# 実効増倍率の核データに起因する不確かさの定量化の基礎[1]

2024/1/4　千葉　豪

実効増倍率の計算値は用いる核データに依存する。核データというものは、真値ではなく、あくまで「評価値」であるため、不確かさが伴う[2]。核データが不確かであるならば、それに基づいて決まる実効増倍率も不確かであり、実効増倍率の計算値にも不確かさが伴うことになる。本稿は、核データの不確かさにより、実効増倍率の計算値の不確かさがどの程度の値となるか、定量的に評価する方法について説明する。

## 1　核データの不確かさ、分散、共分散

核データには不確かさが伴うことから、核データはその評価値を期待値とした確率変数と考えることができるであろう。そこで、核データ $i$ の評価値を $\bar{\sigma}_i$ と書くこととする。$p(\sigma_i)$ を、核データ $i$ の真値が $\sigma_i$ である確率密度関数と考えると、核データ $i$ の評価値（期待値）は以下のように書ける。

$$\bar{\sigma}_i = \int \sigma_i p(\sigma_i) d\sigma_i \tag{1}$$

また、$p(\sigma_i)$ の分布の広がりを示す核データ $i$ の分散 $V_{\sigma_i}$ は以下の式で書ける。

$$V_{\sigma_i} = \int (\sigma_i - \bar{\sigma}_i)^2 p(\sigma_i) d\sigma_i \tag{2}$$

なお、分散の平方根は標準偏差となる。

確率変数を連続で考えるとイメージがつきにくい場合があるため、次は離散的に（標本ベースで）考えることとする。

核データ $i$ について $J$ 回の測定を行ったとし、$j$ 回目の測定データを $\sigma_i^j$ とする。さて、$J$ 個の測定データ $\sigma_i^j$ があるとき、$\sigma_i$ の推定をどのように行うだろうか。おそらく、次のように平均をとるであろう。

$$\frac{\sum_{j=1}^{J} \sigma_i^j}{J} = \bar{\sigma}_i \tag{3}$$

式に書いてあるように、これがそのまま核データ $i$ の期待値となり、この式は連続型の式 (1) に対応する。一方、核データ $i$ の分布の広がりはどう書けるであろうか。おそらく次の式を用いるものと思う。

$$\frac{\sum_{j=1}^{J} \left(\sigma_i^j - \bar{\sigma}_i\right)^2}{J-1} = V_{\sigma_i} \tag{4}$$

式に書いてあるように、これがそのまま分散となり、この式は連続型の式 (2) に対応する[3]。

さて、次はふたつの異なる核データ $i$ と $i'$ を同時に考えてみよう。これらの核データについて $J$ 回の測定を行ったとし、$j$ 回目の測定データのペアを $(\sigma_i^j, \sigma_{i'}^j)$ とする。このデータに対して、以下のような統計量を定義する。

$$\frac{\sum_{j=1}^{J} \left(\sigma_i^j - \bar{\sigma}_i\right)\left(\sigma_{i'}^j - \bar{\sigma}_{i'}\right)}{J-1} \tag{5}$$

[1] /Document/Education/UQ

[2] なお、「核データの不確かさ」を、核データ自体がそもそも確率事象に関係するパラメータであることに由来するものと誤解する向きがあるので、ここで補足する。例として、核分裂反応あたりに発生する平均中性子数 $\bar{\nu}$ について考えよう。核分裂反応あたりに発生する中性子数は一回一回の核分裂反応毎に異なり、2 個になる場合も、3 個になる場合も、さらには 1 個や 4 個になる場合もある。その平均値が $\bar{\nu}$ であり、例えば熱中性子による U-235 の核分裂反応では $\bar{\nu}$ は 2.4 程度となることがよく知られている。我々がここで考えている「核データの不確かさ」は、**$\nu$ のばらつきではなく、$\bar{\nu}$ の不確かさである**ことに注意して欲しい。原子炉物理の計算では、膨大な数の中性子「集団」の挙動を対象としている。従って、核分裂反応が起こったときに発生する中性子数については、一個一個の反応に対して $\nu$ を確率分布からサンプリングして決めるようなことを行う必要はなく、その平均値である $\bar{\nu}$ を用いても何ら問題無く、通常そのような計算を行う（中性子輸送方程式自体がそのように定義されている）。「核データの不確かさが実効増倍率に及ぼす影響」を考えるということは、例えば「$\bar{\nu}$ の不確かさが実効増倍率に及ぼす影響」を考えるということになる。

[3] 分母の $J-1$ は自由度に対応する。ここで用いている期待値 $\bar{\sigma}_i$ は真の期待値ではなく標本から求められたもの（標本平均）であるため、自由度、すなわち標本 $\sigma_i^j$ のうち自由に動ける変数の数は $J-1$ となる。

ここで、核データ $i$ と $i'$ に強い関係性があるとし、$\sigma_i^j$ が大きめのときは $\sigma_{i'}^j$ は大きめ、$\sigma_i^j$ が小さめのときは $\sigma_{i'}^j$ は小さめとなるとする。この場合、上記の統計量はおそらく正の値となるだろう。一方、同じように強い関係性があるとしても、$\sigma_i^j$ が大きめのときは $\sigma_{i'}^j$ は小さめ、$\sigma_i^j$ が小さめのときは $\sigma_{i'}^j$ は大きめとなるとするとどうだろうか。この場合、上記の統計量は負の値となるだろう。

実は、式 (5) で示した統計量は**共分散**と呼ばれるものである。なお、$i = i'$ であれば、核データ $i$ の分散となる。用語として「分散」と「共分散」を区別して使う場合もあるが、一般的には分散も含めて「共分散」という用語が使われることが多い。

前述のように、共分散はふたつのパラメータの不確かさの関係性の強さを示す。$I$ 個の核データを考えた場合、核データ $i$ と $i'$ の共分散を $\mathrm{cov}(\sigma_i, \sigma_{i'})$ と書くこととする（「cov」は共分散 Covariance の略）。なお、$i = i'$ の場合は分散となるため、

$$\mathrm{cov}(\sigma_i, \sigma_i) = V_{\sigma_i} \tag{6}$$

とも書ける。

ここで、すべての核データに対する共分散行列 $\mathbf{V}$ を以下のように定義する。

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} \mathrm{cov}(\sigma_1, \sigma_1) & \mathrm{cov}(\sigma_1, \sigma_2) & \cdots & \mathrm{cov}(\sigma_1, \sigma_I) \\ \mathrm{cov}(\sigma_2, \sigma_1) & \mathrm{cov}(\sigma_2, \sigma_2) & \cdots & \mathrm{cov}(\sigma_2, \sigma_I) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{cov}(\sigma_I, \sigma_1) & \mathrm{cov}(\sigma_I, \sigma_2) & \cdots & \mathrm{cov}(\sigma_I, \sigma_I) \end{pmatrix} \tag{7}$$

この例から明らかなように、核データの共分散行列のサイズは核データの数（ここでは $I$）となる。考えている核データが核種数 $N$、反応数 $X$、エネルギー群数 $G$ のものであるとするならば $I = N \times X \times G$ となる。

また、ふたつの核データ間の関係性の強さを示す別の指標として、核データ $i$ と $i'$ の**相関係数**を以下のように定義できる。

$$\mathrm{corr}(\sigma_i, \sigma_{i'}) = \frac{\mathrm{cov}(\sigma_i, \sigma_{i'})}{\Delta\sigma_i \Delta\sigma_{i'}} \tag{8}$$

ここで、$\Delta\sigma_i$ は核データ $i$ の標準偏差を示す。なお、同一の核データ $i$ 間の相関係数 $\mathrm{corr}(\sigma_i, \sigma_i)$ は、

$$\mathrm{corr}(\sigma_i, \sigma_i) = \frac{\mathrm{cov}(\sigma_i, \sigma_i)}{\Delta\sigma_i \Delta\sigma_i} = \frac{V_{\sigma_i}}{V_{\sigma_i}} = 1 \tag{9}$$

となる。

見方を変えれば、共分散は以下のようにパラメータの標準偏差と相関係数から定義できると言うこともできるであろう。

$$\mathrm{cov}(\sigma_i, \sigma_{i'}) = \Delta\sigma_i \Delta\sigma_{i'} \mathrm{corr}(\sigma_i, \sigma_{i'}) \tag{10}$$

共分散行列 $\mathbf{V}$ と同様に、相関行列 $\mathbf{C}$ も以下のように定義できる。

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \mathrm{corr}(\sigma_1, \sigma_1) & \mathrm{corr}(\sigma_1, \sigma_2) & \cdots & \mathrm{corr}(\sigma_1, \sigma_I) \\ \mathrm{corr}(\sigma_2, \sigma_1) & \mathrm{corr}(\sigma_2, \sigma_2) & \cdots & \mathrm{corr}(\sigma_2, \sigma_I) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathrm{corr}(\sigma_I, \sigma_1) & \mathrm{corr}(\sigma_I, \sigma_2) & \cdots & \mathrm{corr}(\sigma_I, \sigma_I) \end{pmatrix} \tag{11}$$

前述のように、この行列の対角成分は必ず 1.0 となる。

相関係数は-1 から+1 の範囲の値をとり、0 の場合にはふたつのパラメータ間にまったく関係性がないことを意味する。また、+1 の場合には強い正の相関、-1 の場合には強い負の相関があると言える。

## 2　核データから実効増倍率への不確かさの伝播

次に、核データの不確かさが実効増倍率 $k$ に対してどのように伝播していくかを、文献 [1] を参考に述べる。

核データを確率変数と見なした場合、核データを用いた計算によって求まる、ある原子炉の実効増倍率の予測値 $k$ も同様に確率変数となり、その期待値は $\bar{k}$ と書ける。さて、これまでと同じように、全ての核データについて $J$ 回の

測定を行い、$(\sigma_1^j, \sigma_2^j, ..., \sigma_I^j)$ というデータセットが $J$ 個得られたとする。この $J$ 個の核データセットそれぞれについて $k$ が計算されるので、それを $k^j$ と書く。この場合、期待値 $\bar{k}$ は以下のように書けるであろう。

$$\bar{k} = \frac{\sum_{j=1}^{J} k^j}{J} \tag{12}$$

また、$k$ に対する分散 $V_k$ も以下のように書けるであろう。

$$V_k = \frac{\sum_{j=1}^{J} \left(k^j - \bar{k}\right)^2}{J-1} \tag{13}$$

さて、$k^j$ の $\bar{k}$ に対する差は、一次近似のもとでは以下のように記述できる。

$$k^j - \bar{k} = \sum_i \frac{\partial k}{\partial \sigma_i}\left(\sigma_i^j - \bar{\sigma}_i\right) \tag{14}$$

これを式 (13) に代入すると、以下の式を得る。

$$\begin{aligned} V_k &= \left(\sum_{j=1}^{J}\sum_i\sum_{i'} \frac{\partial k}{\partial \sigma_i}\frac{\partial k}{\partial \sigma_{i'}}\left(\sigma_i^j - \bar{\sigma}_i\right)\left(\sigma_{i'}^j - \bar{\sigma}_{i'}\right)\right)/(J-1) \\ &= \sum_i\sum_{i'} \frac{\partial k}{\partial \sigma_i}\frac{\partial k}{\partial \sigma_{i'}}\left(\sum_{j=1}^{J}\left(\sigma_i^j - \bar{\sigma}_i\right)\left(\sigma_{i'}^j - \bar{\sigma}_{i'}\right)\right)/(J-1) = \sum_i\sum_{i'} \frac{\partial k}{\partial \sigma_i}\frac{\partial k}{\partial \sigma_{i'}}\mathrm{cov}\left(\sigma_i, \sigma_{i'}\right) \end{aligned} \tag{15}$$

$\frac{\partial k}{\partial \sigma_i}$ は $k$ の $\sigma_i$ に対する感度係数に他ならないため、$k$ の分散は、核データの共分散と感度係数から計算出来ることが分かる。

核データを核種 $n$、反応 $x$、エネルギー群 $g$ で記述し、感度係数を $S$ と書くと、$V_k$ は以下の式で計算されることになる。

$$V_k = \sum_{n,x,g}\sum_{n',x',g'} S_{n,x,g} S_{n',x',g'} \mathrm{cov}\left(\sigma_{n,x,g}, \sigma_{n',x',g'}\right) \tag{16}$$

例えば、U-235 と Pu-239 からなる原子炉を考え、核分裂中性子の総発生数に対する各々の核種の寄与は同程度であるとする。U-235 と Pu-239 の核分裂あたりの平均中性子発生数 $\bar{\nu}$ がそれぞれ 1%の不確かさを持っているとすると、$k$ の不確かさはどの程度になるであろうか？これは、U-235 と Pu-239 の $\bar{\nu}$ の間の関係性の強さ（相関）に依存する。例えば、この相関が 1.0 であるとするならば、U-235 の $\bar{\nu}$ が大きくなるならば Pu-239 の $\bar{\nu}$ も大きくなるはずなので、$k$ の不確かさは 1%となると考えられる。逆に、相関が-1.0 であれば、U-235 の $\bar{\nu}$ が大きくなるならば Pu-239 の $\bar{\nu}$ は小さくなるはずなので、両者が相殺しあい、$k$ の不確かさはほぼゼロとなると考えられる。この例について、共分散行列と感度係数を実際に作成し、相関が-1、0、+1 の場合の $k$ の不確かさを式 (16) を用いて評価してみるとよいであろう。

上の例のように、二種類の核データ $\sigma_1$、$\sigma_2$ に不確かさが存在するとして、その不確かさが $k$ に及ぼす影響を考えよう。式 (16) より、$k$ の分散 $V_k$ は次のように書けるであろう。

$$V_k = \sum_{n=1}^{2}\sum_{n'=1}^{2} S_n S_{n'} \mathrm{cov}\left(\sigma_n, \sigma_{n'}\right) = S_1^2 V_{\sigma_1} + S_2^2 V_{\sigma_2} + 2 S_1 S_2 \mathrm{cov}\left(\sigma_1, \sigma_2\right) \tag{17}$$

つまり、$V_k$ は 3 つの項に分解出来ることが分かる。ここで、右辺第一項は $\sigma_1$ の不確かさに起因する項であり、第二項は $\sigma_2$ の不確かさに起因する項である。感度 $S_n$ は二乗されており、また分散 $V_{\sigma_n}$ は正であるため、これらの項は正の値をとることが分かるであろう。一方、右辺第三項は $\sigma_1$ と $\sigma_2$ の相関項であるが、感度、共分散ともに負の値をとりうるため、この項は場合に応じて正負の値をとることになる。

次に、二つの異なる原子炉の実効増倍率 $k^j$、$k^{j'}$ に対する誤差伝播を考える。それぞれの不確かさ $\left(\Delta k^j/k^j\right)$、$\left(\Delta k^{j'}/k^{j'}\right)$ は式 (16) を用いて計算することが出来るが、この両者に関係性は無いであろうか？すなわち、$k^j$ と $k^{j'}$ の共分散はどうなるであろうか？そのような計算を行いたい場合は次の式を用いる。

$$\mathrm{cov}(k^j, k^{j'}) = \sum_{n,x,g}\sum_{n',x',g'} S^{k^j}_{n,x,g} S^{k^{j'}}_{n',x',g'} \mathrm{cov}(\sigma_{n,x,g}, \sigma_{n',x',g'}) \tag{18}$$

$j = j'$ の場合、この式は $k^j$ の分散の式に一致する。

今、考えている原子炉が $J$ 個ある（$J$ 個の実効増倍率に着目している）とする。この場合、$k^j$ に対する共分散行列が定義でき、そのサイズは $J$ となる。

U-235 と Pu-239 からなる原子炉 $A$、$B$ を二つ考え、U-235 の核分裂中性子総発生数に対する寄与がそれぞれ 50% と 20%であるとし、残りは Pu-239 が寄与すると考える。U-235 と Pu-239 の核分裂あたりの平均中性子発生数 $\bar{\nu}$ にそれぞれ 1%、2%の不確かさがあるとすると、$A$、$B$ の実効増倍率 $k^A$、$k^B$ の不確かさはどの程度となるか。また、$k^A$ と $k^B$ の不確かさの相関はどの程度となるか。なお、U-235 と Pu-239 の $\bar{\nu}$ は独立（相関が無いもの）とする。

さて、$k$ に対する核データ $\sigma_i$ の感度係数を $S_i$ と書いた場合、核データ $\sigma_i$ の不確かさに起因する $k$ の不確かさは以下のように計算できる。

$$V_k = \sum_i \sum_{i'} S_i S_{i'} \mathrm{cov}\left(\sigma_i, \sigma_{i'}\right) \tag{19}$$

ここで、感度係数ベクトル $\mathbf{s}$ を以下のように定義する。

$$\mathbf{s}^T = \begin{pmatrix} S_1 & S_2 & \cdots & S_I \end{pmatrix} \tag{20}$$

ここでベクトルの肩添字の $T$ は転置を意味し、$I$ は核データの総数に対応する。これを用いると、式 (19) は次のように書き直せる。

$$V_k = \mathbf{s}^T \mathbf{V}_\sigma \mathbf{s} \tag{21}$$

また、$k^j$ と $k^{j'}$ に対する共分散は以下の式で計算できる。

$$\mathrm{cov}(k^j, k^{j'}) = \mathbf{s}^{j^T} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{s}^{j'} \tag{22}$$

ここで、$\mathbf{s}^j$ は $k^j$ の感度係数ベクトルを示す。

さらに感度係数行列 $\mathbf{S}$ を以下のように定義する。

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \mathbf{s}^1 & \mathbf{s}^2 & \cdots \mathbf{s}^J \end{pmatrix} \tag{23}$$

ここで、$J$ は考えている原子炉の総数を示す。この場合、$J$ 個の $k^j$ に対する共分散行列 $\mathbf{V}_k$ は以下のように得られる。

$$\mathbf{V}_k = \mathbf{S}^T \mathbf{V}_p \mathbf{S} \tag{24}$$

# 3 核データに対する共分散データの与えられ方

中性子輸送方程式に現れる核データは、評価済み核データファイルと呼ばれる一種のデータベースに収納される。評価済み核データファイルとしては、米国で開発されている ENDF/B（最新版は Version VIII.0）、欧州で開発されている JEFF（最新版は Version 3.3）、日本で開発されている JENDL（最新版は Version 5）が挙げられる。

核データの値に加えて、その不確かさ（共分散）の情報も、重要な核種に対しては評価済み核データファイルに与えられているため、核データの不確かさの実効増倍率などの原子炉パラメータへの誤差伝播計算はそれらを用いて行うことが出来る。

評価済み核データファイルに与えられている核データは連続エネルギーで与えられており、また断面積の共鳴構造は共鳴パラメータと呼ばれる特殊なパラメータで与えられる。一方、中性子輸送方程式を決定論的手法により解く場合、核データをエネルギーに対して離散化する必要があるため、評価済み核データファイルに与えられている核データを中性子輸送計算にそのまま用いることはできない。そのため、中性子輸送計算に適した形式（多群形式）に評価済み核データを変換する必要がある。このような手続きを「核データの処理」と呼んでおり、CBZ では JAEA で開発

された FRENDY コードを用いている。また、CBZ で用いる多群の断面積セット（評価済み核データファイルを処理したあとのもの）は CBZLIB と呼んでいる。

核データの共分散についても同じことが言え、数値計算に用いるために処理（多群化）を行う必要がある。現時点では、共分散データの処理については LANL で開発されている NJOY コードを用いている。

## 参考文献


[1] 山本章夫、「不確かさ評価の基礎」、第 44 回炉物理夏期セミナーテキスト、(2012).

[2] 東京大学教養学部統計学教室編、「基礎統計学 I　統計学入門」、東京大学出版会、(2012).