

話題・解説 (I)

2023 年度核データ部会賞

学術賞

—厚いコンクリートを透過する中性子線量の 不確かさの評価における ^{28}Si 核データの断面積と 角度分布の相関の重要性—

東京工業大学
科学技術創成研究院ゼロカーボンエネルギー研究所
山野 直樹
yamano@zc.iir.titech.ac.jp

1. はじめに

核データの不確かさに起因する誤差伝播によって、中性子輸送計算で求められる炉物理諸量の不確かさを定量的に推定することは、原子力システムの設計および安全性解析の検証と確証 (V&V) にとって非常に重要です。通常、核データの誤差伝播は、ENDF-6 型式で指定された共分散ファイルを通じて計算されます。炉物理分野では、輸送方程式並びにその随伴方程式と断面積共分散を用いた一般化摂動法が実効増倍係数などの感度解析に適用されています。

遮蔽解析や放射化解析にもその適用が試みられていますが、ENDF-6 型式は核データに存在する可能性のある不確かさの相関関係をすべて表すことはできないので、中性子の流れの場における誤差伝播を精度よく評価するためには幾つかの問題が存在します。つまり、異なる反応間の相関関係 (弾性散乱の角度分布と全断面積の相関関係を含む) の情報が完備していないファイルの処理は挑戦的な課題です。

核データ共分散の利用の観点から、この課題を解決できる Total Monte Carlo (TMC) 法による新たな不確かさ解析手法を構築しました。本報では、厚いコンクリート透過問題における ^{28}Si 核データの中性子線量の不確かさ評価の適用例を示しながら、断面積と角度分布の相関の重要性を述べます。

2. 核データの誤差の取り扱い

評価済核データには最も確からしい評価データが格納されているのは言うまでもありませんが、評価者は実験値の誤差や理論計算値に含まれる不確かさを評価して、その誤差データを ENDF-6 型式 [1] の共分散ファイル (MF30~40) に格納しています。この共分散ファイルと一般化摂動法を用いて、断面積誤差から注目する炉物理量への誤差伝播を計算することが可能です。

しかしながら、JENDL-4.0 [2] や JENDL-5 [3] の評価済核データライブラリには全ての核種について共分散ファイルが格納されているわけではなく、また JENDL に格納されている核種でも表 1 に示すように一部のデータのみが格納されており、全ての共分散データが評価されているわけではありません。これらの完備していないデータの取り扱いが今後の課題です。本研究で着目した ^{28}Si は JENDL-4.0 や JENDL-5 に共分散データが存在しません。

表 1 ENDF-6 型式と評価済核データライブラリに格納されている共分散データ

MF 番号	共分散データの種類
30	パラメータの共分散と感度から得られるデータの共分散 (未適用)
31	核分裂当たりの平均中性子数 $\bar{\nu}$ の共分散
32	共鳴パラメータの共分散
33	断面積の共分散 (異なる反応間の相関なし)
34	二次中性子の角度分布の共分散 (MT=2, P ₁ のみ)
35	二次中性子のエネルギー分布の共分散 (MT=18 のみ)
40	放射性核種生成の共分散 (未適用)

3. 不確かさ解析手法 [4]

評価済核データに誤差データが格納されていない場合でも、断面積の不確かさを推定可能で、かつ異なる反応間の相関や二次中性子の角度・エネルギー分布の相関を考慮して炉物理量への誤差伝播までを評価できる手法として、図 1 に示す流れに沿った T6 [5] と Total Monte Carlo (TMC) 法 [6] を組み合わせた手法を適用しました。評価済核データに共分散データが格納されている場合は SANDY [7] を用いて TMC 法に接続することができます。

(1) T6 を用いて評価済核データ（本研究では JENDL-4.0 を基準に採用）の断面積を再現した後に、各種モデルパラメータをランダムに振って 1,000 個のランダム核データファイルを作成します（図 1 の赤線の流れ）。T6 は断面積計算コード群であり、これを用いる理由は、JENDL-4.0 に共分散データが存在しない異なる反応間の相関や二次中性子の角度・エネルギー分布の相関の情報を補完することが可能なことにあります。共分散データが全く無い場合でも、評価された断面積を可能な限り再現することで、断面積の評価値と整合性のある誤差データを作成することが可能です。炉物理分野では、JENDL-4.0 に共分散が無い核種に対して ENDF/B-VIII [8] などの他の共分散データを流用するケースが時折見受けられますが、評価ポリシーが異なり断面積の値も異なる誤差データを流用することは、物理的にも論理的にも整合性がありません。また、T6 の TEFAL モジュールでは 1,000 個のランダムファイルのデータを用いて共分散ファイルを作成できます。

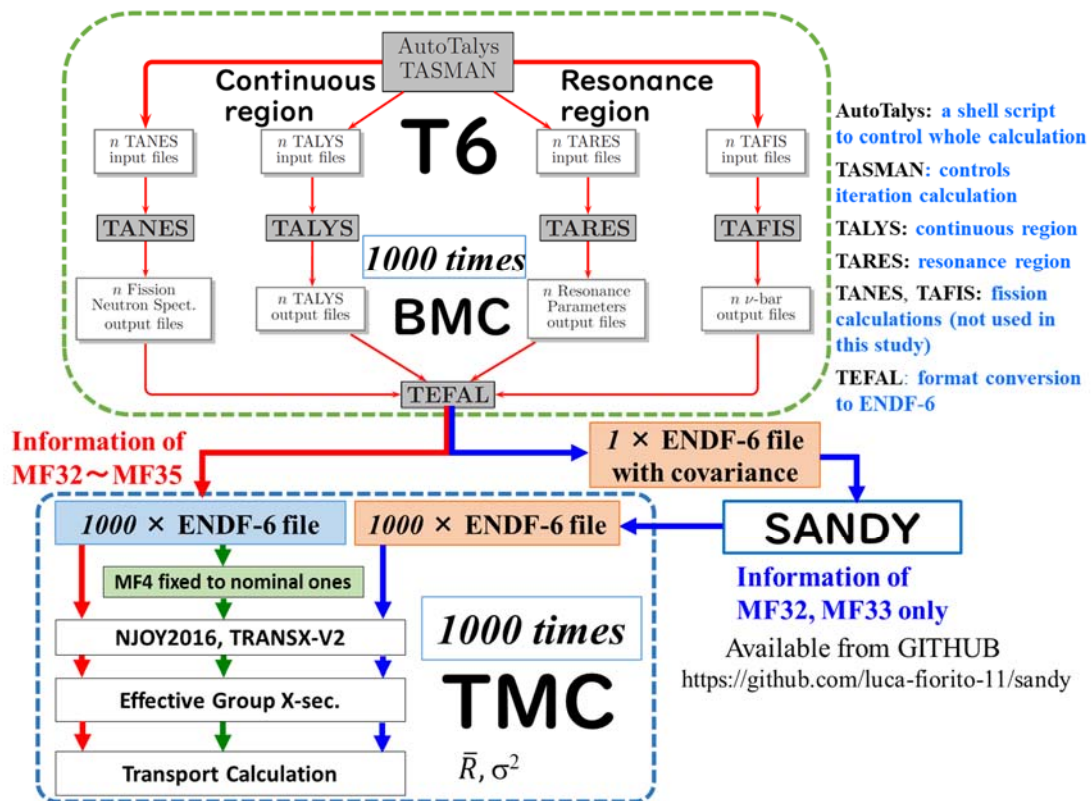


図 1 不確かさ解析手法の流れ [4]

- (2) 共分散ファイルを含む核データファイルから SANDY を用いて 1,000 個のランダムファイルを生成し TMC 計算を行います (図 1 の青線の流れ)。SANDY は SCK-CEN で開発されたコードで、修正コレスキー分解によって共分散付きの核データファイルから任意の複数のランダムファイルを生成できます。T6 で作成されたランダムファイルを用いた TMC 計算と比較することで、共分散データの相関情報の有無による影響を検討することができます。但し、SANDY の断面積データ処理は NJOY [9] を外部エンジンとして利用しているため、共分散データ処理は ERRORR の処理機能に制限されます。
- (3) 3 番目は、比較のために、上記(1)で作成された 1,000 個のランダム核データファイルをベースとして、弾性散乱の二次中性子の角度分布データ (MF4, MT2) の摂動を考慮せず、基準データに固定して 1,000 個のランダム核データファイルを生成し TMC 計算を行います (MF4 no perturbed) (図 1 の緑線の流れ)。
- (4) 各々 1,000 個のランダムファイルを用いて、TMC により対象とする物理量の期待値と分散 (標準偏差) を求めます。TMC は特定の計算コードではなくスクリプトで構成されているため、TMC で用いるソルバーは注目したい物理量を得る計算コードを利用者が組み合わせて構成します。すなわち、利用者は対象とする解析に最適なソルバーを選択できます。

T6 で共分散 (誤差) を求める基本的な発想は、TALYS が計算に用いる入力パラメータと TARES が読み込む核データの共鳴パラメータのそれぞれが、不確かさ (uncertainty) を持っていると考えられることにあります。入力パラメータと共鳴パラメータの値を各々、ある分布の中でランダムに変化させ、少しずつ違う断面積 (ランダムファイル) を多数個計算して、これら多数個のランダムファイルを統計処理して共分散を推定します。筆者らはランダムファイルの総数を決めるために、相関行列の収束性を判定の基準としています。一般的に分散の収束は相関行列の収束より早く、500 個のランダムファイルで相関行列の収束性はほぼ満足しますが、統計誤差を考慮して 1,000 個を標準としました。この相関行列の収束性は反応毎に確認しています。

図 2 に T6 のランダム計算で生成した ^{28}Si 全断面積 (灰色線) と基準とした JENDL-4.0 (赤線) の比較を示します。図 3 には T6 のランダム計算で生成した ^{28}Si 断面積の相関行列を反応毎に示します。従来の共分散ファイルでは、異なる反応間の相関は格納されていません。T6 を用いることで、異なる反応間の相関行列を推定でき、TMC でその相関関係を輸送計算に直接反映させることができます。

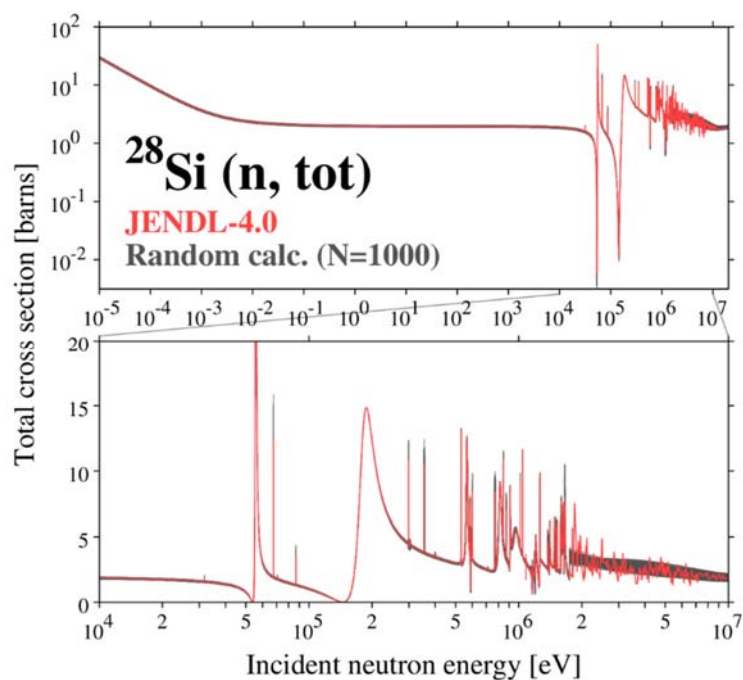


図2 T6のランダム計算で作成された ^{28}Si 全断面積(灰色線)とJENDL-4.0(赤線)の比較 [4]。下図は上図の部分拡大図。

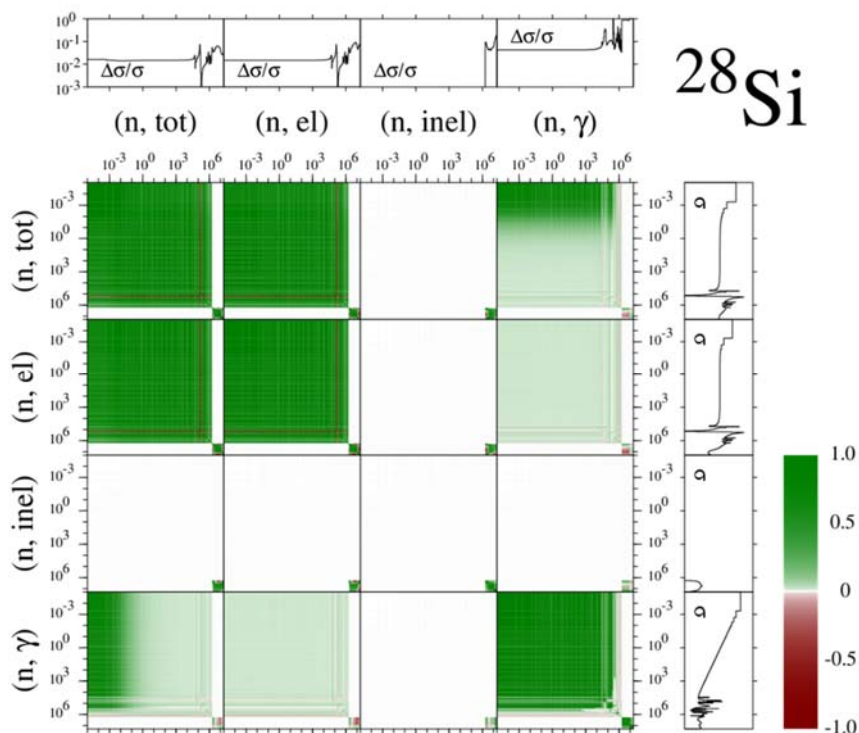


図3 T6で作成された ^{28}Si 断面積の反応毎の相関行列と相対標準偏差 [4]。エネルギー群構造はVITAMIN-B6(199群) [10]を採用。

4. ^{28}Si を含む中性子深層透過問題への適用

中性子透過問題における断面積の不確かさに起因する誤差評価は遮蔽安全解析や廃止措置の放射化放射能評価に重要です。ここでは、 ^{28}Si 断面積の不確かさによるコンクリート深層透過の中性子線量への誤差伝播を、図 4 に示す一次元球体系モデルで計算しました。球中心から 100 cm までを空気層として、その後 300 cm 厚の輝緑岩コンクリートとし、左側境界は反射条件、右側境界は真空条件とし、線源は U-235 核分裂中性子スペクトルを最初の 100 cm 空気層中に一様に分布させました。

3 章に述べた 3 種類の各々 1,000 セットのランダムファイルから、VITAMIN-B6 199 群エネルギー群構造[10]の群定数を NJOY2016 [11] および TRANSX-V2 [12] を用いて作成し、中性子透過問題を一次元 Sn 輸送計算コード ANISN [13] (P₅S₁₆) で計算して中性子線量の期待値と分散から得られる標準偏差を比較しました。

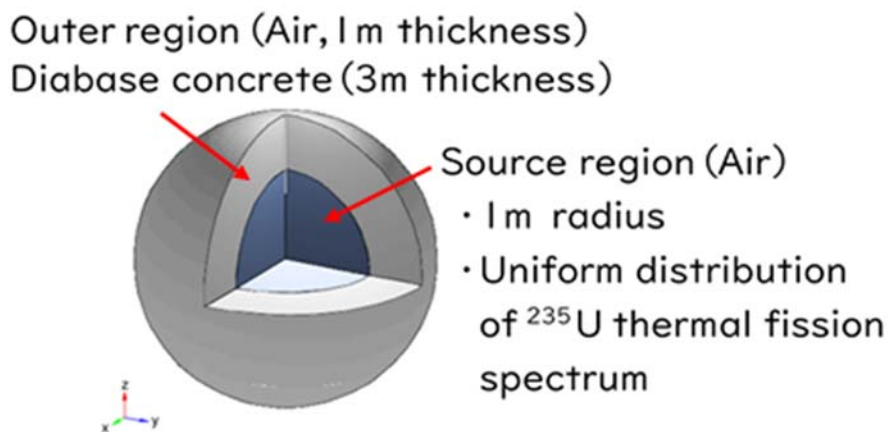


図 4 ANISN 中性子輸送計算体系

結果を図 5 に示します。TMC で得られた T6 と SANDY, MF4 no perturbed による中性子線量分布の比較では、線量の期待値は 3 者ではほぼ一致しますが、その標準偏差は異なる結果となりました。図 6 に標準偏差の分布を拡大したものを示します。MF4 no perturbed は SANDY とほぼ同じ結果となりました。SANDY は T6 で作成された共分散ファイル MF32, MF33, MF34 の情報を基本的に参照しますが、共分散データ処理は NJOY の ERRORR を利用しています。すなわち、ERRORR は MF34 の二次中性子の角度分布の高次のモーメントを処理できないので、二次中性子の角度分布データを基準データに固定した結果 (MF4 no perturbed) と同様な結果となりました。他方、T6 で作成されたランダムファイルを直接用いた TMC は二次中性子の全ての角度分布の摂動を考慮しています。

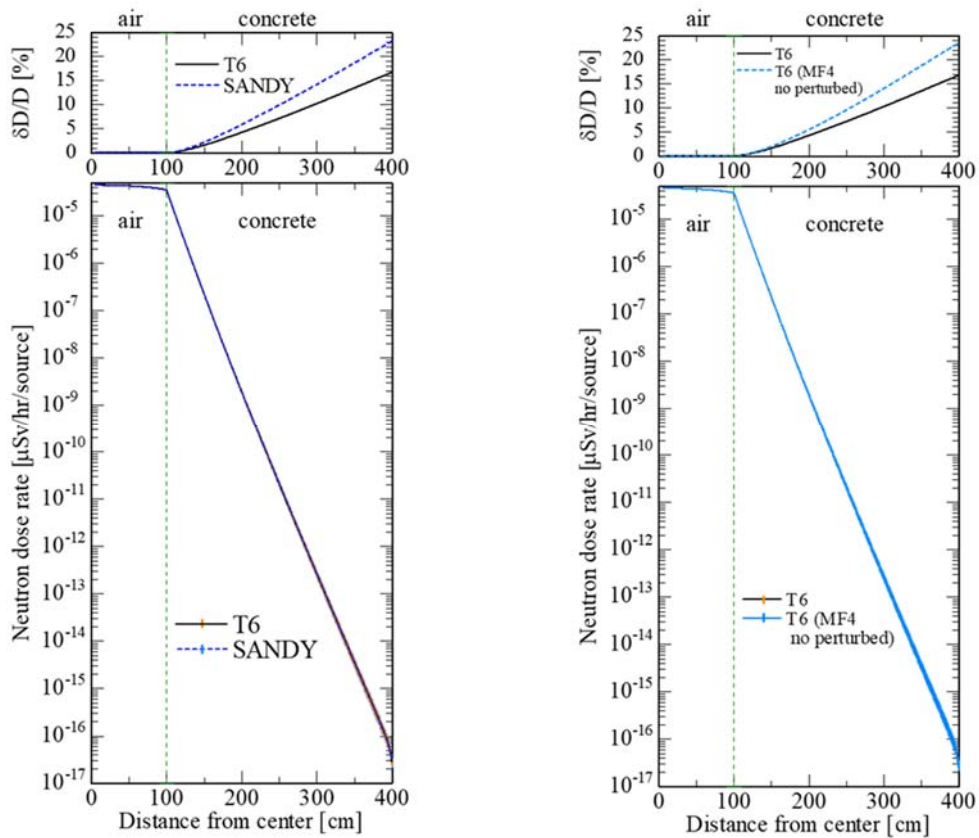


図5 T6, SANDY, MF4 no perturbed による中性子線量率と標準偏差の結果 [4]

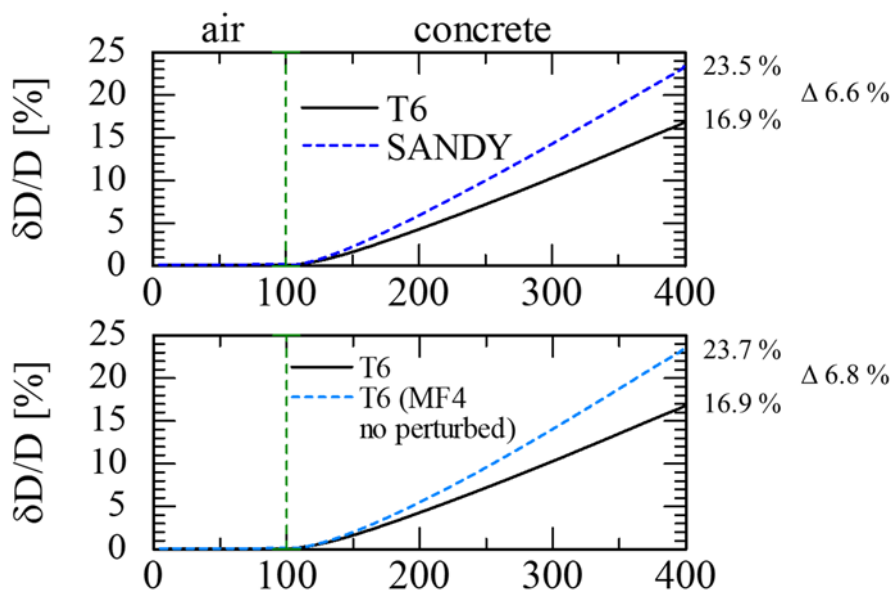


図6 T6, SANDY, MF4 no perturbed による中性子線量率の標準偏差 (拡大図)

光学定理で明らかな通り、全断面積と前方弾性散乱断面積には、次式に示す Wick の不等式 [14] (Wick's limit とも言う) で表される正の相関があります。

$$\text{Optical theorem : } \text{Im}f(0) = \frac{k}{4\pi}\sigma_t \rightarrow \sigma_{el}(0) = |f(0)|^2 \geq \left(\frac{k}{4\pi}\sigma_t\right)^2 \quad (1)$$

ここで、 $\sigma_{el}(0)$, σ_t , k はそれぞれ 0 度方向の弾性散乱断面積、全断面積、波数を示します。

全断面積と前方弾性散乱断面積は正の相関があるにも関わらず、弾性散乱の二次中性子角度分布の摂動を無視すると、この相関は減少します。

図 7 には、T6 で作成された 1,000 個のランダムファイルのデータの全断面積と 0 度方向の弾性散乱断面積の相関を示します。入射中性子エネルギーは 2.2 MeV と 14 MeV です。黒点は T6 のランダムデータで、赤点は弾性散乱の二次中性子角度分布の相関を無視した結果 (MF4 no perturbed) を示しています。この図から明らかなように、T6 のランダムデータの全断面積と 0 度方向の弾性散乱断面積には右上がりの強い正の相関がありますが、二次中性子角度分布の摂動を無視した結果はこの相関の傾きが減少しているのが分かります。入射中性子エネルギー 14 MeV では後者の相関はほとんど消えています。

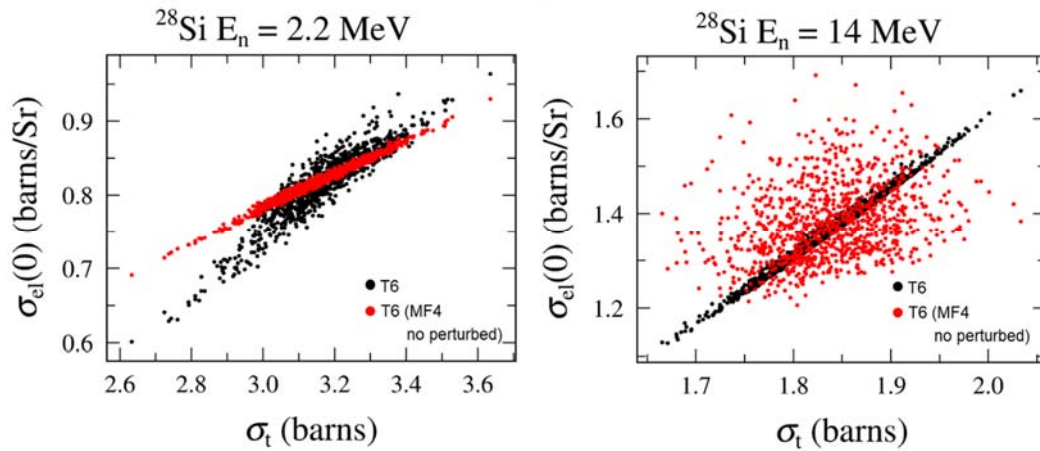


図 7 T6 で作成した 1,000 個のランダムデータの全断面積と 0 度方向の弾性散乱断面積の相関 [4]

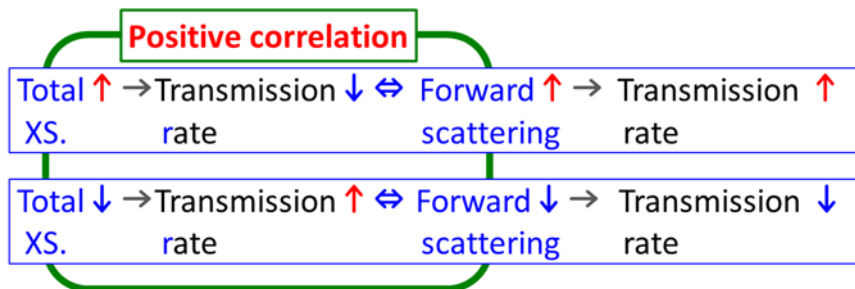


図 8 全断面積と前方弾性散乱断面積と中性子透過率の関係

図 8 に示すように、パラメータの摂動による全断面積の変化による中性子透過率の変化を打ち消すように前方弾性散乱断面積が変化するため、微分散乱断面積の摂動と全断面積の摂動を同時に考慮すると、中性子線量率の標準偏差が低減することが示されました。このように、透過問題のような中性子の流れの場の正確な誤差評価には二次中性子の角度分布の不確かさを考慮しなければならないことが明らかとなりました。

5. おわりに

新たに開発した不確かさ解析手法は、T6 法と TMC 法を組合せたものであり、現行の ENDF-6 型式では処理が困難な弾性散乱の角度分布と全断面積の相関を考慮でき、核データの不確かさによる炉物理量へ伝播する誤差を評価できます。 ^{28}Si を含むコンクリート深層透過問題への適用例を示し、弾性散乱の角度分布と全断面積の相関を考慮することにより、線量率の不確かさが低減することが分りました。今後、宇宙炉、核融合炉の遮蔽解析、並びに加速器駆動システム (ADS) など多くの分野への適用が期待されます。

参考文献

- 1) Trkov A, Herman M, Brown DA, Eds., ENDF-6 formats manual, data formats and procedures for the evaluated nuclear data file ENDF/B-VI, ENDF/B-VII and ENDF/B-VIII, Brookhaven National Laboratory (US); 2018 doi: 10.2172/1425114. (BNL report BNL-203218-2018-INRE.)
- 2) Shibata K, Iwamoto O, Nakagawa T, et al., JENDL-4.0: a new library for nuclear science and engineering. J. Nucl. Sci. Technol., 48(1), 1–30 (2011). doi:10.1080/18811248.2011.9711675.
- 3) Iwamoto O, Iwamoto N, Kunieda S, et al., Japanese evaluated nuclear data library version 5: JENDL-5, J. Nucl. Sci. Technol., 60(1), 1-60 (2023). doi: 10.1080/00223131.2022.2141903.
- 4) Yamano N, Inakura T, Ishizuka C, Chiba S, Crucial importance of correlation between cross sections and angular distributions in nuclear data of ^{28}Si on estimation of uncertainty of neutron dose penetrating a thick concrete, J. Nucl. Sci. Technol., 59(5), 641-646 (2022). doi: 10.1080/00223131.2021.1997665.
- 5) Koning AJ, Rochman D, Sublet JC, et al., TENDL: complete nuclear data library for innovative nuclear Science and technology, Nucl Data Sheets, 155, 1–55 (2019). doi: 10.1016/j.nds.2019.01.002.
- 6) Koning AJ, Rochman D, Towards sustainable nuclear energy: putting nuclear physics to work, Ann Nucl Energy, 35(11), 2024–2030 (2008). doi: 10.1016/j.anucene.2008.06.004.
- 7) Fiorito L, Žerovnik G, Stankovskiy A, et al., Nuclear data uncertainty propagation to integral responses using SANDY, Ann Nucl Energy, 101, 359–366 (2017). doi: 10.1016/j.anucene.2016.11.026.

- 8) Brown DA, Chadwick MB, Capote R, et al., ENDF/B-VIII.0: the 8th major release of the nuclear reaction data library with CIELO-project cross sections, New standards and thermal scattering data, Nucl Data Sheets, 148, 1–142 (2018). doi: 10.1016/j.nds.2018.02.001.
- 9) MacFarlane RE, Kahler AC, Methods for processing ENDF/B-VII with NJOY, Nucl Data Sheets,;111(12), 2739–2890 (2010). doi: 10.1016/j.nds.2010.11.001.
- 10) Ingersoll DT, White JE, Wright RQ, et al., Production and testing of the VITAMIN-B6 fine group and the BUGLE-93 broad-group neutron/photon cross-section libraries derived from ENDF/B-VI nuclear data, NUREG/CR-6214 (US); 1995. (ORNL report ORNL– 6795).
- 11) MacFarlane RE, Muir DW, Boicourt RM, et al., The NJOY nuclear data processing system, version 2016, Los Alamos National Laboratory (US); 2016. (LANL report LA-UR–17–20093).
- 12) MacFarlane RE, TRANSX 2: a code for interfacing MATXS cross-section libraries to nuclear transport codes, Los Alamos National Laboratory (US); 1993. (LANL report LA-12312-MS).
- 13) Engle WW Jr, ANISN, a one-dimensional discrete ordinates transport code with anisotropic scattering. Oak Ridge National Laboratory (US); 1967. (ORNL report K–1693).
- 14) Wick GC, A theorem on cross sections, Phys Rev., 75(9), 1459 (1949).