

令和 2 年 5 月 20 日現在

機関番号：82110

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2017～2019

課題番号：17K14917

研究課題名(和文) ブートストラップ法を用いた輸送計算コードにおける系統誤差評価手法の開発

研究課題名(英文) Development of estimation method of systematic uncertainty in particle transport code using bootstrap method

研究代表者

橋本 慎太郎 (Hashimoto, Shintaro)

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・原子力科学研究部門 原子力科学研究所 原子力基礎工学研究センター・研究副主幹

研究者番号：60465995

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,800,000円

研究成果の概要(和文)：放射線の遮蔽設計等で利用されるモンテカルロ粒子輸送計算コードの系統的な不確かさを評価する方法を整備し、ブートストラップ法を利用した推定方法の有効性について検証を行った。分散分析(ANalysis Of Variance; ANOVA)の導入により、系統のおよび統計的不確かさの両方を評価する方法を提案した。コード内で使用される核反応断面積モデルを開発し、輸送計算結果におけるモデルの不定性の影響が評価できるようになった。ブートストラップ法を用いることにより、系統的な不確かさが正規分布と非正規分布を取る場合の両方で、結果の信頼性を判断する手法について検討を行った。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本課題により、放射線挙動解析コードによる計算結果の信頼性を真の意味で定量的に与えることができるようになった。加速器を初めとする放射線を扱う施設の遮へい設計や運用条件を議論するための有力なツールとして大きく利便性を向上させることになり、過剰な安全裕度の設定や別途信頼性の検証実験等を行う必要がなくなることから、非常に大きなコストカットが可能となる。本成果を原子力機構が開発している粒子輸送計算コードPHITSに組み込むことで、希望者が自由に利用できる計算コードとして公開され、直接的に社会や国民に資することが期待される。

研究成果の概要(英文)：We developed a function to estimate systematic uncertainties in calculated results obtained by Monte Carlo particle transport simulation codes, which have been successfully applied to shielding calculations in radiation facilities. Then, we discussed validity of an estimation using bootstrap method. ANOVA (analysis of variance) can estimate both systematic and statistical uncertainties. A new total cross section model was developed to estimate effects of uncertainty of the nuclear reaction model on the results of transport simulation. Several estimation techniques using the bootstrap method were discussed to estimate reliability of the systematic uncertainty obtained by ANOVA in the cases of normal and non-normal distributions.

研究分野：放射線物理

キーワード：粒子輸送計算 ブートストラップ法 系統的な不確かさ(系統誤差) モンテカルロ法 核反応モデル

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

近年、加速器等の放射線取扱施設における遮へい設計や作業従事者の被ばく線量評価において、モンテカルロ法に基づく粒子輸送計算コードが必要不可欠な技術となっている。最新の輸送計算コードは 3 次元体系を考慮できるため、複雑な構造の施設を対象とした場合でも詳細な放射線の挙動を解析できる。しかし、解析結果の信頼性を定量的に評価する際、モンテカルロ法に関連した統計的不確かさは評価できる一方、コード固有の核反応モデルが起因となる系統的不確かさ(系統誤差)は評価できていない。核反応モデルの不定性は数%から数 10%あることが知られているため、遮蔽設計の際には、その影響を考慮して遮蔽材の厚さを増やす、といった過剰な安全裕度を見込む必要があり、建設費の増加をもたらしている。よって、安全性を適切に評価し建設費を抑えるためには、系統的不確かさの適切な評価が必要不可欠である。

系統的不確かさの評価に関する先行研究として、Total Monte Carlo 法が提案されている。ここでは、核反応モデル TALYS 中のパラメータを変化させて求めた複数の核データライブラリを使う手法が用いられ、ライブラリの違いが原子炉等の臨界計算で重要なパラメータとなる実効増倍率(k_{eff})などに対して与える影響が定量的に示された。しかし、その手法はデータ容量が数 GB にもなるデータライブラリを千程度用意し、それと同数の輸送計算結果を得る必要があるため、計算条件によっては現実的でないデータ量や計算時間を考慮しなくてはならなかった。

2. 研究の目的

原子力機構が開発している粒子輸送計算コード PHITS に実装することを目的に、計算結果の系統的不確かさ評価法を整備すると共に、ブートストラップ法を利用することで、その評価結果の信頼性について定量的な判断ができるような考え方を提案する。系統的不確かさを評価する手法として分散分析(ANalysis Of Variance; ANOVA)を導入し、実験値の誤差の伝播を表現できる断面積モデルの開発を行う。コード内部に実装することで、莫大なデータライブラリを生成する必要がなくなる。また、統計学における確率分布の推定法の一つであるブートストラップ法を用いることにより、系統的不確かさの分布を効率的に推定するための手法を検討する。

3. 研究の方法

(1)粒子輸送計算をモンテカルロ法に基づいて行う場合、計算結果が系統的不確かさの他に試行回数に依存する統計的不確かさを含むことになるため、後者の不確かさを取り除く理論的な枠組みが必要である。本課題では、モンテカルロ法による粒子輸送計算の結果を分析する手法として分散分析を導入し、統計学に基づいて系統のおよび統計学不確かさのそれぞれを個別に評価可能とした。

(2)粒子輸送計算で使用される全断面積モデルの不定性に起因する系統的不確かさを評価するために、モデルの内部パラメータが不定性の幅をもつ全断面積モデルを開発した。S. Pearlstein [Astrophys. J. (1989)]が提案したモデルを基にして、内部パラメータの中心値と不定性の幅を全断面積の実験値を参照しながら最小自乗法により決定した。

(3)ブートストラップ法は、条件を変えながら求めた N 個の輸送計算の結果 x_i ($i=1, \dots, N$) から重複を許してリサンプリングすることで、 N が不十分な場合にも各種統計量を推定する。 x_i から N 個の値をサンプリングしてその標準誤差 $\hat{\sigma}_b$ を計算し、同様のサンプリング計算を B 回繰り返す。得られた B 個の $\hat{\sigma}_b$ ($b=1, \dots, B$) とその平均値 $\bar{\sigma}^* = \Sigma \hat{\sigma}_b^* / B$ により、 $\hat{\sigma}_b^2 = \Sigma (\hat{\sigma}_b^* - \bar{\sigma}^*)^2 / (B - 1)$ からブートストラップ法による系統的不確かさが推定できる。

また、95%信頼区間を求める際は、リサンプリングして計算できる平均値 $\bar{\mu}$ と標準誤差 $\hat{\sigma}$ を求め、 B 個の μ_b^* と $\hat{\sigma}_b$ ($b=1, \dots, B$) を得る。 x_i の平均値 $\bar{\mu}$ からのずれを表す t 値が得られるため、 B 個の t 値の大小関係を整理し、それぞれ 2.5% と 97.5% に対応する $0.025B$ と $0.975B$ 番目の値を使って、信頼区間の下限と上限を推定する。

4. 研究成果

(1)モンテカルロ法に基づいた粒子輸送計算において、計算で使用される核反応断面積モデルの不定性や計算の入力情報となる物質の密度の誤差が計算結果に与える影響を、分散分析の考え方により系統的不確かさとして評価できることを示した。分散分析を用いることにより、モンテカルロ計算の試行回数に依存する統計的不確かさと系統的不確かさの両方が評価可能となる。

また、本手法を中性子の遮蔽計算の解析に適用し、分散分析により系統的不確かさを評価する際に、入力情報を誤差の範囲で変動させる際の変動回数や試行回数を増加させた場合の収束条件について分析を行った。更に、試行回数を増やした時の収束状況を判断できる新しい基準値を提案し、収束した評価結果を必要最小限の計算時間で得るための考え方を示した。

(2)中性子入射反応の全断面積の実験値を参照し、最小自乗法に基づきモデルの内部パラメータ

が不定性の幅をもつ全断面モデルを開発した。本モデルの不定性は実験値の誤差を再現し、その幅の範囲で内部パラメータを変動させて行った輸送計算の結果から、系統的な不確かさを適切に評価できることが分かった。

(3)粒子輸送計算に対するブートストラップ法の有効性を確認するために、PHITS を用いて 100 MeV 中性子を鉄遮蔽材に照射した場合の中性子の透過量を計算し、鉄の中性子断面積モデルの不定性に起因する系統的な不確かさを評価した。不定性の幅の範囲で条件を変え、変動回数を 1000 回とした結果を参照値としてブートストラップ法による結果と比較した。計算結果における系統的な不確かさが正規分布となる条件では比較的有効に機能し、非正規分布となる条件では有効でない場合があることがわかった。後者は、乱数によって稀に平均値から離れた値を示すことが原因であり、その際の評価には別の評価基準が必要であると考えられる。

また、得られた推定値の信頼性と使用した初期サンプル数やリサンプリング数の関係を調査した。初期サンプル数を変化させながら系統的な不確かさの推定値を求めたところ、その値は多くの計算条件において初期サンプル数に依存しており、少数のサンプル数で信頼性の高い推定値を得ることが難しいことがわかった。これは、粒子輸送計算の特徴として乱数によって稀に平均値から離れた値を示すことがあり、その稀な結果が分散である系統的な不確かさに大きな影響を与えることが原因である。次に、推定値の信頼性とリサンプリング数の関係については、リサンプリング数が 100 程度で 10%の精度、1000 程度で 1%の精度で収束することがわかった。よって、要求する信頼性の精度に応じてリサンプリング数を調整し、計算量を最小限に抑えることが可能となる。

次に、モデルの不定性が偏った分布を持ち、その影響を受けて評価される系統的な不確かさが非正規分布となる場合については、95%信頼区間を指標として推定結果の信頼性を判断できることがわかった。図 1 に、100 MeV 中性子を鉛材に照射した際の 10 cm 深さにおける実効線量を PHITS で計算した場合の頻度分布を示す。分布は中性子断面積の不定性の影響を表現し、ここでは不定性に偏った分布を持たせた。黒線は計算結果が $N=20$ 個の場合の頻度分布、緑線は正規分布を仮定した場合の 95%信頼区間の上限と下限、青線はブートストラップ法による非正規分布の区間を表す。黒線の分布が示す最頻値は平均値とは違っており、正規分布を仮定して評価した緑線の信頼区間は下限側を十分に評価できなかった。他方、青の信頼区間は黒の分布の範囲内で適切に推定できている。しかし、黒線の分布と比較すると上限値を過小評価し、幅が狭くなる傾向を示すことがわかった。

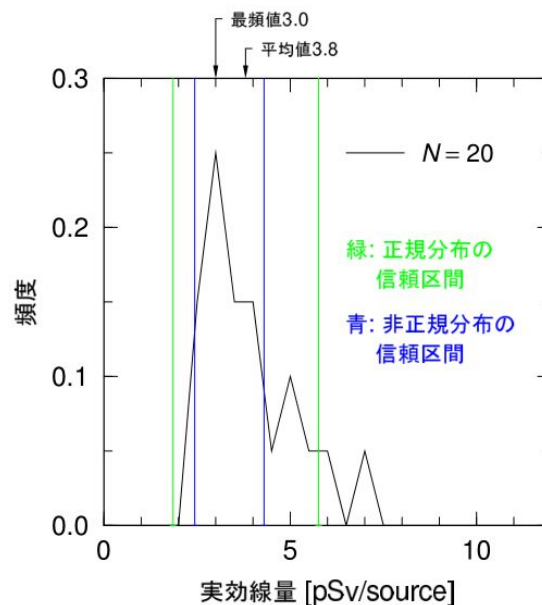


図 1. 中性子の遮蔽計算結果における実効線量の系統的な不確かさの分布。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 1件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Hashimoto Shintaro, Sato Tatsuhiko	4. 巻 56
2. 論文標題 Estimation method of systematic uncertainties in Monte Carlo particle transport simulation based on analysis of variance	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Nuclear Science and Technology	6. 最初と最後の頁 345, 354
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1080/00223131.2019.1585989	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計5件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

1. 発表者名 Shintaro Hashimoto, Tatsuhiko Sato
2. 発表標題 Total cross section model with uncertainty evaluated by KALMAN
3. 学会等名 2019 International Conference on Nuclear Data for Science and Technology (ND2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 橋本慎太郎、佐藤達彦
2. 発表標題 ブートストラップ法を利用した PHITS における系統的不確かさの評価
3. 学会等名 日本原子力学会 2019 年秋の大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Shintaro Hashimoto, Tatsuhiko Sato
2. 発表標題 New analytical method to estimate systematic uncertainty in PHITS
3. 学会等名 14th Specialists' workshop on Shielding aspects of Accelerators, Targets, and Irradiation Facilities (SATIF-14) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 橋本慎太郎
2. 発表標題 PHITSにおける系統的不確かさ評価機能の開発
3. 学会等名 放射線遮蔽設計法及び廃止措置における放射線安全に係るワークショップ
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 橋本慎太郎、佐藤達彦
2. 発表標題 分散分析を用いたPHITSにおける系統誤差の評価法
3. 学会等名 日本原子力学会2018年春の年会
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----