

統計的安全評価における量子回路学習の適用

Application of Quantum Circuit Learning for Statistical Safety Evaluation

木下郁男¹⁾

Ikuo Kinoshita

1) 博(工) 原子力安全システム研究所 (〒919-1138 福井県三方郡美浜町佐田64, E-mail: kinoshita@inss.co.jp)

The applicability of quantum circuit learning to the statistical safety evaluation of nuclear plants is examined. Quantum circuit learning is performed by optimizing the parameters to minimize the loss function of a parameterized quantum circuit. It is expected that constructing a circuit using only unitary transformations functions as regularization and suppresses over-learning. In this paper, quantum circuit learning is applied to the uncertainty analysis of the maximum fuel cladding temperature for a small-break LOCA-simulated experiment, and an effective parameter optimization method is investigated.

Key Words : Statistical safety evaluation, Quantum circuit learning, LOCA, RELAP5

1. はじめに

原子力プラントの安全解析に用いられる最適評価コードは、システム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[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、これらの不確かさをモンテカルロ・サンプリングにより統合して、コード全体の不確かさを定量化する。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するには機械学習モデルの適用が有効である。

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、学習データへの過学習を防ぐ必要がある。本研究では、統計的安全評価に対する量子回路学習[2]の適用性を検討する。量子回路学習はパラメータ付き量子回路の損失関数を最小化するようにパラメータを最適化して学習を行う。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る。一方、計算の高速性や精度についての検証が必要である。本報では、ROSA/LSTFにおける小破断LOCA模擬実験[3]を対象に、RELAP5コード[4]による燃料被覆管最高温度(PCT)の不確かさ解析に量子回路学習を適用し、効果的なパラメータの最適化法を検討した。

2. RELAP5コードによる不確かさ解析

以前の研究[5]で、ROSA/LSTFにおける小破断LOCA模擬実験を対象に、RELAP5コードによる燃料被覆管最高温度(PCT)の不確かさ解析を実施した。解析対象はROSA/LSTFの低温側配管1.0%破断実験とした。本実験を対象に、RELAP5コードの計算モデルの不確かさ(7パラメータ)を変化させた統計解析を行い、PCTの不確かさを評価した。表-1に入力パラメータの不確かさを示す。入力パラメータの不確かさ分布から、ランダム・サンプリング法により1024ケースのパラメータの組み合わせをサンプリングし、各ケースに対してRELAP5コードにより

PCTを計算し、PCTの不確かさ分布を求めた。図-1にPCTの不確かさ分布を示す。本研究では、このRELAP5コードによるPCTの不確かさ解析を参照解析として、量子回路学習によるPCTの95%累積確率値の予測精度をRELAP5計算値と比較して評価した。

表-1 入力パラメータの不確かさ

不確かさパラメータ	Min, Max	ヒストグラム
露出炉心熱伝達	0.58, 1.88	
炉心内相間摩擦	0.13, 3.00	
伝熱管凝縮熱伝達(層流)	0.56, 1.44	
伝熱管凝縮熱伝達(乱流)	0.64, 1.66	
伝熱管入口CCFL	0.70, 0.80	一様分布
低温側配管水平層状化	0.20, 4.63	
ダウンカマ相間摩擦	0.58, 1.60	

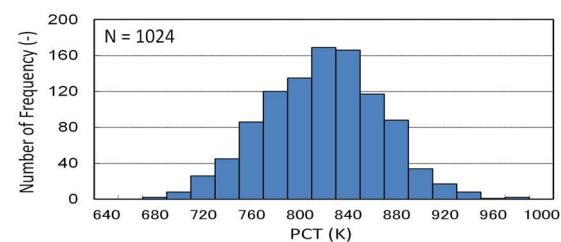


図-1 PCTの不確かさ

3. 量子回路学習の適用

図-2に量子回路学習の概念図を示す。本研究では、このRELAP5コードによるPCTの不確かさ解析を参照解析。本研究では、文献[6]に従って以下のように量子回路モデルを構築した。

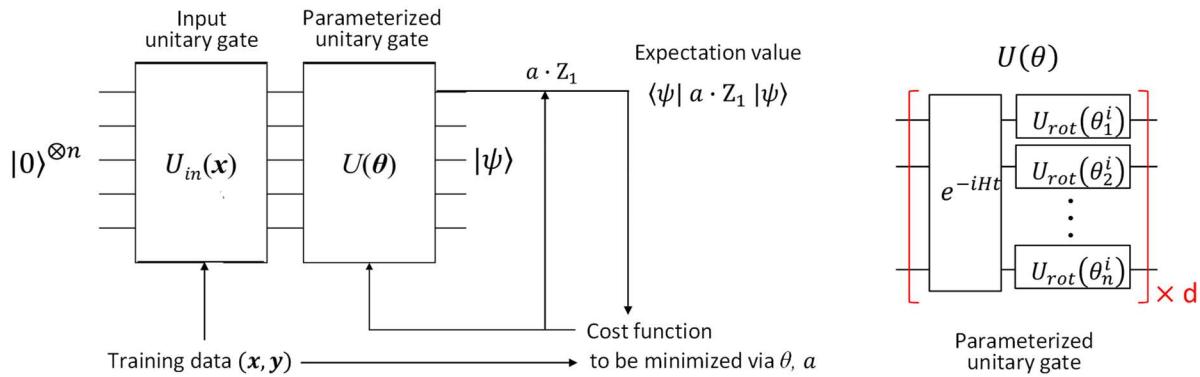


図-2 量子回路学習の概念図

入力をエンコードする量子回路 $U_{in}(x)$ は、以下で定義する。

$$\begin{aligned} U_{in}(x) &= \prod_j R_j^Z(\cos^{-1}x^2) R_j^Y(\sin^{-1}x) \\ R_j^Y(\theta) &= e^{i\theta Y_j/2} \\ R_j^Z(\theta) &= e^{i\theta Z_j/2} \end{aligned} \quad (1)$$

パラメータ付き量子回路 $U(\theta)$ は、量子回路の複雑性を増加させる時間発展演算子 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 $U_{rot}(\theta_j^i)$ を掛けたものを層化 ($i = 1, \dots, d$)して構成する。 $U_{rand} = e^{-iHt}$ は横磁場イジングモデルの時間発展演算子である。

$$U(\{\theta_j^i\}) = \prod_{i=1}^d \left(\left(\prod_{j=1}^n U_{rot}(\theta_j^i) \right) \cdot U_{rand} \right) \quad (2)$$

$$\begin{aligned} U_{rand} &= e^{-iHt} \\ H &= \sum_{j=1}^N a_j X_j + \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^{j-1} J_{jk} Z_j Z_k \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} U_{rot}(\theta_j^i) &= R_j^X(\theta_{j1}^i) R_j^Z(\theta_{j2}^i) R_j^X(\theta_{j3}^i) \\ R_j^X(\theta) &= e^{i\theta X_j/2} \\ R_j^Z(\theta) &= e^{i\theta Z_j/2} \end{aligned} \quad (4)$$

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。本研究の具体的な手順を以下に示す。

- 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。
- 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。

- 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。
- 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。
- $L(\theta, a)$ が最小となるように (θ, a) を最適化する。

4. 量子回路学習による不確かさ解析

本研究では、RELAP5コードによる不確かさ解析を対象に、量子シミュレータQulacs[7]を使用して7量子ビット量子回路を定義し、ランダムに選んだ59サンプルのRELAP5計算を学習データに用いて、PCTの予測モデルを構築した。量子回路学習により評価したPCTの95%累積確率値の精度を、RELAP5解析結果と比較して評価した。

(1) 汎化性能の評価

パラメータの最適化法として Nelder-Mead 法を使用して、量子回路学習の計算精度を検討した。Nelder-Mead 法は、目的関数の形状や勾配などの情報が分からぬる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法の一つである。Z 基底乗数の初期値は $a = 2, 3, 4, 5, 6$ とし、パラメータ付き量子回路 $U(\theta)$ の層数は 9 とした。

図-3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、いずれのZ基底乗数の初期値についても RELAP5 計算とよく一致した。一方、全データに対しては、Z基底乗数の初期値が 4 の場合には 95%値の予測精度は良いが、初期値が 2 の場合は 95%値を過小評価し、6 の場合は 95%値を過大評価した。

図-4に、1024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、それぞれについて全データ(1024サンプル)に対してQCLにより評価した95%値を、RELAP5計算による95%値の収束過程と合わせて示す。

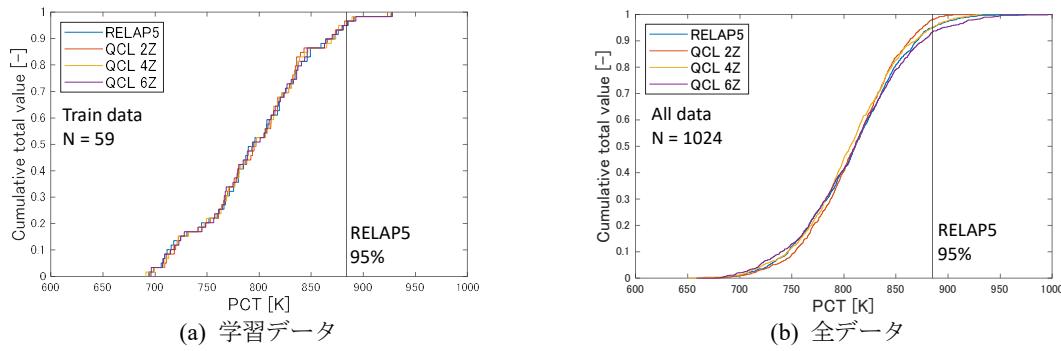


図-3 量子回路学習による不確かさ解析

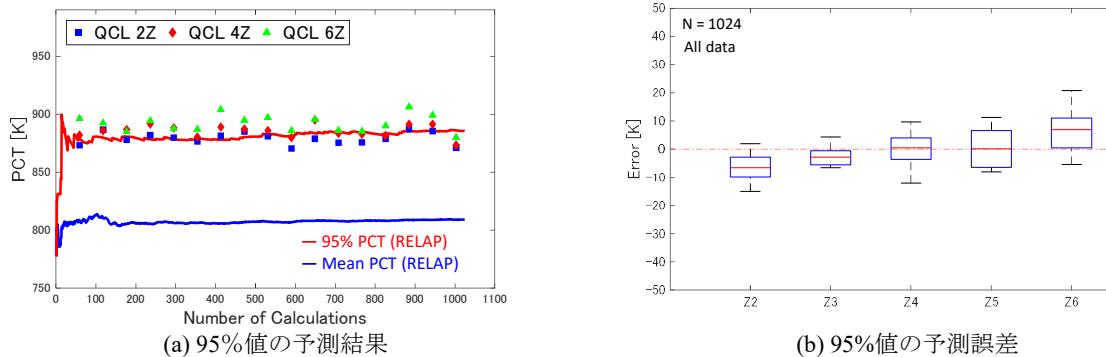


図-4 汎化性能の評価

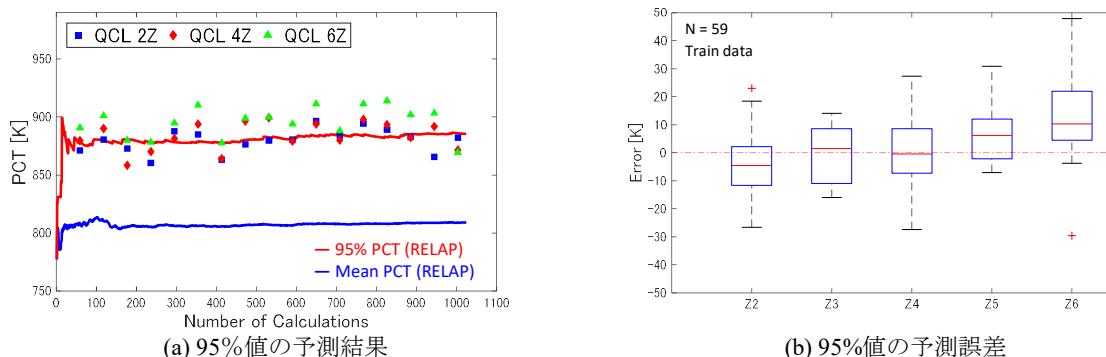


図-5 交差検証法の適用

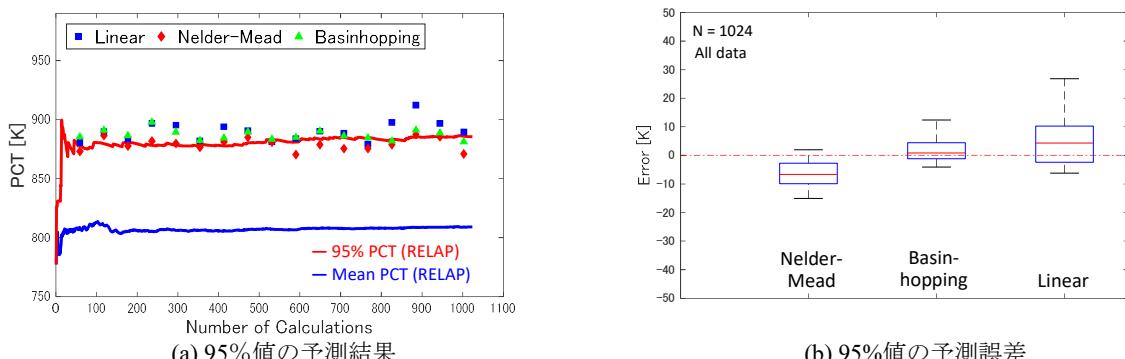


図-6 大域的最適化法の適用

また、全17ケースのRELAP5計算に対する誤差の箱ひげ図を示す。全17ケースの集計でも、Z基底乗数の初期値が4

の場合に95%値の予測精度が良いが分かる。したがって、Z基底乗数の初期値を適切に選択することによって、全デ

ータに対する95%値の予測精度の良い量子回路を構築できることが分かる。

(2) 交差検証法の適用

量子回路モデルの学習データ以外のデータに対する95%値の予測精度を学習データから評価するために、交差検証法の適用性を検討した。交差検証による95%値の評価は、学習データ以外のデータに対して汎化性能があると考えられる。

図-5に、1024サンプルのRELAP5計算に対して、59サンプルごとにRELAP5計算を学習データとして構築した量子回路モデルによる、学習データに対する10分割交差検証による95%値の評価結果を示す。学習データに対する10分割交差検証による95%値のRELAP5計算値との誤差は、Z基底乗数の初期値が4の時に最も小さくなる傾向があるものの、誤差評価のバラツキが大きい。全データに対して量子回路学習による95%値の誤差が最小となるZ基底乗数の初期値を、学習データを用いた交差検証による推定するためには、誤差評価の精度を向上する必要がある。

(3) 大域的最適化法の適用

パラメータの最適化法として Basinhopping 法を使用して、量子回路学習の計算精度を検討した。Basinhopping 法は、マルチスタート局所探索法の一種で、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、Nelder-Mead 法と計算精度を比較した。

図-6に、1024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、それぞれについて全データ(1024サンプル)に対してQCLにより評価した95%値を示す。Nelder-Mead法では、95%値を過小評価するのに対して、Basinhopping法では、95%値を精度良く評価する結果が得られた。Nelder-Mead法では、Z基底乗数の初期値 $a=2$ に依存して局所解に陥っていると考えられる。一方、Basinhopping法は大域最適化法であり、局所解に陥ることなくRELAP5計算とよく一致する結果が得られたと考えられる。

また、Basinhopping法による95%値の評価は、線形2次回帰モデルによる評価[8]よりも精度が良い結果が得られた。

5. 結論

本研究では、ROSA/LSTFにおける小破断LOCA模擬実験を対象に、RELAP5コードによるPCTの不確かさ解析に量子回路学習を適用し、PCTの95%累積確率値の量子回路学習による予測精度をRELAP5解析計算と比較して評価した。パラメータの最適化に大域最適化手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。

参考文献

- [1] 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).
- [2] K. Mitarai, M. Negori, M. Kitagawa, K. Fujii, *Quantum circuit learning*, PHISICAL REVIEW A **98**, 032309 (2018).
- [3] 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).
- [4] The RELAP5 Code Development Team, *RELAP5/MOD3 Code Manual*, NUREG/CR-5535 (1995).
- [5] 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).
- [6] Y. Suzuki, et al., *Qulacs: a fast and versatile quantum circuit simulator for research purpose*, arXiv:2011.13524v4 (2021).
- [7] QunaSys Inc., *Welcome to Quantum Native Dojo!*, <https://dojo.qulacs.org/ja/latest/> index.html (2024).
- [8] I. Kinoshita, *Application of Surrogate Model for Uncertainty Quantification of RELAP5 Code Analysis of LSTF Small Break LOCA Tests*, *Proceedings of 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE27)*, ICONE27-2428, Ibaraki, Japan, May 19-24 (2019).