

2023 年度核データ部会賞

奨励賞

－ 機械学習を用いた核データ評価 －

北海道大学

理学院原子核理論研究室

渡辺 証斗

shoto@nucl.sci.hokudai.ac.jp

1. はじめに

核データは、原子炉の設計はもちろん、天体現象での核融合シミュレーション、放射線によるがん治療での被曝シミュレーションといった、工学、理学、医学をはじめとするさまざまな分野で用いられている。実際に用いられる核データには、用途に合わせたエネルギー範囲や核種に対して、精度の高い核反応情報が必要である。そのため、様々な分野の需要に応じた核データを作成することが求められている。しかし、核データの作成には大きな人的、時間的なコストが必要である。膨大な数の実験データを、信頼度や精度評価をもとに取捨選択し、核反応モデルを用いた数値計算結果に基づいて専門家がデータの補間、補外を行う必要があるためである。

こうした中、近年のデータサイエンスと機械学習の発達を背景に、核データ作成の大規模なコスト削減が期待されている。例えば、機械学習を用いて実験データから生成断面積を推定する [1]、核分裂における質量収率を予測する [2] といった試みが行われている。核データ評価に機械学習を導入することで、作成コスト削減が見込めるほか、核分裂収率のような見積もりに有効な計算法がまだ確立されていない物理量の推定も可能であると期待が寄せられている。しかし、すべての物理量において、実験データを直接統計処理し推定することは危険であることも事実である。特に、散乱断面積や反応断面積のような各種断面積に関しては、物理的な側面から数多くの理論モデルが考案され、それらモデルからおおよその値を見積もることができている。また、機械学習は学習させるデータ（訓練データ）に対して内挿の精度は高いが、外挿の精度は訓練データの少ない領域になるほど大幅に悪くなることが知られている。機械学習を用いて断面積を推定する際には、実験データだけではなく核反応模型の情報も組み込むことが必要だといえる。

このような背景から、私たちは、機械学習と核反応模型を組み合わせ、核反応模型のパラメータを機械学習によって最適化することで、核データの作成をすることを着想した。このような手法をとれば、物理法則に従った推定を行うことができ、実験データの少ないエネルギー領域でも精度の良い推定ができる。さらに、計算コストを削減し、需要に応じた核データをすばやく生成することが期待できる。その試みとして、機械学習の手法としてガウス過程回帰を、核反応模型計算コードとして CCONE [3] を採用し、それらを組み合わせた枠組みを開発した。この枠組みを用いて、核子-原子核弾性散乱の角度分布の実験データを再現するように、核反応模型のパラメータの最適化を行った。また、このようにして得られたパラメータの最適値を機械学習に与えることで、任意の入射エネルギーにおける断面積の予測を行った。本記事では、まず、核反応模型として採用したチャンネル結合模型と、機械学習の手法であるガウス過程回帰とベイズ最適化の概要を解説する。その後、今回作成したアルゴリズムが核反応模型のパラメータを最適化する様子を紹介する。最後に、核反応模型のパラメータの最適値を訓練データとして用い、パラメータの入射エネルギー依存性を推定を行った結果を紹介する。

2. 理論的枠組み

2.1 核反応模型

核子-原子核散乱における散乱波は、原子核内部で作られるポテンシャルを、入射した核子が通過する系をシュレディンガー方程式で解くことで求められる。しかし、原子核は入射された核子のエネルギーを吸収し励起状態になるため、原子核を通過する前後で核子が持つエネルギーの総計は保存されていない。よって、核子-原子核散乱による散乱波を計算するためには、原子核の形状を表現し、吸収の効果を考慮した複素ポテンシャルを用いてシュレディンガー方程式を解く必要がある(光学模型)。本研究ではチャンネル結合光学模型を用いた。

チャンネル結合光学模型における複素ポテンシャルは大まかに、実部中心力、クーロン力、L-S 力を示す実数部分、吸収の効果を表す虚数部分に分けることができる。クーロン力は入射粒子と標的核内部の電荷から生じるものであり、L-S 力は、相対運動の角運動量とスピンの間に発生するスピン軌道力に由来する。また、実部中心力の部分は、標的核を構成する核子と入射粒子の間に生じる核力に由来しており、複素ポテンシャルを構成する要素の中でも断面積に大きな効果を及ぼす。特に実部中心力の強さに対応する実部のポテンシャル深さは、各種断面積との感度が大きく、パラメータの値が少し変化するだけでも断面積の値が大きく変化する。このような特徴から実験データの再現や精度の評価には最適だと考えたため、今回は実部のポテンシャル深さを示すパラメータ V_R を調整、及び推定した。

また、原子核は入射した核子を取り込み複合核を形成することがある。複合核からはエネルギーを持った核子を放出することがわかっている。このプロセスも散乱断面積を計算する際に考慮しなければならないが、複合核反応の解析的な計算は困難なため、統計模型を用いて計算する。核子-原子核散乱の断面積を計算するために、核反応計算コードの1つである CCONE[3] を用いた。

2.2 ガウス過程回帰とベイズ最適化

ガウス過程回帰は機械学習の手法の1つであり、入力 x と出力 y のデータから、データを満たす $y = f(x)$ を求める「回帰問題」を解くものである。ガウス過程回帰は従来の回帰問題と異なる「非線形性」と「推定の信頼性を表す不確かさ」という2つの特徴を有する。この2つの特徴はガウス過程回帰の手法に由来する。従来の回帰問題は、関数形を仮定し、与えられたデータに合うように関数形を構成する係数を調整することで解いている。一方でガウス過程回帰は、訓練データから任意の入力 x における出力 y の値が取りうる値の条件付き確率を計算することで推定を行う。推定のイメージとして図1を見ていただきたい。ガウス過程回帰では各入力 x における出力 y が取りうる値の確率の正規分布の平均値と分散を与える。図1の底面における黒実線は平均値に対応し、底面の青く塗られた領域は分散 (1σ) に対応している。そのため、特定の入力 x (図1においては $x=-1$) における出力 y の値は、図1の垂直方向に描かれている正規分布のようになる。この手法を用いれば関数の推定に関数形を仮定する必要がなくなり、非線形な関数の推定も行うことが可能である。また、推定の結果は何かしらの関数だけではなく、図1のように不確定性を必ず伴う。

ベイズ最適化はガウス過程回帰の推定結果に基づいて関数の最小値を与える入力 x の値を探す手法である。ガウス過程回帰の推定によって与えられた正規分布の平均値と分散の値をもとに、次に調査すべき入力 x の値を求める、指定された入力 x で出力 y の値を求める、推定の結果をアップデートする、という手順を繰り返すことで関数の最小値を与える入力 x の値を求めることができる。

本記事では核子-原子核散乱、弾性散乱の角度分布の実験値を再現する複素ポテンシャルの実部の深さを示すパラメータ V_R の最適値をベイズ最適化で求める様子を紹介する。パラメータ V_R の最適化を行うために、CCONEによる計算値と実験値とのずれを定量化する必要がある。しかし、弾性散乱の角度分布は $10^3 \sim 10^0$ mb/sr と広い範囲で値を持つため、核データ評価でよく使われている χ^2 値の解析ではデータセット全体を考慮することはできず、断面積の値が大きくなる前方角に合わせる傾向が強くなってしまう。この問題を避けるために、我々は以下のような評価関数を用いた。

$$f(x) = \sum_i \left(\frac{\sigma_{exp}^{(i)}}{\Delta\sigma_{exp}^{(i)}} \log_{10} \frac{\sigma_{th}^{(i)}(x)}{\sigma_{exp}^{(i)}} \right)^2 \quad (1)$$

ここで、 $\sigma_{exp}^{(i)}$, $\Delta\sigma_{exp}^{(i)}$, $\sigma_{th}^{(i)}$ はそれぞれ、実験値、実験の誤差値、CCONEによる計算値である。もし実験値とCCONEによる計算値が完全に一致した場合、評価関数は0になり、逆に実験値と計算値のずれが大きくなると評価関数の値は大きくなる。この評価関数を最小にする値をベイズ最適化を用いて求めれば、実験データをもっともよく再現する V_R を求めることができる。

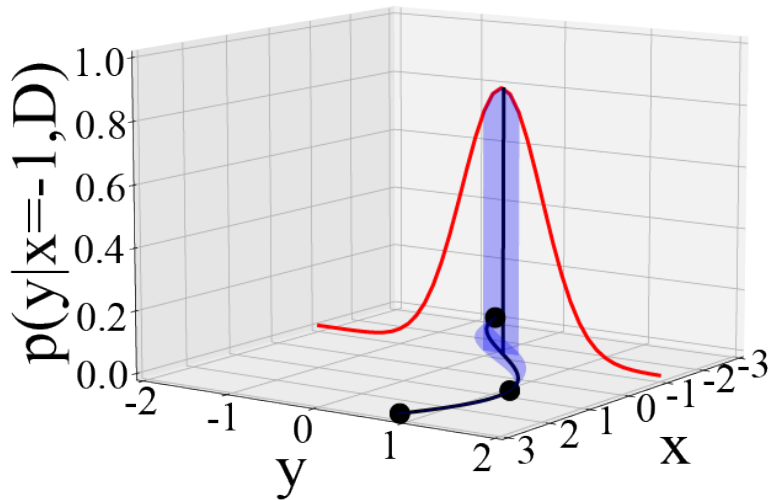


図 1: ガウス過程回帰のイメージ。底の x - y 平面は黒い点を訓練データに与えてガウス過程回帰で推定をした結果。黒線と青く塗られた領域はそれぞれ、推定の平均値と分散 (1σ) を表している。訓練データ (D と表現している) が与えられた時、指定した x (図中では $x=-1$) における y の値が取る条件つき確率を垂直方向の図のような正規分布で与える。

3. 結果

3.1 最適化の様子

ベイズ最適化を用いてパラメータ V_R の最適化を行った。 ^{58}Ni 、中性子を 7 MeV で入射したときの弾性散乱の角度分布の実験値 [4] を再現した例を通して最適化の様子を紹介する。まず、 V_R の値を数個、適当に選び、各 V_R を使って弾性散乱の角度分布を計算する。今回の例だと、 $V_R = 40, 50, 60$ MeV の値が選ばれた。実際に、それぞれの V_R の値を使って計算した角度分布が図 2 の灰色の実線と破線の 3 本である。ここで使われた V_R の値は適当に選ばれたため、いずれの計算値も実験値を十分に再現しているわけではない。 V_R の値と実験値の再現度の関係を調べるために、それぞれの V_R における計算値と実験値とのずれを、式 (1) の評価関数を使って計算する。こうして、入力： V_R の値、出力：評価関数の値、のデータを 3 組用意することができた。次に、こうして得られたデータをガウス過程回帰に与えて、任意の V_R における評価関数の値を推定する。実際に推定した結果が図 3 の (a) である。図 3(a) の白抜きの点はガウス過程回帰に用いた訓練データであり、黒線が推定の平均値、青く塗られている領域がガウス過程回帰の推定の分散であり、正規分布における 1σ の領域に対応する (図 1 をイメージしてもらえばわかりやすい)。この推定の結果をもとに、次に計算すべき V_R の値を決定するのがベイズ最適化である。具体的には、次の条件を満たす V_R の値を選ぶ。

- 1, 推定の平均値が小さいところ。図 3(a) でいえば、黒線の値が 0 に近い値を取る V_R
- 2, 推定の分散が大きいところ。図 3(a) でいえば、青い領域が大きい V_R

評価関数を最小にする V_R の値を探しているため、条件 1 はすぐに理解できる。条件 2 は、その条件に推定の不定性を消すように V_R を選ぶためのものである。たとえ推定の平均値が

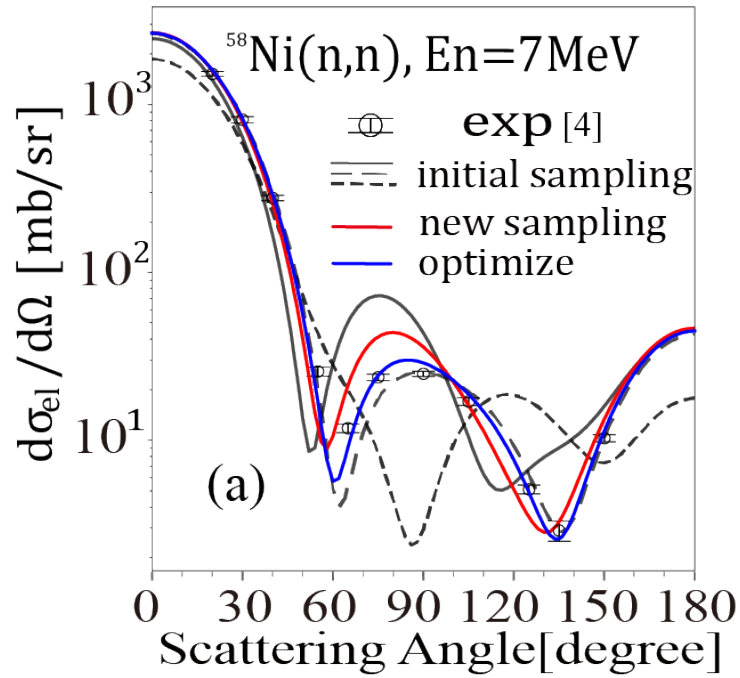


図2: ベイズ最適化を行う際に選ばれた V_R の値を使って計算した弾性散乱の角度分布。標的核は ^{58}Ni 、入射粒子は中性子、入射エネルギーは 7 MeV。灰色の実線と破線は $V_R=40,50,60$ MeV、赤実線はベイズ最適化によって最初に選ばれた V_R 、青実線は最適化した V_R を使って計算した。実験値には [4] を使用。

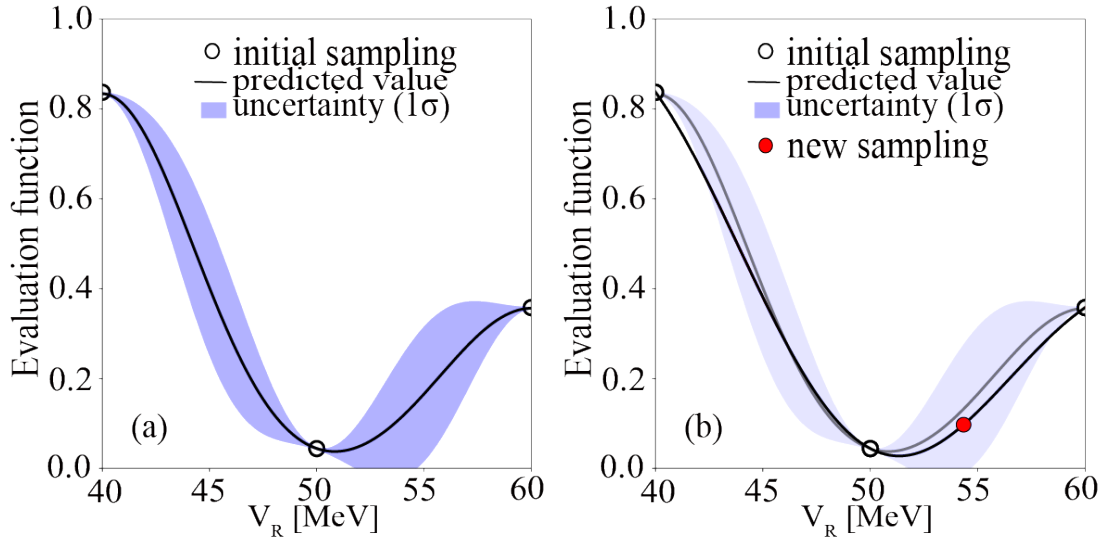


図3: 最適化の様子。白抜き点は最初に与えられた訓練データ、赤点はベイズ最適化で選ばれた V_R を計算して獲得した新しい訓練データ、黒実線と青く塗られた領域はそれぞれガウス過程回帰による推定の平均値と分散 (1σ)。 (a) は最初に与えられた3点の訓練データから推定した結果で、 (b) は新しく獲得したデータを加えた4点の訓練データから推定をした結果。変化が見やすいように (b) には (a) の推定結果を薄く描画している。4点の訓練データを用いたときの推定の分散も描画しているが、与えるデータ数が増えたことにより見えなくなるほど小さくなった。

さほど小さくなくても、推定の分散が大きい場合、その V_R においては、その分評価関数を小さくする可能性がある。そのため、上記の2つの条件を同時に考慮し、次に計算するべき V_R の値を決める。今回の例では、 $V_R = 54.34 \text{ MeV}$ が選ばれた。実際に、 $V_R = 54.34 \text{ MeV}$ を使って計算した断面積が図2の赤線である。また、この赤線と実験値とのずれを評価関数を使って計算したものが図3(b)の赤点に対応する。こうして、最初に用意した3点に加えて、赤点を加えた計4点のデータを用意することができた。この4点をガウス過程回帰に与えて、推定の結果をアップデートした。その結果が図3(b)の赤点を通る黒線である。実際は推定の分散も図に描き込まれているが、ガウス過程回帰に与えるデータが増えたことで推定の不定性が見えなくなるほど小さくなった。

この後は、アップデートされたガウス過程回帰の推定結果をもとに、条件1, 2を満たす次に計算するべき V_R の値を決めて、断面積と評価関数を計算する、という操作を繰り返す。図3のアップデート前後から分かる通り、一般的にガウス過程回帰の推定の不確定性は与えるデータの数が増えるほど小さくなる。そのため、この動作を繰り返すと、推定値を最小にする V_R の値は収束していく。実際に、この操作を十分な回数行って求めた V_R の最適値を使って計算した弾性散乱の角度分布が図2の青実線であり、実験値をよく再現していることが理解できる。

3.2 推定の結果

3.1で紹介した手法を用いれば、実験データのある入射エネルギーにおいては V_R の最適値を求めることができる。だが、 V_R は入射エネルギーの大きさに伴い値が変化するので、実用化の際には実験データのない入射エネルギーにおける V_R の最適値を求めることも必要である。従来の核反応模型を提唱する論文では、複素ポテンシャルの関数形を現象論的、理論的に決定し、その関数形を構成するパラメータを実験データを再現するように決定する手法を取っている。しかし、関数形を仮定せずにガウス過程回帰を使って推定を行えば、従来の手法で決定した核反応模型よりも精度よく V_R の入射エネルギー依存性を推定することが期待できる。

先ほどの手法を用いて、 ^{58}Ni の中性子入射における 5,6,7,14,14.7,17 MeV での弾性散乱角度分布の実験値に対して V_R の最適値を求めた。こうして得られた最適値をガウス過程回帰に与えて、任意の入射エネルギーにおける V_R の最適値を推定する。その結果が図4である。図4の推定結果がどれだけの精度なのかを確かめるために、ガウス過程回帰をする際に訓練データには用いていない入射エネルギーでの V_R の推定値で断面積を計算し、実験値と比較した。その結果をまとめたものが図5である。図4の推定結果は不確定性を有しているため、この不確定性が断面積にどれだけ影響を与えるか確認するために、図4の色塗られた領域で取りうる V_R の値に対応して、断面積が取りうる範囲を図5に描画した。図5の2つの絵からわかる通り、推定した V_R の値を使って計算した断面積は実験値を十分な精度で再現できている。また、推定の不確定性に対応する領域まで考慮すると、ほぼすべての実験値が不確定性によって取りうる範囲に収まっていることが理解でき、ガウス過程回帰によって十分な精度で弾性散乱の角度分布を推定ができたことが分かる。

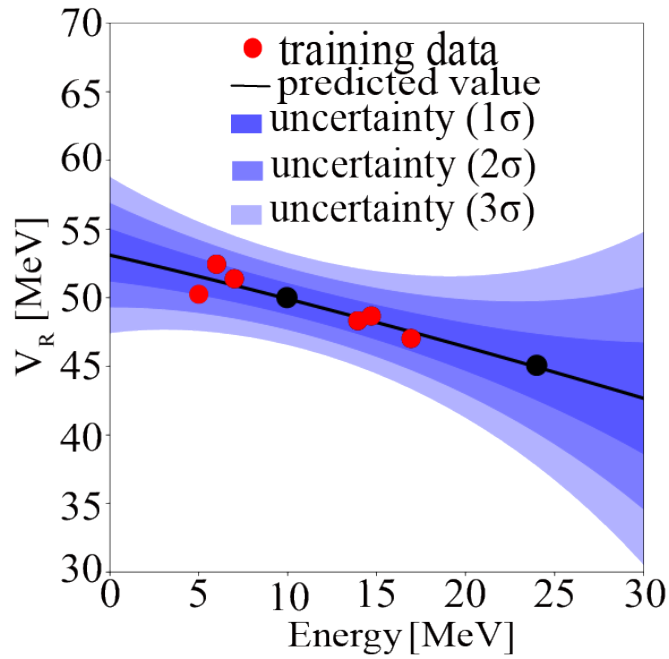


図4: ガウス過程回帰による任意のエネルギーにおける V_R の最適値の推定結果。赤点が訓練データ、黒実線と青く塗られた領域がガウス過程による推定の平均値と分散（色の濃いものから順に 1σ 、 2σ 、 3σ ）。訓練データは、標的核が ^{58}Ni 、入射粒子が中性子の弾性散乱の角度分布の実験データを最適化することで獲得した。

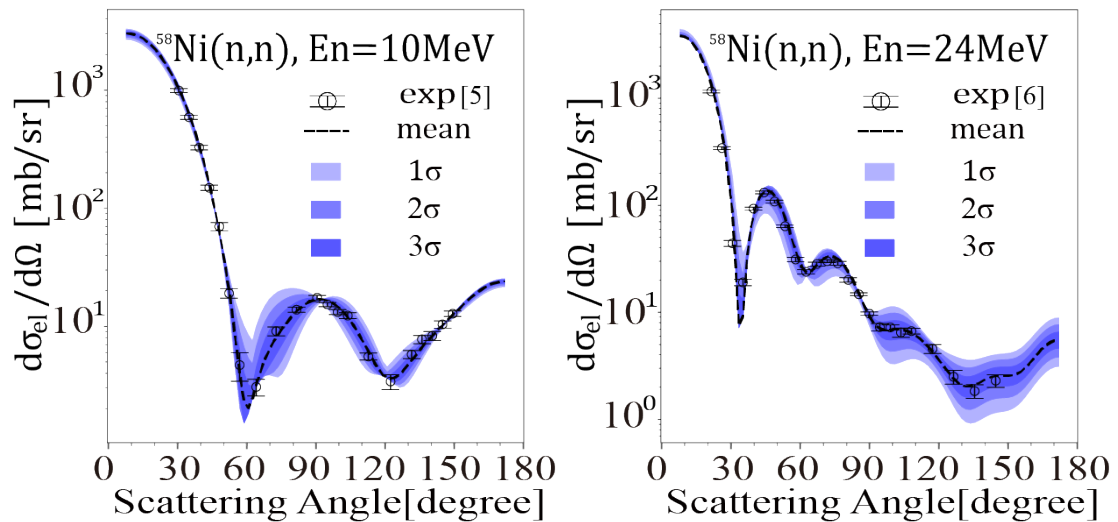


図5: ガウス過程回帰による V_R の推定結果を用いて計算した、弾性散乱の角度分布。いずれも標的核は ^{58}Ni 、入射粒子は中性子。10 MeV、24 MeV ともに、図4で描画されている V_R の平均値を使って計算しており、図4の $1\sim 3\sigma$ に対応する領域も計算して図中に表している。実験値には [5] と [6] を使用。

4. まとめと将来の展望

本記事では、核反応模型と機械学習を組み合わせ、核子-原子核散乱の角度分布の実験値を再現するようにポテンシャルのパラメータを最適化する手法、およびその様子を紹介した。

また、実験値を再現するように最適化したポテンシャルのパラメータ (V_R) の値を複数個用いることで、任意のエネルギーにおけるパラメータの最適値を推定し、その精度を確認した。本記事では、手法の実用性を確かめるために、ポテンシャルのパラメータを V_R のみを最適化、及び推定した。だが、実用化にあたって、ポテンシャルを構成するすべてのパラメータに対してこの操作を行う必要があり、その操作に対しても手法の実用性を確かめる必要性がある。また、ポテンシャルは、入射エネルギーのほかに、標的核の核子数や入射粒子の種類に対しても変化する。今後は、それら依存性も考慮することで、技術的に実験値の用意できない入射エネルギー、標的核、入射粒子における断面積を推定することを目指す。

参考文献

- [1] H. Iwamoto et al.: “G-HyND: a hybrid nuclear data estimator with Gaussian processes”, J. Nucl. Sci. Technol. 2022; 59: 334–344.
- [2] A. E. Lovell et al.: “Quantifying uncertainties on fission fragment mass yields with mixture density networks”, J. Phys. G. 2020; 47: 114001.
- [3] O. Iwamoto et al.: “The CCONE code system and its application to nuclear data evaluation for fission and other reactions”, Nucl. Data Sheets. 2016; 131: 259–288.
- [4] I. A. Korzh, et al.: “The angular distribution of neutrons elastically and idealistically scattered by Ni-58,60,62,64”, Proc. of 5th All Union Conf. on Neutron Physics, Kiev, 15-19 Sep. 1980, Vol. 1, pp.314-319.
- [5] P. P. Guss, et al.: “Cross sections and analyzing powers for fast-neutron scattering to the ground and first excited states of ^{58}Ni and ^{60}Ni ”, Nucl. Phys. A, 1985; 438: 187-211.
- [6] Y. Yamanouti, et al.: “Elastic and inelastic scattering of 24 MeV neutrons from even isotopes of Ni”, Proc. of Internat. Conf. on Nuclear Cross Sections for Technology, Knoxville, 22-26 Oct. 1979, pp.146-149.