

炉物理部会セッション

炉物理計算における V&V の課題と解決

Addressing issues of V&V in reactor physics calculations

(2) 実験データを用いた不確かさの定量化と妥当性確認

(2) Uncertainty Quantification and Validation using Experimental Data

*横山 賢治¹¹原子力機構

1. はじめに

日本原子力学会において 2015 年に「シミュレーションの信頼性確保に関するガイドライン：2015」[1]（以下、ガイドライン）が発行された。ガイドラインは、原子力分野で用いられるシミュレーション手法の信頼性を確保するための枠組みを提示したものであるが、個別分野における適用方法については、各分野にて検討し、実例を蓄積することが重要とされている。このため、次世代高速炉の核設計の分野では、ガイドラインに基づくモデリング&シミュレーションの検証及び妥当性確認（Verification and Validation, V&V）と不確かさ定量化（Uncertainty Quantification, UQ）（以下、特に断らない場合は、両者をまとめて V&V と呼ぶ）の基本的な考え方について検討を行った[2,3]。ガイドラインを特定の分野に適用する際には、様々な考え方が可能であるが、2016 年に行われたこの検討に参加した経験をもとに、高速炉核設計の分野における V&V の基本的な考え方について紹介する。なお、本項の内容の詳細については今後も検討が継続される予定である。

高速炉の核特性評価では、不確かさの主要な部分が、物性値（核データ）の不確かさに起因するので、この不確かさを低減する目的で、臨界実験等で得られる積分実験データのデータベースを開発・整備してきたという経緯がある。この実験データベースは継続的に改良が行われ、高速炉の設計研究で利用されてきた[4]。また、実験データベースを有効に活用するためには解析評価結果とその不確かさの情報が必要となるため、不確かさ定量化に関する取り組みも活発に行われてきた。

ガイドラインでは、図 1 に示すように V&V のプロセスを 4 つのエレメントに分けて取り扱う。特に不確かさ定量化に関する項目に着目すると、エレメント 2 の数学的モデル化では、数値的解析手法上の不確かさと入力の不確かさの評価が必要となる。エレメント 3 の物理的モデル化では、不確かさ評価済みの実験データに基づく妥当性確認データベースを用意し、実験の不確かさを定量化する必要がある。エレメント 4 では、これらの不確かさを統合して、妥当性確認のために用いる実験が存在しない条件におけるモデルの予想性能を評価することが求められている。

本稿では、エレメント 2~4 の不確かさの定量化と妥当性確認に関する部分を中心に紹介する。

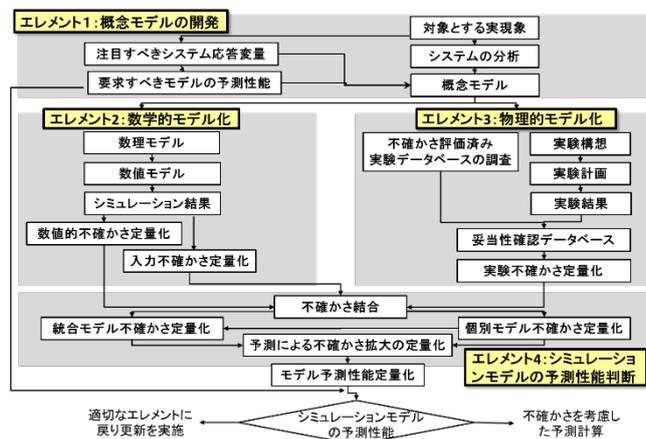


図 1 ガイドラインにおけるモデル V&V

2. 次世代高速炉核設計手法の V&V（基本的考え方）

高速炉核特性評価の分野における V&V について、不確かさ定量化に関する各項目との対応を整理したものを図 2 に示す。以下では、これらの項目についてエレメント 2~4 の順に説明する。

*Kenji Yokoyama¹¹Japan Atomic Energy Agency

2-1. エレメント 2：数学的モデル化における不確かさ定量化

V&Vの基本的考え方を検討する際の前提条件として、次世代高速炉の核設計のシミュレーション手法には、決定論的手法を用いることとした。設計解析ではパラメータを変更して繰り返し計算する必要があるため、基準計算として、解析モデルはやや粗いが計算の速い手法を採用し、種々の詳細な解析モデルに基づく計算結果で基準計算値を補正して最確評価を行うことを考える。このように各種の補正は行うものの、決定論的手法を用いることから、実効断面積、エネルギー群数、計算手法などに起因する数値解析手法上の不確かさがあると考えられる。このため、これらの解析モデル上の近似がないとみなすことができる連続エネルギーモンテカルロ法との比較により、数値的な不確かさを定量化する。入力の不確かさの定量化については、前述のように、核データの不確かさの影響が大きいため、核データに起因する不確かさを考慮する。この核データ起因不確かさは、評価済み核データライブラリの共分散データと感度係数（核データの単位変化当りの核特性変化量で定義）により評価することができる。具体的には、共分散データを行列 \mathbf{M} 、感度係数を行列 \mathbf{G} で表すと、核データ起因不確かさは \mathbf{GMG}^T （ T は行列の転置）で計算することができる。高速炉体系では、核データの変化と核特性の変化の間に線形性が比較的良好に成り立つことから、一般化摂動論に基づいて効率的に感度係数を計算することが可能である。

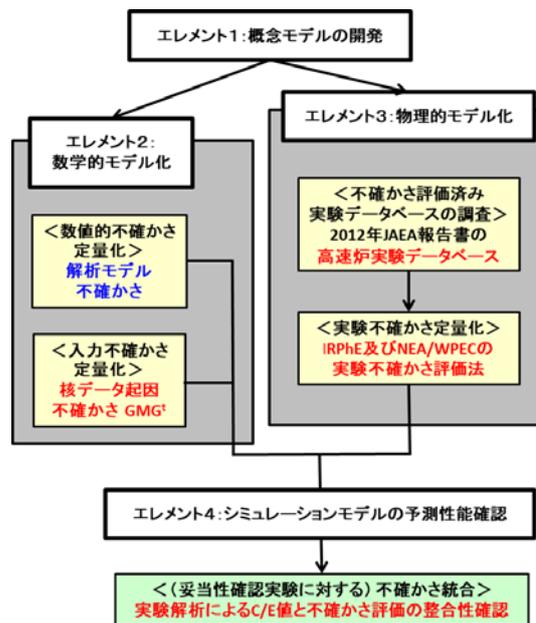


図2 高速炉核特性評価分野での適用例

2-2. エレメント 3：物理的モデル化における不確かさ定量化

高速炉核特性評価の分野では、臨界実験装置・実機プラントにおける種々の炉心特性に関する600を超える実験が既にデータベース化されている[4]ため、この高速炉実験データベースを、エレメント3で必要とされる妥当性確認用データベースに対応させる。表1にこのデータベースの概要を示す。このデータベースは、基本的にはNa冷却MOX燃料大型高速炉を設計することを想定して開発されてきたものであるが、実験データの信頼性向上の観点から、できるだけ独立した複数の実験を採用するという方針が採られており、臨界実験だけでなく、高速実験炉「常陽」や高速増殖原型炉「もんじゅ」で取得された性能試験データ等も含まれる。また、実験データベースには、契約上の理由などにより公開できないものも含まれているものの、実験データの選択においては、説明性の観点から、公開性を重要な要件の一つとして考慮している。

ガイドラインでは、実験データベースの完備性を確認することの必要性が述べられており、評価マトリックスなどのツールの使用により分かりやすく整理することの重要性が指摘されている。表1から、様々なサイズの炉心において設計で重要となる核特性が幅広く取得されていることが分かるが、設計対象炉心のすべての状態を完全に包含することはできないため、エレメント4で要求される、実験が存在しない条件におけるモデルの予測性能を評価するという項目への対応が何らかの形で必要になると考えられる。このエレメント4の要求に対する考え方については後述する。また、現状では完備性を分かりやすくシステムティックに評価する手法等は確立できておらず、エレメント4の完備性の確認方法については、今後の検討課題といえる。

2-2-1. 実験に起因する不確かさの評価方法

エレメント3では、不確かさ評価済み実験データベースの調査が必要となるが、高速炉実験データベースの実験起因不確かさについては、OECD/NEAで整備されている国際炉物理ベンチマーク（International

表 1 高速炉実験データベースの概要

実験装置 (研究所、国)	実験炉心 (合計数)	炉心の特徴	DB化された核特性	公開性
ZPPR <JUPITER計画> (ANL-W, 米国)	ZPPR-9, 10A~10C (4)	60~80kW級 均質二重MOX炉心	臨界性、反応率、制御棒価値、Naボイド 反応度、ドブラー反応度 (サンプル)	Yes (IRPhE)
	ZPPR-13A, 17A (2)	65kW級 径・軸方向非均質MOX炉心	臨界性、反応率、制御棒価値、Naボイド 反応度、ドブラー反応度 (サンプル)	
	ZPPR-18A, 18C, 19B (3)	100kW級 均質二重MOX炉心 (外側:濃縮ウラン混合)	臨界性、反応率、制御棒価値、 Naボイド反応度	
ZEBRA <MOZART計画> (Winfrith, 英国)	MZA (1)	550t- 軽MOX クリーン炉心	臨界性、Naボイド反応度	Yes. (IRPhE)
	MZB, MZC (2)	2,300t 均質二重MOX もんじゅ複製炉心	臨界性、制御棒価値、Naボイド反応度	
常陽 (JAEA, 日本)	JOYO Mk-I (1)	Pu・濃縮ウラン混合燃料のブランケット 付き75MWth高速実験炉	臨界性、制御棒価値、Naボイド反応度、 燃料置換反応度、等温係数、燃焼反応度	Yes. (IRPhE)
	JOYO Mk-II (1)	Pu・濃縮ウラン混合燃料のSS反射体付き 100MWth高速実験炉	MA照射後試験	No.
もんじゅ (JAEA, 日本)	MONJU Startup Tests (2)	28kW級均質二重MOXの 高速増殖原型炉	臨界性、制御棒価値、等温係数	No.
BFS (IPPE, ロシア)	BFS-62-1~62-5, 66-1 (6)	3,400t 三または四重MOX 濃縮ウラン (+Pu) 炉心 (ブランケットまたはSS反射体)	臨界性、反応率、制御棒価値、 Naボイド反応度	No. (Yes. BFS-62-3A) (IRPhE)
	BFS-67, 69, 66 (3)	10kgのNpO ₂ を炉中心MOX領域に装荷 (原子炉級、兵器級、高次化Pu)	臨界性、反応率、制御棒価値、 Naボイド反応度	No.
MASURCA (CEA, 仏国)	ZONA-2B (1)	380t Pu燃焼型MOX炉心 (CIRANO計画)	Naボイド反応度、燃料置換反応度	No.
SEFOR (General Electric, 米国)	SEFOR CORE-I, II (2)	20MWth Pu・濃縮ウラン 混合燃料高速炉心	ドブラー反応度 (全炉心)	Yes. (PHYSOR2004)
Los Alamos (LANL, 米国)	FLAITOP-Pu, FLAITOP-25, JEZEBEL, JEZEBEL-24Q, GODIVA (5)	直径約10cmの球状炉心 (Pu-239, 高次化Pu, ウラン燃料、 裸またはU-238反射体付き)	臨界性	Yes. (ICSBEP)

Reactor Physics Benchmark Evaluation Project, IRPhEP) の評価方法[5]に則り、不確かさ定量化が行われている。IRPhEP の評価方法には、実際に評価作業を進める上で参考になる具体的な指針が示されている。例えば、文献の調査に関しても、複数の文献がある場合、お互いの文献の記述に整合性があるかどうかなどのチェックを要求している。更に必要に応じて、実際に実験を行った実験関係者へのインタビューや内部メモやログブックを調査して評価することまで求めている。高速炉実験データベースは、実験の詳細データへのアクセスのしやすさの違いなどから、実験によってその評価内容の詳細さに違いはあるものの、基本的にこの考え方に則り評価を行っている。実際に、高速炉臨界実験 JUPITER シリーズの ZPPR の 9 個の実験炉心 (ZPPR-9、-10A/B/C、-13A、17A、18A/C、-19B) と、高速実験炉「常陽」MK-I の性能試験、50MW/75MW 運転データについては、IRPhEP のベンチマーク問題として登録されている。

不確かさ定量化に関しては IRPhEP の評価方法では、実験に起因する不確かさを要因ごとに分類して、個別に評価した上で、それらを統合して全体の不確かさを評価することが求められている。更に、必要に応じて感度解析などを実施し、寸法製作公差や組成分析の不確かさ等、各種の不確かさが実験データに与える影響を定量的に把握して評価しなければならないとされている。また、原則として、実験に関して考えられるすべての不確かさの要因をリストアップして、定量的に評価した後で、それらの誤差要因が無視できるかどうか判断することが求められている。

一方、ガイドラインでは、実験データにおける総括不確かさ (不確かさ及び推定誤差の総称) の発生因子とその影響について可能な限り把握しておくことの重要性が指摘されている。また、総括不確かさの定量化にあたっては、実験装置、計測、過誤などに起因する総括不確かさを特定して評価することの必要性が述べられている。これらのガイドラインの考え方は、先に述べた IRPhEP の考え方とよく対応しており、IRPhEP の評価方法はガイドラインにおける実験不確かさ定量化の方法を炉物理実験に適用した実例の一つと見ることができると考えられる。

2-2-2. 実験データ間の相関係数の評価方法 (OECD/NEA WPEC の方法)

IRPhEP の実験不確かさの評価方法では、不確かさを要因ごとに細分することが求められているので、

これらの評価された不確かさの情報を用いて、更に、実験データ間の相関係数を評価することができる。この相関係数の評価方法は「不確かさ要因相関法」と呼ばれており、OECD/NEA の報告書[6]に詳細が記載されている。例えば、2つの実験データ A、B の不確かさ要因を「共通不確かさ」と「独立不確かさ」のどちらかに分類できるまで細分してある場合、以下の式を用いて実験データ A と B の間の相関係数を評価することができる。

$$\rho_{A,B} = \frac{\sum_i \sigma_{\text{common},A,i} \times \sigma_{\text{common},B,i}}{\sigma_{\text{total},A} \times \sigma_{\text{total},B}} \quad (1)$$

ただし、 $\sigma_{\text{total},x} = \sqrt{\sum_i \sigma_{\text{independent},x,i}^2 + \sum_i \sigma_{\text{common},x,i}^2}$ ($x = A, B$)である。

実験データ間の相関係数は、実験データの特徴を表す重要な情報であり、実験データベースの多様性・完備性を評価する観点でも必要である。高速炉の実験データベースには、実験起因不確かさの情報として、このようにして評価された相関係数の情報も含まれている。

2-3. エレメント 4：不確かさ統合、実験データベースによる妥当性確認

エレメント 4 では、妥当性確認のために用いる実験に対する総括不確かさの定量化及び注目システム応答変量に対する総括不確かさの影響についての統合を実施し、妥当性確認のために用いる実験が存在しない条件におけるモデルの予測性能を評価することが求められている。また、考慮すべき不確かさの発生因子が全て同定されており、数学的表現を当てはめるレベルにまで整理することの必要性が指摘されている。これらに対応する考え方として、実験解析に対する全不確かさ、すなわち、実験解析に対する不確かさの統合を評価する式が妥当であることを確認した上で、同様の式を用いて設計解析における予測計算値の全不確かさを評価することにより、妥当性確認のために用いる実験が存在しない条件においても不確かさを評価できると考える。

個々の実験解析の全不確かさは、実験データを解析する際の解析モデル起因不確かさ $\mathbf{V}_{\text{model}}^{(\text{database})}$ と核データ起因不確かさ $\mathbf{G}^{(\text{database})} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(\text{database})T}$ 、実験起因不確かさ $\mathbf{V}_{\text{experiment}}^{(\text{database})}$ の合計として、以下の式で評価する。

$$\mathbf{V}_{\text{total}}^{(\text{database})} = \mathbf{V}_{\text{model}}^{(\text{database})} + \mathbf{G}^{(\text{database})} \mathbf{M} \mathbf{G}^{(\text{database})T} + \mathbf{V}_{\text{experiment}}^{(\text{database})} \quad (2)$$

この式で各項は相関を含む分散共分散行列で表現されているので、具体的には左辺の対角成分の平方根が統合された不確かさに対応する。この式で示されるように、各項の内部では必要に応じて相関まで考慮するが、解析モデル起因不確かさ、核データ起因不確かさ、実験起因不確かさは互いに独立であるとしている。この式で評価した実験解析の全不確かさの妥当性を、図 3 に示すような考え方に基づいて確認する。例えば、この図の一番左側のケースは、C/E 値のばらつきと C/E 値の全不確かさの間に（少なくとも）明らかな不整合はないと考えられるので、妥当であると判断する。残りの三つは、C/E 値のばらつきと C/E 値の全不確かさの間の関係から、系統的なバイアスの可能性、不確かさの過小評価、不確かさ過大評価の可能性があると評価される例を示している。

2016年の検討では、現状の実験データベースを用いて、予備的な妥当性確認が行われた。図 4 に、そのときの結果の一つとして、U-238 捕獲反応率比の結果を示す。この例では、C/E 値のばらつきに対応する C/E-1 値の 2 乗の平方根で評価された不確かさが約 2%であったのに対して、(2)式で評価された物理モデル化に対して統合した不確かさは約 3%となった。このように両者に若干の差は見られるものの、図 4 の結果は、図 3 の考え方に照らしてほぼ妥当であると考えられる。

このように、実験解析の全不確かさ評価の妥当性を確認した上で、設計解析における予測計算値の全不確かさを評価する。ただし、設計解析では核データ以外の入力情報（例えば、実際に設計する体系の燃料組成や寸法等）に起因する不確かさが存在すると考えられるので、別途「実体系起

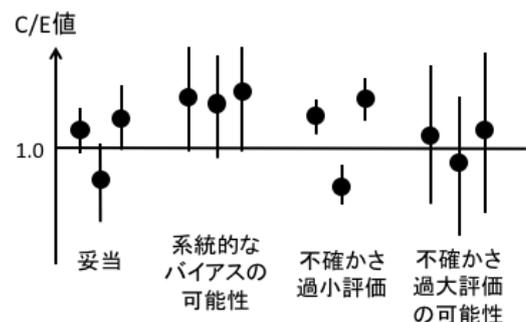


図 3 妥当性確認の考え方

「不確かさ」を考慮する。この不確かさは、妥当性確認のための実験データの解析においては、実験起因不確かさ（実験体系の寸法製作公差や組成分析の不確かさ等）に相当する。設計解析における予測計算値の全不確かさ V_{total} は、設計対象体系を解析する際の解析モデル起因不確かさ $V_{model}^{(target)}$ 、設計対象体系の感度係数 $G^{(target)}$ と核データ共分散 M で評価される核データ起因不確かさ $G^{(target)}MG^{(target)T}$ 、実体系起因不確かさ $V_{external}^{(target)}$ の合計として以下の式で評価する。

$$V_{total} = V_{model}^{(target)} + G^{(target)}MG^{(target)T} + V_{external}^{(target)} \quad (3)$$

この式においても、実験解析の不確かさを評価する(2)式と同様に、解析モデル起因不確かさ、核データ起因不確かさ、実体系起因不確かさは互いに独立であるとしている。前述のように、ガイドラインでは、予測による不確かさ拡大を定量化することが求められているが、この予測による不確かさの拡大については、上記の不確かさの独立性に基づいて各項ごとに評価する。右辺の第1項の解析モデル起因不確かさについては、設計体系に対して決定論的手法とモンテカルロ法を適用して解析を実施できるので、これらの結果を比較することで設計体系における解析モデル起因不確かさを定量化する。第2項の核データ起因不確かさについても、設計体系における感度係数を計算して評価するので、この感度係数に炉心サイズ・形状・組成などの解析対象の特徴が反映され、設計体系の核特性の核データ起因不確かさを定量化できると考える。第3項の実体系起因不確かさは、設計体系の解析をする際に新たに入り込むと考えられる入力の不確かさであるので、設計体系における不確かさが直接的に反映されると考えられる。

3. 今後の課題とまとめ

炉物理計算における実験データを用いた不確かさの定量化と妥当性確認の検討例として、高速炉の核設計評価の分野におけるガイドラインの適用の取り組みを紹介した。今後、より詳細な検討を行い、実例を蓄積していくことが必要である。

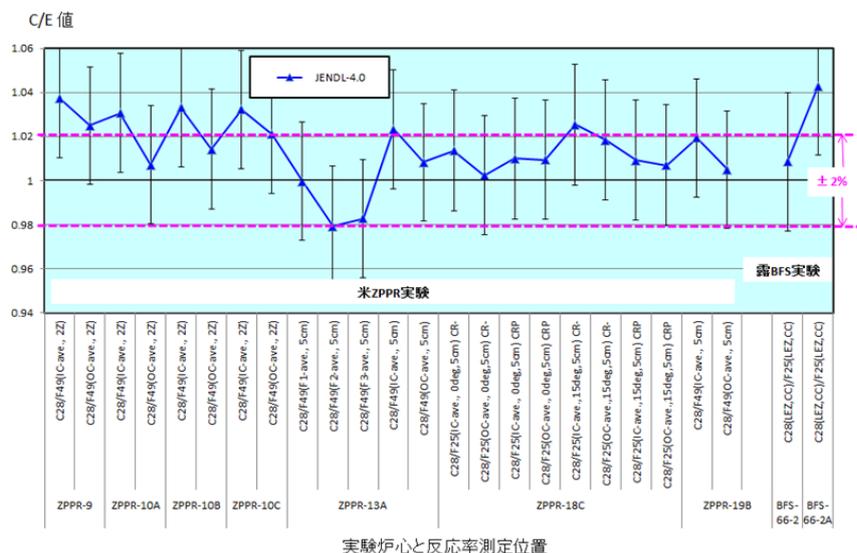


図4 U-238 捕獲反応率比の妥当性確認（予備検討結果）

参考文献

- [1] 日本原子力学会標準、「シミュレーションの信頼性確保に関するガイドライン：2015」、AESJ-SC-A008:2015 (2016)
- [2] K. Ohgama, et al., “Model Verification and Validation Procedure for a Neutronics Design Methodology on Next Generation Fast Reactors,” Proc. of ICAPP 2017, Apr. 24-28, 2017, Fukui and Kyoto, Japan (2017)
- [3] 大釜和也、池田一三、石川 眞、他、「次世代高速炉核設計手法のモデル V&V および UQ」、3 件シリーズ発表 2H03~05、日本原子力学会 2016 年秋の大会 (2016)
- [4] 杉野和輝、石川 眞、他、「核設計基本データベースの整備 (XIV) —JENDL-4.0 に基づく高速炉核特性解析の総合評価—」、JAEA Research 2012 2012-013 (2012)
- [5] V. A. F. Dean, “The Benchmark Evaluation Process: From Experimental Data to Benchmark Model,” Nucl. Sci. Eng., Vol. 145, pp.20-38 (2003)
- [6] M. Salvatores, et al., “Method and Issues for the Combined Use of Integral Experiments and Covariance Data,” NEA/NSC/WPEC/DOC(2013)445, OECD (2013)