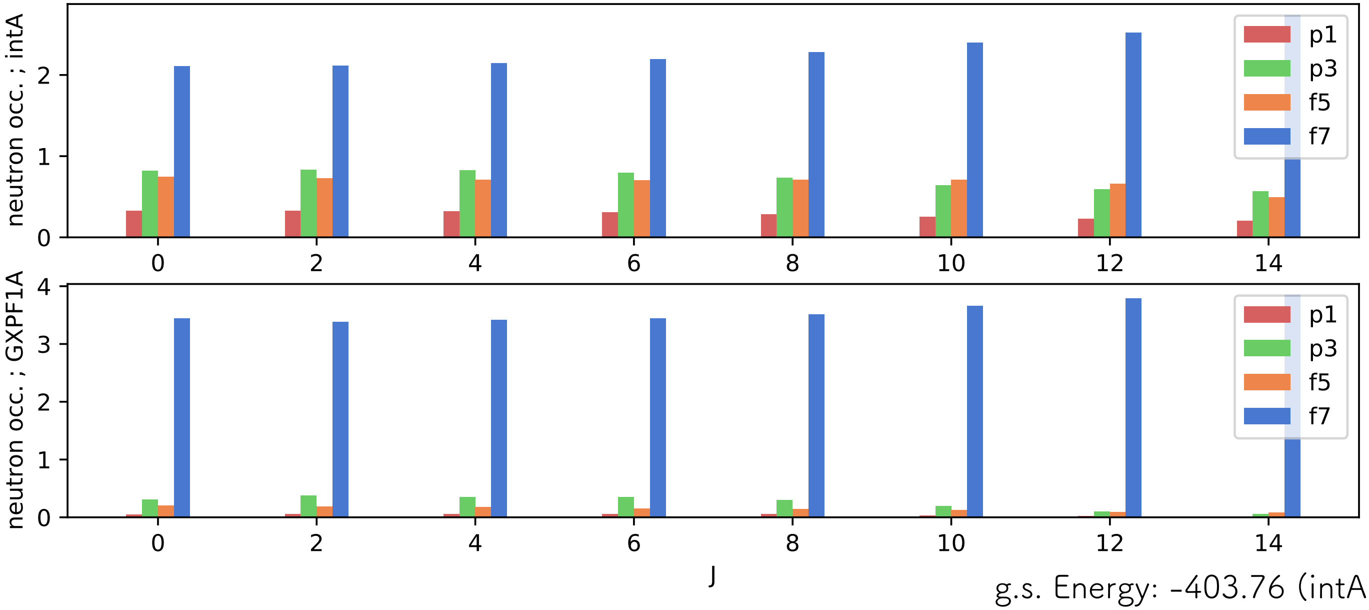
intA/B: hw=28, emax=12, Ref=^{40}Ca

S.R. Stroberg et al., PRL 118, 032502 (2017)
NN(EM, N3LO) + NNN (Λ_{3NF}=400 MeV)
hw = 24, cD = -0.2 cE = 0.098

VS-IMSRG計算: ^{48}Cr yrast states



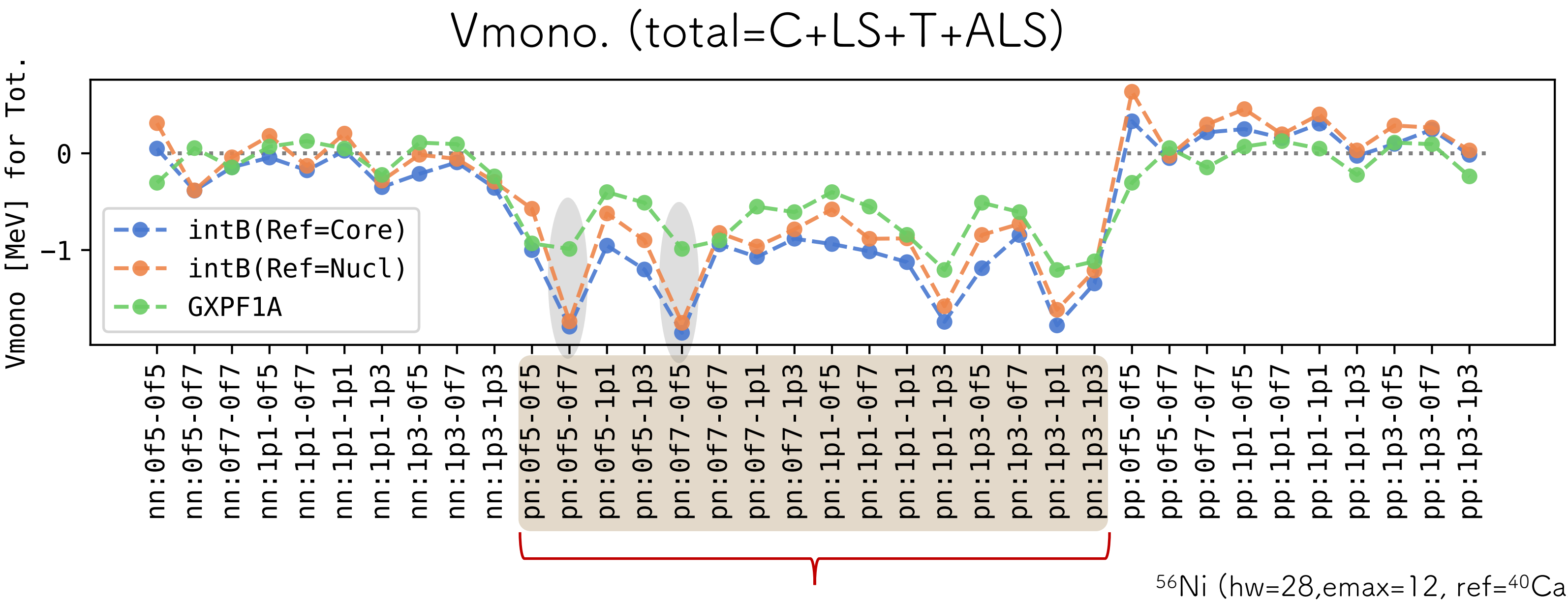




g.s. Energy: -403.76 (intA), -411.47(Exp.)

- int A/Bはf7/2が壊れやすい → 後述
- back bendingは説明できない

monopole int.



^{56}Ni (hw=28,emax=12, ref=^{40}Ca/^{56}Ni)

proton-neutron

T=1成分はGXPF1Aと類似→Caの記述はソコソコ?

※GXPF1Aはcoulomb無し

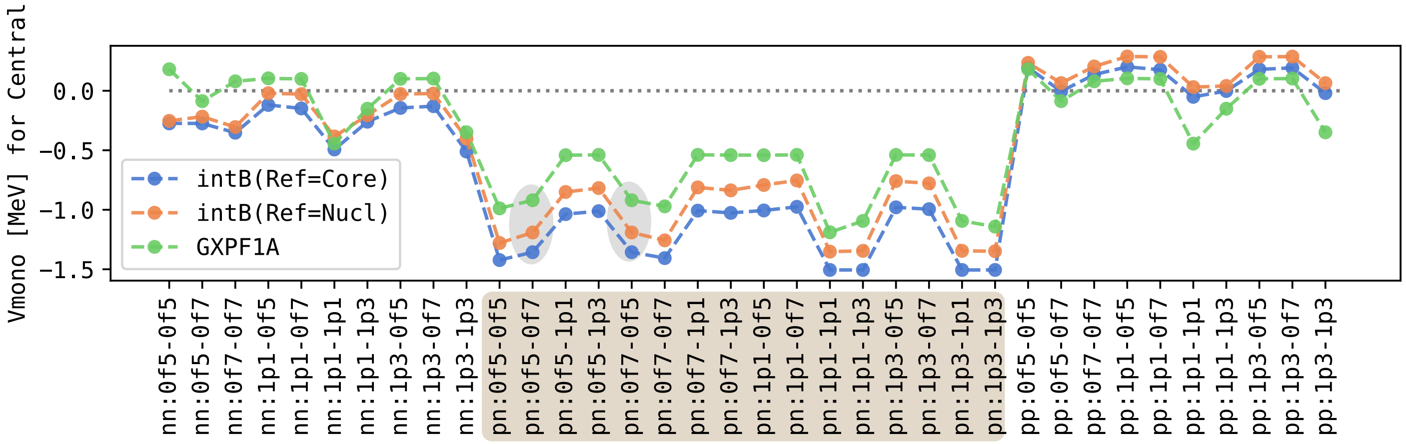
proton-neutronで、全体的に引力的(GXPF1A比)

→ f5-f7の"1MeV"~ Central&Tensor
→ f7に詰まるよりも**f5に**適度に励起した方がお得
→ ^{48}Crのback bending, ^{56}Ni領域での破綻

origin: 相互作用(近似,LECs fitのartifact)? 多体手法(IMSRG(2))?

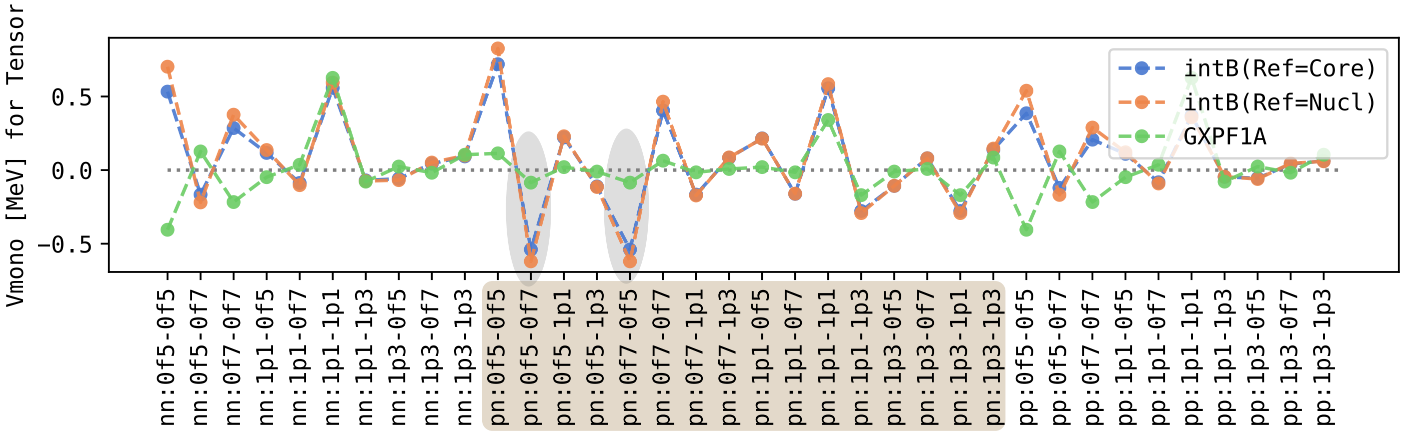
^{56}Ni相互作用でのmonopoleの内訳 (Central/LS/Tensor)

Central



- ▶ 今の相互作用はCa同位体にLECs(cD&cE) をあわせた以外、一切fitはナシ
- ▶ 一方でCentralのmonopoleはGXPF1A(G行列+fit)と極めて類似した傾向(**非自明**)

Tensor



- ▶ 「GXPF1Aはfitの影響からT=1で現実的な核力と逆符号のtensorを持つ」
VS-IMSRGによる相互作用ではこのような"artifact"は見られない

まとめ

- Chiral EFT相互作用の、とくに有効2体化3体力による3体力のバルクな近似の妥当性を中重殻領域で検証中
  - 密度依存性の導入(今はエイヤッと標準核密度)→より広域を系統的に

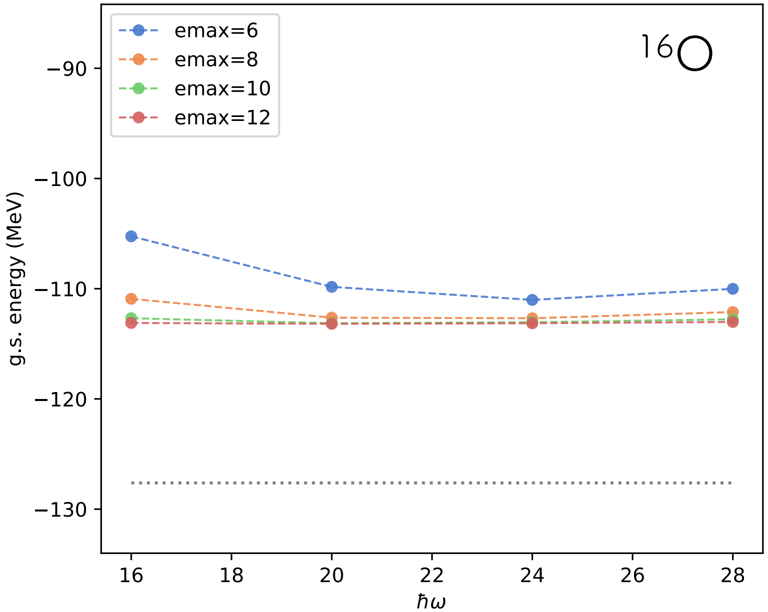
- publicな相互作用生成コードChiEFT.jlを開発中，NN+eff 2N(3NF)
  - genuine 3NFやNN-NNNのconsistent SRGとあわせて検証へ
  - 核力から核構造計算・結果の可視化を単一のプラットフォームで...

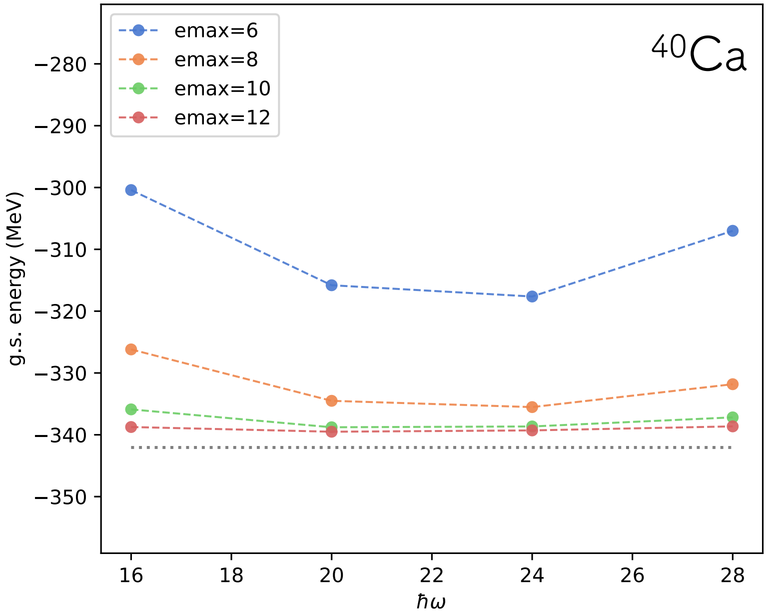
  publicな3体力/多体計算コード **Nuclear Toolkit (?)** の作成に興味はありませんか？

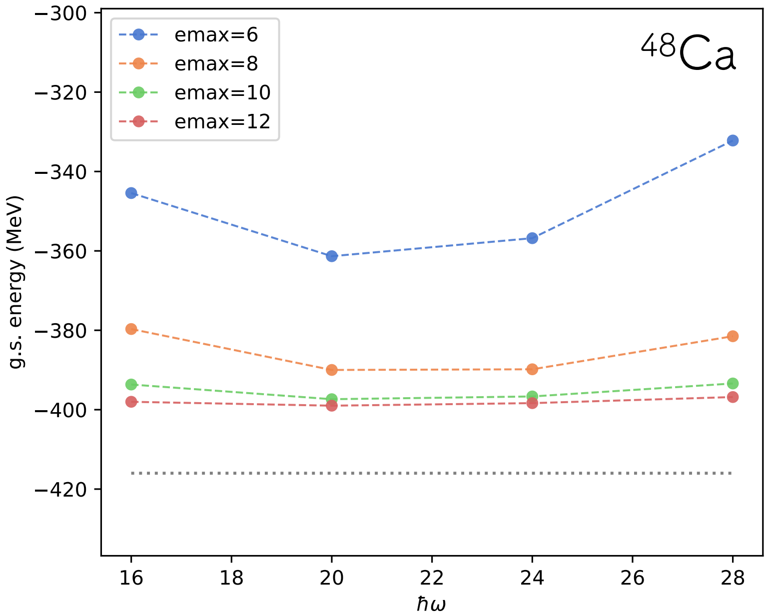
- これまでの現象論的な殻模型計算における”ノウハウ”を活かして核力・有効相互作用・多体計算手法(SM, MSCM/QVSM, IMSRG, etc.)相補的な理解の深化へ...
  - **核力(NN, NNN, etc.)のさらなる理解**
  - **核力に基づく中重核領域計算フロンティアの開拓**

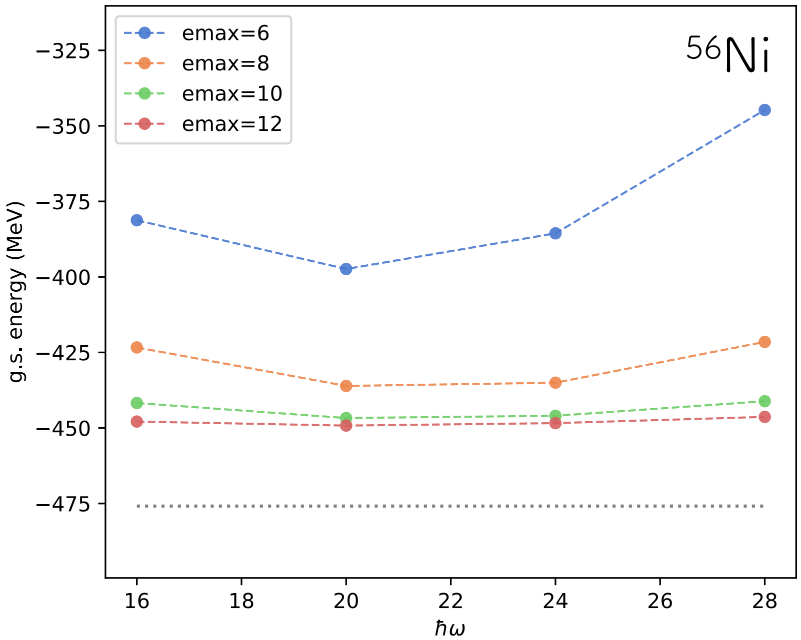
backup

基底状態のIMSRG計算: 収束性 (intB)





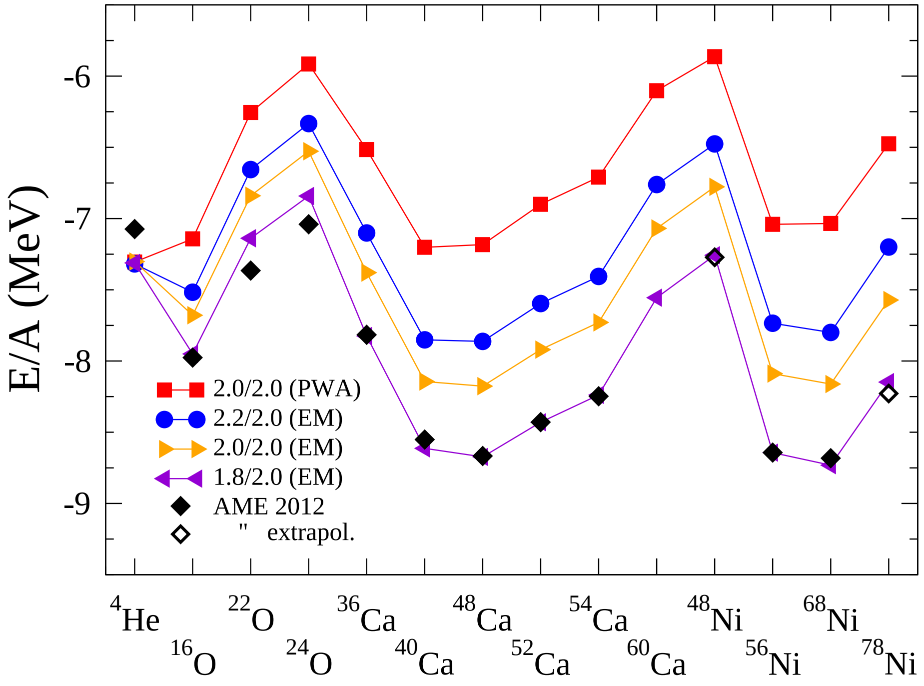


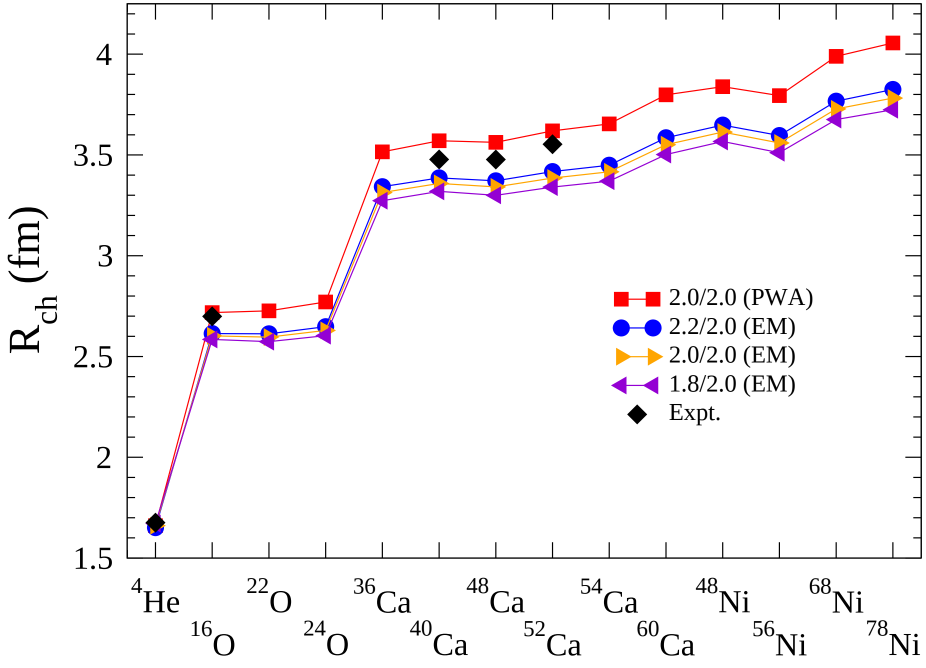


EM1.8/2.0 magic interaction, J. Simonis et al., PRC 96, 014303 (2017)

NN (N3LO, SRG evolved, indχ) + 3NF (NNLO, not evolved)
K. Hebeler et al., PRC 83, 031301(R) (2011)

cD = 1.264, cE = -0.120



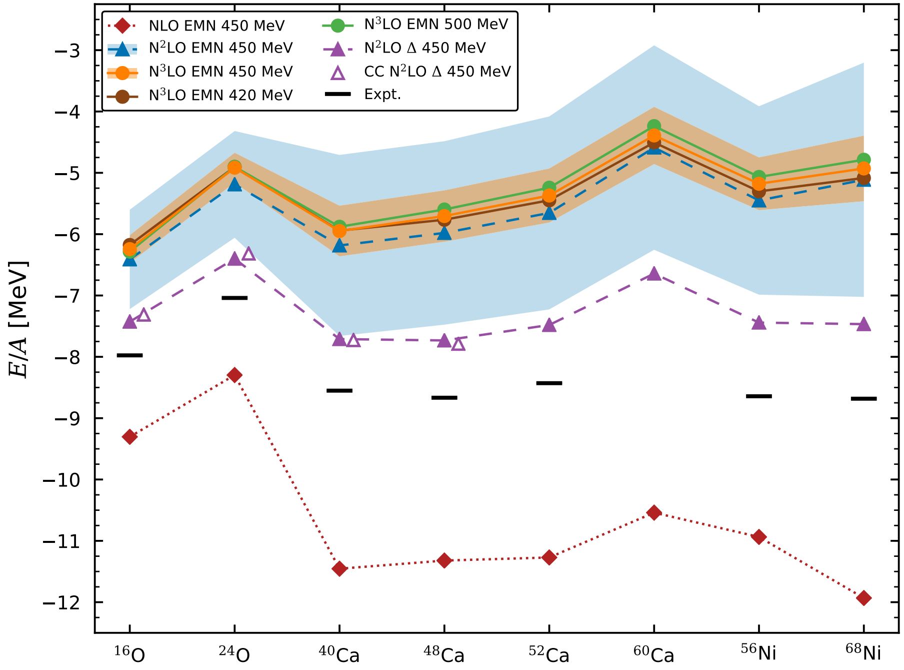


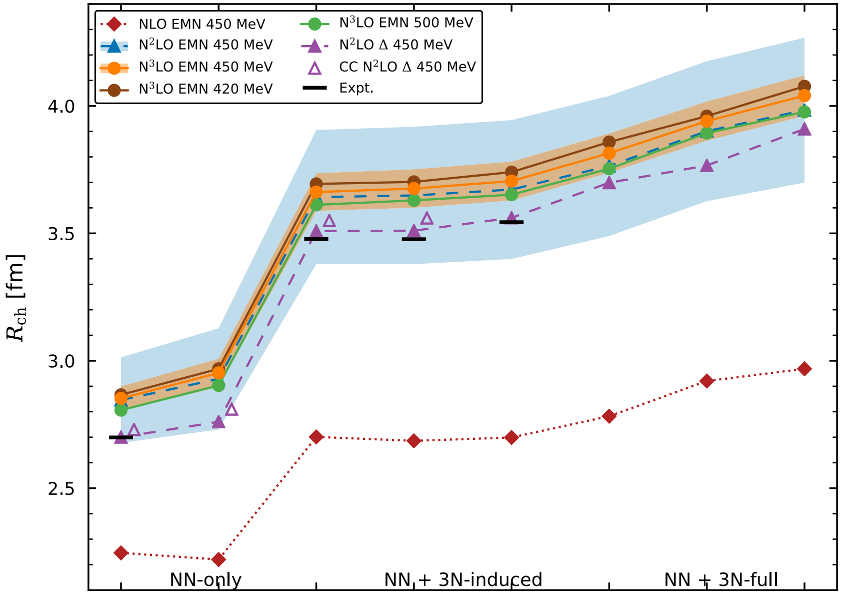
IMSRG計算

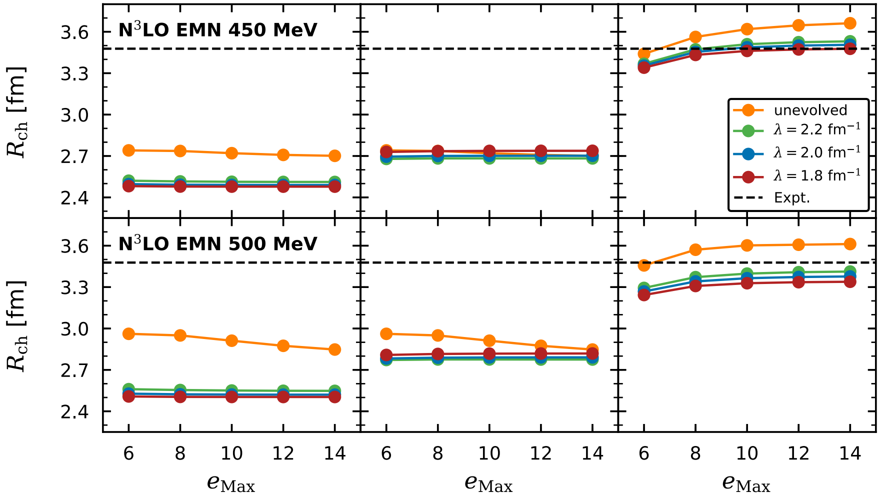
induceされる多体力を上手くmimicするような3体力になっている?

J. Hoppe et al., PRC 100, 024318 (2019)

NN+3NF **upto N3LO, Consistently SRG evolved (ind ✓)** cD,cE from saturation property





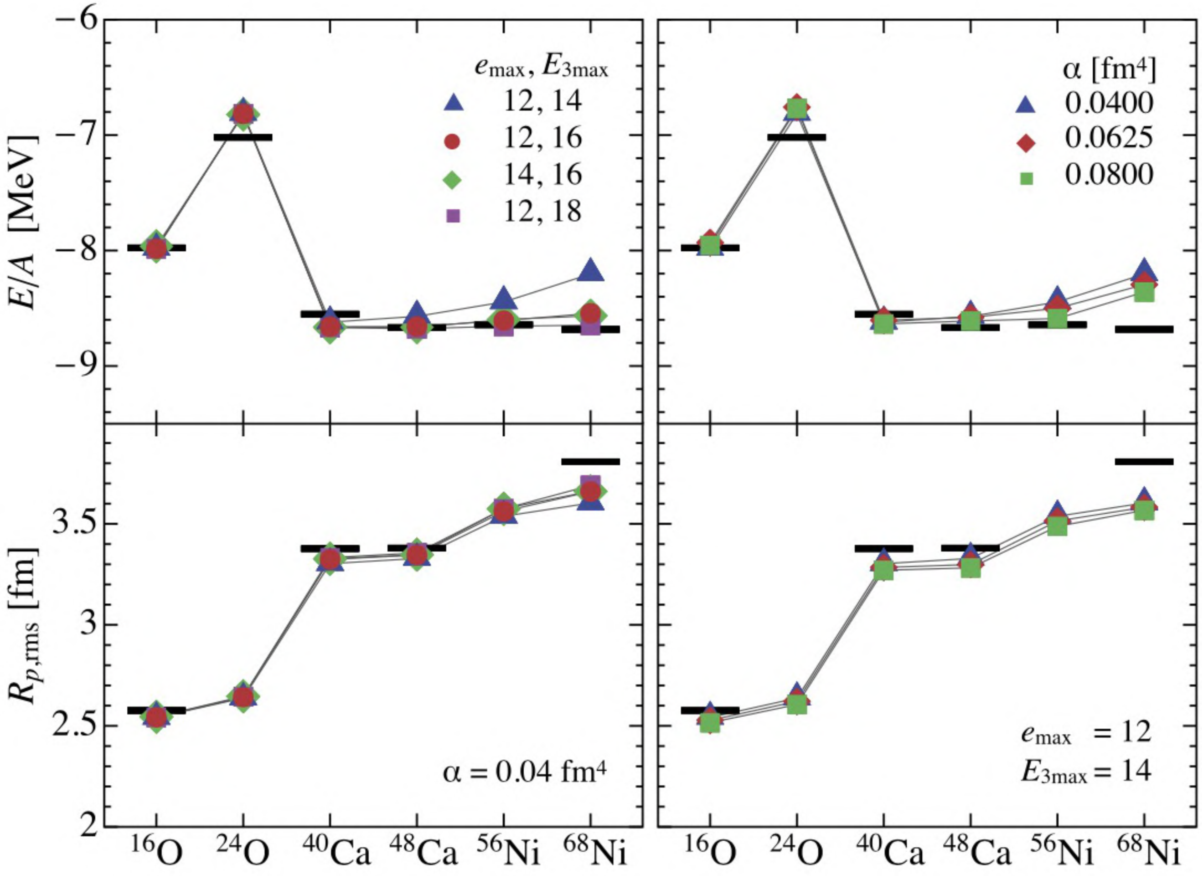


cD ~ -2

Hüter (R. Roth group), Phys. Lett. B 808, 135651 (2020)

NN+3NF **upto N3LO, Consistently SRG evolved (ind ✓)** c_D, c_E from ^{3}H & ^{16}O g.s. energy

cD ~ 4



SRG parameterにあんまり依らない
(=induceされる多体力の効果は小さい)

good!!

What is Julia ?

Since 2012:
Becoming popular in physics, DS, Machine Learning, etc.

- MIT LICENSE
- Multiple dispatch
- Dynamically typed
- JIT(Just-In-Time) compilation by LLVM
- Fast as C++/Fortran
- Macros like Lisp
- Package manager
- Easy to call Python, C, Fortran, etc.

→ High readability and productivity like Python
→ High performance like C++/Fortran

If you are “greedy”, you should consider to use Julia 😉

Juliaを用いた殻模型計算コード: ShellModel.jl (v0.1.0)

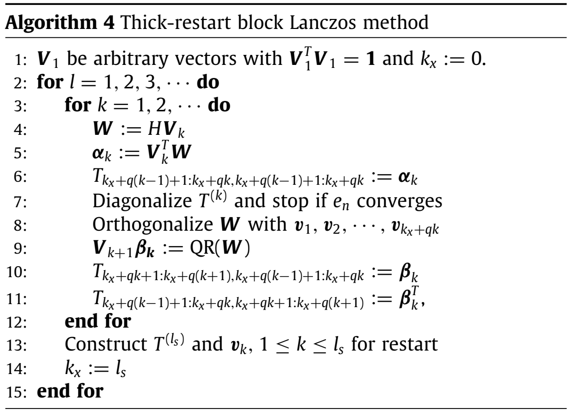
ShellModel.jl https://github.com/SotaYoshida/ShellModel.jl

○ Lanczos法による厳密対角化: $H(\vec{c})|\psi(\vec{c})\rangle = E(\vec{c})|\psi(\vec{c})\rangle$

殻模型計算の80-95%を占める

Thick-Restart(TR), Block Lanczos(BL),
TRBL, double Lanczos (J射影), etc.

sd-shell (^{16}O〜), pf-shell(^{40}Ca〜)領域で"最速"



Algorithm 4 Thick-restart block Lanczos method

```
$\boldsymbol{V}_1$ be arbitrary vectors with $\boldsymbol{V}_1^T\boldsymbol{V}_1 = \mathbf{1}$ and $k_x := 0$.
for $l = 1, 2, 3, \cdots$ do
    for $k = 1, 2, \cdots$ do
        $\boldsymbol{W} := H\boldsymbol{V}_k$
        $\boldsymbol{\alpha}_k := \boldsymbol{V}_k^T\boldsymbol{W}$
        $T_{k_x+q(k-1)+1:k_x+qk,k_x+q(k-1)+1:k_x+qk} := \boldsymbol{\alpha}_k$
        Diagonalize $T^{(k)}$ and stop if $e_n$ converges
        Orthogonalize $\boldsymbol{W}$ with $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_{k_x+qk}$
        $\boldsymbol{V}_{k+1}\boldsymbol{\beta}_{\boldsymbol{k}} := \mathrm{QR}(\boldsymbol{W})$
        $T_{k_x+qk+1:k_x+q(k+1),k_x+q(k-1)+1:k_x+qk} := \boldsymbol{\beta}_k$
        $T_{k_x+q(k-1)+1:k_x+qk,k_x+qk+1:k_x+q(k+1)} := \boldsymbol{\beta}_k^T$,
    end for
    Construct $T^{(l_s)}$ and $\boldsymbol{v}_k$, $1 \leq k \leq l_s$ for restart
    $k_x := l_s$
end for
```

N. Shimizu et al.,
Comp. Phys. Commun. 244 (2019) 372–384

○ 各種物理量の期待値計算: $\langle\hat{O}\rangle = \langle\psi(\vec{c}_\odot)|\hat{O}|\psi(\vec{c}_\odot)\rangle$

EM遷移強度, β崩壊(GT, Fermi, ...)

○ Eigenvector Continuation:

$$E(\vec{c}_\odot) \simeq \lambda$$

$$|\psi(\vec{c}_\odot)\rangle \simeq \sum_{i=1}^{N_s} v_i|\psi(\vec{c}_i)\rangle \equiv |\psi_{EC}(\vec{c}_\odot)\rangle$$

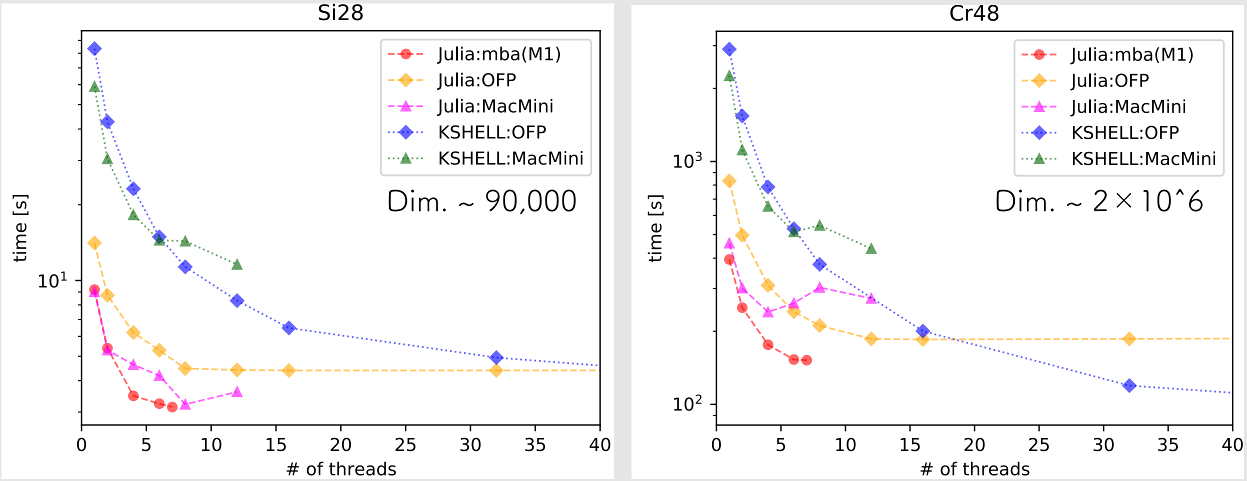
任意のパラメータ点での近似波動関数の構成
→(疑似)計算データの高速なサンプリング→最適化,ベイズ推定・不定性評価
c.f. https://arxiv.org/abs/2105.08256

他のコードとの”比較”

殻模型計算コード

※私のコードは機能面で劣るため、比較自体は全くのアンフェアです

NuShellX	W.Rae, B.A. Brown (Michigan)	~ 42,000行	Fortran
BIGSTICK	C.W. Johnson (San Diego)	~ 70,000行	
ANTOINE	E. Caurier (Strasbourg)	~ 30,000行	
KSHELL	N. Shimizu (Tokyo)	~ 24,000行	
ShellModel.jl	SY	~ 5,200行	



※設計思想が違うので比較は単純ではない

KSHELL => ハイブリット(OpenMP+MPI)並列用
ShellModel.jl => 手元で軽めの計算を大量にやる用

ちなみに... χEFT核力の計算コード

- R. Machleidt (20,000～40,000行, Fortran)
- chiEFTint.jl (3,000～4,000行, Julia)
  https://github.com/SotaYoshida/ChiralEFTint.jlで公開予定

Point:

Juliaコードは読み書きしやすく、実行性能も十分

Δ-full EFT, PRC 102, 054301 (2020)

GO potential (Chalmers & Oak Ridge)

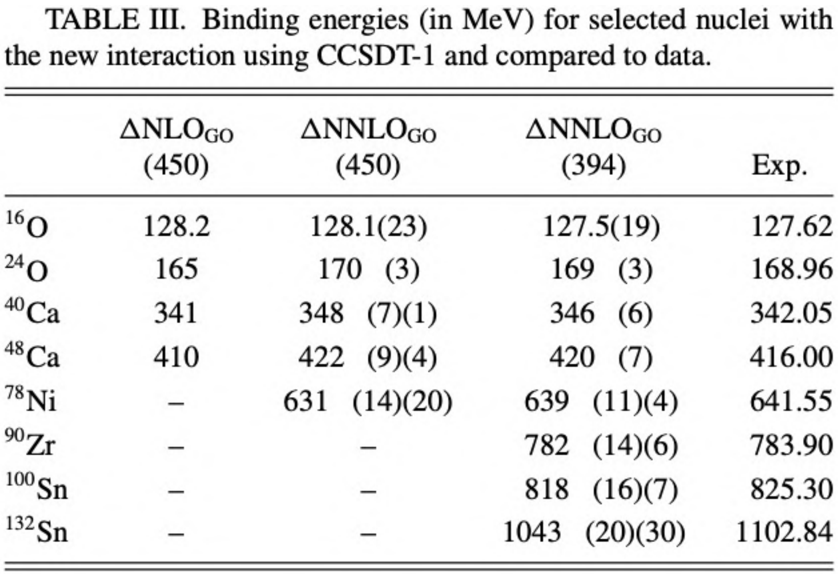


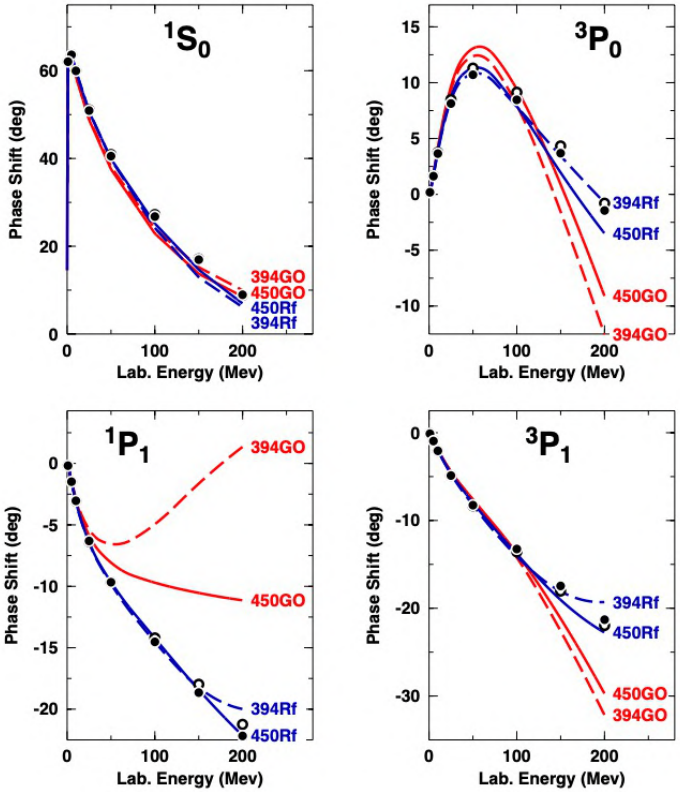
TABLE III. Binding energies (in MeV) for selected nuclei with the new interaction using CCSDT-1 and compared to data.

	ΔNLO$_{GO}$ (450)	ΔNNLO$_{GO}$ (450)	ΔNNLO$_{GO}$ (394)	Exp.
^{16}O	128.2	128.1(23)	127.5(19)	127.62
^{24}O	165	170 (3)	169 (3)	168.96
^{40}Ca	341	348 (7)(1)	346 (6)	342.05
^{48}Ca	410	422 (9)(4)	420 (7)	416.00
^{78}Ni	–	631 (14)(20)	639 (11)(4)	641.55
^{90}Zr	–	–	782 (14)(6)	783.90
^{100}Sn	–	–	818 (16)(7)	825.30
^{132}Sn	–	–	1043 (20)(30)	1102.84

「やっぱりΔの自由度が重要!!」

そう単純なストーリーではない

Nosyk, Entem, Machleidt
PRC 104, 054001 (2021).



「あなたたちのポテンシャル、
P-waveのphase shiftが
めちゃくちゃだし、
60年代の核力より酷いよ」