

科学研究費助成事業 研究成果報告書

令和 4 年 6 月 21 日現在

機関番号：82110

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2018～2021

課題番号：18K05002

研究課題名（和文）ブートストラップ法を用いた確率テーブルの統計誤差評価手法の開発

研究課題名（英文）Estimation of statistical error of probability table using bootstrap method

研究代表者

多田 健一（TADA, Kenichi）

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：50714317

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000 円

研究成果の概要（和文）：原子炉の炉心解析などに影響のある、非分離共鳴領域の自己遮蔽効果を取り扱う確率テーブルの統計誤差計算手法を開発した。本手法では、確率テーブルと平均断面積の積を統計誤差計算の標本とした。検証計算により、評価済み核データに与えられている全核種で確率テーブルの統計誤差を適切に計算できることを確認した。

本手法を用いることで、高精度な確率テーブルを従来よりも短時間で作成することが可能となった。本研究成果は、JAEAから公開されている核データ処理コードFRENDY第2版に組み込まれている。本研究により、世界中の核データ処理コードユーザーが効率的に確率テーブルを作成することが可能となった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

非分離共鳴領域の自己遮蔽効果は、スペクトルの硬い高速炉や中速炉を対象とした炉心解析に影響を与えることが知られている。そのため、非分離共鳴領域の自己遮蔽効果を取り扱う確率テーブルの不確かさを定量化し、統計誤差の小さい確率テーブルを作成することは、高精度な炉心解析を実施する上で重要である。

本研究では、確率テーブルの統計誤差計算手法を開発し、国内外で利用されている核データ処理コードFRENDYに実装した。確率テーブルの不確かさを明らかにすると共に、要求精度を満足する確率テーブルを最低限のラダー数で作成することを可能にした本研究は、核データ処理時間の削減と高精度な炉心解析に貢献するものである。

研究成果の概要（英文）：The self-shielding effect in the unresolved resonance region has a large impact on the analysis of fast- and intermediate-spectrum reactors. The probability table method is widely used to treat this effect. In this study, the calculation method of the statistical processing for the probability table generation is developed. The product of the probability table and average cross-section in each probability bin is used as samples for statistical uncertainty estimation of the probability table.

The generation time of the probability table was reduced by setting the criterion of the statistical uncertainty of the probability table as the input parameter. This statistical uncertainty calculation method for the probability table generation was implemented in the nuclear data processing code FRENDY which is released from the JAEA website. This method enables users to the efficient probability table generation.

研究分野：原子力工学

キーワード：核データ処理 確率テーブル ラダー法 統計誤差 FRENDY

1. 研究開始当初の背景

原子炉の炉心解析などで用いる中性子輸送計算では、図1に示すように、各核種の断面積が必要となる。断面積は中性子の入射エネルギーによって大きく変化し、特定の入射エネルギーで断面積が非常に大きくなる。この断面積が非常に大きくなることを共鳴と呼び、共鳴が並んでいるエネルギー領域を共鳴領域と呼ぶ。中性子の入射エネルギーが高くなるにつれて共鳴の間隔が狭くなる。中性子の入射エネルギーが十分に高くなると、個々の共鳴が分離できなくなる。この共鳴が分離できない領域を非分離共鳴領域と呼ぶ。共鳴領域では、共鳴による断面積の鋭いピークにより、中性子のエネルギー分布が歪むことが知られており、この効果を自己遮蔽効果と呼ぶ。非分離共鳴領域では、個々の共鳴が分離できないものの、この自己遮蔽効果を無視すると、原子炉内の中性子の平均エネルギーが高い高速炉や中速炉での炉心解析の計算精度が悪化することが知られている[1]。

この非分離共鳴領域の自己遮蔽効果は、従来はもんじゅや常陽を始めとした高速増殖炉の炉心解析で重要視されていた。世界各国で開発が進められている小型原子炉(SMR: Small Modular Reactor)において、多くの高速炉や中速炉が提案されていることから、非分離共鳴領域の自己遮蔽効果を高精度に取り扱うことの重要性が近年高まっている。

この非分離共鳴領域の自己遮蔽効果を取り扱う手法として、いくつかの手法が提案されている[2]。これらの手法のうち、近年では確率テーブル法が広く利用されている[3]。確率テーブル法では、図2に示すように、乱数を用いてラダーと呼ばれる擬似的な共鳴構造を作成する。そして得られた擬似的な共鳴構造から、断面積の範囲($\sigma_1 \sim \sigma_2, \sigma_2 \sim \sigma_3, \dots, \sigma_4 \sim \sigma_5$)と、その断面積の範囲に入る確率ピン値(P_1, P_2, \dots, P_5)と平均断面積($\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2, \dots, \bar{\sigma}_5$)の表、すなわち確率テーブルを作成する。確率テーブル法では、この擬似共鳴構造を何度も作成し、平均値としての確率ピン値と平均断面積を計算している。そのため、確率テーブル法では、擬似的な共鳴構造とその作成回数(ラダー数)が確率テーブルの作成に大きな影響を与えている。申請者が過去に実施した研究では、擬似的な共鳴構造の作成に必要な乱数生成手法を改良するなど、擬似的な共鳴構造の作成手法の高度化について取り組んだ[4]。しかし、ラダー数の最適化については今まで検討していなかった。

申請者は、確率テーブルの統計誤差を求め、その統計誤差が一定の基準以下となるまで疑似共鳴構造を作成することで、ラダー数の最適化が実現できると考えた。しかし、確率テーブルの統計誤差を計算する手法は開発されておらず、十分に統計誤差を減らした高精度な確率テーブルを作成するためには、確率テーブル作成者の経験を頼りにするか、確率テーブルの統計誤差が十分に小さくなるようにラダー数を非常に大きな値とするしかなかった。確率テーブルの作成時間は、核データ処理全体の処理時間の大きな割合を占めている。そのため、ラダー数を大きな値とした場合、一つの評価済み核データライブラリを処理するのに一週間以上かかることもあることから、ラダー数を最適化することによる、核データ処理の高速化が求められていた。

2. 研究の目的

本研究では、確率テーブルの統計誤差を指標とすることで、誰もが簡単に要求精度を満たす確率テーブルを最低限のラダー数で効率的に作成することを目的としている。この目的の達成のため、確率テーブルの統計誤差計算手法を開発するとともに、申請者らが開発している核データ処理コード FRENDY に開発した統計誤差計算手法を実装する。これにより、確率テーブルの統計誤差の許容誤差を入力値とした確率テーブルの作成が可能となる。FRENDY を用いることで、統計誤差という客観的な指標を用いて、誰でも高精度な確率テーブルを高速に作成することが可能となる。

3. 研究の方法

2章で述べた目的を達成するために、本研究では以下の手順により検討を進めた。

(1) 最適な疑似共鳴構造作成回数(ラダー数)の検討 [5,6]

適切なラダー数を調査するため、ラダー数の違いで確率テーブルにどの程度の差異が見られるのかを調査した。また、評価済み核データライブラリ JENDL-4.0 に含まれている全核種でラダ

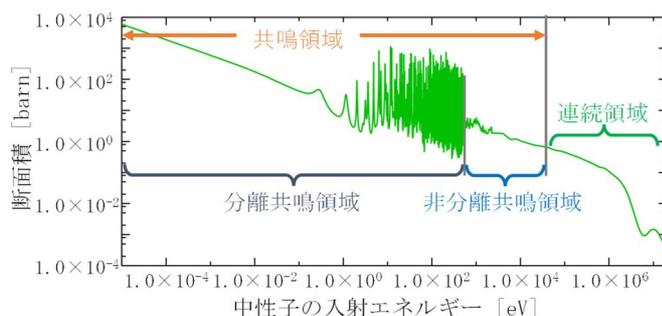


図1 断面積のエネルギー分布の例

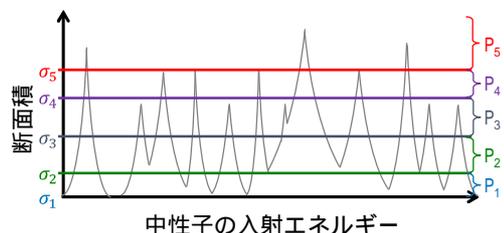


図2 確率テーブルの例

一数を変えて確率テーブルを作成した。核種によってラダー数による確率テーブルの差異に違いが見られるのかを調査するとともに、差異が大きくなる要因について調査した。また、確率テーブルが解析結果に与える影響の大きい臨界実験体系に対し、ラダー数の違いが臨界実験解析に与える影響を調査した。

(2) 確率テーブルの統計誤差計算手法の開発 [7,8]

(1)の検討結果から、確率テーブルの統計誤差を計算する標本として、確率ビン値と平均断面積の積を標本とすることが望ましいことが分かった。確率テーブルの統計誤差を計算する手法として、中心極限定理、ブートストラップ法、ジャックナイフ法の3つの統計誤差計算手法を取り上げた。これらの手法で計算した確率テーブルの統計誤差を比較し、確率テーブルの統計誤差を計算するのに最適な手法を調査した。

(3) 確率テーブルの統計誤差計算手法の開発 [8,9]

(2)の検討結果で得られた確率テーブルの統計誤差計算手法を核データ処理コード FRENDY に実装し、統計誤差の許容誤差を入力値とする確率テーブルの作成を実現した。また、統計誤差の許容誤差を入力値とすることで、従来のラダー数を入力値とした場合に比べて、確率テーブルの作成時間がどの程度低減されるかを調査した。

4. 研究成果

(1) 最適な疑似共鳴構造作成回数(ラダー数)の検討

各ラダー数での確率テーブルを比較するため、図2の断面積の範囲($\sigma_i \sim \sigma_{i+1}$)を固定した上で、ラダー数の違いで確率ビン値や平均断面積にどのような違いが出るのかを調査した[5,6]。調査には、確率テーブルの統計誤差の有無が中性子輸送計算に与える影響の大きいU-235とU-238を用いた。室温(300 K)、運転時の高温条件(1,000 K)、事故時の超高温条件(2,000 K)の三温度点について、ラダー数を50,000とした結果を参照解として、ラダー数の違いが確率テーブルに与える影響を調査した。確率テーブルは、断面積の範囲 $\sigma_i \sim \sigma_{i+1}$ と、その断面積の範囲に入る確率ビン値 P_i と平均断面積 $\bar{\sigma}_i$ の表である。そのため、比較する値としては、確率ビン値 P_i と平均断面積 $\bar{\sigma}_i$ 、それにその積 $P_i \bar{\sigma}_i$ の3通りが考えられる。図3にU-235とU-238の各ラダー数での確率ビン値と平均断面積の積($P_i \bar{\sigma}_i$)の参照解との差異の二乗平均平方根(RMS, root mean square)を示す。本解析では、断面積範囲の分割数を20とし、全ての断面積範囲において、個々に参照解との差異を取り、RMS値を計算した。図3に示すように、ラダー数が増えるのに伴って参照解との差異のRMS値が指数関数状に低減していることが分かった。確率ビン値や平均断面積でも同様に各ラダー数での参照解との差異のRMS値を比較したところ、確率ビン値の低い断面積範囲の影響が強く見られ

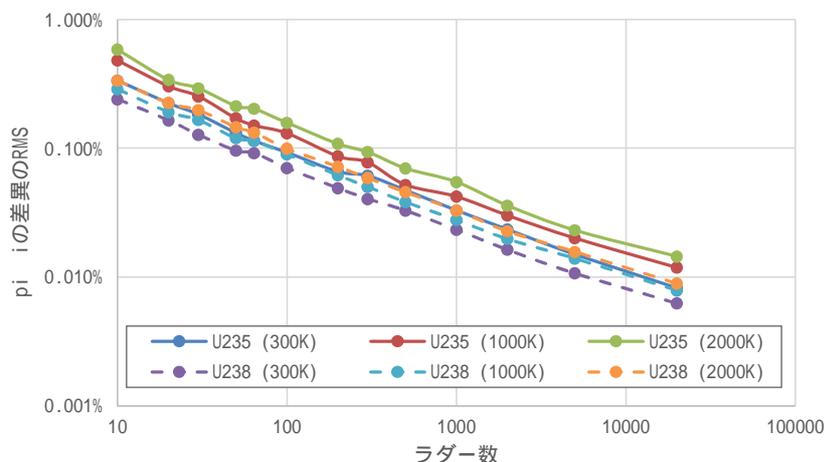


図3 ラダー数50,000を参照解としたときの各ラダー数での $P_i \bar{\sigma}_i$ のRMS値

るなど、 $P_i \bar{\sigma}_i$ と違って綺麗な傾向が見られなかった。このことから、確率テーブルの比較としては、 $P_i \bar{\sigma}_i$ を用いることが適切であることが分かった。

次に、ラダー数の違いが臨界実験解析に与える影響を調査した。確率テーブルの有無が解析結果に与える影響の大きい臨界実験体系に対し、ラダー数を1,000とした場合を参照解として、各ラダー数での実効増倍率(k_{eff})を比較した。その結果、ラダー数を100~200とすると、参照解とほぼ同じ結果となることが分かった。

また、JENDL-4.0の全核種で同様の比較を行ったところ、Sr-90などの各共鳴の平均的な間隔(平均共鳴間隔)の広い一部の核種で、他の核種に比べてRMS値が大きくなる傾向があることが分かった。この要因を調査したところ、従来の確率テーブル作成手法では、平均共鳴間隔が広い場合に、疑似共鳴構造中の共鳴の数が非常に少なくなってしまうという問題があることが分かった。この問題を解決するために、平均共鳴間隔が広い場合でも多数の共鳴を生成するように確率テーブル作成手法を改良した。この確率テーブル作成手法の改良により、平均共鳴間隔が広い場合でも少ないラダー数で十分な統計誤差が得られるようになり、確率テーブルの精度向上に貢献した[7]。

(2) 確率テーブルの統計誤差計算手法の開発

(1)の研究成果により、確率テーブルの統計誤差計算の標本として、確率ビン値 P_i と平均断面積 $\bar{\sigma}_i$ の積($P_i \bar{\sigma}_i$)を用いることが望ましいことが分かった。そこで本研究では、 $P_i \bar{\sigma}_i$ を用いた確率テーブルの統計誤差計算手法について検討した[7,8]。確率テーブルの統計誤差計算手法として、

中心極限定理、ブートストラップ法、ジャックナイフ法を取り上げた。

まず、これらの統計誤差計算手法で確率テーブルの統計誤差が計算できることを確認するため、初期乱数を変えた確率テーブルを1,000ケース作成し、この1,000ケースの不変分散の平方根(参照解)と、統計誤差計算手法で得られた統計誤差を比較した。表1に参照解と各統計誤差計算手法で計算した統計誤差の比を示す。なお、表1では中性子輸送計算に与える影響の大きいU-235を示しているが、他の核種でも同様の結果となることを確認している。確率テーブルは断面積範囲($\sigma_i \sim \sigma_{i+1}$)によって大きく異なることから、各断面積範囲で統計誤差を計算しているが、表1では特定の断面積範囲で得られた確率テーブルの統計誤差のみを記載している。なお、それ以外の断面積範囲での確率テーブルの統計誤差についても比較しており、表1と同様の結果となることを確認している。

表1に示されるように、どのラダー数においても、それぞれの統計誤差計算手法に大きな差異はなく、参照解とよく一致することが分かった。また、確率分布が正規分布に近いかどうかを確認するため、1,000ケースの結果から、平均値、分散値、中央値などを計算した。表1には歪度のみを示しているが、歪度はほぼゼロと正規分布と近いことが分かった。なお、表には記載していないが、平均値や分散値なども正規分布に近いことを確認している。

ブートストラップ法やジャックナイフ法は確率分布が正規分布ではないデータの統計誤差を効率よく計算する手法であるが、中心極限定理に比べて計算時間が長くなるという欠点がある。表1の結果より、確率分布の歪度などが正規分布に近いこと、また中心極限定理で計算した統計誤差とブートストラップ法やジャックナイフ法で計算した統計誤差に差異がないことから、中心極限定理で確率テーブルの統計誤差が適切に計算できていることが分かった。そのため、計算時間の観点から確率テーブルの統計誤差の計算には中心極限定理を用いることが望ましいことが分かった。

表1 初期乱数を変えた場合の統計誤差と、各手法で計算した統計誤差の比 (U235, 293.6K)

ラダー数	統計誤差	歪度	中心極限定理	Boot strap	Jack knife
50	3.29%	0.11	0.99	0.96	1.00
100	2.16%	0.30	1.05	1.04	1.06
200	1.36%	-0.02	1.19	1.18	1.19
300	1.20%	0.28	1.10	1.10	1.10
500	0.94%	0.19	1.08	1.08	1.08
1,000	0.65%	0.18	1.12	1.11	1.12

(3) 確率テーブルの統計誤差計算手法の開発

(2)の研究で開発した確率テーブルの統計誤差計算手法を申請者らが開発している核データ処理コードFRENDYに実装し、許容誤差を入力値とした確率テーブルの作成を可能とした[8,9]。

前述した通り、(2)の研究で開発した確率テーブルの統計誤差計算手法は、各断面積範囲で確率テーブルの統計誤差を計算している。そこでFRENDYでは、各断面積範囲の統計誤差の最大値を当該ラダー数の統計誤差と見なすこととした。図4にU-235、U-238におけるラダー数と統計誤差の関係を示す。確率テーブルは一般的に核種当たり10~30の入射エネルギー点で計算される。図4では、U-235、U-238の最小と最大の入射エネルギー点での確率テーブルの統計誤差の推移を示している。図4に示すように、入射エネルギーによって統計誤差の推移がやや異なるものの、ラダー数の増加に伴って、統計誤差が指数関数状に低減していることが分かった。また、(1)の研究成果ではラダー数100~200とすると、ラダー数を1,000とした場合と臨界実験解析の結果が一致すると述べたが、同様の検討により、許容誤差の入力値を5%以下とすれば、ラダー数を十分に大きくとった結果と一致することが分かった[9]。

図4に示すように、核種や入射エネルギーによって統計誤差が異なっている。例えば、図4のU-235では、入射エネルギーが500 eVの場合は統計誤差が5%以下となるラダー数が100なのに対し、入射エネルギーを30 keVの場合は50と入射エネルギーによって2倍の差異がある。ラダー数を入力値として確率テーブルを作成する場合、全ての入射エネルギーに対して同じラダー数を設定する。このように同じラダー数を設定して十分に確率テーブルのばらつきを収束させようとする、大きなラダー数を取らざるを得ない。それに対し、確率テーブルの許容誤差を入力値として確率テーブルを作成する場合、個々の入射エネルギーで最適なラダー数で計算できるため、ラダー数を削減することが可能となる。

本研究成果を用いて、確率テーブルの許容誤差を5%として確率テーブルを作

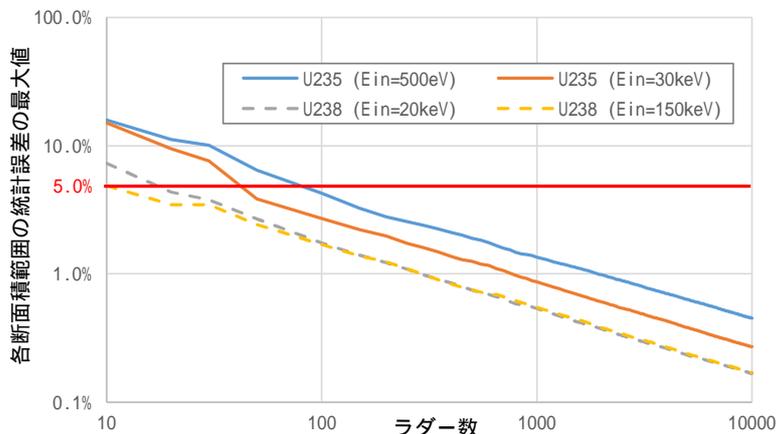


図4 各核種・各入射エネルギーでの確率テーブルの統計誤差推移 (293.6K)

成した場合と、ラダー数を 200 として確率テーブルを作成した場合の計算時間を比較した。比較に用いたのは U-235 と U-238 である。解析には Intel Xeon Gold 6154 (3.0 GHz) を用い、シングルタスクで計算を行った。また、温度点は 293.6 K の一点のみとしている。確率テーブルの許容誤差を 5% として確率テーブルを作成した場合、U-235 は 193.7 秒、U-238 は 19.4 秒であった。それに対し、ラダー数を 200 として確率テーブルを作成した場合、U-235 は 883.1 秒、U-238 は 249.5 秒であった。ラダー数を入力値とすると、許容誤差を入力値とした場合に比べ、U-235 で 4.5 倍、U-238 で 12.8 倍の計算時間がかかることが分かった。今回の解析では、統計誤差が 5% 以下となるまでに必要なラダー数が多い入射エネルギーで 100 以下となっている。そこでラダー数を 100 とした計算と比較しても、許容誤差を入力値とした場合に比べて計算時間が半分以下となっている。このように、確率テーブルの統計誤差を入力値とすることで、計算時間の大幅な短縮が可能となることが分かった。

確率テーブルの作成時間は、核データ処理全体の計算時間の大部分を占めている。例えば、中性子輸送計算の参照解の計算に用いられている連続エネルギーモンテカルロ計算コードで利用されている ACE 形式の断面積ライブラリ (293.6 K) を作成する場合、確率テーブルの作成以外の処理時間は U-235 で 27.4 秒、U-238 で 129.5 秒である。本研究で確率テーブルの作成時間を低減させたことにより、核データ処理全体の処理時間の削減に大きく貢献することができた。

以上の研究成果 (1) ~ (3) により、確率テーブルの統計誤差計算手法を開発した。本研究で開発した統計誤差計算手法を用いることで、統計誤差という明確な指標を持って要求精度を満足する確率テーブルを作成することが可能となった。このように、誰もが適切な確率テーブルの作成が可能となったことで、確率テーブルの不確かさが炉心解析に与える影響を除去することが可能となった。また、許容誤差を入力値とすることで、ラダー数の最適化が可能となり、確率テーブルの作成時間を 4 ~ 10 倍近くも高速化するなど、研究開発当初に想定していた以上の高速化が実現した。以上のことから、本研究の所期の目的を達成することができた。

申請者が開発している核データ処理コード FRENDY は、オープンソースソフトウェアとして公開されており、OECD/NEA/Data-Bank で用いる核データ処理コードの一つとして採用される [10] など、日本だけでなく世界中で広く利用されている。そのため、本研究成果は世界中の核データ処理時間の削減と高精度な炉心解析に貢献することが期待される。

< 引用文献 >

1. R.D. Mosteller and R.C. Little, "Impact of MCNP Unresolved Resonance Probability-Table Treatment on Uranium and Plutonium Benchmarks," Proc. ICNC '99, Versailles, France, Sep. 20-24, 1999, p. 341 (1999).
2. D.E. Cullen, "The importance of Resonance Self-Shielding," INDC(NDS)-0778, International Atomic Energy Agency (2019).
3. R.E. MacFarlane and A.C. Kahler, "Methods for Processing ENDF/B-VII with NJOY," Nucl. Data Sheets, 111, pp.2739-2890 (2010).
4. K. Tada, "Improvement of probability table generation using ladder method for a new nuclear data processing system FRENDY," Proc. Physor2018, Cancun, Mexico, Apr. 22-26, 2018 (2018).
5. 多田健一、「ラダー数の違いが確率テーブル作成に与える影響評価」、日本原子力学会 2019 年春の年会 (2019)
6. K. Tada, "Investigation of Appropriate Ladder Number on Probability Table Generation," EPJ Web of Conference, 247, 09002 (2021).
7. 多田健一、「確率テーブルの統計誤差計算手法の開発」、日本原子力学会 2021 年春の年会 (2021)
8. K. Tada, T. Endo, "Statistical Uncertainty Quantification of Probability Tables for Unresolved Resonance Cross Section," Proc. ND2022, July, 24-29 (2022).
9. K. Tada, A. Yamamoto, T. Endo, G. Chiba, M. Ono, M. Tojo, "Development of Nuclear Data Processing Code FRENDY Version 2," Proc. PHYSOR2022, May, 16-20, Pittsburgh, USA (2022).
10. F. M. Sendis, "Managing Evaluated Nuclear Data Libraries Database: A Continuous Integration V&V Approach," JEFDOC-2021, OECD/NEA (2020).

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 1件）

1. 著者名 Tada Kenichi	4. 巻 247
2. 論文標題 INVESTIGATION OF APPROPRIATE LADDER NUMBER ON PROBABILITY TABLE GENERATION	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 EPJ Web of Conferences	6. 最初と最後の頁 09002 ~ 09002
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1051/epjconf/202124709002	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 0件/うち国際学会 3件）

1. 発表者名 多田健一、遠藤知弘
2. 発表標題 Statistical Uncertainty Quantification of Probability Tables for Unresolved Resonance Cross Sections
3. 学会等名 ND2022（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 多田健一、山本章夫、遠藤知弘、千葉豪、小野道隆、東條匡志
2. 発表標題 Development of Nuclear Data Processing Code FRENDY Version 2
3. 学会等名 PHYSOR2022（国際学会）
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 多田健一、遠藤知弘
2. 発表標題 確率テーブルの統計誤差計算手法の開発
3. 学会等名 日本原子力学会2021年春の年会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 近藤諒一、遠藤知弘、山本章夫、多田健一
2. 発表標題 Implementation of random sampling for ACE-format cross sections using FRENDY and application to uncertainty reduction
3. 学会等名 M&C2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 多田健一
2. 発表標題 ラダー数の違いが確率テーブル作成に与える影響評価
3. 学会等名 日本原子力学会2019年春の年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 近藤諒一、遠藤知弘、山本章夫、多田健一
2. 発表標題 FRENDYを用いたACE形式断面積のランダムサンプリング実装
3. 学会等名 日本原子力学会2019年春の年会
4. 発表年 2019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
研究 分担 者	遠藤 知弘	名古屋大学・工学研究科・准教授	
	(ENDO Tomohiro)		
	(50377876)	(13901)	

6. 研究組織（つづき）

	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
研究分担者	長家 康展 (NAGAYA Yasunobu) (20391310)	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・研究主幹 (82110)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関