

ENDF/B-VII.1 の概要とその開発

Los Alamos National Laboratory

Theoretical Division

河野 俊彦

kawano@lanl.gov

1. 緒言

2011 年 12 月末に ENDF の最新版である ENDF/B-VII.1 が公開されたので、その概要を簡単に報告する。2006 年に公開された ENDF/B-VII.0 は主要重核の改訂を含み、ENDF/B-VI から大幅に変化したものであったが、今回の改訂では残された問題の解決に重点を置き、評価済み核データライブラリとしての品質向上を達成している。中性子ライブラリでは、全評価核種数は 393 から 423 へ増え、主要な核種に対して共分散データも与えられている。軽核での新しい R 行列計算、中重核の新しい評価、FP (Fission Product) の共鳴パラメータの改善、MA (Minor Actinides) データの再評価が含まれる。断面積データ以外でも、FPY (Fission Product Yields) と崩壊データが改訂されている。

なお評価及びベンチマークの詳細は、同時に発行された Nuclear Data Sheets 第 112 巻に掲載されているのでそちらを参照して頂きたい。本稿では評価の詳細についてはあまり立ち入らず、評価活動の背景等についてエッセイ風に述べることにする。また、内容が自分の関わった分野に偏りがちなのはご了承願いたい。

2. 壮大なパッチワーク

ENDF/B-VII.0 のリリースから純国産主義は消え、JEFF や JENDL に優れたファイルがあればそれらを積極的に採用している。B-VII.0 がリリースされて以来、ENDF は核種の坩堝となり、United States の面目躍如たる様相である。まず FP 領域の核データが、WPEC SG23 (Working Party on Evaluation Cooperation, Subgroup 23) で推奨されたファイルで置き換えられた。その結果 JENDL-3 に基づくファイルが大量に含まれる結果となった。そして B-VII.1 のリリースでは、MA (Minor Actinides) データ (但し Pu や Am の同位体等、重要なものを除く) が全て JENDL-4.0 で置き換えられた。

IAEA に於ける国際協力の成果、例えば標準断面積や Th-U 燃料サイクルの CRP

(Coordinated Research Project) で評価されたファイルも ENDF で採用されている。具体的には、Mn、W、Th、Pa のデータである。水素等の標準断面積は、LANL で作成された評価データファイルの一部として取り込まれている。ENDF/B-VII.1 に含まれる個々のファイルがどのようなライブラリを起源にしているのかの一覧が、以下で公開されている。

<http://www.nndc.bnl.gov/exfor/ENDF71summary.pdf>

他のライブラリから採用されたデータとは言え、しばしば一部修正されているので「起源」と呼ぶには語弊があるが、それでも現在の ENDF が如何に国際色豊かであるかを見て取れるだろう。数だけ見れば、驚くことに ENDF 起源のファイルは 43 % しか含まれず、45 % が JENDL、そして CENDL が 6 % も含まれているのである。この結果は ENDF 関係者に少なからぬ衝撃を与えたようであるが、要するに自分らがコントロールしたい主要核種の評価に重点を置き、あまり重要で無い核データについては、より良いものが利用できるのなら積極的に取り込んで行こうという合理主義の表れである。ライブラリ作成の目標が質重視にシフトしてきたとも言える。

3. ENDF の開発体制

ENDF は US の核データライブラリであるが、LANL、ORNL、BNL 等の国立研究所はほぼ独立して評価活動を続けている。JENDL の開発体制と大きく違うのは、ENDF 作成そのものの予算が存在する訳ではない点である。臨界安全や高性能コンピュータシミュレーション、核燃料サイクル、原子核物理といった核データに関連する研究の成果として何か評価ファイルが作られ、それらを BNL に集めたものが ENDF として公開されている。ORNL が評価するのは共鳴領域のみであり、LANL が高速領域を中心に評価しているのは、要するにプロジェクト毎の対象エネルギー領域が異なっているからである。

B-VII.1 に含まれる核種は 423 と過去最大になっているが、中にはあまり注目されることの無い不安定核、例えば半減期 2 時間の ^{123}Xe が含まれている。これもプロジェクト毎に必要なとされる評価データが異なることに起因する。

全体を ENDF としてまとめる意思決定機関が必要であり、その機能を果たしているのが CSEWG (Cross Section Evaluation Working Group) である。ここで新しい評価データが報告され、それを ENDF に採用するかどうか決定される。CSEWG だけでなく、距離が離れた研究所間の情報調整を常時行う必要がある。ENDF/B-VII.1 から、この調整方法として GForge と呼ばれる Web ベースの共同開発環境が整えられている。新しい評価、あるいはデータファイルの修正が合衆国のどこかで行われると、それが BNL のサーバのデータと同期される。誰がどのファイルを編集したのかを集中して管理できるシステムである。ある時点でのスナップショットを取り、それを β 版としてリリースすることで、ベンチマークテスト時のバージョンの混乱も避けることができる。

ファイル修正の履歴は全て残されるため、データファイルを古いものに戻すことも簡単に行える。新しい評価データがベンチマークテストを改善しないと分かった場合、その新評価データをシステムに残したまま、ENDF としては古いものを採用する場合もあった。自分が更新したファイルを他人に上書きされてしまうと不満を言うユーザもいたが、Internet 時代らしい開発体制になったと思う。

4. 主要重核データ

主要重核はほぼ ENDF/B-VII.0 のままである。変更点は共分散データと遅発中性子データであり、遅発中性子はユーザからのフィードバックによるものである。B-VII.0 の核分裂当たりの平均遅発中性子数 (ν_d) は、LANL の燃焼計算コード CINDER による総和計算で与えられたものである。しかしながら B-VI の方が熱炉のベンチマークの結果が良いという結果が幾つか報告され、最終的に B-VII.1 では遅発中性子データを B-VI に戻す判断がなされた。後ろ向きの決断であるが、遅発中性子を評価していた人達は全て引退しているのが現状である。

余談であるが、B-VII.1 リリース直前になって、BNL から奇妙な問い合わせが来た。B-VI の遅発中性子のセクションをそのまま B-VII.1 に埋め込んだだけであるが、そこに ENDF-6 のマニュアルに定義されていない数値があるというのである。調べてみると、なるほど未定義のフィールドに何やら意味ありげな数値が入っている。「何の影響も無いのだからゼロにしてみええば？」と答えておいたのだが、よく考えてみればこの変な数字は 20 世紀からずっと誰にも気付かれずに残っていたことになり、不思議なものである。ちなみにこの数字は今もそのまま残されている。気になる人は調べてみて欲しい。

今回のリリースに向け、主要重核関連での幾つかの大きな議論があった。全ての核データライブラリに共通する話題である。

1. ^{235}U の捕獲断面積
2. ^{239}Pu の共鳴パラメータ
3. ^{239}Pu の熱エネルギーでの平均即発中性子数(ν_p)
4. 即発核分裂中性子スペクトル(χ)
5. 高速領域での弾性・非弾性散乱断面積

^{235}U の捕獲断面積については、JAEA の岩本修氏を中心となった WPEC の SG29 の活動があるのでご存知の方も多いと思う。共鳴パラメータから計算される keV 領域の捕獲断面積を修正することで、幾つかのベンチマークテストを改善できるというものである。LANL では 4π 型 γ 線検出器 DANCE を用いて ^{235}U の捕獲断面積を測定したのだが、現在結果論文がまとめられつつある状況であり、DANCE の実験データに基づいた B-VII.1 での ^{235}U の変更は見送られた。このデータが公開され、共鳴パラメータ解析を ORNL が

行った後に改めて検討する予定である。予備的計算の結果は keV 領域では JENDL-4.0 の評価を支持しているようであるが、10 keV 以上での捕獲断面積のライブラリ間の矛盾もあり、どうなるかは不透明である。

^{239}Pu の共鳴パラメータの問題は、 χ や ν の不確かさと関連している。 ^{239}Pu の熱炉の問題は依然として残されており、JEFF では共鳴パラメータを調整したものを JEFF-3.1.1 としてリリースしている。同じような修正を共鳴パラメータに加える方向で検討されたのだが、僅かな χ や ν の調整で共鳴パラメータの変更分はキャンセルされてしまうということで、これも将来の検討事項として残された。JEFF のような ad hoc な修正はすべきではないと思う。

即発核分裂中性子スペクトルに関しては、IAEA が CRP として検討を続けており、大澤氏による昨年 12 月の会合のレポートが、この核データニュースに掲載されている筈である。実験、理論、そしてベンチマークテストの観点からスペクトルの「正しい」形状の検討が続けられているが、これも長期戦の様相を呈しているようである。

JEFF の ^{239}Pu の弾性・非弾性散乱断面積は JENDL や ENDF とはかなり異なっている。でも面白いことに、どのライブラリも Jezebel (Pu の球) の中性子実効増倍率を見事に再現するのである。どうやら弾性散乱と非弾性散乱の上下で効果が相殺されているらしい。これについては IAEA からレポートが出される予定であるが、一般に高速領域の非弾性散乱断面積を測定するのは難しく、模型計算によって評価がなされているのが現状である。計算コードがどれだけ正しく散乱断面積を計算しているのかを定量することが鍵となる。

5. MA データ

応用上さほど注目されない多くの MA は、全て JENDL-4.0 が採用されている。MA の中でも重要な同位体、特に Pu と Am のデータは今回の改訂作業に含まれている。Pu の同位体の幾つかは LANL で新しい評価ファイルが作成され、また Am のデータもアップデートされている。これらには共分散も含まれる。この改訂は、LANL でのベンチマークテストの改善を目指したものである。

MA の中には他のライブラリでは珍しい ^{239}U が含まれている。B-VII.0 では LANL で評価されたものが含まれていたが、紆余曲折の末、B-VII.1 では LLNL の評価で置き換えられた。半減期 23 分の同位体であり、通常の方法では断面積を測定するのは困難である。所謂「代理反応 (surrogate method)」の手法による実験データは存在するが、どの程度までそれが信用できるのかが問題であろう。

6. 中重核、FP データ

中重核、FP 領域で新しく評価され直したものには、Ti、V、Mn、Co、As、Kr、Zr、Mo、Xe、Tm、Ta、W、Re、Tl の幾つかの同位体がある。さらに多くの核種に対して、共鳴パラメータが再評価されている。

Ti や V のデータ改訂の背景には、反射体付きの高速炉心体系での問題がある。共鳴パラメータを再評価してはベンチマークテストを繰り返したが、著しい改善は見られなかった。最終的には、弾性散乱の角度分布を実験値に基づいた ENDF/B-VI の評価に戻すことにより良好な結果を得られるようになった。高速領域の弾性散乱の角度分布が中性子増倍率に大きな感度を持つことは以前から JAEA の石川氏らから指摘されていた事であるが、諸外国でも次第にこれに感心を持ち始めている。なお北大の千葉氏によれば、ENDF/B-VII.1 と JENDL-4.0 の Ti の弾性散乱角度分布の差は、主要重核データの僅かな差で帳消しになるとのことなので、より詳細な検討が必要であろう。

ENDF は核分裂エネルギー応用のユーザを重視しており、高エネルギー領域の核データは基本的に LA-150 のままである (Petten や IAEA の評価を採用したものを除く)。一方で構造材に対する α 粒子生成断面積が、LANL で測定されたデータを全く再現してないと長年問題になっていた。これは模型計算そのものに起因する問題で、GNASH や TALYS で採用されている前平衡モデルでは高エネルギーでの複合粒子放出をうまく計算できないのである。2010 年より JAEA の國枝氏が LANL に滞在しており、Iwamoto-Harada モデルを応用してこの問題を解決し、その結果が B-VII.1 に採用されている。また同じ計算結果は IAEA で編集されている核融合用データライブラリ FENDL-3 にも含まれる予定である。

7. 核分裂収率データ

歴史的に ENDF の FPY は LANL で評価されてきたが、そのアクティビティが途絶えて久しい。それが今回、LANL と LLNL の間で論争を巻き起こすことになる。LANL で評価される種々の核データは基本的に ENDF として公開される訳であるが、LLNL も内部で独自のライブラリを持っている。その FPY のデータがお互いに異なっていたという話である。詳細は避けるが、結論として FPY のエネルギー依存性が重要であることが分かった。

我々は過去の FPY の測定データを全て見直し、その測定条件と MCNP の計算から核分裂を起こしている中性子の平均のエネルギーを割り出した。その結果、thermal、fast、14 MeV の 3 つの中性子入射エネルギー点で与えられていた FPY データを、高速領域を 0.5 MeV と 2.0 MeV に分けて 4 点とした。今回の改訂作業では ^{239}Pu のみを対象にしたが、FPY 評価をしている人物はもう LANL にはいない。この再評価を行ったのは Chadwick 氏と自分である。二人のアマチュアがこんな重要なデータに手を入れて良いのだろうか、よく冗談を言ったものである。実際、ファイル化作業はまさに手探り状態であった。なお FPY がどのように測定され、どのように評価されたかの論文が、2010、2011 年の Nuclear Data Sheets 12 月号に掲載されている。数十年に渡る核分裂収率データ測定の歴史をみるようで面白いと思う。

8. 崩壊データ

新しい評価済み核データライブラリのリリースでは断面積データに話題が集まりがち

であるが、崩壊データも BNL にて大幅に改良されている。崩壊データは 3817 核種を含み、主に最新の ENSDF (Evaluated Nuclear Structure Data File) を ENDF-6 フォーマットに変換したものや、他の評価データライブラリ、理論計算からなる。今回の改訂により、長年の懸念であった崩壊熱の問題を解決している。

遅発中性子及び遅発 γ 線放出には、LANL で開発された統計模型計算コード CGM (Cascading Gamma-ray and Multiplicity) が用いられている。実験の困難な中性子過剰核に対して、 β 崩壊後の原子核の崩壊過程を Hauser-Feshbach 統計模型を用いて計算するものである。 γ 線と中性子の競合をより正確に計算することができる。

9. DOE Office of Science のサポート

CSEWG と並び ENDF の評価を支えるのが、DOE Office of Science の USNDP (US Nuclear Data Program) である。このプログラムは主に NNDC に於けるデータ普及と核構造データ評価をサポートするが、それ以外にも LANL での原子核反応理論や核反応データ測定、国際会議主催などの核データ国際協力を補助する。CGM コードは USNDP の元で開発されたもので、Hauser-Feshbach 統計模型を決定論的方法と Monte Carlo 法で計算するものである。このコードは崩壊データ評価に用いられただけでなく、LANL の実験データの解析、Monte Carlo 法による即発核分裂中性子スペクトルの計算にも利用されている。工学応用を目的とした核データライブラリ開発に対して、原子核物理基礎からの支えがあることは非常に有利である。

10. ENDF/B-VII.2 に向けて

主要重核に残された課題、すなわち ^{235}U の捕獲断面積、 ^{239}Pu の共鳴パラメータと v 、核分裂スペクト、そして散乱断面積、これらの検討を次期 ENDF リリースに向けて続ける予定である。国際協力は今後さらに必要になってくるであろう。また今回のリリースでは時間の関係上入れることができなかった新しい評価データが残されている。これには ^{23}Na のような高速炉で重要な核種も含まれる。

B-VII.0 と B-VII.1 のリリースでは、Fe、Cr、Ni 等の構造材データの改訂が取り残された。高エネルギー領域での α 粒子生成断面積以外、さほど厳しい問題点が指摘されていなかったのが理由であるが、これらのデータがかなり古いものになっているのも事実である。ここも検討対象となるであろう。中には ENDF/B-IV (もしかすると B-III) から引き継がれているデータも残っているようなので、一度ファイルのエイジング問題を検討する必要があるようである。

GForge を用いた開発体制はそのまま続けられると思われる。具体的な B-VII.2 リリースのターゲットは設けないまでも、定期的に β 版をリリースしてユーザからのフィードバックを得ながら改良していく予定である。

カードイメージである ENDF フォーマットは時代遅れであると言う声が次第に強く

なっており、評価データを全て XML に変換する試みがなされている。現在のところ ENDF-6 フォーマットと XML の相互変換は可能になっており、簡単なデータ修正は XML ファイルに対して行い、それを ENDF-6 フォーマットに戻している。XML 化の最大の問題は処理コードであるが、少なくとも ENDF-6 に戻せる間は問題ないであろう。しかし XML の利点は ENDF-6 で表現できない情報を格納できる点であり、そうすると今度は処理ができない。パラダイムシフトに付きものの問題であるが、この新フォーマット化の流れは止まらないようである。

昨年 5 月、Chadwick 氏と私はパリを散歩しながら（散歩と言うには長距離のハイクであったが）、11 月に IAEA で予定されていた会合について話していた。今後の核データのあり方として、2 つの方向性があると思う。一つはより国際協力を推進し、世界で標準のライブラリを作成すること。もう一つはデータファイルという旧来の制約にとらわれず、模型計算コードそのものを放射線輸送計算コードに含めてしまう、所謂 *event generator* の考えである。CGM はまさに *event generator* として機能し、LANL ではこれを MCNP に含めてしまう計画もある。

世界標準ライブラリ、WENDL や iENDF など、現状では適当な名前と呼ばれているが、アイデアそのものはずっと以前から存在したものである。あまりに強い向かい風で現実には議論されることは殆ど無かったが、今回 LANL が IAEA でこれを取り上げた IAEA がこのプロジェクトを推進するのに最適であるという判断のためである。NEA の JEFF は OECD の元に評価されているライブラリということになっているが、実情はヨーロッパのライブラリとなっている。

現在、核データ評価の手法そのものはほぼ収斂している。利用可能な実験データを集め、それらを模型計算で再現してファイル化する。実験データが限られている以上、得られる評価値はどれも似通ったものとなる。共鳴パラメータにも多くの選択肢があるわけではない。Internet で各国が接続されている現在、各プロジェクトが独自に評価を行うのはリソースの無駄という声は常に存在する。TENDL は TALYS 計算で数多くの評価データを一気に作成したものであり、その核種数に於いて他のライブラリを圧倒している。以前 Koning 氏とその話をしていた時のこと。数が多いのが利点であるのなら、ENDF に無くて TENDL にある核種を全部コピーして、それを ENDF とするよと彼に言ったら、「それは不公平だ」と不平を漏らした。これをやれば TENDL の利点は無い。

ライブラリ間の競争は質向上に於いて重要であるが、ユーザからすれば良い核データライブラリであればその起源は関係ないはずである。そろそろ世界標準ファイルを考えても良いのではないか。もちろん ENDF を標準にするというつもりは全くない。ENDF/B-VII.2 は依然として現在の体制で開発が続けられるであろう。それと並行しながら、ゆっくりとした歩みであっても確実にファイルの統合を目標にする時期に来ていると LANL は考えている。