

修士論文

情報科学的手法に基づく
ロバスト核データ調整法の開発

名古屋大学大学院

工学研究科博士前期課程

総合エネルギー工学専攻

山本章夫研究室

福井悠平

令和5年2月

目次

第1章	序論.....	4
1.1	背景.....	4
1.2	核データ調整の課題.....	6
1.2.1	感度係数・ランダムサンプリングの課題.....	6
1.2.2	外れ値の課題.....	6
1.3	本論文の構成.....	7
1.4	参考文献.....	7
第2章	従来核データ調整の理論.....	9
2.1	本章の概要.....	9
2.2	感度係数を用いた核データ調整.....	9
2.2.1	本節の概要.....	9
2.2.2	分散共分散行列と感度係数行列.....	9
2.2.3	感度係数を用いた核データ調整法.....	10
2.3	ランダムサンプリングを用いた核データ調整.....	12
2.3.1	本節の概要.....	12
2.3.2	ランダムサンプリング.....	12
2.3.3	ランダムサンプリングを用いた核データ調整法.....	14
2.4	本章のまとめ.....	16
2.5	参考文献.....	16
第3章	決定論的サンプリングを用いた核データ調整.....	17
3.1	本章の概要.....	17
3.2	理論.....	17
3.2.1	Unscented 変換サンプリング.....	17
3.2.2	Unscented 変換サンプリングを用いた核データ調整法.....	21
3.3	双子実験による検証.....	22
3.3.1	計算体系と条件.....	22
3.3.2	検証結果.....	25

3.4	本章のまとめ.....	30
3.5	参考文献.....	31
第4章	ロバスト核データ調整.....	32
4.1	本章の概要.....	32
4.2	理論.....	32
4.2.1	M 推定.....	32
4.2.2	ロバスト核データ調整法.....	34
4.3	双子実験による検証.....	37
4.3.1	計算体系と条件.....	37
4.3.2	検証 1:理想的な測定値が得られている場合.....	40
4.3.3	検証 2:影響の大きい核特性を外れ値とした場合.....	44
4.3.4	検証 3:影響の大きい核特性を除外した場合.....	48
4.3.5	検証 4:影響の小さい核特性を外れ値とした場合.....	53
4.4	本章のまとめ.....	57
4.5	参考文献.....	58
第5章	結論.....	59
5.1	本論文のまとめ.....	59
5.2	Unscented 変換サンプリングを用いた核データ調整.....	60
5.3	M 推定を用いた核データ調整.....	61

謝辞 エラー! ブックマークが定義されていません。

公刊論文 62

第1章 序論

1.1 背景

エネルギー源には安定供給性、環境性、経済性及び安全性が求められる。原子力は安定供給性、環境適合性、経済性の3点において優れたエネルギー源であると考えられている。しかしながら福島第一原子力発電所事故を契機に、原子力は安全性の向上とその実証の重要性が改めて認識されるようになった。原子炉そのものを用いた実験は安全性・社会性・経済性等の観点から不可能であるため、数値計算を軸として原子炉は設計・運用される。そのため数値計算によって予測される核特性（あるいは炉心特性）の信頼性を向上させることは原子力の安全性向上に不可欠となる。

数値計算で得られた核特性の信頼性は、その「不確かさ」から評価される[1]。参考文献[1]によれば、不確かさとは、観測又は解析の結果としての標本に付随した、観測量又は解析結果に合理的に結びつけられ得る値のばらつきの幅を特徴付ける符号なしパラメータである。数値計算で得られた核特性の不確かさは以下に大別される。

(1) 物理現象のモデル化に起因する不確かさ

解析対象のふるまいについて数学的に記述した（モデル化した）方程式を用いて数値解析は実施される。方程式で記述された物理モデルと実際の物理現象間には、我々が理論化できていない差異が存在する。

(2) 解析手法に起因する不確かさ

物理モデルとして記述された方程式を数学的（解析的）に解くことは困難である場合が多い。そのため、空間や中性子のエネルギー、飛行方向を離散化する決定論的手法や、乱数を用いた確率論的手法を用いることで、方程式を数値的に解く。決定論的手法では離散化に起因する誤差が生じ、確率論的手法では統計的な不確かさが生じるため、数値計算された核特性は真値とは異なる値をとる。これらの誤差は解析手法に起因する不確かさとして扱われる。

(3) 体系のモデル化に起因する不確かさ

数値解析の入力として与える体系の幾何寸法や組成の値と、実際の実験体系での幾何寸法や組成の値の間には、測定や製造公差等に起因する差異が存在する。これらの差異に起因して、数値計算された核特性は真値とは異なる値をとる。

(4) 核データの不確かさに起因する不確かさ

数値計算の入力として与える核データの持つ不確かさによって数値計算された核特性は真値とは異なる値をとる。これらの誤差は核データに起因する不確かさとして扱われる。また、(3)にて説明した入力値と異なり、核データ等の入力値は体系に依存しない値である。

本研究では上記の不確かさのうち、(4)の核データの持つ不確かさに起因して発生する解析値の不確かさに注目する。核データとは、核分裂断面積や吸収反応断面積などの微視的核反応断面積 σ 、核分裂によって生じる中性子数 ν 、核分裂によって生じる中性子のエネルギー

スペクトル χ などを総称したものを指す。核データは非常に微視的な値であり、正確な測定が困難である場合も多い。実用軽水炉に用いられる核種と比べて、高速炉や加速器駆動未臨界炉において重要となるマイナーアクチノイド核種の核データは大きな不確かさを持つ。例として ^1H , ^{235}U , ^{241}Am , ^{244}Cm の全断面積の不確かさ[2]を比較したものを図 1.1 に示す。

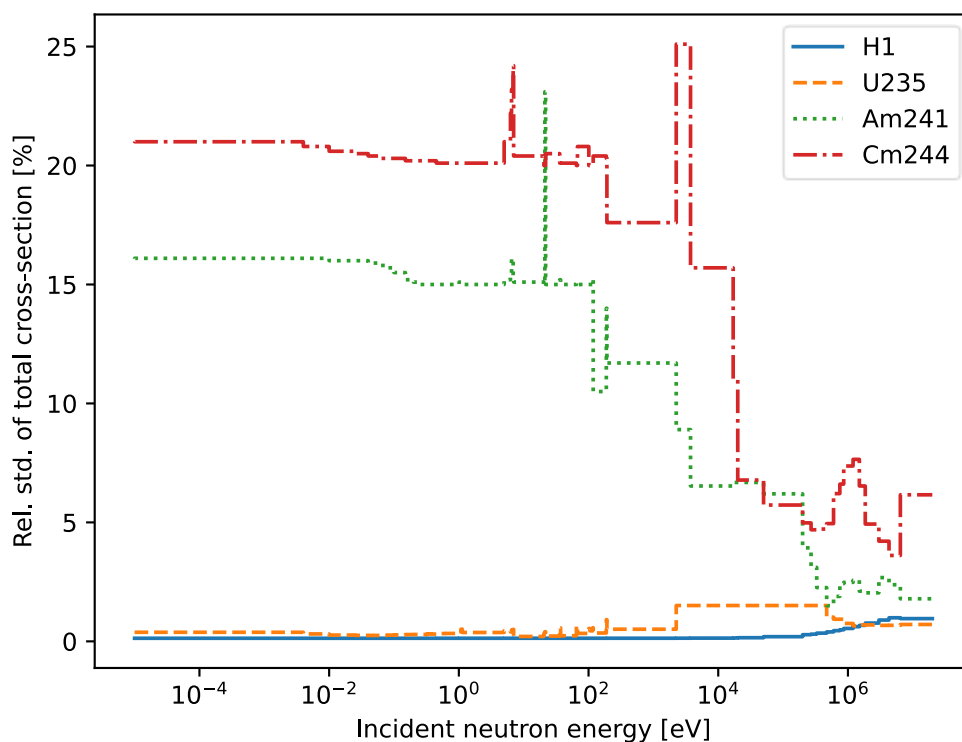


図 1.1 核種ごとの全断面積の不確かさ

図 1.1 より、実用軽水炉新材料である ^1H , ^{235}U と比較して、マイナーアクチノイド核種である ^{241}Am , ^{244}Cm は 10 倍程度大きい不確かさを持つ。そのため、高速炉等の革新炉に用いる核種では核データの持つ不確かさは比較的大きく、核特性不確かさの支配的な要因となりえる。

核データ起因の核特性不確かさを低減する技術は核データ調整[3]として知られている。数値計算された核特性に対して、実験において測定された核特性を考慮することで、数値計算の入力である核データの平均と不確かさを調整する。調整後核データの平均は真値に近づいており、不確かさが低減されている。そのため調整後核データを用いた核計算結果についても、その平均を真値に近づけ、その不確かさも低減することができる。

1.2 核データ調整の課題

1.2.1 感度係数・ランダムサンプリングの課題

現在、主流の核データ調整は感度係数と呼ばれる核データが核特性に与える影響を表す一次微分係数を必要とする。例えば、既存の連続エネルギーモンテカルロ計算コード MCNP6.2[4]では摂動論に基づく摂動法[5]を用いて実効増倍率の感度係数のみについては一回の数値解析で計算できる。しかしながら実効増倍率以外の核特性感度を解析するためには一般化摂動論とばれる理論をソースコード段階で実装する必要がある[6]。既存の連続エネルギーモンテカルロ計算コード MCNP6.2 には一般化摂動論の機能は搭載されておらず、実効増倍率以外の核特性感度を解析するためには、核データを微小量変化させた核計算をする必要がある。この手法では核種、核反応、エネルギー群数ごとに分けられた核データそれぞれを微小量変化させた解析を必要とするため、膨大な数の核計算を要する。動力炉の炉心計算では、ピンセル計算や集合体計算といった均質化断面計算による多段階の計算が必要となるため、一般化摂動論による感度解析が困難となる。また、燃焼による体系組成の変化や核熱フィードバックを考慮した場合、核データと核特性は非線形システムとなるため、不確かさによる核データ変化量が大きい場合には、感度係数を用いた一次近似は適切ではなくなる。

この問題を解決するために、統計的手法として、感度係数を用いないランダムサンプリング法を用いた核データ調整法[7]が提案されている。この手法では、共分散データに基づいて確率論的に摂動させた核データサンプルを多数用意し、各サンプルの核データを用いた数値計算を実施し核特性を得る。得られた核特性サンプルと核データサンプルから核特性-核データ間の共分散を評価し、核データを調整できる。ランダムサンプリングに基づく手法は一般化摂動論に基づく感度解析を必要としないため、非線形システムや感度解析が困難な体系に適用可能な利点がある。一方でランダムサンプリング法の特徴として、核データサンプル数に起因した統計不確かさが生じざるを得ない。そのため、統計不確かさの低減にはサンプル数（計算コスト）を増加させる必要がある[8]。

そこで本研究の第 3 章では、不確かさ評価の分野で用いられている決定論的なサンプリング手法の一つである **Unscented** 変換サンプリング (UTS) [9][10]を核データ調整に適用する。UTS では、サンプル生成の基準とする核データの母分散共分散行列を、最低限のサンプル数での標本分散共分散行列で再現するようにサンプリングする。UTS を適用することで、サンプル共分散に基づく核データ調整の計算コストを削減することを目的とする。

1.2.2 外れ値の課題

従来の核データ調整法では、実験データ（測定された核特性及びその不確かさ）が適切であることを前提としている。しかし、調整後の核データは実験データの影響を大きく受けるため、実験データに外れ値が含まれている場合、核データは適切に調整されない。この問題を回避するため、解析者は核データ調整の実務における経験や工学的判断に基づいて、外れ

値を含む実験データを除去している。

竹田らによる先行研究[11]では、核特性の測定値 E と核特性の計算値 C の差 (C/E 値) から除去データを決定した。具体的には、 E と C の差分が全不確かさ (実験不確かさ+解析不確かさ+核データ起因不確かさ) の1倍、2倍、3倍を超えた核特性について除外した検討を実施した。

別の例として、ADJ2017[12]では、以下の点に基づいて実験データが除外されている。

- (1) 測定値 E と計算値 C の差が全不確かさの2倍を超えているデータ
- (2) 実験解析が不適切と思われるデータ
- (3) 核データの調整量がその不確かさを超えているデータ

特に(3)は、結果である調整後核データから原因となる実験データを探すという逆問題を解く必要があるため、除去すべき実験データを特定することが容易ではない。原因となる実験データ群を正確に特定するためには、各実験データの包含・除外が必要となるため、膨大な数の解析を必要とする。そのため、解析者の経験や工学的判断に基づき、不適切な実験データ群を除外している。

この外れ値に関する問題点を解決するために、第4章では、核データ調整にロバスト推定法を適用する。ロバスト推定法の例として、最小メディアン法[13]、random sample consensus[14]、M推定[15]などがある。本研究では、ベイズ推定への適用性から、M推定に着目する。従来の核データ調整法にM推定を導入することで、外れ値を含む実験データに対してロバストな新しい核データ調整法を開発することを目的とする。

1.3 本論文の構成

第2章では従来用いられている核データ調整の手法として、感度係数を用いた核データ調整とランダムサンプリングを用いた核データ調整の理論を解説する。第3章ではUnscented変換サンプリングを用いた核データ調整手法について解説し、ランダムサンプリングを用いた場合と比較検討する。第4章ではM推定を適用した核データ調整について解説し、外れ値を含んだ実験データに対する有効性について検討する。第5章では結論を述べる。

1.4 参考文献

- [1] 日本原子力学会統計的安全評価手法標準分科会編, *統計的安全評価の実施基準*, 日本原子力学会, 日本, ISBN : 978-4-89047-323-6 (2009).
- [2] W.A. Wieselquist, R.A. Lefebvre, M.A. Jessee, (Eds.), *SCALE Code System*, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.4, Oak Ridge National Laboratory, (2020).
- [3] K. Yokoyama, M. Ishikawa, T. Kugo, “Extended Cross-Section Adjustment Method to Improve the Prediction Accuracy of Core Parameters,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **49**, 1165-1174 (2012); <https://doi.org/10.1080/00223131.2012.739020>.

- [4] B.C. Kiedrowski, F.B. Brown, P.P.H. Wilson, Adjoint-Weighted Tallies for k-Eigenvalue Calculations with Continuous-Energy Monte Carlo, *Nucl. Sci. Eng.*, **168**, 226-241 (2011); <https://doi.org/10.13182/NSE10-22>.
- [5] D.G. Cacuci, *Sensitivity and Uncertainty Analysis: Theory*, Vol. 1, Chapman and Hall/CRC, Florida, USA, ISBN: 9781584881155, (2003).
- [6] A. Hara, T. Takeda, Y. Kikuchi, SAGEP: Two-Dimensional Sensitivity Analysis Code Based on Generalized Perturbation Theory, JAERI-M 84-027, Japan Atomic Energy Research Institute, (1984). [in Japanese]
- [7] T. Watanabe, T. Endo, A. Yamamoto, *et al.*, “Cross Section Adjustment Method Based on Random Sampling Technique,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **51**, 590-599 (2014); <https://doi.org/10.1080/00223131.2014.882801>.
- [8] D. Siefman, M. Hursin, D. Rochman *e. al.*, “Stochastic vs. Sensitivity-Based Integral Parameter and Nuclear Data Adjustments,” *Eur. Phys. J. Plus*, **133**, 429 (2018); <https://doi.org/10.1140/epjp/i2018-12303-8>.
- [9] S.J. Julier, “The Scaled Unscented Transformation,” *Proc. Am. Control Conf.* **6**, 4555–4559 (2002); <https://doi.org/10.1109/acc.2002.1025369>.
- [10] B. Foad, A. Yamamoto, T. Endo, “Uncertainty and Regression Analysis of the MSLB Accident in PWR Based on Unscented Transformation and Low Rank Approximation,” *Ann. Nucl. Energy* **143**, 107493 (2020); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2020.107493>
- [11] T. Takeda, K. Yokoyama, K. Sugino, “A New Cross Section Adjustment Method of Removing Systematic Errors in Fast Reactors,” *Ann. Nucl. Energy*. **109**, 698-704 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2017.06.011>.
- [12] K. Yokoyama, K. Sugino, M. Ishikawa, *et al.*, *Development of the Unified Cross-section Set ADJ2017*, JAEA-Research 2018-011, Japan Atomic Energy Agency (2018); <https://doi.org/10.11484/jaea-research-2018-011>.
- [13] P.J. Rousseeuw, “Least Median of Squares Regression”, *Journal of the American Statistical Association*, **79**, 871-880 (1984); <https://doi.org/10.1080/01621459.1984.10477105>.
- [14] R. Raguram, O. Chum, M. Pollefeys, *et al.*, “Usac: A Universal Framework for Random Sample Consensus”, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, **35**, 2022-2038 (2013); <https://doi.org/10.1109/TPAMI.2012.257>.
- [15] Maronna, R. A. *Robust Statistics: Theory and Methods*, Wiley, USA, ISBN: 978-0-470-01092-1 (2006).

第2章 従来核データ調整の理論

2.1 本章の概要

本章では第3章、第4章にて解説する提案手法の前提知識として、従来核データ調整の理論について解説する。2.2節では、最も基本的な手法である感度係数を用いた核データ調整について、ベイズの定理を起点に解説する。2.3節では、感度係数を用いないランダムサンプリング手法を利用した核データ調整手法について解説する。2.4節では、本章の内容をまとめ、2.5節では参考文献について記す。

2.2 感度係数を用いた核データ調整

2.2.1 本節の概要

本節では、最も基本的な手法である感度係数を用いた核データ調整について解説する。2.2.2項では、基礎知識として分散共分散行列と感度係数の概要について解説する。2.2.3項では、ベイズの定理を起点として、感度係数を用いた核データ調整式を導出する[1]。

2.2.2 分散共分散行列と感度係数行列

核データ調整を解説する上で基礎知識として必要となる分散共分散行列と感度係数について説明する。

分散共分散行列 \mathbf{M}_T は N_T 次元の多変量変数 $\vec{T} = [T_1 \ T_2 \ \dots \ T_{N_T}]^T$ について、各組み合わせにおける分散及び共分散をまとめた行列である。

$$\mathbf{M}_T = \begin{bmatrix} \text{cov}[T_1, T_1] & \dots & \text{cov}[T_1, T_{N_T}] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{cov}[T_{N_T}, T_1] & \dots & \text{cov}[T_{N_T}, T_{N_T}] \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

ここで $\text{cov}[T_n, T_m]$ は S 個のサンプルからなるアンサンブル $T_n = \{T_n^{(1)} \dots T_n^{(S)}\}$ と $T_m = \{T_m^{(1)} \dots T_m^{(S)}\}$ から計算できる共分散である。その定義式を次に示す。

$$\begin{aligned} \text{cov}[T_n, T_m] &= \frac{1}{S-1} \sum_{s=1}^S (T_n^{(s)} - E[T_n])(T_m^{(s)} - E[T_m]) \\ &= E[T_n T_m] - E[T_n]E[T_m] \end{aligned} \quad (2.2)$$

$E[T_n]$ はアンサンブル $T_n = \{T_n^{(1)} \dots T_n^{(S)}\}$ から計算できる平均である。その定義式を次に示す。

$$E[T_n] = \frac{1}{S} \sum_{s=1}^S T_n^{(s)} \quad (2.3)$$

式(2.2)を多変数に拡張して、分散共分散行列 \mathbf{M}_T を次の式で計算することができる。

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_T &= \frac{1}{S-1} \sum_{s=1}^S (\vec{T}^{(s)} - E[\vec{T}])(\vec{T}^{(s)} - E[\vec{T}])^T = E[(\vec{T} - E[\vec{T}])(\vec{T} - E[\vec{T}])^T] \\ &= E[\vec{T}\vec{T}^T] - E[\vec{T}]E[\vec{T}]^T \end{aligned} \quad (2.4)$$

ここで、 $\vec{T}\vec{T}^T$ の平均値 $E[\vec{T}\vec{T}^T]$ は $N_T \times N_T$ 次元の行列、 \vec{T} の平均値 $E[\vec{T}]$ は $N_T \times 1$ 次元の列ベクトルであることに注意する。

感度係数 $g[R, T]$ とは、特定の核データ T の変動に対する核特性値 R の変化の割合を示す一次微分係数である。その定義式を次に示す。

$$g[R, T] = \frac{\partial R}{\partial T} \quad (2.5)$$

特定の核特性 R について、複数の核データセット $\vec{T} = [T_1 \ T_2 \ \dots \ T_{N_T}]^T$ で偏微分したものを、感度係数ベクトル $\vec{g}[R]$ と呼ぶ。

$$\vec{g}[R] = [g[R, T_1] \ \dots \ g[R, T_{N_T}]] = \left[\frac{\partial R}{\partial T_1} \ \dots \ \frac{\partial R}{\partial T_{N_T}} \right] \quad (2.6)$$

感度係数ベクトルを複数の核特性 $\vec{R} = [R_1 \ \dots \ R_{N_R}]^T$ について並べたものを感度係数行列 \mathbf{G} と呼ぶ。習慣的に感度係数行列は、行(横)ベクトルを上下方向に積み重ねた形で表すことに注意する。

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} \vec{g}[R_1] \\ \vdots \\ \vec{g}[R_{N_R}] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial R_1}{\partial T_1} & \dots & \frac{\partial R_1}{\partial T_{N_T}} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial R_{N_R}}{\partial T_1} & \dots & \frac{\partial R_{N_R}}{\partial T_{N_T}} \end{bmatrix} \quad (2.7)$$

2.2.3 感度係数を用いた核データ調整法

Generalized Linear Least Square method (GLLS)と呼ばれる感度係数を用いた核データ調整法について解説する。この手法は以下の仮定に基づく。

- 核データの摂動に対して、核特性の摂動が線形となる
- 核データと核特性が多変量正規分布に従う

式(2.8)に示すベイズの定理より、核データ調整式を導出する[1]。

$$P(\vec{T}|\vec{E}) = \frac{P(\vec{E}|\vec{T})P(\vec{T})}{P(\vec{E})} \quad (2.8)$$

ここで、 \vec{T} は核データ、 \vec{E} は測定された核特性、 $P(\vec{T})$ は核データ \vec{T} の事前確率分布、 $P(\vec{E})$ は測定された核特性 \vec{E} の事前確率分布、 $P(\vec{T}|\vec{E})$ は核特性が \vec{E} であった場合の核データ \vec{T} の事後確率分布、 $P(\vec{E}|\vec{T})$ は核データが \vec{T} であった場合の核特性 \vec{E} の事後確率分布である。多変量正規分布の仮定より、 $P(\vec{T})$ 、 $P(\vec{E})$ 、及び $P(\vec{E}|\vec{T})$ についてそれぞれ式(2.9)–(2.11)が得られる。

$$P(\vec{T}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} (\vec{T} - \vec{T}^{(0)})^T \mathbf{M}_T^{(0)-1} (\vec{T} - \vec{T}^{(0)}) \right], \quad (2.9)$$

$$P(\vec{E}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} (\vec{E} - \vec{R})^T \mathbf{M}_E^{-1} (\vec{E} - \vec{R}) \right], \quad (2.10)$$

$$P(\vec{E}|\vec{T}) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} (\vec{E} - \vec{C}(\vec{T}))^T \mathbf{M}_{E+C}^{-1} (\vec{E} - \vec{C}(\vec{T})) \right] \quad (2.11)$$

ここで $\vec{T}^{(0)} \in \mathbb{R}^{N_T}$ は核データの事前平均、 $\mathbf{M}_T^{(0)} \in \mathbb{R}^{N_T \times N_T}$ は事前核データ $\vec{T}^{(0)}$ の共分散行列、 N_T は核データ数、 $\vec{R} \in \mathbb{R}^{N_R}$ は核特性の真値、 $\mathbf{M}_E \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ は測定された核特性の共分散行列、 $\vec{C}(\vec{T}) \in \mathbb{R}^{N_R}$ は核データ \vec{T} に対して計算された核特性、 $\mathbf{M}_{E+C} \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ は計算された核特性の共分散行列と測定された核特性の共分散行列の和、 N_R は核特性数である。式(2.9)–(2.11)を式(2.8)に代入することで事後確率 $P(\vec{T}|\vec{E})$ を得る。

$$P(\vec{T}|\vec{E}) \propto \exp\left[-\frac{1}{2}\left\{(\vec{T} - \vec{T}^{(0)})^T \mathbf{M}_T^{(0)-1}(\vec{T} - \vec{T}^{(0)})\right.\right. \quad (2.12)$$

$$\left. + (\vec{E} - \vec{C}(\vec{T}))^T \mathbf{M}_{E+C}^{-1}(\vec{E} - \vec{C}(\vec{T})) - (\vec{E} - \vec{R})^T \mathbf{M}_E^{-1}(\vec{E} - \vec{R})\right\}]$$

$$= \exp\left[-\frac{1}{2} \cdot \{J(\vec{T}) - (\vec{E} - \vec{R})^T \mathbf{M}_E^{-1}(\vec{E} - \vec{R})\}\right] \quad (2.13)$$

ここで事後確率分布 $P(\vec{T}|\vec{E})$ の核データ \vec{T} に関する部分を $J(\vec{T})$ として定義した。

$$J(\vec{T}) = (\vec{T} - \vec{T}^{(0)})^T \mathbf{M}_T^{(0)-1}(\vec{T} - \vec{T}^{(0)}) + (\vec{E} - \vec{C}(\vec{T}))^T \mathbf{M}_{E+C}^{-1}(\vec{E} - \vec{C}(\vec{T})) \quad (2.14)$$

核データと核特性間における線形性の仮定から、核データ \vec{T} に対して計算された核特性 $\vec{C}(\vec{T})$ について、感度係数行列 $\mathbf{G} \in \mathbb{R}^{N_R \times N_T}$ を用いて次式で近似的に計算できる。

$$\vec{C}(\vec{T}) \approx \vec{C}(\vec{T}^{(0)}) + \mathbf{G}(\vec{T} - \vec{T}^{(0)}) \quad (2.15)$$

事後確率 $P(\vec{T}|\vec{E})$ を最大化する核データ \vec{T} はベイズの定理によって推定された「調整後核データ $\vec{T}^{(\text{adj})}$ 」である。事後確率を最大化する核データを求めるために、 $J(\vec{T})$ の核データ \vec{T} に関する一次微分がゼロとなる核データ \vec{T} を考える。

$$\frac{\partial J(\vec{T})}{\partial \vec{T}} = 0 \quad (2.16)$$

式(2.16)を満たす核データ \vec{T} が調整後核データである。加えて $\vec{T}^{(\text{adj})} - \vec{T}^{(0)}$ の分散から、調整後核データの共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(\text{adj})}$ が得られる。上記より、以下の核データ調整式が得られる。導出にあたっての詳細な式変形については、参考文献[1]を参照すること。

$$\vec{T}^{(\text{adj})} = \vec{T}^{(0)} + \mathbf{K}(\vec{E} - \vec{C}(\vec{T}^{(0)})) \quad (2.17)$$

$$\mathbf{M}_T^{(\text{adj})} = \mathbf{M}_T - \mathbf{KGM}_T^{(0)} \quad (2.18)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{M}_T^{(0)} \mathbf{G}^T (\mathbf{GM}_T^{(0)} \mathbf{G}^T + \mathbf{M}_{E+C})^{-1} \quad (2.19)$$

感度係数を用いた核データ調整法の利点を以下に示す。

- 核データ調整自体の計算コストが小さい
 - 調整前の核データ $\vec{T}^{(0)}$ 、核データ不確かさ $\mathbf{M}_T^{(0)}$ 、核特性 \vec{E} 、 $\vec{C}(\vec{T}^{(0)})$ 、核特性不確かさ \mathbf{M}_{E+C} 及び感度係数 \mathbf{G} を用意できれば、行列積計算のみで核データを調整できる。
- 一方で欠点を以下に示す。

- 事前の感度解析を要する
実効増倍率以外の感度係数を解析するために一般化摂動論による特殊な計算あるいは、多数回の核計算が必要となる。
- 確率分布として多変量正規分布を仮定している
平均と分散共分散行列の 2 パラメータのみを用いて確率分布を扱うため、特殊な確率分布を仮定できない。調整後核データについても、平均と分散共分散行列のみを得るため、尖度、歪度などの情報を含む確率分布を得ることができない。
- 核データと核特性間に線形性を仮定している
核データの摂動に対する核特性の摂動をテイラー級数展開の一次近似を用いて計算しているため、核データの不確かさが大きく核データの摂動と核特性の摂動が線形の関係にならない非線形なシステムに対する適用が困難である。

2.3 ランダムサンプリングを用いた核データ調整

2.3.1 本節の概要

2.2 節で解説した手法に必要な感度係数を得るには随伴計算[2][3]あるいは核データを摂動させた膨大な回数の解析[4]が必要となる。そこで本節では、感度係数を用いない統計的手法であるランダムサンプリングを用いた核データ調整法[4][5]を解説する。2.3.2 節では、基礎となる多変量正規分布に従う確率変数をサンプリングする手法について解説する。2.3.3 節では、ランダムサンプリングから得られて結果を用いた核データ調整手法について解説する。

2.3.2 ランダムサンプリング

本項では、確率論的なサンプリング手法であるランダムサンプリング(RS)について解説する。RS では、平均 $\vec{T}^{(0)}$ 、共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(0)}$ の多変量正規分布に従うサンプル $\vec{\mathcal{T}} = \{\vec{\mathcal{T}}^{(1)}, \vec{\mathcal{T}}^{(2)}, \dots, \vec{\mathcal{T}}^{(N)}\}$ を生成する。まず、簡単のためサンプル $\vec{\mathcal{T}}$ が平均 $T^{(0)}$ 、分散 σ^2 のスカラー変数 $\mathcal{T}^{(n)}$ であった場合について考える。

$$\mathcal{T}^{(n)} = T^{(0)} + \sigma z \quad (2.20)$$

ここで z は平均 0、分散 1 の正規分布に従う乱数(標準正規乱数)である。標準正規乱数は Box-Muller 法[6]を用いて生成できる。平均 $T^{(0)}$ に対して、分散の平方根 σ に正規乱数 z を乗じた値を足した変数 $\mathcal{T}^{(n)}$ は、平均 $T^{(0)}$ 、分散 σ^2 の確率分布に従う。

上記の考えを多変量に拡張し、平均 $\vec{T}^{(0)}$ 、分散共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(0)}$ の N 次元多変量正規分布に従う確率変数サンプル $\vec{\mathcal{T}}^{(n)}$ の生成方法を考える。

$$\vec{\mathcal{T}}^{(n)} = \vec{T}^{(0)} + \mathbf{A}z \quad (2.21)$$

$$\begin{bmatrix} \mathcal{J}_1^{(n)} \\ \mathcal{J}_2^{(n)} \\ \vdots \\ \mathcal{J}_{N_T}^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_1^{(0)} \\ T_2^{(0)} \\ \vdots \\ T_{N_T}^{(0)} \end{bmatrix} + \mathbf{A} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_{N_T} \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

ここでベクトル \vec{z} の各成分は独立な標準正規乱数である。式(2.20)における分散の平方根 σ に相当する行列 \mathbf{A} を計算できれば、多変量正規分布に従う確率変数サンプル $\vec{\mathcal{J}}$ を生成できる。この行列 \mathbf{A} を本研究では便宜的に相関方向行列と呼ぶこととする。相関方向行列 \mathbf{A} と共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(0)}$ の関係式を導出する。確率変数サンプルの積 $\vec{\mathcal{J}}^{(n)}\vec{\mathcal{J}}^{(n)\top}$ を考える。

$$\begin{aligned} \vec{\mathcal{J}}^{(n)}\vec{\mathcal{J}}^{(n)\top} &= (\vec{T}^{(0)} + \mathbf{A}\vec{z})(\vec{T}^{(0)} + \mathbf{A}\vec{z})^\top \\ &= \vec{T}^{(0)}\vec{T}^{(0)\top} + \mathbf{A}\vec{z}\vec{T}^{(0)\top} + \vec{T}^{(0)}\vec{z}^\top\mathbf{A}^\top + \mathbf{A}\vec{z}\vec{z}^\top\mathbf{A}^\top \end{aligned} \quad (2.23)$$

この式の両辺について平均値を考える。

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\vec{\mathcal{J}}^{(n)}\vec{\mathcal{J}}^{(n)\top}] &= \mathbb{E}[\vec{T}^{(0)}\vec{T}^{(0)\top}] + \mathbb{E}[\mathbf{A}\vec{z}\vec{T}^{(0)\top}] + \mathbb{E}[\vec{T}^{(0)}\vec{z}^\top\mathbf{A}^\top] + \mathbb{E}[\mathbf{A}\vec{z}\vec{z}^\top\mathbf{A}^\top] \\ &= \vec{T}^{(0)}\vec{T}^{(0)\top} + \mathbf{0} + \mathbf{0} + \mathbf{A}\mathbf{E}\mathbf{A}^\top = \vec{T}^{(0)}\vec{T}^{(0)\top} + \mathbf{A}\mathbf{A}^\top \end{aligned} \quad (2.24)$$

ここで、 $\mathbb{E}[\vec{\mathcal{J}}^{(n)}\vec{\mathcal{J}}^{(n)\top}]$ について核データの共分散から次のように変形できる。

$$\mathbf{M}_T^{(0)} = \text{cov}[\vec{\mathcal{J}}^{(n)}] = \mathbb{E}[\vec{\mathcal{J}}^{(n)}\vec{\mathcal{J}}^{(n)\top}] - \mathbb{E}[\vec{\mathcal{J}}^{(n)}]\mathbb{E}[\vec{\mathcal{J}}^{(n)}]^\top = \mathbb{E}[\vec{\mathcal{J}}^{(n)}\vec{\mathcal{J}}^{(n)\top}] - \vec{T}^{(0)}\vec{T}^{(0)\top} \quad (2.25)$$

式(2.24), (2.25)から $\mathbb{E}[\vec{\mathcal{J}}^{(n)}\vec{\mathcal{J}}^{(n)\top}]$ を消去することで、共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(0)}$ と相関方向行列 \mathbf{A} に関する以下の関係式が得られる。

$$\mathbf{M}_T^{(0)} = \mathbf{A}\mathbf{A}^\top \quad (2.26)$$

本稿では特異値分解を用いた相関方向行列 \mathbf{A} の計算方法について示す。

$$\mathbf{M}_T^{(0)} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^\top = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{U}^\top = [\vec{u}_1 \ \vec{u}_2 \ \dots \ \vec{u}_{N_T}] \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_{N_T} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{u}_1^\top \\ \vec{u}_2^\top \\ \vdots \\ \vec{u}_{N_T}^\top \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

$$= [\vec{u}_1 \ \vec{u}_2 \ \dots \ \vec{u}_{N_T}] \begin{bmatrix} \sigma_1^{1/2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2^{1/2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_{N_T}^{1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma_1^{1/2} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sigma_2^{1/2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \sigma_{N_T}^{1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \vec{u}_1^\top \\ \vec{u}_2^\top \\ \vdots \\ \vec{u}_{N_T}^\top \end{bmatrix} \quad (2.28)$$

$$= \mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\mathbf{U}^T = \mathbf{A}\mathbf{A}^T \quad (2.29)$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2} = [\vec{u}_1 \quad \vec{u}_2 \quad \cdots \quad \vec{u}_{N_T}] \begin{bmatrix} \sigma_1^{1/2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^{1/2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_{N_T}^{1/2} \end{bmatrix} = [\vec{a}_1 \quad \vec{a}_2 \quad \cdots \quad \vec{a}_{N_T}] \quad (2.30)$$

ここで、特異値分解後の行列 $\mathbf{U}, \boldsymbol{\Sigma}, \mathbf{V}^T$ について \mathbf{U}, \mathbf{V} はユニタリ行列、 $\boldsymbol{\Sigma}$ は対角行列である。分散共分散行列は対称行列であるため、特異値分解によって得られる \mathbf{U} と \mathbf{V} が等しいことに注意する。

共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(0)}$ の特異値分解によって得た相関方向行列 \mathbf{A} に対して、独立な標準正規乱数 $\vec{z} = [z_1 \quad z_2 \quad \cdots \quad z_{N_T}]^T$ を掛け合わせることで核データサンプル $\vec{\mathcal{J}}^{(n)}$ を生成できる。

$$\vec{\mathcal{J}}^{(n)} = \vec{T}^{(0)} + \mathbf{A}\vec{z} \quad (2.21)$$

(再掲)

乱数は呼び出すたびに値が変わるため、式(2.21)をサンプル数 N 回分計算することで核データアンサンブル $\vec{\mathcal{J}} = \{\vec{\mathcal{J}}^{(1)}, \vec{\mathcal{J}}^{(2)}, \dots, \vec{\mathcal{J}}^{(N)}\}$ を得られる。

2.3.3 ランダムサンプリングを用いた核データ調整法

前節で解説したランダムサンプリング法を用いた核データ調整について解説する。この手法は Monte-Carlo 法を用いることで、感度係数行列 \mathbf{G} を必要とすることなく核データを調整する手法である。前節において示した核データ調整式(2.17)–(2.19)における感度係数行列 \mathbf{G} を含む部分 $\mathbf{G}\mathbf{M}_T^{(0)}\mathbf{G}^T$ 、 $\mathbf{G}\mathbf{M}_T^{(0)}$ を別の形で記載する。これらは誤差伝播の法則を用いることで核データに起因する核特性の共分散行列 \mathbf{M}_R と核データ核特性間の共分散行列 \mathbf{M}_{TR} とみることができ。

$$\mathbf{G}\mathbf{M}_T^{(0)}\mathbf{G}^T = \mathbf{M}_R = \text{cov}[\vec{\mathcal{R}}, \vec{\mathcal{R}}] = \begin{bmatrix} \text{cov}[\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_1] & \cdots & \text{cov}[\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_{N_R}] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{cov}[\mathcal{R}_{N_R}, \mathcal{R}_1] & \cdots & \text{cov}[\mathcal{R}_{N_R}, \mathcal{R}_{N_R}] \end{bmatrix} \quad (2.31)$$

$$\mathbf{G}\mathbf{M}_T^{(0)} = \mathbf{M}_{TR} = \text{cov}[\vec{\mathcal{J}}, \vec{\mathcal{R}}] = \begin{bmatrix} \text{cov}[\mathcal{J}_1, \mathcal{R}_1] & \cdots & \text{cov}[\mathcal{J}_1, \mathcal{R}_{N_R}] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{cov}[\mathcal{J}_{N_T}, \mathcal{R}_1] & \cdots & \text{cov}[\mathcal{J}_{N_T}, \mathcal{R}_{N_R}] \end{bmatrix} \quad (2.32)$$

すなわち、核データ調整式(2.17)–(2.19)は核特性の共分散行列 \mathbf{M}_R と核データ・核特性間の共分散行列 \mathbf{M}_{TR} を用いて書き換えることができる。

2.2 節と同様に核データ $\vec{T}^{(0)} \in \mathbb{R}^{N_T}$ 、核データの分散共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(0)} \in \mathbb{R}^{N_T \times N_T}$ 、核特性測定値 \vec{E} 、核特性測定値と計算値の分散共分散行列 \mathbf{M}_{E+C} が得られているとする。計算手順を次に示す。

- (1) ランダムサンプリング法を用いて、 N 個のサンプルからなる多変量正規分布に従う核データアンサンブル $\vec{\mathcal{J}} = \{\vec{\mathcal{J}}^{(1)}, \vec{\mathcal{J}}^{(2)}, \dots, \vec{\mathcal{J}}^{(N)}\}$ ($\vec{\mathcal{J}}^{(n)} \in \mathbb{R}^{N_T} \sim \mathcal{N}(\vec{T}^{(0)}, \mathbf{M}_T^{(0)})$)を生成する

- (2) 核データサンプル $\vec{\mathcal{J}}^{(n)}$ を入力とした核計算によって核特性サンプル $\vec{\mathcal{R}}^{(n)} \in \mathbb{R}^{N_R}$ を得る。すべての核データサンプルに対する核計算を必要とするため、全 N 回の核計算を必要とする。一連の核計算により核特性アンサンブル $\vec{\mathcal{R}} = \{\vec{\mathcal{R}}^{(1)}, \vec{\mathcal{R}}^{(2)}, \dots, \vec{\mathcal{R}}^{(N)}\}$ を得る。
- (3) 核データアンサンブル $\vec{\mathcal{J}}$ と核特性アンサンブル $\vec{\mathcal{R}}$ を統計処理することで、核データアンサンブルの共分散行列 $\mathbf{M}_T \in \mathbb{R}^{N_T \times N_T}$ 、核特性アンサンブルの共分散行列 $\mathbf{M}_R \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ 、核データと核特性間の共分散行列 $\mathbf{M}_{TR} \in \mathbb{R}^{N_T \times N_R}$ 及び核特性アンサンブルの平均値 $\vec{\mathcal{R}}^{(\text{ave})} \in \mathbb{R}^{N_R}$ を得る。

$$\mathbf{M}_T = \text{cov}[\vec{\mathcal{J}}, \vec{\mathcal{J}}] \quad (2.33)$$

$$\vec{\mathcal{R}}^{(\text{ave})} = \mathbb{E}[\vec{\mathcal{R}}] = [\mathbb{E}[\mathcal{R}_1] \quad \mathbb{E}[\mathcal{R}_2] \quad \dots \quad \mathbb{E}[\mathcal{R}_{N_R}]]^T \quad (2.34)$$

- (4) 式(2.35)–(2.37)を用いて調整後核データ $\vec{T}^{(\text{adj})} \in \mathbb{R}^{N_T}$ と調整後共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(\text{adj})} \in \mathbb{R}^{N_T \times N_T}$ を得る。

$$\vec{T}^{(\text{adj})} = \vec{T}^{(0)} + \mathbf{K}(\vec{E} - \vec{\mathcal{R}}^{(\text{ave})}), \quad (2.35)$$

$$\mathbf{M}_T^{(\text{adj})} = \mathbf{M}_T - \mathbf{K}\mathbf{M}_{TR}^T, \quad (2.36)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{M}_{TR}(\mathbf{M}_R + \mathbf{M}_{E+C})^{-1}, \quad (2.37)$$

ここで核データ調整式(2.17)–(2.19)と比較して、核データ $\vec{T}^{(0)}$ に対する計算値 $\vec{C}(\vec{T}^{(0)})$ ではなく、核特性のアンサンブル平均値 $\vec{\mathcal{R}}^{(\text{ave})}$ を用いること、核データの母共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(0)}$ ではなく、核データアンサンブル共分散行列 \mathbf{M}_T を用いることに注意する。

ランダムサンプリングを用いた核データ調整手法の利点を以下に示す。

- 事前の感度解析を要しない
一般化摂動論を用いた感度解析を必要としないため、計算コードを改修することなく利用でき、実装が簡易である。また、核熱フィードバックや燃焼を考慮した全炉心計算など、感度解析が困難な体系にも適用可能である。
- 核データ–核特性間に線形性を仮定しない
感度係数による一次近似を用いないため、核データの摂動に対して核特性が非線形な摂動をする体系に対しても適用可能である。

一方で欠点について以下に示す。

- 統計不確かさの発生
統計的手法特有の統計的不確かさが発生する。統計的不確かさ低減には、サンプル数 N を大きくとることが必要である。しかしながら、統計的不確かさはサンプル数 N の $-1/2$ 乗 ($1/\sqrt{N}$) に比例して低減されるため、統計的不確かさの低減には計算コストの増加が伴う。

- 核データの不確かさが大きい場合に、負の核データが発生しうる
核データの平均 μ と標準偏差 σ が近いオーダーである場合、負の核データが発生する可能性がある。負の核データは計算コードのエラーを引き起こすことがある。また、負の核データ値を0として扱った場合には、核データの分布形状が変化するため、不確かさ評価結果に系統誤差が生じることとなる。この系統誤差を緩和するためには、アンサンブルの分布パラメータ（平均と分散）が母集団の分布パラメータを再現するような分布パラメータに補正する、あるいは対数正規分布を利用する必要がある。

2.4 本章のまとめ

本章では、感度係数を用いた核データ調整手法（GLLS）とランダムサンプリング法を用いた核データ調整手法について紹介した。以降の第3章では、ランダムサンプリング法を用いた核データ調整手法を拡張した、Unscented 変換サンプリングを用いた核データ調整手法について解説し、検討する。この手法では、アンサンブルを決定論的に生成するため、統計不確かさの影響を受けない利点がある。第4章では本章の手法を拡張した手法として、ロバスト推定手法であるM推定をGLLSに対して適用した、外れ値に堅牢な核データ調整手法について解説し、検討する。

2.5 参考文献

- [1] K. Yokoyama, M. Ishikawa, T. Kugo, “Extended Cross-Section Adjustment Method to Improve the Prediction Accuracy of Core Parameters,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **49**, 1165-1174 (2012); <https://doi.org/10.1080/00223131.2012.739020>.
- [2] D.G. Cacuci, *Sensitivity and Uncertainty Analysis: Theory*, Vol. 1, Chapman and Hall/CRC, Florida, USA, ISBN: 9781584881155 (2003).
- [3] D.G. Cacuci, “On the Application of the Adjoint Method of Sensitivity Analysis to Problems in the Atmospheric Sciences,” *Atmosfera*, **7**, 47-59 (1994).
- [4] T. Watanabe, T. Endo, A. Yamamoto, *et al.*, “Cross Section Adjustment Method Based on Random Sampling Technique,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **51**, 590-599 (2014); <https://doi.org/10.1080/00223131.2014.882801>.
- [5] A. Hoefler, O. Buss, M. Hennebach, *et al.*, “MOCABA: A general Monte Carlo-Bayes Procedure for Improved Predictions of Integral Functions of Nuclear Data” *Ann Nucl Energy*, **77**, 514-521 (2015); <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2014.11.038>.
- [6] G.E.P. Box, M.E. Muller, “A Note on the Generation of Random Normal Deviates,” *Ann. Math. Statist.*, **29**, 610-611 (1958); <https://doi.org/10.1214/aoms/1177706645>.

第3章 決定論的サンプリングを用いた核データ調整

3.1 本章の概要

本章では、Unscented 変換サンプリングを用いた核データ調整手法について解説する。この手法は第 2 章で紹介した感度係数を用いた核データ調整手法と比較して、感度係数を必要としない利点がある。またランダムサンプリング (RS) を用いた核データ調整法と比較して、統計不確かさの発生や調整幅が大きくなることによる負の核データの発生を抑止できる利点がある。

3.2 理論

3.2.1 Unscented 変換サンプリング

本項では、決定論的なサンプリング方法の一つである Unscented 変換を用いたサンプリング法 (UTS) [1]について解説する。RS では分散共分散行列の特異値分解によって得られる相関方向行列 \mathbf{A} に対して、正規乱数ベクトル \vec{z} を乗ずることでサンプルを生成した。

$$\vec{\mathcal{J}}^{(n)} = \vec{T}^{(0)} + \mathbf{A}\vec{z} \quad (2.21)$$

再掲

$$\begin{bmatrix} \mathcal{J}_1^{(n)} \\ \mathcal{J}_2^{(n)} \\ \vdots \\ \mathcal{J}_{N_T}^{(n)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_1^{(0)} \\ T_2^{(0)} \\ \vdots \\ T_{N_T}^{(0)} \end{bmatrix} + \mathbf{A} \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_{N_T} \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

再掲

$$\mathbf{M}_T^{(0)} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{U}^T = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}^{1/2}\mathbf{\Sigma}^{1/2}\mathbf{U}^T = \mathbf{A}\mathbf{A}^T \quad (2.26)$$

再掲

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}^{1/2} = [\vec{a}_1 \quad \vec{a}_2 \quad \cdots \quad \vec{a}_{N_T}] \quad (2.30)$$

再掲

これに対して、UTS ではひとつの相関方向ベクトル \vec{a}_x に任意の係数 f_x (UTS 摂動係数) を乗じた摂動を正負の 2 方向にそれぞれ与えたサンプル対 ($\vec{\mathcal{J}}^{(2x-1)}$, $\vec{\mathcal{J}}^{(2x)}$) を生成する。この手法の特徴として、相関方向ベクトルの数が有限 ($\leq N_T$) であるため、生成されるサンプル数も有限となることがある。共分散行列の実効的なランク X ($\leq N_T$) が小さい場合、支配的な相関方向 (あるいは特異値の大きい相関方向) のみを用いることで共分散行列を次のように近似できる。

$$\mathbf{M}_T^{(0)} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{U}^T \approx \mathbf{U}_X\mathbf{\Sigma}_X^{1/2}\mathbf{\Sigma}_X^{1/2}\mathbf{U}_X^T \quad (3.1)$$

$$\mathbf{U}_X = [\vec{u}_1 \quad \vec{u}_2 \quad \cdots \quad \vec{u}_X] \quad (3.2)$$

$$\Sigma_X^{1/2} = \begin{bmatrix} \sigma_1^{1/2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2^{1/2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & \sigma_X^{1/2} \end{bmatrix} \quad (3.3)$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}_X \Sigma_X^{1/2} = [\vec{a}_1 \quad \vec{a}_2 \quad \cdots \quad \vec{a}_X] \quad (3.4)$$

つまり、共分散行列の実効的なランクを特定することで、サンプル数をより少ない数に抑えることができる。UTS では摂動していない 0 番目の核データサンプル $\vec{\mathcal{J}}^{(0)} = \vec{T}^{(0)}$ と、摂動した核データサンプル $\vec{\mathcal{J}}^{(1)}, \vec{\mathcal{J}}^{(2)}, \dots, \vec{\mathcal{J}}^{(2X)}$ 及びそれぞれのサンプルに対する加重 $\mathbf{w} = \{w^{(0)}, w^{(1)}, \dots, w^{(2X)}\}$ を用いて平均及び共分散が評価される。

UTS 摂動係数 f_x は大きすぎると負の核データを発生させる可能性があるため、あまり大きい値を設定しないことが望ましい。この問題を解決するために、本研究では UTS を改良し、母共分散行列を正確に再現しつつ、負の核データのサンプリングを防止する手法を提案する。

改良された UTS の手順を以下に説明する。

- (1) 摂動させない点を 0 番目のサンプルとして設定する。

$$\vec{\mathcal{J}}^{(0)} = \vec{T}^{(0)} \quad (3.5)$$

- (2) x 番目の相関方向ベクトル \vec{a}_x に対する初期摂動係数 f_x を決定する。例えば $f_x = 1$ ($1 \leq x \leq X$) とする。
- (3) 正負のサンプル対を生成する。

$$\vec{\mathcal{J}}^{(2x-1)} = \vec{T}^{(0)} + f_x \vec{a}_x \quad (3.6)$$

$$\vec{\mathcal{J}}^{(2x)} = \vec{T}^{(0)} - f_x \vec{a}_x \quad (3.7)$$

- (4) 核データサンプルが負の値を持つ場合、摂動係数を f'_x に修正する。

$$i_{\min}^+ = \operatorname{argmin}[\vec{\mathcal{J}}^{(2x-1)}] \quad (3.8)$$

$$f_x^+ = \begin{cases} \frac{-\vec{T}^{(0)}[i_{\min}^+]}{\vec{a}_x[i_{\min}^+]} & \text{if } \min[\vec{\mathcal{J}}^{(2x-1)}] < 0 \\ f_x & \text{else} \end{cases} \quad (3.9)$$

$$i_{\min}^- = \operatorname{argmin}[\vec{\mathcal{J}}^{(2x)}] \quad (3.10)$$

$$f_x^- = \begin{cases} \frac{\vec{T}^{(0)}[i_{\min}^-]}{\vec{a}_x[i_{\min}^-]} & \text{if } \min[\vec{\mathcal{J}}^{(2x)}] < 0 \\ f_x & \text{else} \end{cases} \quad (3.11)$$

$$f'_x = \begin{cases} f_x^+ & \text{if } f_x^+ \leq f_x^- \\ f_x^- & \text{else} \end{cases} \quad (3.12)$$

ここで $\vec{a}_x[i]$ は \vec{a}_x の i 番目の要素、 $\min[\vec{f}^{(x)}]$ はベクトル $\vec{f}^{(x)}$ の最小要素である。また、 $\text{argmin}[\vec{f}^{(x)}]$ はベクトル $\vec{f}^{(x)}$ の最小要素の位置インデックスである。 f'_x を用いると、全ての核データサンプルの最小要素が 0 以上になる。

(5) 修正後の摂動係数 f'_x を用いてサンプル対を再生成する。

$$\vec{f}^{(2x-1)} = \vec{f}^{(0)} + f'_x \vec{a}_x \quad (3.13)$$

$$\vec{f}^{(2x)} = \vec{f}^{(0)} - f'_x \vec{a}_x \quad (3.14)$$

(6) サンプル対 $\vec{f}^{(2x-1)}$, $\vec{f}^{(2x)}$ に対する加重 $w^{(2x-1)}$, $w^{(2x)}$ を計算する。これらの加重は、摂動係数 f'_x が標本共分散行列に及ぼす影響を打ち消すために選ばれたものである。摂動係数 f'_x が大きいほど、核データが大きく摂動するために共分散行列を大きくする影響がある。そこで影響を打ち消すために、摂動量の大きいサンプルほど加重を小さくする。

$$w^{(2x-1)} = \frac{1}{2(f'_x)^2} \quad (3.15)$$

$$w^{(2x)} = \frac{1}{2(f'_x)^2} \quad (3.16)$$

(7) (2)–(6) をすべての相関方向ベクトルについて繰り返す。

(8) 摂動係数ベクトルを用いて摂動していない 0 番目サンプルの加重を計算する。

$$w^{(0)} = 1 - \sum_{x=1}^X \frac{1}{(f'_x)^2} \quad (3.17)$$

(9) 核データアンサンブル $\vec{f} = \{\vec{f}^{(0)} \ \vec{f}^{(1)} \ \dots \ \vec{f}^{(2X)}\}$ を用いた数値解析の結果である核特性アンサンブル $\vec{\mathcal{R}} = \{\vec{\mathcal{R}}^{(0)} \ \vec{\mathcal{R}}^{(1)} \ \dots \ \vec{\mathcal{R}}^{(2X)}\}$ の平均 $E_w[\vec{\mathcal{R}}]$ と共分散行列 $\text{cov}_w[\vec{\mathcal{R}}, \vec{\mathcal{R}}]$ について加重 $w = \{w^{(0)} \ w^{(1)} \ \dots \ w^{(2X)}\}$ を用いて評価する。摂動された N 個のサンプルからなる RS とは異なり、UTS では、1 個の摂動していないサンプル $\vec{f}^{(0)}$ と $2X$ 個の摂動されたサンプルからなる $2X + 1$ 個のアンサンブルとなることに注意する。ここで加重付き平均 $E_w[\mathcal{R}]$ の定義式を式(3.18)に、加重付き共分散 $\text{cov}_w[\mathcal{R}_i, \mathcal{R}_j]$ の定義式を式(3.19)に示す。

$$E_w[\mathcal{R}] = \frac{1}{\sum_{n=0}^{2X} w^{(n)}} \sum_{n=0}^{2X} w^{(n)} \mathcal{R}^{(n)} \quad (3.18)$$

$$\text{cov}_w[\mathcal{R}_i, \mathcal{R}_j] = \frac{1}{\sum_{n=0}^{2X} w^{(n)}} \sum_{n=0}^{2X} w^{(n)} (\mathcal{R}_i^{(n)} - E_w[\mathcal{R}_i]) (\mathcal{R}_j^{(n)} - E_w[\mathcal{R}_j]) \quad (3.19)$$

加重付き共分散行列 $\text{cov}_w[\vec{\mathcal{R}}, \vec{\mathcal{R}}]$ は次式で計算できる。

$$\begin{aligned}
\text{cov}_w[\vec{\mathcal{R}}, \vec{\mathcal{R}}] &= \frac{1}{\sum_{n=0}^{2X} w^{(n)}} \sum_{n=0}^{2X} w^{(n)} (\vec{\mathcal{R}}^{(n)} - E_w[\vec{\mathcal{R}}]) (\vec{\mathcal{R}}^{(n)} - E_w[\vec{\mathcal{R}}])^T \\
&= E_w \left[(\vec{\mathcal{R}} - E_w[\vec{\mathcal{R}}]) (\vec{\mathcal{R}} - E_w[\vec{\mathcal{R}}])^T \right] = E_w[\vec{\mathcal{R}}\vec{\mathcal{R}}^T] - E_w[\vec{\mathcal{R}}]E_w[\vec{\mathcal{R}}]^T \tag{3.20}
\end{aligned}$$

ここで、 $\vec{\mathcal{R}}\vec{\mathcal{R}}^T$ の加重付き平均値 $E_w[\vec{\mathcal{R}}\vec{\mathcal{R}}^T]$ は $N_R \times N_R$ 次元の行列、 $\vec{\mathcal{R}}$ の加重付き平均値 $E_w[\vec{\mathcal{R}}]$ は $N_R \times 1$ 次元の列ベクトルであることに注意する。

すべての相関方向ベクトル \vec{a}_x (すなわち、 $1 \leq x \leq X = N_T$) を用いた場合、加重付き平均 $E_w[\vec{\mathcal{J}}]$ と加重付き共分散行列 $\text{cov}_w[\vec{\mathcal{J}}, \vec{\mathcal{J}}]$ について、核データ平均 $\vec{T}^{(0)}$ と母共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(0)}$ と等しいことを示す。まず、核データアンサンブル $\vec{\mathcal{J}}$ の加重付き平均 $E_w[\vec{\mathcal{J}}]$ について、加重付き平均の定義式(3.18)より、以下の式で表現できる。

$$\begin{aligned}
E_w[\vec{\mathcal{J}}] &= \frac{\sum_{n=0}^{2X} w^{(n)} \vec{\mathcal{J}}^{(n)}}{\sum_{n=0}^{2X} w^{(n)}} = \frac{1}{\sum_{n=0}^{2X} w^{(n)}} \left(w^{(0)} \vec{\mathcal{J}}^{(0)} + \sum_{n=1}^{2X} w^{(n)} \vec{\mathcal{J}}^{(n)} \right) \\
&= w^{(0)} \vec{\mathcal{J}}^{(0)} + \sum_{x=1}^X w^{(2x-1)} \vec{\mathcal{J}}^{(2x-1)} + \sum_{x=1}^X w^{(2x)} \vec{\mathcal{J}}^{(2x)} \tag{3.21}
\end{aligned}$$

ここで、加重の総和について $\sum_{n=0}^{2X} w^{(n)} = 1$ である。核データサンプルが正負対になっている特性より、加重と核データ積の総和部分について以下の関係式が得られる。

$$\sum_{x=1}^X w^{(2x-1)} \vec{\mathcal{J}}^{(2x-1)} = \sum_{x=1}^X \frac{1}{2(f'_x)^2} (\vec{T}^{(0)} + f'_x \vec{a}_x) \tag{3.22}$$

$$\sum_{x=1}^X w^{(2x)} \vec{\mathcal{J}}^{(2x)} = \sum_{x=1}^X \frac{1}{2(f'_x)^2} (\vec{T}^{(0)} - f'_x \vec{a}_x) \tag{3.23}$$

$$\sum_{x=1}^X w^{(2x-1)} \vec{\mathcal{J}}^{(2x-1)} + \sum_{x=1}^X w^{(2x)} \vec{\mathcal{J}}^{(2x)} = 2 \sum_{x=1}^X \frac{1}{2(f'_x)^2} \vec{T}^{(0)} \tag{3.24}$$

式(3.17), (3.24)を、式(3.21)に代入することで次式が得られる。

$$E_w[\vec{\mathcal{J}}] = \left(1 - \sum_{x=1}^X \frac{1}{(f'_x)^2} \right) \vec{T}^{(0)} + 2 \sum_{x=1}^X \frac{1}{2(f'_x)^2} \vec{T}^{(0)} = \vec{T}^{(0)}, \tag{3.25}$$

上式より、核データアンサンブル $\vec{\mathcal{J}}$ の加重付き平均 $E_w[\vec{\mathcal{J}}]$ が核データ平均と等しいことを確認できる。続いて加重付き共分散行列について、加重付き共分散行列の定義式(3.20)に式(3.13), (3.14)を代入することで、次式が得られる。

$$\begin{aligned}
\text{cov}_w[\vec{\mathcal{J}}, \vec{\mathcal{J}}] &= \frac{\sum_{n=0}^{2X} w^{(n)} (\vec{\mathcal{J}}^{(n)} - E_w[\vec{\mathcal{J}}]) (\vec{\mathcal{J}}^{(n)} - E_w[\vec{\mathcal{J}}])^T}{\sum_{n=0}^{2X} w^{(n)}} \\
&= w^{(0)} (\vec{\mathcal{J}}^{(0)} - \vec{T}^{(0)}) (\vec{\mathcal{J}}^{(0)} - \vec{T}^{(0)})^T + \sum_{x=1}^X w^{(2x-1)} (\vec{\mathcal{J}}^{(2x-1)} - \vec{T}^{(0)}) (\vec{\mathcal{J}}^{(2x-1)} - \vec{T}^{(0)})^T \\
&\quad + \sum_{x=1}^X w^{(2x)} (\vec{\mathcal{J}}^{(2x)} - \vec{T}^{(0)}) (\vec{\mathcal{J}}^{(2x)} - \vec{T}^{(0)})^T
\end{aligned}$$

$$= 0 + \sum_{x=1}^X \frac{1}{2(f'_x)^2} (f'_x \vec{a}_x)(f'_x \vec{a}_x)^T + \sum_{x=1}^X \frac{1}{2(f'_x)^2} (-f'_x \vec{a}_x)(-f'_x \vec{a}_x)^T \quad (3.26)$$

ここで、加重の総和について、 $\sum_{n=0}^{2X} w^{(n)} = 1$ であり、式より $E_w[\vec{\mathcal{J}}] = \vec{\tau}^{(0)}$ を用いた。

$$\begin{aligned} \text{cov}_w[\vec{\mathcal{J}}, \vec{\mathcal{J}}] &= 2 \sum_{x=1}^X \frac{1}{2(f'_x)^2} (f'_x \vec{a}_x)(f'_x \vec{a}_x)^T \\ &= \sum_{x=1}^X \vec{a}_x \cdot \vec{a}_x^T = \mathbf{A} \mathbf{A}^T = \mathbf{M}_T^{(0)} \end{aligned} \quad (3.27)$$

上式より、核データアンサンブル $\vec{\mathcal{J}}$ の加重付き共分散行列 $\text{cov}_w[\vec{\mathcal{J}}, \vec{\mathcal{J}}]$ が核データ母共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(0)}$ と等しいことを確認した。

3.2.2 Unscented 変換サンプリングを用いた核データ調整法

Unscented 変換サンプリングを用いた核データ調整法について解説する。計算手順を以下に示す。

- (1) UTS を用いて核データ平均 $\vec{\tau}^{(0)}$ と母共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(0)}$ に対して、 $2X + 1$ 個のサンプルからなる核データアンサンブル $\vec{\mathcal{J}} = \{\vec{\mathcal{J}}^{(0)} \quad \vec{\mathcal{J}}^{(1)} \quad \dots \quad \vec{\mathcal{J}}^{(2X)}\}$ を生成する。
- (2) 核データサンプル $\vec{\mathcal{J}}^{(n)}$ を入力とした核計算によって核特性サンプル $\vec{\mathcal{R}}^{(n)}$ を得る。すべての核データサンプルに対する核計算を必要とするため、全 $2X + 1$ 回の数値解析を必要とする。一連の核計算により核特性アンサンブル $\vec{\mathcal{R}} = \{\vec{\mathcal{R}}^{(0)}, \vec{\mathcal{R}}^{(2)}, \dots, \vec{\mathcal{R}}^{(2X)}\}$ を得る。
- (3) 核特性の平均 $\vec{\mathcal{R}}^{(\text{ave})}$ 、核特性の共分散行列 \mathbf{M}_R 及び核データ-核特性間 \mathbf{M}_{TR} の共分散行列を以下のように加重を付けて計算する。

$$\vec{\mathcal{R}}^{(\text{ave})} = E_w[\vec{\mathcal{R}}] = [E_w[\mathcal{R}_1] \quad E_w[\mathcal{R}_2] \quad \dots \quad E_w[\mathcal{R}_{N_R}]]^T \quad (3.28)$$

$$\mathbf{M}_R = \text{cov}_w[\vec{\mathcal{R}}, \vec{\mathcal{R}}] = \begin{bmatrix} \text{cov}_w[\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_1] & \dots & \text{cov}_w[\mathcal{R}_1, \mathcal{R}_{N_R}] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{cov}_w[\mathcal{R}_{N_R}, \mathcal{R}_1] & \dots & \text{cov}_w[\mathcal{R}_{N_R}, \mathcal{R}_{N_R}] \end{bmatrix} \quad (3.29)$$

$$\mathbf{M}_{TR} = \text{cov}_w[\vec{\mathcal{J}}, \vec{\mathcal{R}}] = \begin{bmatrix} \text{cov}_w[\mathcal{J}_1, \mathcal{R}_1] & \dots & \text{cov}_w[\mathcal{J}_1, \mathcal{R}_{N_R}] \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{cov}_w[\mathcal{J}_{N_T}, \mathcal{R}_1] & \dots & \text{cov}_w[\mathcal{J}_{N_T}, \mathcal{R}_{N_R}] \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

- (4) 以下の式より、調整後核データ $\vec{\tau}^{(\text{adj})}$ と調整後共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(\text{adj})}$ を計算する。

$$\vec{\tau}^{(\text{adj})} = \vec{\tau}^{(0)} + \mathbf{K}(\vec{E} - \vec{\mathcal{R}}^{(\text{ave})}) \quad (2.35)$$

再掲

$$\mathbf{M}_T^{(\text{adj})} = \mathbf{M}_T - \mathbf{K} \mathbf{M}_{TR}^T \quad (2.36)$$

再掲

$$\mathbf{K} = \mathbf{M}_{TR} (\mathbf{M}_R + \mathbf{M}_{E+C})^{-1} \quad (2.37)$$

再掲

UTS では、必要なサンプル数 $2X + 1$ は共分散行列の有効ランク(すなわち、有効な特異値の数)で決定される。共分散行列の有効ランクの決定については、次節で説明する。共分散行列の有効ランクが小さい場合、必要なサンプルサイズを $2N_T + 1$ より小さくすることができる。

3.3 双子実験による検証

3.3.1 計算体系と条件

提案する核データ調整法を、双子実験を通じて検証する。双子実験とは仮想的な数値計算を用いてデータ同化技術を検証する仮想的な実験である。本検証では、「真の」核データを RS により決定した。核データに対して、連続エネルギーモンテカルロコード MCNP6.2[3] と評価済み核データ ENDF/B-VII.1[4] を用いて解析した核特性を仮想測定値として考慮した。ここで最新の評価済み核データ ENDF/B-VIII.0[5] を利用しなかった理由は、SCALE コードに収録されている共分散データファイル scale.rev08.56groupcov7.1[6] が、ENDF/B-VII.1 に基づくため、共分散データファイルと評価済み核データライブラリのバージョンを統一するためである。主な計算条件を表 3.1 に示す。

表 3.1 計算条件

実験体系	ICSBEP HEU-MET-FAST-001 (GODIVA)[2]
核計算コード	MCNP6.2[3]
評価済み核データライブラリ	ENDF/B-VII.1[4]
共分散データファイル	SCALE 6.2.4[5] scale.rev08.56groupcov7.1
共分散データのエネルギー群数	56 groups[5]
ACE ファイルの摂動コード	FRENDY(1.03.007) [7]
調整対象核データ	<ul style="list-style-type: none"> • ^{235}U fission (MT=18) • ^{235}U (n,γ) (MT=102)
計算・測定対象核特性	<ul style="list-style-type: none"> • 実効増倍率 k_{eff} • 反応率比 * F24/F25, F28/F25, C24/F25, C28/F25

*注: 反応率 $\sigma \cdot \vec{\phi}$ は単位体積・単位時間当たりの単位核反応数 ($\vec{\phi}$ は中性子束、 σ は微視的断面積) である。F24、F25、F28 はそれぞれ ^{234}U 、 ^{235}U 、 ^{238}U の核分裂率を意味する。同様に、C24、C28 はそれぞれ ^{234}U 、 ^{235}U 、 ^{238}U の(n, γ)反応率を意味する。

提案手法の検証手順について解説する。一般に核データ調整では、核データの相対的な摂動を推定するために相対共分散行列を使用する。したがって、第2章の内容については、実際の数値計算において、核データ \vec{T} を相対摂動量 \vec{p} に置き換えて考える必要がある。相対摂

動量 \vec{p} の定義式を以下に示す。

$$\vec{p} = \left[\frac{T_1 + \Delta T_1}{T_1} \quad \frac{T_2 + \Delta T_2}{T_2} \quad \dots \quad \frac{T_{N_T} + \Delta T_{N_T}}{T_{N_T}} \right]^T \quad (3.31)$$

ここで、 ΔT_i は*i*番目の核データの摂動量である。つまり、相対摂動量とは、核データ平均値 $\vec{T}^{(0)} = [T_1 \quad T_2 \quad \dots \quad T_{N_T}]^T$ からの無次元化された差異を意味する。検証手順は以下の通りである。

- (1) RS 法を用いて、核データ相対共分散行列 \mathbf{M}_p から、対象核データの仮想的な真値を定義する核データ相対的摂動 $\vec{p}^{(\text{ref})}$ を決定する。共分散行列は SCALE6.2.4 コード付属の scale.rev08.56groupcov7.1 ファイルから入手した。
- (2) $\vec{p}^{(\text{ref})}$ に従って摂動した ACE ファイルを生成する。ACE ファイルの生成と摂動には核データ処理コード FRENDY を使用した。
- (3) MCNP6.2 を用いて $\vec{p}^{(\text{ref})}$ に対する核特性を解析する。得られた核特性を仮想的な測定値である \vec{E} と見なす。
- (4) UTS 法を用いて、核データ相対共分散行列 \mathbf{M}_p から核データ相対摂動量サンプル $\vec{p} = \{\vec{p}^{(0)}, \vec{p}^{(1)}, \dots, \vec{p}^{(2X)}\}$ と加重 $w = \{w^{(0)}, w^{(1)}, \dots, w^{(2X)}\}$ を生成する。
- (5) 相対摂動量 \vec{p} に従って摂動させた ACE ファイル群を生成する。
- (6) ACE ファイル群に対する核特性 $\vec{R} = \{\vec{R}^{(0)}, \vec{R}^{(1)}, \dots, \vec{R}^{(2X)}\}$ を解析する。
- (7) ステップ(6)で得られた解析結果とステップ(3)で得られた仮想的な測定値 \vec{E} を用いて核データを調整し、調整後核データ相対摂動量 $\vec{p}^{(\text{adj})}$ と調整後相対共分散行列 $\mathbf{M}_p^{(\text{adj})}$ を得る。
- (8) ステップ(1)で設定した核データ相対摂動量参照値 $\vec{p}^{(\text{ref})}$ と、調整後相対摂動量 $\vec{p}^{(\text{adj})}$ 、 $\mathbf{M}_p^{(\text{adj})}$ から核データ調整結果を評価する。

上記の手順で核データを調整し、調整後の核データを仮想的な真値と比較することで、手法の妥当性を評価する。性能指標として、真値 $\vec{p}^{(\text{ref})}$ と調整値 $\vec{p}^{(\text{adj})}$ の差の二乗和を推定不確かさ $\mathbf{M}_p^{(\text{adj})}$ で除したものをカイ二乗値 χ^2 として定義する。

$$\chi^2 = [\vec{p}^{(\text{adj})} - \vec{p}^{(\text{ref})}]^T \mathbf{M}_p^{(\text{adj})^{-1}} [\vec{p}^{(\text{adj})} - \vec{p}^{(\text{ref})}] \quad (3.32)$$

χ^2 は、その値が調整対象核データの自由度とほぼ等しい場合は、核データが適切に調整されていることを示唆する値である。今回使用した核データの総数は $2 \times 56 = 112$ であるため、核データ間の相関を考慮しない場合、その自由度は 112 である。

ただし、調整後核データの共分散行列の行列式がゼロに近い場合、 χ^2 を正確に計算できないことがあるので注意が必要である。そこで、式(3.32)で定義されるカイ二乗値は、低ランク近似を用いて計算する。核データの共分散行列は、特異値分解を用いて以下のように近似できる。

$$\mathbf{M}_p^{(\text{adj})} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{U}^T \approx \mathbf{U}_r\Sigma_r\mathbf{U}_r^T \quad (3.33)$$

ここで、 \mathbf{U} は直交行列、 $\mathbf{\Sigma}$ は特異値 ($\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_X$) を持つ対角行列である。式(3.33)では r 個の特異値を持つ低ランク近似を用いる。 r の決定については後述する。また、 \mathbf{U}_r および $\mathbf{\Sigma}_r$ は以下のように定義される。

$$\mathbf{U}_r = \mathbf{U}[:, :r] = [\vec{u}_1 \quad \vec{u}_2 \quad \dots \quad \vec{u}_r] \quad (3.34)$$

$$\mathbf{\Sigma}_r = \mathbf{\Sigma}[:, :r] \quad (3.35)$$

ここで、 $\mathbf{U}[:, :r]$ は行列 \mathbf{U} の1番目から r 番目 ($r \leq N_T$)の列要素を抽出するスライシング、 $\mathbf{\Sigma}[:, :r]$ は行列 $\mathbf{\Sigma}$ の1番目から r 番目 ($r \leq N_T$)までの平方行列要素を抽出するスライシングである。式(3.36)を用いて、共分散行列の逆行列を次のように計算する。

$$\mathbf{M}_p^{(\text{adj})^{-1}} \approx \mathbf{U}_r \mathbf{\Sigma}_r^{-1} \mathbf{U}_r^T \quad (3.36)$$

その結果、 χ^2 の近似値は次のように計算される。

$$\chi^2 \approx [\vec{p}^{(\text{adj})} - \vec{p}^{(\text{ref})}]^T \mathbf{U}_r \mathbf{\Sigma}_r^{-1} \mathbf{U}_r^T [\vec{p}^{(\text{adj})} - \vec{p}^{(\text{ref})}] \quad (3.37)$$

行列の実効的なランク r は、核データ共分散行列の特異値分解によって決定される。GLLSを用いて得られた調整後共分散行列 $\mathbf{M}_p^{(\text{adj})}$ の特異値について図 3.1 に示す。

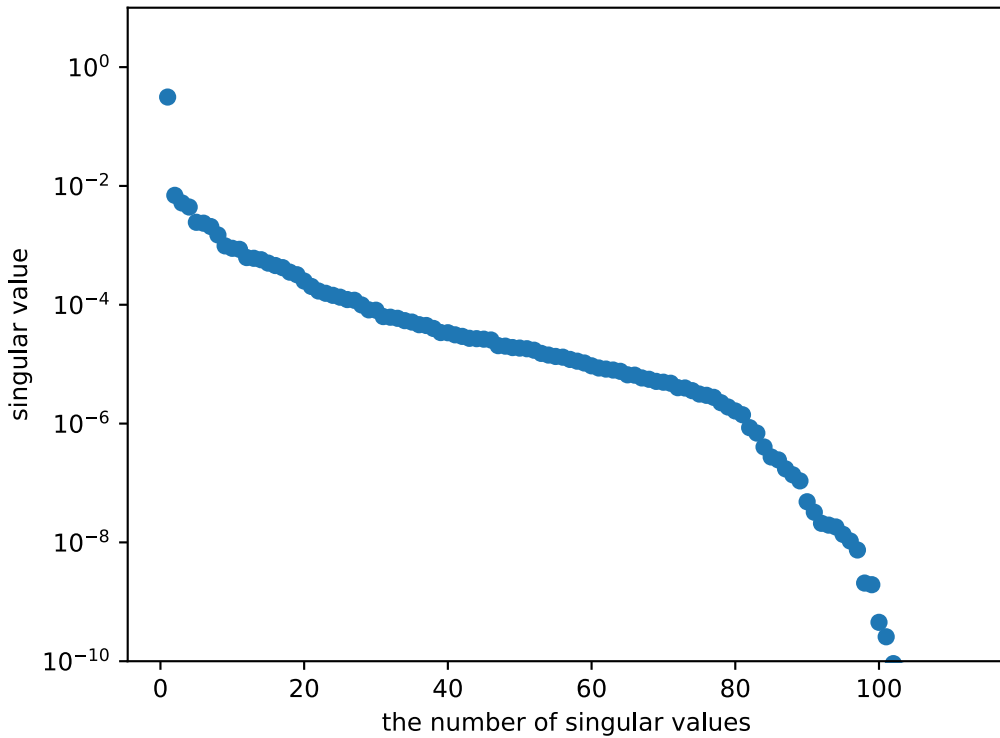


図 3.1 調整後核データ共分散行列の特異値分布

図 3.1 より、 r が 80 より大きい場合、特異値が急激に減少している。したがって、この行列の有効ランクは約 80–100 であると推定した。続いて低ランク近似の次数 r と、低ランク近似を用いて計算されるカイ二乗値 χ^2 の関係を図 3.2 に示す。

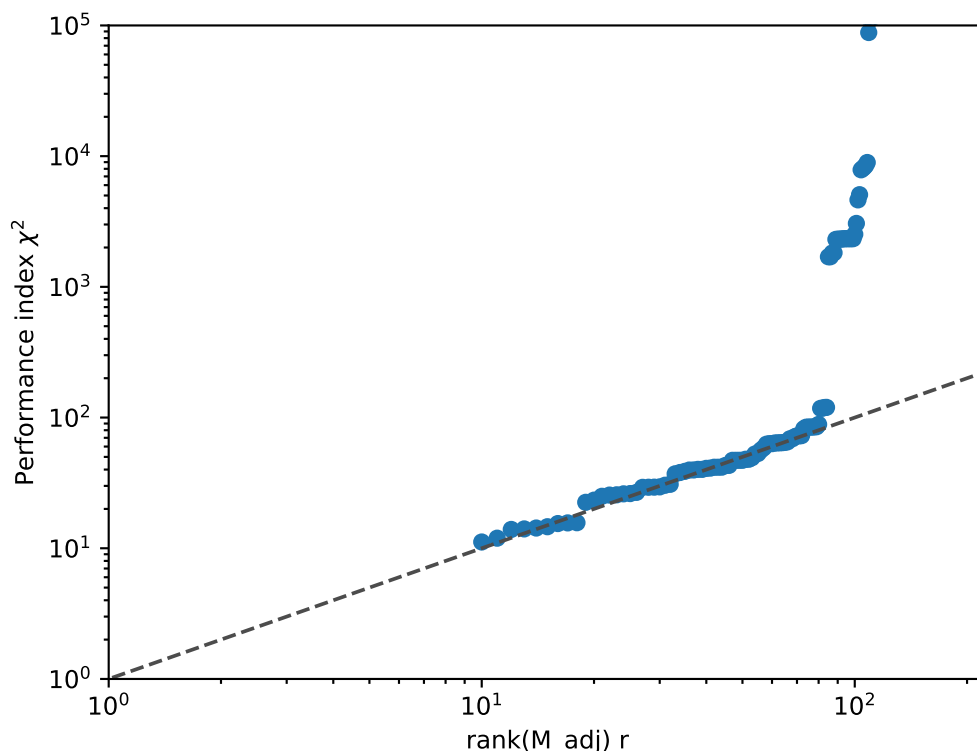


図 3.2 共分散行列のランク r に対するカイ二乗値 χ^2

r が約 80 以下の場合、行列のランクとカイ二乗値はほぼ同じ値になる。一方、 $r = 85$ のとき、カイ二乗値は不連続的に急激に増加した ($\chi^2 \approx 1698$)。したがって、本研究では共分散行列の実効ランクを 84 と仮定した。

初期摂動係数 f_x の設定について解説する。 f_x が大きすぎると、統計的に極端な核データ（例えば、標準偏差の 10 倍や 100 倍の摂動）を生成する。しかし、 f_x が小さすぎると、モンテカルロ計算の統計誤差に比べ、核特性に対する摂動量が小さくなりすぎて、有意な摂動が得られなくなる。そのため、 f_x を適切な値に設定する必要がある。本研究では、標準偏差の 3 倍を超える核データはほとんど生成されないと考えたため、摂動量の上限でもある初期摂動係数について $f_x = 3$ を設定した。

3.3.2 検証結果

3つの手法で核データを調整した。1つ目のアプローチでは、UTSを用いて、核特性の共分散行列 \mathbf{M}_R と核特性と核データ間の共分散行列 \mathbf{M}_{TR} を評価した。2つ目のアプローチでは、

RS を用いて、 \mathbf{M}_R , \mathbf{M}_{TR} を評価した。第 1 及び第 2 のアプローチでは、核データ調整に式 (2.35)–(2.37) を使用した。3 つ目のアプローチは、GLLS[8]に基づく従来のアプローチであり、感度係数を使用する式(2.17)–(2.19) を用いた。

GLLS で用いる感度係数は、SCALE6.2/TSUNAMI-1D[6]を用いて解析した。核データ調整には、実験値の不確かさ \mathbf{M}_E と計算モデルの不確かさ \mathbf{M}_C を必要とする。仮想的な測定値を MCNP6.2 によって数値解析した際の統計不確かさを実験値の不確かさ \mathbf{M}_E として用いた。同様に、核データ調整に用いる計算値を MCNP6.2 によって数値解析した際の統計不確かさを計算モデルの不確かさ \mathbf{M}_C として用いた。

提案手法である UTS について、従来法である GLLS, RS と比較する。サンプル数を最大とした場合において、提案手法と従来手法間で近い解を得ることができれば、手法の妥当性を確認できる。UTS ($2X + 1 = 225$ サンプル), RS ($N = 225$ サンプル), GLLS を用いて核データを調整した結果をそれぞれ 図 3.4, 図 3.5 に示す。実線、破線、一点鎖線はそれぞれ調整後核データ (Estimation)、調整後核データの標準偏差 (Estimation Unc.)、仮想的な真値 (reference) である。

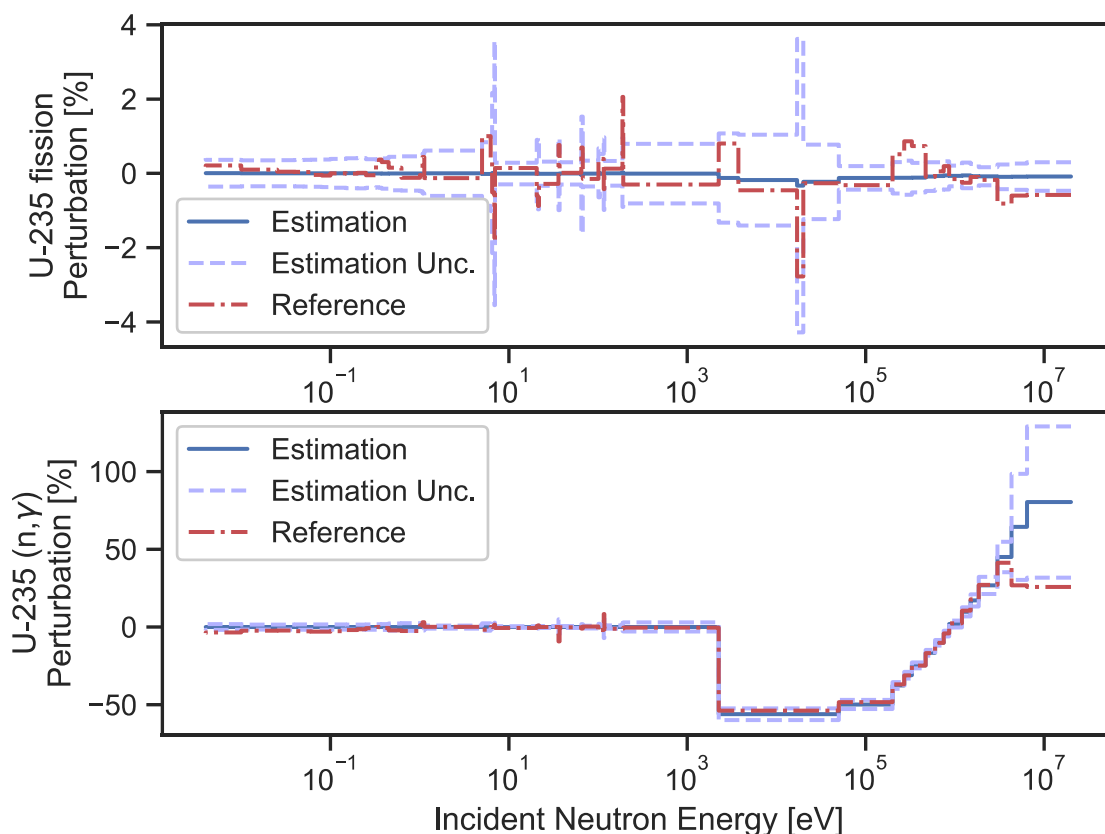


図 3.3 核データの調整値と参照値 (UTS, $N = 225$)

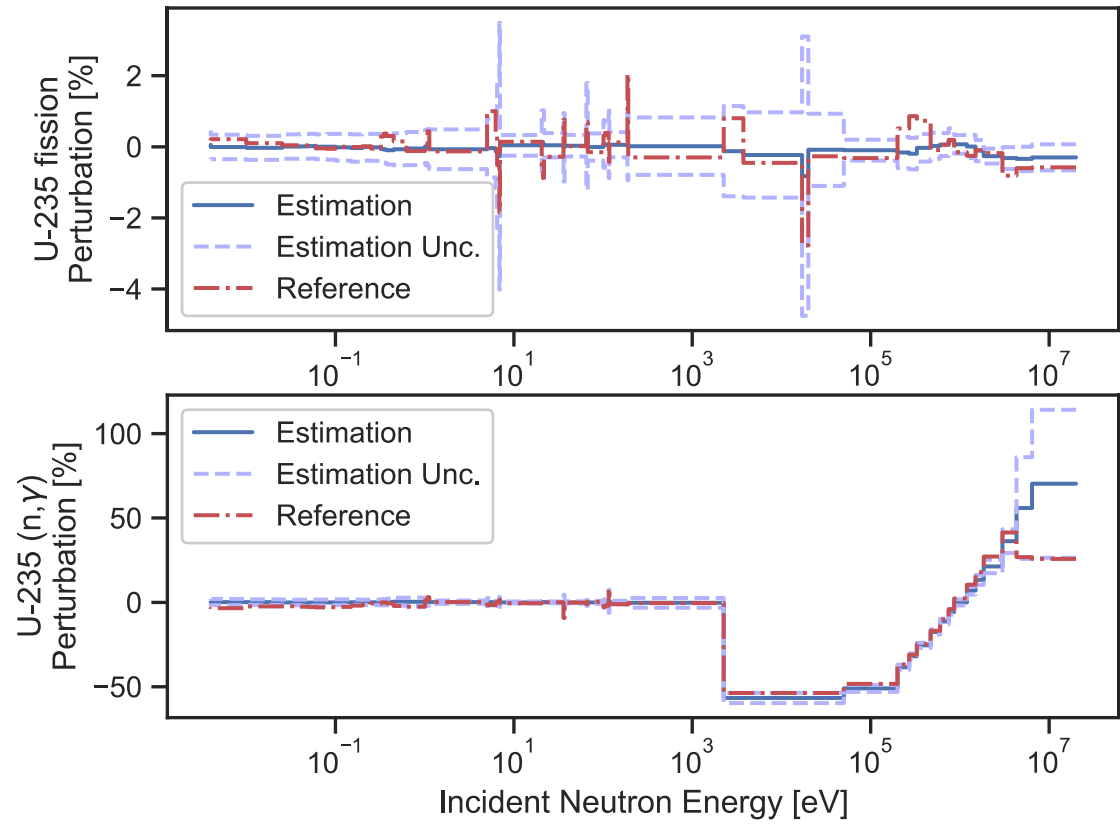


図 3.4 核データの調整値と参照値 (RS, $N = 225$)

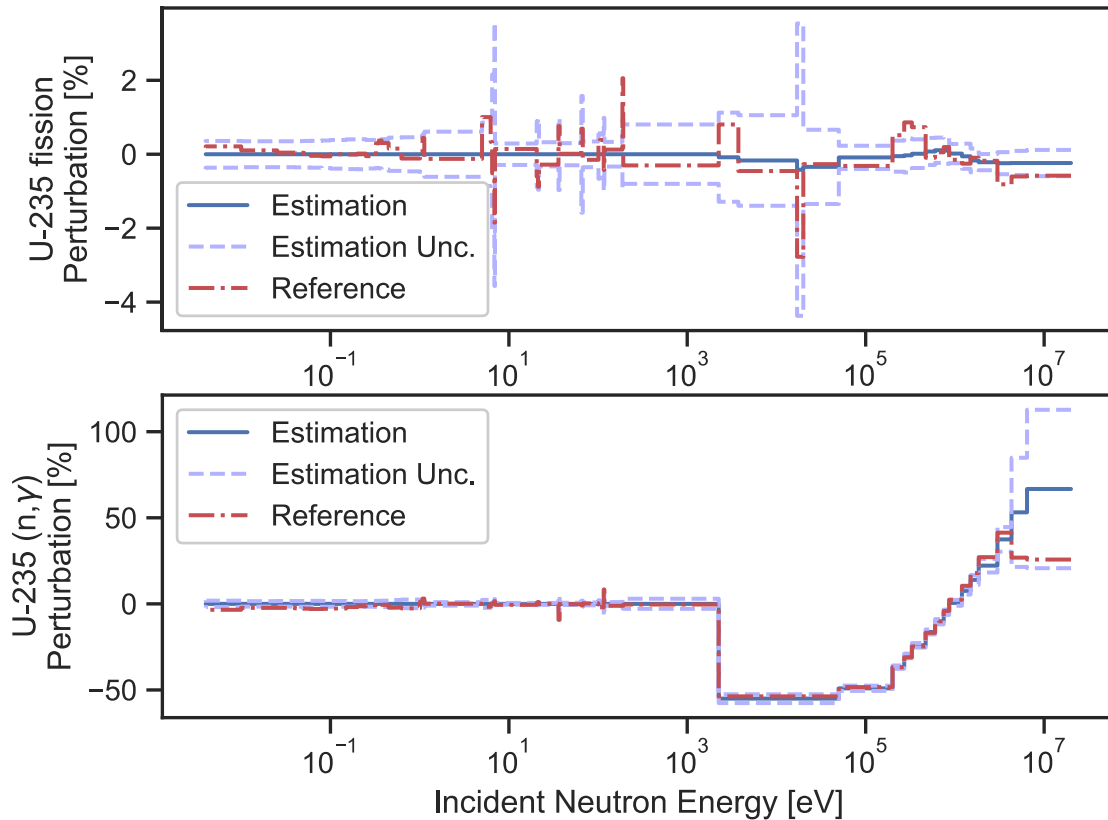


図 3.5 核データの調整値と参照値 (GLLS)

すべての核データ調整法において、参照解は調整後の核データの不確かさ範囲の約 1 標準偏差内に収まることがわかった。一方、 1×10^7 [eV]付近の中性子捕獲断面積の推定解の違いは、このエネルギー領域での感度が低いことに起因する。この領域では、核データの摂動に対して核特性の摂動が小さくなるため、連続エネルギーモンテカルロ計算コードの統計誤差の影響が大きい。これに対して、連続エネルギーモンテカルロ計算コードを用いない GLLS では、統計誤差の影響を受けないため比較的に良い解を得ることができ、基準値が 1 標準偏差以内に収まった。

図 3.6 は、様々なサンプル数に対する各核データ調整手法のカイ二乗値を示している。サンプル数が小さい場合、UTS はより大きな特異値を持つ摂動方向のみを使用した。例えば、 $N = 3$ の場合、非摂動核データ $\vec{d}^{(0)}$ と正負ペア $\vec{d}^{(1)}$, $\vec{d}^{(2)}$ (最も特異値の大きい方向 \vec{a}_1 へ摂動した核データ) が用いられる。UTS 系列で 20 から 50 付近で χ^2 が不連続となる理由は、この範囲では高速群核分裂断面積が摂動され、これらの核データの核特性への影響が大きいためである。

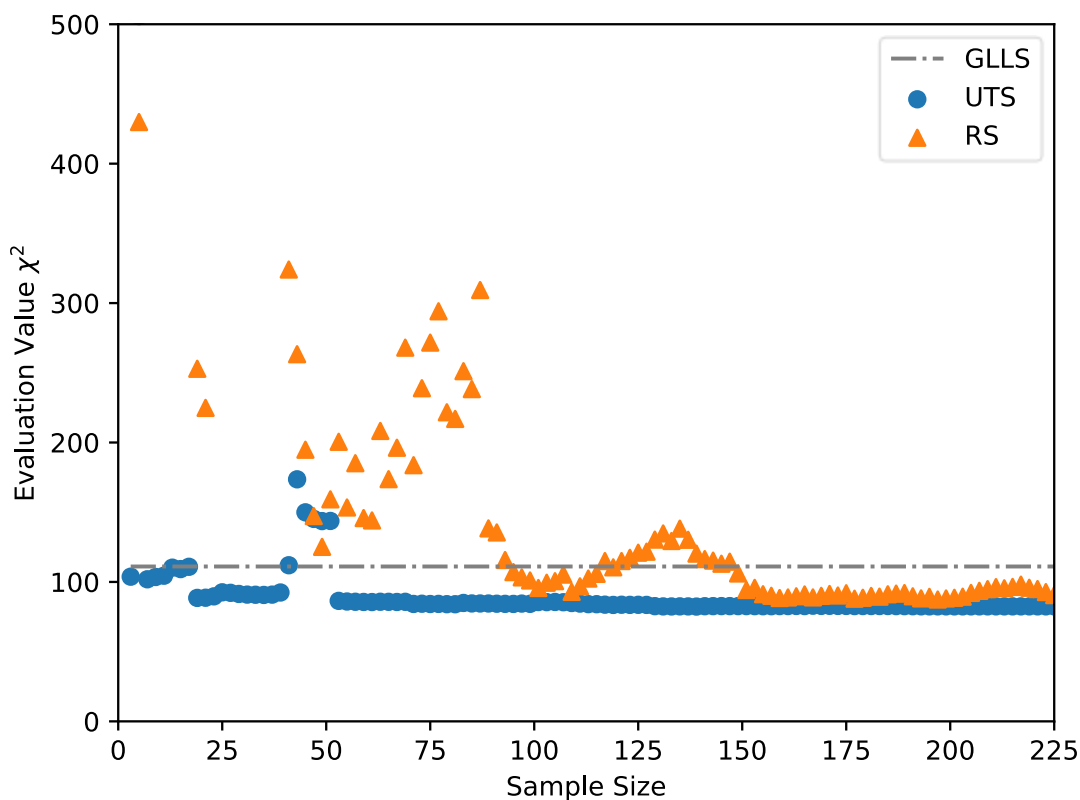


図 3.6 それぞれの核データ調整法におけるサンプル数に対するカイ二乗値

カイ二乗分布の性質として、自由度（未知数の数）を k とした場合平均 k 、標準偏差 $\sqrt{2k}$ となる。核データ数が 112 であるため、今回の計算における適切なカイ二乗値は、おおよそ $\chi^2 \approx 112 \pm 15$ である。より詳細には、核データを $r = 84$ で低ランク近似してカイ二乗値を計算しているため、自由度も84となり適切なカイ二乗値は $\chi^2 \approx 84 \pm 13$ となる。GLLS では感度係数が必要であるが、予想通り適切な χ^2 値が得られた。RS による核データ調整では、サンプル数が大きくなるにつれて適切な χ^2 値に収束していった。一方、UTS の場合には、従来の RS より明らかに早く収束した。その結果、UTS は RS よりも低い計算回数で核データを調整できた。RS 法では統計誤差が発生するため、核データサンプルの共分散行列が元の母共分散行列を統計精度良く再現することができない。しかし、UTS によって生成されるサンプルの共分散行列は、サンプル数に関係なく統計的誤差を含まない。これが UTS の収束を早める大きな理由である。

本検討では、UTS を用いることで、RS に比べてサンプル数を小さくすることができる見通しを得た。一方、特定の条件下では、RS は UTS より少ないサンプル数で核データを調整できる可能性がある。UTS のサンプル数は核データ共分散行列の有効ランク（すなわち、有効な特異値 X の数）に依存し、RS のサンプル数は要求される統計精度に依存する。UTS で

は、入力核データの総数が N_T であれば、 $2N_T + 1$ 回の計算で統計的な不確かさをゼロにして定量化することができる。また、寄与が無視できる特異値の数を減らし、核データ共分散行列の有効特異値数を X とすれば、サンプル数はさらに $2X + 1$ に減らすことができる。しかし、RS に必要なサンプル数は、統計的精度に依存する。先行研究[9]では、RS の典型的なサンプル数 N_{RS} は約 1000–10000 の範囲で設定されている。この条件下で、核データ共分散行列の有効ランクが $(2X + 1) < N_{RS}$ であれば、UTS は RS よりもサンプル数を小さくすることが可能である。

3.4 本章のまとめ

本章では、UTS を用いた新しい核データ調整法を提案した。GLLS と比較して、UTS を用いた手法は RS を用いた手法と同様に以下の利点を有する。

- UTS は一般化摂動論による感度解析を省略できる。炉心解析コードを用いた forward 計算のみでよいため、既存のコードへの適用が容易である。
- UTS は、感度係数を用いた一次近似モデルを排除できるため、非線形問題への適用が可能である。

また、RS と比較した場合、UTS の利点は以下の通りである。

- 要求される統計精度が高い場合や核データの共分散の有効ランクが小さい場合、UTS は RS に比べてサンプル数を小さくすることができる。
- UTS は、調整後核データの統計的不確かさを排除することができる。
- UTS は負の核データの発生を防ぎつつ、母集団特性（母共分散行列）を再現するサンプルを生成できる。

これに対し、提案手法の欠点は以下の通りである。

- UTS は、入力データの数（核データの種類数）と共分散行列のランクに応じて、RS よりも多くの数値解析が必要となる場合がある。
- 決定論的サンプリングにおける摂動係数 f_x の適切な決定方法については、検討を要する。摂動が小さすぎると、核特性の摂動も小さくなり、モンテカルロ解析コードを用いた場合、統計誤差により正確な評価ができなくなる。

提案手法では、適切なサンプル数は共分散行列の実効ランク X に依存する。入力データ（核データ）の数が増えると、共分散行列の有効ランクが上昇する。このため、適切なサンプル数が増加する。この問題は、Active Subspace (AS)法[10]を適用することで解決することができる。対象システムの感度係数を用いて Active Subspace を求めることで、UTS における核データの摂動方向を Active Subspace に限定することができる。したがって、Active Subspace 法を適用した UTS を用いた核データ調整は、より少ないサンプル数で実施できる可能性がある。

3.5 参考文献

- [1] S.J. Julier, “The Scaled Unscented Transformation,” *Proc. Am. Control Conf.* **6**, 4555–4559 (2002); <https://doi.org/10.1109/acc.2002.1025369>.
- [2] “International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project Handbook,” OECD. (2020); <https://doi.org/10.1787/110ba6fc-en>
- [3] C.J. Werner (Ed.), *MCNP User’s Manual Code Version 6.2*, LA-UR-17-29981, Los Alamos National Laboratory (2018).
- [4] M.B. Chadwick, M. Herman, P. Obložinský, *et al.*, “ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Section, Covariance, Fission Product Yields and Decay Data,” *Nucl. Data Sheets*, **112**, 2887–2996 (2011); <https://doi.org/10.1016/j.nds.2011.11.002>.
- [5] D.A. Brown, M.B. Chadwick, R. Capote, *et al.*, “ENDF/B-VIII.0: The 8 th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data,” *Nucl. Data Sheets*, **148**, 1–142 (2018); <https://doi.org/10.1016/j.nds.2018.02.001>.
- [6] W. A. Wieselquist, R. A. Lefebvre, M. A. Jessee, (Eds.), *SCALE Code System*, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.4, Oak Ridge National Laboratory (2020).
- [7] K. Tada, Y. Nagaya, S. Kunieda, *et al.*, “Development and Verification of a New Nuclear Data Processing System FRENDDY,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **54**, 806–817 (2017); <https://doi.org/10.1080/00223131.2017.1309306>.
- [8] K. Yokoyama, M. Ishikawa, T. Kugo, “Extended Cross-Section Adjustment Method to Improve the Prediction Accuracy of Core Parameters,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **49**, 1165-1174 (2012) ; <https://doi.org/10.1080/00223131.2012.739020>.
- [9] D. Siefman, M. Hursin, D. Rochman, *et al.*, “Stochastic vs. Sensitivity-Based Integral Parameter and Nuclear Data Adjustments,” *Eur. Phys. J. Plus*, **133**, 429 (2018) ; <https://doi.org/10.1140/epjp/i2018-12303-8>.
- [10] C. Kennedy, C. Rabiti, H. Abdel-Khalik. “Generalized Perturbation Theory-free Sensitivity Analysis for Eigenvalue Problems,” *Nucl. Technol.*, **179**, 169–179 (2012) ; <https://doi.org/10.13182/NT179-169>.

第4章 ロバスト核データ調整

4.1 本章の概要

本章ではM推定を適用した外れ値に堅牢な核データ調整について解説する。4.2節では理論として、M推定の概要と核データ調整法への適用について解説する。4.3節では意図的に外れ値を与えた双子実験によって提案手法の有効性を比較検証する。4.4節では本章の内容をまとめる。

4.2 理論

4.2.1 M推定

M推定[1]は外れ値に対してロバストな推定手法の一つである。M推定では、観測値と回帰モデルとの残差 d から観測値の加重 $w(d)$ を設定し、回帰モデルを更新する。初期回帰モデル（加重の更新前）は、あらかじめ最小二乗法などで決定しておく。この方法では、残差 d が大きい場合、値に対する加重付け $w(d)$ が小さくなるため、推定結果に対する外れ値の影響を低減できる。残差 d から加重 w を計算する関数を損失関数と呼ぶ。損失関数の一例を式(4.1)に示す。

$$w(d) = \begin{cases} \left(1 - \left(\frac{d}{D}\right)^2\right)^2 & |d| \leq D \\ 0 & |d| > D, \end{cases} \quad (4.1)$$

ここで、 D は許容誤差である。この損失関数を用いた推定を **Tukey's Biweight 法**と呼ぶ[1]。

本項では、M推定の一例として、線形関数の回帰問題を考える。与えられた入力データと観測された出力データの組 $\{x_n, y_n^{(\text{obs})}\}$ ($1 \leq n \leq N$)を用いて回帰モデル $y^{(\text{model})} = ax + b$ のパラメータ a, b を推定する問題を考える。

通常最小二乗法は、式(4.2)に示す連立方程式を設定し、モデルと観測値の間の残差の二乗和 J を最小化するパラメータ a, b を計算するものである。

$$\begin{cases} y_1^{(\text{model})} = ax_1 + b \\ y_2^{(\text{model})} = ax_2 + b \\ \vdots \\ y_N^{(\text{model})} = ax_N + b, \end{cases} \quad (4.2)$$

$$J = \sum_{n=1}^N (y_n^{(\text{model})} - y_n^{(\text{obs})})^2 \quad (4.3)$$

式(4.2)を行列形式で記述する。観測データ $\vec{y}^{(\text{obs})}$ 、回帰パラメータ $\vec{p} = [a \ b]^T$ 、入力 \mathbf{X} を使用すると、一般化逆行列による通常最小二乗法では次式が得られる。

$$\vec{y}^{(\text{obs})} \simeq \vec{y}^{(\text{model})} = \mathbf{X}\vec{p}, \quad (4.4)$$

$$\begin{bmatrix} y_1^{(\text{obs})} \\ y_2^{(\text{obs})} \\ \vdots \\ y_N^{(\text{obs})} \end{bmatrix} \simeq \begin{bmatrix} y_1^{(\text{model})} \\ y_2^{(\text{model})} \\ \vdots \\ y_N^{(\text{model})} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_N & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix}, \quad (4.5)$$

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \simeq \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_N & 1 \end{bmatrix}^\dagger \begin{bmatrix} y_1^{(\text{obs})} \\ y_2^{(\text{obs})} \\ \vdots \\ y_N^{(\text{obs})} \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

$$\vec{p} \simeq \mathbf{X}^\dagger \vec{y}^{(\text{obs})} \quad (4.7)$$

ここで、 \mathbf{X}^\dagger は行列 \mathbf{X} の一般化逆行列を示す。

一方、 \mathbf{M} 推定では、加重 w を掛け合わせた連立方程式を設定する。このとき、最小化すべき関数 J は、式(4.9)のようになる。 n 番目のデータ $y_n^{(\text{obs})}$ の重み w_n は、仮に設定した回帰モデルによる計算値と観測値との残差により算出される。

$$\begin{cases} w_1 y_1 = w_1 (ax_1 + b) \\ w_2 y_2 = w_2 (ax_2 + b) \\ \vdots \\ w_N y_N = w_N (ax_N + b) \end{cases} \quad (4.8)$$

$$J = \sum_{n=1}^N w_n^2 (y_n^{(\text{model})} - y_n^{(\text{obs})})^2 \quad (4.9)$$

ここで、式(4.8)を行列形式で記述するために、加重行列 \mathbf{W} を使用する。加重行列 \mathbf{W} は、対角上に加重 w_n を持つ行列である。

$$\mathbf{W} \vec{y}^{(\text{obs})} \simeq \mathbf{W} \vec{y}^{(\text{model})} = \mathbf{W} \mathbf{X} \vec{p} \quad (4.10)$$

$$\begin{bmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1^{(\text{obs})} \\ y_2^{(\text{obs})} \\ \vdots \\ y_N^{(\text{obs})} \end{bmatrix} \simeq \begin{bmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_N & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \quad (4.11)$$

$$\begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \simeq \left(\begin{bmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 & 1 \\ x_2 & 1 \\ \vdots & \vdots \\ x_N & 1 \end{bmatrix} \right)^\dagger \begin{bmatrix} w_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1^{(\text{obs})} \\ y_2^{(\text{obs})} \\ \vdots \\ y_N^{(\text{obs})} \end{bmatrix} \quad (4.12)$$

$$\vec{p} \simeq (\mathbf{W} \mathbf{X})^\dagger \mathbf{W} \vec{y}^{(\text{obs})} \quad (4.13)$$

線形関数への回帰問題に対して \mathbf{M} 推定を適用する手順は以下の通りである。

- (1) 初期パラメータ (a, b) を最小二乗法などの手法を用いて仮決定する。
- (2) 初期パラメータと観測値による回帰モデルから加重を計算する。

(3) 加重を用いて回帰パラメータを更新する。

核データ調整に \mathbf{M} 推定を適用する手順は以下の通りである。

- (1) 初期パラメータは、核データ平均値（評価済み核データ）である。
- (2) 加重は、核データ平均に対する計算核特性及び測定核特性から求められる。
- (3) 加重を用いて核データを調整する。

次項では、 \mathbf{M} 推定の核データ調整への応用を、より具体的に説明する。

4.2.2 ロバスト核データ調整法

4.2.2.1 基礎的な概要

\mathbf{M} 推定を導入した核データ調整法を考える。提案する手法の基本的な考え方は、計算値と測定値の差が許容不確かさ範囲内にある核特性に着目した核データの調整である。以下に、開発手法の要点をまとめる。

- (1) 核特性間の相関を考慮し、計算値と実測値の差から加重付けを計算する方法を開発した。一般的な \mathbf{M} 推定では、観測データが独立であるとの仮定に基づいて加重が計算されるため、核特性間の相関を扱うことができない。この問題を解決するために、特異値分解を用いた加重計算方法を提案する。全核特性共分散行列の特異値分解（すなわち $\mathbf{G}^T \mathbf{M}_T^{(0)} \mathbf{G} + \mathbf{M}_E + \mathbf{M}_C = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{U}^T$ ）から、 $\mathbf{U} = [\vec{u}_1 \ \vec{u}_2 \ \dots \ \vec{u}_N]$ の基底行列が得られ、その相関方向を特徴付けるベクトル $\vec{u}_1 \ \vec{u}_2 \ \dots \ \vec{u}_N$ が得られる。この操作により、相関を含む核特性分布を独立した分布として扱うことができる。加重は、各基底方向における計算値と測定値との差を評価することにより算出することができる。例えば、図 4.1 に示す 2 つの核特性の場合、 \vec{u}_2 方向は測定値がばらつきの範囲外であるのに対し、 \vec{u}_1 方向はばらつきの範囲内なので \vec{u}_1 方向の加重は大きくなり、 \vec{u}_2 方向の加重は小さくなる。

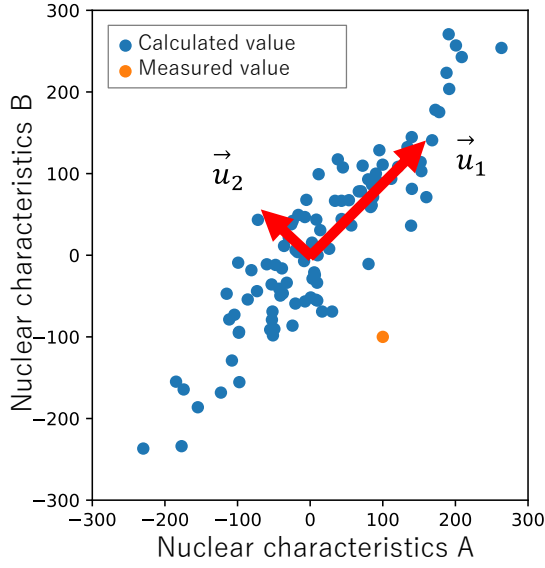


図 4.1 加重計算の概念

- (2) (1)に示した加重計算に基づく \mathbf{M} 推定を取り入れた核特性ごとの加重付き核データ調整式を開発した。

4.2.2.2 加重の計算

ここでは、核特性間の相関を考慮した加重行列 $\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ の設定について解説する。この方法では、核特性の共分散行列の特異値分解から相関の方向 (= 基底) を求める。得られた基底方向において損失関数を用いて基底方向加重行列 $\mathbf{W}^{(\mathbf{U})} \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ を計算する。詳細な計算手順を以下に示す。

- (1) 感度係数行列 \mathbf{G} 、核データの共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(0)} \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ 、測定核特性値 $\vec{E} \in \mathbb{R}^{N_R}$ 、核データ $\vec{T}^{(0)}$ に対する計算核特性値 $\vec{C}(\vec{T}^{(0)}) \in \mathbb{R}^{N_R}$ 、およびそれらの共分散行列 $\mathbf{M}_E \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ 、 $\mathbf{M}_C \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ が得られているとする。
- (2) 共分散行列の和から全不確かさの共分散行列 $\mathbf{M}_R \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ を求める。

$$\mathbf{M}_R = \mathbf{G}\mathbf{M}_T^{(0)}\mathbf{G}^T + \mathbf{M}_E + \mathbf{M}_C \quad (4.14)$$

- (3) 特異値分解により、核特性相関の基底行列 \mathbf{U} を得る。共分散行列 \mathbf{M}_R は直交行列である $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ と対角行列である $\mathbf{\Sigma} \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ に分解される。

$$\mathbf{M}_R = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{U}^T \quad (4.15)$$

$$\mathbf{U} = [\vec{u}_1 \quad \vec{u}_2 \quad \cdots \quad \vec{u}_{N_R}] \quad (4.16)$$

ここで、基底行列 \mathbf{U} の列要素 $\vec{u}_1 \quad \vec{u}_2 \quad \cdots \quad \vec{u}_{N_R}$ は直交する基底ベクトルである。

- (4) 測定値 \vec{E} 、計算値 $\vec{C}(\vec{T}^{(0)})$ 、共分散行列 \mathbf{M}_R は、基底行列 \mathbf{U} で表される基底行列の空間でのベクトル $\vec{E}^{(U)} \in \mathbb{R}^{N_R}$ 、 $\vec{C}^{(U)} \in \mathbb{R}^{N_R}$ 、 $\mathbf{M}_R^{(U)} \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ にそれぞれ変換される。

$$\vec{E}^{(U)} = \mathbf{U}^T \vec{E} \quad (4.17)$$

$$\vec{C}^{(U)} = \mathbf{U}^T \vec{C}(\vec{T}^{(0)}) \quad (4.18)$$

$$\mathbf{M}_R^{(U)} = \mathbf{U}^T \mathbf{M}_R \mathbf{U} (= \Sigma) \quad (4.19)$$

- (5) 変換後の測定値 $\vec{E}^{(U)}$ と変換後の計算値 $\vec{C}^{(U)}$ の差異について損失関数 w を用いて評価し、基底方向加重行列 $\mathbf{W}^{(U)} \in \mathbb{R}^{N_R \times N_R}$ (対角行列) を計算する。

$$\mathbf{W}^{(U)} = \begin{bmatrix} w_1 & & & \mathbf{0} \\ & w_2 & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & w_{N_R} \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

$$w_n = w(\vec{C}^{(U)}[n], \vec{E}^{(U)}[n], \mathbf{M}_R^{(U)}[n, n], \gamma) \quad (4.21)$$

ここで、 $[n]$ はベクトルの n 番目の要素、 $[n, n]$ は行列の (n, n) 番目の要素を意味する。 γ は加重計算時の任意のチューニングパラメータである。損失関数としてガウス関数を使用する場合の式を以下に示す。

$$w_n = \exp\left(-\frac{\gamma (\vec{C}^{(U)}[n] - \vec{E}^{(U)}[n])^2}{2 \mathbf{M}_R^{(U)}[n, n]}\right) \quad (4.22)$$

本論文では、 $\gamma = 1.0$ とする。もし $\gamma = 0$ と設定した場合には式(4.23)の戻り値は常に1となり、加重行列が常に単位行列となる。この場合は従来手法である GLLS と等価な手法となる。

- (6) 基底方向加重行列 $\mathbf{W}^{(U)}$ の逆行列に基底行列 \mathbf{U} を作用させ、加重行列の逆行列 \mathbf{W}^{-1} を求める。

$$\mathbf{W}^{-1} = \mathbf{U} \mathbf{W}^{(U)-1} \mathbf{U}^T \quad (4.23)$$

4.2.2.3 加重付き核データ調整

最小二乗法への \mathbf{M} 推定の適用と同様に、ロバスト核データ調整式も加重付けたモデル式を想定して導出される。従来の核データ調整で最小化対象としていた関数 $J(\vec{T})$ に代えて、核特性 \vec{E} 、 $\vec{C}(\vec{T})$ に加重つけた関数 $J_M(\vec{T})$ を考える。

$$J_M(\vec{T}) = (\vec{T} - \vec{T}^{(0)})^T \mathbf{M}_T^{(0)-1} (\vec{T} - \vec{T}^{(0)}) + \left(\mathbf{W} (\vec{E} - \vec{C}(\vec{T})) \right)^T \mathbf{M}_{E+C}^{-1} \mathbf{W} (\vec{E} - \vec{C}(\vec{T}))$$

$$\begin{aligned}
&= (\vec{T} - \vec{T}^{(0)})^T \mathbf{M}_T^{(0)-1} (\vec{T} - \vec{T}^{(0)}) + (\vec{E} - \vec{C}(\vec{T}))^T \mathbf{W}^T \mathbf{M}_{E+C}^{-1} \mathbf{W} (\vec{E} - \vec{C}(\vec{T})) \\
&= (\vec{T} - \vec{T}^{(0)})^T \mathbf{M}_T^{(0)-1} (\vec{T} - \vec{T}^{(0)}) + (\vec{E} - \vec{C}(\vec{T}))^T \mathbf{W} \mathbf{M}_{E+C}^{-1} \mathbf{W} (\vec{E} - \vec{C}(\vec{T})) \quad (4.24)
\end{aligned}$$

ここで、従来の核データ調整式における核特性不確かさ \mathbf{M}_{E+C}^{-1} を $\mathbf{W} \mathbf{M}_{E+C}^{-1} \mathbf{W}$ に置き換えると、 $J_M(\vec{T})$ に対応することが分かる。

この結果より核データ調整式(2.17)–(2.19)を以下の形に書き換える。

$$\vec{T}^{(\text{adj})} = \vec{T}^{(0)} + \mathbf{K}(\vec{E} - \vec{C}(\vec{T}^{(0)})) \quad (4.25)$$

$$\mathbf{M}_T^{(\text{adj})} = \mathbf{M}_T - \mathbf{K} \mathbf{G} \mathbf{M}_T^{(0)} \quad (4.26)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{M}_T^{(0)} \mathbf{G}^T (\mathbf{G} \mathbf{M}_T^{(0)} \mathbf{G}^T + \mathbf{W}^{-1} \mathbf{M}_{E+C} \mathbf{W}^{-1})^{-1} \quad (4.27)$$

本論文では、この方法を MGLLS (GLLS に M 推定を組み込んだ加重付き核データ調整) と呼ぶ。

4.3 双子実験による検証

4.3.1 計算体系と条件

データ同化の検証手法の一つである双子実験により、提案手法を検証する。本研究における検証の手順は以下の通りである。

- (1) 参照核データ $\vec{T}^{(\text{ref})}$ を、事前平均 $\vec{T}^{(0)}$ と事前共分散行列 $\mathbf{M}_T^{(0)}$ に基づいてランダムに設定する。データ同化により、 $\vec{T}^{(\text{ref})}$ が再現できれば手法の妥当性が確認できたことになる。データ同化手法の汎用性を確認するため、様々なケースを想定して、9 種類の $\vec{T}^{(\text{ref})}$ (#1–#9) をランダムに用意し、検証した。
- (2) 実際のデータ同化においては、実測された核特性値を用いるが、双子実験においては、参照核データ $\vec{T}^{(\text{ref})}$ を用いて、測定核特性 \vec{E} を仮想的に数値計算で求める。
- (3) (2) で求められた測定核特性 \vec{E} の一部を意図的に変化させ、異常値 (外れ値) を仮想的に混入させる。
- (4) 測定核特性 \vec{E} を用いて核データ $\vec{T}^{(0)}$ を調整し、調整核データ $\vec{T}^{(\text{adj})}$ とその共分散 $\mathbf{M}_T^{(\text{adj})}$ を得る。
- (5) また、 $\vec{T}^{(\text{adj})}$ を参照核データ $\vec{T}^{(\text{ref})}$ と比較する。ここで、 $\vec{T}^{(\text{adj})}$ の不確かさ範囲として、 $\mathbf{M}_T^{(\text{adj})}$ を考慮する。 $\vec{T}^{(\text{ref})}$ が $\vec{T}^{(\text{adj})}$ の不確かさ範囲に入っていれば妥当なデータ同化が行われていると判断できる。

検証条件を表 4.1 にまとめる。臨界実験の体系として Pu-Met-Fast-001(PMF001), Pu-Met-Fast-006(PMF006), Pu-Sol-Therm-001(PST001)[2] の 3 種類を選出した。利用する一次元感度解析コード(SCALE6.2/TSUNAMI-1D)の制約より、球対称な体系の実験を選出した。

PMF001（金属 Pu 球体）と PMF006（金属 Pu 球体と U 反射材）は組成が類似した体系であり、中性子スペクトルも類似しているため、核特性間の相関が強い。そのため、核特性間の相関を考慮して加重付けする提案手法の有効性確認に有効であることから選出された。一方で PST001（硝酸 Pu 溶液球体）は、水素原子によって中性子が熱化するため、核特性の相関が弱い体系として選出した。このとき3つの実験について、それぞれ4つの核特性を解析したため、核特性の総数は12個である。

表 4.1 解析条件

Critical experiments	Pu-Met-Fast-001 (Jezebel) [2] Pu-Met-Fast-006 (Flatop) [2] Pu-Sol-Therm-001 [2]
Adjusted nuclear data	^{239}Pu (n, γ) cross-section
Nuclear characteristics	k_{eff} C41/F41 C49/F41 F49/F41
Nuclear characteristics analysis	MCNP6.2 [3]
Evaluated nuclear data	ENDF/B-VII.1 [4]
Sensitivity analysis	SCALE6.2/TSUNAMI-1D [5]
Nuclear data perturbation	FRENDY [6]
Covariance data	scale.rev08.56groupcov7.1 [5]
Energy groups	56
Tuning parameter of loss function γ	1.0

外れ値に対する堅牢性を確認するために、測定した核特性 \vec{E} を意図的に異常値に置き換えた検討を実施する。ここで、異常な測定値は、核特性 $\vec{T}^{(0)}$ に対する計算核特性である C の相対差 $\Delta = (E - C)/C$ の符号を変えることで得た。つまり、相対差異のプラスとマイナスを逆にしたのである。例として、測定値 E と計算値 C に対する異常測定値 E' を考える。その相対的な摂動の正負が逆転しているので、異常測定値 E' は以下の式で計算できる。

$$\frac{E' - C}{C} = -\frac{E - C}{C}, \quad (4.28)$$

$$E' = 2C - E \quad (4.29)$$

以降の項では検証として、

- 外れ値を含む実験データに対して堅牢に核データを調整できるのか
- 外れ値を含む実験データに対して提案手法を適用した調整後核データと、外れ値を除外し、従来手法を適用した調整後核データ間に差異はあるのか
- 外れ値を含まない実験データに対して、従来手法と提案手法間で調整後核データに差異はあるのか

について確認する。これらの検証のために設定した条件について表 4.2 にまとめる。

表 4.2 検証条件の設定

検証	用いる実験と核特性	外れ値とする核特性
1	PMF001[k_{eff} , C49/F41, C41/F41, F49/F41] PMF006[k_{eff} , C49/F41, C41/F41, F49/F41] PST001[k_{eff} , C49/F41, C41/F41, F49/F41]	-
2	PMF001[k_{eff} , C49/F41, C41/F41, F49/F41] PMF006[k_{eff} , C49/F41, C41/F41, F49/F41] PST001[k_{eff} , C49/F41, C41/F41, F49/F41]	PMF001[C49/F41]
3	PMF001[k_{eff} , C41/F41, F49/F41] PMF006[k_{eff} , C49/F41, C41/F41, F49/F41] PST001[k_{eff} , C49/F41, C41/F41, F49/F41]	PMF001[C49/F41] ※実験データから PMF001[C49/F41]を除外
4	PMF001[k_{eff} , C41/F41, F49/F41] PMF006[k_{eff} , C49/F41, C41/F41, F49/F41] PST001[k_{eff} , C49/F41, C41/F41, F49/F41]	PMF001[k_{eff}] ※実験データから PMF001[C49/F41]を除外

4.3.2 項に掲載する検証 1 では、外れ値を与えない理想的な実験データに対して、GLLS と MGLLS を適用し、調整後核データの妥当性を確認する。両手法間で調整後核データが近いならば、提案手法は妥当であるといえる。4.3.3 項に掲載する検証 2 では、調整対象核データに対する感度の高い核特性(PMF001[C49/F41])に対して外れ値を与える。手法間での調整後核データを比較し、従来手法での調整後核データが提案手法によって改善されるのかを確認する。4.3.4 項に掲載する検証 3 では、検証 2 で外れ値とした核特性(PMF001[C49/F41])を予め除外した場合の調整結果から、検証 2 の調整結果の妥当性を確認する。4.3.4 項に掲載する検証 4 では、調整対象となる核データに対する感度の低い核特性(PMF001[k_{eff}])に外れ値を与えた場合、調整結果に与える影響が少ないことを確認する。

検証の目的と確認事項について、表 4.3 にまとめる。

表 4.3 各検証の目的と確認事項

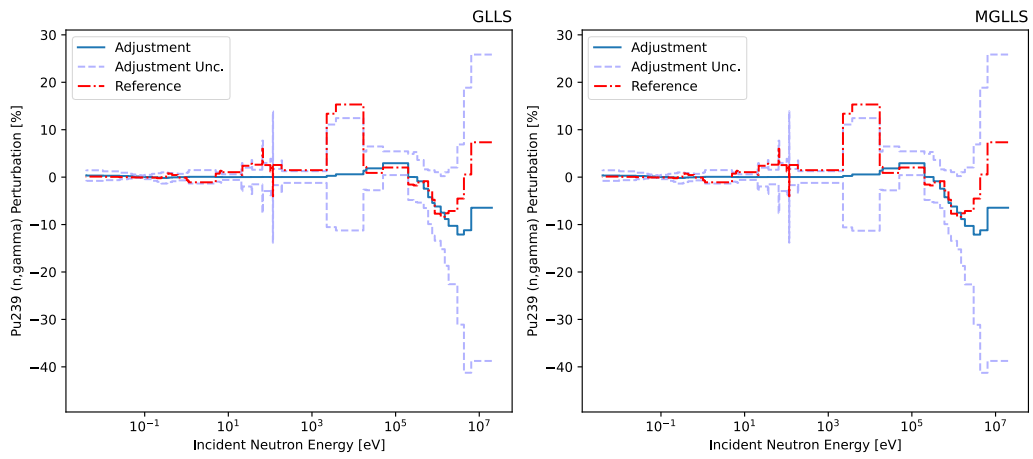
検証	目的	確認事項
1	外れ値を含まない問題での MGLLS の妥当性	両手法での調整後核データがおおよそ一致するのを確認する
2	外れ値を含む問題での MGLLS の優位性	GLLS での調整後核データよりも、MGLLS での調整後核データの方が良好な推定であるのを確認する
3	外れ値を含む問題での MGLLS の妥当性	検証 2 での MGLLS の調整後核データと検証 3 での GLLS 調整後核データを比較し、MGLLS の調整後核データが妥当であるのを確認する
4	外れ値を含む問題での MGLLS の優位性	感度の低い核特性に外れ値を含んでいても、調整後核データに対して影響を与えないことを確認することで MGLLS の調整後核データの妥当性を確認する

核データ調整コードは python3.7 を用いて作成した。基礎的な行列演算（行列積等）は numpy ライブラリ [7] を用いた。逆行列計算、特異値分解については scipy ライブラリ [8] の関数（`inv()`, `svd()`）を用いた。

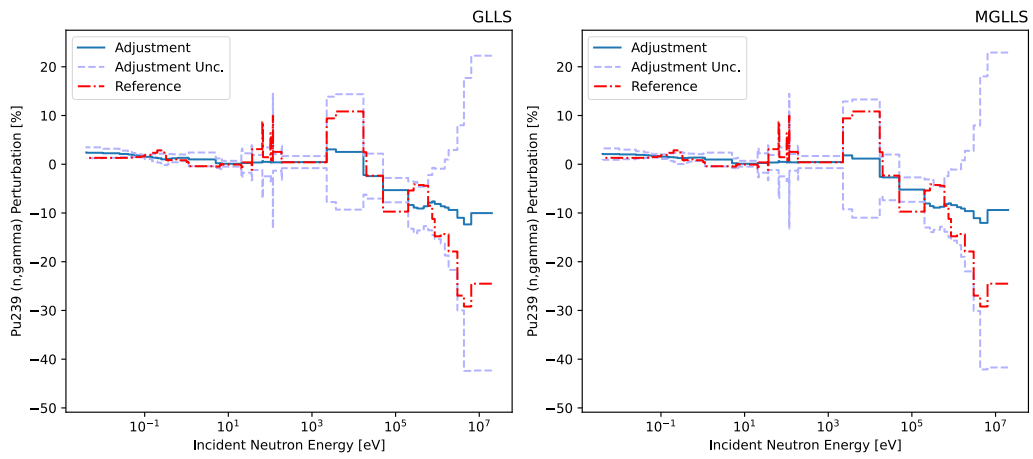
4.3.2 検証 1:理想的な測定値が得られている場合

この項では、理想的な測定値が得られている場合、GLLS と MGLLS の調整結果が類似であることを確認する。調整後の核データ $\vec{T}^{(adj)}$ とその不確かさ ($\mathbf{M}_T^{(adj)}$ の対角要素の平方根、すなわち標準偏差) を参照核データ $\vec{T}^{(ref)}$ (双子実験における仮想的な真の核データ) と比較する。

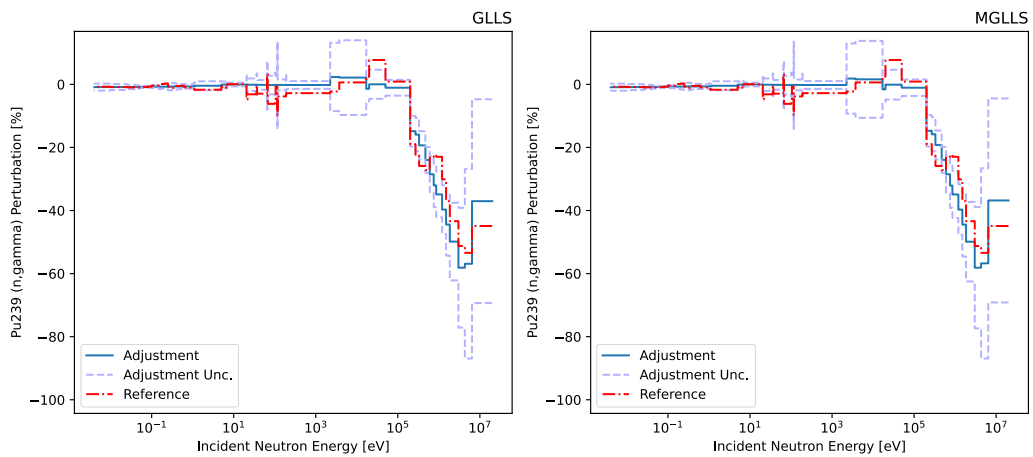
図 4.2 に調整後核データの比較を示す。ここでは $\vec{T}^{(ref)}$ が異なる場合として #2, 4, 7 を代表例として掲載する。#2 は PMF001[C49/F41] の摂動量が微小、#4 は PMF001[C49/F41] の摂動量が中、#7 は PMF001[C49/F41] の摂動量が大きいため、選出した。なお、この検証においては PMF001[C49/F41] に外れ値を与えていないことに注意する。この図において、青色実線は調整後核データ、水色破線は調整後核データ不確かさ(推定標準偏差 1σ)、赤色一点鎖線は参照核データを意味する。参照核データ(赤の一点鎖線)が推定標準偏差の 1-2 倍の範囲内(水色の破線の範囲内)であれば、調整は適切であると考えられる。



#2



#4

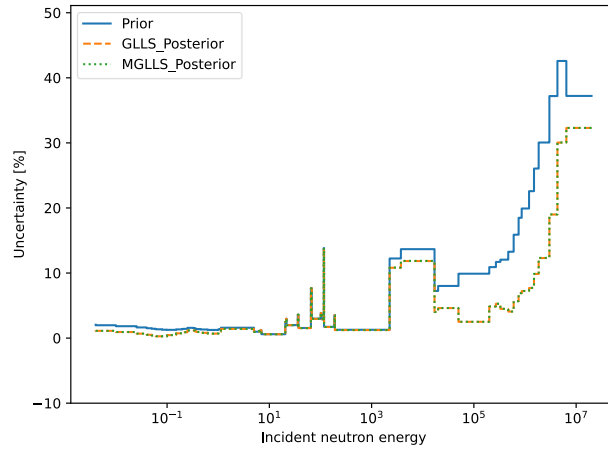


#7

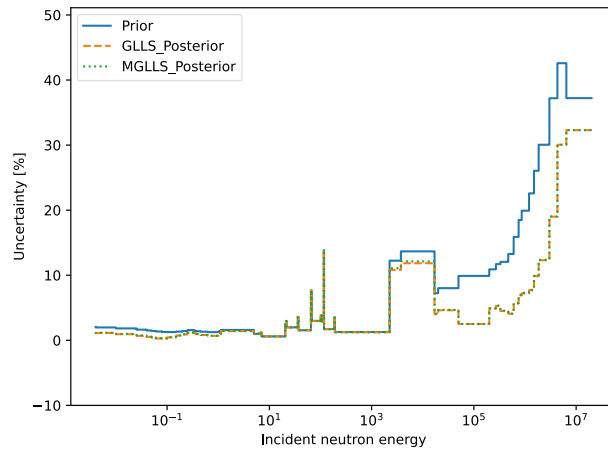
図 4.2 検証 1 での調整後核データの比較

#2,4,7 のそれぞれのケースについて、GLLS と MGLLS の両手法で推定結果が良好であり

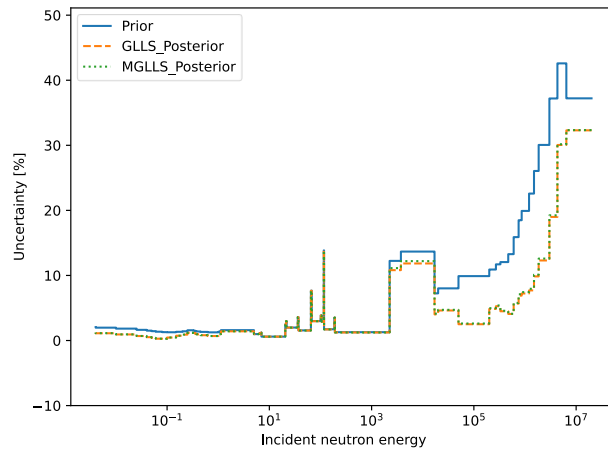
(参照値が推定値の不確かさ範囲内に存在する)、調整後核データが同程度であることを確認した。続いて、調整前後の不確かさ低減量の比較を図 4.3 に示す。青色実線は調整前核データの標準偏差、橙色破線は GLLS による調整後核データの標準偏差、緑色点線は MGLLS による調整後核データの標準偏差を意味する。図 4.3 の結果より、意図的な外れ値を含まない問題設定下では GLLS と MGLLS の手法間にて、不確かさ低減量が同程度であることを確認した。



#2



#4



#7

図 4.3 検証 1 での核データ不確かさの比較

両調整法について、評価した χ^2 値を図 4.4 に示す。青色○印は従来法 (GLLS) の χ^2 値、

橙色×印は提案法（MGLLS）の χ^2 値、黒色破線は自由度をそれぞれ意味する。調整が適切であれば、 χ^2 値は自由度に対応する値をとる。 ^{239}Pu の断面積は 56 群エネルギービンで調整されているため、今回の計算条件では自由度は 56 以下となる。

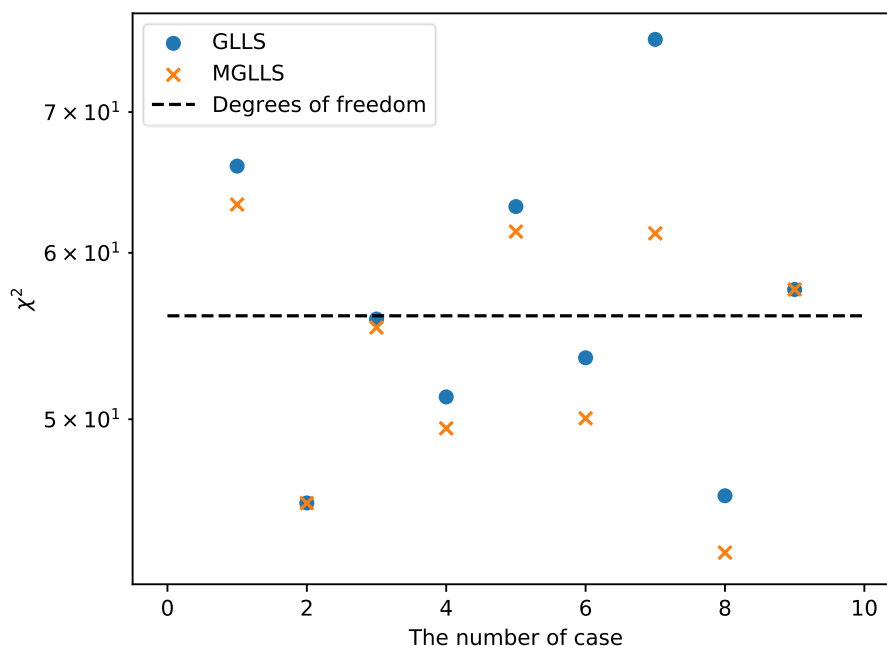


図 4.4 検証 1 での χ^2 値

両手法において、 χ^2 値が自由度と同程度の値をとる。そのため、外れ値を含まない理想的な測定値が得られている問題の場合、今回の提案手法は、従来法と同程度の調整後核データを得られることを確認した。

4.3.3 検証 2: 影響の大きい核特性を外れ値とした場合

この項では、調整対象核データに対する感度の高い核特性である PMF001 における C49/F41 を外れ値とした場合について解説する。外れ値の影響によって、従来法である GLLS では調整後核データが悪化する（調整値範囲に参照値が収まらない）のに対して、提案手法である MGLLS では調整後核データが改善する（調整値範囲に参照値が収まらない）ことを確認する。

図 4.5 に調整後核データの比較について示した。前節同様に、異なる参照核データ $\vec{r}(\text{ref})$ を与えた場合として #2,4,7 を代表例として掲載する。この図において、青色実線は調整後核データ、水色破線は調整後核データ不確かさ(推定標準偏差 1σ)、赤色一点鎖線は参照核データを意味する。

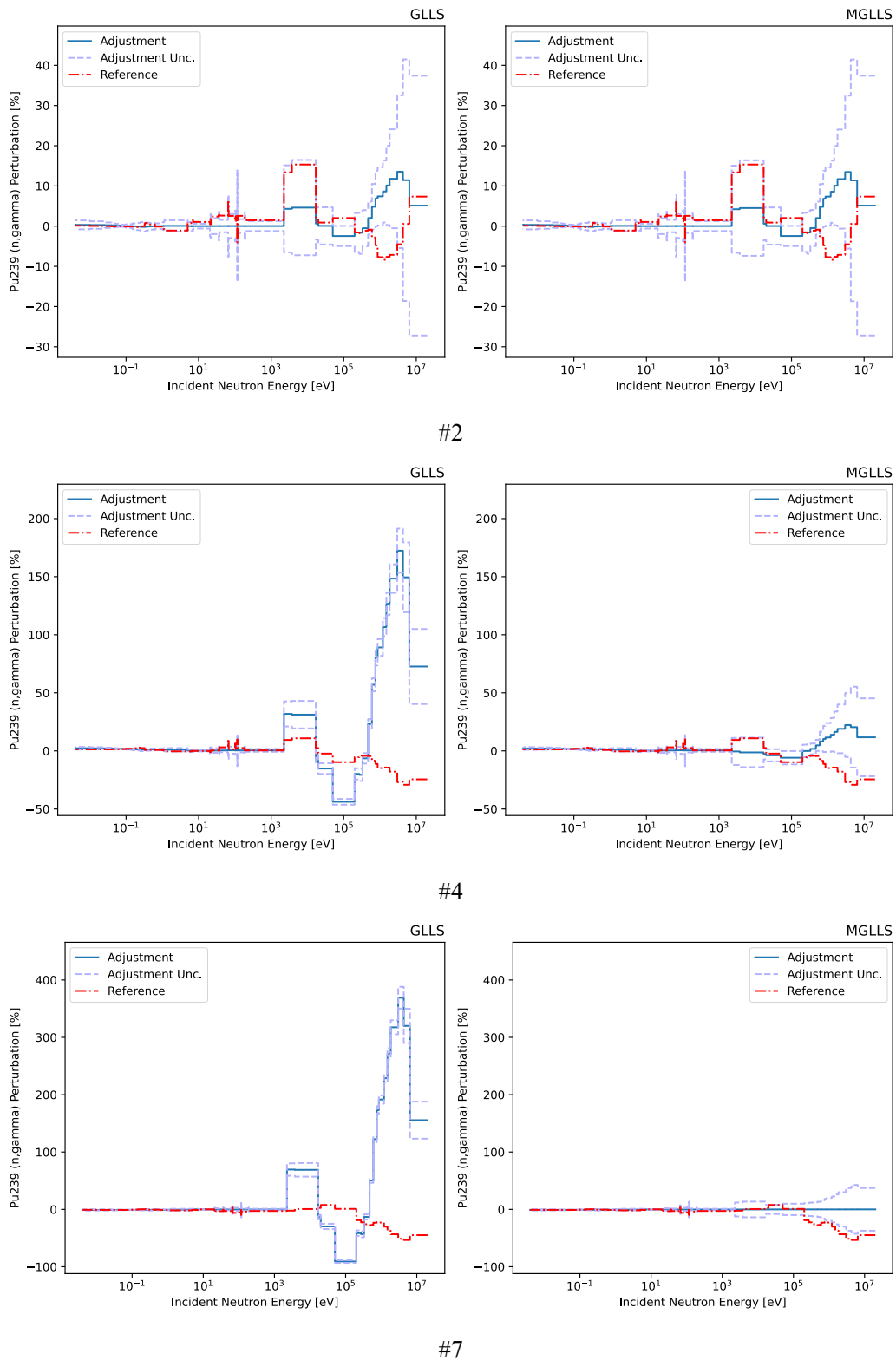
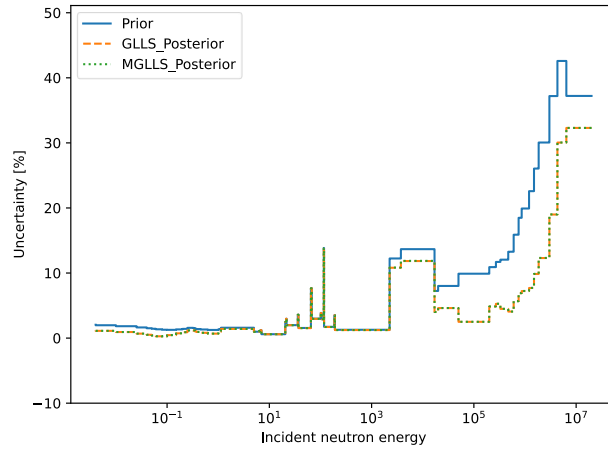


図 4.5 検証 2 での調整後核データの比較

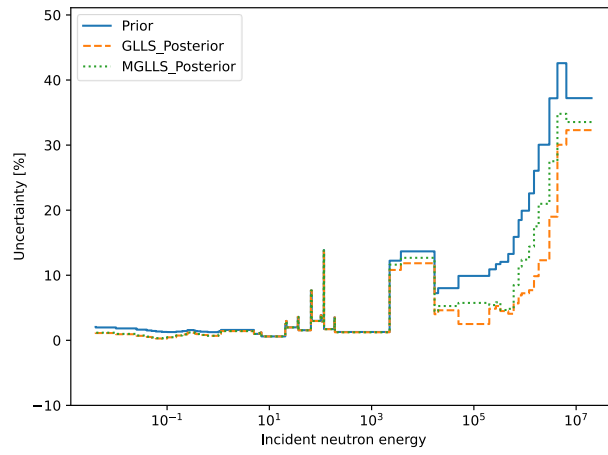
#2 のケースについて、GLLS と MGLLS の両手法で推定結果が良好である。これは#2 に

において、PMF001[C49/F41]の外れ値への摂動が小さいためである。ケース#2の外れ値は、小さな摂動量の符号を反転して発生しているため、元の核特性と摂動（異常値を含む）した核特性の差は小さく、外れ値の影響も小さくなったといえる。#4,7のケースでは、GLLSによる調整後核データの不確かさ範囲から参照値が大きく外れている。これに対して、MGLLSによる調整後核データでは不確かさの数倍の範囲に参照値があることが確認できる。しかしながら、#7のケースについては調整後核データの平均値が変動しておらず、核データが適切に調整されていないとも考えられる。これは、実験データに外れ値を含んだことによって、すべての核特性の加重が小さくなっているためである。この問題については、損失関数の変更や、損失関数パラメータのチューニングで改善できる可能性がある。具体的には、外れ値の外れ方が大きい#7のようなケースに対しては、損失関数パラメータ γ をより小さい値に設定することで加重の値をより大きい値にできる。ここで損失関数パラメータについて、小さい値に設定するほど従来手法である GLLS に近づき堅牢性が損なわれることに注意する。実際には $\gamma = 0$ と設定した場合、ガウス関数の戻り値がすべて1となり、加重行列が単位行列となるために、GLLS と等価な手法となる。

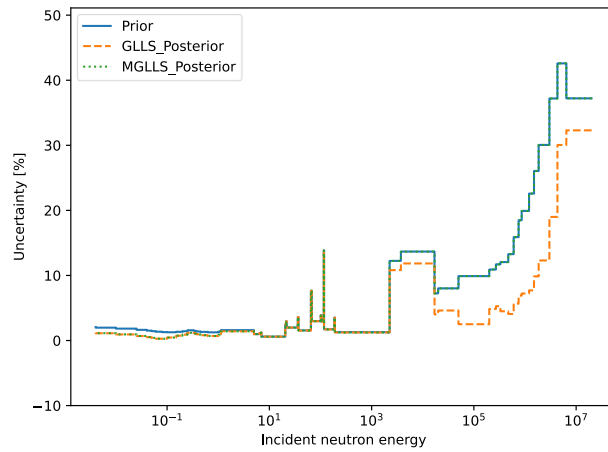
続いて、調整前後の不確かさ低減量の比較を図 4.6 に示す。青色実線は調整前核データの標準偏差、橙色破線は GLLS による調整後核データの標準偏差、緑色点線は MGLLS による調整後核データの標準偏差を意味する。PMF001[C49/F41]の相対摂動量が小さいケース (#2) では、両手法間で不確かさの低減量に差は見られない。PMF001[C49/F41]の相対摂動量が中程度のケース (#4) では、MGLLS の不確かさ低減量がわずかに小さくなることを確認した。PMF001[C49/F41]の相対摂動量が大きいケース (#7) では、 $10^4 - 10^7$ [eV]の高速中性子領域において MGLLS の調整後核データの不確かさは低減されていないため、核データを調整できていないことが確認できる。一方で、 $10^{-2} - 10^4$ [eV]の熱中性子領域においては MGLLS の調整後核データの不確かさが低減されている。これは、高速中性子が支配的な臨界実験に対して外れ値を設定したため、その体系と相関の低い体系である PST001 の実験データを用いて調整されたためである。



#2



#4



#7

図 4.6 検証 2 での核データ不確かさの比較

両調整法について、評価した χ^2 値を図 4.7 に示す。図 4.7 は縦軸が対数軸になっている

ことに留意する必要がある。青色○印は従来法 (GLLS) の χ^2 値、橙色×印は提案法 (MGLLS) の χ^2 値、黒色破線は自由度をそれぞれ意味する。調整が適切であれば、 χ^2 値は自由度に対応する値をとる。 ^{239}Pu の断面積は 56 群エネルギービンで調整されているため、今回の計算条件では自由度は 56 以下となる。

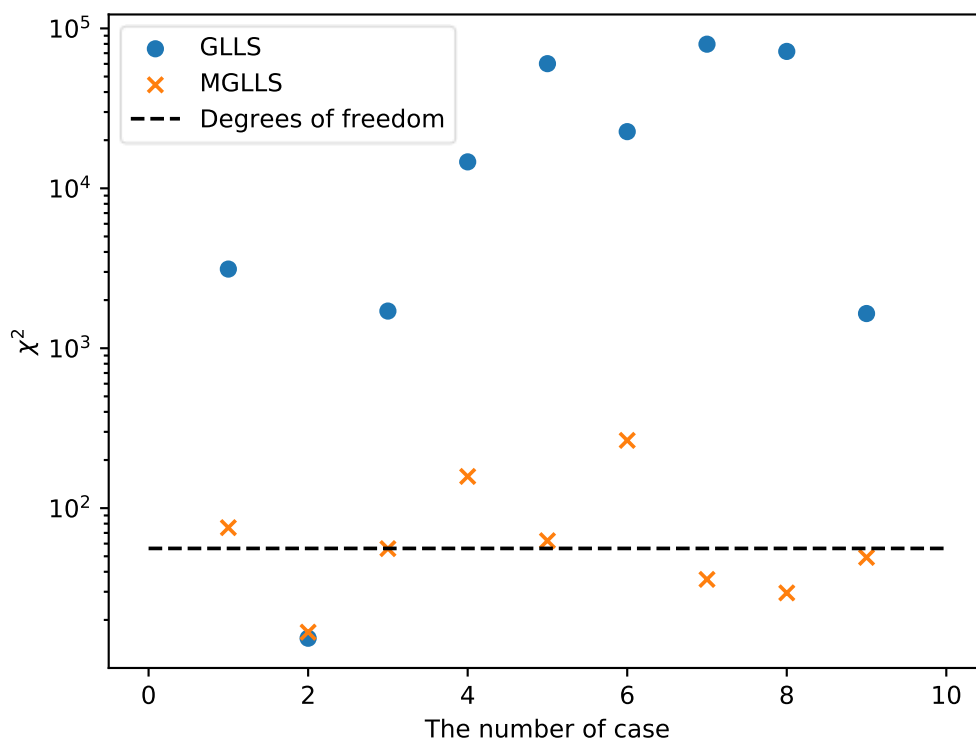


図 4.7 検証 2 での χ^2 値

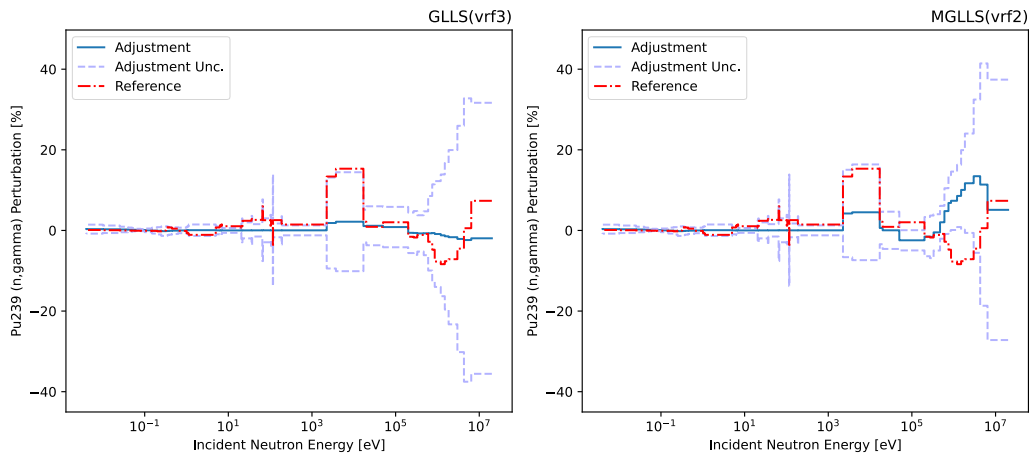
ケース#1, #3-#9 では、GLLS ケースの χ^2 値が 1000–100000 と非常に大きくなっている。一方、MGLLS の場合は自由度 (核データ数=56) と同程度の値となる。この結果は、MGLLS を用いることにより、推定結果が改善されたことを示している。ケース 2 の GLLS と MGLLS でほぼ同じ結果になった理由は、前述したように、PMF001 での C49/F41 の相対摂動量が小さく、本来の値から異常値への変化量が少なかったためである。

4.3.4 検証 3: 影響の大きい核特性を除外した場合

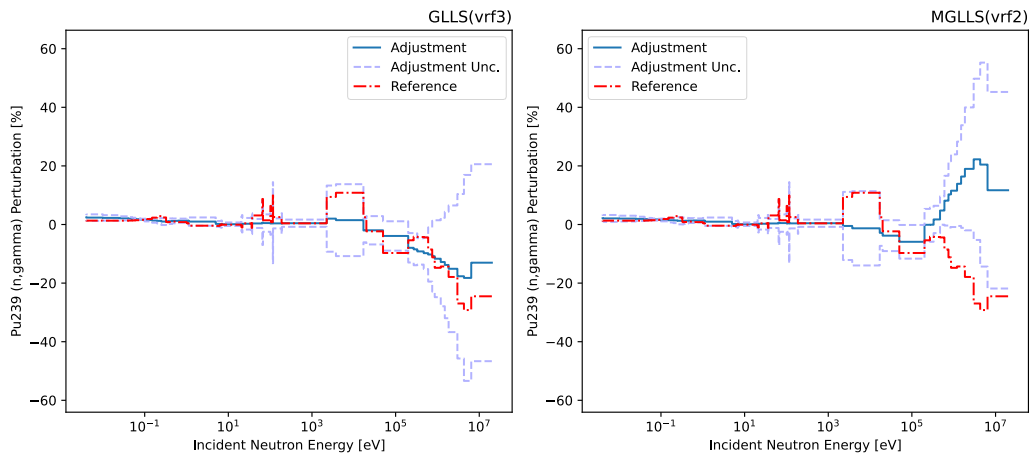
この項では、調整対象核データに対する感度の高い核特性である PMF001 における C49/F41 を除外した場合の GLLS による調整後核データと、PMF001 における C49/F41 を外れ値とした場合の MGLLS による調整後核データ (検証 2) を比較し、MGLLS による調整後核データの妥当性を確認する。検証 2 において、外れ値の影響を適切に除外できている場合、検証 2 での MGLLS 調整後核データは、検証 3 での調整後核データと近い値となるはず

である。

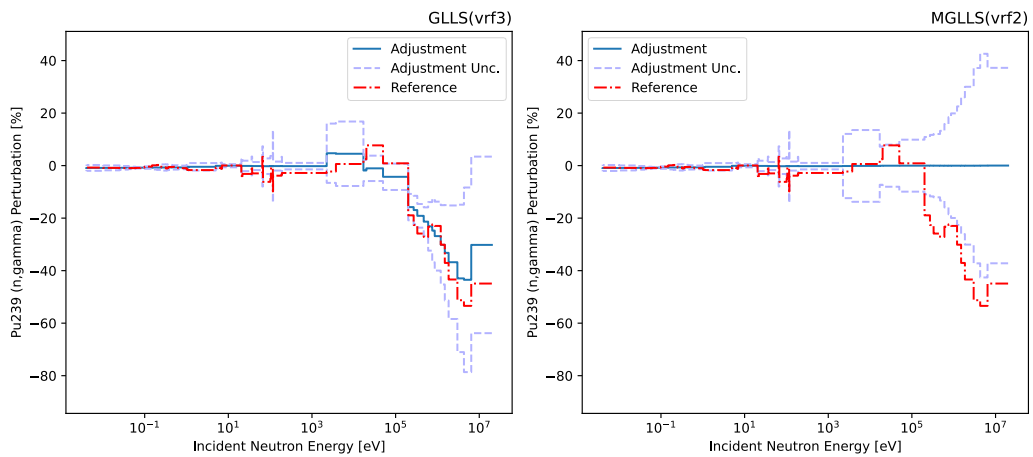
図 4.8 に調整後核データの比較について示した。前節同様に、異なる参照核データ $\vec{T}^{(\text{ref})}$ を与えた場合として#2,4,7を代表例として掲載する。この図において、青色実線は調整後核データ、水色破線は調整後核データ不確かさ(推定標準偏差 1σ)、赤色一点鎖線は参照核データを意味する。



#2



#4



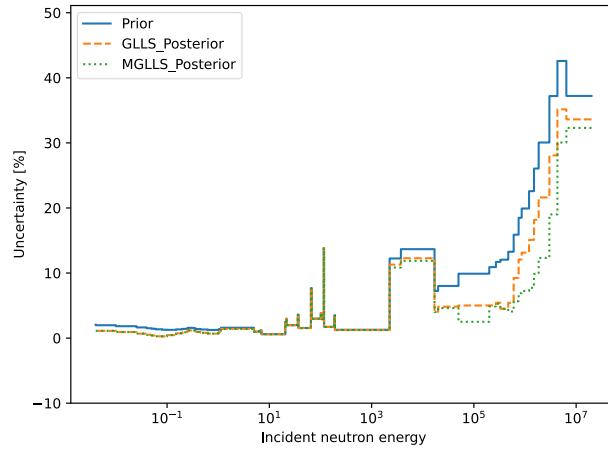
#7

図 4.8 検証 3(GLLS)と検証 2(MGLLS)での調整後核データの比較

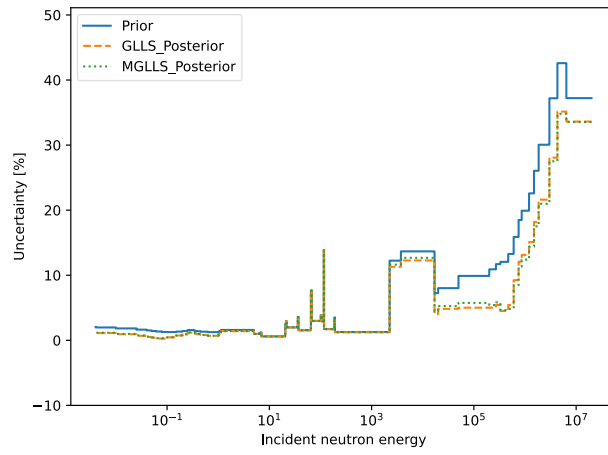
外れ値の原因となる核特性を除去しているため、GLLS による調整後核データについても、

参照値が調整不確かさ範囲におおよそ収まる結果が得られた。ここで、検証2でのMGLLSと検証3でのMGLLS結果を比較すると同様の結果とならないことから、加重の計算方法について改善の余地があることがわかる。理想的な加重の設定としては、外れ値であるPMF001[C49/F41]の加重のみが小さく設定されることによって、PMF001[C49/F41]のみを除外した核データ調整と同様の調整となることである。

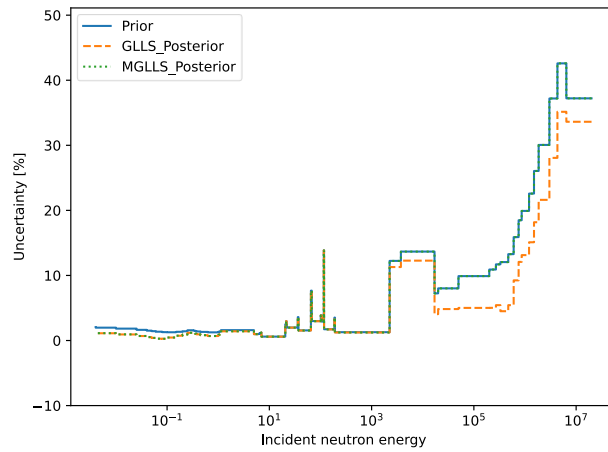
続いて、調整前後の不確かさ低減量の比較を図4.9に示す。青色実線は調整前核データの標準偏差、橙色破線はGLLSによる調整後核データの標準偏差、緑色点線はMGLLSによる調整後核データの標準偏差を意味する。#2のPMF001[C49/F41]相対摂動量が小さいケースでは、MGLLSの方がより不確かさが低減される結果となった。これは、不確かさ低減に重要な感度の高い核特性PMF001[C49/F41]が、検証3GLLSでは除外されており、不確かさの低減量が小さくなったためである。#4のPMF001[C49/F41]相対摂動量が中程度であるケースでは、両手法の不確かさ低減量が同程度である結果となった。すなわち、比較的妥当な不確かさ低減量であるといえる。#4のPMF001[C49/F41]相対摂動量が大きいケースでは、前節でも述べた通り、MGLLSでの調整後核データの不確かさが低減されていないが、損失関数パラメータ γ をより小さい値とすることで改善する見込みがある。



#2



#4



#7

図 4.9 検証 3 での核データ不確かさの比較

両調整法について、評価した χ^2 値を図 4.10 に示す。青色○印は従来法（GLLS）の χ^2

値、橙色×印は提案法（MGLLS）の χ^2 値、黒色破線は自由度をそれぞれ意味する。調整が適切であれば、 χ^2 値は自由度に対応する値をとる。 ^{239}Pu の断面積は 56 群エネルギービンで調整されているため、今回の計算条件では自由度は 56 以下となる。

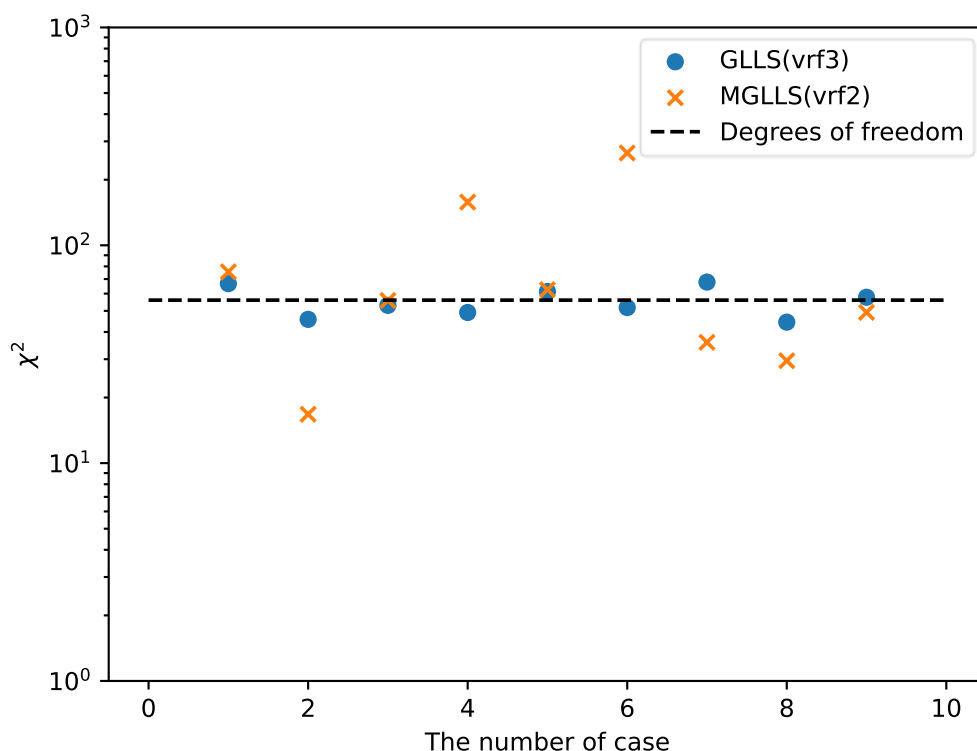


図 4.10 検証 3 での χ^2 値

外れ値を含まないため、検証 3 での GLLS による調整後核データの χ^2 値は自由度と同程度の値を取る。この結果と比較して、検証 2 での MGLLS による調整後核データの χ^2 値は自由度から多少離れる結果となった。

4.3.5 検証 4: 影響の小さい核特性を外れ値とした場合

前項で解説したのは、調整対象核データに対する感度の高い核特性であるため、調整後核データに対する影響の大きい核特性であった（すなわち最も「厳しい」問題設定であったといえる）。この項では、調整対象核データに対する感度の低い核特性である PMF001 における実効増倍率 k_{eff} を外れ値とした場合について解説する。最終的には、感度の低い核特性に外れ値を与えた場合には、調整後核データに対する影響はほとんどないことを確認する。

図 4.11 に調整後核データの比較を示す。前節同様に、異なる参照核データ $\vec{T}^{(\text{ref})}$ を与えた場合として #2,4,7 を代表例として掲載する。この図において、青色実線は調整後核データ、水色破線は調整後核データ不確かさ、赤色一点鎖線は参照核データを意味する。

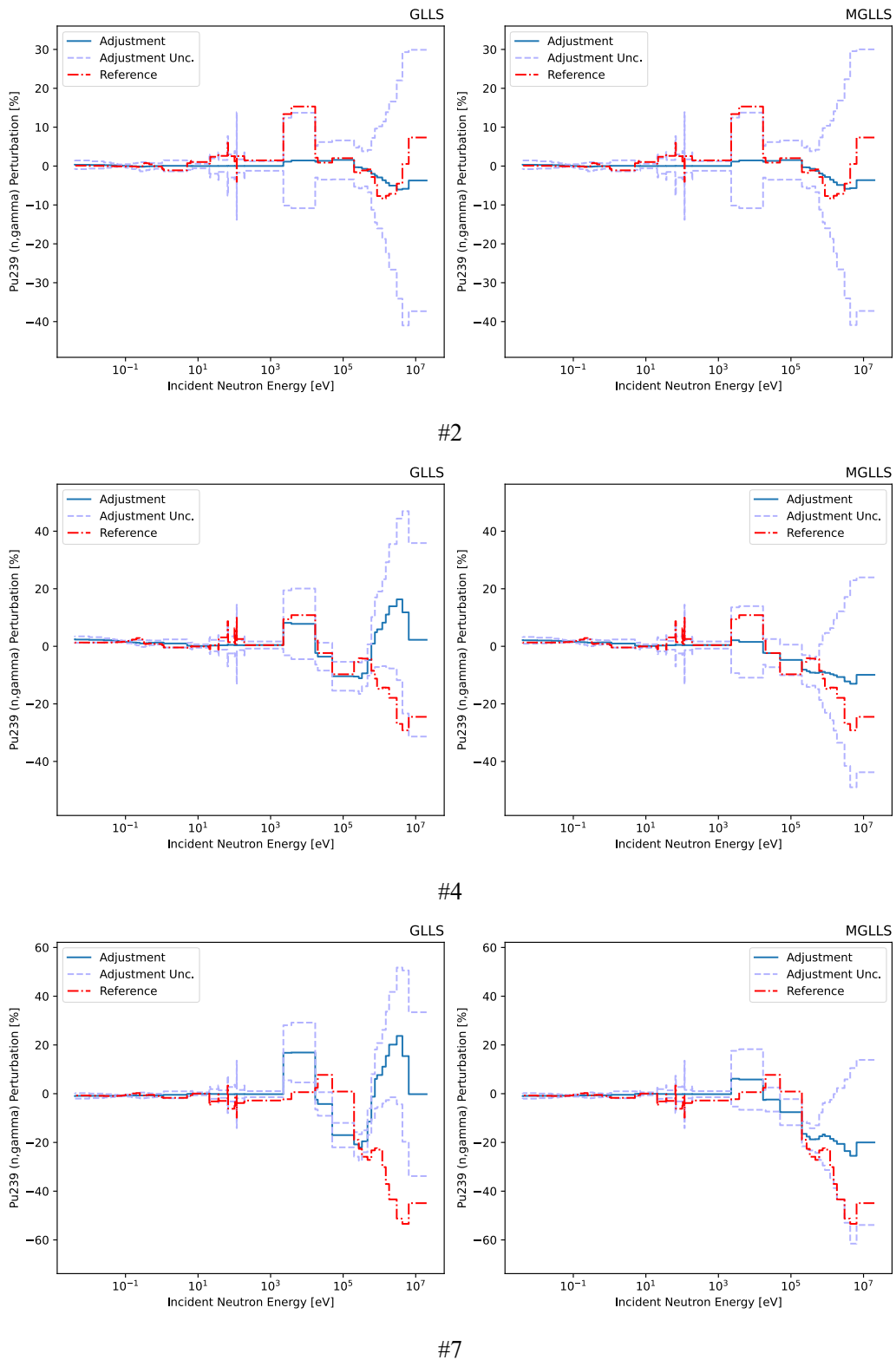
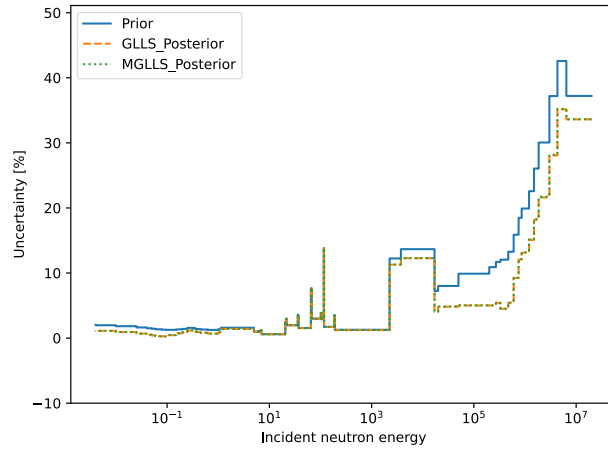


図 4.11 検証 4 での調整後核データの比較

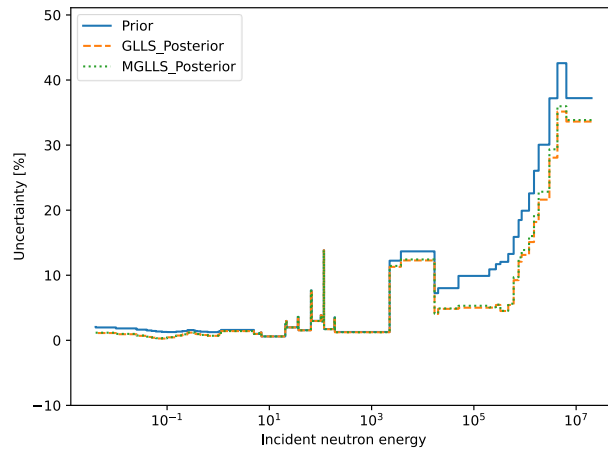
#2,#4 などの、 $PMF001[k_{eff}]$ の摂動量が小さいケースでは、両手法ともに参照値が推定不

確かさ範囲程度に収まる良好な結果となった。#7 のような $PMF001[k_{eff}]$ の摂動量が大きいケースでは、GLLS の場合参照値が推定不確かさの 2 倍程度外れた結果となったが、MGLLS の適用で改善できることを確認した。

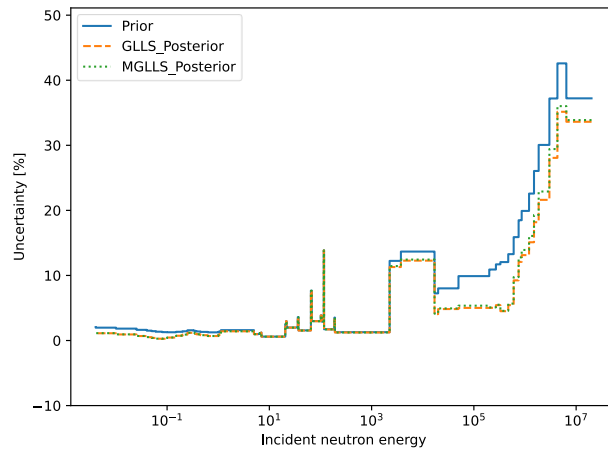
続いて、調整前後の不確かさ低減量の比較を図 4.12 に示す。青色実線は調整前核データの標準偏差、橙色破線は GLLS による調整後核データの標準偏差、緑色点線は MGLLS による調整後核データの標準偏差を意味する。図 4.12 の結果より、GLLS と MGLLS の両手法にて、不確かさが同程度低減可能であることを確認した。



#2



#4



#7

図 4.12 検証 4 での核データ不確かさの比較

両調整法について、評価した χ^2 値を図 4.13 に示す。青色○印は従来法 (GLLS) の χ^2

値、橙色×印は提案法（MGLLS）の χ^2 値、黒色破線は自由度をそれぞれ意味する。調整が適切であれば、 χ^2 値は自由度に対応する値をとる。 ^{239}Pu の断面積は 56 群エネルギービンで調整されているため、今回の計算条件では自由度は 56 以下となる。

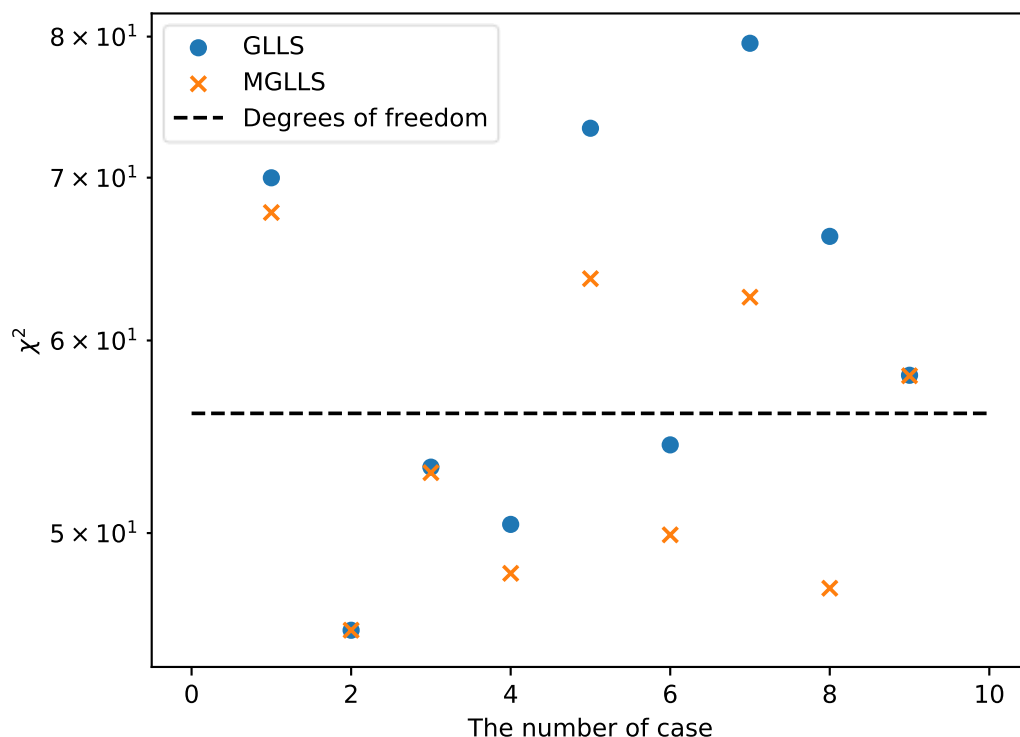


図 4.13 検証 4 でのカイ二乗値

両手法において、 χ^2 値が自由度と同程度の値をとる。そのため、調整対象の核データに対する感度の低い核特性に外れ値がある問題の場合、従来法と同程度の調整後核データを得られることを確認した。

4.4 本章のまとめ

本章では従来の核データ調整法に M 推定を取り入れた、外れ値に堅牢な核データ調整法を提案した。この手法では、臨界実験での測定核特性と、核データに対する計算核特性との差から、各核特性の信頼性を判断する。この信頼性に基づいて、それぞれの核特性を加重付け、核データを調整する。この信頼性の評価には、核特性間の相関が考慮される。

従来手法（GLLS）と提案手法（MGLLS）を双子実験により比較し、検証した。各検証の結果を以下にまとめる。

- 検証 1 より、外れ値を含まない実験データに対する調整後核データは、両手法で同程度になることを確認した。

- 検証 2 より、調整する核データに対する感度の高い核特性に外れ値を持つ場合、GLLS では調整後核データが悪化し、MGLLS では改善することを確認した。
- 検証 2 と検証 3 の比較より、調整する核データに対する感度の高い核特性に外れ値を持つ場合と、外れ値となる核特性を除外した場合を比較すると同程度の結果とはならないことを確認した。すなわち、加重の計算方法には改善の余地があるともいえる。
- 検証 4 より、調整する核データに対する感度の低い核特性に外れ値を持つ場合、GLLS では調整後核データが悪化し、MGLLS では改善することを確認した。

本章の検証では、外れ値を含む実験データに対して、提案手法を用いることで、調整後核データが改善することを確認した。しかしながら、外れ値を含む実験データに対して提案手法を用いて得られる調整後核データと外れ値を除外した実験データに対して従来手法を適用した調整後核データは一致しないことから、損失関数や損失関数パラメータ等の加重計算手法について更なる研究が必要である。

4.5 参考文献

- [1] R.A. Maronna, R.D. Martin, V.J. Yohai, *Robust Statistics: Theory and Methods*, John Wiley & Sons, USA, ISBN: 978-0-470-01092-1, (2006).
- [2] “International Criticality Safety Benchmark Evaluation Project Handbook,” OECD. (2020); <https://doi.org/10.1787/110ba6fc-en>
- [3] C.J. Werner (Ed.), *MCNP User’s Manual Code Version 6.2*, LA-UR-17-29981, Los Alamos National Laboratory (2018).
- [4] M.B. Chadwick, M. Herman, P. Obložinský, *et al.*, “ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Section, Covariance, Fission Product Yields and Decay Data,” *Nucl. Data Sheets*, **112**, 2887–2996 (2011); <https://doi.org/10.1016/j.nds.2011.11.002>.
- [5] W.A. Wieselquist, R.A. Lefebvre, M.A. Jessee, (Eds.), *SCALE Code System*, ORNL/TM-2005/39, Version 6.2.4, Oak Ridge National Laboratory (2020).
- [6] K. Tada, Y. Nagaya, S. Kunieda, *et al.*, “Development and Verification of a New Nuclear Data Processing System FRENDY,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **54**, 806–817 (2017) ; <https://doi.org/10.13182/NT179-169>.
- [7] Numpy.org, “Numpy documentation”, Numpy.org, 2022 Dec. 19, (English) <https://numpy.org/doc/stable/index.html>, (cited 2023 Jan. 19).
- [8] Scipy.org, “Scipy documentation”, Scipy.org, 2023 Jan. 4, (English), <https://docs.scipy.org/doc/scipy/>, (cited 2023 Jan. 19).

第5章 結論

5.1 本論文のまとめ

原子炉の安全性は予測計算により担保されている。予測計算の不確かさは様々な要因から発生するが、核データの不確かさは主要な要因の一つとなる。例えば、高速炉、加速器駆動未臨界炉等の革新炉材料であるマイナーアクチノイド核種に関する核データは不確かさが大きく、その核データを用いて数値解析された核特性の不確かさに対して支配的な要因となる。核データ調整とは、数値解析の入力データである核データの不確かさを、実験データを用いて低減し、数値解析の信頼性を向上させる手法である。本論文では、核データ調整が抱える2つの課題点を解決するための手法をそれぞれ開発した。それらの課題について、以下にまとめる。

1つ目の課題は、感度解析あるいは多数の核データサンプルに対する数値解析を要する点である。今日において主流な核データ調整法では、感度係数と呼ばれる核データが核特性に与える影響を表す一次微分係数を必要とする。しかしながら、動力炉の全炉心計算といった多段階の計算を必要とする体系では、一般化摂動論と呼ばれる理論を用いた感度解析が困難であり、核データを微小変化させた解析を繰り返す必要がある。この問題を解決するために、感度係数を用いない統計的手法である、ランダムサンプリング法を用いた核データ調整法が提案されている。この手法では多数の核データサンプルに対する数値解析を必要とするため、計算コストが高い課題がある。また、平均と標準偏差の値が近く、不確かさの大きい核データに対して、負の核データの取り扱いが問題となる。

2つ目の課題点は、実験データに含まれる外れ値の影響を受けるために、外れ値の特定と除去を必要とする点である。先行研究においては、測定値と計算値の差が一定量を超えるような核特性を除去したうえで、さらに核データ調整量が、その事前不確かさを超える原因となる核特性を除外している。しかしながら、核データ調整量を大きくする原因となる核特性を特定するのは、結果から原因を探す逆問題であり、解析者の経験や工学的判断に基づいて、不適切な実験データを特定している。

1つ目の問題点を解決するために、本論文の第3章では、Unscented変換サンプリングを用いた核データ調整法を新たに提案した。この手法では、より少数のサンプルから核データを調整でき、負の核データの発生について効果的に抑制できる。2つ目の問題点を解決するために、本論文の第4章ではM推定を用いたロバストな核データ調整手法を提案した。この手法では、外れ値を陽に除去することなく、堅牢に核データを調整できる。各章における内容について以下にまとめる。

第1章では、背景として核データ調整の概要について説明し、従来手法の2つの課題についてまとめた。1つ目の課題として、感度係数を解析する一般化摂動論を用いた随伴計算、あるいは多数の核データサンプルに対する数値計算を必要とする点について解説した。2つ目の課題として、外れ値と呼ばれる異常な測定値を含む実験データの核データ調整への影響と、外れ値除外のための過程に検討の余地があることについて解説した。

第2章では、従来核データ調整法として、感度係数を用いた核データ調整 (GLLS) とランダムサンプリングを用いた核データ調整 (RS) の2手法について、核データ調整式を導出し、適用方法について解説した。

第3章では、感度解析を必要とせず、RSより少数のサンプルから核データを調整できる Unscented 変換サンプリングを用いた核データ調整法 (UTS) を解説した。双子実験を通じて、より少数のサンプル数において参照値に近い調整後核データを得られることを確認した。UTSの詳細なまとめと今後の課題については5.2節にて解説する。

第4章では、外れ値に堅牢な核データ調整法として、GLLSに対してM推定を適用した MGLLS について解説した。双子実験を通じて、外れ値を含む実験データに対しても堅牢に核データを調整できること、外れ値を含まない実験データに対しては従来手法と同程度の調整後核データとなることを確認した。MGLLSの詳細なまとめと今後の課題については5.3節にて解説する。

5.2 Unscented 変換サンプリングを用いた核データ調整

第3章では感度解析を必要としない新たな統計的手法として、Unscented 変換サンプリングを用いた核データ調整法を解説した。この手法では決定論的にサンプリングされた核データアンサンブルを用いる。核データアンサンブルに対する核特性アンサンブルを核計算コードによって計算し、それらの共分散を評価することで核データを調整する。

サンプル数に対する調整後核データの適切性を双子実験によって検証した。検証計算によって確認した本手法の利点について以下にまとめる。

- ① GLLS と比較して
 - (i) 感度係数による一次近似を用いない厳密な調整後核データであること
 - (ii) 一般化摂動論による感度解析を省略できること
- ② RS と比較して
 - (i) 調整後核データの統計的不確かさを排除できる
 - (ii) 要求精度が高い場合や、核データ共分散行列の有効ランクが小さい場合、サンプル数を削減できること

一方で、本手法の欠点と解決のための今後の課題について以下にまとめる。

- ① 入力データである核データ数が多い場合、RSよりも多くの数値解析を必要とすること
⇒Active Subspace 法の適用によって、解決できる見込みがある。対象システムの感度係数を用いて、核特性により影響を与える Subspace を特定し、より少数のサンプルから核データを調整できる。
- ② 決定論的サンプリングにおける摂動係数 f_x の適切な決定方法が未知であること
⇒摂動係数を変化させた検討を必要とする。

5.3 M 推定を用いた核データ調整

第4章では外れ値に対する課題を解決するために提案した M 推定を用いた核データ調整法 (MGLLS) について解説した。この手法では、計算された核特性と測定された核特性間の差異から、それぞれの核特性の信頼性に基づく加重を用いて核データを調整する。測定された核特性に外れ値が含まれる場合、計算された核特性との差異が大きくなるため、加重は小さくなり核データ調整へ与える影響を小さく抑える。

従来手法 (GLLS) と提案手法 (MGLLS) の外れ値を含む測定値に対する堅牢性を双子実験によって検証した。検証の結果について以下にまとめる。

- ① 外れ値を含まない実験データに対しては両手法で同程度の結果となること
- ② 調整する核データに対する感度の高い核特性に外れ値を持つ場合、GLLS では調整後核データが悪化し、MGLLS では改善すること
- ③ 外れ値を除外した実験データを用いた GLLS と、外れ値を含む実験データを用いた MGLLS の調整後核データは一致しないこと
- ④ 調整する核データに対する感度の低い核特性に外れ値を持つ場合、両手法で同程度の結果となること

本手法の今後の課題について以下にまとめる。

- ① 加重の計算方法について検討の余地がある
⇒本論文では一つの損失関数を用いた解析しか実施していない。ガウス関数のパラメータを変化させた解析や、別の損失関数系による解析は未知である。
- ② RS, UTS など、サンプリング手法を用いた核データ調整法への拡張
⇒本論文で紹介した M 推定の適用は、核特性の測定・計算共分散行列 \mathbf{M}_{E+C} について加重行列 \mathbf{W} をかけた形 ($\mathbf{W}^{-1}\mathbf{M}_{E+C}\mathbf{W}^{-1}$) に置き換えるだけで実装可能である。そのため GLLS 以外の核データ調整法にも適用が可能である。

公刊論文

- [1] Y. Fukui, T. Endo, A. Yamamoto, *J. Nucl. Sci. Technol.* (2022).
<https://doi.org/10.1080/00223131.2022.2095051>
- [2] Y. Fukui, T. Endo, A. Yamamoto, S. Maruyama, *EPJ Web Conf. (CW2022)* (to be published).