

統計的安全評価における機械学習モデルの適用 (量子回路学習における最適化法に関する検討)

Application of Machine Learning Models for Statistical Safety Evaluation (Investigation of Optimization Methods of Quantum Circuit Learning)

木下 郁男 (Ikuro Kinoshita) ^{*1}

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負荷を低減するため、機械学習モデルの適用性を検討している。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。本論文では、NISQ コンピュータのハードウェアの制約においても有効なモデルを構築するために、深層学習で有力となっている最適化法の量子回路学習への適用性を検討した。量子回路を PyTorch のカスタムレイヤーとして定義し、最適化法には SGD と Adam を使用した。量子回路を深層学習のネットワークに組み込むことによって、深さの浅い回路においてもモデルの汎化性能が向上する結果が得られた。最適化法として SGD を使用すると、学習データに対する収束は遅いが、学習データ以外のデータに対する汎化性能は良い結果が得られた。一方、Adam を使用すると、学習データに対する収束は早いですが、汎化性能は悪化する結果が得られた。深層学習フレームワークの最適化アルゴリズムの選択とハイパーパラメータの設定を適切に行うことで、汎化性能の良い学習過程を実現し、95%累積確率値の予測精度の良い学習モデルを構築できると言える。

キーワード 統計的安全評価, 量子回路学習, 最適化法, 不確かさ解析

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. Quantum circuit learning is an algorithm that can work on NISQ (noisy intermediate-scale quantum) computers. In this paper, the applicability of optimization methods that are popular in deep learning to quantum circuit learning was investigated in order to construct a model that is effective even with the hardware limitations of NISQ computers. Quantum circuits were defined as a custom layer in PyTorch, and SGD and Adam were used as optimization methods. Incorporating quantum circuits into the deep learning network resulted in improved generalization performance, even for shallow quantum circuits. When SGD was used, convergence on training data was slow, but generalization performance on non-training data was good. On the other hand, when using Adam, convergence on the training data was fast, but generalization performance deteriorated. It was concluded that by appropriately selecting the algorithm and the hyperparameters of optimization method of deep learning framework, a learning process can be achieved with good generalization performance and a learning model can be constructed with good prediction accuracy for the 95% cumulative probability value.

Keywords Best estimate plus uncertainty (BEPU), Quantum circuit learning, Optimization method, Uncertainty analysis

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必要となる。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) ⁽¹⁾ 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。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⁽²⁾が発行された。

* 1 (株) 原子力安全システム研究所 技術システム研究所

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負荷が大きいいため、統計的安全評価を実施可能な計算時間で行うためには、計算負荷の小さな機械学習モデルによって最適評価コードの計算を代替することが有効である。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。

これまでの研究では、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）の不確かさ解析への機械学習モデルの適用性を検討した。具体的には、ROSA/LSTF における小破断 LOCA 模擬実験の最適評価コードによる不確かさ解析を対象に、機械学習モデルに交差検証法を適用し、学習データを用いて 95%値の計算精度を推定できることを示した⁽³⁾。また、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、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⁽⁴⁾。

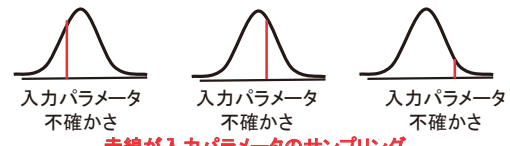
2024 年の本誌論文では、不確かさ解析に対して汎化性能の良い機械学習モデルを構築するために、近い将来の実用化が期待される NISQ（noisy intermediate-scale quantum）コンピュータに用いられるアルゴリズムである量子回路学習の適用性を検討した。パラメータ付き量子回路の層数を大きく取り、最適化に大域最適化法を適用することによって、量子回路学習は PCT95%累積確率値を精度よく評価できることを示した⁽⁵⁾。

本論文では、NISQ コンピュータのハードウェアの制約を考慮し、必要量子ビット数が少なく、深さの浅い回路においても有効な最適化を行うために、深層学習で有力となっている最適化手法の量子回路学習への適用性を検討する。具体的には、ROSA/LSTF における小破断 LOCA 模擬実験の最適評価コードによる不確かさ解析を対象に、深層学習フレームワークの最適化法を用いた量子回路学習を適用し、95%累積確率値に対する汎化性能を評価する。

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⁽¹⁾⁽²⁾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

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

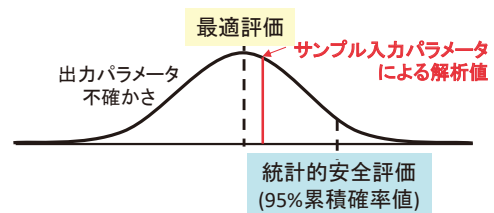


図1 統計的安全評価手法における不確かさ評価

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。最適評価コードは計算コストが大きいいため、多数回のモンテカルロ計算から 95%累積確率値を評価することは困難であり、統計的安全評価を実用化する上での課題となっている。

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。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 95%累積確率値を評価することができる。ここで課題となるのは、機械学習モデルによる 95%累積確率値の予測精度、すなわち最適評価コードによる 95%累積確率値

に対する予測精度の確認である。機械学習モデルについて、学習データに対する予測性能がその他のデータにも適切に適用できる性能のことを汎化性能という。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、95%累積確率値の評価における機械学習モデルの汎化性能の確認が必要である。

統計的安全評価では、解析対象が複雑であると、モデル化に必要な特徴量が多くなる。一般に、機械学習モデルでは、特徴量の数に対して学習データ数が少ないと汎化性能が低下する要因となる。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。この場合の一つの方法として、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。2024 年の本誌論文⁽⁵⁾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⁽⁶⁾の有効性を検討した。

図 2 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。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。また、量子回路学習では、量子回路を一量子ビットの回転ゲートで構築し、回転ゲートの角度 θ 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、汎化性能が向上すると期待されている。

これまでの研究では、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⁽⁷⁾を使用し、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%値の予測精度を最適評価コードによる解析結果と比較して評価した。パラメータの最適化に大域最適化法を使用し、パラメータ付き量子回路の層の深さ（層数）を解析対象の複雑度に応じて大きく取ることによって、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。

量子回路学習は、NISQ 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で、数年~十年以内に実現可能と考えられている。一方、NISQ コンピュータで量子回路学習を行う際は、ユニタリーゲートの層数が大きいとノイズによる誤差が蓄積するため、実用的な層数に制限がある。統計的安全評価に量子回路学習を適用するにあたっては、量子回路の層数を大きくしなくても有効な最適化法の検討が必要と言える。

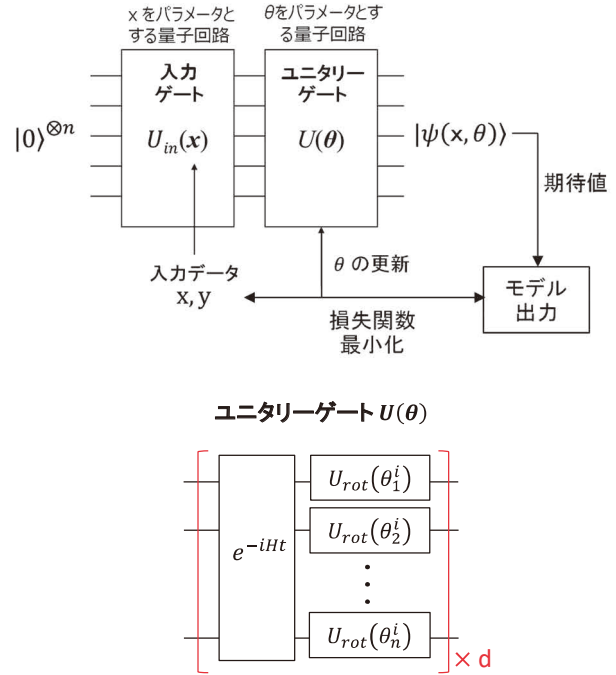


図2 量子回路学習の概念図

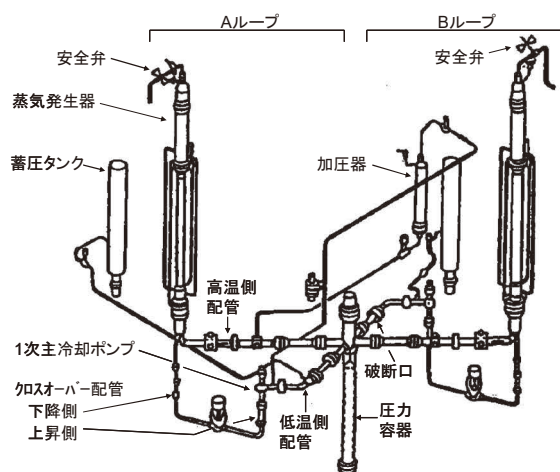
本研究では、深層学習フレームワークの PyTorch⁽⁸⁾を量子回路学習に適用する。具体的には、Qulacs で実装した量子回路部分を PyTorch におけるカスタムレイヤーとして定義し、深層学習で有効となっている最適化法を量子回路学習に適用する。深層学習の最適化法として代表的な確率的勾配降下法は、ランダムに選択されたデータを使ってステップごとに勾配を更新することが正則化として機能し、汎化性能が向上すると期待されている。このような深層学習の最適化法を適用することによって、NISQ 制約下における量子回路学習の統計的安全評価への有効性を検討する。

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、大型非定常実験装置 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⁽⁹⁾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

図3 LSTFの外観図⁽⁹⁾

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。

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、高圧注入系の機能喪失を仮定している。蓄圧注入は全ループで作動する条件である。

アクシデントマネジメント策として、蒸気発生器の逃し弁の開放による1次系の減圧を破断後600秒に全ループ

表1 試験条件／解析条件⁽⁹⁾

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に
主蒸気隔離	原子炉トリップと同時に
補助給水	強制減圧開始と同時に（全ループ）
高圧注入	不作動
蓄圧注入	作動（全ループ）
低圧注入	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2 入力パラメータの不確かさ

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 ⁽¹²⁾	0.58 1.88	
炉心内相間摩擦 ⁽¹³⁾	0.13 3.00	
伝熱管凝縮熱伝達（層流） ⁽¹⁴⁾	0.56 1.44	
伝熱管凝縮熱伝達（乱流） ⁽¹⁴⁾	0.64 1.66	
伝熱管入口CCFL ⁽¹⁵⁾	0.70 0.80	一様分布
低温側配管水平層状化 ⁽¹⁶⁾	0.20 4.63	
ダウンカム相間摩擦 ⁽¹⁷⁾	0.58 1.60	

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。

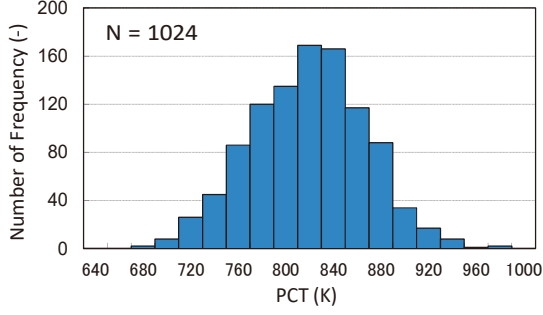
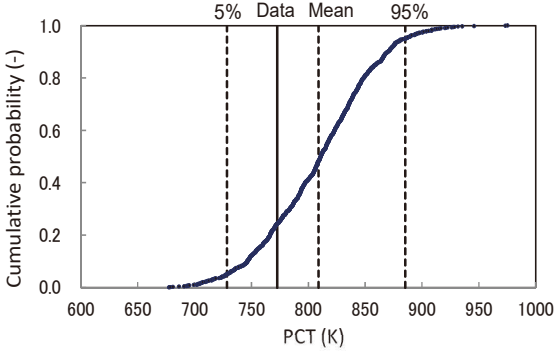
3.2 燃料被覆管最高温度の不確かさ解析

本実験を対象に、RELAP5/MOD3コード⁽¹⁰⁾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⁽¹¹⁾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⁽²⁾に則って実施した。本実験が対象とする事故時の熱水力挙動を詳細に分析し、不確かさを考慮すべき計算モデルを特定した。表2に、不確かさを考慮する計算モデルに対して、関連する実験データを用いて定量化した不確かさ分布を示す。

これらの計算モデルの不確かさを変化させた統計解析を実施した。不確かさ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。

図4および図5に、全1024ケースに対するPCTのヒストグラムおよび累積分布関数を示す。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。

図4 PCTの不確かさのヒストグラム⁽¹¹⁾図5 PCTの累積分布関数⁽¹¹⁾

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対象に量子回路学習を適用し、RELAP5 計算と比較して量子回路学習に有効な最適化法を検討する。

4.1 量子回路学習の適用

これまでの論文⁽⁵⁾と同様に、文献⁽¹⁸⁾に従って、以下のよう量子回路を定義した。

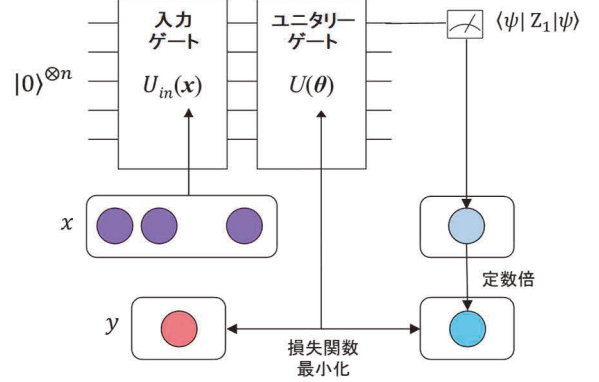
入力データ x をエンコードする量子回路を以下で定義する。

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

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

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

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。 $U_{rand} = e^{-iHt}$ は統計物理学で用いられる横磁場イジ

図6 モデル出力と最適化 (2024 年本誌⁽⁵⁾)

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 $\{\theta_j^i\}$ を調整することで学習を行う。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⁽⁷⁾ を使用した。図6に、これまでの論文⁽⁵⁾で行った学習手順を示す。具体手順は以下の通りである。

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 Z 演算子の期待値に乗数 a を乗じた $a \cdot \langle \psi | Z_1 | \psi \rangle$ をモデルの出力 y_{out} とする。
4. 出力 $\{y_{out}\}$ と真値 $\{y\}$ の平均二乗誤差により定義した損失関数 $MSELoss(\theta, a)$ が最小となるように (θ, a) を最適化する。

パラメータの最適化アルゴリズムとしては、大域最適法である **Basinhopping** 法を使用した。Basinhopping 法は、マルチタスク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。

以上の方法により、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。

図 7 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 計算と比較して示す。パラメータ付き量子回路 $U(\theta)$ の層数 (depth) は 3, 7, 5 とした。PCT の累積分布関数は、学習データに対しては、RELAP5 計算とよく一致した。一方、全データに対しては、95%累積確率値をいくらか過大評価した。

図 8 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 RELAP5 計算値との誤差を集計した箱ひげ図を示す。

学習データに対しては、層数を 5 以上とすれば、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。層数が 9 以上では RELAP5 計算とほぼ一致する結果が得られた。しかし、NISQ 制約下の計算では、層数がより小さい条件での汎化性能を確認することが必要と考えられる。

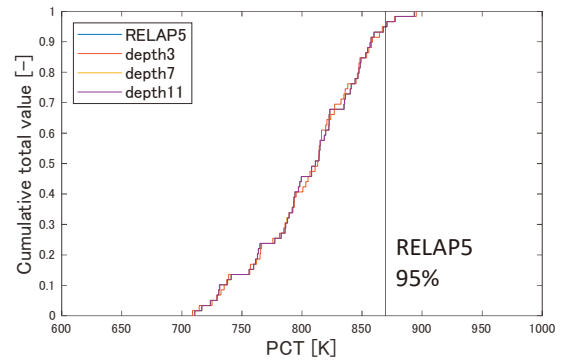
4.2 深層学習フレームワークの適用

本節では、深層学習で有力となっている最適化手法の量子回路学習への適用性を検討する。

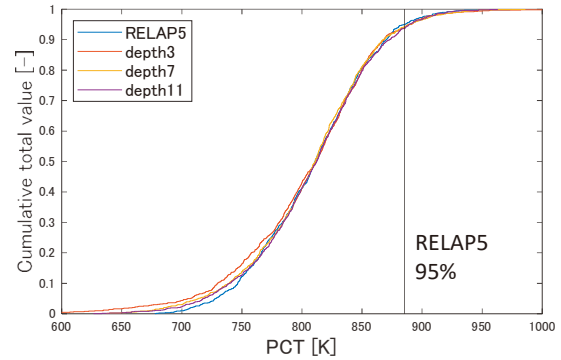
本論文では、深層学習フレームワークの PyTorch⁽⁸⁾ を使用し、Qulacs で実装した量子回路部分を PyTorch におけるカスタムレイヤーとして定義することで量子回路学習を実施した。図 9 に本論文で行った学習手順を示す。

具体的手順は以下のとおりである。

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、すべての量子ビットで測定した Z 演算子の期待値を全結合層につないでモデルの出力 y_{out} とする。

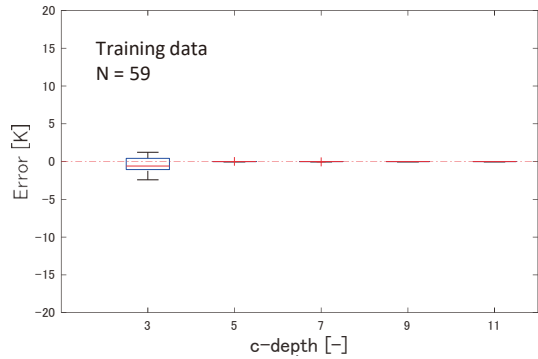


(a) 学習データ

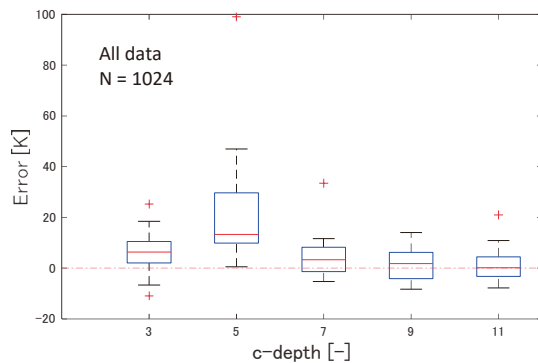


(b) 全データ

図 7 PCT の累積分布関数 (2024 年本誌⁽⁵⁾)



(a) 学習データ



(b) 全データ

図 8 PCT 95%値誤差の分布 (2024 年本誌⁽⁵⁾)

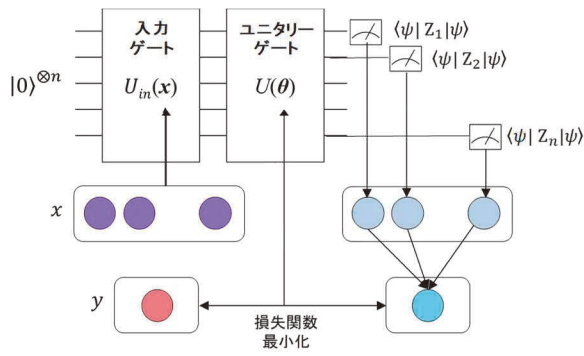


図9 モデル出力と最適化

4. 出力 $\{y_{out}\}$ と真値 $\{y\}$ の平均二乗誤差により定義した損失関数 $MSELoss$ が最小となるように最適化する。

最適化アルゴリズムとしては、PyTorch に実装されている SGD (確率的勾配降下法) と Adam (適応的のモーメント推定) を使用した。SGD は、ランダムに選択したサンプルを用いて勾配を計算する。一般に収束は遅いが、汎化性能は高いとされている。Adam は、勾配の平均・分散を利用して学習率を調整する。収束は早いですが、急速な損失低下によって過学習しやすいとされている。

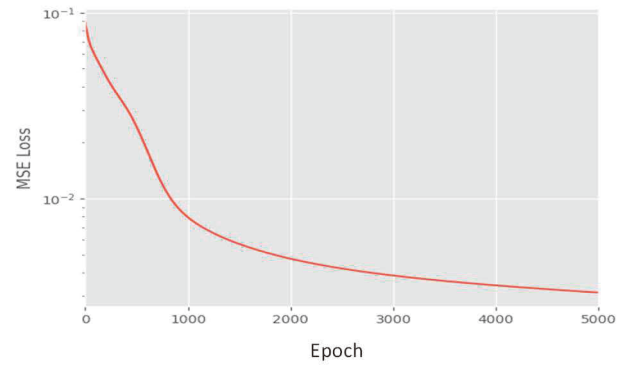
4.3 最適化法の比較

本論文では、最適化の実施にあたり、バッチサイズ (1 回の学習ステップで使うデータの個数) は 59 (学習データ数と同じ)、学習率は 0.01 とした。また、SGD のモーメントは 0.9 とした。

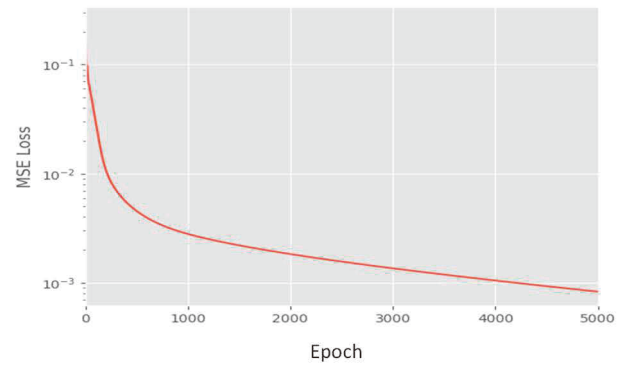
図 10 および図 11 に、SGD および Adam によるエポック数 (学習データ全体を何回繰り返して使うかを示す回数) が 5,000 までの学習過程における損失の変化を示す。パラメータ付き量子回路 $U(\theta)$ の層数 (depth) は、(a) 3 および (b) 7 である。

SGD では、エポック数が増えるにつれて損失は滑らかに低下した。また、層数が大きいほど同じエポック数でも損失の低下が大きいことが分かる。5000 エポックでは学習が十分に進んでおらず、エポック数をより大きくして学習を継続することが必要と考えられる。

Adam では、SGD と比較して同じエポック数でも損失の低下が大きい結果となった。学習を加速させる手法が機能していると考えられるが、学習の過程で周期的に損失が大きくなっている。これは局所解から抜け出していることを示すと考えられ、学習過程全体として損失は低下している

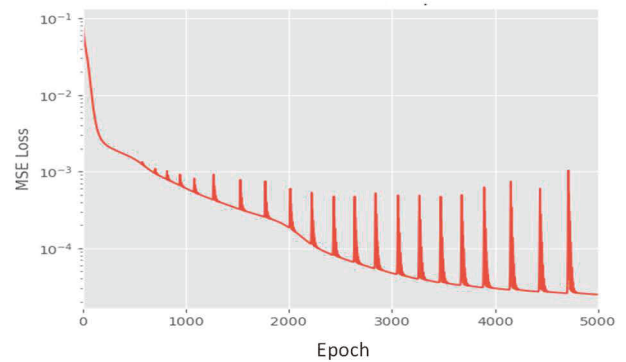


(a) depth 3

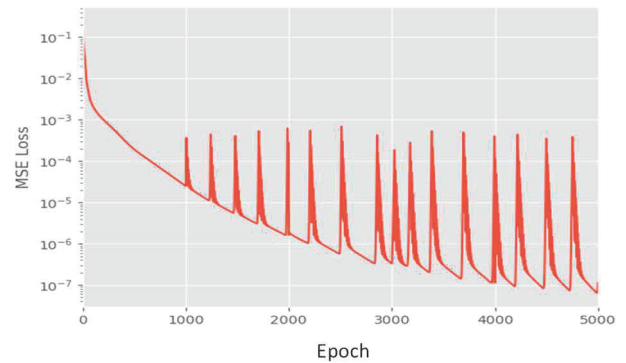


(b) depth 7

図 10 学習過程における損失の変化 (SGD)

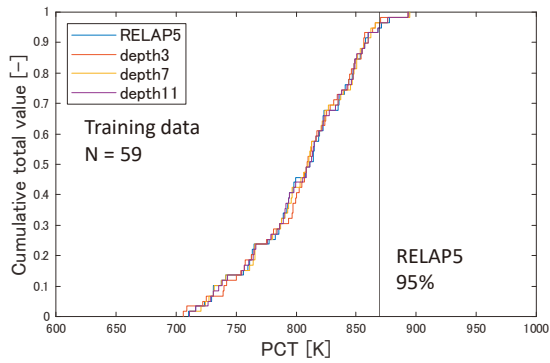


(a) depth 3

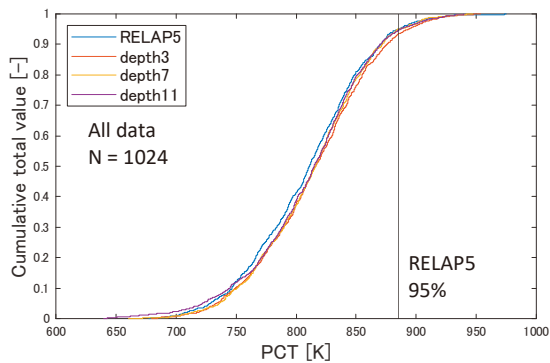


(b) depth 7

図 11 学習過程における損失の変化 (Adam)

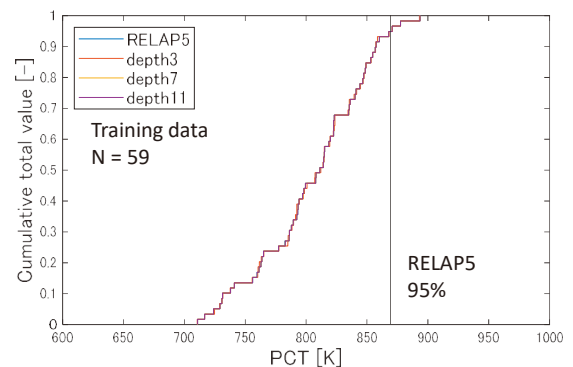


(a) 学習データ

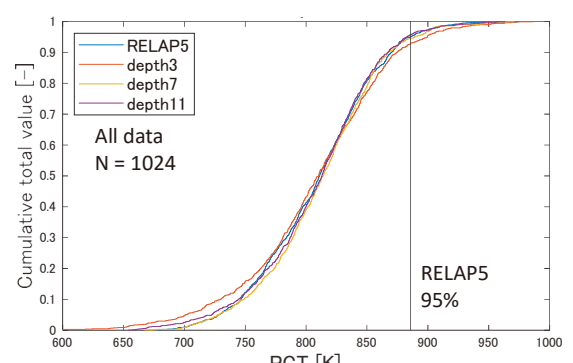


(b) 全データ

図 12 PCT の累積分布関数 (SGD)



(a) 学習データ



(b) 全データ

図 13 PCT の累積分布関数 (Adam)

ものの、このような学習過程はモデルの汎化性能を低下させる可能性がある。

図 12 および図 13 に、SGD および Adam により評価した累積分布関数を RELAP5 計算と比較して示す。パラメータ付き量子回路 $U(\theta)$ の層数 (depth) は 3, 7, 11 である。

SGD では、5000 エポックでは学習が十分に進んでいないものの、学習データおよび全データに対して、PCT の 95%累積確率値の精度は良い結果が得られた。

Adam では、5000 エポックで学習が十分に進んでいると考えられ、学習データに対して、PCT の 95%累積確率値の精度は非常に良い。一方、全データに対しては、層数が 3 の場合、PCT の 95%累積確率値を過大評価する結果となった。

図 14 および図 15 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 SGD および Adam による最適化法により評価した 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。層数 (depth) は 3, 5, 7, 9, 11 であり、各々のエポック数は 5000 である。

SGD では、学習データに対しては、各層数について、PCT95%累積確率値の誤差のパラツキは大きい、おおむねゼロに近い結果が得られた。全データに対しては、PCT

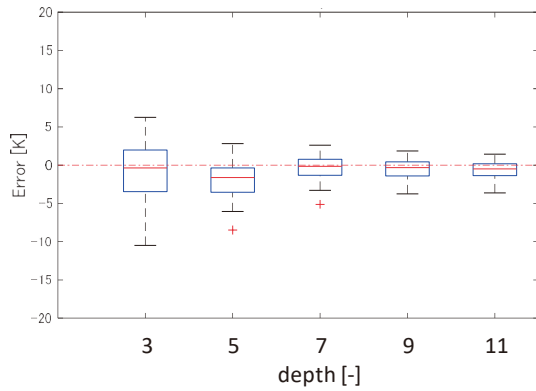
の 95%累積確率値を過少評価する傾向であるが、エポック数を増加して計算すれば精度は向上すると考えられる。

Adam では、学習データに対しては、各層数について、PCT95%累積確率値の誤差のパラツキは、おおむねゼロに近い結果が得られた。一方、全データに対しては、層数 3, 5 で過大評価傾向であり、層数 9, 11 で過少評価傾向となった。Adam による 95%累積確率値の汎化性能は SGD と比較して低いと考えられる。

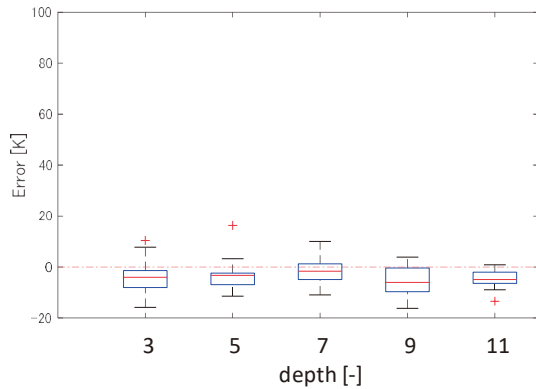
SGD や Adam の量子回路学習による統計的安全評価への適用性については、エポック数の増加やその他のハイパーパラメータの最適化を詳細に検討し、95%累積確率値の汎化性能を評価することが必要である。

2024 年本誌論文の Basinhopping 法を用いた最適化による結果 (図 8) と比較すると、特に、層数が 3, 5, 7 の場合において、PCT95%累積確率値の評価における汎化性能が向上していることが分かる。したがって、NISQ 制約条件下における量子回路学習の統計的安全評価への適用において、深層学習フレームワークの最適化法の適用は有効であると考えられる。

以上の考察から、統計的安全評価に量子回路学習を適用するにあたっては、深層学習フレームワークの最適化アルゴリズムの選択とハイパーパラメータの設定を適切に行

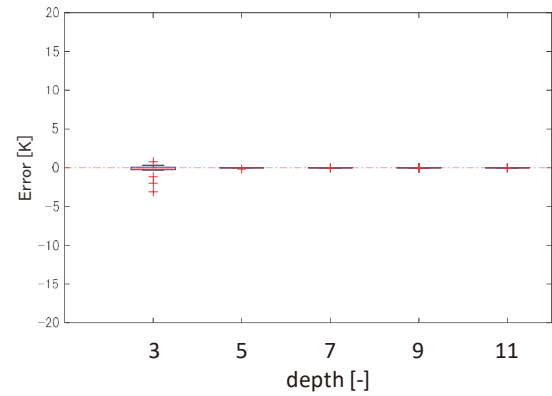


(a) 学習データ

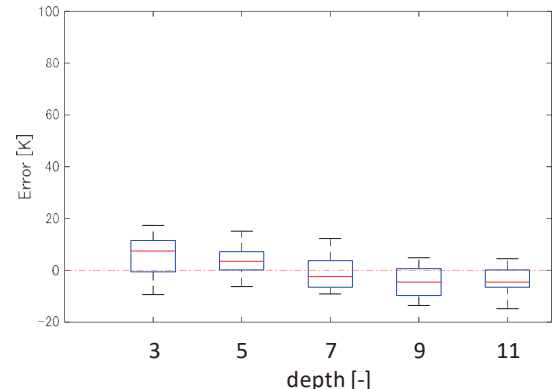


(b) 全データ

図 14 PCT95%値誤差の分布 (SGD)



(a) 学習データ



(b) 全データ

図 15 PCT95%値誤差の分布 (Adam)

うことで、汎化性能の良い学習過程を実現し、95%累積確率値の予測精度の良い学習モデルを構築できると言える。

今後、実機プラントにおける小破断 LOCA 事象のような、不確かさパラメータの数が増加し、PCT の不確かさ分布が正規分布とならない場合に対して、量子回路学習と深層学習フレームワークの最適化法の有効性を評価することが必要である。

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モデルを適用するにあたってはモデルの汎化性能の確認が必要である。

量子回路学習は、NISQ 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。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からなることが正則化として機能し、汎化性能がよいと期待されている。

本論文では、NISQ コンピュータのハードウェアの制約においても有効な学習モデルを構築するために、深層学習

で有力となっている最適化法の量子回路学習への適用性を検討した。具体的には、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。

量子回路を PyTorch のカスタムレイヤーとして定義し、最適化法には SGD (確率的勾配降下法) と Adam (適応的モーメント推定) を使用した。量子回路を深層学習のネットワークに組み込むことによって、深さの浅い回路においてもモデルの汎化性能が向上する結果が得られた。SGD を使用すると、学習データに対する収束は遅いが、学習データ以外のデータに対する汎化性能は良い結果が得られた。一方、Adam を使用すると、学習データに対する収束は早いですが、汎化性能は悪化する結果が得られた。

統計的安全評価に量子回路学習を適用するにあたっては、深層学習フレームワークの最適化アルゴリズムの選択とハイパーパラメータの設定を適切に行うことで、汎化性能の良い学習過程を実現し、95%累積確率値の予測精度の良いモデルを構築できると考えられる。

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 (Stan による不確かさ解析のベイズ推定)," INSS JOURNAL, Vol.29, pp.217-228 (2022).
- (5) 木下郁男, "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)," INSS JOURNAL, Vol.31, pp.94-103 (2024).
- (6) K. Mitarai, M. Negori, M. Kitagawa, K. Fujii, Quantum circuit learning, PHISYCAL REVIEW A **98**, 032309 (2018).
- (7) Y. Suzuki, et al., Qulacs: a fast and versatile quantum circuit simulator for research purpose, arXiv:2011.13524v4 (2021).
- (8) A. Paszke, S. Gross, F. Massa, A. Lerer, J. Bradbury, G. Chanan, T. Killeen, Z. Lin, N. Gimsheine, L. Antiga, et al., PyTorch: An imperative style, high-performance deep learning library. Advances in Neural Information Processing Systems, 32, (2019).
- (9) 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).
- (10) The RELAP5 code development team, "RELAP5/MOD3 code manual," NUREG/CR-5535 (1995).
- (11) 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).
- (12) 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).
- (13) 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).
- (14) 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).
- (15) 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).
- (16) 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).
- (17) 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).
- (18) QunaSys Inc., Welcome to Quantum Native Dojo!, <https://dojo.qulacs.org/ja/latest/> (2024).