

# 統計的安全評価における機械学習モデルの適用 (量子回路学習の適用性に関する検討)

## Application of Machine Learning Models for Statistical Safety Evaluation (Investigation of Applicability of Quantum Circuit Learning)

木下 郁男 (Ikuo Kinoshita)\*<sup>1</sup>

**要約** 最適評価コードを用いた統計的安全評価における計算コストを低減するため、機械学習モデルの適用性を検討している。統計的安全評価に機械学習を適用するにあたっては過学習を防ぐ必要がある。量子回路学習は古典的深層学習の量子アナロジーであり、最適化を行うパラメータ付き量子回路がユニタリー変換によって構成されるため、過学習が起こりにくいと期待されている。本論文では、量子回路学習を加圧水型原子炉の小破断冷却材喪失事故における燃料被覆管最高温度(PCT)の不確かさ解析に適用した。RELAP5 コードによる少数の解析結果を用いて、パラメータ付き量子回路による学習モデルを構築し、PCTの95%累積確率値の予測精度を検討した。解析対象の複雑度に応じてパラメータ付き量子回路の層数を大きく取り、パラメータの最適化に大域最適化法を適用することによって、量子回路学習は線形回帰よりもPCT95%累積確率値を精度よく評価する結果が得られた。

**キーワード** 統計的安全評価, 量子回路学習, 不確かさ解析, RELAP5

**Abstract** To reduce the computational demand in the best estimate plus uncertainty (BEPU) analysis, an accurate and inexpensive machine learning model is expected to be used to replace the high-fidelity RELAP5 code for rapid determination of the uncertainties on the figure of merit of interest. One of the problems associated with the application of machine learning is overlearning. Quantum circuit learning is the quantum analogue of classical deep learning, which is expected to be less prone to overlearning because the optimized parameters are bound by unitary transformations in the quantum circuit. In this paper, quantum circuit learning is applied to the BEPU analysis of the fuel peak cladding temperature (PCT) for a small-break LOCA scenario in PWRs. The parameterized quantum circuit is trained using a small number of the RELAP5 analysis results and the prediction accuracy of the 95th percentile value of the PCTs is investigated. By taking a large number of layers of parameterized quantum circuits depending on the complexity of the analysis target and applying a global optimization method to optimize the parameters, the 95th percentile value of the PCTs predicted by the quantum circuit learning is found to result in better accuracy and smaller variability than linear quadratic regressions.

**Keywords** Best estimate plus uncertainty (BEPU), Quantum circuit learning, Uncertainty analysis, RELAP5

## 1. 緒言

原子力プラントの安全性について十分な精度での議論を行うためには、詳細な核熱水力計算モデルを実装した最適評価コードによるシミュレーションが不可欠である。最適評価コードは、原子力プラントを階層分解して要素ごとに物理現象をモデル化する。統計的安全評価手法 (Best Estimate Plus Uncertainty, BEPU)<sup>(1)</sup>は、各モデルの不確かさを対応する検証試験に基づいて定量化し、モンテカルロ・サンプリングによりこれらを統合して、コード全体の不確

かさを定量化する。本手法の適用により、解析結果に対する不確かさが定量的に評価され、過度の保守性を排した信頼性の高い評価結果を得ることができる。統計的安全評価手法は、米国、韓国、スペインなどの国で規制に採用されており、日本でも採用が検討されている。日本では、日本原子力学会標準「統計的安全評価の実施基準」が2008年に策定され、2021年に本手法の最新知見を反映した改訂版<sup>(2)</sup>が発行された。

統計的安全評価では、最適評価コードを用いた多数回のモンテカルロ計算により統計的安全評価値を求める。統

\* 1 (株) 原子力安全システム研究所 技術システム研究所

計的安全評価値は通常 95%累積確率値（以下 95%値とも言う）で与えられる。最適評価コードは計算コストが大きいため、統計的安全評価を実施可能な計算時間で行うためには、最適評価コードよりも計算コストの小さな機械学習モデルの適用が有効である。一方、機械学習モデルを統計的安全評価に適用するにあたっては、学習データ以外のデータに対するモデルの計算精度（汎化性能）の確認が必要である。

本誌既報では、日本原子力研究開発機構の ROSA 計画大型非定常試験装置（LSTF）における小破断 LOCA（冷却材喪失事故）模擬実験を対象に、機械学習モデルによる燃料被覆管最高温度（PCT）の不確かさ解析において、交差検証法を適用することにより 95%値の計算精度を推定できることを示した<sup>(3)</sup>。

また、実機プラントにおける小破断 LOCA 事象を対象に、機械学習モデルによる不確かさ解析において、95%値の計算精度の向上のために適応的サンプリング法が有効であること、交差検証法を適用することにより 95%値の計算精度を推定できることを示した<sup>(4)</sup>。

さらに、ROSA/LSTFにおける小破断 LOCA 模擬実験の不確かさ解析を対象に、不確かさ解析の機械学習モデルに対してベイズ推定を適用した。ベイズ推定により、95%値の計算精度をベイズ予測区間として定量的に、順序統計法よりも精度良く評価できることを示した<sup>(5)</sup>。

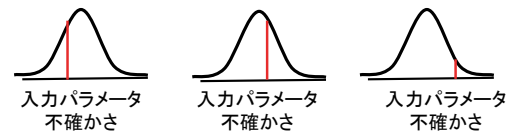
加えて、実機プラントにおける小破断 LOCA 事象を対象に、不確かさ解析の機械学習モデルに対してベイズ推定を適用した。適応的サンプリングを適用することによって、95%値の評価は順序統計法よりも精度が良く、変動が小さいことを確認した<sup>(6)</sup>。

本論文では、不確かさ解析に対して汎化性能の良い機械学習モデルを構築するために、近い将来実現されるゲート型量子コンピュータに用いられるアルゴリズムである量子回路学習<sup>(7)</sup>の適用性を検討する。このため、ROSA/LSTFにおける小破断 LOCA 模擬実験の不確かさ解析に量子回路学習を適用し、95%値の予測精度を評価する。

## 2. 統計的安全評価と機械学習モデル

統計的安全評価手法<sup>(1)(2)</sup>は、着目する事象に対し、まず重要度ランク表（PIRT）を作成して安全評価パラメータに及ぼす影響の大きい重要現象を抽出し、次いで、抽出した重要現象に対応する計算モデルや入力データの不確かさを定量化し、それから、これらの不確かさが安全評価パラ

### ①入力パラメータの不確かさの特定と定量化



### ②入力パラメータの不確かさの組合せ 最適評価コードによる解析

### ③解析結果に対する不確かさ評価

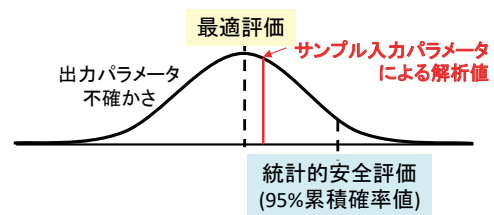


図1 統計的安全評価手法における不確かさ評価

メータの解析結果に及ぼす影響を評価する。

図1に、統計的安全評価における不確かさ評価の概要を示す。統計的安全評価は以下の手順で実施する。①最適評価コードの入力パラメータの不確かさを特定し、確率分布として定量化する。②入力パラメータの不確かさ分布からサンプリングを行って最適評価コードによる解析を行い（図中の赤字で示す）、これらの解析結果を集計して出力パラメータの不確かさ分布を求める。③出力パラメータの不確かさ分布から統計的安全評価値を求める。通常、統計的安全評価値は 95%累積確率値で与えられる。

統計的安全評価においては、95%累積確率値は最適評価コードの直接計算で得られた確率分布から直接評価するのが厳密であるが、これでは計算コストが大きくなる。計算コストを削減するために、順序統計法や応答曲面法を適用して 95%累積確率値の評価が行われている<sup>(2)</sup>。

本研究では、95%累積確率値の評価に対する機械学習モデルの適用性を検討している。機械学習モデルは、最適評価コードの入力と出力を近似するように少数のサンプル（学習データ）から学習されたモデルである。図2に、機械学習モデルの概念図を示す。機械学習モデルは最適評価コードよりも計算コストが小さいため多数回の計算が可能であり、これから得られる確率分布から直接的に 95%累積確率値を評価することができる。

機械学習モデルは、一般に、パラメータを含んだ形式で定式化され、各パラメータはデータに適合するように定め

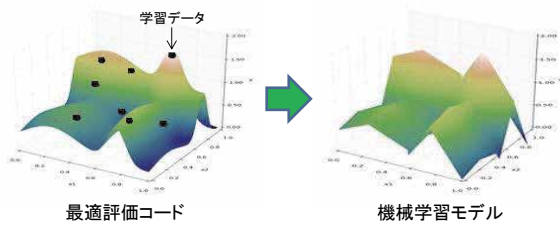


図2 機械学習モデル

られる。機械学習モデルが、学習データに対しては適合しているが、未知のデータに対しては適合できていないことを、そのモデルが過学習（または過剰適合）していると言う。統計的安全評価に機械学習を適用するにあたっては過学習を防ぐ必要がある。

一般に、過学習の要因としては、モデルの自由度が大きすぎることで、学習データが少なすぎるものが考えられる。機械学習モデルを単純で自由度を小さいものとするれば過学習を抑制できるが、あまり単純なモデルでは、モデル自体の精度が悪いものになる可能性がある。一方、学習データを多くすれば過学習を抑制できるが、機械学習モデルの構築のために多くの最適評価コードによる計算が必要となる。統計的安全評価に機械学習モデルを適用するにあたっては、解析対象の複雑度と利用できる学習データ数に応じて適切な機械学習モデルを構築することが必要である。

一般に、解析対象が複雑であると、モデル化に必要な特徴量（説明変数）が多くなる。学習データ数に比較して特徴量が多いと過学習の要因となる。一方、統計的安全評価では、学習データをあまり多く用意することはできない。この場合、過学習を防ぐためには、特徴量を学習に重要なものだけに減らすことや、特徴量を学習に効果的な形に変換することが考えられる。前者については、スパース推定法を統計的安全評価に適用し、実機プラントにおける小破断 LOCA 事象を対象に、不確かさ解析の機械学習モデルに対するスパース正則化の有効性を検討した<sup>(8)</sup>。

本論文では、不確かさ解析の機械学習モデルに対して量子回路学習<sup>(7)</sup>の有効性を検討する。量子回路学習では、 $n$  量子ビットの量子状態が  $2^n$  次元の複素ベクトルになることから、入力データを高次元空間に埋め込むことにより学習に効果的な特徴量に変換することが期待できる。

量子回路学習は、NISQ (Noisy Intermediate-Scale Quantum) コンピュータでの動作を可能とするアルゴリズムである。NISQ コンピュータは、ノイズを含む 50~100 量子ビットサイズの小規模な量子コンピューターで、数年~十年以内に実現可能と考えられている。量子回路学習では、量子回路を、一量子ビット回転ゲートを使用して構築し、

回転ゲートの角度  $\theta$  を調整することで学習を行う。ユニタリー変換のみで回路を構成することが正則化として機能し、過学習が抑えられると期待されている。一方、計算の高速性や精度について検証が必要である。

本論文では、不確かさ解析に対して汎化性能の良い機械学習モデルを構築することを目的として、量子回路学習の適用性を検討する。量子回路学習の実行環境には量子コンピュータのシミュレータ Qulacs<sup>(9)</sup>を使用する。ROSA/LSTF における小破断 LOCA 模擬実験の不確かさ解析に量子回路学習を適用し、95%値の予測精度を RELAP5 コードによる解析結果と比較して評価する。

### 3. RELAP5コードによる不確かさ解析

#### 3.1 対象実験

日本原子力研究開発機構（旧日本原子力研究所）の ROSA プロジェクトにおいて、大型非正常実験装置 LSTF を用いて、PWR プラントの小破断 LOCA 時の再冠水過程に関する実験が実施されている。LSTF における 2 次側強制減圧関連試験<sup>(10)</sup>の概要を以下に示す。

図 3 に、LSTF 装置の概観図を示す。LSTF 装置はウェスチングハウス社製 4 ループ PWR プラントを同じ高さ、体積を 1/48 で模擬し、1 次系冷却材配管の小破断による LOCA や異常な過渡変化を、実炉と同じ圧力、温度、時間経過で模擬することができるよう設計されている。原子炉容器、1 次系ループ、ECCS 注水系から構成されており、4 つのループを 2 つの等体積 (2/48 スケール) ループにより模擬している。

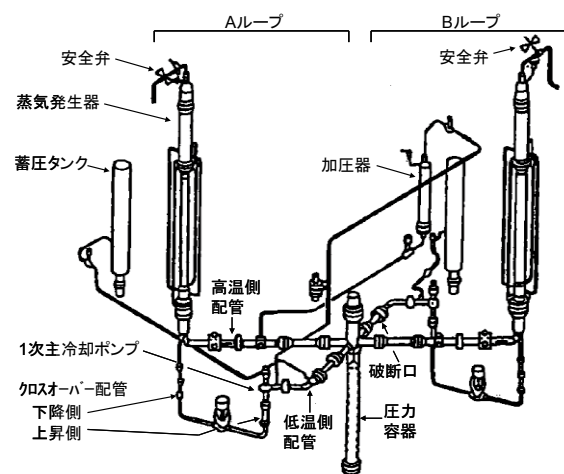


図3 LSTF の外観図

表 1 試験条件／解析条件<sup>(40)</sup>

項目	SB-CL-32
破断サイズ	低温側配管断面積の 1.0%
破断場所	加圧器非接続低温側配管
破断向き	横向き
原子炉トリップ	加圧器圧力低
主給水停止	原子炉トリップと同時
主蒸気隔離	原子炉トリップと同時
補助給水	強制減圧開始と同時 (全ループ)
高压注入	不作動
蓄圧注入	作動 (全ループ)
低压注入	作動前に試験終了
SG2 次側強制減圧	破断後 600 秒, 減温率 200K/h (全ループ)

表 1 に解析対象とした SB-CL-32 試験の試験条件を示す。破断位置は加圧器非接続ループ低温側配管である。破断サイズは低温側配管断面積の 1.0%であり、実機 4 ループ PWR の 3 インチ破断に相当する。SB-CL-32 試験は、高压注入系の機能喪失を仮定している。蒸気発生器の逃し弁の開放による 1 次系の減圧は、破断後 600 秒に全ル

ープで減温率 200 K/h で行い、同時に全ループで補助給水を行っている。蓄圧注入は全ループで作動する条件である。

### 3.2 燃料被覆管最高温度の不確かさ解析

本実験を対象に、RELAP5/MOD3 コード<sup>(11)</sup>を用いて、安全評価パラメータを燃料被覆管最高温度 (PCT) とした不確かさ解析<sup>(12)</sup>の概要を以下に示す。

不確かさ解析は、日本原子力学会標準<sup>(2)</sup>に則って実施した。まず、本実験が対象とする事故時の熱水力挙動を 1 次系のコンポーネントごとに詳細に分析し、PCT を安全評価パラメータとした重要度ランク表 (PIRT) を作成して、不確かさを考慮すべき重要現象を抽出した<sup>(13)(14)</sup>。次いで、抽出した重要現象に対応する RELAP5 コードの計算モデルを特定し、各計算モデルに対して、関連する実験データとの比較を行って不確かさを定量化した<sup>(15)-(21)</sup>。表 2 に、抽出した重要現象と、対応する計算モデルに対して定量化した不確かさ分布を示す。

以上より、各計算モデルのパラメータの不確かさを変化させた統計解析を実施した。入力パラメータのサンプリングはランダム・サンプリング法により行い、全 1024 ケースの解析を実施して、PCT の 95%累積確率値は一定値に収束することを確認した。

表 2 抽出した重要現象と入力パラメータの不確かさ

重要現象	RELAP5 モデル	不確かさパラメータ	最小	最大	ヒストグラム
露出炉心熱伝達 <sup>(15)</sup>	Dittus-Boelter 相関式	熱伝達係数乗数	0.58	1.88	
炉心内相間摩擦 <sup>(16)(17)</sup>	EPRI 相関式	相間摩擦係数乗数	0.13	3.00	
伝熱管凝縮熱伝達 (層流) <sup>(18)</sup>	Nusselt 相関式	熱伝達係数乗数	0.56	1.44	
伝熱管凝縮熱伝達 (乱流) <sup>(18)</sup>	Shah 相関式	熱伝達係数乗数	0.64	1.66	
伝熱管入口 CCFL <sup>(19)</sup>	CCFL 相関式	CCFL 定数	0.70	0.80	一様分布
低温側配管水平層状化 <sup>(20)</sup>	Taitel-Dukler 式	水平層状化判定乗数	0.20	4.63	
ダウンコマ相間摩擦 <sup>(21)</sup>	Kataoka-Ishii 相関式	相間摩擦係数乗数	0.58	1.60	

表3 PCTの不確かさの統計量

項目	RELAP5 計算
5%値 [K]	728.2
平均値 [K]	809.0
95%値 [K]	885.4
歪度 [-]	-0.028
尖度 [-]	2.85

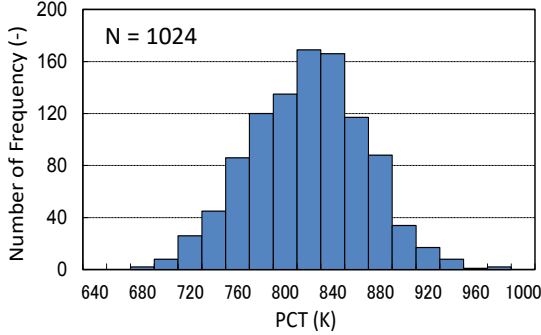
図4 PCTの不確かさのヒストグラム<sup>(12)</sup>

表3に、全1024ケースに対するPCTの不確かさの統計量を示す。図4に、全1024ケースに対するPCTのヒストグラムを示す。ROSA/LSTFにおける小破断LOCA実験の不確かさ解析では、PCTの分布は正規分布に近い分布となった。

#### 4. 量子回路学習による不確かさ解析

本節では、3節で説明したRELAP5コードによる不確かさ解析を参照解析として、不確かさ解析への量子回路学習の適用性を検討する。

##### 4.1 量子回路学習

図5に、量子回路学習の概念図を示す。量子回路学習は、量子回路を学習モデルと見立てて学習を行うアルゴリズムである。パラメータ付き量子回路からの出力と学習データとの差を最小化するようにパラメータを最適化する。パラメータの調整は古典コンピュータで行い、学習モデルを構築する。量子コンピュータで実行する部分と古典コンピュータで実行する部分からなるハイブリッドアルゴリズムになっている。

本論文では、文献<sup>(22)</sup>に従って、以下のように量子回路モデルを構築した。

入力データ $x$ をエンコードする量子回路を以下で定義する。

$$U_{in}(x) = \prod_j R_j^Z(\cos^{-1}x^2) R_j^Y(\sin^{-1}x) \quad (1)$$

$$R_j^Y(\theta) = e^{i\theta Y_j/2} \quad (2)$$

$$R_j^Z(\theta) = e^{i\theta Z_j/2} \quad (3)$$

パラメータ付き量子回路 $U(\theta)$ は、時間発展演算子 $U_{rand}$ と $j$ 番目( $j = 1, \dots, n$ )の量子ビットに作用する回転ゲート $U_{rot}(\theta_j^i)$ を掛けたものを $d$ 回繰り返して構成される。 $U_{rand} = e^{-iHt}$ は横磁場イジングモデルの時間発展演算子であり、量子回路の複雑性を増加させる働きをもつ。 $U_{rot}(\theta_j^i) = R_j^X(\theta_{j1}^i) R_j^Z(\theta_{j2}^i) R_j^X(\theta_{j3}^i)$ は3つの回転ゲートからなり、 $U(\theta)$ は全体で $3nd$ 個の回転角を含んでいる。

$$U(\{\theta_j^i\}) = \prod_{i=1}^d \left( \left( \prod_{j=1}^n U_{rot}(\theta_j^i) \right) \cdot U_{rand} \right) \quad (4)$$

$$U_{rand} = e^{-iHt} \quad (5)$$

$$H = \sum_{j=1}^N a_j X_j + \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^{j-1} J_{jk} Z_j Z_k \quad (6)$$

$$U_{rot}(\theta_j^i) = R_j^X(\theta_{j1}^i) R_j^Z(\theta_{j2}^i) R_j^X(\theta_{j3}^i) \quad (7)$$

$$R_j^X(\theta) = e^{i\theta X_j/2} \quad (8)$$

$$R_j^Z(\theta) = e^{i\theta Z_j/2} \quad (9)$$

量子回路学習では、量子回路の回転角 $\{\theta_j^i\}$ および計算基底( $Z$ 基底)の値域を広げる乗数 $a$ を調整することで学習を行う。本研究の具体的手順を以下に示す。

1. 初期状態 $|0\rangle^{\otimes n}$ から $x$ をエンコードする $U_{in}(x)$ によって、入力状態 $|\psi_{in}(x)\rangle$ を生成する。
2. 入力状態 $|\psi_{in}(x)\rangle$ からパラメータ付き量子回路 $U(\theta)$ によって、出力状態 $|\psi\rangle = |\psi(x, \theta)\rangle$ に変換する。
3. 出力状態 $|\psi\rangle$ に対して、最初の量子ビットで測定したパウリ $Z$ 演算子の期待値に乗数 $a$ を乗じた $\langle \psi | a \cdot Z_1 | \psi \rangle$ をモデルの出力 $y_{out}$ とする。
4. 出力 $\{y_{out}\}$ と真値 $\{y\}$ の最小二乗誤差により損失関数 $L = L(\theta, a)$ を定義する。
5.  $L(\theta, a)$ が最小となるように $(\theta, a)$ を最適化する。

本モデルにおいて、パラメータ付き量子回路 $U(\theta)$ の層の深さ $d$ はハイパーパラメータ(予め設定しておく値)である。

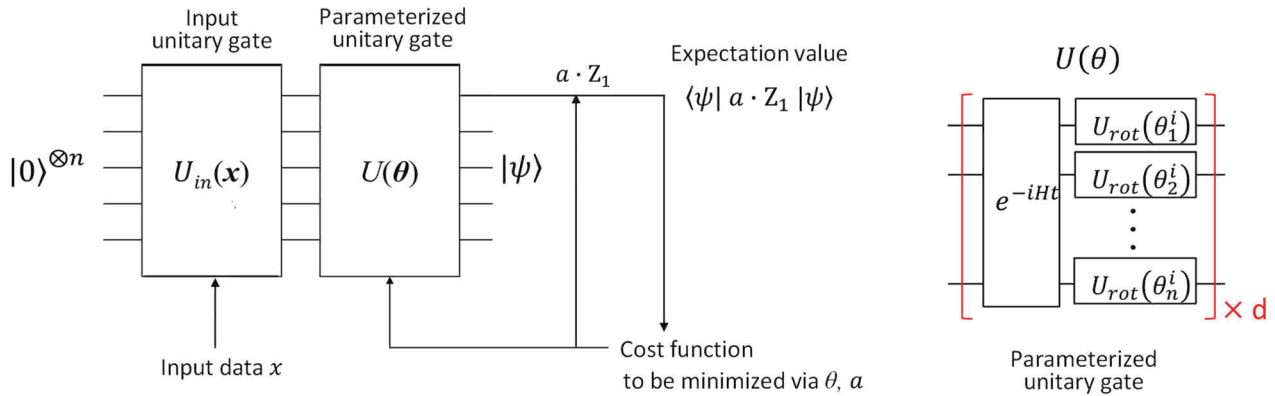


図5 量子回路学習の概念図

## 4.2 不確かさ解析への量子回路学習の適用

本論文では、量子回路学習の実行環境として量子コンピュータのシミュレータ Qulacs<sup>®</sup>を使用した。4.1 節で説明した方法で7量子ビットの量子回路を定義し、RELAP5による不確かさ解析からランダムに選んだ59サンプルを学習データに用いて、PCTの予測モデルを構築した。RELAP5解析と同じ乱数を用いて量子回路モデルによる統計解析を行い、PCTの不確かさ分布をRELAP5解析結果と比較した。

### 4.2.1 パラメータの最適化に係る検討

量子回路学習の適用性を検討するにあたり、最適化する回転角 $\theta$ およびZ基底乗数 $a$ のうち、初めにZ基底乗数を $a=2, 3, 4, 5, 6$ に固定して計算精度の検討を行った。パラメータ付き量子回路 $U(\theta)$ の層数は $d=9$ とした。また、パラメータの最適化アルゴリズムとしては、科学技術計算ライブラリ SciPy<sup>(23)</sup>に実装されているNelder-Mead法を使用した。Nelder-Mead法は、目的関数の形状や勾配などの情報がわからないブラックボックス最適化問題を解くために使われる最適化手法の一つである。

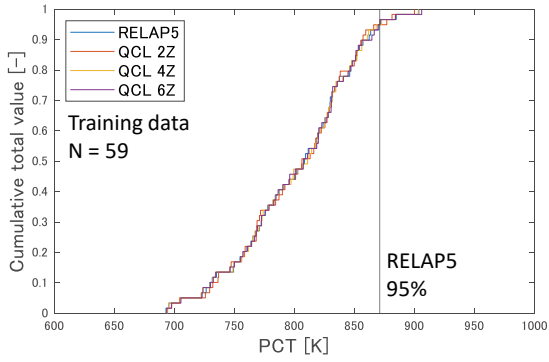
図6に、学習データ(59サンプル)および全データ(1024サンプル)に対して、量子回路学習により評価したPCTの累積分布関数をRELAP5計算結果と比較して示す。ここで、Z基底乗数を $a=2, 4, 6$ としている。PCTの累積分布関数は、学習データに対しては、各乗数に対してRELAP5計算とよく一致した。一方、全データに対しては、乗数が $a=4$ のときにRELAP5計算とよく一致した。

図7に、1024サンプルのRELAP5計算結果から、59サンプルごとに17ケースの学習データを選択し、それぞれに対して構築した量子回路モデルによるPCTの95%累積確率値の評価とRELAP5計算との誤差を集計した箱ひげ図を示す。また、表4に、PCTの95%累積確率値の17ケースの集計を示す。学習データに対しては、すべてのZ基底乗数 $a=2, 3, 4, 5, 6$ について、95%累積確率値のRELAP5計算との誤差はゼロに近い値となった。一方、全データに対しては、95%累積確率値のRELAP5計算との誤差は、Z基底乗数が $a=4$ の時に最も小さく、およそ±10K以内の精度が得られた。

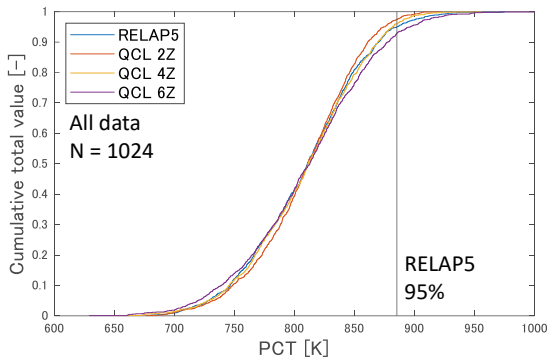
以上より、Z基底乗数を適切に選択することによって、全データに対する95%累積確率値の予測精度のよい量子回路を構築できると言える。

次に、量子回路学習において、最適化する回転角 $\theta$ およびZ基底乗数 $a$ を同時に最適化して、計算精度を検討した。パラメータ付き量子回路 $U(\theta)$ の層数は $d=9$ とした。また、パラメータの最適化アルゴリズムとしては、SciPyに実装されているNelder-Mead法とBasinhopping法を使用して計算精度を比較した。Basinhopping法は、マルチスタート局所探索法の一つで、ランダムに初期点を生成し、局所探索を繰り返すことで大域的最適解を探索する。最適化にあたりZ基底乗数の初期値は $a=2$ とした。

図8に、学習データ(59サンプル)および全データ(1024サンプル)に対して、量子回路学習により評価したPCTの累積分布関数をRELAP5計算結果と比較して示す。PCTの累積分布関数は、学習データに対しては、Nelder-Mead法とBasinhopping法ともにRELAP5計算とよく一致した。一方、全データに対しては、Basinhopping法ではRELAP5計算とよく一致したが、Nelder-Mead法では95%値を過小評価した。

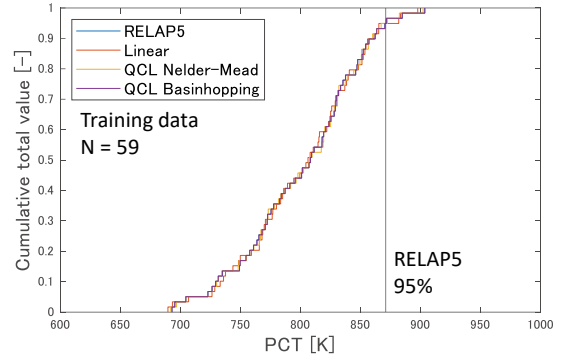


(a) 学習データ

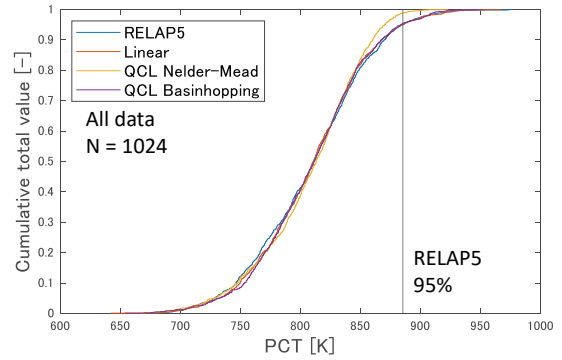


(b) 全データ

図 6 PCT の累積分布関数 (Z 乗数固定)

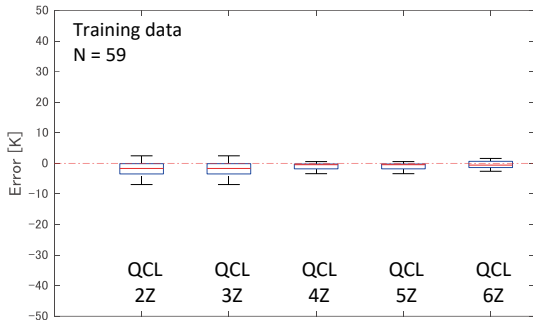


(a) 学習データ

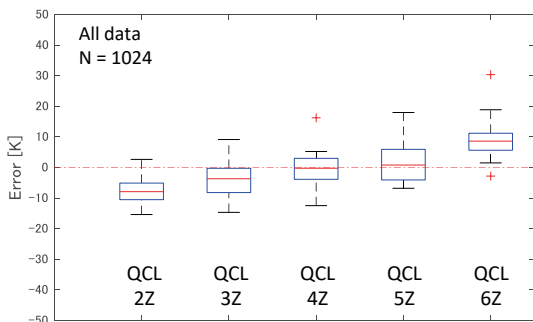


(b) 全データ

図 8 PCT の累積分布関数 (Z 乗数最適化)

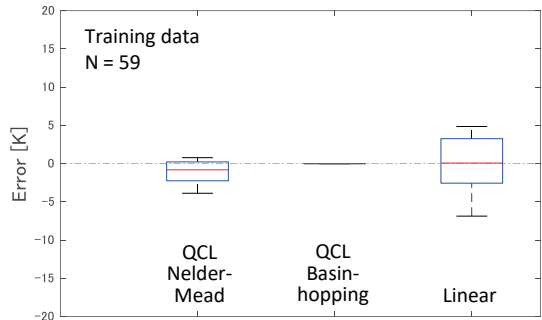


(a) 学習データ

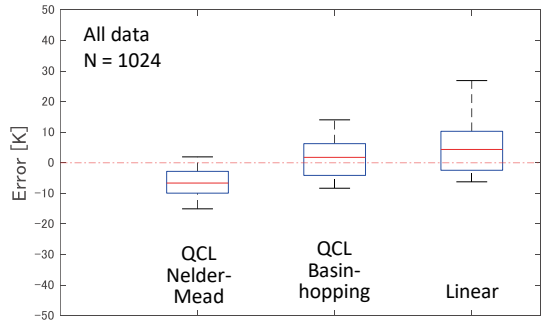


(b) 全データ

図 7 PCT 95%値誤差の分布 (Z 乗数固定)



(a) 学習データ



(b) 全データ

図 9 PCT 95%値誤差の分布 (Z 乗数最適化)

表4 PCT95%値の集計 (Z 乗数固定)

項目	PCT95%値					
	Z 基底乗数	2Z	3Z	4Z	5Z	6Z
Z 基底乗数						
平均値 [K]		877.9	881.4	885.2	887.5	894.6
最大値 [K]		888.0	894.5	901.7	903.4	915.7
最小値 [K]		870.0	870.7	872.9	878.6	882.6
標準偏差 [K]		4.5	5.8	6.3	6.4	7.2

図9に、1024 サンプルの RELAP5 計算結果から、59 サンプルごと 17 ケースの学習データを選択し、それぞれに対して構築した量子回路モデルによる PCT の 95% 累積確率値の評価と RELAP5 計算との誤差を集計した箱ひげ図を示す。また、表5に、PCT の 95% 累積確率値の 17 ケースの集計を示す。学習データに対しては、Basinhopping 法では 95% 累積確率値の RELAP5 計算との誤差はほぼゼロとなった。Nelder-Mead 法も 95% 累積確率値の RELAP5 計算との誤差は小さい。一方、全データに対しては、95% 累積確率値の予測結果は、Basinhopping 法では RELAP5 計算とよく一致したが、Nelder-Mead 法では RELAP5 計算を過小評価した。

Nelder-Mead 法で 95% 累積確率値を過小評価するのは、最適化において、Z 基底乗数の初期値  $a = 2$  に依存して局所的最適解に陥っているためと考えられる。

図10に、1024 サンプルの RELAP5 計算結果から、59 サンプルごとに 17 ケースの学習データを選択し、それぞれに対して構築した量子回路モデルによる Z 係数乗数の最適化結果を集計した箱ひげ図を示す。また、表5に、Z 係数乗数の最適化結果の 17 ケースの集計を示す。Nelder-Mead 法では、Z 係数乗数の最適化結果は、 $a = 2.7$  を平均値とした局所的最適解に陥っていることがわかる。図7で見たように、 $a = 2.7$  のまわりでは、量子回路学習は 95% 累積確率値を過小評価する。一方、Basinhopping 法では、Z 係数乗数の最適化結果は、 $a = 5.0$  を平均値として最適化された。したがって、Basinhopping 法による大域最適化法を適用することによって、量子回路学習は 95% 累積確率値を精度良く評価すると言することができる。

#### 4.2.2 パラメータ付き量子回路 $U(\theta)$ の層数に係る検討

次に、パラメータ付き量子回路の層数を変化させて、量子回路学習による 95% 累積確率値の計算精度を検討した。パラメータの最適化アルゴリズムとしては、Basinhopping 法を使用した。

表5 PCT95%値の集計 (Z 乗数最適化)

項目	PCT95%値			Z 基底乗数	
	N-M <sup>*1</sup>	BH <sup>*2</sup>	Linear	N-M <sup>*1</sup>	BH <sup>*2</sup>
最適化法					
平均値 [K]	890.1	879.1	887.1	2.70	5.00
最大値 [K]	912.3	887.4	899.5	3.35	7.04
最小値 [K]	879.2	870.4	877.1	2.44	3.85
標準偏差 [K]	8.4	5.2	6.8	0.23	0.84

\*1: Nelder-Mead, \*2: Basinhopping

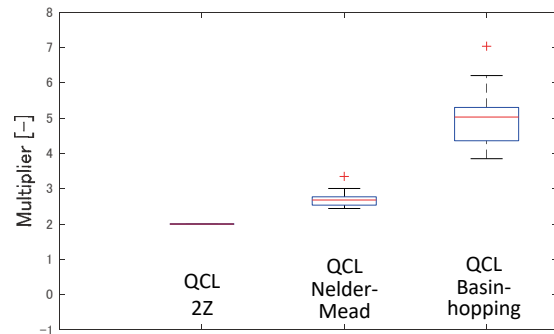


図10 Z 基底乗数の集計

パラメータ付き量子回路  $U(\theta)$  の層数を増加すると、最適化するパラメータである回転角  $\{\theta^i\}$  の数が増加し、学習モデルの表現力が高くなる。一方、過学習を起こす可能性も生じるが、パラメータ付き量子回路  $U(\theta)$  がユニタリー変換であることが正則化として機能し、過学習を防ぐことが期待される。

図11に、1024 サンプルの RELAP5 計算結果から、59 サンプルごとに 17 ケースの学習データを選択し、それぞれに対して構築した量子回路モデルによる PCT の 95% 累積確率値の評価と RELAP5 計算との誤差を集計した箱ひげ図を示す。また、表6に、PCT の 95% 累積確率値の 17 ケースの集計を示す。学習データに対しては、層数を 5 以上にすれば、RELAP5 計算との誤差はほぼゼロになった。一方、全データに対しては、層数が 5 では RELAP5 計算を過大評価した。これは、少ない層数では、解析対象の複雑度に対してパラメータ付き量子回路  $U(\theta)$  の表現力が十分ではなく、Z 係数乗数が過学習しているためと考えられる。層数を 9 以上にすると、過学習とならず RELAP5 計算とよく一致する結果が得られた。

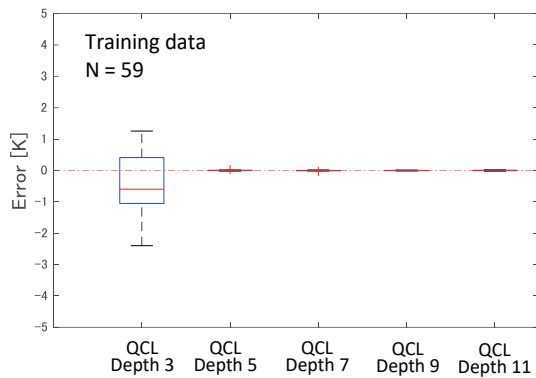
#### 4.3 線形回帰モデルとの比較

最後に、量子回路学習による 95% 累積確率値の計算精度を線形回帰モデル<sup>③</sup>と比較した。

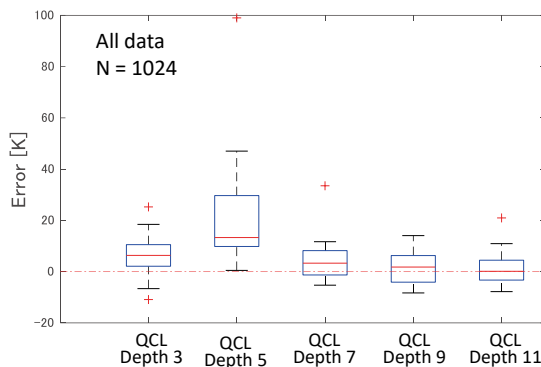


表 6 PCT95%値の集計 (層数の比較)

項目	PCT95%値				
	3層	5層	7層	9層	11層
平均値 [K]	891.9	907.7	890.3	887.1	887.0
最大値 [K]	910.7	984.4	918.9	899.5	906.4
最小値 [K]	874.5	885.9	880.1	877.1	877.6
標準偏差 [K]	8.8	23.1	8.9	6.8	7.1



(a) 学習データ



(b) 全データ

図 11 PCT 95%値誤差の分布 (層数比較)

図 8 に、学習データ (59 サンプル) および全データ (1024 サンプル) に対して、線形 2 次回帰モデルにより評価した PCT の累積分布関数を示している。本論文が対象とした実験解析のように、PCT の不確かさ分布が正規分布に近い場合には、大域最適化法を用いた量子回路学習と比較して線形回帰モデルも予測精度は良いと言える。

図 7 に、1024 サンプルの RELAP5 計算結果から、59 サンプルごとに 17 ケースの学習データを選択し、それぞれに対して構築した線形 2 次回帰モデルによる PCT の 95% 累積確率値の RELAP5 計算に対する誤差の箱ひげ図を示

す。17 ケースを集計して評価した場合、学習データに対しては、線形回帰モデルでは誤差にバラツキがあるのに対して、大域最適化法を用いた量子回路学習の誤差はほぼゼロである。全データに対しても、大域最適化法を用いた量子回路学習のほうが線形回帰モデルよりも誤差は小さい。

今後、実機プラントにおける小破断 LOCA 事象のような PCT の不確かさ分布が正規分布とならない場合に対して、量子回路学習と線形回帰モデルの比較を行うことが必要である。

### 5. 結言

最適評価コードを用いた統計的安全評価における計算コストを低減するため、機械学習モデルの適用性を検討している。統計的安全評価に機械学習を適用するにあたっては過学習を防ぐ必要がある。量子回路学習は古典的深層学習の量子アナロジーであり、最適化を行うパラメータ付き量子回路がユニタリー変換によって構成されることから、過学習が起こりにくいと期待されている。

本論文では、燃料被覆管最高温度 (PCT) の不確かさ解析に対して汎化性能の良い機械学習モデルを構築することを目的として、量子回路学習の適用性を検討した。ROSA/LSTF における小破断 LOCA 模擬実験の不確かさ解析に量子回路学習を適用し、PCT の 95%累積確率値の予測精度を RELAP5 解析結果と比較して評価した。

パラメータの最適化にあたっては、計算基底の値域を広げる乗数を同時に最適化した。大域最適化法を用いることにより、量子回路学習は 95%累積確率値を精度よく評価する結果が得られた。

パラメータ付き量子回路の層数を変化させて量子回路学習の計算精度を検討した。解析対象の複雑度に応じて量子回路の層数を大きく取ることによって、量子回路学習は線形回帰よりも 95%累積確率値を精度よく評価する結果が得られた。

### 引用文献

- (1) B. Boyack, R. Duffey, G. Wilson, P. Griffith, G. Lellouche, S. Levy, U. Rohatgi, W. Wulff, N. Zuber, "Quantifying reactor safety margins: application of code scaling, applicability, and uncertainty (CSAU) evaluation methodology to a large break, loss-of-coolant accident," NUREG/CR-5249 (1989).

- (2) 日本原子力学会, “統計的安全評価の実施基準:2021”, AESJ-SC-S001:2021 (2021).
- (3) 木下郁男, “統計的安全評価における代替統計モデルの適用 (不確かさ解析への適用性に関する検討)”, INSS JOURNAL, Vol.27, pp.219-230 (2020).
- (4) 木下郁男, “統計的安全評価における代替統計モデルの適用 (実機条件の不確かさ解析に対する適用性の検討)”, INSS JOURNAL, Vol.28, pp.151-162 (2021).
- (5) 木下郁男, “統計的安全評価における代替統計モデルの適用 (Stan による不確かさ解析のベイズ推定)”, INSS JOURNAL, Vol.29, pp.217-228 (2022).
- (6) 木下郁男, “統計的安全評価における代替統計モデルの適用 (実機条件に対する不確かさ解析のベイズ推定)”, INSS JOURNAL, Vol.30, pp.182-193 (2023).
- (7) K. Mitarai, M. Negori, M. Kitagawa, K. Fujii, Quantum circuit learning, PHISYCAL REVIEW A **98**, 032309 (2018).
- (8) I. Kinoshita, Application of Sparse Estimation for Best Estimate Plus Uncertainty Analysis of a Small Break LOCA in PWRs, Proceedings of the ASME 2023 International Mechanical Engineering Congress & Exposition (IMECE2023), IMECE2023-111094, New Orleans, Louisiana, October 29-November 2, (2023).
- (9) Y. Suzuki, et al., Qulacs: a fast and versatile quantum circuit simulator for research purpose, arXiv:2011.13524v4 (2021).
- (10) The RELAP5 code development team, “RELAP5/MOD3 code manual,” NUREG/CR-5535 (1995).
- (11) H. Asaka, Y. Anoda, Y. Kukita, I. Ohtsu, Secondary-Side Depressurization during PWR Cold-Leg Small Break LOCAs Based on ROSA-V/LSTF Experiments and Analyses, Journal of Nuclear Science and Technology, **35**(12), pp.905-915 (1998).
- (12) I. Kinoshita, M. Murase, RELAP5 Code Analysis of LSTF Small Break LOCA Tests with Steam Generator Intentional Depressurization and Its Uncertainty Quantification by Monte-Carlo Method and Wilks' Formula Approach, Proceedings of the ASME 2016 International Mechanical Engineering Congress & Exposition (IMECE2016), IMECE2016-66638, Phoenix, AZ, November 11-17, (2016).
- (13) 山田実, 南雲宏一, 木下郁男, 村瀬道雄, 吉田至孝, 川崎郁夫, “小破断 LOCA 時高圧注入系不作動事象の PIRT 作成および重要現象の感度解析”, INSS JOURNAL, Vol.18, pp.294-309 (2011).
- (14) M.J. Griffiths, J.P. Schlegel, T. Hibiki, M. Ishii, I. Kinoshita, Y. Yoshida, “Phenomena identification and ranking table for thermal-hydraulic phenomena during a small-break LOCA with loss of high pressure injection,” Progress in Nuclear Energy, Vol. 73, pp.51-63 (2014).
- (15) T. Torige, I. Kinoshita, “Application of the statistical safety evaluation method to the small break LOCA with high pressure injection failure (Quantification of the uncertainty of uncovered core heat transfer model),” Proceedings of the ASME 2013 International Mechanical Engineering Congress & Exposition (IMECE2013), IMECE2013-64305, San Diego, CA, November 13-21 (2013).
- (16) 木下郁男, 鳥毛俊秀, 山田実, “炉心内相間摩擦に係る RELAP5 モデルの不確かさの定量化,” INSS JOURNAL, Vol.24, pp.201-210 (2017).
- (17) I. Kinoshita, T. Torige, M. Yamada, “Uncertainty quantification of the RELAP5 interfacial friction model in the rod bundle geometry,” Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science, Vol.2, No.2, 021003 (2016).
- (18) 鳥毛俊秀, 木下郁男, 山田実, “小破断 LOCA 時高圧注入系不作動事象への統計的手法適用 ~被覆管酸化, 崩壊熱, 被覆管変形および伝熱管凝縮に係る RELAP5 モデルの不確かさの定量化,” INSS JOURNAL, Vol.21, pp.213-222 (2014).
- (19) 楠木貴世志, 村瀬道雄, 富山明男, “蒸気発生器に伝熱管下端における気液対向流制限に関する研究のレビュー,” INSS JOURNAL, Vol.24, pp.211-220 (2017).
- (20) 鳥毛俊秀, 木下郁男, 山田実, “小破断 LOCA 時高圧注入系不作動事象への統計的手法の適用 ; (9) 重要現象に係るモデル不確かさの定量化 (伝熱管凝縮熱伝達, 低温側配管水平層状化)”, 日本原子力学会 2014 春の大会, L24 (2014).
- (21) C. Clark, J.P. Schlegel, T. Hibiki, M. Ishii, I. Kinoshita, “Uncertainty in RELAP5/MOD3.2 calculations for interfacial drag in downward two-phase flow,” Annals of Nuclear Energy, Vol. 94, pp.230-240 (2016).
- (22) QunaSys Inc., Welcome to Quantum Native Dojo!, <https://dojo.qulacs.org/ja/latest/> (2024).
- (23) SciPy 1.10.1: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python, <https://scipy.org/> (2023).