

令和 6 年度

文部科学省 国家課題対応型研究開発推進事業
原子力システム研究開発事業

機械学習による未整備エネルギー領域での核
分裂核データ構築と炉物理への影響評価

成果報告書

令和 7 年 3 月

国立大学法人東京科学大学

本報告書は、文部科学省の原子力システム研究開発事業による委託業務として、国立大学法人 東京科学大学（旧・東京工業大学）が実施した令和4年度－令和6年度「機械学習による未整備エネルギー領域での核分裂核データ構築と炉物理への影響評価」の成果を取りまとめたものです。

目次

概略	viii
1. はじめに	1. 1-1
2. 業務計画	
2.1 全体計画	2. 1-1
2.2 各年度計画	2. 2-1
3. 業務の実施内容および成果	
3.1 機械学習による核分裂収率予測と評価【R4～R6】	3. 1-1
3.1.1 大規模機械学習の準備とコード開発【R4】	3. 1-1
3.1.2 アクチノイド核の核分裂収率整備【R5】	3. 1-7
3.1.3 核データライブラリ化および評価【R6】	3. 1-21
3.1.4 まとめ【R6】	3. 1-32
3.2 核分裂収率評価のためのベイジアンニューラルネットワーク法の高度化【R4～R6】	
(再委託先：電気通信大学)	3. 2-1
3.2.1 核分裂収率高精度予測のためのアルゴリズムのテスト【R4】	3. 2-1
3.2.2 機械学習モデルの最適化【R5】	3. 2-1
3.2.3 機械学習モデルの確立【R6】	3. 2-2
3.2.4 まとめ【R6】	3. 2-11
3.3 機械学習による中性子断面積評価（再委託先：原子力機構）	3. 3-1
3.3.1 核反応モデルパラメータの系統性の検討【R4】	3. 3-1
3.3.2 物理モデルの導入【R5】	3. 3-3
3.3.3 入射チャンネルにおける変形効果の導入【R6】	3. 3-6
3.3.4 評価済核データファイルの整備【R6】	3. 3-8
3.3.5 まとめ【R6】	3. 3-9
3.4 炉物理への影響評価（再委託先：大阪大学）	3. 4-1
3.4.1 ADS や新型炉における	
炉心特性への影響評価【R4-R6】	3. 4-1
3.4.2 種々の燃料サイクルを想定した	
バックエンドへの影響評価【R4-R6】	3. 4-21
3.4.3 まとめ【R6】	3. 4-33

3.5 研究推進	【R4-R6】	3.5-1
----------	---------	-------

4. 結言	4-1
-------	-----

表一覧

表 2.1	本研究全体の研究項目ごとの年次計画および研究体制の様子	2.1-1
表 2.2	本計画の令和6年度月別研究計画の様子	2.2-1
表 3.1-1	BNN の設定	3.1-2
表 3.1-2	学習データの重みの内訳	3.1-3
表 3.1-3	隠れ層二層の BNN モデルのユニット数 10-10 から 20-20 までの 評価指標の比較	3.1-22
表 3.2-1	トレーニングデータとテストデータ	3.2-6
表 3.2-2	各手法の予測結果の MSE (10^{-6})	3.2-7
表 3.4-1	断面積の修正があった FP 核種一覧	3.4-2
表 3.4-2	ADS の Inner core における数密度	3.4-5
表 3.4-3	金属燃料高速炉の燃料部分における数密度	3.4-7
表 3.4-4	酸化物燃料高速炉の燃料部分における数密度	3.4-9
表 3.4-5	ORLIBJ40 に含まれず JENDL-5 にのみ含まれる核種	3.4-11
表 3.4-6	ORIGEN ライブラリ作成に用いた核分裂性核種と収率の中性子エネルギー点	3.4-11
表 3.4-7	崩壊モードとそのモードで崩壊する核種	3.4-13
表 3.4-8	ORIGEN ライブラリで与える断面積と MVP の出力との関係	3.4-13
表 3.4-9	従来ライブラリとして用いた ORLIBJ40 のライブラリ名	3.4-14
表 3.4-10	照射後の ADS における各核種の放射線量の相対差	3.4-30
表 3.4-11	照射後の金属燃料高速炉における各核種の放射線量の相対差	3.4-31
表 3.4-12	照射後の酸化物燃料高速炉における各核種の放射線量の相対差	3.4-32

図一覧

図 3.1-1	BNN の様子	3.1-2
図 3.1-2	機械学習モデルの入力に用いた核分裂収率データの例	3.1-4
図 3.1-3	BNN による予測データ（実線）と検証用の 20 % の JENDL-5 値（点）の比較	3.1-5
図 3.1-4	事前分布を変更した場合の ^{233}U , ^{235}U の学習結果の比較	3.1-7
図 3.1-5	殻効果因子関数の挙動	3.1-11
図 3.1-6	殻効果因子を導入したベイジアンニューラルネットワーク	3.1-12
図 3.1-7	殻効果因子の導入による再現性と検証性の比較	3.1-12
図 3.1-8	核分裂収率の検証用データと JENDL5 の比較	3.1-13
図 3.1-9	殻効果因子の導入による ^{235}U の核分裂収率のエネルギー依存性の予測結果	3.1-14

図 3. 1-10	^{239}Pu での補正範囲の決め方	3. 1-15
図 3. 1-11	^{239}Pu での補正範囲の決め方 2	3. 1-15
図 3. 1-12	外挿補間に用いるデータ範囲 (^{239}Pu)	3. 1-16
図 3. 1-13	外挿補間後の ^{239}Pu の核分裂収率	3. 1-16
図 3. 1-14	^{233}U の予測結果を用いた 2 次内挿の補正範囲	3. 1-17
図 3. 1-15	2 次内挿補完を実施した結果 (^{233}U)	3. 1-17
図 3. 1-16	2 次内挿補完後の ^{233}U の核分裂収率	3. 1-18
図 3. 1-17	炉物理計算のために整備した核種の BNN モデルによる質量収率の予測値	3. 1-18
図 3. 1-18	独立収率の未整備エネルギーでの予測値と実験値の比較	3. 1-19
図 3. 1-19	^{235}U の Weak SF と Strong SF の BNN の予測値と実験値の比較	3. 1-21
図 3. 1-20	Stratified K-Fold CV の概念図	3. 1-22
図 3. 1-21	k-fold CV で k=5 の場合の各組の再現性と検証性の比較	3. 1-24
図 3. 1-22	CV と WAIC でのハイパーパラメータに対する変化	3. 1-24
図 3. 1-23	訓練データとテストデータの WAIC および対数尤度の比較	3. 1-25
図 3. 1-24	^{232}Th , 233 , 235 , ^{238}U および 239 , ^{241}Pu に対する BNN モデルの 1 MeV から 5 MeV までの予測値と JENDL-5 の実験値 (0. 5 MeV, 14 MeV) の比較	3. 1-26
図 3. 1-25	^{232}Th , ^{235}U の BNN モデルから 1 MeV から 5 MeV までの予測と JENDL-5 の実験値 (0. 5 MeV, 14 MeV) の比較	3. 1-27
図 3. 1-26	$^{95, 97}\text{Zr}$, ^{99}Mo , ^{105}Ru , ^{127}Sb , ^{132}Te , ^{140}Ba , ^{143}Ce の BNN モデルによるエネルギー依存性 評価と実験値の比較	3. 1-28
図 3. 1-27	1 MeV から 5 MeV までの ^{235}U 核分裂の A=88 の 同重体分布の BNN 予測値と JENDL-5 の 0. 5 MeV の比較	3. 1-29
図 3. 1-28	1 MeV から 5 MeV までの ^{232}Th , ^{233}U , ^{235}U の荷電分布の予測値と JENDL-5 の 0. 5 MeV 実験値の比較	3. 1-30
図 3. 1-29	1 MeV から 5 MeV までの ^{232}Th , ^{235}U , ^{239}Pu の遅発中性子収率の予測値と実験値の比較	3. 1-30
図 3. 2-1	提案手法の構造	3. 2-3
図 3. 2-2	提案手法 (提案損失関数と奇遇効果) を用いた ^{235}U の異なる励起エネルギー における FPY および FPY Error 予測	3. 2-9
図 3. 2-3	提案手法 (提案損失関数と奇遇効果) を用いた ^{235}U の異なる励起エネルギー における FPY および FPY Error 予測	3. 2-10
図 3. 3-1	^{156}Gd 中性子断面積に対するフィッティング結果	3. 3-2
図 3. 3-2	Gd (Z=64) 同位体に対するガンマ線強度関数規格化定数 (G)	3. 3-3
図 3. 3-3	ガウス過程回帰による原子核変形度の推定結果	3. 3-4
図 3. 3-4	^{79}Br に対する中性子捕獲断面積の計算結果	3. 3-5
図 3. 3-5	Pd 同位体に対する中性子捕獲断面積の計算結果	3. 3-6
図 3. 3-6	s 波強度関数の計算結果	3. 3-7

図 3. 3-7 ^{116}Cd および ^{156}Gd に対する中性子捕獲断面積の計算結果	3. 3-7
図 3. 3-8 ^{99}Tc および ^{137}Cs の中性子捕獲断面積	3. 3-8
図 3. 3-9 ^{138}Ba および ^{152}Gd の中性子捕獲断面積	3. 3-9
図 3. 4-1 金属燃料高速炉のピンセル体系	3. 4-6
図 3. 4-2 酸化物燃料高速炉のピンセル体系	3. 4-8
図 3. 4-3 モンテカルロ計算で得られた核分裂スペクトル	3. 4-10
図 3. 4-4 燃焼末期の ADS における実効遅発中性子割合の相対差	3. 4-15
図 3. 4-5 燃焼末期の金属燃料高速炉における実効遅発中性子割合の相対差	3. 4-15
図 3. 4-6 燃焼末期の酸化物燃料高速炉における実効遅発中性子割合の相対差	3. 4-16
図 3. 4-7 ADS における増倍率の計算結果	3. 4-16
図 3. 4-8 金属燃料高速炉における増倍率の計算結果	3. 4-17
図 3. 4-9 酸化物燃料高速炉における増倍率の計算結果	3. 4-17
図 3. 4-10 燃焼末期における ADS、金属燃料高速炉、酸化物燃料高速炉の中性子捕獲 反応率の差異	3. 4-18
図 3. 4-11 中性子捕獲断面積の比較	3. 4-19
図 3. 4-12 照射後の ADS における燃焼度の指標となる核種の生成量の相対差	3. 4-22
図 3. 4-13 照射後の金属燃料高速炉における燃焼度の指標となる核種の生成量の相対差	3. 4-23
図 3. 4-14 照射後の酸化物燃料高速炉における燃焼度の指標となる核種の生成量の 相対差	3. 4-23
図 3. 4-15 照射後の ADS における崩壊熱の比較	3. 4-24
図 3. 4-16 照射後の金属燃料高速炉における崩壊熱の比較	3. 4-25
図 3. 4-17 照射後の酸化物燃料高速炉における崩壊熱の比較	3. 4-26
図 3. 4-18 照射後の ADS における放射線量の比較	3. 4-27
図 3. 4-19 照射後の金属燃料高速炉における放射線量の比較	3. 4-28
図 3. 4-20 照射後の酸化物燃料高速炉における放射線量の比較	3. 4-29
図 3. 4-21 ADS における各核種の潜在的放射性毒性	3. 4-30
図 3. 4-22 金属燃料高速炉における各核種の潜在的放射性毒性	3. 4-31
図 3. 4-23 酸化物燃料高速炉における各核種の潜在的放射性毒性	3. 4-32

用語説明

核分裂率スペクトル : 入射中性子のエネルギーに対する核分裂率の分布のこと。

ADS : Accelerator-driven systems
(加速器駆動の核変換システム)

MVP : 原子力機構によって開発された連続エネルギーモンテカルロ計算コード。

MVP-BURN : MVP コードシステムに BURN モジュールを追加したもので燃焼計算が可能である。

核分裂生成物 : 核分裂反応によって生成される核種およびその放射性壊変によって生じる核種。

対称核分裂 : ほぼ同じ質量数を持つ二つの原子核に分かれるような核分裂のこと。

使用済燃料 : 原子炉で使用された後、取り出された核燃料で、大量の核分裂生成物の他に ^{235}U 、 ^{239}Pu やマイナーアクチノイドを含む。

核分裂核データ : 核分裂反応が関係する核データのこと、本研究では核分裂収率と核分裂生成物の中性子反応断面積を主とするデータのこと。

核分裂収率 : 核分裂反応による生成物の収量の割合のこと。核分裂を起こす中性子のエネルギーによって変化する。

独立収率 : ベータ崩壊前の核分裂直後の核分裂生成物の収率のこと。

質量収率 : 核分裂生成物核種の質量数に対する収量の割合のこと。

累積収率 : 核分裂後にベータ崩壊を経験してできた核分裂生成物の収量の割合のこと。

核分裂収率の共分散データ : 核分裂によって生成される核種数分布のデータの不確かさのこと。

崩壊様式 : 原子核の様々な崩壊の起こり方のこと。

崩壊熱 : 原子核の崩壊によって発生する熱のこと。

中性子断面積 : 中性子と原子核の反応の起こり易さのこと。

機械学習 : 人工知能の技術で、人間が入力した情報を基にコンピュータが学習する仕組みのこと。

ベイズ深層学習 : 機械学習の手法の一つで、ベイズの定理に基づいて初期分布を与え、それを学習により更新していく手法で、小規模データでも過学習が起きにくい特徴を有する。

ベイジアンニューラルネットワーク (BNN) : 一般的なニューラルネットワークの重みやバイアスの各々がベイズ推定の意味で確率分布を持つようなネットワークのこと。

マルチタスクモデル (MMoE) : 目的とするタスクに関係がある複数のタスクを一つのモデルに同時に学習させることで精度の向上を図る機械学習モデルのこと。

損失関数 : 正解値とモデルによる予測値とのずれの大きさを表す関数のこと。

事前分布 : 知りたいパラメータの確からしさを表す初期分布のこと。

隠れ層 : 深層学習において、データを入力する入力層と計算結果を出力する出力層以外の層のこと。

Random-walk : 乱数に時系列性が存在するもっとも典型的なケースのこと。Random-walk では、本来全く関係性のない二変数の間に関係性があるかのような回帰結果を与えてしまう。

Tensorflow_probability : 機械学習に用いるためのソフトウェアライブラリ TensorFlow に基づいて作成された確率的推論と統計的分析のための Python ライブラリのこと。このライブラリを使用すると、最新のハードウェア上で確率モデルとディープラーニングを組み合わせることができる。

一群断面積 : 全中性子エネルギーを 1 つのグループとして表した場合の断面積のこと。簡略化した燃焼計算を実施する場合等で用いられる。

核分裂率スペクトル : 入射中性子のエネルギーに対する核分裂率の分布のこと。

連続エネルギーモンテカルロ計算 : 中性子のエネルギースペクトルを群化せず、モンテカルロ法に基づき中性子等のエネルギーを連続的に扱う計算のこと。

略語一覧

ADS	: Accelerator-driven systems (加速器駆動の核変換システム)
BOC	: Beginning Of Cycle (サイクル初期)
EXFOR	: Experimental Nuclear Reaction Data Library (実験核反応データライブラリ)
GPR	: Gaussian Process Regression (Gauss 過程回帰)
HCBWR	: High Conversion Boiling Water Reactor (高転換沸騰水型原子炉)
IAEA	: International Atomic Energy Agency (国際原子力機関)
JSON	: JavaScript Object Notation (ジャバスクリプトオブジェクト書式)
ORIGEN	: 米国オークリッジ国立研究所が開発した燃焼コード ORNL Isotope Generation and Depletion Code の略称。
MVP	: 原子力機構によって開発された連続エネルギーモンテカルロ計算コード Monte Carlo Codes for Neutron and Photon Transport Calculations Based on Continuous Energy and Multigroup Methods の略称。
SDM	: Shut Down Margin (炉停止余裕)

概略

核分裂生成物の収率（核分裂収率）は原子炉の臨界性や、安全性を左右する崩壊熱、炉内での遅発中性子放出量等に影響を与える他、医療用の核医学検査薬の製造量や核変換技術、核セキュリティのための核鑑識の精度にも直結する非常に重要な核データである。従来、核分裂収率は自発核分裂を除くと 0.0253 eV（熱中性子）、500 keV（高速中性子）、14 MeV の 3 点における中性子入射核分裂を対象として整備されてきたが、アプリケーションの多様化と高度化に伴い、従来の 3 つのエネルギー点以外の連続的なエネルギーでの核分裂収率へのニーズが高まっている。このニーズの高まりを受けて実験データは増えているものの、実験でアクセスできるエネルギーには限りがあり、また測定データも特定の核種に限られるなどの問題がある。

特に今から約 10 年前、 ^{239}Pu の核分裂生成物 ^{147}Nd の収率が明らかな入射エネルギー依存性を持つことが指摘された。 ^{147}Nd は臨界安全評価上重要な燃焼度の決定法である Nd 法の ^{148}Nd の生成量に影響する。また言うまでもなく、核分裂収率データは原子炉の臨界性・安全性や廃棄物問題等の広い領域に関わる主要な核データである。特に長寿命核分裂生成物や核分裂で生じる ^{135}Xe のような中性子毒物の量は核分裂収率に依拠するため、炉内で実現し得る中性子エネルギー領域に対して、中性子エネルギーの関数として高精度の核分裂収率を予測することは非常に重要な課題である。

このような背景から、この 10 年で核分裂収率のエネルギー依存性についての実験データが急速に増えた。とはいえ、実験できるエネルギーや精度、核種には限りがある。一方で核分裂収率の理論的研究については、現象論的なアプローチと理論核物理的アプローチが従来手法である。現象論的なアプローチは、実験データのない領域になると途端に予測精度が悪化してしまう。また理論核物理的アプローチには、我々の開発している形状 4 次元 Langevin 模型が最も予言力のある模型の 1 つであるが、炉物理計算や原子炉設計で用いられる核データとしての精度で考えると一層の改善が必要な状況である。そこで注目されるようになったのが、機械学習によるデータ駆動のアプローチである。国内での機械学習を用いた核データ研究の例としては、ガウス過程回帰を用いた国立大学法人北海道大学や国立研究開発法人日本原子力研究開発機構（以下「原子力機構」と略す。）での核反応断面積評価が挙げられるが、核分裂収率研究については未開拓である。しかし、国外では数年前から中国や米国でベイズ深層学習を用いた核分裂収率の予測がはじまっており、国際競争力の観点からも機械学習による国産の核分裂収率予測が急務となっている。

そこで本研究では機械学習の専門家の知見と、核データ整備や核分裂メカニズムの専門家の知見を最大限に融合させて、未整備エネルギーでの核分裂核データを整備し、今後の核データ研究の発展やその基盤の維持を図る。さらに新たに構築した核分裂核データが炉物理へ与える波及効果を検証・評価する。以上により、研究開発段階にある新型原子炉に関する研究開発や核燃料物質の原子炉燃料としての使用・再処理・加工に資することを本研究の目的としている。

本研究は全体で 3 か年計画となっており、初年度にあたる令和 4 年度は、機械学習を効率的に実施するための計算機環境の構築と核分裂収率評価（担当は国立大学法人東京科学大学（以下、「東京科学大学」と略す。）・国立大学法人電気通信大学（以下、「電気通信大学」と略す。）や中

中性子断面積評価（担当は原子力機構）に適した機械学習モデルの模索を行う一方、機械学習を用いて既存の評価済核データで提供されていない中性子エネルギーでの核データを炉物理計算で使うための計算コードの整備（国立大学法人大阪大学（以下、「大阪大学」と略す。）も同時に進め、核分裂核データに関する一連の研究を統合的に進めた。令和 5 年度には、令和 4 年度の知見を受けて、核分裂収率の機械学習による予測に取り組む 2 つの機関（担当は東京科学大学・電気通信大学）におけるアプローチ方法を大きく変更することとなった。また令和 4 年度よりも物理学の知見を多く取り入れることで、先述の核分裂収率のための機械学習モデルだけでなく、中性子断面積評価（担当は原子力機構）に適したモデルパラメータの機械学習を用いた模索においても、大幅に予測精度を向上することができた。また、令和 6 年度に向けて既存の評価済核データでは提供されていない中性子エネルギーでの核データを炉物理計算で使うための計算コードの整備（担当は大阪大学）も順調に進み、未整備エネルギーにおける核分裂核データの影響を定量的に評価するための基盤が整った。

本研究で高度化を図った 2 つの核分裂核データのうち、ベイズ深層学習による核分裂生成物の質量収率 $Y(A)$ については入力情報に核物理の知見を与えることで主要核種の殻効果に由来するピーク構造の詳細な再現および予測に成功しただけでなく、そのエネルギー依存性についての予測精度も従来のライブラリ値の線形内容に比べて飛躍的に改善することができた。その精度は過去の先行研究に比べても非常に正確である。また炉物理側へ応用する際に必要となる核分裂生成物の独立収率 $Y(Z, A)$ の導出では、JENDL-5 の核分裂収率作成時の知見を活用することで、妥当性の高い荷電分布を与えることに成功した。その結果、最終的に得られた独立収率のエネルギー依存性が他に例を見ない精度で高精度に予測できていることが主要な複数の核種での遅発中性子収率の実験値との比較から明らかになった。このような高度な妥当性評価は世界初である。また中性子断面積については、断面積を予測する CCONE モデルのモデルパラメータの最適化に物理学的な知見（シザーズモード）を導入することで、ガウス過程回帰法単独での最適化に比べて格段に妥当性が向上することが明らかになった。このように本研究では機械学習の手法と物理学的知見を融合することで核分裂核データを高度化できる道筋を示した。将来的には本研究で整備された手順を完全自動化することで、核データ整備の効率化が見込まれる。

本研究で高度化を図った核分裂核データは様々な原子力システムの評価における最上流の入力情報である。従来の核データライブラリでは中性子エネルギー $E_n=0.0253$ eV、500 keV のあとは 14 MeV まで核分裂収率の情報が飛んでいたが、本研究により本来エネルギーに依存して連続的に変化するはずの核分裂収率や核分裂生成物の中性子断面積等の核分裂核データを機械学習で高度に予測することが可能となった。本研究では、これらの新たに整備した核データを異なる炉型に対して適用し、従来データとの違いを精査した。この知見を活用することで、研究開発段階にある新型原子炉に関する研究開発や核燃料物質の原子炉燃料としての使用・再処理または加工の効率化や安全性の向上が期待できる。

具体的な令和 6 年度の実施内容および研究成果としては、以下のとおりである。

(1) 機械学習による核分裂収率予測と評価

研究項目(2)と連動し、 ^{235}U の中性子入射核分裂で十分に学習させ、さらに他のアクチノイド核種についても評価済データや実験値を学習させることにより、主要なアクチノイド核種を網羅した中性子エネルギーに依存する核分裂収率を評価済核データフォーマットで整備した。また、整備された核分裂収率は、累積収率実験データ等を用いて妥当性を評価した。

(2) 核分裂収率評価のためのベイジアンニューラルネットワーク法の高度化

(再委託先：電気通信大学)

核分裂核データを高精度に予測可能なアルゴリズムを確立し、先行研究と比較した。

(3) 機械学習による中性子断面積評価 (再委託先：原子力機構)

核分裂生成物に対するパラメータの系統性の検討を進め、機械学習による予測結果をもとに核データファイルを整備し、(4)へ提供する。

(4) 炉物理への影響評価 (再委託先：大阪大学)

①ADS や新型炉における炉心特性への影響評価

従来のライブラリと(1)～(3)の成果を反映したライブラリを用いて、モンテカルロ法に基づき計算し、ADS や新型炉のスペクトル情報を取り入れ構築した体系において、増倍率等の炉心特性への影響を評価した。

②種々の燃料サイクルを想定したバックエンドへの影響評価

ORIGEN による従来法で得られる結果と(1)～(3)の成果を反映したライブラリで得られた結果を比較し、使用済燃料における主要な核分裂生成物の生成量、崩壊熱、放射線量の推移について、その影響を評価した。

(5) 研究推進

本事業全体を適切に遂行するために再委託者との連絡を緊密に取り、さらに定期的な会合を開催することで進捗状況を把握し事業を滞りなく進める。また3年間の成果のとりまとめを行った。

以上、3年計画の3年目である令和6年度の業務項目を実施し、所期の目標を達成した。

1. はじめに

核データは、新たな原子炉の設計や放射線遮へい設計、バックエンド評価を行う際に欠かせない最も基礎的なデータである。一口に核データと言っても多岐にわたるが、核分裂収率データは、原子炉の臨界性・安全性や廃棄物問題等の広い領域に関わる主要な核データである。特に長寿命核分裂生成物や核分裂で生じる ^{135}Xe のような中性子毒物の量は核分裂収率に依拠するため、原子炉内で核分裂により生成される中性子エネルギーの全領域に対して、中性子エネルギーの関数として高精度の核分裂収率を予測することは非常に重要な課題である。

評価済核データライブラリでは、自発核分裂を除くと熱中性子、高速中性子 (0.5 MeV)、14 MeV の中性子が入射した際の核分裂収率データが整備されている。従来手法では、これらの 3 つの中性子エネルギー以外での収率データを得る際、3 つのエネルギー点での値を線形内挿している。しかし近年、 ^{235}U などの主要な核において、核データの中性子エネルギーに対するエネルギー依存性についての実験が出始めた結果、線形内挿が適切ではないケースが少なからずあることがわかった。その為、従来重要視されていなかった核分裂収率に対する入射中性子エネルギー依存性に対する理論・実験両面からの研究が加速しているのが国際的な現状である。特に米国・欧州・中国では、それぞれの地域で代表的な評価済核データライブラリの整備を担うグループを中心として、様々な入射中性子エネルギーに対する核分裂収率を機械学習により、あるいは機械学習と理論計算を組み合わせることにより予測する取り組みが数年前から先行している。日本の国際競争力の維持・向上のためにも、日本独自の機械学習による核分裂収率の高度予測が急務であった。

このような現状を受けて本研究では、実験データが乏しい中性子エネルギー領域に対して核分裂生成物の収率や中性子吸収断面積などの核データを機械学習の手法を活用して高精度に整備することにより、これまで議論することすらできなかった様々なエネルギーを持つ中性子と核分裂生成物との反応が、炉物理に与える影響に対する定量的な評価を与えることを可能とする。これにより、本研究は新型炉設計や廃止措置における安全性や経済性の向上に資することができる。以上のような研究構想を実現するために、本研究では最新版の国産評価済標準核データライブラリ JENDL-5 の核分裂収率評価を担当した東京科学大学の研究グループ、同ライブラリを取りまとめている原子力機構核データグループ、ベイズニューラルネットワークの黎明期を支えた専門家である電気通信大学情報数理工学グループ、炉物理の専門家である大阪大学炉物理グループが協働して本課題に取り組むこととした。すなわち、本研究の狙いは従来の評価済核データライブラリとして整備されていない情報に対して、機械学習を本格的に適用して情報の精度を高め、それが炉物理に与える影響までの定量的な見積もりを行うための枠組みを構築し研究を遂行することである。

本研究の特筆すべき点は、様々なエネルギーを持つ中性子が ^{235}U などに入射して誘起される核分裂の核分裂収率そのもののエネルギー依存性を機械学習で予測するだけでなく、各エネルギーでの中性子と核分裂生成物の間の反応断面積に対しても機械学習を用いて予測精度向上に取り組んでいる点である。このように核分裂に関する主要な核データの中性子エネルギー依存性が最終的に炉物理に与える影響まで統合的かつ定量的に評価する取り組みは世界的に見ても他に例がな

く、学術的に大変意義深い取り組みである。

2. 業務計画

2.1 全体計画

核データは新たな原子炉の設計や放射線遮へい設計、バックエンド評価を行う際に欠かせない最も基礎的なデータである。一口に核データと言っても多岐にわたるが、核分裂収率データは原子炉の臨界性・安全性や廃棄物問題等の広い領域に関わる主要な核データである。特に長寿命核分裂生成物や核分裂で生じる ^{135}Xe のような中性子毒物の量は核分裂収率に依拠するため、炉内で実現し得る中性子エネルギー領域に対して、中性子エネルギーの関数として高精度の核分裂収率を予測することは非常に重要な課題である。

本研究は未整備の中性子エネルギー領域での核分裂収率をデータ駆動の新発想に基づいて予測する。その際に問題となるのが、核分裂収率測定における不確かさ（共分散行列の対角成分）である。実験による誤差が大きいため、従来の評価済みライブラリ値の不確かさの値も大きな値を採用しているのが実情である。そこで本研究では表 2.1 に示す体制および年次計画に従い、未整備の中性子エネルギーにおける核データをベイズ深層学習により様々な入射中性子エネルギーでの核分裂収率を高精度に予測し、95%信頼区間を不確かさとして見積もり、ライブラリの標準形式として提供する。また同様の手法により、核分裂生成物の中性子断面積についてもデータの完備を目指す。こうして得られる核分裂核データは、累積収率や崩壊熱の実験値との比較で、まず核データそのものの妥当性が評価される。その一方で、これまで十分に整備されてこなかった中性子エネルギー領域の核分裂核データが炉物理へ与える影響を定量的に評価するために、従来型の軽水炉や高速炉での使用済燃料における核分裂生成物の生成量や、使用済燃料の崩壊熱や放射線量に与える影響を定量的に評価する計画となっている。

表 2.1 本研究全体の研究項目ごとの年次計画および研究体制の様子

項目 \ 年度	令和4年度	令和5年度	令和6年度
(1) 機械学習による核分裂収率予測と評価	大規模機械学習の準備とコード開発	アクチノイド核の核分裂収率整備	核データライブラリ化および評価
(2) 核分裂収率評価のためのページアンニューラルネットワーク法の高度化 (再委託先：電気通信大学)	核分裂収率高精度予測のためのアルゴリズムのテスト	機械学習モデルの最適化	機械学習モデルの確立
(3) 機械学習による中性子断面積評価 (再委託先：原子力機構)	機械学習導入準備	中性子断面積予測	核データファイル整備
(4) 炉物理への影響評価 (再委託先：大阪大学)	モンテカルロ法の試計算	モンテカルロ法による炉心特性評価	炉心特性への影響評価
① ADSや新型炉における炉心特性への影響評価	ORIGENによる試計算	ORIGENによるバックエンドへの影響評価	ORIGENによるバックエンドへの影響評価
② 種々の燃料サイクルを想定したバックエンドへの影響評価	技術評価委員会の開催	技術評価委員会の開催	技術評価委員会の開催
(5) 研究推進	まとめ・評価	まとめ・評価	まとめ・評価

2.2 各年度計画

核分裂生成物の収率（核分裂収率）は原子炉の安全性を左右する崩壊熱や炉内での遅発中性子放出量の他、医療用の核医学検査薬の製造量や核変換技術、核セキュリティのための核鑑識の精度にも直結する非常に重要な核データである。核分裂収率データは自発核分裂を除くと 0.0253 eV、500 keV、14 MeV における中性子入射核分裂を対象として整備されてきたが、アプリケーションの多様化に伴い、従来の 3 つのエネルギー点以外の連続的なエネルギーでの核分裂収率へのニーズが高まっている。このニーズの高まりを受けて実験データは増えているものの、実験でアクセスできるエネルギーや核種には限りがある。

そこで本研究では 3 か年計画で、機械学習の専門家の知見と、核データ整備や核分裂メカニズムの専門家の知見を最大限に融合させて、未整備エネルギーでの核分裂核データを整備し、今後の核データ研究の発展やその基盤の維持を図った。さらに新たに構築した核分裂核データが炉物理へ与える波及効果を検証・評価した。

各年度の研究計画では、最初の年である令和 4 年度では、機械学習に基づく核データ構築のための基盤作りを目標とし、3 年計画の 2 年目である令和 5 年度では、機械学習に基づく核データ構築のための基盤作りを目標とした。最終年度である令和 6 年度は令和 5 年度までに精査・基盤整備した機械学習の手法を用いて核分裂収率および中性子断面積に関する核データを整備し、それらの炉物理への影響評価を行うことを目標とした。特に 3 年目である令和 6 年度の研究計画は、表 2.2 に示す通りである。

表 2.2 本計画の令和 6 年度月別研究計画の様子

題目 令和 6 年度「機械学習による未整備エネルギー領域での核分裂核データ構築と炉物理への影響評価」 月別年間計画												
項目	4 月	5 月	6 月	7 月	8 月	9 月	10 月	11 月	12 月	1 月	2 月	3 月
(1) 機械学習による核分裂収率予測と評価					核データライブラリ化および評価						成果報告書作成	
(2) 核分裂収率評価のためのベイジアンニューラルネットワーク法の高度化 (再委託先：電気通信大学)					機械学習モデルの確立						成果報告書作成	
(3) 機械学習による中性子断面積評価 (再委託先：原子力機構)					核データファイル整備						成果報告書作成	
(4) 炉物理への影響評価（再委託先：大阪大学） ① ADS や新型炉における炉心特性への影響評価 ② 種々の燃料サイクルを想定したバックエンドへの影響評価					炉心特性への影響評価						成果報告書作成	
					ORIGEN によるバックエンドへの影響評価							
(5) 研究推進					技術評価委員会の開催						まとめ・評価	

3. 業務の実施内容および成果

3.1 機械学習による核分裂収率予測と評価

3.1.1 大規模機械学習の準備とコード開発【R4】

(1) 核分裂収率学習モデルの最適化

ウランなどの核燃料に中性子が入射して誘起される核分裂において、発生する核分裂生成物の中に「どのような原子核が、どの程度の量含まれるか」という情報は、革新炉を含む全ての原子力システムの効率的な設計と安全性確保、バックエンドシステムの構築のためには欠かせないものである。この情報は核分裂収率と呼ばれる核データとして、これまで自発核分裂を除くと、熱中性子・高速中性子・14MeV 中性子を対象に整備されてきた。しかし使用済核燃料の再利用・再処理を考えると、従来の 3 つのエネルギー以外の様々なエネルギーを持つ中性子がウラン等に入射して誘起される核分裂での核分裂生成物の挙動が近年重要な課題となってきた。

一般に、特にウランなどのアクチノイド核種では、核分裂収率は数個のガウス分布の重ね合わせのような大局的二山ピーク構造に加えて、原子核の殻構造に由来する詳細なピーク構造を持つことが知られている。本研究では、このような構造を持つ核分裂収率に最適化した機械学習のアルゴリズムを実装することにより、実験データが乏しいエネルギー領域における核分裂収率予想値の飛躍的な信頼性向上を 3 か年計画で目指している。

3 か年計画の最初にあたる令和 4 年度は、 ^{235}U の中性子入射核分裂に対する評価済データが存在する 3 つの中性子エネルギー ($E_n=0.0253\text{ eV}/500\text{ keV}/14\text{ MeV}$) に対して、詳細ピーク構造の再現に必要な深層学習の手法およびパラメータを予備計算に基づいて最適化した。その上で実験データの存在しないエネルギー領域で期待される詳細ピーク構造を再現するために必要な機械学習モデルを実装し、テスト計算等でアルゴリズムやパラメータの最適化・精緻化を進めていった。さらに上記 3 つの中性子エネルギー以外の実験データを学習させ、予測値の精度向上を進めた。具体的には深層学習の一種であるベイジアンニューラルネットワーク (BNN) モデルを利用し、JENDL-5⁽¹⁾ の核分裂生成物質量数分布のデータを学習し、熱中性子、高速中性子および 14 MeV 中性子入射の核分裂による生成物の収率データを再現し、そのネットワークを用いて、 ^{235}U に対してデータの無いエネルギーである 1 MeV から 5 MeV までの核分裂生成物収率の予測を行った。

① 機械学習モデルの作成

令和 4 年度に構築した BNN モデルでは、図 3.1-1 および表 3.1-1 に示したように隠れ層を 2 層に設定しており、層と層の間の重み W とバイアス b の初期状態として、それぞれ標準正規分布、平均 0、標準偏差 0.1 の正規分布を用いた。活性化関数は双曲線正接関数 (\tanh) とし、各隠れ層のユニット数は 25 程度としている。入力層では、核分裂生成物の質量数 A 、中性子を標的核に入射して形成される複合核の陽子数 Z_n および質量数 A_n 、複合核の励起エネルギー E を与えている。 ^{235}U の中性子入射核分裂を例にとると、質量数 A を持つ核分裂生成物に対して、その質量数に対応する核分裂収率 y を出力層でアウトプットする。サンプリング手法としてマルコフ連鎖モンテカルロ

法(MCMC)を採用し、カーネル関数はハミルトニアン・モンテカルロ法(HMC法)の変種としてよく用いられているNo-U-Turn Sampler(NUTS法)⁽²⁾によって目的分布への接近を行った。伝統的なHMC法では、ステップサイズの設定が非常に重要である。ステップサイズが大きすぎるとRandom-walkに陥る可能性があり、逆に小さすぎると計算時間と計算コストが膨大になる可能性がある。それに比べ、NUTS法ではステップサイズの自動的な調整ができるため、ステップサイズとステップ数を考慮する必要性がない。サンプリング数に関しては、バーンイン期間(捨てバッチ数)とサンプリング数がいずれも2万回を超えるように計算をしている。MCMCにおける最適化は事後分布を最大にするMAP(Maximum a posterior estimation)推定法により実施した。

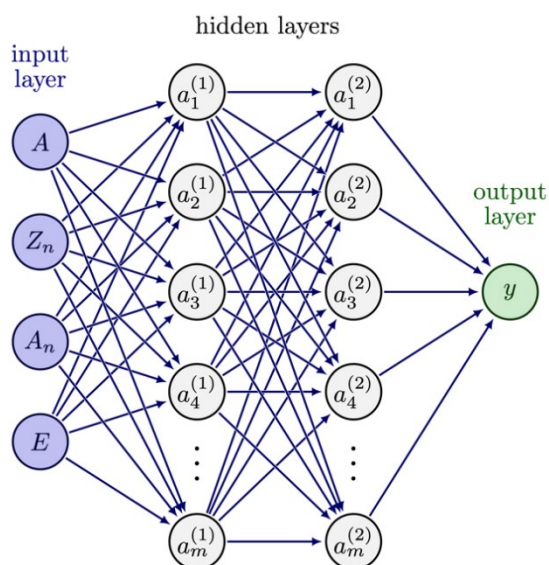


図 3.1-1 BNN の様子

W_1	平均 0, 標準偏差 1
W_2	平均 0, 標準偏差 1
W_3	平均 0, 標準偏差 1
b_1	平均 0, 標準偏差 0.1
b_2	平均 0, 標準偏差 0.1
b_3	平均 0, 標準偏差 0.1
活性化関数	tanh
層数	2 層
ユニット数	15, 20, 25, 30, 40
バーンイン期間	20000 以上
サンプリング数	20000 以上
ステップサイズ	1
カーネル関数	NUTS

表 3.1-1 BNN の設定

② 学習データの改良

核データにおいて $^{233, 235, 238} \text{U}(\text{n}, \text{f})$ 、 $^{239, 241} \text{Pu}(\text{n}, \text{f})$ と $^{252} \text{Cf}(\text{sf})$ のデータは実験が頻繁に行われるために信頼性が高く、かつ重要な反応系であるため、これらのデータを学習データに導入した。その上で、JENDL-5 中の核分裂収率⁽²⁾データを 8:2 で分け、80%を学習データとし、20%を検証用データとした。検証用データとして選んだのは $^{232, 236} \text{U}$ 、 $^{238, 240} \text{Pu}$ 、 $^{243, 244} \text{Cm}$ 、 $^{251} \text{Cf}$ である。

JENDL-5 の中性子入射の FPY データは、0.0253 eV (熱中性子)、0.5 MeV と 14 MeV のみに対して整備されており、これだけでは BNN モデルに対して、エネルギー間の開きが大きく、データ点も少ないため学習データとしては不十分と考えられる。そこで以下のように、JENDL-5 以外の実験データと従来の収率予測で良く用いられている計算値を学習データに導入した。

1) 累積核分裂収率の実験データ

実験データとして、JENDL-5 の熱中性子、0.5 MeV と 14 MeV 以外に、入射エネルギー 0.58 MeV、1.37 MeV、2.37 MeV、3.60 MeV、4.49 MeV、5.50 MeV、8.90 MeV と 14.8 MeV の累積核分裂収率データがあるが^(3,4)、JENDL-5 のように核分裂生成物の質量数 66 から 172 までをカバーする完全なデータではなく、限られた質量数のみをカバーする質量数分布のデータとなっている。しかし、本研究ではこのような不完全な収率データも学習または検証用データとして使用することとする。ここで、これらの核種では累積収率と質量収率の差は非常に小さいため、今回はこれらのデータを学習データに導入し、その効果を検証した。

2) 片倉氏の 5Gaussian 計算コードの計算値

原子力機構の片倉氏が開発したコードで計算された 0.5 MeV と 14 MeV の間のエネルギーにおける計算値を学習データに導入する⁽⁵⁾。片倉氏が開発したコードでは 5 つの正規分布に基づいて、実験の FPY データをフィットするようにパラメータを調整している。計算値を入れることによって、ネットワークの出力が計算コードに依存する可能性があるが、今回はデータに重みをつけることによって原子核の殻効果に由来する詳細なピーク構造を予測できるように調整した。今回学習データに導入したのは ^{235}U と ^{244}Cm の 1 MeV から 13 MeV までの 1 MeV ずつの片倉氏の FPY データである。

以上をまとめると本研究の学習データには、上記で示した JENDL-5 の FPY データ、実験の累積核分裂収率データと 5Gaussian コードの計算値がある。それらデータに下の表 3.1-2 のように、データ拡張により重みをつけた。

1 倍	2 倍	3 倍	4 倍
計算値全て	他の JENDL-5 データ	^{233}U	^{235}U
^{254}Es	累積収率の実験値	^{238}U	^{239}Pu
^{255}Fm		^{241}Pu	^{252}Cf

表 3.1-2 学習データの重みの内訳

JENDL-5 の中で核データとして非常に重要なデータ、特に信頼性の高いデータ、実験が活発ではない反応系のデータ ($^{254}\text{Es}(n, f)$ と $^{255}\text{Fm}(n, f)$ のデータ)があるため、4 つの重要性順位を決定して重みをつけた。最も重要なデータとして原子炉の設計上不可欠であり、かつ実験データ数も桁違いに多いために原子核の殻構造由来の詳細なピーク情報を含む $^{235}\text{U}(n, f)$ 、 $^{239}\text{Pu}(n, f)$ 、 $^{252}\text{Cf}(sf)$ の重みを最大にし、同様に原子炉設計上欠かせないが実験データ数が先ほどの 3 核種に比べると少ない ^{233}U 、 ^{238}U 、 ^{241}Pu の重みを二番目に多くしている。データの重みづけに関しては、imbalanced learning の over sampling のようにデータを取り扱い、表 3.1-2 にしたがって重みづけを行った。以上の手続きを行った重み付き学習データを BNN モデルに導入する。

(2) 検証用データに対する予測値と機械学習モデルの評価

機械学習利用の実効性については、成立性評価 (Feasibility Study) として確認する必要がある。その上で、 ^{235}U の中性子入射核分裂で十分な学習を済ませた後、他のアクチノイド核種についても評価済データや実験値を用いた学習を行うことで、最終的には主要なアクチノイド核種を網羅した中性子エネルギーに依存する核分裂収率の整備を行うことが本研究計画の目標である。

そこで3か年計画の初年度にあたる令和4年度は、様々な中性子エネルギーでの核分裂収率データを調査し、機械学習で使用する入力データの準備を進めた。さらに、機械学習を用いて予測した核分裂収率の成立性評価 (Feasibility Study) に利用可能な実験データの収集を行った。

具体的には、様々な中性子エネルギーでの核分裂収率データとして EXFOR を調査し、参考文献(3)や参考文献(4)のように中性子エネルギーが0.58 MeV から14.8 MeV の286個のデータを収集し、入力に用いた。図3.1-2にはその一例を示す。図3.1-2では、参考文献(3)の $^{239}\text{Pu}(n, f)$ 反応の累積核分裂収率データである。このデータは全ての質量数の値が測定されておらず、部分的な収率データとなっている。整備されている核種は質量数の小さい順番に示すと、 ^{91}Sr 、 ^{92}Sr 、 ^{95}Zr 、 ^{97}Zr 、 ^{99}Mo 、 ^{103}Ru 、 ^{105}Ru 、 ^{127}Sb 、 ^{132}Te 、 ^{133}I 、 ^{135}Xe 、 ^{136}Cs 、 ^{140}Ba 、 ^{143}Ce 、 ^{147}Nd である。一方、図における0.5 MeVと14.0 MeVの実線はJENDL-5のデータである。ただし、 ^{136}Cs のデータのみ累積核分裂収率ではなく、独立核分裂収率データとなっている。この ^{136}Cs のデータがモデルの一般性と汎用性に影響を与える可能性があるため、学習データからは除外した。

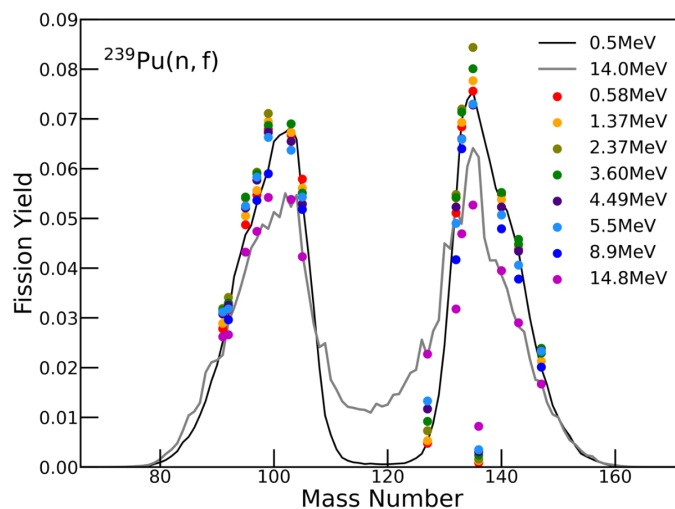


図 3.1-2 機械学習モデルの入力に用いた核分裂収率データの例。実線は0.5 MeVおよび14 MeVにおけるJENDL-5の評価値。色付きの各点は参考文献4の $^{239}\text{Pu}(n, f)$ 反応の累積核分裂収率データの値である。

(3) 検証用データの予測性による妥当性評価

訓練されたBNNモデルを利用して得られた未知の中性子エネルギー領域における核分裂収率が信頼できる値であることを保証するためには、妥当性評価が必要である。最も簡単な妥当性評価

としては、ランダムに手持ちのデータを 2 つに分けて、一方を学習に用い、残りを検証用に用いることである。本研究の場合では、3.1.1(1)節の項目②の冒頭にて説明したとおり、JENDL-5 中の核分裂収率データを 8 : 2 で分け、80%を学習データに用い、残り 20%を検証用データに用いている。3.1.1(1)節の項目②-2)で記載したとおり、それぞれの核データには重要性に違いがあるため、検証用データをランダムに抽出するのではなく、考慮した上で選ぶこととした。本研究で検証用データとして選んだのは ^{232}U 、 ^{236}U 、 ^{238}Pu 、 ^{240}Pu 、 ^{243}Cm と ^{251}Cf である。

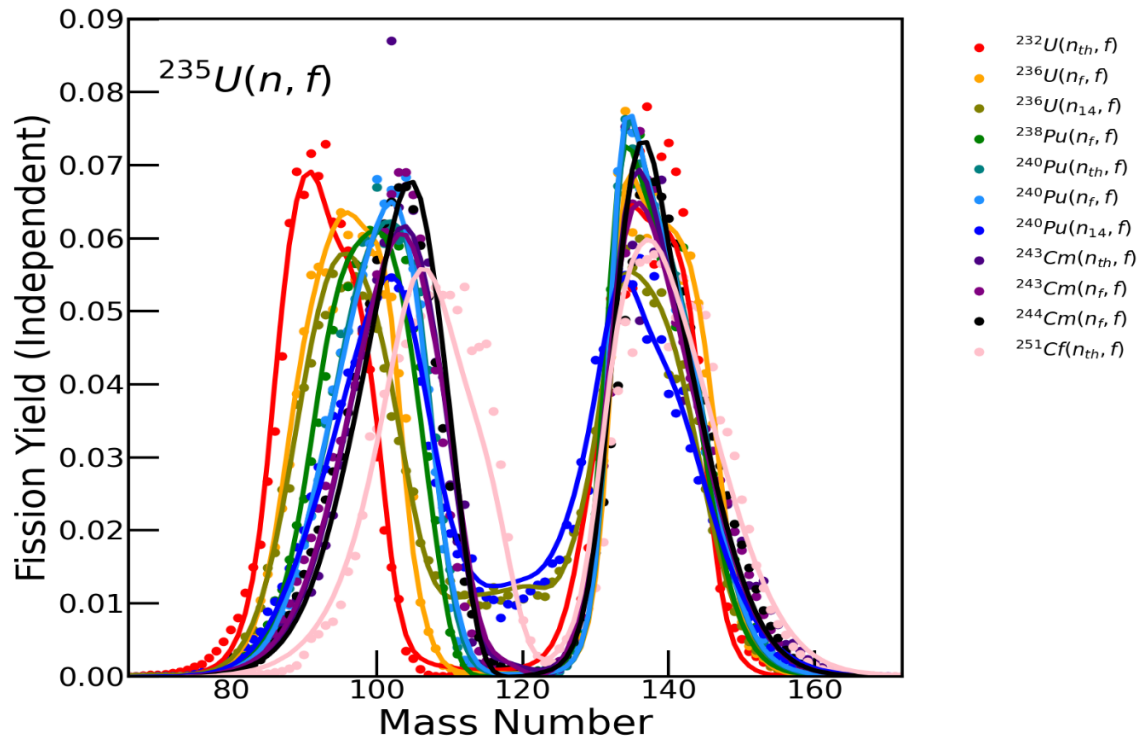


図 3.1-3 BNN による予測データ（実線）と検証用の 20%の JENDL-5 値（点）の比較

図 3.1-3 では、上記のようにして検証用データを選出し、残った手持ちのデータの 8 割を学習に用いた BNN モデルによる予測値を検証用データである JENDL-5 の 2 割のデータと比較している。この比較から、予測された核分裂収率が概ね $A=134$ のピークとそれに対応する核分裂片からなる軽いピークの二山構造を良く予測できていることがわかる。またアクチノイドの核分裂収率は一般に核分裂する原子核の質量数が増加しても、重いピークの位置がほとんど移動しない一方で、軽いピークについては核分裂する原子核の質量数が増加すれば増加するほど右へ移動することが知られている。この物理的な性質の予測再現性について検証すると、図 3.1-3 に示した凡例の一番下に対応するピンク色の ^{251}Cf の場合では実験値の「谷」の部分が特に短くなっているが、それ以外の核種でも評価済核データの動向と良く一致していることがわかる。

従って今回構築した BNN モデルは、実験値や評価値の存在するエネルギーに対しては、核分裂収率の性質として良く知られており物理的にも期待される挙動を精度良く予測できることがわかった。未知のエネルギー領域の推測値に対しても学習されたエネルギーに近い場合には信頼性を持つと期待できる。しかし学習データで与えたエネルギーから離れると、例え学習させたエネルギー

ギー間のエネルギーであっても現状のモデルでは不連続かつ物理学的に不自然な収率が与えられてしまう。それゆえに更なる改良は不可欠である。令和 5 年度は標準正規分布に固定していた事前分布を half-Cauchy 分布, heavy-tailed 分布, Laplace 分布に変更するなどして更なる改良に取り組む。また実験値や理論値の導入による学習データの拡充だけでは微細なピーク構造の再現には至っておらず、この点の改良方法を令和 5 年度に検討することとした。

3.1.2 アクチノイド核の核分裂収率整備【R5】

(1) 核分裂収率学習モデルの最適化

3 年計画の最初にあたる令和 4 年度は、 ^{235}U の中性子入射核分裂に対する評価済データがある 3 つの中性子エネルギーに対して詳細ピーク構造の再現に必要な深層学習の手法およびパラメータを予備計算に基づいて最適化した。しかし、学習データで与えたエネルギーから離れると、それが学習させたエネルギー間のエネルギーであっても現状のモデルでは不連続かつ物理的に不自然な収率が出力されてしまうため、更なる改良が不可欠であった。また、令和 4 年度に構築した BNN モデルでは特に軽い核分裂片の微細構造が再現できない点が問題であった。

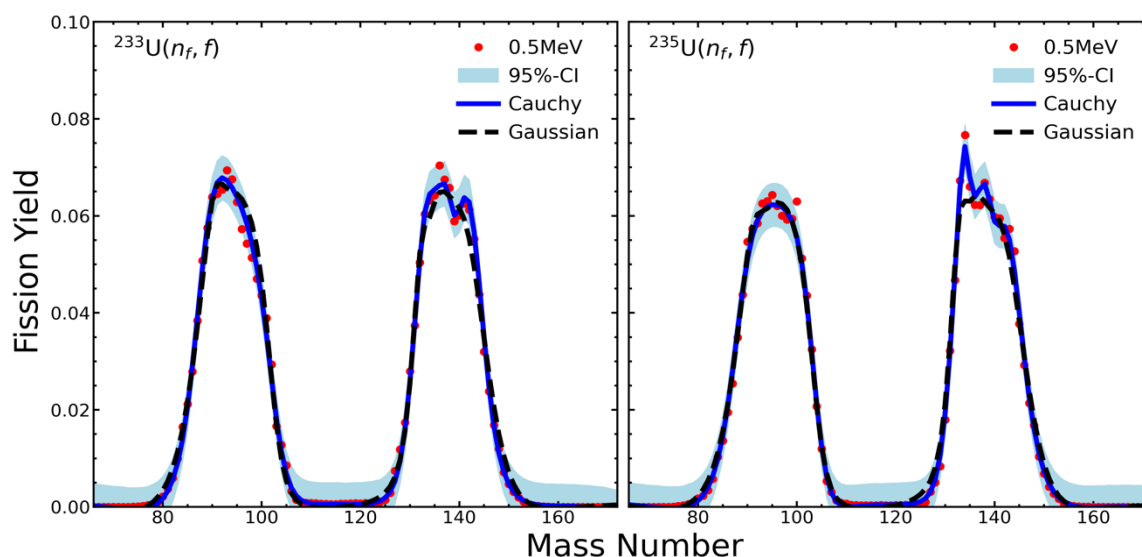


図 3.1-4 事前分布を変更した場合の ^{233}U , ^{235}U の学習結果の比較

青の実線が事前分布に Cauchy 分布を用いた場合で、黒の破線が事前分布に Gauss 分布を用いた場合の結果である。左が ^{233}U に高速中性子が入射した場合で、右が ^{235}U に高速中性子が入射した場合である。

そこで 3 年計画の 2 年目にあたる令和 5 年度は、 ^{235}U の中性子入射核分裂に対する評価済データがある 3 つの中性子エネルギーに対して、詳細ピーク構造の再現に必要な深層学習の手法の改良および予備計算に基づくパラメータの最適化を実施した。具体的には、令和 4 年度に実装された機械学習モデルのテスト計算結果をフィードバックしながら、さらにアルゴリズムやパラメータの最適化・精緻化を進めた。令和 4 年度に収集した様々なアクチノイド核種および中性子エネルギー領域での核分裂収率実験データを学習させ、予測値の精度向上を進めた。機械学習利用の実効性については、成立性評価 (Feasibility Study) として確認した。

① 事前分布の変更

機械学習モデルを改良するにあたり、最初に取り組むべきことは BNN モデルの重みとバイアスの事前分布である Gauss 分布を他の分布に変更することであった。そこで令和 4 年度に事前分布

として仮定していた Gauss 分布を Cauchy 分布に変更して計算した結果を図 3.1-4 に示す。図 3.1-4 では、事前分布以外のモデルの設定を同一と仮定した際に、実線で示した Cauchy 分布を事前分布とした場合の方が、破線で示した Gauss 分布を事前分布に用いた場合に比べて、詳細なピーク構造の再現性が高くなっていることがわかる。しかし質量数 $A=80\sim 110$ 近傍の軽い核分裂片に注目すると、特に ^{235}U の中性子入射核分裂の質量収率で質量数 $A=100$ 前後に現れる鋭い山と谷の構造をいずれの場合にも再現できていない。このように事前分布の変更では改善できることに限りがあり、軽いピーク領域では、いずれの場合でも滑らかな曲線構造が強く残っている。

(2) 学習データの改善

令和 4 年度に構築した機械学習モデルでは、学習データとして JENDL-5 の一部および定性的に核分裂収率をよく説明することで知られている 5Gaussian モデル^[5]の値を用いた。その際、微細構造が再現しにくい傾向が見られたため、それを改善するために、データ拡張 (Data Augmentation) という手法を用いて微細構造に重みをつけた学習を行った。令和 5 年度は令和 4 年度の P0 フォロー時にいただいた意見を踏まえて、以下の 2 つの点に着目して学習データの改善を図った。

① 核物理理論に基づく計算値の導入

令和 4 年度に理論値として学習データに用いた 5Gaussian モデルは、熱中性子や高速中性子入射の核分裂の実験値を 5 つの Gauss 分布の重ね合わせで表現する現象論的なモデルであり、核分裂質量収率の幅やピークの中心値を広く説明することができる。その一方で、本課題の重要なテーマである原子核の殻効果に起因する詳細なピーク構造の再現は得意ではない。

東京科学大学グループでは揺動散逸定理に基づき、核分裂で取りうる全ての配位を記述できる多次元 Langevin モデルを開発してきた。特に 4 次元 Langevin モデルは、アクチノイドの核分裂片の質量収率や全運動エネルギーを系統的に良く再現できるモデルである。その再現性を核データで要求される実験値との差を 5% 以内までに収めるために、新たに開発したモデルが 4.5 次元 Langevin モデル^[6]である。令和 5 年度の大きな進展の一つは、4.5 次元 Langevin モデルを用いて様々な中性子エネルギーでの核分裂片（即発中性子放出前のもの）の質量数分布を計算し、それらの値をさらに統計崩壊させて得られた独立収率を学習データとして導入した点である。なお、4.5 次元 Langevin モデルは計算コストが高いため、その結果が得られていない核種については引き続き 5Gaussian モデルの値を学習データとして採用している。

重い核分裂片および軽い核分裂片の両方において、詳細なピーク構造の情報を核理論に基づいて導出するにあたり用いたのは、The General fission (GEF) モデル、Hauser-Feshbach Fission Fragment Decay (HF3D) モデルおよび 4.5 次元 Langevin モデルである。

今回 4.5 次元 Langevin モデルで計算した核種は ^{232}Th 、 $^{233, 235, 238}\text{U}$ 、 $^{239, 241}\text{Pu}$ であり、Langevin 計算で仮定した中性子入射エネルギーは 1 MeV から 5 MeV までの 1 MeV 毎のエネルギー値である。ここで中性子入射エネルギーを 5 MeV 以下に限定した理由は、入射中性子エネルギーが 5 MeV 以上

になると multiple-chance fission の考慮が必要となるためである。なお理論計算で得られる値に対する重みは 1 に設定している。

② 学習データの重みづけと検証用データ

令和 4 年度に引き続き、本研究では JENDL-5 にある 80% のデータ (34 核種) を学習データとして使用し、残りの 20% (7 核種 $^{232, 236}\text{U}$ 、 $^{238, 240}\text{Pu}$ 、 $^{243, 244}\text{Cm}$ 、 ^{251}Cf) のデータを検証用データとして取り扱っている。令和 4 年度の取り組みでは、JENDL-5 だけでは学習データが十分でないことがわかっており、令和 5 年度は学習データとして、他のいくつかの実験データと理論計算データを新たに導入した。また核種毎に核分裂収率データの重要性和信頼性が違うため、データに重みをつけて、データ拡張を行っている。

核種毎に実施した学習データの重みづけの手順は次の通りである。最初に、核分裂収率データの重みを 1, 2, 3, 4 の 4 段階に分ける。重みを 3, 4 に設定したデータは主に応用上の重要度と信頼性が非常に高いデータで、重みを 1, 2 に設定したデータは応用上の重要度や信頼性が比較的低いものを対象とした。重要度順にその内訳は以下の通りである。

まず、重みを 4 にした核種は $^{235, 238}\text{U}$ 、 ^{239}Pu と ^{252}Cf である。前の 3 つの核種は、核分裂収率データの応用価値が高く信頼性も高い。 ^{252}Cf は自発核分裂核種であり、収率データに関して非常に多くの実験データがあるだけでなく、核物理でも頻繁に取り上げられる核種である。

次に重みを 3 にした核種は、 ^{232}Th 、 ^{233}U 、 ^{241}Pu 、 ^{245}Cm と ^{249}Cf である。前の 3 つの核種は次世代高速炉で利用可能な核燃料物質と核原料物質であり、残る 2 つ ^{245}Cm および ^{249}Cf は長寿命核種であり、大阪大学の担当する燃焼計算において必要な核種である。

重みを 2 にした核種は引用文献^(3, 7, 8, 9)に含まれる ^{232}Th 、 $^{235, 238}\text{U}$ 、 ^{239}Pu の実験データである。学習データに選んだこれらの実験データは全て 2011 年以降最新のデータであり、2011 年より前の古いデータは今回の学習データに入っていない。2011 年より前の古い実験データに関しては検証用データとして扱っている。

最新の実験値に加えて、JENDL-5 の他の核種の収率データ (^{254}Es と ^{255}Fm 以外) も重み 2 のグループに設定している。これらの核種は令和 5 年度の燃焼計算では要求されない核種であったことから、学習には必要だが予測の対象ではないことから、ベイジアンニューラルネットワーク (BNN) モデルを補足する学習データとして扱っている。

最後に、重みを 1 にしたのは JENDL-5 の ^{254}Es と ^{255}Fm 、および理論計算値である。 ^{254}Es と ^{255}Fm の評価値の重みを 1 に設定した理由は、これらの核の核分裂収率特性がその他の核種の持つ核分裂収率データの系統性に反するためである。BNN モデル全体の微細構造への影響を考慮し、これら 2 つの特異な核種の重みを下げることにした。また理論計算値の重みを 1 に設計した理由は、実験値や評価値の再現性が未だ限定的であるためである。今回導入した GEF コードでは ^{232}Th 、 $^{233, 235, 238}\text{U}$ 、 $^{239, 241}\text{Pu}$ 、 ^{245}Cm および ^{249}Cf の 1 MeV から 5 MeV まで 1 MeV 刻みで計算値を用意した。H3FD モデルでは、 $^{235, 238}\text{U}$ および ^{239}Pu の 1 MeV から 5 MeV まで 1 MeV 刻みで、4.5 次元 Langevin では ^{239}Pu の 1 MeV から 5 MeV まで 1 MeV 刻みの計算値を各々用意した。

以上のように学習データに関しては、ロバスト性を欠かない範囲でデータ拡張を行った。

(3) 殻効果因子の開発

本研究の研究手法であるベイジアンニューラルネットワーク (Bayesian Neural Network: BNN) モデルはデータ駆動的な深層学習モデルであるため、単なる内挿以上の知見を引き出すためには、物理学的知見の導入が重要な鍵となる。そこで令和 5 年度は、殻効果因子を入力情報に取り入れることで物理学的知見を機械学習モデルに組み込むことを試みた。この殻効果因子は核分裂生成物の独立収率に現れる殻効果や即発中性子多重度の相互作用を反映するようなパラメータとして下記の要領で現象論的に設計している。

① 殻効果因子の設計

ウラン近傍の重い核の核分裂では、質量数 $A=132$ の球形閉殻および質量数 $A=140-144$ の変形閉殻の影響により重い核分裂片の質量数が支配されていることが物理的知見として良く知られている。さらに変形した原子核から放出される即発中性子の数との競合の結果、核分裂生成物の独立収率に本課題で注目している微細構造が形成されている。このようなアクチノイドの核分裂での性質に対して、1990 年に Brosa 等^[10]が現象論的に取り扱う手法を提案した。Brosa 等が提案した考え方は核分裂を似た性質を持つモードごとに分けるというもので、質量数 $A=134$ 周辺にピークを持つものを Standard I Fission Mode (ST1)、 $A=140-144$ 周辺にピークを持つものを Standard II Fission Mode (ST2) としている。先述の学習モデルで新に導入した 4.5 次元 Langevin 模型でも、ST1 および ST2 に相当する成分を重ね合わせることで核分裂片の質量数分布の再現性を最適化していた。殻効果因子についても同様の考え方で、下記のような 6 つの Gauss 分布の重ね合わせによって表される殻効果因子を導入した。

$$f(E, Af, A) = \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \times (W_1 \mathcal{N}_{1,4} + W_2 \mathcal{N}_{2,5} + W_3 \mathcal{N}_{3,6})$$

上記の式において $\exp(-E/kT)$ は Boltzmann 分布である。また、 $\mathcal{N}_{1,2,3,4,5,6}$ はそれぞれ以下のように与えられる。

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_1(A; \mu = 134, \sigma = 1) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(A - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \\ \mathcal{N}_2(A; \mu = 140, \sigma = 1), \mathcal{N}_3(A; \mu = 144, \sigma = 1) \\ \mathcal{N}_4(A; \mu = Af - 134, \sigma = 1) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left(-\frac{(A - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \\ \mathcal{N}_5(A; \mu = Af - 140, \sigma = 1), \mathcal{N}_6(A; \mu = Af - 144, \sigma = 1) \end{aligned}$$

ここで $\mathcal{N}_{1,2,3}$ は平均が 134, 140, 144、分散が 1 の Gauss 関数であり、 $\mathcal{N}_{4,5,6}$ は重い核分裂片の片割れに対応する軽いピーク領域の Gauss 関数である。

図 3.1-5 は、今回設計した殻効果因子関数の挙動を示している。図から殻効果因子関数が「入射する中性子のエネルギー上がるほど殻効果が抑制されて液滴模型的になる」という物理描像に即した振る舞いを示すことが見て取れる。

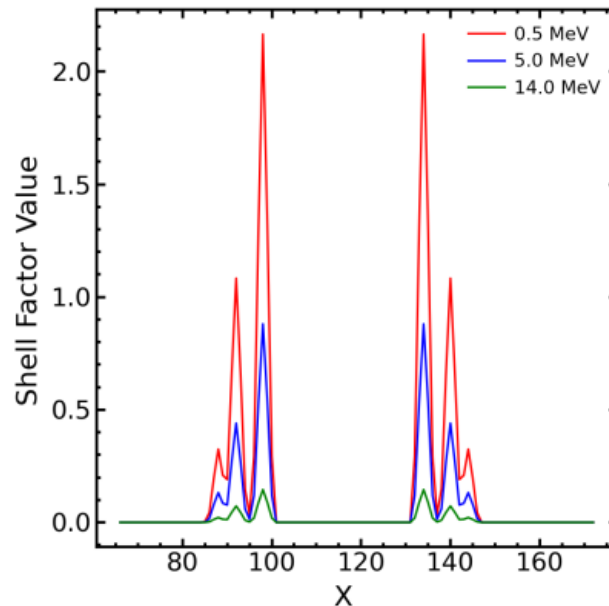


図 3.1-5 殻効果因子関数の挙動

横軸は核分裂生成物の質量数を示しており、
縦軸は殻効果因子の値を示している。

② 殻効果因子を導入したモデルの再現性評価と予測値の検証

殻効果因子関数 $f(E, A_f, A)$ における 6 つの Gauss 関数の重ね合わせの重みには、期待される殻効果の強さから W_1, W_2, W_3 の 3 つの異なる値を与え、中性子入射エネルギー依存性を持たせるために、Gauss 関数の重ね合わせの後に Boltzmann 関数を乗じている。ここでは $W_1=6, W_2=3, W_3=0.8$ としている。Boltzmann 関数を乗じることで、入射中性子エネルギーが高ければ高いほど殻効果が核分裂片への影響が小さくなるという傾向を反映できる。

上記の手順で設計された殻効果因子関数を図 3.1-6 のように、第五入力として、機械学習モデルに導入した。殻効果因子 $f(E, A_f, A)$ は ^{235}U の低エネルギー中性子入射反応で得られる質量数分布でピーク位置に対応する質量数 $A=134, 140, 144$ に重みをつけることを目的として設計したが、今回導入した殻効果因子は現象論的な側面が強く、ウランから離れた核種での妥当性は検討すべき課題である。令和 5 年度の後半では図 3.1-6 の SF2 に示すように殻効果因子の改良を行った。ここで、SF および SF2 は $f(E, A_f, A)$ で定義される共通の関数形を持つが、SF は $A=134, 140, 144$ に重みを持ち、エネルギーのスケーリング因子 $kT=5 \text{ MeV}$ に設計しているが、SF2 は $A=136, 140, 144$ に重みを持つ、エネルギーのスケーリング因子 $kT=1.5 \text{ MeV}$ に設計している。

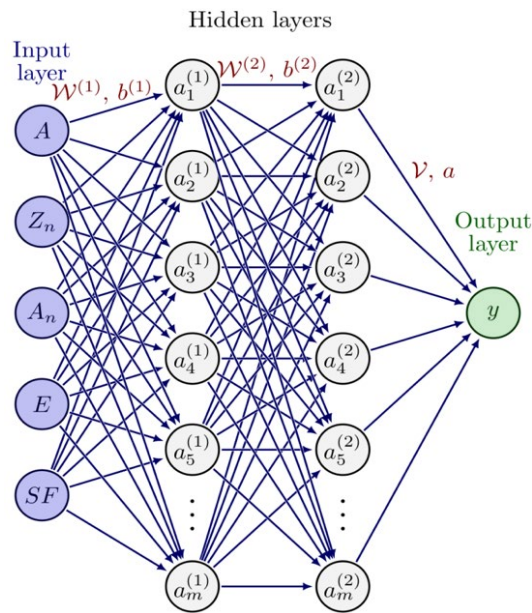


図 3.1-6 殻効果因子を導入したベイジアンニューラルネットワーク

図 3.1-7 では殻効果を導入した BNN モデルと殻効果を導入していない BNN モデルの再現性（学習に用いたデータと BNN モデルの出力値の差）と検証性（検証用データと BNN モデルの出力値の差）の違いを比較している。X 軸が各隠れ層のユニットの数、左側の Y 軸が ^{235}U の学習データの再現誤差（赤系の実線）で、右の Y 軸は検証用に用いた 20% JENDL-5 (学習データに入っていない) のデータの予測誤差（青色系の実線）である。

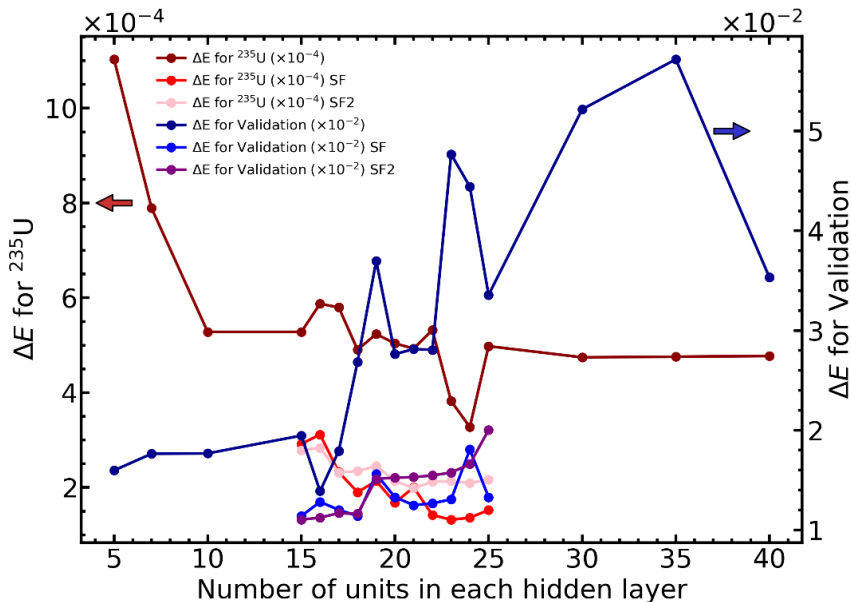


図 3.1-7 殻効果因子の導入による再現性と検証性の比較

凡例において SF の記載がない実線は殻効果因子が入っていない BNN モデルでの結果であり、凡例に SF または SF2 の記載のあるものは殻効果因子を入力に導入した場合の BNN モデルの結果で

ある。比較した結果を見ると、殻効果因子がある BNN モデルでは、殻効果因子がない BNN モデルに比べて、再現性と検証性が 2 倍ほど改善することが確認できた。図中の SF および SF2 は前述のとおりであり、現状では SF の場合のほうが学習データの再現性が高いものの、SF2 のほうが予測された値の検証性は高く、最終的な殻効果因子の設計に向けて検討途中の段階である。最終年度では殻効果因子を最適化することで更なるモデルの精度向上を目指す。

殻効果因子導入が再現性と検証性を同時に大幅に改善することがわかったので、次に実際の質量収率に対する検証性の度合いを図 3. 1-8 に示す。

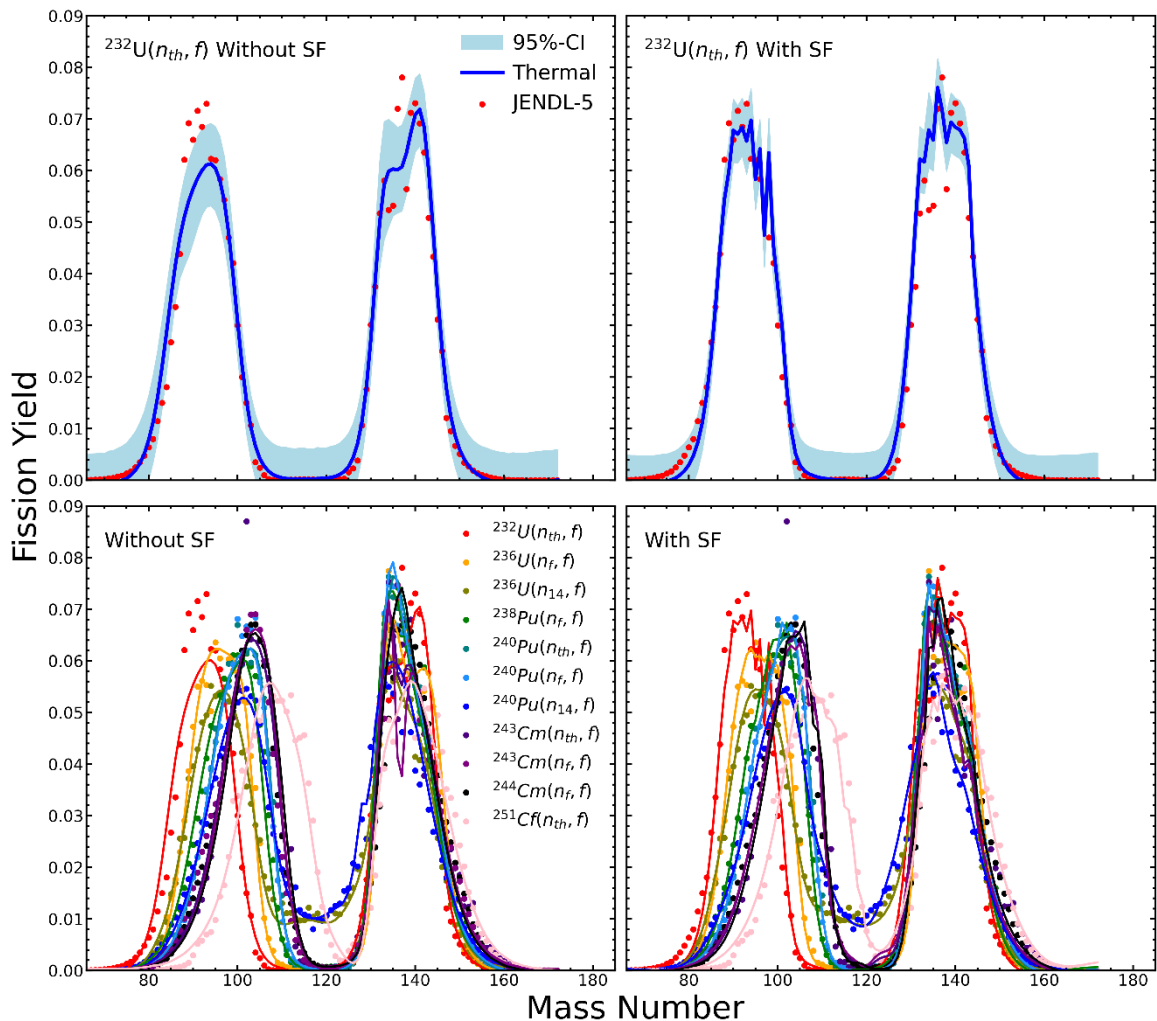


図 3. 1-8 核分裂収率の検証用データと JENDL5 の比較

図 3. 1-8 の上の 2 つが ^{232}U の熱中性子入射核分裂の検証性を示しており、下の 2 つの図が全ての検証用データ（JENDL-5 で学習に用いなかった残りの 20%）と対応する核種の JENDL5 の値の比較図である。また、左の 2 つの図は殻効果因子が入っていない結果であり、右の 2 つの図は殻効果因子が入っている結果である。これらの比較から、殻効果因子を導入することにより、 ^{235}U の重いピーク領域の微細構造の再現性が非常に向上したうえ、令和 4 年度までのモデルでは滑らかな曲線となっていた軽いピーク領域に本来期待されるべき微細構造が出現したことがわかる。また殻効果因子の導入により、下半分に示した検証性も明らかに改善傾向にあることが見て取れる。

これによりユニット数も最適化できたことがわかる。

次に殻効果因子の導入による ^{235}U の質量収率のエネルギー依存性の予測結果を図 3.1-9 に示す。図では検証用データとして L. E. Glendenin 等⁽¹¹⁾の実験値を利用して、BNN の予測結果との比較を行った。エネルギー毎に比較してみると、中性子エネルギーが 5.5 MeV までの場合には実験値が予測の信頼区間の中に入っており、今回の改良により BNN モデルは高い精度で予測値を与えることができることがわかった。ただし、6 MeV になると対称核分裂に対応する質量収率の中央の分布に対して、BNN モデルが若干過大評価する。丁度このエネルギー付近から multiple-chance fission が影響し始めることから、この過大評価に関しては必ずしも問題ではないと考える。

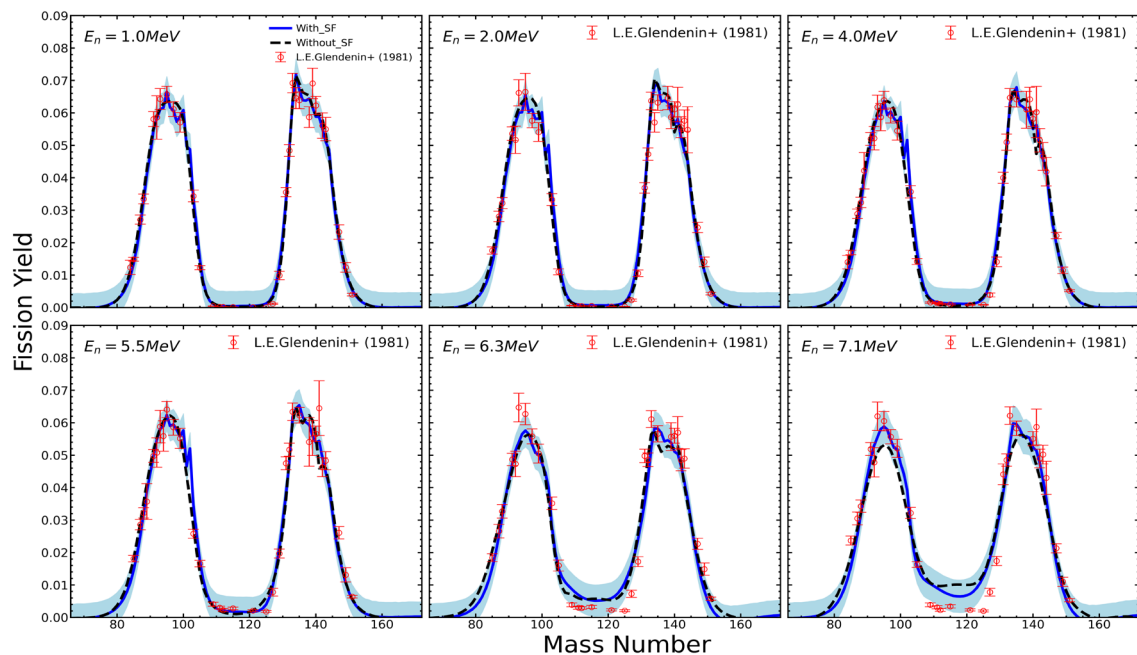


図 3.1-9 殻効果因子の導入による ^{235}U の核分裂収率のエネルギー依存性の予測結果

以上のように予測された質量収率は、最終的に炉物理計算に引き渡される。多くの場合には物理的に妥当と判断できる核分裂収率が得られたが、いくつかの例外も出てきた。下図にいくつかの例外を示す。これらの場合は、そのままの予測値を炉物理側に引き渡すには妥当ではない。そこで物理的に期待される値になるように、以下の手順で補正を行った。

線形表示では目立たなかった値の極めて小さな質量収率の中には対数表示した際に物理的に妥当でない挙動が出現する場合がある。このような挙動が現れる非常に小さい領域には非対称度が大きい質量収率の両端近傍の領域と対称核分裂成分に対応する質量収率の中央領域がある(図 3.1-10)。そこで質量分布の両端付近の領域の場合には 2 次外挿による補正、中央領域では 2 次内挿による補正を行った。具体的な方法を ^{239}Pu の場合を例に説明する。

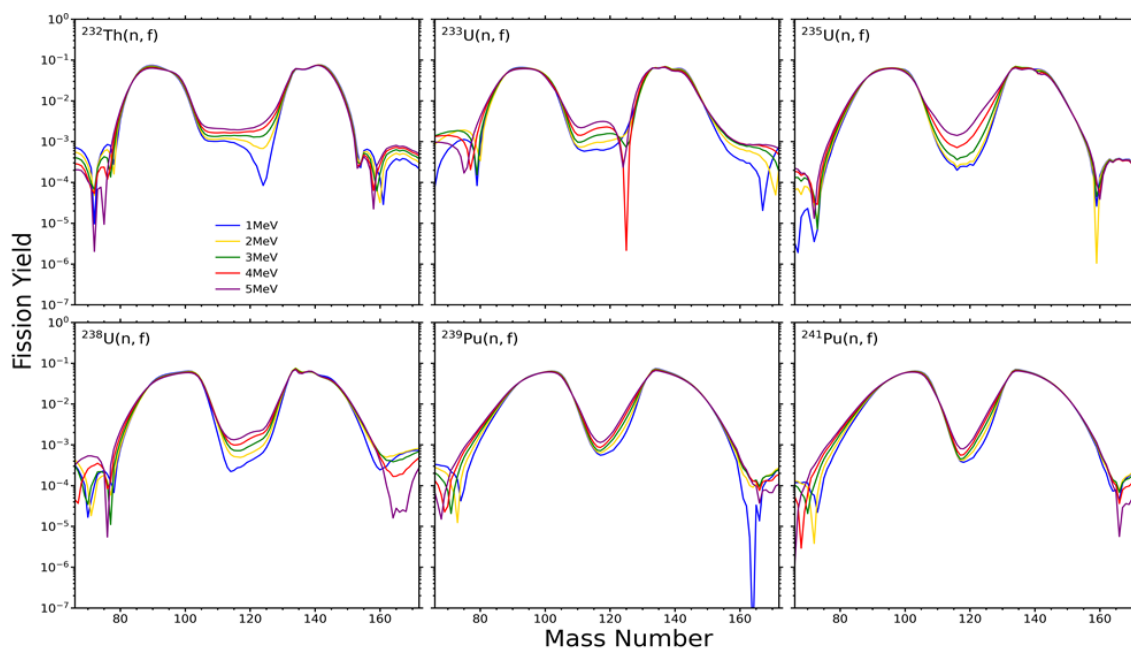


図 3.1-10 ^{239}Pu での補正範囲の決め方

まず、「異常」と思われる範囲を確認する。図 3.1-11 に示されるように、左の赤枠に囲まれた質量数 $A=66-82$ のデータと右の赤枠に囲まれた質量数 $A=158-172$ のデータを排除する。排除した後、外挿補間に使う範囲を決める。図 3.1-11 の左の赤枠のように、この場合には質量数 $A=66-81$ のデータを排除したい。その場合には外挿補間に使う範囲は質量数 $A=82-88$ とする。基本的に 4 つ以上の質量数を外挿で利用するように決めると良いが、外挿に利用するデータ数は状況に応じて調整できる。

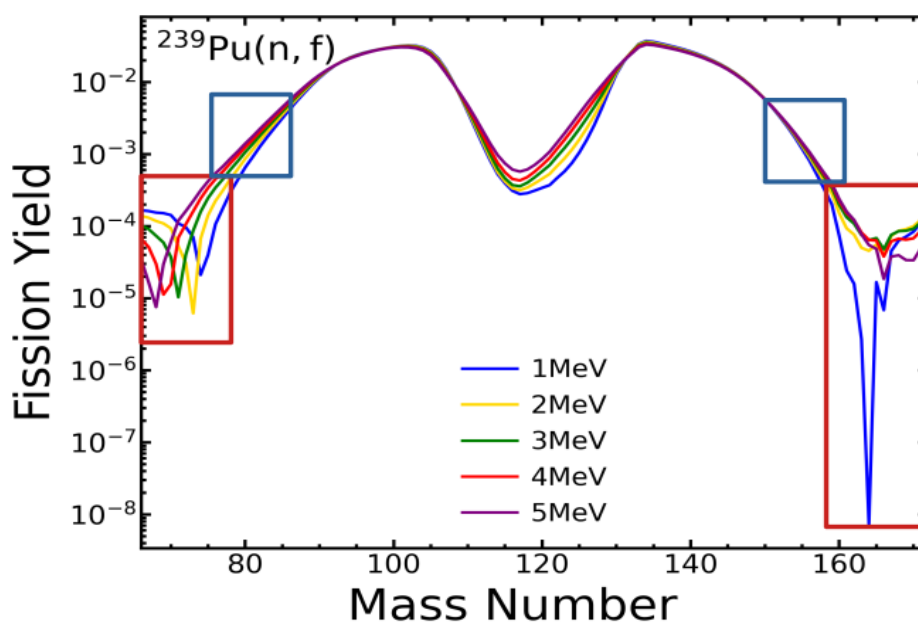


図 3.1-11 ^{239}Pu での補正範囲の決め方

まず、「異常」と思われる範囲を確認する。図 3.1-11 に示されるように、左の赤枠に囲まれ

た質量数 $A=66-82$ のデータと右の赤枠に囲まれた質量数 $A=158-172$ のデータを排除する。排除した後、外挿補間に使う範囲を決める。図 3.1-12 の左の赤枠のように、この場合には質量数 $A=66-81$ のデータを排除したい。その場合には外挿補間に使う範囲は質量数 $A=82-88$ とする。基本的に 4 つ以上の質量数を外挿で利用するように決めると良いが、外挿に利用するデータ数は状況に応じて調整できる。

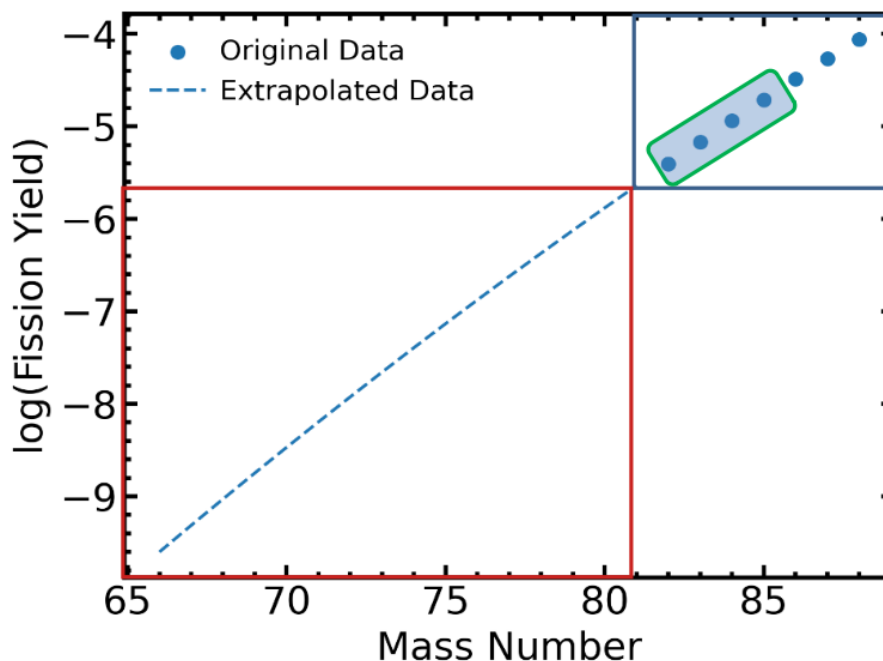


図 3.1-12 外挿補間に用いるデータ範囲 (^{239}Pu の場合)

外挿補間に利用するデータ範囲を図 3.1-12 の青枠に囲まれた質量数 $A=82-88$ とした後、曲線 $y = ax^2 + bx + c$ を用いて 2 次外挿を行う。外挿補間が終わった後の様子を図 3.1-13 に示す。

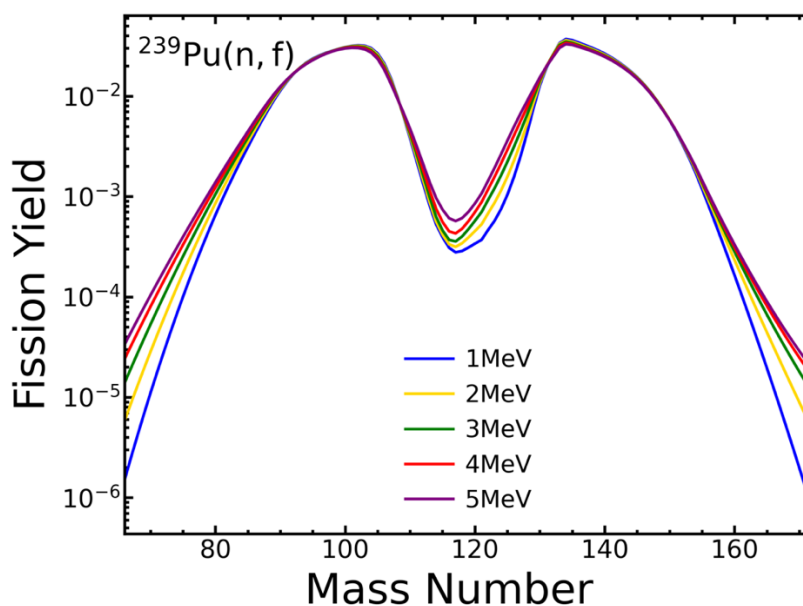


図 3.1-13 外挿補間後の ^{239}Pu の核分裂収

次に異常値が中央領域に出現した際の 2 次内挿手順について ^{233}U を例として説明する

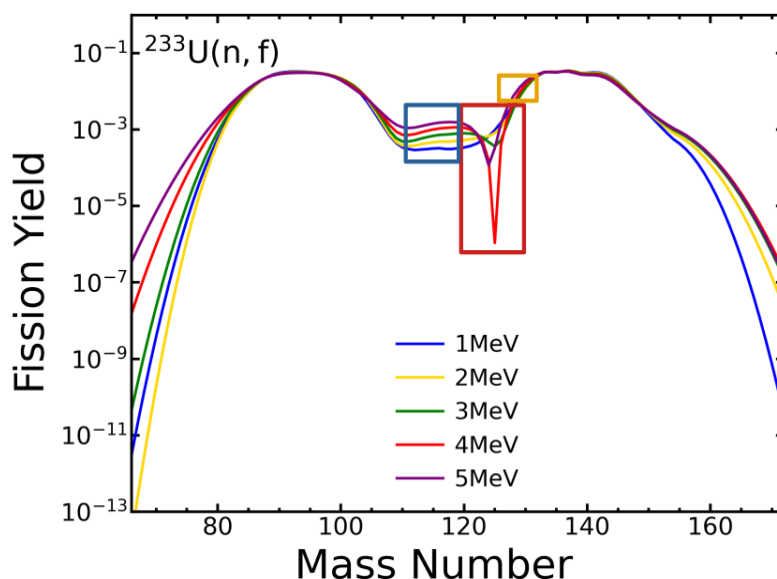


図 3.1-14 ^{233}U の予測結果を用いた 2 次内挿の補正範囲

図 3.1-14 のように中央付近に異常値が現れた際の補正手順は、外挿の時とほぼ同じである。まず排除すべき範囲の質量数およびエネルギーを確認する。図 3.1-14 に示した $^{233}\text{U}(n, f)$ の場合には中性子入射エネルギーが 1 および 2 MeV の場合のデータは問題がないため、そのままの値を炉物理側へ引き渡す際に予測値として使用する。中性子入射エネルギーが 4 および 5 MeV の場合には異常値があるので、外挿の場合と同様に該当のデータを排除する領域を決める。この場合は質量数 $A=118-129$ が排除すべき範囲となる。排除範囲を決めた後、内挿補間に使う範囲を決める。内挿の場合には、2 次曲線の両端の範囲を決める。その範囲も状況に応じて柔軟に判断する。例として挙げた ^{233}U の場合には、図 3.1-14 中の青枠で囲まれた質量数 $A=110-117$ の領域と、オレンジ枠で囲まれた質量数 $A=131-135$ の 2 つの領域の値を内挿に使用している。

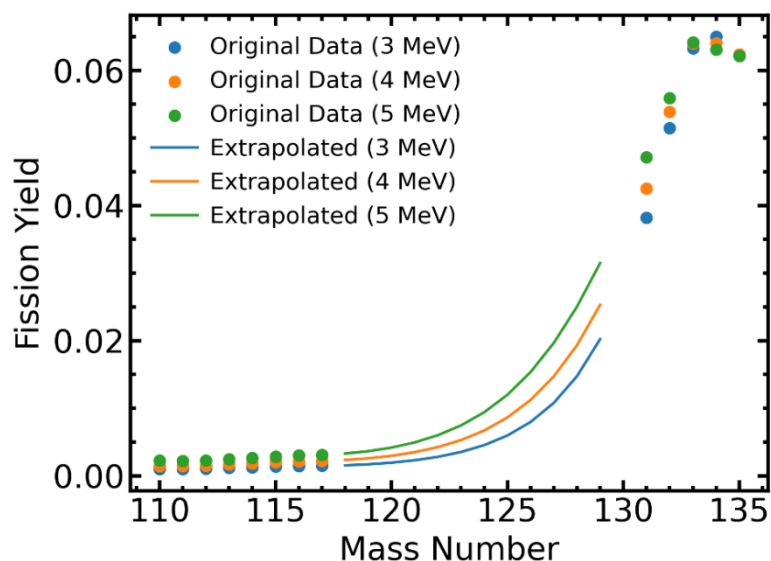


図 3.1-15 2 次内挿補完を実施した結果 (^{233}U の場合)

図 3.1-14 の青枠とオレンジ枠の値を用いて内挿補間される質量数 $A=(118, 129)$ のデータに対して曲線 $y = ax^2 + bx + c$ による 2 次内挿を実施した結果が図 3.1-15 の実線に対応する。このような手順で補正を加えた後の質量収率は図 3.1-16 の通りである。

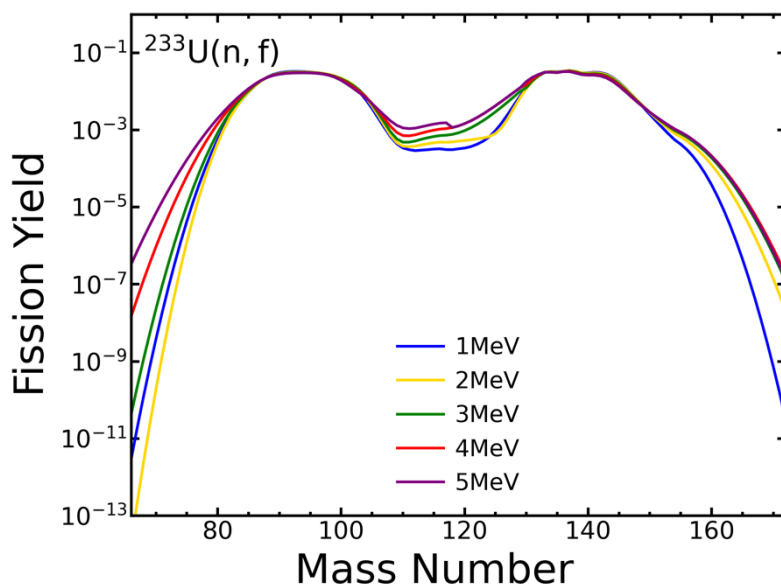


図 3.1-16 2 次内挿補完後の ^{233}U の核分裂収率

令和 5 年度に炉物理計算のために整備した核種の BNN モデルによる質量収率の予測値の様子を図 3.1-17 に示す。

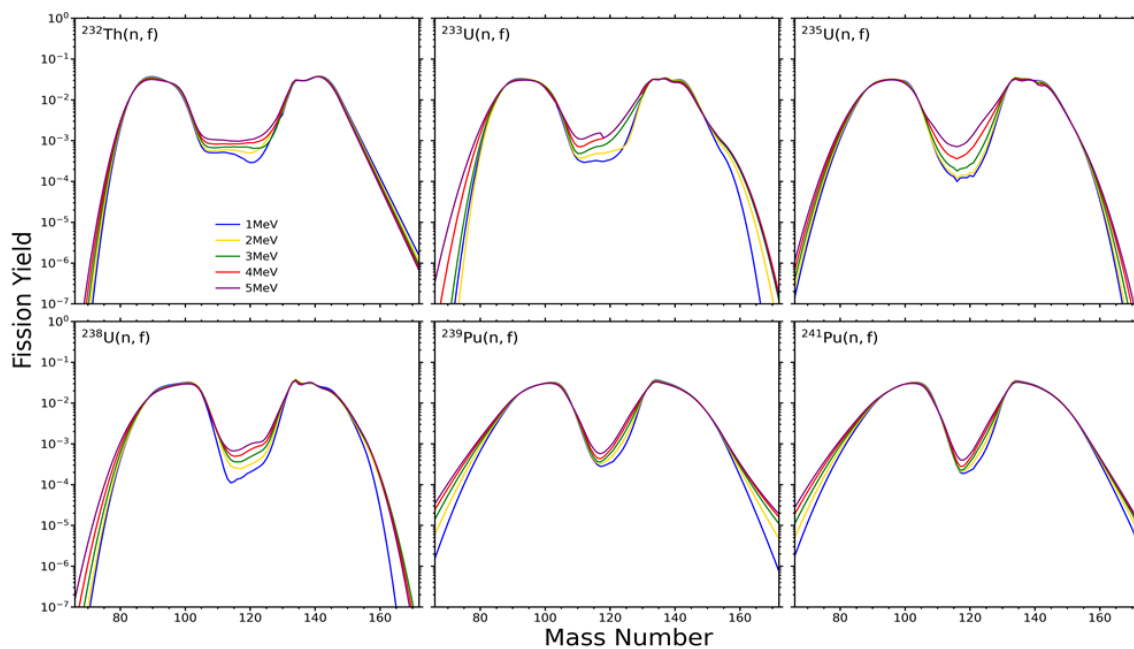


図 3.1-17 炉物理計算のために整備した核種の BNN モデルによる質量収率の予測値

以上のように BNN モデルによる核分裂生成物の質量収率の予測値の取得および取得後の補正を実施した後、炉物理計算において実際に必要となる独立収率を導出する必要がある。我々は JENDL-5 に採用された東京科学大学・椿原等の核分裂収率評価^[9]において独立収率と質量収率を結ぶ経験式を得ている。この知見を応用して、下記の手順で質量収率から独立収率への変換を行った。

独立収率 $Y_I(Z, A, m)$ は次のように 4 つの因子の積で表現できる。陽子分布 $Y_A(Z)$ は特定の質量数 A を持つ核種が異なる陽子数を持つ場合の陽子数毎の収率を意味し、正規分布を仮定する。 F_{oe} は奇偶効果を反映する因子で、質量公式 KTUY の殻補正エネルギーを用いて定義されている。

$$Y_I(Z, A, m) = Y_I(A) \times Y_A(Z) \times F_{oe} \times B_{Z,A}^{HF}(m)$$

$$Y_A(Z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(A)} \int_{-0.5}^{0.5} \exp \left[-\frac{(Z - Z_p(A) + t)^2}{2\sigma(A)^2} \right] dt$$

$$F_{oe} = \exp \left[-\frac{E_d(A)}{\Delta E_{sh}(Z, A)} \right]$$

$$\Delta E_{sh}(Z, A) = \Delta E_{sh}(KTUY) + E_{pair}$$

原子核には質量数に応じて対相関 E_{pair} が知られており、下記の形で定義する。

$$E_{pair} = \begin{cases} 12/\sqrt{A} & (\text{odd-odd nucleus}) \\ -12/\sqrt{A} & (\text{even-even nucleus}) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

最後の項 $B_{Z,A}^{HF}(m)$ は基底状態 (Ground State) やアイソマー (Isomer) の比を決める項で、今回は Hauser-Feshbach (HF) の計算値を使っている。このようにして得られた独立収率の未整備エネルギーでの予測値と実験値との比較を図 3.1-18 に示す。

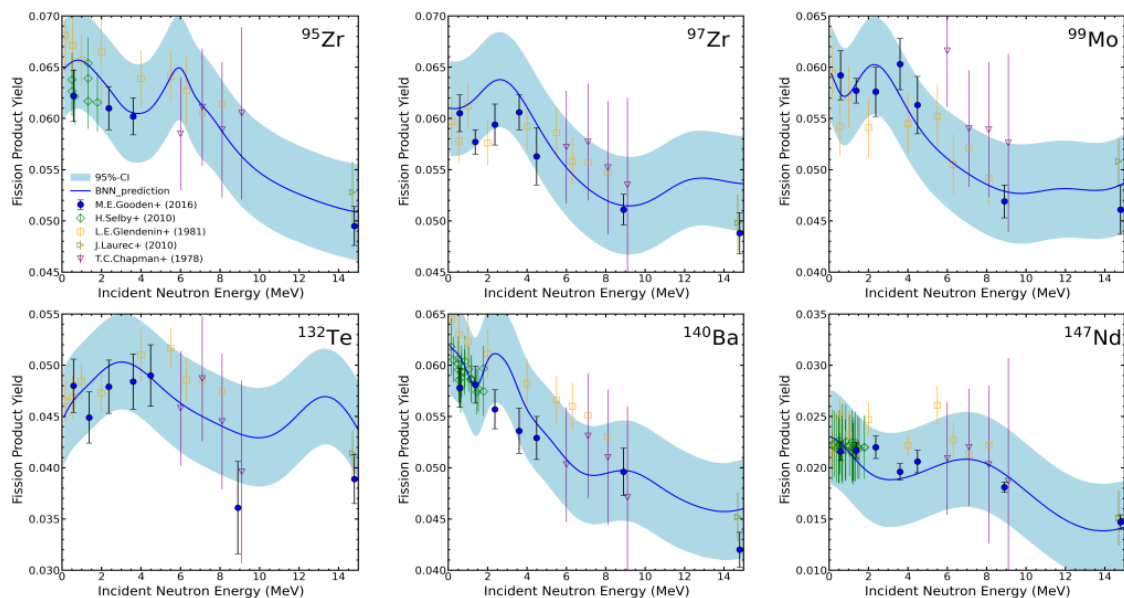


図 3.1-18 独立収率の未整備エネルギーでの予測値と実験値の比較

図 3.1-18 は核分裂生成物収率 $Y(Z, A)$ のエネルギー依存性の図である。参照している核種は ^{95}Zr 、 ^{97}Zr 、 ^{99}Mo 、 ^{132}Te 、 ^{140}Ba と ^{147}Nd の応用上の重要性が高いだけでなく、核分裂収率が比較的容易に測定しやすい。図中に青丸で示した 2016 年 M. E. Gooden 等の実験データは学習データとして使用

している点に注意されたい。BNN モデルに基づき最終的に得られた独立収率について特筆すべき点は、青丸以外の複数の検証用データ（オープンシンボルで示された複数の実験値）が誤差棒の範囲内で 95% の信頼区間に収まっている点である。実験値から従来の核データファイルで提供されている値 ($E_n=0.0253$ eV, 0.5 MeV, 14 MeV) の線形内挿では適当でないことが指摘されていたが、今回は線形内挿を超えたエネルギー依存性を表現することに成功している。

令和 5 年度は学習用データの改善と新たな入力情報である殻効果因子の設計と導入による BNN モデルの改良を実施した。既知の物理的知見を学習させる能力をつけたことで、機械学習モデルの再現性と検証性を飛躍的に向上できた。また本課題の鍵となる核分裂収率データのエネルギー依存性に関しては、質量収率 $Y(A)$ の微細構造だけでなく、独立収率 $Y(Z, A)$ に関しても線形内挿よりも良い予測を与えることに成功した。このように令和 4 年度に実装された機械学習モデルを基に理論値や原子核の殻効果・偶奇性を取り入れることで、核分裂収率の大局的構造と微細構造の予測精度が向上している。殻効果因子の最適化などの課題は残るものの、先ず独立収率が出たことから、令和 6 年度で実施予定の累積収率を用いた妥当性評価の準備は整った。機械学習モデルの結果に基づく累積収率等を検証用データと比較することで、実験値を個別に比較できないケースについても予測値の妥当性を論じることができる。

3.1.3 核データライブラリ化および評価【R6】

令和5年度に構築した機械学習モデルにおいては、学習データセットとして JENDL-5 核データライブラリの 80% に加え、EXFOR の核反応データベースから取得した実験値、および GEF+TALYS⁽⁶⁾、GEF+HF3D⁽¹³⁾、4.5 次元 Langevin 法⁽¹⁶⁾と 5Gaussian⁽⁵⁾モデル等の核反応理論計算値を組み込んだ。特に未整備エネルギー領域における核分裂収率 (FPY) ならびに関連するエネルギー依存性評価においては、微細構造の再現性向上を目的として：

A. データソースの重み付けを最適化するデータ拡張手法 (Data Augmentation; DA)

B. 殻効果因子 (Shell Factor; SF) による事前物理情報の導入手法

を新規に開発した。しかし、令和5年度の結果では、まだ ^{235}U に対しての予測では、入射中性子のエネルギーが 5 MeV 以上になると、対称成分の Y(A) が過大評価されてしまう問題および実験値が不在の領域での予測値のエネルギー依存性も対する検証方法についての課題が残っていた。令和6年度では先ず前者に対して、SF のパラメータを調整することで問題を解決した。3.1.2 節の項目(3)①の冒頭に示した SF の定義式に示したように、令和5年度には6つの Gaussian 分布の重ね合わせによって表される殻効果因子 SF を導入した。

SF では、 $\exp(-E/kT)$ で表わされる Boltzmann 分布の中で調整可能なパラメータとして kT が存在する。この kT を大きく設定すれば、入射中性子エネルギーが高くなっても、殻効果の影響が残り続ける。逆に kT を小さく設定すれば、入射中性子エネルギーが高くなった際に、殻効果がすぐ消失するようになる。令和6年度は、この性質を利用して、「Strong SF」と「Weak SF」の2組の SF を設定し、計算を行った。図 3.1-19 にその結果を示す。Strong の場合は軽い非対称成分にも微細構造が良く出ているが、5MeV 以上になると対称成分の予測が不安定になってしまう。一方、Weak の場合に実験値と比較して妥当な挙動をすることから、Weak の方が良いと帰結した。

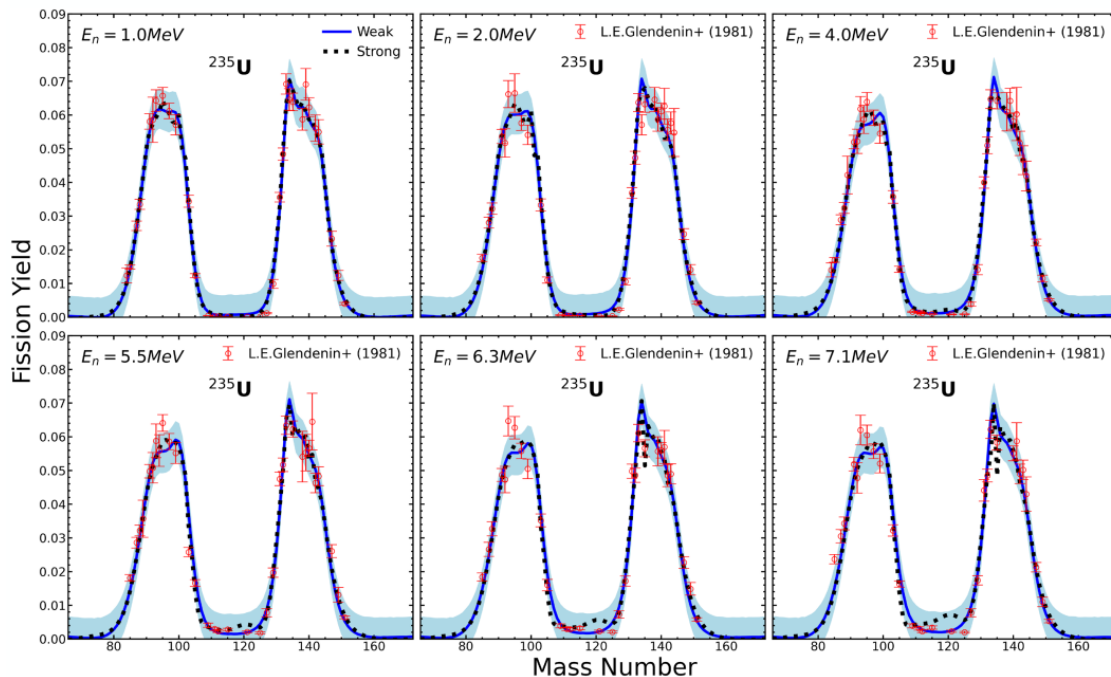


図 3.1-19 ^{235}U の Weak SF と Strong SF の BNN の予測値と実験値の比較

(1) ベイジアンニューラルネットワークの汎用性評価

最適化された SF（Weak の場合）を導入したベイジアンニューラルネットワーク（BNN）モデルに対する汎用性評価について、令和 5 年度 P0 フォローアップ協議で示された指摘事項を踏まえ、令和 6 年度は、従来の機械学習モデルに対する汎用性評価手法として知られる交差検証法（Cross Validation; CV）を体系的に適用した。具体的には、学習データセットにおいて DA 手法により重みを×4 から×1 に付与することで重要度クラスを 4 段階で設定したことに基づき、図 3.1-20 に示すように層化 K 分割交差検証法（Stratified K-Fold CV）⁽¹⁵⁾を最初に採用した。

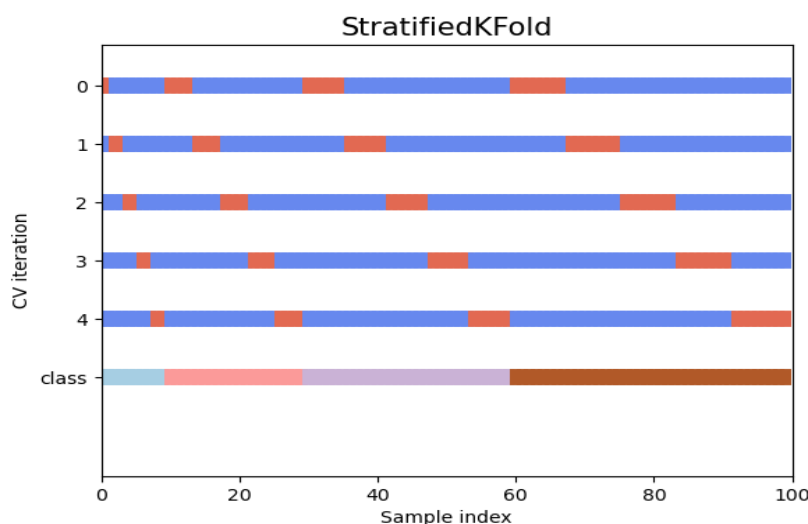


図 3.1-20 Stratified K-Fold CV の概念図

データ拡張（DA）により設定した 4 段階の重要度クラスに基づき、図 3.1-20 に示す通りラベル 1～4 に分類した後、層化サンプリング法を適用して各ラベル単位でランダムに訓練データ（80%）と検証データ（20%）を分割した。図中青色は各ラベルに対応する訓練データ、橙色は検証データを示す。令和 4 年度では重要度の高い核種を選択的に 80%の訓練データに振り分け、訓練データに選ばれた核種では全質量数領域に亘る収率の情報が使われていたことに注意されたい。令和 6 年度の CV では、データを全て平等に扱い、個々の核種の質量収率から 80%を無作為に抽出して訓練データとし、残りの 20%を検証データに振り分けた。

表 3.1-3 隠れ層二層の BNN モデルのユニット数 10-10 から 20-20 までの評価指標の比較

Data Type	BNN構造	MAE	MSE	D ² Score	AIC	BIC
CV	10-10	1.97E-03	1.12E-05	7.60E-01	-3.10E+04	-2.99E+04
CV	11-11	1.91E-03	1.06E-05	7.67E-01	-3.10E+04	-2.98E+04
CV	12-12	1.96E-03	1.14E-05	7.62E-01	-3.08E+04	-2.94E+04
CV	13-13	2.02E-03	1.23E-05	7.55E-01	-3.05E+04	-2.89E+04
CV	14-14	1.90E-03	1.09E-05	7.65E-01	-3.08E+04	-2.90E+04
CV	15-15	1.95E-03	1.15E-05	7.63E-01	-3.06E+04	-2.85E+04
CV	16-16	1.87E-03	1.06E-05	7.72E-01	-3.07E+04	-2.84E+04
CV	17-17	1.79E-03	9.55E-06	7.79E-01	-3.09E+04	-2.84E+04
CV	18-18	1.77E-03	9.59E-06	7.82E-01	-3.08E+04	-2.80E+04
CV	19-19	1.83E-03	1.03E-05	7.75E-01	-3.05E+04	-2.75E+04
CV	20-20	1.77E-03	9.64E-06	7.85E-01	-3.06E+04	-2.73E+04

以上の操作で作成された 5 つのサブセットに対して 5 分割の層化交差検証 (Stratified 5-Fold CV) を採用し、各分割で得られた検証データにおける評価指標 (平均絶対誤差 : MAE、平均二乗誤差 : MSE、回帰スコア関数、ピンボール損失の割合を説明⁽¹⁴⁾ : D^2 Score、赤池情報量基準 : AIC、ベイズ情報量基準 : BIC) の平均値を算出した。表 3.1-3 にこれらの指標についてまとめた結果を示す。赤色で表示したのは各評価指標における最適値である。情報量基準 (AIC/BIC) に関しては値が小さいほどモデル適合度が高いことを意味する。実験値と JENDL-5 残存 20% データを用いた検証結果を比較したところ、検証データとの合致度が悪化するような過学習 (overfitting) の兆候は認められなかった。この要因としては、核分裂収率 (FPY) データ Y(A) の無作為分割の方法が考えられる。本研究で実施した無作為分割では、全質量数領域 ($A=66\sim 172$) の収率分布の中で歯抜けになった 20% を予想させる問題に相当するため、内挿の精度が高く、過学習がおきなかったと推測できる。しかし本研究では交差検証 (CV) 法の適用が向いているとは言えない。その主たる要因は以下の 2 点に集約される :

- ・ データソースの異質性

訓練データが複数理論計算コード (GEF+TALYS 等) と実験値 (EXFOR) から構成され、さらにデータ拡張 (DA) 手法による重要度クラス分けが施されているため、従来の無作為分割を前提とする CV 法との整合性が低下する。これにより、入射中性子のエネルギーの変化による物理的挙動を反映されていない短所がある。

- ・ 計算コストの指数的大増大

本研究目的は核分裂収率の高精度再現とエネルギー依存性評価なので、BNN の計算には計算時間が長いマルコフ連鎖モンテカルロ法 (MCMC) を採用している。今回の CV 法では、80:20 分割による、本来長い計算時間を 5 倍にして、計算資源の非効率的消費を招く。

そのため、CV 法に代わるものとして、本研究で構築している BNN モデルの妥当性を評価する指標として、広く使える情報量基準 (Widely applicable information criterion; WAIC) または渡辺・赤池情報量基準 (Watanabe-Akaike information criterion; WAIC)⁽¹⁷⁾ を導入した。WAIC は、ニューラルネットワークや隠れマルコフモデルなどの特異的統計モデル (Singular Statistical Models) に対する赤池情報量基準 (AIC) の一般化版である。

(2) WAIC と CV の等価性の調べ

令和 6 年度中間フォローアップでの指摘事項として、CV と WAIC の等価性の証明があった。最終的に核種の重要度を反映した学習データによる BNN モデルの妥当性を評価するために、上記の項目 (1) で実施したランダムサンプリングのやり方を次のステップで変更して等価性の検証を行う。

- ・ ステップ 1: ランダムに JENDL-5 の核種を 80:20 で分ける。JENDL-5 では 41 核種なので^{8, 8, 8, 8, 9}のように分ける。以下の結果:

Group 1: ['248Cm', '242Pu', '234U', '251Cf', '231Pa', '239Pu', '254Es', '241Am']
 Group 2: ['246Cm', '240Pu', '237Np', '232Th', '229Th', '246Cm_sf', '238Np', '232U']
 Group 3: ['253Es_sf', '256Fm_sf', '238U_sf', '254Fm_sf', '244Cm', '249Cf', '241Pu', '252Cf_sf']
 Group 4: ['250Cf_sf', '243Am', '248Cf_sf', '242Cm_sf', '235U', '237U', '245Cm', '242Cm']
 Group 5: ['238Pu', '227Th', '233U', '255Fm', '244Cm_sf', '238U', '236U', '243Cm', '242mAm']

- ステップ 2: 学習に使用されたデータ拡張(Data Augmentation: DA)を利用し、JENDL-5 を 3 倍、EXFOR からのデータを 2 倍、理論計算値を 1 倍にする。
- ステップ 3: Shell factor の導入する。

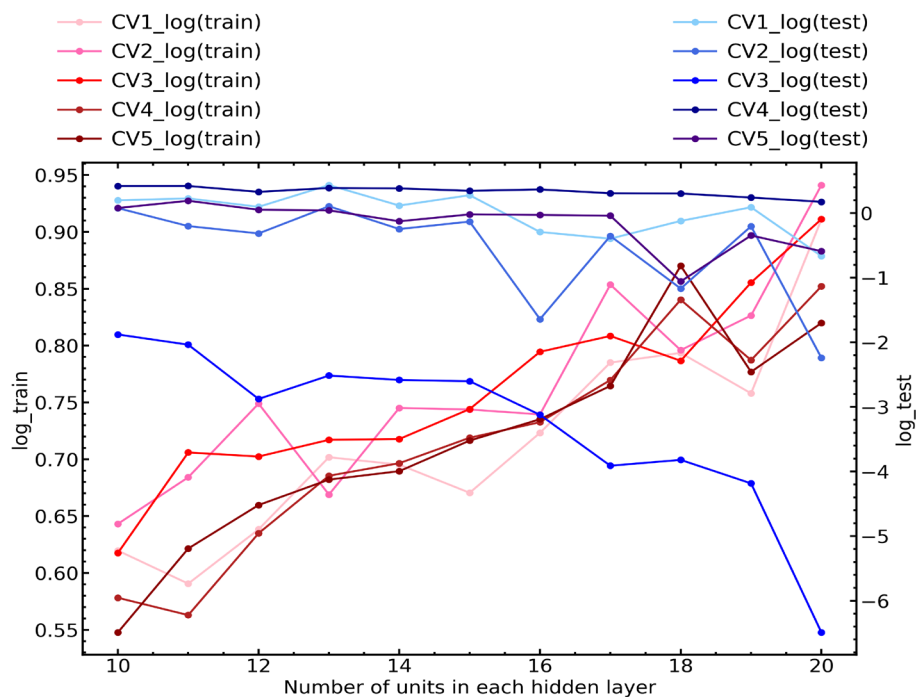


図 3.1-21 k-fold CV で k=5 の場合の各組の再現性と検証性の比較

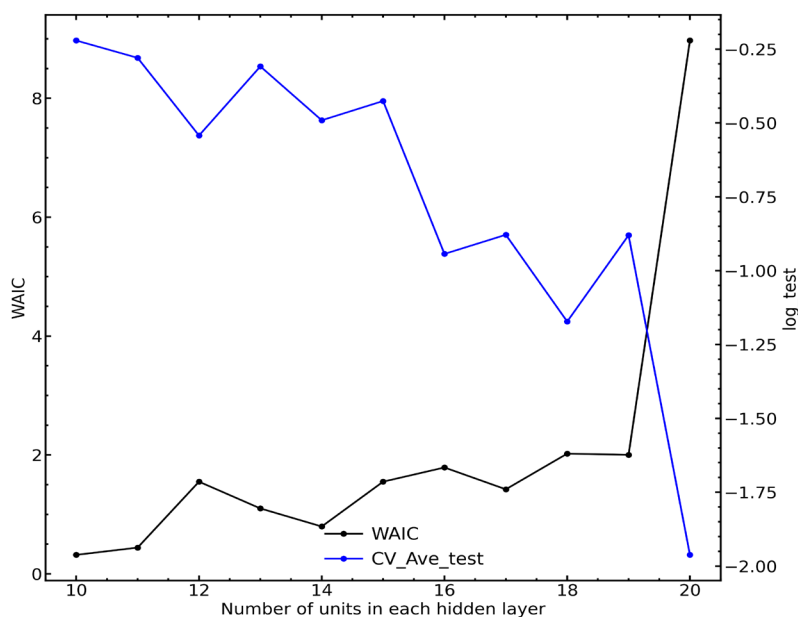


図 3.1-22 CV と WAIC でのハイパーパラメータに対する変化

その結果、図 3.1-21 に示したように核種の組み合わせによる予測精度の違いが現れた。赤色系統の実線群では訓練データの再現性評価を表し、青色系統の実線群ではテストデータの検証性評価である。どちらの結果でも、隠れ層のユニットの数が多ければ多いほど学習データの再現性がよくなる一方で、テストデータの検証性は悪くなる。

特に、CV3_log(test)の結果は、ほかのグループの結果に比べて、圧倒的に検証性が悪い。この組では ^{235}U 近傍の情報が学習に用いられた一方、検証に割り当てられたのは質量数の大きい核種で ^{235}U と核分裂収率の挙動が大きく異なる核種ばかりであることから予測精度が悪くなったと考えられる。

WAIC との等価性を示すにあたり、上記の 5 つのグループに対する平均の $\log(\text{test})$ と平均の WAIC を比較すると図 3.1-22 のような結果となる。 $\log(\text{test})$ は大きいほど信頼性が高く、WAIC は小さい値ほど良いモデルとなる。平均の WAIC と平均の $\log(\text{test})$ の結果は良く一致しており、今回のデータの組み合わせに限っては隠れ層のユニット数の組み合わせとして 10-10 が一番適した構造になっている。以上によって、CV と WAIC の等価性が示された。数学的な証明は参考文献⁽¹⁷⁾に譲る。WAIC と CV が真に保証されるにはサブセットの数を無限大にした極限まで漸近させる必要がある。

(3) WAIC による BNN モデル構造の最適化

項目(2)の議論により、WAIC は漸近的に CV と等価性であることが示された。先ほどの例では、5 つのサブセットに対して 5 つの WAIC を計算し、平均をとっていたが、等価性が保証された今、令和 4 年度に指定した重みづけに従って WAIC を計算し、 $\log_likelihood$ との挙動と比較することでハイパーパラメータの最適化を行った。

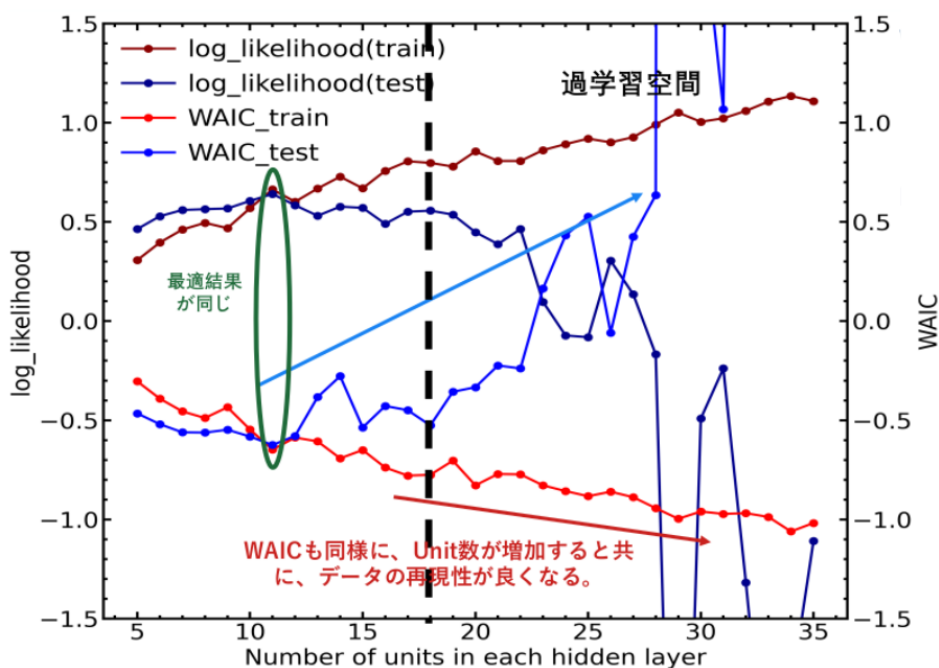


図 3.1-23 訓練データとテストデータの WAIC および対数尤度の比較

図 3.1-23 のように、赤色系統の実線が再現性を示した結果で、青色系統の実線が検証性を示した結果となっている。再現性についての結果に注目すると WAIC および log_likelihood の両方において BNN の隠れ層 2 層の構造の下でユニットの数が増加ほど再現は高くなる。次に検証性に着目すると、ユニット数が WAIC は 11 で最小となり、log_likelihood は最大となる。その後、ユニット数の増加に伴い、これらの値は上下しながら変動し、ユニット数が 18 になったときに急激に WAIC が悪化する。log_likelihood の場合にはユニット数 22 から急激にモデルの検証性が悪化する。WAIC という情報量基準はパラメータの自由度(数)をペナルティとして考えているので、過学習区間は log_likelihood 以上に厳しく制限されている。

(4) 中性子入射エネルギーに対する主要なアクチノイド核種の核分裂収率の整備

項目(3)の議論により殻効果因子が Weak の場合に WAIC により最適化された隠れ層のユニット数は 11-11 となった。この BNN 構造で予測された ^{232}Th 、 ^{233}U 、 ^{235}U 、 ^{238}U と ^{239}Pu 、 ^{241}Pu の 1 MeV から 5 MeV までの予測結果は以下の通りである。

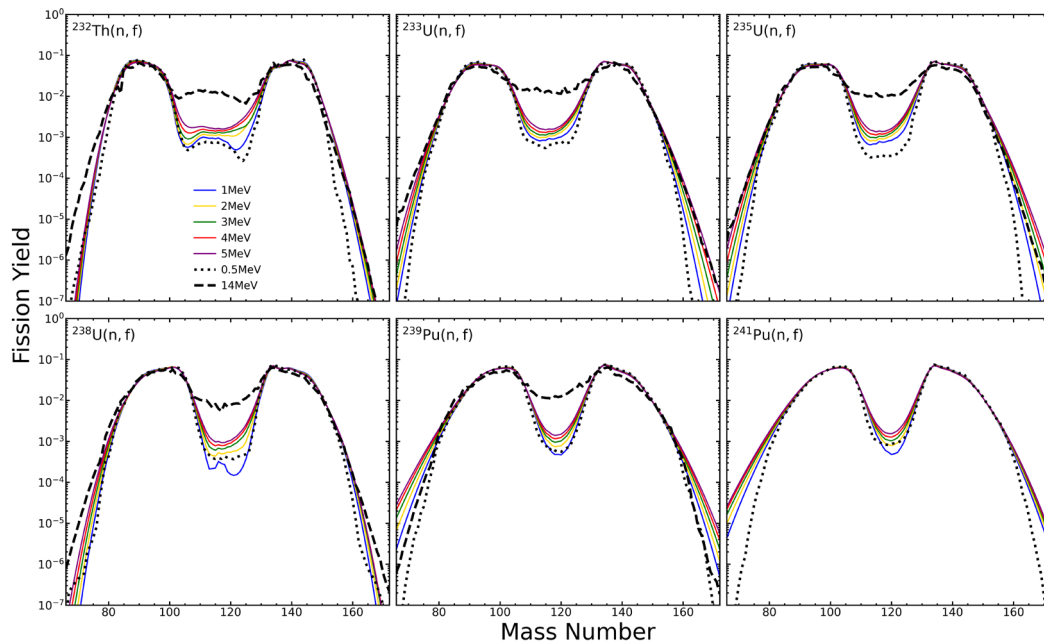


図 3.1-24 ^{232}Th 、 ^{233}U 、 ^{235}U 、 ^{238}U および ^{239}Pu 、 ^{241}Pu に対する BNN モデルの 1MeV から 5MeV までの予測値と JENDL-5 の実験値(0.5 MeV, 14 MeV)の比較

図 3.1-24 で示された主要なアクチノイド核種の FPY の予測値に関しては、比較すべき実験データが存在しない。このような場合にモデルの妥当性を評価するには、予測値に基づく独立収率の荷電分布や遅発中性子収率などの様々な観測量に対する挙動を調べて、原子核物理の観点からその妥当性評価をする必要がある。

そこで先ず、本研究の目的である微細構造のエネルギー依存性の挙動に着目し、原子核物理から期待される振る舞いとの比較を行った。図 3.1-25 に示した $E_n = 1.0 \sim 5.0$ MeV の予測 FPY の線形表示での振る舞いに注目されたい。この図からは核分裂収率のよく知られた傾向が見て取れる。すなわち中性子入射エネルギーが増加すると、非対称核分裂生成物の収率は減少し、対称核分裂

生成物の収率は増加している。これらの予測された挙動は Brosa の核分裂モデルにより示唆される傾向と一致している。なお、入射中性子エネルギーが 6 MeV を超えると多重チャンス核分裂が発生するため、6 MeV 未満のエネルギーに対する予測のみを提示している。さらに、図 3.1-25 の右パネルでは、重い非対称質量領域における微細構造が入射エネルギーとともにどのように変化するか、が強調されている。 ^{235}U の予測結果では、重い非対称成分において、入射エネルギーが増加するにつれて $A=138$ および $A=143$ のピークが急速に消失し、 $A=134$ のピークは残ることが示されている。この予測結果は、質量数によって殻効果が強弱性を示すこと影響を示す物理的現象を反映している。特に、 $A=134$ のピークは $A=132$ （魔法数 $50 + 82$ の二重閉殻）によって非常に安定な状態になっている。一方で、 $A=138$ および $A=143$ のピークは変形殻の影響を受けており、入射中性子エネルギーの増加に伴って急速に消失する。同様に、 ^{232}Th の予測結果でも $A=134$ のピークは増加し、 $A=140$ および $A=144$ のピークは入射中性子エネルギーの増加に伴って減少することは非常に興味深い。

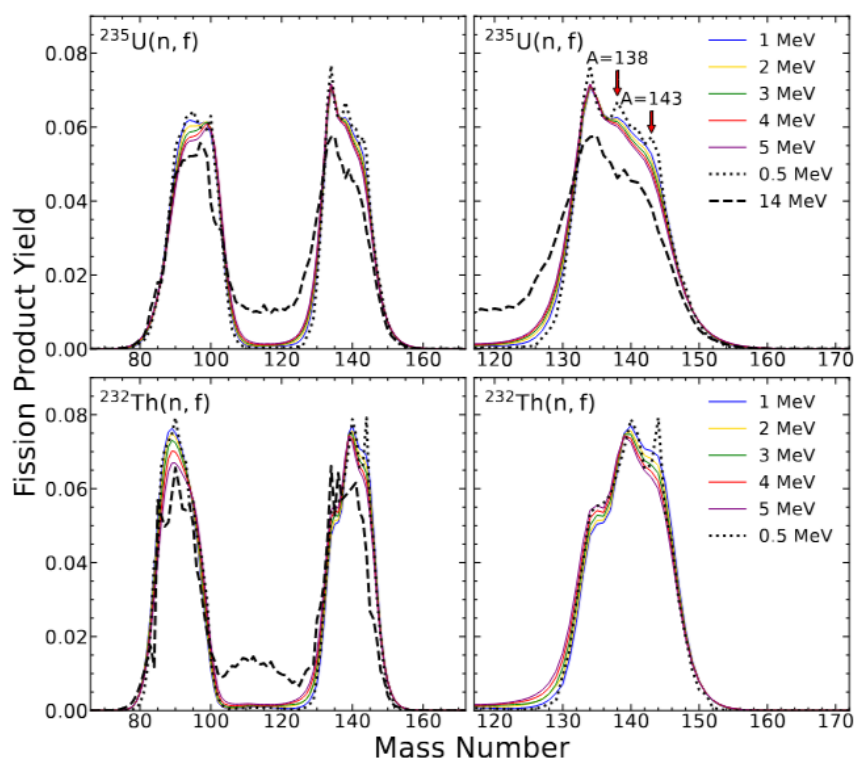


図 3.1-25 ^{232}Th , ^{235}U の BNN モデルから 1MeV から 5MeV までの予測と JENDL-5 の実験値 (0.5 MeV, 14 MeV) の比較

次に図 3.1-26 では、特定の質量数に対する質量収率と相当する質量数で実験値の存在する累積収率との比較を行っている。これらの核種では質量収率と累積収率の差は無視できるほど小さい。青い点 および赤い点が訓練用データの一部を示しており、残りの記号は検証データを表している。赤い破線は、0.5 および 14 MeV における JENDL-5 データの線形補間を示し、青い実線は BNN の予測結果を示している。

軽い核分裂生成物に関しては、5 MeV までに明確な傾向が見られる。中性子エネルギーの増加に伴い、 ^{95}Zr では急激な減少が見られ、 ^{97}Zr ではその現象度合いはやや緩やかな傾きを示す一方、

^{99}Mo はほとんど変化しない。これは、 $N=Z=50$ という二重魔法数に近い同位体ほど、入射中性子エネルギーに対する感受性が低いことを示唆している。さらに、 ^{105}Ru では、入射エネルギーの上昇に伴い収率が増加する傾向が見られる。

軽い核分裂生成物の場合と比べると、重い核分裂生成物の場合にはその挙動は大きく異なる。 ^{127}Sb に着目すると、入射中性子エネルギーが上昇するにつれて増加する。次に二重閉殻(Double shell closure)構造を持つ $A=132$ の場合には二重閉殻ではない ^{132}Te の場合でも、エネルギーに対する依存性はほぼ平坦な傾きを維持している。 ^{140}Ba の傾きは ^{143}Ce よりも中性子エネルギーの増加に対する収率の現象度合いが急であり、これは ^{140}Ba における殻効果が ^{143}Ce よりも顕著であることを示している。

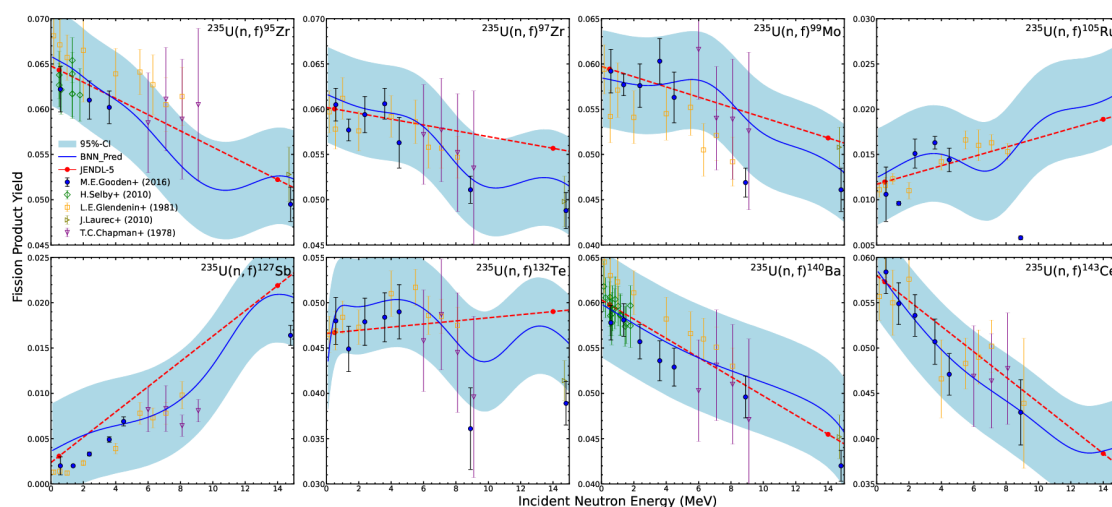


図 3.1-26 $^{95,97}\text{Zr}$, ^{99}Mo , ^{105}Ru , ^{127}Sb , ^{132}Te , ^{140}Ba , ^{143}Ce の BNN モデルによるエネルギー依存性評価と実験値の比較。青の実線が BNN モデルからのエネルギー依存性で、95%の信頼区間を含む。赤の破線は、熱中性子と 14 MeV の間における JENDL-5 の線形補間を示している。

(5) 原子炉物理計算用のデータへの変換

質量収率以外の観測量との比較を行うにあたり、質量収率に基づく独立収率の導出が必要となる。そこで今回構築した BNN モデルから予測された $Y(A)$ を以下の椿原公式⁽¹²⁾を通じて $Y(Z, A)$ データに変更する。ここで $Y(A)$ は BNN の予測値であり、 $Y_A(Z)$ は Z 方向の荷電分布を表現するガウス分布である。また $\sigma(A)$ および $Z_p(A)$ は、等質量数電荷分布のガウス分布における幅およびガウス分布のピークの電荷を表している。 F_{oe} は殻効果および奇偶交互変動の補正係数、 $\Delta E_{sh}(Z, A)$ は殻効果補正エネルギーであり、 $E_d(A)$ は調整された数値である。 $\Delta E_{sh}(Z, A)$ は KTUY 質量公式⁽¹⁸⁾と偶奇効果を考慮した対エネルギーである。また、 $B_{Z,A}^{HF}$ は Hauser-Feshbach 統計崩壊理論⁽¹⁹⁾により計算されたアイソマー分岐比である。今回の計算では便利上、JENDL-5 の 0.5 MeV のアイソマ

一分岐比を使っている。

$$Y(Z, A, m) = Y(A) \times Y_A(Z) \times F_{oe} \times B_{Z,A}^{HF}(m),$$

$$Y_A(Z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(A)} \int_{-0.5}^{0.5} \exp\left[-\frac{(Z - Z_p(A) + t)^2}{2\sigma(A)^2}\right] dt$$

$$F_{oe} = \exp\left[-\frac{\Delta E_{sh}(Z, A)}{E_d(A)}\right],$$

$$\Delta E_{sh}(Z, A) = \Delta E_{sh}(KTUY) + E_{pair}$$

$$E_{pair} = \begin{cases} 12/\sqrt{A}, & (\text{odd-odd nucleus}) \\ -12/\sqrt{A}, & (\text{even-even nucleus}) \\ 0, & (\text{otherwise}), \end{cases}$$

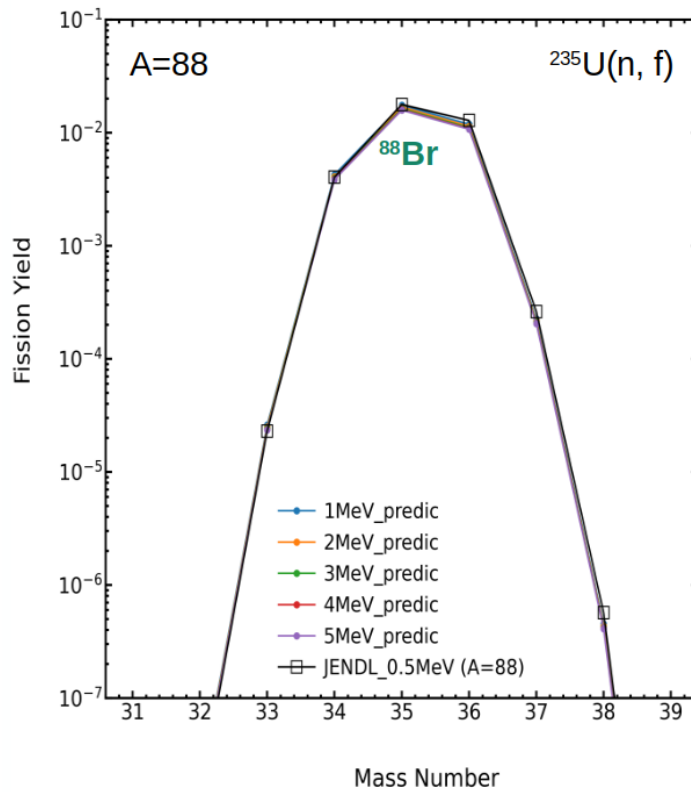


図 3.1-27 1 MeV から 5 MeV までの ^{235}U 核分裂の $A=88$ の同重体分布の BNN 予測値と JENDL-5 の 0.5 MeV の比較

BNN モデルの予測値に基づく同重体分布のピーク位置が JENDL-5 の高速中性子入射核分裂の場合の同重体分布のピーク位置と同じになるように椿原公式におけるガウス分布のピーク位置 $Z_p(A)$ の値を実験誤差の範囲で調整した。その結果得られた同重体分布は図 3.1-27 のようになる。図 3.1-27 は $A=88$ のときの同重体分布 $Y(Z, 88)$ であり、 ^{88}Br は遅発中性子先行核である。

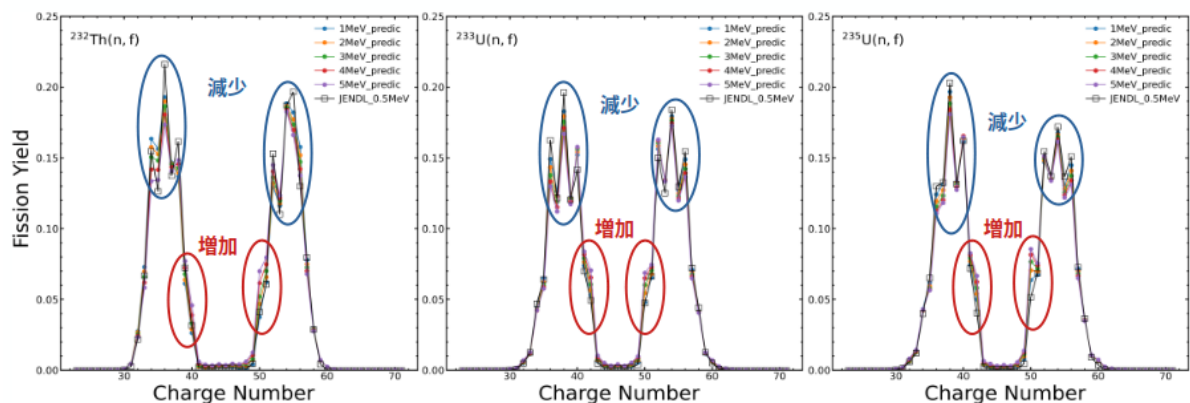


図 3.1-28 1 MeV から 5 MeV までの ^{232}Th , ^{233}U , ^{235}U の荷電分布の予測値と JENDL-5 の 0.5 MeV 実験値の比較

次に別の観測量である荷電分布のエネルギー依存性を評価する。図 3.1-28 において全体的な挙動をみると、荷電分布には強い奇偶効果(Odd-Even Effect)が現れており、JENDL-5 と合致している。また、入射中性子エネルギーが増加すると、対称成分の両辺の $Y(Z)$ 収率が増加する一方で、非対称成分のピークが減少する傾向がある。特に、 $Z=50$ では入射中性子エネルギーの増加に伴う荷電収率の増幅度が一番高く、この核分裂のパートナーに相当する軽い Z でも同様の現象がみられる。これは陽子数の魔法数である $Z=50$ による影響と考えられる。

(6) 遅発中性子収率のエネルギー依存性

最後に積分的な妥当性評価を実施するために、椿原公式によって導出された独立収率 $Y(Z, A)$ データを利用した遅発中性子収率を計算した。遅発中性子先行核は半減期により、通常では、6 群のグループに分けている。特定の遅発中性子先行核（例えば $^{87,88}\text{Br}$ や ^{137}I など）は、遅発中性子の生成に大きく寄与している。

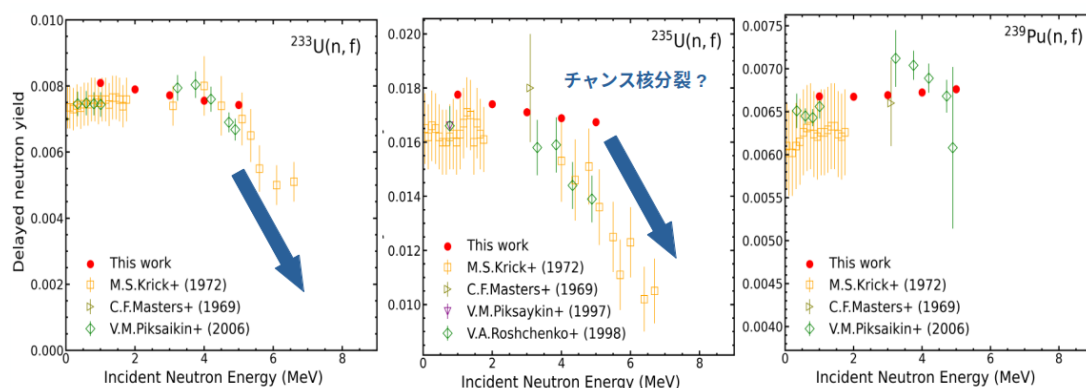


図 3.1-29 1 MeV から 5 MeV までの ^{232}Th , ^{235}U , ^{239}Pu の遅発中性子収率の予測値と実験値の比較

今回の計算では、総和計算(Summation Calculation)に基づいた Oyak96 コードで遅発中性子収率を計算している⁽²⁰⁾。BNN モデルを用いて、予測された核分裂収率 $Y(A)$ データを利用し、Oyak96

コードで遅発中性子収率を計算し、実験データと比較した結果が図 3.1-29 である。図 3.1-29 に示したように、本研究で最終的に整備された核分裂核データは、1 MeV から 5 MeV までの遅発性中性子エネルギー収率は実験データの絶対値を概ねよく再現している。ただし、 ^{233}U , ^{235}U の実験値を見ると 5 MeV 以上で、遅発中性子収率が劇的な減少を示しており、予測値との差がある。これはチャンス核分裂の影響と思われるが、チャンス核分裂の取扱いについては今後の課題である。

3.1.4 まとめ【R6】

本研究では核分裂収率の持つ二つの難しさを乗り越えて高精度に核分裂収率を予測できる手法の開発を目指した。一つ目は ^{235}U の中性子入射核分裂で顕著にみられる収率の詳細ピーク構造の再現性である。核物理の最新理論を用いても、最新の核データの現象論的なモデルであっても、微細な収率構造を上手く再現することは困難である。二つ目の難しさは、従来の三つのエネルギー点 (thermal, fast, 14MeV) の単純な線形内挿では説明できないような核分裂収率のエネルギー依存性を示すデータが近年いくつも見つかった点である。

これらの二つの課題を解決するために、東京科学大ではベイジアンニューラルネットワークモデルの開発にあたった。その過程で、最も信頼性の高いデータである先述の 3 つのエネルギー点に対する評価済み核データや核分裂収率のエネルギー依存性に関する実験値、核分裂収率の理論計算値などを学習させることで、大局的な核分裂収率の構造を上手く表現できるようになることはわかった。しかし単純に学習させる核分裂収率データを多様化しても原子核の殻効果に起因する詳細ピーク構造や物理的に妥当と考えられるエネルギー依存性の再現にはつながらなかった。そこで本研究では特定の質量数で核分裂生成物の収率が高くなるという原子核の性質を反映した殻効果因子という関数を定め、新たな入力情報として追加することで、ベイジアンニューラルネットワークモデルが持つ核分裂収率のギザギザが出にくいという特徴を解決することができた。さらに WEIC に基づいてハイパーパラメータを最適化することでエネルギー依存性を含めて物理学的に妥当な挙動を返すモデルに調整できることがわかった。以上のように BNN+殻効果因子+WAIC という組み合わせでモデルを複雑にせずとも核分裂収率の持つ二つの難しさをカバーして高い予測精度を持つ深層学習モデルが作れることが本研究で明らかになった。しかし、核データとして非常に重要な不確かさについて、BNN では信頼区間で決めるしかない点が残された課題である。この点に関しては続く 3.2 章で詳述されるようにマルチタスク DNN を用いれば、核データとして意義のある不確かさがつけられることがわかっている。したがって 3.1 章で得られた殻効果因子+WAIC の手法をマルチタスク DNN にも適用することで、核分裂収率とその不確かさ情報の二つを核データとして信頼できる精度で予測可能なモデルの開発が期待できる。

参考文献

- (1) O. Iwamoto, N. Iwamoto, S. Kunieda, F. Minato, S. Nakayama, Y. Abe, et al., “Japanese evaluated nuclear data library version 5: JENDL-5”, *J. Nucl. Sci. Technol.*, 60(1), 1-

60 (2023).

- (2) M. D. Hoffman, A. Gelman, “The No-U-Turn Sampler: Adaptively setting Path Lengths in Hamiltonian Monte Carlo,” 2011. <https://arxiv.org/pdf/1111.4246.pdf>
- (3) M. E. Gooden et al., “Energy Dependence of Fission Product Yield from ^{235}U , ^{238}U and ^{239}Pu for Incident Neutron Energies Between 0.5 and 14.8MeV,” Nucl. Data Sheets 131, 319(2016).
- (4) A. P. Tonchev et al., “Toward short-lived and energy-dependent fission product yields from neutron-induced fission,” EPJ web of conferences 239, 03001 (2020).
- (5) J. Katakura., “A systematics of fission product mass yields with 5 gaussian functions,” JAERI-RESEARCH-2003-004
- (6) K. Fujio, et al., European Physical Journal A 59, 178 (2023).
- (7) H. Naik, et al., Nucl. Phys. A. 913:185-205. (2013).
- (8) H. Naik, et al., Nucl. Phys. A. 941:16-37. (2015).
- (9) M. B. Chadwick, et al., Nucl. Data Sheets. 112(12):2887-299. (2011).
- (10) U. Brosa, et al., Phys. Rep. 197, 167 (1990).
- (11) L.E. Glendenin, et, al., Phys. Rev. C 24, 2600 (1981).
- (12) K. Tsubakihara, et al., Journal of Nuclear Science and Technology, Vol. 58, 2 (2020).
- (13) I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville, Deep Learning, MIT Press (2016).
- (14) R. Koenker, et al. Journal of the American Statistical Association, 94(448), 1296–1310.
- (15) I. Ryzhov, et al., Phys. Rev. C, 83, 054603 (2011).
- (16) K. Fujio, S. Okumura, C. Ishizuka, S. Chiba, T. Katabuchi, Journal of Nuclear Science and Technology, Vol. 61, 84-97 (2024).
- (17) S. Watanabe, et al., Journal of Machine Learning Research 11: 3571–3594 (2010).
- (18) S. Okumura, et al., Journal of Nuclear Science and Technology, Vol. 55(9), 1009–1023 (2018).
- (19) H. Koura, et al., RIKEN Accel. Prog. Rep. 36 9 (2003).
- (20) K. Oyamatsu, K. Nuclear Science and Technology, 39(sup2), 1109–1111 (2002).

3.2 核分裂収率評価のためのベイジアンニューラルネットワーク法の高度化【R4～R6】

(再委託先：電気通信大学)

3.2.1 核分裂収率高精度予測のためのアルゴリズムのテスト【R4】

令和4年度は、ベイジアン深層学習を用いた核分裂収率 (Fission Product Yield, FPY) の予測についての先行研究を改良してピークの詳細を予測することを目指した。先行研究におけるマルコフ連鎖モンテカルロ法(MCMC)を用いたベイジアンニューラルネットワーク手法では、毎回計算結果が異なってくること、必要なサンプルサイズを決めにくいこと、計算コストが膨大であることなどの問題があった。そこで、令和4年度は、ベイジアンニューラルネットワークを変分ベイズ法を用いて学習し、核分裂収率予測を行った。変分ベイズ法は、事後分布の計算を最適化問題に置き換えて近似的計算することで計算効率が良く、決定論であるため毎回同一の計算結果を得られる。また、先行研究は、2層、各層16ユニットの単純構造で学習していたため、殻構造に起因する核分裂収率の微細構造の再現が難しかった。そこで、令和4年度の深層学習モデルでは、10層、各層16ユニットに変更した。さらに、変分ベイズは大規模パラメータでも高速に計算できるので、より複雑なタスクでも正確な予測が期待できる。

つぎに、核分裂収率データを機械学習の観点から、ウランなどの代表的なアクチノイドの核分裂収率に特徴的な二峰分布の谷の部分(対称核分裂成分)は共通した特徴を示す一方、重要度が高い原子核の殻構造を反映したピーク部分に関してはデータ数が少なく共通した特徴を見出すことが難しい。その結果、大量の類似性の高いデータを機械学習モデルは優先的に学習するため、結果的にピークデータを正しく予測できない。この問題を解決するために、提案手法では、原子核の殻効果由来の詳細なピークデータの重みを増やすことで、機械学習モデルがピークデータの特徴をより高精度に学習できることを目指した。

しかしながら、こうした改善にもかかわらず、変分ベイズ法によるピーク再現の精度向上は限定的であり、さらなる手法の改良が課題となった。

3.2.2 機械学習モデルの最適化【R5】

令和5年度における電気通信大学の研究目標は、令和4年度で開発した機能を実装した結果をフィードバックしながら、核分裂収率のピークにおける詳細構造の予測に適したアルゴリズムを模索することである。必要に応じて混合数理モデルの開発の検討や、核分裂生成物の中性子断面積予測に対しても同様の手法が適用できるかどうかの検証を行った結果、原子力機構の担当する Gauss 過程回帰のほう为本課題で取り組んでいる中性子断面積予測については適当であるとの判断に至った。

令和5年度に取り組んだ原子核の殻構造に由来する詳細ピークの特徴を高度に予測する手法の深化について詳しく報告する。具体的には、FPYデータの詳細なピーク構造の予測に焦点を当てた機械学習を実現するために、マルチタスクモデル(Multi-gate Mixture-of-Experts, MMoE⁽¹⁾)を用いた提案手法を開発した。提案手法では、入力層にFPYの質量数A、中性子を標的核に入射して形成される複合核の陽子数Znおよび質量数An、複合核の励起エネルギーEを与え、出力層でFPY

の質量数 A に対応する核分裂収率 FPY と実験誤差 $FPY \text{ Error}$ を出力する。これにより、提案手法では、相互補完的な関係にある FPY とその収率に対応する実験誤差 $FPY \text{ Error}$ を同時に学習することで予測精度の向上が期待できる。

さらに、提案手法では核物理学の奇偶効果を組み込むことにより、 FPY に対する予測精度を向上させた。また、 FPY において特徴的なピークの微細構造に着目した損失関数を提案し、 FPY の予測精度を向上させた。

3.2.3 機械学習モデルの確立【R6】

令和 6 年度における電気通信大学の取り組みは、令和 5 年度で開発したマルチタスク深層学習手法を従来手法と比較・分析し、その有効性を検証することである。具体的には、提案手法と同様に奇偶効果とピーク構造に着目した損失関数を用いたシングルタスクで学習した深層学習手法を比較した。これにより、相互補完的な関係にある FPY とその収率に対応する実験誤差 $FPY \text{ Error}$ を同時に学習することが予測精度を向上させることを示した。また、提案手法は、既存手法(ベイズニューラルネットワーク, BNN)⁽⁵⁾を用いた FPY とその収率に対応する実験誤差 $FPY \text{ Error}$ の予測精度を上回ることを示した。さらに、提案手法は、未測定のエネルギーに対する予測を行った結果、現在よく知られている実験値とよく一致することを示した。

(1) マルチタスクモデル (MMoE) を用いた核分裂収率 FPY と実験誤差 $FPY \text{ Error}$ の予測

本研究では深層学習のマルチタスクモデル (MMoE) を用いた核分裂収率 FPY と実験誤差 $FPY \text{ Error}$ の予測手法を提案する。提案手法では、 FPY とその収率に対応する実験誤差 $FPY \text{ Error}$ を同時に学習し予測できる。図 3.2-1 のように、提案手法では、入力層に FPY の質量数 A 、中性子を標的核に入射して形成される複合核の陽子数 Z_n および質量数 A_n 、複合核の励起エネルギー E などで構成される入力データ (Input \mathbf{x}) を与え、出力層で FPY の質量数 A に対応する核分裂収率 FPY と実験誤差 $FPY \text{ Error}$ を出力する。

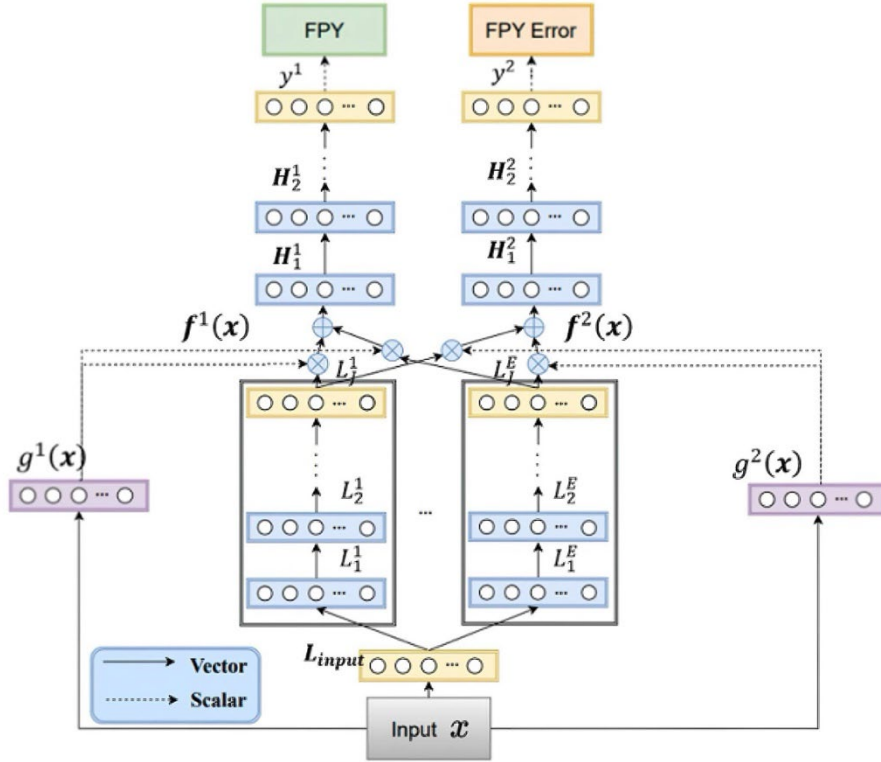


図 3.2-1 提案手法の構造

図 3.2-1 の各ユニットは以下のように定式化される。

- ・入力ベクトル

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$$

- ・出力： k 番目のタスクの予測値 ($k = 1$ は FPY の予測タスク、 $k = 2$ は実験誤差 FPY Error の予測タスク)

$$y^k = \text{leaky_relu}(\mathbf{W}_{y^k} \mathbf{H}_M^k + b_{y^k})$$

$$\text{ただし } \text{leaky_relu}(z) = \begin{cases} z, & z > 0 \\ \gamma z, & z \leq 0 \end{cases} \quad (\text{※ } \gamma: \text{チューニングパラメータ})$$

- ・入力層 (ユニット数 16)

$$\mathbf{L}_{\text{input}} = \text{leaky_relu}(\mathbf{W}_{L_{\text{input}}} \mathbf{x} + \mathbf{b}_{L_{\text{input}}})$$

- ・ e 番目のフィードフォワードニューラルネットワークの第 1 層 (ユニット数 16)

$$\mathbf{L}_1^e = \text{leaky_relu}(\mathbf{W}_{L_1^e} \mathbf{L}_{\text{input}} + \mathbf{b}_{L_1^e}) \quad (e = \{1, 2, 3, \dots, E\})$$

- ・ e 番目のフィードフォワードニューラルネットワークの第 j 層 (ユニット数 16)

$$\mathbf{L}_j^e = \text{leaky_relu}(\mathbf{W}_{L_j^e} \mathbf{L}_{j-1}^e + \mathbf{b}_{L_j^e}) \quad (j = \{2, 3, \dots, J\})$$

- ・ゲート付きネットワーク (ユニット数 16)。タスクに応じて各下層ニューラルネットワーク

の結果に異なる重みを割り当てる

$$g^k(\mathbf{x}) = \text{softmax}(\mathbf{W}_{g^k} \mathbf{x} + \mathbf{b}_{g^k})$$

$$\text{ただし, } \text{softmax}(v_i) = \frac{e^{v_i}}{\sum_{n=1}^E e^{v_n}}$$

・ゲート付きネットワーク $g^k(\mathbf{x})$ によって重み付けされた結果である、タスク k 専用の上層ニューラルネットワークに入力される

$$\mathbf{f}^k(\mathbf{x}) = \sum_{e=1}^E g^k(\mathbf{x}) L_j^e$$

・タスク k 専用のフィードフォワードニューラルネットワークの第 1 層（ユニット数 16）

$$\mathbf{H}_1^k = \text{leaky_relu}(\mathbf{W}_{H_1^k} \mathbf{f}^k(\mathbf{x}) + \mathbf{b}_{H_1^k})$$

・タスク k 専用のフィードフォワードニューラルネットワークの第 m 層（ユニット数 16）

$$\mathbf{H}_m^k = \text{leaky_relu}(\mathbf{W}_{H_m^k} \mathbf{H}_{m-1}^k + \mathbf{b}_{H_m^k}) \quad (m = \{2, 3, \dots, M\})$$

・ J, M : ネットワークのレイヤー数 ($J = 5, M = 5$)

・ E : Number of underlying neural network groups ($E = 3$)

・ \mathbf{W} : ニューラルネットワークの重みパラメータ

・ \mathbf{b} : ニューラルネットワークのバイアスパラメータ

(2) 奇偶効果 (odd-even) の導入

分裂生成物の核子数の奇偶性が FPY の分布に影響を与えることが知られている。MMoE モデルにおける FPY の予測精度をさらに向上させるために、入力に奇偶効果を導入し、モデルを学習する。

提案手法では、MMoE の入力に奇偶データ（ピークデータの核子数が奇数のとき 0, ピークデータの核子数が偶数のとき 1, 非ピークデータのとき 0.5）を追加して学習させることにより、奇偶効果をモデルに組み込んだ。

(3) 損失関数 Weighted Loss の提案

^{235}U などの代表的なアクチノイドの FPY に特徴的な二山分布の谷（対称核分裂成分）に多くのデータが集まっているが、原子核の殻構造を反映したピーク構造に対応したデータは少なく学習には反映されにくい。そこで FPY をピーク構造とそれ以外の構造に分けて損失関数の重みを定義することで、さらに精度を向上できると考えた。この損失関数はピークデータの重みを増やすことで、これらの特徴をよりよく反映して学習できるようになる。

具体的には、次式のようにトレーニングデータをピークデータと非ピークデータの 2 つのグループに分け、トレーニングデータの FPY 値の大きさに応じてピークデータの重みを大き

くすることにより、よりピーク構造学習の精度を向上させる。

$$WeightedLoss = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (WL_i)$$

$$WL_i = \begin{cases} \alpha \times (y_i^1 - \hat{y}_i^1)^2, & \text{if } normalize(y_i^1) < r \quad (\text{非ピークデータ}) \\ w(y_i^1) \times (y_i^1 - \hat{y}_i^1)^2, & \text{if } normalize(y_i^1) \geq r \quad (\text{ピークデータ}) \end{cases},$$

$$w(y_i^1) = 1 + normalize(y_i^1)$$

α, r : チューニングパラメータ ($\alpha = 0.001, r = 0.7$)

$normalize(y_i^1)$: Z-score normalization (平均 0, 分散 1 に標準化した値)

チューニングパラメータ α, r は FPY の予測精度が最大となるようにグリッドサーチ $\alpha \in \{0.001, 0.005, 0.010, 0.020, 0.050\}, r \in \{0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9\}$ によって決定した。ピークデータの損失関数に大きな値の α を重みとすると WL_i の値が大きくなりすぎ勾配爆発を引き起こす恐れがあるため^(3,4)、非ピークデータの損失関数に小さな値の α を重みとして設定した。

提案損失関数をマルチタスク学習モデル MMoE に適用して、次のように MMoE モデルの損失値は、下式のように 2 つの予測タスクの損失値 (提案損失関数で計算された FPY の予測誤差と FPY Error の予測誤差) の加重和 (重み β はチューニングパラメータ) で定式化する。

$$\beta \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (WL_i) + (1 - \beta) \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i^2 - \hat{y}_i^2)^2$$

β : チューニングパラメータ ($\beta = 0.9$)

チューニングパラメータ β は FPY の予測精度が最大となるようにグリッドサーチ $\beta \in \{0.60, 0.70, 0.80, 0.90\}$ によって決定した。

(4) 結果

① 既存手法およびシングルタスク学習との比較実験

提案手法の有効性を示すため、提案手法、DNN 手法 (核分裂収率 FPY と実験誤差 FPY Error を個別にシングルタスク学習する) および既存手法 (ベイズニューラルネットワーク, BNN)⁽⁵⁾ の予測結果を比較した。ただし、DNN 手法は提案手法と同様に奇遇効果や提案損失関数を用いた場合と比較した。また、既存手法は、先行研究のベイズニューラルネットワークの設定に従い、隠れ層は 2 層、各層には 16 個のニューロンにより構成し、バッチサイズは 50,000、サンプリング数は 50,000、活性化関数は tanh とした。

本研究のトレーニングデータとテストデータは JENDL-5⁽⁶⁾ から表 3.2-1 に示したデータを用いた。

表 3. 2-1 トレーニングデータとテストデータ

トレーニングデータ	テストデータ
U-236(0.5,14 MeV), U-238(0,0.5,14 MeV), U-237(0.5 MeV); Cm-242(0,0.5 MeV), Cm-244(0 MeV), Cm-245(2.53E^{-08} MeV), Cm-246(0,0.5 MeV), Cm-248(0,0.5 MeV); Fm-254(0 MeV), Fm-255(2.53E^{-08} MeV), Fm-256(0 MeV); Pu-239(2.53E^{-08} ,0.5,14 MeV), Pu-241(2.53E^{-08} ,0.5 MeV), Pu-242(2.53E^{-08} ,0.5,14 MeV) Cf-249(2.53E^{-08} MeV), Cf-250(0 MeV), Cf-252(0 MeV); Am-241(2.53E^{-08} ,0.5,14 MeV), Am-242(2.53E^{-08} MeV), Am-243(0.5 MeV); Np-237(2.53E^{-08} ,0.5,14 MeV), Np-238(0.5 MeV); Pa-231(0.5 MeV); Es-253(0 MeV), Es-254(2.53E^{-08} MeV); Th-227(2.53E^{-08} MeV), Th-229(2.53E^{-08} MeV), Th-232(0.5,14 MeV)	U-235(0.5 MeV)

提案手法、DNN 手法および既存手法（BNN）の予測結果を表 3. 2-2 と図 3. 2-2 に示した。

表 3. 2-2 では、各手法による FPY の平均二乗誤差（MSE）および FPY Error の平均二乗誤差を示した。また、ピーク構造について詳細に評価を行うため、全体構造とピーク構造および非ピーク構造についての平均二乗誤差をそれぞれ計算した。

表 3. 2-2 に示される結果から、提案手法は、FPY の予測において BNN 手法および DNN 手法と比較してほぼ全ての場合で予測精度が向上した。これは提案手法が相互補完的な関係にある FPY とその収率に対応する実験誤差 FPY Error を同時に学習することで予測精度を向上させたことを示している。

次に、各手法の FPY 予測結果および実験誤差（FPY Error）の予測結果を図 3. 2-2 に示した。具体的には、青の実線が各手法の FPY 予測値、紫の領域が実験誤差（FPY Error）、黒の実点が JENDL の FPY 実データ、赤の領域が JENDL の FPY Error を示している。また、各サブグラフにおいて、 x 軸は質量数、 y 軸は FPY を示している。

表 3.2-2 各手法の予測結果の MSE (10^{-6})

手法		核分裂収率 FPY			実験誤差 FPY Error		
		全体構造	ピーク構造	非ピーク構造	全体構造	ピーク構造	非ピーク構造
既存手法	BNN	9.33	24.30	4.77	6.30	16.20	3.28
シングルタスク	DNN	6.53	18.49	2.89	3.01	8.54	1.32
	DNN 提案損失関数	8.40	18.24	5.39	3.01	8.54	1.32
	DNN 奇偶効果	8.09	24.62	3.05	4.75	16.60	1.14
	DNN 奇偶効果 提案損失関数	6.64	19.59	2.69	4.75	16.60	1.14
提案手法	提案手法	7.30	17.85	4.09	2.69	9.19	0.76
	提案手法 提案損失関数	5.91	16.67	2.63	3.50	12.56	0.74
	提案手法 奇偶効果	7.00	17.16	3.90	2.77	9.98	0.57
	MMoE 奇偶効果 提案損失関数	5.71	16.58	2.39	4.05	15.12	0.68

はじめに、既存手法 BNN と提案手法 (Multi-task DNN) における予測値の特徴は以下の通りであった。

既存手法 BNN (a) : FPY の全体構造の大まかな予測は可能で二山構造を予測できる。しかし、予測精度が低く、FPY のピーク構造を明確に再現できていない。さらに、FPY Error の予測精度は低い。

提案手法 (b) : 既存手法 BNN と比較して、予測精度が大幅に向上し、FPY データの特徴を良く学習できている。しかし、FPY データの最大値 (質量数が 134) で明らかな起伏があるが、ピーク構造を明確に再現するまでには至っていない。

提案損失関数を用いた提案手法 (c) : ピーク構造に対するより精密な予測を実現し、起伏に富んだ特徴を示しており、ピーク構造を再現することができる。

奇偶効果を用いた提案手法 (d) : ピーク構造に対するより精密な予測を実現し、起伏に富んだ特徴を示しており、ピーク構造を再現することができる。

提案損失関数と奇偶効果を用いた提案手法 (e) : ピーク構造により大きな重みを与えたため、

ピーク構造の予測精度が向上し、FPY データの最大値を予測でき、ピーク構造を明確に再現できている。さらに、非ピーク構造の予測精度についても、最も良い値を示した。

結果、上記 4 つの提案手法は、既存手法よりも高い予測精度を示した。特に、最も高い予測精度を示したのは奇偶効果と提案損失関数を組合せた手法である。提案損失関数ではピーク構造と非ピーク構造にそれぞれ重みづけをするため、FPY のそれぞれの構造をより正確にとらえることができたと考えられる。

さらに、提案手法は DNN 手法 (f) ～(i) よりも予測精度が高い。これは提案手法が相互補完的な関係にある FPY とその収率に対応する実験誤差 FPY Error を同時に学習することで予測精度を向上させたことを示している。

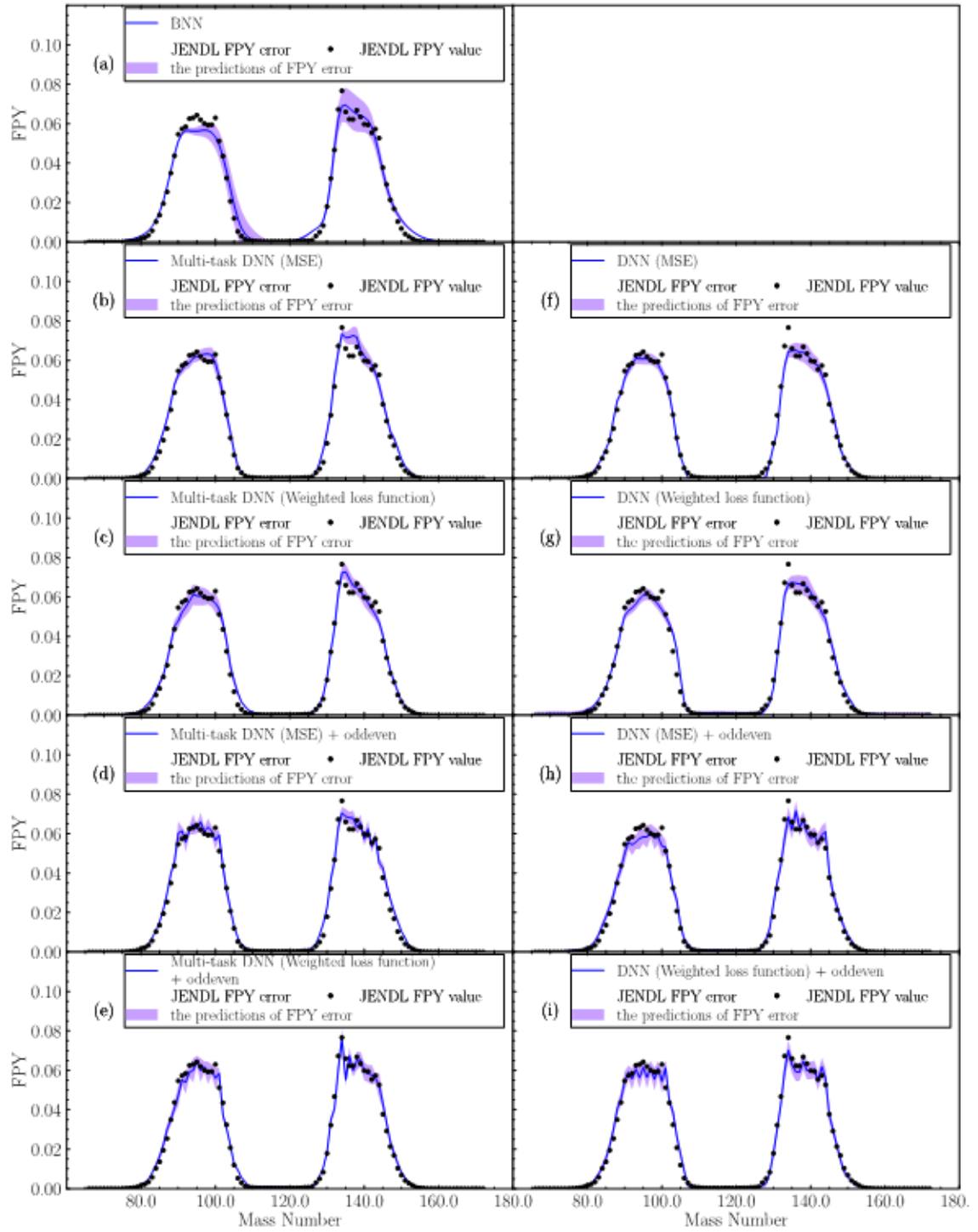


図 3.2-2 提案手法（提案損失関数と奇偶効果）を用いた
 ^{235}U の異なる励起エネルギーにおける FPY および FPY Error 予測

② 異なる励起エネルギーにおける未知 FPY の評価

本節では、未知励起エネルギーにおける FPY（核分裂生成物収率）とその誤差の予測に関する実験を行う。JENDL-5 に含まれる ^{235}U のデータ（ 2.53×10^{-8} MeV、0.5 MeV、14 MeV）と 訓練データとして使用した。Gaussian モデルを用いて生成された補足データ[34] を導入した。これらの補足データは、0～14 MeV のエネルギー範囲を等間隔に複数の部分に分割し、分割点を励起エネルギーとして Gaussian モデルに基づいて補足データを生成した。この補足データの分割点の数は、JENDL-5 に含まれる ^{235}U （0.5 MeV）のデータの予測精度が最大となるように検証を行い分割数=6 に決定した。

図 3. 2-3 は、提案損失関数と奇偶効果を用いた提案手法による異なるエネルギー (a) 0.58 MeV, (b) 1.37 MeV, (c) 2.37 MeV, (d) 3.6 MeV, (e) 4.49 MeV, (f) 8.9 MeV, (g) 14.8 MeV) における FPY および FPY エラーの予測を示している。図 3. 2-3 において、横軸は質量数を、縦軸は FPY 値を表している。青い線は FPY 値の予測を示し、黒い点は FPY データの限定的な実験値 (「experimental FPY value」)⁽⁷⁾ を表している。赤い棒は FPY エラーデータの限定的な実験値 (「experimental FPY error」)⁽⁷⁾ を表し、紫色の影付き領域は FPY エラーの予測を示している。

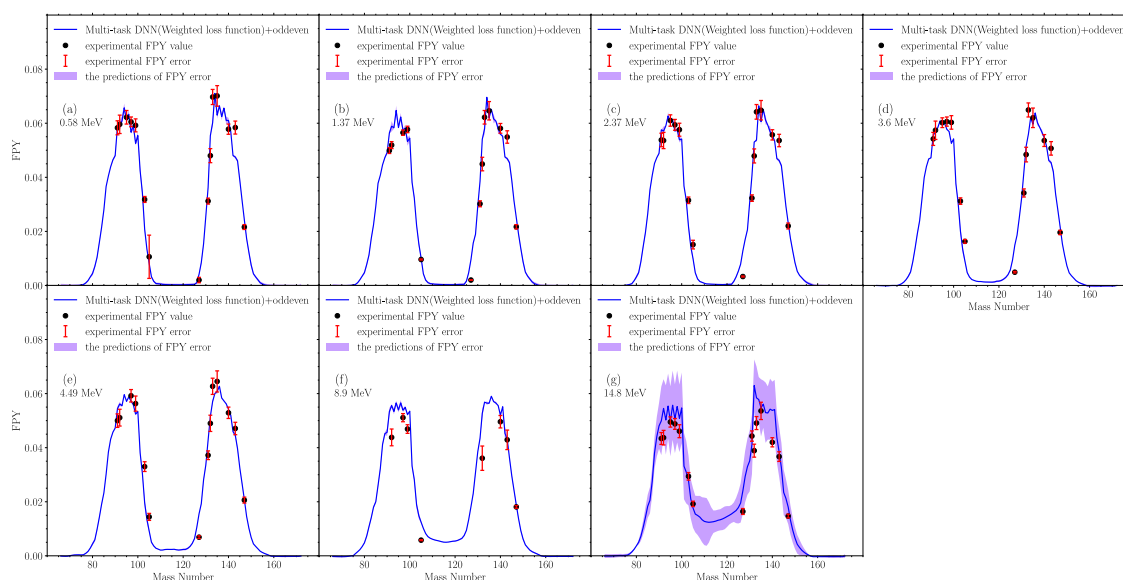


図 3. 2-3 提案手法（提案損失関数と奇偶効果）を用いた ^{235}U の異なる励起エネルギーにおける FPY および FPY Error 予測

図 3. 2-3 において、特にアクチノイド領域では、提案手法による FPY 予測は、 $A=132$ の球形魔法数および $A=142$ 付近の変形魔法数の影響を受けたグローバルな二山構造を特徴としており、奇偶効果による微細構造が重畳した形状となっている。励起エネルギーにかかわらず、提案手法による FPY 予測は、現在知られている FPY データの実験値とよく一致している。このことは、提案手法が未知の励起エネルギーにおける FPY 値を効果的に予測できる能力を持つことを示している。

さらに、提案手法の予測は、既知の物理法則^(6,8) と一致している。グローバルな二山構造は、

分裂核の温度上昇により広がり、ピーク付近の収率が減少し、裾野の収率は増加する結果となる。同時に、微細構造は滑らかになり、微細構造のピークの収率が減少する一方で谷間の収率が増加する。また、重い核分裂生成物のピークは、重い核分裂片からの即発中性子収率の増加により、より小さな A (左側) に移動する。中性子エネルギーが数 MeV を超え、マルチチャンス核分裂が生起するようになる場合、質量数が 1 つ、2 つ、またはそれ以上減少した核分裂する核からの寄与が顕著となる。これにより、軽い核分裂生成物のピークがさらに左側に移動する。

具体的には、グローバルな二山構造の広がりや微細構造の平滑化は、分裂核の熱効果および中性子放出のダイナミクスに対応している。軽い核分裂生成物および重い核分裂生成物のピークの移動も、即発中性子生成の増加およびマルチチャンス核分裂による変化と一致している。したがって、提案手法による予測は、実験的な傾向を再現するだけでなく、これらの確立された物理法則とも密接に一致していることが示された。

図 3.2-3 (a)～(f) では FPY エラー値が小さい一方で、図 3.2-3 (g) では FPY エラー値が大幅に大きくなっていることを示している。図 3.2-3 (g) は 14.8 MeV のエネルギーに対応しており、これは JENDL-5 の FPY エラー値が通常高い 14 MeV に近いので、予測値が大きくなったと考えられる。このことは、提案手法が FPY エラー値の変動パターンを反映できることを示している。

以上のように 6 年度の本研究では、令和 5 年度に開発したマルチタスク深層学習手法の有効性を定量的に評価することを目的として、従来手法との比較・分析を行った。特に、ピーク構造の再現性と奇偶効果に着目し、同様の損失関数を用いたシングルタスク深層学習モデルとの性能比較を実施した結果、FPY (核分裂生成物収率) とその実験誤差 (FPY Error) を同時に学習するマルチタスク構造が、相互補完的な関係を活かして予測精度を向上させることを明らかにした。

3.2.4 まとめ【R6】

核分裂生成物収率 (Fission Product Yield, FPY) は、核燃料サイクルや原子炉設計、安全評価における重要な核データであるが、実測値は限られたエネルギー条件にしか存在せず、特に中間領域や未観測エネルギーでの FPY 予測が重要な課題となっている。従来の物理モデルや Bayesian Neural Network (BNN) は一定の成果を上げているものの、ピーク構造の再現性が乏しいことや負の予測値も頻繁に出現するといった物理的整合性に課題がある。この問題を解決するために、本研究では、FPY とその実験誤差が JENDL-5 の評価式において共通の項を持ち、相関が強いことに着目し、Multi-task DNN (MMoE 構造) によるマルチタスク学習を提案した。これにより、提案手法では、FPY とその実験誤差を同時に学習・予測することで、両者の相互補完的な働きにより予測精度を向上させる。さらに、ピーク構造に敏感な重み付き損失関数と、質量数の奇偶性 (odd-even effect) を特徴量に取り入れることで、ピーク構造を高精度に再現可能とした。予測実験では、学習済みのモデルを用いて異なる励起エネルギーにおける未知の FPY を評価した。その結果、提案手法は多くの条件において BNN や単一タスク DNN よりも良好な精度を示した。特に、ピーク構造や誤差分布の再現性に優れており、負の予測値も大幅に軽減された。さらに、学習に用いていない未測定の実験値に対する予測実験では、予測結果が既知の実験値とよく一致

しており、提案手法の汎化性能と物理的妥当性の高さが示された。これにより、本手法は今後、未知領域における核分裂データの補完・予測手段としての有用性が期待される。ただし、滑らかなピーク構造を持つ核種 (^{239}Pu , ^{238}U など) では、奇偶効果の導入が逆に精度を低下させることもあり、補助情報の選択などが今後の課題である。

本研究を通じて、FPY とその実験誤差をマルチタスク学習で同時に予測することで、両者の相互補完的な関係を同時に学習することが有効であることが明らかになった。特に、Multi-gate Mixture-of-Experts (MMoE) により、タスクごとの特徴量を独立に、互いに共通する特徴量を共有し、相互補完的に学習・予測することで FPY とその誤差の予測精度が向上した。また、ピーク構造に着目した重み付き損失関数により、FPY の高収率領域を優先的に学習する設計としたことで、魔法数に対応する二峰性 ($A \approx 132, 142$) を持つ収率分布の形状をより正確に再現することが可能となった。加えて、質量数の奇偶性 (odd-even effect) を補助特徴量として取り入れることで、ペアリング効果に起因するピーク構造もより明瞭に表現され、既知の核構造との整合性を有する結果が得られた。さらに、励起エネルギーが上がることで FPY 分布が平坦化しピークが広がる傾向や、多重チャンス分裂によってピーク位置が質量数の小さい方にシフトする現象など、文献で報告されている物理的傾向とも予測結果が一致した。このことは、提案手法が核分裂のメカニズムを反映した実用的な予測手法として有効であることを示している。また、従来の BNN では 17.5%にのぼった負の FPY 予測が、本手法では 8.3%にまで減少し、学習時に特別な物理的制約を設けずとも、整合性のある出力が得られるという点も重要な知見である。これは、モデル構造と損失関数が物理的特徴を自然に捉えていることを示唆しており、今後の核データ評価や設計支援に有用な枠組みといえる。

参考文献

- (1) J. Ma, et al. "Modeling task relationships in multi-task learning with multi-gate mixture-of-experts." Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining, (2018).
- (2) A. N. Andreyev, K. Nishio, and K.-H. Schmidt, Rep. Prog. Phys. 81, 016301 (2018).
- (3) Pascanu, R., Mikolov, T., & Bengio, Y. (2013, May). On the difficulty of training recurrent neural networks. In International conference on machine learning (pp. 1310–1318). Pmlr.
- (4) Lin, T. Y., Goyal, P., Girshick, R., He, K., & Dollár, P. (2017). Focal loss for dense object detection. In Proceedings of the IEEE international conference on computer vision (pp. 2980–2988).
- (5) Z. A. Wang, J. C. Pei, and Y. Liu, and Y. Qiang, Phys.Rev.Lett. 123, 122501 (2019).
- (6) O. Iwamoto, N. Iwamoto, S. Kunieda, F. Minato, S. Nakayama, Y. Abe, K. Tsubakihara,

- S. Okumura, C. Ishizuka, T. Yoshida, et al., Japanese evaluated nuclear data library version 5: Jendl-5, *journal of nuclear science and technology* 60, 1 (2023).
- (7) Matthew Edgell Gooden, CW Arnold, JA Becker, C Bhatia, M Bhike, EM Bond, TA Bredeweg, B Fallin, MM Fowler, CR Howell, et al. Energy dependence of fission product yields from ^{235}U , ^{238}U and ^{239}Pu for incident neutron energies between 0.5 and 14.8 meV. *Nuclear Data Sheets*, 131:319–356, 2016.
- (8) Ulrich Brosa, Siegfried Grossmann, and Andreas Müller. Nuclear scission. *Physics Reports*, 197(4):167–262, 1990.

3.3 機械学習による中性子断面積評価（再委託先：原子力機構）

3.3.1 核反応モデルパラメータの系統性の検討 【R4】

核反応モデルのパラメータは通常一部の安定核をもとに決定されているが、核分裂生成物への適用性については定かではない。本研究では、広範囲な原子核に対する既存の実験データに機械学習を適用することで妥当なパラメータを推定し、核分裂生成物の中性子断面積を予測する。令和4年度は、核分裂生成物に対する核反応モデル計算の妥当性向上のために、適切な実験データと機械学習の利用方法を検討した。

本研究では広範囲な原子核に対する実験データから、核分裂生成物に対して妥当性の高い核反応モデルのパラメータの導出を目指しているが、これらのパラメータに系統性が存在することが前提となる。通常、これらのモデルパラメータは計算値が実験値を再現するように決定される。しかしながら、本研究では検討を効率的に行うため、測定データを代表していると考えられる核データライブラリの評価値を利用した。具体的には核データライブラリの評価データを再現する核反応モデルパラメータを導出し、核種に対する依存性を調べた。本報告書では代表的な例として Gd 同位体に対する結果を示す。

核データライブラリには最新の JENDL-5⁽¹⁾を利用し、全断面積、弾性散乱断面積、中性子捕獲断面積の3種類を参照値として用いた。中性子共鳴の影響を低減するため、群平均の断面積を利用した。エネルギー群として1 keV から 20 MeV を対数で20等分し、モデルパラメータの導出には10 keV から 10 MeV の範囲のデータを利用した。核反応モデル計算コードとして原子力機構で開発している CCONE⁽²⁾を用いた。パラメータの初期値はデフォルトの値を使った。最適化するパラメータはできるだけ少なくし、光学ポテンシャルの実数部 (V) と表面項虚数部の深さ (W)、ガンマ線強度関数の規格化定数 (G) の3つを選択した。最適パラメータの導出には非線形最小二乗法を用いた。対象データとして核分裂生成物領域である原子番号 Z=31 (Ga) から Z=81 (Tl) の断面積を用いた。

図 3.3-1 に ¹⁵⁶Gd の断面積のフィッティング結果を示す。図中のヒストグラムは JENDL-5 の平均断面積で、フィッティングに使った参照データである。また、破線はデフォルトパラメータによる計算結果であり、実線はフィッティングの結果得られた断面積である。紫線は全断面積、緑線は弾性散乱断面積、青線は中性子捕獲断面積を表す。デフォルトパラメータによる計算値は JENDL-5 と差があるが、核反応モデルパラメータの最適化により JENDL-5 をより良く再現していることがわかる。

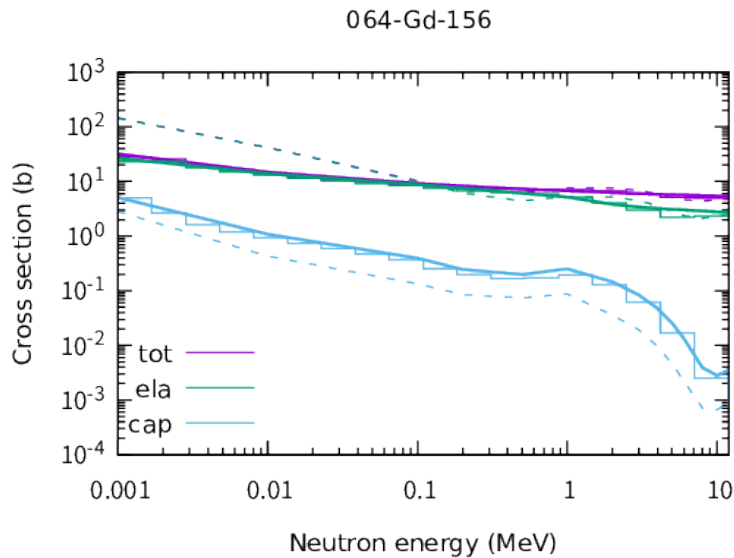


図 3.3-1 ^{156}Gd 中性子断面積に対するフィッティング結果

次に核データライブラリをもとに得られたパラメータについて、ガウス過程回帰 (GPR) を用いて標的核種の陽子数 (Z)、中性子数 (N) に対する依存性を検討した。GPR には機械学習フレームワークの一つとして広く利用されている `scikit-learn`⁽³⁾ を使用した。核データライブラリは実験データがない原子核に対しても評価値が与えられている。ここでは天然存在比が 1% 以上の同位体に対する評価値は実験データを代表するものとみなし、学習データとして利用した。ガウス過程回帰のカーネルとしては、一般的に利用されている動径基底関数 (RBF) を用い、 N 、 Z に依存しないホワイトノイズを加えた。また、RBF の入力変数 N 、 Z に対するスケールパラメータを 4 に固定した。

図 3.3-2 に Gd ($Z=64$) 同位体に対するモデルパラメータ G の解析結果を示す。 $N=82-87$ 、95 については CCONE による系統的な計算結果が JENDL-5 として採用されており、本研究で得られた結果もデフォルトパラメータに近い。一方、測定データをもとに評価されていると考えられる赤丸は N に対する明らかに異なる傾向がみられる。GPR の予想とも整合しており、パラメータの系統性が導出できていると考えられる。 $N=89$ 付近にピークがあるが、これは Gd の近くの別元素のパラメータの値の影響であると考えられる。

本検討の結果、核データライブラリの評価データをもとに得られた核反応モデルパラメータには系統性があり、測定データが少ない核分裂生成物に対する核データの精度向上に利用できると思われる。

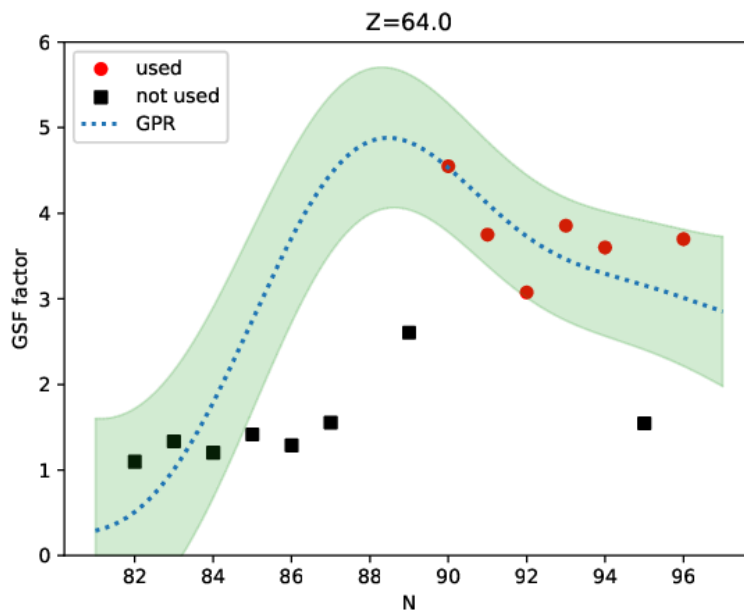


図 3.3-2 Gd (Z=64) 同位体に対するガンマ線強度関数規格化定数 (G)

3.3.2 物理モデルの導入 【R5】

断面積の測定データを用いたモデルパラメータの導出を試みたが、測定データの数は一応やエネルギー領域によって大きく異なるため、測定データが比較的少ない反応やエネルギー領域の断面積については、パラメータの変更により計算結果が悪化した。断面積の測定データの豊富さは核種や反応によって大きく異なっているため、単純なフィッティングにより断面積の測定データから適切なパラメータを得ることは困難であると考え、物理モデルを改良することにより断面積の予測精度の向上を試みた。

核分裂生成物に対する核反応核データとしては、中性子捕獲反応断面積の重要性が高い。ここでは、中性子捕獲反応に大きく影響する、ガンマ線強度関数⁽⁴⁾についての物理モデルを検討した。ガンマ線強度関数は様々なモデルが提案されており⁽⁵⁾、本研究で用いているCCONE⁽²⁾でも、複数のモデルを選択することが可能である。ガンマ線強度関数は電氣的(E)磁氣的(M)遷移の多重極ごとに関数が与えられている⁽⁵⁾。最も強度が大きい電気双極子(E1)について多くの検討がなされており、パラメータの系統性なども提案されている。磁気双極子(M1)については、単純なローレンツ関数を使用するなど、E1と比較して簡単な取り扱いがなされている。変形核についてはM1によって励起されるシザーズモードと呼ばれる励起状態が知られているが、近年Mumpower等は中性子捕獲反応において、シザーズモードを取り入れることで核反応のモデル計算にみられていた過小評価が改善することを示した⁽⁶⁾。本研究においても、シザーズモードを取り入れることにより、中性子捕獲反応断面積の予測精度の向上を試みた。

Mumpower 等はローレンツ関数の強度の系統性について、M1 遷移の共鳴断面積 σ_{M1} と共鳴幅 Γ_{M1} の積が原子核の四重極変形度 β_2 の 2 乗に比例すると仮定して、中性子捕獲断面積の平均値から $\sigma_{M1}\Gamma_{M1} = 42.4\beta_2^2$ と導出した。この系統式を導入し、中性子捕獲反応断面積の計算を行うためには、原子核変形度の値が必要である。原子核の変形度について理論的な研究が多くなされており、複数の計算結果が核分裂生成物を含む広い原子番号および質量数にわたる原子核について公開されている^(5,7)。しかしこれらの値にはばらつきがあり、原子核の変形度を一意的に定めることは難しい。本研究では、陽子数 Z、中性子数 N の 2 次元の関数として、ガウス過程回帰 (GPR) により、不確かさを含めた評価値を導出した。GPR の計算には前節と同様に scikit-learn⁽³⁾を使用した。図 3.3-3 に GPR によって得られた結果を示す。青い実線は GPR による推定結果であり、緑の影はその不確かさを表す。図の黒丸は変形度の理論計算結果である。これらのデータは傾向が大きく外れているものを除いて、不確かさの範囲で GPR の結果とほぼ整合しており、妥当だと判断した。これらの GPR で得られた推定値は原子核の変形度により、シザーズモードの強度を評価し、中性子捕獲断面積の計算に用いた。

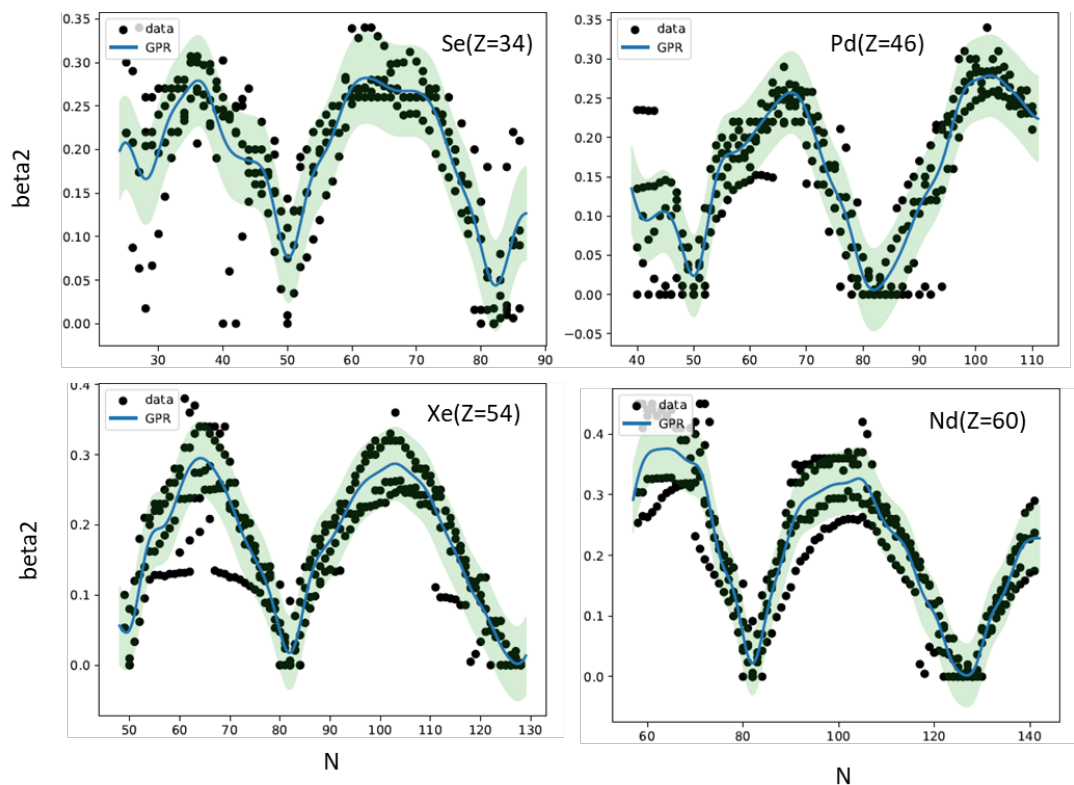


図 3.3-3 ガウス過程回帰による原子核変形度の推定結果。青い実線は中央値で、緑の影の部分が不確かさを表す。

図 3.3-4 に ^{79}Br に対するシザーズモードを取り入れた中性子捕獲断面積の計算結果を示す。図中ピンク色の影で示したものが原子核変形度の不確かさを考慮した断面積を表す。また、シザーズモードなしの計算結果を破線で示す。灰色のシンボルは測定データを表し、青丸は測定データを平均して得られた評価値である。この平均値には測定の不確かさおよびデータのばらつきを考慮して不確かさを与えた。この平均データを用いて、最小二乗法による原子核変形度のフィッティングを行った。その結果得られた断面積を一点鎖線で示す。また、凡例部分に得られた変形度を記載する。シザーズモードを入れない計算結果は測定データを明らかに過小評価しており、シザーズモードを取り入れることによって、断面積の予測精度が向上していることがわかる。また、断面積データを用いて変形度をフィッティングした結果も整合している。

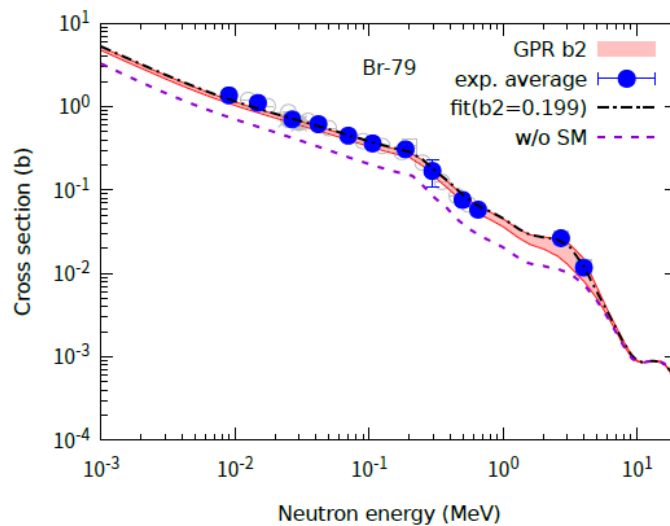


図 3.3-4 ^{79}Br に対する中性子捕獲断面積の計算結果

図 3.3-5 に Pd 同位体に対する計算結果を示す。これらの Pd 同位体は図 3.3.5 からわかるように、 ^{104}Pd (N=58) から ^{110}Pd (N=64) にかけて質量数が増加するにともない、変形度も増加している。ガウス過程回帰による結果は測定データを若干過小評価しているものの、 ^{106}Pd および ^{110}Pd を除くと、測定データとほぼ整合した結果を与えており、シザーズモードを入れていない計算と比較し、明らかに改善していることがわかった。 ^{106}Pd および ^{110}Pd についてもシザーズモードを取り入れることで過小評価は大幅に改善しているものの、測定データと比較しまだ過小評価している。 ^{106}Pd の断面積を用いてフィッティングにより得られた原子核の変形度は 1.6 となっており、非物理的に大きな結果を与えている。これはシザーズモードの導入のみでは断面積の過小評価は説明できないことを表しており、M1 ガンマ線強度関数以外の影響も考えられる。精度向上には他の物理量やモデルなどを含めたより詳細な検討が必要である。

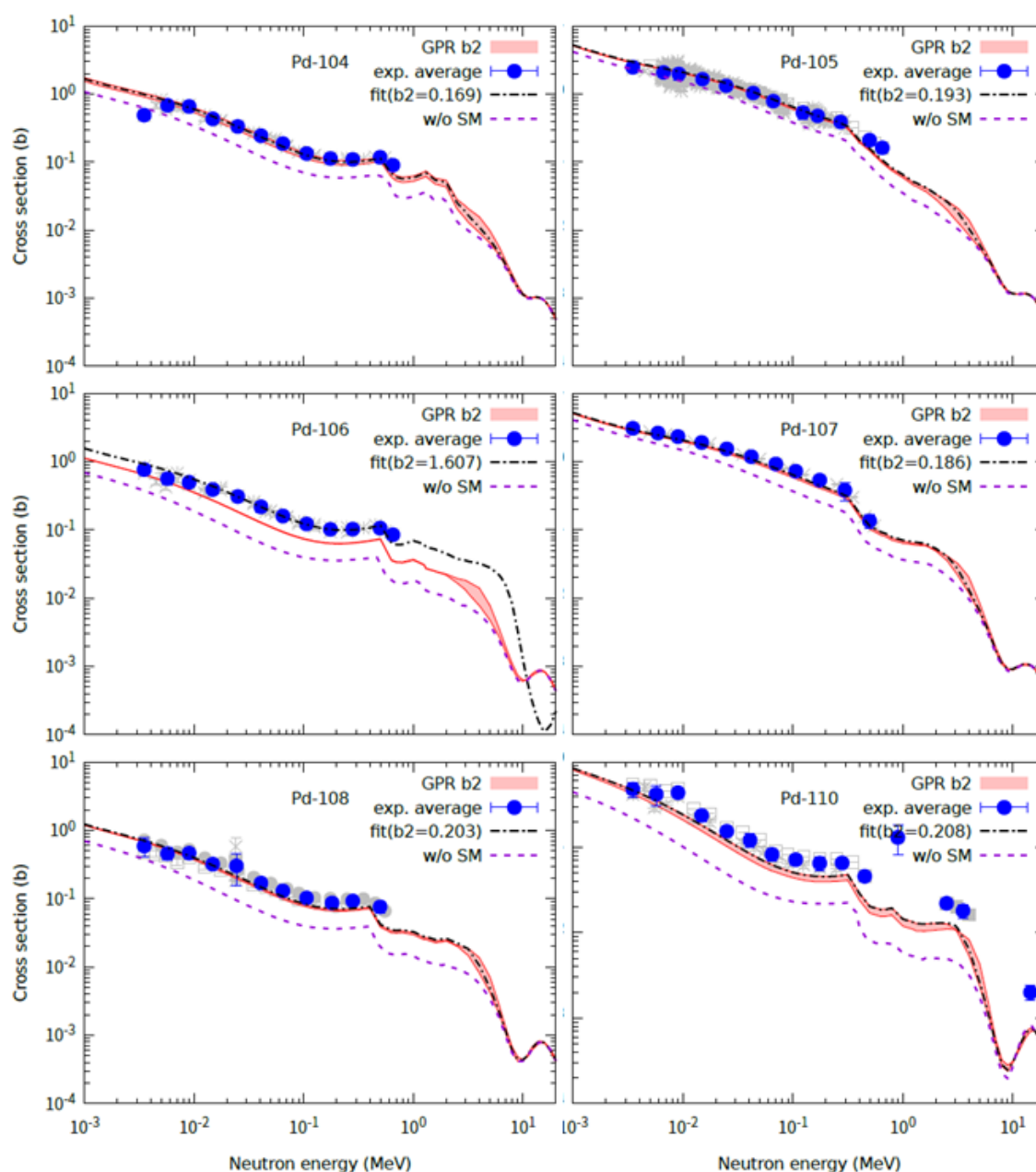


図 3.3-5 Pd 同位体に対する中性子捕獲断面積の計算結果

3.3.3 入射チャンネルにおける変形効果の導入 【R6】

核分裂生成物に対するパラメータの系統性の検討を進めた。令和5年度は中性子捕獲反応で重要となるガンマ線の放出過程に着目して原子核の変形効果を導入したが、原子核の変形は中性子の入射チャンネルにも影響を与える。原子核が変形すると、回転バンドと呼ばれる原子核の回転に対応した励起レベルが現れる。中性子入射によりこの励起レベルが容易に励起され、中性子の吸収断面積にも影響することが知られている。令和5年度の計算では、中性子の入射チャンネルに対して球形の原子核を仮定した光学モデル (SOM) を使用したが、令和6年度は標的核の変形による励起レベルを考慮したチャンネル結合光学モ

デル (CCOM) を使用して影響を調べた。必要となる原子核の変形度は令和 5 年度で得たガウス過程回帰による推定値を用いた。SOM と CCOM を用いて、低エネルギーでの中性子と原子核との反応の起こりやすさを表す s 波中性子強度関数 (S_0) を算出した。SOM 計算には CCONE のデフォルトパラメータである Koning 等のグローバル光学ポテンシャル⁽⁹⁾を用いた。CCOM 計算については、光学ポテンシャルは Kunieda 等のグローバル解析による系統式⁽¹⁰⁾を用い、結合レベルは基底状態回転バンドの 3 レベルとした。s 波中性子強度関数は中性子の共鳴断面積の測定データから得られており、これらのデータとの比較を図 3.3-6 に示す。質量数 140 以上で球形モデル (SOM) と変形モデル (CCOM) との違いが大きいが、CCOM の方が測定データとの整合性が良く、妥当性が高いと考えられる。

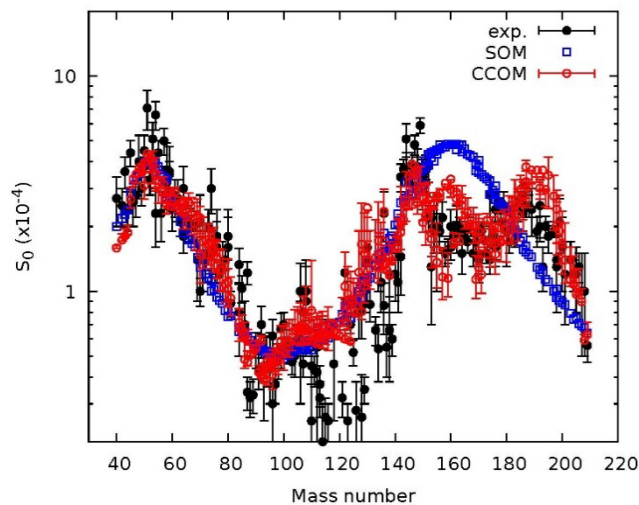


図 3.3-6 s 波強度関数の計算結果

CCOM を用いて中性子捕獲反応断面積の計算を行った。 ^{116}Cd および ^{156}Gd の結果を図 3.3-7 に示す。変形度 β_2 が 0.15 程度である ^{116}Cd については SOM と CCOM とで捕獲断面積の計算結果の差は小さく、測定データとの整合性も同程度である。一方、変形度 β_2 が 0.28 程度とより大きな変形度をもつ ^{156}Gd については、CCOM の方が測定データの再現性が高いことがわかった。この結果は質量数 160 近傍での中性子強度関数の結果と整合しており、変形効果を取り入れた計算の方がより妥当だと考えられる。

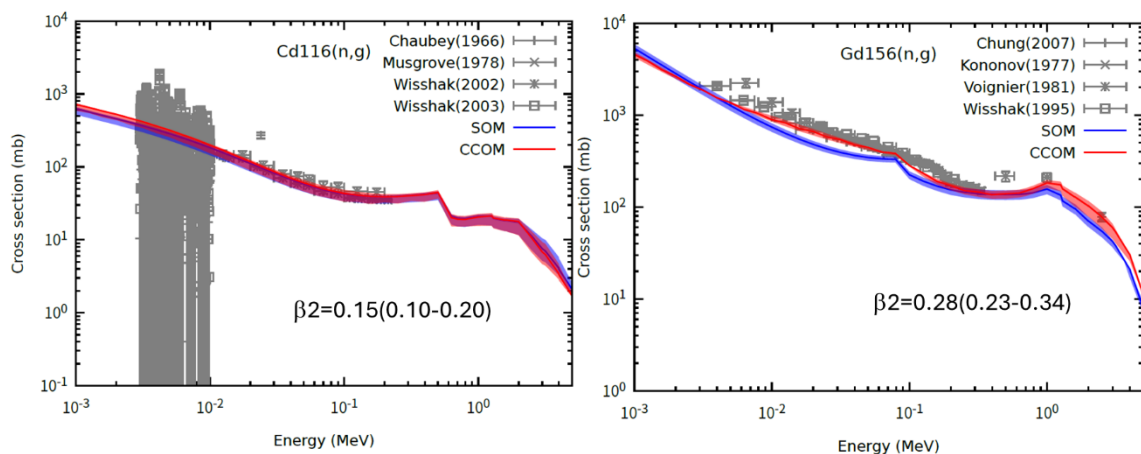


図 3.3-7 ^{116}Cd および ^{156}Gd に対する中性子捕獲断面積の計算結果

3.3.4 評価済核データファイルの整備 【R6】

炉物理への影響評価で使用するため、機械学習による変形度の予測結果をもとに核データファイルを整備した。整備を行う核種は JENDL-5 の中性子反応データが存在する核分裂生成物（質量数 66～172、419 核種）とし、評価対象データは分離共鳴エネルギー以上の中性子捕獲断面積とした。共鳴領域を含む他のデータは JENDL-5 のデータを採用した。本研究で検討したガンマ線強度関数にシザーズモードを追加し、中性子入射チャンネルについては、変形度 0.1 未満は球形モデル、変形度 0.1 以上はチャンネル結合モデルを利用して、共鳴領域以上の中性子捕獲反応断面積を評価した。原子核の変形度は 3.3.2 節の GRP による予測値を用いた。その他のパラメータは CCONE のデフォルト値のままとした。

最終的な評価ファイルとしては、新たな評価値が JENDL-5 と同等以上、または測定データがない場合は新たな評価値を採用し、JENDL-5 の方が明らかに測定データとの整合性が高い場合は JENDL-5 のデータを採用することとした。図 3.3-8 に ^{99}Tc および ^{137}Cs の計算結果と JENDL-5 の比較を示す。 ^{99}Tc については、若干過小評価気味ではあるが、低い値の測定データもあるため、新評価を採用した。また、 ^{137}Cs については、測定データがないため、新評価を採用した。一方、図 3.3-9 に示す ^{138}Ba および ^{152}Gd については、JENDL-5 の方が明らかに測定データとの整合性が高いため、JENDL-5 のデータを採用した。対象とする 419 核種中、35 核種は JENDL-5 のデータのままであるが、384 核種については中性子捕獲断面積を改訂したデータを最終版とした。これらのデータは核データの標準フォーマットである ENDF-6 形式である。MVP⁽¹¹⁾の開発元に依頼し作成した MVP ライブラリを炉物理への影響評価へ提供した。

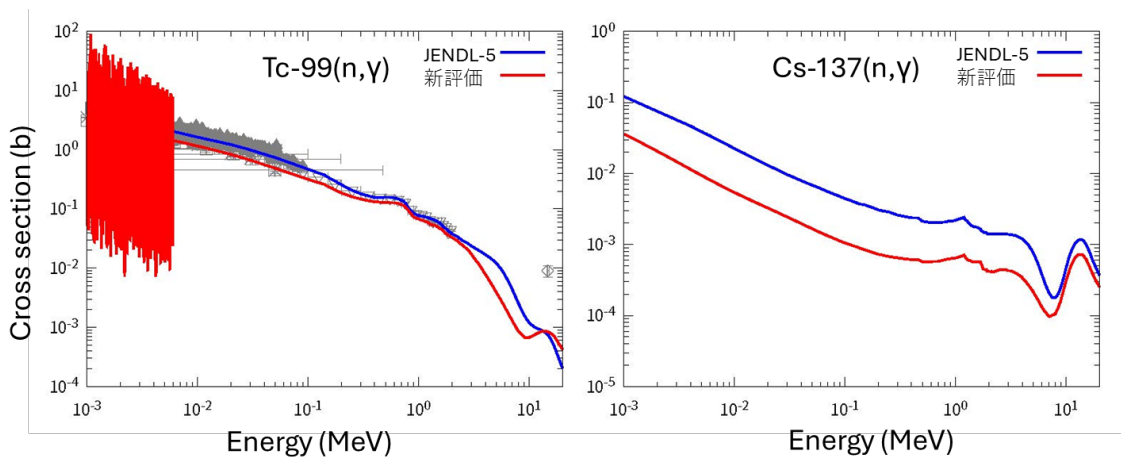


図 3.3-8 ^{99}Tc および ^{137}Cs の中性子捕獲断面積

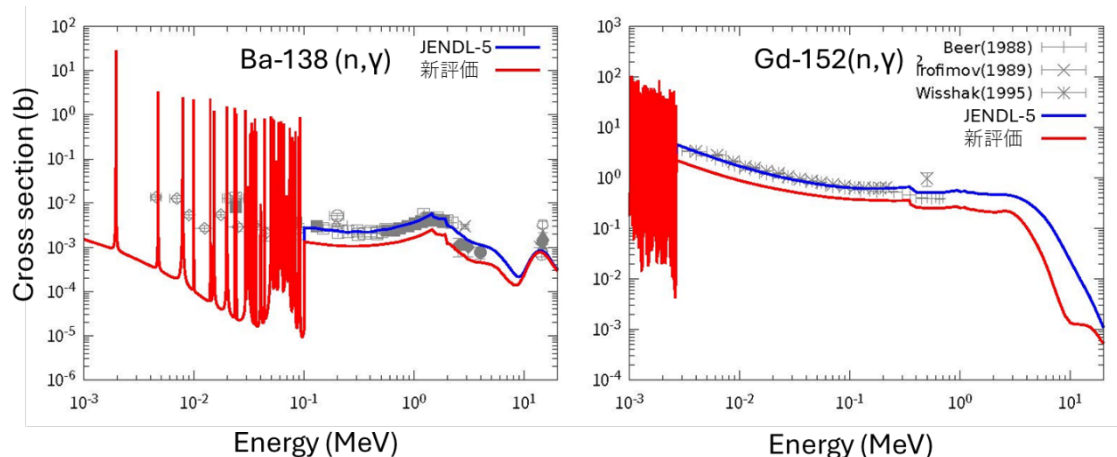


図 3.3-9 ^{138}Ba および ^{152}Gd の中性子捕獲断面積

3.3.5 まとめ【R6】

測定データが限られている核分裂生成物の中性子断面積の信頼性の向上を目指し、核分裂生成物領域で有効な核反応モデルパラメータの検討を行った。核反応モデル計算コード CCONE に原子核の変形に由来するシザーズモードと呼ばれる励起状態への遷移を新たに導入し、必要となる原子核の変形度について理論値や評価値をもとにガウス過程回帰を用いて妥当な値を推定した。この結果、これまで過小評価気味であった中性子捕獲断面積の予測値が大幅に改善された。また、中性子入射チャンネルにも原子核の変形効果を考慮することで、変形度の大きな原子核に対する予測精度がさらに向上した。これにより測定データが限られる核分裂生成物の中性子断面積の信頼性が向上し、当初の目的が達成されたと考える。

本研究から機械学習などの手法を用いても、データが限られる中性子反応の測定データのみを用いて予測精度を向上させることは困難であるが、鍵となる物理モデルと機械学習を組み合わせることで効果的に精度向上につなげることが可能であることが分かった。

現在の計算結果でも測定データの再現性が悪い場合があり、要因の検討が必要である。今回導入した磁気双極遷移の他、電気双極遷移のモデルに加え、準位密度などのパラメータなども検討することで、更なるモデル計算の予測精度の向上につながる可能性がある。

参考文献

- (1) O. Iwamoto et al., “Japanese evaluated nuclear data library version 5: JENDL-5,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, 60, 1 (2023).
- (2) O. Iwamoto, “Development of a Comprehensive Code for Nuclear Data Evaluation, CCONE, and Validation Using Neutron-Induced Cross Sections for Uranium Isotopes,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, 44, 687 (2007).
- (3) Scikit-learn, <https://scikit-learn.org/>
- (4) S. Goriely et al., “Reference database for photon strength functions,” *Eur. Phys. J. A*, 55, 172 (2019).

- (5) R. Capote et al., “RIPL – Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations,” Nuclear Data Sheets, 110, 3107 (2009).
- (6) M. R. Mumpower, “Estimation of M1 scissors mode strength for deformed nuclei in the medium- to heavy-mass region by statistical Hauser-Feshbach model calculations,” Phys. Rev. C, 96, 024612 (2017).
- (7) H. Koura et al., KTUY Mass Formula,
https://www.ndc.jaea.go.jp/nucldata/mass/KTUY04_E.html
- (8) NuDat 3.0, National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory,
<https://www.nndc.bnl.gov/nudat3/>
- (9) A.J. Koning, J.P. Delaroche, “Local and global nucleon optical models from 1 keV to 200 MeV,” Nucl. Phys. A 713, 231 (2003).
- (10) S. Kunieda et al., “Coupled-channels Optical Model Analyses of Nucleon-induced Reactions for Medium and Heavy Nuclei in the Energy Region from 1 keV to 200 MeV,” J. Nucl. Sci. Technol., 44, 838 (2007).
- (11) Y. Nagaya et al., “MVP/GMVP Version 3: General Purpose Monte Carlo Codes for Neutron and Photon Transport Calculations Based on Continuous Energy and Multigroup Methods,” JAEA-Data/Code 2016-018 (2017).

3.4 炉物理への影響評価（再委託先：大阪大学）

3.4.1 ADS や新型炉における炉心特性への影響評価【R4-R6】

令和4年度では、ADS、金属燃料高速炉、酸化物燃料高速炉について MVP⁽¹⁾ を用いたモンテカルロ法に基づく試計算を実施し、核分裂率スペクトルを得た。その後、得られた核分裂率スペクトルと各中性子エネルギーでの核分裂収率に基づいた ORIGEN⁽²⁾ ライブラリを作成し、ORIGEN の試計算を行った。

令和5年度では、ADS や新型炉における炉心特性への影響評価について、JENDL-5⁽³⁾ に基づく従来ライブラリを用いて MVP⁽¹⁾ を用いたモンテカルロ法に基づく計算により、ADS や新型炉における中性子エネルギースペクトル情報をふまえ、実効遅発中性子割合等の炉心特性を評価した。

令和6年度は、3.1 機械学習による核分裂収率予測と評価、3.2 核分裂収率評価のためのベジアンニューラルネットワーク法の高度化（再委託先：電気通信大学）、3.3 機械学習による中性子断面積評価（再委託先：原子力機構）の成果を反映したライブラリを用いて、炉心特性への影響を評価した。核分裂収率の更新は遅発中性子先行核密度に直接的な影響があると考えられるため、実効遅発中性子割合への影響を評価した。中性子断面積の更新は中性子捕獲率に影響することから、増倍率への影響を評価した。

(1) 共通する計算条件

3つの体系で共通する計算条件を示す。核データライブラリとして JENDL-5⁽³⁾ に基づいた MVP 用ライブラリと 3.3 機械学習による中性子断面積評価（再委託先：原子力機構）の成果を反映し、FP 核種の断面積を更新した MVP 用ライブラリを使用した。この MVP 用ライブラリについて、以降では JENDL-5 with mod. FP XS と示す。ADS、金属燃料高速炉、酸化物燃料高速炉の全ての体系で 1 バッチあたりのヒストリー数 10,000、バッチ数 550（捨てバッチ 50）の総ヒストリー数 5,500,000 で計算を行った。また核分裂率スペクトルの出力に使用したエネルギー群構造については、上限 14 MeV、下限 10×10^{-5} eV として、lethargy 幅が 0.17 で均一となるようにした 70 群構造を用いた。表 3.4-1 に断面積の更新があった FP 核種一覧を示す。

表 3.4-1 断面積の修正があった FP 核種一覧

AG-105	AG-106m	AG-107	AG-108m	AG-109
AG-110m	AG-111	AS-71	AS-72	AS-73
AS-74	AS-75	AS-76	AS-77	BA-128
BA-129	BA-130	BA-131	BA-132	BA-133
BA-133m	BA-134	BA-135	BA-135m	BA-136
BA-137	BA-138	BA-139	BA-140	BR-76
BR-77	BR-79	BR-81	BR-82	CD-106
CD-108	CD-109	CD-110	CD-111	CD-112
CD-113	CD-113m	CD-114	CD-115	CD-115m
CD-116	CE-134	CE-135	CE-136	CE-137m
CE-138	CE-139	CE-140	CE-141	CE-142
CE-143	CE-144	CS-129	CS-131	CS-132
CS-133	CS-134	CS-135	CS-136	CS-137
CU-67	DY-154	DY-155	DY-156	DY-157
DY-158	DY-159	DY-160	DY-161	DY-162
DY-163	DY-164	DY-165	DY-166	ER-160
ER-161	ER-162	ER-164	ER-165	ER-166
ER-167	ER-168	ER-169	ER-170	ER-171
ER-172	EU-145	EU-146	EU-147	EU-148
EU-149	EU-150	EU-150m	EU-151	EU-152
EU-152m	EU-153	EU-154	EU-155	EU-156
EU-157	GA-67	GA-69	GA-71	GA-72
GD-146	GD-147	GD-148	GD-149	GD-150
GD-151	GD-152	GD-153	GD-154	GD-155
GD-156	GD-157	GD-158	GD-159	GD-160
GE-68	GE-69	GE-70	GE-71	GE-72
GE-73	GE-74	GE-76	GE-77	HF-170
HF-171	HF-172	HO-161	HO-162	HO-163
HO-164	HO-164m	HO-165	HO-166	HO-166m
I-123	I-124	I-125	I-126	I-127
I-128	I-129	I-130	I-131	I-133
I-135	IN-111	IN-113	IN-114m	IN-115
KR-76	KR-78	KR-79	KR-80	KR-81

KR-82	KR-83	KR-84	KR-85	KR-86
LA-135	LA-137	LA-138	LA-139	LA-140
LA-141	LU-169	LU-170	LU-171	LU-172
MO-92	MO-93	MO-94	MO-95	MO-96
MO-97	MO-98	MO-99	MO-100	NB-90
NB-91	NB-91m	NB-92	NB-92m	NB-93
NB-93m	NB-94	NB-95	NB-95m	NB-96
ND-140	ND-141	ND-142	ND-143	ND-144
ND-145	ND-146	ND-147	ND-148	ND-149
ND-150	NI-66	PD-100	PD-101	PD-102
PD-103	PD-104	PD-105	PD-106	PD-107
PD-108	PD-109	PD-110	PD-112	PM-143
PM-144	PM-145	PM-146	PM-147	PM-148
PM-148m	PM-149	PM-150	PM-151	PR-141
PR-142	PR-143	RB-83	RB-84	RB-85
RB-86	RB-87	RH-99	RH-99m	RH-100
RH-101	RH-101m	RH-102	RH-102m	RH-103
RH-104	RH-105	RU-96	RU-97	RU-98
RU-99	RU-100	RU-101	RU-102	RU-103
RU-104	RU-105	RU-106	SB-119	SB-120m
SB-121	SB-122	SB-123	SB-124	SB-125
SB-126	SB-127	SE-72	SE-73	SE-74
SE-75	SE-76	SE-77	SE-78	SE-79
SE-80	SE-82	SM-144	SM-145	SM-146
SM-147	SM-148	SM-149	SM-150	SM-151
SM-152	SM-153	SM-154	SN-112	SN-113
SN-114	SN-115	SN-116	SN-117	SN-117m
SN-118	SN-119	SN-119m	SN-120	SN-121
SN-121m	SN-122	SN-123	SN-124	SN-125
SN-126	SR-82	SR-83	SR-84	SR-85
SR-86	SR-87	SR-88	SR-89	SR-90
TB-151	TB-152	TB-153	TB-154	TB-154m
TB-155	TB-156	TB-156m	TB-157	TB-158
TB-159	TB-160	TB-161	TC-95	TC-95m

TC-96	TC-97	TC-97m	TC-98	TC-99
TE-118	TE-119	TE-119m	TE-120	TE-121
TE-121m	TE-122	TE-123	TE-123m	TE-124
TE-125	TE-125m	TE-126	TE-127	TE-127m
TE-128	TE-129	TE-129m	TE-130	TE-131m
TE-132	TM-165	TM-166	TM-167	TM-168
TM-169	TM-170	TM-171	TM-172	XE-122
XE-124	XE-125	XE-126	XE-127	XE-128
XE-129	XE-129m	XE-130	XE-131	XE-131m
XE-132	XE-133	XE-133m	XE-134	XE-135
XE-136	Y-86	Y-87	Y-87m	Y-88
Y-89	Y-90	Y-91	YB-166	YB-168
YB-169	YB-170	YB-171	YB-172	ZN-66
ZN-67	ZN-68	ZN-69	ZN-69m	ZN-70
ZN-71	ZN-72	ZR-86	ZR-88	ZR-89
ZR-90	ZR-91	ZR-92	ZR-93	ZR-94
ZR-95	ZR-96	ZR-97		

(2) ADS の計算条件

原子力機構で検討されているマイナーアクチノイドを核変換するためのADS^(4,5)を参考にした。燃料温度を平均燃料温度である 983 K、燃料以外の温度を最大被覆管温度である 873 K として計算を行った。また Inner core を対象として核分裂率スペクトルを得た。Inner core の数密度を表 3.4-2 に示す。

表 3.4-2 ADS の Inner core における数密度

核種	数 密 度 (atom/barn-cm)	核種	数 密 度 (atom/barn-cm)
U-234	3.469×10^{-7}	Fe-57	1.398×10^{-4}
U-236	8.600×10^{-8}	Fe-58	1.861×10^{-5}
Np-237	8.962×10^{-4}	Ni-58	7.597×10^{-4}
Pu-238	2.030×10^{-5}	Ni-60	2.926×10^{-4}
Pu-239	4.625×10^{-4}	Ni-61	1.272×10^{-5}
Pu-240	2.103×10^{-4}	Ni-62	4.056×10^{-5}
Pu-241	9.137×10^{-5}	Ni-64	1.033×10^{-5}
Pu-242	5.837×10^{-5}	Zr-90	2.920×10^{-3}
Am-241	5.790×10^{-4}	Zr-91	6.367×10^{-4}
Am-242	1.061×10^{-6}	Zr-92	9.733×10^{-4}
Am-243	2.354×10^{-4}	Zr-94	9.863×10^{-4}
Cm-243	5.281×10^{-7}	Zr-96	1.589×10^{-4}
Cm-244	7.083×10^{-5}	Mo-92	2.102×10^{-5}
Cm-245	6.809×10^{-6}	Mo-94	1.313×10^{-5}
Cm-246	6.956×10^{-7}	Mo-95	2.392×10^{-4}
N-15	8.309×10^{-3}	Mo-96	2.517×10^{-4}
Cr-50	7.756×10^{-5}	Mo-97	1.450×10^{-4}
Cr-52	1.496×10^{-3}	Mo-98	3.683×10^{-4}
Mn-55	9.939×10^{-5}	Mo-100	1.483×10^{-4}
Fe-54	3.857×10^{-4}	Bi-209	9.686×10^{-3}
Fe-56	6.054×10^{-3}		

(atom/barn-cm)

(3) 金属燃料高速炉の計算条件

NEA で検討されている超ウラン元素を転換するための高速炉⁽⁶⁾の 1,000 MW 出力の金属燃料ベンチマーク炉心を参考にピンセル体系を作成し、計算を行った。燃料ピンとして Inner Fuel ピンを用いて、境界条件を完全反射とし、図 3.4-1 に示すピンセル体系を作成した。原子数密度は、参考文献⁽⁶⁾の値を用いた。燃料部分の数密度を表 3.4-3 に示す。なお温度は、燃料、下部リフレクター (HT9)、ボンド Na、ガスプレナム温度は 807 K、被覆管 (HT9) と冷却材 (ナトリウム) の温度は 706 K として計算を行った。

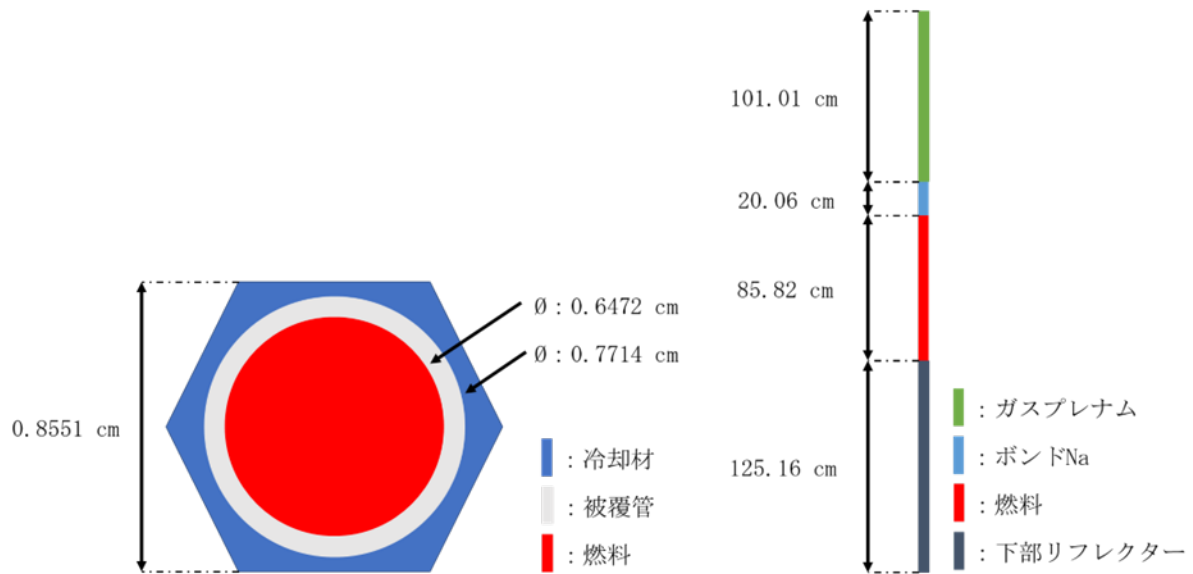


図 3.4-1 金属燃料高速炉のピンセル体系

表 3.4-3 金属燃料高速炉の燃料部分における数密度

核種	数密度 (atom/barn-cm)	核種	数密度 (atom/barn-cm)
U-234	1.0727×10^{-6}	Cm-244	6.5622×10^{-5}
U-235	2.8961×10^{-5}	Cm-245	1.6663×10^{-5}
U-236	2.5536×10^{-6}	Cm-246	9.1307×10^{-6}
U-238	1.9433×10^{-2}	Zr-90	3.7457×10^{-3}
Np-237	4.6782×10^{-5}	Zr-91	8.1684×10^{-4}
Pu-236	5.6701×10^{-10}	Zr-92	1.2486×10^{-3}
Pu-238	1.1196×10^{-4}	Zr-94	1.2653×10^{-3}
Pu-239	2.1754×10^{-3}	Zr-96	2.0385×10^{-4}
Pu-240	1.2902×10^{-3}	Mo-92	1.7481×10^{-4}
Pu-241	1.8518×10^{-4}	Mo-94	1.1008×10^{-4}
Pu-242	2.8818×10^{-4}	Mo-95	1.9057×10^{-4}
Am-241	1.0353×10^{-4}	Mo-96	2.0056×10^{-4}
Am-242	9.0224×10^{-6}	Mo-97	1.1550×10^{-4}
Am-243	9.7993×10^{-5}	Mo-98	2.9344×10^{-4}
Cm-242	5.9476×10^{-6}	Mo-100	1.1814×10^{-4}
Cm-243	5.0136×10^{-7}		

(atom/barn-cm)

(4) 酸化物燃料高速炉の計算条件

NEA で検討されている超ウラン元素を転換するための高速炉⁽⁶⁾の 1,000 MW 出力の酸化物燃料ベンチマーク炉心を参考にピンセル体系を作成し、計算を行った。燃料ピンとして Inner Fuel ピンを用いて、境界条件を完全反射とし、以下の図 3.4-2 に示すピンセル体系を作成した。原子数密度は、参考文献⁽⁶⁾の値を用いた。燃料部分の数密度を表 3.4-4 に示す。なお温度は、燃料、下部リフレクター (HT9)、ガスプレナム温度は 807 K、被覆管 (HT9) と冷却材 (ナトリウム) の温度は 706 K として計算を行った。

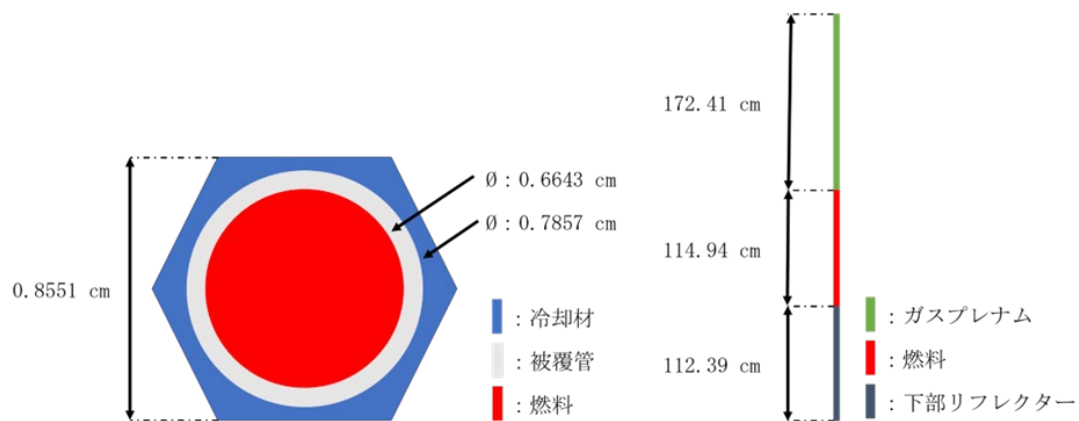


図 3.4-2 酸化物燃料高速炉のピンセル体系

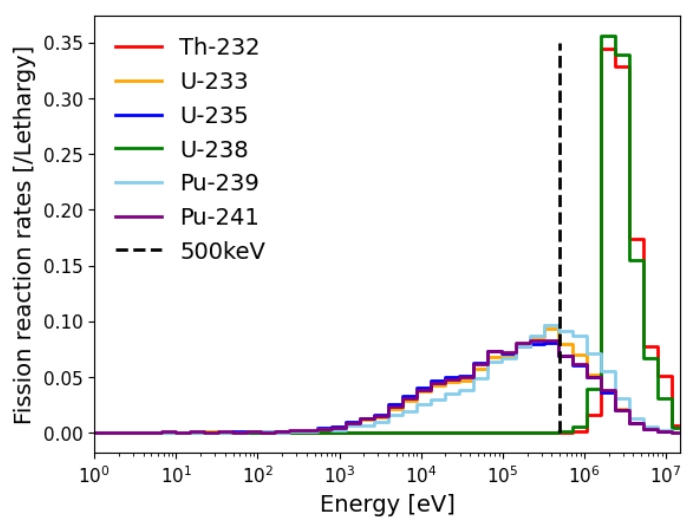
表 3.4-4 酸化物燃料高速炉の燃料部分における数密度

核種	数 密 度 (atom/barn-cm)	核種	数 密 度 (atom/barn-cm)
U-234	1.4786×10^{-6}	Cm-242	6.2924×10^{-6}
U-235	1.9063×10^{-5}	Cm-243	6.7759×10^{-7}
U-236	3.1560×10^{-6}	Cm-244	6.9488×10^{-5}
U-238	1.5155×10^{-2}	Cm-245	1.9724×10^{-5}
Np-237	2.6699×10^{-5}	Cm-246	1.2198×10^{-5}
Pu-236	3.1027×10^{-10}	O-16	4.1265×10^{-2}
Pu-238	9.7979×10^{-5}	Mo-92	2.1940×10^{-4}
Pu-239	1.7950×10^{-3}	Mo-94	1.3817×10^{-4}
Pu-240	1.2352×10^{-3}	Mo-95	2.3918×10^{-4}
Pu-241	2.0069×10^{-4}	Mo-96	2.5172×10^{-4}
Pu-242	2.6801×10^{-4}	Mo-97	1.4496×10^{-4}
Am-241	8.9477×10^{-5}	Mo-98	3.6829×10^{-4}
Am-242	7.9066×10^{-6}	Mo-100	1.4828×10^{-4}
Am-243	8.8520×10^{-5}		

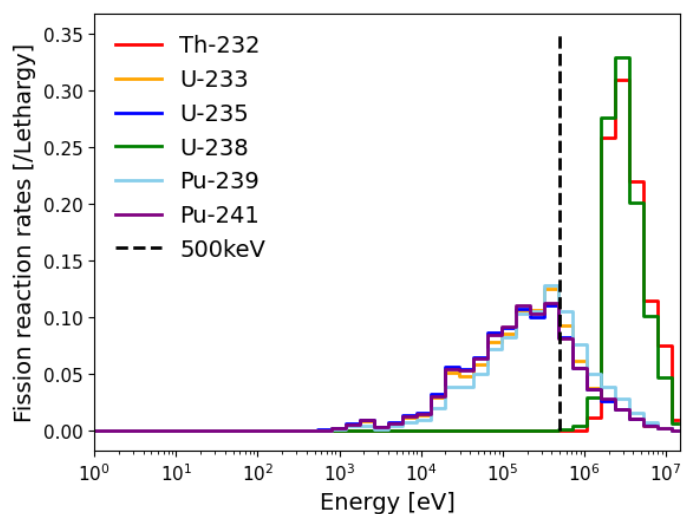
(atom/barn-cm)

(5) モンテカルロ計算で得られた核分裂率スペクトル

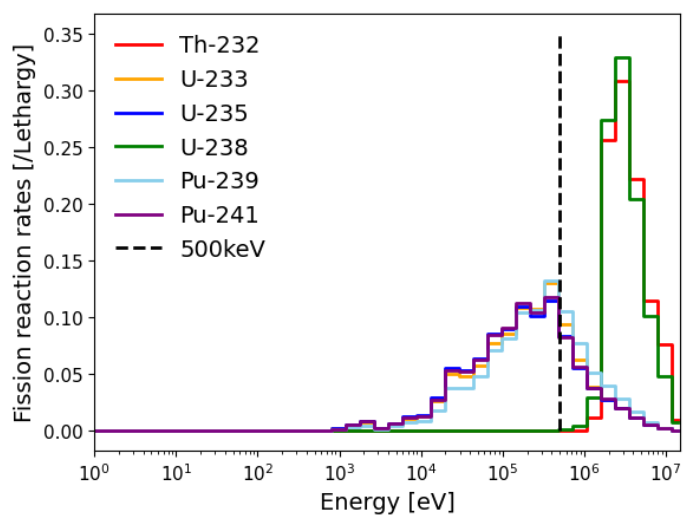
MVP によるモンテカルロ計算で得られたそれぞれの体系の核分裂率スペクトルをエネルギー積分値で除することで規格化し、図 3.4-3 に示す。



(a) ADS



(b) 金属燃料高速炉



(c) 酸化物燃料高速炉

図 3.4-3 モンテカルロ計算で得られた核分裂スペクトル

(6) ORIGIN ライブラリの作成

JENDL-5 および機械学習により得られる核分裂収率に基づいて ORIGIN ライブラリの作成を行った。JENDL-4.0 に基づく ORIGIN 用のライブラリとしては ORLIBJ40⁽⁷⁾ が存在するため、ORLIBJ40 を改修することでライブラリを作成した。ORLIBJ40 で収率が与えられている核分裂生成物と JENDL-5 で収率が与えられている核分裂生成物の比較を行った結果、JENDL-5 にのみ含まれていた核種は以下の表 3.4-5 に示す通りであった。

表 3.4-5 ORLIBJ40 に含まれず JENDL-5 にのみ含まれる核種

核種
He-3, Li-6, Li-8, Be-7, Be-8, Be-9, Cr-70, Fe-76, Co-68m1, Co-70m1, Ni-69m1, Ni-82, Cu-70m2, Cu-76m1, Zn-68, Zn-70, Zn-73m1, Zn-77m1, Ga-69, Ga-72m1, Ge-71m1, As-95, Rb-98m1, Sr-83m1, Y-88m1, Y-88m2, Y-97m2, Y-102m1, Nb-90m1, Nb-91m1, Tc-96, Tc-96m1, Ru-103m1, Ru-113m1, Ru-124, Rh-100, Rh-100m1, Rh-112m1, Rh-114m1, Rh-116m1, Rh-126, Rh-127, Rh-128, Pd-113m1, Pd-115m1, Pd-117m1, Pd-128, Ag-114m1, Ag-116m2, Ag-119m1, Ag-122m1, Cd-108, Cd-123m1, Cd-125m1, In-110, In-110m1, In-111m1, In-114m2, In-116m2, In-118m2, In-120m2, In-122m2, In-127m2, In-129m2, In-130m1, In-130m2, In-131m2, Sn-114, Sn-128m1, Sb-116, Sb-116m1, Sb-122m2, Sb-124m2, Sb-126m2, Te-119, Te-119m1, I-122, Xe-125m1, Xe-132m1, Cs-128, Cs-130m1, Ba-131m1, La-134, La-136m1, Ce-135m1, Ce-136, Ce-138m1, Ce-151m1, Pr-138, Pr-138m1, Nd-141m1, Pm-152m2, Sm-153m1, Eu-152m2, Gd-155m1, Tb-154, Tb-154m1, Tb-154m2, Tb-156m2, Tb-158m2, Dy-157m1, Ho-160m2, Ho-168m1, Er-168, Er-170, Er-171, Tm-166m1, Tm-169, Tm-170, Tm-171, Yb-168, Yb-169m1, Yb-170, Yb-171, Yb-171m1, Yb-172

また JENDL-5 では 31 核種の核分裂性核種に対して収率が与えられているが、ORIGIN に与えることができる核分裂性核種は 7 核種であることをふまえ、ORLIBJ40 と同様の 7 核種を用いた。それぞれの核分裂性核種と JENDL-5 および機械学習による核分裂収率予測で収率が与えられている中性子エネルギー点の有無を以下の表 3.4-6 に示す。

表 3.4-6 ORIGIN ライブラリ作成に用いた核分裂性核種と収率の中性子エネルギー点

核種	0.0253 eV	500 KeV	1 MeV	2 MeV	3 MeV	4 MeV	5 MeV	14 MeV
Th-232	—	○	○	○	○	○	○	○
U-233	○	○	○	○	○	○	○	○
U-235	○	○	○	○	○	○	○	○
U-238	—	○	○	○	○	○	○	○
Pu-239	○	○	○	○	○	○	○	○
Pu-241	○	○	○	○	○	○	○	—
Cm-245	○	—	—	—	—	—	—	—
Cf-249	○	—	—	—	—	—	—	—

ある核種について、収率が与えられている中性子エネルギー点の総数を n 、収率が与えられている中性子エネルギー点を昇順に e_1, e_2, \dots, e_n 、中性子エネルギー点 e_i に対応する収率を $y(e_i)$ と表記する。 $n = 1$ のとき、収率関数 y を

$$y(e) = y(e_1) \quad (3.4-1)$$

と定義する。 $n \geq 2$ のとき、収率関数 $y(e)$ を

$$y(e) = \begin{cases} y(e_1) \wedge (e \leq e_1) \\ y_{1 \rightarrow 2}(e) (e_1 < e \leq e_2) \\ \dots \\ y_{n-1 \rightarrow n}(e) \wedge (e_{n-1} < e \leq e_n) \\ y(e_n) \wedge (e_n < e) \end{cases} \quad (3.4-2)$$

と定義する。核分裂収率の内挿については、「ENDF-6 Formats Manual⁽⁸⁾」で推奨されている linear-linear な内挿方法を使用した。ここで、関数 $y_{i \rightarrow i+1}(e)$ は、収率 $y(e_i)$ と $y(e_{i+1})$ 間の linear-linear な内挿、すなわち

$$y_{i \rightarrow i+1}(e) = \frac{y(e_{i+1}) - y(e_i)}{e_{i+1} - e_i} (e - e_i) + y_i \quad (3.4-3)$$

である。エネルギー群 g のエネルギー境界を e_L^g, e_H^g (ただし、 $e_L^g < e_H^g$) と表記する。エネルギー群の集合を G と表記する。エネルギー群 $g \in G$ について、エネルギー境界の中点

$$e_g = \frac{e_L^g + e_H^g}{2} \quad (3.4-4)$$

を g の代表エネルギー、収率関数 y によって g の代表エネルギーに対応付けられる収率を

$$y_g = y(e_g) \quad (3.4-5)$$

と定義する。1 群収率は、あるエネルギー群の集合 G についてその要素 g の収率を用いて、

$$y_f = \frac{\sum_{g \in G} y_g r(e_g)}{\sum_{g \in G} r(e_g)} \quad (3.4-6)$$

として計算した。

表 3.4-6 に示した核分裂生成物の収率については、JENDL-5 に含まれる崩壊情報に基づき、半減期 1 時間以下の核分裂生成物については、表 3.4-7 で示す崩壊モードを考慮し娘核種の収率に加算した。

表 3.4-7 崩壊モードとそのモードで崩壊する核種

崩壊モード	核種
IT	Cu-70m2, Zn-77m, Ga-72m, Ge-71m, Sr-83m, Y-88m, Y-88m2, Y-97m2, Nb-90m, Tc-96m, Ru-103m, Ru-113m, Rh-100m, Pd-113m, Pd-115m, Pd-117m, Ag-114m, Ag-116m2, In-111m, In-114m2, In-116m2, In-118m2, Sn-128m, Sb-122m2, Sb-124m2, Sb-126m2, Xe-125m, Xe-132m, Cs-130m, Ba-131m, La-136m, Ce-135m, Ce-138m, Nd-141m, Sm-153m, Gd-155m, Tb-158m2, Dy-157m, Ho-160m2, Ho-168m, Tm-166m, Yb-169m, Yb-171m
E. C.	Tc-96m, Rh-100m, Sb-116, I-122, Cs-128, Cs-130m, La-134, Pr-138, Nd-141m
α	Be-8
β^-	Li-8, Cr-70, Fe-76, Co-68m, Co-70m, Ni-69m, Ni-82, Cu-70m2, Cu-76m, Zn-73m, Zn-77m, As-95, Rb-98m, Y-97m2, Y-102m, Ru-113m, Ru-124, Rh-112m, Rh-114m, Rh-116m, Rh-126, Rh-127, Rh-128, Pd-115m, Pd-128, Ag-116m2, Ag-119m, Ag-122m, Cd-123m, Cd-125m, In-118m2, In-120m2, In-122m2, In-127m2, In-129m2, In-130m, In-130m2, In-131m2, Ce-151m, Pm-152m2
β^-, n	Cr-70, Fe-76, Co-68m, Co-70m, Ni-82, As-95, Rb-98m, Y-102m, Rh-116m, Rh-128, Ag-122m, In-130m, In-130m2
β^-, n, n	Cr-70, Fe-76, Ni-82, As-95, Rb-98m, Rh-128
β^-, n, n, n	Cr-70, Fe-76, Ni-82, As-95, Rh-128

1 群断面積は MVP によって作成した。ORIGEN ライブラリで断面積が与えられている反応と、MVP によって出力可能な反応を以下の表 3.4-8 に示す。これらの MVP で出力できない反応の断面積と MVPlibV3_nJ50 に含まれない核種の断面積については、ORLIBJ40 の値を変更せずに使用している。また核異性体比の値についても ORLIBJ40 の高速炉用ライブラリの作成で使用されている値を変更せずに使用している。

表 3.4-8 ORIGEN ライブラリで与える断面積と MVP の出力との関係

ORIGEN ライブラリで断面積が与えられている反応	MVP で出力可能な反応	MVP で出力不可な反応
(n, \square), (n, f), (n, 2n), (n, $\square\square$), (n, f), (n, 2n), (n, 3n), (n, p), (n, \square)		
(n, 3n), (n, p), (n, \square)		

(7) ORIGIN の計算条件

ADS, 金属燃料高速炉, 酸化物燃料高速炉を対象に ORIGIN を用いた試計算を行い、従来ライブラリとの比較により核分裂率スペクトルに基づいた収率の影響評価を行った。従来のライブラリは、代表点における収率を使用した ORLIBJ40 のライブラリを指している。ここでは、生成量が大きい核種の生成量、さらに崩壊熱, 放射線量, 燃焼度の指標となる核種 (^{148}Nd , ^{137}Cs , ^{134}Cs) の生成量について、従来ライブラリと核分裂率スペクトルに基づいた収率を用いて作成したライブラリの結果を比較した。

ADS については、600 日間 193.7MW 出力で運転し、その後はゼロ出力として計算を行った。また、金属燃料高速炉については 328.5 日間 239 MW 出力、酸化物燃料高速炉については 328.5 日間 206 MW 出力で運転し、その後はゼロ出力とした。また、従来ライブラリとして用いたライブラリを表 3.4-9 に示す。

表 3.4-9 従来ライブラリとして用いた ORLIBJ40 のライブラリ名

ADS	金属燃料高速炉	酸化物燃料高速炉
600MMTICJ40	600MMTICJ40	600MMXICJ40

(8) ORIGIN の計算で得られた無限増倍率

収率の変更が増倍率に与える影響を確認するために、燃焼直後の無限増倍率を比較した。ADS における無限増倍率は、従来ライブラリにおいて 1.42893、東京科学大学の収率において 1.42888、電気通信大学の収率において 1.42904 であり、相対差はそれぞれ-0.0035%、0.0077%である。金属燃料高速炉における無限増倍率は、従来ライブラリにおいて 1.45529、東京科学大学の収率において 1.45513、電気通信大学の収率において 1.45580 であり、相対差はそれぞれ-0.011%、0.035%である。酸化物燃料高速炉における無限増倍率は、従来ライブラリにおいて 1.50776、東京科学大学の収率において 1.50762、電気通信大学の収率において 1.50820 であり、相対差はそれぞれ-0.0093%、0.029%である。

(9) ORIGIN の計算で得られた実効遅発中性子割合の比較

燃焼末期における 6 群構造の各群および 1 群の実効遅発中性子割合について、核分裂率スペクトルに基づいた収率を用いて作成したライブラリとの相対差を図 3.4-4～ 図 3.4-6 に示す。ここでは、keepin の 6 群構造⁽¹⁰⁾を引用した。各群に割り当てられた FP の生成量に遅発中性子を放出する割合を掛け、それぞれの群および 1 群の生成量の和を比較することで、近似的に実効遅発中性子割合への影響を求めた。

6 群それぞれにおいて、東京科学大学の収率については第 5 群が最も相対差が大きく、最大-9.5%である。同様に、電気通信大学の収率については第 1 群が最も相対差が大きく、最大 18.3%である。しかし、1 群の実効遅発中性子割合の相対差は東京科学大学と電気通信大学どちらにおいても±2.6%以内である。この結果より、新たな核分裂収率を反映した結果として、1 群の実効

遅発中性子割合については影響が限定的であるが、6 群構造の各群の実効遅発中性子割合については一部の結果で5%を超える影響が確認された。

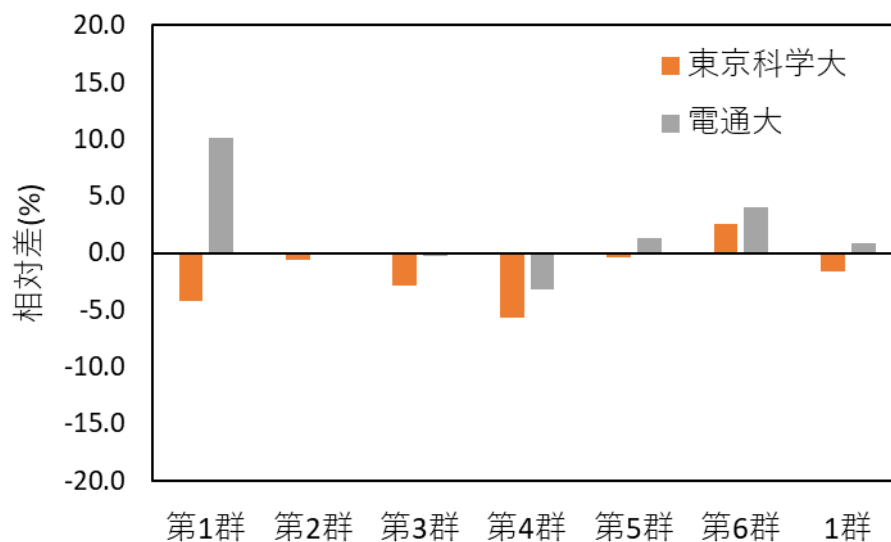


図 3. 4-4 燃焼末期の ADS における実効遅発中性子割合の相対差

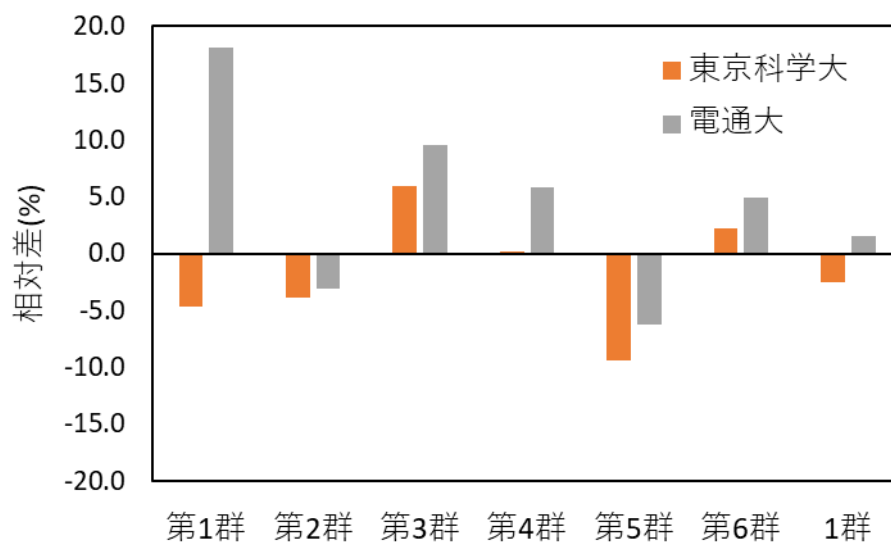


図 3. 4-5 燃焼末期の金属燃料高速炉における実効遅発中性子割合の相対差

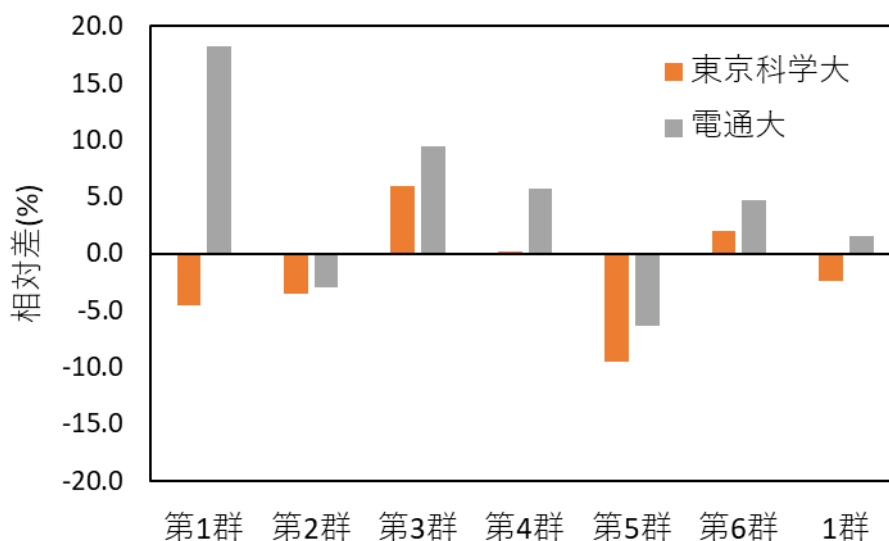


図 3. 4-6 燃焼末期の酸化物燃料高速炉における実効遅発中性子割合の相対差

(10) モンテカルロ計算で得られた増倍率

ADS における増倍率の計算結果を図 3. 4-7 に、金属燃料高速炉における増倍率の計算結果を図 3. 4-8 に、酸化物燃料高速炉における増倍率の計算結果を図 3. 4-9 に示す。統計誤差は全て 0. 02% 以下である。

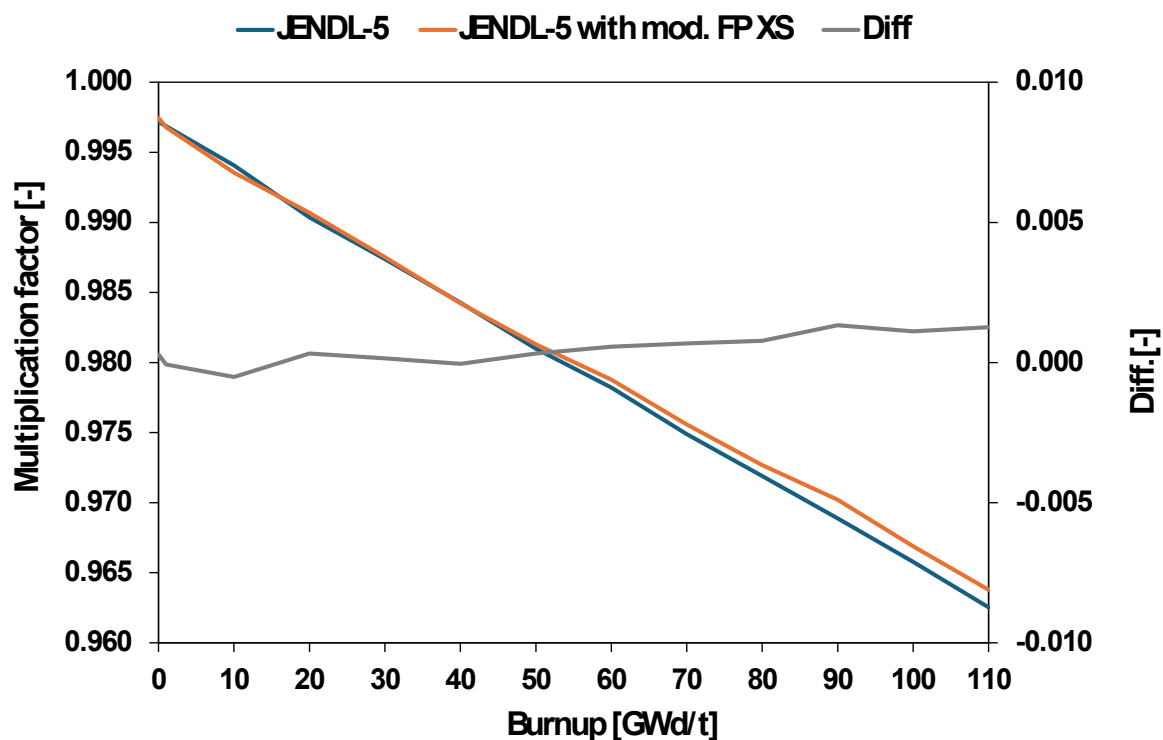


図 3. 4-7 ADS における増倍率の計算結果

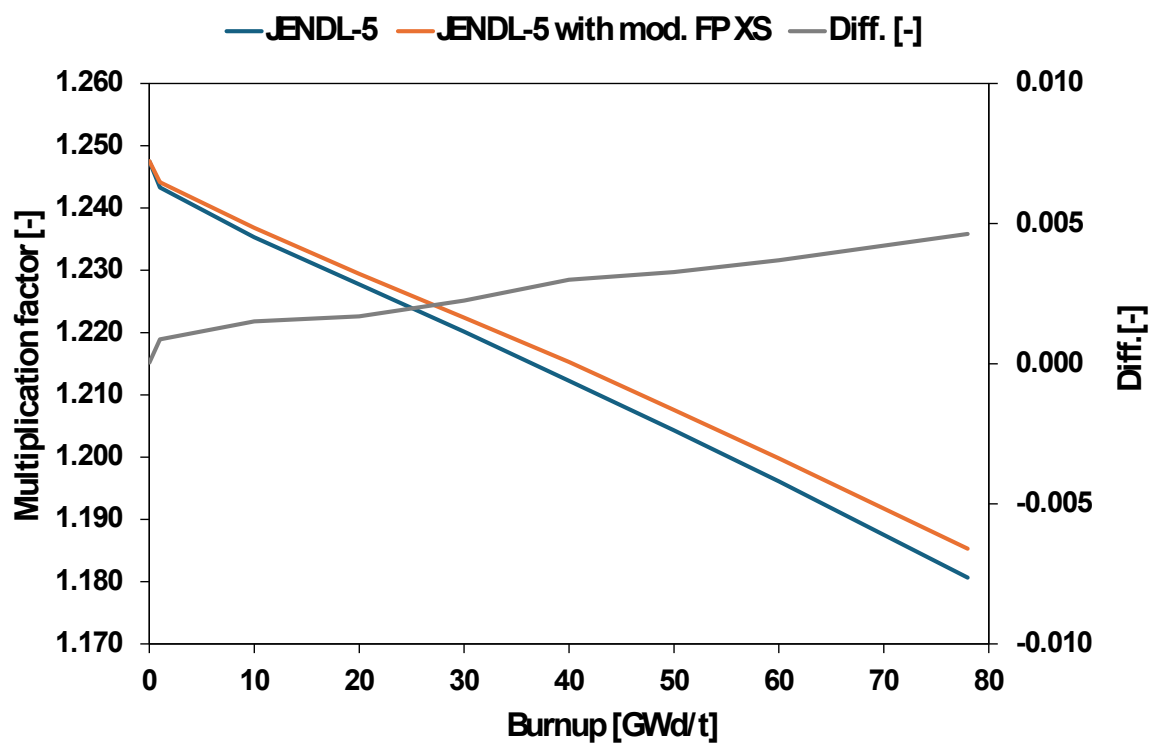


図 3.4-8 金属燃料高速炉における増倍率の計算結果

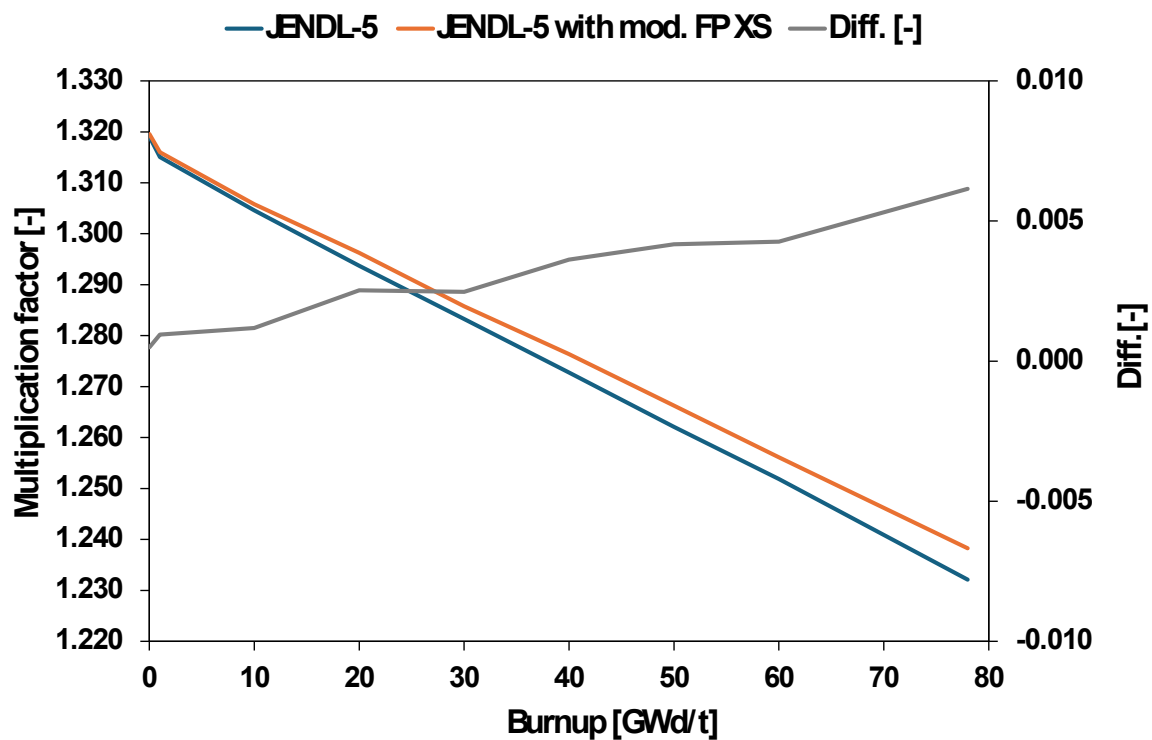


図 3.4-9 酸化物燃料高速炉における増倍率の計算結果

図 3.4-7、図 3.4-8、図 3.4-9 からどの体系においても燃焼度が増えるにつれ増倍率の差異が大きくなる傾向が見られる。そこで、断面積の更新があった FP 核種における燃焼末期の反応率から考察を行った。図 3.4-10 に燃焼末期における ADS、金属燃料高速炉、酸化物燃料高速炉の中性子捕獲反応率の差異を示す。

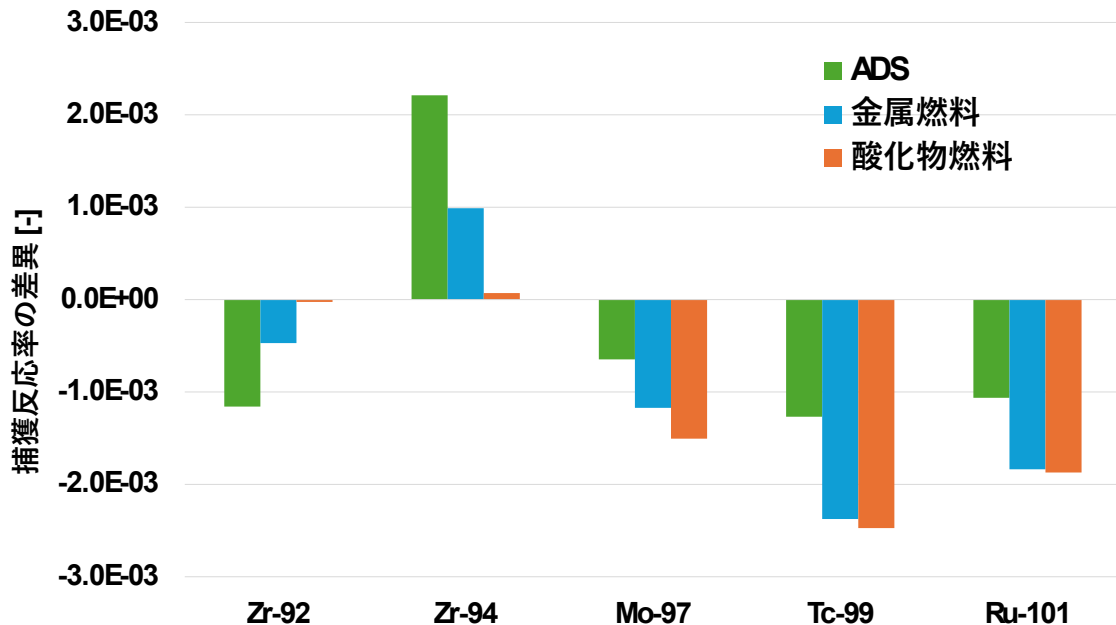
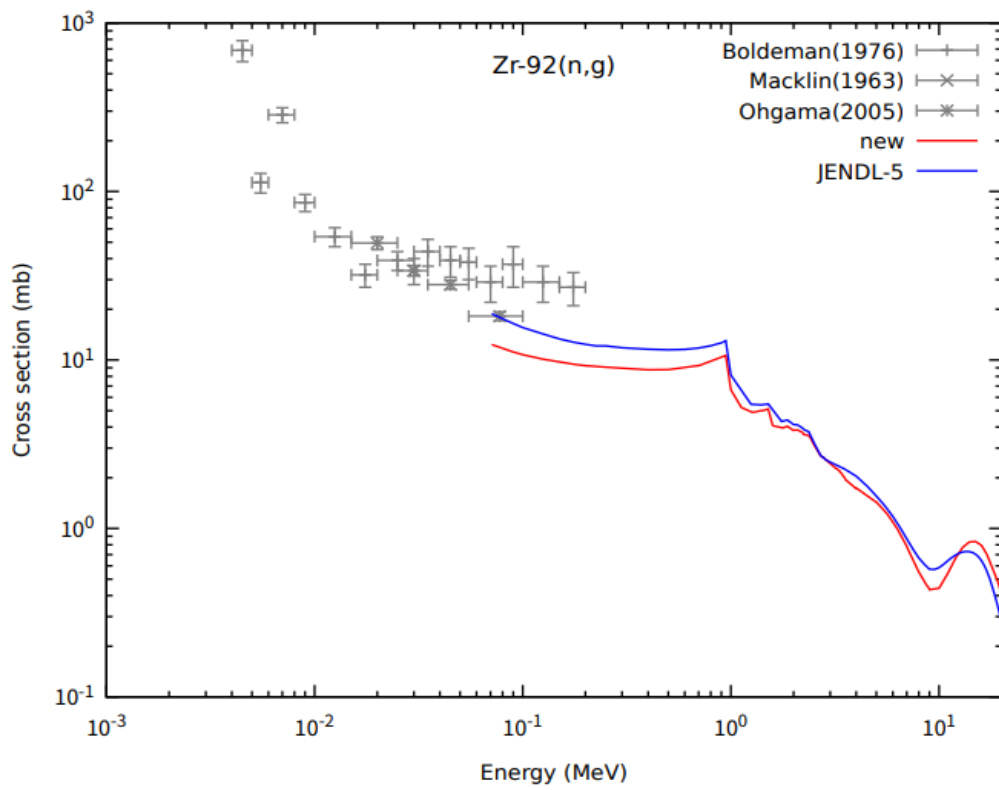
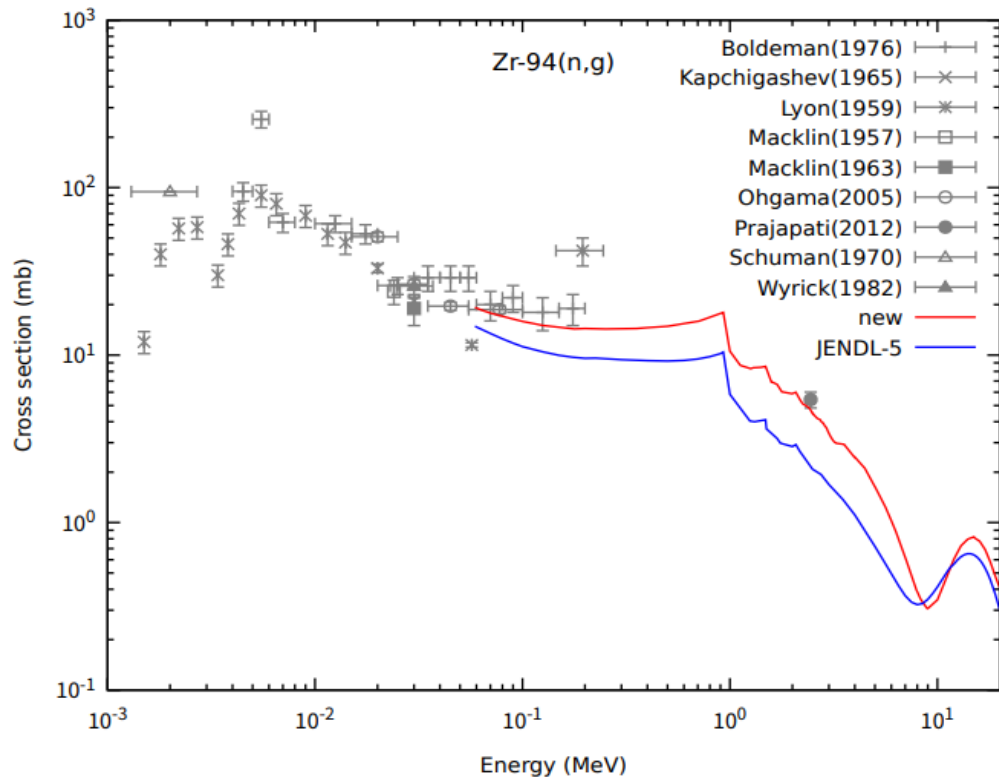


図 3.4-10 燃焼末期における ADS、金属燃料高速炉、酸化物燃料高速炉の中性子捕獲反応率の差異

図 3.4-10 より、燃焼末期において、どの体系においても断面積更新により ^{97}Mo 、 ^{99}Tc 、 ^{101}Ru で中性子捕獲が小さくなる傾向が確認できた。ADS はイナートマトリックス窒化物燃料として $\text{ZrN}^{(5)}$ が、金属燃料高速炉は U-PU-Zr 合金燃料が使用されている⁽⁶⁾ため燃料に Zr が含まれているが、酸化物燃料には燃料に Zr が入っていないため ^{92}Zr 、 ^{94}Zr の中性子捕獲反応率の差異が小さい。また、 ^{99}Tc と ^{101}Ru は燃焼により蓄積される核種であるため、断面積更新により、燃焼に伴って増倍率は高くなる傾向となる。これらの反応率差異が生じる理由は、図 3.4-11 に示すとおり、断面積の更新によって ^{92}Zr 、 ^{97}Mo 、 ^{99}Tc 、 ^{101}Ru では高速域のエネルギーで断面積が小さく、逆に ^{94}Zr では断面積が大きくなるためと考えられる。

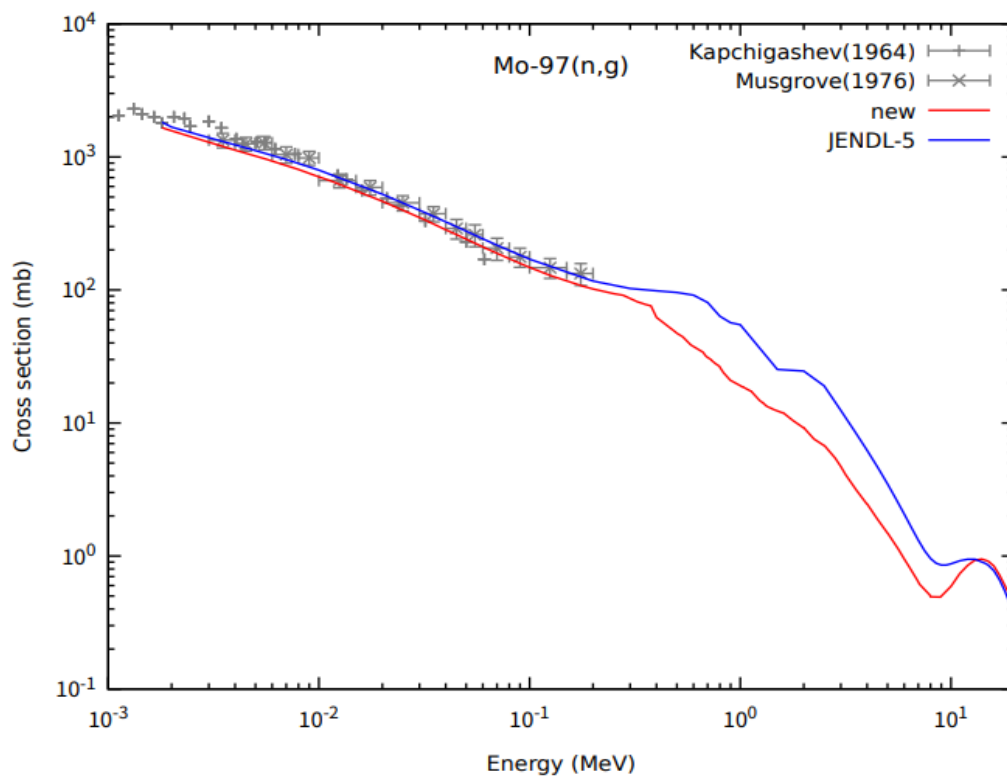


(a) ^{92}Zr

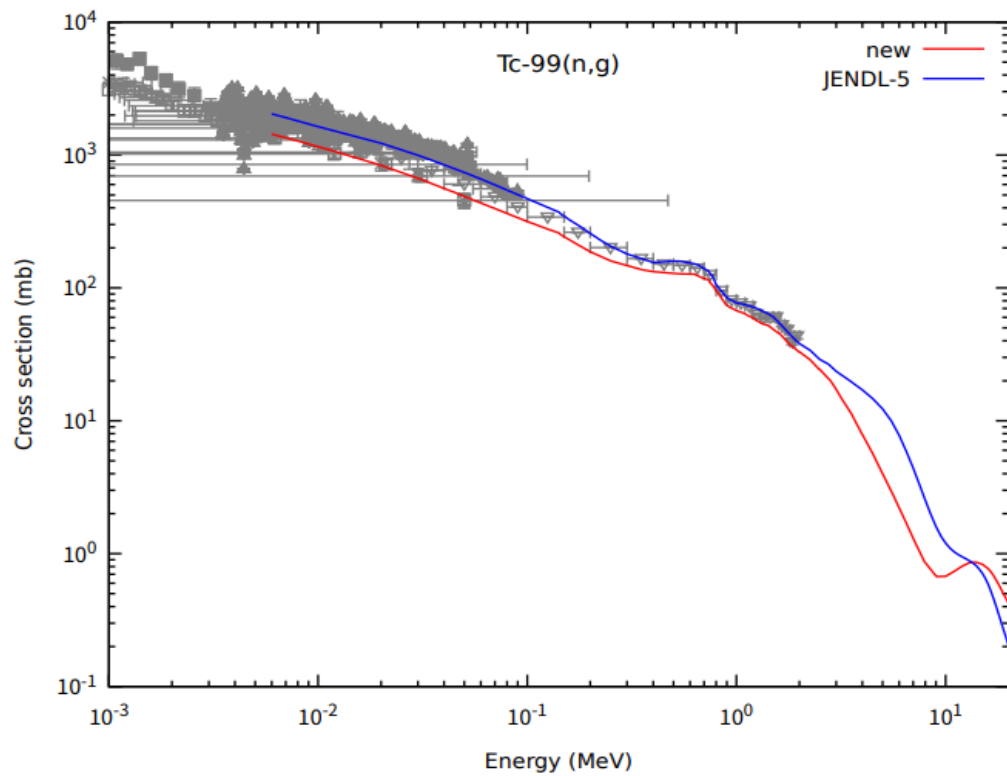


(b) ^{94}Zr

図 3.4-11 中性子捕獲断面積の比較(1/3)

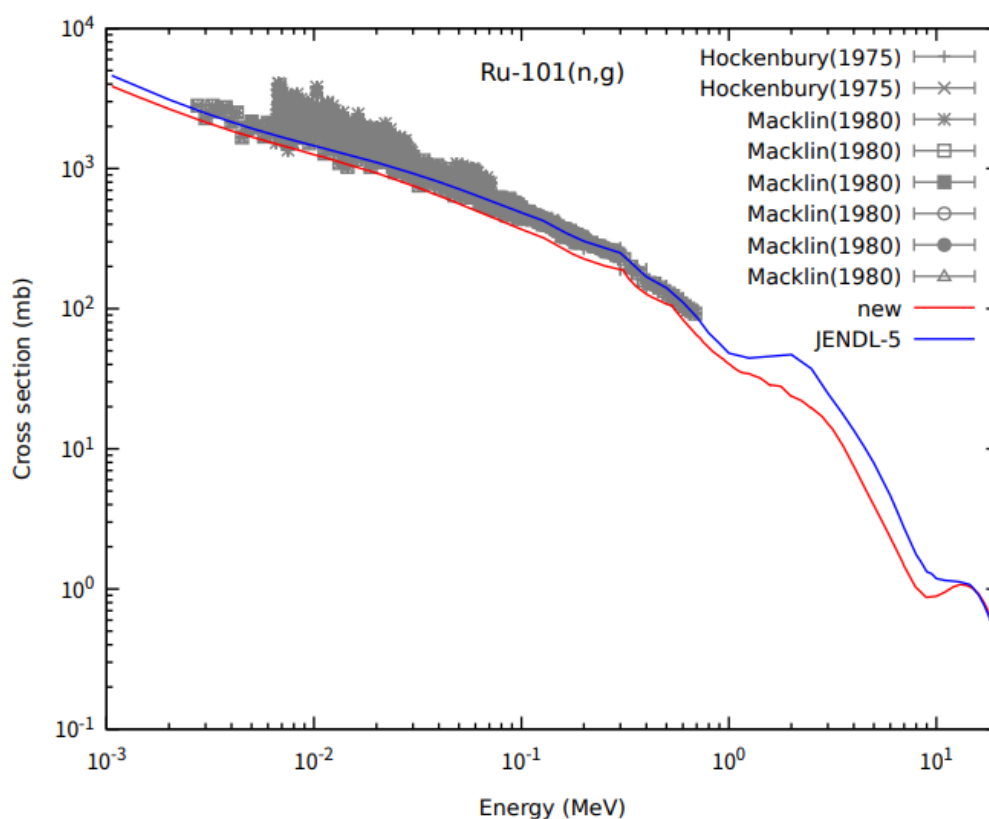


(c) ^{97}Mo



(d) ^{99}Tc

図 3.4-11 中性子捕獲断面積の比較(2/3)



(e) ^{101}Ru

図 3.4-11 中性子捕獲断面積の比較(3/3)

3.4.2 種々の燃料サイクルを想定したバックエンドへの影響評価【R4-R6】

令和4年度では、ADS、金属燃料高速炉、酸化物燃料高速炉について MVP⁽¹⁾ を用いたモンテカルロ法に基づく試計算を実施し、核分裂率スペクトルを得た。その後、得られた核分裂率スペクトルと各中性子エネルギーでの核分裂収率に基づいた ORIGIN⁽²⁾ ライブラリを作成し、ORIGIN の試計算を行った。

令和5年度では、令和4年度で作成した ORIGIN ライブラリを用いて、種々の燃料サイクルを想定し、使用済燃料における主要な核分裂生成物の生成量と使用済燃料の崩壊熱と放射線量について、従来法で得られる結果と、3.1 機械学習による核分裂収率予測と評価、3.2 核分裂収率評価のためのベイジアンニューラルネットワーク法の高度化（再委託先：電気通信大学）、3.3 機械学習による中性子断面積評価（再委託先：原子力機構）の成果を反映したライブラリで得られる結果の比較を行った。

令和6年度は、ORIGIN による従来法で得られる結果と 3.1 機械学習による核分裂収率予測と評価、3.2 核分裂収率評価のためのベイジアンニューラルネットワーク法の高度化（再委託先：電気通信大学）、3.3 機械学習による中性子断面積評価（再委託先：原子力機構）について、成果を反映したライブラリをそれぞれ用意し、使用済燃料における主要な核分裂生成物の生成量、崩壊熱、放射線量の推移について、影響をそれぞれ評価した。ORIGIN ライブラリ作成方法および計算条件

3.4.1と同様である。

(1) 燃焼度の指標となる核種の生成量の比較

燃焼直後の燃焼度の指標となる核種 (^{148}Nd , ^{137}Cs , ^{134}Cs) の生成量の、核分裂率スペクトルに基づいた収率を用いて作成したライブラリとの相対差を図 3.4-12 ～ 図 3.4-14 に示す。全ての体系において、東京科学大学の収率については、 ^{148}Nd の相対差は-1.9%以内、 ^{137}Cs は-0.3%以内、 ^{134}Cs は-0.9%以内である。また、同様に電気通信大学の収率については、 ^{148}Nd の相対差は 2.9%以内、 ^{137}Cs は-1.8%以内、 ^{134}Cs は-7.9%以内である。この結果より、燃焼度の指標となる核種の生成量において、新たな核分裂収率を反映した影響は東京科学大学の収率については限定的といえるが、電気通信大学の収率については特に ^{134}Cs で5%を超える影響があることを確認した。さらに、 ^{133}Cs の捕獲断面積の更新により ^{133}Cs の捕獲率が低下し、結果として ^{134}Cs の生成量が約 15%低下することを確認した。

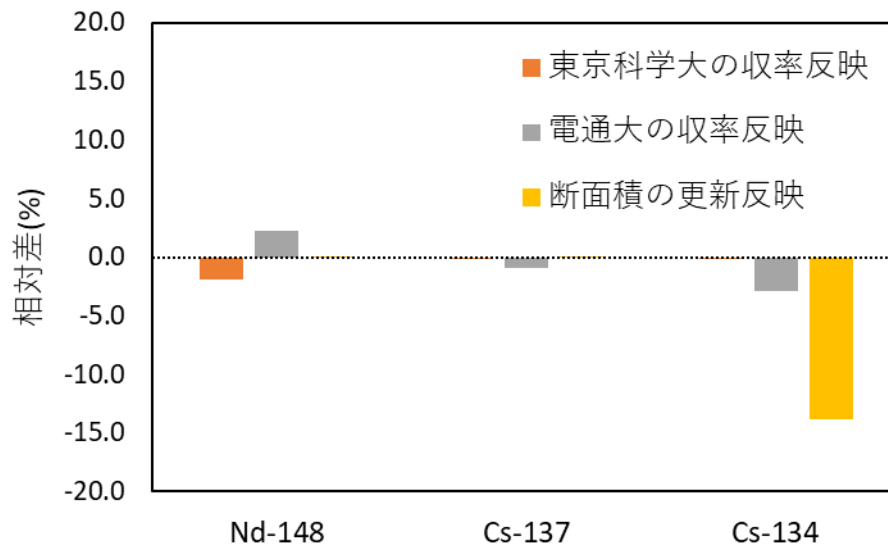


図 3.4-12 照射後の ADS における燃焼度の指標となる核種の生成量の相対差

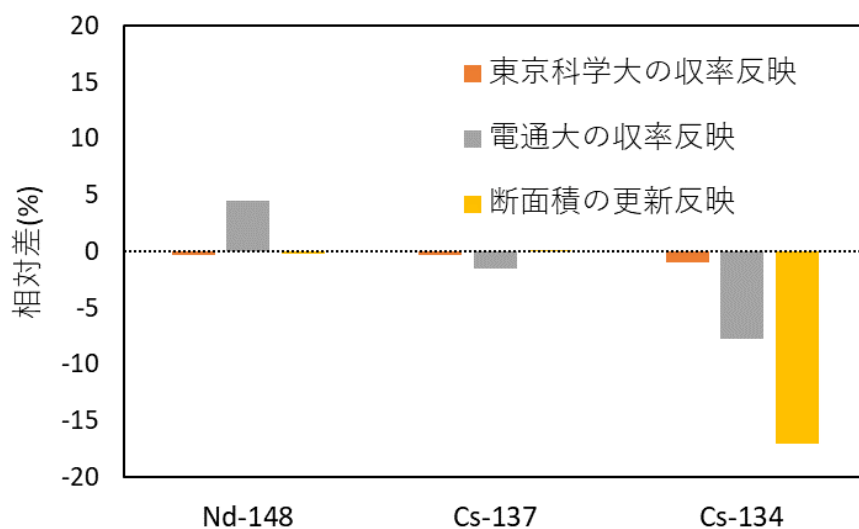


図 3.4-13 照射後の金属燃料高速炉における燃焼度の指標となる核種の生成量の相対差

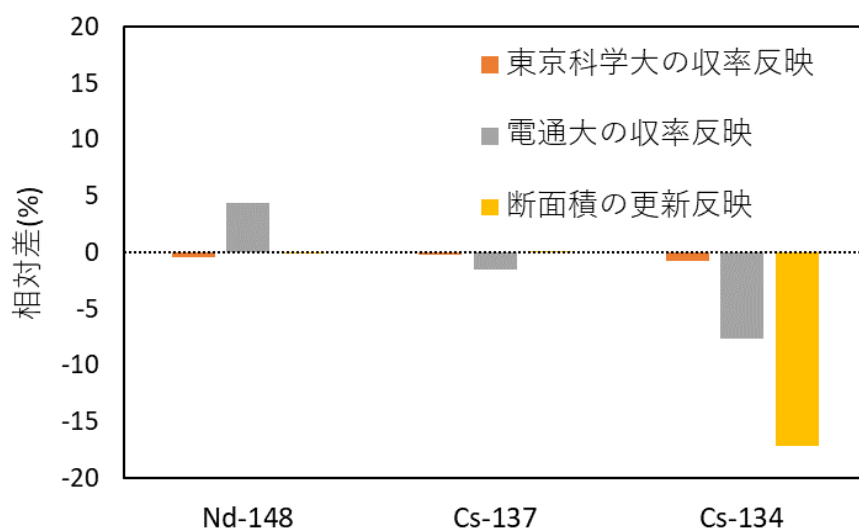


図 3.4-14 照射後の酸化物燃料高速炉における燃焼度の指標となる核種の生成量の相対差

(2) 崩壊熱の比較

燃焼後 3 万年までの FP の崩壊熱の、核分裂率スペクトルに基づいた収率を用いて作成したライブラリとの相対差を図 3.4-15 ～ 図 3.4-17 に示す。照射後の崩壊熱を見ると、いずれの炉型でも東京科学大学と電気通信大学の収率の差は対数表示ではほぼ重なっている程小さい。東京科学大学の収率については、酸化物燃料高速炉および金属燃料高速炉においての相対差は±2.1%以内である。また、ADS において燃焼後 500 年後までは-1.6%以内であるが、1000 年後以降は-5.7%程度である。電気通信大学の収率については、酸化物燃料高速炉および金属燃料高速炉において燃焼後 500 年後までは±3.5%以内であるが、1000 年後以降は 17.1%程度である。また、ADS において燃焼後 500 年後までは±2.5%以

内であるが、1000 年後以降は 5.3% 程度である。100 年後以降の FP の崩壊熱放射線量は小さいことを考慮すると、FP の崩壊熱において、新たな核分裂収率を反映した影響は東京科学大学の収率と電気通信大学の収率についてどちらについても限定的であるといえる。中性子断面積を更新した影響については、100 年後までは 1% 以下、全期間では 5% 以下であり、限定的である。

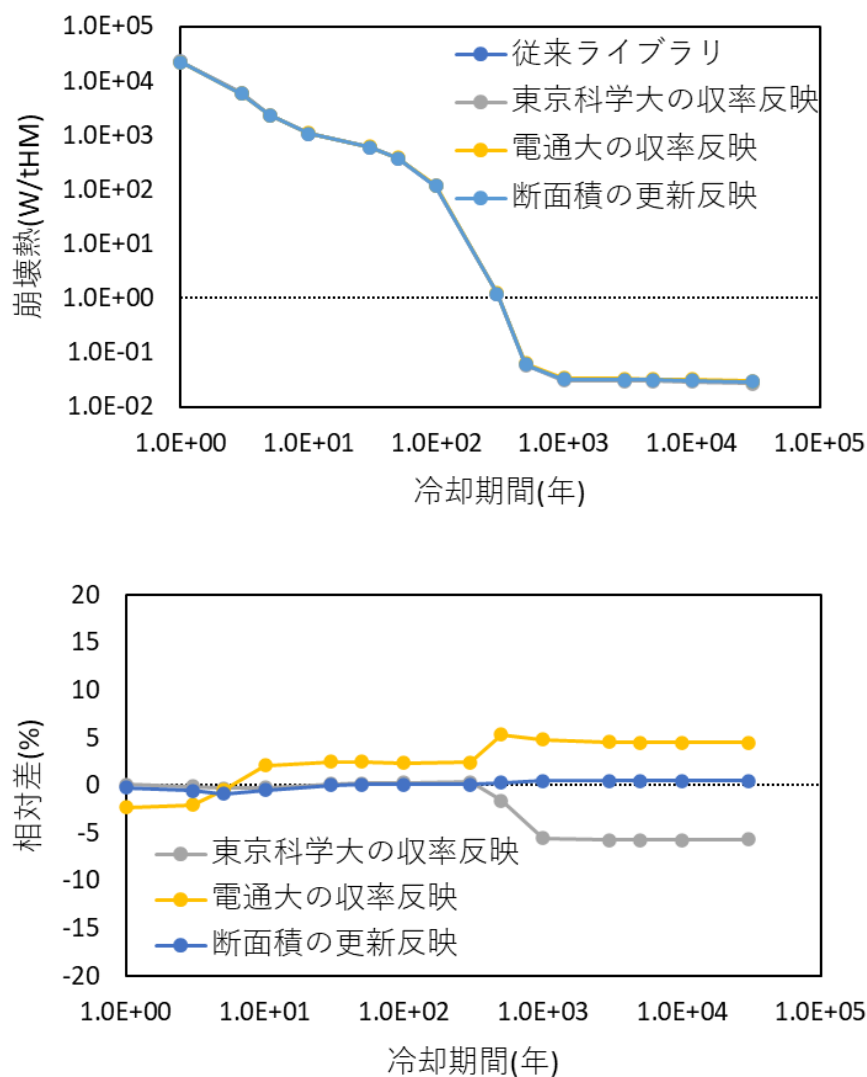


図 3.4-15 照射後の ADS における崩壊熱の比較

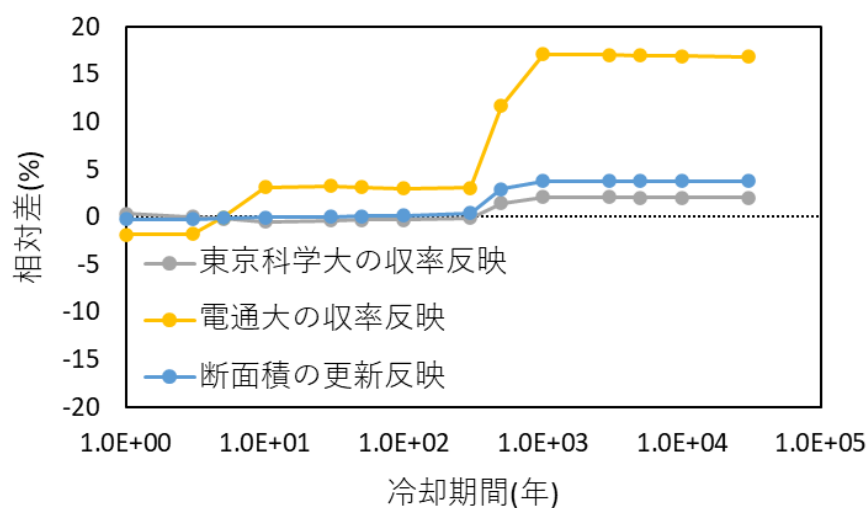
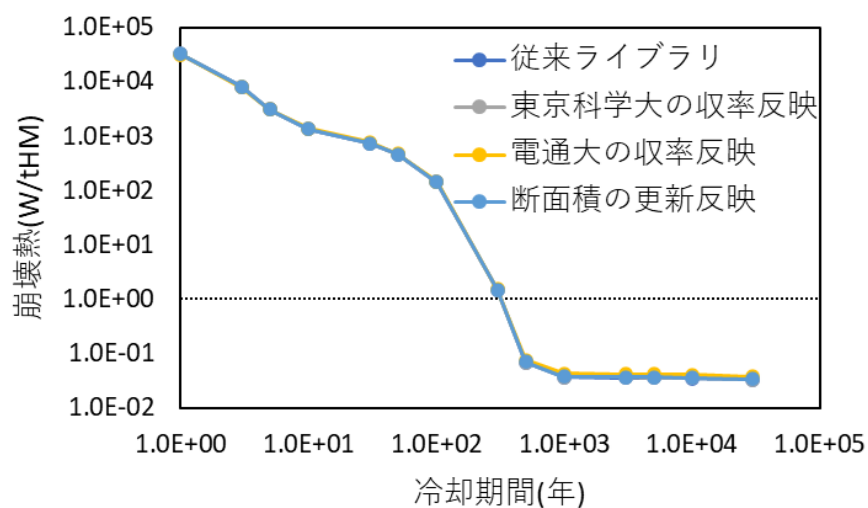


図 3.4-16 照射後の金属燃料高速炉における崩壊熱の比較

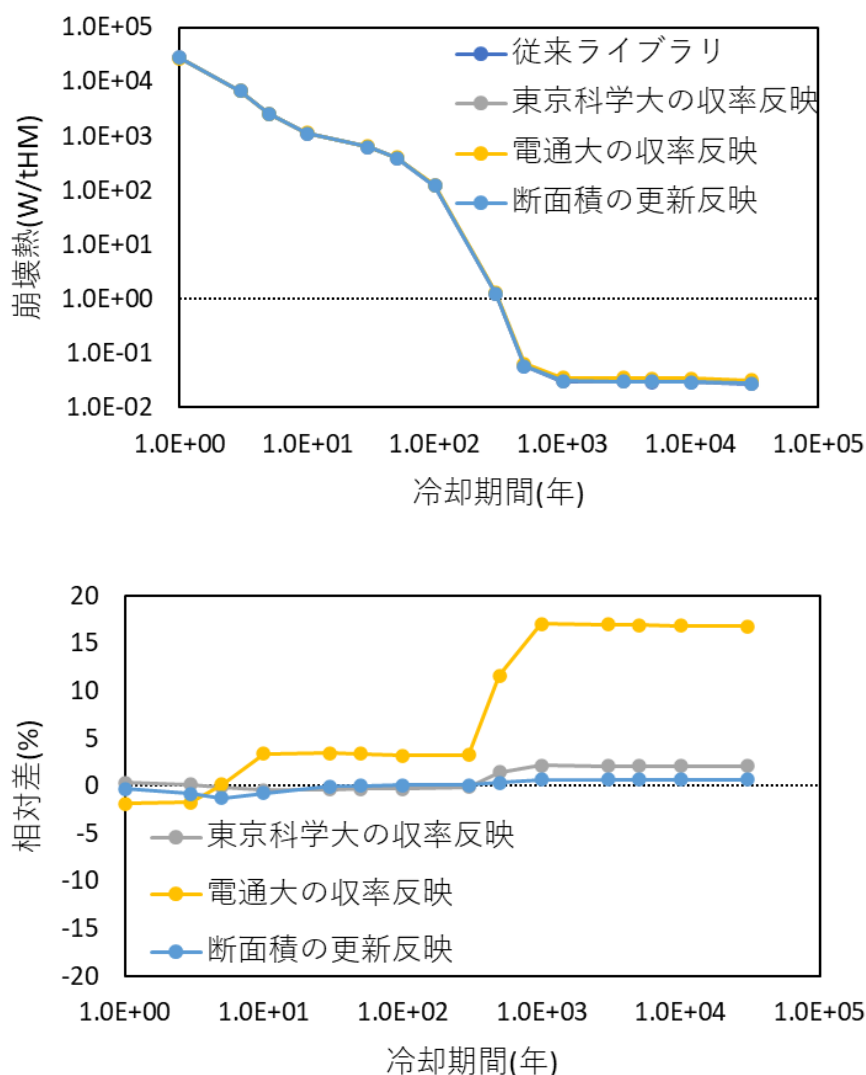


図 3.4-17 照射後の酸化物燃料高速炉における崩壊熱の比較

(3) 放射線量の比較

燃焼後 3 万年までの放射線量の、核分裂率スペクトルに基づいた収率を用いて作成したライブラリとの相対差を図 3.4-18 ～ 図 3.4-20 に示す。ここで、放射線量は原子力機構の潜在的放射性毒性評価のためのデータベース⁽¹¹⁾を参考に算出した。親核種 1 と子孫核種 2 の潜在的放射性毒性の合計値 (Sv) は

$$T_{1+2}(t) = \lambda_1 n_1(t) (C_1 + C_2 \frac{f_{1 \rightarrow 2} \lambda_2}{\lambda_2 - \lambda_1} (1 - e^{-(\lambda_2 - \lambda_1)t})) \quad (3.4-7)$$

で求められる。 λ_i は核種 i の崩壊定数、 $n_i(t)$ は核種 i の原子数、 C_i は核種 i の線量換算係数 (Sv/Bq)、 $f_{1 \rightarrow 2}$ は核種 1 から核種 2 への崩壊割合である。また、子孫核種が短寿命であり $\lambda_2 \gg \lambda_1$ が成立する場合、潜在的放射性毒性の合計値 (Sv) は

$$T_{1+2}(t) = C_{1+2} \lambda_1 n_1^0 e^{-\lambda_1 t} \quad (3.4-8)$$

で求められる。 n_1^0 は時点 $t=0$ における核種 1 の原子数である。

東京科学大学の収率については、酸化物燃料高速炉および金属燃料高速炉における相対差は $\pm 1.1\%$ 以内である。また、ADS において燃焼後 500 年後までは $\pm 0.4\%$ 以内であるが、1000 年後以降は -2.3% 程度である。電気通信大学の収率については、酸化物燃料高速炉および金属燃料高速炉における相対差は最大 9.1% 程度であり ADS における相対差は最大 3.9% 程度である。これらの結果より、電気通信大学の収率を用いた場合は、放射線量に対して比較的大きな影響があることを確認した。中性子断面積を更新した影響については、全期間で 1% 以下であり、限定的である。

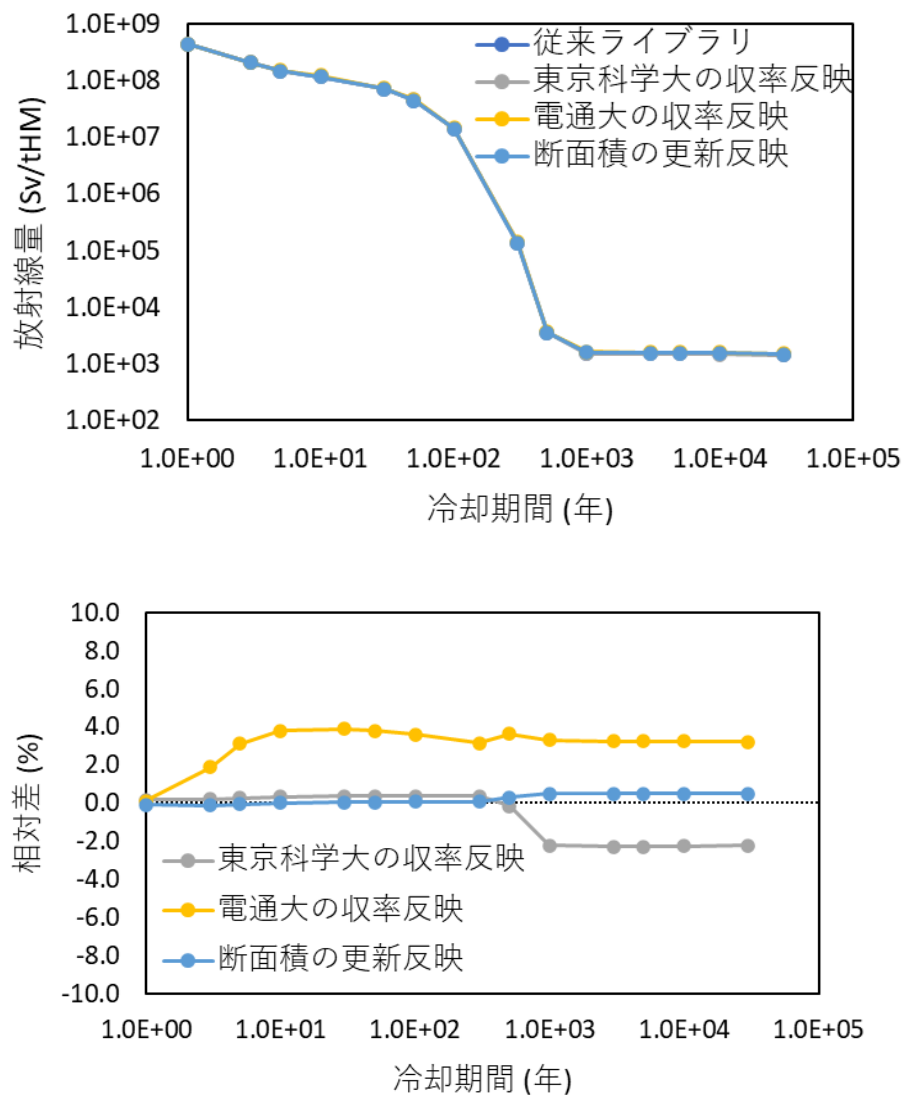


図 3.4-18 照射後の ADS における放射線量の比較

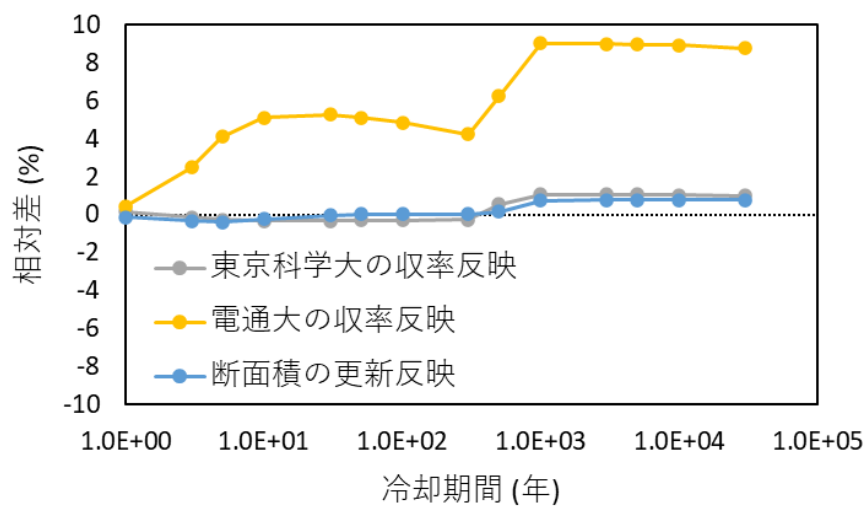
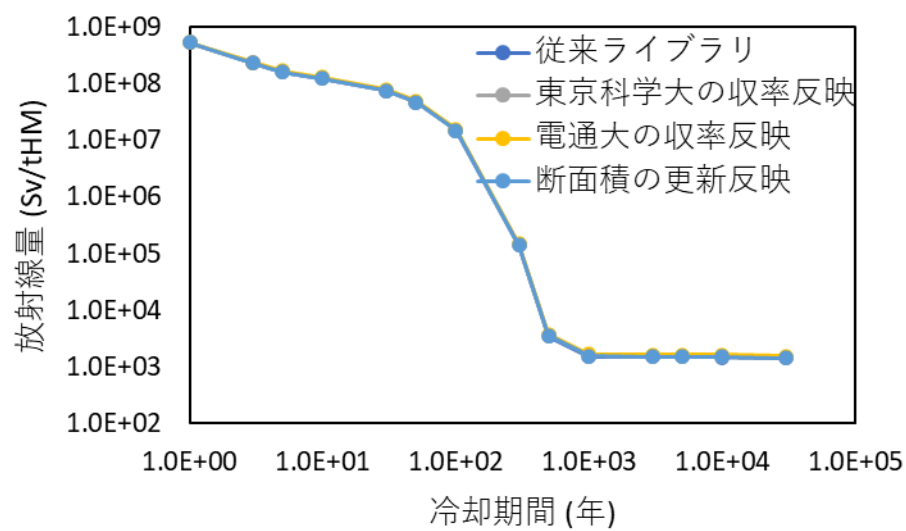


図 3.4-19 照射後の金属燃料高速炉における放射線量の比較

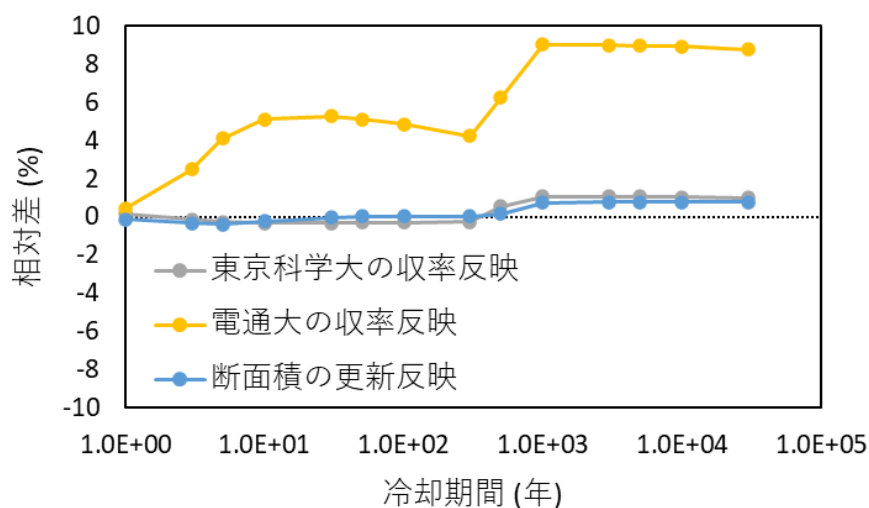
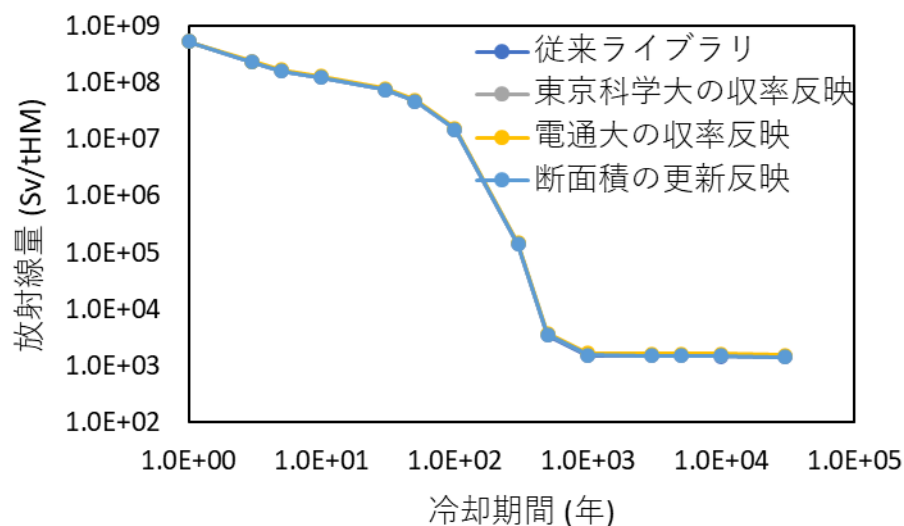


図 3.4-20 照射後の酸化燃料高速炉における放射線量の比較

電気通信大学の収率を用いた場合に放射線量の相対差が比較的大きくなった理由について考察する。それぞれの体系について、各核種の潜在的放射性毒性の推移を図 3.4-21 ～ 図 3.4-23 に示す。これらの潜在的放射性毒性は従来ライブラリを用いて計算した。電気通信大学の収率を用いることによる各核種の潜在的放射性毒性への影響を表 3.4-10 ～ 表 3.4-12 に示す。表 3.4-10 ～ 表 3.4-12 より、照射後 10 年程度において放射線量が大きくなる理由は主に ^{90}Sr の生成量が大きくなることに由来することが確認できる。また、照射後 10 年程度において放射線量が大きくなる理由は主に ^{126}Sn の生成量が大きくなることに由来することが確認できる。

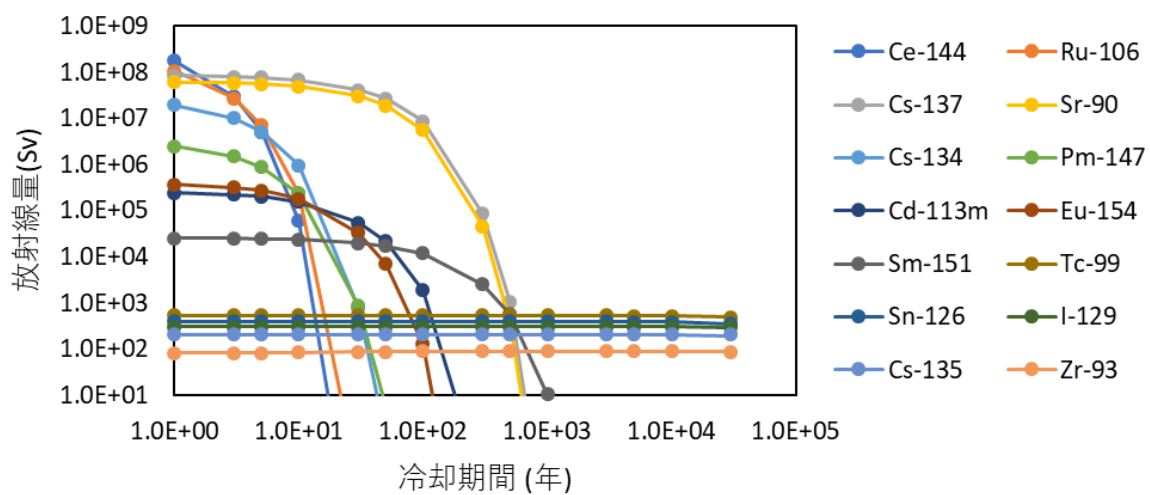


図 3.4-21 ADS における各核種の潜在的放射性毒性

表 3.4-10 照射後の ADS における各核種の放射線量の相対差

核種	相対差 [%]
^{144}Ce	0.3
^{106}Ru	-5.0
^{137}Cs	-0.9
^{90}Sr	10.6
^{134}Cs	-2.9
^{147}Pm	3.4
$^{113\text{m}}\text{Cd}$	3.0
^{154}Eu	-8.0
^{151}Sm	8.3
^{99}Tc	1.4
^{126}Sn	6.8
^{129}I	5.6
^{135}Cs	-2.0
^{93}Zr	1.6

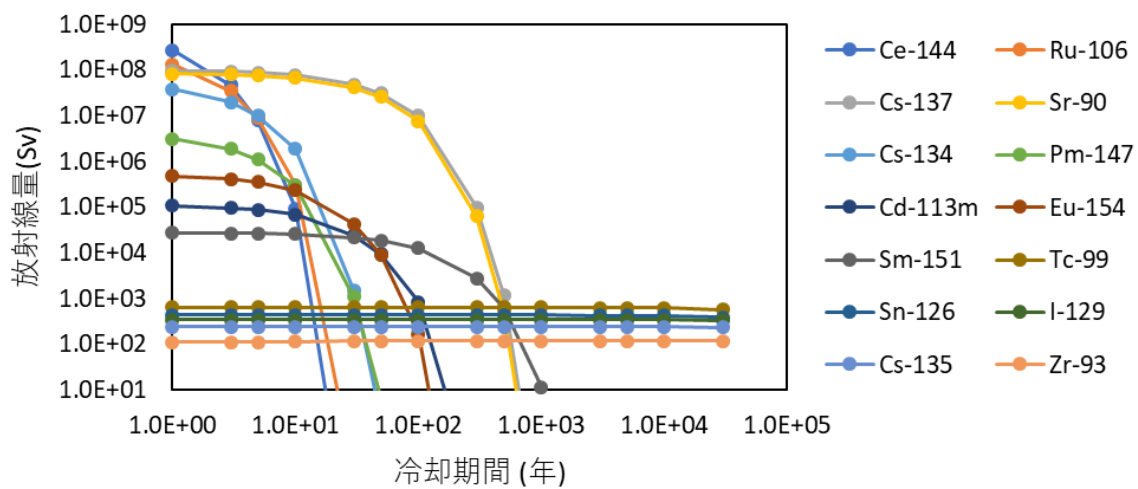


図 3.4-22 金属燃料高速炉における各核種の潜在的放射性毒性

表 3.4-11 照射後の金属燃料高速炉における各核種の放射線量の相対差

核種	相対差 [%]
^{144}Ce	0.7
^{106}Ru	-5.2
^{137}Cs	-1.8
^{90}Sr	13.0
^{134}Cs	-7.9
^{147}Pm	5.1
$^{113\text{m}}\text{Cd}$	19.9
^{154}Eu	0.4
^{151}Sm	7.7
^{99}Tc	0.8
^{126}Sn	29.9
^{129}I	10.3
^{135}Cs	-5.0
^{93}Zr	-0.5

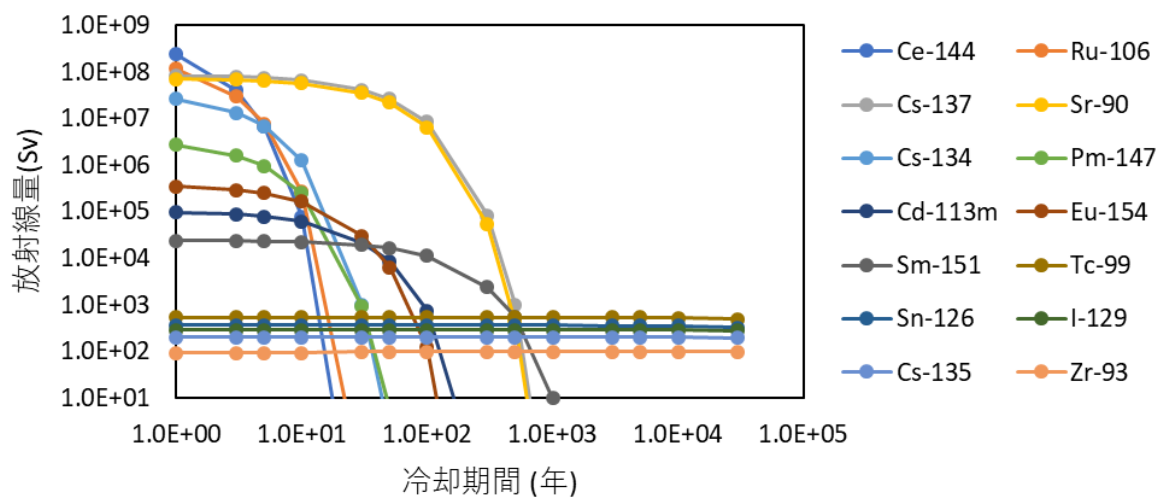


図 3.4-23 酸化物燃料高速炉における各核種の潜在的放射性毒性

表 3.4-12 照射後の酸化物燃料高速炉における各核種の放射線量の相対差

核種	相対差 [%]
^{144}Ce	0.6
^{106}Ru	-5.2
^{137}Cs	-1.6
^{90}Sr	13.3
^{134}Cs	-7.7
^{147}Pm	5.0
$^{113\text{m}}\text{Cd}$	18.7
^{154}Eu	0.1
^{151}Sm	7.6
^{99}Tc	0.8
^{126}Sn	29.8
^{129}I	10.0
^{135}Cs	-4.8
^{93}Zr	-0.4

3.4.3 まとめ 【R6】

本研究では、ADS、金属燃料高速炉、酸化物燃料高速炉を対象に、機械学習およびベイズ統計手法で改訂した核分裂収率（3.1、3.2）と中性子断面積（3.3）を個別に取り込んだライブラリを用いて、炉心特性とバックエンド指標への影響を評価した。炉心特性については、1群の実効遅発中性子割合が東京科学大学および電気通信大学の収率を用いても $\pm 2.6\%$ 以内に収まった一方、Keepinの6群構造では電気通信大学の収率を用いた場合に第1群で最大約18%の差異が現れるなど、群によって5%を超える変動が確認され、動特性への影響が無視できない可能性が示唆された。実効増倍率は燃焼の進行につれて差異が拡大し、特に ^{92}Zr 、 ^{94}Zr 、 ^{97}Mo 、 ^{99}Tc 、 ^{101}Ru の捕獲断面積更新により、金属燃料高速炉と酸化物燃料高速炉の体系では燃焼末期に約500 pcmの影響が確認された。

燃焼度指標核種として利用できる ^{148}Nd 、 ^{137}Cs 、 ^{134}Cs の生成量については、東京科学大学の収率では3核種すべて相対差が約2%以内に収まり影響は限定的であるのに対し、電気通信大学の収率では ^{134}Cs の生成量に対して約8%、中性子断面積を更新した場合には ^{134}Cs の生成量に対して約15%の影響があることを確認した。100年後までの崩壊熱および放射線量について、収率と中性子断面積を更新した影響は全て5%を下回り、影響は限定的であることを確認した。

以上より、核分裂収率と中性子断面積の更新により、実効遅発中性子、増倍率、燃焼度指標核種として利用できる ^{134}Cs については、無視できない影響が確認された。

参考文献

- (1) Y. Nagaya, et al., "MVP/GMVP Version 3 : General Purpose Monte Carlo Codes for Neutron and Photon Transport Calculations Based on Continuous Energy and Multigroup Methods," JAEA-Data/Code 2016-018 (2017).
- (2) S. B. Ludwig, J. P. Renier, "Standard- and Extended-Burnup PWR and BWR Reactor Models for the ORIGEN2 Computer Code," ORNL/TM-11018 (1989).
- (3) Y. NAGAYA, K. OKUMURA, T. SAKURAI and T. MORI: "MVP/GMVP Version 3 General Purpose Monte Carlo Codes for Neutron and Photon Transport Calculations Based on Continuous Energy and Multigroup Methods," JAEA-Data/Code 2016-018 (2017).
- (4) T. Sugawara, et al., "Accelerator-Driven System Analysis by Using Different Nuclear Data Libraries", Atom Indonesia, 38, 2 (2012).
- (5) K. Tsujimoto, et al., "Neutronics Design for Lead-Bismuth Cooled Accelerator-Driven System for Transmutation of Minor Actinide", Journal of Nuclear Science and Technology, 41, 1, 21-36 (2004).
- (6) NEA, "Benchmark for Neutronic Analysis of Sodium-cooled Fast Reactor Cores with Various Fuel Types and Core Sizes", Paris (2015).
- (7) Y. Oka, K. Suzuki, "Nuclear Reactor Kinetics and Plant Control (An Advanced Course in Nuclear Engineering)", Springer (2015/3/7).

- (8) 奥村啓介, et al., “JENDL-4.0 に基づく ORIGEN2 用断面積ライブラリセット:ORLIBJ40”, JAEA-Data/Code, 2012-032.
- (9) A. Trkov, M. Herman, D. A. Brown, ENDF-6 Formats Manual, CSEWG Document ENDF-102 Report BNL-203218-2018-INRE SVN Commit: Revision 215, National Nuclear Data Center (2018).
- (10) G. Rudstam, “Six-Group Representation of the Energy Spectra of Delayed Neutrons from Fission”, NUCLEAR SCIENCE AND ENGINEERING: 80, 238-255 (1982).
- (11) 西原健司, “使用済核燃料の潜在的放射性毒性評価のためのデータベース”, JAEA-Research 2010-012, Japan Atomic Energy Agency (2010).

3.5 研究推進 【R4～R6】

本研究全体を適切に遂行するために再委託者との連絡を緊密に取り、オンライン会議と対面での会議を合わせて、令和4年度は10月31日（東京工業大学にて開催）、11月15日（オンライン開催）、11月17日（近畿大学にて開催）、令和5年3月30日（オンライン開催）の計4回の定期的な会合を開催した。令和5年度は8月8日（オンライン開催）、9月7日（名古屋大学にて開催）、11月16日（東海村産業・情報プラザにて開催）、12月20日（オンライン開催）の計4回の定期的な会合を開催した。また令和6年度は9月12日（東北大学にて開催）、11月11日（オンライン開催）、11月16日（熊取交流センターすまいるズにて開催）、令和7年1月30日（オンライン開催）の計4回の定期的な会合を開催することで進捗状況を把握し業務を滞りなく進めた。また令和6年9月に開催された日本原子力学会秋の大会では、シリーズ講演を行うことで本研究の成果の周知を図るとともに、今後の課題についてのフィードバックを得た。加えて令和7年1月には外部評価委員会を開催し、本研究について高い評価をいただいた。

令和4年度の学会発表1件、国内研究会発表1件、国際研究会発表1件の実績に加え、令和5年度には、学会発表3件、国内研究会発表1件、国際会議発表2件の他、査読付き国際学術雑誌にて論文1本が受理された。また最終年度の令和6年度には、秋の日本原子力学会にてシリーズ講演を含め学会発表5件に加え、2本の論文が投稿中であり、1本の論文が投稿準備中である。

以上により、各機関における研究の進捗状況の把握および連携の効率化を図り、令和4～6年度に計画した事業を全て滞りなく進めることができた。

4. 結言

本研究は機械学習の専門家の知見と、核データ整備や核分裂メカニズムの専門家の知見を最大限に融合させて、未整備エネルギーでの核分裂核データを整備し、今後の核データ研究の発展やその基盤の維持を図ることを目標に掲げたものである。さらに新たに構築した核分裂核データが炉物理へ与える波及効果を検証・評価することにより、研究開発段階にある新型原子炉に関する研究開発や核燃料物質の原子炉燃料としての使用・再処理・加工に資することを本研究の目的としている。

本研究は全体で3か年計画となっており、初年度にあたる令和4年度は、機械学習を効率的に実施するための計算機環境の構築と核分裂収率評価（担当は東京工業大学・電気通信大学）や中性子断面積評価（担当は原子力機構）に適した機械学習モデルの模索を行う一方、機械学習を用いて既存の評価済核データで提供されていない中性子エネルギーでの核データを炉物理計算で使うための計算コードの整備（大阪大学）も同時に進め、核分裂核データに関する一連の研究を統合的に進めた。令和5年度には、令和4年度の知見を受けて、核分裂収率の機械学習による予測に取り組む2つの機関（担当は東京工業大学・電気通信大学）におけるアプローチ方法を大きく変更することとなった。また令和4年度よりも物理学の知見を多く取り入れることで、先述の核分裂収率のための機械学習モデルだけでなく、中性子断面積評価（担当は原子力機構）に適したモデルパラメータの機械学習を用いた模索においても、大幅に予測精度を向上することができた。また、令和6年度に向けて既存の評価済核データでは提供されていない中性子エネルギーでの核データを炉物理計算で使うための計算コードの整備（担当は大阪大学）も順調に進み、未整備エネルギーにおける核分裂核データの影響を定量的に評価するための基盤が整った。最終年度である令和6年度では、整備された手順に基づき最終的なパラメータ調整を実施し、深層学習による核分裂生成物の独立収率のエネルギー毎の核データの整備やガウス過程回帰法によるモデルパラメータの高度化に基づいて整備された断面積データを反映したACEファイルの整備を実施した。また、これらの最終的に整備された核分裂核データの影響を複数の炉型を用いて検証した。

本研究で高度化を図った2つの核分裂核データのうち、ベイズ深層学習による核分裂生成物の質量収率 $Y(A)$ については入力情報に核物理の知見を与えることで主要各種の殻効果に由来するピーク構造の詳細な再現および予測に成功しただけでなく、そのエネルギー依存性についての予測

精度も従来のライブラリ値の線形内容に比べて飛躍的に改善することができた。その精度は過去の先行研究に比べても非常に正確である。また炉物理側へ応用する際に必要となる核分裂生成物の独立収率 $Y(Z, A)$ の導出では、JENDL-5 の核分裂収率作成時の知見を活用することで、妥当性の高い荷電分布を与えることに成功した。その結果、最終的に得られた独立収率のエネルギー依存性が他に例を見ない精度で高精度に予測できていることが主要な複数の核種での遅発中性子収率の実験値との比較から明らかになった。このような高度な妥当性評価は世界初である。また中性子断面積については、断面積を予測する CCONE モデルのモデルパラメータの最適化に物理学的な知見（シザーズモード）を導入することで、ガウス過程回帰法単独での最適化に比べて格段に妥当性が向上することが明らかになった。また整備された核データが炉物理計算に与える影響も複数の炉型を仮定して定量的に評価された。このように本研究では機械学習の手法と物理学的知見を融合することで核分裂核データを高度化できる道筋を示し、これらの核データの炉物理への影響の度合いを具体的に示した。将来的には本研究で整備された手順を完全自動化することで、核データ整備の効率化が見込まれる。

本研究で高度化を図った核分裂核データは様々な原子力システムの評価における最上流の入力情報である。従来の核データライブラリでは中性子エネルギー $E_n=0.0253$ eV, 500 keV のあとは 14 MeV まで核分裂収率の情報が飛んでいたが、本研究により本来エネルギーに依存して連続的に変化するはずの核分裂収率や核分裂生成物の中性子断面積等の核分裂核データを機械学習で高度に予測することが可能となった。本研究では、これらの新たに整備した核データを異なる炉型に対して適用し、核特性・崩壊熱・放射線量の観点から従来データとの違いを精査した。その結果、従来の核分裂核データを用いた場合との差異は特に動特性評価に大きく影響することがわかった。現時点では東京科学大学の構築した収率モデルを用いた場合の方が従来手法との差異は小さいものの、電気通信大学で開発されたモデルの方が不確かさという重要な核データの性質を失わずに予測が行えるという点で優れている。そのため将来的には電気通信大学の開発したマルチタスクニューラルネットワークモデルに殻効果因子を取り入れ、WAIC を用いてハイパーパラメータの最適化を実施することで、より信頼性の高い統合的な機械学習モデルの構築が望まれる。以上の知見を活用することで、研究開発段階にある新型原子炉に関する研究開発や核燃料物質の原子炉燃料としての使用・再処理または加工の効率化や安全性の向上が期待できる。