

核データ調整の式の導出を試みた¹

2024/1/4 千葉 豪

積分データを用いた核データ調整に関しては、これまでに多くの研究が行われ、多くの論文が発表されている。ベイズの定理を用いた核データ調整の定式化については、最近の殆どの論文では省略されているので、本稿では、改めて自分で導出を試みる²。

1 単一の積分データを用いた単一の核データの調整

核データ σ と、それに依存して決まる原子炉の積分パラメータ（積分データ） k を考える。なお、ここでの議論は、ある入力パラメータとそれに依存して決まる出力パラメータに対して適用できる一般的なものである。

核データ σ が正規分布に従うと仮定するならば、 σ の確率密度関数 $p(\sigma)$ は以下のように書ける。

$$p(\sigma) \propto \exp\left(-\frac{(\sigma - \bar{\sigma})^2}{2V_\sigma}\right) \quad (1)$$

ここで、 $\bar{\sigma}$ は σ の期待値、 V_σ は σ の分散を示す。

一方、 σ が与えられたときに k が従う確率密度関数 $p(k|\sigma)$ も以下のように正規分布に従うものとする。

$$p(k|\sigma) \propto \exp\left(-\frac{(k - \tau(\sigma))^2}{2V_k}\right) \quad (2)$$

ここで、 $\tau(\sigma)$ は σ を入力として用いた数値計算によって得られる k の値を示す。数値計算は不確かさを伴うため、 k は $\tau(\sigma)$ の周りに幅（分散 V_k ）をもって分布する確率変数となる。

また、 k が与えられたときの σ の確率密度関数 $p(\sigma|k)$ はベイズの定理より

$$p(\sigma|k) = \frac{p(\sigma)p(k|\sigma)}{p(k)} \propto p(\sigma)p(k|\sigma) \quad (3)$$

と与えられる³ ことから、 $p(\sigma|k)$ は次のように書ける。

$$p(\sigma|k) \propto \exp\left(-\frac{(\sigma - \bar{\sigma})^2}{2V_\sigma} - \frac{(k - \tau(\sigma))^2}{2V_k}\right) = \exp(-J) \quad (4)$$

ここで

$$J = \frac{(\sigma - \bar{\sigma})^2}{2V_\sigma} + \frac{(k - \tau(\sigma))^2}{2V_k} \quad (5)$$

である。この J 値を χ^2 値と呼ぶ場合もある。

積分データを用いた核データの調整は、積分データを考慮しない場合での σ の確率密度関数 $p(\sigma)$ に対して、積分データ k を考慮した場合での σ の確率密度関数 $p(\sigma|k)$ を考え、それが最大値をとる σ と、その確率分布の幅を求めることを意味する。このことは、 J 値、すなわち χ^2 値を最小にする σ を求める問題と言い換えることも出来、一般化最小二乗法として広く知られているものである [3]。

ここで、 $\tau(\sigma)$ を以下のように近似する。

$$\tau(\sigma) \approx \tau(\bar{\sigma}) + \left. \frac{d\tau(\sigma)}{d\sigma} \right|_{\sigma=\bar{\sigma}} (\sigma - \bar{\sigma}) = \bar{k} + S(\sigma - \bar{\sigma}) \quad (6)$$

なお、感度 S は以下で定義される。

$$S = \left. \frac{d\tau(\sigma)}{d\sigma} \right|_{\sigma=\bar{\sigma}} \quad (7)$$

すると、式 (5) で定義された J は次のように書ける。

$$J = \frac{(\sigma - \bar{\sigma})^2}{2V_\sigma} + \frac{(k - \bar{k} + S\bar{\sigma} - S\sigma)^2}{2V_k} = \frac{(\sigma - \bar{\sigma})^2}{2V_\sigma} + \frac{(\alpha - S\sigma)^2}{2V_k} \quad (8)$$

¹ /Document/Education/NuclearDataAdjustment

²調整後の核データの期待値の導出については、JAEA 横山氏が執筆した文献がある [1]。また、JAEA の岩元大樹氏が執筆した公開報告書 [2] の第 3 章に同様かつより厳密な記述がある。

³ σ と k の同時確率を $p(\sigma, k)$ とすると、 $p(\sigma, k) = p(\sigma|k)p(k) = p(k)p(\sigma|k)$ より、式 (3) が得られる。

ここで、 $\alpha = k - \bar{k} + S\bar{\sigma}$ である。これをさらに整理すると

$$J = \left(\frac{1}{2V_\sigma} + \frac{S^2}{2V_k} \right) \sigma^2 - \left(\frac{\bar{\sigma}}{V_\sigma} + \frac{\alpha S}{V_k} \right) \sigma + \frac{\bar{\sigma}^2}{2V_\sigma} + \frac{\alpha^2}{2V_k} \quad (9)$$

と書けるので、 $p(\sigma|k)$ は次のように書き直せることが分かる。

$$\begin{aligned} p(\sigma|k) &= \exp(-J) \propto \exp\left(-\left(\left(\frac{1}{2V_\sigma} + \frac{S^2}{2V_k}\right)\sigma^2 - \left(\frac{\bar{\sigma}}{V_\sigma} + \frac{\alpha S}{V_k}\right)\sigma\right)\right) \\ &= \exp(-(\beta_1\sigma^2 - \beta_2\sigma)) = \exp(-\beta_1(\sigma^2 - \beta_2'\sigma)) = \exp\left(-\beta_1\left(\left(\sigma - \frac{\beta_2'}{2}\right)^2 + \frac{\beta_2'^2}{4}\right)\right) \\ &\propto \exp\left(-\frac{\left(\sigma - \frac{\beta_2'}{2}\right)^2}{2/(2\beta_1)}\right) \end{aligned} \quad (10)$$

これより、 $p(\sigma|k)$ は、平均値 $\beta_2'/2$ 、分散 $1/(2\beta_1)$ の正規分布に従うことが分かる。正規分布であるため、この平均値は確率を最大化させる最頻値と一致する。

以上より、 k が得られたときの σ の平均値 $\bar{\sigma}_k$ は以下となる。

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_k = \frac{\beta_2'}{2} &= \left(\frac{\bar{\sigma}}{V_\sigma} + \frac{\alpha S}{V_k} \right) / \left(\frac{1}{V_\sigma} + \frac{S^2}{V_k} \right) = \left(\frac{\bar{\sigma}}{V_\sigma} + \frac{(k - \bar{k} + S\bar{\sigma})S}{V_k} \right) / \left(\frac{1}{V_\sigma} + \frac{S^2}{V_k} \right) \\ &= (V_k\bar{\sigma} + SV_\sigma(k - \bar{k} + S\bar{\sigma})) / (V_k + S^2V_\sigma) = ((V_k + S^2V_\sigma)\bar{\sigma} + SV_\sigma(k - \bar{k})) / (V_k + S^2V_\sigma) \\ &= \bar{\sigma} + \frac{SV_\sigma}{V_k + S^2V_\sigma}(k - \bar{k}) \end{aligned} \quad (11)$$

また、分散 V_{σ_k} は以下となる。

$$V_{\sigma_k} = \frac{1}{2\beta_1} = \frac{V_\sigma V_k}{V_k + S^2V_\sigma} = V_\sigma - \frac{S^2V_\sigma^2}{V_k + S^2V_\sigma} \quad (12)$$

これら $\bar{\sigma}_k$ 、 V_{σ_k} は、以下のように変形すると理解しやすいであろう。

$$\bar{\sigma}_k = \bar{\sigma} + \frac{S^2V_\sigma}{V_k + S^2V_\sigma} \left(\frac{k - \bar{k}}{S} \right) = \bar{\sigma} + \gamma \left(\frac{k - \bar{k}}{S} \right), \quad (13)$$

$$V_{\sigma_k} = V_\sigma - \frac{S^2V_\sigma}{V_k + S^2V_\sigma} V_\sigma = V_\sigma - \gamma V_\sigma \quad (14)$$

式 (13) に現れている $(k - \bar{k})$ は、 k に関して核データ $\bar{\sigma}$ から予測される値 \bar{k} と、実際に測定によって得られた値 k の差異を示している。これを S で除することによって、 k に関する予測値と実測値の差異を核データの差異に置き換えた量となっている。また、 γ については、 S^2V_σ が σ の不確かさによって生じる k の分散であることを考えると、「 k における予測値と実測値の差異の要因において σ の不確かさが及ぼす影響の割合」を示していると考えられる。式 (13) では、 $(k - \bar{k})/S$ に対して γ が乗せられており、 γ の値が大きいほど $\bar{\sigma}_k$ と $\bar{\sigma}$ の差は大きくなることが分かる。また、 V_{σ_k} においては、 V_σ からの減少量が γ に比例していることが分かる。これはつまり、核データの調整に用いた積分データにおいて σ に起因する不確かさの寄与が大きいほど、核データの調整により σ の不確かさを低減できることを意味している。また、 V_σ の減少量には \bar{k} と k との差は影響していないことも指摘しておく。

2 複数の積分データを用いた場合の複数の核データの調整

ここでは複数の積分データを用いたときの複数の核データの調整について述べる。

核データを T 、積分データを R と、それぞれベクトル表記することとする。また、 T を用いた数値計算で得られる R を $R(T)$ と書くこととする。

核データ T が従う確率分布を $p(T)$ 、積分データ R が従う確率分布を $p(R)$ とし、 T 、 R の同時確率を $p(T, R)$ とする。 $p(T, R)$ は条件付き確率を用いて次のように書くことができる。

$$p(T, R) = p(T|R)p(R) = p(R|T)p(T) \quad (15)$$

ここで、 $p(\mathbf{R}|\mathbf{T})$ は核データとして \mathbf{T} が与えられたときに \mathbf{R} が従う確率分布である。また、 $p(\mathbf{T}|\mathbf{R})$ も同様な条件付き確率である。

核データ \mathbf{T} が従う確率分布 $p(\mathbf{T})$ が、期待値が \mathbf{T}_0 、共分散行列が \mathbf{V}_σ である多変量正規分布に従うとすると、 $p(\mathbf{T})$ は次のように記述される。

$$p(\mathbf{T}) \propto \exp\left(-\frac{(\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)}{2}\right) \quad (16)$$

また、核データとして \mathbf{T} が与えられたときに \mathbf{R} が従う条件付き確率 $p(\mathbf{R}|\mathbf{T})$ は、前節と同様の考え方に基づいて、期待値 $\mathbf{R}(\mathbf{T})$ 、共分散行列 \mathbf{V}_m の多変量正規分布に従うと考えることができ、次のように書くことができる。

$$p(\mathbf{R}|\mathbf{T}) \propto \exp\left(-\frac{(\mathbf{R} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))^T \mathbf{V}_m^{-1} (\mathbf{R} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))}{2}\right) \quad (17)$$

ここで、 \mathbf{V}_m は核データを用いた積分データの計算値に対する共分散行列（数値計算に起因する誤差）である。

\mathbf{R} に関する情報が全く与えられていない場合は、 $p(\mathbf{T}, \mathbf{R}) = p(\mathbf{R}|\mathbf{T})p(\mathbf{T})$ を最大化する \mathbf{T} 、 \mathbf{R} として、自明であるが以下が与えられるであろう。

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_0 \quad (18)$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{T}_0) \quad (19)$$

一方、積分データ \mathbf{R} について測定によって $\tilde{\mathbf{R}}$ が得られたとき、核データ \mathbf{T} が従う確率分布 $p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}})$ はベイズの定理より次のように書ける。

$$p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}}) = p(\tilde{\mathbf{R}}|\mathbf{T})p(\mathbf{T})/p(\tilde{\mathbf{R}}) \propto p(\tilde{\mathbf{R}}|\mathbf{T})p(\mathbf{T}) \quad (20)$$

従って、 $p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}})$ は次のように書ける。

$$p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}}) \propto \exp\left(-\frac{(\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))^T \mathbf{V}_m^{-1} (\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))}{2} - \frac{(\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)}{2}\right) \quad (21)$$

ただし、実際には、積分データの真値を測定によって得ることは出来ないため、 $\tilde{\mathbf{R}}$ は誤差 \mathbf{V}_e をもった確率分布として与えられることになる。そこで、積分データの測定誤差 \mathbf{V}_e を $\mathbf{R}(\mathbf{T})$ に対して考慮すると、式 (17) は次のように変形される。

$$p(\tilde{\mathbf{R}}|\mathbf{T}) \propto \exp\left(-\frac{(\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))^T (\mathbf{V}_e + \mathbf{V}_m)^{-1} (\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))}{2}\right) \quad (22)$$

これを用いると、式 (21) は次のように書ける。

$$p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}}) \propto \exp\left(-\frac{(\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))^T (\mathbf{V}_e + \mathbf{V}_m)^{-1} (\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))}{2} - \frac{(\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)}{2}\right) \quad (23)$$

ここで、積分データ $\tilde{\mathbf{R}}$ が得られたときの核データ \mathbf{T} が従う確率分布 $p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}})$ における最頻値 $\hat{\mathbf{T}}$ を求めることを考える。最頻値は以下の関数 J を最小とするものに対応する。

$$J = (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) + (\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))^T (\mathbf{V}_e + \mathbf{V}_m)^{-1} (\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T})) \quad (24)$$

また、 J を最小化する \mathbf{T} は、以下の式から計算することが出来る。

$$\frac{dJ}{d\mathbf{T}} = 0 \quad (25)$$

式 (25) を計算するために、 $\mathbf{R}(\mathbf{T})$ を次のように近似する。

$$\mathbf{R}(\mathbf{T}) \approx \mathbf{R}(\mathbf{T}_0) + \mathbf{G}(\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \quad (26)$$

ここで、 \mathbf{G} は感度係数行列であり、行数は積分データ数、列数は断面積数である。これを用いると、 J は次のように書ける。

$$J = \mathbf{X}^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} \mathbf{X} + (\mathbf{R}_{00} - \mathbf{G}\mathbf{X})^T \mathbf{V}_{em}^{-1} (\mathbf{R}_{00} - \mathbf{G}\mathbf{X}) \quad (27)$$

ここで、

$$\mathbf{X} = \mathbf{T} - \mathbf{T}_0 \quad (28)$$

$$\mathbf{R}_{00} = \tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}_0) \quad (29)$$

$$\mathbf{V}_{em} = \mathbf{V}_e + \mathbf{V}_m \quad (30)$$

である。これを式 (25) に代入すると

$$\mathbf{X}^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} - (\mathbf{R}_{00} - \mathbf{G}\mathbf{X})^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G} = \mathbf{0} \quad (31)$$

が得られる⁴。また、さらにこれを整理して

$$\mathbf{X} = (\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{R}_{00} \quad (34)$$

が得られる。この式だと逆行列を含む行列の逆行列となっており見通しが悪いので、さらなる変形を行う。この右辺について

$$(\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} = \mathbf{A} (\mathbf{G}\mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} \quad (35)$$

とおくと、 \mathbf{A} として

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T \quad (36)$$

が得られることから、式 (34) は

$$\mathbf{X} = \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T (\mathbf{G}\mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} \mathbf{R}_{00} \quad (37)$$

と書き直せることが分かる。これより、確率 $p(\mathbf{T}|\mathbf{R}_0)$ を最大化させる \mathbf{T} 、すなわち $p(\mathbf{T}|\mathbf{R}_0)$ の最頻値 $\hat{\mathbf{T}}$ は

$$\hat{\mathbf{T}} = \mathbf{T}_0 + \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T (\mathbf{G}\mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} (\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}_0)) \quad (38)$$

と得られる。

次に、確率分布 $p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}})$ における分散を求めよう。式 (24) は以下のように書くことができる。

$$J = (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) + (\mathbf{G}\mathbf{T} - \boldsymbol{\alpha})^T \mathbf{V}_{em}^{-1} (\mathbf{G}\mathbf{T} - \boldsymbol{\alpha}) \quad (39)$$

ここで、

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{G}\mathbf{T}_0 + \mathbf{R}_{00} \quad (40)$$

である。 $\mathbf{T} = \hat{\mathbf{T}}$ のとき J が極値をとることから、式 (39) は $\hat{\mathbf{T}}$ を用いて以下のように書き直せる⁵。

$$J = (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}})^T (\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G}) (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}}) + \tilde{J} = J_0 + \tilde{J} \quad (42)$$

従って、 J_0 について

$$J_0 = (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}})^T (\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G}) (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}}) = (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}})^T \hat{\mathbf{V}}^{-1} (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}}) \quad (43)$$

のように変形したときの $\hat{\mathbf{V}}$ が $p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}})$ の分散となる。すなわち、 $(\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})$ の逆行列を求める問題に帰着する。

⁴ \mathbf{A} をベクトル、 \mathbf{B} を対称行列としたとき、スカラー量 $\mathbf{A}^T(t)\mathbf{B}\mathbf{A}(t)$ の t に対する微分について

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{A}^T(t)\mathbf{B}\mathbf{A}(t)) = \frac{d\mathbf{A}^T}{dt} \mathbf{B}\mathbf{A} + \mathbf{A}^T \mathbf{B} \frac{d\mathbf{A}}{dt} \quad (32)$$

が成り立つ。 $\mathbf{A}^T \mathbf{B} \mathbf{C} = \mathbf{C}^T \mathbf{B}^T \mathbf{A}$ 、また \mathbf{B} が対称行列なので $\mathbf{A}^T \mathbf{B} \mathbf{C} = \mathbf{C}^T \mathbf{B} \mathbf{A}$ が成り立つため

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{A}^T(t)\mathbf{B}\mathbf{A}(t)) = 2\mathbf{A}^T \mathbf{B} \frac{d\mathbf{A}}{dt} \quad (33)$$

となる。

⁵ このあたりの議論は平方完成と呼ばれる考え方を導入することで簡潔になることを JAEA 横山氏からご教示いただいた [4]。なお、式 (39) の右辺第二項については、

$$(\mathbf{G}\mathbf{T} - \boldsymbol{\alpha})^T \mathbf{V}_{em}^{-1} (\mathbf{G}\mathbf{T} - \boldsymbol{\alpha}) = (\mathbf{T}^T \mathbf{G}^T - \boldsymbol{\alpha}^T) \mathbf{V}_{em}^{-1} (\mathbf{G}\mathbf{T} - \boldsymbol{\alpha}) \quad (41)$$

と書ける。

式 (35)、(36) より

$$(V_\sigma^{-1} + G^T V_{em}^{-1} G)^{-1} G^T V_{em}^{-1} = V_\sigma G^T (G V_\sigma G^T + V_{em})^{-1} \quad (44)$$

が得られる。この両辺の転置をとることで、以下の式が得られる。

$$V_{em}^{-1} G (V_\sigma^{-1} + G^T V_{em}^{-1} G)^{-1} = (G V_\sigma G^T + V_{em})^{-1} G V_\sigma \quad (45)$$

これを以下のように変形する。

$$\begin{aligned} G (V_\sigma^{-1} + G^T V_{em}^{-1} G)^{-1} &= V_{em} (G V_\sigma G^T + V_{em})^{-1} G V_\sigma \\ G (V_\sigma^{-1} + G^T V_{em}^{-1} G)^{-1} &= (G V_\sigma G^T + V_{em} - G V_\sigma G^T) (G V_\sigma G^T + V_{em})^{-1} G V_\sigma \\ G (V_\sigma^{-1} + G^T V_{em}^{-1} G)^{-1} &= G V_\sigma - G V_\sigma G^T (G V_\sigma G^T + V_{em})^{-1} G V_\sigma \\ G (V_\sigma^{-1} + G^T V_{em}^{-1} G)^{-1} &= G (V_\sigma - V_\sigma G^T (G V_\sigma G^T + V_{em})^{-1} G V_\sigma) \end{aligned} \quad (46)$$

ここで、 $GX = GY$ のときに $X = Y$ が成り立つか考えよう。積分データ数を p 、核データ数を q としたとき、 G は $p \times q$ の行列、 X 、 Y は $q \times q$ の行列となる。ただし、 $p < q$ である。この式は $G(X - Y) = GZ = \mathbf{0}$ と書き直せる。正方行列である Z が non-singular であるとするならば、 Z^{-1} を両辺の右から乗じることで $G = \mathbf{0}$ になってしまうため、 Z は singular でなければならないことになる。 $Z = \mathbf{0}$ 、すなわち $X = Y$ の場合はこの条件が満足され、以下の式が得られることになる。

$$(V_\sigma^{-1} + G^T V_{em}^{-1} G)^{-1} = V_\sigma - V_\sigma G^T (G V_\sigma G^T + V_{em})^{-1} G V_\sigma \quad (47)$$

一方、行列の逆行列は一意に求まらなければならないことから、上の式が $(V_\sigma^{-1} + G^T V_{em}^{-1} G)$ の逆行列の表式であることが言える。

以上の議論より、最終的に J_0 として以下が得られる。

$$J_0 = (T - \hat{T})^T (V_\sigma - V_\sigma G^T (V_{em} + G V_\sigma G^T)^{-1} G V_\sigma)^{-1} (T - \hat{T}) \quad (48)$$

すなわち、確率分布 $p(T|\hat{R})$ における分散 \hat{V} は以下となる。

$$\hat{V} = V_\sigma - V_\sigma G^T (V_{em} + G V_\sigma G^T)^{-1} G V_\sigma \quad (49)$$

調整後の核データを用いて、ある炉物理パラメータの予測を行ったときの精度について考えよう。この炉物理パラメータの感度ベクトルを \hat{G} とするならば、式 (49) の両辺の左から \hat{G} 、右から \hat{G}^T を作用させることで、この炉物理パラメータの不確かさが以下のように求められる。

$$\hat{G} \hat{V} \hat{G}^T = \hat{G} V_\sigma \hat{G}^T - \hat{G} V_\sigma G^T (V_{em} + G V_\sigma G^T)^{-1} G V_\sigma \hat{G}^T \quad (50)$$

上式の右辺第一項が調整前の核データを用いたときの予測精度に対応し、右辺第二項が核データ調整による予測精度向上の程度を示している。この右辺第二項における $\hat{G} V_\sigma G^T$ は、核データ調整に用いた積分データ群と着目している炉物理パラメータの共分散に対応するため、これを \tilde{V} と記述する。 \tilde{V} は、核データ調整に用いた積分データ群の個数を要素数とするベクトルである。また、右辺第二項における $(V_{em} + G V_\sigma G^T)$ は実験値と計算値の不確かさも含めた、調整前の核データを用いたときの予測精度に対応する共分散行列であるが、これを V' とする。以上で定義した \tilde{V} 、 V' を用いると、右辺第二項は以下のように書き直せる。

$$-\hat{G} V_\sigma G^T (V_{em} + G V_\sigma G^T)^{-1} G V_\sigma \hat{G}^T = -\tilde{V} V'^{-1} \tilde{V}^T = -\sum_i \sum_j \tilde{V}_i \tilde{V}_j V'_{i,j}^{-1} = -\sum_i \tilde{V}_i^2 V'_{i,i}^{-1} - \sum_i \sum_{j \neq i} \tilde{V}_i \tilde{V}_j V'_{i,j}^{-1} \quad (51)$$

つまり、核データ調整による炉物理パラメータの予測精度の向上は、核データ調整に用いた積分データ毎の寄与 ($\sum_i \tilde{V}_i^2 V'_{i,i}^{-1}$) と積分データ間の相関により生じる寄与 ($\sum_i \sum_{j \neq i} \tilde{V}_i \tilde{V}_j V'_{i,j}^{-1}$) に分けて考えることが出来ると言える [5]。

3 Monte Carlo Bayesian Analysis (MOCABA) からの式の導出

昨今、積分データを用いた予測精度の向上（データ同化）に関する研究は世界的に活発に行われており、その手法は大きく分けて以下の3つに分類されるようである [6]。

- Generalized Linear Least Squares (GLLS)
- Monte Carlo Bayesian Analysis (MOCABA)
- Bayesian Monte Carlo (BMC)

GLLS は上述した積分データを用いる核データ調整法に該当し、積分データの核データに対する依存性を一次近似で取り扱う（感度係数を使う）という仮定が導入される。GLLS では、積分データが与えられたときに核データが新たに従う確率分布が最頻値をとるように核データを更新するが、MOCABA では、ある積分データについて、その測定値が与えられたときに積分データが新たに従う確率分布が最頻値をとるように積分データを更新するという考え方を採る。MOCABA に対して上記の一次近似を導入することで GLLS に一致することが示されており [7]、MOCABA は GLLS を一般化したものと考えてもよいかもしれない。なお、MOCABA では感度係数の導入が不要であり、その名の通り Monte Carlo 法ベースでのデータ同化が可能となることが特徴である。感度係数が不要なデータ同化の方法としては、名大グループの研究成果も挙げられる [8] が、基本的に両者は同一のものと考えてよいであろう⁶。

核データ T_0 を考え、これによって計算される積分データ R の値を R_0 とする。このとき、積分データ R が従う確率分布 $p(R)$ を以下のように記述する。

$$p(R) \propto \exp\left(-\frac{(R - R_0)^T V_R^{-1} (R - R_0)}{2}\right) \quad (52)$$

ここで、 V_R は核データ（数値計算手法も含む？）に起因する R の不確かさ（共分散行列）を示す。

一方、 R が得られたとしたときの測定値 \hat{R} が従う確率分布 $p(\hat{R}|R)$ は以下のように書ける。

$$p(\hat{R}|R) \propto \exp\left(-\frac{(\hat{R} - R)^T V_E^{-1} (\hat{R} - R)}{2}\right) \quad (53)$$

ここで、 V_E は測定に起因する \hat{R} の不確かさ（共分散行列）を示す。

ベイズの定理より、 \hat{R} が得られたときの R が従う確率分布 $p(R|\hat{R})$ は以下のように書ける。

$$p(R|\hat{R}) \propto p(R)p(\hat{R}|R) \propto \exp\left\{-\frac{1}{2}\left((R - R_0)^T V_R^{-1} (R - R_0) + (\hat{R} - R)^T V_E^{-1} (\hat{R} - R)\right)\right\} = \exp\left(-\frac{1}{2}J\right) \quad (54)$$

ここで

$$J = (R - R_0)^T V_R^{-1} (R - R_0) + (R - \hat{R})^T V_E^{-1} (R - \hat{R}) \quad (55)$$

である。一方、 R が得られたとしたときの測定値 \hat{R} が従う確率分布 $p(\hat{R}|R)$ は以下のように書ける。

$$p(\hat{R}|R) \propto \exp\left(-\frac{(\hat{R} - R)^T V_E^{-1} (\hat{R} - R)}{2}\right) \quad (56)$$

ここで、 V_E は測定に起因する \hat{R} の不確かさ（共分散行列）を示す。

$p(R|\hat{R})$ を最大化させる（すなわち J を最小化させる） R を \tilde{R} としたとき、 $\frac{dJ}{d\tilde{R}} = 0$ を満足することから、以下の式を得ることが出来る。

$$\tilde{R} = (V_R^{-1} + V_E^{-1})^{-1} V_R^{-1} R_0 + (V_R^{-1} + V_E^{-1})^{-1} V_E^{-1} \hat{R} \quad (57)$$

これより、 \tilde{R} は、核データ T_0 から求まる R_0 と測定から求まる \hat{R} の荷重平均として記述されることが分かる。また、荷重はそれぞれの共分散行列の逆行列となっており、不確かさの寄与が小さいほど荷重は大きくなる。

⁶名大グループの方法は、GLLS の式に対して、核データの共分散行列と感度係数行列の積などがランダムサンプリングの結果から推定できるということに着目したものである。

一般的に \tilde{R} は R_0 からの変動として記述されることが多いので、上式を以下のように変形する。

$$\begin{aligned}\tilde{R} &= (\mathbf{V}_R^{-1} + \mathbf{V}_E^{-1})^{-1} (\mathbf{V}_R^{-1} \mathbf{R}_0 + \mathbf{V}_E^{-1} \hat{R}) \\ &= (\mathbf{V}_R^{-1} + \mathbf{V}_E^{-1})^{-1} ((\mathbf{V}_R^{-1} + \mathbf{V}_E^{-1} - \mathbf{V}_E^{-1}) \mathbf{R}_0 + \mathbf{V}_E^{-1} \hat{R}) \\ &= \mathbf{R}_0 + (\mathbf{V}_R^{-1} + \mathbf{V}_E^{-1})^{-1} \mathbf{V}_E^{-1} (\hat{R} - \mathbf{R}_0)\end{aligned}\quad (58)$$

J を最小化する R として \tilde{R} が得られたことから、 J を以下のように記述することができる。

$$J = (\mathbf{R} - \tilde{R})^T (\mathbf{V}_R^{-1} + \mathbf{V}_E^{-1}) (\mathbf{R} - \tilde{R}) + J_0 \quad (59)$$

従って、 $p(\mathbf{R}|\hat{R})$ の分散 $\mathbf{V}_{\tilde{R}}$ は

$$\mathbf{V}_{\tilde{R}} = (\mathbf{V}_R^{-1} + \mathbf{V}_E^{-1})^{-1} \quad (60)$$

と記述されることが分かる。スカラー量との類似性から、この式の右辺は以下のように変形できる。

$$(\mathbf{V}_R^{-1} + \mathbf{V}_E^{-1})^{-1} = \mathbf{V}_R - \mathbf{V}_R (\mathbf{V}_R + \mathbf{V}_E)^{-1} \mathbf{V}_R = \mathbf{V}_E - \mathbf{V}_E (\mathbf{V}_R + \mathbf{V}_E)^{-1} \mathbf{V}_E \quad (61)$$

以上を用いることによって、積分データ R に対して新たな測定データ \hat{R} が得られたときに $p(\mathbf{R}|\hat{R})$ の最頻値 (期待値) \tilde{R} として

$$\tilde{R} = \mathbf{R}_0 + \mathbf{V}_R (\mathbf{V}_R + \mathbf{V}_E)^{-1} (\hat{R} - \mathbf{R}_0) \quad (62)$$

が、分散 $\mathbf{V}_{\tilde{R}}$ として

$$\mathbf{V}_{\tilde{R}} = \mathbf{V}_R - \mathbf{V}_R (\mathbf{V}_R + \mathbf{V}_E)^{-1} \mathbf{V}_R \quad (63)$$

が、それぞれ得られる⁷。

これらの式に対して、感度係数行列 G を用いた以下の近似式を導入することによって GLLS の表式を得ることが出来る。

$$\tilde{R} - \mathbf{R}_0 \approx G(\tilde{T} - T_0), \quad (64)$$

$$\mathbf{V}_R \approx G \mathbf{V}_T G^T \quad (65)$$

ここで、 \tilde{T} はデータ同化後の核データを、 \mathbf{V}_T は核データの共分散行列を示す。

参考文献

- [1] 横山賢治、炉定数調整法と拡張バイアス因子法の理論統合、炉物理の研究、**70**, (2018). (available from https://rpg.jaea.go.jp/else/rpd/annual_report/pdf70/No70-04-01.pdf).
- [2] 岩元大樹、他、核変換物理実験施設を用いた炉物理実験による加速器駆動核変換システム炉物理パラメータの不確かさの低減効果、JAEA-Research 2014-033, (2014). (available from <https://jopss.jaea.go.jp/pdfdata/JAEA-Research-2014-033.pdf>).
- [3] D.L. Smith, 'Probability, statistics, and data uncertainties in nuclear science and technology,' In: Vol. 4 of Neutron Physics and Nuclear Data in Science and Technology. American Nuclear Society (1991).
- [4] 横山賢治、平方完成を用いた炉定数調整法の理論式の導出、(2018).
- [5] G. Palmiotti, *et al.*, 'A-priori and a-posteriori covariance data in nuclear cross section adjustments: issues and challenges,' *Nucl. Data Sheets*, **123**, p.41-50, (2015).
- [6] D.J. Siefman, *et al.*, 'Case study of data assimilation methods with the LWR-Proteus Phase II experimental campaign,' *Proc. of M&C2017*, Jeju, Korea (2017).

⁷この手続きでは、 \tilde{R} を求める際に若干の式変形が必要となる。

- [7] A. Hofer, *et al.*, ‘MOCABA: a general Monte Carlo-Bayes procedure for improved predictions of integral functions of nuclear data,’ *Ann. Nucl. Energy*, **77**, pp. 514-521, (2015).
- [8] T. Watanabe, *et al.*, ‘Cross section adjustment method based on random sampling technique,’ *J. Nucl. Sci. Technol.*, **51**, pp.590-599, (2014).

以下の記述は、Y. Ronen 編、CRC press 発行の「Uncertainty Analysis」の Chapter 6 (Gandini 著) の V. Adjustment Methods、I. Model Errors での記述を参考にしたものである (全然違うことを言っているかもしれませんが、、、)。

核データとして σ を考え、この核データの調整に使う積分データ (モックアップデータ) を p_m 、調整後核データで予測を行う積分データ (設計データ) を p_t とする。ここで、積分データに対する計算値を、感度係数が 1.0 の擬似的な核データと考えるものとし、擬似的なものも含めて核データとして σ 、 p_m 、 p_t を考えるものとする⁸。また、 p_m 、 p_t の間には相関が存在するものとし、それを C とする。この 3 つの核データに対する共分散行列 M を以下のように定義する。

$$M = \begin{pmatrix} V_\sigma & 0 & 0 \\ 0 & V_m & \alpha \\ 0 & \alpha & V_t \end{pmatrix} \quad (66)$$

ここで、 V_m はモックアップデータに対する計算値の (解析手法に起因する) 分散、 V_t は設計データに対する同様の分散を示し、 $\alpha = C\sqrt{V_m V_t}$ である。

p_m 、 p_t の σ に対する感度を便宜的に 1.0 とした場合、 p_m 、 p_t の擬似的なものも含んだ核データに対する感度係数ベクトル G_m 、 G_t は以下のように定義される。

$$G_m = (1 \ 1 \ 0), \quad (67)$$

$$G_t = (1 \ 0 \ 1) \quad (68)$$

以上の前提条件のもとで、 p_m を用いて核データ調整を行ったとする。このとき、調整後の共分散行列 M' は以下となる。

$$M' = M - M G_m^T (G_m M G_m^T + V_{m,exp})^{-1} G_m M \quad (69)$$

ここで、 $V_{m,exp}$ は p_m に対する実験値の誤差を示す。なお、 p_m に対する計算値は擬似的な核データとして扱われているため、その誤差はこの式には陽には現れていない。

これを計算すると以下を得る。

$$M' = \begin{pmatrix} V_\sigma & 0 & 0 \\ 0 & V_m & \alpha \\ 0 & \alpha & V_t \end{pmatrix} - \frac{1}{V_\sigma + V_m + V_{m,exp}} \begin{pmatrix} V_\sigma^2 & V_\sigma V_m & \alpha V_\sigma \\ V_\sigma V_m & V_m^2 & \alpha V_m \\ \alpha V_\sigma & \alpha V_m & \alpha^2 \end{pmatrix} \quad (70)$$

従って、調整後の核データ (計算値に相当する擬似的なものも含む) を用いて p_t を計算したときのその不確かさは以下のように計算される。

$$G_t M' G_t^T = (V_\sigma + V_t) - \frac{(V_\sigma + \alpha)^2}{V_\sigma + V_m + V_{m,exp}} = (V_\sigma + V_t) - \frac{(V_\sigma + C\sqrt{V_m V_t})^2}{V_\sigma + V_m + V_{m,exp}} \quad (71)$$

調整後の核データ (と解析手法) を用いたときの設計データの予測値の不確かさは、上記の $G_t M' G_t^T$ そのものとなる (設計データの計算値の不確かさは M' に含まれているため)。従って、モックアップデータと設計データの解析手法に起因する不確かさの相関 C がゼロである場合には、設計データの予測値の不確かさは

$$V_\sigma \frac{V_m + V_{m,exp}}{V_\sigma + V_m + V_{m,exp}} + V_t \quad (72)$$

となる。すなわち、モックアップデータにおいて核データ σ に起因する不確かさの寄与が大きいほど、設計データにおける σ に起因する不確かさは小さくなる。また、設計データにおける解析手法に起因する不確かさは V_t となる。一方、 C が非ゼロである場合は、設計データの予測値の不確かさは以下となる。

$$V_\sigma \frac{V_m + V_{m,exp}}{V_\sigma + V_m + V_{m,exp}} + V_t \left(1 - \frac{C\sqrt{V_m V_t}}{V_\sigma + V_m + V_{m,exp}} \right) \quad (73)$$

すなわち、この相関が正側に大きい値をとるほど、設計データにおける計算手法に起因する不確かさは小さくなる。

⁸モックアップデータの実験値についても同様の扱いが可能であるが、その場合、実験値に対応する (後述する) 感度係数は-1.0 となる。