

## 話 題 (Ⅲ)

### NEANS C 主催

### 「共分散データの評価と処理」 専門家会議出席報告

(日本原子力研究所) 千葉 敏

#### 1. はじめに

標記会議が 1992年10月7日より9日にかけて、米国オークリッジ国立研究所 (ORNL) の ORELA 施設内の会議室で行われた。日本からは九大の神田幸則教授と筆者の 2 名が参加した。本稿では、筆者が原子力学会誌“国際会議の窓”に投稿した内容をベースに、本会議の内容その他について紹介を行う。

#### 2. 会議の背景と目的

共分散は、種々の物理量に対する同時確率分布が分かれば原理的には計算可能な量であって、確率変数の 2 次のモーメント (従来の誤差) の概念を多変数の場合に自然に拡張したものになっている。しかしながら、現実世界において我々が知り得るのは、不完全な測定あるいは計算の結果得られる、不確定性を持ったデータの集合であり、目的とする物理量の確率分布が直接に得られるわけではない。さらに、統計学の教科書で扱われている確率変数と異なり、断面積等の物理量は実際には確率的に分布しているわけではないので、その量に固有の共分散が存在するわけではない (Ericson fluctuation による相関などはここで問題にしている共分散とは質的に異なるものである)。むしろ、単に我々の知識が不完全であるという意味での不確かさのようなものがあるだけで、共分散はその尺度を表す量と解釈される。従って、同じデータを用いて同じ物理量に対する推定を行ったとしても、共分散は、評価者の知識の確かさの度合いによって、種々の値を取り得る。このため、共分散の推定には大きな不確定要素が付きまとっている。核データの分野においては、断面積の調整や中性子場のドジメトリー、核融合炉の設計マージン評価等の目的のために、JENDL-3 を始めとする評価済み核データの共分散データが必要とされているが、共分散の評価を行う具体的な方針が未定であるばかりでなく、評価された共分散の妥当性さえ判断しかねるというのが現状である。本会議は、核データの分野における共分散データの評価と処理の専門家により、これらの問題点を議論するために開催された。

#### 3. 会議の概要

米国では共分散データの重要性が早くから認識されており、ENDF/B-V、ENDF/B-VI の

一部の反応には既に共分散データが与えられている。特に ORNL の Peelle のグループが推進役となっており、本会議はそのお膝元での開催となった。しかしながら、「共分散の父」と言われている Perey は ORNL を既に退職しており不在であった（聞くとところによると彼は大西洋をヨットで横断中とのことであった）。また、この分野の権威の一人である KfK の Fröhner が参加していなかったのも残念であった。会議にはロシア 2 名、オーストリア 2 名、日本 2 名、IAEA、中国、ベルギー、フランス、ドイツより各 1 名、アメリカ 10 名の他、数名のオブザーバーの参加があった。3 つのトピックスに関するセッションの全てが口頭発表で、途中、2 グループに分かれて、共分散の評価方法及び処理及びフォーマットについての議論を行った。以下、発表内容の概要を述べる。

### 3.1 トピックス 1 評価された共分散データの必要性

本セッションでは、ORNL の Maerker によって、PWR の圧力容器内での中性子フルエンスのドジメトリーに関する講演が行われた。彼の方法は、中性子束に関する種々の積分的な測定値と計算値だけでなく、断面積とその共分散行列を一般化最小二乗法を用いて組み合わせ、断面積の調整も同時に行っていくというやり方で、LEPRICON というコードシステムが構築されている。この方法では、事前情報としての断面積の共分散が必要不可欠な量である。結論としては、ENDF/B-V を用いた計算においては、Fe-56 の非弾性散乱が主要な感度を有しており、9 % ほど過大評価になっている可能性が示唆された。

### 3.2 トピックス 2 共分散データの生成

本セッションが本会議の主要なテーマで、14 件の発表がなされた。

ANL の D. Smith は、実験データに対する誤差情報を、micro-correlation と macro-correlation に分割して報告すれば、少ないデータで多くの情報をカバーできる事を示し、さらに相対共分散行列の形にしておけば、後で評価者が合理的な判断を行える事を指摘した。相対共分散行列の方法は、以前彼と筆者が Peelle のパズル(PPP)と呼ばれている最小二乗法における異常解の問題に関して提案した方法で、次第に有用性が認識されてきている。中国原子能研究院の Zhao は、モデルパラメータの誤差を、モーメント法と称する方法で求める方法を提案し、TNG を使った F-19 の断面積計算値の共分散推定に適用する例を示した。この方法は、後述する神田氏の方法の一つの近似という位置づけが出来る。次いで、CBNM の Bastian が、グリッド付き電離箱等の  $(E, \theta)$  情報から、直接、二重微分断面積の Legendre 展開係数とその共分散行列をイベント毎に蓄積していく方法を説明した。

筆者は、データの非線形変換とトランケーションが最小二乗解に与える影響についての講演を行った。従来、データを変換すると、変換前後で最小二乗解が変化してしまう

という現象が知られている。最小二乗解が変化しないためには、デザイン行列(感度行列)に対しても共分散行列と同一の変換を施してやる必要がある事を示し、さらに、データ空間をトランケートすると、正しい最小二乗解が得られない事がある事をも指摘した。この二つの指摘によって、前出の Peelle のパズルは完全に解決が可能である事も示した。引き続いて BNL にて行われた核データ評価手法に関するシンポジウムにおいてもこれに関する発表を行い、一応のコンセンサスが得られたという感触を得た。

IPPE (オブニスク) の Rabotnov は、最初の講演で、Pade 近似を用いてデータフィッティングおよび共分散行列の導出を行う方法を、次いでそれをドジメトリー断面積の評価に用いた結果を示した。この方法では、断面積に相当量の fluctuation がある場合でも再現する事が出来るので、かなり適用性の高い方法のように思われた。九大の神田氏は、実験データと理論計算値から評価済みデータの共分散行列を算出する方法についての講演を行い、パラメータや実験値間の相関に関する種々の仮定が結果に及ぼす影響について議論した。この方法は、数学的な形式としては他の誰よりも厳密な方法であると考えられているが、それだけに正しい入力データを与えるために必要な努力は相当なものである。次いで、IPPE の Pronyaev、PTB の Mannhart は、ベイズの定理によって評価値を up-date しかつ共分散をえる手法、主として実験データの共分散の推定法についての講演を行った。Pronyaev の方法は、ORNL で開発された GLUCS プログラムを改良したものをを用いている。一方、Mannhart は、Cf-252 の自発核分裂中性子スペクトル中での平均断面積の評価にベイズの定理を適用した例を紹介した。

ORNL の Hetrick (GLUCS の作成者) は、ENDF/B-VI の Cr、Fe、Ni、Cu、Pb の共分散行列を計算した方法についての報告を行った。特に、実験データがほとんど無い場合に共分散データを評価する、“合理的に見える主観的”な方法を紹介した。次いで、IRK の Vonach は、DDX の共分散行列を、Kalbach-Mann 型の Legendre 展開の展開係数の共分散の形で ENDF のファイルに収納するフォーマットを提案し、評価例を紹介した。Vonach の方法が DDX の共分散を直接データから推定するのに対し、LANL の Muir は同じことを理論計算パラメータの共分散行列と感度行列の情報としてファイル化する方法を紹介した。次に IRK の Tagesen は、ファイル化された共分散行列が持つべき対称性その他の条件をまとめた。本セッションの最後は、ORNL の N. Larson が、SAMMY コードを用いた中性子共鳴解析の結果が、データの変換によって異なる事等を紹介したが、この件は筆者が示した一般論で説明可能であるとの事で意見が一致した。

### 3.3 トピックス3 共分散ファイルの処理

ORNL の Broadhead は、single level Breit-Wigner 公式の共鳴パラメータの共分散行列を処理する方法についての解説を行った。最後に、NEA データバンクの Sartori は、評価済み核データの共分散データのチェック、プロットおよび処理を行う一連のコンピュータプログラムの紹介を行った。

## 4. まとめとレコメンデーション

会議二日目には、二つのグループに分かれての working group 会合がもたれ、最終日に全体会合でその成果が報告された。日本からの参加者が二名であったので、神田先生がグループ A に、筆者がグループ B に参加した。

グループ A は、“Generation of Covariances to Meet User Needs; Handling Stubbornly Discrepant Data” と命名されていた。本グループでは、今後共分散データを整備していく上で、マンパワー等を考えると、重要度の低いものには定性的な、高いものには詳細な共分散データを与えていくという二本立ての戦略が必要になるだろうとして上で、定性的なものには ORNL の方式等が参考になるとしている。詳細な方法としては、Muir、神田氏によって紹介されたようなパラメータの共分散と感度行列より算出する方法が挙げられた。

グループ B “Covariance File Formats and Processing” では、DDX の共分散をファイル化する方法や、簡単な共分散はコメント部 (MF=1) に記述しておくだけでも十分ではないだろうかとか、共分散データの処理プログラムのベンチマークテストの必要性等についての議論が行われた。

## 5. 共分散雑感

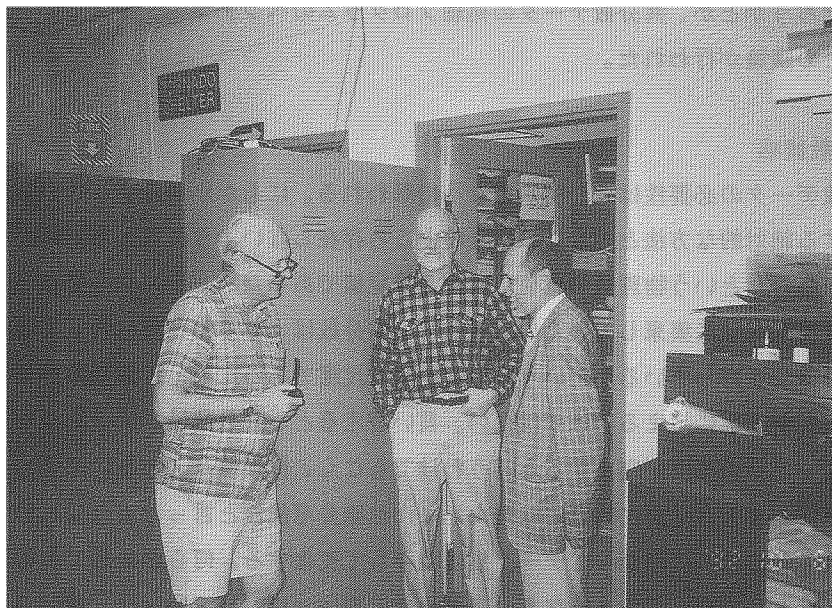
共分散データの必要性は今や明かのように思われる。にもかかわらず、共分散データを評価する絶対的な方法というものは今のところ存在しないように見える。断面積の評価値が、断面積という物理量の真値に対する推定値であるため、データの蓄積と共に一般には次第に真値に集束していくのに対して、共分散は、ある物理量に対して我々がどの程度の理解を有しているかという信頼度を表す尺度であるため、断面積の評価値が同じだとしても一意に定まるわけではない。言い替えると、共分散は、データ量が増えたからと言ってその精度が向上すると言うわけでもなく、極限值 0 (あるいは Ericson fluctuation のような真に物理的な理由、または微分可能性と言ったような純粋に数学的な要請による値) に向かってデータ量に依存して変化する。何らかの形で共分散の評価を行ったとしても、このようなものをどうやって verify していったら良いのであろうか。Tagesen の講演はこれに関する一考察であるが、単に形式的な議論に終始してい

るため余り有用性があるようには思われない。

## 6. 本当の雑感

今回はシカゴ経由でオークリッジに入ったので、久しぶりにアルゴンヌを訪れる事ができた。周知のごとく、中性子散乱データで世界をリードしてきた同研究所の高速中性子発生装置 (FNG) が、とうとう予算カットのためシャットダウンとなってしまった。昨年10月の時点で既に装置はストップしており、後は正式な decommissioning を待つばかりである。A. B. Smith、R. D. Lawson、J. W. Meadows 等そうそうたる人達がレイオフされ、今は年1ドルの涙金で趣味としてデータ解析を行っている。写真は、左から A. B. Smith、P. T. Guenther、H. K. Vonach (IRK、共分散会議出席のため在米中) の諸氏である。A. B. Smith 氏はこれまで計ってきたデータの解析で今後10年間は論文を書けるだろうと言っていた。見方を変えると、退職してからも研究所に来なければ来て計算機くらいは自由に使えるアメリカの制度は、貴重な知的財産が急速に散逸するのを避けるという意味では日本も見習っても良いのではないだろうか。いずれにしても、筆者としてはノスタルジックな気持ちを押さえる事が出来なかった。

最後に、長年共分散の分野で指導的な役割をはたしてきた Peelle 氏が、その後肝臓病の悪化のため肝移植を受けたとの事である。経過は順調との事であるが、彼の早い快復をお祈りしたい。



FNG の懲りない面々(?) + 1