

令和 4 年 5 月 12 日現在

機関番号：12601

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2017～2021

課題番号：17K05433

研究課題名（和文）原子核構造理論におけるデータ指向アプローチ

研究課題名（英文）Data-driven approaches in nuclear structure theory

研究代表者

清水 則孝（Shimizu, Noritaka）

東京大学・大学院理学系研究科（理学部）・特任准教授

研究者番号：30419254

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,500,000円

研究成果の概要（和文）：陽子と中性子の量子多体系である原子核、特に天体現象や加速器実験でのみ現れるような不安定な原子核の構造を、原子核殻模型計算という手法で数値的に求める研究を進めている。殻模型計算の計算結果には、模型に内在するパラメータ由来の不定性が残る。ベイズ解析を導入して、この不定性を評価した。また、評価に必要な計算量を削減するために、Eigenvector continuation という手法を殻模型計算に導入した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

中性子数が通常の安定核より多い中性子過剰不安定核は、寿命が短く天然には存在しないものの、元素合成過程の理解などに重要な役割を果たすため、加速器実験などで盛んに調べられている。これらを理論で研究する有力な理論模型の一つである殻模型計算において、模型に内在するパラメータ由来の不定性を評価するための方法論を提唱した。

研究成果の概要（英文）：We aim to study structure of unstable nuclei which appear only in astrophysical condition or in accelerator experiments by performing nuclear shell-model calculations numerically. The results of shell-model calculations implicitly contain uncertainties originated from the model parameters. We introduced Bayes analysis to estimate these uncertainties. In addition, we introduced the method of eigenvector continuation into nuclear shell-model calculations in order to reduce computational resources required for the estimation.

研究分野：原子核理論

キーワード：原子核殻模型 不定性評価 ベイズ統計 固有ベクトル連続性

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

原子核構造理論の究極の目標は、原子核中の核子間相互作用(核力と呼ばれる)から出発して不安定核を含むすべての原子核の構造を预言することである。これは第一原理計算と呼ばれ、2体散乱実験の位相のずれを再現するような相互作用から出発し、量子多体問題を数値的に解くことによって、原子核の構造を記述する。質量数 16 以下の軽い核や、一部の球形核では成功を収めているが、未知の領域を精度よく预言することは困難であった。

特に中重核領域では、中性子過剰側の存在限界(何粒子まで中性子を増やした同位体が安定して存在しうるか)にも大きな不定性があり、超重核領域における安定の島が存在するか否かに決着をつけることにも程遠い。一方で、原子核構造計算には、素粒子物理学、宇宙物理学、原子力工学など多方面に応用が期待されている。原子核構造計算の精度の定量的な議論を可能とし、応用上要求される水準まで上げることは原子核理論研究の究極の目標の一つである。

2. 研究の目的

原子核構造の理論研究において、原子核殻模型計算は、安定核・不安定核など様々な核種の同位体の構造や低エネルギー励起を高い精度で記述し、未知の不安定核の構造を预言する有力なモデルである。原子核モデルにおける理論の不定性を評価することで、理論モデルの限界や预言の不定性を定量的に議論し、理論モデルの精度を向上することを目指した。殻模型計算は、RI ビーム加速器実験によって得られる不安定核の低エネルギー励起スペクトルをよく記述する最も有力な手法である。このモデルを規定するパラメータは、微視的に核力から出発した有効相互作用理論を用いて求められるが、このパラメータは多くの場合実験値を再現する程高精度ではないため、理論計算結果の预言能力を向上させるためにパラメータの現象論的補正が必要となる。このパラメータ由来の不定性を評価する事を目的として研究を進めた。

また、このような理論モデルの不定性を評価するには、パラメータを様々に変えながら、多数の殻模型計算を実行する必要がある。この問題を解決するため、コード開発による計算時間の短縮や近似手法の開発も目的の一つである。

3. 研究の方法

p 殻核(質量数 5 から 16 までの原子核)を例にとり、殻模型ハミルトニアンのパラメータに由来する不定性の評価をおこなった。ヘリウム 4 を芯として p 殻を模型空間にとった殻模型計算を想定、ベイズ統計を導入した。実際に質量数 10 前後の p 殻核において不定性評価を実現した。

ベイズ統計を用いて不定性を評価するためには、原理的には、パラメータをランダムに変えて多数の殻模型計算をおこない、その結果の統計を検討する必要がある。これをそのままより重い核に適用すると、莫大な計算機資源が必要となってしまう。この問題を回避するため、殻模型計算コードの開発・高速化や、近似手法の開発をおこなった。特に、Eigenvalue continuation と呼ばれる近似手法を殻模型計算に導入し、対角化計算せずに固有値を評価する手法の性能評価をおこなった。

4. 研究成果

p 殻核を例にとり、殻模型ハミルトニアンのパラメータに由来する不定性の評価をおこなった。ここで、17 個のパラメータは、33 個の p 殻核のエネルギー、励起エネルギーの実験値を再現するデータを再現するように決定する。このパラメータの不定性を論じるため、ベイズ統計を導入し、ベイズ統計における事前分布を一様分布として事後分布として、一定の不定性を許容し実験値を再現するようなハミルトニアンのパラメータセットの統計的な集団を、ラプラス近似を用いて生成した。このハミルトニアン各々に対し、殻模型計算を実行することによって、有効相互作用に含まれるパラメータに由来する不定性を議論することを可能とした。

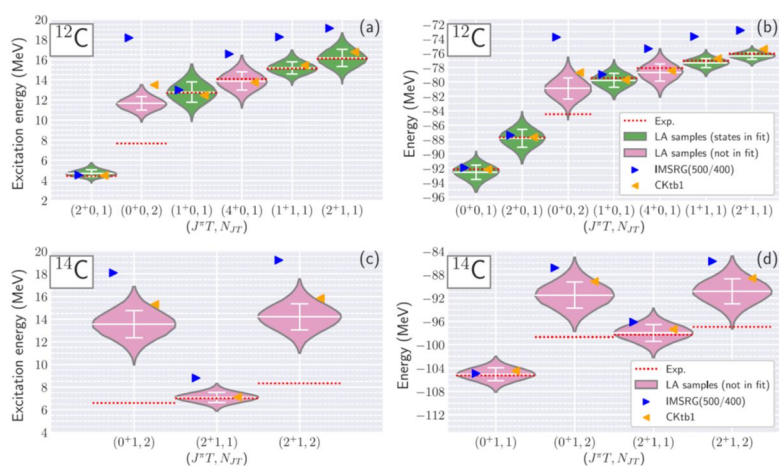


図 1 : (a) 炭素 1 2 の励起エネルギー (b) 炭素 1 2 のエネルギー (c) 炭素 1 4 の励起エネルギー (d) 炭素 1 4 のエネルギー 赤い点線は実験値、エラーバーとバイオリンプロットが理論値とベイズ統計による不定性を表す。青色の右向き三角は IMSRG 理論による結果、オレンジ色の左向き三角は CKPOT 相互作用による結果を示す。S. Yoshida, N. Shimizu, T. Togashi, and T. Otsuka, Phys. Rev. C 98, 061301(R) (2018) より。

この結果、オレンジ色の左向き三角は CKPOT 相互作用による結果を示す。S. Yoshida, N. Shimizu, T. Togashi, and T. Otsuka, Phys. Rev. C 98, 061301(R) (2018) より。

図 1 に、ベイズ統計を用いた不定性の評価を示す。例として、炭素 1 2、炭素 1 4 のエネルギー、励起エネルギーを示す。励起エネルギーに着目すると、第 1 励起 0^+ 状態 ($0^+, 0, 2$) 以外の状態は良く実験を再現しており、実験値は、パラメータ不定性から得られる不定性の誤差の範囲に収まっている。これは、p 殻模型空間の殻模型計算がこれらの状態の記述に適切であることを示す。一方、第 1 励起 0^+ 状態 ($0^+, 0, 2$) は、大きく理論の結果と実験値がずれている。この状態は、部分系である 2 陽子と 2 中性子がアルファクラスターを形成することが知られており、p 殻を模型空間とした殻模型計算が適切でないことを示している。このように、原子核殻模型計算にベイズ統計を導入することにより、理論模型の記述能力とその限界を示すことを可能とした。

さらに、先行研究として現象論的フィットのみから作られた Cohen-Kurath(CKPOT)相互作用による計算結果と、第一原理計算から求められた In-medium Similarlity Renormalization Group(IM-SRG)相互作用の結果との比較検討を進めた。CKPOT 相互作用においては、導入されていなかったパラメータの質量依存性が有用であることを示した。また、IM-SRG は系統的な実験値とのずれを示しており、改善の余地があることを示した。

この研究では、ラプラス近似によって多数のパラメータを変え、そのパラメータごとにハミルトニアン行列の対角化計算をおこなっている。この手法を中重核に適用すると、この対角化計算の計算量が莫大になるため、そのままでは不可能である。この問題を解決するため、Eigenvector continuation による近似を導入した。sd 殻核、pf 殻核に適用し、その近似の良さを評価した。(S. Yoshida and N. Shimizu, Prog. Theor. Exp. Phys. Accepted <https://doi.org/10.1093/ptep/ptac057>)

並行して、大規模並列計算に対応した原子核殻模型計算コード “KSHELL” の開発を進めた。固有値問題ソルバーとして、Thick-restart block Lanczos method を実装した。旧来使われてきた Lanczos 法ではハミルトニアン行列とベクトルの積に最も計算時間がかかっているが、複数のベクトルをまとめてブロックにして演算することにより、行列・ベクトル積を行列・行列積に変更し、計算の高速化を試みた。旧来手法に比べて、場合によっては 10 倍の高速化を果たした。(N. Shimizu, T. Mizusaki, Y. Utsuno and Y. Tsunoda, *Comp. Phys. Comm.* 244, 372 (2019).)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計21件（うち査読付論文 19件 / うち国際共著 8件 / うちオープンアクセス 4件）

1. 著者名 N. Shimizu, T. Mizusaki, Y. Utsuno and Y. Tsunoda	4. 巻 244
2. 論文標題 Thick-restart block Lanczos method in nuclear shell-model calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Comput. Phys. Comm.	6. 最初と最後の頁 372
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.cpc.2019.06.011	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshida Sota, Shimizu Noritaka, Togashi Tomoaki, Otsuka Takaharu	4. 巻 98
2. 論文標題 Uncertainty quantification in the nuclear shell model	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review C	6. 最初と最後の頁 61301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevC.98.061301	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshida Sota, Shimizu Noritaka	4. 巻 2022
2. 論文標題 Constructing approximate shell-model wavefunctions by eigenvector continuation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Progress of Theoretical and Experimental Physics	6. 最初と最後の頁 ptac057
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1093/ptep/ptac057	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計11件（うち招待講演 3件 / うち国際学会 4件）

1. 発表者名 清水則孝, 吉田聡太, 角田直文, 角田佑介, 大塚孝治
2. 発表標題 殻模型計算による中性子過剰pf 殻核の構造
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会 (オンライン)
4. 発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担 者	吉田 聡太 (Yoshida Sota) (10868665)	宇都宮大学・大学教育推進機構・特任助教 (12201)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------