

## ランダムサンプリング法に基づくバイアス因子法

遠藤 知弘

## 1. はじめに

このたびは、第 50 回(平成 29 年度)日本原子力学会 論文賞を受賞する機会に恵まれ、いまだ光栄に感じております。詳細は後述致しますが、本研究は名大・山本 章夫 研究室で実施され続けてきている不確かさ評価(Uncertainty Quantification, UQ)・データ同化手法(Data Assimilation, DA)に関する研究成果の一部であり、山本 章夫 研究室を修了した学生の英知の詰まった成果となっています。

さて、こういった切り口で原稿を進めようかと思案いたしましたところ、過去の「炉物理の研究」に寄稿した原稿「名大の炉物理研究」[1]を、ふっと思い出しました。そこで、若かりし遠藤 知弘くんは今後取り組みたい研究課題の一つとして「炉心解析・核計算の不確かさの定量化」を挙げていました。その当時の目論見としては、

『例えば米国で研究されている Ep-GPT[2]や GPT-free[3] 等の効率良い摂動計算手法に倣って、より実用的な手法を編み出したい』

と綴っていました。それ以降、試行錯誤した検討の末、「ランダムサンプリング法」という確率論的手法に基づいた手法に辿りついた成果の一つをまとめた内容が本論文[4]となります。なお、これと対となるもう一つの成果としては、共著者の一人である渡邊 友章さんが発表された「ランダムサンプリング法に基づいた炉定数調整法」[5]であり、これら 2 つの手法はともに「データ同化手法」、すなわち「測定結果を取り込むことで、数値計算による予測結果のバイアス・不確かさの低減を図る手法」となっています。両者の違いは、

- ① 炉定数調整法：入力パラメータを更新する手法。評価済み核データのバイアス・不確かさ(共分散)を更新→更新後の核データに基づいて数値計算による予測結果を改善
- ② バイアス因子法：出力結果のみを改善する手法。測定結果と数値計算の相関情報を活用して、数値計算による予測結果を改善

といった違いであり、最終的に目指すところは同じです。

少し脱線してしまいましたが、今回の寄稿では堅苦しい数式・理論は極力控えて、その当時の研究室の研究を振り返りながら、文章を綴りたいと思います。

## 2. 軽水炉炉心解析の UQ,DA の何が難しいの？

炉物理分野において、バイアス因子法や炉定数調整法といったデータ同化手法は、高速炉炉心解析の分野や、ゼロ出力で熱的フィードバック効果のない臨界実験解析の分野において、主に発達し研究されてきた、と私は理解しています[6],[7]。

まず、我々取り組んでいる核計算の誤差要因は、大きく以下の 2 つに分けることができます。

- ① 計算手法起因の誤差：決定論的手法における離散化誤差や、確率論的手法における統計誤差。なお、連続エネルギーモンテカルロコードであったとしても、理論屋・コード開

発者が見落としていた物理モデルがあれば、それも潜在的な誤差となります。

## ② 入力パラメータの不確かさ：寸法や核種組成の不確かさ、そして評価済み核データの共分散

核計算の UQ を考える上で、まず立ちはだかる難敵は入力パラメータの 1 つである評価済み核データ起因の不確かさでしょう。核計算で用いる入力パラメータ数(評価済み核データの数)は非常に多いという問題です。例えば、SCALE6.2.3[8]に付属している核データ共分散データ(scale.rev08.252groupcov7.1)に収録されているデータのうち  $^{235}\text{U}$  を調べてみると、この 1 核種だけでもエネルギー群数 252 群×核データ数 7 種類(弾性散乱、 $(n,n')$ 、 $(n,2n)$ 、核分裂、 $(n,\gamma)$ 、 $\nu$ 、 $\chi$ ) $\approx$ 約  $10^3$  個の入力パラメータに対して不確かさ情報が評価

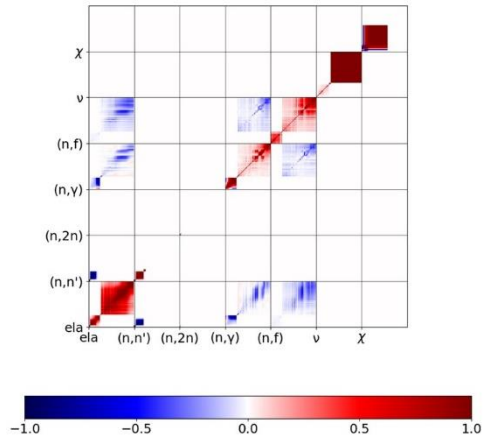


Figure 1  $^{235}\text{U}$  核データの相関係数行列

されており、懇切丁寧に 1 個 1 個のパラメータが予測結果に与える影響を調べようと思うと、約  $10^3$  回もの核計算が必要になってしまうこととなります…。実際の計算では、核燃料の燃焼により MA や FP が生成されることも考えると、この計算量が数十～百倍ものオーダーで増加するため、このような直接法に基づく UQ は非現実的なものとなります。

このような困難さを解決するために、偉大なる先人の方々が編み出した手法が、1 次摂動論に基づいた感度係数評価(Sensitivity Analysis, SA)[9]とサンドイッチ則(不確かさ伝播則)になります。摂動論に基づく SA の場合、実効増倍率  $k_{\text{eff}}$  の解析であれば、forward の固有値計算と adjoint の固有値計算の 2 回だけ実施し、得られた 2 つの固有関数  $\phi$ 、 $\phi^\dagger$  を利用したベクトル・行列演算により、 $k_{\text{eff}}$  の相対感度係数  $S(k_{\text{eff}}, \sigma) = \frac{\sigma}{k_{\text{eff}}} \frac{\partial k_{\text{eff}}}{\partial \sigma}$  (ある核データに  $\sigma$  が 1% 変化した時に  $k_{\text{eff}}$  が何% 変化するか) を低計算コストで求めることができます。こうして得られた全  $\sigma$  に対する相対感度係数を(Jacobian 行列の定義に従って)横方向に行ベクトル  $\mathbf{S}$  としてまとめ、核データの相対共分散行列  $\text{cov}(\sigma, \sigma)$  に対して  $\mathbf{Scov}(\sigma, \sigma)\mathbf{S}^T$  と左右からサンドイッチ  $\left[ \begin{smallmatrix} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{smallmatrix} \right]$  のように挟み込んで行列積を取ることで、「核データ不確かさに起因する  $k_{\text{eff}}$  相対分散」を求めることができます。この平方根をとった相対標準偏差が、核データ不確かさに起因する  $k_{\text{eff}}$  の不確かさ( $\%dk/k$ )に対応します。さらに、様々な計算体系に対して得られた相対感度係数ベクトルを更に縦方向に並べ、(計算体系の数)行×(核データの数列)の行列  $\mathbf{S}$  とすれば、 $\mathbf{Scov}(\sigma, \sigma)\mathbf{S}^T$  の行列演算をするだけで、様々な計算体系間の  $k_{\text{eff}}$  相対共分散行列も求めることができます。

上述のように、摂動論による SA で感度係数行列  $\mathbf{S}$  さえ評価することができれば、あとはバイアス因子法[10],[11]・炉定数調整法[12],[13],[14]といった手法を利用することで、測定結

果(例: ICSBEP[15]に収録された臨界実験の結果)を活用して、測定結果と相関の強い(測定体系との代表性因子が 1 に近い)設計体系の核特性予測精度を改善することもできます。具体的には、この寄稿のメインテーマとなる「複数の測定値・予測結果を対象としたバイアス因子法[4]」であれば、設計体系の核特性予測結果 $\mathbf{R}_{\text{calc}}^{(2)}$ および不確かさ(相対共分散)を、測定体系の測定結果 $\mathbf{R}_{\text{exp}}^{(1)}$ の情報を取り入れることで、以下の式により改善することができます。

$$\mathbf{R}_{\text{after}}^{(2)} = \mathbf{R}_{\text{calc}}^{(2)} + \mathbf{K} (\mathbf{R}_{\text{exp}}^{(1)} - \mathbf{R}_{\text{calc}}^{(1)}) \quad (1)$$

$$\text{cov}(\mathbf{R}_{\text{after}}^{(2)}, \mathbf{R}_{\text{after}}^{(2)}) = \mathbf{S}^{(2)} \text{cov}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{S}^{(2)T} + \mathbf{V}_{\text{model}}^{(2)} - \mathbf{K} \left( \mathbf{S}^{(1)} \text{cov}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{S}^{(1)T} + \mathbf{V}_{\text{model}}^{(12)} \right) \quad (2)$$

$$\mathbf{K} \equiv \left( \mathbf{S}^{(2)} \text{cov}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{S}^{(1)T} + \mathbf{V}_{\text{model}}^{(21)} \right) \left( \mathbf{S}^{(1)} \text{cov}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{S}^{(1)T} + \mathbf{V}_{\text{exp}}^{(1)} + \mathbf{V}_{\text{model}}^{(1)} \right)^{-1} \quad (3)$$

上添字(1) : 測定体系の核特性。測定および数値計算による予測が可能な核特性。

上添字(2) : 設計体系の核特性。数値計算で予測を試み、精度向上を図る核特性。

$\mathbf{R}_{\text{exp}}^{(1)}$  : 測定体系における核特性 1 の測定結果。なお、異なる種類の測定結果が複数ある場合には、縦方向に並べて列ベクトルとする。

$\mathbf{R}_{\text{calc}}^{(1)}$  : 測定体系における核特性 1 の数値計算による予測結果(期待値)。

$\mathbf{R}_{\text{calc}}^{(2)}$  : データ同化前の設計対象における核特性 2 の予測結果(期待値)。なお、異なる種類の予測結果が複数ある場合には、縦方向に並べて列ベクトルとする。

$\mathbf{R}_{\text{after}}^{(2)}$  : データ同化後の設計対象における核特性 2 の予測改善結果(期待値)。

$\text{cov}(\mathbf{R}_{\text{after}}^{(2)}, \mathbf{R}_{\text{after}}^{(2)})$  : データ同化後の設計対象における予測改善結果の相対共分散。

$\mathbf{S}^{(i)}$  : 測定体系または設計体系の核特性( $i = 1$  or  $2$ )の相対感度係数行列。(核特性 $i$ の数)行 $\times$ (核データの数)列の行列。

$\mathbf{V}_{\text{exp}}^{(1)}$  : 測定結果の相対共分散行列。(核特性 1 の数)行 $\times$ (核特性 1 の数)列の行列。

$\mathbf{V}_{\text{model}}^{(i)}$  : 測定体系または設計体系の核特性( $i = 1$  or  $2$ )の計算手法起因の誤差(相対共分散行列)。(核特性 $i$ の数)行 $\times$ (核特性 $i$ の数)列の行列。

$\mathbf{V}_{\text{model}}^{(12)}$  : 測定体系と設計体系計の算手法起因の相対共分散行列。(核特性 1 の数)行 $\times$ (核特性 2 の数)列の行列。

ということで、摂動論に基づいて SA を実施さえできれば、核データ共分散行列に起因した核特性の UQ や DA を効率良く実施することができることとなります。しかし、従来取り組まれてきた摂動論に基づく SA, UQ, DA を軽水炉炉心解析に適用しようと考えた場合、以下に挙げるような課題に直面することとなります。

① 決定論的手法による軽水炉炉心解析の場合、多段階の計算手順(集合体計算による断面積テーブル作成 $\rightarrow$ 3次元全炉心計算)を利用するため、摂動論による SA で必要となる随伴計算が複雑となる。

✓ 補足すると、集合体計算では「反応率保存」に基づいて巨視的断面積のエネルギー

一群縮約・均質化を行うため、一般化摂動論(GPT)により粗群・均質化断面積の SA を実施することも原理的には可能である。ただし、共鳴計算における implicit effect[16],[17]など、真面目に考えれば考えるほど計算手順が煩雑となる(炉心解析コードシステムの大幅な修正が必要となる)。

- ② さらに、HFP における 1 サイクルを通じた炉心計算を考えた場合、核燃料の燃焼効果、熱水力計算による核熱フィードバック効果があるが、摂動論による SA における燃焼・核熱フィードバックの取り扱いが非常に困難。
  - ✓ また、次サイクルの炉心計算を行うためには、そのサイクルで使用する「過去のサイクルで照射された照射済み燃料」の解析も当然必要となるため、計算の煩雑さは更に増す。
- ③ 炉心解析において予測対象とする核特性は「実効増倍率 $k_{\text{eff}}$ 」だけではなく、PWR であれば臨界ホウ素濃度、出力分布、燃焼度分布、反応度値・反応度係数、など多岐に渡る。予測したい出力結果の数が増えるほど、それに比例して多数の複雑な随伴方程式を解くこととなり、摂動論による SA の計算コスト上の利点が低下してしまう。

以上で述べた困難な課題ゆえ、軽水炉炉心解析における実用的な SA,UQ,DA を達成するためには、何らかのブレイクスルーが必要な状況でした。

### 3. 本研究成果が得られるまでの道のり

振り返ると、安江 祉洋さん(2012/3 修士卒)による「核データ起因の核特性パラメータ間の相関を考慮した不確かさ定量評価」の研究で得られた成果[18]が、本研究に繋がる多くの示唆を与えたものとなっています。この研究の肝は、「異なる核特性間の核データ起因相関に注目し、測定可能な核特性の測定結果&測定誤差を活用して、別の核特性の不確かさを予測する」という点ですが、要は、「核特性間の共分散(相関)に基づいたデータ同化手法」に相当します。例えば、評価済み核データの共分散データに基づいて炉心計算の UQ を実施

することで、①あるバンク位置における制御棒値の予測結果と、②ある位置における集合体出力分布の予測結果との間に非常に相関が強いことが示されます。例えば、「炉物理試験において測定可能な「各バンク位置の制御棒値の測定値・測定誤差」を利用すれば、相関を利用して出力分布予測結果の不確かさが評価できる」ことに繋がります。この安江さんの研究では、できる限り問題を簡略化し、燃焼・核熱フィードバック効果は無視していたため、摂動論により SA,UQ を実施していました。故に、燃焼・核熱フィードバック効果を如何に取り扱えば良いのかという課題が、次の後輩・我々教員に託された形になります。

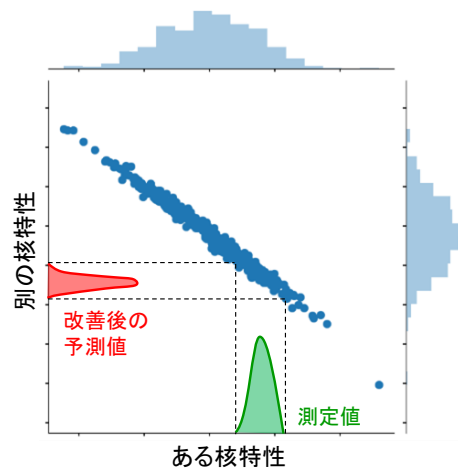


Figure 2 相関を利用した予測結果改善の概念図

これに続いて、「ランダムサンプリング法」を積極的に取り入れたのが、加藤 慎也さん(2013/3 修士卒)になります[19]。加藤さんの研究では、JAEA 横山さんが提案された拡張炉定数調整法[13]の考え方を、核熱フィードバック効果の無い単純な小型軽水炉体系の計算で活用しようと試行錯誤していました。彼の計算では、集合体計算を SRAC2006/PIJ[20]で実施し、得られた集合体断面積テーブルに基づいてマクロ燃焼方式のエネルギー2群炉心計算を実施していました。エネルギー2群の炉心計算であれば、入力パラメータとなる巨視的断面積の数が比較的少ないため、燃焼フィードバックがあったとしても、摂動論ではなく直接法(1,2群の各巨視的断面積を1つずつ微小量だけ変化させて一連の炉心燃焼計算を実施する方式)を用いることで、炉心計算における炉心燃焼度点毎の感度係数( $k_{\text{eff}}$ , 出力分布)を比較的少ない計算コストで、随伴計算をすることなく容易に推定することができます。ここで課題となっていたのは、JENDL-4.0の共分散データ[21]に基づいて、「エネルギー2群の均質化断面積の感度係数(共分散行列)をどのように求めればよいのか?」という点でした。加藤さんは学部4年生の時には、MOCによるGPT計算に取り組んでいましたが、それ故に、GPT計算の煩雑さ・限界が骨身にしみていたのではないのでしょうか。煩雑なGPT計算に頼らずに、2群均質化断面積の共分散行列を求める方法として、「JENDL-4.0共分散データに基づいた多変量正規乱数により、SRAC2006/PIJの微視的断面積データを多数個ランダムサンプリングし、多数回集合体計算を実施して統計処理する」という方法に辿り着きました。

ランダムサンプリング法は、計算機性能の向上に伴い、2000年代後期ごろから注目されつつあった手法かと思われます。例えば、有名な手法として、NRGが開発した Total Monte Carlo(TMC。核模型パラメータをランダムサンプリングすることで TALYS により複数の ENDF 形式ファイルを準備し、摂動された断面積に基づき MCNP による連続エネルギーモンテカルロ計算を多数回実施し、統計処理すること UQ を実施する方法) [22]が挙げられます。2016年に公開された SCALE6.2には、「Sampler」という核データ共分散データに基づいたランダムサンプリング機能も実装され、現在では(計算時間さえ許容できれば)単純かつ実用的な UQ 手法としてランダムサンプリング法が利用できるようになっています[23],[8]。

こうして、単純な小型軽水炉体系によるフィジビリティスタディながらも、マクロ燃焼方程式による炉心計算における炉定数調整法による DA の妥当性を数値実験により確認することができました。ただし、加藤さんが編み出した手法では、「集合体計算はランダムサンプリング法、炉心計算は直接法による SA」となっており、SRAC2006/PIJで使用する最上流の微視的断面積データを更新するのではなく、炉心計算で用いる少数群・均質化断面積を更新することで予測精度の改善を図っていました。軽水炉炉心解析システムとして有名なものとして、CASMO[24]/Simulate[25]が挙げられますが、加藤さんの手法を活用しようと思っても、後段の Simulate による炉心計算の SA をどうすればよいのか、が依然として大きな壁として残った形です。Simulate のように実際の炉心計算で用いる炉定数テーブルは次元数(断面積テーブルにおける状態変数の総数)が多いため、直接法による SA も実施し難くなります。

以上の研究成果を踏まえた上で、渡邊 友章さん(2015/3 修士卒)が編み出すことになるのが、「ランダムサンプリング法に基づく炉定数調整法」[5]となります。この研究課題に取り組むにあたって、渡邊さんは学部4年生の卒業研究として、まずはランダムサンプリング法による PWR 炉心解析の UQ に取り組みました[26]。この研究では、燃焼効果や核熱フィードバックといった厄介な効果を含む PWR 炉心解析の UQ を実現するにあたって、以下のような方法を採用しました。

- ① JENDL-4.0 共分散行列に基づいて CASMO4 で使用する微視的断面積ライブラリそのものを多数個ランダムサンプリングする。
- ② 各摂動後微視的断面積ライブラリに基づいて一連の「CASMO4 集合体計算→Simulate3 炉心計算」を多数回実施する。
- ③ 得られた多数個の CASMO4/Simulate3 炉心解析の結果を統計処理することで、炉心核特性予測結果の UQ、核特性間の共分散行列(相関)を評価する。

なお、軽水炉炉心解析の UQ については、木下 国治さん(2016/3 修士卒)が「ラテン超方格法」という凝ったサンプリング手法に基づいて、PWR・BWR 炉心解析の UQ を実施しています[26]。

上述した検討に引き続いて、渡邊さんのほうで「ランダムサンプリング法に基づいて感度係数 $\mathbf{S}$ を評価する[27]」といった試行錯誤もありました。これはこれで一つの解決策となっています。例えば、別の研究例として、北大・千葉 豪 先生が考案されたランダムサンプリング法による感度係数評価の論文[28]も挙げられます。特に、千葉論文[28]の「2.2 Nuclear data-wise uncertainty estimation」の内容(14)式は必見といえるでしょう。すなわち、「ランダムサンプリング法で得られた全不確かさについて、各核種・各反応の寄与を調べたければ、わざわざ感度係数行列を推定する必要はなく、①注目する核種・核データ $\tilde{\sigma}$ の部分共分散データと②ランダムサンプリング法で得られた核データ $\tilde{\sigma}$ と核特性( $k_{\text{eff}}$ )の共分散行列の行列演算のみで容易評価可能」であることを示しています。

当時の我々の検討では、摂動論に基づいた SA,UQ,DA の歴史的な流れを踏まえて(とらわれすぎて)、感度係数を求めることに躍起になっていました。が、もっと単純に考えて、炉定数調整法では感度係数 $\mathbf{S}$ を用いて結局のところ何を推定しているのか考えてみると、

- ✓  $\text{Scov}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma})\mathbf{S}^T$  : 核データ共分散行列に起因した注目している核特性の共分散行列
- ✓  $\text{Scov}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma})$  : 核データと注目している核特性間の共分散行列

であることに(今して思えば当たり前のことですが、紆余曲折の末)気づきました。ということは、わざわざ感度係数行列 $\mathbf{S}$ を推定しなくても、ランダムサンプリング法による統計処理で上述の量を以下のように推定すれば良い、という発想に至ることになります。

$$\mathbf{Scov}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma})\mathbf{S}^T \approx \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{R}_{\text{calc},i} - \bar{\mathbf{R}}_{\text{calc}})(\mathbf{R}_{\text{calc},i} - \bar{\mathbf{R}}_{\text{calc}})^T \quad (4)$$

$$\mathbf{Scov}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma}) \approx \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{R}_{\text{calc},i} - \bar{\mathbf{R}}_{\text{calc}})(\boldsymbol{\sigma}_i - \bar{\boldsymbol{\sigma}})^T \quad (5)$$

$$\bar{\mathbf{R}}_{\text{calc}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{R}_{\text{calc},i} \quad (6)$$

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\sigma}_i \quad (7)$$

- $N$  : サンプルサイズ。ランダムサンプリングした数。  
 $\boldsymbol{\sigma}_i$  : 共分散データに基づいてランダムサンプリングした  $i$  番目の摂動後核データ。各中性子エネルギー群・各種類の核データを縦方向に並べて列ベクトルとする。  
 $\mathbf{R}_{\text{calc},i}$  :  $i$  番目の摂動後核データを用いて得られる炉心解析による予測結果。なお、異なる種類の測定結果が複数ある場合には、縦方向に並べて列ベクトルとする。

同様に、バイアス因子法の場合には、(1)–(3)式中の  $\mathbf{S}^{(1)} \mathbf{cov}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma})\mathbf{S}^{(1)T}$ 、 $\mathbf{S}^{(2)} \mathbf{cov}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma})\mathbf{S}^{(2)T}$ 、 $\mathbf{S}^{(1)} \mathbf{cov}(\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\sigma})\mathbf{S}^{(2)T}$  について、ランダムサンプリング法により核特性 1 と核特性 2 の間の共分散行列を推定すれば良いだけとなります。すなわち(2),(3)式が以下のようなになります。

$$\mathbf{cov}(\mathbf{R}_{\text{after}}^{(2)}, \mathbf{R}_{\text{after}}^{(2)}) = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{R}_{\text{calc},i}^{(2)} - \bar{\mathbf{R}}_{\text{calc}}^{(2)})(\mathbf{R}_{\text{calc},i}^{(2)} - \bar{\mathbf{R}}_{\text{calc}}^{(2)})^T + \mathbf{V}_{\text{model}}^{(2)} \quad (8)$$

$$- \mathbf{K} \left( \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{R}_{\text{calc},i}^{(1)} - \bar{\mathbf{R}}_{\text{calc}}^{(1)})(\mathbf{R}_{\text{calc},i}^{(2)} - \bar{\mathbf{R}}_{\text{calc}}^{(2)})^T + \mathbf{V}_{\text{model}}^{(12)} \right)$$

$$\mathbf{K} = \left( \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{R}_{\text{calc},i}^{(2)} - \bar{\mathbf{R}}_{\text{calc}}^{(2)})(\mathbf{R}_{\text{calc},i}^{(1)} - \bar{\mathbf{R}}_{\text{calc}}^{(1)})^T + \mathbf{V}_{\text{model}}^{(21)} \right)$$

$$\times \left( \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\mathbf{R}_{\text{calc},i}^{(1)} - \bar{\mathbf{R}}_{\text{calc}}^{(1)})(\mathbf{R}_{\text{calc},i}^{(1)} - \bar{\mathbf{R}}_{\text{calc}}^{(1)})^T + \mathbf{V}_{\text{exp}}^{(1)} + \mathbf{V}_{\text{model}}^{(1)} \right)^{-1} \quad (9)$$

渡邊さんのおかげで、ランダムサンプリング法に基づくことで軽水炉炉心解析において実用的な UQ, DA を実現できる見込みを得たのですが、質疑応答でよくあった質問として

「ランダムサンプリング法で評価した『不確かさの不確かさ(統計誤差)』の大きさは？」といったご指摘もありました。もし、ランダムサンプリング法で得られた核特性予測結果の頻度分布が、理想的な正規分布に従っていれば、この質問には統計学知識に基づいて以下のように回答できるでしょう。すなわち、「ランダムサンプリング法で得られた不偏分散に  $(N-1)$  をかけて母分散で割った量が自由度  $(N-1)$  のカイ二乗に従う」ため、核データ共分

散データ起因不確かさ(標準偏差)の統計誤差は、カイ二乗分布のパーセンタイル点に基づいて推定することができます。概算でよければ、自由度( $N - 1$ )のカイ二乗分布の母分散が  $2(N - 1)$  となることを利用して、ランダムサンプリング法によって推定された不確かさの相対統計誤差(1シグマ)は  $1/\sqrt{2(N - 1)}$  となります。例えば、サンプルサイズが  $N = 200$  の場合、相対統計誤差は約 5% と概算できます。しかし、実際のランダムサンプリング法で得られた頻度分布が必ずしも正規分布で上手く近似できるとは限りませんので、正規性の仮定を必要としない、統計誤差の評価手法が望まれました。

そこで、遠藤 知弘くんが注目したのは、Efron 氏により提案されたブートストラップ法 [29] であり、例えば、ランダムサンプリング法に基づく UQ の場合には以下のような手順となります [30]。

- ① サンプルサイズ  $N$  が十分多ければ、ランダムサンプリング法で得られた頻度分布は真の確率分布に近いと期待できる。
- ② 従って、ランダムサンプリング法で得られた頻度分布を「真の確率分布の近似的な分布」とみなし、この頻度分布に基づいてさらに乱数を用いてちょうど  $N$  個復元抽出し、仮想的な標本(ブートストラップ標本)を得る。
- ③ ②で得られたブートストラップ標本に対して、求めたい統計量(UQ の場合には、標準偏差)を求める。
- ④ ②～③の作業を、数百～千回程度繰り返し統計処理することで、正規性を仮定することなく、求めたい統計量の統計誤差(ブートストラップ標準偏差、ブートストラップ信頼区間)を推定する。

ブートストラップ法はサンプリングの際に乱数を利用するものの、計算時間を要する炉心計算を更に追加で実施する必要なく、ランダムサンプリング法で得られた手持ちの結果のみを用いて、ランダムサンプリング法で推定された不確かさ(標準偏差)以外にも「ありとあらゆる統計量」(例えば、歪度や尖度。炉雑音解析の場合には Feynman- $\alpha$ 法における二次中性子相関量  $Y$  値 [31]) に対して、非常に単純に統計誤差推定を行うことができます。ブートストラップ法をさらに応用すれば、注目する「統計量」として①ランダムサンプリング法による炉定数調整法の結果や②バイアス因子法の結果を考えることで、これらの統計誤差も推定することができます [4]。

最後に、炉定数調整法だけではなく、バイアス因子法についても並行して検討した理由について述べたいと思います。炉定数調整法の場合、①核データ共分散行列の事前分布が妥当に評価されていること、②測定誤差  $\mathbf{V}_{\text{exp}}$  や計算手法起因誤差  $\mathbf{V}_{\text{model}}$  も妥当に評価できていることを、暗黙のうちに要請しています。逆に言うと、

- ✓ 予測結果に対する感度係数が大きいにもかかわらず、共分散データが評価できていない核種・核反応があった場合
- ✓ 予測結果の不確かさとして、核データ以外の入力パラメータの寄与が大きい場合



✓ 測定誤差 $V_{exp}$ や計算手法起因誤差 $V_{model}$ が過小評価されている場合を考えると、測定結果と事前予測結果の差異(バイアス)が小さくなるように評価済み核データを調整し過ぎる可能性(数値計算による予測精度は改善できるが、評価済み核データの事後分布を必ずしも真値に近づけることができない場合)があります。そういうわけで、炉定数調整法のように入力パラメータの一つである評価済み核データのみバイアス要因を押し込めるのではなく、入力パラメータの更新はせず予測結果の改善のみを単純に図れる手法として、バイアス因子法にも注目していました。なお、(1)-(3),(8),(9)式で示した式中には、一見バイアス因子 $f(E/C \text{ 値})$ が陽に現れていないように見えますが、

① 共分散行列として、平均値の値で割った「相対共分散行列」を用いた上で

② (1)式の両辺に対して、左から対角行列 $\text{diag}(\mathbf{R}_{calc}^{(1)})$ の逆行列をかける

ことにより、「測定結果のある核特性(1)について得られる個々の E/C 値(列ベクトル $\mathbf{f}^{(1)}$ )を合成して、核特性(2)の予測結果を改善するためのバイアス因子 $\mathbf{f}_{after}^{(2)}$ を求めている」ことと本質的に等価であること論文[4]にて示しています。このように相対共分散行列や E/C 値を利用するアプローチの利点は、無次元化することで、単位が異なる任意の核特性(例：HZP の臨界ボロン濃度(ppm)、制御棒価値(pcm))を複数個組み合わせ、全く別の核特性(例：集合体出力分布)の予測結果改善に繋げることができる点にもあるかと思えます。ただし、安江さんの研究成果[18]や論文[4]で議論しているように、核特性 2 の予測精度を向上したいのであれば、核特性 2 とできる限り相関の強い別の核特性 1 を測定しなければなりません。その一例として、論文[4]では PWR 炉心解析を模擬した仮想的な数値実験(ある摂動後核データで得られた炉心解析結果を仮想的な実験結果とみなす双子実験)を実施することで、ゼロ出力炉物理試験で測定している①HZP 臨界ホウ素濃度や②制御棒価値の測定結果と予測結果を確認することで、③運転中の臨界ホウ素濃度や出力分布予測結果を精度良く予測できる(バイアス・不確かさを低減できる)可能性を示しました。

#### 4. おわりに

以上、長々と綴ってきましたが、本研究の今後の展望について以下で述べたいと思います。

##### ① 核データの共分散以外の入力パラメータ不確かさの考慮

ランダムサンプリング法に基づいた炉定数調整法やバイアス因子法で今後取り組むべき検討課題として、まずは、入力パラメータとして核データ共分散以外の不確かさの影響も考慮することが挙げられます[32]。ランダムサンプリング法の利点は、核データ共分散以外の入力パラメータについても不確かさがあっても、同様の手順で単純に考慮できる点にあります。

##### ② 正規分布の仮定に基づかない手法

炉定数調整法やバイアス因子法の基礎式に基づくことで、測定結果の情報を取り入れて

予測結果の期待値と共分散を改善することができますが、データ同化後の事後分布の分布形状(歪度・尖度や多峰性)については何ら情報を与えることができません。①入力パラメータに対する核特性予測結果の非線形が強い場合や②核特性予測結果に多峰性がある(頻度分布の山が複数ある)場合には、これらの影響を考慮できるような手法も望まれるでしょう。そういった手法例としては、測定結果と予測結果の差異から尤度を求めベイズ理論に基づいて評価する手法(Bayesian Monte Carlo (BMC)[33]、遠藤の学会発表[34])を挙げることができます。

### ③ 計算コストの低減

ランダムサンプリング法は非常に単純な手法(既存計算コードの修正することなく実現可能な手法)と言えます。ただし、数百～千回の炉心解析を実施するのは非常に計算コストを要するため、少ない計算回数で精度良く推定できる手法の開発も望まれます。そのための解決策と浮かぶのは、次元圧縮(Reduced Order Modeling, ROM)であり、方野 量太さん(2016/3 修士卒)の研究成果[35]や横井 公洋さん(2017/3 修士卒)の研究成果[36]がその突破口になるかもしれません。

### ④ 代理積分実験

科研費申請書を執筆するシーズンにこの記事を書いていることもあり、個人的に実現出来たら興味深いと考えている内容は、東工大・千葉 敏 先生が取り組んでおられる「代理反応」のように、炉物理実験においても「代理積分実験(測定しやすく、核特性予測結果の改善に繋がるような代替的な実験)」が無いだろうか、という案です。その第一歩として、未臨界実験で直接測定可能な量(例：即発中性子減衰定数 $\alpha$ 、面積比)を活用することで、臨界固有値計算で得られる予測結果(実効増倍率 $k_{\text{eff}}$ や一点炉動特性パラメータ等)を改善できないかと、2018年現時点での科研費研究(17K14909)で取り組んでいます[34],[37]。この考えの根底には、私自身が「三次中性子相関法」という未臨界度測定手法に関する研究で学位を取得したこともあり、炉物理実験の意義を問い直し再生させたいという願いもあります。例えば、木村 俊貴さん(2017/3 修士卒)の研究成果[37]では「パルス中性子法で測定可能な①即発中性子減衰定数 $\alpha$ と②面積比の測定結果を組み合わせることで、 $k_{\text{eff}}$ の不確かさだけでなく実効遅発中性子割合 $\beta_{\text{eff}}$ の不確かさも低減できる可能性」を見出しており、この発想を様々な測定法に対して柔軟に応用できないだろうか、と考えています。

今回の寄稿では、自分の記憶がまだ残っているうちに、山本 章夫 研究室での学生が励んできた歩みに焦点を当てて振り返ってみました。本研究テーマのみに限らず、残された課題をバトンタッチしながら取り組み続けた研究成果であるため恐れ多くもありますが、私の理想とする「理論-実験-数値計算が三位一体となったバランス良い研究」に向けて、今後ますます邁進できればと思います。☺

## 5. 参考文献

- [1] 遠藤 知弘, “名大の炉物理研究,” 炉物理の研究 第 65 号, 2013 年 3 月, [https://rpg.jaea.go.jp/else/rpd/annual\\_report/pdf65/No65-5.pdf](https://rpg.jaea.go.jp/else/rpd/annual_report/pdf65/No65-5.pdf). (2018 年 10 月 1 日アクセス).
- [2] C. Wang, H. Abdel-Khalik, “Exact-to-precision generalized perturbation theory for eigenvalue problems,” *Nucl. Eng. Des.*, **256**, pp.130–140, (2013).
- [3] C. Kennedy, C. Rabiti, H. Abdel-Khalik, “Generalized perturbation theory-free sensitivity analysis for eigenvalue problems,” *Nucl. Technol.*, **179**(2), pp.169–179 (2012).
- [4] T. Endo, A. Yamamoto, T. Watanabe, “Bias factor method using random sampling technique,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **53**(10), pp.1494–1501 (2016).
- [5] T. Watanabe, T. Endo, A. Yamamoto, *et al.*, “Cross section adjustment method based on random sampling technique,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **51**(5), pp.590-599 (2014).
- [6] C.R. Weisbin, J.H. Marable, J.L. Lucius, *et al.*, “Application of FORSS sensitivity and uncertainty methodology to fast reactor benchmark analysis,” [ORNL/TM-5563, Oak Ridge National Laboratory \(1976\)](https://www.ornl.gov/info/publications/ornl-tm-5563).
- [7] A. Hara, T. Takeda, Y. Kikuchi, “SAGEP: Two-dimensional sensitivity analysis code based on generalized perturbation theory,” [JAERI-M 84-027, Japan Atomic Energy Agency \(1984\)](https://www.jaeri.go.jp/IR/IR084-027). [in Japanese]
- [8] B.T. Rearden, M.A. Jessee (editors), “SCALE code system,” ORNL/TM-2005/39 Version 6.2.3, Oak Ridge National Laboratory (2018).
- [9] M.L. Williams, “Perturbation theory for nuclear reactor analysis,” CRC Handbook of Nuclear Reactors Calculations, **3**, pp.63–188 (1986).
- [10] T. Kamei, T. Yoshida, “Error due to nuclear data uncertainties in the rediction of large liquid-metal fast breeder reactor core performance parameters,” *Nucl. Sci. Eng.*, **84**(2), pp.83–97 (1983).
- [11] T. Kugo, T. Mori, 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.*, **44**(12), pp.1509–1517 (2007).
- [12] J.B. Dragt, J.W.M. Dekker, H. Gruppelaar, *et al.*, “Methods of adjustment and error evaluation of neutron capture cross sections; application to fission product nuclides,” *Nucl. Sci. Eng.*, **62**(1), pp.117–129 (1977).
- [13] K. Yokoyama, M. Ishikawa, T. Kugo, “Extended cross-section adjustment method to improve the prediction accuracy of core parameters,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **49**(12), pp.1165–1174 (2012).
- [14] K. Yokoyama, A. Yamamoto, “Cross-section adjustment methods based on minimum variance unbiased estimation,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **53**(10), pp.1622–1638 (2016).
- [15] International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project (ICSBEP), OECD Nuclear Energy Agency. <https://www.oecd-nea.org/science/wpncs/icsbep/handbook.html> (2018 年 10 月 1 日アクセス).

- [16] M.L. Williams, B.L. Broadhead, C.V. Parks, “Eigenvalue sensitivity theory for resonance-shielded cross sections,” *Nucl Sci Eng.*, **138**(2), pp.177–191 (2001).
- [17] G. Chiba, M. Tsuji, T. Narabayashi, “Resonance self-shielding effect in uncertainty quantification of fission reactor neutronics parameters,” *Nucl. Eng. Technol.*, **46**(3), pp.281–290 (2014).
- [18] A. Yamamoto, Y. Yasue, T. Endo, *et al.*, “Uncertainty estimation of core safety parameters using cross-correlations of covariance matrix,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **50**(10), pp.966–978 (2013).
- [19] S. Kato, T. Endo, A. Yamamoto, *et al.*, “Random sampling-based cross-section adjustment technique for LWR core analysis,” Proc. M&C2013, April 14–18, 2013, Jeju Island, Korea.
- [20] K. Okumura, T. Kugo, K. Kaneko, *et al.*, “SRAC2006: A comprehensive neutronics calculation code system,” *IAEA-Data/Code 2007-004, Japan Atomic Energy Agency* (2007).
- [21] K. Shibata, O. Iwamoto, T. Nakagawa, *et al.*, “JENDL-4.0: A new library for nuclear science and engineering,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **48**(1), pp.1–30 (2011).
- [22] D. Rochman, A.J. Koning, S.C. van der Marck, *et al.*, “Nuclear data uncertainty propagation: perturbation vs. Monte Carlo,” *Ann. Nucl. Energy*, **38**(5), pp.942–952 (2011).
- [23] M.L. Williams, G. Ilas, M.A. Jessee, *et al.*, “A statistical sampling method for uncertainty analysis with SCALE and XSUSA,” *Nucl Technol.*, **183**(3), pp.515–526 (2013).
- [24] “CASMO-4 a fuel assembly burn-up program. User’s manual,” SSP-09/443-U Rev 0, Studsvik Scandpower Inc. (2009).
- [25] “SIMULATE-3 advanced three-dimensional two-group reactor analysis code,” SSP-09/447-U Rev 0, Studsvik Scandpower Inc. (2009).
- [26] A. Yamamoto, K. Kinoshita, T. Watanabe, *et al.*, “Uncertainty quantification of LWR core characteristics using random sampling method,” *Nucl. Sci. Eng.*, **181**(2), pp.160–174 (2015).
- [27] T. Watanabe, T. Endo, A. Yamamoto, *et al.*, “Estimation of sensitivity coefficient using random sampling and L1-norm minimization,” *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **111**, pp.1391–1394 (2014).
- [28] G. Chiba, Y. Kawamoto, M. Tsuji, *et al.*, “Estimation of neutronics parameter sensitivity to nuclear data in random sampling-based uncertainty quantification calculations,” *Ann. Nucl. Energy*, **75**, pp. 395–403 (2014).
- [29] B. Efron, “Bootstrap methods: Another look at the Jackknife,” *Ann Stat.*, **7**(1), pp.1–26 (1979).
- [30] T. Endo, T. Watanabe, A. Yamamoto, “Confidence interval estimation by bootstrap method for uncertainty quantification using random sampling method,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **52**(7-8), pp.993–999 (2015).
- [31] T. Endo, A. Yamamoto, T. Yagi, *et al.*, “Statistical error estimation of the Feynman- $\alpha$  method using the bootstrap method,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **53**(9), pp.1447–1453 (2016).
- [32] 伊藤 基尋, 遠藤 知弘, 山本 章夫, 吉井 貴, 阿萬 剛史, “ボイド相関式の不確かさに起因する BWR 炉心核特性の不確かさ評価,” AESJ 2018 年春の年会, 2F01, 2018 年 3 月 26 日～28 日, 大阪大学.

- [33] A.J. Koning, “Bayesian Monte Carlo method for nuclear data evaluation,” [\*Nucl. Data Sheets\*, \*\*123\*\*, pp.207–213 \(2015\)](#).
- [34] 遠藤 知弘, 山本 章夫, “未臨界実験を活用したデータ同化手法に関する研究,” AESJ 2017年秋の大会, 3G11, 2017年9月13日～15日, 北海道大学.
- [35] R. Katano, T. Endo, A. Yamamoto, *et al.*, “Estimation of sensitivity coefficients of core characteristics based on reduced-order modeling using sensitivity matrix of assembly characteristics,” [\*J. Nucl. Sci. Technol.\*, \*\*54\*\*\(6\), pp.637–647 \(2017\)](#).
- [36] K. Yokoi, T. Endo, A. Yamamoto, *et al.*, “Development of the Uncertainty Quantification Method of Activation in Reactor Structures using Reduced-Order Modeling,” Proc. PHYSOR 2018, Apr. 22–26, Cancun, Mexico.
- [37] 木村 俊貴, 遠藤 知弘, 山本 章夫, “未臨界実験データを用いた実効遅発中性子割合に対するバイアス因子法の適用,” 3G13, 2017年9月13日～15日, 北海道大学.