

「シグマ」特別専門委員会、核データ部会、炉物理部会合同セッション
「ベンチマーク問題や積分実験を用いた JENDL 及び核計算コードの V&V の
現状と今後の展望」

(2) 核計算分野における OECD/NEA 国際ベンチマーク

日本原子力研究開発機構
炉物理標準コード研究グループ

須山賢也

suyama.kenya@jaea.go.jp

1. はじめに

炉物理・核データ分野では、計算コードによる解析精度の現状把握や入力データとなる核データの妥当性を確認する事を目的として、「ベンチマーク計算」が行われている。多くの人がこの単語を聞いたことがあると思われるが、1970 年発刊の「JNDC ニュース (核データニュースの前身)」第 15 号に「ベンチマークについて」という記事があり、「最近、ベンチマークという用語が炉物理研究者の間で使われようになってきている」という記載がある。我が国が NEA データバンクの前身である欧州原子力機関(ENEA)のコンピュータプログラムライブラリ (CPL; Computer Programme Library) と核データ編纂センター (CCDN; Centre de Compilation de Données Nucléaires) に加盟し、国際的な計算コードと核データの流通システムに関与し始めたのは 1966 年であるので、それから数年後には現在と同様の計算システムの妥当性確認活動が、「ベンチマーク」という言葉で代表されるようになった事が窺える。

経済協力開発機構 原子力機関 (OECD/NEA) の原子力科学委員会 (NSC; Nuclear Science Committee) は、その前身の一つである炉物理委員会 (CRP; Committee on Reactor Physics) の頃からベンチマーク計算実施を活動の柱の一つとし、現在「国際ベンチマーク」と言うと NEA/NSC で実施しているベンチマークを指すことが比較的多いと思われる。筆者は NSC の配下にある臨界安全性ワーキングパーティー (WPNCSS; Working Party on Nuclear Criticality Safety) 及び燃焼度クレジット専門家会合 (EGBUC; Expert Group on Burnup Credit Criticality Safety) に長年参加し、そこで実施されるベンチマークの実施状況を見るだけでなく、複数のベンチマークについては運営する立場にある。本発表では NEA/NSC で実施している炉物理関連のベンチマークの現状や、それらが実際の計算コードの精度評価や開発にどのように役立っているのかの実例を示したい。

2. NEA におけるベンチマーク

NEA/CRP 時代から始まる NEA/NSC のベンチマーク計算の歴史は長い。それを俯瞰することはこれまでの炉物理・核データ分野の技術開発の歩みを確かめることにも繋がると思われるが、残念ながら NEA/NSC にそういった資料は存在していない。比較的リストが揃っているのは EGBUC における燃焼度クレジットに関係したベンチマーク問題であり、NEA のホームページ[1]に、実施されたベンチマークの一覧が掲載されている。それを表 1 にまとめた。

使用済燃料組成を有する単一燃料棒体系での中性子増倍率の相互比較を目的とした Phase-IA ベンチマークの結果が 1993 年に公刊されて以来、2012 年に仕様が配布された反応度価値計算の比較を目的とした Phase-VIII ベンチマークまで、15 のベンチマークがリストアップされている。これらのリストを見ると、それぞれの時代にその分野の関係者がどのような意識をもって研究開発を行っていたかを知ることが出来て興味深い。

最初に実施された Phase-I ベンチマークでは、新燃料や使用済燃料組成を使用したシンプルな臨界計算を実施して燃焼度クレジットの効果を確認すると共に、使用済燃料組成の計算精度の確認が照射後試験の解析を通じて行われた。Phase-II ベンチマークでは 1990 年代中頃に課題となっていた、使用済燃料の燃焼度分布が反応度に与える影響（端部効果）に着目した評価が行われている。Phase-I 及び II ベンチマークでは PWR-UO₂ 燃料を対象にしていたが、Phase-III ベンチマークでは BWR 燃料を、そして Phase-IV ベンチマークでは MOX 燃料を対象として、燃焼度クレジットの検討が行われている。また NEA 加盟国の東欧諸国への拡大を反映し、Phase-V 及び Phase-VI ベンチマークでは VVER の燃料を対象としたベンチマークが行われた。その後、使用済燃料の直接処分を視野に入れた超長期冷却（つまりは超長期間の崩壊計算）後の使用済燃料組成の比較、さらにはサンプルの反応度価値の評価までが、Phase-VII 及び Phase-VIII ベンチマークでそれぞれ実施されている。

EGBUC は 25 年を越える活発な活動を行ってきたが、燃焼度クレジットの導入が欧米各国で進んだ事もあってその活動を閉鎖し、2014 年から使用済燃料の臨界問題全般を扱う「使用済燃料臨界安全性専門家会合（EGUNF; Expert Group on Used Nuclear Fuel Criticality Safety）」に改組された。現在 EGUNF では、使用済燃料直接処分における臨界安全評価で重要となる SiO₂ の反射体効果や、可燃性毒物として Gd を使用している燃料の臨界性評価に必要な Gd 燃料の燃焼に関するベンチマークを行っている。

その他、炉物理に関する専門家会合としては、原子炉システムの科学的課題に関するワーキングパーティー（WPRS; Working Party on Scientific Issues of Reactor Systems）に原子炉物理及び先進原子力システムに関する専門家会合（EGRPANS; Expert Group on Reactor Physics and Advanced Nuclear Systems）があり、燃焼計算の相互比較を中心とした

ベンチマークが実施されており、最近では、高温ガス炉の燃料を対象とした燃焼ベンチマークが行われている（HTGR Fuel Element Depletion Benchmarks）。このように、NEAの専門家会合では、ある技術的テーマを中心に一連のベンチマークが継続的に行われている状況にある。

表1：EGBUCにおける燃焼度クレジットに関係したベンチマーク問題一覧^[1]

ベンチマーク番号	対象	解析の概要	レポート 公刊年月
I-A	PWR-UOX	PWR 単一ピンセル体系臨界計算	1994年1月
I-B	PWR-UOX	PWR 単一ピンセル体系燃焼計算	1996年6月
II-A	PWR-UOX	単一ピンセル体系での燃焼度分布の増倍率に与える影響	1996年2月
II-B	PWR-UOX	実キャスク体系における燃焼度分布が増倍率に与える影響	1998年5月
II-C	PWR-UOX	実キャスク体系における燃焼度分布が増倍率に与える影響（燃焼度分布に対する感度評価）	2008年9月
II-D	PWR-UOX	実キャスク体系における燃焼度分布が増倍率に与える影響（制御棒挿入が使用済燃料組成に与える効果）	2006年12月
II-E	PWR-UOX	制御棒挿入によって生じる使用済燃料組成変化が端部効果に与える影響	2015年6月
III-A	BWR-UOX	BWR 単一ピンセル体系臨界	2000年9月
III-B	BWR-UOX	BWR 燃料集合体燃焼計算	2002年2月
III-C	BWR-UOX	BWR 燃料集合体燃焼計算	2016年3月
IV-A	PWR-MOX	PWR-MOX 単一ピンセル体系での臨界計算	2003年5月
IV-B	PWR-MOX	PWR-MOX 燃料燃焼計算	2003年5月
V	PWR-UOX	VVER-440 燃焼計算	出版準備中
VI	PWR-UOX	VVER-440 燃料の端部効果評価	継続中
VII	PWR-UOX	長期冷却後の使用済燃料組成	2012年2月
VIII	PWR	サンプル反応度値	出版準備中

3. ベンチマーク計算の核計算システムへの反映

NEA のベンチマークの報告書を見ると、どのコードが良くどのコードが悪いという「白黒」が明確に書いていないことに物足りなさを感じる人もおられると思う。NEA で実施している国際ベンチマークは、コードの優劣を決めることを目的としていない。これは国際機関である OECD の考え方と同じであり、お互いが抱える共通の問題とそれらに対するより良い解決策を互いに考え、peer-review を行うことでより良い解決策を目指していくという精神が、その根底に流れていることには注意すべきである。

このようなレビューを重ねていくことは、確実に互いの評価につながる。よって、ベンチマーク参加者はできる限り最善の計算値を提出すること、長期に亘ってその委員会に出席して自ら建設的な意見を提示すること、そして得られた結果から最大の成果を抽出する努力をすることが期待される。これは時間のかかる非常に地味な作業ではあるが、国際ベンチマークの醍醐味と意義がこのような研究者間の相互の交流と刺激にもある事は、疑いのない事実である。

筆者の関与したベンチマークに、BWR 燃料を対象とした燃焼ベンチマークがある。ベンチマーク計算の経験が、その後の計算コードの精度評価や機能向上に影響を与えたと思われる典型的な例であるので、ここで取り上げてみたい。

わが国の臨界安全性評価にたずさわる関係者の間で燃焼度クレジットの導入が最大の課題であった頃、1998 年に原研は BWR 燃料集合体に対する燃焼計算のベンチマーク Phase-IIIB[2]を EGBUC に提案した。このベンチマークは BWR 燃料への燃焼度クレジット適用性を検討する目的で開始された。その当時は、燃料集合体を対象とした 2 次元あるいは 3 次元の燃焼計算を行えるコードは EGBUC 参加機関（公的研究機関がメインであったため）でさほど広く利用されていない状況にあった。PWR とは違い集合体内に濃縮度分布が付けられるのが当然である BWR 燃料の場合、単一ピンセルに焼き直した計算と詳細な計算結果にはある程度の差が生じることは予想されていたものの、多くの参加者が使用する米国の SCALE でさえ多次元燃焼計算が出来ない状況にあって、かなり無理なモデル化をして計算をする参加者もあった。そのため計算結果間の差が非常に大きくなり、ベンチマーク実施後に重要な問題点を抽出しきれない状況であった。報告書は 2000 年に当時の原研から公刊されたものの、関係者にとっては課題の残るベンチマークであった。

しかし、国際ベンチマークにおける peer-review の精神は、コード開発に影響を与える。Phase-IIIB ベンチマークの現状を見た ORNL の SCALE 開発部隊は、SCALE の多次元燃焼機能の実装の必要性を実感して熱心に取り組み、現在の SCALE の隆盛に繋がっている。拙作の統合化燃焼計算コード SWAT も Phase-IB ベンチマークから活動に参加をしたが、Phase-IIIB ベンチマークで難儀した経験から ORIGEN2 を使った多次元燃焼機能の追求の必要性に目覚め、ORIGEN2 と MVP や MCNP を組み合わせた現在の SWAT4.0 につながっ

た。

国際ベンチマークは peer-review の精神があると同時に、お互いのプライドをかけた場でもある。それがコード開発に刺激を与えることは疑いのない事実である。計算コードの開発やそれを使った解析に取り組んでいる若い研究者にも、ぜひチャンレンジしてもらいたい。

4. 資産としてのベンチマーク計算

2011年の福島事故を受け、BWR 燃料の燃焼計算結果の相互比較が再び必要となった。Phase-IIIB ベンチマークの経験のあった筆者は、それを最新のコードで解析し直し、参加コードの中でも正しく多次元燃焼を扱っていると思われるコード群と現在の最新燃焼計算コードの差を把握した。その結果を EGBUC に提出して議論を行い、福島事故で発生した燃料デブリの臨界安全評価を視野に入れた、最新の BWR 燃料集合体に対する燃焼計算の精度評価の必要性を、EGBUC メンバーが共有した。それを受けて、1F で使用される燃料の仕様をベースとした Phase-IIIC ベンチマーク [3] を我が国から提案することとなった。

Phase-IIIC ベンチマークは最終的に 30 以上の結果を受けとる大がかりなものとなった。そこでは、15 年近く前とは大きく異なり中性子輸送計算ソルバーに連続エネルギーモンテカルロコードを使用した燃焼計算コードが広く利用されている実態が確認されるとともに、連続エネルギーモンテカルロコードを使用した燃焼計算コードで求めた燃料平均組成を使用することによる反応度評価誤差は、FP を考慮した場合でも 2% 以下 (2σ) であることを評価するなど、Phase-IIIB ベンチマークでは行う事が出来なかった分野までカバーすることが出来た。

Phase-IIIB ベンチマークの例が示すように、国際ベンチマークでは時に自分たちの能力を超えた仕様が提示される場合がある。しかし自己の進歩や周囲の技術開発の進展に伴って後年解析が可能となる場合もある。従って、ベンチマークの情報は、その結果がどのようなになったとしても次世代に引き継ぐべき貴重な知見を含んだ資産となる可能性を含んでいると考え、詳細な情報を報告書に保存するべきである。この「知見・経験の次世代への継承」も、ベンチマークの重要な役割として考えられるべきである。

5. 実験データに基づくベンチマーク計算

(1) 数値ベンチマークと実験値を使ったベンチマーク

実験値の無い仮想的な問題を対象としたベンチマークは、数値ベンチマークと呼ばれることがある。この場合、初めて実施される場合にはどのような結果になるかが不明であることが多いため、ブラインドベンチマークという言い方もされる。計算シミュレーションの分野では近年検証と妥当性確認 (V&V; Verification and Validation) が一つのキー

ワードとなっているが、実験値を使用せず計算コードを比較するベンチマークは、それぞれの計算コードが採用した数学モデルや数値計算手法を正しく実装しているか（言い換えればバグなくコーディングされているか）を確認する **Verification** に近い活動と言える。計算コードを新たに開発した場合に、これまでに実施された国際ベンチマークの解析を行って従来開発されていたコードとの比較を通じて検証をすることは重要なステップであり、ベンチマーク問題の重要な役割となる。

一方で実験値を積極的に使用するベンチマークもある。実験値の解析を行いそれぞれのコードの **Validation** と同時に他コードとの比較も行うものである。これには高品質な実験データが必須であるが、近年使用される典型的なデータは「国際臨界安全評価プロジェクト (ICSBEP)」で収集されたデータである。ICSBEP は臨界実験の解析に必要な数多くのデータの妥当性を複数の専門家がレビューした結果を **document** としてまとめたものであるが、積分テストを通じた **Validation** を実施する上で欠くことの出来ないデータベースとして使用されている。

(2) 実験値を使ったベンチマーク問題の難しさ

実験データをベンチマークに使用する場合、ベンチマークのスペックを決める際にどの程度の詳細さでデータを与えるか、実験解析として十分なデータを与えているか、そして簡略化したモデルが実験データ解析においてどの程度の誤差を与えるかの事前の検討を十分に行わないと結果の扱いに迷うことがあるため注意が必要である。すなわち、実験値と計算値の差が大きいと計算の妥当性に疑問符が付くこととなるため、ベンチマークの提案者は詳細モデルとベンチマーク計算で提示するベンチマークモデルの間の差を良く理解し、簡略化したベンチマーク用のモデルを作成する場合であっても、実験の再現性を意識したモデル化をすべきである。

筆者の経験した例で言えば、EGBUC Phase-IB ベンチマーク [4] がこの例に該当する。米国カルバートクリフス一号炉で照射された燃料を対象とした **PIE** データの解析を題材にした次元燃焼計算のベンチマークであって、筆者が始めて参加した国際ベンチマークであった。問題の提案当時にはあまり問題とされなかったようであるが、問題の設定が **PIE** データの解析には不十分であったため実験値と計算値の差が大きく、最終的に実験値は参考としてあつかわれることとなった。何のために実験解析を題材に持ち出したのかが若干不明確となったことと、カルバートクリフス 1 号炉のデータは、その後の詳細解析によって良い計算結果が得られることが分かっていたため、実験データの質に対する疑問が生じたのは残念であった。今後、注意すべき点であろう。

このような注意は **ICSBEP** を使用する場合でも同様である。**ICSBEP** に例として挙げられているコードの入力データは、あくまでも参考として付録されているもので、正しさが保証されているわけではない。よって、実験解析によって評価済核データを含む計算

システムの精度評価を極限まで追求しようとするれば、そのコード入力データの精査や見直しは必須である。ICSBEP は新規データの登録が一段落し、新しい活動の方向性を探っている時である。ICSBEP の将来を考えれば、それを使用した国際ベンチマークによる計算コードの絶対的な精度評価及び核データへのフィードバックまでを視野に入れ、内蔵データの精査が一つの検討課題となるであろう。

(3) 実験値を使ったベンチマーク問題からのフィードバック

なお、ICSBEP や NEA の国際ベンチマークに取り上げられたものではないが、Phase-IB ベンチマークと同様に照射後試験データを使って計算コードの精度評価を行ったものに、原研が 1990 年代後半に実施した高浜 3 号炉照射後試験で取得したデータ[5]がある。データ取得当時は、JENDL-3.2 に基づく ORIGEN2 用ライブラリ[6]の開発において Validation を目的とした解析が行われたが、使用済燃料組成データベース SFCOMPO[7]に内蔵されて、広く海外でも使用されることとなり、標準的なデータとしての扱いをうけている。また、原子力機構の奥村氏らによって JENDL-4.0 の開発のための積分テストとして実験解析の対象とされた。その解析結果をうけ、JENDL-4.0 の作成時に、JENDL-3.3 における ^{134}Cs 生成量の過小評価を修正するために ^{133}Cs 断面積の見直しが行われた。また、燃焼度の指標である ^{148}Nd の生成量に影響をもつ ^{147}Nd の中性子捕獲断面積についても、その他の照射後試験の結果も踏まえて見直しが行われた。

実験データの解析から核データや計算コードの改良につながる情報を得る事は、実験の動機となるものである。多様な解析手法（コード）によって裏付けされた結果があれば、自信をもって核データにまでもどってフィードバックをかけることが出来る。

取得した実験データを国際ベンチマークとして解析対象に提案することは、取得したデータの価値を長期間にわたって高くすることにつながるので、良い実験データが取得されれば、是非その国際ベンチマーク問題化にチャレンジされてはどうだろうか。

6. OECD/NEA/NSC でのベンチマークの提案方法

ある問題意識のもとに、必要な情報を得るためのベンチマークを NEA で行いたいと思った場合には、ベンチマークを実施する専門家会合 (EG; Expert Group) に出席し提案を行うことが第一ステップである。この時に注意しなければならないのは、NEA が国際機関であり委員会の出席には公式性が求められるということである。現在、EG へ出席するためには日本政府を經由した正式な委員登録までは求められていないが、該当する EG の参加者ではない場合には、EG への日本からの常時参加者に連絡を取り、各 EG を統括するワーキングパーティー (WP) の日本代表委員に対して EG への出席の意志と提案の概要を伝え、WP 代表委員から EG 会合への参加の連絡を NEA 側に伝える必要がある。この時点でベンチマークの提案がどのように扱われるかの感触もわかるであろう。

満足度の高い良いベンチマークのためには、私の経験からすると、以下を意識することが必要であると思う。

i) 明確な目的

国際ベンチマークを実施する際、広範な比較を行うと同時にプレゼンスを示すため、出来るだけ多くの参加者を得たいと提案者は考えるだろう。しかし単に計算値を比較してみたい、というだけでは多くの国から参加者を得ることは出来ない。多くの参加者は自分の通常業務に付加する形で参加をするため、彼等にとって魅力的な訴求ポイントが必要である。少なくとも共通課題となり得るクリアしたい技術課題があって、その課題克服がある科学的・技術的目標の達成に必要不可欠であるという大義名分（他人を納得させる理由）が必要である。それがあれば、次に示す仕様の設定においても迷うことは無いだろう。

ii) シンプルで練られた仕様

複雑な計算仕様や求められる評価値を得るのに膨大な後処理が必要となれば、参加を躊躇されてしまうだけでなく、ベンチマークで得られた差異の原因の追求を困難にする。計算結果から科学的知見を絞り出すのは、ベンチマークの提案者である。提案者は、送付されてきた計算結果を処理し、付加的な計算を実施し、何が分かったのか、そして何処に問題があり改善の余地があるのかを調べた上で、レポートに記載する責務がある。それを見越した仕様の設定が求められるし、それが出来ない場合には内容を再考すべきである。

iii) 事前の十分な準備

ベンチマークの提案者は、当然のことではあるが、事前にベンチマーク計算を実施して、どういった結果になるのかを把握しておく必要がある。できれば、複数のライブラリやコードを使って計算を行い、どのような傾向の結果となるかを調べておくことが望ましい。過去の類似のベンチマークがあるのであれば、当時の傾向と最近の技術開発の結果どのような改善が期待されるかも見ておくべきである。そして、事前に各国関係者に意見を聞いておけば仕様の修正や参加者数の予測もできるため、EGでの提案もスムーズになると思われる。

iv) 専門家会合への継続的参加

提案者はベンチマークのレポートが公刊されるまで、委員会に出席してその進捗を報告しなければならない。また、最終報告書の出版までのEG会合には、提案者は出席を求められるのが通例である。EGで提案してすぐにベンチマークが開始されるとしても、結

果を受け取るまでに半年以上、それをまとめた数表・図表の作成と内部での確認には数ヶ月はかかる。そして一年後の次回 EG で報告書案を提案出来たととしても、それへのフィードバックを参加者から得るのにはさらに半年程度の時間が経過するのは通例である。ベンチマークを提案してから結果的に最終報告案にまとまるまでに最低 2 年近くかかることは覚悟しなければならない。その間、提案者は粘り強く参加者と連絡し、結果の取りまとめに尽力する必要がある。筆者は、国際ベンチマーク参加の意義は単なる数値の比較ではなく、この粘り強い議論にあると思う。一つの目標に向かって世界各国の関係者と膝詰めの議論をして専門家同士の相互理解とコネクションを強化することが出来るのは、国際ベンチマーク実施の大きな意義の一つである。

なお最終的な報告書の出版についてであるが、NEA の国際ベンチマークの場合、NEA の出版担当者が、ベンチマーク取りまとめ側で作成した報告書最終案に対し、英文を入念に確認する。英文のクオリティはそこで確保されるものの、出版リスト掲載から公刊までに半年近く待たされることもある事には注意が必要である。これを短縮させるには、もともとの報告書案作成の時に英語を母国語とする参加者にテキストを見てもらうことも考えられる。このあたりのハンドリングは NEA 事務局と調整をすれば良い。

7. おわりに

NEA のベンチマークを題材に、ベンチマークの実例を取り上げてみた。NEA の国際ベンチマークの提案は決して難しい事では無いが、適切な問題を設定して良いタイミングで結果を取りまとめ参加者全員に参加して良かったという満足感を持ってもらえるかは、提案者にかかっているとと言える。我が国の炉物理・核データ関係者の活躍の場として、原子力先進各国が集う NEA は申し分ないフロアである。関係者に本分野に関心を持って頂くことが出来、将来の我が国からの新しいベンチマークの提案に繋がれば幸いである。

参考文献

- [1] <https://www.oecd-nea.org/science/wpncs/buc/status.html>
- [2] H.Okuno, Y. Naito and K. Suyama, “OECD/NEA burnup credit criticality benchmarks phase IIIB; Burnup calculations of BWR fuel assemblies for storage and transport,” NEA/NSC/DOC(2002)2 (JAERI-Research 2002-001), Japan Atomic Energy Research Institute (2002).
- [3] “Burn-up Credit Criticality Safety Benchmark Phase III-C,” Organisation for Economic Cooperation and Development, Nuclear Energy Agency, NEA/NSC/R/(2015)6. <https://www.oecd-nea.org/science/wpncs/buc/specifications/phase-IIIc/EGBUC-Phase3c.pdf>
- [4] M.D. DeHart, M.C. Brady, C.V. Parks, “OECD/NEA Burnup Credit Computational Criticality

Benchmark Phase I-B Results,”NEA/NSC/DOC(96)-06(ORNL-6901), Oak Ridge National Laboratory (1996).

[5] 中原嘉則、須山賢也、須崎武則、” 軽水炉使用済燃料の燃焼度クレジットに関する技術開発,” JAERI-Tech 2000-071, 日本原子力研究所(2000).

[6] 須山 賢也、片倉 純一、大川内 靖、石川 眞、”JENDL-3.2 に基づく ORIGEN2 用ライブラリ; ORLIBJ32,” JAERI-Data/Code 99-003, 日本原子力研究所(1999).

[7] <https://www.oecd-nea.org/science/wpncs/sfcompo> and <https://www.oecd-nea.org/sfcompo/>