

既知の観測量間の関係から別の観測量を効率的に予測する計算手法を開発

物理学研究で使われる数値計算では、一般に多数のパラメータ推定を含みます。本研究では、既知の観測量（計算結果）同士の関係に着目し、パラメータ推定を介さずに予測を行う新しい手法（MEP エミュレータ）を開発しました。これにより計算コストの大幅な削減と、効率的な不定性評価が実現できます。

物理学研究では、実験で得られたデータをもとに理論を調整し、まだ観測されていない現象を予測するというのが一般的な手順です。しかし現実の理論はとても複雑で、実験で直接測ることができない、多くの「パラメータ」と呼ばれる数値を推定した上で、別の現象を計算するという手順が必要になります。この作業は非常に計算量が多く、パラメータの不確かさが最終的な予測に及ぼす影響を調べるのも困難です。

本研究では、Multiparameter Eigenvalue Problem (MEP) と呼ばれる数理的な枠組みを利用した新しいエミュレータ（高速な近似モデル）を構築し、パラメータを使わず、すでに分かっている観測データ同士の関係から、別の観測量を直接予測する新しい計算手法を開発しました。

簡単な模型を使ってこの手法を検証したところ、従来の計算方法ではうまく扱えなかった複雑な振る舞いも、安定して再現できることが分かりました。さらに、実際の原子核の問題に応用し、酸素同位体のエネルギーを予測したところ、実験結果とよく一致する確率分布が得られました。この手法では大量の計算を短時間で繰り返すことができ、予測のばらつき（不確かさ）の評価も容易です。

本研究成果により、物理学研究においてこれまで大きな負担となっていたパラメータ推定の手順を省きつつ、効率よく物理現象を予測できる新しい道が開かれました。宇宙や物質科学など、この手法のさまざまな分野への応用が期待されます。

研究代表者

筑波大学計算科学研究センター

Hang Yu 研究員

宮城 宇志 助教

研究の背景

物理学の大きな目標の一つは、自然界の現象を理解し、まだ観測されていない結果を予測することです。そのためには、理論と実験を結びつける必要があります。しかし現代の物理理論は非常に複雑で、多くの「パラメータ」と呼ばれる不確実な数値を含んでいます。例えば原子核^{注1)}の研究では、陽子や中性子の相互作用を記述するために多数のパラメータが登場しますが、これらは直接測定できる量ではありません。そのため、実験データに合うようにパラメータを調整し、その結果を使って別の現象を予測する、という段階的な手順を踏みます。しかしながら、この方法にはいくつかの課題があります。まず、パラメータの数が多いほど問題が複雑になり、何度も試行を繰り返さなくてはなりません。また、異なるパラメータの組み合わせでも同じような結果が得られることがあり、どの値が正しいのか一意に決めることが難しい場合もあります。さらに、パラメータの不確かさが最終的な予測にどのように影響するのかを調べるには、多数の計算を繰り返す必要があります。これも大きな負担となります。一方で、実際に測定された観測量^{注2)}同士の間にはしばしば強い相関があることが知られています。しかし従来の計算方法は、こうした観測量同士の相関を直接利用するのではなく、あくまでパラメータを経由して間接的に扱うことが一般的でした。そこで本研究では、「パラメータに依存せず、観測量同士のつながりを直接使った計算手法」の開発を試みました。

研究内容と成果

本研究では、従来のようにパラメータを介して予測を行うのではなく、「観測量から観測量へ」と直接つなぐ新しい計算手法を開発しました。この方法では、Multiparameter Eigenvalue Problem (MEP、多パラメータ固有値問題)^{注3)} エミュレータ^{注4)}と呼ばれる数理的な枠組みを用いて、複数の観測量の関係を同時に扱います。そのためには、あらかじめ高精度な理論計算によって得られたデータを用いて学習を行う必要があります。今回、限られたデータから本質的な関係を抽出し、未知の観測量を高速に予測できる仕組みを構築しました(参考図)。また、計算の規模が大きくなりすぎないように、重要な情報だけを取り出して扱う工夫を取り入れました。

簡単なモデルを用いてこの手法を検証したところ、従来の MEP では数値的に不安定になりやすい場合でも、本手法は安定して正しい解を再現できることを確認しました。特に、粒子の基底状態エネルギー(最もエネルギーが低い状態)を求める場合などでは、複数の解が入り乱れることがありますが、このような複雑な状況でも目的とする物理量を適切に取り出せる点が大きな特徴です。さらに、本手法を実際の原子核の問題に応用し、酸素の同位体に対するエネルギー差を予測しました。その結果、限られたデータからでも先行研究で予測されていた計算結果、さらに実験結果と整合的な分布を効率よく得ることに成功しました。

本手法は、「何を入力として与えるか」を再編成することで、観測量を入力として別の観測量を求める逆問題(観測された結果から、その原因となるパラメータや別の物理量を推定する問題)を、順問題(パラメータを入力として与え、そこから観測量を計算する問題)と同様に扱うことができる点が大きな特徴です。また、大量の試行計算を高速に行えるため、予測値のばらつきや信頼性を調べる不確かさの評価も容易で、従来は時間的な制約により十分に行えなかった解析が、現実的な時間で実施できます。

このように本手法は、複雑な物理問題に対して効率的かつ柔軟に予測を行う新しい枠組みとして有効であることが示されました。

今後の展開

今後の展開としてまず期待されるのは、より複雑で大きな系への応用です。本研究では主に原子核を例にしましたが、同様の問題は物性物理や宇宙物理などさまざまな分野に存在します。観測量どうしの関係を直接扱うという考え方は汎用性が高く、さまざまな分野での応用が可能です。また、実験データや高精度の計算結果が蓄積されるほど、本手法の精度が高まっていくと考えられます。さらに、理論の近似やモデルの限界など、より厳密な不確かさの評価に用いることで、予測結果の信頼度をより明確に示せるようになります。

加えて、本研究で示された「順問題と逆問題を同じ枠組みで扱う」という視点は、他の計算手法や機械学習とも結びつく可能性があります。例えば、複数の異なるモデルや精度の異なるデータを組み合わせる手法や、時間発展を含む問題への拡張なども考えられ、物理現象の理解の仕方そのものを広げる基盤として発展していくことが期待されます。

参考図

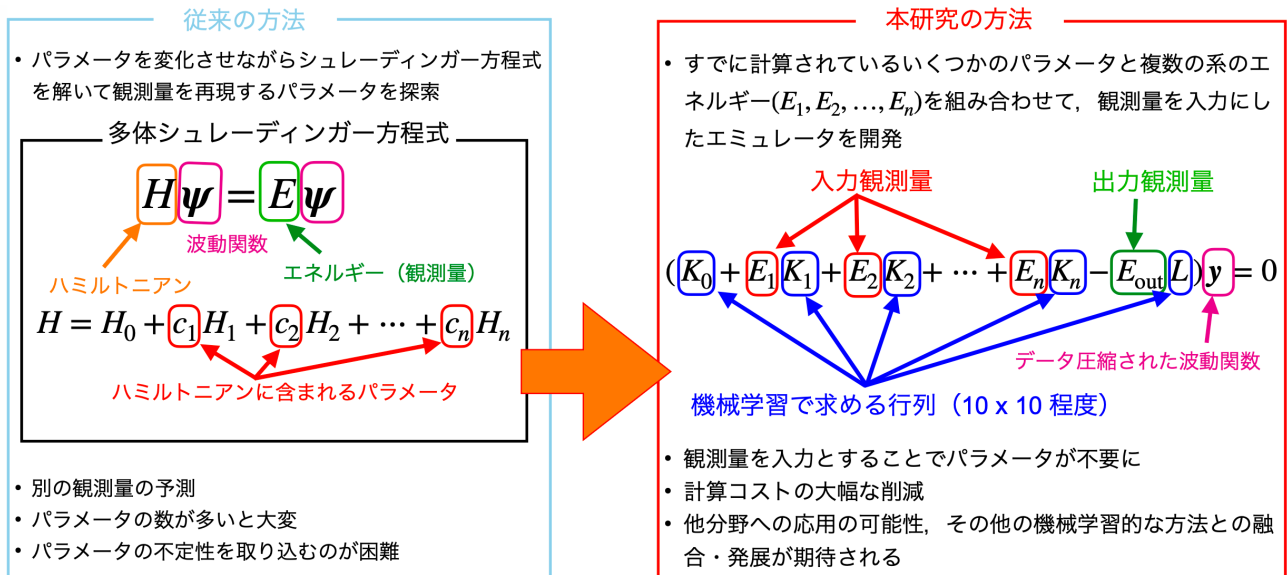


図 本研究の概要

原子核理論では、原子核のエネルギーを計算する際、代表的なアプローチの一つとして、多体シュレーディンガー方程式 (左図) を解く。その際、ハミルトニアン (系全体のエネルギーを表す関数) が複数のパラメータに線形に依存している場合、パラメータを変化させながらシュレーディンガー方程式を繰り返し解き、既知の観測量を再現するようにパラメータを推定するが、パラメータの数が増えると計算が困難になる。一方、本研究の手法 (右図) では、ハミルトニアンの代わりに、観測量を直接入力とした (パラメータを含まない) 線形方程式を用いる。すでに得られている計算結果データセットを機械学習させると、高速なエミュレータが構築され、計算コストを大幅に削減できる。

用語解説

注1) 原子核

原子の中心にある非常に小さな粒子の集まりで、陽子と中性子から成る。原子の質量のほとんどを担い、その性質はエネルギーなどの観測量を通じて理解される。本研究では、この原子核の性質を理論的に予測することを目的の一つとした。

注2) 観測量

実験や観測によって直接測定できる物理量のこと。原子核に関しては、エネルギー、半径、崩壊寿命などがあるが、今回はエネルギーを取り扱った。本研究では、ある観測量が変化すると、別の観測量も一定の傾向で変化する関係（相関）を直接利用して観測量を予測した。

注3) Multiparameter eigenvalue problem (MEP、多パラメータ固有値問題)

複数の変数や条件を同時に扱う、拡張された固有値問題（連立方程式の問題）。本研究ではこの枠組みを用いて、複数の観測量を、統一的な式に組み込んで表現した。

注4) エミュレータ

計算コストの高いシミュレーションの代わりに、計算コストが低く、結果を近似的に予測することができるモデルのこと。

研究資金

本研究は、JST ERATO プロジェクト（Grant No. JPMJER2304）の一環として実施されました。

掲載論文

【題名】 An Efficient Learning Method to Connect Observables

（観測量どうしを繋ぐ効率的な学習法の開発）

【著者名】 Hang Yu and Takayuki Miyagi

【掲載誌】 *Physical Review Letters*

【掲載日】 2026年5月19日

【DOI】 10.1103/33q9-76qp

問合わせ先

【研究に関すること】

宮城 宇志（みやぎ たかゆき）

筑波大学 計算科学研究センター 助教

URL: <https://wwwnucl.ph.tsukuba.ac.jp>

【取材・報道に関すること】

筑波大学計算科学研究センター 広報・戦略室

TEL: 029-853-6260

E-mail: pr@ccs.tsukuba.ac.jp