

<原子力学会賞受賞記念寄稿>

炉定数調整法と拡張バイアス因子法の理論統合

原子力機構 横山 賢治

1. はじめに

この度は、2017 年度原子力学会論文賞を受賞し、炉物理部会報に記念寄稿する機会をいただきましたことを大変光栄に感じております。本稿では、当該論文 [1] の概要を研究背景等を含めて紹介させていただきたいと思っております。本研究は、基本的には炉定数調整法と呼ばれる理論の開発に関するものとなっています。炉定数調整法というのは、核データ測定などの微分実験データのみから評価された核データに、臨界実験などの積分実験データから得られた情報を追加（核データを調整）することで、炉心核特性の計算予測精度（設計予測精度）を向上させるための理論です。炉心核特性の解析では、通常、核データを炉定数セットの形に変換してから使いますので、実際には炉定数セットを調整することになります。

論文の内容は、一言でいうと、従来からある炉定数調整法 [2-4] を別の方法で導出しなおして理論を拡張するとともに、炉定数調整法に代わる手法として新たに提案された拡張バイアス因子法 [5] の特徴を取り込んで、二つの理論を統合するという内容になっています。論文では厳密さを重視して、式の展開を可能な限り省略せずに説明していますので、一見すると数式ばかりで結論が分かりにくいかもしれません。このため、本稿では主要な結論に絞って本研究の概要を紹介させていただきたいと思っております。本稿でもいくつか数式を示しますが、各手法の違いやイメージを説明するための図のようなものとして使います。数式の記号の意味については、本稿の記号表にまとめました。一方で、この記事の内容に興味を持ってくださった方が式の展開を確認する際に参考にしていただけるように、文献 [2-4] における式の展開を補足する情報を付録 A にまとめました。

2. 研究の背景

2.1 炉定数調整法と拡張バイアス因子法

炉定数調整法の研究の経緯については、2010 年に発行された OECD/NEA の核データ評価国際協力ワーキングパーティ (WPEC) の SG33 の中間報告書 [6] に詳細にまとめられていますが、炉定数調整法の研究の歴史は古く、1960 年代には研究が始まっていた [7,8] ことが分かります。日本では、複数の積分実験データを活用して高速炉の核設計予測精度を向上するための手法として長年に亘って炉定数調整法の研究が行われてきており、1990 年代前半には炉定数調整法を適用した最初的高速炉用統合炉定数である ADJ91 [9,10] が作成されました。

一方で、2006 年に複数の積分実験データを活用して設計対象炉心の予測精度を向上する手法として一般化バイアス因子法 [11] が提案されました。更に、2007 年には一般化バイアス因子法を高度化させた拡張バイアス因子法 (Extended Bias factor method: EB) [5] が提案されました。^{*1} 拡張

^{*1} 拡張バイアス因子法の論文では、LC 法と PE 法が提案されていますが、ここでは、積分実験データの不確かさが大きくても設計予測精度の悪化することがないという点で、LC 法よりも優れている PE 法のみを対象として説明します。

バイアス因子法は、炉定数調整法と利用するデータや目的が同じで、よく似た手法であることは明らかでしたが、当時は両手法の違いを明確に説明することはできませんでした。

従来からある炉定数調整法は、ベイズの定理に基いて積分実験データの実験解析評価結果が得られた条件の下で、核データ（炉定数セット）が正しくなる確率を最大化する手法であると説明することができます。このため、ここでは、この従来からある炉定数調整法を最尤推定（Maximum Likelihood Estimation: MLE）に基づいて導出された従来型の炉定数調整法（Conventional cross-section Adjustment method: CA）という意味で「最尤推定に基づく従来炉定数調整法（MLE-CA）」と呼ぶことにします。

最尤推定に基づく従来炉定数調整法における設計予測値は、調整後の炉定数セット \mathbf{T}_{CA}^{MLE} を使って設計対象炉心の核特性 $\mathbf{R}_c^{(2)}$ を計算すればよいという意味で、以下のように表すことができます。

$$\mathbf{R}_c^{(2)}(\mathbf{T}_{CA}^{MLE}) \quad \text{ただし、} \mathbf{T}_{CA}^{MLE} = \mathbf{T}_0 + \mathbf{M}\mathbf{G}^{(1)\text{T}}\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0)) \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{T}_0 と \mathbf{M} は調整前の炉定数セットとその共分散、 $\mathbf{G}^{(1)}$ は核データが変化したときの積分実験データの変化率を表す感度係数、 \mathbf{D}^{-1} は積分実験データの C/E 値の不確かさの合計の逆行列、 $\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0)$ は複数^{*2}の積分実験データの実験値（E 値）と調整前の炉定数セット \mathbf{T}_0 で計算した計算値（C 値）の差を表します。また、上付きの \mathbf{T} は行列の転置を表します。なお、積分実験データの C/E 値の不確かさは、積分実験データ間の相関も考慮するため、核データ（炉定数セット）の共分散と同様に、数式上は共分散行列の形になります。一般に、共分散行列の逆行列は精度行列と呼ばれ、スカラーの分散の逆数（精度）に相当する行列になります。このため、(1) 式は、基本的には、積分実験データの E-C 値の情報（ $\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0)$ ）に精度（ \mathbf{D}^{-1} ）の重みをかけて核データを調整していると解釈することができます。残りの $\mathbf{M}\mathbf{G}^{(1)\text{T}}$ については、全体として $n_a \times n^{(1)}$ 行列になっており、 $n^{(1)}$ 個の積分実験データの情報を n_a 個の核データの情報に変換するための項であると考えることができます。したがって、(1) 式全体としては、複数の積分実験データの E-C 値の情報を核データの調整を介して設計対象炉心の予測計算に反映していると解釈することができます。

一方、拡張バイアス因子法では、設計対象炉心の設計予測値は、以下のように、調整前の炉定数セット \mathbf{T}_0 を使って計算したある一つ^{*3}の設計対象炉心の核特性の計算値 $R_c^{(2)}(\mathbf{T}_0)$ に対して、 $n^{(1)}$ 個の積分実験データの i 番目の E/C 値（ $R_{e,i}^{(1)}/R_{c,i}^{(1)}$ ）に累乗の重み F_i を付けて掛け合わせたバイアスを乗じることで得られます。

$$R_c^{(2)}(\mathbf{T}_0) \cdot \prod_{i=1}^{n^{(1)}} \left(\frac{R_{e,i}^{(1)}}{R_{c,i}^{(1)}} \right)^{F_i} \quad \text{ただし、} (F_1, F_2, \dots, F_{n^{(1)}}) = (\mathbf{G}^{(2)}\mathbf{M}\mathbf{G}^{(1)\text{T}} + \mathbf{V}_m^{(12)\text{T}})\mathbf{D}^{-1} \quad (2)$$

この拡張バイアス因子法の式は、結果を先取りして少し整理した形で書いていますので、オリジナルの文献 [5] の表式とは異なりますが、(2) 式は、累乗の重み F_i として、基本的には、積分実験データの精度（ \mathbf{D}^{-1} ）を使っていると解釈することができます。残りの $\mathbf{G}^{(2)}\mathbf{M}\mathbf{G}^{(1)\text{T}} + \mathbf{V}_m^{(12)\text{T}}$ は、積分実験データと設計対象炉心の計算値に含まれる（核データと解析モデルに起因する）不確かさの

^{*2} 複数の積分実験データなので、 $\mathbf{R}_e^{(1)}$ や $\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0)$ はベクトルになります。

^{*3} ある一つの核特性の計算値なので、ここでは $R_c^{(2)}(\mathbf{T}_0)$ はスカラーになります。

合計の相互相関と解釈することができますが、全体として $n^{(2)} \times n^{(1)}$ 行列になっており、 $n^{(1)}$ 個の積分実験データの情報を $n^{(2)}$ 個の設計対象炉心の情報に変換するための項であると考えられます。^{*4} したがって、(2) 式全体としては、複数の積分実験データの E/C 値の情報を精度で重みづけした上で、設計対象炉心の予測計算に反映していると解釈することができます。

以上のように、積分実験データの情報を E-C 値で表すか E/C 値で表すか、調整するパラメータが核データであるか累乗の係数であるか、といった違いはあるものの、(1) 式と (2) 式は何となく似ていることが分かります。一方で、積分実験データの情報を設計対象炉心の情報に変換する項は明らかに異なっているように見えます。特に、設計対象炉心の感度係数 $\mathbf{G}^{(2)}$ や相互相関 $\mathbf{V}_m^{(12)T}$ は、拡張バイアス因子法の式にしか表れないという特徴が見られます。

以上のように、従来はこの二つの式の違いを明確に説明することができませんでした。

2.2 拡張炉定数調整法

2.2.1 理論開発の経緯

このような状況の下で、拡張バイアス因子法に相当するような新しい炉定数調整法の開発が始まりました。拡張バイアス因子法では、設計対象炉心の予測計算値を直接補正していることから、核データよりも設計対象炉心の予測計算値に重点が置かれていると考えることができます。このため、最尤推定に基づく従来炉定数調整法の導出の考え方を踏襲し、ベイズの定理に基づいて、複数の積分実験データが得られたという条件の下で（核データではなく）設計対象炉心の核特性の計算値が正しくなる確率を最大にするような核データを求めるという方針で新しい理論を導出しました。この新しい理論は、従来炉定数調整法を「拡張」している、「拡張」バイアス因子法の特徴を取り込んでいるという両方の意味を込めて、拡張炉定数調整法 (Extended Cross-section adjustment method: EA) [12] と名付けられました。以下では「最尤推定に基づく拡張炉定数調整法 (MLE-EA)」と呼ぶことにします。最尤推定に基づく従来炉定数調整法では、確率を最大化する対象と調整する対象がどちらも核データであり一致していますが、拡張炉定数調整法ではこれらが異なるため、設計対象炉心の核特性の情報を核データの情報に橋渡しする方法が必要でした。図 1 に示すように、基本的には、感度係数 $\mathbf{G}^{(2)}$ が、核データの情報を設計対象炉心に橋渡しする役目を果たしますが、ここでは逆向きの橋渡しが必要でした。このために、拡張炉定数調整法の導出では、感度係数 $\mathbf{G}^{(2)}$ の Moore-Penrose の一般化逆行列 $\mathbf{G}^{(2)+}$ を使っています。

最尤推定に基づく拡張炉定数調整法の設計予測値は、以下のように表すことができます。

$$\mathbf{R}_c^{(2)} \left(\mathbf{T}_{EA}^{MLE} \right) \quad \text{ただし、} \quad \mathbf{T}_{EA}^{MLE} = \mathbf{T}_0 + \left(\mathbf{M}\mathbf{G}^{(1)T} + \mathbf{G}^{(2)+}\mathbf{V}_m^{(12)T} \right) \mathbf{D}^{-1} \left(\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) \right) \quad (3)$$

この最尤推定に基づく拡張炉定数調整法は、最適化する設計対象炉心の核特性を一つにした場合、拡張バイアス因子法と同じ設計予測値となることが分かりました。すなわち、以下の式が成り立つ

^{*4} 拡張バイアス因子法では、設計対象炉心の核特性ごとに補正を行いますので、 $n^{(2)} = 1$ となります。

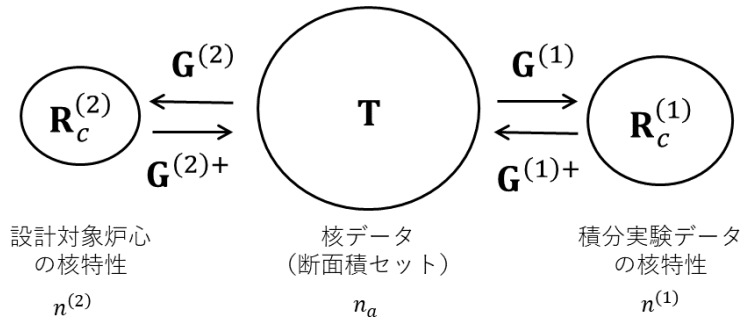


図 1 炉定数調整法で扱う各種データと関係

ことが確認できました。

$$R_c^{(2)}(T_{EA}^{MLE}) = R_c^{(2)}(T_0) \cdot \prod_{i=1}^{n^{(1)}} (R_{e,i}^{(1)} / R_{c,i}^{(1)})^{F_i} \quad (4)$$

一方で、(3) 式と (1) 式を比べると、 $G^{(2)+}V_m^{(12)T}$ の項があるかないかだけの違いしかありません。このことから、設計対象炉心の核特性と積分実験データの核特性の間の解析モデル起因の不確かさに相関がなければ（すなわち、 $V_m^{(12)} = \mathbf{O}$ （零行列）の場合には）、拡張炉定数調整法と従来炉定数調整法は完全に等価になることが分かります。すなわち、この差が従来炉定数調整法と拡張バイアス因子法の違いであると明確に説明できるようになりました。

2.2.2 課題

以上のように、拡張炉定数調整法を開発したことで、従来炉定数調整法と拡張バイアス因子法の関係は明確になりました。しかしながら、この時点ではまだ一つ気になることが残っていました。それは、最尤推定に基づく拡張炉定数調整法の導出と拡張バイアス因子法の導出では前提として使っている仮定が異なるということでした。具体的には、拡張炉定数調整法では、積分実験データや核データなどが正規分布に従うという仮定（以下、正規分布の仮定）を必要とするのに対して、拡張バイアス因子法ではそのような仮定は必要ないということです。

このように、最尤推定に基づく拡張炉定数調整法と拡張バイアス因子法は前提としている仮定が異なるのに、設計対象炉心の設計予測値は全く同じになるということから、何か矛盾が生じているのではないかという疑問が残りました。また、拡張バイアス因子法の方が、より少ない仮定で同じ設計予測値を与えるので、拡張バイアス因子法の方が理論としてはより一般性があると考えられますので、炉定数調整法にはまだ改良の余地が残っていると思われました。

3. 最小分散不偏推定に基づく炉定数調整法の開発

ここからが当該論文の研究内容の紹介となります。前述の拡張炉定数調整法の導出では、最尤推定の考え方を採用しましたが、拡張バイアス因子法の導出では、設計対象炉心の核特性の分散を最小化するように係数を求めています。また、拡張バイアス因子法の導出では、正規分布の仮定

は用いていないものの、積分実験データや核データの誤差を明示的に定義しており、この考え方は、平均値が真値になるという不偏推定の仮定を用いていることに相当すると考えることができます。以上のことから、拡張バイアス因子法の導出では、最小分散不偏推定 (Minimum Variance Unbiased Estimation: MVUE) と呼ばれる考え方が用いられていると解釈することができます。このため、この最小分散不偏推定の考え方に基づいて、従来炉定数調整法や拡張炉定数調整法に対応する新しい炉定数調整法の導出を行いました。これが、最小分散不偏推定に基づく拡張炉定数調整法 (MVUE-EA) と従来炉定数調整法 (MVUE-CA) です。^{*5}

3.1 拡張炉定数調整法と拡張バイアス因子法の理論統合

この結果、最尤推定に基づく拡張炉定数調整法とほとんど同じ式を導出することができました。最小分散不偏推定に基づく拡張炉定数調整法としては、以下のような式が得られました。^{*6}

$$\mathbf{T}_{\text{rigorous-EA}}^{\text{MVUE}} = \mathbf{T}_0 + \underline{\mathbf{G}^{(1)+} \left(\mathbf{G}^{(2)} \mathbf{G}^{(1)+} \right)^+ \mathbf{G}^{(2)} \left(\mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} + \mathbf{G}^{(2)+} \mathbf{V}_m^{(12)\text{T}} \right) \mathbf{D}^{-1} \left(\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) \right)} \quad (5)$$

比較のため、最尤推定に基づく拡張炉定数調整法の調整後の炉定数セットの式を再掲します。

$$\mathbf{T}_{\text{EA}}^{\text{MLE}} = \mathbf{T}_0 + \left(\mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} + \mathbf{G}^{(2)+} \mathbf{V}_m^{(12)\text{T}} \right) \mathbf{D}^{-1} \left(\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) \right) \quad (6)$$

一見するとかなり違う式のように見えますが、(5) 式と (6) 式を比較すると下線を引いたところが追加されただけであることが分かります。

図 1 に示したように、核データの情報を設計対象炉心の核特性の情報に変換するためには、 $\mathbf{G}^{(2)}$ を適用すればよいのですが、実は、(5) 式の下線部分は、左から $\mathbf{G}^{(2)}$ をかけると $\mathbf{G}^{(2)} \mathbf{G}^{(1)+} \left(\mathbf{G}^{(2)} \mathbf{G}^{(1)+} \right)^+ \mathbf{G}^{(2)} = \mathbf{G}^{(2)}$ のように $\mathbf{G}^{(2)}$ に戻ってしまうという特徴を持った式になっています。^{*7}このため、設計対象炉心の核特性、すなわち、設計予測値としては、(5) 式と (6) は等価になります。すなわち、以下の式が成り立ちます。

$$\mathbf{R}_c^{(2)}(\mathbf{T}_{\text{rigorous-EA}}^{\text{MVUE}}) = \mathbf{R}_c^{(2)}(\mathbf{T}_{\text{EA}}^{\text{MLE}}) \quad (7)$$

これにより、正規分布の仮定を用いずに導出した最小分散不偏推定に基づく拡張炉定数調整法も、拡張バイアス因子法と同じ設計予測値を与えることが確認できました。すなわち、拡張炉定数調整法と拡張バイアス因子法の間には矛盾は生じていないことになります。以上の結果から、拡張バイアス因子法と拡張炉定数調整法は、最小分散法に基づく炉定数調整法の開発によって、理論的に統合されたということが出来ます。

以上が、当該論文の最も重要な結論となります。

^{*5} 論文では、もう一つ別に、最小分散不偏推定に基づく回帰炉定数調整法 (Regressive Cross-section Adjustment method: RA) の導出も行っていますが、実用性はほとんどないと考えられるため、本稿では説明を割愛します。

^{*6} 論文では、更に rigorous 法と simplified 法に分けて議論していますが、本稿では rigorous 法に絞って説明します。

^{*7} 厳密には $\mathbf{G}^{(2)} \mathbf{G}^{(1)+}$ が完全階数であるという条件も必要になります。

3.2 従来炉定数調整法と正規分布の仮定

一方で、論文では、最小分散不偏推定に基づく従来炉定数調整法の式も導出しています。これにより、従来炉定数調整法についての新たな知見も得られました。最小分散推定に基づく従来炉定数調整法の調整後の炉定数セットとしては、以下のような式が得られました。

$$\mathbf{T}_{rigorous-CA}^{MVUE} = \mathbf{T}_0 + \underline{\mathbf{G}^{(1)+}\mathbf{G}^{(1)}\mathbf{M}\mathbf{G}^{(1)\mathbf{T}}\mathbf{D}^{-1}} (\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0)) \quad (8)$$

比較のため、最尤推定に基づく従来炉定数調整法の調整後の炉定数セットの式を再掲します。

$$\mathbf{T}_{CA}^{MLE} = \mathbf{T}_0 + \mathbf{M}\mathbf{G}^{(1)\mathbf{T}}\mathbf{D}^{-1} (\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0)) \quad (9)$$

(8) 式と (9) 式を比較すると下線を引いたところだけ余分に追加されていることが分かります。下線部の式に含まれる $\mathbf{G}^{(1)+}$ は逆行列に似た性質がありますが、逆行列のように $\mathbf{G}^{(1)+}\mathbf{G}^{(1)} = \mathbf{I}$ (単位行列) が成り立つには特定の条件が必要になります。 $\mathbf{G}^{(1)}$ は $n^{(1)} \times n_a$ 行列ですが、具体的には、この行列の形、すなわち、調整に用いる積分実験データの数 $n^{(1)}$ と調整される核データの数 n_a の大小関係が重要になります。

調整に用いる積分実験データの数が増える核データの数よりも大きい場合は、炉定数調整法の観点からは、優決定問題の条件 ($n^{(1)} \geq n_a$) となりますが、この場合には、 $\mathbf{G}^{(1)+}\mathbf{G}^{(1)} = \mathbf{I}$ が成り立つため、(5) の下線部分は消えてしまい、(8) 式と (9) 式は等しくなります。^{*8} 一方、大小関係が逆の場合は、劣決定問題の条件 ($n^{(1)} < n_a$) となりますが、この場合には、このような関係は成り立たないため、(8) 式と (9) 式は等しくなりません。

以上を整理すると以下ようになります。

$$\begin{cases} \mathbf{T}_{rigorous-CA}^{MVUE} = \mathbf{T}_{EA}^{MLE} & (n^{(1)} \geq n_a) \\ \mathbf{T}_{rigorous-CA}^{MVUE} \neq \mathbf{T}_{EA}^{MLE} & (n^{(1)} < n_a) \end{cases} \quad (10)$$

このように、最小分散不偏推定に基づく従来炉定数調整法に関しては、「優決定問題の条件の場合には」という追加の条件が必要になりますが、調整後の炉定数セットのレベルで、最尤推定に基づく従来炉定数調整法と等価になります。これまで使われてきた最尤推定に基づく従来炉定数調整法では、正規分布の仮定が必要であると考えられてきましたが、優決定問題の条件の場合については、正規分布の仮定は必要ないということが明らかになりました。

一方で、劣決定問題の条件の場合には、最小分散不偏推定に基づく従来炉定数調整法と最尤推定に基づく従来炉定数調整法は、調整後の炉定数セットとして異なった結果を与えることが分かりました。このことから劣決定問題の条件の場合には、最尤推定従来炉定数調整法では、正規分布の仮定が不要とは言いきれず、何らかの役割を果たしていると推測することができます。

^{*8} 厳密には $\mathbf{G}^{(1)}$ が完全階数であるという条件も必要になります。

3.3 まとめ

ここまでで説明した各手法の特徴を整理すると表 1 のようになります。この表から拡張バイアス因子法 (EB) と最尤推定に基づく従来炉定数調整法 (MLE-CA) の特徴が、最尤推定に基づく拡張炉定数調整法 (MLE-EA) や最小分散不偏推定に基づく従来炉定数調整法 (MVUE-CA) の段階を踏んで、最終的に最小分散推定に基づく拡張炉定数調整法 (MVUE-EA) として統合されたことが分かると思います。

表 1 各手法の特徴の比較

	EB	MLE-CA	MLE-EA	MVUE-CA	MVUE-EA
調整対象炉心への最適化が可能	○	×	○	×	○
正規分布の仮定が不要	○	×	×	○	○
調整 (統合) 炉定数の作成が可能	×	○	○	○	○

理論としては、最小分散推定に基づく拡張炉定数調整法 (MVUE-EA) がすべての特徴を取り込んでいることとなりますが、これらの手法は状況に応じて使い分ける必要があると考えています。例えば、炉心の概念設計を行っているような段階では、設計対象炉心の仕様が明確に決まっていないので、最適化する設計対象炉心を設定することができませんし、むやみに設定するとかえって予測精度を悪化させてしまうと考えられます。このため、このような場合には、拡張炉定数調整法 (MLE-EA、MVUE-EA) よりも、むしろ従来炉定数調整法 (MLE-CA、MVUE-CA) の方が適していると考えられます。

また、正規分布の仮定が不要な最小分散推定に基づく炉定数調整法 (MVUE-CA、MVUE-EA) では、炉定数セットの調整量がエネルギーに対して不連続に大きく変動すること等が分かっています。正規分布の仮定は、多くの場合において妥当性のある仮定と考えられますので、通常は、比較的安定した解が得られる最尤推定に基づく炉定数調整法 (MLE-CA、MLE-EA) を利用しておき、正規分布の仮定が成り立たない場合の影響を評価するために、最小分散推定に基づく炉定数調整法 (MVUE-CA、MVUE-EA) を利用するといった使い分けも考えられます。

4. おわりに

本研究を進めるに当たってはきっかけの段階から、関連分野に精通する貴重な協力者に多く恵まれたと感じております。また、炉定数調整法の理論自体が多くの研究に基づいて整理されてきたものであり、炉定数調整法や拡張バイアス因子法の適用に必要な積分実験データや核データの評価、更にそれらのベースとなる測定の実施まで考えると非常に多くの人の労力の上に成り立っていると感じています。関係者の皆様に、この場を借りてお礼申し上げたいと思います。本稿で紹介した内容は抽象的で分かりにくい面もあったかと思いますが、このような分野に興味を持っていただききっかけとなり、更なる技術の発展の一助となれば幸いです。

記号表

- n_a : 調整対象の炉定数セットに含まれる核データの数
- $n^{(1)}$: 調整に用いる積分実験データの核特性の数
- $n^{(2)}$: 最適化対象として考慮する設計対象炉心の核特性の数
- \mathbf{T} : 任意の炉定数セット ($n_a \times 1$ 行列)
- \mathbf{T}_0 : 調整前の炉定数セット ($n_a \times 1$ 行列)
- \mathbf{M} : 調整前の核データ共分散 ($n_a \times n_a$ 行列)
- $\mathbf{G}^{(1)}$: 積分実験データの感度係数 ($n^{(1)} \times n_a$ 行列)
- $\mathbf{G}^{(2)}$: 設計対象炉心の感度係数 ($n^{(2)} \times n_a$ 行列)
- $\mathbf{R}_e^{(1)}$: 積分実験データの実験値 ($n^{(1)} \times 1$ 行列)
- $\mathbf{V}_e^{(1)}$: 積分実験データの実験に起因する不確かさ ($n^{(1)} \times n^{(1)}$ 行列)
- $\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) = (R_{c,1}^{(1)}, R_{c,2}^{(1)}, \dots, R_{c,i}^{(1)}, R_{c,n^{(1)}}^{(1)})^T$: 炉定数セット \mathbf{T}_0 を使って計算した積分実験データの計算値 ($n^{(1)} \times 1$ 行列)
- $\mathbf{V}_m^{(1)}$: 積分実験データの解析モデルに起因する不確かさ ($n^{(1)} \times n^{(1)}$ 行列)
- $\mathbf{R}_c^{(2)}(\mathbf{T}_0) = (R_{c,1}^{(2)}, R_{c,2}^{(2)}, \dots, R_{c,i}^{(2)}, R_{c,n^{(2)}}^{(2)})^T$: 炉定数セット \mathbf{T}_0 を使って計算した設計対象炉心の核特性の計算値 ($n^{(1)} \times 1$ 行列)
- $\mathbf{V}_m^{(2)}$: 設計対象炉心の解析モデルに起因する不確かさ ($n^{(2)} \times n^{(2)}$ 行列)
- $\mathbf{V}_m^{(12)}$: 積分実験データと設計対象炉心の解析モデルに起因する不確かさの相互相関 ($n^{(1)} \times n^{(2)}$ 行列)
- $\mathbf{D} \equiv \mathbf{G}^{(1)}\mathbf{M}\mathbf{G}^{(1)T} + \mathbf{V}_e^{(1)} + \mathbf{V}_m^{(1)}$: 積分実験データの C/E 値に含まれるすべての不確かさの合計
- $\mathbf{V}_{e+m}^{(1)} \equiv \mathbf{V}_e^{(1)} + \mathbf{V}_m^{(1)}$: 積分実験データの実験に起因する不確かさと解析モデルに起因する不確かさの合計

参考文献

- [1] K. Yokoyama and A. Yamamoto. Cross-section adjustment methods based on minimum variance unbiased estimation. *J. Nucl. Sci. Technol.*, Vol. 53, No. 10, pp. 1622–1638, 2016.
- [2] J. B. Dragt. Statistical considerations on techniques for adjustment of differential cross sections with measured integral parameters. In *STEK, The Fast-Thermal Coupled Facility of RCN at Petten*, RCN-122, pp. 85–105. Reactor Centrum Nederland, 1970.
- [3] J. B. Dragt, J. W. M. Dekker, H. Guppelaar, and A. J. Janssen. Methods of adjustment and error evaluation of neutron capture cross sections; application to fission product nuclides. *Nucl. Sci. Eng.*, Vol. 62, pp. 117–129, 1977.
- [4] T. Takeda, A. Yoshimura, and T. Kamei. Prediction uncertainty evaluation methods of core performance parameters in large liquid-metal fast breeder reactors. *Nucl. Sci. Eng.*, Vol. 103, pp. 157–165, 1989.

- [5] T. Kugo, T. Mori, and T. Takeda. Theoretical study on new bias factor methods to effectively use critical experiments for improvement of prediction accuracy of neutronic characteristics. *J. Nucl. Sci. Technol.*, Vol. 44, No. 12, pp. 1509–1517, 2007.
- [6] C. de Saint-Jean, E. Dupont, M. Ishikawa, G. Palmiotti, and M. Salvatores. Assessment of existing nuclear data adjustment methodologies. Technical Report NEA/NSC/WPEC/DOC(2010)429, OECD/NEA, 2011.
- [7] G. Cecchini, U. Farinelli, A. Gandini, and M. Salvatores. Analysis of integral data for few-group parameter evaluation of fast reactors. In *Proc. 3rd Int. Conf. Peaceful Uses Atomic Energy*, pp. 388–397, Geneva, Switzerland, 1964. P/627.
- [8] M. Humi, J. J. Wagschal, and Y. Yeivin. Multi-group constants from integral data. In *Proc. 3rd Int. Conf. Peaceful Uses Atomic Energy*, pp. 398–402, Geneva, Switzerland, 1964. P/668.
- [9] M. Ishikawa, T. Hoshi, T. Sanda, T. Kamei, and T. Kawakita. Development of an adjusted group cross-sectionset for large LMFBR cores using the JUPITER analytical results. In *Proc. of the 1992 Symposium on Nuclear Data*, pp. 36–47, Tokai, Japan, November 26-27, 1992.
- [10] M. Ishikawa, T. Hoshi, T. Sanda, T. Kamei, and T. Kawakita. Improvement of nuclear design method for large LMFBR cores using the cross-section adjustment. In *Proc. Joint Int. Conf. Mathematical Methods and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C+SNA'93)*, pp. 593–604, Karlsruhe, Germany, April 16-20, 1993.
- [11] T. Sano and T. Takeda. Generalized bias factor method for accurate prediction of neutronics characteristics. *J. Nucl. Sci. Technol.*, Vol. 43, No. 12, pp. 1465–1470, 2006.
- [12] K. Yokoyama, M. Ishikawa, and T. Kugo. Extended cross-section adjustment method to improve the prediction accuracy of core parameters. *J. Nucl. Sci. Technol.*, Vol. 49, No. 12, pp. 1165–1174, 2012.
- [13] H. Mitani and H. Kuroi. Adjustment of group cross sections by means of integral data, (I) theoretical study. *J. Nucl. Sci. Technol.*, Vol. 9, No. 7, pp. 383–394, 1972.
- [14] A. Gandini. Nuclear data and integral measurements correlation for fast reactors. part 1: Statistical formulation. Technical Report RT/IF(73)5, Comitato Nazionale Energia Nucleare, 1973.
- [15] 岩本大樹, 西原健司, 方野量太, 福島昌宏, 辻本和文. 核変換物理実験施設を用いた炉物理実験による加速器駆動核変換システム炉物理パラメータの不確かさの低減効果. Technical Report JAEA-Research 2014-033, 日本原子力研究開発機構, 2014.
- [16] 石川眞. 核設計への応用：炉定数調整法. 第 45 回炉物理夏期セミナーテキスト 炉物理と核データ-断面積測定から実機解析の応用まで-. 日本原子力学会 炉物理部会, 2013.

付録 A 最尤推定 (ベイズの定理) に基づく従来炉定数調整法の導出の詳細

A.1 背景

本文中で紹介した最小分散不偏推定に基づく炉定数調整法 [1] の理論式の導出の詳細については、前述のように論文に記載しましたので、もしこの記事の内容に興味を持たれた方は導出の詳細についてもご参照いただければと思います。この場合、比較する対象として、最尤推定 (ベイズの定理) に基づく従来炉定数調整法の理論式の導出の詳細が必要になりますが、残念ながら、本文中で紹介した文献 [2-4] には、途中の式展開についてはそれほど詳しく記載されていません。特に式展開が難しい部分については、別の文献 (文献 [13] の (37) 式から (40) 式にかけてや、文献 [14] の (A1.15) 式から (A1.22) 式にかけて) に説明があるのですが、導出過程をすべてフォローするのは案外難しいと感じています。文献 [2-4] では、正規分布を仮定して事後確率を最大化する方法、すなわち、この考え方に基づいて最小化すべき関数 (以下、 J 関数) を定義して、 J 関数が最小となるベクトルを求める方法 (文献 [4] ではより具体的に、 J 関数の偏微分の値が 0 になるときのベクトル) を求める方法で、調整後の炉定数セットの式を導出しますが、この導出の流れは、最小分散不偏推定に基づく炉定数調整法の導出と似ており、その物理的意味を理解する上でも重要と考えています。このため、最尤推定に基づく炉定数調整法の理論式の導出の詳細をこの J 関数を偏微分して導出する方法でまとめて説明している文献をご紹介しますのですが、良い文献を見つけられておりません。

本文中で紹介した拡張炉定数調整法の文献 [12] でも、最尤推定に基づく従来炉定数調整法の導出について言及していますが、この文献では、平方完成と呼ばれる方法で別途導出されたガウス分布の公式と呼ばれる公式を使って説明しています。このため、 J 関数を偏微分して導出する方法については説明できておりません。また、比較的最近、JAEA から発行された報告書 [15] にも、従来炉定数調整法の導出についての記載があり、参考になる部分がありますが、この導出方法も J 関数を偏微分して導出する方法とは異なっているようです。一方で、本文で紹介した統合炉定数 ADJ91 の作成当時に導出の詳細について確認が行われており、この導出の詳細については、2013 年の炉物理夏期セミナー [16] で講義があったようなのですが、残念ながら、この導出の詳細は炉物理夏期セミナーのテキストには収録されなかったようです。ただし、この導出方法はかなり複雑で難解なものとなっています。

以上のように、最小分散不偏推定の炉定数調整法の導出の詳細 [1] に対応する、最尤推定に基づく従来炉定数調整法の導出の詳細がまとめて記載されている適切な文献をご紹介しますことができませんので、本稿の付録として、最尤推定に基づく従来炉定数調整法の導出の詳細をなるべく簡潔になるように整理してご紹介させていただきたいと思います。

A.2 導出

この付録でも本文中と同様に、記号表にまとめた記号を用います。前述のように最尤推定に基づく炉定数調整法の導出では、正規分布を仮定して事後確率を最大化するという考え方に基づいて、

J 関数を定義し、その偏微分の値が 0 になるときのベクトルを求める方法で、調整後の炉定数セットの式を導出します。この J 関数は、任意の炉定数セット \mathbf{T} を変数として、以下のように表わすことができます。

$$J = (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) + \left(\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}) \right)^T \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \left(\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}) \right) \quad (\text{A.1})$$

ただし、ここで、式を簡単にするために、 $\mathbf{V}_{e+m}^{(1)} \equiv \mathbf{V}_e^{(1)} + \mathbf{V}_m^{(1)}$ と定義し、更に、少し紛らわしいですが、曖昧さはないと思いますので、 $\mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \equiv \left(\mathbf{V}_{e+m}^{(1)} \right)^{-1}$ と表記しています。なお、(A.1) 式は文献 [3] の (2) 式、及び、文献 [4] の (10) 式に対応しています。ここでは、この式から導出を始めます。

最小分散不偏推定に基づく炉定数調整法の導出でも用いている感度係数の線形性の仮定 (文献 [1] の (20) 式) により、以下の式が成り立ちます。

$$\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}) = \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) + \mathbf{G}^{(1)} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \quad (\text{A.2})$$

この式を J 関数、すなわち、(A.1) 式に代入すると、以下のように変形することができます。

$$\begin{aligned} J &= (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \\ &\quad + \left(\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{G}^{(1)} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \right)^T \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \left(\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{G}^{(1)} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \right) \\ &= (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \\ &\quad + \left(\mathbf{G}^{(1)} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) + \left(\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)} \right) \right)^T \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \left(\mathbf{G}^{(1)} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) + \left(\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)} \right) \right) \\ &= (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \\ &\quad + (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{G}^{(1)T} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \\ &\quad + (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{G}^{(1)T} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \left(\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)} \right) + \left(\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)} \right)^T \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \\ &\quad + \left(\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)} \right)^T \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \left(\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)} \right) \\ &= (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \left(\mathbf{M}^{-1} + \mathbf{G}^{(1)T} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)} \right) (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \\ &\quad + (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{G}^{(1)T} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \left(\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)} \right) + \left(\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)} \right)^T \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \\ &\quad + \left(\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)} \right)^T \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \left(\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

ただし、ここで、任意の行列 \mathbf{A} 、 \mathbf{B} に対して以下の式が成り立つことを用いています。

$$(\mathbf{AB})^T = \mathbf{B}^T \mathbf{A}^T \quad (\text{A.4})$$

次に、 J 関数の値が最小となる \mathbf{T} を求めるために J を \mathbf{T} で偏微分することを考えます。一般に、任意の定数列ベクトル \mathbf{a} 、任意の定数行列 \mathbf{A} 、変数列ベクトル \mathbf{x} の関数に対して、以下のような偏微分の式が成り立ちます。

$$\frac{\partial \mathbf{x}^T \mathbf{a}}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{a}^T \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{a} \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{\partial \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = (\mathbf{A} + \mathbf{A}^T) \mathbf{x} \quad (\text{A.6})$$

一方で、以下の式が成り立ちます。

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{T}} = \frac{\partial J}{\partial (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)} \cdot \frac{\partial (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)}{\partial \mathbf{T}} = \frac{\partial J}{\partial (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)} \cdot \mathbf{1} = \frac{\partial J}{\partial (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)} \quad (\text{A.7})$$

以上のことから、 J を \mathbf{T} で偏微分した量は以下のように表すことができます。

$$\begin{aligned} \frac{\partial J}{\partial \mathbf{T}} &= \frac{\partial J}{\partial (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)} \\ &= \left((\mathbf{M}^{-1} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)}) + (\mathbf{M}^{-1} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)})^{\text{T}} \right) (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \\ &\quad + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} (\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)}) + \left((\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)})^{\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)} \right)^{\text{T}} \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

ここで、 $(\mathbf{M}^{-1} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)})$ と $\mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1}$ が対称行列であること、(A.4) 式が成り立つことから、更に、以下のように変形できます。

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{T}} = 2(\mathbf{M}^{-1} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)}) (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) + 2(\mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} (\mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0) - \mathbf{R}_e^{(1)})) \quad (\text{A.9})$$

この式が 0 になるときに J 関数の値は最小になると考えることができますので、このときの \mathbf{T} を \mathbf{T}_{CA}^{MLE} と定義すると、以下の式が得られます。

$$(\mathbf{M}^{-1} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)}) (\mathbf{T}_{CA}^{MLE} - \mathbf{T}_0) = \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} (\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0)) \quad (\text{A.10})$$

この式の両辺に左から $(\mathbf{M}^{-1} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)})^{-1}$ を掛けると、以下のように変形できます。

$$\mathbf{T}_{CA}^{MLE} - \mathbf{T}_0 = (\mathbf{M}^{-1} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)})^{-1} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} (\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0)) \quad (\text{A.11})$$

ここで、この式を更に変形するために、以下の恒等式について考えます。

$$\mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} = \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \quad (\text{A.12})$$

この式の両辺に $\mathbf{G}^{(1)\text{T}}$ を加えると以下のように変形することができます。

$$\begin{aligned} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} &= \mathbf{G}^{(1)\text{T}} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \\ \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)} &= \mathbf{M}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \\ \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} (\mathbf{G}^{(1)} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} + \mathbf{V}_{e+m}^{(1)}) &= (\mathbf{M}^{-1} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)}) \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

更に、この式の両辺に右から $(\mathbf{G}^{(1)} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} + \mathbf{V}_{e+m}^{(1)})^{-1}$ 、左から $(\mathbf{M}^{-1} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)})^{-1}$ を掛けると以下の式が得られます。

$$(\mathbf{M}^{-1} + \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} \mathbf{G}^{(1)})^{-1} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} \mathbf{V}_{e+m}^{(1)-1} = \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} (\mathbf{G}^{(1)} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} + \mathbf{V}_{e+m}^{(1)})^{-1} \quad (\text{A.14})$$

この式を (A.11) 式に代入すると以下の式が得られます。

$$\mathbf{T}_{CA}^{MLE} = \mathbf{T}_0 + \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} (\mathbf{G}^{(1)} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(1)\text{T}} + \mathbf{V}_e^{(1)} + \mathbf{V}_m^{(1)})^{-1} (\mathbf{R}_e^{(1)} - \mathbf{R}_c^{(1)}(\mathbf{T}_0)) \quad (\text{A.15})$$

この式は、本文中の (1) 式、文献 [3] の (10) 式、文献 [4] の (12) 式に対応しています。このようにして、最尤推定 (ベイズの定理) に基づく従来炉定数調整法における調整後の炉定数セットを表す式を導出することができます。