

核データ・炉物理特別会合(1)

Los Alamos 国立研究所における重核データ評価*

Los Alamos 国立研究所

河野 俊彦

kawano@lanl.gov

1. はじめに

LANL 理論部門原子核物理グループ (T-16) では、素粒子理論から核エネルギー応用に関連した原子核反応にわたる幅広い研究を行っている。核データと密接に関連するのは、勿論この応用サイドであり、重核データの評価を中心に、軽核標準断面積や高エネルギー核反応の研究を行い、その成果は ENDF/B-VII に大きく貢献している。

重核データの評価では、Advanced Fuel Cycle Initiative (AFCI) と臨界安全が、現在の主要な柱となっている。AFCI は廃棄物の核変換のための核データを整備しており、特に Am や Cm 等の Minor Actinide のデータに重点を置いた再評価を行っている。臨界安全では重核データの精度をより高めることが重要であるが、それ以外にデータの誤差を推定しておくことで実効増倍率 k_{eff} の計算値の誤差を推定できるようにする。

この誤差推定あるいは設計マージンの定量化は、LANL でも注目されている課題の一つであり、共分散データへの要求の増大は避けられそうにない。臨界安全面での k_{eff} の誤差推定だけでなく、全く新しい体系の臨界予測精度の決定に必要なためである。最近では、Generation-IV タイプの炉心や、宇宙船に搭載する原子炉の臨界予測精度推定として、共分散データを考慮する例がある。

2. 核データ評価

2.1 核データ評価用理論計算コード

良く知られているように、このグループでは GNASH という前平衡・統計模型計算コードの開発を続けており、ENDF の評価に広く用いられている。断面積計算は keV 領域から行うことができ、これに共鳴パラメータを追加すれば評価済みファイルが完成する。この GNASH を新しくクリーンなコードに書き直す作業が進められている。新しい GNASH は McGNASH と呼ばれ、Fortran95 によるコーディング、width fluctuation の計算、Monte Carlo Simulation による前平衡過程計算が取り込まれている。

* LA-UR-05-0701

Monte Carlo の手法は、核分裂即発中性子スペクトル計算にも利用されつつある。LANL では古くから Madland-Nix モデルをスペクトル評価に用いてきたが、このモデルには幾つかの近似が含まれる。新しい計算では、2 つに分れた核分裂片の励起状態からの中性子蒸発過程を実際に Monte Carlo を用いて模擬し、中性子のエネルギー分布と中性子放出数を計算する。平均中性子数 $\bar{\nu}$ だけでなく、放出中性子数確率分布 $P(\nu)$ や γ 線との相関も計算することができる。この Monte Carlo 法によるスペクトル計算の結果は、Phys. Rev. C に掲載される予定である。

2.2 標準断面積

軽核標準断面積評価の再評価が、IAEA の CRP として行われた。V. Pronyaev (IAEA, IPPE) と A. Carlson (NIST) がこのプロジェクトを取りまとめているが、LANL はこの評価活動に大きく関与している。このプロジェクトでは、軽核の断面積を R-matrix コードで評価するとともに、軽核の断面積との比で与えられてる $^{235,238}\text{U}$, ^{239}Pu の核分裂断面積も最小自乗フィット（同時評価）を用いて評価されている。

LANL では、ここで得られた核分裂断面積に対して高速炉心体系に対するベンチマークを行った上で、ENDF/B-VII への採用を決定した。Fig. 1 に、IAEA で得られた ^{235}U 核分裂断面積を、ENDF/B-VI の値に対する比として示す。新しい核分裂断面積は、JENDL-3.3 に非常に似通ったものになっており、ENDF/B-VI で報告されていた高速領域での断面積の過小評価が解消されている。

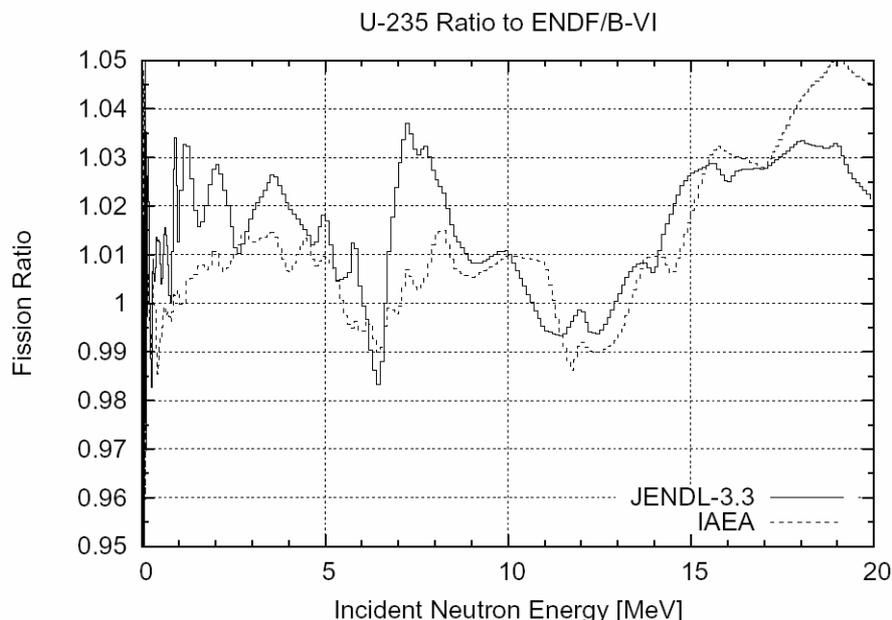


Fig. 1 : ^{235}U fission cross sections, ratio to the ENDF/B-VI evaluation.

重核データに対する標準断面積評価では、 ^{238}U の捕獲断面積も同時に得られている。

しかしながら、断面積が小さいことや MeV 領域で断面積が極端に変化する等の理由から、評価に入っているが「標準断面積」では無いという位置付けである。実際、得られた断面積はかなりジグザグと変動しており、これが本当のエネルギー変化なのか、数値計算上の問題なのか不明であった。

そこで ^{238}U の捕獲断面積を、IAEA の評価値を再現するように統計模型計算で再評価を行った。Fig. 2、記号が IAEA での評価結果であり、このまま評価値とするには問題があることが分る。この点を再現するように統計模型計算したものが実線で示されている。700 keV 付近の構造は非弾性散乱の競合過程によるものであり、物理的に説明できるものである。実際、IAEA の評価値にもこの構造が現われている。一方、300 keV 以下の IAEA データのふらつきは、明らかに数値計算上の問題であり、理論計算はこれを支持しない。

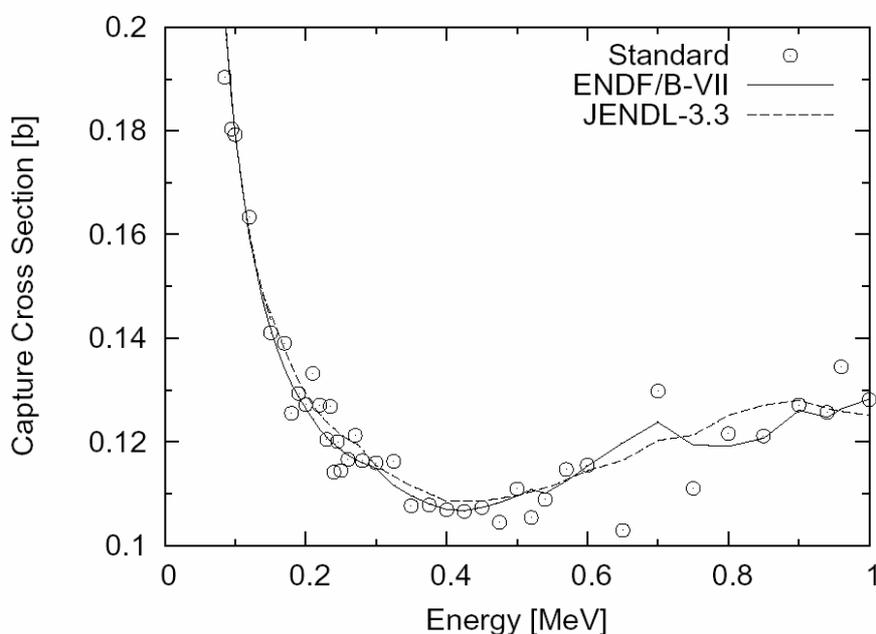


Fig.2 : ^{238}U capture cross sections.

図で JENDL-3.3 は非分離共鳴パラメータから point-wise 断面積を作ったものである。ENDF では非分離共鳴パラメータが与えられているが、これは自己遮蔽計算のみに用いられ、断面積は File 3 を取るように指定されている。

2.3 AFCI

Advanced Fuel Cycle のための核データ評価として、Am 同位体の断面積評価が行われている。もちろん、この結果は ENDF/B-VII に取り入れられている。

Am 同位体の中で最も重要なものは ^{241}Am であり、中性子捕獲過程における Isomeric Ratio (IR) の評価は最重要項目として、最初に着手された。2003 年に提案した IR では、

^{242}Am の基底状態への遷移が ENDF/B-VI の値よりもやや大きくなっている。その後、幾つかのベンチマークテストにおいて、この高めの IR が支持されている。

^{241}Am の捕獲反応断面積そのものも重要であり、この評価は FZK、の ^{197}Au との比の測定に基づいて行われた。その結果、断面積は 100 keV 付近で約 15%程大きくなっている。

Am の評価のレポートは、ND2004 の論文集に掲載される予定である。

3. 誤差評価

核データを利用する応用技術において、その誤差の定量化が重要な課題の一つになっている。LANL では Uncertainty Quantification (UQ) と呼ばれるが、具体的には *mcnp* のような時間のかかる計算において、核データに起因する誤差が結果にどれだけ影響するかを押えておこうというもの。最も単純な方法としては、*mcnp* の感度計算をしておき、核データ共分散からの誤差伝播を計算すれば良い。

しかしながら、simulation 計算は次第に複雑さを増しており、解こうとする体系によっては普通に計算するだけで数日かかるものもあり、感度計算は現実的でない。そこで、断面積データに摂動を加えたセットを幾つか作っておき、それらを使った simulation を行って、結果がどのように変動するかを調べることで誤差の定量化を行う。エネルギー群数が 100 のときに、それぞれの群断面積を僅かに変化させて 100 回計算するのでは、通常の感度計算と変わらない。そうではなく、全体を同時に変化させ、30 回ほどの試行で計算結果の分布を見たいというのが目的であり、これは一種の Monte Carlo となる。

ここで問題になるのは、どのようにして摂動セットを作成するかである。無作為に作成した断面積セットに対しその分布を計算したとき、それは断面積共分散に一致しなければならない。逆に言えば、断面積共分散が与えられれば、それに基づいた摂動セットを作成することができる。

もっとも単純な例として、LANL の臨界体系 Jezebel を取り上げ、この計算結果に ^{239}Pu の核分裂断面積がどのように影響するかを調べた。本来の目的は、Monte Carlo のような simulation に対する誤差評価であるが、まずは手法を確立することを目指し、計算の早い S_N コードを用いた。

ここで提案する手法は、3 つのステップからなる。最初は ^{239}Pu 核分裂断面積の共分散推定であり、微分実験データに基づいた共分散評価を行った。多くの実験データには規格化による系統誤差が含まれているため、得られた共分散の相関係数は一般に全て正となる。この手続きは、通常の共分散評価と全く同じものである。ここで得られた共分散に基づき、摂動ライブラリを作る事ができる。正の相関があるため、あるエネルギー群で断面積が高めにサンプルされれば、その近傍の群でも断面積が高い方向に動くことになる。

得られた共分散の相関係数を Fig. 3 に示す。なお、Jezebel は高速中性子臨界体系であ

るため、共鳴領域への感度は無視できる。

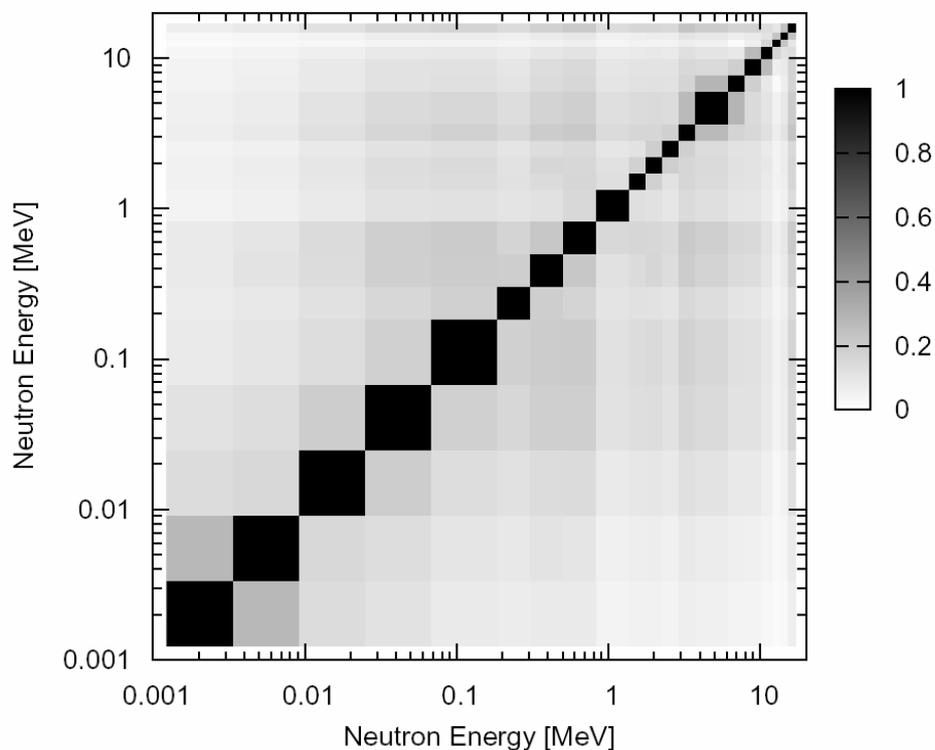


Fig.3 : Correlation matrix for the ^{239}Pu fission cross sections, evaluated based on the differential measurements only.

共分散を与えた ^{239}Pu 核分裂断面積は LANL/T-16 で評価されたものであり、この断面積は Jezebel に対して調整されたものではないが、Jezebel の実行増倍率計算を完璧に再現することが分っている。もし、微分実験データから得られた共分散をそのまま k_{eff} の誤差計算に用いると、約 1% という誤差が得られる。しかしながら、Jezebel の臨界実験誤差は 0.2% である。この積分データの情報を、断面積共分散に反映させたい。これには良く知られた炉定数調整の手法を用いる。

但しここでの「調整」は、炉定数調整のそれとは異なる。なぜなら事前の計算において $k_{\text{eff}} = 1.0$ が得られているので、 ^{239}Pu の核分裂断面積は調整の前後で変化せず、共分散のみが変化する。相関係数を Fig. 4 に示す。

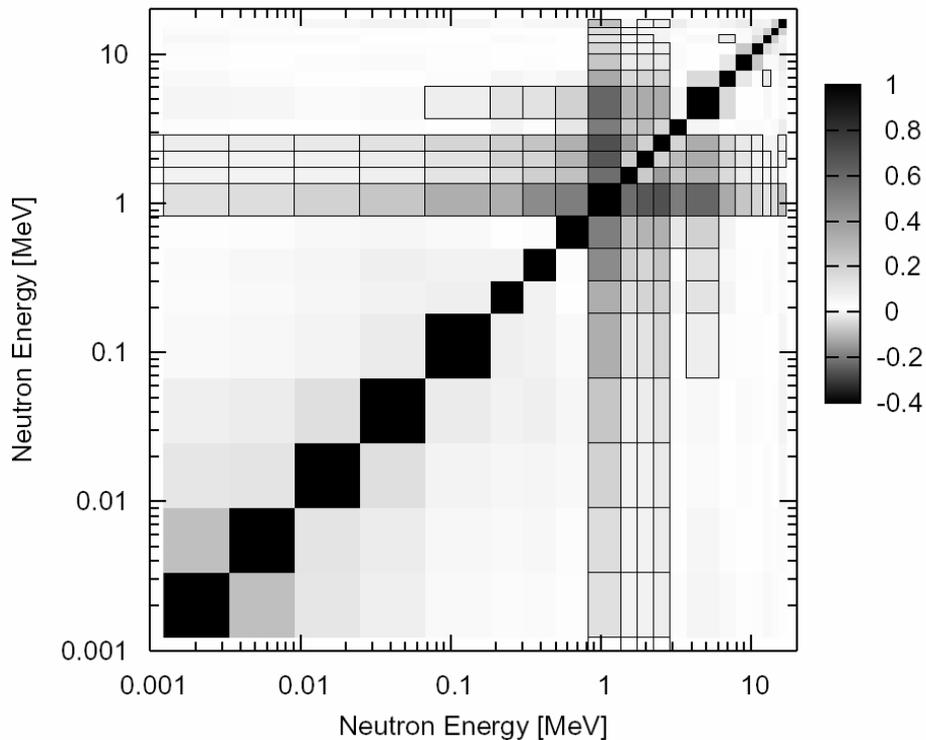


Fig.4 : Correlation matrix for the ^{239}Pu fission cross sections, evaluated based on both differential and integral data. The area surrounded by the solid rectangle has a negative correlation.

事後共分散の最大の特徴は、高速エネルギー領域において負の相関が生じることである。この共分散に基づく摂動ライブラリでは、あるエネルギー群の断面積が高くサンプルされると、Jezebel の k_{eff} を 1 に保つために、近接するエネルギー群の断面積は低い方向に動く。

最後の段階は、この共分散行列に基づく摂動ライブラリを生成することである。相関のあるデータに対してランダムサンプルを行うのは難しいので、まず共分散行列を対角化し、その固有値に対してサンプリングを行う。それぞれの固有値に対して、ランダムに抽出された値がガウス分布になるようにサンプルするものである。この固有値空間でのサンプルを、再び断面積空間に戻してやると、相関のある摂動ライブラリのセットを作ることができる。なお手法の詳細については Nucl. Sci. Eng. に投稿中であるので、そちらを参照のこと。

得られた 2 つの共分散行列 (before adjustment, after adjustment) を用いて 2 つの摂動ライブラリを作成し、Jezebel の k_{eff} 計算に用いたとき、 k_{eff} がどのように分布するかを調べた。結果を Fig. 5 に示す。ここでは実際に SN コードを走らせるのではなく、感度行列を用いて線形近似した計算を行った。1000 回の試行の結果であるが、“before adjustment”のほうは約 1% の誤差、“after adjustment”ではそれが 0.2% に減少していることが分る。

実際にこの手法を適用する際には、1000 回もの試行は不可能であり、せいぜい 30 回程度が現実的な試行回数となる。 S_N 計算の例であるが、実際に 30 回の試行を行って k_{eff} の誤差を推定した。試行回数が少ないので、この図ほどはっきりと正規分布はなさないが、それでも k_{eff} の誤差は 0.2% になっているのを確認している。

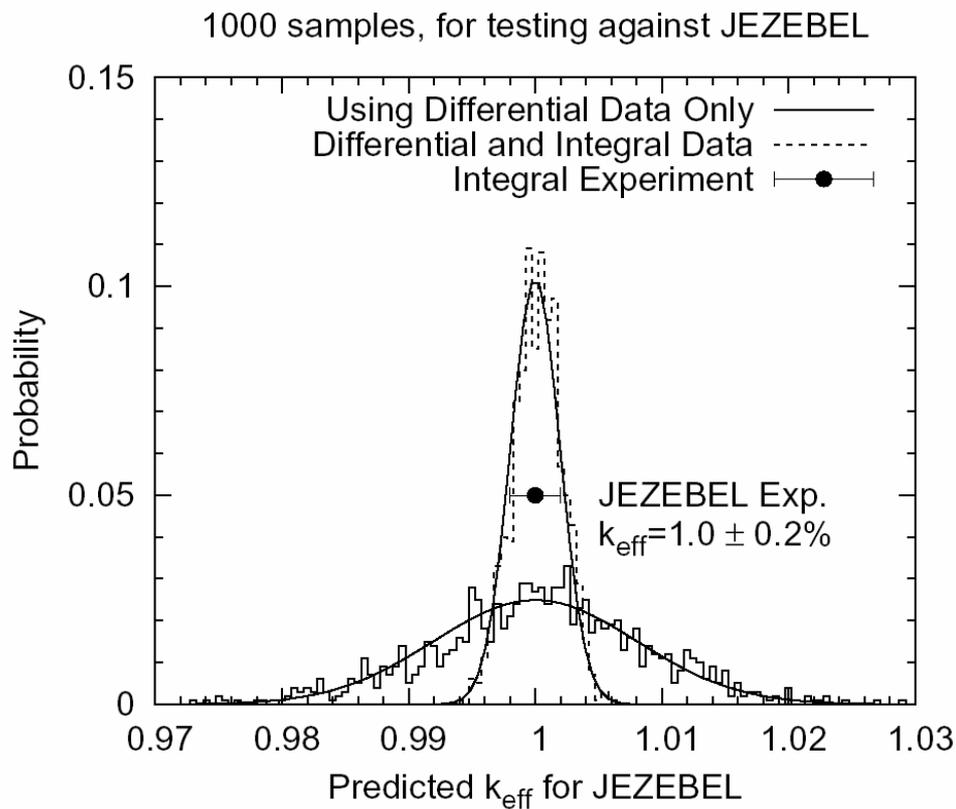


Fig.5 : Distributions of simulated k_{eff} prediction for Jezebel.

4. おわりに

LANL/T-16 での核データ評価活動について、最近の話題を中心に概観した。最大のトピックスとしては、ENDF/B-VII の完成が挙げられるが、LANL は ENDF/B-VII に非常に大きな貢献をしている。ここで評価されるデータは、標準断面積となる軽核断面積から、エネルギー開発に重要な重核データに及ぶ。評価の手法は理論計算を全面的に応用したものであり、中性子スペクトルに対する Monte Carlo 計算のような新しい試みも盛んである。

断面積計算の高精度化が研究の大きな柱ではあるが、ここで紹介したような誤差推定も主要な項目になりつつある。LANL では断面積誤差共分散の評価のみならず、それを実際に用いて大規模 simulation の誤差を推定しようとしている。できることなら避けたい共分散評価だが、どこの国に行っても同じ壁が立ちはだかっているものである。