



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	ガウス過程回帰と核反応模型を用いた核子-原子核散乱断面積の推定
Author(s)	渡辺, 証斗
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(理学)
Dissertation Number	甲第16251号
Issue Date	2025-03-25
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k16251
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/95335
Type	doctoral thesis
File Information	Shoto_Watanabe.pdf



博士学位論文

ガウス過程回帰と核反応模型を用いた核子－原子核散乱断面
積の推定

Prediction of nucleon-nucleus scattering cross section using a
combination of Gaussian process regression and Nuclear
reaction model

渡辺 証斗

Shoto Watanabe

北海道大学大学院理学院宇宙理学専攻原子核理論研究室

2025 年 3 月

論文要旨

核データは、原子核の構造および反応、壊変関わるデータであり、原子核が反応を起こす確率を表す反応断面積、放射性壊変の半減期、その際に放出される放射線のエネルギーや強度等、原子核に固有の物理的事象に関する情報が該当する。ほぼ全ての安定な核種、および半減期の長い主要な不安定核種に対して、広範囲のエネルギー領域における核データを収容したものが核データベースである。核データベースは様々な科学技術分野で利用されているが、その作成には膨大な人的および時間的コストがかかるという問題がある。近年、機械学習を活用することでそのコスト削減が試みられているが、多くの場合、背景にある物理法則が十分に考慮されておらず、信頼性に問題がある。この問題を解決するため、機械学習による直接的な推定ではなく、核反応モデルを組み合わせることにより、信頼性の高い核データを、コストを抑えて作成することを発想した。この手法を用いれば、核反応理論に基づいた核データを作成できることに加え、核反応モデルにより標的核の粒子数依存性を推定することができることから、実験データが無い反応における断面積の推定を高精度に行う事が期待される。本研究では、検証の対象を核子-原子核散乱の断面積に定め、このアプローチがどれほど有用であるかを確認する。機械学習アルゴリズムを用いて核反応モデルのパラメータの最適化を行い、得られた最適なパラメータを基に、任意の入射エネルギーおよび標的核に対する最適値の推定を行った。推定したパラメータを使用して断面積を計算し、実験値と比較することで、本研究の有用性を示す。

核反応モデルにはチャネル結合光学モデルを採用し、計算プログラムとして CCONE を用いた。また、機械学習アルゴリズムにはガウス過程回帰を採用した。CCONE による計算値が実験値を再現するように、ガウス過程回帰によって光学ポテンシャルのパラメータを最適化および推定するシステムを開発した。断面積の実験値と CCONE による計算値との差異を示す評価関数を導入し、その関数を最小化することで光学ポテンシャルのパラメータの最適値を決定した。この方法で得られたパラメータの最適値を使用することで、実験データを十分に再現する。また、この手法は、様々な入射エネルギーや標的核、入射粒子に対して有効であることを確認した。

次に、同じ標的核と入射粒子を用い、入射エネルギーが異なる実験データに対して最適なパラメータの値を求めた。その後、求めたパラメータの最適値のセットをガウス過程回帰に入力し、任意の入射エネルギーにおけるパラメータの最適値を推定した。この場合に

も、十分な精度で実験値を再現した。同様の方法で、中性子数と入射粒子が同じだが、入射エネルギーと陽子数が異なる反応の実験データから、任意の陽子数および入射エネルギーにおけるパラメータの最適値を推定した。この場合にも、十分な精度で入力として用いていない反応の実験値を再現した。

さらに、入力データの分布に応じて推定結果がどの程度変化するのかを議論した。推定したい反応の条件に近い入力データがある場合には推定精度は高いものの、入力データから大きく異なる反応の推定は、再現性が低く、推定誤差も大きくなる。ただし、データに挟まれ内挿の推定が行われる場合には、推定精度は比較的良好であることがわかった。

以上の結果から、機械学習に入射エネルギーの異なる実験値から求めたパラメータの最適値を入力し、任意の入射エネルギーにおける核子-原子核散乱の断面積を推定する試みが有用であることが示された。標的核が異なる場合でも、陽子数の異なる実験値から求めたパラメータの最適値を入力することで、任意の陽子数を有する標的核における核子-原子核散乱の断面積を推定することも可能であるとわかった。しかし、本研究で議論した手法を用いて実用的な精度で断面積を算出するためには、追加で2点検証すべきことがある。1点目は、任意の中性子数を持つ標的核、任意の入射粒子に対する反応においても、同様の手法でパラメータの推定が可能かどうか、である。この検証はガウス過程回帰が複数入力の推定に対しても有効であり、エネルギー、陽子数の依存性を同時に推定することができたことから、本論文で示した手法で推定可能だと考えられる。2点目は同時に推定するパラメータの数を増やしても推定が可能かどうか、である。本研究では推定対象のパラメータを1つに限定したが、光学ポテンシャルを構成する全てのパラメータを調整しなければ、核データの評価としては不十分である。しかし、本論文で機械学習に使用しているガウス過程回帰は複数の出力には対応していないため、複数出力に対応したガウス過程回帰 (MOGP) を利用するなど、機械学習の手法を改善する必要がある。

Contents

1	背景	1
2	理論的枠組み	4
2.1	チャンネル結合光学模型	4
2.2	複合核過程の記述	9
2.3	ガウス過程回帰とベイズ最適化	10
2.4	数値計算による検証の概要説明	13
3	結果と議論	14
3.1	機械学習によるポテンシャル最適化の過程	14
3.2	機械学習による光学ポテンシャルの推定	16
3.2.1	弾性散乱の角分布データを用いた V_R のエネルギー依存性の 推定	16
3.2.2	より大規模な全断面積データを用いた推定	20
3.3	エネルギー依存性、陽子数依存性の同時推定	28
4	まとめ	41
5	謝辞	43
6	付録	44
6.1	行列の分割と逆行列	44
6.2	多変量ガウス分布の条件付き分布	44
	References	46

Chapter 1

背景

核データは、原子核の構造および反応、壊変関わるデータの総称である [1]。原子核が反応を起こす確率を表す反応断面積のほかにも、放射性壊変の半減期、その際に放出される放射線のエネルギーや強度等、原子核に固有の物理的事象に関する情報が核データに該当する。ほぼ全ての安定な核種および半減期の長い主要な不安定核種に対して、広範なエネルギー領域における核データを収容したライブラリを核データライブラリと呼び、各国それぞれで作成が行われている (日本で作成された JENDL [2]、米国で作成された ENDF [3] が有名である)。核データは、原子炉の設計 [4] [5] はもちろん、星の内部での起きる核融合のシミュレーション [6]、放射線治療施設で発生する放射性核種の見積もり [7] といった、工学、理学、医学をはじめとするさまざまな分野で用いられている。実際に用いられる核データには、用途に合わせたエネルギー範囲や核種に対して、極めて精度の高い核反応情報が集められている。例えば、原子炉の設計には、 $0.001\text{ eV} \sim 10\text{ MeV}$ と 10^{10} のオーダーにわたるエネルギー範囲において、中性子と炉心を構成する陽子数 80 前後の原子核の全断面積、中性子捕獲断面積、核分裂断面積、核分裂生成物の収量、1 回の核分裂当たりに発生する中性子数といったデータが必要となる。一方、恒星での核融合シミュレーションで必要になるのは鉄 (陽子数 26) より軽い核であり、必要とされるエネルギーも、もっぱら数 10 meV から数 10 keV の範囲である。この様に、核データの用途が変われば、必要となるデータの種類、反応する原子核の種類、エネルギー範囲などが変わる。そのため、様々な分野の需要に応じた核データを作成することが求められている。しかし、核データの作成には大きな人的、時間的コストが必要である。膨大な数の実験データを、信頼度や精度評価をもとに取捨選択し、核反応模型を用いた数値計算結果に基づいて専門家がデータの補間、補外を行う必要があるためである [1]。

こうした中、近年のデータサイエンスと機械学習の進展を背景に、核データ生成に機械学習を活用することで、核データの精度向上と作成コストの大幅な削減が期待されている。例えば、機械学習を用いて実験データから生成断面積や核分裂における質量収率を予測するといった試みが行われている [9][10][11][12][13]。多くの先行研究では、実験データを直接機械学習に入力して核データを作成している。生成断面積のエネルギー依存性推定を主目的としたシステムである [9] を例に挙げると、生成断面積を推定したい反応における既知の実験値を機械学習に入力することで、実験値が得られていないエネルギー範囲について、内挿や外挿を行っている。ほかの先行研究でも、推定する物理量と同じ種類の実験データ、あるいは理論値を入力している。機械学習は入力するデータの数に伴い精度が向上することが知られているが、先に上げた手法では推定に使用できるデータの数は限られるため、予測できる核データの種類、範囲が限られ、推定の精度にも上限がある。この傾向は機械学習の推定精度が低くなることが知られている外挿において顕著になることが考えられる。そこで、この課題を解決するために、私は様々な種類の反応断面積を推定する核反応模型に注目した。

核反応模型は核子-原子核反応、あるいは原子核-原子核反応を理論的に計算する模型である。核反応は直接過程と複合核過程の2つの過程に分けることができる ([14] をはじめとした核反応論の文献で紹介されている)。それらを大まかに説明するのが、Figure 1.1 である。Figure 1.1 に描かれた器は核内部のエネルギー準位とその準位を占有している粒子を示している。色の塗られている部分が粒子の占有しているエネルギーである。始め、標的核に粒子が入射された状態は図中 (a) のようになっている。この際、入射粒子が内部の核子と相互作用し、入射粒子は標的核の核子にエネルギーを与え、逆にエネルギーをもらった核子は励起し、もといエネルギー準位に穴が開いた状態になる (図中の (b) のような状態)。直接過程では、このエネルギーのやり取りがほとんど起きず、入射粒子が標的核の作るポテンシャルの影響を受けながら通過する過程として記述することができる。一方、複合核過程では、このエネルギーのやり取りが頻繁に起き、図中の (b)、(c) のような状態を長時間にわたって行き来する。このエネルギーのやり取りが行われる中で、ある核子にたまたまエネルギーが集中すると、核内から飛び出す。直接過程を記述する代表的な模型としては光学模型がある。複合核過程に対しては、特定の始状態から終状態に移行する確率から複合核過程における断面積を算出する統計模型が存在する。

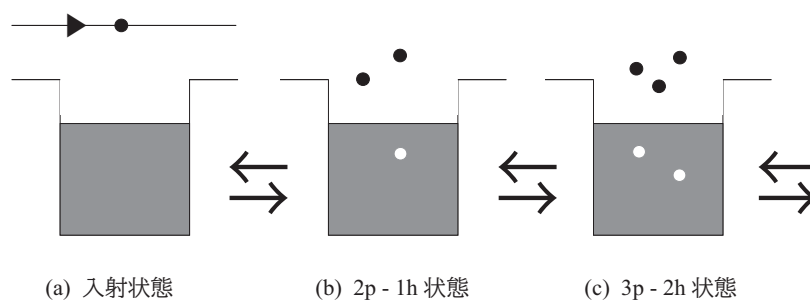


Figure 1.1: 核反応の模式図

機械学習と核反応模型を組み合わせるという観点から、本研究では、チャンネル結合光学模型に含まれる光学ポテンシャルに注目する。チャンネル結合光学模型では、核反応のエネルギー依存性や標的核、入射粒子への依存性といったものを、標的核が作るポテンシャルである光学ポテンシャルで表し、それを構成するパラメータに入射エネルギーや粒子数依存性を持たせることで表現する。そこで、このエネルギー依存性、標的核、入射粒子の依存性を機械学習で推定し、任意の反応における断面積を推定できるのではないかと考えた。機械学習と物理的背景を考慮した核反応モデルを組み合わせることで、物理的に妥当な結果を得るとともに、機械学習に入力するデータが増えることで推定精度の向上が期待できる。加えて、機械学習を用いることで計算コスト、人的コストの削減も期待できる。

本論文では、この方法の有用性を確かめるために、光学ポテンシャルのパラメータを機械学習によって推定することで、核子-原子核散乱の断面積を算出し、実験値と比較した。機械学習の手法としてガウス過程回帰を、核反応模型計算コードとして CCONE [15] を採用し、それらを組み合わせた枠組みを開発した。これを用いて、弾性散乱の角度分布、または全断面積の実験データを再現するように、光学ポテンシャルのパラメータの最適化を行った。また、求めたの最適値を入力として用いて、パラメータのエネルギー、核子数依存性を推定し、任意のエネルギー、任意の標的核における断面積の予測を行った。

本論文では、まず、核反応模型として採用したチャンネル結合模型、及び CCONE 内部で行われている計算、機械学習の手法であるガウス過程回帰とベイズ最適化の概要について解説する。その後、光学ポテンシャルのパラメータを最適化する手法を説明する。次に、得られた最適値をもとにパラメータのエネルギー、核子数依存性を推定し、未知の反応条件に対する断面積を予測した。それを実験データと比較し、この枠組みの有用性を検証する。また、入力するデータの分布が断面積の予測にどのような影響を与えるかも示す。

Chapter 2

理論的枠組み

本研究で提案する手法は散乱断面積を算出する核反応模型と機械学習との2つの要素に分けられる。Section 2.1 では、直接過程における散乱問題の概要とそれを記述するチャンネル結合光学模型について、Section 2.2 では複合核過程とそれを記述する統計模型について解説する。Section 2.3 では、パラメータの最適化に用いるベイズ最適化とパラメータの推定に用いるガウス過程回帰について解説し、Section 2.4 では本研究でそれらをどのように用いて散乱断面積を予測するかを解説する。

2.1 チャンネル結合光学模型

核子-原子核散乱における直接過程を記述するには、標的核が作るポテンシャルによって、入射核子が散乱される様子をシュレディンガー方程式で解けばよい。標的核は、入射された核子のエネルギーを吸収し、励起状態になる場合があるため、散乱の前後で入射核子が持つエネルギーが保存されとは限らない。そのため、核子-原子核散乱の直接過程を計算するためには、核子-原子核間の相互作用を表現するだけでなく、吸収の効果を考慮した複素ポテンシャルを用いる (光学模型)。また、入射した核子を標的核が取り込み複合核を形成することがある (複合核過程)。複合核過程を完全に微視的に記述することは困難なため、統計模型を用いて記述する。

実際の計算には、核反応計算コードの1つである CCONE [15] を用いた。CCONE は、チャンネル結合光学模型計算を行う部分 (CCOM) と、励起子模型による前平衡過程の記述、及び Hauser-Feshbach 統計模型 [16] によって複合核過程を計算をする部分 (CCSM) からなっている。

CCOM で用いられる光学模型は参考文献 [17] に基づいており、標的核の回転励起状態へのチャンネル結合は回転剛体模型によって考慮されている。CCOM では核

子と標的核の相対運動のハミルトニアンは以下のように与えられる。

$$H = H_A + T + V \quad (2.1)$$

ここで、 H_A は標的核のハミルトニアン、 T, V はそれぞれ相対運動の運動エネルギーと光学ポテンシャルである。入射粒子と標的核は各々スピンをもっているため、式 (2.1) の解となる散乱状態の波動関数 Φ は、相対運動の波動関数と入射粒子、標的核の波動関数を角運動量合成して得られる。標的核の固有状態を $\Psi_n (H_A \Psi_n = \epsilon_n \Psi_n$ を満たす)、入射粒子のスピン波動関数を χ_s とし、散乱状態を記述する波動関数 Φ を以下のように部分波展開する。

$$\Phi = \sum_{c,J,M} \phi_c^{JM} r^{-1} f_c^{JM}(r), \quad (2.2)$$

$$\phi_c^{JM} = \left[[i^l Y_l \otimes \chi_s]_j \otimes \Psi_n(I) \right]_{JM} \quad (2.3)$$

c は量子数 n, l, j (n は主量子数, l は軌道角運動量, j は全角運動量) を持つ反応チャネルを表し、 I は標的核のスピン、 f_c はチャネル c における動径波動関数、 Y_l は球面調和関数を表す。また $[\phi_{j_1} \otimes \phi_{j_2}] = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle \phi_{j_1} \phi_{j_2}$ である。式 (2.1) と式 (2.2) から散乱波に対するシュレディンガー方程式は次のように書き下せる。

$$\sum_{c,J,M} \left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_c(l_c+1)}{r^2} + k_c^2 \right) f_c^{JM}(r) \phi_c^{JM} = \sum_{c,J,M} \frac{2mV}{\hbar^2} f_c^{JM}(r) \phi_c^{JM} \quad (2.4)$$

ここで、 l_c は散乱状態の波動関数がもつ軌道角運動量であり、 k_c は反応チャネル c における波数である。特定のチャネル c' に対する動径波動関数 $f_{c'}^{JM}(r)$ を求めるために、式 (2.4) の両辺の左から $\phi_{c'}^{JM*}$ を掛けて角度積分することで、動径成分のシュレディンガー方程式が以下のように得られる。

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_c(l_c+1)}{r^2} + k_c^2 \right) f_c^{JM}(r) = \sum_{c'} \langle \phi_c | V | \phi_{c'} \rangle f_{c'}^{JM}(r) \quad (2.5)$$

式 (2.5) はチャネルごとの連立微分方程式となっており、それらを解くことで $f_c^{JM}(r)$ を求めることができる。

次に、 $f_c^{JM}(r)$ と断面積の関係を示す。以下に示す議論は散乱問題を取り扱う様々な文献 ([18] など) で取り扱われている。球対称ポテンシャル $V(r)$ に粒子が入射し、散乱している状態を考える。散乱の波動関数の無限遠方での様子は、入射粒子が作る平面波と球対称ポテンシャルによって作られた球面波の重ね合わせで書くことができるため。

$$\psi_k(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (2\pi)^{-3/2} \left[\exp(ikz) + \frac{F(\theta)}{r} \exp(ikr) \right] \quad (2.6)$$

ここで $F(\theta)$ は散乱振幅と呼ばれる量である。このとき、入射粒子の単位面積当たりの粒子数は、平面波の確率密度流より

$$N = \frac{v}{(2\pi)^3} \quad (2.7)$$

となる。一方、散乱角方向に散乱される粒子の密度の流れは、式 (2.6) の球面波より、

$$j_k = \frac{v}{(2\pi)^3 r^2} |F(\theta)|^2 \quad (2.8)$$

が成り立つ。これによって、面要素立体角 $d\mathbf{S}$ を垂直に通過する粒子数が求められ、微分散乱断面積 $\sigma(\theta)$ は、

$$\sigma(\theta) d\Omega = \frac{j d\mathbf{S}}{N} = |F(\theta)|^2 d\Omega \quad (2.9)$$

より散乱振幅の 2 乗であるとわかる。このことより、散乱振幅が分かれば断面積を求めることができる。ここで、ポテンシャル $V(r)$ の外側におけるシュレディンガー方程式

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 \right) R(r) = 0 \quad (2.10)$$

の一般解である球面 Hankel 関数を用いると、式 (2.6) は、

$$\psi_k(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{2l+1}{2} \left[\eta_l(k) h_l^{(1)}(\rho) + h_l^{(2)}(\rho) \right] P_l(\cos\theta) \quad (2.11)$$

ここで、 $\rho = kr$ であり、 h_l は球面 Hankel 関数であり、 $P_l(x)$ はルジャンドル多項式である。また、 η_l は展開係数であり、散乱振幅は完全系 $P_l(\cos\theta)$ で展開したときに、係数 η_l を用いて

$$F(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} i^l \frac{(2l+1)}{2ik} [\eta_l(k) - 1] P_l(\cos\theta) \quad (2.12)$$

と書ける。式 (2.11) の動径成分は、球面 Hankel 関数の線形結合で書かれている部分であり、この部分が $f_c^{JM}(r)$ に対応している。球面 Hankel 関数は既知の関数であるため、 $f_c^{JM}(r)$ の具体的な関数が与えられれば係数 η_l を決定することができる。よって、散乱振幅の値を定めることができ、断面積を算出することができる。結果として、 $f_c^{JM}(r)$ が分かれば、断面積を求めることができる。(2.10) では井戸型ポテンシャルのような遠方においてポテンシャルが働かない場合を考えた。しかし、遠方においてもポテンシャルが影響を及ぼすクーロンポテンシャルの場合を考慮し

ても、同様の議論で散乱振幅を決めることができる。クーロンポテンシャル下における動径成分のシュレディンガー方程式として

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{2C_c}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} + 1 \right) \chi_r(\rho) = 0 \quad (2.13)$$

を考える。ここで、 χ_r は $\chi_r = R/r$ をみたす関数とした。 C_c はクーロンポテンシャルの $1/\rho$ にかかる係数であり、標的核の陽子数 Z 、入射粒子の陽子数 Z' 、標的核と入射粒子の相対質量 μ 、高速 c 、微細構造定数 α を用いて $C_c = \frac{ZZ'\alpha c\mu}{\hbar}$ を満たす。式 (2.13) の一般解は coulomb 関数 F_l 、 G_l の線形結合で表すことができる。ここで、 F_l 、 G_l の無限遠方における漸近形は

$$F_l(\rho) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sin\left(\rho - C_c \log 2\rho - \frac{l\pi}{2} + \sigma_l\right) \quad (2.14)$$

$$G_l(\rho) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \cos\left(\rho - C_c \log 2\rho - \frac{l\pi}{2} + \sigma_l\right) \quad (2.15)$$

となる。ただし、 σ_l はガンマ関数を使って、 $\sigma_l = \arg\Gamma(l+1+iC_c)$ を満たす。式 (2.14)、式 (2.15) より、 F_l 、 G_l の線形結合の無限遠方における漸近形は、オイラーの公式を使うことで、 $\exp(i\rho)$ と $\exp(-i\rho)$ の線形結合に書き換えることができる。式 (2.11) は式 (2.6) を $P_l(\cos\theta)$ で展開した解を、Hankel 関数を用いた一般解と比較して係数を決定して求められる。そのため、 $f_c^{JM}(r)$ を満たすような F_l と G_l の線形結合にかかる係数が決まれば、同じような手法を用いて係数 η_l を決定することができる。

係数 η_l が物理的にどのような意味を持つか議論する。球面 Hankel 関数の漸近形は、

$$h_l^{(1)}(\rho) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (-i)^{l+1} \frac{\exp(i\rho)}{\rho} \quad (2.16)$$

$$h_l^{(2)}(\rho) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} (i)^{l+1} \frac{\exp(-i\rho)}{\rho} \quad (2.17)$$

で与えられ、 $h_l^{(1)}(\rho)$ がポテンシャル中心から外側向きの球面波、 $h_l^{(2)}(\rho)$ が内向きの球面波に対応してる。 $h_l^{(1)}(\rho)$ と $h_l^{(2)}(\rho)$ の振幅の絶対値は同じであるため、係数 η_l の絶対値が 1 である場合、式 (2.11) で記述された散乱状態の波動関数は、ポテンシャルを作っている標的核の中に入ってくる粒子と、標的核から出ていく粒子の数が一致している状態に対応する。逆に、係数 η_l の絶対値が 1 よりも小さい場合、標的核の中に入る粒子数に対して、標的核から出ていく粒子の数が少ない状態、つまり入射された粒子の一部が標的核に内部に吸収される状態を表している。この時に、入射する粒子に対する吸収される粒子の割合を透過係数 T と呼び

$$T = 1 - |\eta|^2 \quad (2.18)$$

で算出される。吸収された粒子は標的核とともに一体になり複合核を形成する。そのため、透過係数は複合核を形成する割合を示す係数であり、複合核過程における断面積の計算に用いられる。複合核過程についての詳細は Section 3.2 で行う。

本研究では、核子-原子核散乱の弾性散乱チャネルを記述する光学ポテンシャルとして、論文 [17] で提案されたものを元にした次の関数形を用いる。

$$V(r) = K \left[-V_R U_R(r) + i \left(4W_D a_D \frac{d}{dr} U_D(r) - W_V U_V(r) \right) + V_{Coul}(r) \right] + \left(\frac{\hbar}{m_\pi c} \right)^2 (V_{SO} + iW_{SO}) \frac{1}{r} \frac{d}{dr} U_{SO}(r) \mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.19)$$

ここで、

$$U_i(r) = \frac{1}{1 + \exp\{(r - R_i)/a_i\}}, \quad i = R, D, V, SO, \quad (2.20)$$

$$R_i = r_i A^{1/3} \left(1 + \sum_{l=2,4,\dots} \beta_l Y_{l0}(\hat{r}) \right), \quad i = R, D, V, SO. \quad (2.21)$$

である。各パラメータの添え字、 $R, D, V, SO, Coul$, はそれぞれ、ポテンシャルの実部体積部分、虚部表面部分、虚部体積部分、実部及び虚部のスピン軌道部分、クーロン力部分を示す。また、因子 K は、相対論的運動学の補正項、 $\mathbf{L}$ 、及び $\boldsymbol{\sigma}$ はそれぞれ、相対運動の角運動量、スピンを示す。 $Y_{l0}(\hat{r})$ は球面調和関数を示し、 $\hat{r}$ は物体固定系における角度座標、 β は角運動量 l における変形度を示すパラメータ、 A は標的核の質量を表す。また、式 (2.19) における $V_R, W_D, W_V, V_{SO}, W_{SO}$ は具体的に以下のような形で与えられる。

$$V_R(E) = (V_R^0 + V_R^1 E + V_R^2 E^2 + V_R^3 E^3 + V_R^{DISP} e^{-\lambda_R E}) \times \left[1 + \frac{1}{V_R^0 + V_R^{DISP}} (-1)^{Z'+1} C_{viso} \frac{N-Z}{A} \right] + C_{Coul} \frac{ZZ'}{A^{1/3}} \varphi_{Coul}(E), \quad (2.22)$$

$$\varphi_{Coul} = (\lambda_R V_R^{DISP} e^{-\lambda_R E} - V_R^1 - 2V_R^2 E - 3V_R^3 E^2) \times \left[1 + \frac{1}{V_R^0 + V_R^{DISP}} (-1)^{Z'+1} C_{viso} \frac{N-Z}{A} \right], \quad (2.23)$$

$$W_D(E) = \left[W_D^{DISP} + (-1)^{Z'+1} C_{wiso} \frac{N-Z}{A} \right] e^{-\lambda_D E} \frac{E^2}{E^2 + WID_D^2}, \quad (2.24)$$

$$W_V(E) = W_V^{DISP} \frac{E^2}{E^2 + WID_V^2}, \quad (2.25)$$

$$V_{SO}(E) = V_{SO}^0 \exp^{-\lambda_{SO} E}, \quad (2.26)$$

$$W_{SO}(E) = W_{SO}^{DISP} \frac{E^2}{E^2 + WID_{SO}^2}, \quad (2.27)$$

ここで、 E はフェルミエネルギーに対する入射粒子のエネルギー、 φ_{Coul} はクーロン項のエネルギー依存性、 N, Z, Z' はそれぞれ、標的核の中性子数、陽子数、核子の電荷を表わしている。また、 $V_R^{0,1,2,3,DISP}, \lambda_{R,D}, W_D^{DISP}, WID_D, C_{viso}, C_{Coul}, C_{wiso}$ はパラメータであり、その値は実験データを再現するように調整される。論文 [17] では、1 keV から 200 MeV のエネルギー範囲で、様々な標的核の実験データをフィットすることでこれらのパラメータの値を決定している。

実際の核データ評価では多数のパラメータを同時に決定する。しかし、本研究の目的は機械学習と核反応模型を組み合わせた新しい方法の有効性を検証することであるため、決定するパラメータを少数に限定し、残りのパラメータの値は論文 [17] の Table.6 に示された値を用いた。本研究で最適化と推定を行うパラメータは弾性散乱の角度分布と全断面積に対して感度の大きい、中心力体積項の深さ $V_R(E)$ を選んだ。エネルギー、核子数の依存性を機械学習で直接推定するために、最適化、推定を行う際には、式 (2.22) を入射エネルギー、粒子数に依存しない定数

$$V_R(E) = V_R \quad (2.28)$$

として扱い計算を行った。

2.2 複合核過程の記述

標的核に核子が入射された際に、標的核と一体となって複合核を形成する場合がある。複合核が1度形成された後に崩壊し、粒子を放出する過程を複合核過程という。複合核では、エネルギーを持った粒子を取り込んだことで、多数の核子が励起しほかの核子とエネルギーのやり取りを繰り返す複雑な過程が起こる。この最中に、一部の核子にエネルギーと運動量が集中すると、核内から飛び出す。これが複合核過程のメカニズムである。

複合核過程と Section 2.1 で述べた直接過程には大きな差異がある。直接過程は入射粒子が標的核が作るポテンシャル中を通過するため、反応時間は、入射核子が標的核の半径を通過する時間ほどのスケールである。一方で、複合核過程は、構成する核子がエネルギーと運動量のやり取りを繰り返したのち偶発的に崩壊するため、入射してから放出するまでの時間が $10^3 \sim 10^8$ 倍ほど長い。また、複合核過程で放出される粒子は複合核を形成するいずれかの核子であるため、入射粒子と放出される粒子が同一種とは限らない。このため、複合核過程の記述には光学模型とは別の模型が必要となる。

本研究では、複合核過程を記述するために、Hauser-Feshbach 統計モデルを用いる。

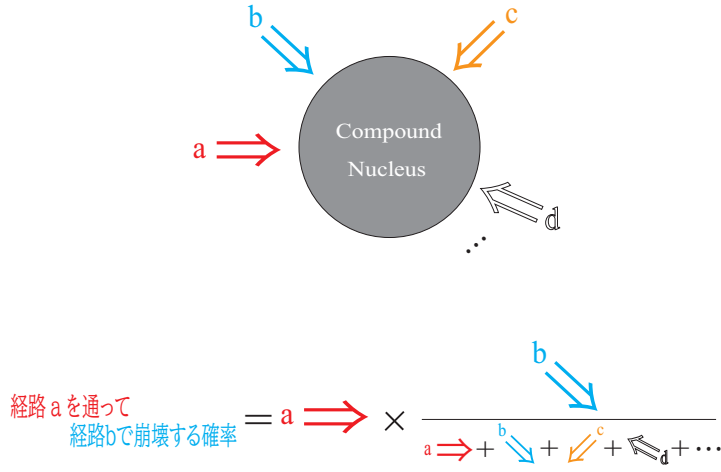


Figure 2.1: Hauser-Feshbach 統計モデルの概念図。図中の矢印は添え字のチャンネルを通して粒子が標的核に吸収、もしくは放出する確率を示す

式 (2.18) で示した通り、入射した粒子のうち散乱されず吸収される割合を透過係数と呼ぶ。透過係数は入射粒子、標的核それぞれがどの励起状態にあるかによって変化する。そのため、特定のチャンネル a における透過係数を T_a と示す。透過係数は始状態と終状態が入れ替わっても同じ値を持つことに留意する。この時、チャンネル a を経由してチャンネル b から崩壊するときの確率は、Figure 2.1 のイメージ図のようにチャンネル a が選ばれる確率に崩壊するすべてのチャンネルの中からチャンネル b が選ばれる確率を掛けることで得られる。複合核断面積は断面積の単位を持つため、断面積の次元を持たせる項とスピン分の縮退分を考慮する項に加え崩壊幅のゆらぎの補正項が必要である。以上のことを考慮した結果、Hauser-Feshbach 統計モデルにおいて複合核断面積は以下のように表わされる。

$$\sigma_{a,b} = \frac{\pi}{k_a^2} \sum_{J^\pi \alpha \beta} g_\alpha^J \frac{T_\alpha^{J^\pi} T_\beta^{J^\pi}}{T^{J^\pi}} W_{\alpha\beta}^{J^\pi}. \quad (2.29)$$

ここで 因子 $T_\alpha^{J^\pi}$ と $T_\beta^{J^\pi}$ は始状態と終状態の透過係数である。中性子の透過係数は CCOM の計算結果から算出され、それ以外の軽い粒子の透過係数は RIPL-3 [19] で記載されているグローバルポテンシャルをもとに計算される。 $W_{\alpha\beta}^{J^\pi}$ は崩壊幅の揺らぎの補正項、 g_α^J はスピン統計因子 $g_\alpha^J \equiv (2J+1)/(2s_a+1)(2I_A+1)$ である。また、 s_a と I_A は入射粒子と標的核のスピンである。

2.3 ガウス過程回帰とベイズ最適化

本研究で提案する手法は、光学ポテンシャルのパラメータを最適化する工程とパラメータのエネルギー、核子数依存性を推定する工程の2つに分けられる。エネ

ルギー、核子数依存性を推定するために、機械学習の手法であるガウス過程を用いた。ガウス過程回帰は回帰問題を解くアルゴリズムの一つであり、関数形を仮定することなく、回帰結果と予測誤差を同時に求められるという特徴を持つ。そのため、光学ポテンシャルのパラメータがエネルギー、核子数に対して複雑に変化していても、高精度な推定を行うことが期待できる。パラメータの最適化を行う際には、ガウス過程回帰に基づくベイズ最適化を用いる。ガウス過程回帰による推定結果をもとに目的関数を最小にするパラメータを予測するのがベイズ最適化である。ガウス過程回帰に関する文献は数多く存在する（[20] など）。本論文ではそれら内容を簡潔に説明する。

ガウス過程とは、ある入力集合 $(x_1, x_2 \dots x_n)$ に対して、対応する出力 $(y_1, y_2 \dots y_n)$ の同時分布 $p(y)$ が多変量のガウス分布に従うことを意味する。ガウス過程回帰ではこれが任意の個数の入力とそれに対応する出力に対して成り立つと仮定する。つまり、 n 次元の入力 $(x_1, x_2 \dots x_n)$ に新しく m 次元の入力 $(x_{n+1}, \dots x_{n+m})$ が加わった場合、それに対応する出力 $(y_1, y_2, \dots y_n), (y_{n+1}, \dots y_{n+m})$ の同時分布は以下のように与えられると考える。

$$p(y, y^* | \theta) = \mathcal{N} \left(\begin{bmatrix} \mu \\ \mu^* \end{bmatrix} \middle| \Sigma(\theta) = \begin{bmatrix} K & K_* \\ K_*^T & K_{**} \end{bmatrix} \right), \quad (2.30)$$

$$(K)_{ij} \equiv k(x_i, x_j), \quad (K_*)_{ij} \equiv k(x_i, x_j^*), \quad (K_{**})_{ij} \equiv k(x_i^*, x_j^*), \quad (2.31)$$

ここで、 $\mathcal{N}$ は多変量ガウス分布である。

$$\mathcal{N}(\mu | \Sigma) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^D \sqrt{|\Sigma|}} \exp \left(-\frac{1}{2} \{ (\mathbf{x} - \mu)^T \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \mu) \} \right) \quad (2.32)$$

θ はカーネル関数のハイパーパラメータであり、 μ, μ^* は出力の確率分布の平均値である。 μ, μ^* それぞれは n 次元、 m 次元のベクトルであり、本研究では $\mu, \mu^* = \mathbf{0}$ とする。また、カーネル関数は任意の 2 点の入力点の間の共分散を示す関数であり、入力点の空間的な距離に対応するものが選ばれる。本研究ではカーネル関数として以下のように定義される動径基底関数カーネルを用いた。

$$k(x_i, x_j) = \theta_1 \exp \left\{ -\frac{\theta_2}{2} \|x_i - x_j\|^2 \right\}, \quad (2.33)$$

ハイパーパラメータ $\theta = (\theta_1, \theta_2)$ はカーネル関数の形状を制御するパラメータである。本研究ではハイパーパラメータの初期値を $\theta_1, \theta_2 = 1$ とした。

n 次元の入力 x は、それまでにサンプリングした入力点に対応し、追加した m 次元の入力 x^* は確率分布を予測したい入力点に対応する。式 (2.30) から入力 x に

おける出力 y が与えられたとき、任意の入力点 x^* における出力の条件付き確率分布は以下のように表される。

$$p(y^*|y) = \mathcal{N}(K_*^T K^{-1} y, K_{**} - K_*^T K^{-1} K_*) \equiv \mathcal{N}(M(x^*), \Sigma^*), \quad (2.34)$$

式 (2.34) の導出は付録にある。この様にして、事前に複数個の入力点をサンプルすることで、任意の入力点における関数の平均値と推定誤差を求めることができる。最後に、条件付き確率が入力データに対して適切になるように、データの入力点における最尤度が最小となるように、ハイパーパラメータの値を最適化する。

ベイズ最適化は式 (2.34) で推定した結果をもとに出力 y の最小値を与える入力 x を求める手法である。ガウス過程回帰で求めた推定結果から、実際の最小値となる点は、予測された平均値が最小である点、あるいは誤差が大きい点であると予想できる。そこで、本研究では、新たなサンプリング点 x_{new} を決定する獲得関数として Lower Confidence Bound(LCB) を用いた。

$$x_{new} = \operatorname{argmin}_{k=n+1, \dots, n+m} (M(x_k^*) - \kappa \sigma_k^*), \quad (2.35)$$

ここで κ は平均値と誤差を評価する重みを調整する係数であり、本研究では $\kappa=2$ とした。また、 σ_k^* は入力 x^* における推定誤差であり、式 (2.34) の Σ^* の $-1/2$ 乗 ($\sigma_k^* = 1/\sqrt{(\Sigma^*)_{kk}}$) である。獲得関数によって決定された入力点を新たにサンプリングし、その結果を入力データとして追加することでガウス過程回帰の予測を更新する。これを繰り返すことで目的関数を最小化する入力点を求める。

一般的に、誤差を持つ実験値との差異を評価する際には、目的関数として χ^2 検定が用いられる。だが、今回の検証で取り扱う弾性散乱の角度分布は、 $10^3 \sim 10^{-1}$ と広い範囲で値を取りうる。実験値との差異の2乗を用いる χ^2 検定では、断面積の値が大きい実験データを重く評価する。そのため、今回の研究では、実験値のスケールに関係なく等しく評価するために、以下のような評価関数を用いた。目的関数には以下で示す評価関数を用いた。

$$f(x) = \frac{1}{N} \sum_i^N \left(\frac{\sigma_{exp}^{(i)}}{\Delta \sigma_{exp}^{(i)}} \log_{10} \frac{\sigma_{th}^{(i)}(x)}{\sigma_{exp}^{(i)}} \right)^2, \quad (2.36)$$

ここで、 σ_{th} は CCONE を用いて計算した断面積、 σ_{exp} と $\Delta \sigma_{exp}$ は実験値とその誤差であり、添え字 i はデータ点を区別するインデックスである。因子 $\sigma_{exp}/\Delta \sigma_{exp}$ によって、誤差の小さい実験データがより重要視される。

2.4 数値計算による検証の概要説明

本研究の目的は、機械学習を用いて光学ポテンシャルのエネルギーや粒子数への依存性を推定し、任意の入射エネルギー、標的核における断面積の推定を行うことである。そのために、次の2つの研究、開発を行った。

1: ベイズ最適化により、実験データを再現する光学ポテンシャルのパラメータの最適値を求める。

ガウス過程回帰を用いて光学ポテンシャルのパラメータの最適値を推定するためには、既存の実験データから光学ポテンシャルのパラメータの最適値を求めておく必要がある。そのため、CCONE の計算値と実験値との差異を、Section 2.3 で述べた評価関数 (式 (2.36)) で表し、その値を最小にするパラメータを、ベイズ最適化を用いて求める。その詳細な手順と有用性については Section 3.1 で議論する

2: 1 で求めた光学ポテンシャルのパラメータの最適値から、任意のエネルギー、陽子数における光学ポテンシャルの最適値を推定する。

1 の手法で獲得したパラメータの最適値から、パラメータが持つ入射エネルギー、陽子数依存性の推定を行う。ガウス過程回帰を用いて、推定したパラメータの値を用いて断面積を計算し、既知の実験値と比較することで、この手法の有用性を示す。また、ガウス過程回帰による推定は、入力データの分布によって異なるため、入力データの分布の変化が推定の精度にどれだけ影響をするかについても検証した。入射エネルギーの依存性を推定した結果、および入力するデータの分布に対する推定の変化を検証した結果を Section 3.2、入射エネルギーに加え陽子数依存性の推定を行った結果を Section 3.3 で述べる。

Chapter 3

結果と議論

3.1 機械学習によるポテンシャル最適化の過程

ここでは前節で説明した手順によって、光学ポテンシャルのパラメータを最適化
する手順を詳しく説明する。例として、7 MeV の中性子と ^{58}Ni 標的の弾性散乱角
度分布を示す実験データ [21] を再現するために、光学ポテンシャルの中心力の強
さ V_R (式 (2.28)) を最適化する例を紹介する。

まず、 V_R の値をランダムに複数とり、その値での断面積と評価関数 (式 (2.36))
を計算する。今回の例では V_R を 3 点選び、それぞれに対して断面積を計算した。
その結果が、Figure 3.1 に示された灰色の実、破線である。この結果から評価関数
の値を求めると、Figure 3.2 (a) の○印のようになる。この 3 点を入力データとし
てガウス過程回帰を行い、評価関数の値を推定した結果が Figure 3.2 (a) の実線と
赤く塗りつぶされた領域である。この結果に、式 (2.35) の獲得関数を適用するこ
とで、次のサンプル点となる V_R の値を決定する。Figure 3.2 (a) の場合では、次
のサンプル点は、(b) に示した●であった。Figure 3.2 の (b) の実線と赤く塗りつ
ぶされた領域は、この新たなサンプル点を加えることで推定した評価関数の値であ
り、予測誤差が減少していることがわかる。

上記の操作を繰り返すことで、評価関数の推定が正確になり、評価関数の値を最
小にする V_R の値を求めることができる。Figure 3.2 の例では、この過程を 4 回繰
り返すと、 V_R の最適値は収束した。こうして得た V_R の最適値を用いた光学ポテ
ンシャルから求めた弾性散乱の角度分布は、Figure 3.1 の赤線のように実験データ
をよく再現する。

この手法は、入射エネルギー、標的核、入射粒子の種類が異なっても有効で
ある。他の実験データに対して同様に V_R の値を求め、弾性散乱断面積の実験デー
タと比較した (Figure 3.3)。Figure 3.3 から分かる通り、この手法を用いること

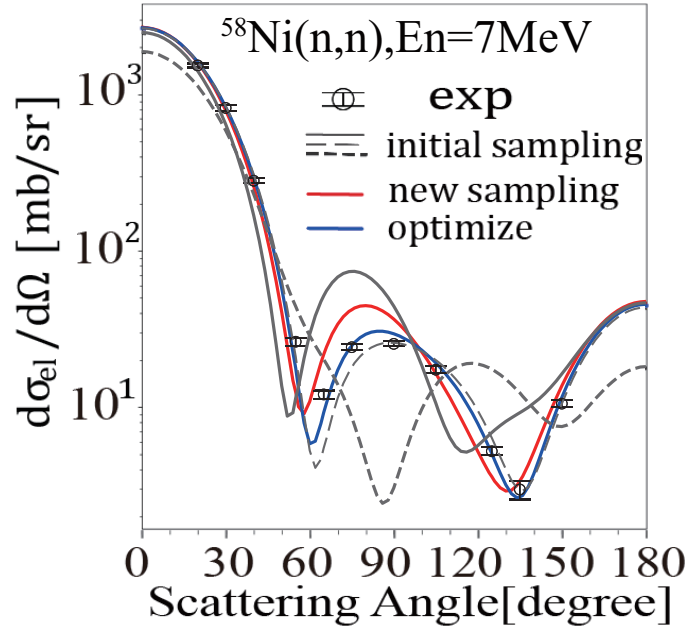


Figure 3.1: 最適化の際に選ばれた V_R の値を用いて計算した 7 MeV の中性子と ^{58}Ni 標的の弾性散乱の角度分布。黒実、破線が最初にランダムに決めた V_R の値、赤実線は Figure 3.2 (b) の●印、青実線は最適化された V_R の値を用いて計算した。

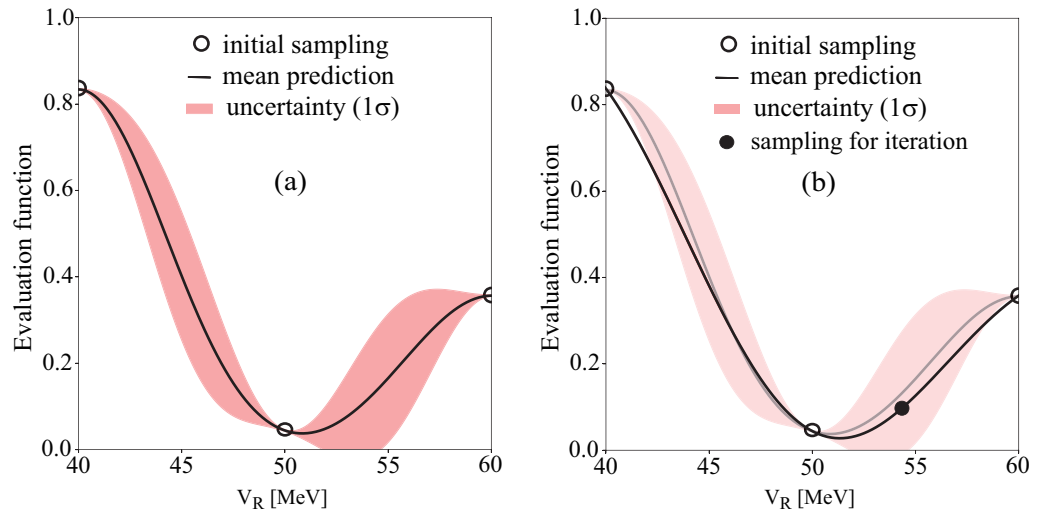


Figure 3.2: 最適化の過程。実線と赤い領域はガウス過程回帰によって推定された評価関数の値と推定誤差。○印は最初にランダムにサンプリングされた 3 つの V_R の値とその時の評価関数の値。●印は最適化の過程でサンプリングされた点。
(a) 初期サンプリングから求めた評価関数の推定値。(b) サンプル点を 1 つ追加し推定した評価関数。

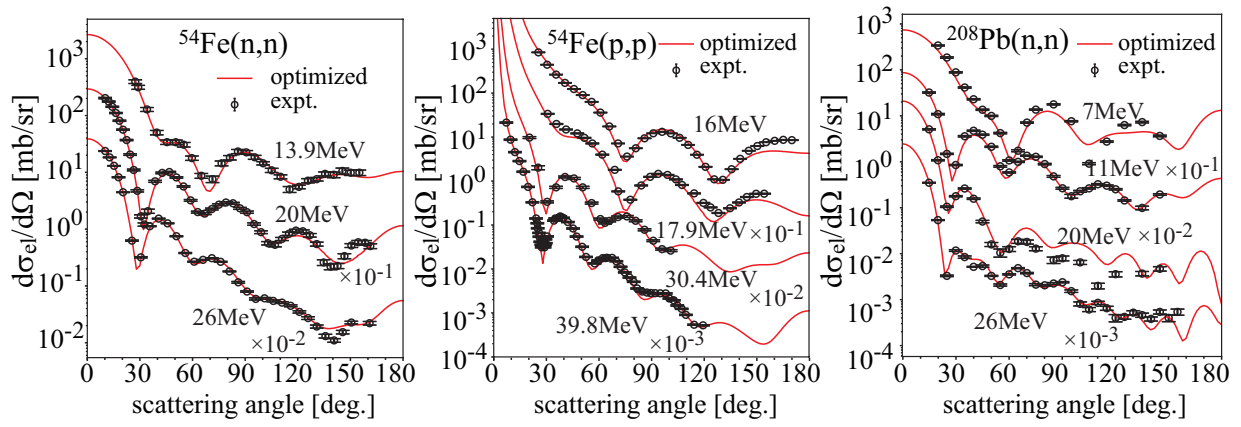


Figure 3.3: 異なる入射エネルギーにおける、中性子- ^{54}Fe 、陽子- ^{54}Fe 、中性子- ^{208}Pb の弾性散乱の角度分布

で、入射エネルギー、標的核、入射粒子の種類が異なっても十分な精度で実験データを再現することができる。一方で、Figure 3.3 内の $^{54}\text{Fe}(\text{p,p})$ の 17.9 MeV や $^{208}\text{Pb}(\text{n,n})$ の 7 MeV の結果で見られる通り、一部の計算結果では、後方角の実験値を再現できていない。これは、評価関数の誤差評価が原因で前方角の再現が優先され、後方角の再現度が落ちたこと、また最適化したパラメータが V_R のみであるためすべてのケースを再現するには、自由度が足りないことなどが原因である。この問題は論文 [17] で示した虚数部のパラメータ W_D や半径 r_R といった、 V_R 以外のパラメータも最適化することで解決が見込める。

3.2 機械学習による光学ポテンシャルの推定

3.2.1 弾性散乱の角分布データを用いた V_R のエネルギー依存性の推定

Section 3.1 では実験データを再現する V_R の最適値を求める方法を説明した。こうして求めた V_R の最適値をガウス過程回帰に入力することで、任意の入射エネルギーにおける V_R の最適値の推定を試みた。検証のため、まず ^{58}Ni の弾性散乱の実験データを異なる入射エネルギーで用意し、それぞれの実験データに対して V_R の最適値を求めた。検証に用いた実験データの入射エネルギーと V_R の最適値は Table. 3.1 にまとめている。

こうして得られた V_R の最適値が Figure 3.4 に示した黒点である。Figure 3.4 には比較のために、論文 [17] で与えられている V_R の推奨値を青破線で示している。Figure 3.4 を見ると、実験値を再現するように最適化して獲得した V_R の値は論文 [17] で与えられている推奨値に近いことが分かる。だが同時に、獲得した V_R

入射エネルギー (MeV)	引用論文	V_R の最適値 (MeV)	内挿	外挿
6	[22]	52.44	○	○
7	[22]	51.38	○	○
7.9	[23]	51.03	-	○
10	[23]	50.25	-	○
12	[23]	49.41	-	○
14	[23]	48.32	○	-
14.7	[24]	48.67	○	-
17	[25]	47.2	○	-
24	[26]	45.89	-	-

Table 3.1: 標的核 ^{58}Ni の弾性散乱角度分布における実験データと V_R の最適値。内挿の欄で○になっているデータは Figure 3.5 の推定で、外挿の欄で○になっているデータは Figure 3.7 の推定においてガウス過程回帰に入力されたデータである。

の最適値は、論文 [17] で与えられている値のようになめらかに減衰しているわけではなく、単調減少する関数の周りを点在している。本研究の手法では誤差を含む実験データ 1 つ 1 つに対し、最もその実験値を再現する V_R の値を求めている。そのため、獲得した V_R の最適値がなめらかに変化する保証はない。ガウス過程回帰による推定精度を評価するために、得られた最適値の中から数点を選び、ガウス過程回帰に入力し、任意の入射エネルギーにおける V_R の最適値を推定する。こうして推定された V_R の最適値を用いて、弾性散乱の角度分布を計算し、入力に用いなかった実験値をどれだけ再現しているかを検証する。

まず最初に、内挿の結果を見るために、Figure 3.5 に示す赤点 [6,7,14,14.7,17 MeV] をガウス過程回帰に入力し、 ^{58}Ni 標的、中性子入射における V_R の最適値を、0~30 MeV の範囲で推定した。こうして推定された V_R の最適値を示したものが Figure 3.5 である。Figure 3.5 の黒線と赤く塗られた領域はそれぞれ、ガウス過程回帰による推定の平均値と推定誤差である。また、Figure 3.5 で示す V_R の推定結果を用いて計算した、 ^{58}Ni 標的、入射エネルギー 12 MeV における中性子入射の弾性散乱角度分布が Figure 3.6 である。Figure 3.6 には比較のために、論文 [17] の推奨値を用いて計算した断面積を青破線で示している。論文 [17] では推奨値を求める際、再現する実験データに 12 MeV [23] の実験値を使用している。Figure 3.6 を見ると、

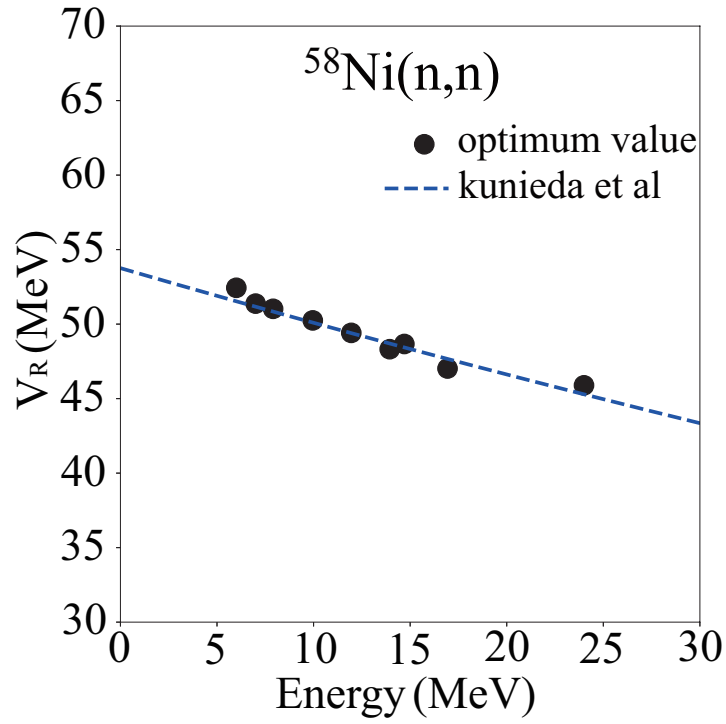


Figure 3.4: ガウス過程回帰を用いて V_R のエネルギー依存性を推定するために用意した V_R の最適値。図中の黒点はいずれも、 ^{58}Ni に中性子を入射したときの弾性散乱の角度分布の実験データを再現するように最適化して求めた。

推定によって計算された断面積は、27 個ある実験データのうち約 2/3 のデータをよく再現していることが分かり、ほぼすべて実験値の誤差範囲に収まっていることが分かる。また、12 MeV での V_R の推定値は論文 [17] の推奨値に近いため、両者の断面積はほぼ一致している。今回の検証では、12 MeV の実験値を最適化して得たデータはガウス過程回帰に与えずに推定を行った。その推定結果として、実験値 [23] を直接評価した論文 [17] の推奨値と極めて近い値を得ることができた。このことから、本研究で提案する手法を用いれば、直接評価しなくても、周囲の入射エネルギーに関する実験データを提供することで、実験値を十分に再現できることが期待される。

次に、外挿の精度を見るために、Figure 3.7 に示した赤点 [6,7,7.9,10,12 MeV] をガウス過程回帰に入力し、 ^{58}Ni 標的、中性子入射における V_R の最適値を、0~30 MeV の範囲で推定した。得られた V_R の推定結果と断面積を示したものが Figure 3.7、Figure 3.8 である。Figure 3.7 を見ると、入射エネルギーが入力したデータから離れるほど、推定誤差は大きくなっていることが分かる。ただし、推定の平均値は Figure 3.5 と比べても大きな差異はない。推定の誤差のみが大きくなった原因は、

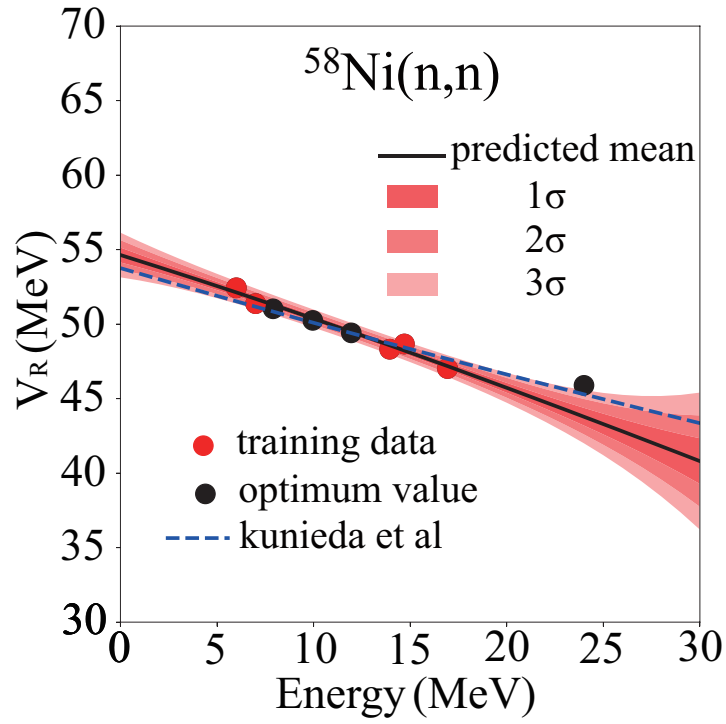


Figure 3.5: ガウス過程回帰による V_R エネルギー依存性の推定結果（内挿）。入力データには図中の赤点を用いた。黒実線はガウス過程回帰の推定の平均値、赤く塗られた領域はガウス過程回帰による推定の誤差値であり、色の濃いものから 1σ 、 2σ 、 3σ

ガウス過程回帰の共分散行列を見ることで理解できる。Figure 3.7 の場合、入力データが 5~12 MeV の範囲に限られているため、12 MeV よりエネルギーが大きくなるほど、式 (2.34) の共分散行列、 $\mathbf{K}_*, \mathbf{K}_*^T$ の各成分が大きくなる。それに伴って、各入射エネルギーの推定誤差が大きくなる。ただし、 V_R の推定値から求めた弾性散乱の角度分布は依然として実験値をよく再現している。ただし、特に後方散乱において、推定誤差に由来する不定性が大きくなっている。弾性散乱の角度分布においては、入射粒子がポテンシャルを受け軌道を変えながら通過する系を考える。後方角に散乱する粒子の方が前方に散乱する粒子と比べて、ポテンシャル内部を動く距離が長くなり、その分ポテンシャルの影響を多く受けることになる。そのため弾性散乱の角度分布においては、 V_R の大きさの違いは後方角に大きく現れることが知られている。後方角に現れたこの不定性は、推定の誤差値が大きくなり、それに伴う V_R の変化が後方角に現れたからだと考えられる。この不定性は推定の不定性が大きくなるに伴い増加するため、さらにエネルギーが大きくなると増加する。以上より、入力データに挟まれた内挿の推定結果と比べて、入力データから離

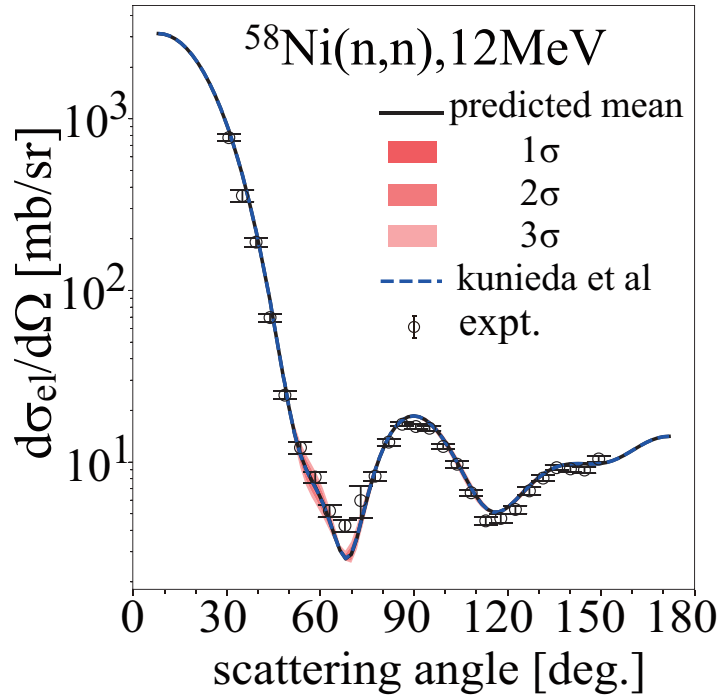


Figure 3.6: Figure 3.5 による V_R の推定を用いて計算した、入射エネルギー 12 MeV における ^{58}Ni 中性子入射の弾性散乱の角度分布。黒実線は推定の平均値を用いて計算した断面積であり、赤く塗られた領域は推定誤差の範囲で角度分布が取りうる領域であり、Figure 3.5 の 12 MeV において赤く塗られた領域に対応している。

れた外挿の推定結果の方が再現度が低い傾向にある。

以上の結果より、パラメータの最適値をガウス過程回帰に入力し V_R の最適値を推定することで、任意のエネルギーにおける断面積をある程度の精度で再現できることがわかった。また、断面積の再現度とガウス過程回帰が与える不確かさは、 V_R の推定結果が内挿か外挿か、与えられた入力データからどれだけ離れているかに影響することがわかった。

3.2.2 より大規模な全断面積データを用いた推定

ガウス過程回帰に入力するデータの違いによる推定の変化をより広いエネルギー範囲で見るために、データが十分に揃っている、 ^{58}Ni に中性子を入射した場合の全断面積の実験データを検討した。用いた実験データは Figure 3.9 に示したものである。これらは論文 [27] で記述されている実験結果のうち、おおよそ 5~200 MeV の範囲のものを取り出しており、さらにデータ点の間隔が約 1 MeV 刻みになるようにデータを間引いてある。まず、ベイズ最適化により、Figure 3.9 に示している

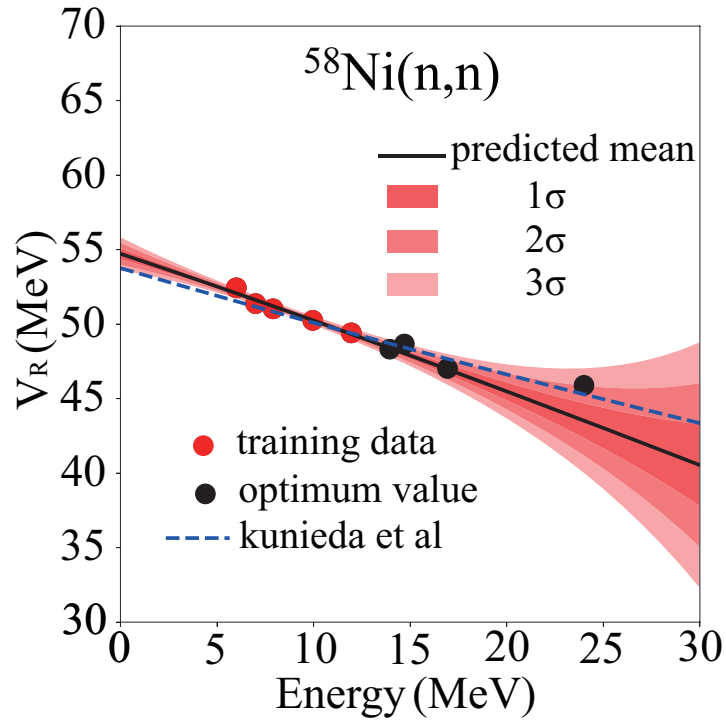


Figure 3.7: ガウス過程回帰による V_R エネルギー依存性の推定結果（外挿）。入力データには図中の赤点を用いた。黒実線はガウス過程回帰の推定の平均値、赤く塗られた領域はガウス過程回帰による推定の誤差値であり、色の濃いものから 1σ 、 2σ 、 3σ

それぞれの実験値に対して V_R の最適値を求めた。その結果は、Figure 3.10 に示している。この V_R の最適値の中から以下で説明するパターンに従い数点を選び、それらをガウス過程回帰の入力として、 ^{58}Ni と中性子の反応に対する V_R の最適値を 0~200 MeV の範囲で推定する。その推定値を用いて入力として用いていないエネルギーでの全断面積を計算し、実験値と比較することで、入力データの選択方法の違いに応じて、予測精度にどの程度影響するのかを検証した。

入力するデータの選び方として、以下の 5 つのパターンを試した。下記に記述するパターンは、Figure 3.11、及び Table 3.2 にもまとめている。

パターン 1: Figure 3.10 の横軸を 20 MeV 間隔で区切り、各区間から 1 点ずつ、合計 10 点をランダムに選ぶ取り方

パターン 2: Figure 3.10 の横軸を 40 MeV 間隔で区切り、各区間から 1 点ずつ、合計 5 点をランダムに選ぶ取り方

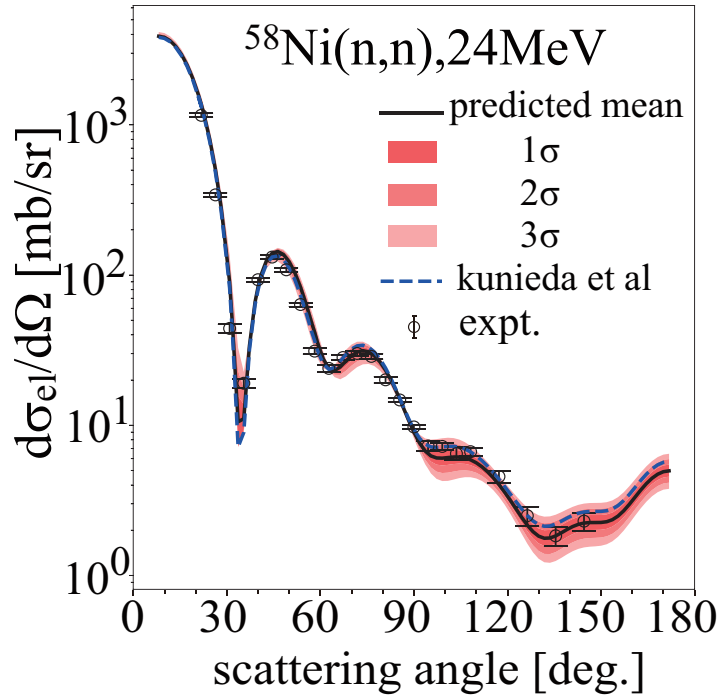


Figure 3.8: Figure 3.7 による V_R の推定を用いて計算した、入射エネルギー 24 MeV における ^{58}Ni 中性子入射の弾性散乱の角度分布。黒実線は推定の平均値を用いて計算した断面積であり、赤く塗られた領域は推定誤差の範囲で角度分布が取りうる領域であり、Figure 3.7 の 24 MeV において赤く塗られた領域に対応している。

パターン 3: Figure 3.10 の横軸を 20 MeV 間隔で区切り、60~200 MeV の各区間から 1 点ずつ、合計 7 点をランダムに選ぶ取り方

パターン 4: Figure 3.10 の横軸を 20 MeV 間隔で区切り、0~60 MeV、及び 120~200 MeV の各区間から 1 点ずつ、合計 7 点をランダムに選ぶ取り方

パターン 5: Figure 3.10 の横軸を 20 MeV 間隔で区切り、0~120 MeV の各区間から 1 点ずつ、合計 6 点をランダムに選ぶ取り方

パターン 1 であれば、0~20 MeV の区間からランダムに 1 点、20~40 MeV の区間からランダムに 1 点、… と入力データを選ぶ。Figure 3.12 内の白抜きの黒点はそのようにして選ばれた入力データの 1 例であり、そのデータをガウス過程回帰に入力して推定した V_R の最適値が Figure 3.12 の赤実線である。この推定値を用いて計算した全断面積が Figure 3.13 に示されている。こうして計算した全断面積と実験値との差異を評価するために、 χ^2 値を計算し、データ数で平均を取った。Figure 3.12 で取った場合の χ^2 値は 3.17 であった。もちろん、入力するデータの選び方が変わると V_R の推定結果と全断面積の計算値、及び χ^2 値は変化する。入

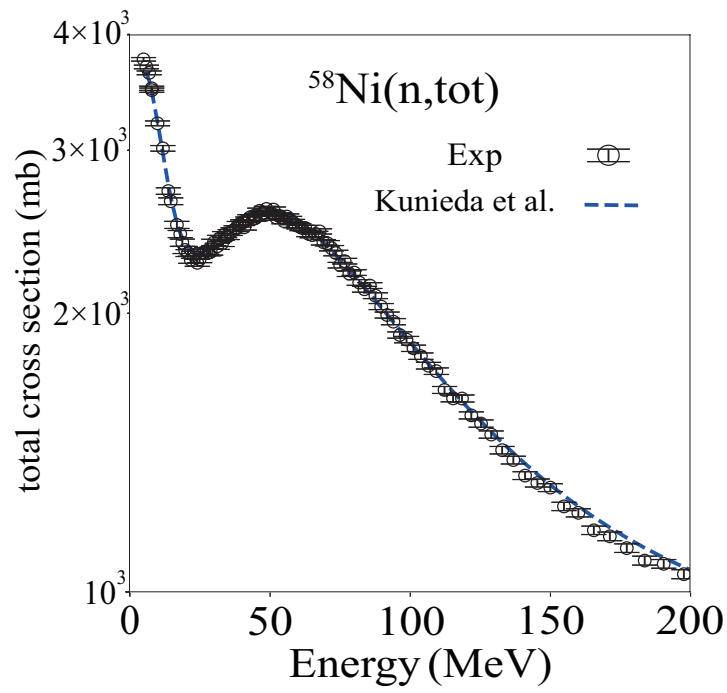


Figure 3.9: 入力データの分布と推定の精度の相関を検証するために用いた実験データ。 ^{58}Ni 、中性子入射の全断面積 [27] からデータ点の間隔が一定になるようにデータ点を抽出した

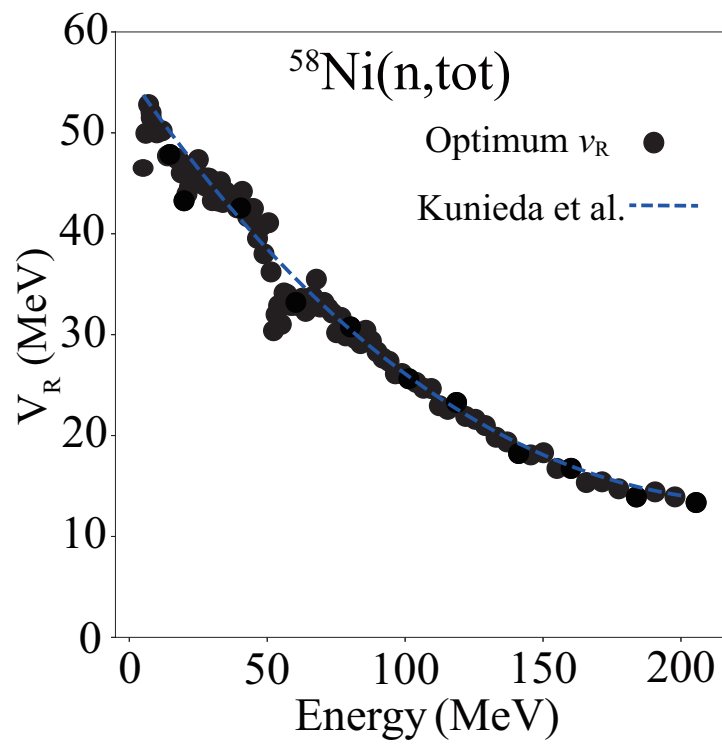


Figure 3.10: Figure 3.9 中の実験値に対する V_R の最適値

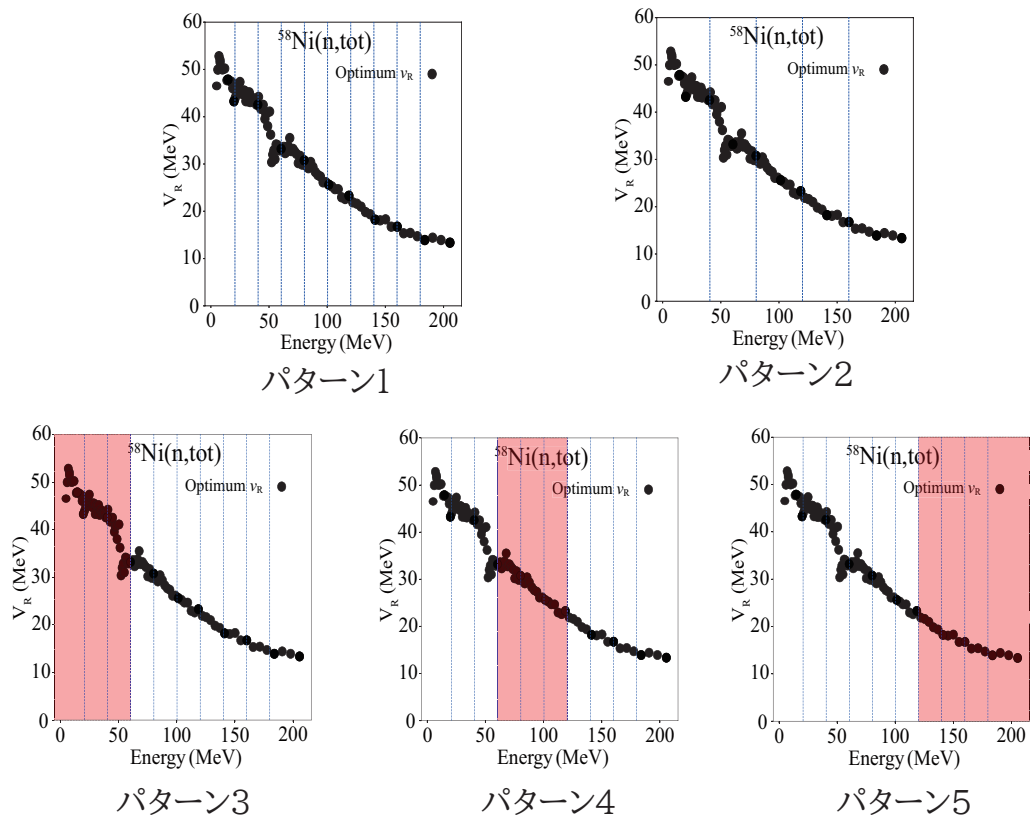


Figure 3.11: パターン 1~5 における点の取り方。点を取る際には図の枠線と青破線で区切られた区間からランダムに 1 点ずつ取る。点を取る際には白く塗られた区間からのみ取る。

力するデータの取り方で推定の仕方がどのように変化するかを見るためには、各パターンにおいて、ランダムにデータ点を取ったときの推定の精度とそのばらつきの傾向を評価する必要がある。そこで、同じ条件で入力データを選ぶ操作を 200 回行い、各サンプルでの χ^2 値を求め、200 回分の平均値と標準偏差を求めた。 χ^2 値の平均値が小さい場合には、推定の精度は高く、標準偏差が小さい場合には、推定の精度は入力データの選ばれ方によらないと言える。200 回分の推定結果とそれに対応する計算値をすべて示したものが、Figure 3.13、および Figure 3.14 である。Figure 3.13 の左の列がパターン 1、右の列がパターン 2 の結果を、Figure 3.14 の左の列がパターン 3、真ん中の列がパターン 4、右の列がパターン 5 の推定結果を示している。また、Figure 3.13、Figure 3.14 の図はどのパターンにおいても 1 番上の図が V_R の推定値、上から 2 番目の図が全断面積の計算値である。また、 V_R の推定値を用いて、全断面積以外に ^{58}Ni と中性子の 7 MeV、24 MeV での弾性散乱角度分布も計算した。つまり、入力データは全断面積だが、同じ光学ポテンシャルを用いて弾性散乱角度分布を記述できるか検証した訳である。その結果は、

Figure 3.13、および Figure 3.14 の下 2 つの図に示している。また、それぞれのパターンにおけるは χ^2 値の 200 回分に対する平均値と標準偏差は Table 3.3 にまとめている。比較のために、論文 [17] の推奨値を使った計算結果も示している。論文 [17] は、7 MeV、24 MeV における角度分布の実験値をパラメータフィッティングに用いているため、実験値をよく再現することは当然であることを留意されたい。

まず、パターン 1 の結果を評価する。そのあと、入力するデータの間隔が離れた場合に推定の結果がどうなるかを評価するために、パターン 2 とパターン 1 の推定結果を比較する。最後に、入力するデータが 1 部の入射エネルギーに偏った場合、推定結果にどう影響するかを評価するために、パターン 3、4、5、とパターン 1 の推定結果をそれぞれ比較する。

Figure 3.13 の左列の上から 2 つ目の図である全断面積のパターン 1 での推定結果は、200 回分すべてが実験値の誤差範囲に収まっていることが見て取れる。今回用いている実験値の誤差は、3~5% の範囲である。よって、200 回分の計算値は大きく見積もっても実験値の誤差 5% に収まる程度の精度で再現が出来ていることが分かる。次に角度分布の再現性について、 χ^2 値を論文 [17] の推奨値と比較して評価する。論文 [17] はパラメータフィッティングに 7 MeV、24 MeV の角度分布を用いているため、Figure 3.13 下 2 つの図中の青波線は実験値をよく再現する。(光学ポテンシャルを構成する数多くのパラメータのうち V_R を動かすだけで再現できる範囲は限られている。論文 [17] における V_R の推奨値は、その条件下において角度分布をよく再現する値であるといえる。) 24 MeV における χ^2 値は論文 [17] の推奨値に近いことが分かる。今回の検証では入力するデータに全断面積に関するデータしか与えていないが、ほとんどの推定結果において、弾性散乱角度分布を再現する論文 [17] と同等の精度で実験値を再現することができた。このことより、全断面積の実験データから弾性散乱の角度分布を十分な精度で推定ができることが示された。一方で、7 MeV の方は、論文 [17] における χ^2 値の 4 倍ほどまで大きくなっている。これは、20 MeV 間隔でデータを取ったため、7 MeV よりも低い入射エネルギーでのデータが入力として選ばれない場合が多く発生し、7 MeV における V_R の推定が外挿になったためである。それに対して 24 MeV の場合は 20 MeV 以下の領域に入力データが必ず 1 点あるため、内挿的になる。そのため、今回の条件では 7 MeV における角度分布の推定精度が低くなる。

次に、パターン 2 と 1 の推定結果を比較し、入力データの間隔が広がった場合における推定の変化を確認する。Figure 3.13 の右列には、パターン 2 の推定の結果を示している。 V_R の推定結果と全断面積を示した Figure 3.13 の上から 1 番目、2 番目の図を比較すると、パターン 2 はパターン 1 よりも推定結果のばらつきが大きくなっていることが分かる。このばらつきは 40 MeV 以下、あるいは 160 MeV 以上の領域において特に大きくなっている。これは、入力データを取る間隔が広がり、最もエネルギーが高い区間と低い区間が広がったためである。これにより外挿となるエネルギー領域が拡大し、推定のばらつきが大きくなったと考えられる。一方でパターン 2 はパターン 1 と比較すると、40~160 MeV の範囲では、 V_R の推定結果と全断面積のばらつきが全てのエネルギーにおいて同程度である。外挿を除くと、推定のばらつきが大きくなるのは、入力データをすべてのエネルギー区間から取っているためである。推定の精度とばらつきを評価するために χ^2 値の平均値と標準偏差をパターン 1 と比較する (Table 3.3) パターン 2 はパターン 1 と比べて、全断面積、角度分布すべてにおいて、平均値、標準偏差ともに大きくなった。

続いて角度分布について評価する。Table 3.3 の角度分布における χ^2 値の平均値と標準偏差を見ると、パターン 2 の値はパターン 1 のもの比べて、7 MeV、24 MeV のいずれもが大きくなっているが、その増加量はデータの種類によって異なる。特徴的なのが、24 MeV の標準偏差の増加である。パターン 2 における 7 MeV の角度分布での標準偏差はパターン 1 の約 2.5 倍であるが、24 MeV に関しては 4 倍以上大きくなっている。一方で、 χ^2 値の平均値は 7 MeV の方は 2 倍ほどまで大きくなっているが、24 MeV の場合は、1.2~1.3 倍程度に収まっている。このことより、24 MeV の角度分布は χ^2 の平均値はほぼ変化しておらず、標準偏差だけが大きくなったことが理解できる。実際に、Figure 3.13 の 1 番上の V_R の推定結果を 24 MeV 付近で見ると、赤い線の束の中心はパターン 1、2 ともに青破線のあたりに来るが、パターン 2 はパターン 1 よりもばらつきが大きくなっている。これはパターン 2 の 24 MeV において、外挿による推定が増えたためである。一方で、入力するデータの取り方次第ではパターン 2 でも内挿となる場合がある。そのため、パターン 2 において V_R の平均値が大きく変動しなかったと考えられる。さらに、外挿であっても、24 MeV に近いエネルギーが入力に用いられた場合には、実験値をよく再現する。これらの事より、24 MeV における χ^2 値の平均値は、入力データを取るエネルギーの間隔が広がってもあまり変わらなかったのに、標準偏差は大きくなったと考えられる。

パターン 1 と 2 を比較した結果をまとめると、入力データ点の間隔が大きくなると、外挿になるケースが増えることに加え、内挿するエネルギーが広くなり実験値を再現できない確率も高くなることから、推定のばらつきが大きくなる。一方で、外挿となる低、高エネルギー領域を除くと、精度の劣化やばらつきはエネルギーによらず一様に増加しており、特定のエネルギーだけ精度が大きく変化するということはなかった。

次に、入力データの偏りが推定の結果にどう影響するかを評価するために、パターン 3、4、5、及びパターン 1 を比較する。Figure 3.14 の 3 列の上 2 つの図 (V_R の推定結果と全断面積)を確認すると、いずれのパターンでも入力データ点がないエネルギー領域における推定が大きくばらついていることが分かる。パターン 3 とパターン 5 は、パターン 4 と比べてばらつきが大きいことが分かる。このことは Table 3.3 の全断面積の標準偏差を見ることでも確認できる。パターン 3 と 5 の全断面積における χ^2 の平均値はパターン 1 の比較しても 20 倍近く大きくなっている。一方で、パターン 4 の χ^2 の平均値はパターン 1 と 3 倍程度に収まっている。この傾向は標準偏差でも同様であり、パターン 3 と 5 の標準偏差は、パターン 1 の 20 倍以上、パターン 4 はパターン 1 の 5 倍程度に収まっている。これは、パターン 4 の推定が内挿になっていることが原因だと考えられる。

次に角度分布の計算結果について評価する。Figure 3.14 の 3 列の下 2 つの図を見ると、パターン 3 の 7 MeV、24 MeV における角度分布はパターン 4、5 の推定結果と比べてばらつきが非常に大きいことが分かる。Table 3.3 を見ると、パターン 3 における χ^2 の平均値と標準偏差はパターン 4、5 のものと比べて、 χ^2 値が 10 倍、標準偏差が 6 倍以上と非常に大きくなっている。一方で、パターン 4、5 の χ^2 値の平均値、標準偏差は非常に小さく、大きいものでもパターン 1 の 1.5 倍程度に収まっている。これは、7、24 MeV の角度分布を計算する際に参照する 0~40 MeV において、ガウス過程回帰に与えられるデータがパターン 1 とパターン 4、5 で同じだからである。逆に、パターン 3 において角度分布の χ^2 値の平均値、標準偏差が大きいのは、0~40 MeV の範囲においてデータを入力できておらず、推定値がすべて外挿から来たものだからである。

以上のことをまとめると、推定の精度は、推定を行うエネルギー付近に入力データがあるか、ない場合は最も近い入力データがどれだけ離れているかに依存する。精度の良い推定を行うためには、まんべんなくすべてのエネルギーにおいてデータ

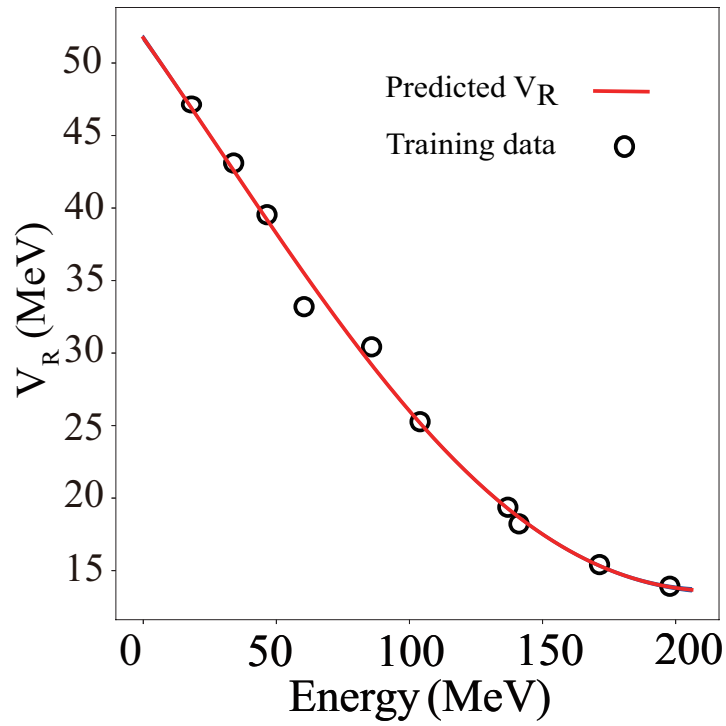


Figure 3.12: Figure 3.10 中のデータ点から、パターン 1 の取り方で選ばれた入力データの 1 例、及びそれをガウス過程回帰に入力して推定した V_R の最適値。白抜き黒点の黒点を選ばれたデータ点であり、赤実線がガウス過程回帰の推定の平均値である。また、ガウス過程回帰の推定誤差も図中には記述しているが、このデータの取り方では誤差が小さく目視できない。

を入力する必要がある。また、もしも推定を行うエネルギー付近にデータがない場合も、より高エネルギー、及びより低エネルギーにおいてデータが与えられてる場合、推定が内挿的になり精度が比較的向上する。また、入力データがない、もしくはデータの間隔が大きくなると、入力データの選択により推定がばらつく。このため、精度の良い推定を行うためには、細かい間隔でデータを取ることが望ましい。ここで述べた傾向は、 ^{89}Y 中性子入射の全断面積についてもいえる (Table 3.4)。

3.3 エネルギー依存性、陽子数依存性の同時推定

Section 3.2 では、ガウス過程回帰を用いて光学ポテンシャルのパラメータを持つ入射エネルギー依存性を推定し、任意の入射エネルギーにおける断面積を求めた。光学ポテンシャルは、Section 2.1 でも述べた通り、入射エネルギー依存性の他に、核子数依存性も持っている。そのため、精度の高い核データベースを作成す

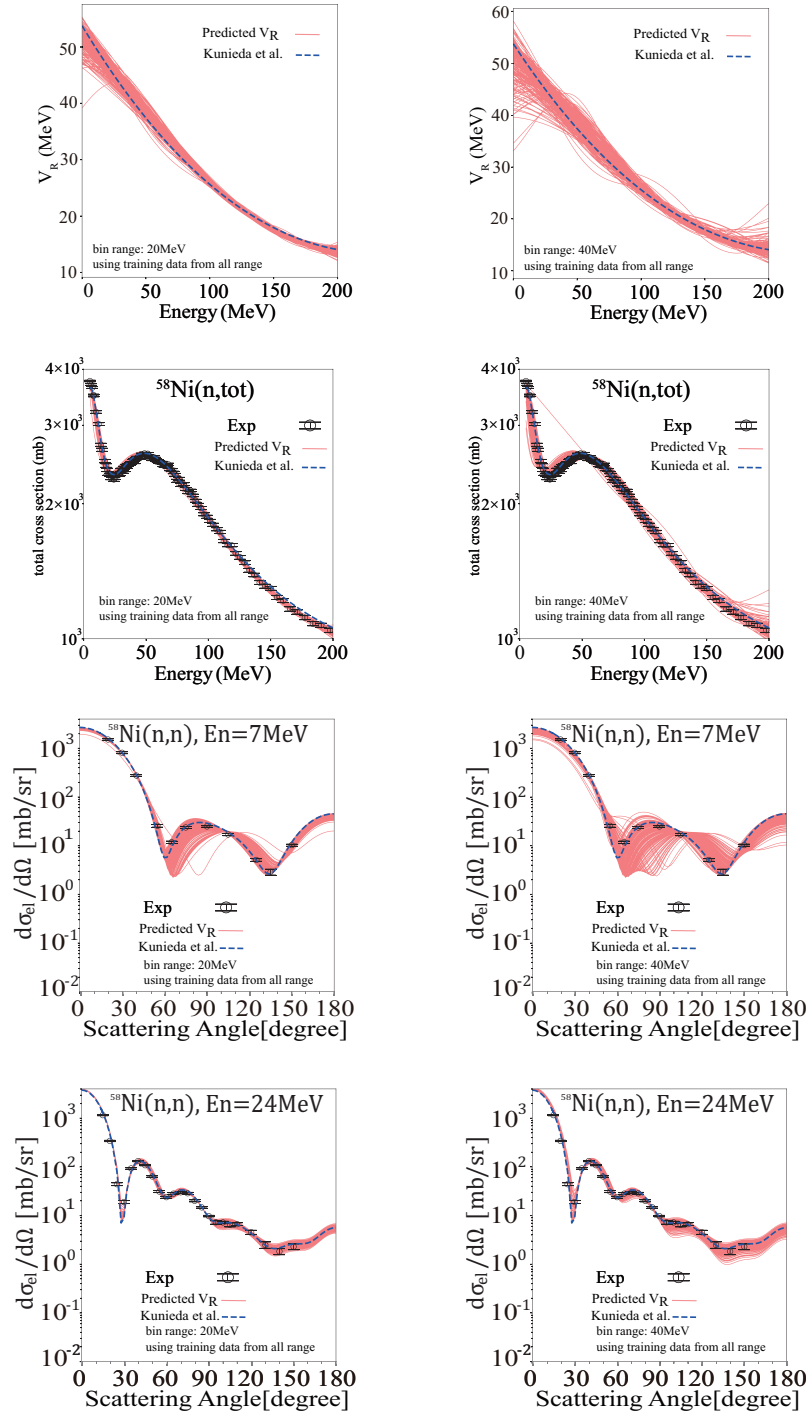


Figure 3.13: Figure 3.10 中のデータ点からガウス過程回帰に入力するデータを選んだ時の V_R の推定結果 (1 番上) と、推定結果に対応する全断面積 (上から 2 番目)、及び弾性散乱の角度分布 (下 2 つ)。左側の列はパターン 1 の取り方、右側の列はパターン 2 の取り方で入力データを選んだ結果。図中には入力データを選び断面積を計算する操作を 200 回行った結果をすべて記載している。図中にはガウス過程回帰の推定の平均値、及び平均値を用いて計算した断面積のみを記載している。

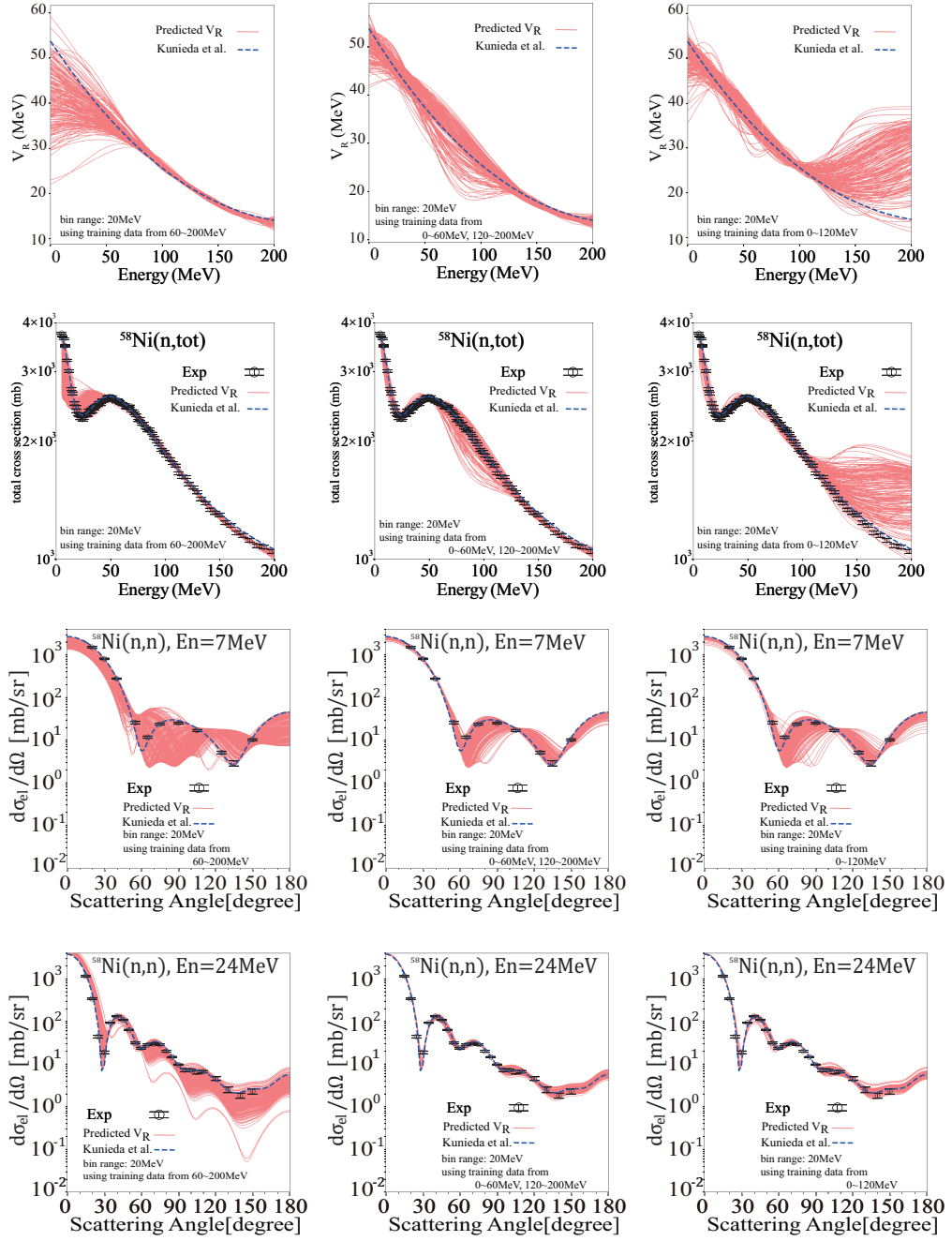


Figure 3.14: Figure 3.10 中のデータ点からガウス過程回帰に入力するデータを選んだ時の V_R の推定結果（1 番上）と、推定結果に対応する全断面積（上から 2 番目）、及び弾性散乱の角度分布（下 2 つ）。左側の列はパターン 3、真ん中の列はパターン 4、右側の列はパターン 5 の選び方で入力データ点を選んだ結果。図中には入力データを選び断面積を計算する操作を 200 回行った結果をすべて記載している。図中にはガウス過程回帰の推定の平均値、及び平均値を用いて計算した断面積のみを記載している。

	エネルギー領域を区切る間隔	データ点を取るエネルギー領域	入力するデータ点の数
パターン 1	20 MeV	0~200 MeV	10
パターン 2	40 MeV	0~200 MeV	5
パターン 3	20 MeV	60~200 MeV	7
パターン 4	20 MeV	0~60 MeV、及び 120~200 MeV	7
パターン 5	20 MeV	0~120 MeV	6

Table 3.2: Section 3.2.2 の検証におけるデータ点の取り方

	$^{58}\text{Ni}(\text{n},\text{total})$		$^{58}\text{Ni}(\text{n},\text{elastic}), 7 \text{ MeV}$		$^{58}\text{Ni}(\text{n},\text{elastic}), 24 \text{ MeV}$	
	$\bar{\chi}^2$	STD	$\bar{\chi}^2$	STD	$\bar{\chi}^2$	STD
論文 [17]	3.98	-	8.83	-	24.29	-
パターン 1	5.76	4.81	31.16	29.82	27.47	5.23
パターン 2	14.14	20.78	66.04	78.66	35.12	22.73
パターン 3	91.35	76.6	313.8	185.4	255	275
パターン 4	18.17	25.97	39.31	38.5	27.97	6.17
パターン 5	133.58	107.54	46.27	49.59	28.3	8.41

Table 3.3: 標的核 ^{58}Ni の全断面積における実験値を対象とした検証結果のまとめ。
各パターンにおける入力データ点の取り方は Table 3.2 に記載

	$^{89}\text{Y}(\text{n},\text{total})$		$^{89}\text{Y}(\text{n},\text{elastic}), 7.75 \text{ MeV}$		$^{89}\text{Y}(\text{n},\text{elastic}), 21.6 \text{ MeV}$	
	$\bar{\chi}^2$	STD	$\bar{\chi}^2$	STD	$\bar{\chi}^2$	STD
論文 [17]	9.45	-	3.9	-	13.85	-
パターン 1	7.64	3.67	5.53	1.75	22.19	14
パターン 2	16.22	12.93	8.2	5.56	31.1	25.89
パターン 3	238.99	139.09	38.18	12.52	427.56	138.58
パターン 4	10.79	5.53	6.18	2.26	20.81	25.25
パターン 5	718.8	659.41	6.76	2.12	24.86	21.21

Table 3.4: 標的核 ^{89}Y の全断面積における実験値を対象とした検証結果まとめ。各
パターンにおける入力データ点の取り方は Table 3.2 に記載

るためには、核子依存性も推定する必要がある。ガウス過程回帰に入力するデータの入力 (Section 2.3 で紹介したガウス過程回帰に与えるデータの n 次元の入力) は複数の変数に対しても有効である。そのため、入力情報を入射エネルギーと核子数にすることで、光学ポテンシャルのエネルギー依存性、核子数依存性を同時に推定することができる。この章では光学ポテンシャルのエネルギー依存性、核子数依存性の同時推定を試みた検証結果を示す。

検証の対象には、実験値が十分に揃っており、標的核の中性子が同じ実験データとして、 ^{48}Ca 、 ^{50}Ti 、 ^{51}V 、 ^{52}Cr 、 ^{54}Fe (すべて中性子数が 28) を選んだ。また、広いエネルギー範囲において推定を行うために陽子入射の弾性散乱角度分布を採用した。実験データを再現する V_R の最適値をすべて示したものが Figure 3.15 である。これらの最適値と用いた実験データは Table 3.5 にまとめている。

まず、入射エネルギーと核子数依存性の推定が可能かどうかを検証する。 ^{48}Ca を除くすべて標的核 ($Z=22\sim 26$) の最適値をガウス過程回帰に入力し、 V_R の最適値を、入射エネルギー 0~200 MeV、陽子数 20~26 の範囲で推定した。その結果を 3 次元平面図で示したのが Figure 3.16 である。Figure 3.16 内の色塗りされた平面の高さはガウス過程回帰による V_R の推定の平均値を示し、平面の色は推定の誤差を示している。Figure 3.16 から、入力データがある核子数、入射エネルギーの領域では、平面図が入力データを通るように推定されている。また、エネルギーの値が入力データから離れるに伴い推定の誤差が増加するという、前 Section 3.2 で議論したものと同じ傾向が確認できる。

次に、Figure 3.16 の ^{48}Ca (陽子数が 20) における推定結果に注目する。 ^{48}Ca に対するエネルギー依存性の推定結果のみを描画したのが Figure 3.17 である。Figure 3.17 の推定結果を見ると、Figure 3.4 の青破線で示した単調減少と似た振る舞いをしていることが分かる。これは、論文 [17] で示されている V_R の関数形 (式 (2.22)) より、陽子数が変化しても入射エネルギーに対する V_R の振る舞いは変化しないことから理解できる。こうして推定した V_R の最適値を用いて計算した ^{48}Ca 標的の 65 MeV における陽子散乱の角分布が Figure 3.18 である。Figure 3.18 から、 V_R の推定値を用いて計算した断面積は、22 個のある実験値の 4/5 以上のデータよく再現できていることが分かる。Figure 3.18 の推定結果は ^{48}Ca 標的のデータを入力していないにもかかわらず、十分な精度で推定ができている。このことから、本研究の手法はエネルギー依存性、陽子数依存性の複数の依存性の同時推定に対しても有効であることが確認できた。

標的核	陽子数	入射エネルギー (MeV)	引用論文	V_R の最適値 (MeV)
^{48}Ca	20	9	[28]	55.04
^{48}Ca	20	12	[28]	56.36
^{48}Ca	20	14	[29]	53.76
^{48}Ca	20	15	[29]	52.36
^{48}Ca	20	15.6	[29]	53.54
^{48}Ca	20	21	[30]	51.81
^{48}Ca	20	25	[30]	50.1
^{48}Ca	20	30	[30]	49.57
^{48}Ca	20	35	[30]	46.92
^{48}Ca	20	40	[30]	44.80
^{48}Ca	20	45	[30]	43.77
^{48}Ca	20	48.4	[30]	41.75
^{48}Ca	20	65	[31]	37.06
^{50}Ti	22	11	[32]	53.16
^{50}Ti	22	14.2	[33]	50.18
^{50}Ti	22	15.4	[33]	51.17
^{50}Ti	22	16	[34]	52.1
^{50}Ti	22	18	[32]	51.83
^{50}Ti	22	18.2	[35]	48.56
^{50}Ti	22	18.6	[36]	50.99
^{50}Ti	22	65	[37]	36.44
^{50}Ti	22	100	[38]	25.96
^{51}V	23	5.96	[39]	55.99
^{51}V	23	7.5	[40]	55.43
^{51}V	23	10.8	[33]	54.44
^{51}V	23	11	[41]	54.07
^{51}V	23	15.2	[33]	52.08

^{51}V	23	17.5	[42]	50.95
^{52}Cr	24	5.8	[43]	51.83
^{52}Cr	24	5.96	[43]	58.65
^{52}Cr	24	6	[44]	44.09
^{52}Cr	24	6.1	[43]	54.85
^{52}Cr	24	6.8	[45]	50.07
^{52}Cr	24	10.77	[29]	53.38
^{52}Cr	24	11	[41]	53.49
^{52}Cr	24	15.35	[29]	52.50
^{52}Cr	24	17.5	[42]	49.81
^{52}Cr	24	18.6	[36]	50.8
^{52}Cr	24	24	[46]	47.63
^{52}Cr	24	65	[47]	38.13
^{54}Fe	26	3.73	[48]	56.28
^{54}Fe	26	4.95	[48]	64.58
^{54}Fe	26	5.55	[49]	55.96
^{54}Fe	26	5.95	[49]	51.8
^{54}Fe	26	6	[50]	56.28
^{54}Fe	26	6.06	[48]	64.52
^{54}Fe	26	6.16	[49]	57.8
^{54}Fe	26	7.74	[48]	56.28
^{54}Fe	26	9.69	[51]	51.45
^{54}Fe	26	10	[52]	49.89
^{54}Fe	26	10.8	[33]	52.38
^{54}Fe	26	12	[54]	54.28
^{54}Fe	26	15.1	[33]	54.04
^{54}Fe	26	16	[55]	51.55
^{54}Fe	26	17.2	[56]	52.51
^{54}Fe	26	17.9	[35]	48.3
^{54}Fe	26	18.6	[36]	49.57
^{54}Fe	26	19.6	[57]	51.31

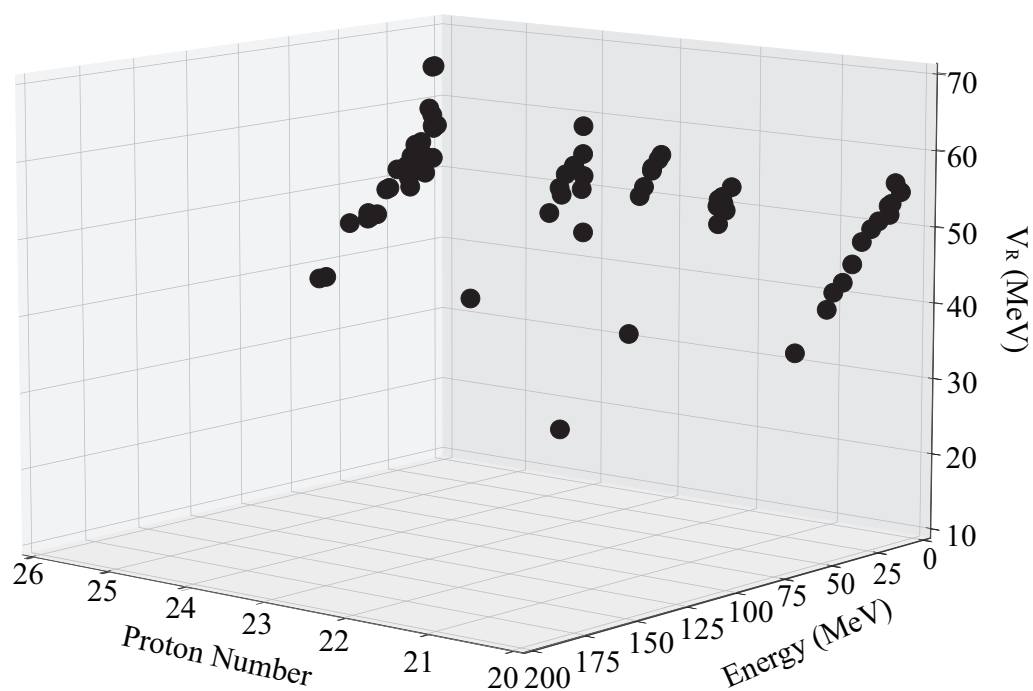


Figure 3.15: 中性子数が28、陽子数が20～26の陽子入射における実験データを再現するように最適化した V_R の値。再現の対象とした実験データは Table 3.5 に記載している。

^{54}Fe	26	20.4	[56]	50.98
^{54}Fe	26	24.6	[56]	51.03
^{54}Fe	26	28.8	[58]	48.65
^{54}Fe	26	30.4	[59]	48.5
^{54}Fe	26	35.2	[60]	45.29
^{54}Fe	26	38.8	[58]	45.06
^{54}Fe	26	39.8	[61]	45.68
^{54}Fe	26	40	[62]	44.91
^{54}Fe	26	49.4	[63]	44.75
^{54}Fe	26	61.5	[58]	37.94
^{54}Fe	26	65	[31]	37.9

Table 3.5: 陽子数依存性の推定に用いた、中性子数28、陽子入射の弾性散乱の角度分布の実験データと、実験データを再現するように最適化した V_R の値

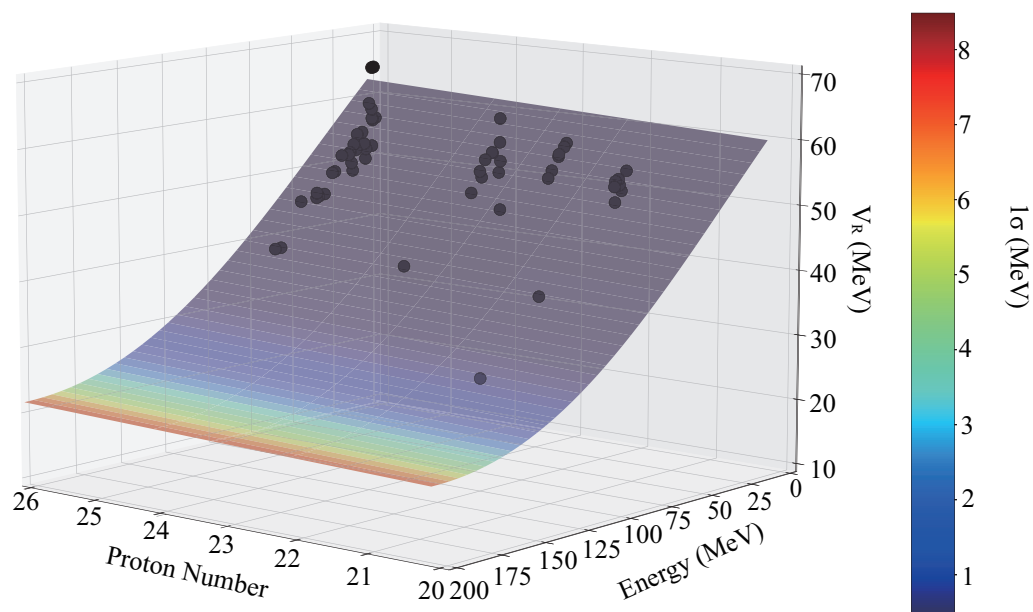


Figure 3.16: ガウス過程回帰に陽子数 22~26 のデータを入力して求めた、中性子数 28、陽子数 20~26 の標的核、陽子入射における V_R の最適値の推定結果。高さは推定の平均値を示し、平面図の色は推定の誤差値に対応している。

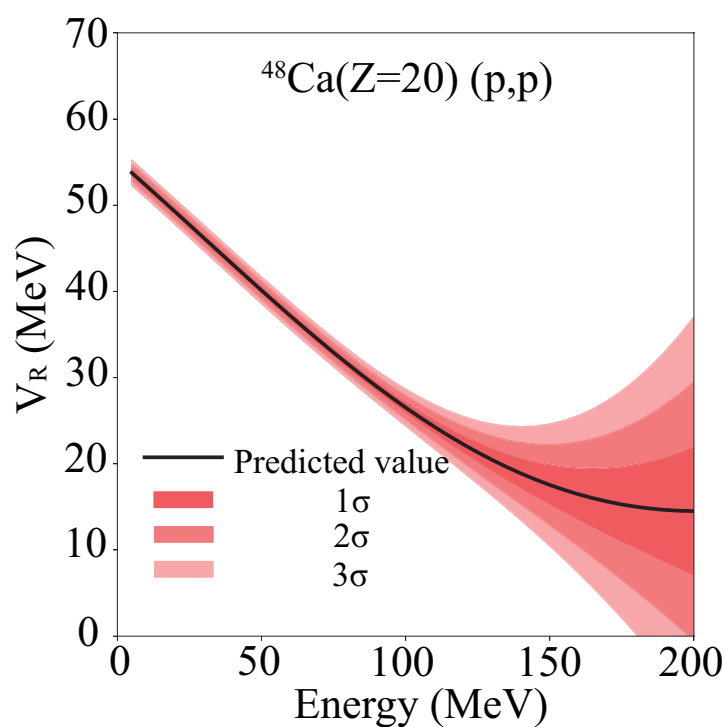


Figure 3.17: 陽子数=20 における Figure 3.16 の推定結果。黒実線は推定の平均値、赤く塗られた領域は推定の誤差値を示す。

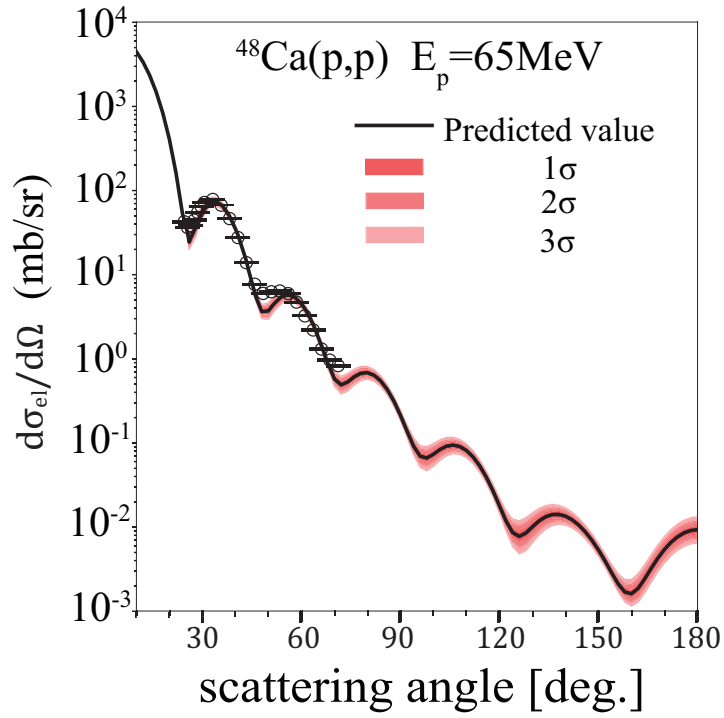


Figure 3.18: Figure 3.17 の入射エネルギー 65 MeV における推定結果を用いて計算した、 ^{48}Ca 陽子入射における弾性散乱の角度分布。黒実線、赤い領域はそれぞれ、Figure 3.17 の黒実線、赤く塗られた領域に対応している。

最後に、入力データの陽子数に対する内挿と外挿の推定精度について確認する。まず、内挿の推定精度を確認する。 ^{48}Ca 、 ^{54}Fe のデータを入力し、 ^{50}Ti 、 ^{51}V 、 ^{52}Cr における V_R の値を入射エネルギー 0~200 MeV の範囲で推定した。各陽子数において、入射エネルギーに対する V_R の推定結果を示したものが Figure 3.19 である。Figure 3.19 内の 3 つのグラフを比較すると、推定の平均値、推定誤差、ともに大きな違いはないように見える。陽子数が 1 変化した程度では、 V_R の推定の結果は大きく変化しないことが理解できる。Figure 3.19 における V_R の推定値を用いて弾性散乱の角度分布を計算したものが Figure 3.20 である。Figure 3.20 の ^{52}Cr における弾性散乱の角度分布は、29 個ある実験値の 4/5 以上を再現できていることが分かる。一方で、 ^{50}Ti 、 ^{51}V に対する角度分布は、実験データの半分程度しか実験値の真値を再現できていない。しかし、実験値の真値を再現できていない入射エネルギーでは、不定性が大きくなっており、実験値のほぼすべては不定性の範囲に収まっている。これより、陽子数の変化に対しても、内挿に関しては十分な精度で実験値を再現できることが確認できた。

最後に外挿の推定結果を示す。 ^{51}V 、 ^{52}Cr 、 ^{54}Fe のデータをガウス過程回帰に

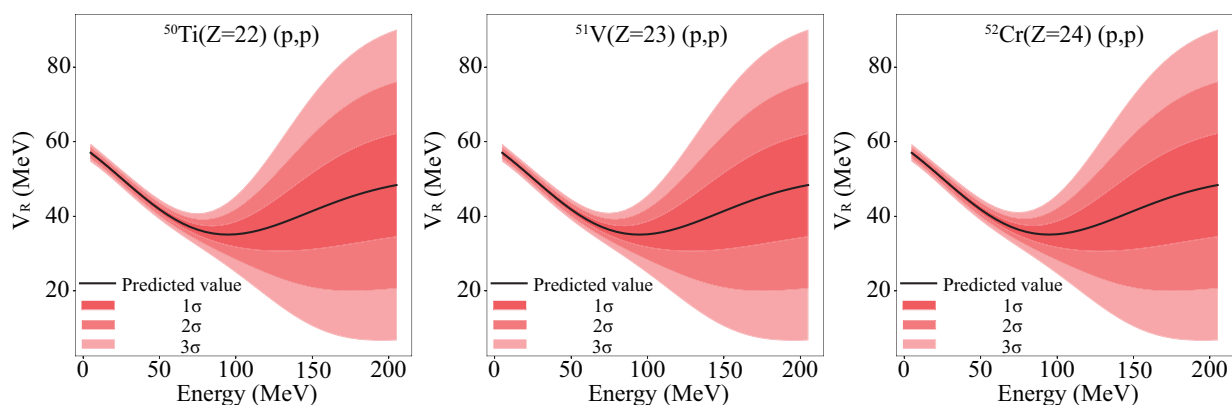


Figure 3.19: 中性子数 28、陽子数 20、26 における V_R の最適値をガウス過程回帰入力したときの、中性子数 28、陽子数 22、23、24 における V_R の推定結果。入力データは Table 3.5 の陽子数 20、26 のデータを用いた。黒実線はガウス過程回帰の推定の平均値、赤く塗られた領域はガウス過程回帰による推定の誤差値であり、色の濃いものから 1σ 、 2σ 、 3σ

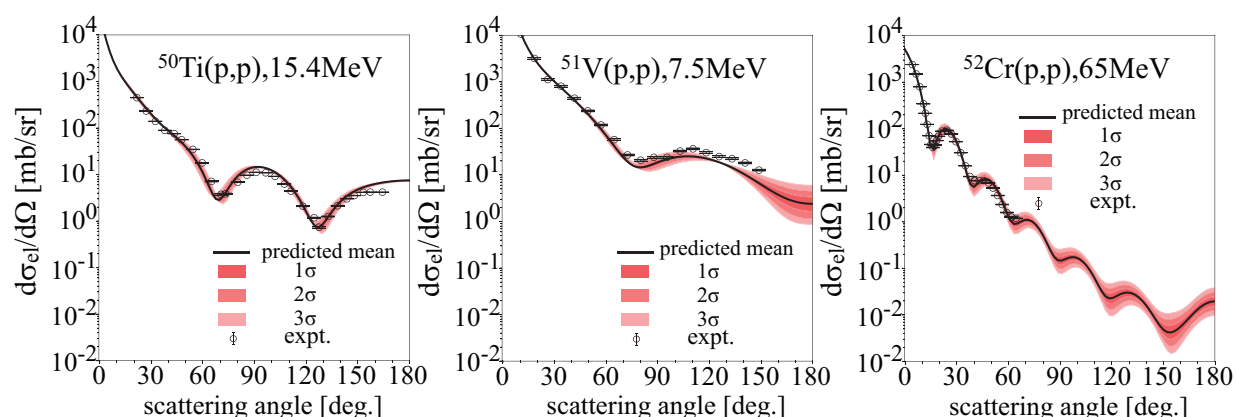


Figure 3.20: Figure 3.19 の推定結果を用いて計算した、中性子数 28、陽子数 22、23、24、陽子入射における弾性散乱の角度分布。黒実線、赤い領域はそれぞれ、Figure 3.19 の黒実線、赤く塗られた領域に対応している。

入力し、 ^{48}Ca における V_R の値を入射エネルギー 0~200 MeV の範囲で推定した結果が Figure 3.21 である。Figure 3.17 は Figure 3.21 に ^{50}Ti のデータを加えて推定を行った ^{48}Ca における V_R の推定値であるため、入力するデータの減少に伴う推定の変化を見るためにこの 2 つを比較する。Figure 3.21 は Figure 3.17 よりも、推定の誤差が全体的大きくなっていることが見て取れる。これは、 ^{48}Ca (陽子数 20) から最も陽子数の近い入力データが ^{50}Ti (陽子数 22) から ^{51}V (陽子数 23) に変わり、陽子数に対する入力データからの距離が離れたためである。また、Figure 3.21 は Figure 3.17 と比較して、100 MeV 以上の入射エネルギーにおける V_R の推定誤

差が大きくなっていることが分かる。これは、Figure 3.21 で入力しなかった ^{50}Ti のデータの中に入射エネルギー 100 MeV におけるデータが存在するためである。Figure 3.21 ではこのデータを入力していないため、入射エネルギーが 100 MeV 以上における入力データが無くなる。その結果、入力データにおける入射エネルギーの最大値が 65 MeV となり、エネルギー方向における外挿の推定を行う領域が広くなったからだと考えられる。推定した V_R の値を用いて ^{48}Ca における弾性散乱の角度分布を計算したものが Figure 3.22 である。Figure 3.22 の推定結果は、22 個ある実験値のうち 4/5 以上をよく再現できていることが分かる。Figure 3.17 の推定値を使って同じ入射エネルギーにおける角度分布を計算した Figure 3.18 と比較しても、二つグラフの黒実線 (推定の平均値に対する計算値) はほぼ一致していることが分かる。一方で、推定の誤差値は Figure 3.18 よりも Figure 3.22 の方が大きくなっていることが分かる。これは、推定を行う陽子数 (陽子数 20) が入力したデータから離れたことによる V_R の推定誤差の増加し、角度分布の不定性に反映された結果である。以上より、内挿、外挿における推定の傾向は、陽子数依存性に対しても、Section 3.2.1 で議論した傾向と同じであると考えられる。

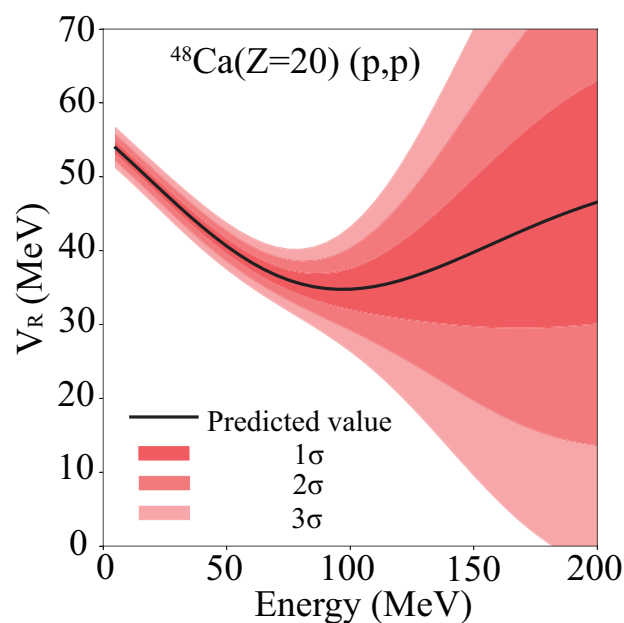


Figure 3.21: 中性子数 28、陽子数 23、24、26 における V_R の最適値をガウス過程回帰に入力したときの、中性子数 28、陽子数 20 における V_R の推定結果。入力データは Table 3.5 の陽子数 22、23、24 のデータを用いた。黒実線はガウス過程回帰の推定の平均値、赤く塗られた領域はガウス過程回帰による推定の誤差値であり、色の濃いものから 1σ 、 2σ 、 3σ

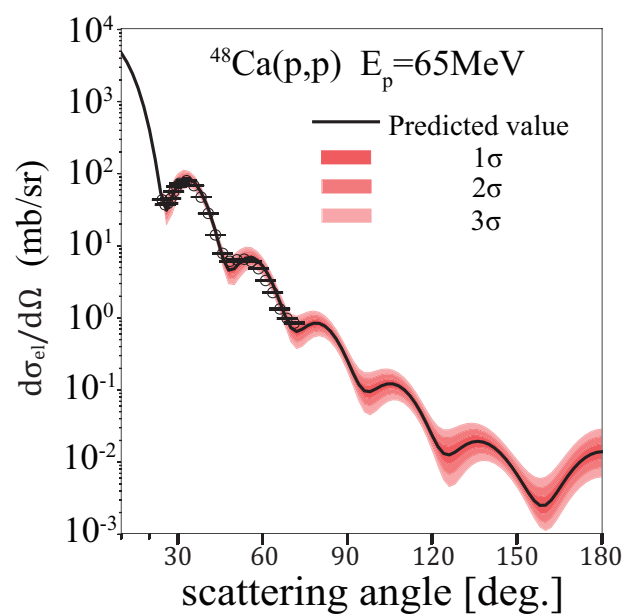


Figure 3.22: Figure 3.21 の推定結果を用いて計算した、中性子数 28、陽子数 20、陽子入射における弾性散乱の角度分布。黒実線、赤い領域はそれぞれ、Figure 3.21 の黒実線、赤く塗られた領域に対応している

Chapter 4

まとめ

本研究では、作成コストを削減しつつ精度の高い核データを生成することを目指し、機械学習と核反応モデルを組み合わせ、核子-原子核散乱における断面積の推定を試みた。核反応モデルとしてチャンネル結合光学モデルを、機械学習手法としてガウス過程回帰を採用した。任意の入射エネルギーおよび標的核において、核反応モデルで算出される断面積が実験値を再現するように、光学ポテンシャルのパラメータをガウス過程回帰を用いて推定するシステムを開発した。

光学ポテンシャルのパラメータ推定において、ガウス過程回帰に入力するデータには、ベイズ最適化を用いて実験値を再現するように最適化されたパラメータ値を使用した。ベイズ最適化を用いたパラメータ最適化の手法が、入射エネルギー、標的核、入射粒子に関わらず有効であることを本論文で示している。入射エネルギーおよび陽子数が異なる実験データを用いてパラメータの最適値を求め、それらをガウス過程回帰に入力することで、任意のエネルギーおよび陽子数におけるパラメータの最適値を推定した。推定の精度を評価するため、実験データのある入射エネルギー、陽子数における断面積を核反応モデルで計算し、実験値と比較した。特定の標的核および入射粒子における入射エネルギーが異なる実験データから推定された光学ポテンシャルのパラメータを使用することで、直接パラメータを最適化していないエネルギーにおいても、実験値を十分な精度で再現できることが分かった。さらに、中性子数が同じで陽子数が異なる反応におけるパラメータの最適値をガウス過程回帰に入力することで、任意の入射エネルギーおよび陽子数における断面積の計算値が実験データを十分な精度で再現できることが示された。また、入力データの分布が推定精度に与える影響についても評価した。推定する入射エネルギーおよび陽子数に近いデータが機械学習に入力されていた場合、推定精度が向上することが分かった。さらに、推定する入射エネルギーおよび陽子数に近いデータが入力

されていない場合でも、入力データに挟まれている内挿のケースでは、挟まれていない外挿の場合と比較して推定精度が高いことが確認された。

本研究では、精度の高い核データの生成を目指しているが、実用的な核データを作成するためには、光学ポテンシャルを構成するすべてのパラメータの最適値を推定する必要がある。本研究では、光学ポテンシャルのパラメータの1つである V_R の入射エネルギーおよび標的核の陽子数依存性の推定までしか行っていない。研究目標を達成するためには、光学ポテンシャルを構成する他のパラメータも同時に推定し、本研究では推定していない標的核の中性子数依存性や入射粒子の依存性についても推定を行う必要がある。Section 3.3 の結果から、ガウス過程回帰を用いた複数入力に対する推定は有効であることが示されている。この手法を用いれば、標的核の中性子数および入射粒子に対する依存性も推定ができると考えられる。一方で、本研究で機械学習の手法として採用したガウス過程回帰は、複数の出力に対する推定に対応していないため、本研究で提案した手法のままでは複数のパラメータの推定はできない。この問題を解決するために、Multi-output Gaussian process regression [64] などの複数出力の推定に対応した機械学習を適用し、推定を試みる。また、本研究では詳しく言及しなかったが、ガウス過程回帰における推定の誤差は、核データの誤差評価への活用が期待できる。核データの誤差情報は、核データを使用するにあたり重要な役割を果たしている [4]。ガウス過程回帰による推定誤差を核データの誤差評価と対応付けることで、より実用に足る核データの作成が期待できる。

Chapter 5

謝辭

Chapter 6

付録

6.1 行列の分割と逆行列

ブロックに分けられた行列 $\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$ の逆行列について、 A^{-1}, D^{-1} が存在する場合、以下の式が成り立つ。

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} A^{-1} + A^{-1}BMCA^{-1} & -A^{-1}BM \\ -MCA^{-1} & M \end{pmatrix} \quad (6.1)$$

ただし、 $M = (D - CA^{-1}B)^{-1}$ である。式 (6.1) の証明は、両辺の右辺から実際に $\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$ を書けることで示される。

6.2 多変量ガウス分布の条件付き分布

入力の組 $\mathbf{x}_1$ が与えられた時、任意の入力 $\mathbf{x}_2$ を取る条件付き確率 $p(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1)$ を多変量ガウス分布に従って計算する。本研究では各入力の確率分布の平均値をすべて 0 としたが、一般的な場合について取り扱うために、入力 x_1, x_2 での確率分布の平均値をそれぞれ μ_1, μ_2 とする。また、計算を簡単にするために、まず、多変量ガウス分布の共分散行列 Σ の逆行列を $\Lambda = \begin{pmatrix} \Lambda_{11} & \Lambda_{12} \\ \Lambda_{21} & \Lambda_{22} \end{pmatrix}$ として考える。 $p(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1)$

は $\mathbf{x}_2$ の関数として同時分布 $p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ に比例するため、

$$\begin{aligned}
p(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1) &\propto p(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \\
&\propto \exp \left(-\frac{1}{2} \left\{ \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1 \\ \mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2 \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Lambda}_{11} & \boldsymbol{\Lambda}_{12} \\ \boldsymbol{\Lambda}_{21} & \boldsymbol{\Lambda}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1 \\ \mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2 \end{pmatrix} \right\} \right) \\
&= \exp \left(-\frac{1}{2} \{ (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1)^T \boldsymbol{\Lambda}_{11} (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1) + (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1)^T \boldsymbol{\Lambda}_{12} (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2) \right. \\
&\quad \left. + (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2)^T \boldsymbol{\Lambda}_{21} (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1) + (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2)^T \boldsymbol{\Lambda}_{22} (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2) \} \right) \\
&\propto \exp \left(-\frac{1}{2} \{ (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2)^T \boldsymbol{\Lambda}_{22} (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2) + 2(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2)^T \boldsymbol{\Lambda}_{21} (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1) \} \right) \\
&\propto \exp \left(-\frac{1}{2} \{ \mathbf{x}_2^T \boldsymbol{\Lambda}_{22} \mathbf{x}_2 - 2\mathbf{x}_2^T \boldsymbol{\Lambda}_{22} \boldsymbol{\mu}_2 + 2\mathbf{x}_2^T \boldsymbol{\Lambda}_{21} \mathbf{x}_1 - 2\mathbf{x}_2^T \boldsymbol{\Lambda}_{21} \boldsymbol{\mu}_1 \} \right) \\
&= \exp \left(-\frac{1}{2} \{ \mathbf{x}_2^T \boldsymbol{\Lambda}_{22} \mathbf{x}_2 - 2\mathbf{x}_2^T (\boldsymbol{\Lambda}_{22} \boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\Lambda}_{21} \mathbf{x}_1 + \boldsymbol{\Lambda}_{21} \boldsymbol{\mu}_1) \} \right) \\
&\propto \exp \left(-\frac{1}{2} \{ (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\Lambda}_{22}^{-1} (\boldsymbol{\Lambda}_{22} \boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\Lambda}_{21} \mathbf{x}_1 + \boldsymbol{\Lambda}_{21} \boldsymbol{\mu}_1))^T \boldsymbol{\Lambda}_{22} (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\Lambda}_{22}^{-1} (\cdots)) \} \right) \\
&= \exp \left(-\frac{1}{2} \{ (\mathbf{x}_2 - (\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\Lambda}_{22}^{-1} \boldsymbol{\Lambda}_{21} (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1)))^T \boldsymbol{\Lambda}_{22} (\mathbf{x}_2 - (\cdots)) \} \right)
\end{aligned} \tag{6.2}$$

と平方完成することができる。よって、

$$p(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1) \sim \mathcal{N}((\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\Lambda}_{22}^{-1} \boldsymbol{\Lambda}_{21} (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1), \boldsymbol{\Lambda}_{22}^{-1}) \tag{6.3}$$

となる。ここで、 $\boldsymbol{\Lambda}$ を共分散行列の成分 $\boldsymbol{\Sigma}$ を用いて示すと、 $\boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ であるから、式 (6.1) に当てはめて $M = (\boldsymbol{\Sigma}_{22} - \boldsymbol{\Sigma}_{21} \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{21})^{-1}$ とおくと、

$$\boldsymbol{\Lambda}_{22} = (\boldsymbol{\Sigma}_{22} - \boldsymbol{\Sigma}_{21} \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{21})^{-1} \tag{6.4}$$

$$\boldsymbol{\Lambda}_{22}^{-1} \boldsymbol{\Lambda}_{21} = -\boldsymbol{\Sigma}_{21} \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1} \tag{6.5}$$

となるため、式 (6.3) を $\boldsymbol{\Sigma}$ を使ってあらわすと

$$p(\mathbf{x}_2|\mathbf{x}_1) \sim \mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_2 + \boldsymbol{\Sigma}_{21} \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1} (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1), \boldsymbol{\Sigma}_{22} - \boldsymbol{\Sigma}_{21} \boldsymbol{\Sigma}_{11}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{21}) \tag{6.6}$$

となる。

References

- [1] Suyama K, Kunieda S, Hukahori T and Chiba G. 核データ研究の最前線 ～ たゆまざる真値の追及，そして新たなニーズへ応える為に～. 日本原子力学会誌 ATOMO Σ 2017;59(10):598–602.
- [2] Osamu Iwamoto et al. Japanese evaluated nuclear data library version 5: JENDL-5. Journal of Nuclear Science and Technology. 2023;60(1):1–60.
- [3] M.B. Chadwick et al. Evaluated Nuclear Data File ENDF/B-VII.0. Nuclear Data Sheets. 2006;108(12):2931-3060.
- [4] Kawai M. 遮蔽計算に用いる核データの特徴とその不確かさの影響. 日本原子力学会誌 1979;21(3):207–214.
- [5] 日本原子力学会核データ部会 核融合炉関連核データの現状と将来展望. 日本原子力学会誌 ATOMO Σ 2009;51(10):749–753.
- [6] Yoshida T et al. 連載講座核データ 第4回 核データの応用と今後の展望. 日本原子力学会誌 2001;43(8):761–774.
- [7] Iwamoto O, Kunieda S, and Iwamoto N. 放射線治療に用いられる高エネルギー核データの現状と今後の展望. Isotope News 2019年6月号 2019;(763):4–7.
- [8] Iwamoto H. Generation of nuclear data using Gaussian process regression. Journal of Nuclear Science and Technology. 2020;57(8):932–938.
- [9] Iwamoto H, Iwamoto O, Kunieda S. G-HyND: a hybrid nuclear data estimator with Gaussian processes. Journal of Nuclear Science and Technology. 2021;;1–11.
- [10] A E Lovell and A T Mohan and P Talou. Quantifying uncertainties on fission fragment mass yields with mixture density networks Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics 2020

- [11] Al Hammal et al, Neural network predictions of inclusive electron-nucleus cross sections Phys. Rev. C, 107, 065501 2023.
- [12] Kang Xing et al, Phase shift deep neural network approach for studying resonance cross sections for the $^{235}\text{U}(n,f)$ reaction Phys. Lett. B, 855, 138825 2024.
- [13] Jingde Chen et al, Bayesian approach to energy dependence of fission product yields of ^{235}U by data augmentation Journal of Nuclear Science and Technology, 2024;61(12):1509–1520.
- [14] Kawai M, and Yoshida S. 原子核反応論. 朝倉書店 2002
- [15] Iwamoto O, Iwamoto N, Kunieda S, et al. The CCONE Code System and its Application to Nuclear Data Evaluation for Fission and Other Reactions. Nuclear Data Sheets. 2016;131:259–288.
- [16] Hauser W, Feshbach H, The Inelastic Scattering of Neutrons. Phys. Rev. 1952;87:366–373.
- [17] Kunieda S, Chiba S, Shibata K, 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. Journal of Nuclear Science and Technology. 2007;44(6):838–852.
- [18] Sunagawa S. 散乱の量子論. 岩波書店 2015
- [19] Capote R, Herman M, Obložinský P, et al. RIPL – Reference Input Parameter Library for Calculation of Nuclear Reactions and Nuclear Data Evaluations. Nuclear Data Sheets. 2009;110(12):3107–3214.
- [20] Rasmussen CE. and Williams CKI. Gaussian Processes for Machine Learning. MIT Press.2006.
- [21] Korzh IA, Mishchenko VA, Pravdivyi NM. Fast neutron elastic and inelastic scattering cross sections of ^{54}Fe . Soviet Atomic Energy. 1987;62(6):487–492.
- [22] I.A.Korzh et al, The Angular Distribution of Neutrons Elastically and Idealistically Scattered by Ni-58,60,62,64 Conf: 5.All Union Conf.on Neutron Phys.,Kiev,15-19 Sep 1980, Vol.1, p.314 (1980), USSR.

- [23] P.P. Guss et al, Cross sections and analyzing powers for fast-neutron scattering to the ground and first excited states of ^{58}Ni and ^{60}Ni Nuclear Physics A 438, 187–211 1985.
- [24] A. I. Tutubalin et al. Elastic scattering of the 14.7 MeV neutrons by the iron, cobalt, and nickel separated isotopes <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:100606666> 1974.
- [25] Pedroni, R. S. et al, Energy dependence of the deformed optical potential for neutron scattering from $^{54,56}\text{Fe}$ and $^{58,60}\text{Ni}$ up to 80 MeV Phys. Rev. C, 38 2052-2062 1988
- [26] Y. Yamanouti et al. Elastic and inelastic scattering of 24 MeV neutrons from even isotopes of Ni <https://api.semanticscholar.org/CorpusID:119052160> 1980.
- [27] Pruitt C.D. et al. Isotopically resolved neutron total cross sections at intermediate energies. Phys. Rev. C. 2020;102(3):034601.
- [28] Marinov, A. and Lee, L. L. and Schiffer, J. P. Studies of Elastic Scattering of Protons and Deuterons by Calcium Isotopes PhysRev.145.852,1966; 545(3):852–861.
- [29] J.C. Lombardi and R.N. Boyd and R. Arking and A.B. Robbins. Nuclear sizes in 40, 44, 48Ca Nuclear Physics A. 188,1972;0375-9474(1):103–114.
- [30] McCamis, R. H. and Nasr, T. N. and Birchall, J. and Davison, N. E. and van Oers, W. T. H. and Verheijen, P. J. T. and Carlson, R. F. and Cox, A. J. and Clark, B. C. and Cooper, E. D. and Hama, S. and Mercer, R. L. Elastic scattering of protons from $^{40,42,44,48}\text{Ca}$ from 20 to 50 MeV and nuclear matter radii Phys. Rev. C. 33,1986;(5):1624–1633.
- [31] Sakaguchi, H. and Nakamura, M. and Hatanaka, K. and Goto, A. and Noro, T. and Ohtani, F. and Sakamoto, H. and Ogawa, H. and Kobayashi, S. Elastic scattering of 65 MeV polarized protons Phys. Rev. C. 26,1982;(3):944–960.

- [32] Tomizawa, M. and Aoki, T. and Aoki, Y. and Murayama, T. and Sakai, T. and Tagishi, Y. and Yagi, K. Asymmetry of spin-flip of polarized protons in the inelastic scattering to the first 2^+ states of ^{48}Ti and ^{50}Ti Phys. Rev. C. 41,1990;(4):1486–1494.
- [33] J.C. Lombardi and R.N. Boyd and R. Arking and A.B. Robbins. The calcium isotopes and $N = 28$ isotones and the optical model Nuclear Physics A. 192,1972;0375-9474(3):641–650.
- [34] R.Varner. A parameterization of the nucleon-nucleus Optical Model potential Phys.Reports 201, 57 (1991)
- [35] Gray W, Kenefick R, Kraushaar J. Inelastic proton scattering (II). Ti50 and Fe54. Nuclear Physics. 1965;67(3):565–576.
- [36] P. Kossanyi-Demay and R. de Swiniarski and C. Glashausser. An optical-model analysis of 18.6 MeV proton elastic scattering Nuclear Physics A. 94,1967;0375-9474(3):513-527.
- [37] Sakaguchi, H. and Nakamura, M. and Hatanaka, K. and Goto, A. and Noro, T. and Ohtani, F. and Sakamoto, H. and Ogawa, H. and Kobayashi, S. Elastic scattering of 65 MeV polarized protons Phys. Rev. C. 26,1982;(3):944–960.
- [38] Woo, L. W. and Wall, N. S. and Roos, P. G. and Debenham, P. H. and Kwiatkowski, K. and Nadasen, A. Elastic and inelastic scattering of 100 MeV protons from the even-even titanium isotopes Phys. Rev. C. 29,1984;(3):794–804.
- [39] E. A. Romanovskii, A. V. Spasskii, T. I. Spasskaya, I. B. Teplov. Elastic Scattering of Protons by chromium and vanadium Calcium Jour: Vestnik Moskovskogo Univ., Seriya Fiz.Astron., Vol.1971, Issue.12, p.398 (1971), Russia
- [40] Shore, Bruce W. and Wall, Nathan S. and Irvine, John W. Interactions of 7.5-Mev Protons with Copper and Vanadium Phys. Rev. 123,1961;(1):276–283.

- [41] Perey, C. M. and Perey, F. G. and Dickens, J. K. and Silva, R. J. 11-MeV Proton Optical-Model Analysis Phys. Rev. 175,1968;(4):1460–1475.
- [42] R.J Peterson. Inelastic scattering of 17.5 MeV protons from ^{51}V , ^{52}Cr , ^{55}Mn , and ^{56}Fe Annals of Physics. 53,1969;0003-4916(1):40–92.
- [43] E.A.Romanovskii,A.V.Spasskii,T.I.Spasskaya,I.B.Teplov. Elastic scattering of protons by chromium and vanadium. Vestnik Moskovskogo Univ., Seriya Fiz.Astron., Vol.1971, Issue.12, p.398 (1971), Russia
- [44] A.E.Antropov, P.P.Zarubin, P.D.Ioannu, B.N.Orlov, V.S.Romanov. Elastic and Inelastic Scattering of 6 MeV Protons by Even Isotopes ofChromium Bull.Russian Academy of Sciences - Physics, Vol.35, p.2136 (1972), USA
- [45] B.W.Shore, N.S.Wall, J.W.Irvine, Jr. Interactions of 7.5-MeV Protons with Copper and Vanadium Journal of Experimental and Theoretical Physics, Vol.11, p.1025 (1960), USA
- [46] Leach, K. G. and Holt, J. D. and Garrett, P. E. and Stroberg, S. R. and Ball, G. C. and Bender, P. C. and Bildstein, V. and Varela, A. Diaz and Dunlop, R. and Faestermann, T. and Hadinia, B. and Hertenberger, R. and Jamieson, D. S. and Jigmeddorj, B. and Krücken, R. and Laffoley, A. T. and Radich, A. J. and Rand, E. T. and Svensson, C. E. and Triambak, S. and Wirth, H.-F. High-resolution (p, t) reaction measurements as spectroscopic tests of ab-initio theory in the mid- pf shell Phys. Rev. C. 100,2019;(1):014320.
- [47] T. Noro and H. Sakaguchi and M. Nakamura and K. Hatanaka and F. Ohtani and H. Sakamoto and S. Kobayashi. Isospin dependence of the 65 MeV proton optical potential in f-p shell nucleiNuclear Physics A. 366,1981;0375-9474(2):189-201.
- [48] Boukharouba, N. and Brient, C. E. and Grimes, S. M. and Mishra, V. and Pedroni, R. S. Low energy optical model studies of proton scattering on ^{54}Fe and ^{56}Fe Phys. Rev. C. 46,1992;(6):2375–2386.
- [49] A.E.Antropov, V.P.Gusev, P.P.Zarubin, P.D.Ioannu, A.L.Malyshev, B.N.Orlov Proton Scattering on the ^{54}Fe Nucleus at 5.5-6.2 MeV

Bull.Russian Academy of Sciences - Physics, Vol.42, Issue.1, p.152 (1978),
USA

- [50] A.E.Antropov, P.P.Zarubin, P.D.Ioannu, B.N.Orlov Elastic and Inelastic Scattering of Protons by ^{54}Fe Bull.Russian Academy of Sciences - Physics, Vol.35, p.1564 (1972), USA
- [51] Boukharouba, N. and Brient, C. E. and Grimes, S. M. and Mishra, V. and Pedroni, R. S. Proton Elastic Scattering Measurements at 9.8 MeV with Optical-Model Analysis Phys. Rev. C. 3,1971;(3):1231–1242.
- [52] M. Ahmed and J. Lowe and P.M. Rolph and O. Karban. Differential cross sections, polarisations and proton-gamma angular correlations for ^{54}Fe , $^{60}\text{Ni}(p, p)$ and $(p, p' \gamma)$ at 10 MeV Nuclear Physics A. 147,1970;0375-9474(2):273-282.
- [53] Boukharouba, N. and Brient, C. E. and Grimes, S. M. and Mishra, V. and Pedroni, R. S. Low energy optical model studies of proton scattering on ^{54}Fe and ^{56}Fe Phys. Rev. C. 46,1992;(6):2375–2386.
- [54] Lee, L. L. and Schiffer, J. P. Studies of Elastic Scattering of Protons, Deuterons, and Alpha Particles from Isotopes of Cu, Ni, and Fe Phys. Rev. 134,1964;(4B):B765–B772.
- [55] Varner, Robert Lindsay, Jr. A Parameterization of the Nucleon-Nucleus Optical Model Potential. PhD Thesis. THE UNIVERSITY OF NORTH CAROLINA AT CHAPEL HILL. 1986.
- [56] P.J. Van Hall and J.P.M.G. Melssen and S.D. Wassenaar and O.J. Poppema and S.S. Klein and G.J. Nijgh. Scattering of polarized protons by iron and nickel isotopes Nuclear Physics A. 291,1977;0375-9474(1):63-84.
- [57] Tesmer, J. R. and Schmidt, F. H. Substate Excitation of 2^+ States Produced by Inelastic Scattering of Protons on ^{12}C , ^{54}Fe , and ^{58}Ni Phys. Rev. C. 5,1972;(3):864–875.
- [58] Bertrand, F. E. and Peelle, R. W. Complete Hydrogen and Helium Particle Spectra from 30- to 60-MeV Proton Bombardment of Nuclei with

- $A = 12$ to 209 and Comparison with the Intranuclear Cascade Model Phys. Rev. C. 8,1973;(3):1045–1064.
- [59] Greaves P, Hnizdo V, Lowe J, et al. Elastic and inelastic scattering of 30.4 MeV polarised protons by $^{12,13}\text{C}$, ^{16}O and ^{54}Fe . Nuclear Physics A. 1972;179(1):1–22.
 - [60] Fabrici, E. and Micheletti, S. and Pignanelli, M. and Resmini, F. G. and De Leo, R. and D’Erasmus, G. and Pantaleo, A. Proton elastic scattering on light nuclei. II. Nuclear structure effects Phys. Rev. C. 21,1980;(3):844–860.
 - [61] Brussel MK, Williams JH. Elastic Scattering of 40-Mev Protons from Isotopes of Fe, Ni, and Cu. Physical Review. 1959;114(2):525–533.
 - [62] Fricke, M. P. and Gross, E. E. and Zucker, A. Inelastic Scattering of 40-MeV Polarized Protons Phys. Rev. 163,1980;(4):1153–1169.
 - [63] G.S. Mani and D.T. Jones and D. Jacques. Elastic scattering of 50 MeV Protons by Nuclei in the range from ^{42}Ca to ^{208}Pb Nuclear Physics A. 165,1971;0375-9474(2):384-392.
 - [64] Haitao Liu and Jianfei Cai and Yew-Soon Ong. Remarks on multi-output Gaussian process regression Knowledge-Based Systems. 144,2018; 0950-7051:102-121.