



Priority Issue 9  
to be Tackled by Using Post K Computer  
“Elucidation of the Fundamental Laws  
and Evolution of the Universe”  
KAKENHI grant 17K05433, 25870168

第2回HPC-Phys 勉強会@理研和光  
2018/12/01

# 大規模並列計算用原子核殻模 型コードの開発



CENTER for  
NUCLEAR STUDY

清水 則孝



東京大学  
THE UNIVERSITY OF TOKYO

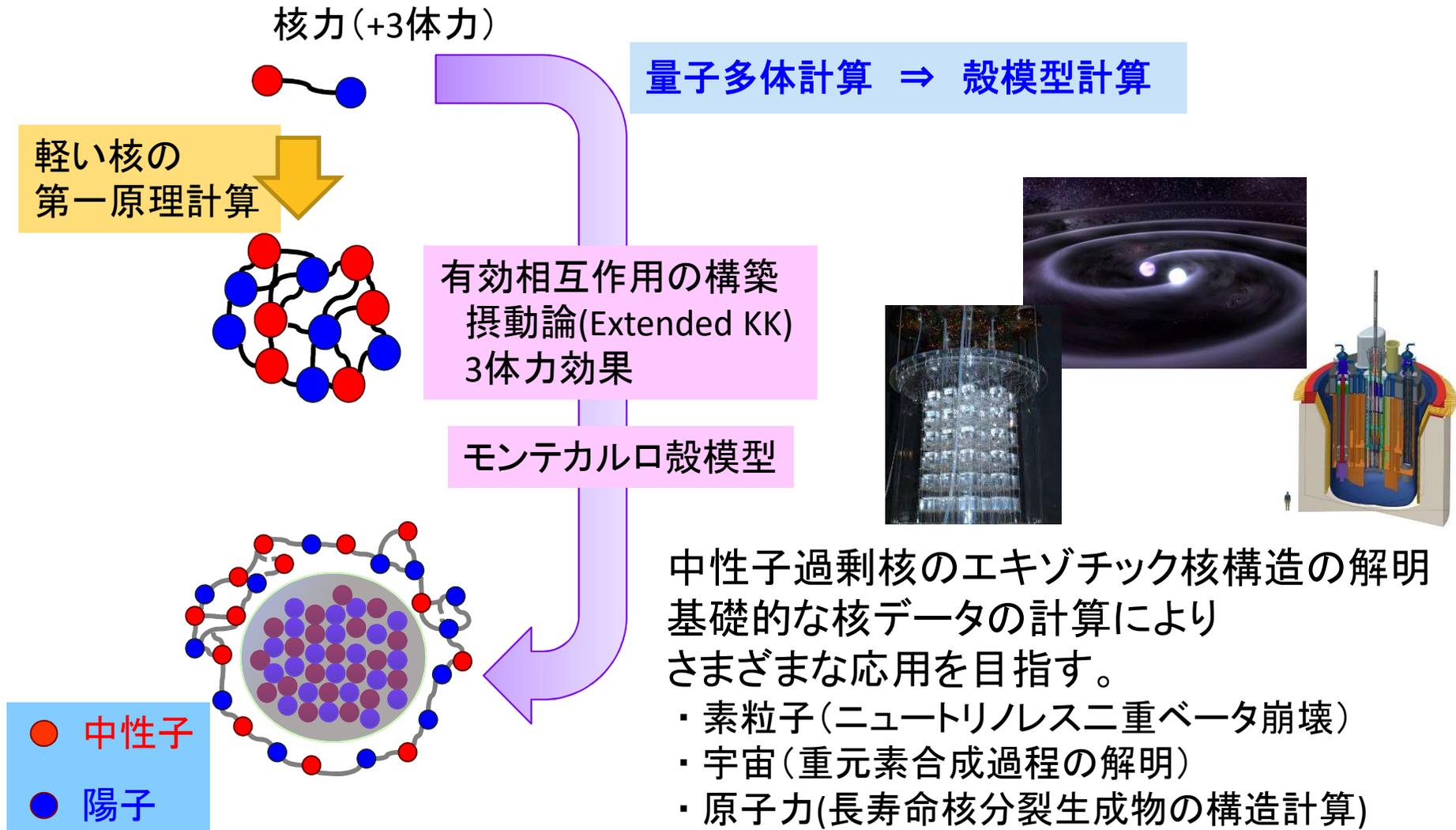
東京大学大学院理学系研究科  
附属原子核科学研究センター

# Outline

- 原子核物理における殻模型計算とは
- KHELLコードの開発
  - *M*-scheme 表現
  - コード開発・基本アルゴリズム・ランチョス法
  - 並列性能
  - 行列・ブロック化による高速化
- まとめ

# ポスト京重点課題9サブ課題B 原子核研究

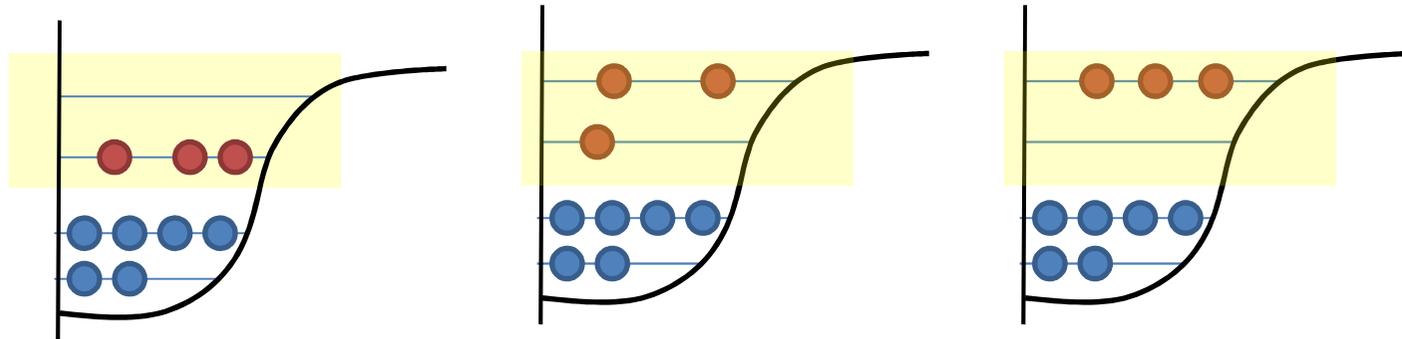
複雑な核力から出発しつつ、大規模量子多体計算により、原子核の多体構造を明らかにし、その性質を計算する。素粒子、宇宙、エネルギーなどの問題へ応用。





# 原子核殻模型計算における配位混合

- 殻模型計算における波動関数



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

配位の数(Mスキーム次元)は中重核領域で急激に増加する。

シュレディンガー方程式を解く

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

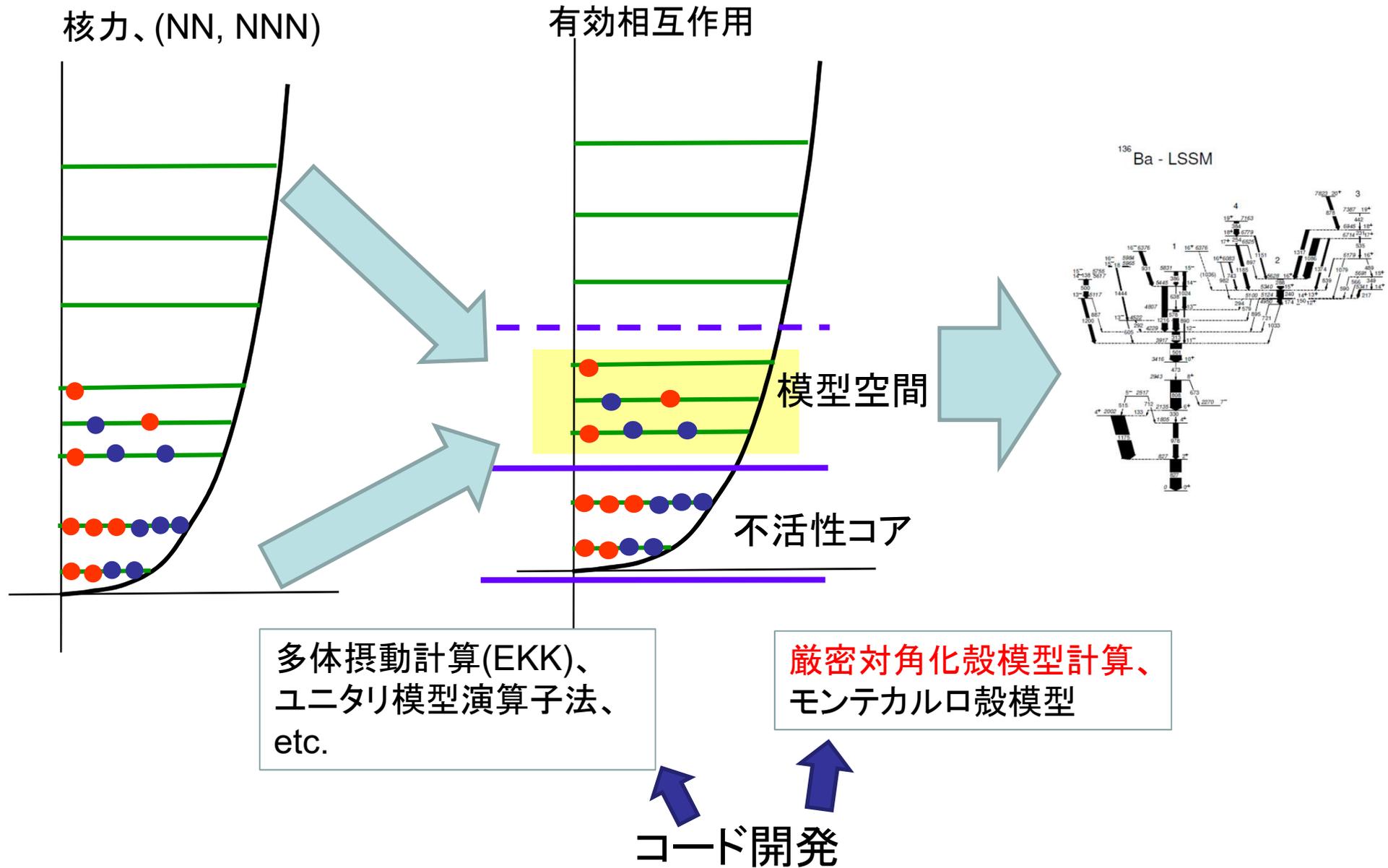
大次元疎行列の固有値問題に帰着

ランチョス法が効率的

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

現在のスパコンでは、1000億次元程度の計算が可能。

# 殻模型計算のスキーム

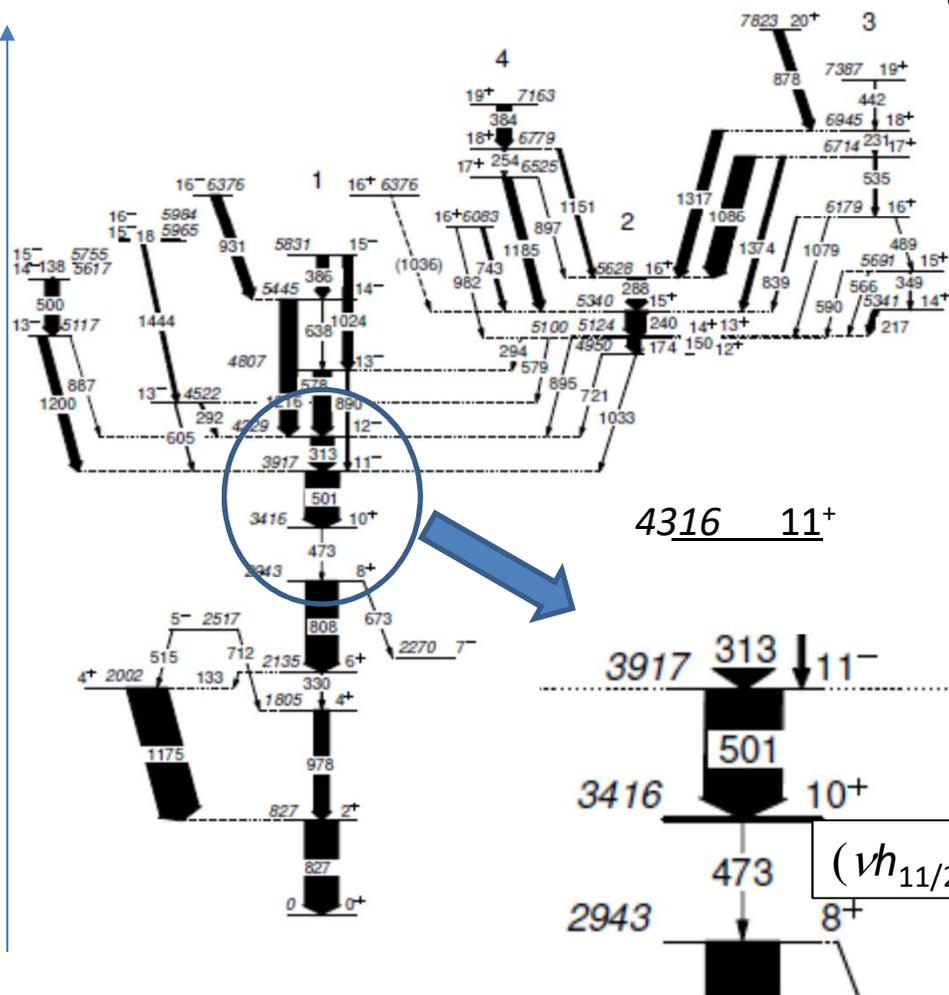


# $^{136}_{56}\text{Ba}_{80}$ : 殻模型計算 vs. 実験値

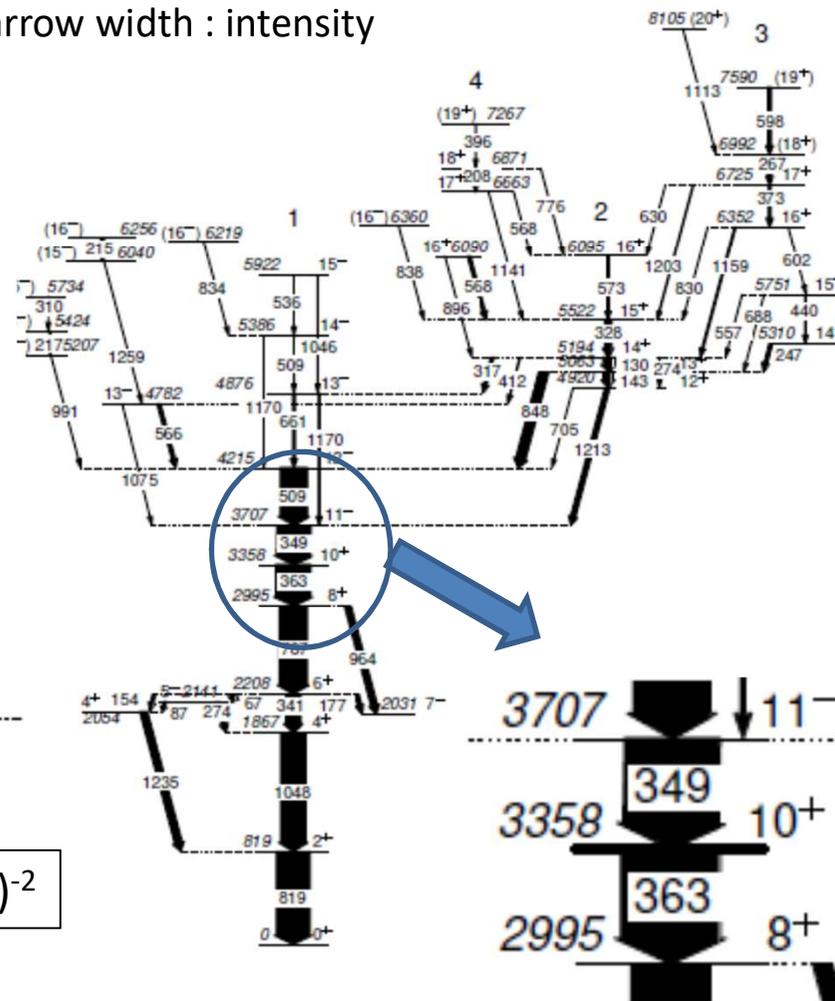
with C. Petrache *et al.*

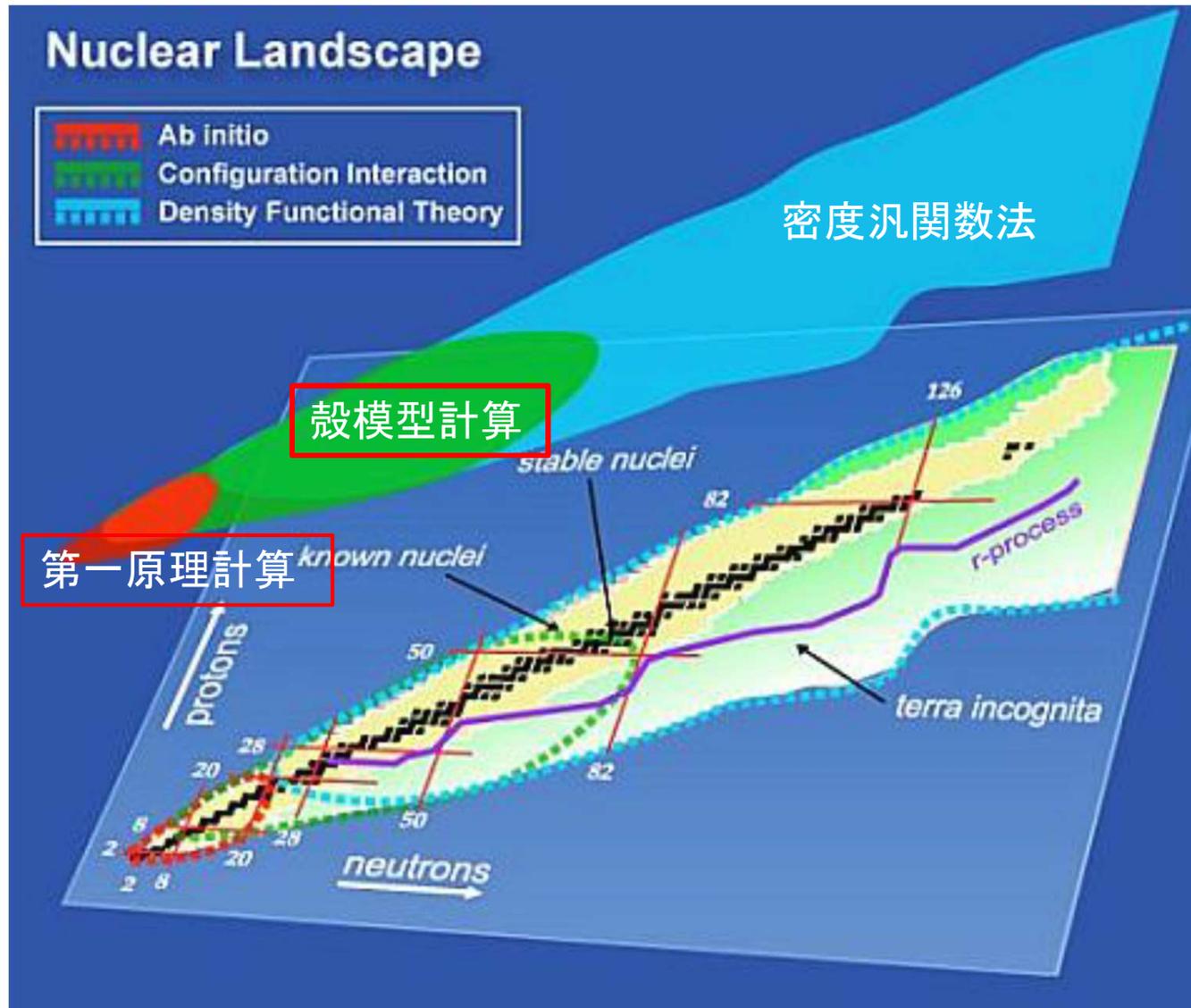
励起エネルギー (MeV) ... 行列の固有値

$^{136}\text{Ba}$  - LSSM  
arrow width : B(E2)



$^{136}\text{Ba}$  - exp  
arrow width : intensity





Ref. UNEDF SciDAC collaboration

# 原子核殻模型のハミルトニアン

特定の質量領域用にチューンされたハミルトニアンが様々な公開されている。

⇒ 実験解析用にも多用される。

使いやすい殻模型計算コードの開発が重要。

核子は平均場中における有効相互作用を通して運動する

– 一粒子エネルギー (SPE)

– 二体行列要素 (TBME)

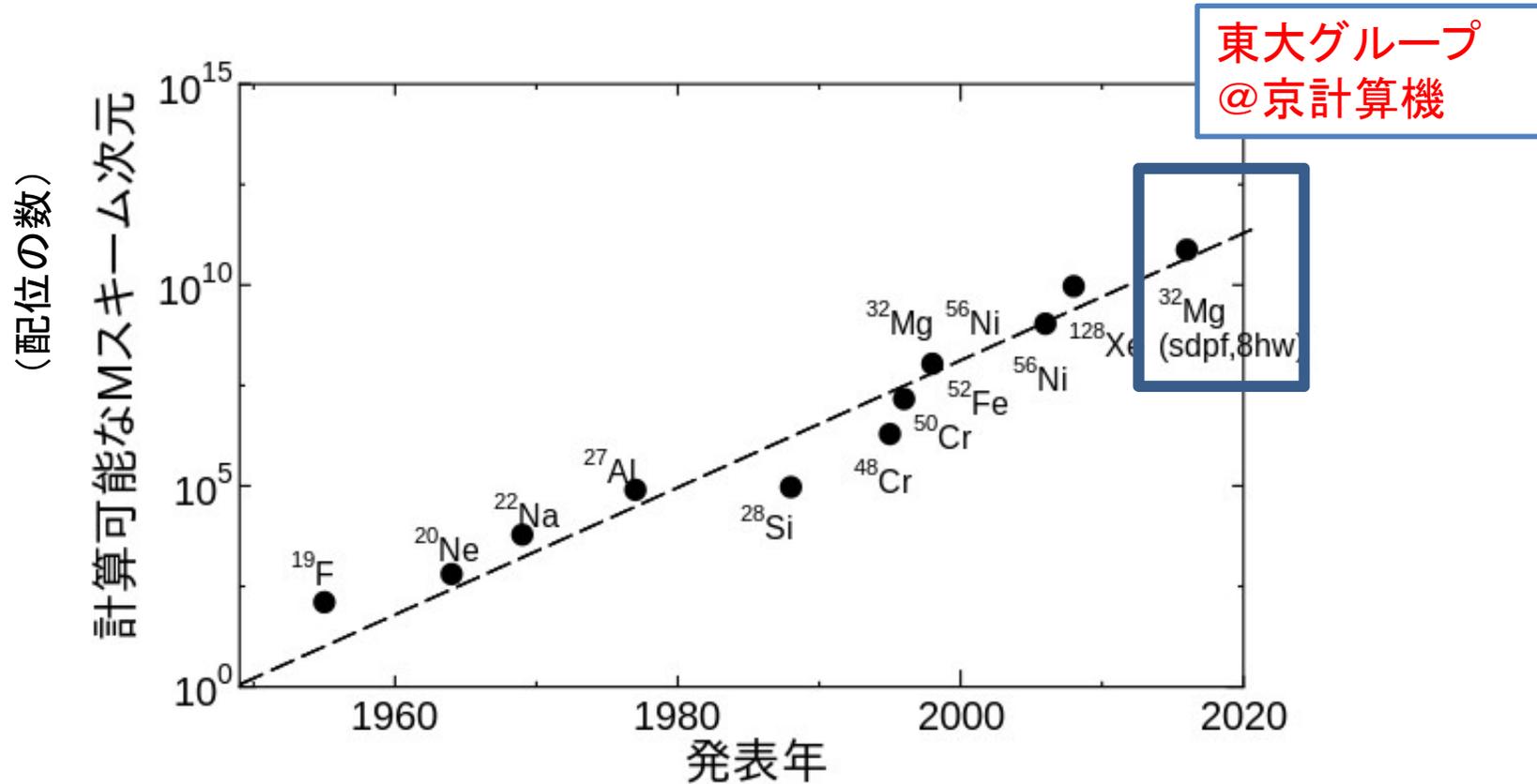
$$H = \sum_a \epsilon_a n_a + \sum_{a \leq b, c \leq d, JM} V(abcd; J) A_{JM}^\dagger(a, b) A_{JM}(c, d)$$

$a = (n_a, l_a, j_a)$  一粒子軌道を指定するインデックス

$n_a$  ... number operators of orbit  $a$        $n_a = \sum_{m_a} c_{a, m_a}^\dagger c_{a, m_a}$

$$A_J^\dagger(a, b) = \frac{1}{\sqrt{1 + \delta_{ab}}} [c_a^\dagger \otimes c_b^\dagger]^{(J)} = \frac{1}{\sqrt{1 + \delta_{ab}}} \sum_{m_a, m_b} \langle j_a m_a j_b m_b | JM \rangle c_{a, m_a}^\dagger c_{b, m_b}^\dagger$$

# どのくらいの配位をとりあつかえるか？

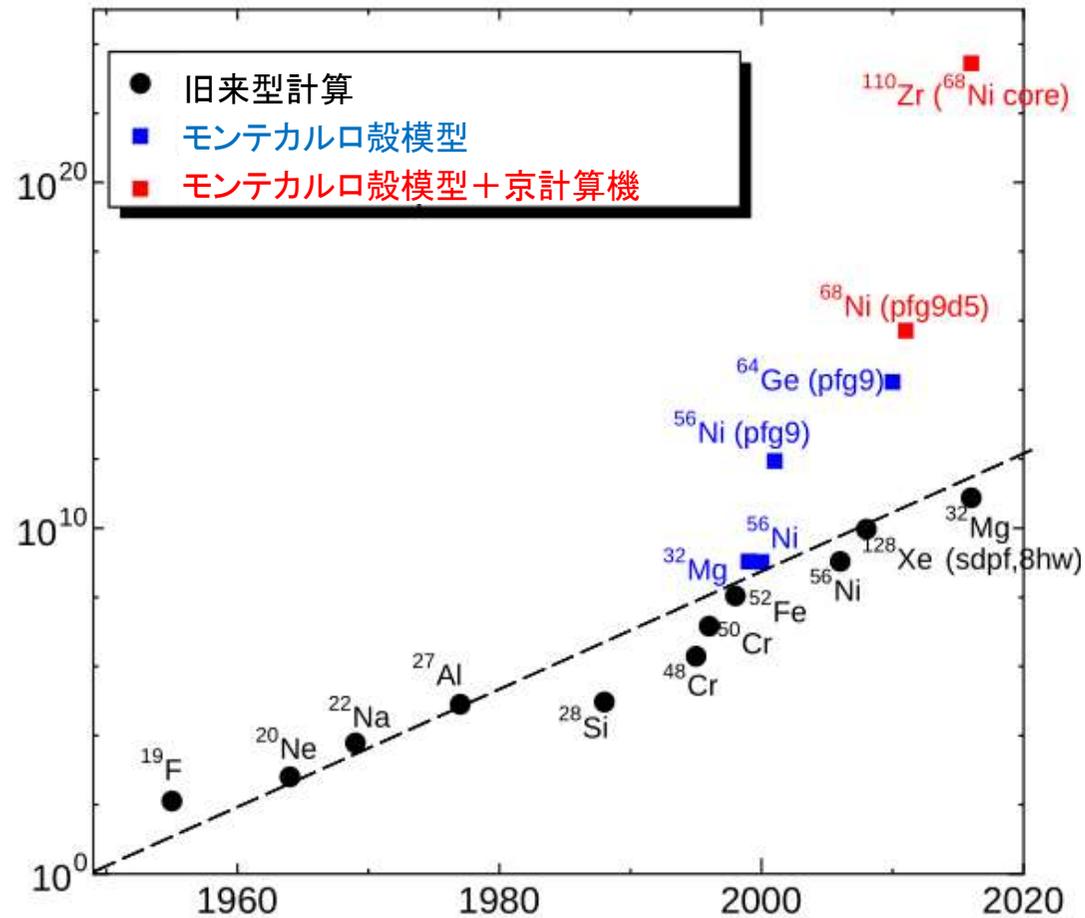


世界最大級の大次元対角化計算 ( $10^{11}$ 次元) に成功！

N. Tsunoda, T. Otsuka, N. Shimizu, M. H.-Jensen, K. Takayanagi,  
and T. Suzuki, Phys. Rev. C 95, 021304R (2017)

# モンテカルロ殻模型

重要な「状態」だけを選び出す東大グループ独自の計算手法



次元の制限を超えられるが、とり扱いが難しい。  
今回はとりあげない。

# 殻模型計算コードKSHELLの開発

- 大次元・実対称・疎行列の固有値問題を解く。最小固有値近傍のみが必要
  - ランチョス法、(クリロフ部分空間法)
- 大次元の問題にチャレンジ
  - ハミルトニアン行列の行列要素はオンザフライで生成、ベクトルのみメモリーに保持
- PCから京・ポスト京まで単一のコード、使い勝手を実現。

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

Fortran 90/95, 20,000行



CENTER for  
NUCLEAR STUDY

kshell

このサイトを検索

原子核殻模型計算コード  
"KSHELL"

DOWNLOAD

サイトマップ

## Download

### Test version of kshell code (restricted)

ダウンロードされる方は [shimizu+kshell@cns.s.u-tokyo.ac.jp](mailto:shimizu+kshell@cns.s.u-tokyo.ac.jp) にご一報ください。  
バグフィックス、バージョンアップ等の情報を送らせていただきます。  
バグ、誤りを見つけたら必ず清水までお知らせください。(まだいろいろ誤りがあるかと思えます)  
また、感想・コードによる成果の報告(引用をお願いします)・共同研究依頼等、歓迎いたします。  
(返答できないかもしれませんが、容赦ください。)

I will announce bug, version-up information if you e-mail to  
[shimizu+kshell@cns.s.u-tokyo.ac.jp](mailto:shimizu+kshell@cns.s.u-tokyo.ac.jp).  
Since this is a test version, it is provided as it is and has no warranty.  
Any comments about suggestions and collaborations are welcome.

- KSHELL ver.1.2e
- 日本語マニュアル (Manual in Japanese) 2014/09/25版
- KSHELL Manual in English, 2014/11/23

# KSHELLコードの公開・普及中

- 公開済みの殻模型計算コードは複数あるが、並列計算可能なものはなかった。
  - c.f. OXBASH 1985, ANTOINE, NuSHELL, BigSTICK, ...
- 並列性能と使い勝手を両立したコードKSHELLを開発、公開。
- 講習会を随時開催
  - 東大本郷(清水)、理研仁科センター(清水)、埼玉大(清水)、ケーブタウン(角田佑)、U. Oslo (J. Midtbo), TRIUMF(J. Midtbo), ...
  - 実験研究者の需要が強い。

## ハミルトニアン行列のMスキーム表現

$$\begin{aligned}
 |\Psi\rangle &= u_1 \begin{array}{c} \text{M=0} \\ \text{---} \bullet \text{---} \\ \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \end{array} + u_2 \begin{array}{c} \text{M=0} \\ \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \\ \bullet \text{---} \text{---} \bullet \text{---} \end{array} + u_3 \begin{array}{c} \text{M=0} \\ \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} \begin{array}{l} j = \frac{3}{2} \\ j = \frac{3}{2} \end{array} + \dots \\
 &= u_1 |m_1\rangle + u_2 |m_2\rangle + u_3 |m_3\rangle + \dots \\
 &\qquad\qquad\qquad m = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}
 \end{aligned}$$

## ハミルトニアン行列の固有値問題を解く

$$H_{ij} = \langle m_i | H | m_j \rangle$$

ハミルトニアン行列は疎行列。なぜ？

ハミルトニアンは2体相互作用:

$$H = \sum_{ij} T_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_{ijkl} V_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k$$

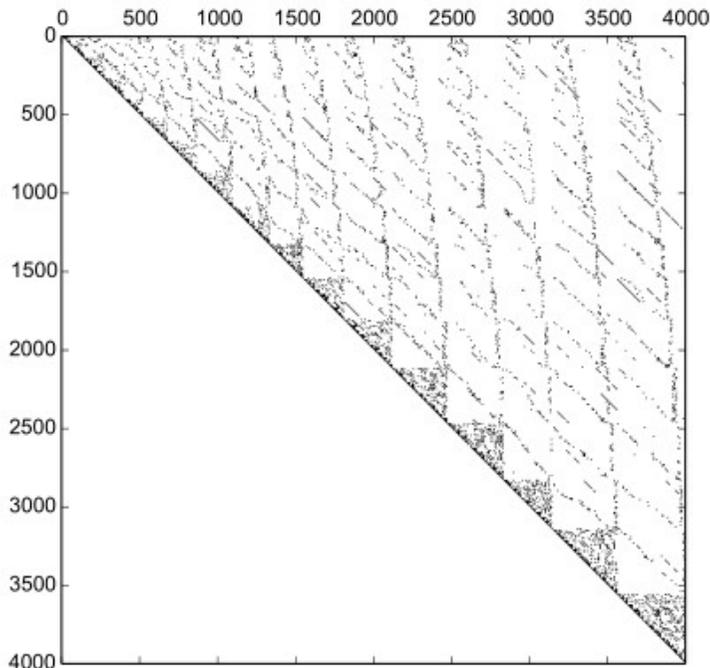
例: 2体相互作用では  $\langle m_1 | H | m_3 \rangle = 0$

# 殻模型におけるハミルトニアン行列

⇒ 実対称・疎行列

Nuclide	Space	Basis dim.	Sparsity	Storage (GB)
$^{28}\text{Si}$	sd	$9.4 \times 10^4$	$6 \times 10^{-3}$	0.2
$^{52}\text{Fe}$	pf	$1.1 \times 10^8$	$1 \times 10^{-5}$	720
$^{56}\text{Ni}$	pf	$1.1 \times 10^9$	$2 \times 10^{-6}$	9600

$^{44}\text{Ti}$  in pf-shell (4000次元)



行列要素全てをメモリーに保持することは困難



オンザフライ生成による行列・ベクトル積の実現、  
最低2本のランチョスベクトルをメモリーに保持する。

# ランチョス法: アルゴリズム

- 初期ベクトル  $u_0$
- 反復する  $k = 0, 1, 2, \dots$

$$a_k = u_k^T H u_k$$

行列ベクトル積による部分空間の拡張

$$u'_{k+1} = H u_k - a_k u_k - b_{k-1} u_{k-1}$$

Gram-Schmidt直交化

$$b_k = \sqrt{u'^T_{k+1} u'_{k+1}}$$

規格化

$$u_{k+1} = u'_{k+1} / b_k$$

$$T = u_i^T H u_j = \begin{bmatrix} a_0 & b_0 & & & \\ b_0 & a_1 & b_1 & & \\ & b_1 & a_2 & b_3 & \\ & & b_2 & a_3 & b_3 \\ & & & b_3 & \dots & \dots \\ & & & & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

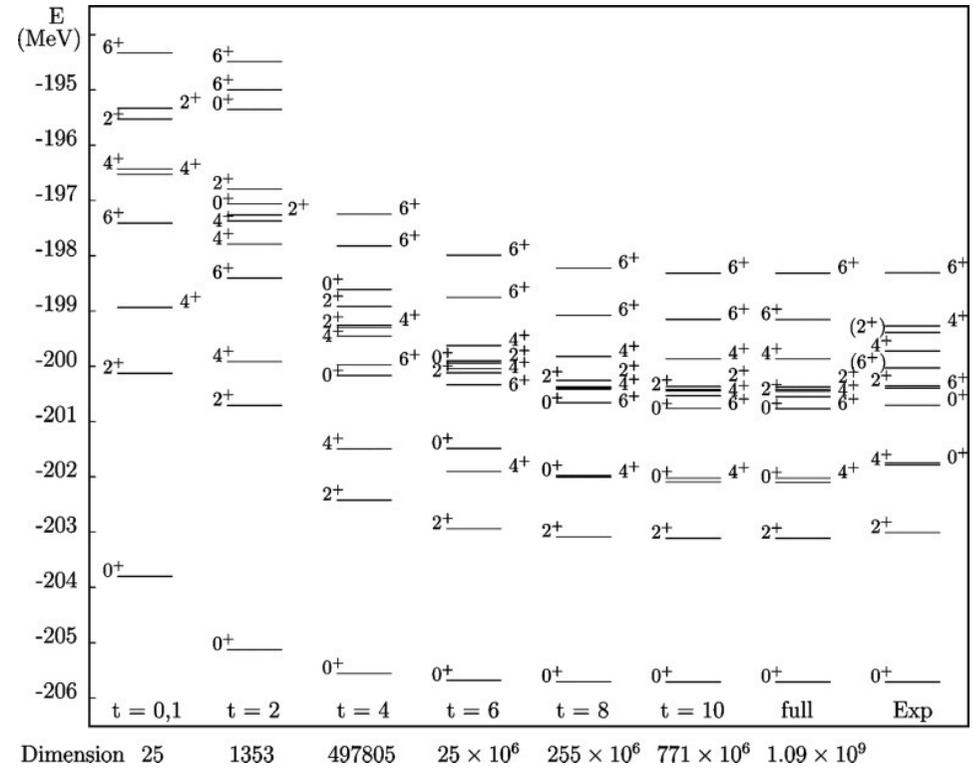
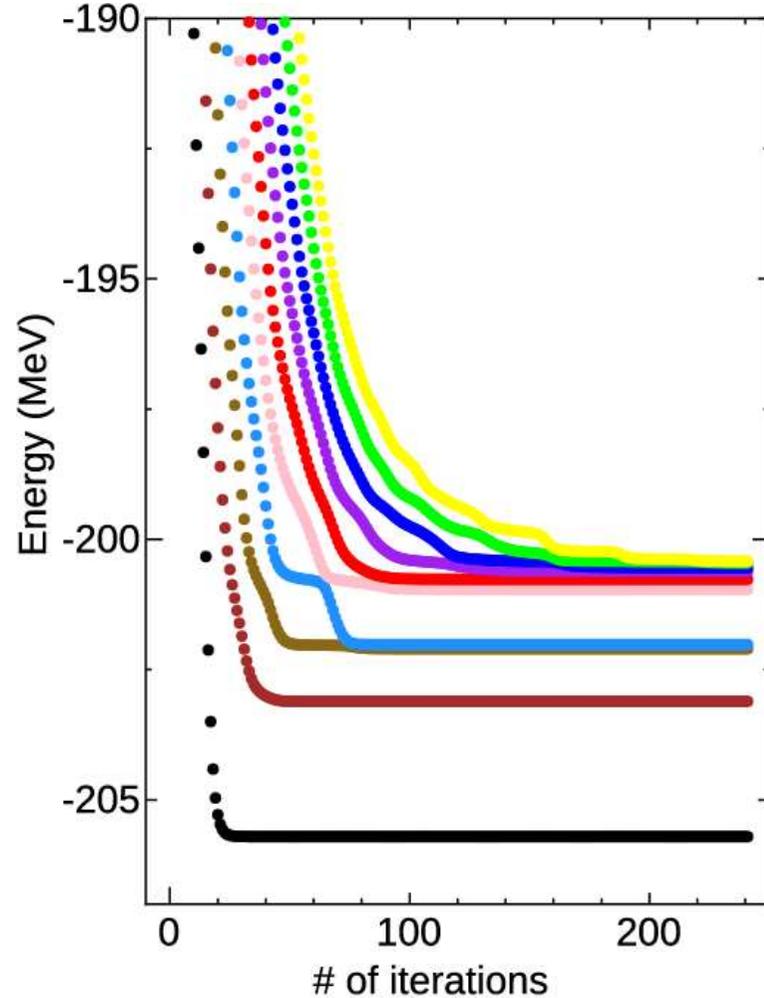
- 3重対角行列  $T$  を対角化する。

注意: 数学的には、 $u_i^T u_j = \delta_{ij}$  が保たれているはずである。  
 しかしながら、反復を繰り返していくと、丸め誤差によって直交性が失われていく。

➡ 再直交化が必須。Thick restartが有効。

# ランチョス法の収束性

$^{56}\text{Ni}$  pf殻の殻模型計算:  $10^9$ 次元の対角化計算  $\implies$  8GB ランチョスベクトル  
 10個の最小固有値 ... 241回の反復



Excitation energies of  $^{56}\text{Ni}$

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

code "KSHELL"

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

# KSHELLのアルゴリズム:ビットによる配位の表現

$$\begin{aligned}
 |\Psi\rangle &= u_1 \begin{array}{c} \text{M=0} \\ \text{---} \bullet \text{---} \\ \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \end{array} + u_2 \begin{array}{c} \text{M=0} \\ \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \\ \bullet \text{---} \text{---} \bullet \text{---} \end{array} + u_3 \begin{array}{c} \text{M=0} \\ \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \text{---} \end{array} + \dots \\
 &= u_1 |m_1\rangle + u_2 |m_2\rangle + u_3 |m_3\rangle + \dots
 \end{aligned}$$

$j = \frac{3}{2}$   
 $j = \frac{3}{2}$   
 $m = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{3}{2}$

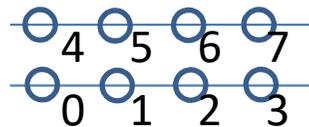
$$\begin{array}{cccc}
 \circ & \circ & \circ & \circ \\
 4 & 5 & 6 & 7 \\
 \hline
 \circ & \circ & \circ & \circ \\
 0 & 1 & 2 & 3
 \end{array}
 \quad |m_1\rangle = c_0^\dagger c_1^\dagger c_3^\dagger c_6^\dagger |-\rangle$$

m	0	1	2	3	4	5	6	7	Decimal num.
$ m_1\rangle$	1	1	0	1	0	0	1	0	75
$ m_2\rangle$	1	0	0	1	0	1	1	0	105
$ m_3\rangle$	0	0	0	0	1	1	1	1	240

# 「オンザフライ」行列要素生成による行列ベクトル積

ハミルトニアン行列要素  $H_{ij} = \langle m_i | H | m_j \rangle$  の数は多すぎてメモリーに保存できない。

ランチョス法では、行列ベクトル積を実現すれば行列自体は不要。



$$|m_3\rangle = c_4^\dagger c_7^\dagger c_3 c_0 |m_2\rangle$$

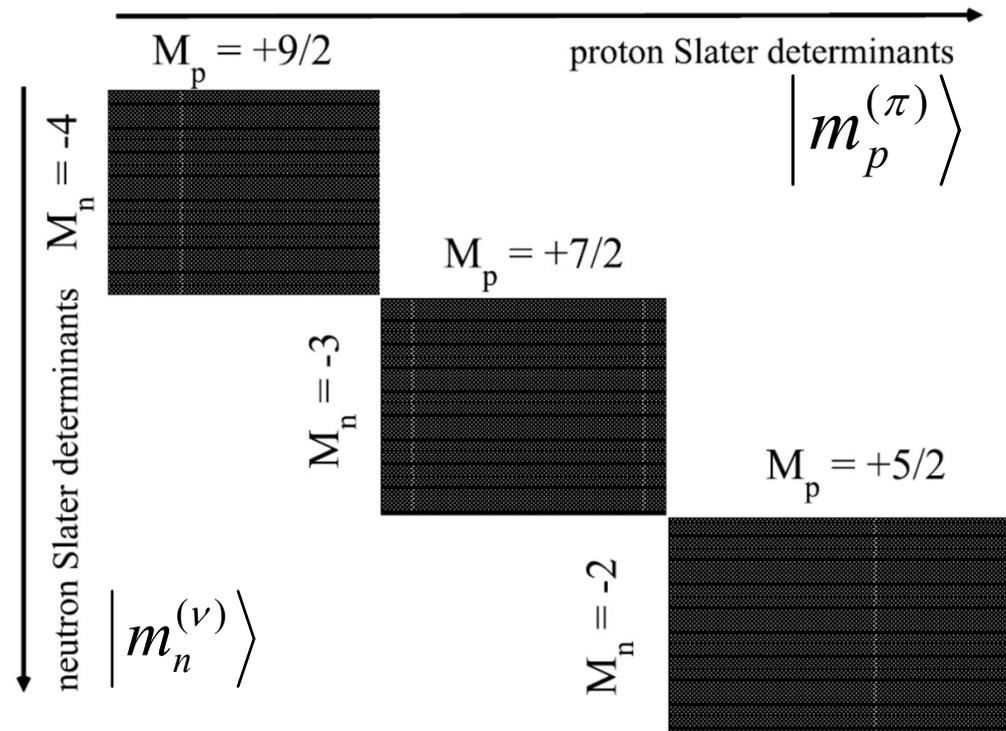
m	0	1	2	3	4	5	6	7	Decimal num.
$ m_1\rangle$	1	1	0	1	0	0	1	0	75
$ m_2\rangle$	1	0	0	1	0	1	1	0	105
$ m_3\rangle$	0	0	0	0	1	1	1	1	240

$c_4^\dagger c_7^\dagger c_3 c_0$   
  
 off 0,3 bits  
 and  
 on 4, 7 bits

得られたビット表現の位置を2分法で探索する

# 高速化手法：陽子空間・中性子空間への分解

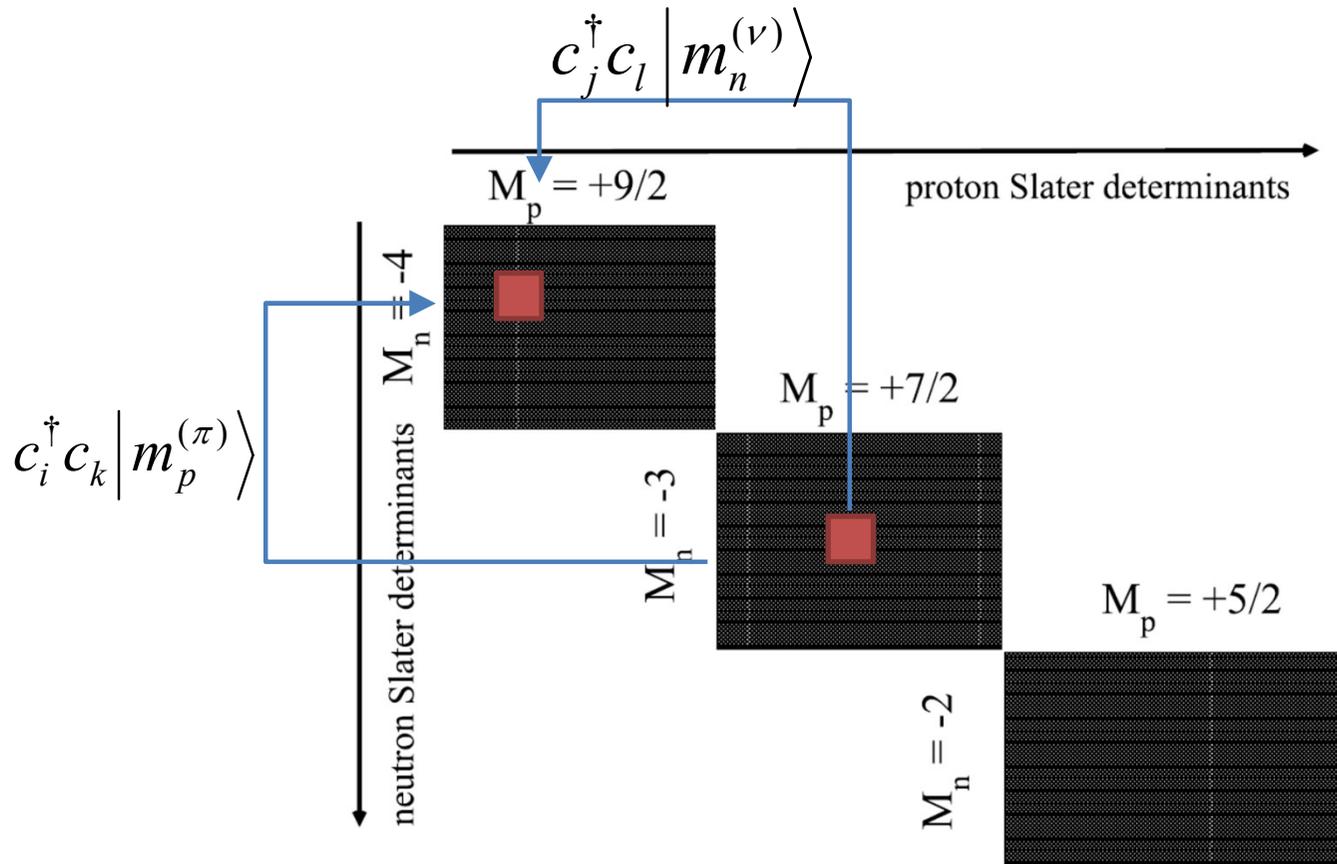
$$|\Psi\rangle = \sum_i v_i |m_i\rangle = \sum_{p,n} v_{p,n} |m_p^{(\pi)}\rangle |m_n^{(\nu)}\rangle$$



Ref. C. W. Johnson et al., Comp. Phys. Comm. 184, 2761 (2013)

# 高速化手法：陽子・中性子相互作用部分の行列・ベクトル積 (ボトルネック部分)

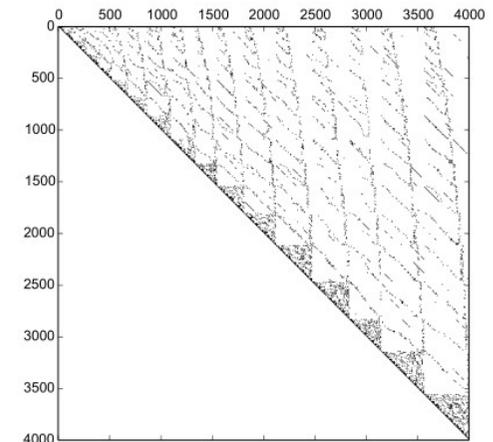
$$c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k |m_p^{(\pi)}\rangle |m_n^{(\nu)}\rangle = c_i^\dagger c_k |m_p^{(\pi)}\rangle c_j^\dagger c_l |m_n^{(\nu)}\rangle = |m_{p'}^{(\pi)}\rangle |m_{n'}^{(\nu)}\rangle$$



陽子側の1体作用  $c_i^\dagger c_k |m_p^{(\pi)}\rangle$  と中性子側の1体作用  $c_j^\dagger c_l |m_n^{(\nu)}\rangle$  をあらかじめ求めておくことで、陽子・中性子相互作用演算を高速化する。

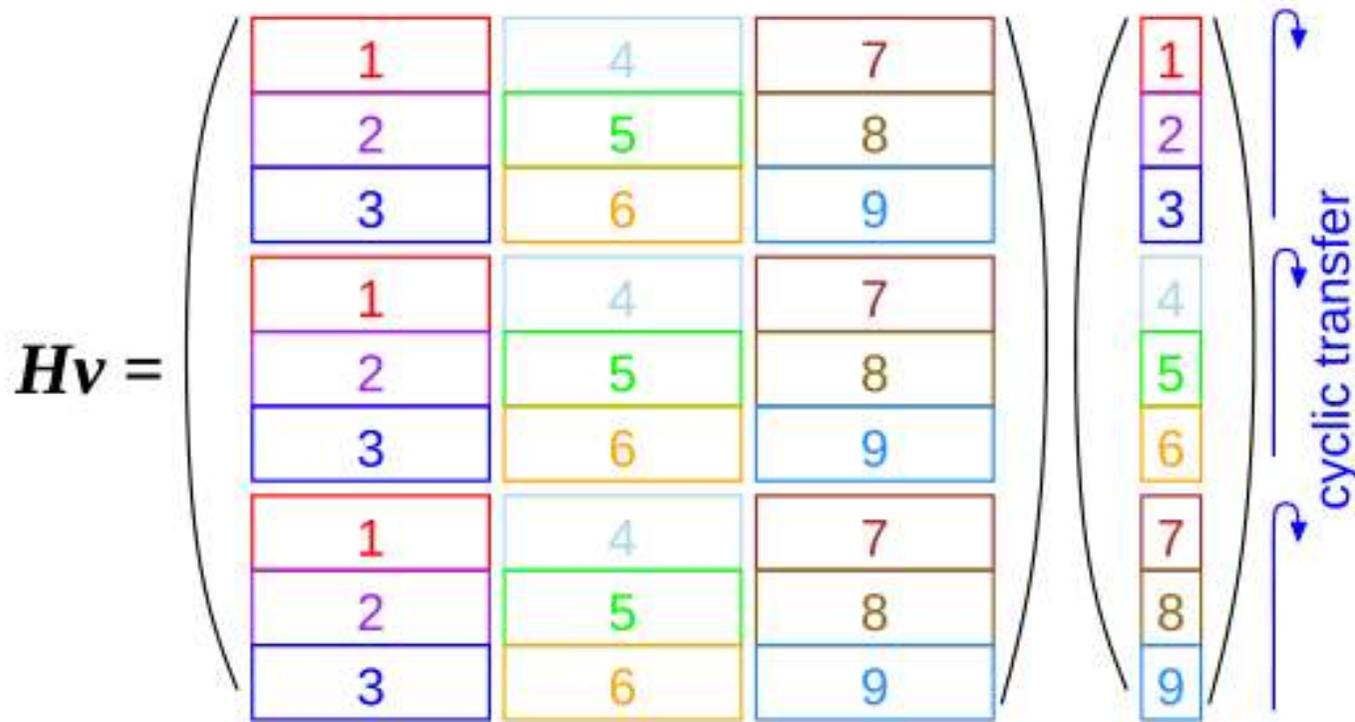
# KSHELLにおける並列計算

- 全てのランチョスベクトルをメモリーにのせられれば、再直交化の計算時間は無視できる。行列・ベクトル積がほぼすべての計算時間を占める。
- 行列・ベクトル積をロードバランスよく並列化した  
い。
  - 対角ブロックは計算量が大きい
  - 分散保持されたベクトルの通信量も無視できない



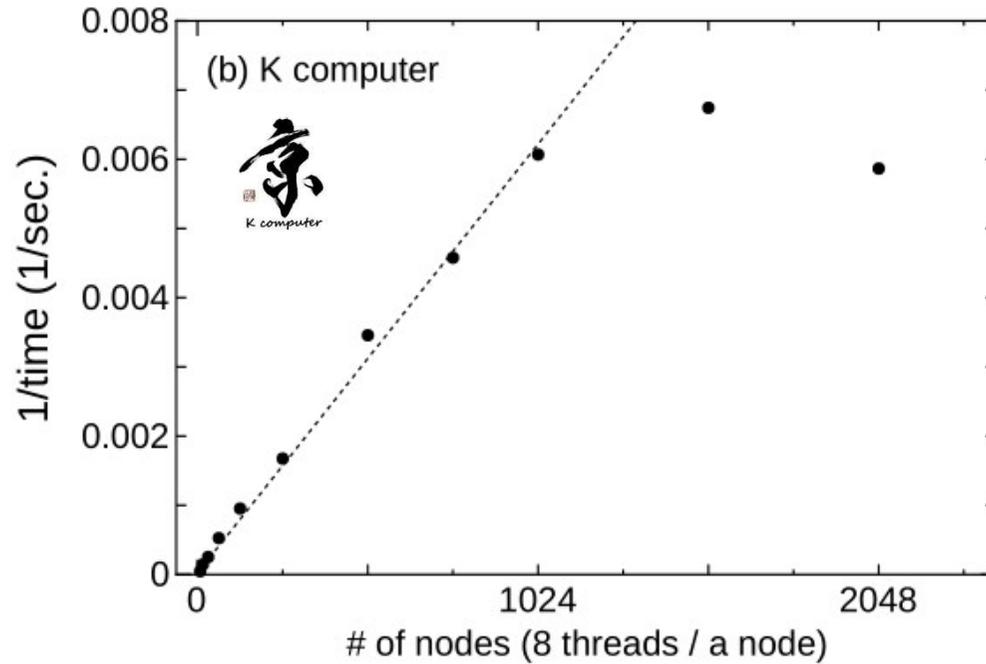
# KSHELLにおける行列・ベクトル積の並列化

9プロセスの場合: 各プロセスの担当



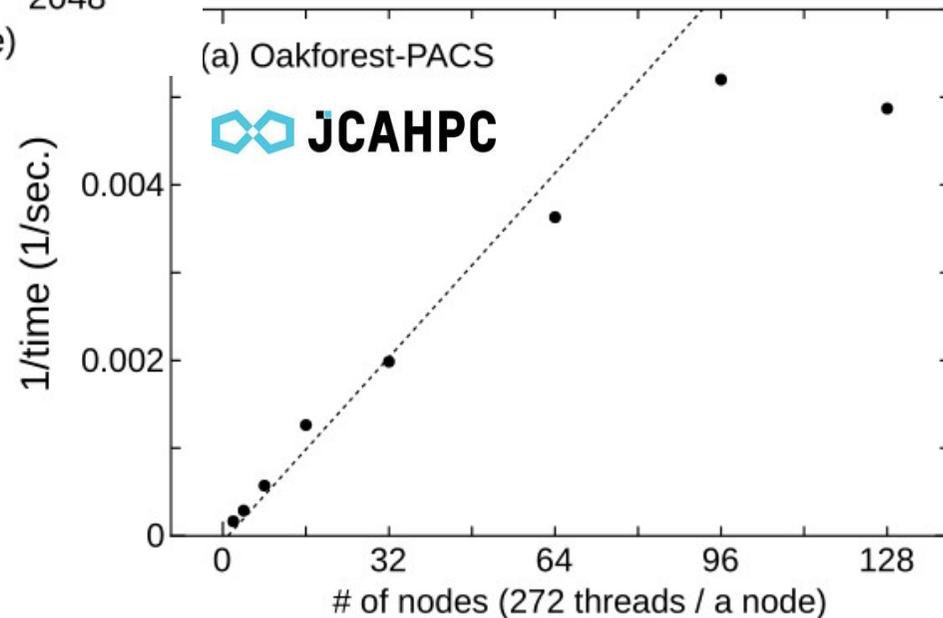
- 対角ブロックが均等に分散されている。
- 通信量が  $2V/\sqrt{N}$  ( $V$ :ベクトルサイズ、 $N$ :プロセス数)に抑えられる。
- 再直交化の並列化は自明。

# 並列性能 (ストロングスケーリング)



$^{56}\text{Ni}$ , pf-shell  
 $10^9$  dimension

$10^5$  スレッド並列までの  
良好な並列性能



# 計算速度の向上に向けて

- オンザフライ生成による行列・ベクトル積の実行時間がボトルネック
  - より詳細には、2分法によるビット表現の探索

$$v' = Hv$$

- ブロック化による高速化を試みる。  
(ブロックランチョス法、ブロック櫻井・杉浦法)

$$(v'_1, v'_2, \dots, v'_p) = H(v_1, v_2, \dots, v_p)$$

# ブロックランチョス法

- あるいは、リスタート法を組み合わせせて Thick-restart block Lanczos method

a block of vectors  $V_1$  be arbitrary vectors with  $V_1^T V_1 = 1$  and  $\beta_{-1} := 0$ .

```

for  $k = 1, 2, 3, \dots$  do
   $W := HV_k$ 
   $\alpha_k := V_k^T W$ 
   $T_{k(p-1)+1:kp, k(p-1)+1:kp} := \alpha_k$ 
  Diagonalize  $T^{(k)}$  and stop if  $e_n$  converges
   $W = W - V_k \alpha_k$ 
  Reorthogonalize  $W$  with  $\{V_1, V_2, \dots, V_{k-1}\}$ 
   $V_{k+1} \beta_k = \text{QR}(W)$ 
   $T_{k(p+1)+1:k(p+2), kp+1:k(p+1)} := \beta_k$ 
   $T_{kp+1:k(p+1), k(p+1)+1:k(p+2)} := \beta_k^T$ 
end for
  
```

← 行列・ブロックベクトル積  
による部分空間の拡張

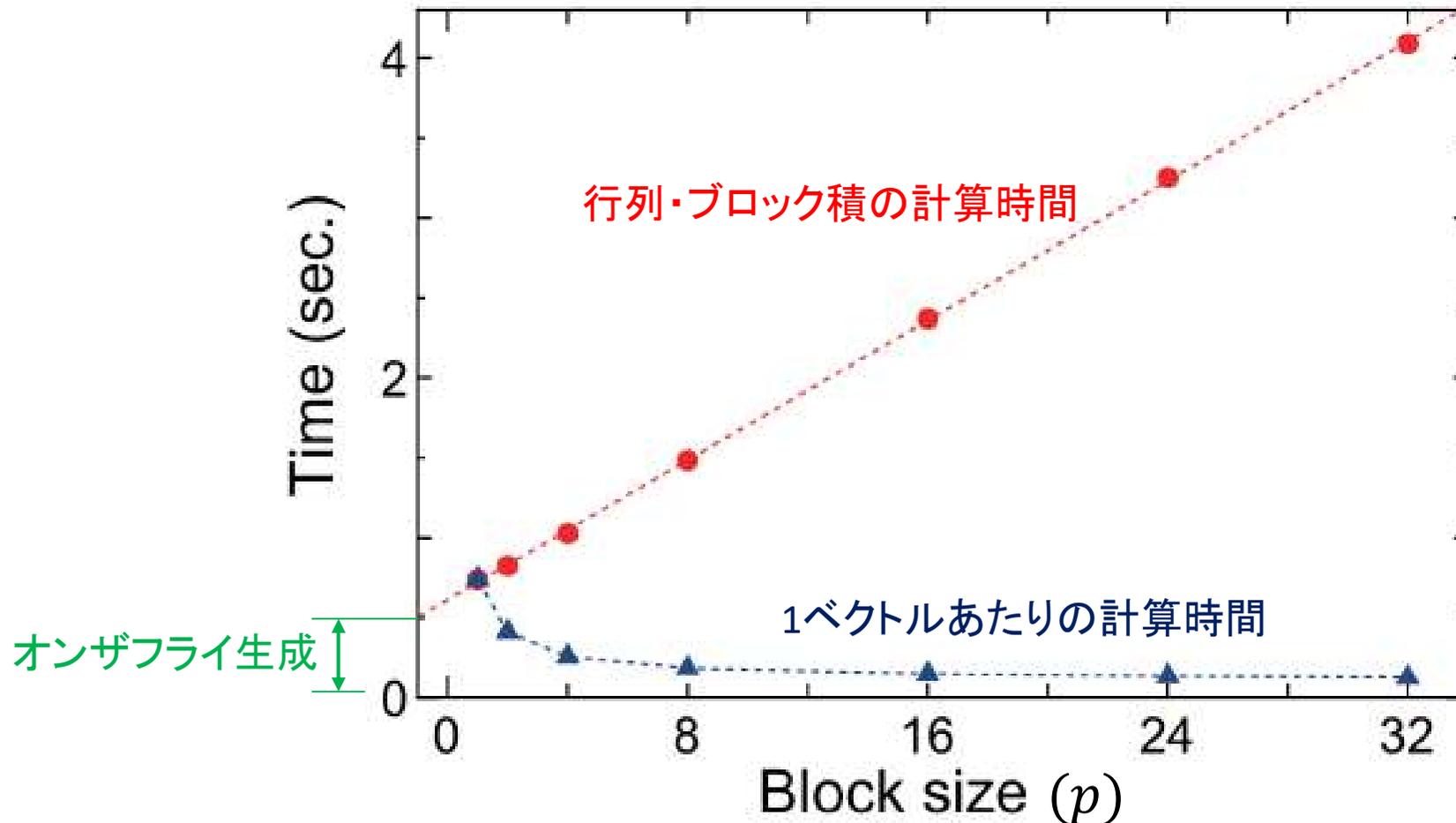
$$T^{(k)} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1^T & & & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2^T & & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \beta_{k-1}^T \\ 0 & & & \beta_{k-1} & \alpha_k \end{pmatrix}$$

$\alpha_i$ と $\beta_i$ は  $p \times p$  のブロック行列

# ブロック化による性能向上

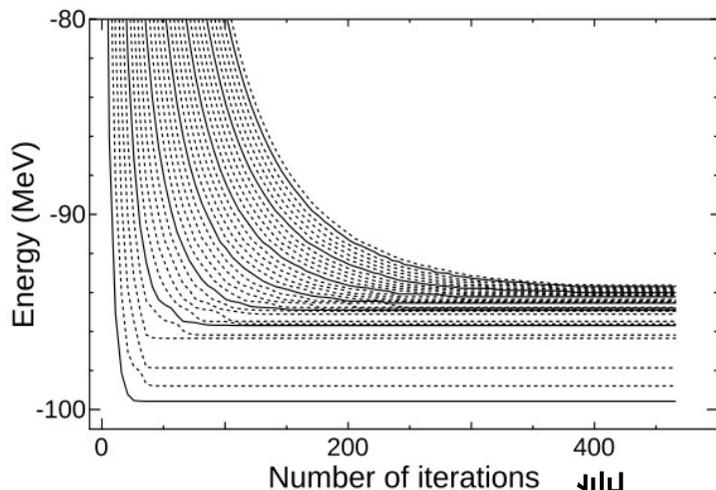
## 行列・ベクトル(ブロック)積の計算時間

$$(v'_1, v'_2, \dots, v'_p) = H(v_1, v_2, \dots, v_p)$$



$^{48}\text{Cr}$  in pf-shell, 1,963,461 dimension, Xeon 20 cores

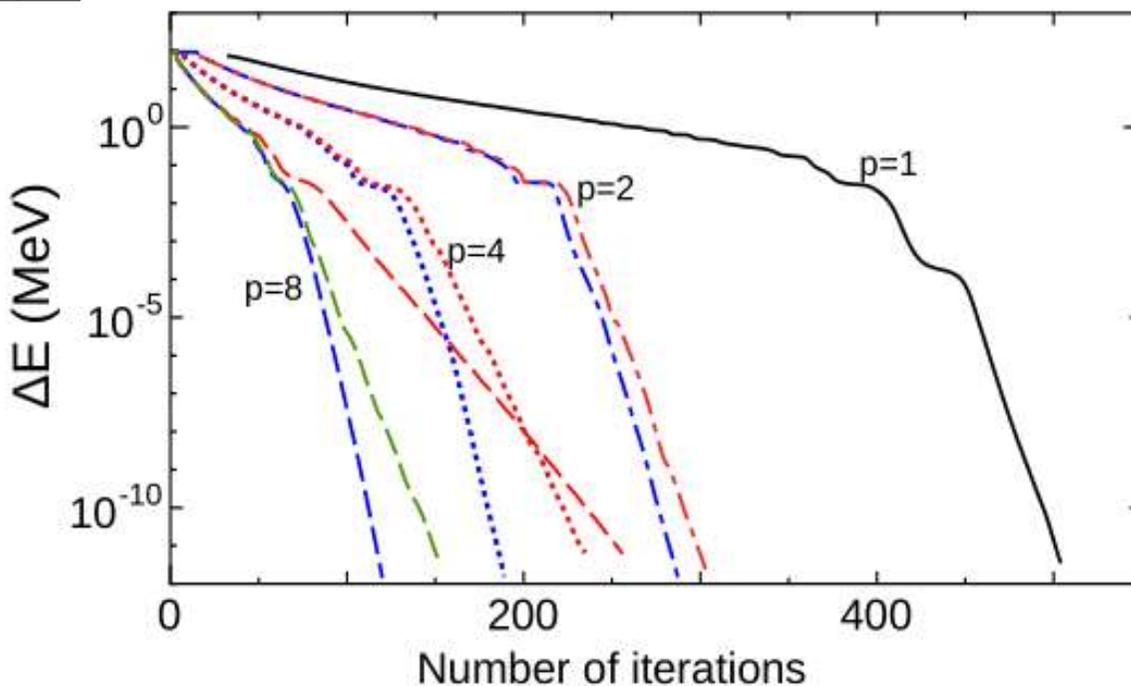
# ブロックランチョス法による性能向上



$^{48}\text{Cr}$  in pf-shell, 1,963,461 dimension, Xeon 20 cores

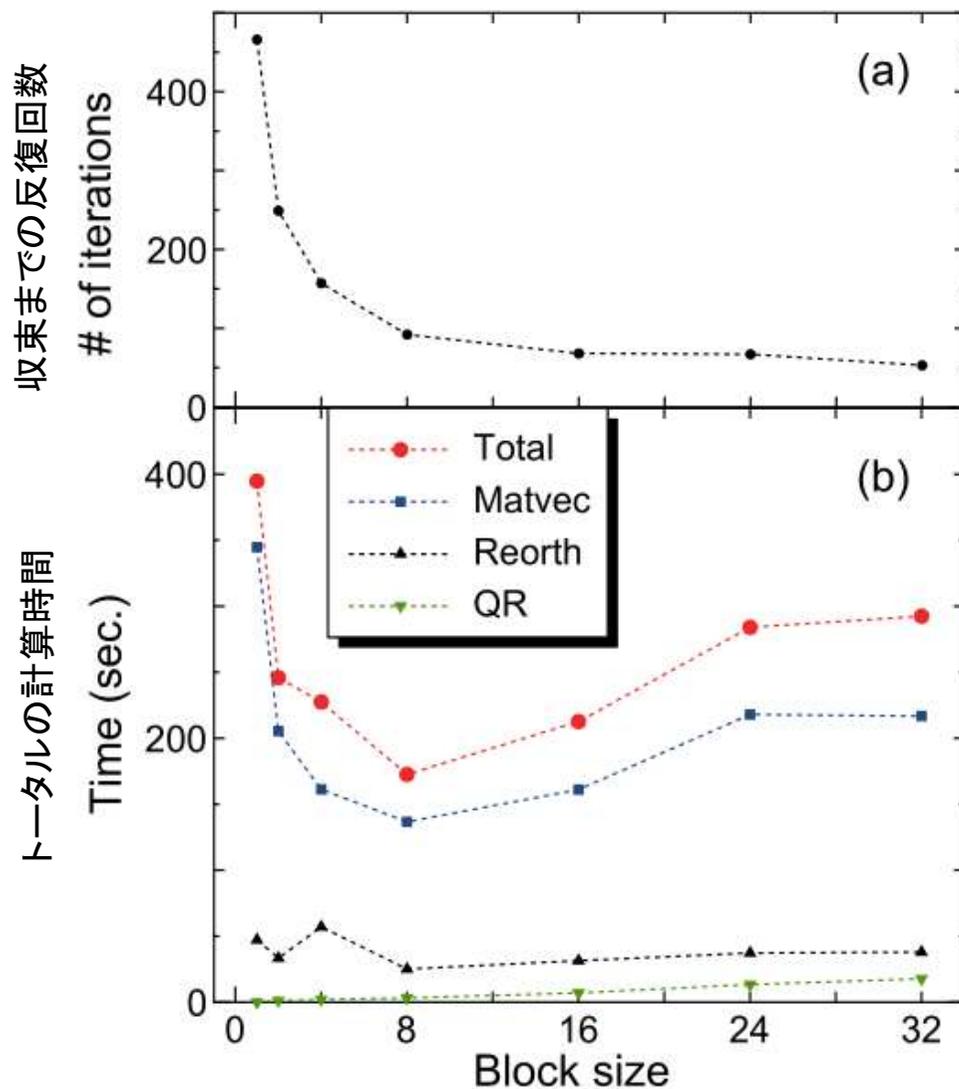
32番目の固有値の収束性

近似固有値と厳密値との差

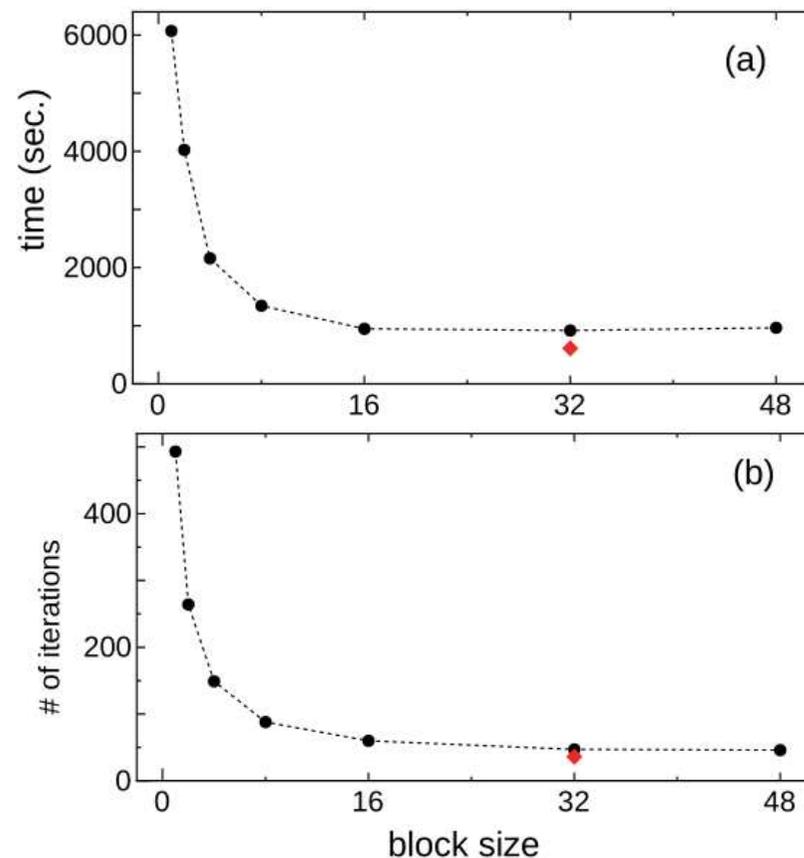


# ブロックランチョス法による性能向上

$^{48}\text{Cr}$  in pf-shell, 1,963,461 dimension



$^{112}\text{Sn}$  w/  $^{100}\text{Sn}$  core  
6,210,638 dimension



# ブロック櫻井杉浦法の導入： 原子核準位密度の計算

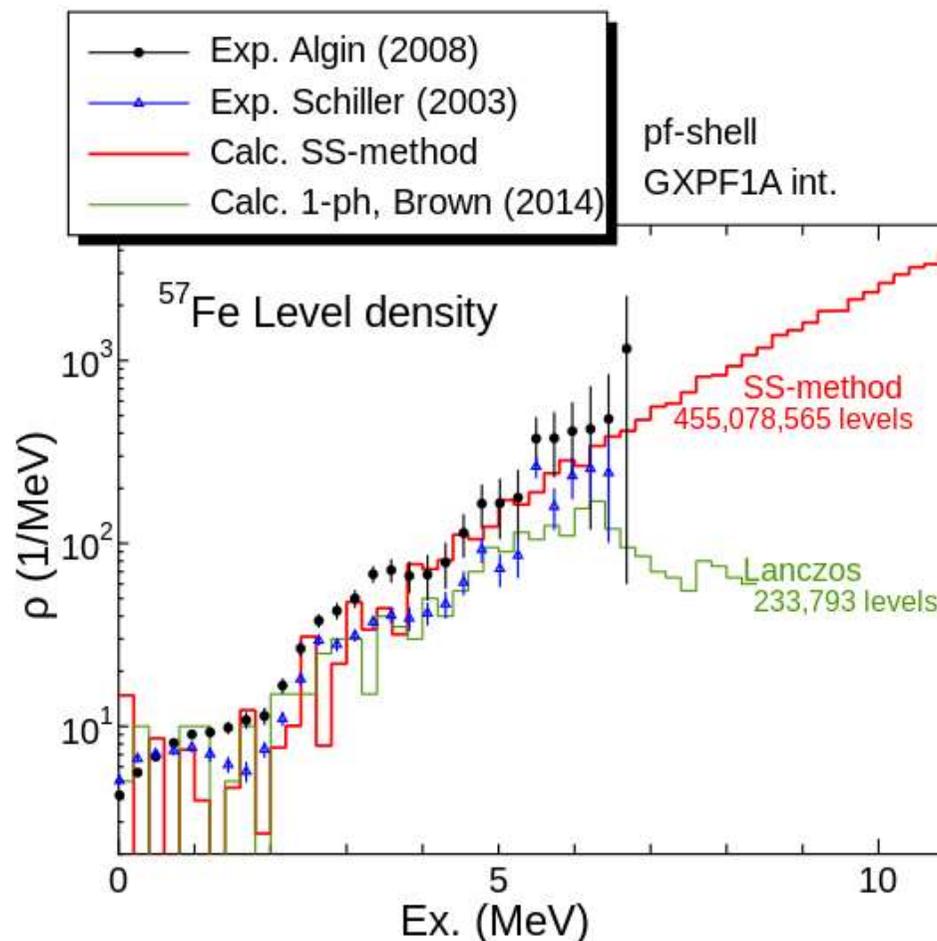


z-Pares libraryによる  
櫻井一杉浦法の導入・  
確率的固有値密度推定法  
200億次元行列の固有値密度  
推定を可能に

$$\rho(E) = \oint_{\Gamma} \text{tr} \left( (z-H)^{-1} \right) dz$$

The diagram shows the complex plane with a horizontal axis labeled Re(z) and a vertical axis labeled Im(z). A contour Gamma is drawn as a series of overlapping circles along the real axis. Several orange crosses representing eigenvalues are marked on the real axis within the contour.

中性子捕獲反応の理解に重要な物理量。



Ref. N. Shimizu Y. Utsuno, Y. Futamura, T. Sakurai, T. Mizusaki and  
T. Otsuka, Phys. Lett. B 753, 13 (2016)

# Summary

- 原子核殻模型計算
  - 原子核の微視的構造を記述、第一原理計算にも用いられる。
  - 殻模型計算・コードは実験研究者含め多岐にわたる需要
- 殻模型計算コードKSHELLの開発・公開
  - 大規模並列計算＋オンザフライ行列要素生成による大次元計算
  - ブロック化による性能向上
- Future work
  - 2体カレント、3体力対応などの機能拡張
  - ポスト京にむけて