

(続紙 1)

京都大学	博士 (理学)	氏名	樋沢規宏
論文題目	深層学習に基づくSkyrmeエネルギー密度汎函数の密度依存性及び原子核集団運動の解析		
<p>(論文内容の要旨)</p> <p>量子多体系において、基底状態の断熱的ダイナミクスを原理的には厳密に記述する密度汎関数理論(Density Functional Theory, DFT) は、電子系のみならず原子核系においても多大な成功を収めてきた。DFT において、ダイナミクスは粒子数密度のみに依存したエネルギー密度汎函数(Orbital-free Energy Density Functional, OF-EDF) により支配される。その一方で、実際の計算では、ほとんどの場合、粒子数密度以外の種々の密度にも依存したKohn-Sham 型のEDF (KS-EDF) が用いられてきた。現象論的に与えられたKS-EDF は様々な現象の再現に成功してきたものの、OF-EDFとの等価性の問題や粒子数が大きい場合における計算コストの問題を抱えている。</p> <p>またKS-EDF では、系を外場で制御し、最終的な結果としてエネルギーや粒子数密度を得るという理論構造を持つ。電子系ほど自在に外場を扱えない原子核系では、外場は数学的な道具の側面が強い。ここでは、外場を通して仮想的に原子核を変形させることで、核分裂などの変形ダイナミクスが調べられてきた。しかし、変形のさせ方には、外場の設計を通じて人間の強いバイアスが入り、多重極モーメントといった仮定された変形モードが現象の記述に用いられてきた。そのようなアプローチでは、核分裂の完全な記述はまだ成功していない。この“外場の呪い”は集団運動の記述において深刻な問題であり、人間のバイアスを排除した、ダイナミクスに基づく変形モードの導出法が求められる。</p> <p>本論文では、KS-EDF に起因した2つの問題の解決に向けて、深層学習に基づいたdata-derived アプローチによる解析を行なった。まずKS-EDFとOF-EDFの等価性と計算コストの問題に関して、電子系で開発されたランダムポテンシャルに基づくアプローチを原子核系に適用することで、Skyrme KS-EDFを再現するようなOF-EDF の構築に取り組んだ。10 層の隠れ層を持つneural network と教師データを用いて、^{24}Mgの核子数密度から対応する束縛エネルギーを推定するタスクを学習した。その結果、エネルギーの推定誤差は43 keVであり、実験データとの比較において許容できるほどに小さい、つまり、エラーの範囲内でSkyrme KS-EDFはOF-EDF と等価であることが示唆された。また、与えられた密度や外場からエネルギーを推定する時間は、従来のKS-EDF に基づく手法に比べ、10^5 倍から10^6 倍短い。この圧倒的な計算速度は、研究プロセスの短縮を可能にし、原子核構造研究を加速させ得る。</p> <p>次に、以上の^{24}Mgの研究結果により示唆されたSkyrme KS-EDF と等価なOF-EDF の存在に動機付けされ、DFT に基づく非経験的な集団座標の抽出を行なった。まず、低エネルギーの^{236}Uに関して、核子数密度と基底状態のエネルギーをランダムポテンシャルにより計算し、データセットを生成した。このデータをmulti-task learning を用いて、様々な次元の潜在変数に圧縮し、もとのデータを復元する際のエラーを調べた。その結果、僅か2次元の潜在変数で低エネルギーの^{236}Uのダイナミクスの大部分が特徴づけられることが明らかになった。一方で、多重極モーメントによる密度やエネルギーの推定タスクを考え、そのエラーを調べたところ、多重極モーメントがダイナミクスの情報をほとんど持たないことが明らかになった。以上より本研究は、集団座標を抽出する全く新しい手法を提案しただけでなく、“外場の呪い”により仮定されてきた従来の変形パラメータの問題点を、定量的に示すことに成功した。</p>			

(続紙 2)

(論文審査の結果の要旨)

樋沢規宏提出の本論文は、現在様々な分野で注目を集めている機械学習を用いて原子核構造の研究を進めるというもので、著者のオリジナリティに富むアイデアが複数提示されている。この論文では主に次の2つのことが研究されている。まず最初に、密度汎関数法の精神に基づいて密度分布のみをインプットとして原子核の基底状態エネルギーを計算できるかどうか、ということに関する議論が展開されている。密度汎関数法の精神に則れば、原子核のようなフェルミオン多体系の基底状態エネルギーは原理的には密度にのみ依存するエネルギー汎関数で記述できることになっている。ところが、現実的には、そのような汎関数を見つけることは殆ど不可能で、密度分布の他にも運動エネルギー密度、スピン軌道密度、対密度のような種々の種類の密度を用いて基底状態を記述するというような現象論的アプローチを取らざるを得ない。本論文では、ランダムに生成した外場のもとで原子核の基底状態を求め、その密度とエネルギーの関係を機械学習を用いて学習させることにより、密度分布のみをインプットとしてエネルギーを求めるプロトコルを構築することに成功した。これは密度汎関数法の精神を再確認するとともに、複雑な多体計算をしなくても密度を与えるだけで原子核のエネルギーを求められるというスキームを与えることができるようになったという意義を持つ。次に、深層学習を用いて、核分裂のような重い原子核の形状変化のダイナミクスが議論されている。通常、このような場合、原子核の4重極変形度のようなパラメータを座標の代わりに用いて形状変化を議論するが、そのような現象論的なパラメータは必ずしもダイナミクスを反映した最適なものになっているとは限らない。本論文では、ランダムな外場で求められた密度分布を画像解析の手法を用いて解析し、恣意性を排除した集団座標の抽出に成功した。集団運動をいかに抽出するのかということは、多体問題のなかでも最も難しい問題の一つとしてとらえられているが、機械学習を用いるとそれが容易に求められるという機械学習の威力を見せつけるような成果になっている。解析の結果、従来用いられてきた集団座標はあまりダイナミクスとはコンシステントにはなっていないということが明らかになった。

このように、本論文は機械学習を単なるフィッティングのツールとして使うのではなく、機械学習を原子核構造の理解を大きく進める手段として積極的に用いる方法を提示している。このような試みは世界的に見ても例はなく、今後、原子核構造論を大きく変えうるポテンシャルを持っている。2つのメインの議論は2本の独立な論文として Phys. Rev. C 誌に掲載済みである。どちらも著者の独創的なアイデアに基づき、これまでにない全く新しいアプローチになっている。

よって、本論文は博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。また、令和6年1月12日、論文内容とそれに関連した事項について試問を行った結果、合格と認めた。

要旨公表可能日： 年 月 日以降