

部会・連絡会セッション 核データ部会 [「シグマ」特別専門委員会共催]
「我が国における核データ計算コード開発の現状と将来ビジョン」

(2) 核反応モデルコード CCONE の進展

日本原子力研究開発機構

核データ研究グループ

岩本 修

iwamoto.osamu@jaea.go.jp

1. はじめに

日本原子力学会春の年会の企画セッションで、私が主となり開発している核反応モデルコード CCONE[1,2]の進展について話す機会をいただいた。本稿では、特にその時の話にこだわらず、これまでの開発状況を振り返り、技術的な詳細というよりどちらかという主観的に見た、論文等ではあまり触れていない開発の歩みについて紹介させていただく。CCONE の進展について全体を網羅した一貫した学術的な解説とはなっていないが、いろいろな観点からの原稿が許される（と勝手に思っている）核データニュースの良さでもあり、このような文章も何かの参考になればと考える。参考文献をできるだけつけるようにした。技術的な詳細に興味のある方はそちらをご参照いただければ幸いである。

核データの評価を始めたころ、アクチニド核種の中性子反応データの評価を担当し GNASH[3]を利用したが、必ずしも使い勝手が良いとはいえず、使えるようになるまでに結構な時間を要した。また、GNASH は高いエネルギーでの核反応の計算に主眼が置かれており、核データの評価をする上で十分な機能があるともいい難かった。このように書くと GNASH の出来が良くないように聞こえるかもしれないが、その当時の核データ評価の計算コードは全体的にそのようなもので、様々なコードを組み合わせで補いあい、利用していた。GNASH が良くないのではなく、どちらかといえばバグが少ない良い計算コードであった。コードの中を見て改良を試みようとも考えていたが、なかなか手ごわかった。計算の中身は大体把握したので、改良するより新しく作った方が早いのではないかと考え、それまであまり長いプログラムは書いたことが無かったが、無謀にも新しい核反応計算コードを作ることをグループの内部で宣言したのが、CCONE の開発のはじまりであった。

その当時、2002年に公開された JENDL-3.3 の次のバージョン JENDL-4.0[4]の開発に向

けて、マイナーアクチニド(MA)を含めたアクチニド核種の評価が課題の一つであった。JENDL-3.3のアクチニド核種のデータを見直し、アクチニド核種のみデータを収録したJENDL アクチノイドファイル(JENDL/AC-2008)[5]の開発が計画されており、特にマイナーアクチニド等の測定データが少ない核種の反応断面積や核反応による放出スペクトルの精度向上を目指した。

2. 初期バージョン

核データの評価計算において、光学模型は全断面積を決めると共に、出口チャンネルについても反応の起こりやすさは光学模型で計算される。アクチニド核種は変形しており、光学模型計算にもその効果を取り入れることが望ましい。手始めとして、変形効果を取り入れた光学模型計算コードの開発に取り組んだ。基本的な計算部分は比較的早く完成させることができたが、核データの評価に利用するには計算ができるだけでは不十分であり、核データの評価で重要となる光学ポテンシャルのパラメータの決定を速やかに行えることが必要である。全断面積や弾性散乱断面積、非弾性散乱断面積、または、その角度分布の測定データを同時に再現することが求められる。これらの測定データを読み込み自動的にパラメータサーチが行える機能を加えることができ、なんとかコードを完成させることができた[6]。変形効果を取り入れるためには、チャンネル結合法という手法が必要である。これらが計算できるECISなどの有名なコードはあったが、古いコードでその中身を解読するのは非常に困難であったため、このコードの作成はほとんど教科書と論文のみを参考にしたが無事完成にこぎつけることができた。何事も最初が肝心であり、最初に取り組んだコードを無事完成させることができたことにより自信が付き、CCONEの開発を進めることができる確信が得られた。

次に Hauser-Feshbach 統計モデルの計算コードの開発に取り組んだ[7]。GNASHでは幅変動補正の計算機能が不十分であり、低エネルギーの計算に課題があった。一方、旧原研で開発されたCASTHY[8]は幅変動補正を入れた計算が可能であり低エネルギーの反応では問題なかったが、複数の粒子を放出する多段階過程や前平衡過程などエネルギーが高い反応には対応していなかった。また、CASTHYは核分裂反応を計算することができないため、アクチニド核種の評価には向いていなかった。新しいコードでは、これらの欠点を解消し、さらに計算の入力の作成を大幅に低減することを目標とした。統計モデルの計算では、レベル密度やガンマ線強度関数など原子核の構造等に関わる様々なモデルが必要となり、また、対応するパラメータも多くなる。入力パラメータについては、IAEAでRIPL[9]と呼ばれる原子核のモデル計算のパラメータライブラリーが整備されており、入力ファイルの簡素化に非常に役立てることができた。

また、前平衡過程については、TALYS/TENDL[10]で有名なA. Koning等がその当時広い質量数範囲の原子核に対する200 MeVまでの核子入射反応について、前平衡過程のモ

デルにより解析した論文を出しており[11]、良い結果を与えていたので、これを採用することにした。採用しているモデルは 2 成分励起子モデルと呼ばれるものだが、基本的な定式化は C. Kalbach によってなされたもの[12]に基づいている。Kalbach の定式化では粒子・空孔の陽子成分と中性子成分の交換項の計算が近似的になされているが、CCONE では正確にするなど改良を行い取り入れた[1]。

評価済核データファイルでは、反応の種類ごとに断面積やスペクトルを格納する必要がある。したがって、核反応のモデル計算でもこれに沿って分類することが必要となる。このようなことは当たり前のように感じられる方も多いと思うが、実は複数種類の多粒子が放出される多段階の反応では、この計算が非常に厄介である。反応過程における粒子放出は様々な原子核の励起状態を経由して起こるが、この厄介さの原因は反応の分類は最終的に基底状態または準安定状態へ落ち着くまで、決定できないことにある。CCONE ではスピン状態の区別は無視して、途中の放出粒子スペクトルの履歴を原子核毎に各励起エネルギーで保存し、粒子放出による崩壊先へ伝搬させることによって行っている[13]。モンテカルロ法などを使えば比較的容易に反応ごとの断面積やスペクトルの導出が可能となるが[14]、実際の核データ評価計算においては微小な断面積も同様に導出する必要があり、モンテカルロ法の適用はなかなか難しいと思われる。

アクチノイド核種の核反応では核分裂が重要となるが、核分裂後に放出される中性子のスペクトルは上記の枠組みで計算することが困難である。そこで、核分裂スペクトルの計算で比較的良好に利用される Los Alamos モデル(Madland-Nix)[15]を利用した系統式の導出を試みた。核分裂スペクトルは核分裂によって生成される高エネルギーに励起された多数の核分裂片からの中性子放出により構成される。このような多数の原子核が関与するものであれば、さまざまな原子核に関わる個性が消され系統性が見いだせるのではないかと考えた。マルチチャンス核分裂では、核分裂する原子核とエネルギーを特定できないため、ファーストチャンス核分裂と自発核分裂の実験データを利用し、パラメータをフィッティングで求めた。このパラメータをプロットして見ることにより、原子核の励起エネルギーと原子番号、質量数等に依存する系統性を予想通りに見出すことができた[16]。マルチチャンス核分裂に対しても、統計モデルによって得られる核分裂原子核と励起エネルギーを特定し、この系統式を用いることで計算が可能となる。マルチチャンス核分裂に対する核分裂スペクトルの実験データは豊富とは言えないが、測定データとの比較ではある程度の再現性があると考えられる。

JENDL-4.0 の開発では共分散の充実も目標となっていた。CCONE を用いた共分散の評価では、KALMAN[17]を利用した。核データ評価に用いた CCONE の入力ファイル上の感度計算を行いたいパラメータに@で印をつけることで、感度計算が簡単にできるように工夫した。これらは Ruby スクリプト言語[18]を用いた複数の補助プログラムを作り対応した。Ruby は日本で開発されたもので、手軽にプログラミングが可能なおから、そ

のほかの CCONE の計算システム上でも、色々と活用している。JENDL/AC-2008 の評価に利用した入力ファイルを利用し、JENDL-4.0 ではすべてのアクチノイド核種のデータに共分散を付与することができ、共分散の充実を図ることができた[19]。

3. 高エネルギーへの拡張

JENDL-4.0 の公開後の JENDL の開発について、高エネルギーへの拡張を目標とした。CCONE もこれに対応するための拡張を行った。

JENDL-4.0 入射粒子のエネルギーが高くなると前平衡過程の寄与が大きくなる。JENDL/AC-2008 や JENDL-4.0 の中性子エネルギーの上限である 20MeV 程度までは、前平衡過程から 1 個の粒子放出を考慮すれば十分であったが、エネルギーが高くなるにつれて 2 個目、3 個目の粒子放出の割合が増加し、これらの影響が無視できなくなる。CCONE では前平衡過程から放出される粒子数の制限をなくした計算を可能にする拡張を行った。1 個の粒子放出では、入射粒子と標的核で構成される系と、一つの励起エネルギーに対応する状態のみを考慮すれば良いが、放出される粒子の種類や個数、またそのエネルギーは様々であるため、考慮すべき状態や原子核が一気に増加する。この手の拡張は、プログラムの設計を見直す必要も出てくるため、厄介なものとなるが、時間をかけながらもなんとか完成することができた[20]。

20 MeV までは反応の計算を重心系で行い、放出粒子のスペクトルについても重心系のスペクトルとして評価済ファイルへ収納している。入射粒子のエネルギーが高くなると、重心の運動エネルギーも大きくなると共に、粒子放出による重心エネルギーの変化による影響も増加することから、重心系でのスペクトルを記述することが適当ではなくなる。実験室系でのスペクトルの計算を可能になるように CCONE の拡張を図った。粒子放出によって生成される原子核の運動エネルギーを適切に考慮するため、励起エネルギー毎に平均の速度を計算し実験室系のスペクトルを計算するようにした。運動エネルギーの広がりも重要になるとこの近似は使えないが、入射粒子に垂直な方向の放出粒子の角度分布を等方と仮定すると、平均速度は入射粒子方向の成分のみとなり計算が非常に簡単になる。この方法で計算した結果は、比較的良好に実験データを再現している[20]ことが分かり、ほっとした。

エネルギーが高くなると、重陽子やアルファ粒子などの複合粒子の放出も増加し、適切な計算の必要がでてくる。元々の励起子モデルからもアルファ粒子等の複合粒子は放出可能であるが、励起子モデルでは粒子状態に複合粒子を形成できる陽子及び中性子が無くてはならず、放出確率は実験データを過小評価している。複合粒子放出では国枝氏等によって行われた Iwamoto-Harada のモデル[21]の改良版[22]を取り入れた。Iwamoto-Harada のモデルでは、フェルミ面以下から粒子をピックアップして複合粒子を作ることが可能となるため、複合粒子の放出が増加し実験データを再現できるようにな

る。CCONE は C++プログラム言語で開発しているが、国枝氏のコードも C++で開発されていたため比較的簡単に取り入れることができた。CCONE ではピックアップやロックアウト等の直接過程からの複合粒子放出として、Kalbach の現象論的モデル[23]を利用して、Iwamoto-Harada と Kalbach のモデルを組み合わせた計算は比較的よく機能しているように見える。しかしながら、Iwamoto-Harada や Kalbach のモデルは相互に独立に開発され、パラメータもそれぞれ実験データをもとに設定されていることから、二重に寄与を見積もっている可能性もあるため、パラメータを適切に設定するなど注意が必要と考えられる。

4. その他の CCONE の利用

代理反応は別の反応を用いて、目的とする反応を模擬した反応のことである。不安定核に対する断面積の測定など、通常の測定では困難な場合、間接的な断面積の導出に利用できる。JAEA の先端基礎研究センターの研究グループが代理反応による実験を進めていた。しかしながら、代理反応の測定ではスピンなどの状態を制御することが困難なため、測定結果の妥当性を評価するには理論的な知見から考慮する必要がある。CCONE により特定の励起エネルギー、スピン、パリティ状態からの崩壊過程を計算させ、代理反応による断面積導出の妥当性の検討に利用した[24]。似たような原子核を利用して比をとる代理比法を使えば、10%程度以下の精度でアクチノイド核種の断面積を導出できる可能性があることが分かった。

JENDL の特殊目的ファイルとして JENDL Photonuclear Data File 2016 (JENDL/PD-2016) を 2017 年 12 月に公開したが、この評価にも CCONE が利用された[25]。光核反応は核子等の核反応によるガンマ線放出の逆反応であり、基本的な要素は核子入射反応の計算と同じであるため、コードの大きな拡張は必要ではない。準重陽子分解過程のモデル[26]を取り入れたこと程度である。しかしながら、光核反応については測定データが十分ではないため、前平衡過程の取り扱いに不明確なところがあり、今後、光核反応による放出スペクトルの測定データの充実が望まれる。

遅発中性子の放出に関する計算でも利用された[2,27]。ベータ崩壊の理論計算によって生成される原子核の励起状態を求め、そこからの崩壊を CCONE によって計算している。遅発中性子の放出率と共にスペクトルも計算可能であり、今後の JENDL への反映が期待される。

5. おわりに

CCONE は JENDL-4.0 をはじめとする JENDL の核データ評価に利用されつつ、開発が進展してきた。単純な入力でも計算できると共に、核データの評価で必要となる細かな調整が可能となっており、JENDL の開発へ貢献してきたと考える。しかしながら、現在

のもので十分かと問われると決してそうではなく、核分裂反応のモデル、直接反応過程、高エネルギーの反応モデル等の物理過程の改良のみならず、カーマ係数の計算に必要な反跳核スペクトルや共分散評価の簡素化等取り組む余地は多分にある。最終的な ENDF 形式のファイルを作成するには、他のツールを利用するなどして仕上げる必要があるが、CCONE からの出力がライブラリーの最終的なものにもっと近ければ、マンパワーの節約になる。また、イベントジェネレータの機能があれば、J-PARC の ANNRI でのガンマ線の測定データを詳細に解析することにより、ANNRI のデータをこれまで以上に有効に活用できる可能性がある。現バージョンでは軽核への適応性には限界があり、改良すべき課題である。この課題は、TALYS 等を含む類似のコードで共通であるが、現在特効薬となるモデルがなく、根本的なところから考える必要がある。

核反応の理論計算コードは核データ評価において核となる重要な技術である。現在では TALYS 等の広く使われている完成度が高い外国産のコードもあるが、この核となる技術を持ち発展させていくことは、日本の核データ研究やライブラリー開発の競争力を維持していくためには欠かすことができないものだと考える。コードの開発は手っ取り早く成果を出すことには向かないが、研究の発展性の観点からは不可欠だと考える。コードを自由に改良できれば、いろいろな研究の展開が可能となりメリットが大きい。しかしながら、私がコードを開発している最も単純な理由は、中身が分かっている方が面白いからである。あまり良くわからないコードを使うと思いどおりに動かなくてストレスを感じるのみならず、何をやっているかがぼやっとしてしまい、楽しさがあまりない。自分で作って使う方が絶対面白いと思う。

CCONE もまだまだやるものがたくさんあります。皆さんも、一緒にこの楽しさを味わいませんか。ただし、デバッグの苦勞はご覚悟を。

参考文献

- [1] O. Iwamoto, “Development of a Comprehensive Code for Nuclear Data Evaluation, CCONE, and Validation Using Neutron-Induced Cross Sections for Uranium Isotopes”, J. Nucl. Sci. Technol., 44, 687 (2007).
- [2] O. Iwamoto, N. Iwamoto, S. Kunieda, F. Minato, K. Shibata, “The CCONE Code System and its Application to Nuclear Data Evaluation for Fission and Other Reactions”, Nuclear Data Sheets 131, 259–288 (2016).
- [3] P. G. Young, E. D. Arthur, M. B. Chadwick, “Comprehensive Nuclear Model Calculations: Introduction to the Theory and Use of the GNASH Code”, LA-12343 (1992).
- [4] K. Shibata et al., “JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering,” J. Nucl. Sci. Technol. 48, 1 (2011).
- [5] O. Iwamoto et al., “JENDL Actinoid File 2008”, J. Nucl. Sci. Technol., 46, 510 (2009).

- [6] O. Iwamoto, “Program CCOM –Coupled-channels Optical Model Calculation with Automatic Parameter Search–”, JAERI-Data/Code 2003-020, December 2003, Japan Atomic Energy Research Institute.
- [7] 岩本 修、「核データ評価計算プログラムの開発」、日本原子力学会 年会・大会予稿集, 2005s 巻、L38 (2005).
- [8] S. Igarasi, T. Fukahori, “Program CASTHY – Statistical Model Calculation for Neutron Cross Sections and Gamma Ray Spectrum –, JAERI 1321, (1991).
- [9] T. Belgya et al. “Handbook for calculations of nuclear reaction data, RIPL-2”, IAEA-TECDOC-1506, 2006, IAEA.
- [10] A. J. Koning, D. Rochman, “Modern Nuclear Data Evaluation with the TALYS Code System”, Nuclear Data Sheets, 133, 2841 (2012).
- [11] A.J. Koning, M.C. Duijvestijn, “A global pre-equilibrium analysis from 7 to 200 MeV based on the optical model potential”, Nucl. Phys. A744, 15 (2004).
- [12] C. Kalbach, “Two-component exciton model: Basic formalism away from shell closures”, Phys. Rev. C33, 818 (1986).
- [13] 岩本 修、「核データ評価計算プログラムの開発 (2)」、日本原子力学会 年会・大会予稿集、2005f 巻、C07 (2005).
- [14] T. Kawano et al., “Monte Carlo Simulation for Particle and γ -Ray Emissions in Statistical Hauser-Feshbach Model”, J. Nucl. Sci. Technol. 47, 462 (2010).
- [15] D. G. Madland, J. R. Nix, “New Calculation of Prompt Fission Neutron Spectra and Average Prompt Neutron Multiplicities,” Nucl. Sci. Eng. 81, 213 (1982).
- [16] O. Iwamoto, “Systematics of Prompt Fission Neutron Spectra”, J. Nucl. Sci. Technol. 45, 910 (2008).
- [17] T. Kawano, K. Shibata, “Covariance Evaluation System”, JAERI-Data/Code 97-037, (1997).
- [18] オブジェクト指向スクリプト言語 Ruby、<https://www.ruby-lang.org/>
- [19] O. Iwamoto, T. Nakagawa, S. Chiba, N. Otsuka, “Covariance Evaluation for Actinide Nuclear Data in JENDL-4”, J. Korean Phys. Soc. 59, 1224 (2011).
- [20] O. Iwamoto, “Extension of a nuclear reaction calculation code CCONE toward higher incident energies —multiple preequilibrium emission, and spectrum in laboratory system”, J. Nucl. Sci. Technol., 50, 409 (2013).
- [21] A. Iwamoto, K. Harada, “Mechanism of cluster emission in nucleon-induced preequilibrium reactions”, Phys. Rev. C26, 1821 (1982).
- [22] S. Kunieda et al., “Measurement and model analysis of (n, α) cross sections for Cr, Fe, ^{59}Co , and $^{58,60}\text{Ni}$ from threshold energy to 150 MeV”, Phys. Rev. C85, 054602 (2012).
- [23] C. Kalbach, “The Griffin Model, Complex particles and Direct Nuclear Reactions,” Z. Phys.

A283, 401 (1977).

- [24] S. Chiba, O. Iwamoto, “Verification of the surrogate ratio method”, Phys. Rev. C81, 044604 (2010).
- [25] N. Iwamoto, K. Kosako, T. Murata "Photonuclear Data File", JAEA-Conf 2016-004, 53 (2016).
- [26] M.B. Chadwick, P. Oblozinsky, P.E. Hodgson, G. Reffo, “Pauli-blocking in the quasideuteron model of photoabsorption,” Phys. Rev. C44, 814 (1991).
- [27] F. Minato, “Calculation of Beta Decay Half-Lives and Delayed Neutron Branching Ratio of Fission Fragments with Skyrme-QRPA”, EPJ Web of Conf. 122, 10001 (2016).