

ランダムサンプリング法を用いた
炉物理パラメータの不確かさ評価における
分散低減手法の提案と検討

Proposal of variance reduction method methods
for uncertainty quantification of reactor physics parameters
by using random sampling method

原子炉工学研究室

二平舜介

目次

第1章 序論	1
1.1 背景	1
1.1.1 不確かさ評価とは	1
1.1.2 モンテカルロ法とその分散低減手法の開発	2
1.2 本研究の目的	2
第2章 ランダムサンプリング法を用いた不確かさ評価理論	3
2.1 不確かさ評価の流れ	3
2.1.1 概要	3
2.1.2 対象とする統計量	4
2.2 ブートストラップ法	6
2.3 燃焼計算における不確かさ評価	7
2.3.1 概要	7
2.3.2 対象とする入力データとその不確かさ	7
2.3.3 計算プログラム/手順	7
第3章 リバースサンプリング法	9
3.1 概要	9
3.2 分散低減効果の理論的検証	9
3.2.1 対称変量法の説明に基づく期待値推定の効果検証	9
3.2.2 リバースサンプリング法の分散低減効果	11
3.3 簡易モデルによる検証	13
3.3.1 簡易モデルの設定	13
3.3.2 結果・考察	13
3.4 ブートストラップ法における過小評価	19
3.4.1 概要	19
3.4.2 ブートストラップの適用可否	19

3.4.3	ブートストラップ法における過小評価	21
3.5	燃焼計算における検討	22
3.5.1	燃焼計算への適用手法	22
3.5.2	結果・考察	22
第4章	制御変量法	28
4.1	概要	28
4.2	分散低減効果の理論的検証	29
4.3	分散推定に対する制御変量法の応用手法	30
4.3.1	概要	30
4.3.2	積分計算を用いた説明	30
4.3.3	統計計算を用いた説明	31
4.3.4	簡易モデルの設定	31
4.3.5	結果・考察	32
4.4	感度係数を類似対象に用いた制御変量法	38
4.4.1	概要	39
4.4.2	簡易モデルの設定	39
4.4.3	結果・考察	40
4.5	燃焼計算における検討	44
4.5.1	燃焼計算への適用手法	45
4.5.2	結果・考察	45
第5章	まとめ	47
	参考文献	48
	謝辞	49

第1章 序論

1.1 背景

1.1.1 不確かさ評価とは

近年、計算機シミュレーションによって得られた結果の信頼性を評価し、それをより効果的に取り扱うため、不確かさ評価の需要が高まっている。では、そもそも不確かさとはいったいどのようなものであるか。それを理解するためには、測定値や解析値には必ず Table 1.1 に示したような疑わしさが存在することを念頭に置かねばならない。このように様々な要因によって生じるばらつきを定量化し、得られた値の信頼性を数値化したものが不確かさであり、それを定量化する手段が不確かさ評価である。

中でも本研究では『入力パラメータがばらつきを持つ際に出力値に生じる不確かさ評価』について着目する。入力パラメータのばらつきに起因した出力の不確かさとは、ある確率分布を持つ入力パラメータを入力した時、その入力値が一意に定まらず確率分布に従うことから、得られる計算結果である出力値もその入力値に対応する値を持つ、つまり確率分布に従うために生じる不確かさのことである。例えば、燃焼計算における核反応や核壊変といった物理現象に関するパラメータは核データによって確率分布が与えられるが、これらの中心となる平均値もまた確率分布に従う。そのため、結果となる核種数密度などの出力値も必ず分布を持つこととなり、当然それらを定量的に評価する必要性が生じる。

上述のような、入力の不確かさに起因した出力値の不確かさ評価には幾つのかの手法が存在する。近年では計算機の進歩に伴って、確率論的手法であるランダムサンプリング法(以後 RS 法)が用いられることが多くなりつつあるが、計算負荷の小ささ等から決定論的手法の一つである感度係数を用いた手法もよく用いられる。後者の感度係数を用いた手法[1][2]とは、入出力のパラメータ間に線形性を仮定することでその伝播を示す感度係数を評価し、入力の不確かさを直接出力側へと伝播させることで出力の不確かさを求める手法である。これは、出力の不確かさを一度の計算で求めることが可能という点で計算コストが非常に軽い手法であるが、同時に入出力間の線形性を前提としているため、計算過程の複雑さ等により入出力間が非線形となる体系には導入できないという欠点を持つ。また、今回実計算の対象としている燃焼計算においては、核燃料の燃焼が複雑な物理過程(崩壊やその分岐比、核反応の確率等)に従うため、入出力間の関係を線形だと仮定するには疑問が残る[3]。

対して、確率論的手法である RS 法では前述の入力パラメータが従う確率分布を全て乱数によって再現し、それに従った複数回の入力を行う。つまり、一入力パラメータを得た際の出力パラメータを逐一求め、それらを統計的に評価することによって、入出力間の関係性などの前提条件に拠らない不確かさ評価が可能となる。ただし、統計処理によって出力値の不確かさを得ているため、その不確かさには必ず統計的な不確かさが生じることに注意しなければならない。それを除去するためには無限の標本数を要するため、実用上は統計的な不確かさ評価を重ねて行うことで、結果の信頼性を担保している。

Table1.1 The example of various uncertainties.

	測定値	解析値
偶然誤差(偏りを持たず万遍なくばらつき不確かさ)	<ul style="list-style-type: none"> 測定機材の精度 測定者の測定精度 	<ul style="list-style-type: none"> 核反応のような、確率事象の再現によるばらつき パラメータ自身の信頼性によるばらつき
系統誤差(ある法則を持ち、明確な原因によって生じる不確かさ)	<ul style="list-style-type: none"> 測定に用いる機材の不正確さ 室温や風など、測定条件による真の値からのずれ 	<ul style="list-style-type: none"> 近似の際に生じる誤差 メッシュ切りによるデジタル化等の誤差

1.1.2 モンテカルロ法とその分散低減手法の開発

前節で不確かさ評価手法として紹介した RS 法とは、乱数を用いて計算を行うモンテカルロ法の一つである。モンテカルロ法は、主に積分計算や確率に従う事象、モデル化の難しい事象などを計算機で解くために開発された手法であり、非常に広くの分野で用いられてきた。このモンテカルロ法だが、RS 法の説明の際にも述べたが、その結果には統計的な不確かさが生じるため、十分な評価を行うために多数の標本を要するという不利点がある。これより、現代までも多くの分野においてその高速化手法——ここでは、統計的な不確かさである分散を減じる手法であるため、分散低減手法と呼ぶ——が考案されてきた。例えば、入力値を負の相関を持ったペアとする対称変量法[4][5]や、相関が大きくより簡易な計算で導出可能な類似対象を用いてより収束解に近い値を求める制御変量法[4][6]、サンプリングに規則を持たせたラテン方格サンプリング法[7]と言った次第である。しかし、これらの手法は全てモンテカルロ法を用いて積分値（不確かさではなく、統計的には期待値）を求めるための手法であり、分散を推定する際に応用されるような例は見当たらない。

1.2 本研究の目的

1.1.2 節で述べた通り、ランダムサンプリング法とは入出力の関係性に拠らず簡便に適用可能な不確かさ評価手法である。先行研究[3]からも、線形性を前提とすることに疑問の残る評価対象がある中で、このランダムサンプリング法は非常に有用であるが、同時に統計的な不確かさを考慮する必要性から計算時間等が非常にコストとなる不利点を持っている。また、ランダムサンプリング法に対する分散低減法は全て期待値の推定、すなわち不確かさ評価に適用するには困難なものが大よそである。そこで、本研究においては、出力分布の分散や歪度といった高次の統計量を求める際にも適用可能となる分散低減手法を得ることを目的し、リバースサンプリング法(分散低減手法としては対称変量法に非常に近い原理を持つ)と制御変量法という二種の分散低減手法を提案し、その適用可否や性質について検討を行う。

第2章 ランダムサンプリング法を用いた不確かさ評価理論

本章では、ランダムサンプリング法を用いて行う不確かさ評価の方法について述べる。2.1節では本研究で行われる不確かさ評価の具体的な流れを示し、2.2節ではランダムサンプリング法によって得られた結果に生じる統計的な不確かさを評価するための手法である、ブートストラップ法について触れ、2.3節では今回実計算の例として扱う、燃焼計算に適用する際の方法等について説明を行う。

2.1 不確かさ評価の流れ

2.1.1 概要

以下に示す通りの手順にて不確かさ評価を行う。

- 1) 入力パラメータが従う確率分布に沿った乱数を作成する。
- 2) 1で得られた乱数に基づいて入力パラメータのサンプリングを行う。
- 3) 得られた値を入力し、入力標本と同数の出力値を得る。
- 4) 得られた出力値を統計的に評価し、出力の不確かさを評価する。

上記手順の概念図は下図 Fig.2.1 に示す。また、このとき入力パラメータは正規分布を示すことを前提としており、C++の標準的な関数によって生成した一様乱数から Box-Muller 法[3]を用いて標準正規乱数を作成した。

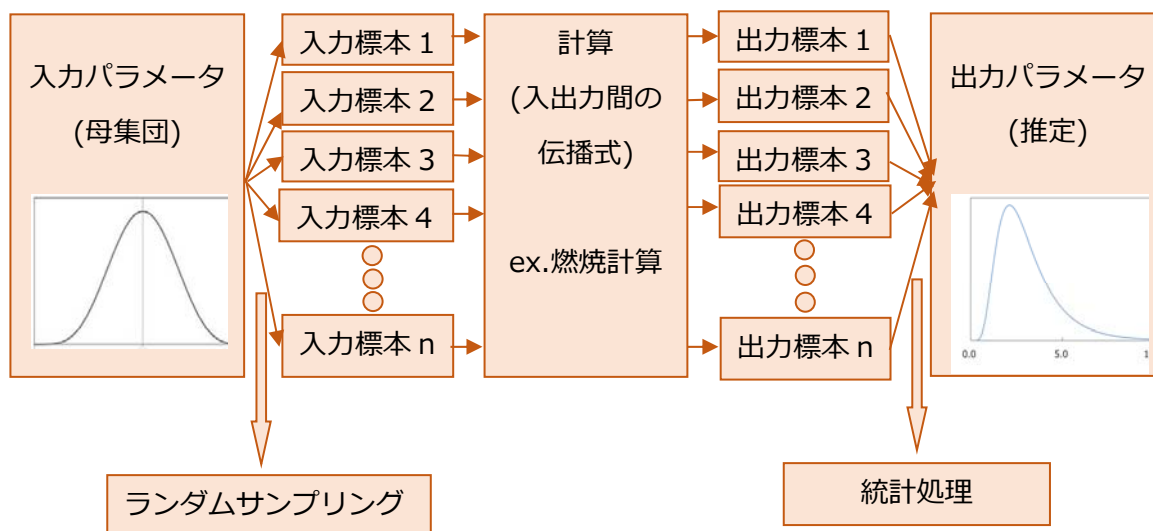


Fig.2.1 Image of UQ by random sampling method

2.1.2 対象とする統計量

前述の通り、RS法を用いた不確かさ評価は対象となる出力標本群を統計的に評価することで行われている。本節では、統計的な評価について、具体的にどの統計量に着目し、どのように評価を行っているかについて記述する。

第一に、統計学におけるモーメントという概念を理解する必要がある。これは確率分布の形状が $E[(X - \mu)^r]$ という量（ r は任意の整数、 μ は期待値を示す）で表現されることから、力学的なモーメントの概念と似ているためそう称されているもので、期待値周りの r 次のモーメントという形で呼ばれる。また、本研究においては、一次モーメントである分散と二次モーメントである歪度までを対象とした。また、出力標本群から求められた統計量は、母集団の統計量と区別して標本からの推定量であることを留意する必要がある。そのため、各統計量を求める際には推定の際のバイアスを排除した不偏統計量を求める式を用いている。以下に、本研究で用いる各統計量の定義や意味を示す。

§ 期待値（平均値）

期待値は $E[X]$ で示される原点周りの一次モーメントであり、下記のように(2.1)式で定義される。これはのちに求める統計的なモーメントの基準となる値で、確率的に最も起こりうる値を示している。

$$E[X] = \frac{\sum_{i=1}^n X_i}{n} \quad (2.1)$$

§ 分散

分散とは確率分布のばらつき（幅）を示す期待値周りの二次モーメントであり、中でも推定の際に用いる不偏分散は(2.2)式で定義される。分散が大きいくほど分布の広がり（ばらつき）が大きいことを示す。不確かさ評価において最も重視される統計量であり、出力値の確率分布が正規分布であった場合、分散の値のみで信頼区間を決めることが可能である。また、信頼区間を論ずる際は、二乗根を取って標準偏差とする。

$$V[X] = \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^2}{n - 1} \quad (2.2)$$
$$\sigma[X] = \sqrt{V[X]}$$

§ 歪度

歪度とは、確率分布の偏りについて示した値であり、期待値周りの三次モーメントを標準偏差で規格化した(2.3)式で定義される。

$$\text{Skew}[X] = \frac{n}{(n-1)(n-2)} \left\{ \frac{\sum_{i=1}^n (X_i - \mu)^3}{\sigma^3} \right\} \quad (2.3)$$

歪度が0のとき分布は左右対称を示し、値が正であれば分布は左(正の方向)に歪み、負であれば右へと偏りを示す。また、その値が大きいくほど偏りは大きなものとなる。次頁 Fig.2.2、Fig.2.3 にそれぞれ歪度が0、0.59の際の確率分布を示したが、歪度が正を示す分布はその形

状が明らかに歪んでいることがわかる。また、正規分布に対して 2σ と定義される 95.4% 信頼区間の外側は、本来左右対称に標本の 2.3% 程度となるはずであるが、Fig.2.3 においては明らかな偏りが確認できる。

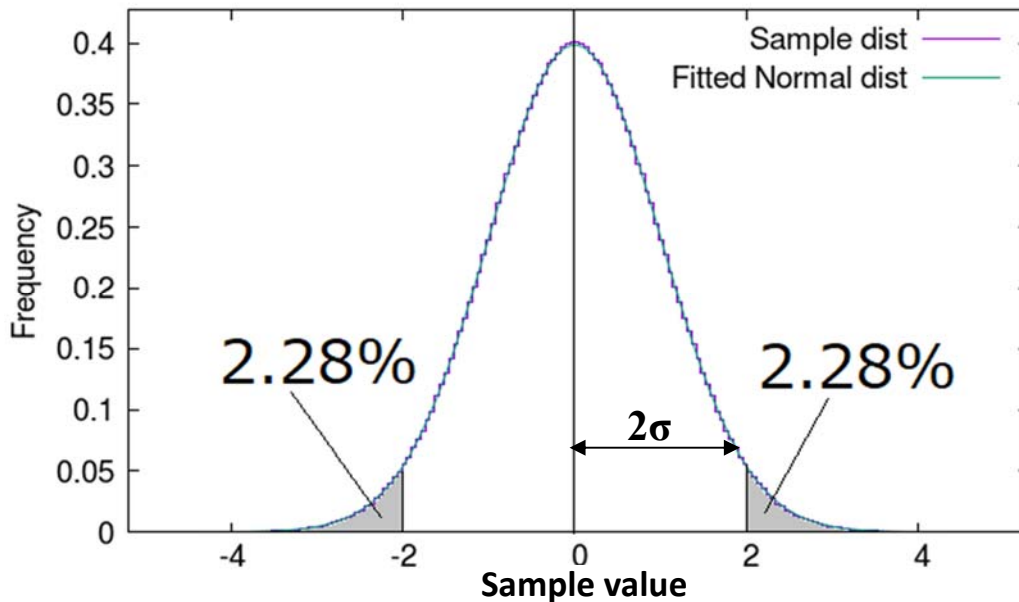


Fig.2.2 The example of non-distorted distribution

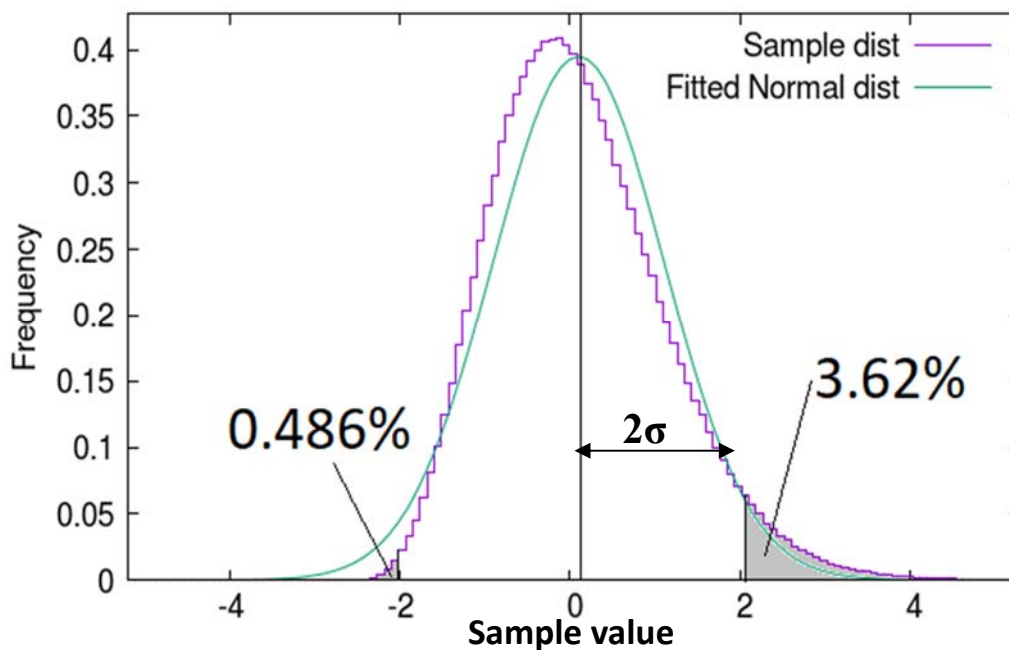


Fig.2.3 The example of distorted distribution

なお、Fig.2.2 は入出力間の伝播式を線形、Fig.2.3 は $F(x) = 0.1x^2 + x$ とし、 x に正規乱数を入力した結果であり。Fig.2.2 は出力分布が正規分布を、Fig.2.3 は歪度が 0.59 の分布を示した。Fig.2.3 の図より読み取れるように、二次関数の伝播モデルにおいて、二次感度が 0.1 程度であっても分布が大きく歪んでいることが分かる。

2.2 ブートストラップ法

RS法によって採集される標本数は有限であり、有限の標本から推定された統計量には必ず統計的な不確かさが生じる。そのため、今回推定する期待値、分散、歪度にはそれぞれ自身の分散を考える必要がある。仮に出力値の確率分布が正規分布であった場合は、公式を用いて統計量の不確かさを求めることが可能であるが、本研究ではRS法が有効である状況——つまり、入出力間の線形性が担保されていない状況を扱う。そのため出力分布が正規分布を示す可能性は低く、公式を用いて直接的に統計的な不確かさを評価することができないと考えてよい。よって、今回はリサンプリング法の一つであるブートストラップ法[8][9]を用いて統計誤差の評価を行った。

ブートストラップ法とは、予め得られた標本を一様乱数によって再びサンプリングし、リサンプリングされた確率変数の統計量を求め、複数回行ったリサンプリングの統計量をさらに統計的に評価することで母集団の推定量である標本の統計量を評価する手法である。簡略的な概念を Fig.2.4 に示した。

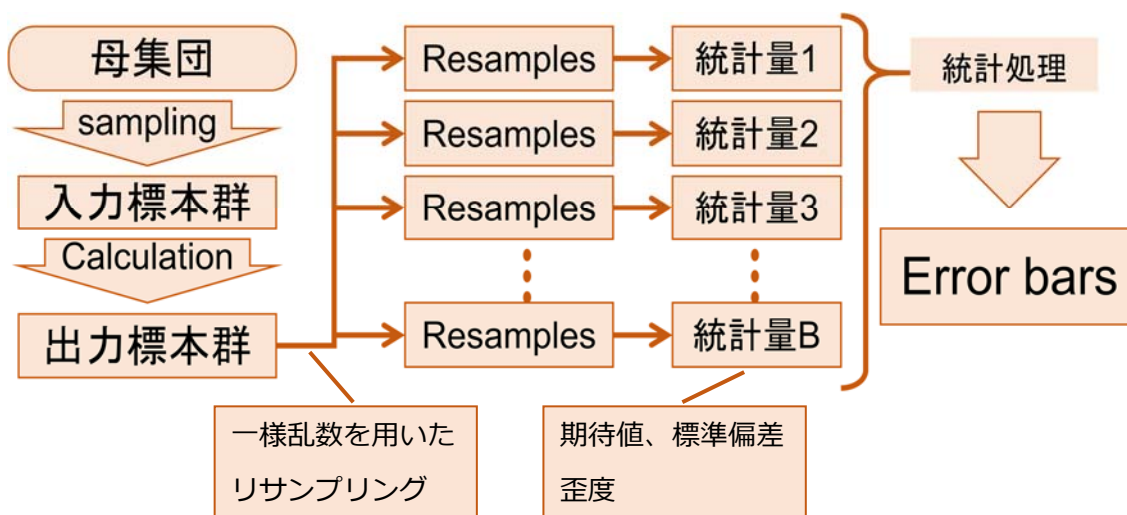


Fig.2.4 Image of Bootstrap method

図より読み取れる通り、ブートストラップ法は入出力間の計算を行った後である出力標本群に対して再サンプリングを行う。つまり、新たに不確かさ評価対象である計算を繰り返す必要はなく、計算自体に多大なコストを払う集合体計算などの対象に対して非常に有効な統計的な不確かさを評価する手法といえる。

2.3 燃焼計算における不確かさ評価

2.3.1 概要

本研究においては、各分散低減法について簡易モデルで実証を行った後に、実計算の例として燃焼計算に適用する。具体的には、核燃料燃焼後の核種数密度に対する不確かさ評価でありその条件は参考文献[3]の通りである。この時、入力データとして核データの不確かさを用いているが、その確率分布の形状は与えられておらず、一般的に正規分布として扱われるため、本研究においても、入力の不確かさは正規分布に従うと仮定する。また、詳細は後述もしくは参考文献の通りであるが、核データの抽出と燃焼計算を汎用炉物理解析コード CBZ によって行い、乱数を用いたサンプリングと出力データの統計処理を本研究において作成したプログラムを用いて行った。特に、このサンプリングと統計処理に関しては分散低減手法によって異なるため、後の章にて詳細に触れる。

2.3.2 対象とする入力データとその不確かさ

今回入力データとして考慮した核データは多群断面積ライブラリを構成する断面積データと、燃焼チェーンを構成する半減期、核分裂収率、崩壊分岐比の合計四つである。

今回使用した断面積はエネルギー107群の多群断面積であり、エネルギー間と幾つかの反応の間に相関を持っている。そのため、断面積に関しては各値の分散のみではなく、各相関を考慮した共分散行列の形でデータが与えられており、入力乱数を作成する際はそれを考慮した多変量正規乱数とした、その方法は参考文献[3]を参照する通りである。多群断面積の作成は評価済み核データファイル JENDL-4.0[10]を参照し、燃焼チェーン作成については半減期、核分裂収率、分岐比についてそれぞれ、JENDL FP Decay Data File 2011, Fission Yield Data File 2011[11]を参照したうえで FP-137 チェーン[12]を作成し行った。

2.3.3 計算プログラム/手順

本節では具体的な計算条件について述べる。はじめに、燃焼計算における不確かさ評価を実施する際のフローは以下の Fig.2.5 の通りとなる。

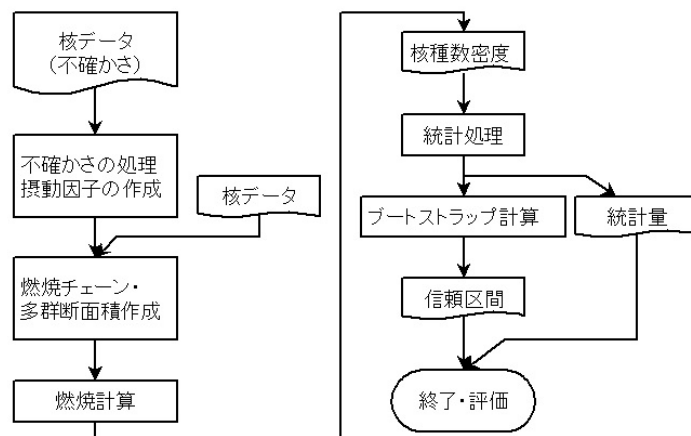


Fig.2.5 Flow of UQ for burnup calculation

なお、上記フローにおける核データの摂動処理、核データのインプット、燃焼計算と、核種数密度のアウトプットについては後述の汎用炉物理解析コード CBZ を用いて行った。

また、前述の通り入力となる核データは評価済み核データである JENDL-4.0 と一部 ENDF/B-VII.1 を使用した。Fig.2.5 中に出力として記載してある核種数密度、統計量、信頼区間はすべて外部ファイルに出力しており、核種数密度については再度読み込みを行っている。先ほどから述べている汎用炉物理解析コード CBZ とは当研究室で 2012 年 4 月から開発中の汎用炉物理計算コードである。このコードは臨界、燃焼、遮蔽といった原子炉内とその周囲における中性子やガンマ線の輸送に関わる物理現象を数値的に模擬する機能と、そのために用いられる核データの処理などの幅広い機能を有している。本研究ではその中でも、燃焼計算用の Burner というモジュールを用いた。Burner はピンセル体系の燃焼計算を行うためのモジュール（クラス）で、衝突確率法によって中性子輸送方程式を解くことで中性子束計算を行っている。また、燃焼後核特性の核データに対する感度を計算するメソッドも実装されており、後述の制御変量法に感度係数を利用する際はこの機能を使用した。

続いて、計算体系は以下の Table2.1 の通りである。

Table 2.1 Calculation condition

燃料	UO ₂ 燃料 濃縮度 4.1%
被覆管材料	ジルカロイ
冷却材組成	軽水
ピンセル間の境界条件	等方反射条件
ピンピッチ	0.6325 × 2[cm]
燃料ペレット半径（被覆管込み半径）	0.412[cm]（0.476[cm]）
燃焼ステップ	20
線出力	179[W/cm]

第3章 リバースサンプリング法

3.1 概要

リバースサンプリング法とは元来、ランダムサンプリング法を用いて感度係数を求めるために考案された手法である[2]。具体的な行程としては、Fig.3.1中に示すように、ある入力標本 $I_1 (= \mu + \delta_1)$ を採取した際に、次の標本を必ず $I_1' (= \mu - \delta_1)$ から採取するように規則性を持たせてサンプリングを行うもので、この時入力値の確率 $P(I_1) = P(I_1')$ であることが前提となっており、入力確率分布には左右対称であることが求められる。

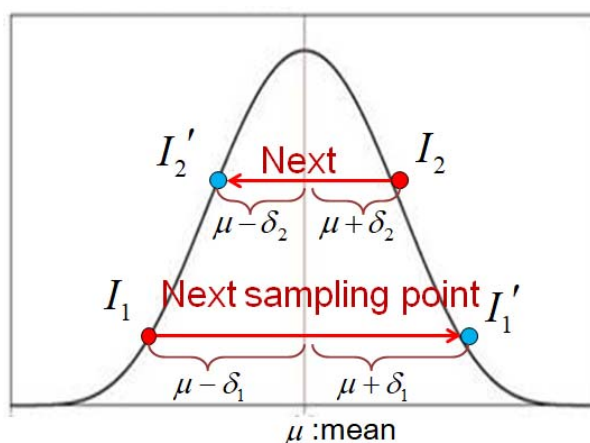


Fig.3.1 The method of reverse sampling

本手法では左右対称に標本を採取する特徴から、ランダムサンプリング法において収束が遅くなる原因である偏りのうち、正負の偏りを減じる効果が期待できる。また、同様の分散低減手法として対称変量法[5]と呼ばれるものがあり、こちらは負の相関をもったペアを作成し入力値を採取することで分散低減効果を期待するもので、おおよそ根本の理論は同一のものとなる。

3.2 分散低減効果の理論的検証

3.2.1 対称変量法の説明に基づく期待値推定の効果検証

リバースサンプリング法を用いた際の分散低減効果について論じる前に、期待値を求めるモンテカルロ法の高速度化手法である対称変量法の原理について触れる。本手法においては下記(3.1)式のように分布から対称に採集した入力の変数 x と $2m - x$ の組み合わせを $\theta(x)$ として取り扱う。

$$\theta = \frac{\{h(x) + h(2m - x)\}}{2}$$

$h(x)$: 入力 x に対する出力 (3.1)

m : 入力 x の平均値

このとき、期待値 $E[\theta(x)]$ は $h(x)$ の期待値を用いて、

$$E[\theta(x)] = \frac{E[h(x)]}{2} + \frac{E[h(2m-x)]}{2} = E[h(x)] \quad (3.2)$$

と(3.2)式のように期待値の足し合わせで表すことができる。また、入力 x が正規分布に従い、左右均等に標本を採集できることから、推定量 $E[h(x)] = E[h(2m-x)]$ が成立し、 $E[\theta(x)]$ は $E[h(x)]$ と等しくなる。

また、このとき $\theta(x)$ の分散 $V[\theta(x)]$ は定義から下記(3.3)式のように書ける。ただし、本来は不偏分散にすべきところをこの場では計算の簡略化のため定義としての分散を利用して、いることに注意すべきである。

$$V[\theta(x)] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\theta - E[\theta])^2 \quad (3.3)$$

(3.3)式を展開し整理することで(3.4)式が得られ、

$$\begin{aligned} V[\theta(x)] &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{1}{2} \{ (h(x) - E[h(x)])^2 + (h(2m-x) - E[h(2m-x)])^2 \\ &\quad + 2(h(x) - E[h(x)])(h(2m-x) - E[h(2m-x)]) \} \\ &= V[h(x)] + \text{Cov}[h(x), h(2m-x)] \quad (\text{Cov}[a, b] \text{は } a \text{ と } b \text{ の共分散を示す}) \end{aligned} \quad (3.4)$$

この共分散を統計的な定義に基づいて相関係数 corr を用いて表すと、 $\theta(x)$ の分散は

$$V[\theta(x)] = (1 + \text{corr})V[h(x)] \quad (3.5)$$

と相関係数と元の関数 $h(x)$ の式で表され、推定される統計量の統計的な不確かさが、その分布の分散値に依存することから、 $V[\theta(x)]$ が $V[h(x)]$ より小さくなるときに分散低減効果が生じることが分かる。例として、入出力間が線形である場合、対称にサンプリングを行った際の二出力の関係は $\text{corr}=-1$ で表され、 $V[\theta(x)]$ は即座に0に収束し、 $E[\theta]=E[h(x)]$ を非常に高速に求めることが可能となることが言える。また、入出力間が線形でなく、出力分布が正規分布に従わない際も相関係数が負になる場合においては、 $V[\theta(x)]$ が小さくなることから分散低減効果が期待できる。対称変量法においては、通常のRS法に比して二倍のサンプル数を要するため、 $V[\theta(x)]$ が $V[h(x)]$ の半分以下である条件下、すなわち $\text{corr}<-0.5$ となる範囲において対称変量法が有効だと言える。

リバースサンプリング法を用いた期待値推定の場合も以上と同様となり、入出力間の線形性が強い、すなわち対称にサンプリングした二出力の相関が-1に近いほど分散低減効果は大きなものとなると予想される。

3.2.2 リバースサンプリング法の分散低減効果

3.2.1 節において述べた分散低減効果は期待値の推定にのみしか適用することができず、分散や歪度といったその他の統計量推定に応用されたような研究・論文は見つかっていない。そこで、本節ではリバースサンプリング法を適用した際の効果を入出力の伝播式を整理することで予測した。結果として、線形性が強い場合は平均や歪度といった奇数次モーメントに関わる統計量で収束の高速化が見られ、それ以外の状況（偶数次モーメントに関わる統計量、非線形性の強い入出力間の関係）においては収束が遅くなる可能性が高いということが予想された。以下に詳細を記述する。

第一に、入力を a_i と出力を p_i として以下(3.6)式のように整理する。

$$\begin{aligned} p_i &= f(a_i) && \left(\text{伝播式：} p_i \text{は} a_i \text{の値によって一意に決まる} \right) \\ f(\bar{a}) &= \bar{p} && \left(\text{入力の平均} \bar{a} \text{の時の出力値、ただし出力平均とは異なる} \right) \\ \Delta a_i &= a_i - \bar{a} && \left(i \text{ 番目のサンプル} a_i \text{と平均値の差を} \Delta a_i \text{と表す} \right) \\ \Delta p_i &= p_i - \bar{p} && \left(a_i \text{時の出力} p_i \text{と} \bar{p} \text{の差を} \Delta p_i \text{と表す} \right) \end{aligned} \quad (3.6)$$

ここで、 p_i を $a=0$ に対してテーラー展開すると、下記(3.7)式のように表される。

$$\begin{aligned} p_i &= \bar{p} + \left(\frac{dp}{da} \right) \Delta a_i + \frac{1}{2!} \left(\frac{d^2p}{da^2} \right) (\Delta a_i)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{d^3p}{da^3} \right) (\Delta a_i)^3 + \frac{1}{4!} \left(\frac{d^4p}{da^4} \right) (\Delta a_i)^4 + \dots \\ &= \bar{p} + S_1 \Delta a_i + S_2 (\Delta a_i)^2 + S_3 (\Delta a_i)^3 + \dots \quad (2) \\ &= \bar{p} + \Delta p_i \end{aligned} \quad (3.7)$$

ただし、(3.7)式の中央では $(\Delta a_i)^n$ にかかる係数をまとめて S_n と表している。これはすなわち、出力 p_i が入力値の変化量 Δa_i の関数で表現されているということを示す。

ここで一度出力 p の各種統計量について考えてみる。平均、分散、歪度はそれぞれの定義式から、

$$\begin{aligned} E[p] &= \frac{1}{I} \sum p_i = \frac{1}{I} \sum (\bar{p} + \Delta p_i) = \bar{p} + \frac{1}{I} \sum (\Delta p_i) = \bar{p} + E[\Delta p] \\ V[p] &= \frac{1}{I} \sum (p_i - E[p])^2 = \frac{1}{I} \sum (p_i - \bar{p} + \bar{p} - E[p])^2 = \frac{1}{I} \sum (\Delta p_i - E[\Delta p])^2 \\ &= E[(\Delta p)^2] - (E[\Delta p])^2 \\ S[p] &= \frac{1}{(V[p])^{3/2}} \cdot \frac{1}{I} \sum (p_i - E[p])^3 = \frac{1}{(V[p])^{3/2}} \cdot \frac{1}{I} \sum (\Delta p_i - E[\Delta p])^3 \\ &= \frac{1}{(V[p])^{3/2}} \cdot \left\{ \frac{1}{I} \sum (\Delta p_i)^3 - 3 \cdot E[\Delta p_i] \cdot \frac{1}{I} \sum (\Delta p_i)^2 + 2 \cdot (E[\Delta p_i])^3 \right\} \\ &= \frac{1}{(V[p])^{3/2}} \cdot \left\{ E[(\Delta p)^3] - 3 \cdot E[\Delta p] \cdot E[(\Delta p)^2] + 2 \cdot (E[\Delta p])^3 \right\} \end{aligned} \quad (3.8)$$

と(3.8)式のように表すことができ、これらは全て $E[(\Delta p)^n]$ の関数となる。

さらに、 Δp について(3.7)式から

$$\Delta p_i = S_1 \Delta a_i + S_2 (\Delta a_i)^2 + S_3 (\Delta a_i)^3 + S_4 (\Delta a_i)^4 + \dots \quad (3.9)$$

のように Δa_i の関数として表現が可能であることが分かる。

以上から $E[(\Delta p)^n]$ について、 Δa_i を用いて整理すると以下(3.10)式のように

$$\begin{aligned} E[\Delta p] &= \frac{1}{I} \sum (S_1 \Delta a_i + S_2 (\Delta a_i)^2 + S_3 (\Delta a_i)^3 + S_4 (\Delta a_i)^4 + \dots) \\ &= S_1 \frac{1}{I} \sum \Delta a_i + S_2 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^2 + S_3 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^3 + S_4 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^4 \\ &\quad + \dots \\ E[(\Delta p)^2] &= \frac{1}{I} \sum (S_1 \Delta a_i + S_2 (\Delta a_i)^2 + S_3 (\Delta a_i)^3 + S_4 (\Delta a_i)^4 + \dots)^2 \\ &= \frac{1}{I} \sum (S_1^2 (\Delta a_i)^2 + 2S_1 S_2 (\Delta a_i)^3 + (S_2^2 + 2S_1 S_3) (\Delta a_i)^4 + \dots) \\ &= S_1^2 \cdot \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^2 + 2S_1 S_2 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^3 + \dots \\ E[(\Delta p)^3] &= \frac{1}{I} \sum (S_1 \Delta a_i + S_2 (\Delta a_i)^2 + S_3 (\Delta a_i)^3 + S_4 (\Delta a_i)^4 + \dots)^3 \\ &= S_1^3 \cdot \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^3 + 3S_1^2 S_2 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^4 + \dots \end{aligned} \quad (3.10)$$

すべて $\frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^n$ と感度係数 S_i^n の式で書き表せることが分かる。また $\frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^n$ の項は $\bar{a} + \Delta a_i$ をサンプリングし n 乗の平均値を取る項であるが、これは入力 a_i が正規分布であるとき『平均値を軸に左右対称である』という特徴から n が奇数のとき、サンプル数の増加に併せて 0 に収束することが容易に想像できる。

ここで、 $\frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^n$ の項について、リバースサンプリングを適用した際を考える。リバースサンプリング法では、その定義から前述の通り、 $a_i = \bar{a} + \Delta a_i$ を採集した次のサンプルは必ず $a_i = \bar{a} - \Delta a_i$ となることが決められている。つまり、サンプル数 I が偶数であるとき、一回一回の $\Delta a_i + \Delta a_i$ は必ず 0 になると言える。すなわち、 I が偶数であるとき n が奇数である $\frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^n$ の項は無限回サンプリングしたと同様の値に収束することが決まっている。

よって、 $E[\Delta p]$ や $E[(\Delta p)^3]$ といった n が奇数であるときの期待値は n が奇数となる $(\Delta a_i)^n$ の項が支配的である可能性が高く ((3.10)式より、また $S_1 > S_2 > S_3$ であることが多く、 $\Delta a_i < 1$ という場合を考えたとき)、奇数次の期待値が支配的となっている奇数次のモーメントに関わる統計量(平均や歪度)の収束も早くなるのではないかと予測できる。

以上を統計量収束の点からまとめると、

- $E[p]$ や $S[p]$ といった奇数次のモーメントの統計量に対しては素早い収束が期待できるが
- 偶数次のモーメントに関しては、 $2I$ 回のリバースサンプリングと I 回のランダムサンプリングで得られる情報量が等しくなり、収束が遅くなる可能性が高い。また、
- 各項のどれが支配的かという問題には、感度係数 S_1, S_2, S_3 が大きく関わってくるため、これらの値についても留意する必要がある。

といったことが結論として予測された。

3.3 簡易モデルによる検証

本節では、実問題ではなく簡易的な入出力の非線形伝播モデルにリバースサンプリング法を適用し、その効果を検証する。3.2.2 節において、既に期待値推定に対する効果と分散推定に対する無効性は論じた通りであるが、その検証の意味も込めている。

3.3.1 簡易モデルの設定

今回実計算の例として考えている燃焼計算は、乱数の作成に時間がかかることなどにより十分な標本数を得るために時間を要するため、本研究ではより簡易な入出力間の伝播モデルとして以下(3.11)式のような二種類の関数を用いる。

$$\begin{aligned} F_L(x) &= S_1x \\ F_{NL}(x) &= S_2x^2 + S_1x \end{aligned} \quad (3.11)$$

上式において、 S_n は n 次の微係数を意味し、簡易モデルにおける検証では任意の値を設定することで入出力間の非線形度合いを調整した。また、任意の期待値・分散に従う標準正規乱数を作成し、入力パラメータ x とする。また、 S_1, S_2 の比率を保持したままそれぞれの値を変化させたところ(Fig.3.2)、出力パラメータの統計量の推移はその比率のみに依存し、絶対値によって影響を受けることはなかった。これより、二次関数を用いた簡易モデルを(3.12)式のように変更し、非線形の度合いについては、 S_R を任意の値に変更することで検証を行った。

$$\begin{aligned} F_{NL}(x) &= S_Rx^2 + x \\ S_R &= S_2/S_1 \end{aligned} \quad (3.12)$$

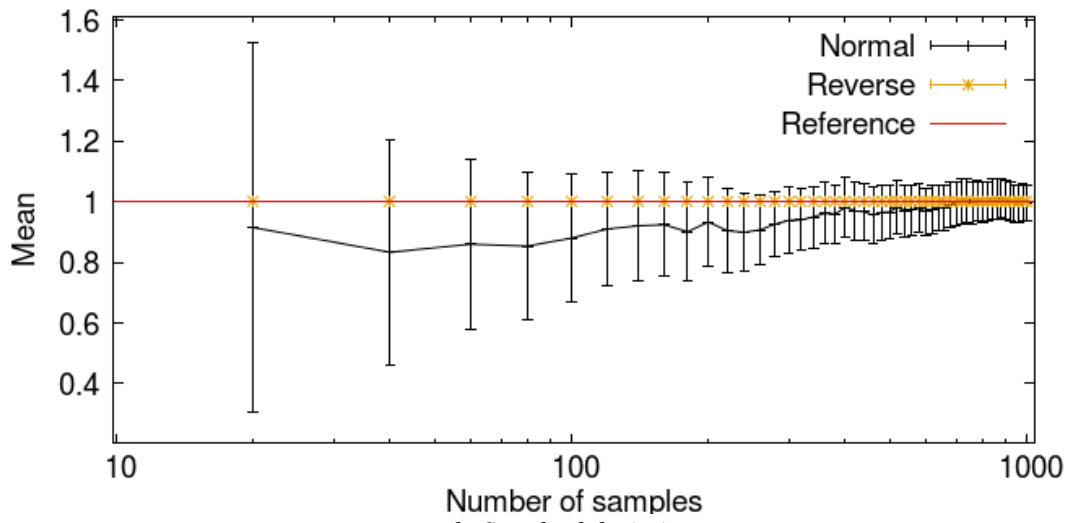
3.3.2 結果・考察

§ 入出力に線形性が認められる場合

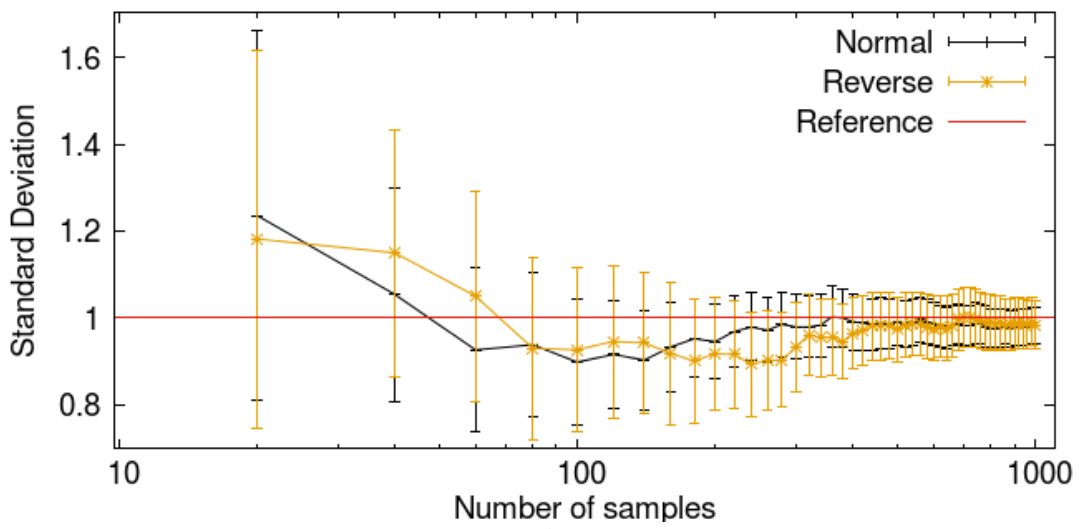
本条件はすなわち(3.11)式における $F_L(x)$ の場合となる。このモデルに対して、不確かさ評価を実施した結果を次頁 Fig.3.2 に示した。黒線はリバースサンプリングを適用せず通常のRS法によって縦軸に示す統計量を推定した結果を示し、橙線がリバースサンプリング法を適用したものとなる。また、それぞれに付与した誤差棒は、同じサンプル数の標本を100回採集し、それによって統計誤差を評価したものである。(誤差棒としては 2σ を用いた)

図より、平均値や歪度と言った奇数次のモーメントに関しては最初のサンプリングの時点で収束しており、偶数次のモーメントである標準偏差に関しては一切効果を示していないことが読み取れる。これは、入出力間が線形であるとき、前節において導出した式のうち S_1 以外が全て 0 となることから明らかである。

a. Mean



b. Standard deviation



c. Skewness

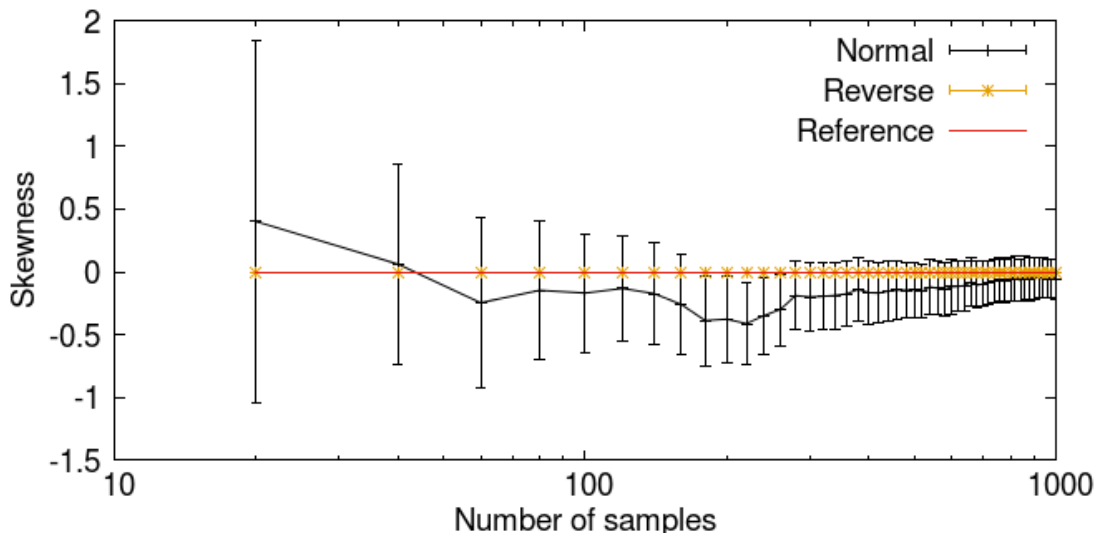
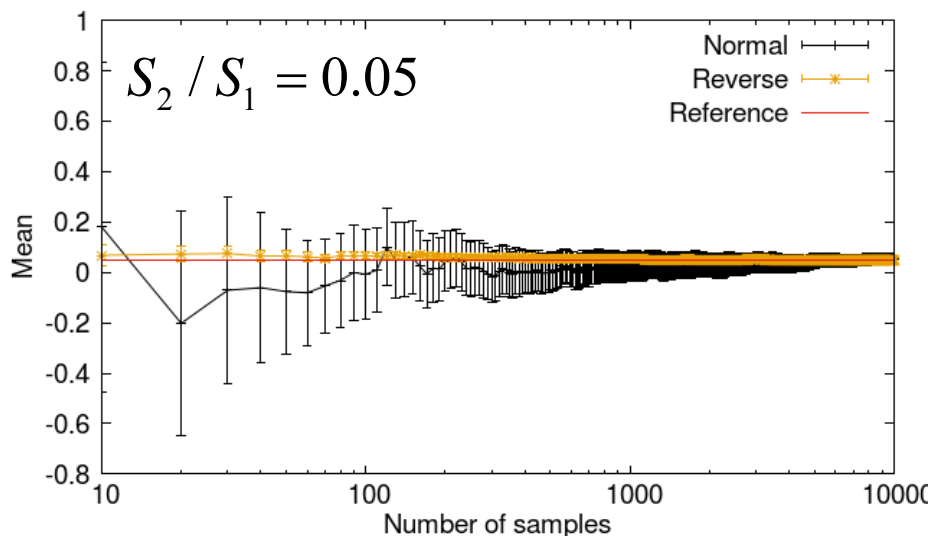


Fig.3.2 Result of Variance reduction in linear condition

§ 入出力間が非線形の関係にある場合

続いて、入出力間に非線形性が認められる $F_{NL}(x)$ の結果について触れていく。第一に不確かさ評価の主題とは外れるが、期待値の推定にリバースサンプリング法を適用した結果は以下の Fig.3.3 に示した通りである。



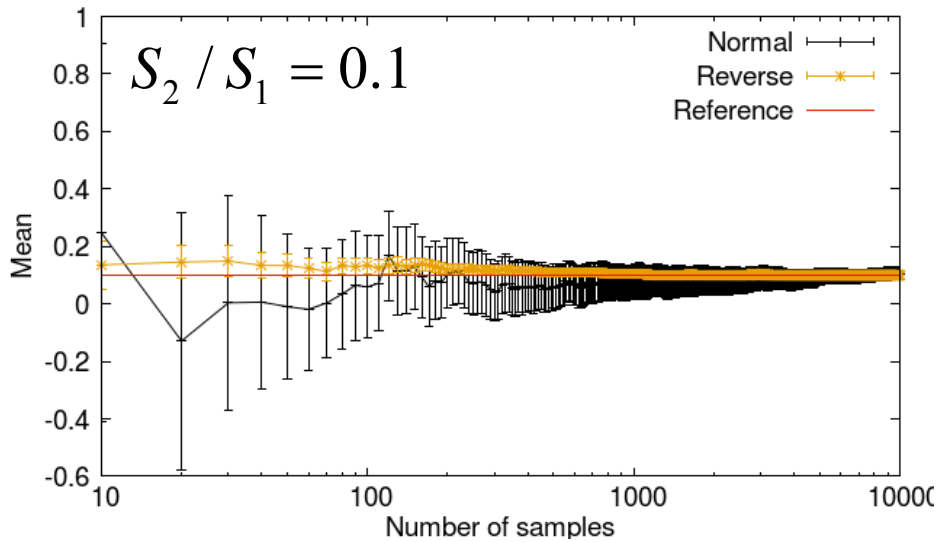
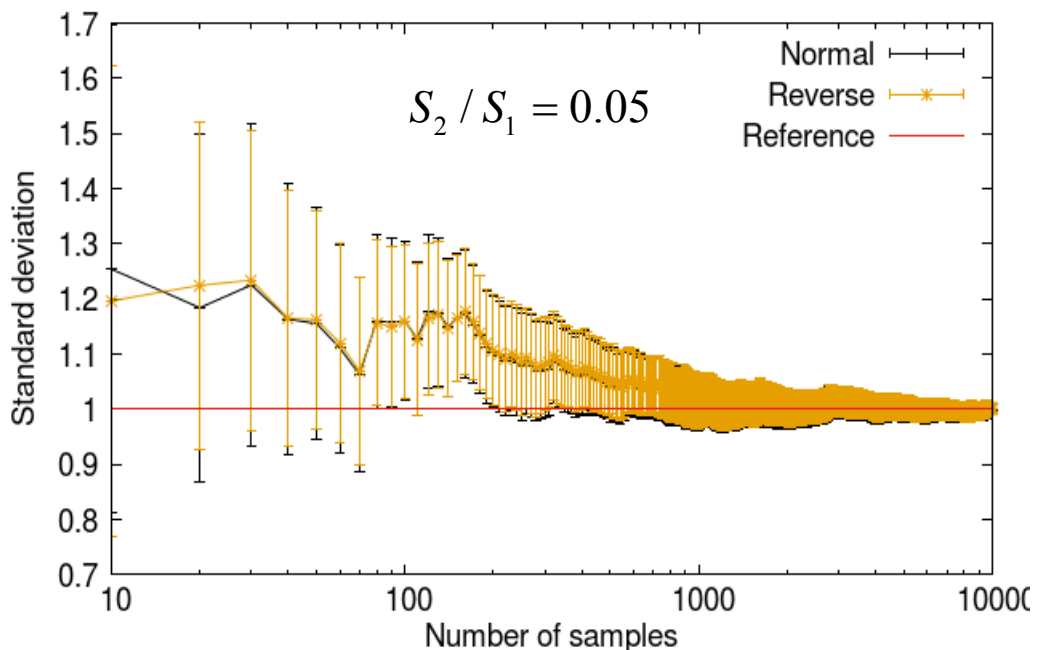


Fig.3.3 Result of mean value estimation

Fig.3.3 中の統計的な不確かさ（誤差棒）として、線形の際と同様に同一標本数における統計量推定を 100 回繰り返した際に得られた 95%信頼区間（標準偏差の二倍）を用いている。上図 Fig.3.3 から明らかなとおり、期待値の推定についてリバースサンプリング法は非常に効果的である。ただし、僅かではあるが、非線形の度合いが大きくなるにつれ、効果が薄れていることが読み取れた。次に、出力分布の幅として推定の高速化が特に望まれる標準偏差の推定についてだが、解析的な予測で述べた通り、Fig.3.4 のような結果となった。リバースサンプリング法使用の有無、入出力間の非線形性の度合いに関わらず変化が見られないことから、どのような条件下であってもリバースサンプリング法によって標準偏差の推定を高速化することは困難であると予想される。



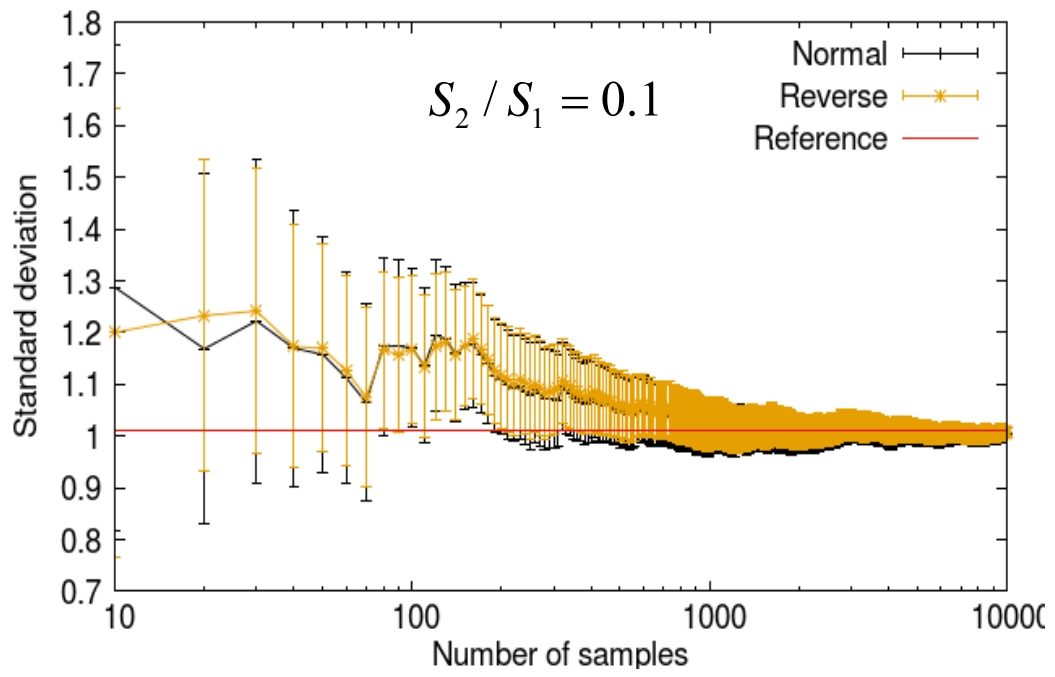


Fig.3.4 Result of standard deviation estimation

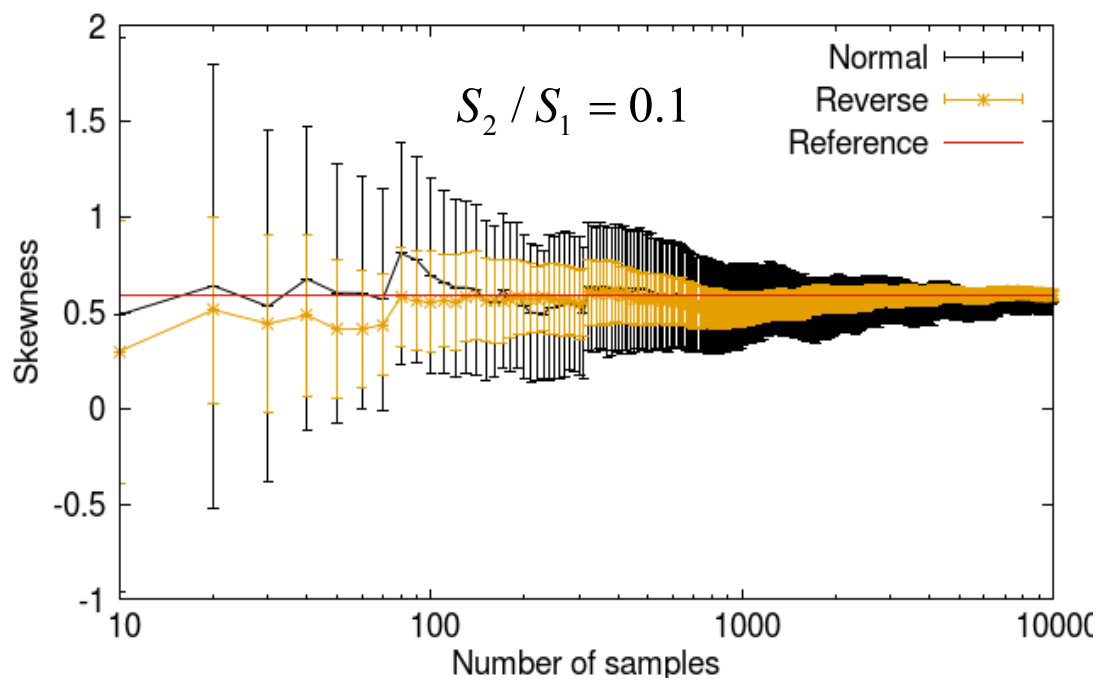
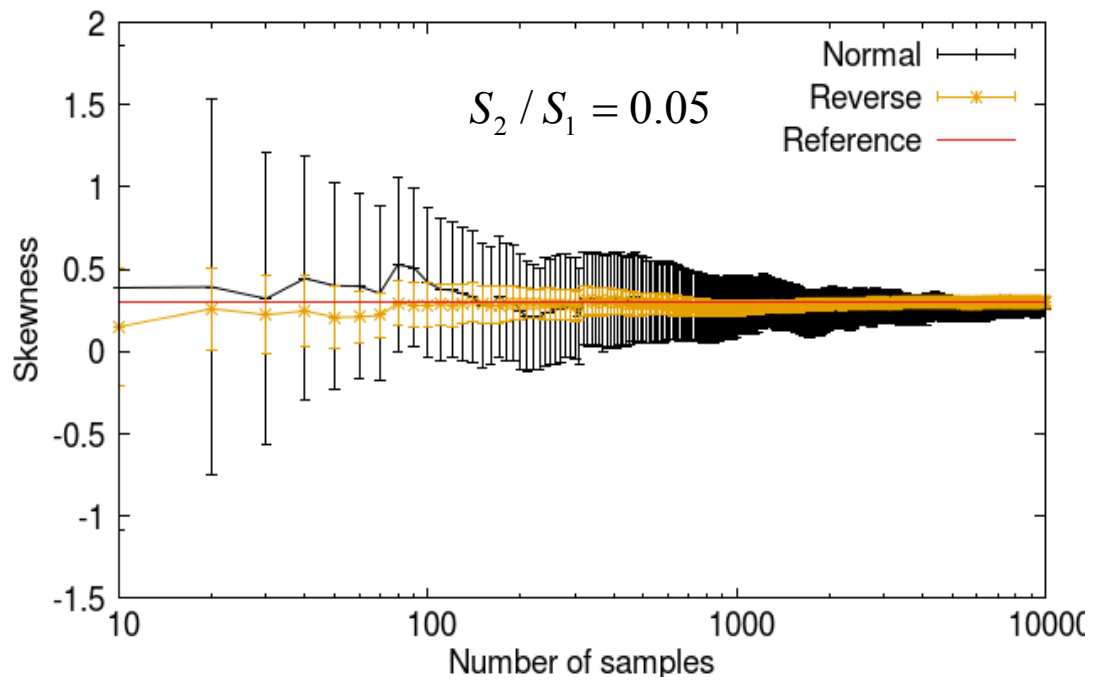


Fig.3.5 Result of skewness estimation

最後に、出力分布の歪みの度合いである歪度を予測する際の結果であるが、Fig.3.5 に示したように入出力の非線形性に強く依存するものの、十分な分散低減効果が確認された。

3.4 ブートストラップ法における過小評価

前節において、リバースサンプリング法が歪度の高速推定に用いることができる可能性が高いことが判明したが、このような統計的手法で推定を行う際は必ずその統計的な不確かさを同時に評価する必要がある。しかし、前節で用いた同一サンプル数による統計量推定を多数繰り返す評価手法は実際の不確かさ評価において現実的ではない。そのため、一般的に RS 法を用いる際はブートストラップ法によって誤差棒を求めているが、それがリバースサンプリング法に適用可能であるかは検討の必要がある。

本節ではブートストラップ法のリバースサンプリング法への適用可否について論じる。

3.4.1 概要

ブートストラップ法は 2 章で説明した通り、経験分布から重複を許してブートストラップ標本を反復採集することで推定値の分散を推定する手法である。リバースサンプリング法においては、同一確率で発生する正負両方の事象を同時にペアとしてサンプリングするというその特徴から、ブートストラップ法によって反復抽出する際にもそのペアを崩さず一すなわち、同時に得られた出力標本に関してもペアのまま反復抽出することで、問題なくブートストラップ法を適用することができると考えた (Fig.3.6)。

3.4.2 ブートストラップの適用可否

実際に、適用し信頼区間を求めた結果が次頁 Fig.3.7 の通りである。S_R = 0.05、反復抽出回数 500 回のブートストラップ法を用いた信頼区間が水色で、簡易モデルによる検証の際と同様に同一サンプル数における統計量評価を 100 回繰り返して求めた結果がそれぞれ、黒、橙色の線で示されている。少標本数の際に Estimate と Bootstrap の結果が一致しない傾向はあるものの、サンプル数の増加によってブートストラップ法による信頼区間推定が、反復による推定のものに近づいていることが分かる。以上より、十分な標本数が担保されている状況下であれば、ブートストラップ法を用いて信頼区間の推定を行うことは可能であると言える。

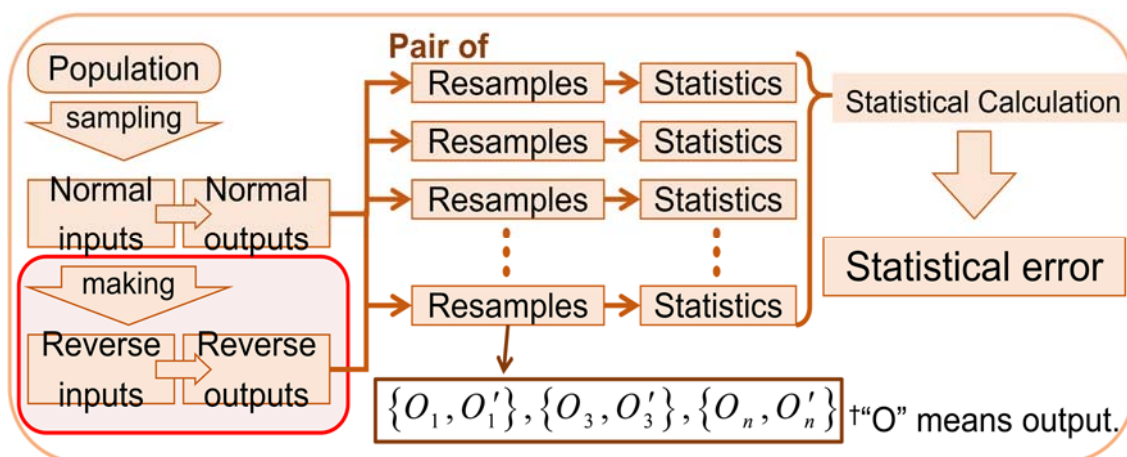


Fig.3.6 The image of bootstrap for reverse sampling

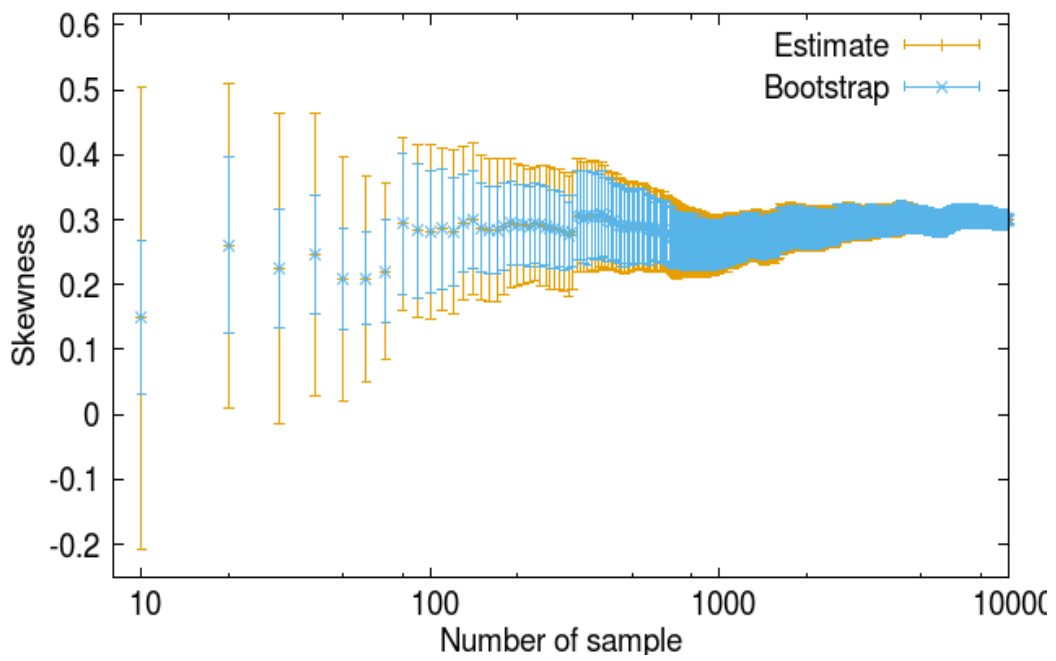
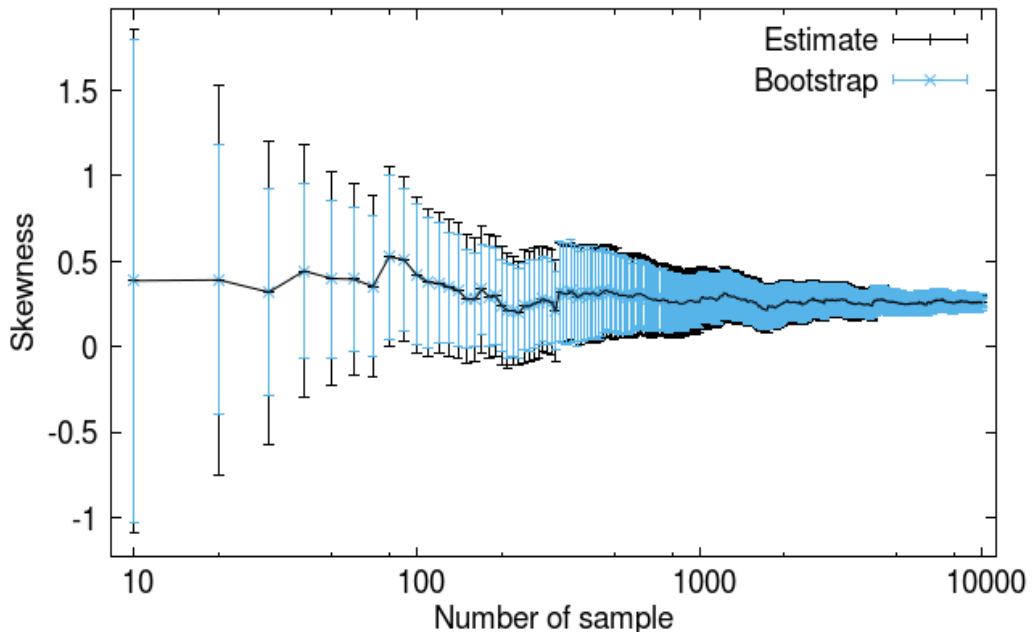


Fig.3.7 The result of bootstrap application

3.4.3 ブートストラップ法における過小評価

前節の結果から、ブートストラップ法には標本数が少ない際に過小評価する傾向があることが分かった。また、こういったブートストラップ法における少標本数時の過小評価に関しては広く述べられている。次に、過小評価の度合いについて確認を行った。

ここで、Degree of Underestimation (DoU)という評価指標を以下の(3.13)式のように定義する。

$$\text{DoU} = \frac{\text{Est} - \text{Boot}}{\text{Est}}$$

Est：同一標本数で 100 回統計量を評価した際の標準偏差 (3.13)

Boot：ブートストラップ法を用いて求めた標準偏差

ただし、このとき Est を求めるために同一標本数の標本群が 100 セット存在するため、ブートストラップ法についても、100 セット全てにおいてブートストラップ法を実施し、得られた 100 個の標準偏差の平均値を Boot の値とした。結果を Fig.3.8 に示す。

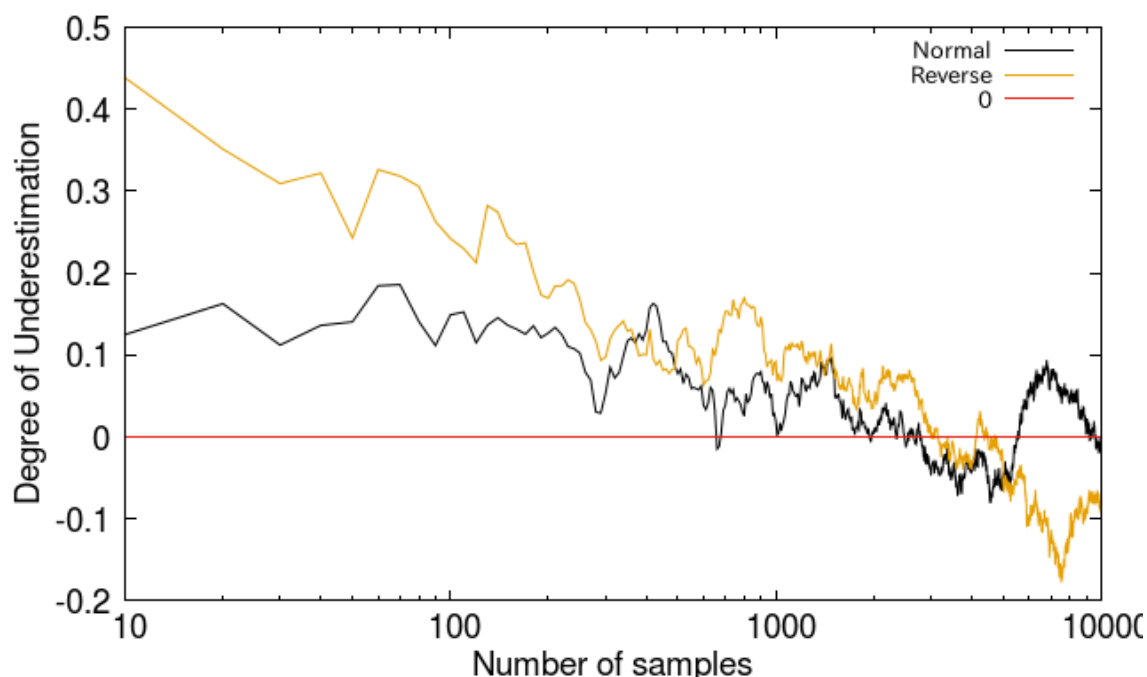


Fig.3.8 Degree of underestimation

Fig.3.8 において、DoU が 0 の時は過小評価しておらず、正に大きいほど過小評価の度合いが大きくなっていることを示している。図より、ブートストラップ標本を抽出する元となる経験分布の標本数が大よそ 1000 に満たない状態では、信頼区間が過小評価となる傾向が確かにあることが言える。また、その傾向は通常のランダムサンプリングに比べ、リバースサンプリングを用いた際は特に顕著であった。

以上より、ブートストラップ法によって統計的な不確かさを評価する際はそのもととなる標本数に注意する必要があることがわかる。

3.5 燃焼計算における検討

本節では、実計算の例としてリバースサンプリング法による不確かさ評価を燃焼計算に適用した結果について論じる。燃焼計算の詳細な設定は、2章に示した通りである。

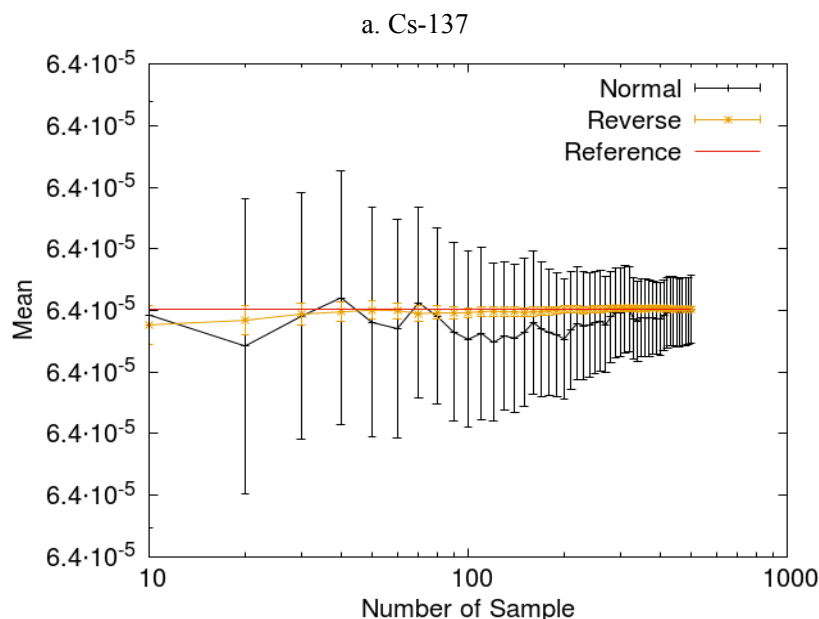
3.5.1 燃焼計算への適用手法

2.3節でも記載したが、本研究には、燃焼計算にて不確かさを考慮する入力パラメータとして、先行研究[3]に引き続きFP-137チェーンにおける核反応断面積、半減期、核分裂収率、分岐比のすべてを対象としている。そこで、各入力パラメータのサンプリングを行う際に、得られた乱数とそれをリバース（すなわち、平均値よりも10%大きい値を採集した場合は次に必ず10%小さい値を採る）した乱数の組み合わせを作成し、全て同時に考慮した。また、以後の結果について、表示される誤差棒は全て100回同一標本数の計算を繰り返して得られた統計誤差を用いている。

3.5.2 結果・考察

§ 期待値の推定

期待値の推定にリバースサンプリング法を適用した結果を Fig.3.9 に示す。Reference には RS 法を 10 万サンプルに対して行った結果を用いている。図からも分かるように、簡易モデルにおいて実施した際と同様の結果を示し、159 核種の全ての収束挙動が例に挙げた核種のようになった。また、先行研究より非線形性が高いと判明している Eu-151 のような核種についても、分散低減効果が十分にみられた。また、前節で述べた過小評価の影響が見られなくなる標本数の大きい結果について、誤差棒をブートストラップ法によって求めた傾向を Fig.3.10 に示した。なお、表中右軸 Variance reduction rate とは、誤差棒(すなわち推定統計量の標準偏差)の低減割合であり、例として 0.8 はリバースサンプリング法によって誤差棒が 80%短縮されていることを表す。



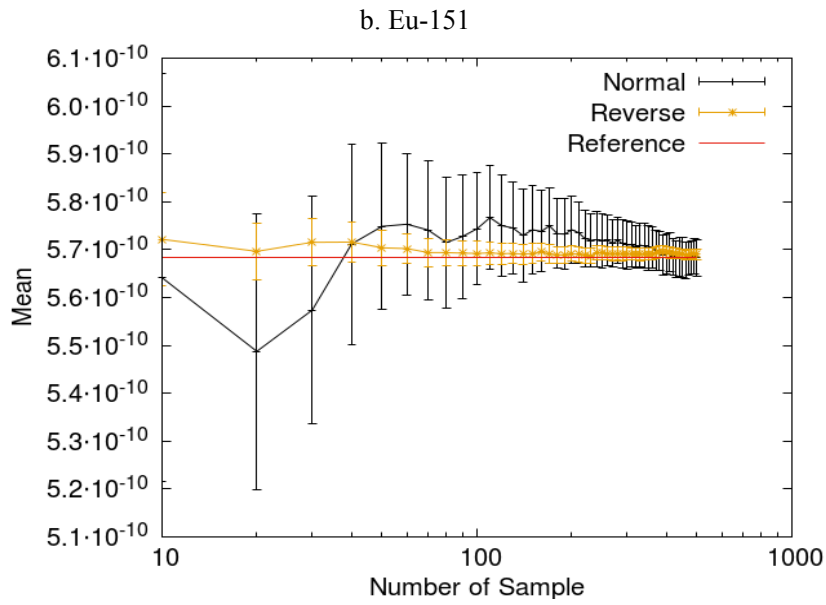


Fig.3.9 Result of Mean estimation on burnup calculation

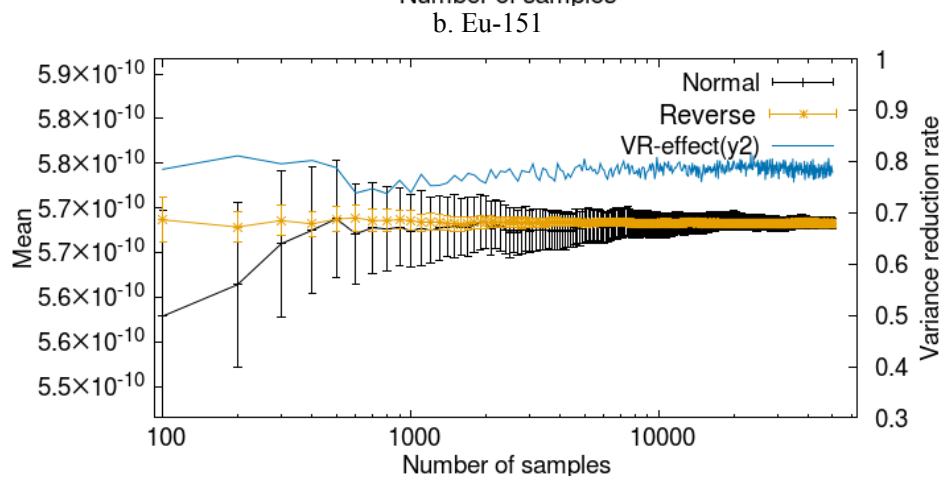
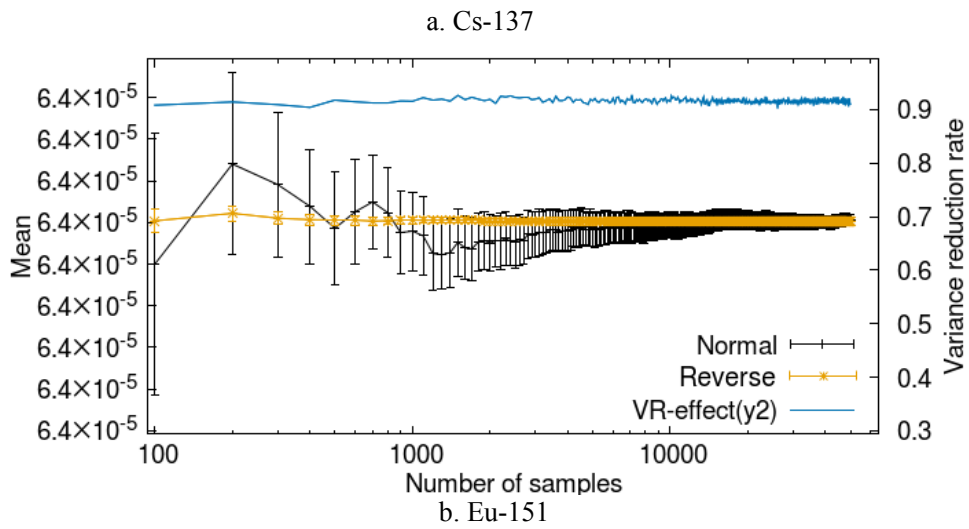
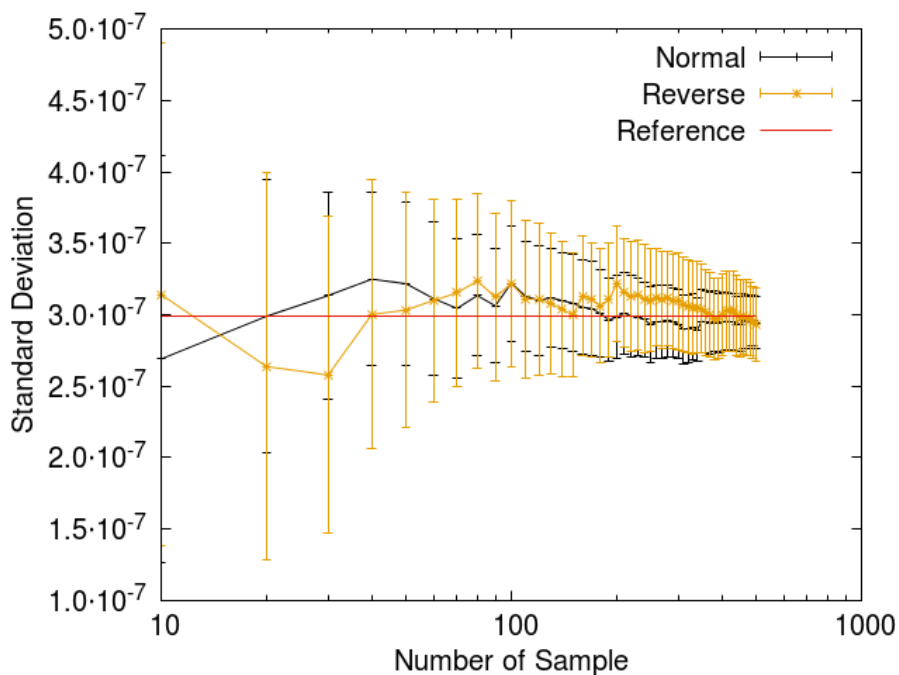


Fig.3.10 Result of Mean estimation on burnup calculation (using 100000 Samples).

§ 標準偏差の推定

続いて、標準偏差の推定に用いた結果を Fig.3.11 に示す。これらも簡易モデルにおける結果同様、核種—すなわち入出力間の関係性に拠らず分散低減効果が見られないという結果を示した。標準偏差についても、ブートストラップ法を適用した結果を Fig.3.12 に示す。

a. Cs-137



b. Eu-151

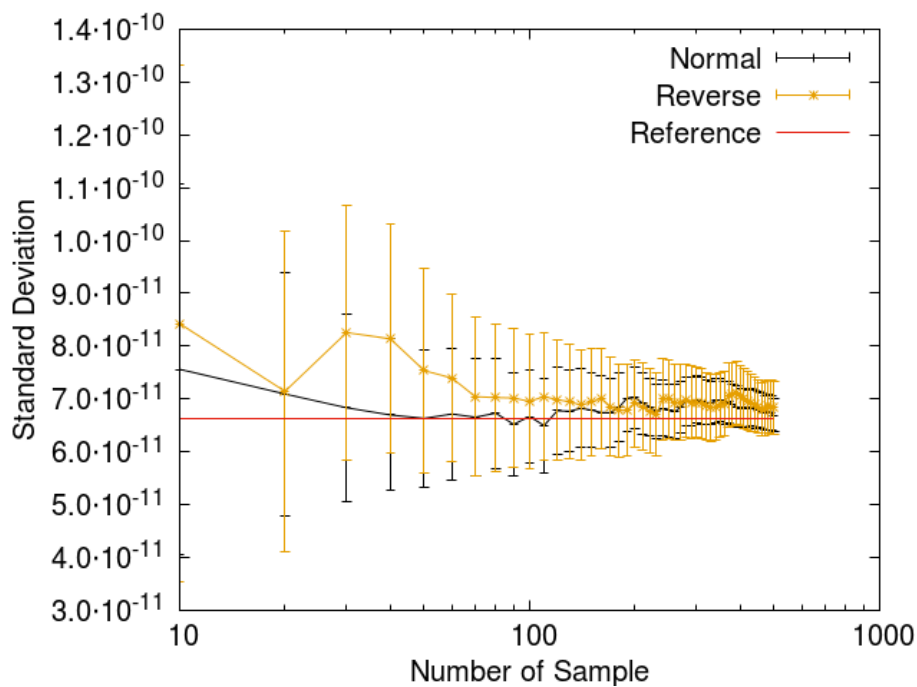


Fig.3.11 Result of standard deviation estimation on burnup calculation

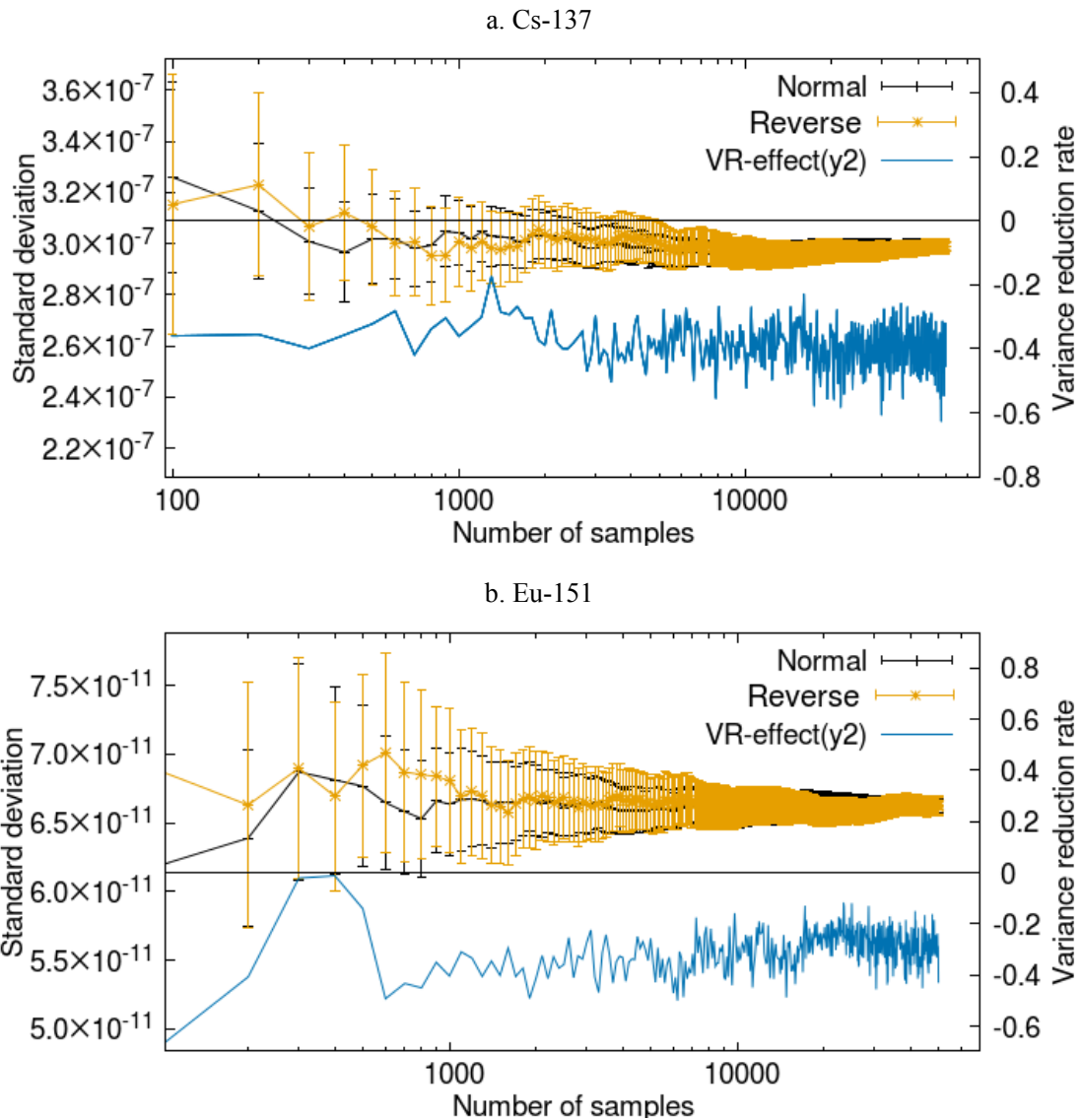


Fig.3.12 Result of standard deviation estimation on burnup calculation (using 100000 Samples).

§ 歪度の推定

最後に歪度の推定にリバースサンプリング法を適用した結果であるが、これに関しては核種によって結果が分かれた。下図 Fig.3.12 の通り、Cs-137 のような歪度の小さい核種に関しては非常に高い分散低減効果を示したが、Eu-151 のような歪度が有意な値を持つ核種に関しては、低減効果が見られるとは言い難い挙動を示した。こちらも同様に Fig.3.13 に標本数が十分得られる際の結果をブートストラップ法による統計誤差評価とともに掲載している。

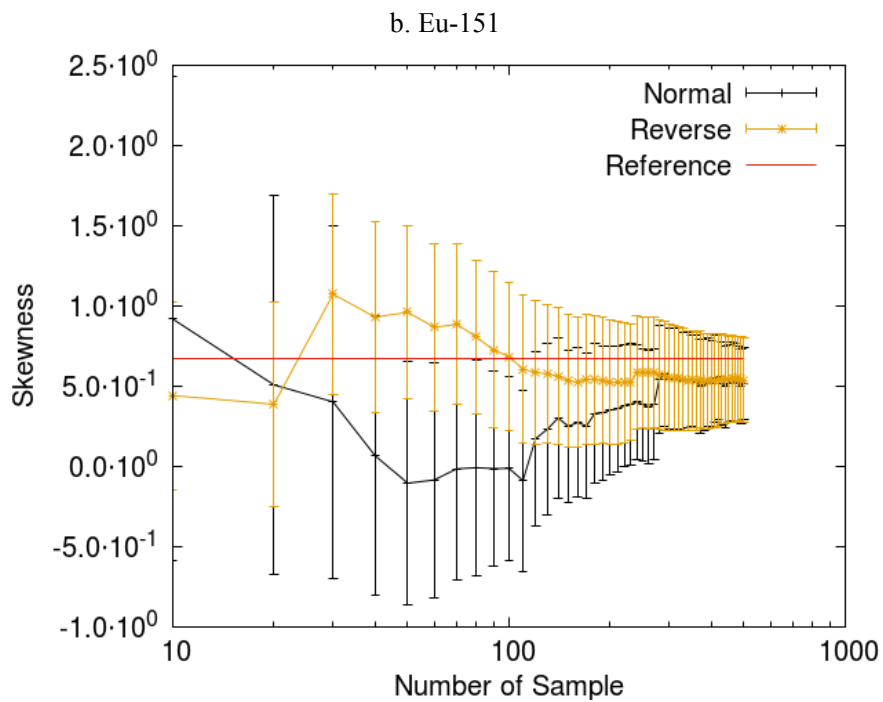
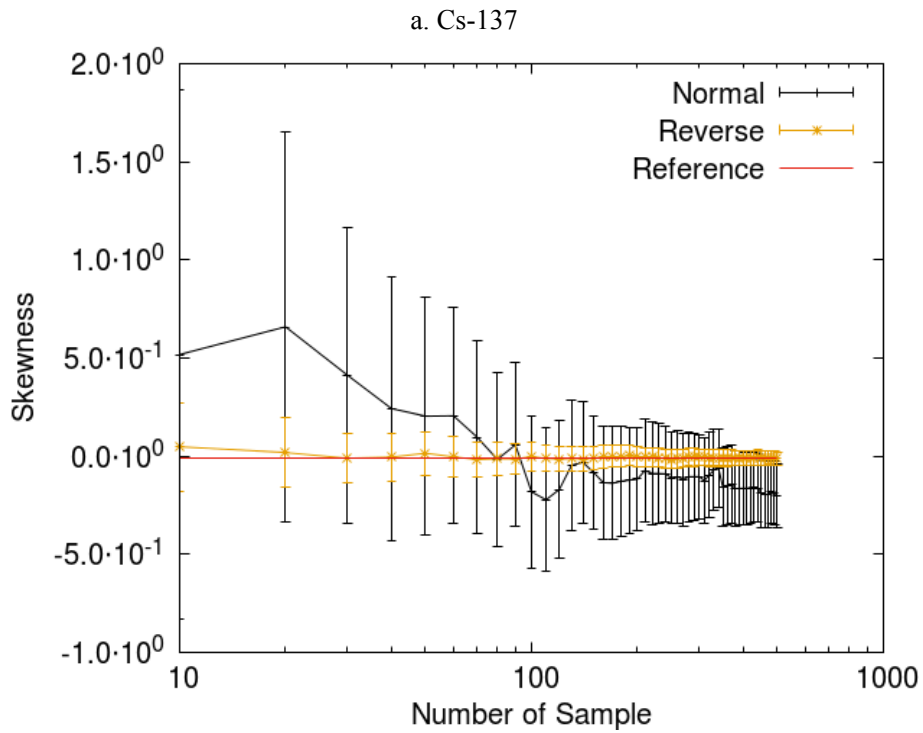


Fig.3.13 Result of Skewness estimation on burnup calculation

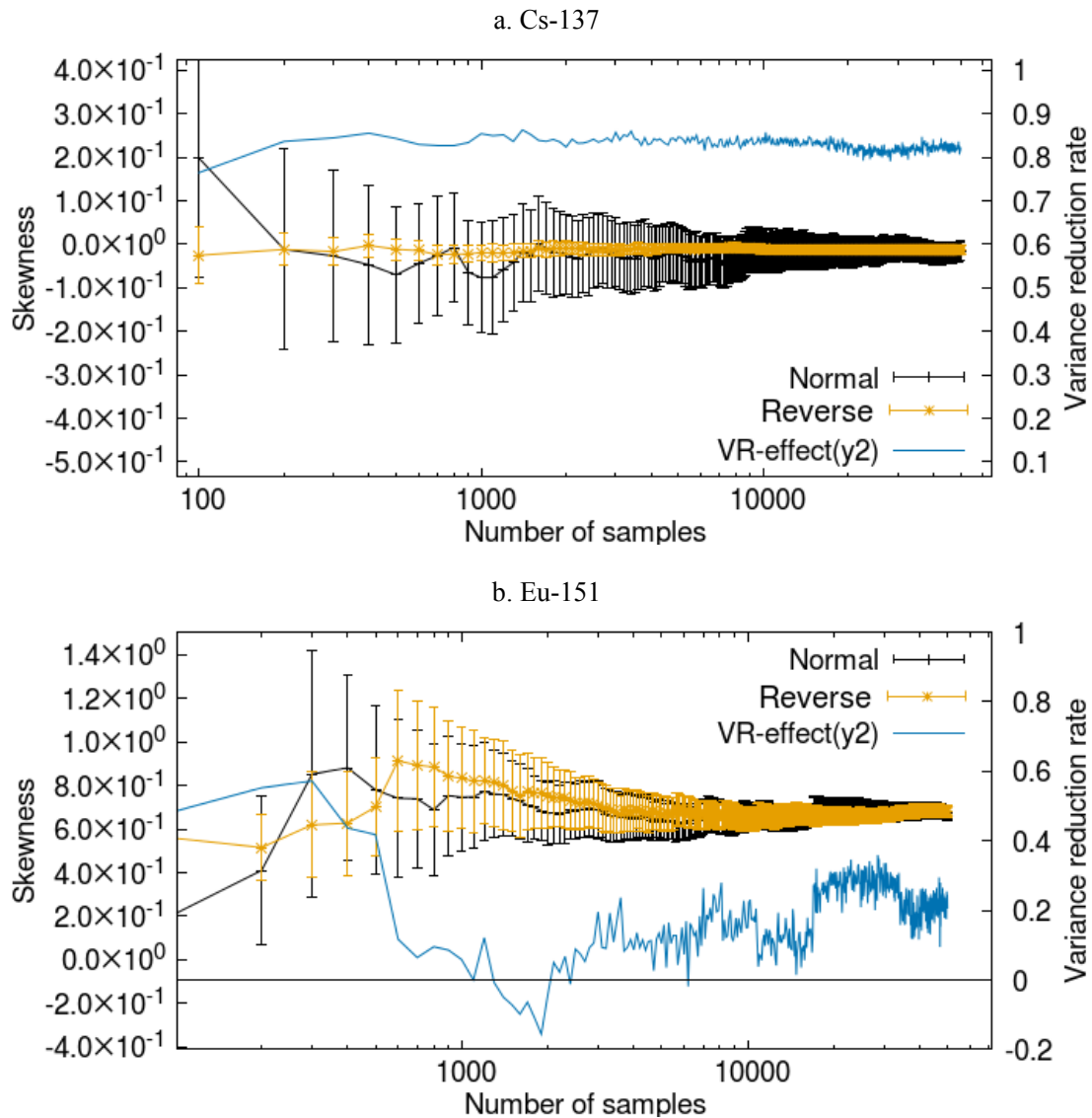


Fig.3.14 Result of Skewness estimation on burnup calculation (using 100000 Samples).

これは、入出力間の非線形性が大きなモデルにおいてみられる結果と同様であり、リバースサンプリングによる歪度推定の高速化は、歪度が小さい——つまり、入出力間の線形性が強い核種に限られると言える。

以上より、リバースサンプリング法は不確かさ評価そのものに応用することは難しいが、歪度が0近傍の時に限り分散低減効果を示し、入出力間の非線形性を判別する手法となる可能性が高いと言える。また、ブートストラップ法を用いて統計誤差を評価する際は標本数に十分注意する必要がある、今後の検討が必要となってくる。

第4章 制御変量法

4.1 概要

制御変量法とはある評価対象関数 $f(x)$ から、解析的に結果が判明している類似対象関数 $g(x)$ に制御変量 α を乗じ差し引いた対象 $h(x) = f(x) - \alpha g(x)$ に対してRS法を実施し、得られた値に既知である類似対象の結果、この場合は積分値 m_g に α を乗じた値を加えることで、評価対象(積分値 m_f)を高速に推定する手法である。すなわち、評価対象と相関を持つ類似対象の情報を利用することで、素早く評価対象の解を求めようという手法となる。Fig.4.1のようなある関数 $f(x)$ の積分値を求める際、通常のランダムサンプリング法においてはそのすべての領域をサンプリングする必要があるが、既に積分値の判明している $g(x)$ を用いることで、ランダムサンプリング法によって推定すべき領域が斜線部のみとなることから、分散低減効果が感覚的に理解できるだろう。

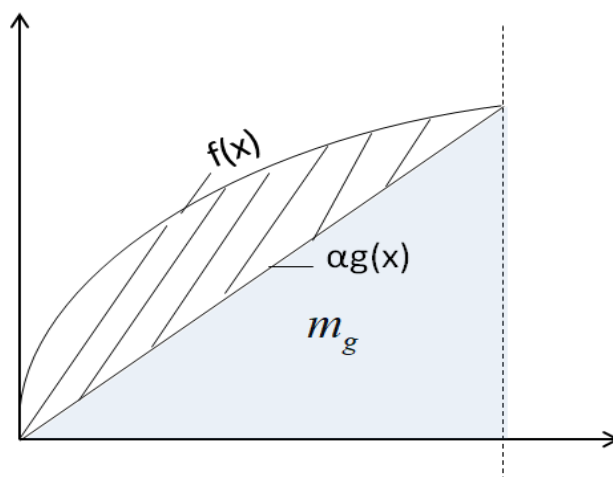


Fig.4.1 The image of control variates method

またこれは評価対象の積分値 m_f を求める積分式

$$m_f = \int f(x)dx = \int (f(x) - \alpha g(x))dx + \alpha m_g \quad (4.1)$$

という(4.1)式が成立することからも示せる。

また、我々の研究におけるモンテカルロ法は統計量の推定であり、これも期待値が

$$\mu_X = \int X(x)P(x)dx \cong E[X] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \quad (4.2)$$

と積分の形で表せることから問題なく適用可能であると言える。また、上式に従えば評価対象を X 、類似対象を Y と表したとき、 Y の平均値 μ_Y が既知である場合

$$E[X] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (H_i) + \alpha \mu_Y = E[H] + \alpha \mu_Y \quad (H_i = X_i - \alpha Y_i) \quad (4.3)$$

と表せ、この式を利用することで $E[X]$ の素早い推定が可能になる。

4.2 分散低減効果の理論的検証

ここでは制御変量法を用いることによる分散低減効果の原理について触れる。概念的な仕組みは前節で触れたが、この節では実際に解析的に分散低減効果を示し、相関が低減効果に与える影響について考える。

第一に、ある推定統計量 $E[X]$ の持つ統計的な不確かさは、仮に X が正規分布を示す場合は $V[X]/n$ (n は標本数) と表され、またこのような公式を用いることができない場合においても、標本数が多くなる、もしくは分散 $V[X]$ が小さくなるに従って、統計的な不確かさが小さくなるのは間違いない。そこで、 $E[X]$ の統計的な不確かさに影響を与える $V[X]$ と制御変量法を用いる際の推定量となる $E[H]$ に対する分散 $V[H]$ の関係を考えてみる。

分散 $V[H]$ は、 $H_i = X_i - \alpha Y_i$ の定義より

$$\begin{aligned} V[H] &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (H_i - \mu_H)^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \{(X_i - \alpha Y_i) - (E[X] - \alpha \mu_Y)\}^2 \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - E[X])^2 + \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \alpha (Y_i - \mu_Y)^2 - 2\alpha \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - E[X])(Y_i - \mu_Y) \end{aligned} \quad (4.4)$$

と書け (ただし、ここでは式変形の明確化のため、不偏分散ではなく一般的分散の定義式を用いている)、式中の総和演算子の部分を全て統計量として表し、 Y に関する統計量が既知であることから $V[H]$ と $V[X]$ の関係は X, Y の共分散を用いて以下の式で表される。

$$V[H] = V[X] + \alpha^2 \sigma_Y^2 - 2\alpha \text{Cov}(X, Y) \quad (4.5)$$

(4.5) 式中の $V[H]$ を最小化するため、 $\frac{\partial V[H]}{\partial \alpha} = 0$ となる α を導出すると $\alpha = \text{Cov}[X, Y]/V[Y]$ と求まり、このとき $V[H]$ は

$$V[H] = (1 - \text{corr}_{X,Y}^2) V[X] \quad (4.6)$$

と表される。すなわち、 X, Y の相関が大きいほど $V[H]$ は $V[X]$ に対して小さくなり、分散低減効果も高くなると言える。

ただし、以上の分散低減効果は統計計算における期待値を求める際にのみ有効なものである。不確かさ評価では分布の幅などその形状を評価する必要があるため、標準偏差を始めとするより高次の統計量を得る必要がある。そのための制御変量法の応用手法について次節にて述べる。

4.3 分散推定に対する制御変量法の応用手法

本節では、一般的に積分値の推定に用いられ、統計計算においては期待値推定の分散低減手法として主に用いられる制御変量法を、標準偏差の推定に用いる手法について論じる。4.3.1 節において標準偏差の推定に用いる手法として考案した手法を提示し、後の 4.3.2 節、4.3.3 節ではその理論的な説明を積分計算、統計計算の二側面から行う。また、続く 4.3.4 節では検証に用いた簡易モデルの設定を行い、4.3.5 節において結果のまとめと適用可能性の検討を行う。

4.3.1 概要

節頭でも述べたが、統計計算における制御変量法は通常期待値推定の分散低減に

$$E[X] = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (H_i) + \alpha \mu_Y = E[H] + \alpha \mu_Y \quad (H_i = X_i - \alpha Y_i) \quad (4.7)$$

という式の下で用いられる。また、この時の分散も

$$V[H] = V[X] + \alpha^2 \sigma_Y^2 - 2\alpha \text{Cov}(X, Y) \quad (4.8)$$

という形で与えられる。本来であれば、(4.8)式を変形し、 $V[X]$ を $V[H]$ から推定することで $E[X]$ 推定の際と同様の分散低減を行いたいが、式中に $\text{Cov}(X, Y)$ という推定量を用いているため、その手法は効果を発揮しない。そこで、本研究では制御変量 α を用いた H に加え、

$$\bar{H}_i = X_i^2 - \beta Y_i^2 \quad (4.9)$$

という量 \bar{H} と制御変量 β を新たに考案し、これを用いて

$$\begin{aligned} V[X] &= E[X^2] - (E[X])^2 \\ &= E[\bar{H}] - (E[X])^2 + \beta \{\mu_Y^2 + \sigma_Y^2\} \end{aligned} \quad (4.10)$$

の形で $V[X]$ の推定を高速化する手法を提案した。

4.3.2 積分計算を用いた説明

4.1 節で説明を行った通り、制御変量法は積分値の推定における分散低減手法と理解できる。つまり、期待値の推定が積分の式によって前述の(4.2)式のように表され、これに従って分散 $V[X]$ の推定式を同様に示すと

$$V[X] = \int (X(x) - E[X])^2 P_X(x) dx \doteq \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i - \mu_X)^2 \quad (4.11)$$

となり、この積分計算へ制御変量法を適用することを考える。上(4.11)式に Y の分散に関する式を加えると、

$$\begin{aligned} V[X] &= \int \left\{ (X(x) - E[X])^2 P_X(x) - \beta (Y(x) - \mu_Y)^2 P_Y(x) \right\} dx \\ &\quad + \beta \int (Y(x) - \mu_Y)^2 P_Y(x) dx \end{aligned} \quad (4.12)$$

と書け、Yに関する期待値や標準偏差が既知であることからこれを展開、整理すると

$$V[X] = \int \{X(x)^2 P_X(x) - \beta Y(x)^2 P_Y(x)\} dx - (E[X])^2 + \beta\{\mu_Y^2 + \sigma_Y^2\} \quad (4.13)$$

と表すことができ、これは(4.9)式と一致する。

4.3.3 統計計算を用いた説明

(4.9)式の体感的な理解は、分散の定義式から前述の式を求めた方がより都合がよいだろう。すなわち、分散 $V[X]$ は通常 of 定義式の整理より、

$$V[X] = E[X^2] - (E[X])^2 \quad (4.14)$$

という形で書かれることから、右辺各項 $E[X^2]$ と $(E[X])^2$ の推定を高速化することで推定における分散低減効果を求める。式中 $E[X]$ に関しては前述までの通り、期待値推定に用いる制御変量法によって分散低減が可能である。また、他方 $E[X^2]$ に関してもこれは期待値であり、つまり期待値推定に用いる制御変量法が使用可能である。よって、4.3.1 節で提案した $\bar{H}_i = X_i^2 - \beta Y_i^2$ を用いて

$$\begin{aligned} E[X^2] &= E[\bar{H}_i] + \beta \mu_{Y^2} \\ \beta \mu_{Y^2} &= \beta\{\mu_Y^2 + \sigma_Y^2\} \end{aligned} \quad (4.15)$$

の形で推定の高速化が可能となる。これより、(4.15)式における右辺各項の高速な推定が可能となり、標準偏差推定における分散低減が見込まれる。

4.3.4 簡易モデルの設定

前述までの手法の妥当性を確認するため、本研究ではまず各統計量が既知である二組の相関を持つ正規乱数を簡易モデルとして採用し、一方を評価対象 f、他方を類似対象 g とし検証を行った。詳細は下 Fig.4.2 の通りである。

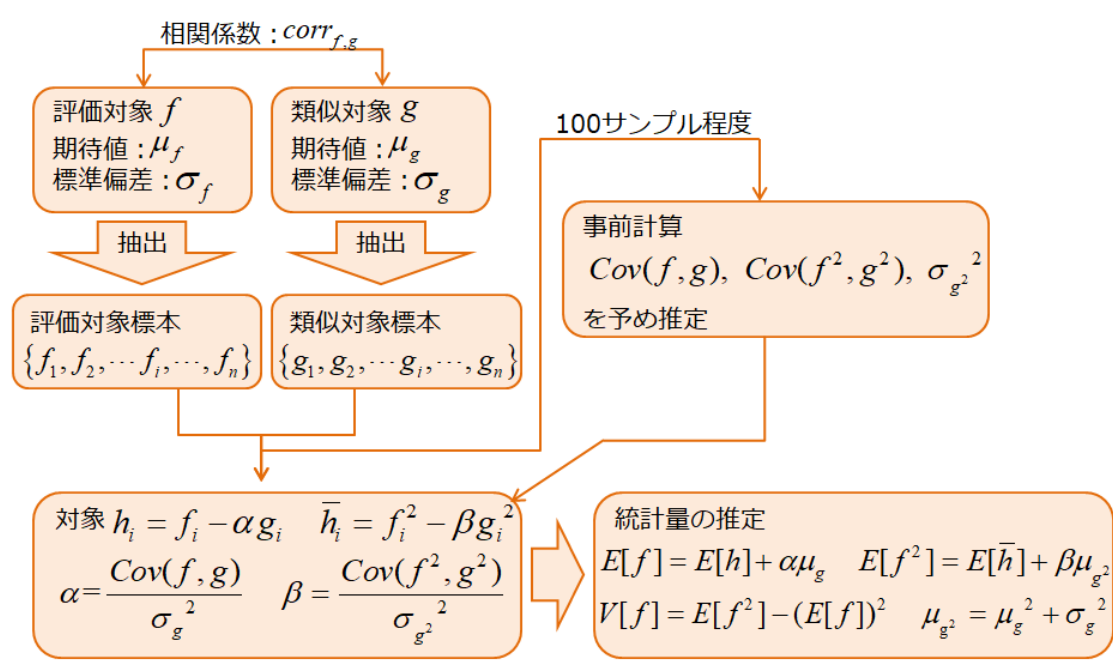


Fig.4.2 The flow of Control Variates method

Fig.4.2 に示した通り、類似対象 g の期待値や標準偏差は既知として扱い、推定された評価対象 f の統計量が予め任意に定めた真値へ、どの程度の信頼性をもって収束していくかを確認した。

4.3.5 結果・考察

本節では考案した分散推定手法そのものの妥当性とその性質について、前述の簡易モデルを用いて検討した結果について示す。

§ 標準偏差推定手法の妥当性検証

第一に、手法そのものの妥当性や分散低減効果の有無について検証を行った。その際の条件は以下の通りである。

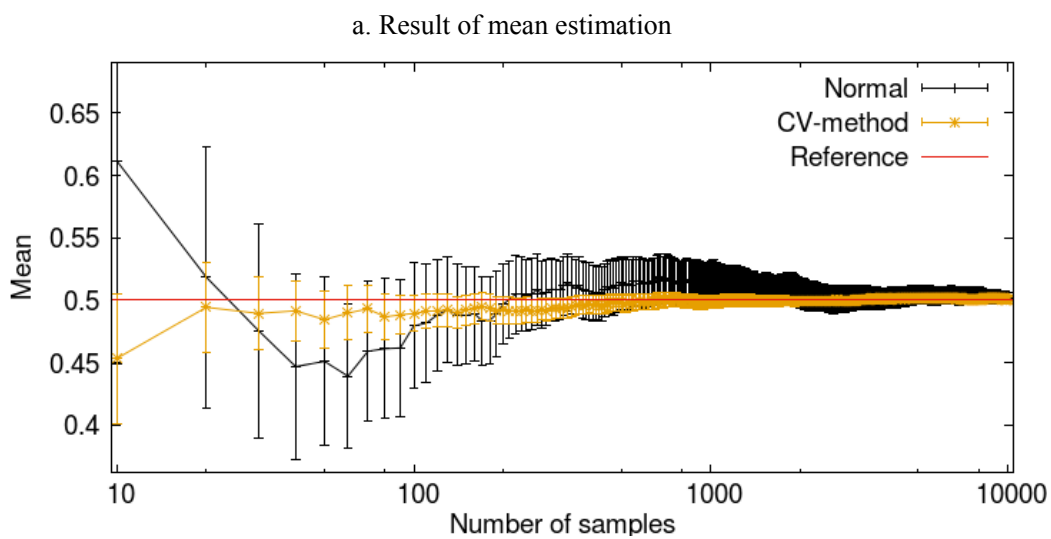
Table4.1 検証条件

	f (評価対象)	g (類似対象)
平均値	0.5	1.0
標準偏差	0.25	0.5
相関係数	0.95	

Table4.1 に示した条件に従って、評価対象の平均値、二乗の平均値の推定を行い、前節までにて示した計算式によって標準偏差を求めた。なお、 α や β といった制御変量は、少数の標本(ここでは 100 サンプルとする)から推定した共分散の値などを用いて導出した。

評価対象の平均値、二乗の平均値推定の様子は Fig.4.3 に示した通りである。双方とも、通常のランダムサンプリングに比べ、制御変量法を用いた際は非常に高い分散低減効果を示していることが読み取れる。また、この二つの値を利用して標準偏差を求めた結果を

Fig.4.4 に示したが、表中青色の線で示した統計誤差の減少割合 Variance reduction effect(VR-effect)からも読み取れる通り、およそ 50%程度の分散低減効果を示している。このことから、提案した CV 法が標準偏差推定における分散低減手法として適している可能性が高いと言える。



b. Result of squared mean estimation

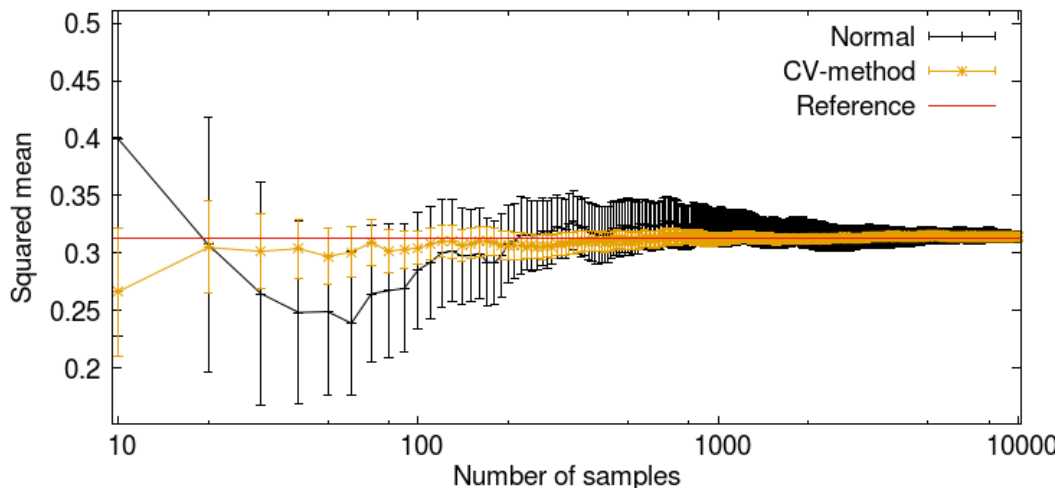


Fig.4.3 Result of preparation of standard deviation estimation

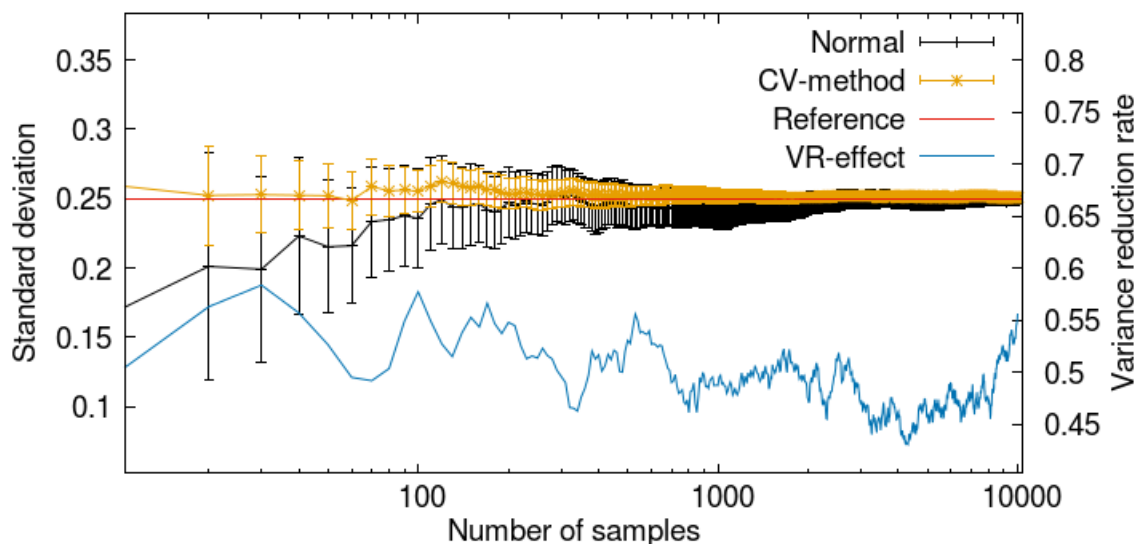


Fig.4.4 Result of standard deviation estimation

§ 提案手法の分散低減効果の検証

前節において、期待値の組み合わせで標準偏差(分散)を表現することでCV法を不確かさ評価に応用できる可能性が高いことが判明した。本節では、様々な条件において提案手法を実施し、実用上の条件や適用できる体系等について検討を行った結果を示す。

第一に、 α や β を求める際の事前計算精度に関する検討を行う。この事前計算とは、制御変数である α や β を求めるために、本来の評価対象に比べ少ない標本数で分散や対象間の相関係数を評価し、最適に近い値を求めるために行うものである。 α や β は最適値こそ存在するが、式中においては任意に定めることができるため、その精度によって結果の正確性が左右されることはない。Fig.4.5に事前計算の回数と10000サンプル時の分散低減割合との関係を示す。なお、後に触れるが、標本数の増加に伴う分散低減割合の変化はある程度決まった値の周囲で振動するに留まり、同一標本数時の分散低減割合を比較することで、それ以外の要素における比較を行うことは妥当である。

Fig.4.5 より、事前計算の回数に関わらず相関係数が0.99の時の分散低減割合はおよそ80%前後を振動しており、事前計算を密に行うことでの精度向上は望めないことが分かる。ただし、これは一度のみ試行した結果であり、共分散の推定精度が標本数に依存することから、事前の計算回数が多いほど分散低減効果の振れ幅は小さい、すなわち効果量が安定する可能性が高いことを留意する必要がある。

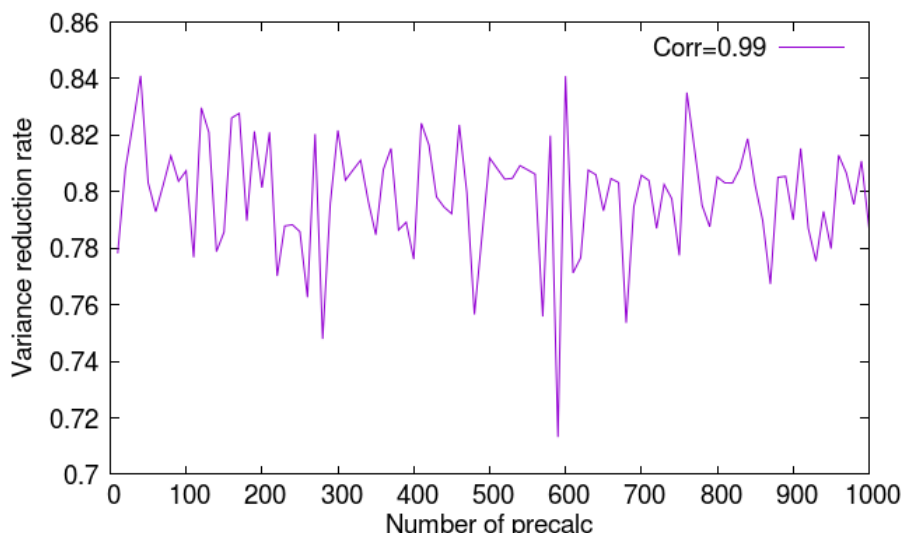


Fig.4.5 Result of variance reduction effect depends on number of pre-Calc.

続いて、評価対象と類似対象間の相関係数が分散低減効果に与える影響について検証を行った結果を次頁 Fig.4.6 に示す。図中横軸は不確かさ評価を行った標本数、縦軸が分散低減の割合を表しているが、前述の通り、分散低減効果は標本数に依存しないことが第一に読み取れる。加えて、同一の平均値や歪度(つまり分布)の中で、相関係数のみを変化させた結果の比較を行ったが、Fig.4.6 の通り、相関が高いほど分散低減効果が大きく、相関係数が0.7付近になると0近傍の値をとる、つまり低減効果を示さないことが分かる。

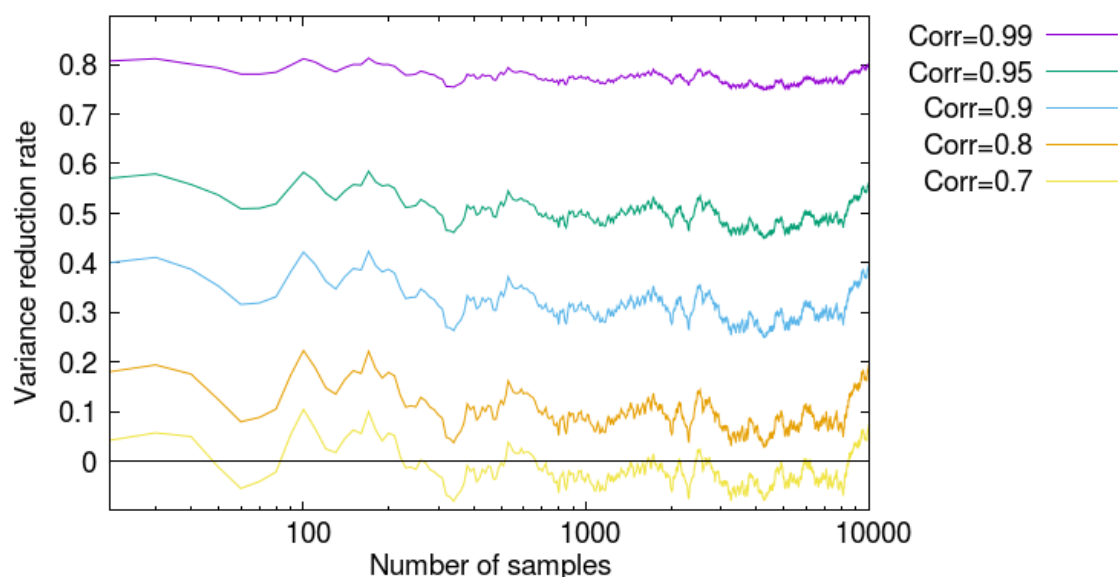


Fig.4.6 Result of variance reduction effect depends on correlation coefficient.

また、相関係数のほか、平均値や分散の値を変更したケースについても評価を行ったところ、分散低減効果が各分布の相対標準偏差の差にも依存している可能性が高いことが判明した。本研究ではこの値を下(4.16)式の形で Dif 値と定義し以後論ずる。

$$\text{Dif}_{f,g} = \frac{\sigma_{\text{rel},f} - \sigma_{\text{rel},g}}{\sigma_{\text{rel},f}} \quad (4.16)$$

$$\sigma_{\text{rel},f} = \frac{\sigma_f}{\mu_f} \text{ (相対標準偏差)}$$

この Dif 値と分散低減効果の関係を以下の Fig.4.7 に示す。

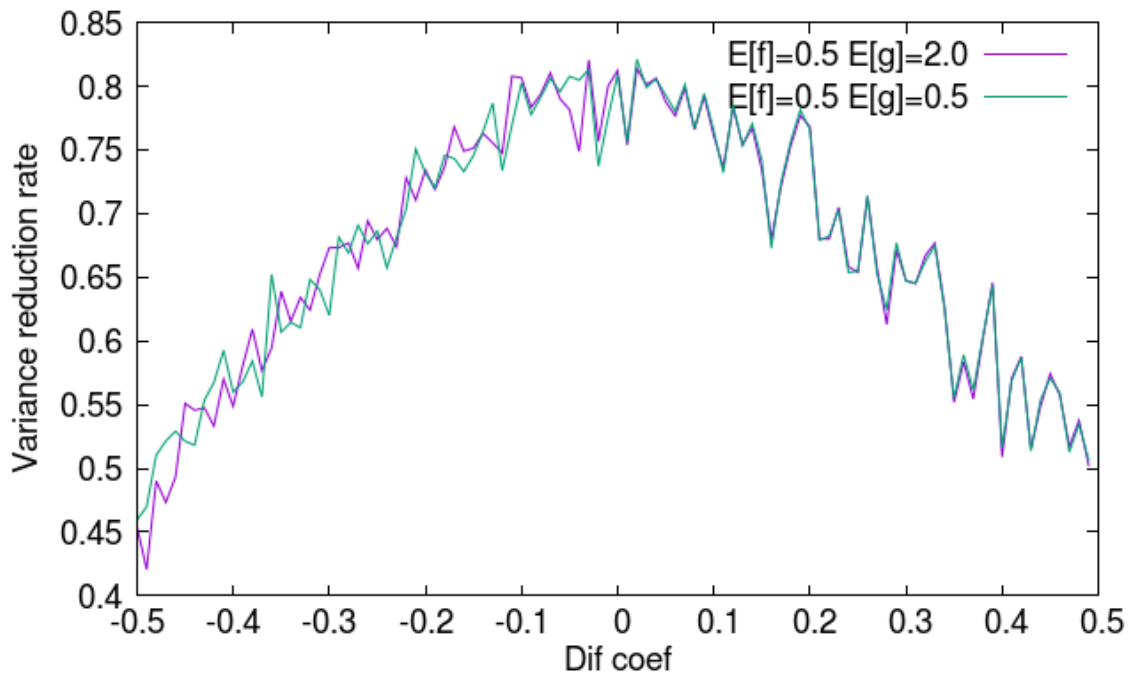


Fig.4.7 Result of variance reduction effect depends on Dif coefficient.

Fig.4.7 中には各対象の平均値を同一としたものと、異なるものとしたものの 2 通りを描画した。そのどちらにも傾向として変化がないことから、分散低減効果は同一相関係数内では Dif 値のみに依存し、Dif 値が 0 に近いほど——すなわち両者の相対標準偏差に差がないほど分散低減効果が高くなることが分かった。以下 Fig.4.8 に相関係数ごとの結果を比較したもの、Fig.4.9 に Dif 値ごとに比較した相関係数と分散低減効果の関係を示す。

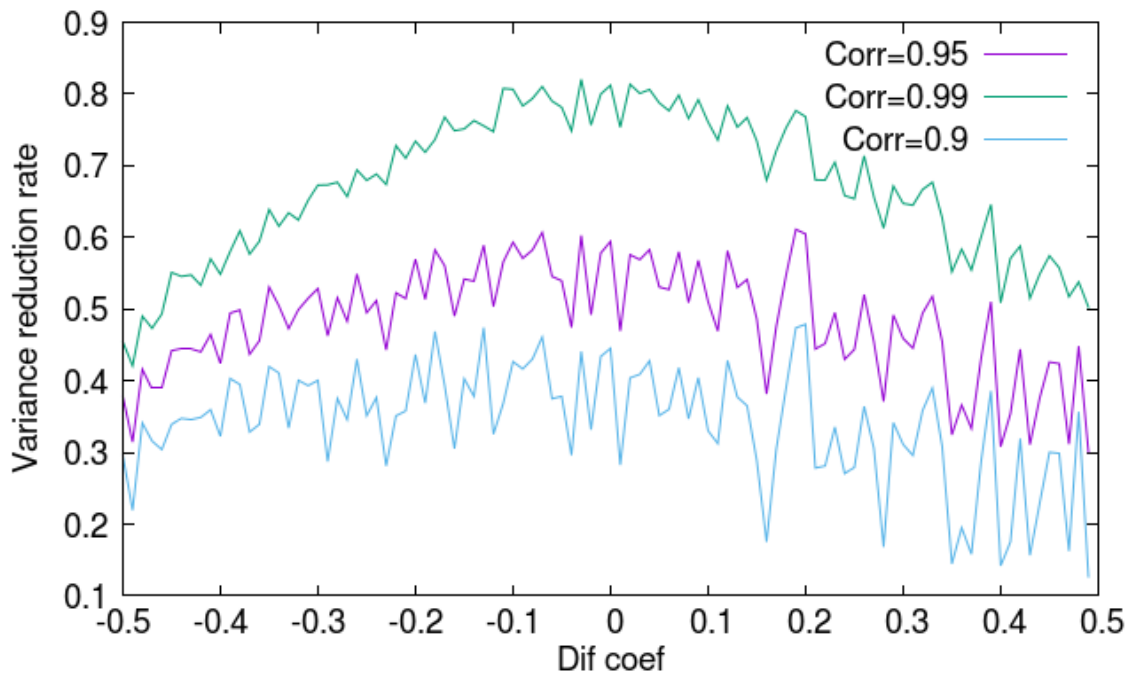


Fig.4.8 Result of variance reduction effect depends on Dif coefficient (Corr).

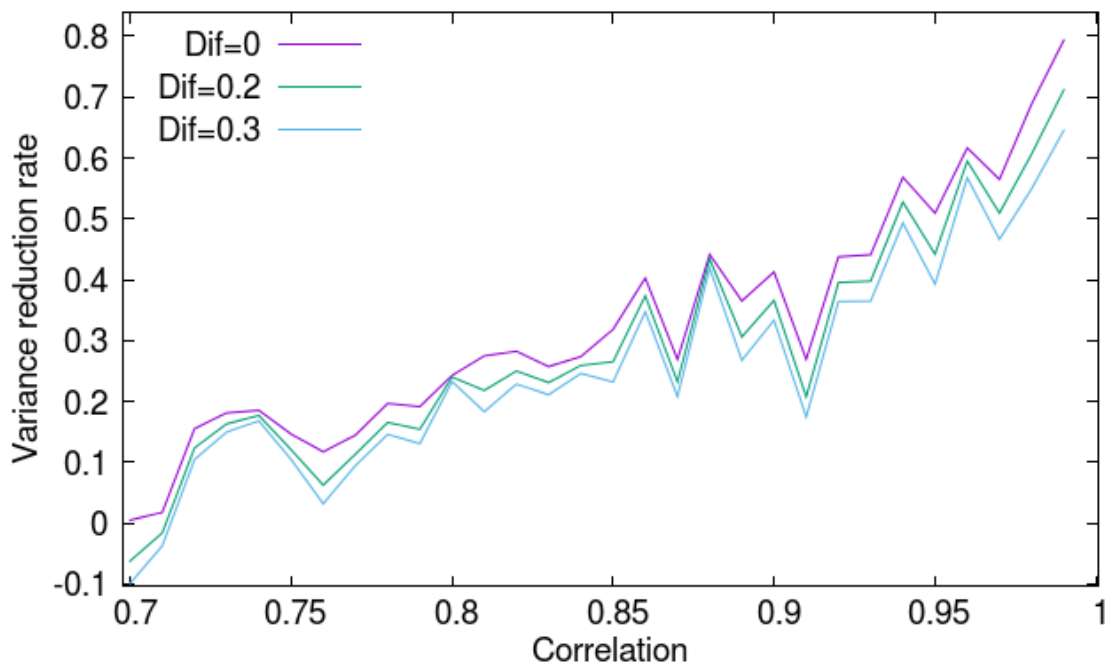


Fig.4.9 Result of variance reduction effect depends on correlation coefficient (Dif).

前頁までの結果より、CV法の分散低減効果は相関係数と Dif 値(対象間の相対標準偏差の差)に依存し、相関が強く相対標準偏差が近い対象を用いることで分散低減効果を高めることができる可能性が高いと言える。また、以下 Fig.4.10 に相関係数が 0.7 以下の結果を示す。

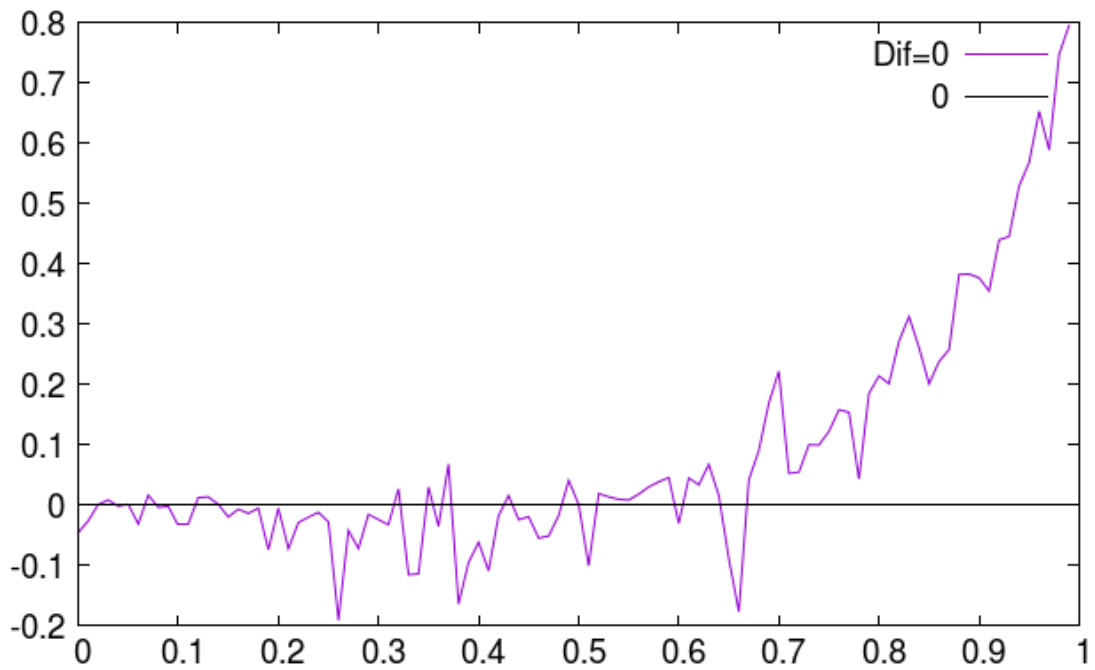


Fig.4.10 Result of variance reduction effect depends on correlation coefficient.

4.4 感度係数を類似対象に用いた制御変量法

前節までにおいては、制御変量法を標準偏差の推定に用いるための手法の妥当性について検討を行った。本節では制御変量法を実際の不確かさ評価に応用する際に重要となる類似対象の選択について、本研究の目的である炉物理パラメータの不確かさ評価に焦点を当

て『感度係数』を用いる手法を提案し、その妥当性を論じる。

4.4.1 概要

感度係数とは、入出力間の関係性を線形であると仮定した際に、入出力間の伝播の様子を決定する係数であり、つまり入出力の関係を示す一次関数における傾きのことである。感度係数を用いた不確かさ評価においては、この感度係数と入力パラメータの不確かさを用いて決定論的に出力パラメータの不確かさを導出するが、本研究では感度係数をあくまで類似対象として用いてRS法を実施する。その概略を以下 Fig.4.11 に示す。

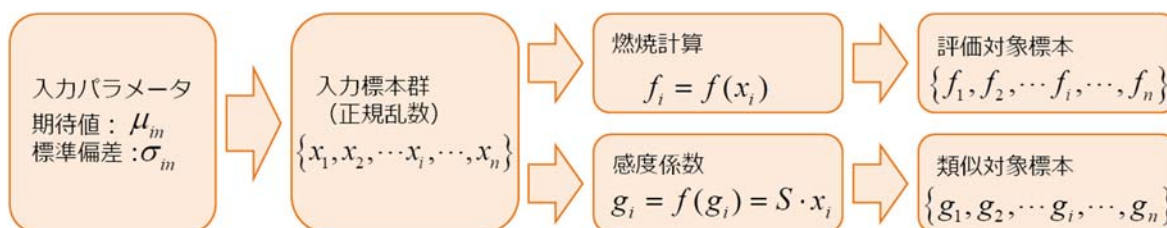


Fig.4.11 Image of using CV-method for non-linear system.

以上のように評価対象(燃烧計算を解いて得られた燃烧後の核種数密度)と類似対象(感度係数を用いて出力した燃烧後核種数密度)を得、これを前述の Fig.4.2 のように処理し不確かさ評価を実施する。

CV法を適用するにあたって、類似対象選択にはいくつかの望ましい条件がある。一つは前節でも述べた通り、評価対象に対する相関が大きいことであるが、それに加えて、類似対象の計算負荷が軽いことも重視される。これは、評価対象と同時に類似対象の計算も行う必要がある性質上、類似対象の計算負荷が重いことは分散低減手法として望ましくないことから分かる。燃烧計算の不確かさ評価を行う上で、こういった二つの条件に合致した類似対象こそ、感度係数を用いて得られた出力標本である。

4.4.2 簡易モデルの設定

CV法を実施する対象である入出力間が非線形である伝播式モデルとして、3節のリバースサンプリング法の際にも用いた二次関数を簡易モデルとして使用する。この(3.11)式中の $f(x) = S_2x^2 + S_1x$ を評価対象とするとき、類似対象はその一次の項 $g(x) = S_1x$ となり、3節でも述べた通り、この特性は S_2 と S_1 の比によって決まるため、以下(4.17)式のように簡易モデルを設定する。

$$\begin{aligned}
 f(x) &= S \cdot x^2 + x \quad (\text{評価対象}) \\
 g(x) &= x \quad (\text{類似対象})
 \end{aligned}
 \tag{4.17}$$

簡易モデルにおいては、入力値 x を任意の平均値、標準偏差に従う正規乱数とし、上記(4.17)式にあてはめることで、評価対象と類似対象を作成した。

4.4.3 結果・考察

(4.17)式における S の値を任意に変更し、不確かさ評価を実施した結果が次頁の Fig.4.12 の通りである。黒線で示した通常の RS 法で推定した標準偏差に対して、CV 法を適用して推定した結果の誤差棒が総じて小さくなっていることが読み取れる。ただし、 $S=0.01$ の時は 70%を示していた分散低減効果も、 $S=0.2$ の際には 20%程度にとどまることから、分散低減効果は体系の非線形性に依存する可能性が高いことが分かる。本件について、 S の値を任意に変化させた体系で 10000 サンプル時の分散低減効果や Dif 値、相関係数を確認した結果を Fig.4.13 に示したが、 $S=0.5$ までの計算を行っても Dif 値が最大で 0.2 程度、相関係数も 0.98 を下回らず、前節の結果からは分散低減効果が 20%近くまで低下範囲には達していなかった。以上より、入出力間の非線形性(分布形状の差)は相関係数や Dif 値とはまた別に、分散低減効果に影響を与えるパラメータとなっていることが分かる。

a. $S=0.05$

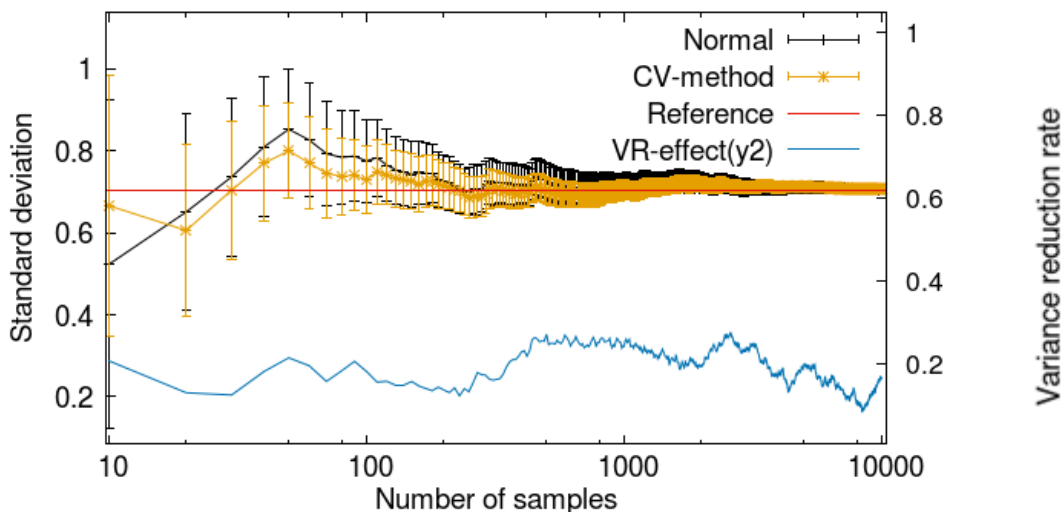
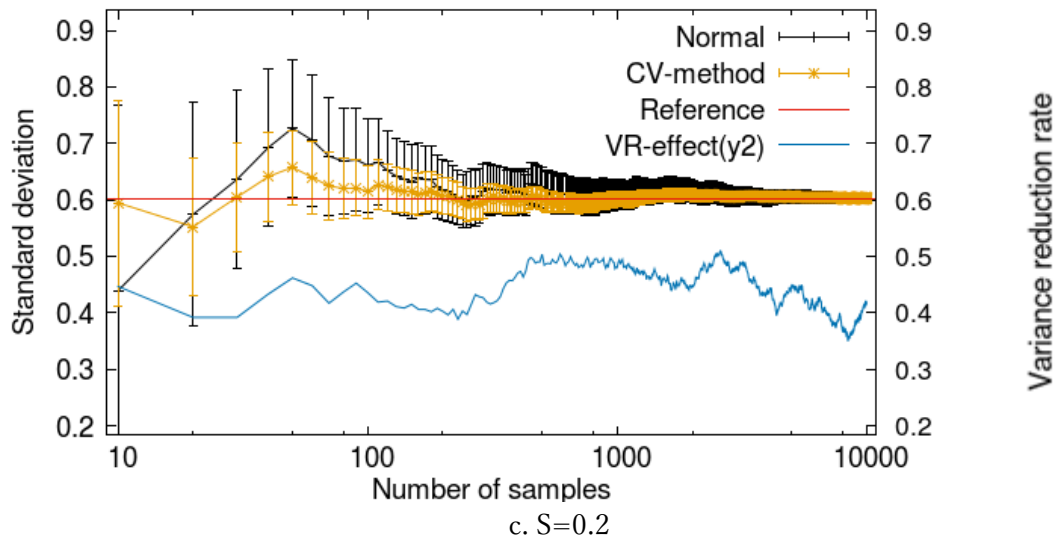
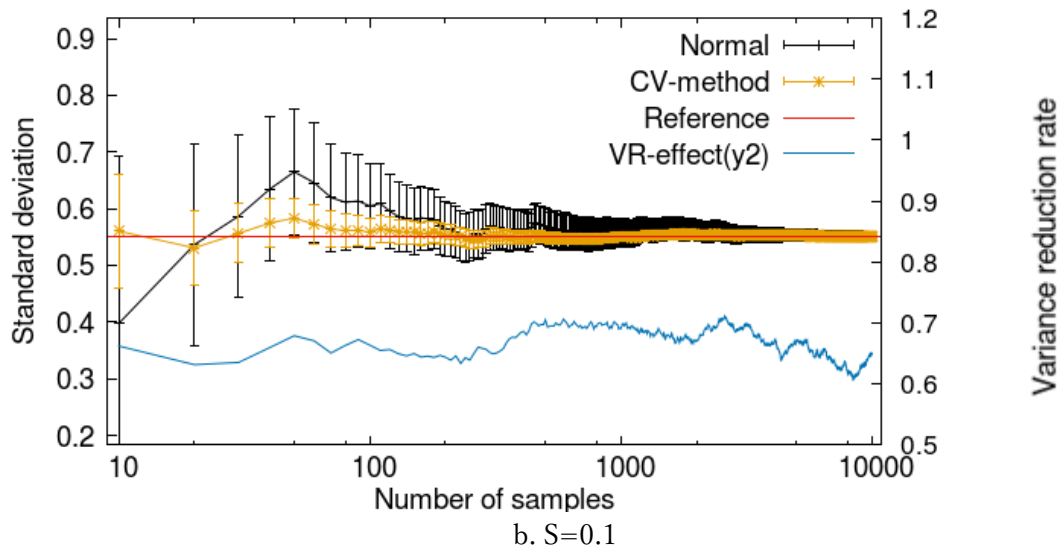


Fig.4.12 Result of using CV-method for non-linear system.

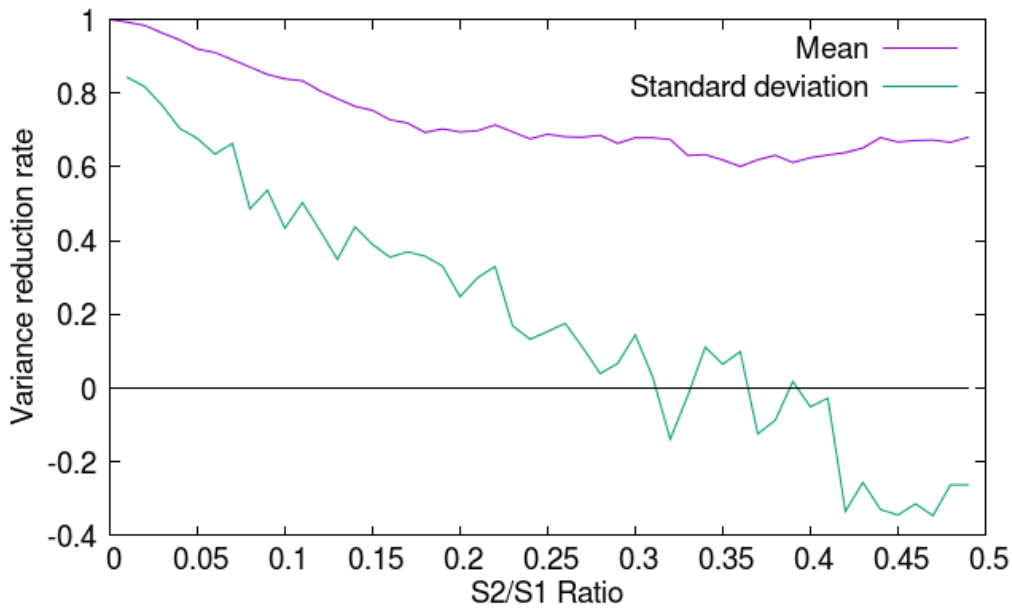


Fig.4.13 Result of VR-effect depend on S2/S1 ratio.

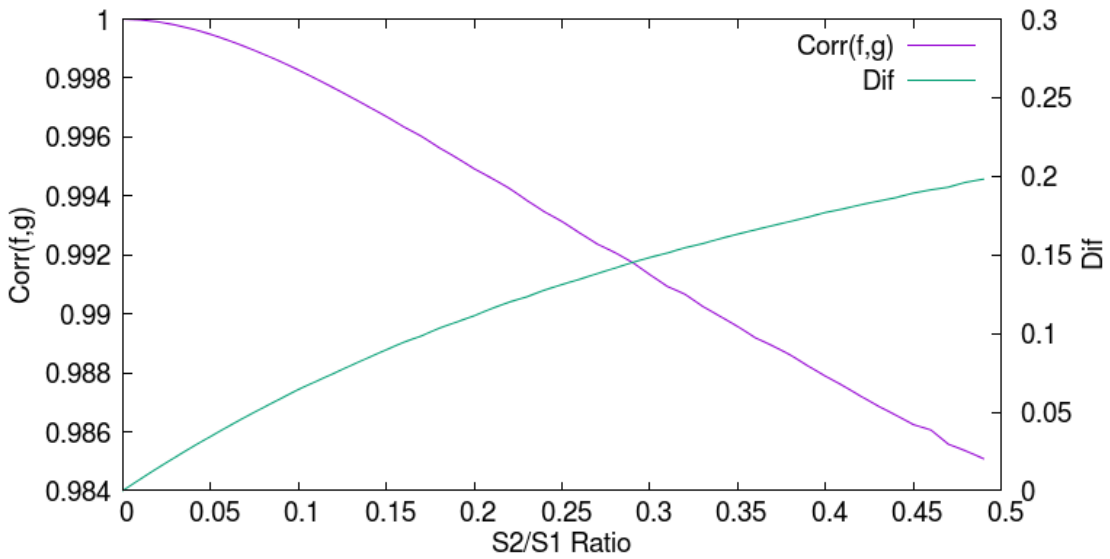


Fig.4.14 Result of correlation and Dif value depend on S2/S1 ratio.

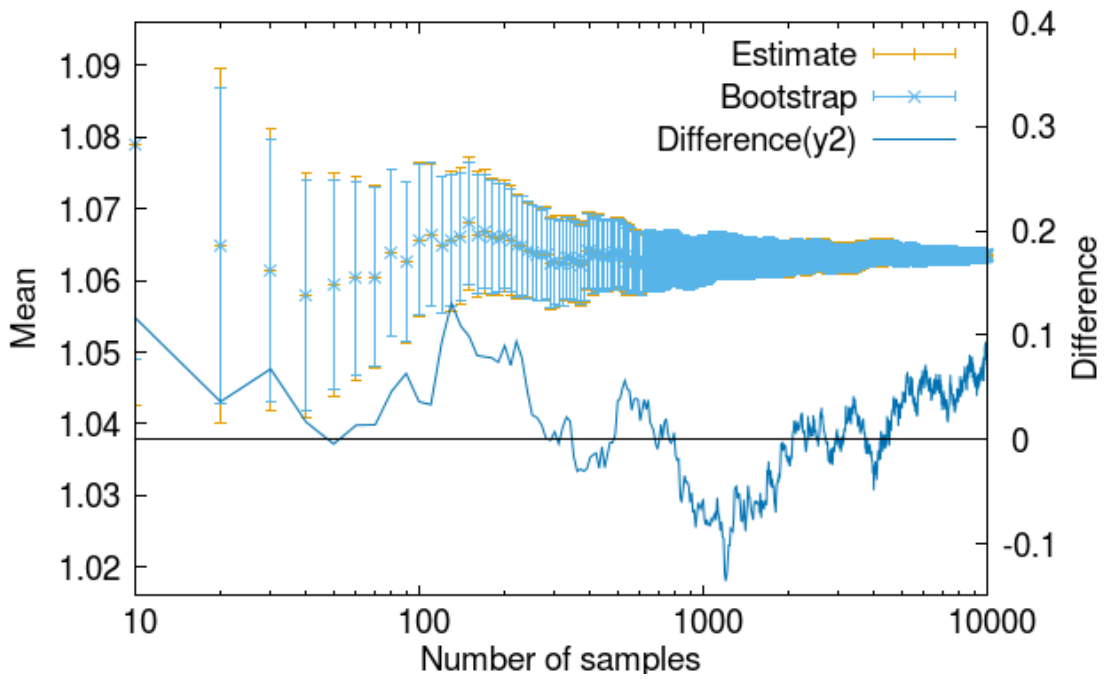
§ ブートストラップ法の適用可否について

ここまでの検討における誤差棒は全て、同一標本数での統計量評価を 100 回行って得られたばらつきを用いて求めていたが、この手法は実計算に適用する上では標本を余分に要求する点で好ましくない。そこで、CV 法を適用する際にも統計誤差の推定にブートストラップ法を適用可能か否か、検討を行った。

CV 法に適用するブートストラップ法についても基本は通常の RS 法と同様で、対称標本数のリサンプリングを 500 回程度繰り返し、各リサンプリング標本から得られた期待値や標準偏差といった統計量を統計的に評価することで統計誤差を推定する。平均値の推定、標準偏差の推定それぞれに適用した結果を次の Fig.4.14、Fig.4.15 に示す。なお、平均値にブートストラップ法を適用する際は、 μ_Y が統計的な不確かさを有せず、CV 法を適用した $E[X]$ の統計誤差が $E[H]$ の統計誤差と同一であるため、 $E[X] = E[H] + \alpha\mu_Y$ の計算は行わず、 $E[H]$ の統計誤差を直接用いている。

Fig.中橙線で示したものが CV 法を用いた統計量推定を 100 回繰り返し、直接統計誤差を推定した結果、水色線で示したものがブートストラップ法を適用した結果である。また、右軸にはブートストラップ法で得た統計誤差が 100 回の計算から推定した値に比べてどの程度過小評価しているのかを示した。0 のとき、ブートストラップ法は繰り返し計算から得られた参照値と同程度の値を示しており、正に大きくなるほど過小評価していることを表す。以上の点で見ると、期待値の推定において過小評価は発生しておらず、標準偏差の推定においてはおよそ 100 サンプル程度までは有意な過小評価が発生しているように見られた。これは、ブートストラップ法の性質としてリバースサンプリング法の節に前述したとおりの理由によって生じるものだと考えられる。ただし、非常にあるていど少量の標本数で過小評価が改善されており、以後実計算にて取り扱う際は、ブートストラップ法を統計誤差推定の手法として用いても問題ないと判断した。

a. Mean estimation



b. Standard deviation estimation

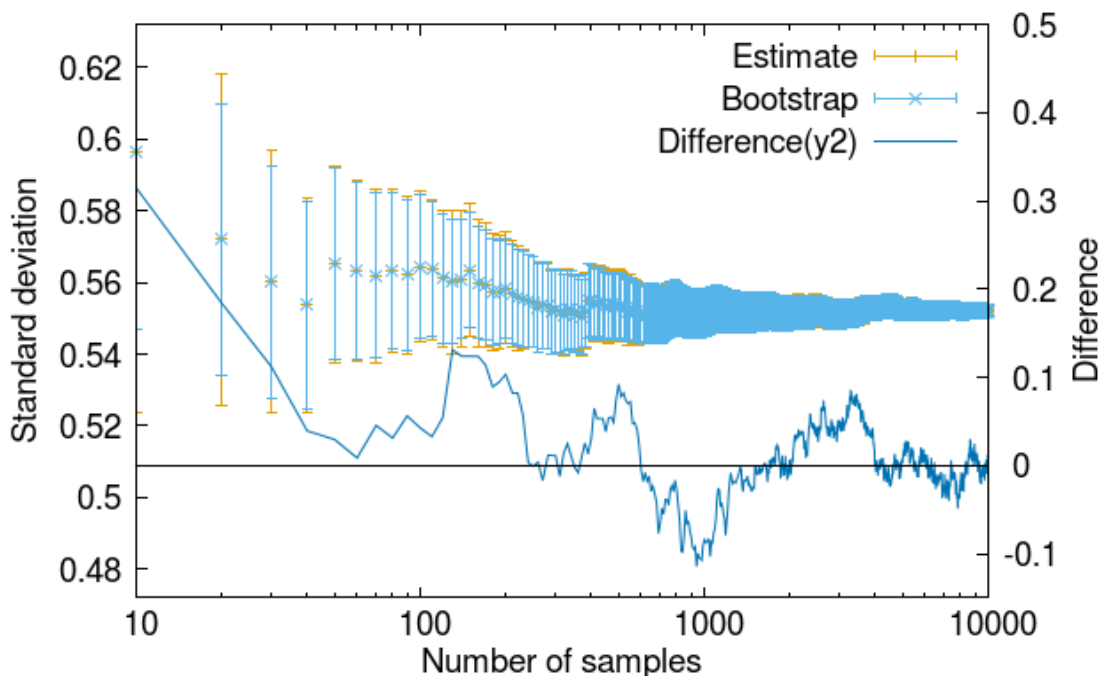


Fig.4.15 Validation of bootstrap method

4.5 燃焼計算における検討

本節においては、前節までで適用手法を検討してきた CV 法を用いて実際の燃焼計算における不確かさ評価を行った結果を示す。

4.5.1 燃焼計算への適用手法

2 章等で述べた通り、CBZ コード内では任意の入力値を摂動させた燃焼チェーンを用いて燃焼計算を行うことが可能となっている。本研究においては、複数入力に取り掛かる前段階として、一入力一出力の不確かさ計算を対象とするため、検討のモデルとして、Eu-151 の崩壊定数の不確かさに起因する 45[GWD/t]燃焼後の Eu-151 核種数密度の不確かさ評価を用いた。計算の概念図は以下 Fig.4.16 の通りである。

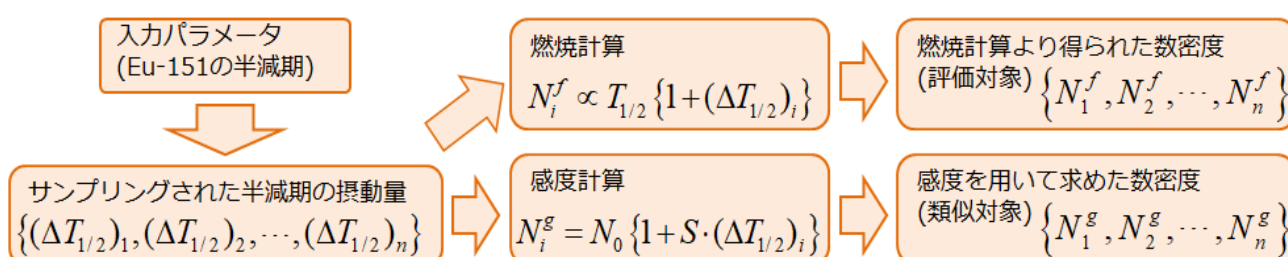


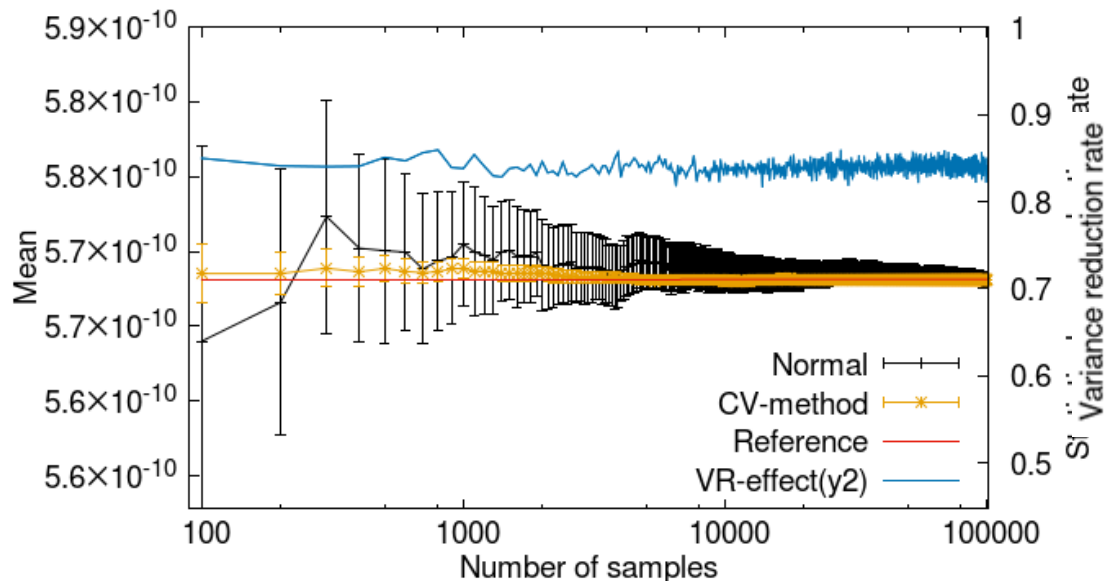
Fig.4.16 Image of UQ-method for burnup Calc. by using CV-method.

4.5.2 結果・考察

4.5.1 で述べた対象について、期待値、標準偏差の推定に CV 法を適用した結果を Fig.4.17 に示す。効果は自明であるが、標準偏差の推定の際にも推定された平均値が結果に大きく影響を与える値となるため、平均値の検討も行った。図中黒線が通常の RS 法、橙線が CV 法適用の結果を示し、誤差棒はブートストラップ法によって得られた 95%信頼区間を用いている。

図より分かる通り、前述までの結果より非線形性の強いことが判明している Eu-151 の核種数密度に対する不確かさ評価であっても、CV 法が効果を示していることが分かる。これは、入出力間の線形性が実現象の範囲内においては簡易モデルにおける最大 $S=0.1\sim 0.2$ 程度の値であり、問題なく CV 法による分散低減効果が期待できるためだと考えられる。

a. Mean estimation



b. Standard deviation estimation

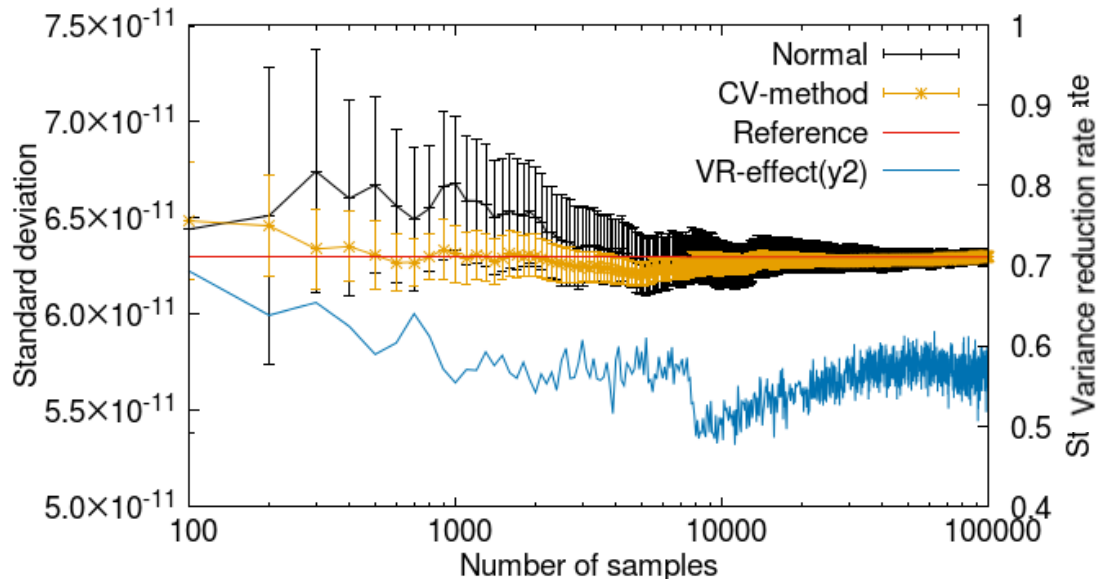


Fig.4.17 Result of statistics value estimation for burnup Calc. by using CV-method.

第5章 まとめ

RS法を用いた不確かさ評価の高速化のため、リバースサンプリング法と制御変量法の二つの分散低減手法を提案し検討を行った。

リバースサンプリング法に関しては、いわゆる不確かさの代表的な指標となる標準偏差推定の高速化には適用不可であったが、入出力間の線形性を判別するために有用となる歪度の高速な推定が可能となる可能性が見られた。また、入出力間が線形であるとき—すなわち出力の確率分布が正規分布であるとき—はより高速に不確かさを評価することができる決定論的手法である感度係数を用いた手法が適用可能であるため、歪度の高速な判定は不確かさ評価の高速化において非常に大きな意味を持つと言える。また、RS法によって統計量を推定する際は統計的な不確かさを考慮する必要があるが、限られたサンプルからそれを求めることができるブートストラップ法の適用性が確認でき、その過小評価の程度についても定量的に評価することができた。ただし、高速推定のためには少ない標本数で統計量の推定を行う必要があり、その範囲においてブートストラップ法が過小評価の傾向にある可能性が高いことは留意する必要がある。

対して、制御変量法について、期待値推定の高速化に有用である特徴を利用し、二乗の期待値を高速に推定することで定義式から分散(標準偏差)の推定に用いる手法を提案し、その妥当性の確認を行うことができた。また、CV法における適切な類似対象の選択として、燃焼計算に対する一次感度の式を用いることも検討し、非常に高い分散低減効果を得ることに成功した。これより、入出力間の非線形性が疑われ、感度係数を用いた不確かさ評価に適せず、かつ計算負荷の大きさによりRS法の適正も低いような体系において、より高速に精度の高い統計量推定が可能な手法としてCV法を適用できる可能性が高いことが判明した。

参考文献

- [1] 『第 48 回炉物理夏期セミナーテキスト(2016)』, 2016 年 8 月
- [2] Go Chiba, “Estimation of neutronics parameter sensitivity to nuclear data in random sampling-based uncertainty quantification calculations” *Annals of Nuclear Energy*(2015)
- [3]二平舜介, 『ランダムサンプリング法を用いた燃焼後核燃料の核種組成に対する不確かさ評価』, 2016 年 2 月
- [4]湯前祥二・鈴木輝好 (2000) 『モンテカルロ法の金融工学への応用』, 朝倉書店
- [5]Drik P.Krose ほか (2014), 『モンテカルロ法ハンドブック』伏見正則・逆瀬川浩孝監訳, 朝倉書店
- [6] 岩橋 大希ほか, 『ランダムサンプリング手法を用いた不確かさ評価における分散低減の検討 (2)燃焼計算における分散低減』, 日本原子力学会 2018 年春の年会(1F18), 2018 年 3 月
- [7]木下国治, 『ラテン超方格サンプリング法を用いた BWR 炉心特性の不確かさ評価』, 2014 年 2 月
- [8]汪 金芳・桜井裕仁 (2011), 『ブートストラップ入門』, 共立出版
- [9]小西 貞則ほか (2015), 『計算統計学の方法-ブートストラップ・EM アルゴリズム・MCMC-』,朝倉書店
- [10] Go Chiba, “Uncertainly quantification of neutronic parameters of light water reactor fuel cells with JENDL-4.0 covariance data” *Jarnal of Nuclear Science and Technology*,2013
- [11]J. Katakura, “JENDL FP Decay Data File 2011 and Fission Yields Data File 2011,” *JAEA-Data/Code 2011-025* (Mar 2012)
- [12]Go Chiba, “Important fission product nuclides indetification method for simplified burnup chain construction” *Jarnal of Nuclear Science and Technology*,2015

謝辞

本研究を進めるにあたって、指導教官であり、CBZ の開発者でもある千葉豪准教授には様々なご指摘・ご指導を賜りました。合わせて、研究室生活における 3 年間にわたっても非常に多くのことを学ばせていただき、深く感謝しております。また、報告会などを通じ助言や様々な気づき、感想、意見などを頂きました山本泰功助教、先輩がた、後輩の皆様、そして共同研究の際に非常に参考となるご意見をいただきました原子力規制庁の山本さん、藤田さんにも厚く御礼申し上げます。最後に、ともに初渡米(国際学会)に挑んだ片桐君を始めとする同期の皆様には、配属から3年間の研究生活に多くの彩りを添えていただきました。

改めて支えてくださった皆様に感謝いたします。ありがとうございました。

2019年2月1日 原子炉工学研究室にて