

新博士誕生

私の学位論文と研究を通して学んだこと

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

2025年3月に北海道大学理学院宇宙理学専攻を修了し、博士（理学）の学位を取得しました。このたび「新博士誕生」執筆の機会を頂いたので、私の研究、研究室生活及び研究中に感じた苦悩についてご紹介します。

2. 研究内容

2.1 研究の背景

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ます。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す。

近年のデータサイエンスと機械学習の発達を背景に、機械学習を用いて核データ評価をする研究が行われ始めました。いくつかの先行研究（例として [1], [2]）では十分な精度で核データ評価ができることが報告されています。しかし、先行研究の多くは、機械学習に実験値のみを学習させているため、最終的な推定結果は物理的な背景を持たず、信頼性に欠けています。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、物理法則に従った高精度な核データ評価を機械学習を用いて行う事を着想しました。この手法をとれば、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と考えました。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ました。

2.2 研究手法

この研究は大きく、核反応模型と機械学習の2つに分けられます。核反応模型にはチャンネル結合光学模型を採用し計算コードにはCCONEを用いました。CCONEにおける計算の中核になっているのが光学ポテンシャルです。光学ポテンシャルは入射粒子が標的核から受けるポテンシャルを記述したものです。本研究では、CCONEによる計算結果が実験データを再現するような光学ポテンシャルを構成するパラメータの値を機械学習で求める事を目指します。機械学習には、ガウス過程回帰を用いました。ガウス過程回帰は、回帰問題の1種であり、(入力、出力)のデータを与えることで、与えられたデータを満たす関数を推定します。例えば、 $textbf{x}$ を入力、 y を出力として、 $(\mathbf{x}(=x_1, x_2) : y) = ((1, 1) : 3), ((1, 2) : 5), ((2, 1) : 6)$ と3つのデータが与えられたとします。すると、 $\mathbf{x}(=x_1, x_2)$ と y の関係を示す関数は $y = x_1^2 + 2x_2$ ではないかと予測できます。このように、与えられたデータから条件を満たす関数を求めるのが回帰問題になります。従来の回帰問題の解法には、関数形を仮定し、入力したデータを満たすように関数を形成する係数を調整する方法が用いられます。ですが、ガウス過程回帰では、関数形を仮定せずに推定を行います。そのため、複雑な非線形関係が存在する場合でも、特定の関数モデルに依存せず回帰を行えるという利点があります。また、ガウス過程回帰の特徴として、推定結果が必ず誤差を持つという点が挙げられます。この特徴を生かし、より少ない手数で関数の最小値を与える入力を探す手法がベイズ最適化です。私たちの研究では、まず、ベイズ最適化を用いて既知の実験データを再現するような光学ポテンシャルのパラメータの最適値を求めます。この結果はSection 2.3で紹介します。次に、この操作を複数の実験データに対して行い、得られたパラメータの最適値をガウス過程回帰に与えることで任意の反応におけるパラメータの最適値を求めました。機械学習にするデータを $(\mathbf{x}(=x_1, x_2, \dots) : y) = (\text{反応を決定する物理量}(= \text{入射エネルギー、標的核の陽子数、}\dots) : \text{パラメータの最適値})$ として任意の反応における最適な出力値をガウス過程回帰で推定します。この結果についてはSection 2.4で紹介します。

2.3 結果1：パラメータ最適化による断面積の再現

ベイズ最適化を用いて光学ポテンシャルのパラメータ V_R の値を最適化しました。 ^{58}Ni 標的に、7 MeVで中性子を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します。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します。今回の例では、 $V_R=40, 50, 60$ MeVの値が選ばれました。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1の灰色の実線と破線の3本です。ここで使われた V_R の値は適当に選ばれたので、いずれの計算値も実験値を十分には再現していません。 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で示す評価関数を使って計算します。

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

σ_{exp} は実験値、 $\Delta\sigma_{exp}$ は実験の誤差値、 σ_{th} はCCONEによる計算値を意味しています。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ました。

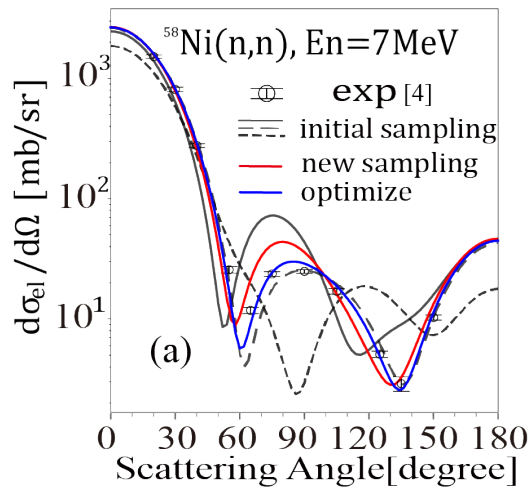


図1 ベイズ最適化を行う際に選ばれた V_R の値を使って計算した弾性散乱の角度分布。標的核は ^{58}Ni 、入射粒子は中性子、入射エネルギーは7 MeV。灰色の実線と破線は $V_R=40, 50, 60$ MeV、赤実線はベイズ最適化によって最初に選ばれた V_R 、青実線は最適化した V_R を使って計算。実験値には [4] を使用。

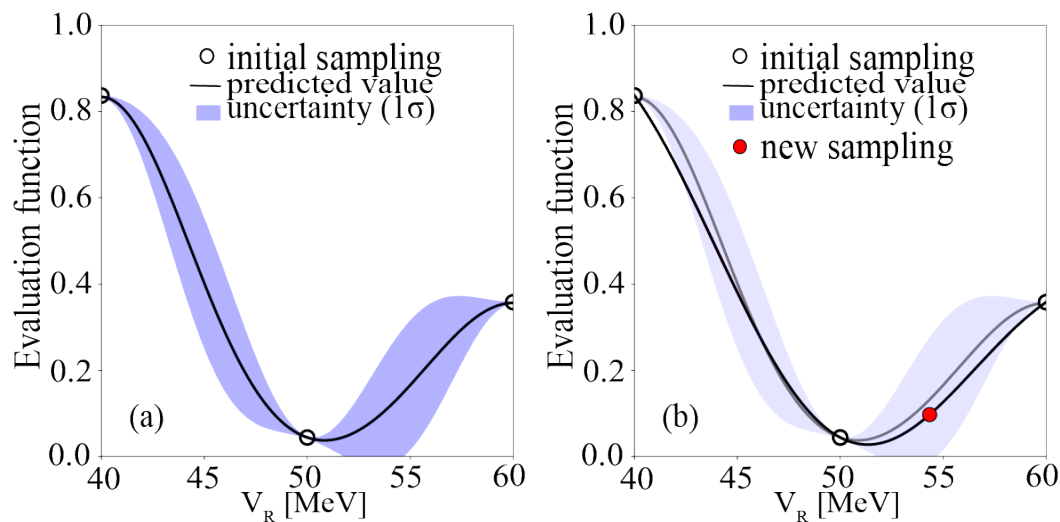


図2 最適化の様子。白抜き点は最初に与えられた訓練データ、赤点はベイズ最適化で選ばれた V_R を計算して獲得した新しい訓練データ、黒実線と青く塗られた領域はそれぞれガウス過程回帰による評価関数の推定値の平均と分散 (1σ)。 (a) は最初に与えられた3点の訓練データから推定した結果で、 (b) は新しく獲得したデータを加えた4点の訓練データから推定をした結果。変化が見やすいように (b) には (a) の推定結果を薄く描画。

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します。実際に推定した結果が図2の (a) です。図2(a)の白抜き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誤差であり、正規分布における 1σ の領域に対応します。この推定の結果をもとに、次に計算するべき V_R の値を決定するのがベイズ最適化です。具体的には、次の条件を満たす V_R の値を選びます。

1, 推定の平均値が小さいところ。図2(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 2(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 はすぐに理解できます。条件 2 は、推定の不定性を小さくするように V_R を選ぶためのものです。推定の分散が大きい V_R に対して訓練データが与えられることで、その V_R 付近における評価関数の振る舞いがより明確になり、結果として推定の不定性を小さくすることができます。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 の値を決めます。今回の例では、 $V_R=54.34$ MeV が選ばれました。実際に、 $V_R=54.34$ MeV を使って計算した断面積が図 1 の赤線です。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 2(b) の赤点に対応します。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ました。この 4 点をガウス過程回帰に与えて、任意の V_R に対する評価関数の推定結果を更新しました。その結果が図 2(b) の赤点を通る黒線です。

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します。図 2 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定性は与えるデータの数が増えるほど小さくなります。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 の値は収束していきます。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 1 の青実線で、実験値をよく再現していることが理解できます。

2.4 結果 2：パラメータ推定を利用した断面積の予測

Section 2.3 で紹介した手法で獲得した光学ポテンシャルのパラメータの最適値を用いて、そのパラメータが持つエネルギー依存性を推定しました。 ^{58}Ni の中性子入射における弾性散乱角度分布の実験値に対してパラメータ V_R のエネルギー依存性を推定した例を紹介します。入射エネルギー 5, 6, 7, 14, 14.7, 17 MeV の実験データを用意し、それらに対する V_R の最適値を Section 2.3 の手法を用いて求めました。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 の最適値を推定します。その結果が図 3 です。図 3 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 10, 24 MeV での V_R の推定値で断面積を計算し、実験値と比較しました。その結果をまとめたものが図 4 です。図 3 の推定結果は不定性を有しているため、この不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 3 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 4 に描画しました。図 4 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ます。また、推定の不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定性によって取りうる範囲に収まっていることが分かります。本記事では割愛しますが、この手法を用いて任意のエネルギー、任意の陽子数における V_R の最適値を推定し、その推定値を用いて断面積を計算することで、十分な精度で実験値を再現できることを確認できています。今後、この手法をベースに、推定する依存性の種類と最適値の推定を行うパラメータの数を増やすことで、既知の実験データから実験が行われていない反応の断面積の推定を試みます。

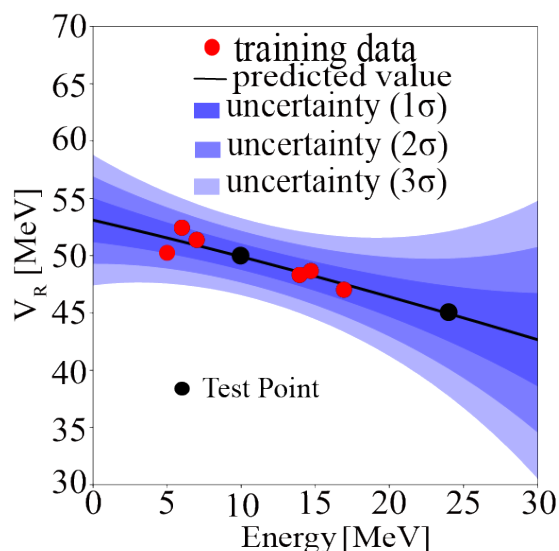


図3 ガウス過程回帰による任意のエネルギーにおける V_R の最適値の推定結果。赤点が訓練データ、黒実線と青く塗られた領域がガウス過程による推定の平均値と分散（色の濃いものから順に 1σ 、 2σ 、 3σ ）。

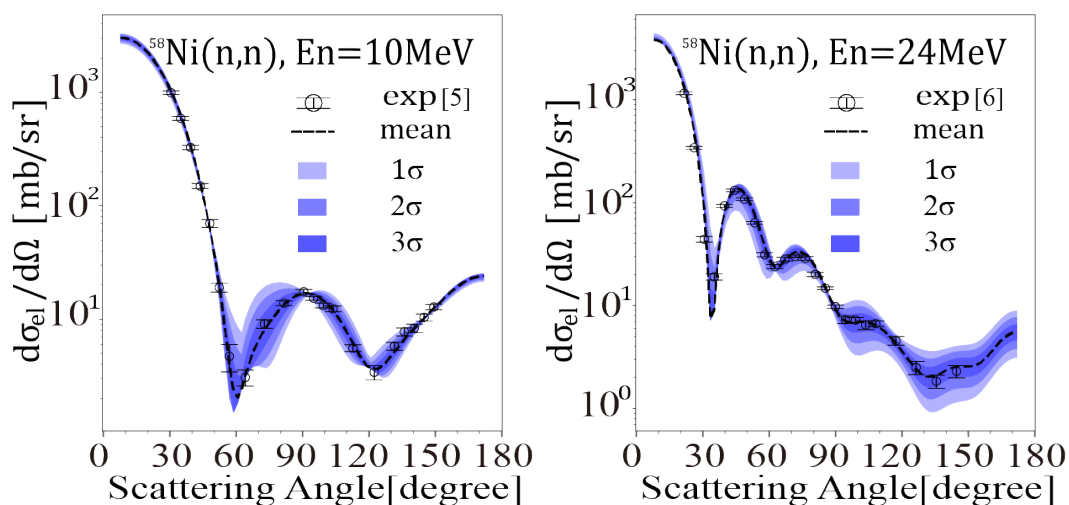


図4 ガウス過程回帰による V_R の推定結果を用いて計算した、弾性散乱の角度分布。いずれも標的核は ^{58}Ni 、入射粒子は中性子。10 MeV、24 MeV ともに、図3で描画されている V_R の平均値を使って計算しており、図3の $1\sim 3\sigma$ に対応する領域も計算して図中に表しています。

3. 研究室生活と研究における苦悩

私が所属していた北大の原子核理論研究室は入学当初、木村真明さんと堀内渉さんを中心にした研究室で、AMD を利用した原子核の構造や核反応の計算を行っていました。指導者もさることながら優秀な先輩方も多く、研究室の会議で使われる大部屋（コロキウム室と呼んでいました）や個人の部屋で議論が飛び交い、部屋を訪れるとホワイトボードに議論の跡

がよく残っていました。研究室には独特な文化があり、外部からゲストが来た時、花見、忘年会と何かと理由をつけてパーティをしていたのですが、とにかくホルモンを食べていました。居酒屋などで食事をすることもありましたが、外でバーベキューするなら味付けホルモン、研究室で料理するならもつ鍋、という暗黙の決まりがありました。なぜそのような文化が生まれたのか、詳細は私も知りません。そんな少しだけ不思議な研究室でしたが、普段議論を交わす真剣な先生方、先輩方がパーティで騒いでいる姿を見て、オンオフ切り替えの重要性を知りました。

私の研究テーマは「機械学習と核反応模型を組み合わせる核データを作る」といったものです。この研究テーマは、先ほど紹介した研究室でメインに行われている研究テーマの中には含まれていない、異質なテーマでした。交流のあった北大の核データセンターでも、研究のメインは実験なので、核データ評価自体は知識はあっても専門ではありません。そして何より、核反応模型を利用している方はいても、機械学習に精通している人は一人もいませんでした。そのため、ガウス過程回帰のコンセプトや計算手法などを、書籍やネットの記事を読み込んで必死に独学することになりました。ベイズ推定に基づいた機械学習の手法はコンセプトの時点で難解な事もあり、書いていることが理解できなかつたり、解釈が間違っていたことに後で気づき内容を最初から見直す、なんてことを何度も繰り返していました。結果的に内容を正しく理解するのに半年くらいかかりました。

また、研究分野が複数の分野に跨っているために、計算中に起きた問題の原因究明が容易ではありませんでした。期待していた計算結果と違う結果が得られた時、そもそも行った手法では期待した結果が得られないのか、どこかで問題が起きているのか、もし問題が起きている場合は核反応模型の部分なのか、機械学習の部分なのか、この2つをつなぎ合わせるスクリプトの部分なのか調べる必要があります。そのため、原因の究明と解決に時間がかかることが多くありました。ですが、研究を続けているうちに、それぞれの部分が起こす不具合の特徴が分かるようになり、原因究明にかかる時間が短くなっていきました。どこで不具合が起きているかを確かめる手法もいくつか学習し、見たことのない不具合が起きても比較的対処が楽になっていきました。

このテーマで研究を始めて苦労したことは他にもありますが、苦労とは別に居心地の悪さを感じることは何度かありました。研究室内でも研究会でも似たような研究をしている人が少なかったためです。研究室のメンバー内で研究会に向けた発表の練習している時も「自分がある研究室は本当にここで合っているのだろうか？」と思うこともありましたが、研究と発表の回数を重ねる内に、だんだん自分がやっている研究が認知されていき、その居心地の悪さも消えていきました。Summer Schoolで私がした発表を聞いてくださった方には別の研究会で、「名前は覚えてなかったけど研究内容聞いて、そういえばこんな研究している人があるのを思い出した」と言われたりもしました。博士2年の頃からは、僕の研究と一致しないまでも機械学習を活用する流れが研究室の中でも見られるようになりました。このあたりから、研究テーマは少し浮いていると思っても気にならなくなりました。

苦労したことや、複雑な気持ちになった時も数々あり、おそらく中にはこれからも何度か直面するかもしれない問題もあると思います。でも振り返ってみると、それらは問題解決の能力や自信の向上につながりました。ですので、ただ辛い、居づらい思いをしたわけでは無

かったのかなと今は思います。この経験を糧にこれからも頑張っていきたいと思っています。

4. おわりに

少しでもこの記事が、読んでくださった皆様のお役に立てば幸いです。また、要領の悪い私が無事に博士号を取得することができたのは、共同研究者である木村真明教授、湊太志准教授、岩本信之教授、吉田聡太准教授をはじめ、多くの先生方、先輩方、そして研究室や研究会でお世話になった皆様のご支援のおかげです。この場をお借りして、心より感謝申し上げます。

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(3):334–344.
- [2] A. E. Lovell, et al. :”Quantifying uncertainties on fission fragment mass yields with mixture density networks”. J. Phys. G. Nucl. Part. Phys. 2020;47(11).
- [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 Inelastically Scattered by Ni-58,60,62,64”. Sov. At. Energy. 1981;50:359–362.
- [5] P. P. GUSS, et al. :”Cross Sections and Analyzing Powers for Fast-Neutron Scattering to the Ground and First Excited States of 58Ni and 60Ni”. Nucl. Phys. A. 1985;438:187
- [6] Y. Yamanouti, et al. :”Elastic and inelastic scattering of 24 MeV neutrons from even isotopes of Ni.”. Conf.on Nucl.Cross Sections F.Techn.,Knoxville 1979, p.146