

核データなんでも相談室への質問のうち
MATXS に関する部分に対する回答案

2012. 11. 27 JAEA 今野

【質問内容】

JSSTDL、MACRO-JG の過去の公開記事を見ていると、温度が3点格納されており、内挿して温度の効果を考慮できるような記載があります。そこで、「常陽」で以下の定数を使って比較をしました。

- (1) 公開されている JSSTDL を縮約して「常陽」n100 群 γ 40 群構造にしたもの
 - (2) JENDL-3.2 を NJOY で処理して作成した n100 群 γ 40 群 matxs-J32
 - (3) JENDL-4.0 を NJOY で処理して作成した n100 群 γ 40 群 matxs-J4
- matxs 形式では5温度ほど格納してあります。

高速実験炉「常陽」の2次元 RZ 体系で各定数を常温と 500°C で計算しました。固定線源問題としております。(1)の定数では、常温と 500°C の結果にほとんど差はありませんでした。(2)、(3)では、中性子はほとんど変わりませんが、 γ 線束は 500°C は常温の約 1.1 倍でした。これは、ドップラー効果により捕獲の実効断面積だけが大きくなり、中性子束が変わっていないので核分裂は変わっていないのか、核分裂断面積の増加と吸収反応全体の増加がキャンセルしているのか疑問です。)

そこで、まず MACRO-JG で本当に温度内挿できているかソースコードを確認したところ、常に常温での計算になるような内容になっていると思われました。縮約の問題ではなさそうです。

疑問点は、

- ・ MACRO-JG で温度内挿は本当に動いていたのか？
 - ・ matxs 形式の計算結果で、 γ 線束だけが增加するのは妥当なのか？
- です。

【回答案[詳細]】

質問者殿のご質問の2番目の「matxs形式の計算結果で、 γ 線束だけが增加するのは妥当なのか？」を検討いたしました。

質問者殿は、JENDL-3.2、JENDL-4.0から独自に作られたMATXSファイル(温度は300K、700K、1200の3点)を使用されましたが、質問者殿から常陽のモデルを簡略化したDORT入力データ(別添1参照)、TRANSX入力データをいただき、それをもとに、JENDL-4.0の公式のMATXSファイルであるMATXSLIB-J40(中性子199群、 γ 線42群、温度は300K、600K、900K、1200Kの6点)をもとに、極端な例として、300Kと1200Kで計算を行ってみました。その結果、MATXSLIB-J40を用いたDORT計算でも、質問者殿のご指摘と同様に、UPu体系では γ 線束の増加はみられませんでした。UPu+SUS体系で1200Kで中性子束はほとんど変わらないのに γ 線束が増加することを確認しました(図1~4)。

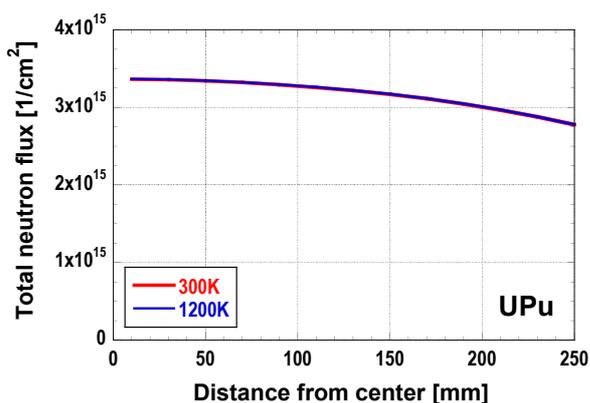


図1 UPu体系での全中性子束のZ=0でのR方向分布

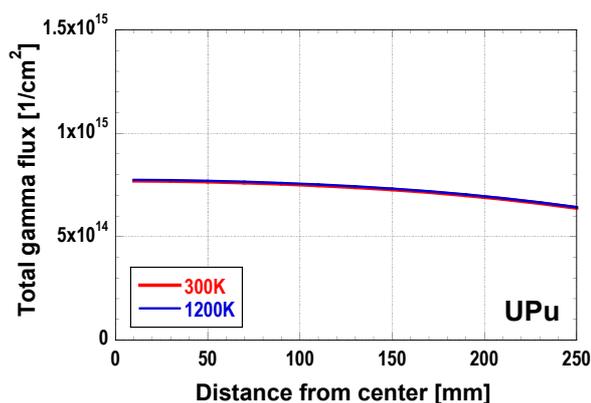


図2 UPu体系での全 γ 線束のZ=0でのR方向分布

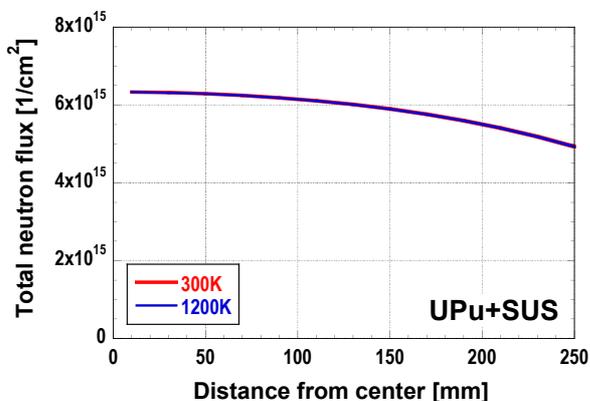


図3 UPu+SUS体系での全中性子束のZ=0でのR方向分布

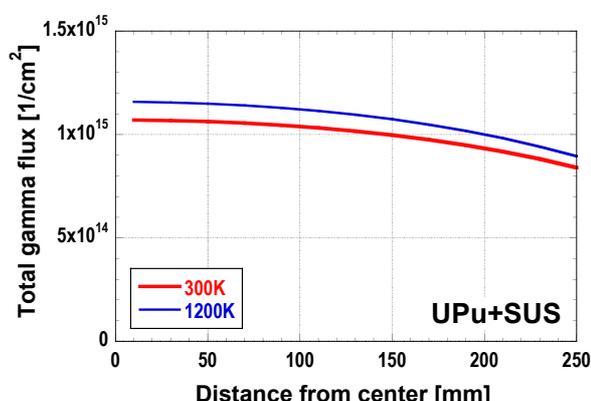


図4 UPu+SUS体系での全 γ 線束のZ=0でのR方向分布

質問者殿がご指摘の問題がこちらでも再現できましたので、その原因を調べました。まず、それぞれの体系での断面積が温度でどう異なっているかを見るために、 γ 線が生成する反応のうち温度によるドップラー効果の影響を受ける捕獲反応、核分裂反応のマクロ断面積をプロットしてみました（図5～8）。

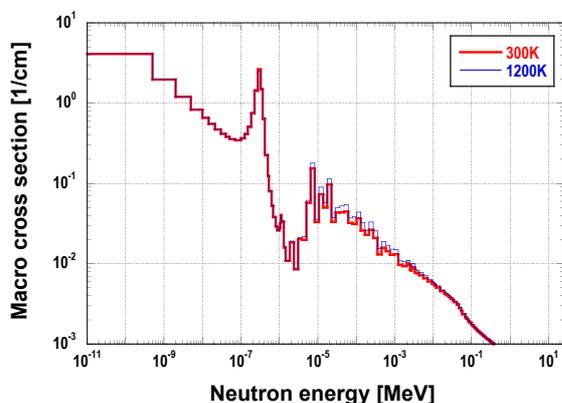


図5 UPu 体系での捕獲断面積

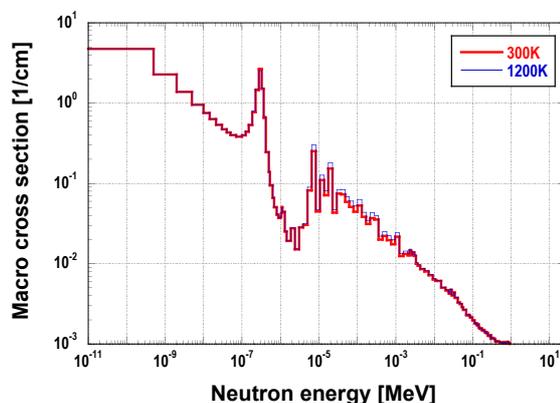


図6 UPu+SUS 体系での捕獲断面積

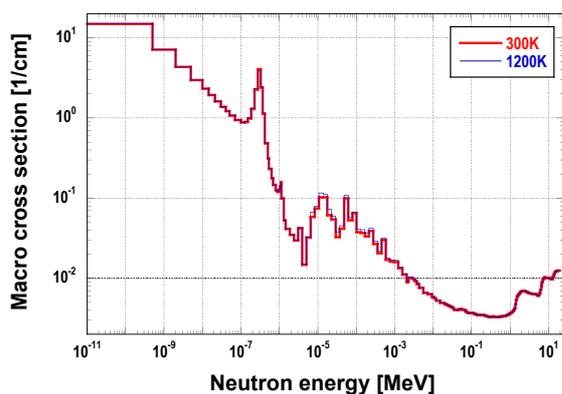


図7 UPu 体系での核分裂断面積

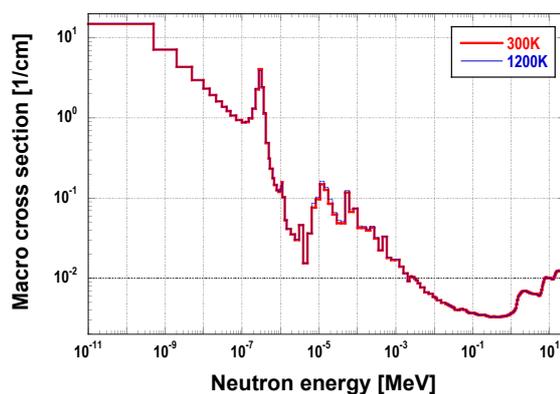


図8 UPu+SUS 体系での核分裂断面積

数 eV から数 keV のエネルギー範囲で捕獲断面積が核分裂断面積よりも温度による差が大きくなっています。当初、この差が高温での γ 線束の増加をもたらしているのではないかと考えましたが、その後、散乱マトリックスから算出した γ 線生成断面積が温度によって大きく違っているとのご指摘を質問者殿からいただき、 γ 線生成断面積を調べてみました。この γ 線生成断面積は、中性子群からガンマ線群への散乱マトリックスを角度で積分して（積分をするとルジャンドルの0次の項しか残らないので、結果的に0次の項を足して）算出したもので、 γ 線の多重度も考慮されているため、単純に γ 線を生成する反応の断面積を合算したものとは一致しません（ γ 線の多重度だけ大きくなります）。図9、10にこの γ 線生成マクロ断面積を示します。

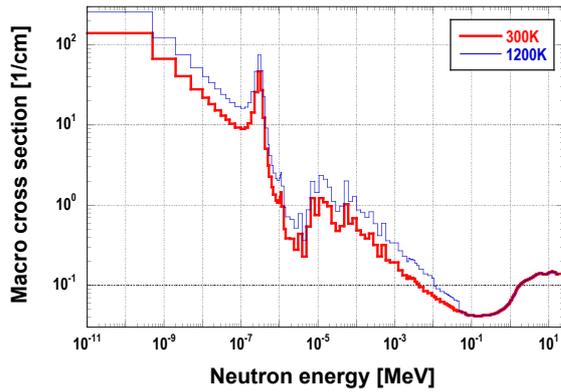


図 9 UPu 体系での γ 線生成断面積

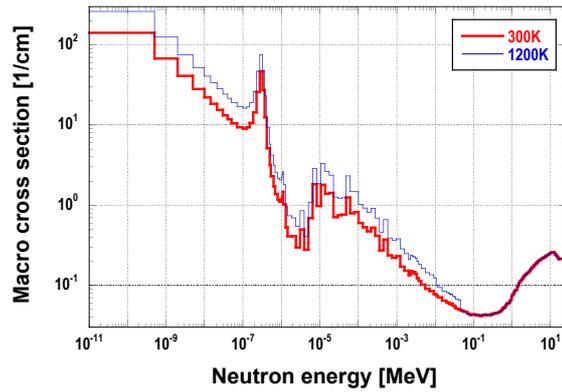


図 10 UPu+SUS 体系での γ 線生成断面積

1200K で UPu 体系でも UPu+SUS 体系でも 40keV 付近で断面積に段差が生じ、約 40keV 以下で 300K の断面積の倍程度になっています。この差は、図 5~8 の 300K と 1200K の捕獲反応、核分裂反応のマクロ断面積の差と比べかなり大きく、中性子群からガンマ線群への散乱マトリックスに何らかの問題があると考えられます。念のため、散乱マトリックスから算出した中性子生成マクロ断面積プロットすると図 11、12 のようになり、中性子群から中性子群への散乱マトリックスには問題がないと思われま

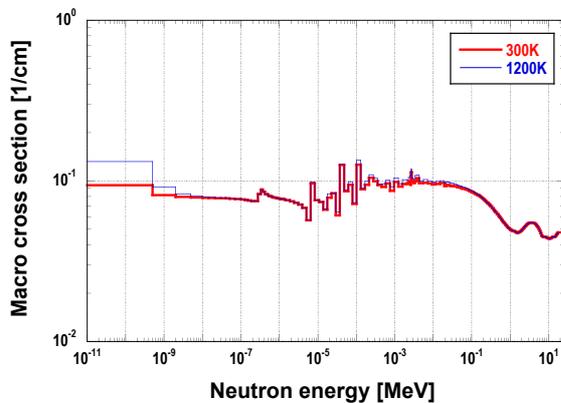


図 11 UPu 体系での中性子生成断面積

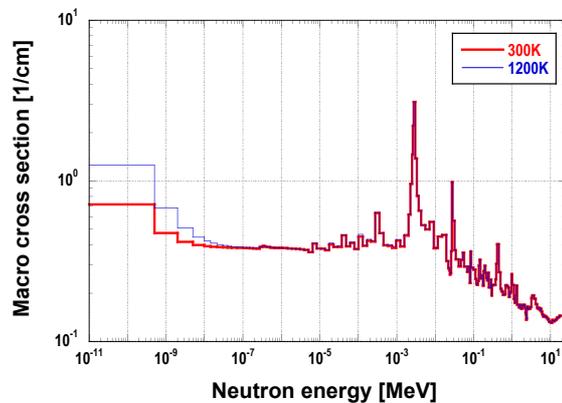


図 12 UPu+SUS 体系での中性子生成断面積

次に、1200K の時に約 40keV 以下で γ 線生成断面積が 300K の時の倍程度になった原因を調べました。その結果、温度が複数ある MATXS ファイルのデータの構成が TRANSX コードと整合性がとれていない箇所があることが見つかりました。温度が複数ある MATXS ファイルでは、最初の温度以外の断面積データは、通常、最初の温度の断面積データからの差として与えられています。しかし、 γ 線生成反応の角度分布がエネルギーによらず一定となる場合には、その角度分布に乗すべき断面積が差ではなく断面積のまま MATXS ファイルの 10d のセクションに記載されていました (断面積処理コード NJOY の matxsr モジュールの出力がそのようになっているようです)。TRANSX コー

ドは、この場合の乗ずべき断面積も差であるとしてコーディングされているようで、そのため、乗ずべき断面積がほぼ2倍になってしまい、図9、10のようにあるエネルギー以下で1200Kの γ 線生成断面積(1200KはMATXSLIB-J40ファイルの4番目の温度です)が300Kの γ 線生成断面積(300KはMATXSLIB-J40ファイルの最初の温度です)の2倍程度になったと考えられます。質問者殿もJENDL-3.2、JENDL-4.0から作成された300K、600K、900KのMATXSファイルを使われたため、同様の問題が生じました。なお、この問題は、UやPuだけでなく、エネルギーの範囲は異なりますが、図13に示しますように他の核種、例えば鉄でも起こっています(図13では約20meV以下で1200Kの γ 線生成断面積が300Kの γ 線生成断面積の倍になっています)。

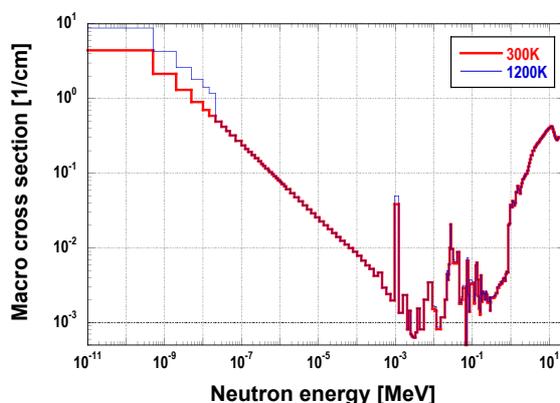


図13 天然組成の鉄体系での γ 線生成断面積

この問題の解決策として、以下の4つがあります。

1. 温度1点のみのMATXSファイルを使う。
2. γ 線生成反応の角度分布がエネルギーによらず一定となる場合には、最初の温度以外は、その角度分布に乗ずべき断面積を最初の温度の断面積との差としてMATXSファイルの10dのセクションに出力するようにNJOYコードのmatxsrモジュールを修正する。
3. γ 線生成反応の角度分布がエネルギーによらず一定となる場合、最初の温度以外の角度分布に乗ずべき断面積が最初の温度の断面積との差ではなく、断面積そのものであるようにTRANSXコードを修正する。
4. すでに作成済みのMATXSファイルの10dのセクションのデータで最初の温度以外の角度分布に乗ずべき断面積を最初の温度の断面積との差にする(マニュアルで行うか、簡単なプログラムを作って行う)。

1、4は比較的対応がしやすいですが(1、4の修正を行うと、本問題が生じないことは確認しました)、2、3はコードの著作権の問題もありコードを作られたMacFarlane氏に修正していただくべきです。現在、進められているMATXSLIB-J40の

改訂では上記のうち何らかの対応を行う必要があります。

話は戻りますが、UPu 体系でも UPu+SUS 体系でも 1200K の温度の約 40keV 以下の γ 線生成断面積に問題があるのに、なぜ、UPu 体系内では γ 線束の増加が見られず、UPu+SUS 体系内でのみ γ 線束の増加が見られたのでしょうか？これを検討するために、それぞれの体系の中心から 1 cm での中性子スペクトルをプロットしてみました (図 14、15)。

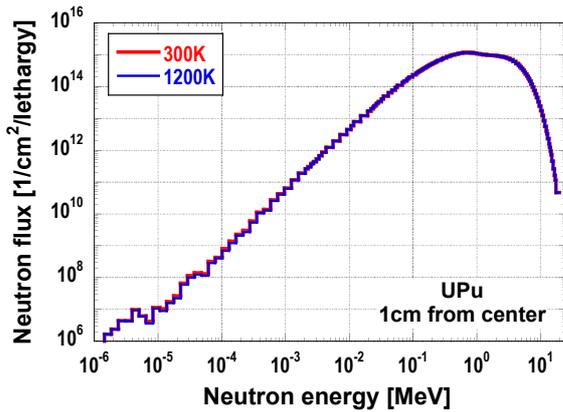


図 14 UPU 体系内中心から 1cm での中性子スペクトル

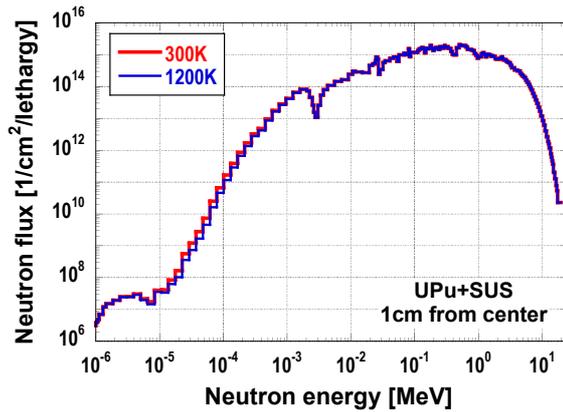


図 15 UPU+SUS 体系内中心から 1cm での中性子スペクトル

UPu 体系では温度で中性子スペクトルの差はほとんどないように見えますが、これは縦軸を対数スケールで表示したため、1keV 以上の中性子束、1keV 以下の中性子束としてプロットすると (図 16、17)、1keV 以上の中性子束は温度が変わっても変わりませんが、1keV 以下の中性子束は 300K と 1200K で 10%程度の違いがあることがわかります。

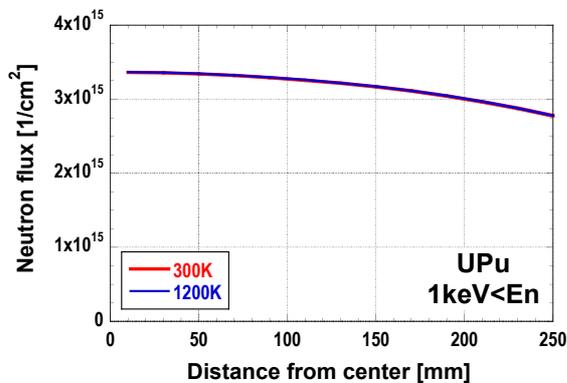


図 16 UPU 体系での 1keV 以上の中性子束の Z=0 での R 方向分布

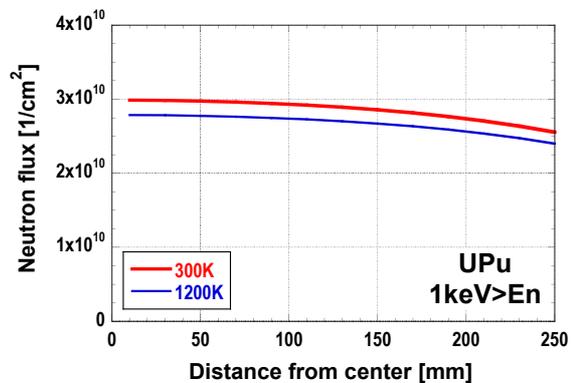


図 17 UPU 体系での 1keV 以下の中性子束の Z=0 での R 方向分布

UPu+SUS 体系でも、1keV 以上の中性子束、1keV 以下の中性子束としてプロットすると (図 18、19)、1keV 以上の中性子束は温度が変わっても変わりませんが、1keV 以下の中性子束は 300K と 1200K で 10%強の違いがあります。この温度による 1keV 以下の中性子束の変化は図 5~8 のように捕獲断面積、核分裂断面積が数 eV から数 keV の範囲で温度によって異なることに起因すると考えられます。しかし、どちらの体系でも 1keV 以上の中性子束は 1keV 以下の中性子束と比べて 2 桁以上大きいため、1keV 以下の中性子束の温度による差は、全中性子束で比較すると図 1、3 のようにほとんど見えなくなってしまいます。

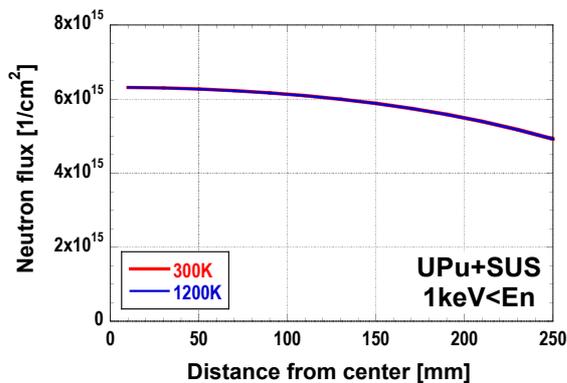


図 18 UPu+SUS 体系での 1keV 以上の中性子束の Z=0 での R 方向分布

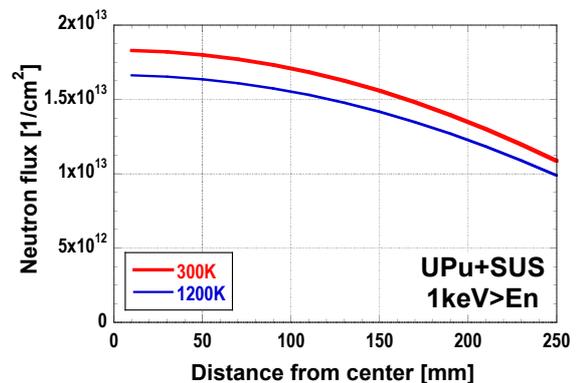


図 19 UPu+SUS 体系での 1keV 以下の中性子束の Z=0 での R 方向分布

次に全 γ 線束について考えます。既に述べましたように 1200K の温度の γ 線生成断面積は、約 40keV 以下で 300K の温度の γ 線生成断面積のほぼ倍になっているため、全 γ 線束も温度によって違いが生じうると考えられます。しかし、UPu 体系の全 γ 線束は温度によって違いが生じず、UPu+SUS 体系の全 γ 線束だけ温度によって違いが生じたのはどうしてでしょうか。図 16~19 をよく見ると、1keV 以上の中性子束は UPu 体系と UPu+SUS 体系で倍程度の違いですが、1keV 以下の中性子束は UPu+SUS 体系では UPu 体系の 3 桁以上も大きくなっています。従って、1keV 以下の中性子束による生成 γ 線も UPu+SUS 体系では UPu 体系の 3 桁程度大きくなります。そのため、UPu+SUS 体系の全 γ 線束は温度によって 10%程度差が現れ、一方、UPu 体系の全 γ 線束は温度が変わってもほとんど変わらなかったのだと考えられます。ちなみに、1keV 以下の中性子束が UPu+SUS 体系で大幅に増えた理由は、ナトリウム、鉄等の核種による中性子の減速効果が効いているためです(質問者殿は UPu 以外の核種を減らした計算をされ、全 γ 線束の温度による差がだんだん小さくなることを確認されています)。なお、解決策の 1、4 で MATXS ファイルを修正すると、UPu+SUS 体系でも 300K と 1200K の温度での全 γ 線束の顕著な差はなくなりました。

別添1 「常陽」を簡易的にモデル化した体系

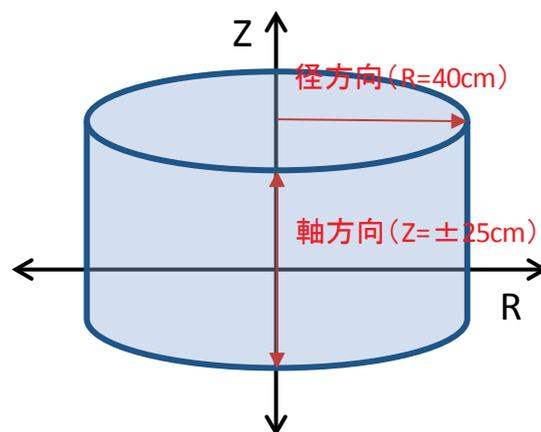
DORT 計算モデルは、2次元 RZ 体系を用いた「常陽」を簡易的にモデル化したもの。

簡易モデルのモデル化範囲は、径方向(R方向)が中心から半径40cmまでとし、軸方向(Z方向)は±25cmの50cm幅をモデルとしました。

簡易モデル内は1領域として断面積を与えています。計算メッシュは径方向、軸方向共に20分割しています。またモデル境界は、中心以外全て真空です。

組成は、燃料 (^{235}U 、 ^{238}U 、 ^{239}Pu) だけの場合 (UPu 体系) と燃料 (^{235}U 、 ^{238}U 、 ^{239}Pu)、SUS、Na を実機に合わせた割合で混ぜた場合 (UPu+SUS 体系) の2ケースを採用しました。

固定中性子源で計算。中性子源は領域内に炉内分布を考慮して配置しています。



核分裂による放出中性子スペクトルは、次に示す MCNP 内蔵の Watt 式で計算した Pu-239 の 100 群核分裂スペクトルを用いました。

$$f(E) = \sqrt{\frac{4}{\pi}} a^3 b \cdot \exp\left(-\frac{ab}{4}\right) \cdot \exp\left(-\frac{E}{a}\right) \cdot \sinh(\sqrt{bE})$$

$$a = 0.966$$

$$b = 2.842$$

(MCNP の推奨値)

核分裂スペクトル図を以下に示します。

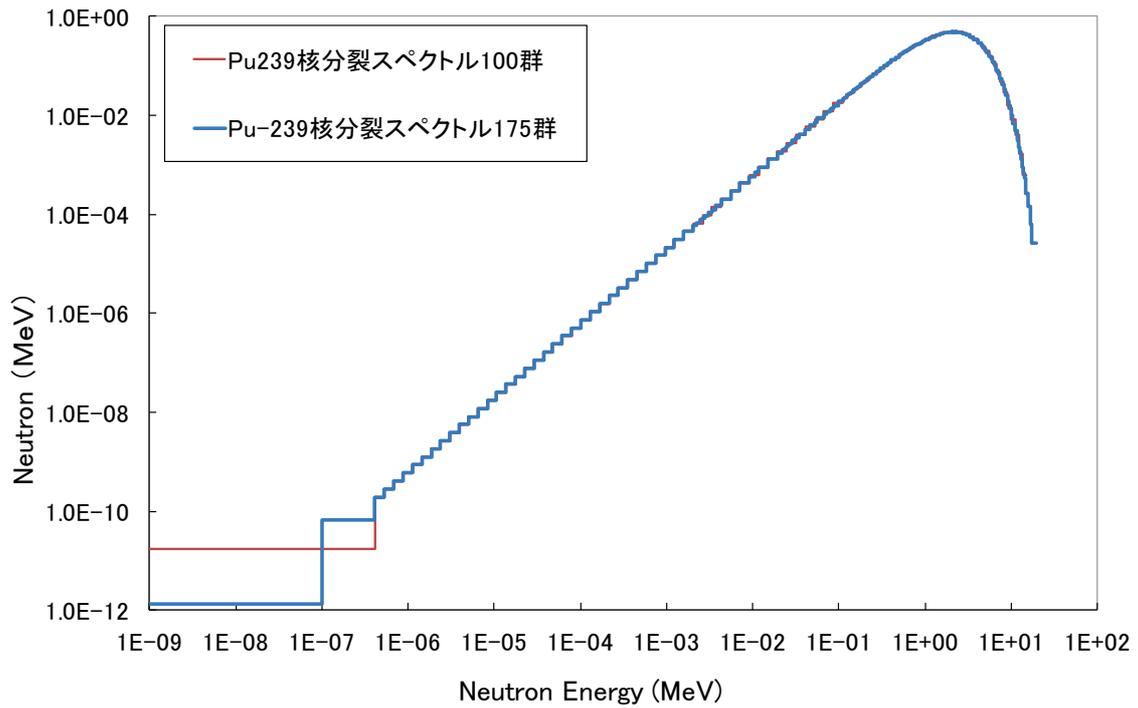


図 DORT計算用核分裂スペクトル

中性子 199 群の計算では中性子 175 群の上記スペクトルのうち 168 群までのデータを用い、169-199 群のデータは 0 にしました。