

ガウス過程を用いたハイブリッド核データ推定手法の開発

Development of A Hybrid Nuclear Data Estimator with Gaussian Processes

*岩元 大樹¹, 岩本 修¹, 国枝 賢¹

¹原子力機構

ガウス過程を用いた機械学習に基づく核データ推定手法 (G-HyND) を開発した。本発表では、核データ評価に対する本手法の有効性を示すとともに、本手法の枠組みで、ガウス過程の固有の問題である過剰適合及び計算コストに対する解決案を提示する。

キーワード：ガウス過程、機械学習、核データ、過剰適合、核データ評価

1. 緒言

核データは主に、原子核の微視的理論や断面積の実験値に適合するように、核反応モデルのモデルパラメータを調整することで評価されるが、従来の核データ評価手法では、モデルの選択及びパラメータ調整に多大な作業コストと評価者の熟練を必要とする。本研究では、この課題に取り組むため、機械学習に基づいて核データを推定する手法 (G-HyND) を開発した。本手法は、機械学習技術の一種であるガウス過程を用いて核データを推定する。訓練データとして、実験データと核反応モデルに基づく解析データを組み合わせて学習することで、核データをより合理的に推定することが可能である。

2. 手法の概要

G-HyND は、文献[1]で示した手法に基づく。カーネル関数として動径基底関数 (RBF) を用い、RBF カーネルに対する超パラメータの最適化のアルゴリズムに L-BFGS-B 法[2]を用いる。右図に、鉄に対する陽子入射弾性外断面積の G-HyND による推定結果を示すように、実験データと核反応モデル (ここでは Pearlstein-仁井田の系統式) に基づく解析データを組み合わせたハイブリッドデータを用いることで、実験データが不足している領域の核データを合理的に推定することが可能である。

機械学習に固有の課題である過剰適合については、超パラメータに制約を与えることでこれを回避する。ガウス過程を機械学習に適用するにあたり、計算コストがしばしば課題となるが、本手法では、訓練データを分割して使用することで計算コストを抑制する。

3. 結言

今後は、本手法を、構造が複雑な共鳴領域及び二次粒子放出の角度分布の推定に適用するとともに、核データ評価ツールとしての適用可能性を調査する予定である。

参考文献

[1] H. Iwamoto, J Nucl Sci Technol, "Generation of nuclear data using Gaussian process regression," 2007;57(8):932-938.

[2] C. Zhu et al., ACM Transactions on Mathematical Software 23(4):550-560.

*Hiroki Iwamoto¹, Osamu Iwamoto¹ and Satoshi Kunieda¹

¹IAEA

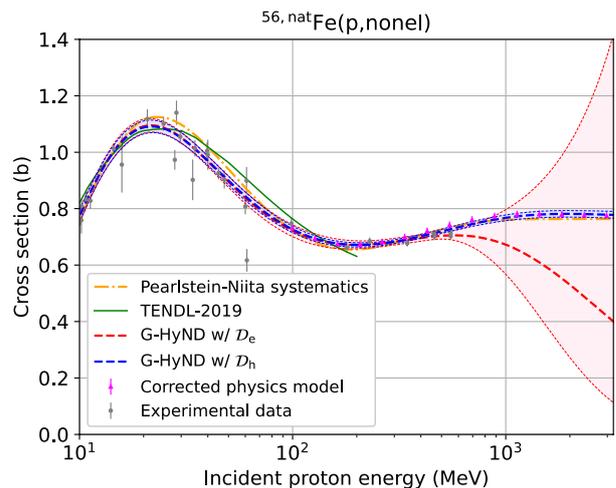


図 鉄に対する陽子入射弾性外断面積
 赤線：実験データのみから推定 (帯： 2σ 不確かさ)
 青線：実験データ及び解析データから推定 (帯： 2σ 不確かさ)
 緑線：TENDL-2019 による評価値 ($E_p < 200$ MeV)
 橙線：Pearlstein-仁井田の系統式