

企画セッション（核データ部会主催）  
「先端データサイエンスの核データへの適用」

### (3) 核データ評価研究及び高エネルギー粒子輸送計算への機械学習の適用

日本原子力研究開発機構 原子力科学研究部門

原子力基礎工学研究センター

岩元 大樹

[iwamoto.hiroki@jaea.go.jp](mailto:iwamoto.hiroki@jaea.go.jp)

#### 1. はじめに

近年、機械学習を用いた技術が注目され、様々な分野で応用されている。著者は機械学習の一種であるガウス過程 (Gaussian process) [1] に着目し、その枠組みで核データを生成する手法を開発した [2]。本稿ではこの手法の概要と核データ生成への適用例を紹介するとともに、本手法の高エネルギー粒子輸送計算への適用の可能性について述べる。

#### 2. ガウス過程による回帰

$N$  個のエネルギー点  $\hat{\mathbf{x}} = \{\hat{x}_1, \hat{x}_2, \dots, \hat{x}_N\}$  に対して不確かさを含んだ断面積  $\hat{\mathbf{t}} \pm \delta \hat{\mathbf{t}} (= \{\hat{t}_1 \pm \delta \hat{t}_1, \hat{t}_2 \pm \delta \hat{t}_2, \dots, \hat{t}_N \pm \delta \hat{t}_N\})$  が与えられているとき、新たに  $M$  個のエネルギー点  $\hat{\mathbf{x}}_* = \{\hat{x}_{*1}, \hat{x}_{*2}, \dots, \hat{x}_{*M}\}$  に対する断面積  $\hat{\mathbf{t}}_* = \{\hat{t}_{*1}, \hat{t}_{*2}, \dots, \hat{t}_{*M}\}$  を生成することを考える。ガウス過程回帰は、 $\hat{\mathbf{t}}$  と  $\hat{\mathbf{t}}_*$  を確率変数として扱い、その同時確率  $p(\hat{\mathbf{t}}, \hat{\mathbf{t}}_*)$  を次のような多次元ガウス分布で表す。

$$p \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{t}} \\ \hat{\mathbf{t}}_* \end{pmatrix} = \mathcal{N} \left( \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{t}} \\ \hat{\mathbf{t}}_* \end{pmatrix} \middle| \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\mu}} \\ \hat{\boldsymbol{\mu}}_* \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}} & \mathbf{C}_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}_*} \\ \mathbf{C}_{\hat{\mathbf{x}}_*\hat{\mathbf{x}}} & \mathbf{C}_{\hat{\mathbf{x}}_*\hat{\mathbf{x}}_*} \end{pmatrix} \right) \quad (1)$$

ここで、 $(\hat{\boldsymbol{\mu}}, \hat{\boldsymbol{\mu}}_*)$  は平均ベクトル、 $\mathbf{C}_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}}$ 、 $\mathbf{C}_{\hat{\mathbf{x}}_*\hat{\mathbf{x}}_*} (= \mathbf{C}_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}_*}^\top)$  及び  $\mathbf{C}_{\hat{\mathbf{x}}_*\hat{\mathbf{x}}}$  は部分共分散行列を表す。式 (1) で、 $(\hat{\boldsymbol{\mu}}, \hat{\boldsymbol{\mu}}_*)$  は任意の値をとることができるため、ここでは平均がゼロのガウス過程を考える：

$$p \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{t}} \\ \hat{\mathbf{t}}_* \end{pmatrix} = \mathcal{N} \left( \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{t}} \\ \hat{\mathbf{t}}_* \end{pmatrix} \middle| \mathbf{0}, \begin{pmatrix} \mathbf{C}_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}} & \mathbf{C}_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}_*} \\ \mathbf{C}_{\hat{\mathbf{x}}_*\hat{\mathbf{x}}} & \mathbf{C}_{\hat{\mathbf{x}}_*\hat{\mathbf{x}}_*} \end{pmatrix} \right) \quad (2)$$

このとき、部分共分散行列の  $(i, j)$  要素は次式で表される。

$$C(\hat{x}_i, \hat{x}_j) = k(\hat{x}_i, \hat{x}_j) + \sigma^2 \delta_{ij} \quad (3)$$

$$C(\hat{x}_{*i}, \hat{x}_j) = k(\hat{x}_{*i}, \hat{x}_j) \quad (4)$$

$$C(\hat{x}_{*i}, \hat{x}_{*j}) = k(\hat{x}_{*i}, \hat{x}_{*j}) \quad (5)$$

ここで、 $\sigma$  はガウシアンノイズと呼ばれるもので、 $\hat{t}$  に対する回帰モデルの不確かさ（標準偏差）を表すが、ここでは  $\hat{t}$  に  $\delta\hat{t}$  の不確かさが乗るため、 $\sigma = \delta\hat{t}_i$  と書き換える。 $\delta_{ij}$  は  $i=j$  のときに 1、それ以外のときは 0 となる行列要素（クロネッカーのデルタ）記号を表す。 $k(\hat{x}_i, \hat{x}_j)$  はカーネル関数と呼ばれるもので、様々な形のものを採りうる。ここではシンプルな関数形として動径基底関数 (RBF: radial basis function) カーネルを採用する。

$$k(\hat{x}_i, \hat{x}_j) = \theta_1 \exp\left(-\frac{\theta_2}{2}(\hat{x}_i - \hat{x}_j)^2\right) \quad (6)$$

ここで、 $\Theta = (\theta_1, \theta_2)$  は超パラメータあるいはハイパーパラメータ (hyperparameter) と呼ばれる。

式 (2) に、多次元ガウス分布の条件付き確率の定理を適用すると、条件付き確率  $p(\hat{t}_*|\hat{t})$  は次の多次元ガウス分布で表される。

$$p(\hat{t}_*|\hat{t}) = \mathcal{N}(\hat{t}_* | \hat{\mu}_*, \hat{\Sigma}_*) \quad (7)$$

ここで、平均  $\hat{\mu}_*$  と共分散  $\hat{\Sigma}_*$  は、それぞれ次のように書ける。

$$\hat{\mu}_* = \mathbf{C}_{\hat{x}\hat{x}_*}^\top \mathbf{C}_{\hat{x}\hat{x}}^{-1} \hat{t}, \quad (8)$$

$$\hat{\Sigma}_* = \mathbf{C}_{\hat{x}_*\hat{x}_*} - \mathbf{C}_{\hat{x}\hat{x}_*}^\top \mathbf{C}_{\hat{x}\hat{x}}^{-1} \mathbf{C}_{\hat{x}\hat{x}_*} \quad (9)$$

これが、ガウス過程回帰の公式である。ここで、ガウス過程による回帰結果は“線”ではなく“確率分布”の形で表されることに注意されたい。

超パラメータは任意の値を採ることも可能だが、周辺尤度関数  $p(\hat{t}|\Theta)$  を最大化することで最適な値を求めることができる。実際は、便宜上これに対数をとった  $\ln p(\hat{t}|\Theta)$  の最適化問題を解くことになる。

$$\Theta_{\text{opt}} = \arg \max_{\Theta} \ln p(\hat{t}|\Theta) \quad (10)$$

ここで、

$$\ln p(\hat{t}|\Theta) = -\frac{1}{2} \ln |\mathbf{C}_{\hat{x}\hat{x}}| - \frac{1}{2} \hat{t}^\top \mathbf{C}_{\hat{x}\hat{x}}^{-1} \hat{t} - \frac{N}{2} \ln(2\pi) \quad (11)$$

であり、 $\theta_\ell$  ( $\ell = 1, 2$ ) に関する微分  $\frac{\partial}{\partial \theta_\ell} \ln p(\hat{t}|\Theta)$  は、行列に関する数学公式を用いて、次のように表される。

$$\frac{\partial}{\partial \theta_\ell} \ln p(\hat{t}|\Theta) = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left( \mathbf{C}_{\hat{x}\hat{x}}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}_{\hat{x}\hat{x}}}{\partial \theta_\ell} \right) + \frac{1}{2} \hat{t}^\top \mathbf{C}_{\hat{x}\hat{x}}^{-1} \frac{\partial \mathbf{C}_{\hat{x}\hat{x}}}{\partial \theta_\ell} \mathbf{C}_{\hat{x}\hat{x}}^{-1} \hat{t} \quad (12)$$

ここで、上で述べた手法をそのまま適用すると、断面積の値が小さなエネルギー領域で回帰結果の値が負になったり、たとえ正になったとしても不確かさの下限が負になったりすることがある。また断面積の評価では、便宜上、エネルギーを表す横軸を常用対数スケールで表すことが多い。そこでここでは負の断面積問題を回避するため、断面積に自然対数をとることで縦軸を自然対数スケールに、エネルギーに常用対数をとることで横軸を常用対数スケールに変換してからガウス過程回帰を適用し、その後、元のスケールに変換するという操作を行なっている。

### 3. 核データ生成への適用例

この節では、ガウス過程回帰の手法を核データ生成に適用した例を紹介する。

図1に、半導体素子の材料として使われるケイ素 ( $^{nat}\text{Si}$ ) と高エネルギー陽子との核反応で生成されるナトリウム 22 ( $^{22}\text{Na}$ ) の核種生成断面積のガウス過程による回帰結果を示す。ここでは訓練データ (training data) として、核反応実験データベース EXFOR [3] から取得した実験データを用いている。本手法は、実在する実験データのみから帰納的に断面積を導き出すため、その回帰結果は実験値と総じて良い一致を示すだけでなく、良質な実験データさえ豊富にあれば、実験データの無い任意のエネルギー点に対してもかなりよい精度で断面積を推定することができる。このようなアプローチは、シュレーディンガー方程式や光学模型のような基本的な物理法則や近似モデルを出発点として演繹的に物理量を導き出す方法とは全く異なることに注意されたい。

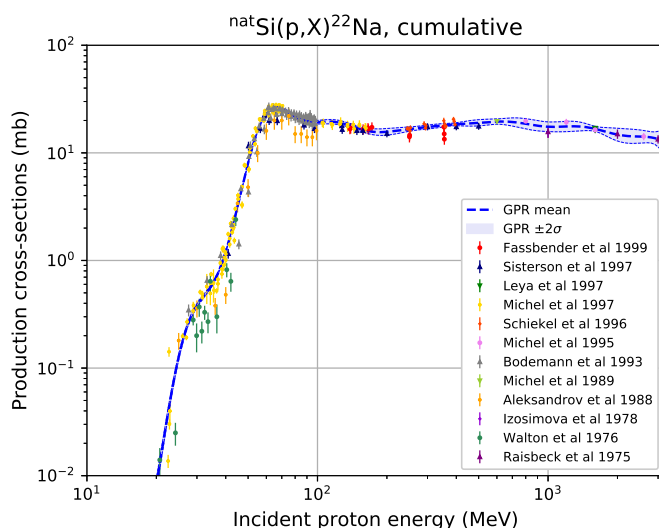


図1 ガウス過程回帰で生成された  $^{nat}\text{Si}(p,X)^{22}\text{Na}$  断面積 (青色の破線：平均値, 青色の帯：2標準偏差の不確かさ)

図2に、大気的主要な構成要素である窒素 ( $^{nat}\text{N}$ ) と高エネルギー陽子との核反応で生成されるベリリウム 10 ( $^{10}\text{Be}$ ) の核種生成断面積のガウス過程による回帰結果を示す。数百 MeV から GeV 領域の実験データの無いエネルギー領域で不確かさの幅が大きく広がっていることがわかる。前述したように、ガウス過程の最大の特長の一つは、回帰結果が確率密度関数として表されることであり、不確かな領域をこの図のように視覚的に捉えることができる。この特長を利用して、断面積の不確かさ低減の観点から効果的な実験を議論することも可能である。

さらに、ガウス過程回帰で得られる不確かさは、式(9)のような共分散行列の形で表されるため、図2の右側のパネルで示したような入射エネルギー間の不確かさの相関も簡単に求められる。さらにこの共分散行列を利用して、断面積のランダムサンプルも容易に作り出せるため、本手法は原子炉等の核特性パラメータ不確かさの定量評価にも適用可能と考えられる。

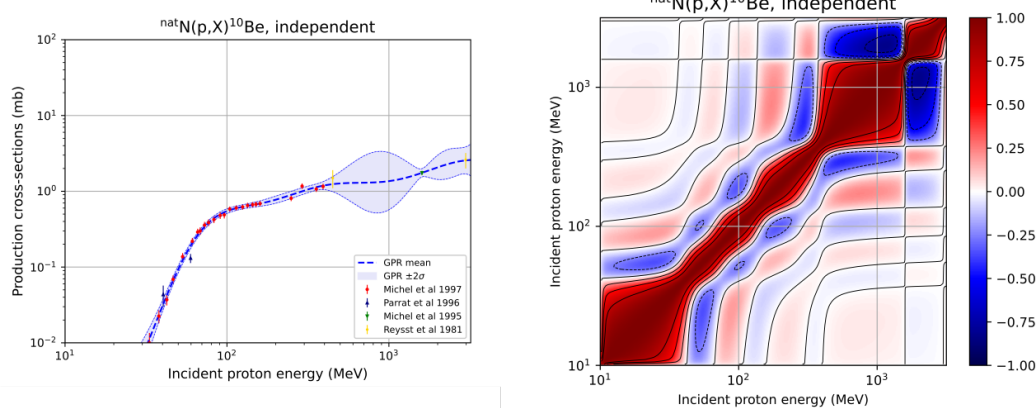


図2 ガウス過程回帰で生成された  ${}^{\text{nat}}\text{N}(p,X){}^{10}\text{Be}$  断面積（青色の破線：平均値，青色の帯：2標準偏差の不確かさ）と相関係数行列

#### 4. 高エネルギー粒子輸送計算への適用例

原子力研究開発の分野では、原子力システムにおける一連の核熱構造解析（連成解析）をシームレスに行なえることが期待されている。ここでは、加速器駆動核変換システム（ADS）のビーム窓周辺部における連成解析を例に、著者らが取り組んでいるガウス過程回帰の適用例を紹介する。

ADSとは、1.5 GeVに加速された高エネルギーの陽子ビームを、液体の鉛ビスマス共晶合金に入射させ、核破碎反応で発生する核破碎中性子を火種にして、炉心に装荷された核燃料物質の核分裂連鎖反応を持続的に引き起こすシステムである。原理的には、 ${}^{241}\text{Am}$  や  ${}^{237}\text{Np}$  などのマイナーアクチノイドを核燃料として使用することで、有害度の高いこれらの核種を核変換することができる。

陽子ビームが通過するビームダクトと鉛ビスマス標的との境界には、ビーム輸送系を真空に保つための“ビーム窓”と呼ばれる鉄を主成分とする半球殻状の仕切り窓が設けられる。図3に、構造解析コード Ansys Mechanical [4] と熱流動解析コード Ansys Fluent [5] による連成解析における ADS ビーム窓周辺部の幾何形状を示す。このビーム窓の成立性と健全性を数値シミュレーションによって評価するためには、熱流動場での局所的な微小乱流や構造材の応力を再現するように、細かなメッシュ分割が必要となる。ところが、図3に示したようなきわめて細かいメッシュの幾何形状でモンテカルロ粒子輸送計算を行なうと、セルを通過する粒子とセル内の核反件事象の数が減り、統計精度が著しく悪化する。図4に、モンテカルロ粒子輸送計算コード PHITS [6] による径方向における ADS ビーム窓の発熱密度分布の解析値を示す。ここで、黒色の誤差棒は  $1\sigma$  の統計的な不確かさを示す。わずか  $0.1^\circ$  の角度幅に1,782個もの極微小セルの発熱密度分布データが含まれており、発熱密度の解析値に統計的不確かさに起因する大きなばらつきが見られる。このばらつきは、原理的には入射粒子数を増やすことによって低減できるが、図3のようなきわめて細かなメッシュ構造を持つ体系に対しては、計算コストが膨大になるだけで現実的に対処することはおそらく困難であろう。

このようなときに、ガウス過程は近隣のデータ間のばらつきをなくすためのツール、すな

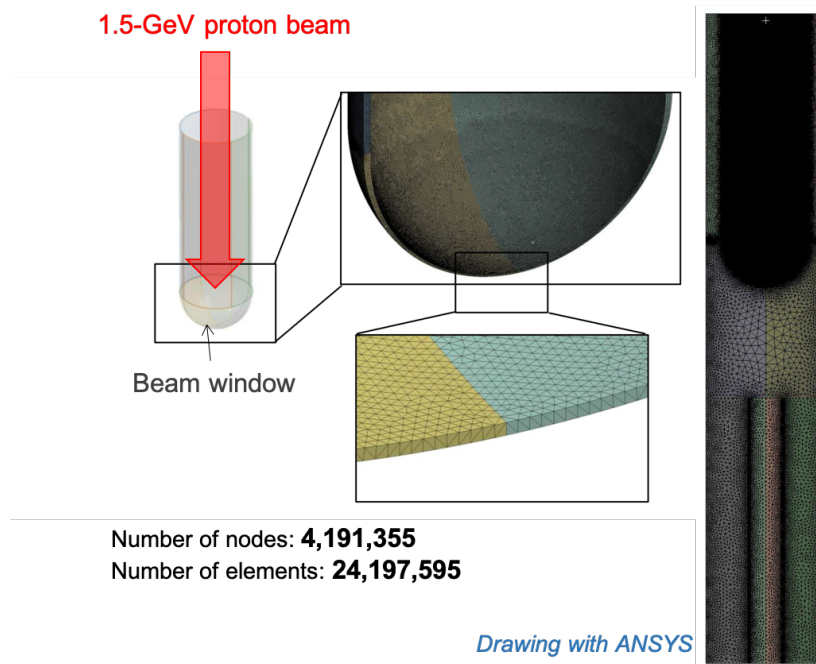


図3 ADS ビーム窓周辺部の幾何形状

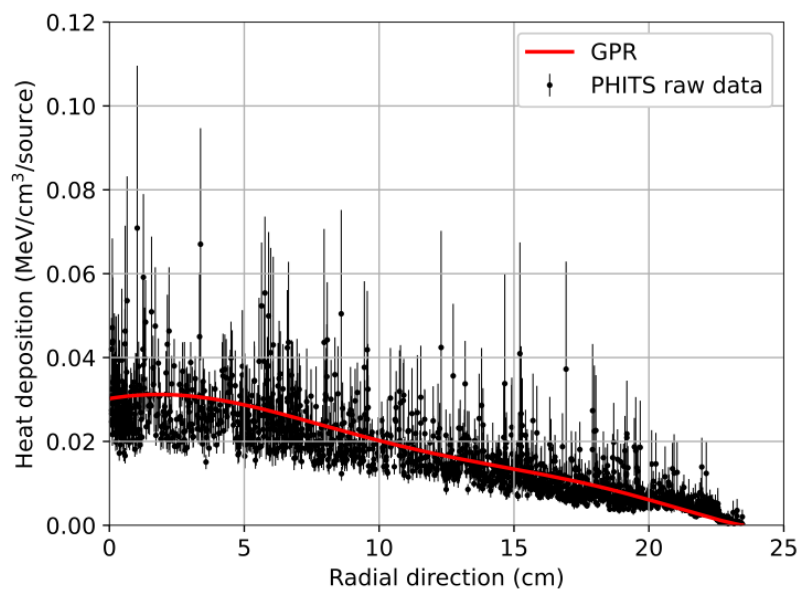


図4 径方向における ADS ビーム窓の発熱密度分布 (角度幅 0.1°)

わち平滑化のツールとしても利用できる。図4の赤線は、ガウス過程回帰を用いて平滑化処理した結果を示している。図5は、ビーム窓とビームダクトの発熱密度の分布を3次元的に示したものである。ここでは、回帰による計算コストを抑えるために、超パラメータの最適化は行わず、あらかじめ適当な値を設定し、さらに平滑化前後で総発熱量が厳密に保存するように、回帰後の結果に補正因子を乗じることでセル内の発熱量を補正している。

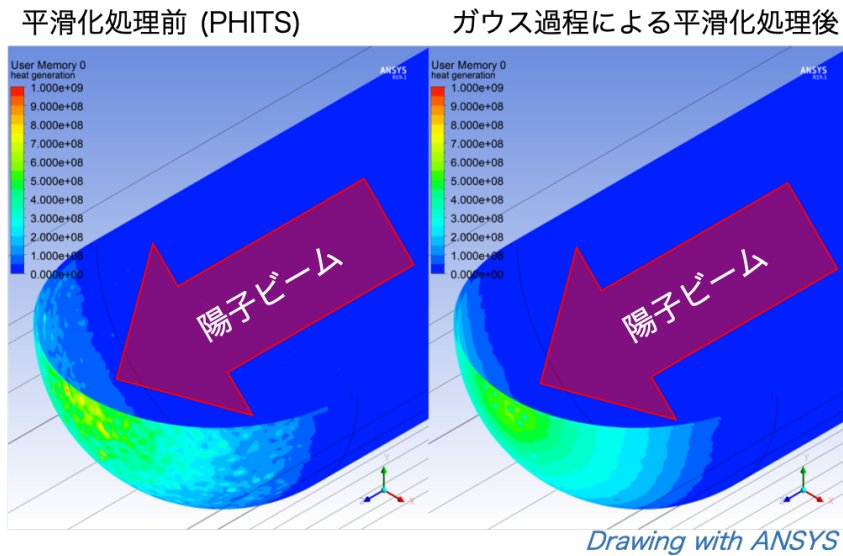


図5 平滑化处理前及び平滑化处理後の ADS ビーム窓及びビームダクトの発熱密度分布

## 5. おわりに

以上、核データ評価研究及び高エネルギー粒子輸送計算へのガウス過程の適用例を簡単に紹介した。ガウス過程の他にも、線形回帰やニューラルネットワーク、深層学習、ランダムフォレストなど様々な機械学習のテクニックがある。ここで紹介したガウス過程は、数学的に美しいモデルであり、不確かさを扱うことができる点からも、物理や工学を基礎として日々核データ研究を行なっている読者にとっては相性の良いモデルではないかと思う。また近年では、ガウス過程に関する日本語で書かれた優れた解説書 [7, 8, 9] が出版され、著者のような機械学習を専門としない人々もガウス過程を気軽に学べる環境が整ってきた。GPyTorch [10] などの Python ライブラリを使ってガウス過程を試してみることもできる。本稿を読んで、ガウス過程に興味を持っていただけたら幸いである。

## 参考文献

- [1] Rasmussen CE and Williams CKI. Gaussian Processes for Machine Learning, the MIP Press, 2006. <http://www.gaussianprocess.org/gpml/chapters/RW.pdf> (Accessed 15 May, 2021).
- [2] Iwamoto H. Generation of nuclear data using Gaussian process regression. J Nucl Sci Technol. **57**(8) (2020) 932–938.
- [3] Otuka N, et al. Towards a More Complete and Accurate Experimental Nuclear Reaction Data Library (EXFOR): International Collaboration Between Nuclear Reaction Data Centres (NRDC). Nucl Data Sheets. **120** (2014) 272–276.
- [4] Ansys Mechanical, Finite Element Analysis (FEA) Software for Structural Engineering, <https://www.ansys.com/ja-jp/products/structures/ansys-mechanical> (Accessed 15 May, 2021).

- [5] [Ansys Fluent, Fluid Simulation Software, https://www.ansys.com/ja-jp/products/fluids/ansys-fluent](https://www.ansys.com/ja-jp/products/fluids/ansys-fluent) (Accessed 15 May, 2021).
- [6] Sato T, Iwamoto Y, Hashimoto S, et al. Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02. *J Nucl Sci Technol.* **55**(6) (2018) 684–690.
- [7] C.M. ビショップ (著), 元田浩, 栗田多喜夫, 樋口知之, 松本裕治, 村田昇 (監訳), パターン認識と機械学習 上・下, 丸善出版.
- [8] 持橋大地, 大羽成征, ガウス過程と機械学習 (機械学習プロフェッショナルシリーズ), 講談社.
- [9] 須山敦志, ベイズ深層学習 (機械学習プロフェッショナルシリーズ), 講談社.
- [10] [GPyTorch, Gaussian processes for modern machine learning systems. https://gpytorch.ai](https://gpytorch.ai) (Accessed 15 May, 2021).