

会議のトピックス(II)

R 行列共鳴解析コードに関するコンサルタント会合に参加

日本原子力研究開発機構

核データ研究グループ

国枝 賢

kunieda.satoshi@jaea.go.jp

1. はじめに

国際原子力機関 (IAEA) が主催する R 行列共鳴理論解析コードに関するコンサルタント会合に参加した (場所: オーストリア・ウィーン、期間: 平成 29 年 6 月 28 日~6 月 30 日)。私がこれまで参加した IAEA 主催の会合の中で最も小規模な会合であり、IAEA から招聘された参加者は僅か 7 名であった。とは言っても、参加者の殆どはコード開発に直接関わる研究者であり、もちろん理論の大専門家でもある。大きな国際会議等で彼らと積極的にコミュニケーションすることをためらいがちなシャイな私にとっては良い機会であった。本稿では、本会合が開催された背景、各国における R 行列解析コード開発の現状や議論の内容を簡単に紹介したい。

2. 荷電粒子入射の核反応断面積

この会合で着目している核データは中性子ではなく、陽子やアルファ粒子等の荷電粒子入射の反応断面積である。共鳴領域における荷電粒子入射反応断面積は、イオンビームを用いた同位体分析における基礎データであり、環境学や考古学等を含む幅広い分野において需要がある。また、放射線医療、天文学における元素合成過程の研究においても基礎データとしての重要性が既に認識されている。もちろん対象は軽い原子核である。一方、現在整備されている荷電粒子共鳴反応の評価済データの精度は十分とは言い難い状況にある。これは異なる測定値間に有意な差異が生じていることに加えて、標準的な理論解析手法が確立されていない為である。そこで IAEA が主体となり、荷電粒子共鳴反応に対する標準的な断面積評価手法の構築および推奨核データライブラリを開発することが計画されている。本会合の主な目的は、その前準備として、各国の R 行列理論解析コード開発の現状を確認・整理することである。さらに、参加メンバーによる小プロジェクトとして、計算結果の相互比較によるコードのベンチマーク作業が現在進行中である。

3. R 行列理論とは？

さて、会議の概要を報告する前に、核反応における R 行列理論について簡単に述べておく。R 行列理論とは、中性子・荷電粒子+原子核の反応を境界条件に基づいて量子力学的に記述し、断面積等々の測定データから散乱行列 (S 行列) を取得する枠組みである。計算を行うためには、まず原子核内部と外部の境界を定義するチャンネル半径および核内外の波動関数を滑らかに繋ぐための対数微分値 (要するに境界条件) を定義する必要がある。測定データから取得される物理量は、複合核のエネルギー固有値とスピン・パリティ、そして個々のチャンネルに対する換算幅振幅である。当然のことながら“チャンネル”とは粒子の種類のみならず、角運動量やチャンネルスピンによって定義される。また、換算幅振幅はざっくりいえばその名の通り、個々のチャンネルの波動関数の“振幅”で定義される物理量である。したがって R 行列理論は、核反応の描像を所謂“モデル化した”ものではなく、枠組みとしては量子力学そのものである (その意味では R 行列理論は将来、核データ測定のみならず、原子核構造理論とも連携できる可能性を秘めていると言える)。

このように R 行列理論とは核反応を記述する上で最も根幹的な物理量である S 行列を取得する枠組みである。従って、断面積の測定データを内外挿することはもちろん、角度微分断面積の予測計算を行うことが可能である。ただし、中重核に対して捕獲断面積の計算を厳密に行うとなるとチャンネル数が膨大になる為、現実的には Reich-Moore 等の近似を導入せざるを得ない状況があることを参考までに補足しておく。

4. 会合の概要

前述したように IAEA は、国際協力に基づいて、軽核に対する荷電粒子入射反応断面積の推奨核データライブラリを構築することを検討している。今回の会合はその一環 (というか前準備) として、ある一つの共通課題 (共通の測定データセット) に対して各国 (各機関) のコードによる断面積や共分散の解析結果を相互比較することを目的に企画された。これは同じく IAEA が主導する中性子標準核データのプロジェクトの手続きに倣ったものである。なお、会合に先立ち予め選定されていた課題は ${}^7\text{Be}$ 複合核に対する解析 (核反応としては $p+{}^6\text{Li}$ や $\alpha+{}^3\text{He}$ の断面積及び微分断面積) であった。会合には共鳴核データの評価に有用な R 行列理論に基づく解析コードの開発者を中心に、米国から 3 名、IAEA から 1 名、オーストリア 2 名、中国 1 名、日本から 1 名 (私)、計 8 名の研究者が参加した。用いられたコードの開発・整備状況と解析結果の概要は下記のとおりである。

1) AZURE2 – 米国ノートルダム大学で開発されたコードである。元々は日本人 (日系の方?) のアズマさんという方が開発したプログラムである。現在は参加者の一人である

同大学の R.J.deBoer 氏により整備・改良が継続されている。主に、宇宙における元素合成過程等、天文学研究において広く利用されており、この分野で重要な低エネルギー荷電粒子反応断面積の推定において多くの実績を有している（プログラムはユーザー登録をすれば誰でも入手可能である）。今回の課題については、 ${}^6\text{Li}(p,\alpha_0){}^3\text{He}$ 反応等一部の測定データや限られたエネルギー領域における測定データを再現することはできたが、広いエネルギー範囲に亘って全てのデータを同時にフィットすることはできなかったとの報告があった。これに対して非共鳴項の扱いに問題がある可能性がある旨の推察がなされたが、詳細な考察はこれからという段階であった。なお、断面積共分散の評価に対しては、モンテカルロ法を用いた手法が導入されようとしている。

2) SAMMY - 米国オークリッジ国立研究所で開発されたコードである。会合には同所の M.Pigni 氏が出席した。SAMMY は米国の核データライブラリ ENDF における中性子共鳴核データの評価において実質的な中心を担ってきた歴史あるコードである。このコード無くして、各国の中性子核データライブラリ開発の進展はあり得なかったと言っても全く過言ではない。ただし、共鳴理論に近似的な Breit-Wigner や Reich-Moore 表示ではなくより厳密な R 行列理論が使われ始めたのはごく最近のことである。これまで中性子断面積の解析に目的が特化されてきたが、近年、荷電粒子反応にも適用できるように改良が行われている。しかし、今回は、与えられた課題に対して妥当な結果が示されたのは ${}^3\text{He}(\alpha, \alpha_0){}^3\text{He}$ 反応断面積のみであり、残念ながら他の反応断面積に対しては何の結果も示されなかった。なお、共分散の評価には一般化最小二乗法に基づく決定論的手法が採用されている。ちなみに、C++言語によるコードの再開発が計画されているようである。SAMMYに限らず、コード開発の世界的な流れはオブジェクト指向型にシフトしている。

3) FRESCO - I.Thompson 氏により、米国ローレンスリバモア国立研究所で開発が継続されているコードである。元々は核反応の基礎研究を目的として作られたコードであり、R 行列解析のモジュールはごく最近開発されたようである。開発者自身、「共鳴領域における測定データの解析を行うのは初めてである」と言っていた。会議では、AZURE2 と同様に全ての測定データを同時にフィットすることはできなかった旨の報告があった（カイ2乗値が収束しないとのこと）。なお、一部の微分断面積の測定データに対しては角度毎に再規格化が必要であるとの報告があった。

4) RAC - 中国清華大学で開発されたコードである。会合には開発者の Chen Zhenpeng 氏が参加した。このコードはこれまでに IAEA 中性子標準核データの開発の一部に採用されている。課題に対する結果は、測定値をよく再現しているという点では見栄えの良い結果であった。しかし、非物理的な共鳴パラメータを仮定している等、参加者からはかな

り厳しい意見を浴びていた。なお、共分散評価に対しては SAMMY コード同様に決定論的なアプローチが採用されているが、結果は示されなかった。

5) AMUR - 執筆者が開発中のコードである。オブジェクト指向言語を駆使し、測定データの解析において種々の手法や組み合わせを適用できる等、共鳴核データ評価の為の標準的なコードとすることを目指して開発を行っており、ゆくゆくは JENDL 開発への応用を睨んでいる。今回の解析対象に対しては、一般的な解析手法を適用すると、AZURE2 や FRESCO 同様に全ての測定データを同時にフィットすることはできなかった。しかし、入射粒子に独立な非共鳴項（おそらくは形状弾性散乱に対する補正項）を導入するとテクニカルに問題を回避することができ、ほぼ全ての測定データを概ね同時に再現できた結果を報告した。これに関しては、今後各参加者が確認を行うことになった（もちろん本人は物理的根拠を明らかにする必要があると思っている）。さらに、決定論的手法を用いた断面積の不確かさの評価結果、およびエネルギー相関行列の結果を示した。とりあえず結果の如何は置いておくとして、ひとまずは日本のプレゼンスを示すことができた（と思っている）。

今回の会合では、残念ながら諸事情により参加者はなかったが、R 行列コードとして最も歴史ありかつ実績のあるコードは米国ロスアラモス国立研究所の EDA である。事実、IAEA 中性子標準断面積や ENDF における軽核断面積の評価において実績を有している。私も米国留学時代に、間接的にはあるが大変世話になったコードである（もちろん開発者にも）。今後、このプロジェクトへの参加を期待したい。

5. おわりに

Wigner と Eisenbud により R 行列理論の枠組みが提唱されたのは何と 70 年ほど前のことである。この間、核物理の研究や一部軽核の核データ評価に採用されてきたこの理論であるが、今まで我々は本当に理論のことを理解しながら使っていたのだろうか（単に測定データのフィッティング関数として使っただけではなかったのだろうか）。今回の解析対象は、種々の入射粒子や反応が絡むケースであり、特殊な条件ではある。測定データやコード自身に問題がある可能性は否定できないが、私には理論の根本的な理解を促しているように感じられてならない。なお、本会議報告は INDC(NDS)-0737 として刊行予定である。

(以上)



写真1 会合の様子 (2017/6/28 IAEA 本部にて)

上段左から : P. Dimitriou 氏 (IAEA、本会合の主催者)、M. Pigni 氏 (ORNL)、I. Thompson 氏 (LLNL)、
下段左から : H. Leeb 氏 (ウィーン工科大)、R. J. deBoer 氏 (ノートルダム大)、T. Srdinko 氏 (ウィーン工科大)、筆者 (JAEA)、Chen Zhenpeng 氏 (清華大)