話題・解説(II)

共分散評価のためのツールの開発

九州大学先端エネルギー理工学専攻

河野 俊彦

kawano@aees.kyushu-u.ac.jp

I. はじめに

誤差の評価は地味である.

断面積の評価なら、その最終目標は「断面積の真の値」であり、それはどこかに存在するはずで ある.日米の核データライブラリの断面積を見比べて、どちらがより正しそうかという比較検討は 科学的である.ところが、断面積評価値の誤差を比較して、こちらは5%の誤差、あちらは3%の 誤差、よって誤差の真値は4%±1% — というわけにはいかない、誤差は物理量では無いのである.

5%の誤差と言えば,それは4%でも6%でも無くて絶対に5%なのだろうか.誤差評価自体は, 当然何かをよりどころに行われているはずだが,任意性が入り込む余地は多分にある.5%の誤差 に±1%の誤差は無いのか?では,±1%の1という数字に誤差は不要なのだろうか.誤差の誤差 で堂々巡りの議論をしてるようでは,あまりに非科学的である.誤差論自身は非常に科学的なも のであるが,いざそれを実践しようとすると,概念的な曖昧さが次々と現れ,眉に唾をつける癖 がつく.

評価済核データライブラリに対する誤差・共分散ファイルの重要性は国際的にも認められたものであるが,実際には統一的な評価手法が確立されているとは言いがたく,未だに手法そのものについての議論がしばしば起こっているのが現状である.そんな状況(物理的なものと概念的なもの,あるいは理想と現実の葛藤)の中で,JENDL-3.2のための共分散データ評価作業がシグマ研究委員会共分散評価ワーキンググループで行われた.その成果として,高速炉設計の為の主要な構造材核種及びアクチノイドについての共分散データが公開されている.またJENDL-3.2の改訂版であるJENDL-3.3の評価もほぼ終了しており,ここでも断面積評価と並行して共分散データの評価が行われている.これらの共分散評価作業を通じて共分散評価のためのツール類が開発されており,JENDLの共分散評価に貢献している.

JENDLで採用されている共分散データの評価手法は二つに大別される.一つは実験データの誤差(系統誤差・統計誤差)から評価値の共分散を算出するもので,GMA コードのような最小自乗法が用いられる.同時評価⁽¹⁾で得られる共分散もこの種類のものである.もう一つの手法は共分散評価システム KALMAN⁽²⁾を用いるものである.KALMAN は理論計算に基づいて共分散を算出するもので,コンピュータコード KALMAN はその計算の核となるものである.KALMAN での共分散評価では,実験データの統計誤差・系統誤差を考慮するが,GMA コードのような実験データのみから得られる共分散とは違い,実験データに系統誤差が与えられていなくても,核反応模型のパラメータ依存性を使って評価値の相関係数を得ることができる点に特徴がある.この特徴を利用することで,断面積データ以外の多くの物理量の共分散を評価することが可能である. 本解説では,この KALMAN システムの紹介を中心に,共分散評価の原理と JENDL における評価の手法を紹介してゆく.

II. 共分散評価の原理

誤差の伝播

評価値の共分散評価とは,誤差の伝播を計算することである.実験データの精度(共分散),ラ ンダムに分布するデータの数,データにフィットする理論や関数の自由度から,評価値の誤差が決 定される.これら全てが得られる共分散に影響するために,同じデータに基づく評価であっても 評価手法が異なれば得られる共分散も異なってくる.

実験データの誤差が小さければ,評価値の誤差も小さくなる.もちろん,実験の誤差評価を信じるならの話.一番単純な例は,ある点xだけに物理量の測定値 $y \pm z$ がある場合を考えればよい.この測定がそれを知る唯一の手段なら,評価値は $y \pm z$ 以外に取りようが無い.

測定値の数が増えれば,評価値の誤差は小さくなると考えられている.完全に独立した2つの 測定 $y_1 \pm z_1 \ge y_2 \pm z_2$ があれば,評価値(平均値) \overline{y} の誤差は, z_1 や z_2 よりも小さい.測定の回 数が増えていけば, \overline{y} の誤差はゼロに近付いていく.ここで,測定が本当に独立であるかどうかが 問題である.もし系統誤差 z_{syst} があるようなデータの平均を取ったとき,その誤差は z_{syst} よりも 小さくならない.データの数が多くなれば,統計的な変動は均されていくが,系統的なずれは最 後まで残ったままである.

GMA や SOK⁽³⁾ のような一般化最小自乗法のコードでは,実験データの統計誤差・系統誤差お よびデータの数とその分布から,ある決まった区間でのデータの平均値と誤差を計算する.これ はデータにフィットする関数形の自由度が無限大であることに対応する.得られる相関係数は実験 データが持つ系統誤差を反映したものである.

KALMAN を用いた共分散評価では,実験データの統計誤差・系統誤差は当然考慮するが,実 験データに系統誤差が与えられていなくても核反応模型から相関係数が出て来る.実際には実験 データの系統誤差を無視することはできないので,KALMAN が与える相関係数は,実験値のも つ系統的な振る舞いにフィットする関数(核反応模型計算)の制約が加わったものとなる.一方, KALMAN による共分散評価の利点の一つは,実験データが存在しない領域でも共分散を計算で きることである.KALMAN は存在する実験データからパラメータの共分散を計算し,さらにパ ラメータ共分散から模型計算値共分散への誤差伝播を計算する.実験データが存在する領域で計 算値の誤差が決定され,その大きさに応じて他の領域の誤差を内外挿していることになる.GMA やSOK のようなコードは実験データの存在しない領域での誤差の評価に使えないので,この利点 は大きい.

計算値の共分散は,次のような2段階の誤差の伝播を計算することで得られる.

- 測定データから模型パラメータへの誤差の伝播 $P = (C^t V^{-1} C)^{-1}$
- パラメータの共分散から計算値への誤差の伝播 $M = CPC^{t}$

ここで, V, P, Mは,実験データ,模型パラメータ,計算値の共分散行列である.行列Cは感度行列であり,計算値に対するパラメータの微分係数 $(\partial f/\partial x)$ を含んでいる.

KALMAN が計算するのは,良く知られている次の Bayes 推定の式である.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}_1 &= \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{\mathsf{P}}\boldsymbol{\mathsf{C}}^t\boldsymbol{\mathsf{V}}^{-1}\left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_0)\right) \\ &= \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{\mathsf{X}}\boldsymbol{\mathsf{C}}^t\left(\boldsymbol{\mathsf{C}}\boldsymbol{\mathsf{X}}\boldsymbol{\mathsf{C}}^t + \boldsymbol{\mathsf{V}}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_0)\right) \end{aligned}$$
(1)

$$\mathbf{P} = \left(\mathbf{X}^{-1} + \mathbf{C}^{t}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{C}\right)^{-1}$$
$$= \mathbf{X} - \mathbf{X}\mathbf{C}^{t}\left(\mathbf{C}\mathbf{X}\mathbf{C}^{t} + \mathbf{V}\right)^{-1}\mathbf{C}\mathbf{X}$$
(2)

ここで, $x_0 \ge x_1$ は事前・事後パラメータのベクトル,yは実験データのベクトルである.

f(x)はパラメータ x を使って計算した値のベクトルであり, 普通は非線形関数である.これを パラメータ x_0 の近傍で Taylor 展開して線形化する.

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \simeq \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_0) + \boldsymbol{\mathsf{C}}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_0) \tag{3}$$

KALMAN はパラメータの共分散 P を計算し, さらにパラメータから計算値への誤差伝播 CPC^tを計算する.これが評価値の共分散となる.実際の計算では,パラメータの共分散 P には実験値の共分散の他にパラメータの事前共分散 X も含まれるが,共分散評価では X への依存性を小さくするために,非常に大きな誤差・共分散の値を X として用いる.

2. 簡単な計算例

KALMAN がどのように共分散を計算するのかを,簡単な例を用いて解説する.KALMANの計算には,フィッティング関数のパラメータに関する微係数が必要であるが,これが解析的に得られる

$$y = \frac{c}{a + (x - b)^2}$$
(4)

という Lorentzian を考える.パラメータは3つあり,それぞれの値をa = 1, b = 2, c = 3として おく.パラメータの相対感度を Fig. 1 に示す.パラメータ c は関数全体に掛かっているファクタな ので,相対感度は1である (cが1%変化すれば関数全体も1%変化する).aは幅なので,これを増 やせば Eq. (4) のピーク付近の値は減少する.bはピークの位置なので左右で感度の符号が変わる.

測定値が x = 2 の 1 点だけにある場合を考える.測定値は $y = 3.0 \pm 10\%$ とする.パラメータの誤差は 100%と仮定する.この測定値と感度係数を用いてパラメータの共分散を KALMAN で計算すると,次のようになる.

parameter	$\operatorname{error}[\%]$	corre	elation	[%]
a	71	100		
b	100	0	100	
c	71	99	0	100

Fig. 1 からわかるように, $x = 2 \ {\columnosises} v$ 度はゼロになる.従ってこの点に測定値が あっても, b は全く変動しない.逆に $a \ge c$ には,測定値の誤差(10%)に見合った大き さの誤差が与えられる.上の例ではいづれ も71% である.このパラメータ共分散から, $x = 2 \ {\columnosises} c$ の誤差を計算してみよう. bの感度はゼロなので,これを省いた $a \ge c$ の誤差からなる 2×2 の共分散行列を考える. Fig. 1 から, $x = 2 \ {\columnosises} c$ の 方 $\partial y / \partial a(a/y) = -1$, $\partial y / \partial c(c/y) = 1$ で ある.また,上の表から相関係数 r = 0.99である.



$$(\delta y)^2 = \left(\begin{array}{cc} \frac{\partial y}{\partial a} \frac{a}{y} & \frac{\partial y}{\partial c} \frac{c}{y} \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc} \sigma_a^2 & r\sigma_a \sigma_c \\ r\sigma_a \sigma_c & \sigma_c^2 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} \frac{\partial y}{\partial a} \frac{a}{y} \\ \frac{\partial y}{\partial c} \frac{c}{y} \end{array}\right)$$

$$= \left(\begin{array}{cc} -1 & 1 \end{array}\right) \left(\begin{array}{cc} 0.71^2 & 0.99 \times 0.71^2 \\ 0.99 \times 0.71^2 & 0.71^2 \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} -1 \\ 1 \end{array}\right)$$

$$= 0.01$$

$$(5)$$

従って, $\delta y = 0.1\%$ であり,与えた誤差を再現しているのがわかる.

x = 2の点以外ではどのようになるだろうか.他の点でも,KALMAN は単に Eq. (5)のような 計算をするだけである.計算された誤差は Fig. 2 に細い実線で示されている.x = 2で評価値の 誤差が測定値の誤差に規格化され,それ以外では Eq. (4)の感度を使って誤差を外挿している.

同様の計算を, x = 4 だけに測定値がある場合について計算した.今度はbの感度はゼロではないので,パラメータ共分散行列は 3×3 になる.下の結果に見られるように, a のような "鈍い" パラメータの誤差はあまり小さくならない.

parameter	$\operatorname{error}[\%]$	correlation $[\%]$		
a	99	100		
b	54	17	100	
c	85	7	-97	100

この場合は,x = 4で評価値の誤差が10%に規格化される.さらにx = 6の場合とx = 8の場合についても計算を行い,それらの場合にKALMANが与える評価値誤差をFig.2に示している. どの場合も測定値は1点だけであるが,測定値のある場所で測定誤差を再現しているのが見える.

もしx = 2, 4, 6, 8の4点に測定値があると, KALMAN が計算する誤差はそれら4点の測定値 誤差を再現しようとする.Fig.2の太い実線が計算結果であり,4つの細い線の極小値の包絡線の ようになっていて,全体的に誤差が10-30%に抑えられている.このときの相関係数を3次元表示 したものを,Fig.3に示している.

データが数点ある場合は,全ての測定値 の誤差を忠実に再現するというわけにはい かない.上の例では $x = 2 \sim 8$ で全て10%の誤差を仮定したが,もしx = 8のときの 測定値の誤差だけが 50%となる場合でも, x = 8 での計算値の誤差は 50%よりもずっ と小さい 13% 程度である . KALMAN を 使った共分散評価では,データの振る舞い を表現するモデルは正しいものと考えてい る.ここの例では,全てのデータはEq. (4) に従いつつ,そのパラメータの統計的な変 動によって生成される.パラメータの精度 がx = 2, 4, 6での測定によって決定される なら,x = 8での測定値が大きな誤差を持っ ていても、そこでの計算値の精度は測定値 の精度よりも良くなるのである.





Fig.3: データが4点ある場合の相関係数の3次元表示.

測定点数が増えて行くとどうなるだろうか.もしそれらの測定が互いに独立なら,データ点数が 増えるに従ってパラメータの誤差は小さくなって行く.その結果,計算値誤差も小さくなる.ここ でも問題なのは,本当に独立かどうかである.なんらかの系統誤差が存在するなら,たとえデータ 点数が多くても評価値誤差はゼロには漸近しない.KALMANによる共分散評価でも,実験デー タの系統誤差を正しく見積もることは重要である.

3. 核反応模型を使う計算例

次は実際に核反応模型を使って共分散評価を行う例である.光学模型は,ポテンシャルパラメータ があれば弾性散乱や全断面積を計算できる単純な模型なので,これを例に使おう.²⁰⁹Biの10 MeV での中性子弾性散乱断面積角度分布の共分散を,ポテンシャルパラメータの誤差から計算する.感 度を計算するパラメータとして,実部 Woods-Saxon ポテンシャルパラメータ*V*, r_v , a_v と,虚部 微分型 Woods-Saxon ポテンシャルパラメータ W_s , r_w , a_w の6 つを考える.スピン-軌道相互作用 ポテンシャルのパラメータは固定しておく.

Parameter	error [%]	correlation [%]					
V	2.60	100					
r_v	1.93	-98	100				
a_v	5.83	59	-67	100			
W_s	15.5	-70	67	0	100		
r_w	1.98	66	-75	71	-27	100	
a_w	9.25	42	-35	-29	-90	-14	100

実験データとして, Lawson らの測定値⁽⁴⁾を用いる. KALMAN を使ってこの実験値に基づく ポテンシャルパラメータの共分散を計算したのが,次の Table である.

半径パラメータや実部ポテンシャル深さは,計算値への感度が大きいために,与えられる誤差は 小さくなる.逆にdiffusenessパラメータの変化による計算値の変化は小さいので,それらの誤差 は大きい. このポテンシャルパラメータ共分散から計算される微分弾性散乱断面積の共分散を Fig. 4 と Fig. 5 に示している.Fig. 4 は誤差の大きさを散乱角度毎にプロットしたもの,Fig. 5 は相関係数 を 3 次元表示したものである.面白いのは Fig. 4 で,これは実験値と計算値の誤差を表示している のであるが,あたかも実験値の誤差にデータフィットした結果のようである.実験データの誤差に は数か所の極大値があるが,ここは角度分布の丁度谷間にあたる部分で,断面積が非常に小さく誤 差は大きい.この谷の部分ではパラメータの感度が小さくなり,計算値の誤差も大きくなっている.



Fig.4: 実験データと計算の誤差の比較.

Fig.5: 相関行列.

III. 共分散評価システム

1. KALMAN

共分散評価の中心となるコード KALMAN はもともと九大で開発されていたもので,名前はカ ルマン・フィルターで知られている R.E. Kalman による.多くの変数を含む非線形最小自乗推定 を行うプログラムとして用いられており,例えば GNASH⁽⁵⁾の計算に必要な全ての準位密度パラ メータを同時に推定することが可能である^(6,7).

KALMAN 計算は Bayes の定理に基づいており, Eq. (1),(2) の事前共分散 X が必要である.こ れはパラメータの事前値の誤差であり, どのような値を与えるかで結果が変わる.もしパラメータ に関して事前に何も知り得ないのなら, パラメータの値の誤差は非常に大きなものとなる.一方, パラメータについて何らかの情報があれば,それを誤差の大きさと言う形で表現する.KALMAN コードは,事前共分散と実験データに基づいてパラメータ推定を行い,パラメータの共分散を与 える.このパラメータ共分散から断面積計算値共分散への伝播を計算すれば断面積の共分散が計 算されることから,共分散評価ツールとして利用できる.

パラメータに事前共分散を付けることで,パラメータの変動は制約される.パラメータの事前 誤差が極めて小さければ,計算結果がどんなに実験値から離れていようとパラメータは動かなく なる.このような制約はパラメータが非現実的な値に変動することを抑える効果があるが,無闇 に抑制を加えると計算された断面積誤差は非常に小さくなってしまう.KALMAN で計算された 誤差は非常に小さいという誤解がここから生じた.良く考えてみれば,パラメータを非現実的な 値まで動かさないと実験値を再現できないということは,もとのパラメータの選択が悪かっただ けである.実験値から極端に離れた計算値を無理矢理フィットしようとすると,Eq(3)の線形化 近似が成り立たなくなってしまう.結局この問題はパラメータの事前値と事前共分散の取り方に あることがわかり,現在では解決している. KALMAN コードそのものには断面積計算を行う部分は無いので,他のコードと併用して共分 散評価を行う.ELIESE-3⁽⁸⁾ や GNASH⁽⁵⁾ を KALMAN システムに組み込んで共分散評価を行っ たものに,1994年の Gatlinburg での核データ国際会議で報告した⁵⁶Fe の断面積共分散の評価⁽⁹⁾ がある.その後,JENDL-3.2 Covariance File, JENDL Dosimetry File, JENDL-3.3 の評価用に利 用され,また計算できる共分散の種類も,弾性散乱,非弾性散乱断面積,全断面積,捕獲断面積, 分離共鳴パラメータ,非分離共鳴パラメータ,即発核分裂中性子スペクトル等に拡張されている.

2. 評価システム

KALMAN コードは Eq. (1), (2) を計算するだけで,模型計算を行う部分は含まれない.共分散 評価を行うにはその部分を別途用意し,感度行列 C を作成する必要がある.核反応模型計算コー ドにパラメータの感度を計算するための一連の道具を追加してシステム化したものが,共分散評 価システム⁽²⁾として評価者に提供されている.システムとは言っても,実際は UNIX 上の小さな プログラムの集合体のようなものであり, UNIX に馴染みの無い人にとってはあまり効率の良い システムではないかもしれない.また,ツールに C, Fortran, Perl, Shell Script といった言語が混 在しているのも,敬遠される一つかもしれない.良くも悪くも作者の趣味である.

共分散評価の大まかな手順は,

- 1. 模型計算コードの感度を計算し,感度行列のファイルを作る.
- 2. 実験データとその共分散のファイルを作る.
- 3. KALMAN を実行し、パラメータと計算値の共分散を得る.

の3つの段階からなる.ここで一番面倒なのが(1)の感度計算であり, KALMAN システムではこの計算がなるべく簡単にできるように作られたものである.

感度を計算する簡単な方法は数値微分である.模型計算コードの入力データを用意し,それを 実行する.次に入力パラメータの値を少しだけ変化させて,計算結果がどれくらい変わるかを見 れば良い.パラメータへの摂動を与えるために,模型計算コード毎に簡単なデータパッチプログ ラムが用意されている.これらは一種のフィルターのようなもので,コードへの入力データをこ のフィルターに通すと,中身の一部分だけが変化するようになっている.一部が書き換えられた 入力データで計算を行い,その結果を使って感度行列を計算する.

現在までに以下のようなコードが KALMAN システムに取り込まれている.

- $GNASH^{(5)}$
 - 反応断面積を計算する GNASH であるが,透過係数計算用に ELIESE-3 が統合されている EGNASH を用いている.計算するのは, (n, p), (n, a), (n, 2n) 等の断面積で, KALMAN システムでは準位密度パラメータと光学ポテンシャルパラメータの感度を計算する.
- ELIESE- $3^{(8)}$
 - 光学模型計算コード ELIESE-3 は、全断面積共分散評価と、弾性散乱の角度分布(但し1次の Legendre 係数 P₁のみ)の共分散評価に用いられる. P₁を計算するのは、これが *µ* と関連するためである。

- $ECIS88^{(10)}$
 - これも ELIESE-3 同様,全断面積共分散評価に用いられるが,その他に非弾性散乱の 直接過程成分の共分散も計算する.
- $CASTHY^{(11)}$
 - Hauser-Feschbach 統計模型コード CASTHY では,放射捕獲断面積と,非弾性散乱断 面積の複合核反応成分を計算する.
- $FISPEKL2^{(12)}$
 - このコードは大澤氏 (近畿大)によって開発されている即発核分裂中性子スペクトル を計算するものである.Madland-Nix⁽¹³⁾の理論を大澤ら⁽¹⁴⁾が修正したモデルを用い ている.核分裂中性子スペクトルの共分散を計算するために KALMAN システムに取 り込まれている⁽¹⁵⁾.
- $ASREP^{(16)}$
 - 非分離共鳴パラメータの共分散を計算する.ASREP コードはパラメータの自動探索機 能があるが,それを使わずに KALMAN と組み合わせることで,パラメータの共分散 が計算される.
- $gfr^{(17)}$
 - このコードは筆者が作成した Reich-Moore⁽¹⁸⁾の *R*-matrix コードであり,分離共鳴パ ラメータの共分散を計算する.共鳴パラメータから point-wise の断面積を計算する他, 統計分布に従う分離共鳴を乱数によって生成する機能がある.

以上のように,ここには分離共鳴領域から MeV 領域のスムースパートにわたる計算コードが一応 用意されており,評価核データライブラリのための共分散評価に利用されている.共分散評価に 対する需要を全て網羅しているわけではないが,感度の計算さえできればコードを新たに追加す るのはさほど難しくないだろう.

3. 同時評価計算コード SOK

プログラム SOK⁽³⁾ は, JENDL-3.3 の重核の核分裂断面積を評価する為に新しく作成されたものであり, KALMAN とは独立の共分散評価ツールとして提供されている.このプログラムは0次もしくは1次のスプラインを用いた最小自乗法計算コードであり,核分裂断面積のようにエネルギーに対して複雑に変化する量の評価に向いている.

核分裂断面積の測定値は,絶対値として測定されているものと,核分裂断面積比として相対的に 測定されているものがあり,それら両方の測定値に矛盾なく評価を行う必要がある.具体的には, 絶対値の測定 σ_1, σ_2 と,比の測定 σ_1/σ_2 があったときに, σ_1 と σ_2 の最小自乗解を求める.植之 原ら^(7,19) が JENDL-3 の為に行った同時評価では,断面積比のデータの対数を取ることで線形化 ($\log \sigma_1 - \log \sigma_2$ となる)を行い,絶対測定と相対測定に対して同時に線形最小自乗法を適用した.

JENDL-3.3 での同時評価⁽¹⁾に用いた SOK コードでは,線形化の手法は同一であるが,より多 くの測定データの取り扱いを可能にするため計算アルゴリズムを変更した.SOK が実際に計算し ているのは Eq. (1) と Eq. (2) であり,この部分は KALMAN と同一である.但しC は感度行列で はなく,補間を行うための行列になることが KALMAN と異なっている.SOK は "Simultaneous evaluation On Kalman" に由来する.なぜ SEOK や SEK ではなく SOK なのかと言うと,それは 単に語呂の問題である.

JENDL-3.3 では, ²³³U, ²³⁵U, ²³⁸U, ²³⁹Pu, ²⁴⁰Pu, ²⁴¹Puに対する核分裂断面積の測定値, およ び²³³U/²³⁵U, ²³⁸U/²³⁵U, ²³⁸U/²³³U, ²³⁹Pu/²³⁵U, ²⁴⁰Pu/²³⁵U, ²⁴¹Pu/²³⁵U, ²⁴⁰Pu/²³⁹Puの核分 裂断面積比の測定値をもとに評価が行われた.同時にこれらの断面積の共分散も得られている.結 果の例として, ²³⁵Uの断面積誤差の相関係数をFig. 6 に示す.また, Fig. 7 は, ²³⁸U と²³⁵Uの 間の相関係数である.ある入射中性子エネルギーでの断面積の比として評価に用いられているた め,対角線上に強い相関が現れる.



Fig.6: ²³⁵U核分裂断面積の相関.



Fig.7: ²³⁵Uと²³⁸Uの核分裂断面積間の相関.

SOK コードは同時評価だけでなく,通常の最小自乗法および共分散評価にも利用できる.JENDL-3.3 では,核分裂断面積共分散評価の他に, 238 U(n, 2n),(n, 3n)反応断面積共分散, 238 U (n, γ) 反応断面積共分散, 238 Uo ν_d 共分散の評価に用いられている.核種が 238 U に限られているが,核データ評価での最小自乗法では GMA コードのユーザが多く,なかなか SOK が普及しないのが残念.

IV. おわりに

JENDL-3.2 共分散ファイルおよび JENDL-3.3 での共分散評価という 2 つのプロジェクトを通じ, KALMAN コードを中心とした共分散評価システムを九大と原研核データセンターで開発してきた.現物は小さなプログラムの集合体なので,システムとは言えないかもしれないが,それでも核データライブラリ共分散評価の実用に耐え,かつ世界的に見ても類を見ないものであろう.

ここではこのシステムの概要を紹介し,また KALMAN コードがどのように共分散を計算する のかを,簡単な例を用いて示した.KALMAN は,まず実験値の誤差の大きさを再現するように 模型パラメータの誤差の大きさを決定する.そして,パラメータから計算値への誤差の伝播を計 算することで,実験データの無い領域に誤差の内外挿を行っているのである.馴染みの無い方々 には,共分散評価とは何か複雑怪奇なことをしているように見えるようであるが,実際は案外簡 単なことをしているに過ぎないのが分かって頂けたのではないだろうか.

誤差というどちらかと言えば曖昧な量に取り組んできたために,評価ライブラリそのものの開 発からすれば,共分散評価は地味な印象を持たれていると思う.しかしながら,そこに用いられ ている理論的な背景や計算のテクニックは科学的かつ工学的である.また,誤差を情報の量とし て定量化する情報エントロピーという考え方もあり,今後の共分散評価に役立つものと思われる. 地味な共分散評価にも,よく探してみれば色々と面白そうなトピックスが隠れているようである.

— References —

- T. Kawano, H. Matsunobu, T. Murata, A. Zukeran, Y. Nakajima, M. Kawai, O. Iwamoto, K. Shibata, T. Nakagawa, T. Ohsawa, M. Baba, and T. Yoshida, *J. Nucl. Sci. Technol.*, 37, 327 (2000).
- (2) T. Kawano and K. Shibata, "共分散評価システム," JAERI-Data/Code 97-037 (1997).
- (3) T. Kawano, H. Matsunobu, T. Murata, A. Zukeran, Y. Nakajima, M. Kawai, O. Iwamoto, K. Shibata, T. Nakagawa, T. Ohsawa, M. Baba, and T. Yoshida, "Evaluation of Fission Cross Sections and Covariances for ²³³U, ²³⁵U, ²³⁸U, ²³⁹Pu, ²⁴⁰Pu, and ²⁴¹Pu," JAERI-Research 2000-004 (2000).
- (4) R.D. Lawson, P.T. Guenther, and A.B. Smith, *Phys. Rev. C*, **34**, 1599 (1986).
- (5) P.G. Young and E.D. Arthur, "GNASH, A Pre-equilibrium, Statistical Nuclear-Model Code for Calculation of Cross Sections and Emission Spectra," LA-6947 (1977).
- (6) Y. Uenohara, M. Tsukamoto, and Y. Kanda, Nucl. Sci. Technol., 20, 787 (1983).
- (7) Y. Uenohara and Y. Kanda, Nucl. Sci. Technol., 20, 967 (1983).

- (8) S. Igarasi, "Program ELIESE-3, Program for Calculation of the Nuclear Cross Sections by Using Local and Non-Local Optical Models and Statistical Model," JAERI-1224 (1972).
- (9) T. Kawano, K. Kamitsubo, T. Iwamoto, and Y. Kanda, "Covariance Matrix of Evaluated Data for ^{54,56}Fe Calculated from Nuclear Reaction Models," *Proc. Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology*, 9–13 May, 1994, Gatlinburg, U.S.A., Ed. J. K. Dickens, American Nuclear Society, p.624 (1994).
- (10) J. RAYNAL, "Program ECIS," (unpublished).
- (11) S. Igarasi and T. Fukahori, "Program CASTHY Statistical Model Calculation for Neutron Cross Sections and Gamma Ray Spectrum —," JAERI-1321 (1991).
- (12) T. Ohsawa, "Program FISPEKL2," (unpublished).
- (13) D.G. Madland and J.R. Nix, Nucl. Sci. Eng., 81, 213 (1982).
- (14) T. Ohsawa and T. Shibata, Proc. Int. Conf. Nuclear Data for Science and Technology, Jülich, Germany, 13–17 May 1991, p.965 (1992); T. Ohsawa and T. Shibata, Proc. Int. Conf. Nuclear Data for Science and Technology, Gatlinburg, U.S.A., 9–13 May 1994, p.639 (1994); T. Ohsawa, Proc. the 9th Int. Symposium on Reactor Dosimentry, Prague, Czech Republic, 2–6 Sep. 1996, p.656 (1998).
- (15) T. Kawano, T. Ohsawa, K. Shibata, and H. Nakashima, "核分裂中性子スペクトルの共分 散評価," JAERI-Research 99-009 (1998).
- (16) Y. Kikuchi, T. Nakagawa, and Y. Nakajima, "ASREP : A Computer Program for Automatic Search of Unresolved Resonance Parameters," JAERI-Data/Code 99-025 (1999).
- (17) T. Kawano, "Program gfr," (unpublished).
- (18) C.W. Reich and M.S. Moore, *Phys. Rev.*, **111**, 929 (1968).
- (19) Y. Kanda, Y. Uenohara, T. Murata, M. Kawai, H. Matsunobu, T. Nakagawa, Y. Kikuchi, Y. Nakajima, "Simultaneous Evaluation of Fission and Capture Cross Sections and Their Covariances for Heavy Nuclei," *Proc. Int. Conf. Nuclear Data for Basic and Applied Science*, Santa Fe, New Mexico, 13–17 May 1985, p.1567 (1986).