

修士論文の和文要旨

研究科・専攻	大学院 情報理工学研究科 情報・ネットワーク工学専攻 博士前期課程		
氏名	ZHANG ENBO	学籍番号	2331100
論文題目	核分裂収率とその誤差を同時に予測する Multi-task Deep Neural Network		
要旨	<p>原子核分裂データは、核エネルギー分野において、設計、シミュレーション、評価、安全性などの分野で極めて重要である。特に、核分裂生成物収率 (Fission Product Yield: FPY) データは非常に価値がある。しかし、JENDL などの主要な核データライブラリには、FPY データが $2.53 \times 10^{-8}\text{MeV}$、$0.5\text{MeV}$ および 14MeV のみ提供されている。このような状況は、異なるエネルギーでの不完全な FPY データを予測する必要性を生じさせる。</p> <p>物理モデルは、核エネルギー技術を開発するために必要な十分な精度で FPY を予測することは依然として困難である。一方、機械学習手法ベイジアンニューラルネットワーク (Bayesian Neural Networks: BNN) は、FPY データを予測し、不確実性の定量化も同時に実現できる。しかし、FPY データのピーク構造は、滑らかでない大きな起伏のある分布を示すことが多いため、BNN がその構造を正確に学習することは困難である。さらに、BNN は不確実性の定量化を提供するが、FPY データのみから推定するため、推定精度は低いという問題がある。</p> <p>この2つの問題を解決するため、本研究では、マルチタスク深層学習モデル Multi-gate Mixture-of-Experts (MMoE)を用いて、FPY データと FPY エラーを同時に学習・予測する手法を提案した。MMoE のアーキテクチャは、FPY データの学習と FPY エラーの学習を相互に補完し合うので、FPY エラー値が FPY 値に依存する場合に特に効果的であり、FPY および FPY エラーの予測精度を向上させることが期待される。さらに、ピークデータを正確に予測するために、FPY 値に応じて訓練データの損失値に重みを付ける新しい損失関数を導入する。加えて、補助入力情報として奇偶効果 (odd-even effect) を組み込んだ。</p> <p>実データに適用した結果、提案手法は滑らかでない大きな起伏のある分布を示すピークデータをより効果的に予測できるだけでなく、FPY データ、FPY エラーを BNN より、高精度に予測できることを示した。</p>		

2025 年度情報数理工学 (MI) プログラム
修士論文

核分裂収率とその誤差を同時に予測する
Multi-task Deep Neural Network

2025 年 1 月 24 日

電気通信大学情報数理工学プログラム
学籍番号 2331100

ZHANG ENBO

指導教員植野真臣
副指導教員宇都雅輝

目次

1	研究背景	2
2	提案手法	4
3	実験および考察	8
3.1	既知 FPY の評価	8
3.2	異なる励起エネルギーにおける未知 FPY の評価	18
4	まとめ	22
5	謝辞	23

1 研究背景

原子核分裂データは、核エネルギー分野において、設計、シミュレーション、評価、安全性などの分野で極めて重要である [1]。これらのデータは、核エネルギー技術を開発するための基盤となる重要な情報を提供する。特に、核分裂生成物収率 (Fission Product Yield: FPY) データは非常に価値がある。しかし、CENDL[2]、JENDL[3]、ENDF[4]、JEFF[5]、ENDF[6] などの主要な核データライブラリには、FPY データが熱中性子エネルギー、すなわち 2.53×10^{-8} MeV、0.5 MeV および 14 MeV のみ提供されている。このような状況は、特に高速炉において、異なるエネルギーでの不完全な FPY データを予測する必要性を生じさせる。

経験的モデルおよび半微視的モデルは、既存の実験データに対して良好に適合することが知られているが、異なるエネルギーレベルで観測されていない FPY データに対する予測能力は低い [7]。最近の研究では、時間依存ハートリー-フォック-ボゴリューボフ法 (Time-Dependent Hartree-Fock-Bogoliubov: TDHFB)[8] や時間依存生成座標法 (Time-Dependent Generator Coordinate Method: TDGCM)[9] など、完全微視的な核分裂モデルが提案されているが、これらの手法は計算コストが非常に高い。

核分裂の FPY を予測するもう一つの理論的アプローチとして、巨視-微視 (macroscopic-microscopic: mac-mic) モデルがある。このモデルは 60 年以上にわたって開発されており、最近のモデル [10, 11, 12, 13] により、実験データと良好に一致する予測が実現されている。しかし、核物理学におけるこれらの最先端モデルであっても、核エネルギー技術を開発するために必要な十分な精度で FPY を予測することは依然として困難である。

近年、機械学習は複雑なビッグデータを活用して知識を得る強力なアプローチとして注目されている。核物理学の分野でも、機械学習が重要な役割を果たしており、核構造 [14, 15, 16, 17, 18, 19] および核反応 [20, 21, 22, 23] の解明に応用され、核物理学研究に新たな視点とアプローチを提供している [24]。機械学習手法の中で、ベイジアンニューラルネットワーク (Bayesian Neural Networks: BNN) は、優れた予測能力と不確実性定量化を提供する点で注目されており、多様な予測タスクでその有効性を示している。たとえば、BNNs は分裂生成物の電荷収率 [25] や FPY データ [26, 27] を予測し、不確実性の定量化も同時に実現している。

一方、FPY データのピーク分布特性は、観測されていない FPY データを予測する上で重要である。しかし、FPY データのピーク構造は、滑らかでない大きな起伏のある分布を示すことが多いため、BNN がその構造を正確に学習することは困難である。

さらに、BNN は FPY 推定の標準誤差を用いて信頼区間 (Confidence Intervals: CIs) による不確実性の定量化を提供するが、FPY データのみから推定するため、推定精度は低いという問題がある。しかし幸いなことに、日本核データライブラリ ver. 5 (JENDL-5) [3] では FPY エラーデータが提供されている。これを用いれば、FPY エラーデータを直接学習し、直接予測することが可能になると考えられる。不確実性の定量化をより効果的に行うことが求められる。FPY および FPY エラーを同時に学習・予測するためにマルチタスクモデルを使用することは、BNNs で FPY データと CIs を予測するよりも効果的であると考えられる。JENDL-5 では、Tsubakihara ら [28] によって評価された FPY のエラーおよびその共分散行列が採用されている。ただし、共分散行列の非対角成分を無視した場合、誤差伝播によるエラーは実際のエラーよりも大きくなるが、共分散行列の非対角成分データに基づいて、各質量分布におけるエラー伝播を計算することも可能である。

本研究では、マルチタスク深層学習を用いて、FPY データと FPY エラーを同時に学習・予測する手法を提案する。マルチタスク深層学習の中でも、Multi-gate Mixture-of-Experts (MMoE) [29] が提案されている。MMoE は、複数のエキスパートネットワークとゲーティングメカニズムを使用して、異なるタスク間で共有される情報を動的に抽出し、各エキスパートをその関連性と貢献度に基づいて割り当てる手法である。この MMoE は、情報共有の効率性に優れていることから、航空宇宙分野 [30]、産業用故障検出 [31]、交通データ解析 [32] など、さまざまな分野におけるマルチタスク予測で優れた結果を示している。

そこで、本研究では MMoE を用いて FPY と FPY エラーを同時に学習・予測する手法を提案する。MMoE のアーキテクチャは、FPY データの学習と FPY エラーの学習を相互に補完し合うので、FPY エラー値が FPY 値に依存する場合に特に効果的であり、FPY および FPY エラーの予測精度を向上させることが期待される。

さらに、ピークデータを正確に予測するために、FPY 値に応じて訓練データの損失値に重みを付ける新しい損失関数を導入する。加えて、補助入力情報として奇偶効果 (odd-even effect) [33] を組み込む。実データに適用した結果、提案手法は滑らかでない大きな起伏のある分布を示すピークデータをより効果的に予測できるだけでなく、FPY データ、FPY エラーを BNN より、高精度に予測できることを示した。

2 提案手法

FPY および FPY エラーデータの学習と予測を行うために、本研究では、マルチタスク学習フレームワークの中核として MMoE モデルを採用している。MMoE は、データから複雑なパターンや特徴を集中的に学習するために複数のフィードフォワードニューラルネットワークを組み合わせるといった基本概念に基づいて構築されている。MMoE の中心には、入力インスタンスごとに各フィードフォワードニューラルネットワークに重みを割り当てるゲーティング機構が存在する。これらの重みは学習によって調整され、複数のフィードフォワードニューラルネットワークを組み合わせることで予測精度を向上させる。

MMoE は以下の式で表される：

$$\hat{y}^k = h^k(f^k(\mathbf{x})), \quad (1)$$

ここで、 \hat{y}^k は第 k 番目のタスクの出力を表し、 $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ は入力ベクトルを表す。また、 n は入力データの数を示し、 h^k および $f^k(\mathbf{x})$ は第 k 番目のタスクに対応するフィードフォワードニューラルネットワークをそれぞれ表す。

$$f^k(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^m g_j^k(\mathbf{x}) f_j(\mathbf{x}), \text{ and} \quad (2)$$

$$g_j^k(\mathbf{x}) = \text{softmax}(\mathbf{W}_{g_j^k} \mathbf{x}). \quad (3)$$

各タスクはタスクゲート $g_j^k(\mathbf{x})$ に対応し、各タスクゲートはソフトマックス層である。また、フィードフォワードニューラルネットワークの数を表す m は 3 に設定される。 $g_j^k(\mathbf{x})$ は、ゲートネットワークによって与えられる第 j 番目のフィードフォワードニューラルネットワークの対応する重みを表す。一方、 $f_j(\mathbf{x})$ は第 j 番目のフィードフォワードニューラルネットワークを表す。各タスクのゲートネットワークの目的は、全てのフィードフォワードニューラルネットワークを選択し、それらに重みを付与することである。このフレームワーク内では、 $\mathbf{W}_{g_j^k}$ は学習可能な行列である。異なるタスクはそれぞれの損失関数と重みに対応させることができる。MMoE に関するさらなる詳細は関連文献 [29] を参照されたい。

図 1 は提案する MMoE のネットワークアーキテクチャを示している。提案するニューラルネットワークは 2 つの出力を持ち、FPY 値を \hat{y}^1 、その FPY エラーを \hat{y}^2 とする。こ

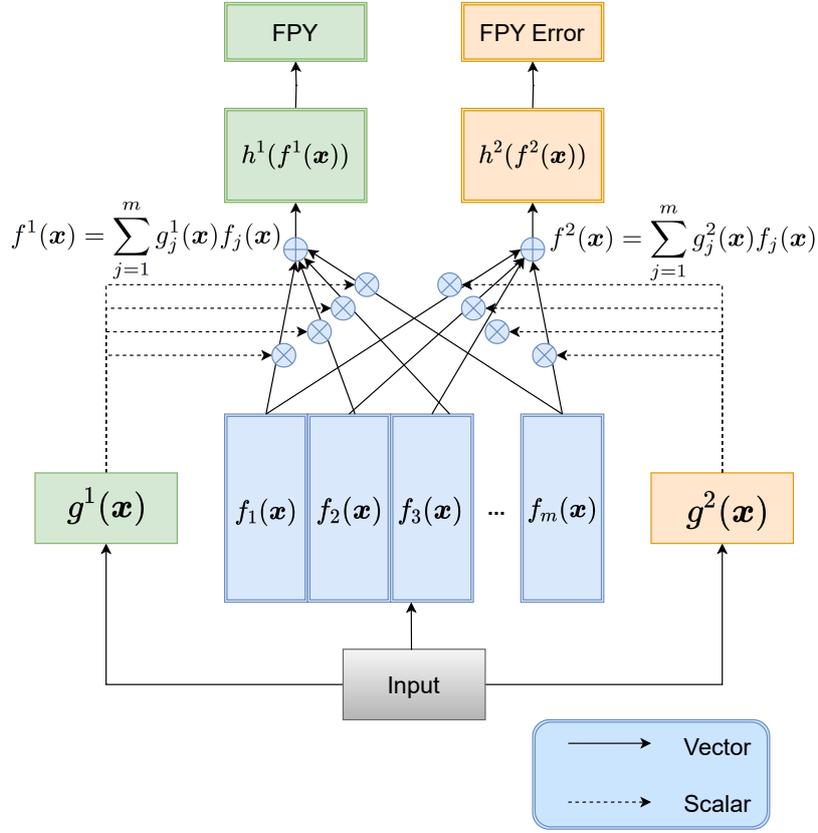


図1: MMoE のネットワークアーキテクチャ

のアーキテクチャにより、JENDL-5 から得られる観測データを用いた教師あり学習を通じて、FPY 値とその FPY エラーを同時に予測することが可能である。

本研究では特に、核分裂生成物の質量分布 FPY(A) を対象とする。これは、独立生成率 FPY(Z, A, m) に比べて利用可能なデータ量が圧倒的に多いためである。ここで、Z は核分裂片の電荷数、A は質量数、m は核異性状態をそれぞれ示している。図 1 に示されるアーキテクチャは、FPY データの学習と FPY エラーの補完的な学習を互いに助け合いながら行うことを可能にする。

提案するモデルの訓練における全体的な損失関数は 2 つの項で構成される。1 つは FPY 予測タスクの損失関数 $Loss_{FPY}$ 、もう 1 つは FPY エラー予測タスクの損失関数 $Loss_{ERROR}$ である。

$$L_{total} = \alpha * Loss_{FPY} + (1 - \alpha) * Loss_{ERROR}. \quad (4)$$

パラメータ α は、FPY 予測と FPY エラー予測の重みバランスを調整するチューニングパラメータである。 α の最適値として 0.9 を選択した。これは、日本核データライブラリ ver. 5 (JENDL-5) のデータに対し、 $\{0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9\}$ の集合に対してグリッドサーチを行い、FPY 予測の最大化を目的として決定したものである。FPY 予測は FPY エラー予測よりも重要であるため、このような設定を採用した。

最初の問題は、本研究で使用する損失関数の選択である。最も一般的な損失関数は、以下に示す平均二乗誤差 (MSE) である、

$$\text{MSE}^k = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i^k - \hat{y}_i^k)^2, \quad (5)$$

ここで、 $k = 1$ は FPY 予測タスクを、 $k = 2$ は FPY エラー予測タスクを意味する。 y_i^k はタスク k における第 i 番目のデータポイントの真値を表し、 \hat{y}_i^k はタスク k における第 i 番目のデータポイントの予測値を示す。すなわち、 MSE^k (式 (5)) は、各バッチ内のデータセット (サンプルサイズ n) に対するタスク k の平均二乗誤差を意味する。

しかしながら、本研究における重要な課題は、先述のように FPY データのピーク値を予測することであるが、MSE 関数ではピークデータの特徴を十分に捉えることができない。

次に、FPY データのピークデータを効果的に予測するために、 MSE^1 の代わりに革新的な損失関数を提案する。この提案する損失関数は「重み付き損失関数 (weighted loss function)」と呼ばれ、モデルが特にピークデータを捉えるように設計されており、最終的に予測能力の向上を目指している。

ただし、weighted loss function は FPY 予測にのみ使用され、FPY エラー予測には適用されない。weighted loss function は以下のように定義される。

$$\text{weightedLoss} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n L_i^W, \quad (6)$$

$$L_i^W = \begin{cases} \beta * (y_i - \hat{y}_i^W)^2, & \text{normalize}(y_i) < r \\ w(y_i) * (y_i - \hat{y}_i^W)^2, & \text{normalize}(y_i) \geq r \end{cases}, \quad (7)$$

$$w(y_i) = 1 + \text{normalize}(y_i). \quad (8)$$

$weightedLoss$ (式 (6)) は、各バッチ内のデータセット (サンプルサイズ n) に対する FPY 予測の総損失値を意味する。また、 L_i^W は、提案手法を用いて得られたバッチ内の第 i 番目のデータポイントにおける予測誤差を表し、 y_i は第 i 番目のデータポイントの真値を示す。さらに、 \hat{y}_i^W は、提案手法による第 i 番目のデータポイントの予測値を示す。ここで、上付き文字 W は、この値が $weighted\ loss\ function$ を用いて得られたものであることを示している。

また、 (β, r) はチューニングパラメータであり、デカルト積 $(\beta, r) \in \{0.001, 0.005, 0.01, 0.02, 0.05\} \times \{0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9\}$ に基づく 25 通りの組み合わせの中から選択される。 $weighted\ loss\ function$ は FPY 値のみを予測するよう設計されているため、このチューニングはシングルタスクの深層ニューラルネットワーク (DNN) を用いて実施される。

さらに、 $w(y_i^W)$ は重み係数を表し、 $normalize(y_i)$ は平均 0.0、標準偏差 1.0 で標準化された y_i の標準化値を示す。式 (8) において、 $w(y_i)$ 関数は、標準化された値 y_i が大きいほど重みを高く設定することで、モデルが FPY データの大きな値をより適切に再現できるように設計されている。

$normalize(y_i)$ がチューニングパラメータ r より大きい場合、入力ベクトル \mathbf{x}_i は「ピークデータ」と呼ばれる。一方で、 $normalize(y_i)$ がチューニングパラメータ r より小さい場合、入力ベクトル \mathbf{x}_i は「ノンピークデータ」と呼ばれる。

β に極めて小さい値を割り当てることで、ノンピークデータの重みが減少し、モデルのピークデータに対する学習感度が向上する。また、 $w(y_i)$ の値を最適化することで、トレーニングデータの FPY 値に応じてピークデータの重みを調整することが可能となる。結果として、トレーニングデータの FPY 値が増加するほど、それに対応する重み係数も増加し、ピークデータの学習が優先される。

3 実験および考察

3.1 既知 FPY の評価

提案手法の有効性を評価するために、JENDL-5 の 4 つの異なるトレーニングデータセットとテストデータセットを使用した。テストデータセットに含まれるデータがトレーニングデータセットに含まれないように設定した。

Data Set 1: Training Set: $^{236,237,238}\text{U}$, $^{242,244,245,246,248}\text{Cm}$, $^{254,255,256}\text{Fm}$, $^{239,241,242}\text{Pu}$, $^{249,250,252}\text{Cf}$, $^{241,242,243}\text{Am}$, $^{237,238}\text{Np}$, ^{231}Pa , $^{253,254}\text{Es}$, $^{227,229,232}\text{Th}$, and $^{254,255,256}\text{Fm}$. Testing Set: ^{235}U .

Data Set 2: Training Set: $^{235,236,237}\text{U}$, $^{242,244,245,246,248}\text{Cm}$, $^{254,255,256}\text{Fm}$, $^{239,241,242}\text{Pu}$, $^{249,250,252}\text{Cf}$, $^{241,242,243}\text{Am}$, $^{237,238}\text{Np}$, ^{231}Pa , $^{253,254}\text{Es}$, $^{227,229,232}\text{Th}$, and $^{254,255,256}\text{Fm}$. Testing Set: ^{238}U .

Data Set 3: Training Set: $^{233,234,235,236,237,238}\text{U}$, $^{242,244,245,246,248}\text{Cm}$, $^{254,255,256}\text{Fm}$, $^{238,240,241,242}\text{Pu}$, $^{249,250,252}\text{Cf}$, $^{241,242,243}\text{Am}$, $^{237,238}\text{Np}$, ^{231}Pa , $^{253,254}\text{Es}$, $^{227,229,232}\text{Th}$, and $^{254,255,256}\text{Fm}$. Testing Set: ^{239}Pu .

Data Set 4: Training Set: $^{233,234,235,236,237,238}\text{U}$, $^{242,244,245,246,248}\text{Cm}$, $^{254,255,256}\text{Fm}$, $^{238,239,240,242}\text{Pu}$, $^{249,250,252}\text{Cf}$, $^{241,242,243}\text{Am}$, $^{237,238}\text{Np}$, ^{231}Pa , $^{253,254}\text{Es}$, $^{227,229,232}\text{Th}$, and $^{254,255,256}\text{Fm}$. Testing Set: ^{241}Pu .

実験において、ネットワークの入力ベクトル \mathbf{x}_i は 4 つの値 $\mathbf{x}_i = (Z_i, N_i, A_i, E_i)$ で構成される。ここで、 Z_i は核分裂核の電荷数、 N_i は中性子数、 A_i は核分裂片の質量数、 E_i は複合核の励起エネルギーをそれぞれ表す。

BNN の学習には、先行研究 [26, 27] に基づき、隠れ層が 2 層 (各層 16 ニューロン) で構成されるネットワークに対して MCMC 法を採用した。ただし、BNN は最小損失関数推定を用いず、MCMC 推定を採用しているため、weighted loss function (式 (7)) を取り入れることはできない。

DNN の学習には、BNN と同様に各層 16 ニューロンを持つ構造を構築した。さらに、隠れ層の数は $\{5, 10, 15\}$ の中からグリッドサーチによって 10 が選択された。

FPY 予測の精度をさらに向上させるために、入力に奇偶効果を組み込んだ。核分裂生成物の質量分布において、奇偶効果は顕著な現象であり、これは核子対形成効果や核結合エネルギーの差異に由来する。核分裂過程では、偶数質量数を持つ原子核は一般的により安定しており、奇数質量数を持つ原子核に比べて高い収率を示す。この結果、核分裂生成

物の収率分布には特徴的なギザギザのパターンが現れる [33]。最近の研究 [26, 27] では、奇偶効果が収率分布の局所的な変動をより良く捉えることに寄与し、FPY モデルの予測精度を向上させることが示されている。

奇偶効果に対して、奇偶値としての O_i を入力ベクトルに追加した。質量数 A_i が偶数の場合、 $O_i = 1$ 、 A_i が奇数の場合、 $O_i = 0$ と設定する。非ピークデータにおける奇偶効果の悪影響を軽減するため、ピークデータの O_i 値は 0 または 1 に設定される一方で、非ピークデータの O_i 値は一律に 0.5 に設定される。

BNN、DNN、および Multi-task DNN の間で FPY 値の予測誤差と FPY エラー値の予測誤差を比較した。提案手法は、FPY データと FPY エラーデータを相補的に学習するアーキテクチャを採用しており、互いに補助することで両データの予測精度を向上させることが期待される。この利点を検証するために、BNN および DNN を用いて FPY データと FPY エラーデータをそれぞれ独立に学習させ、その予測性能を Multi-task DNN の結果と比較した。特に、この利点は、同一の実験条件下で FPY データおよび FPY エラーデータを個別に学習する (single task) DNN と提案手法の性能を比較することで直接的に評価可

表1: 3つのエネルギー条件下における各手法の平均検証誤差 $\chi^2(10^{-6})$

Methods	energy	total χ^2	average		average total χ^2	FPY error	
			peak χ^2	non-peak χ^2		average peak χ^2	average non-peak χ^2
BNN	2.53×10^{-8}	4.66	6.74	4.03	10.45	33.79	3.34
DNN (MSE)	2.53×10^{-8}	7.09	8.30	6.73	7.47	19.14	3.91
DNN (Weighted loss function)	2.53×10^{-8}	9.51	7.18	10.22	7.47	19.14	3.91
DNN (MSE) + oddeven	2.53×10^{-8}	4.58	9.36	3.13	6.38	18.59	2.65
DNN (Weighted loss function) + oddeven	2.53×10^{-8}	4.52	9.26	3.08	6.38	18.59	2.65
Multi-task DNN (MSE)	2.53×10^{-8}	4.46	6.28	3.90	6.81	17.47	3.56
Multi-task DNN (Weighted loss function)	2.53×10^{-8}	5.00	5.31	4.90	7.05	18.82	3.46
Multi-task DNN (MSE) + oddeven	2.53×10^{-8}	4.43	5.53	5.87	4.20	11.36	2.01
Multi-task DNN (Weighted loss function) + oddeven	2.53×10^{-8}	3.36	4.26	3.08	3.75	9.87	1.89
BNN	0.5	7.49	15.70	4.99	9.13	29.5	2.92
DNN (MSE)	0.5	7.19	15.53	4.80	4.70	9.44	3.10
DNN (Weighted loss function)	0.5	8.26	14.52	6.50	4.70	9.44	3.10
DNN (MSE) + oddeven	0.5	6.53	16.59	2.97	4.41	10.48	2.56
DNN (Weighted loss function) + oddeven	0.5	5.95	13.97	3.65	4.41	10.48	2.56
Multi-task DNN (MSE)	0.5	6.94	17.65	3.67	4.06	12.25	1.23
Multi-task DNN (Weighted loss function)	0.5	6.26	13.98	3.91	5.05	15.40	1.89
Multi-task DNN (MSE) + oddeven	0.5	6.53	14.44	4.12	3.16	9.57	1.20
Multi-task DNN (Weighted loss function) + oddeven	0.5	5.50	11.60	3.63	3.21	10.10	1.11
BNN	14	15.03	39.90	7.45	9.10	17.06	6.67
DNN (MSE)	14	10.02	22.17	6.98	4.99	8.07	4.06
DNN (Weighted loss function)	14	11.02	19.62	8.41	4.99	8.07	4.06
DNN (MSE) + oddeven	14	8.74	17.58	6.05	6.37	12.14	4.41
DNN (Weighted loss function) + oddeven	14	8.24	15.65	5.97	6.37	12.14	4.41
Multi-task DNN (MSE)	14	9.57	21.05	6.07	3.50	5.27	2.95
Multi-task DNN (Weighted loss function)	14	8.06	20.77	4.19	2.30	5.88	3.82
Multi-task DNN (MSE) + oddeven	14	9.77	23.27	5.65	2.12	5.76	1.01
Multi-task DNN (Weighted loss function) + oddeven	14	7.35	13.08	5.60	2.48	5.59	1.53

能である。具体的には、BNN、MSE 損失関数を使用した DNN (「DNN (MSE)」)、weighted loss function を使用した DNN (「DNN (Weighted loss function)」)、奇偶効果を導入した MSE 損失関数を使用した DNN (「DNN (MSE)+oddeven」)、奇偶効果を導入した weighted loss function を使用した DNN (「DNN (Weighted loss function)+oddeven」)、MSE を使用した Multi-task DNN (「Multi-task DNN (MSE)」)、weighted loss function を使用した Multi-task DNN (「Multi-task DNN (Weighted loss function)」)、奇偶効果を導入した MSE を使用した Multi-task DNN (「Multi-task DNN (MSE)+oddeven」)、および奇偶効果を導入した weighted loss function を使用した Multi-task DNN (「Multi-task DNN (Weighted loss function)+oddeven」) の予測性能を比較する。表 1 は、エネルギーが 2.53×10^{-8} MeV、0.5 MeV、14 MeV の場合における各手法の FPY および FPY エラーに関する検証誤差を示す。

表 1 において、「energy」は励起エネルギー (単位: MeV) を表す。「average total χ^2 」、「average peak χ^2 」、および「average non-peak χ^2 」は、それぞれ異なる実験条件下での total χ^2 、peak χ^2 、および non-peak χ^2 の平均値を意味する。total χ^2 は、式 $\sum_i [t_i - f(x_i)]^2 / n$ で定義される。ここで、 t_i はテストセットにおける第 i 番目の真値を示す。誤差 χ^2 値 (「peak χ^2 」) はピーク構造のみに対応し、誤差 χ^2 値 (「non-peak χ^2 」) は非ピーク構造のみに対応する。同様に、「FPY error average total χ^2 」、「FPY error average peak χ^2 」、および「FPY error average non-peak χ^2 」は、それぞれ異なる実験条件下での FPY エラー total χ^2 、FPY エラー peak χ^2 、および FPY エラー non-peak χ^2 の平均値を示す。ここで、FPY error total χ^2 は FPY エラー全体の誤差値を示す、FPY error peak χ^2 はピーク構造に対応する FPY エラーの誤差値を示す。また、FPY error non-peak χ^2 は非ピーク構造に対応する FPY エラーの誤差値を示す。

表 1 から、いずれのエネルギー (2.53×10^{-8} MeV、0.5 MeV、または 14 MeV) においても、weighted loss function と奇偶効果を使用した Multi-task DNN が、average total χ^2 における最も優れた FPY 予測精度を提供し、平均予測誤差が最も低いことが明らかである。これは、BNN および DNN よりも優れた結果を示している。

Multi-task DNN の FPY エラー予測における平均誤差 (total errors χ^2) が最小値を示しているが、最適な損失関数 (MSE または Weighted loss function) は原子核およびその励起エネルギーに依存する。これは、式 (4) における損失関数の重み α が FPY 予測のみを最大化するよう最適化されているためである。また、Multi-task DNN (Weighted loss function)+odd-even モデルの FPY エラー予測における平均誤差 (total errors χ^2) は、最良の予測モデルと比較してわずかに劣るのみである。したがって、特に FPY 予測に注目する場合、実験結果は未知の FPY 値を予測するために Multi-task DNN (Weighted

loss function)+odd-even モデルを推奨していることを示唆している。

提案手法の優位性を詳述するために、表 2～表 5 にすべての誤差値を示す。表 2～表 5 において、「nuclei」は原子核を指し、「energy」は励起エネルギー（単位：MeV）を意味する。さらに、「total χ^2 」、「peak χ^2 」、「non-peak χ^2 」、「FPY error total χ^2 」、「FPY error peak χ^2 」、および「FPY error non-peak χ^2 」は、表 1 におけるものと同じである。これらの「total χ^2 」、「peak χ^2 」、「non-peak χ^2 」、「FPY error total χ^2 」、「FPY error peak χ^2 」、および「FPY error non-peak χ^2 」の定義は、以前の説明と一致している。

表 2～表 5 に示される結果から、Multi-task DNN 手法は、FPY の予測において BNN および DNN と比較してほぼすべての場合で χ^2 値が低いことがわかる。これは、FPY と FPY エラーの同時学習を可能にする MMoE によって、FPY エラー値が FPY 値に依存していることから、予測精度が向上するためである。FPY 値と FPY エラー値が互いに影響を与え合うことで、それぞれの学習精度が向上する。

表 2 および表 3 から、MSE 損失関数を使用した DNN は、0.5 MeV および 14 MeV での ^{235}U および ^{238}U の予測において、BNN と比較して total χ^2 および peak χ^2 の値が低いことが示されている。しかし、表 4 に示されるように、0.5 MeV での ^{239}Pu の予測、および表 5 における 0.5 MeV と 2.53×10^{-8} MeV での ^{241}Pu の予測では、MSE 損失関数を使用した DNN は BNN と比較して total χ^2 および peak χ^2 の値が高くなる。

FPY エラーの予測に関しては、14 MeV での ^{235}U を除き、MSE 損失関数を使用した DNN の FPY error total χ^2 および FPY error peak χ^2 の値は BNN のそれよりも低いことが示されている。

総括すると、FPY の予測において、MSE 損失関数を使用した DNN は BNN と同等の予測能力を示している。一方で、FPY エラーの予測では、MSE 損失関数を使用した DNN は BNN よりも優れた精度を一貫して示しており、予測精度の向上が確認された。

さらに、表 2～表 5 から、MSE 損失関数を使用した Multi-task DNN は、 ^{239}Pu (0.5 MeV および 14 MeV)、 ^{241}Pu (0.5 MeV および 2.53×10^{-8} MeV)、および ^{238}U (14 MeV) において、MSE 損失関数を使用した DNN と比較して total χ^2 の値が低いことが示されている。一方で、 ^{235}U (0.5 MeV および 14 MeV) および ^{238}U (0.5 MeV) の場合、MSE 損失関数を使用した Multi-task DNN は、MSE 損失関数を使用した DNN と比較して χ^2 の値が高くなるものの、それでも BNN よりも低い値を示している。

FPY エラーの予測に関しては、 ^{238}U (0.5 MeV) を除き、MSE 損失関数を使用した Multi-task DNN の FPY エラー total χ^2 の値は、MSE 損失関数を使用した DNN よりも低いことが示されている。

次に、weighted loss function の有効性を検証するために、「Multi-task DNN (MSE)」と

「Multi-task DNN (Weighted loss function)」、および「DNN (MSE)」と「DNN (Weighted loss function)」で得られた誤差値を比較する。

DNN に関して、表 2～表 5 から、 ^{238}U (0.5 MeV) を除き、weighted loss function を使用した DNN の peak χ^2 の値は、すべてのエネルギーレベル (0.5 MeV、14 MeV、および 2.53×10^{-8} MeV) において、MSE 損失関数を使用した DNN の値よりも低いことが示されている。

Multi-task DNN に関して、表 2～表 5 から、0.5 MeV の場合、特に ^{238}U において、

表2: ^{235}U の検証誤差 $\chi^2(10^{-6})$

Methods	nuclei	energy	total χ^2	peak χ^2	non-peak χ^2	total χ^2	FPY error	
							peak χ^2	non-peak χ^2
BNN	^{235}U	0.5	9.33	24.30	4.77	6.30	16.20	3.28
DNN (MSE)	^{235}U	0.5	6.53	18.49	2.89	3.01	8.54	1.32
DNN (Weighted loss function)	^{235}U	0.5	8.40	18.24	5.39	3.01	8.54	1.32
DNN (MSE) + oddeven	^{235}U	0.5	8.09	24.62	3.05	4.75	16.60	1.14
DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{235}U	0.5	6.64	19.59	2.69	4.75	16.60	1.14
Multi-task DNN (MSE)	^{235}U	0.5	7.30	17.85	4.09	2.69	9.19	0.76
Multi-task DNN (Weighted loss function)	^{235}U	0.5	5.91	16.67	2.63	3.50	12.56	0.74
Multi-task DNN (MSE) + oddeven	^{235}U	0.5	7.00	17.16	3.90	2.77	9.98	0.57
Multi-task DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{235}U	0.5	5.71	16.58	2.39	4.05	15.12	0.68
BNN	^{235}U	14	20.70	62.96	7.81	6.83	12.75	5.03
DNN (MSE)	^{235}U	14	5.66	14.02	3.12	2.82	6.46	1.71
DNN (Weighted loss function)	^{235}U	14	5.46	11.73	3.56	2.82	6.46	1.71
DNN (MSE) + oddeven	^{235}U	14	5.47	12.75	3.25	6.38	18.59	2.65
DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{235}U	14	6.15	12.04	4.35	6.38	18.59	2.65
Multi-task DNN (MSE)	^{235}U	14	8.91	20.08	5.50	2.37	6.68	1.05
Multi-task DNN (Weighted loss function)	^{235}U	14	5.96	11.44	4.29	2.63	7.04	1.28
Multi-task DNN (MSE) + oddeven	^{235}U	14	12.11	28.53	7.10	2.19	5.21	1.27
Multi-task DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{235}U	14	3.44	8.32	1.95	1.78	3.56	1.23

表3: ^{238}U の検証誤差 $\chi^2(10^{-6})$

Methods	nuclei	energy	total χ^2	peak χ^2	non-peak χ^2	total χ^2	FPY error	
							peak χ^2	non-peak χ^2
BNN	^{238}U	0.5	11.33	24.06	7.45	9.99	35.94	2.08
DNN (MSE)	^{238}U	0.5	9.98	21.09	6.60	8.01	11.28	7.02
DNN (Weighted loss function)	^{238}U	0.5	15.87	21.16	14.26	8.01	11.28	7.02
DNN (MSE) + oddeven	^{238}U	0.5	7.45	23.84	2.46	4.92	10.97	3.07
DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{238}U	0.5	8.80	19.75	5.46	4.92	10.97	3.07
Multi-task DNN (MSE)	^{238}U	0.5	10.48	30.67	4.33	7.27	23.28	2.39
Multi-task DNN (Weighted loss function)	^{238}U	0.5	9.78	22.01	6.06	9.48	29.66	3.33
Multi-task DNN (MSE) + oddeven	^{238}U	0.5	9.21	24.84	4.45	2.55	8.43	0.76
Multi-task DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{238}U	0.5	8.53	16.92	5.97	1.82	5.71	0.64
BNN	^{238}U	14	15.48	36.42	9.10	10.75	20.30	7.83
DNN (MSE)	^{238}U	14	15.65	31.19	10.91	7.61	11.83	6.32
DNN (Weighted loss function)	^{238}U	14	18.03	27.12	15.26	7.61	11.83	6.32
DNN (MSE) + oddeven	^{238}U	14	13.37	26.96	9.23	9.29	13.96	7.87
DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{238}U	14	11.48	22.80	8.02	9.29	13.96	7.87
Multi-task DNN (MSE)	^{238}U	14	12.79	26.88	8.50	6.03	4.27	6.57
Multi-task DNN (Weighted loss function)	^{238}U	14	6.41	14.47	3.95	2.19	4.54	1.47
Multi-task DNN (MSE) + oddeven	^{238}U	14	11.19	25.96	6.69	2.63	7.58	1.12
Multi-task DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{238}U	14	13.53	19.23	11.79	3.44	6.21	2.60

weighted loss function を使用した Multi-task DNN の peak χ^2 の値が、MSE 損失関数を使用した Multi-task DNN の値よりも低いことが示されている。この結果は、weighted loss function を用いることで peak 予測精度が改善されたことを示している。さらに、 ^{241}Pu を除き、 ^{235}U 、 ^{238}U 、および ^{239}Pu における total χ^2 の値は、MSE 損失関数を使用した Multi-task DNN の値よりも低いことが示されている。一方で、FPY エラー予測に関しては、weighted loss function と MSE 損失関数の性能に大きな差は見られなかった。

表4: ^{239}Pu の検証誤差 $\chi^2(10^{-6})$

Methods	nuclei	energy	total	peak	non-peak	total χ^2	FPY error	
			χ^2	χ^2	χ^2		peak χ^2	non-peak χ^2
BNN	^{239}Pu	0.5	5.58	7.99	4.84	10.78	36.64	2.89
DNN (MSE)	^{239}Pu	0.5	6.65	12.35	4.92	3.62	6.93	2.61
DNN (Weighted loss function)	^{239}Pu	0.5	4.30	8.83	2.91	3.62	6.93	2.61
DNN (MSE) + oddeven	^{239}Pu	0.5	4.41	8.11	3.28	4.35	2.95	4.77
DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{239}Pu	0.5	4.22	7.74	3.14	4.35	2.95	4.77
Multi-task DNN (MSE)	^{239}Pu	0.5	5.13	7.65	4.36	3.37	9.49	0.15
Multi-task DNN (Weighted loss function)	^{239}Pu	0.5	2.82	7.13	1.50	3.87	10.91	1.73
Multi-task DNN (MSE) + oddeven	^{239}Pu	0.5	4.37	7.60	3.39	4.02	12.01	1.58
Multi-task DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{239}Pu	0.5	4.25	7.57	3.24	3.91	11.90	1.47
BNN	^{239}Pu	14	8.91	20.32	5.44	9.71	18.12	7.15
DNN (MSE)	^{239}Pu	14	8.75	21.31	4.91	4.56	5.91	4.15
DNN (Weighted loss function)	^{239}Pu	14	9.58	20.02	6.40	4.56	5.91	4.15
DNN (MSE) + oddeven	^{239}Pu	14	7.38	13.02	5.66	3.44	5.86	2.70
DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{239}Pu	14	7.08	12.12	5.54	3.44	5.86	2.70
Multi-task DNN (MSE)	^{239}Pu	14	7.00	16.2	4.20	2.09	4.86	1.24
Multi-task DNN (Weighted loss function)	^{239}Pu	14	11.82	36.41	4.32	2.09	6.07	8.70
Multi-task DNN (MSE) + oddeven	^{239}Pu	14	6.00	15.31	3.17	1.53	4.50	0.63
Multi-task DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{239}Pu	14	5.07	11.68	3.07	2.23	7.01	0.77

表5: ^{241}Pu の検証誤差 $\chi^2(10^{-6})$

Methods	nuclei	energy	total	peak	non-peak	total χ^2	FPY error	
			χ^2	χ^2	χ^2		peak χ^2	non-peak χ^2
BNN	^{241}Pu	0.5	3.73	6.46	2.90	9.46	29.27	3.42
DNN (MSE)	^{241}Pu	0.5	5.60	8.20	4.81	4.15	13.01	1.44
DNN (Weighted loss function)	^{241}Pu	0.5	4.47	7.84	3.44	4.15	13.01	1.44
DNN (MSE) + oddeven	^{241}Pu	0.5	4.18	7.77	3.09	3.61	11.39	1.25
DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{241}Pu	0.5	4.14	6.80	3.32	3.61	11.39	1.25
Multi-task DNN (MSE)	^{241}Pu	0.5	4.83	14.42	1.90	2.89	7.04	1.63
Multi-task DNN (Weighted loss function)	^{241}Pu	0.5	6.52	10.09	5.43	3.34	8.47	1.77
Multi-task DNN (MSE) + oddeven	^{241}Pu	0.5	5.53	8.16	4.72	3.28	7.85	1.89
Multi-task DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{241}Pu	0.5	3.49	5.31	2.93	3.06	7.68	1.65
BNN	^{241}Pu	2.53×10^{-8}	4.66	6.74	4.03	10.45	33.79	3.34
DNN (MSE)	^{241}Pu	2.53×10^{-8}	7.09	8.30	6.73	7.47	19.14	3.91
DNN (Weighted loss function)	^{241}Pu	2.53×10^{-8}	9.51	7.18	10.22	7.47	19.14	3.91
DNN (MSE) + oddeven	^{241}Pu	2.53×10^{-8}	4.58	9.36	3.13	6.38	18.59	2.65
DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{241}Pu	2.53×10^{-8}	4.52	9.26	3.08	6.38	18.59	2.65
Multi-task DNN (MSE)	^{241}Pu	2.53×10^{-8}	4.46	6.28	3.90	6.81	17.47	3.56
Multi-task DNN (Weighted loss function)	^{241}Pu	2.53×10^{-8}	5.00	5.31	4.90	7.05	18.82	3.46
Multi-task DNN (MSE) + oddeven	^{241}Pu	2.53×10^{-8}	4.43	5.53	5.87	4.20	11.36	2.01
Multi-task DNN (Weighted loss function) + oddeven	^{241}Pu	2.53×10^{-8}	3.36	4.26	3.08	3.75	9.87	1.89

表 2～表 5から、14 MeV および 2.53×10^{-8} MeV の場合、 ^{235}U 、 ^{238}U 、および ^{241}Pu において、weighted loss function を使用した Multi-task DNN の peak χ^2 の値は、MSE 損失関数を使用した Multi-task DNN の値よりも低いことが示されている。一方で、 ^{239}Pu の場合、weighted loss function を使用した Multi-task DNN の peak χ^2 の値および total χ^2 の値は、MSE 損失関数を使用した Multi-task DNN の値よりも高くなっている。

FPY エラー予測に関しては、0.5 MeV の場合と同様に、 ^{238}U を除き、weighted loss function を使用した total χ^2 の値は MSE 損失関数を使用した場合よりも高い結果が得られている。

最後に、表 2～表 5の誤差値を比較することで、奇偶効果が FPY 予測精度を向上させる有効な手法であることを示す。

DNN に関して、表 2～表 5から、 ^{235}U (0.5 MeV における MSE 損失関数の場合および 14 MeV における weighted loss function の場合) を除き、奇偶効果を導入した手法の total χ^2 の値は、奇偶効果を導入しない手法の値よりも一貫して低いことが示されている。

Multi-task DNN に関して、 ^{235}U 、 ^{238}U 、および ^{241}Pu (0.5 MeV の場合)、 ^{238}U および ^{239}Pu (14 MeV の場合)、ならびに ^{241}Pu (2.53×10^{-8} MeV の場合) において、奇偶効果を導入した手法は、奇偶効果を導入しない手法と比較して、損失関数が weighted loss function であるか MSE であるかにかかわらず、peak χ^2 および total χ^2 の値が一貫して低いことが示されている。この結果は、奇偶効果の導入が多くの場合において有効であることを示している。

一方で、 ^{239}Pu (0.5 MeV の場合) および ^{238}U (14 MeV の場合) では、奇偶効果を導入した weighted loss function を使用した Multi-task DNN は、奇偶効果を導入しない weighted loss function を使用した Multi-task DNN と比較して、peak χ^2 および total χ^2 の値が高くなっている。これは、FPY のピーク構造が平滑であるためである。この結果の詳細については、FPY 予測に関する図を用いて後述する。

同様に、表 2～表 5から、奇偶効果を導入した DNN の FPY error total χ^2 値および FPY error peak χ^2 値が、奇偶効果を導入しない DNN と比較して一貫して高いまたは低い値を示しているわけではないことが明らかである。この結果は、奇偶効果と FPY エラーデータとの間に明確な相関があることを文献が確認している事実と一致している [33]。

さらに、Multi-task DNN の FPY エラー予測に関する手法間の差異はわずかである。これは、Multi-task DNN の FPY エラー予測タスクにおける損失関数が同じであるためである。

注目すべき点として、BNN 手法では FPY の負の予測が頻繁に観測されており、その割合は 17.52% に達している。一方で、Multi-task DNN 手法は高い予測精度を示し、FPY

の負の予測率は 8.29% と低い値を示している。さらに、追加データの導入や活性化関数の変更といった対策を行わなくても、Multi-task DNN 手法における負の予測は BNN 手法と比較して少ない結果となっている。

FPY および FPY エラー予測における提案手法の有効性を視覚的に示すために、図 2 および図 3 では、それぞれ 0.5 MeV および 14 MeV における ^{235}U の FPY 予測結果を各手法で示している。これは、weighted loss function と奇偶効果を導入した提案手法がこれらの予測において最高の精度を示しているためである。

各図において、横軸は質量数を示し、縦軸は FPY 値を示している。黒い点は JENDL-5 から得られた FPY データの真値（「JENDL FPY 値」）を表している。青い線は「BNN」、「DNN」、「Multi-task DNN」を用いた FPY 値の予測を示している。紫色の影付き領域は、「BNN」、「DNN」、「Multi-task DNN」を用いた FPY エラーの予測を示している。また、赤い影付き領域は JENDL-5 から得られた FPY エラーデータの真値（「JENDL FPY error」）を表している。

各図の構成は、それぞれの手法の有効性を示すように設計されている。図 2(a) および図 3(a) は、BNN による FPY および FPY エラーの予測を示している。図 2(b) および図 3(b) は、MSE 損失関数を使用した Multi-task DNN による FPY および FPY エラーの予測を示している。図 2(c) および図 3(c) は、weighted loss function を使用した Multi-task DNN による FPY および FPY エラーの予測を示している。図 2(d) および図 3(d) は、MSE 損失関数と奇偶効果を使用した Multi-task DNN による FPY および FPY エラーの予測を示している。図 2(e) および図 3(e) は、weighted loss function と奇偶効果を使用した Multi-task DNN による FPY および FPY エラーの予測を示している。

さらに、図 2(f) および図 3(f) は、MSE 損失関数を使用した DNN による FPY および FPY エラーの予測を示している。図 2(g) および図 3(g) は、weighted loss function を使用した DNN による FPY および FPY エラーの予測を示している。図 2(h) および図 3(h) は、MSE 損失関数と奇偶効果を使用した DNN による FPY および FPY エラーの予測を示している。図 2(i) および図 3(i) は、weighted loss function と奇偶効果を使用した DNN による FPY および FPY エラーの予測を示している。

図 2(b) における ^{235}U の FPY 予測が、特に左側のピーク構造において、図 2(a) の結果と比較して JENDL-5 から得られた FPY データの真値に近いことを示している。さらに、図 2(a) における FPY エラーの予測と比較して、図 2(b) における FPY エラーの予測は、ピーク構造以外で JENDL-5 の FPY データの真値により近い結果を示している。

図 2(c) は、weighted loss function を使用した Multi-task DNN による FPY の予測が、図 2(b) の MSE 損失関数を使用した Multi-task DNN の予測と比較して、ピーク構造内

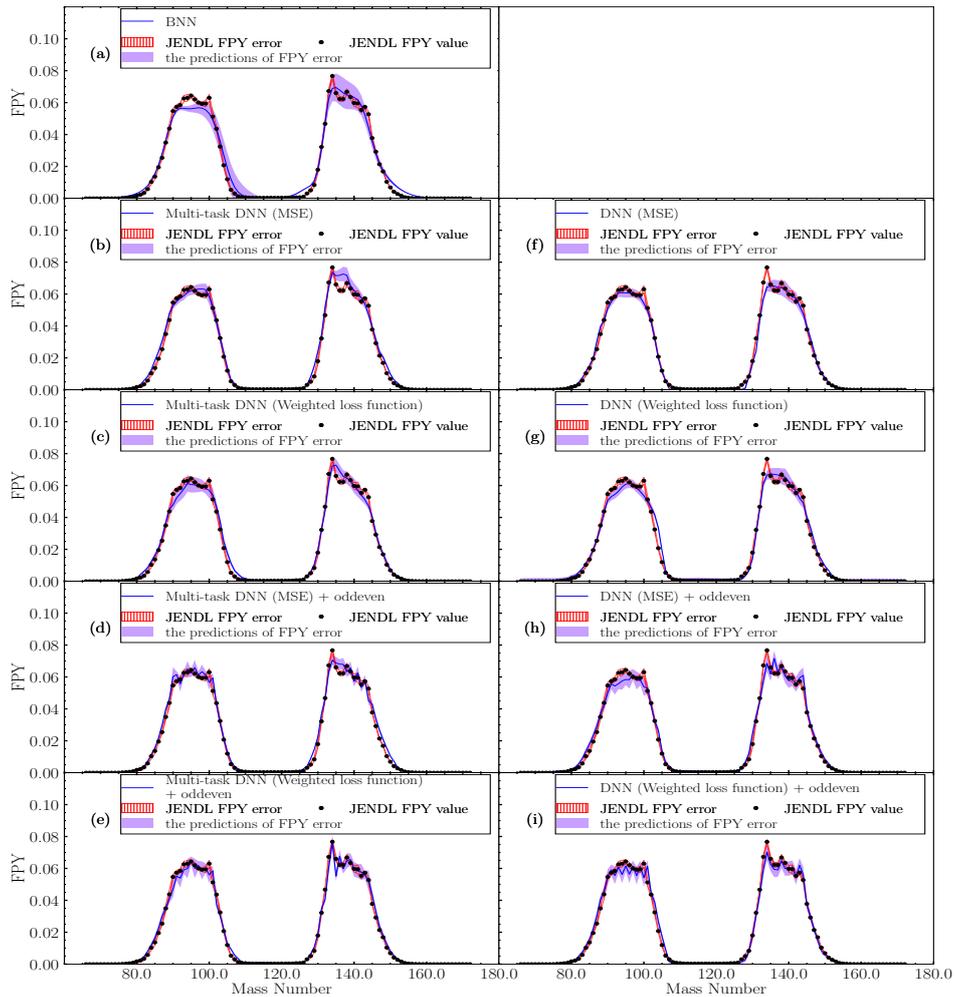


図2: 異なる手法を使用した 0.5 MeV における ^{235}U の FPY 予測

でより高い精度を示していることを示している。図 2(d) および図 2(e) では、奇偶効果を導入しているため、FPY の予測にギザギザした非平滑な分布が見られる。特に、図 2(e) において、weighted loss function と奇偶効果を使用した Multi-task DNN による FPY の予測が、JENDL-5 の FPY データの真値に最も近い結果を示している。さらに、質量数 134 付近では、FPY エラーの予測が JENDL-5 の FPY エラーデータの真値により近い結果を示している。

図 3は、14 MeV においても、weighted loss function と奇偶効果を使用した Multi-task DNN による FPY の予測が、JENDL-5 から得られた FPY データの真値に最も近い結果を示している。注目すべき点として、14 MeV では FPY エラーの値が大きいため、図 2(b)~(e) における FPY エラーの予測が、BNN と比較して JENDL-5 の FPY エラー

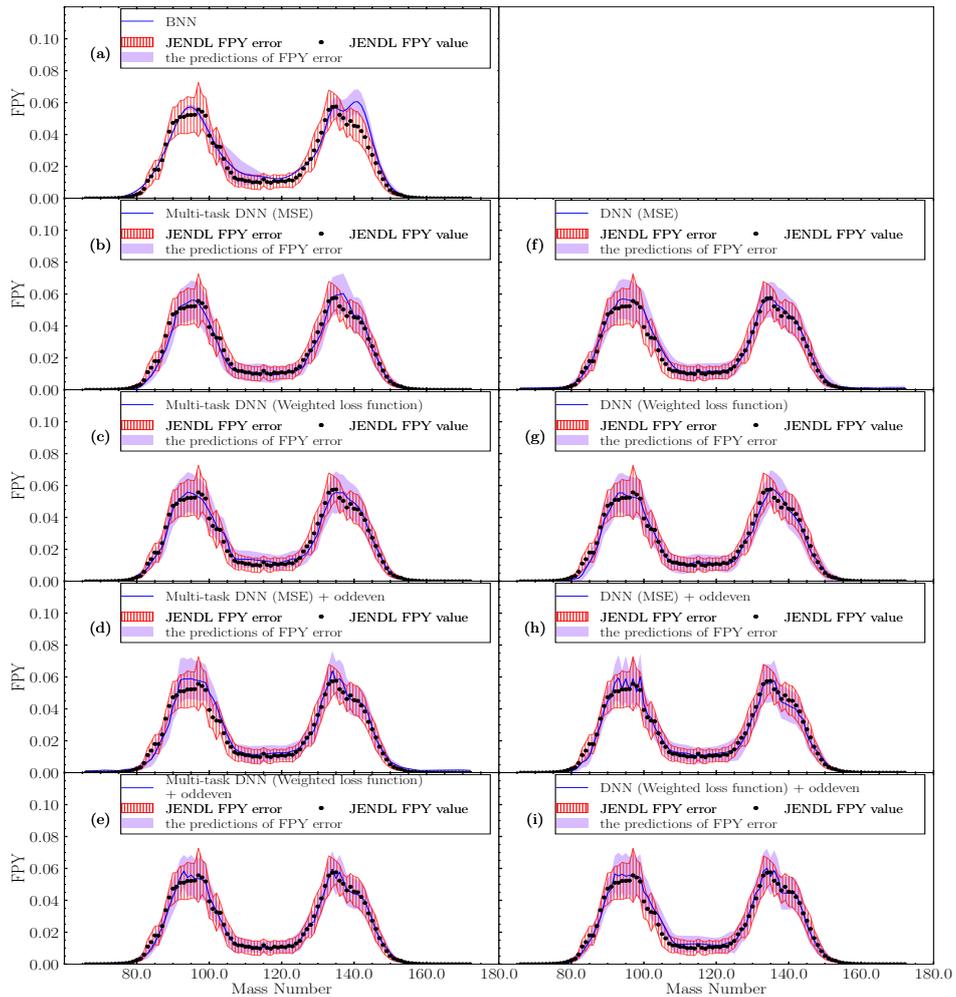


図3: 異なる手法を使用した 14 MeV における ^{235}U の FPY 予測

データの真値により近い結果を明確に示している。

さらに、ピークデータの予測において、weighted loss function は (single-task) DNN よりも Multi-task DNN でより効果を発揮する。ピーク構造の FPY エラーデータは、非ピーク構造のデータよりも値が大きくなる傾向がある。この特性を利用することで、FPY と FPY エラーの同時学習において相互補完を促進することが可能である。

上述の分析から、奇偶効果を導入した weighted loss function を使用する Multi-task DNN の有効性が明らかになり、特に奇偶効果を導入しない手法と比較して優れていることが示されている。しかしながら、 ^{239}Pu (0.5 MeV の場合) および ^{238}U (14 MeV の場合) のように、奇偶効果を導入した Multi-task DNN が高精度な FPY 予測を提供できない場合もあることが図 4 と図 5 に示されている。

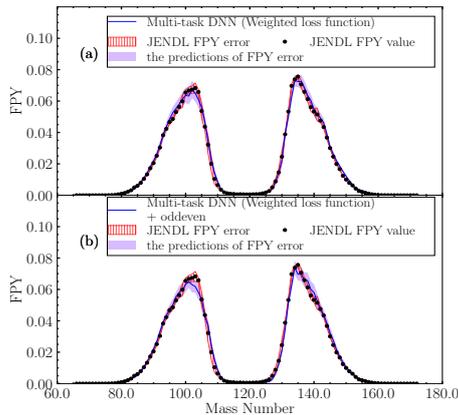


図4: weighted loss function と奇偶効果を使用した 0.5 MeV における ^{239}Pu の FPY 予測

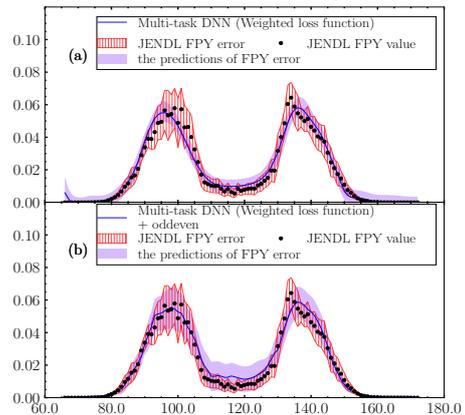


図5: weighted loss function と奇偶効果を使用した 14 MeV における ^{238}U の FPY 予測

図 4(a) および図 5(a) では、weighted loss function を使用した Multi-task DNN による FPY の予測が、すでに JENDL-5 から得られた FPY データの真値に非常に近いことが観察されている。一方で、奇偶効果を導入した後、図 4(b) および図 5(b) におけるピーク構造の FPY 予測が、JENDL-5 の FPY データの真値からさらに遠ざかる結果が観察されている。さらに、図 5(a) における FPY エラー予測の影付き領域が、JENDL-5 の FPY エラーデータの真値の影付き領域とより多く重なっていることも観察されている。

これらの現象は、 ^{239}Pu (0.5 MeV の場合) および ^{238}U (14 MeV の場合) の FPY のピーク構造が非常に平滑であり、ギザギザした特徴が顕著に現れないために発生している可能性がある。このため、これらのデータに対しては、奇偶効果は学習精度の向上には効果的でないと考えられる。

3.2 異なる励起エネルギーにおける未知 FPY の評価

本研究目的は、不完全な実験的 FPY データを、完全な評価結果から得られる情報を用いて予測することである。図 6は、weighted loss function と奇偶効果を使用した Multi-task DNN による、異なるエネルギーにおける FPY および FPY エラーの予測結果を示している。

本実験では、JENDL-5 から得られた ^{235}U をトレーニングデータセットに拡張して使用した。さらに、未測定のエネルギーに対するトレーニングデータが不足しているため、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、

表6: 0.5 MeV における ^{235}U の異なるデータセットに対する検証誤差 $\chi^2(10^{-6})$

Number of divisions	quantity	energy	total χ^2	peak χ^2
-	0	-	5.34	12.67
2	107	7.00	4.51	8.97
3	214	4.67, 9.33	4.27	9.59
4	321	3.50, 7.00, 10.50	4.06	10.73
5	428	2.80, 5.60, 8.40, 11.20	3.07	6.82
6	535	2.33, 4.67, 7.00, 9.33, 11.67	2.06	6.37
7	642	2.00, 4.00, 6.00, 8.00, 10.00, 12.00	3.26	9.71
8	749	1.75, 3.50, 5.25, 7.00, 8.75, 10.50, 12.25	3.42	9.93
9	856	1.56, 3.11, 4.67, 6.22, 7.78, 9.33, 10.89, 12.44	4.13	9.34

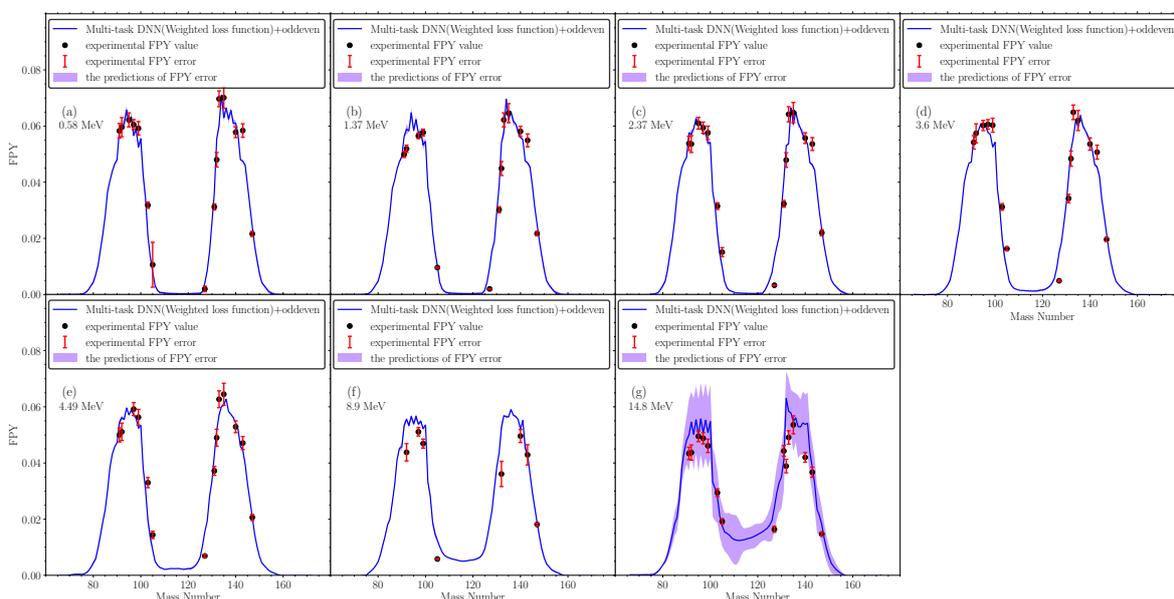


図6: Multi-task DNN (Weighted loss function+odd-even) を使用した ^{235}U の異なる励起エネルギーにおける FPY および FPY エラーの評価結果

トレーニングデータを補充し、ベイズ推論における事前分布と同様の役割を果たす。

FPY 予測において最適な性能を達成する補足データセットを決定するために、JENDL-5 から得られた 0.5 MeV における ^{235}U をテストデータセットとして使用し、異なる補足データセットが予測精度に与える影響を評価した。

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。詳細は表 6 に示されており、「Number of divisions」は 0~14 MeV の範囲を等分した分割数を表し、「quantity」は補足データの量を示し、「energy」は補足データの励起エネルギーを MeV 単位で示してい

る。「total χ^2 」および「peak χ^2 」の意味は、表 1～表 5と一致している。分割数が-と記載されている場合は、トレーニングデータセットに補足データが含まれていないことを示しており、この場合はベースラインとして扱う。

表 6に示されているように、「total χ^2 」および「peak χ^2 」の値は、6 分割の際に最小値を達成している。その結果、6 分割シナリオから得られた 535 個の補足データをトレーニングデータセットに組み込み、不完全な実験的 FPY データを予測するために使用した。

図 6は、weighted loss function と奇偶効果を使用した Multi-task DNN 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 6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」）[35] 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」）[35] 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 6において、特にアクチノイド領域では、weighted loss function と奇偶効果を使用した Multi-task DNN 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、weighted loss function と奇偶効果を使用した Multi-task DNN によるこれらの 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、weighted loss function と奇偶効果を使用した Multi-task DNN が未知の 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、図 6において、weighted loss function と奇偶効果を使用した Multi-task DNN によるこれらの予測は、既知の物理法則 [36, 37] 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。図 6において、weighted loss function と奇偶効果を使用した Multi-task DNN による予測が、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 6は、サブフィギュア (a)~(f) では FPY エラー値が小さい一方で、サブフィギュア (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。サブフィギュア (g) は 14.8 MeV のエネルギーに対応しており、これは図 3および図 5に示されているように、JENDL-5 の FPY エラー値が通常高い 14 MeV に近いので、図 6 の予測は妥当であると考えられる。このことは、weighted loss function と奇偶効果を使用した Multi-task DNN が FPY エラー値の変動パターンを正確に反映できることを示している。

4 まとめ

本論文では、アクチノイド核種の FPY および FPY エラーを学習・予測するための Multi-task DNN の応用を提案した。Multi-task DNN のアーキテクチャは、FPY データとその FPY エラーを相補的に学習し、互いに支援し合うことを可能にする。このため、提案手法は FPY エラー値が FPY 値に依存していることを利用し、FPY の予測精度を向上させる。FPY と FPY エラーを同時に学習することで、それらの依存関係や変動をより効果的に捉えることができる。この革新的なアプローチは、新しい損失関数と奇偶効果を組み込むことで、FPY を予測する際の精度を大幅に向上させるとともに、不確実性の定量化を推定・評価することを可能にする。提案された損失関数と奇偶効果が Multi-task DNN の予測能力を向上させる上で効果的であり、FPY の分布、不確実性の定量化、およびエネルギー依存性に関連する満足のいく成果が得られたことが示された。

本研究では、Multi-task DNN による FPY および FPY エラーの学習・予測能力の向上が示されるとともに、損失関数のさらなる改良が必要であることが明らかになった。今後の課題として、実用的な核応用のための信頼性の高い核分裂データモデルを確立するために、Multi-task DNN アプローチの損失関数を改良していくことが期待される。

5 謝辞

本研究を進めるにあたり、多くの方々から温かいご支援とご助言を賜り、心より感謝申し上げます。特に、研究の遂行において丁寧にご指導くださいました植野真臣先生に深く感謝申し上げます。また、本研究に関する多くの貴重な助言をいただいた博士課程の瀧本 壱真先輩にも厚く御礼申し上げます。

さらに、東京科学大学の千葉敏先生、石塚知香子先生、博士課程の陳敬徳氏に FPY データと FPY エラーデータをご提供いただいただけでなく、研究活動を進める上で多くの有益なご助言を賜り、ここに深く感謝申し上げます。

なお、本研究は文部科学省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」（委託先：東京工業大学）の機械学習研究に関する再委託（電気通信大学）研究の一部として行われました。ここに深く感謝の意を表します。

参考文献

- [1] Lee Bernstein, David Brown, Aaron Hurst, John Kelly, Filip Kondev, Elizabeth McCutchan, Caroline Nesaraja, Rachel Slaybaugh, and Alejandro Sonzogni. Nuclear data needs and capabilities for applications. *arXiv preprint arXiv:1511.07772*, 2015.
- [2] ZG Ge, ZX Zhao, HH Xia, YX Zhuang, TJ Liu, JS Zhang, and HC Wu. the updated version of chinese evaluated nuclear data library (cendl-3.1). *J. Korean Phys. Soc.*, 59(2):1052–1056, 2011.
- [3] Osamu Iwamoto, Nobuyuki Iwamoto, Satoshi Kunieda, Futoshi Minato, Shinsuke Nakayama, Yutaka Abe, Kohsuke Tsubakihara, Shin Okumura, Chikako Ishizuka, Tadashi Yoshida, et al. Japanese evaluated nuclear data library ver. 5: Jendl-5. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 60(1):1–60, 2023.
- [4] Mark B Chadwick, Michal Herman, P Obložinský, Michael E Dunn, Yaron Danon, AC Kahler, Donald L Smith, Boris Pritychenko, Goran Arbanas, R Arcilla, et al. Endf/b-vii. 1 nuclear data for science and technology: cross sections, covariances, fission product yields and decay data. *Nuclear Data Sheets*, 112(12):2887–2996, 2011.

- [5] Joint Evaluated Fission. Fusion (jeff) nuclear data library, 2020.
- [6] Mark B Chadwick, Michal Herman, P Obložinský, Michael E Dunn, Yaron Danon, AC Kahler, Donald L Smith, Boris Pritychenko, Goran Arbanas, R Arcilla, et al. Endf/b-vii. 1 nuclear data for science and technology: cross sections, covariances, fission product yields and decay data. *Nuclear Data Sheets*, 112(12):2887–2996, 2011.
- [7] Karl-Heinz Schmidt and Beatriz Jurado. Review on the progress in nuclear fission – experimental methods and theoretical descriptions. *Reports on Progress in Physics*, 81(10):106301, 2018.
- [8] A Bulgac, P Magierski, KJ Roche, and I Stetcu. Induced fission of ^{240}Pu within a real-time microscopic framework *phys. rev. lett.* 116, 122504, 2016.
- [9] D Regnier, N Dubray, N Schunck, and M Verriere. Fission fragment charge and mass distributions in Pu^{239} (n, f) in the adiabatic nuclear energy density functional theory. *Physical Review C*, 93(5):054611, 2016.
- [10] F. A. Ivanyuk, C. Ishizuka, and S. Chiba. Five-dimensional langevin approach to fission of atomic nuclei. *Phys. Rev. C*, 109:034602, Mar 2024.
- [11] Marc Verriere and Matthew Ryan Mumpower. Improvements to the macroscopic-microscopic approach of nuclear fission. *Phys. Rev. C*, 103:034617, Mar 2021.
- [12] Martin Albertsson, B. Gillis Carlsson, Thomas Døssing, Peter Möller, Jørgen Randrup, and Sven ÅEerg. Calculated fission-fragment mass yields and average total kinetic energies of heavy and superheavy nuclei. *Eur. Phys. J. A.*, 56:46, 2020.
- [13] Kazuki Fujio, Shin Okumura, Chikako Ishizuka, Satoshi Chiba, and Tatsuya Katabuchi. Connection of four-dimensional langevin model and hauser-feshbach theory to describe statistical decay of fission fragments. *J. Nucl. Sci. Tech.*, 61:84–97, 2024.
- [14] Léo Neufcourt, Yuchen Cao, Samuel A Giuliani, Witold Nazarewicz, Erik Olsen, Oleg B Tarasov, et al. Quantified limits of the nuclear landscape. *Physical Review C*, 101(4):044307, 2020.
- [15] R Utama, J Piekarewicz, and H B Prosper. Nuclear mass predictions for the crustal composition of neutron stars: A bayesian neural network approach. *Physical Review C*, 93(1):014311, 2016.
- [16] ZM Niu and HZ Liang. Nuclear mass predictions based on bayesian neural net-

- work approach with pairing and shell effects. *Physics Letters B*, 778:48–53, 2018.
- [17] Di Wu, C L Bai, H Sagawa, and H Q Zhang. Calculation of nuclear charge radii with a trained feed-forward neural network. *Physical Review C*, 102(5):054323, 2020.
- [18] Raditya Utama, Wei-Chia Chen, and Jorge Piekarewicz. Nuclear charge radii: density functional theory meets bayesian neural networks. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 43(11):114002, 2016.
- [19] Yunfei Ma, Chen Su, Jian Liu, Zhongzhou Ren, Chang Xu, and Yonghao Gao. Predictions of nuclear charge radii and physical interpretations based on the naive bayesian probability classifier. *Physical Review C*, 101(1):014304, 2020.
- [20] Chun-Wang Ma, Dan Peng, Hui-Ling Wei, Zhong-Ming Niu, Yu-Ting Wang, and R Wada. Isotopic cross-sections in proton induced spallation reactions based on the bayesian neural network method. *Chinese Physics C*, 44(1):014104, 2020.
- [21] AE Lovell, Filomena M Nunes, Manuel Catacora-Rios, and GB King. Recent advances in the quantification of uncertainties in reaction theory. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 48(1):014001, 2020.
- [22] Denise Neudecker, Oscar Cabellos, Alexander R Clark, Michael J Grosskopf, Wim Haeck, Michal W Herman, Jesson Hutchinson, Toshihiko Kawano, Amy E Lovell, Ionel Stetcu, et al. Informing nuclear physics via machine learning methods with differential and integral experiments. *Physical Review C*, 104(3):034611, 2021.
- [23] Yongjia Wang, Fupeng Li, Qingfeng Li, Hongliang Lü, and Kai Zhou. Finding signatures of the nuclear symmetry energy in heavy-ion collisions with deep learning. *Physics Letters B*, 822:136669, 2021.
- [24] Paulo Bedaque, Amber Boehnlein, Mario Cromaz, Markus Diefenthaler, Latifa Elouadrhiri, Tanja Horn, Michelle Kuchera, David Lawrence, Dean Lee, Steven Lidia, et al. Ai for nuclear physics. *The European Physical Journal A*, 57:1–27, 2021.
- [25] C Y Qiao, J C Pei, Z A Wang, Y Qiang, Y J Chen, N C Shu, and Z G Ge. Bayesian evaluation of charge yields of fission fragments of u 239. *Physical Review C*, 103(3):034621, 2021.
- [26] Zi-Ao Wang, Junchen Pei, Yue Liu, and Yu Qiang. Bayesian evaluation of incomplete fission yields. *Physical Review Letters*, 123(12):122501, 2019.

- [27] Zi-Ao Wang and Junchen Pei. Optimizing multilayer bayesian neural networks for evaluation of fission yields. *Physical Review C*, 104(6):064608, 2021.
- [28] Kohsuke Tsubakihara, Shin Okumura, Chikako Ishizuka, Tadashi Yoshida, and Satoshi Chiba. Evaluation of fission product yields and associated covariance matrices. *J. Nucl. Sci. Tech.*, 58(2):151–165, 2021.
- [29] Jiaqi Ma, Zhe Zhao, Xinyang Yi, Jilin Chen, Lichan Hong, and Ed H Chi. Modeling task relationships in multi-task learning with multi-gate mixture-of-experts. In *Proceedings of the 24th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery & Data Mining*, pages 1930–1939, 2018.
- [30] Yong Zhang, Yuqi Xin, Zhi-wei Liu, Ming Chi, and Guijun Ma. Health status assessment and remaining useful life prediction of aero-engine based on bigru and mmoe. *Reliability Engineering & System Safety*, 220:108263, 2022.
- [31] Yanping Chen, Lele Ren, Hong Xia, Zhongmin Wang, Cong Gao, and Fengwei Wang. A compound fault diagnosis method based on multi-task learning with multi-gate mixture-of-experts. In *2022 14th International Conference on Measuring Technology and Mechatronics Automation (ICMTMA)*, pages 281–285. IEEE, 2022.
- [32] Tong Guan, Jiaheng Peng, and Jun Liang. Spatial-temporal graph multi-gate mixture-of-expert model for traffic prediction. In *2023 IEEE 26th International Conference on Intelligent Transportation Systems (ITSC)*, pages 36–41. IEEE, 2023.
- [33] Karl-Heinz Schmidt and Beatriz Jurado. Review on the progress in nuclear fission – experimental methods and theoretical descriptions. *Reports on Progress in Physics*, 81(10):106301, 2018.
- [34] Jun-ichi Katakura. A systematics of fission product mass yields with 5 gaussian functions. Technical report, Japan Atomic Energy Research Inst., 2003.
- [35] 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.
- [36] Osamu Iwamoto, Nobuyuki Iwamoto, Satoshi Kunieda, Futoshi Minato, Shinsuke Nakayama, Yutaka Abe, Kohsuke Tsubakihara, Shin Okumura, Chikako Ishizuka, Tadashi Yoshida, et al. Japanese evaluated nuclear data library ver. 5:

- Jendl-5. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 60(1):1–60, 2023.
- [37] Ulrich Brosa, Siegfried Grossmann, and Andreas Müller. Nuclear scission. *Physics Reports*, 197(4):167–262, 1990.