

## 核データ部会・炉物理部会合同企画セッション

# (2) 分離及び非分離共鳴領域における 共分散行列の評価とその処理 (SG-20)

日本原子力研究開発機構

千葉 豪

chiba.go@jaea.go.jp

## 1 はじめに

数値シミュレーションによる原子炉核特性の予測値には不確かさが伴う。その定量化の重要性は、設計裕度の合理化、社会への説明責任の観点から、原子力工学の分野で広く認識され始めている。それに伴い、核反応断面積の不確かさの定量化、すなわち断面積共分散の評価が重要となっている。

共鳴エネルギー領域においては、断面積は共鳴パラメータにより定義されるため、共鳴パラメータの共分散を評価する必要がある。一方で、核データから核特性予測値への誤差伝播を計算する際には、通常、エネルギーで平均化された断面積（すなわち群断面積）を考えるため、共鳴パラメータから群断面積への誤差伝播を計算する（「処理」する）必要がある。SG-20 は共鳴パラメータの共分散の評価及びその処理の方法について検討するために組織されたワーキンググループである。

コーディネーターは九大/LANL の河野氏、モニターはCEA の R.Jacqmin 氏である。主要なメンバーは、ORNL の L.Leal 氏、N.Larson 氏、JAEA の柴田氏、石川氏、千葉である。

## 2 共鳴パラメータに対する共分散行列の評価手法の開発

誤差が与えられている実験データを用いて最小二乗法により断面積の評価を行う場合には、断面積の評価値とともにその共分散が与えられる。共鳴パラメータについても同様のことが言える。

ところが、すでに評価された共鳴パラメータに対してその共分散が必要な場合には、再度共鳴解析を行うことは非現実的、もしくは不可能である。なぜなら、以前の共鳴解析に使用された実験データとその誤差データを現時点で入手することが難しいからである。そのような問題に対処するため、本 SG では、簡易評価法と Retroactive 法が提案され実用に供されている。

簡易評価法では、エネルギー平均断面積の誤差を実験データ等から仮定し、それを再現するようにベイズの定理を用いて共鳴パラメータの誤差を推定する。例えば、JENDL-3.2 の U-235 の共鳴パラメータ共分散の評価では、エネルギー区間を 0.05eV 毎に区切り、各区間の平均断面積の誤差を 5%、各区間の断面積間の誤差の相関を 50%と仮定している (4eV 以下の領域について)。なお、非現実的な共鳴パラメータ誤差が計算されることを回避するため、共鳴パラメータ誤差の初期値を 50%と大きく設定している。得られた共鳴パラメータの誤差から各エネルギー区間の平均断面積の誤差を再度計算すると設定した誤差よりも小さい値となるが、これは共鳴パラメータを介して生じる系統性によるものである。

一方、Retroactive 法では、既存の共鳴パラメータから計算したエネルギー依存の断面積を仮想的な実験データと考え、それに対して典型的な実験データの誤差を与える。そして、その仮想実験データを用いて共鳴解析を行い、共鳴パラメータの誤差を計算する。当然のことながら、この共鳴解析の結果得られる共鳴パラメータは既存のものとは一致する (実験誤差の設定が共鳴解析時に用いた実験誤差と大きく異なる場合には微妙にずれるものと考えられる)。簡易評価法と異なり、ポイントワイズの断面積を取り扱うため、実験データの温度依存性 (共鳴のドブラー拡がり) を容易に考慮することができる。この方法は SAMMY コードに組み込まれている。

### 3 共鳴パラメータに対する共分散行列の効率的な格納のための Compact Format の提案

JENDL-3.2 や-3.3 における共鳴パラメータの共分散は、あるエネルギー区間で平均化された断面積に対して影響が大きい、比較的幅の広い共鳴に対してのみ与えられていたが、最近では、さらに多くの共鳴パラメータに対して共分散が与えられる傾向となっている。共分散行列の要素数は共分散を与えるパラメータの数の二乗に比例するため、共分散を与えるパラメータの数が多くなればなるほど、共分散データを格納する評価済み核データファイルのサイズは膨大なものとなる。一般に、共鳴パラメータの共分散行列は疎行列となるため、行列の全要素 (対称性を利用した場合は要素の約半分) を格納する従来のフォーマットでは、そのほ

とんどが無駄な情報となる。

そこで、ORNLのN.LarsonがCompact formatと呼ばれる新しい共鳴パラメータ共分散のためのフォーマットを提案し、それが正式なものとして採択された。Compact formatは、共鳴パラメータの共分散行列の対角成分(分散)と非対角成分(相関係数)を分けて格納し、かつ相関係数は-99から99までの整数で表現する。相関係数は与える行列内での位置を指定し、整数が正の場合には0.5を足して100で割るという変換を施して得る。図1にCompact formatで記述された共鳴パラメータの共分散(非対角成分)の例を示す。

2393	2392	26				904032151	3401	
2394	584	-20	-20			904032151	3402	
2394	2392	31	-68			904032151	3403	
2395	584	-21	67	32	-41	904032151	3404	
2396	583	-56	26	-86	33	904032151	3405	
2396	2390	25			-61	904032151	3406	
2398	584	-33	-64	32		904032151	3407	
2399	584	20	-30	23	-26	78	904032151	3408
2399	2396	23	23				904032151	3409
2401	589	31	75				904032151	3410
2402	589	-84	-95				904032151	3411
2402	2401	-61					904032151	3412
2403	588	-22					904032151	3413

図1: Compact formatで記述された共鳴パラメータ共分散

## 4 共分散行列処理コードERRORJの開発

ENDFフォーマットで格納された断面積共分散の処理は、断面積の処理同様、核データ処理コードシステムNJOY(開発元はLANL)やAMPX(同ORNL)で可能である。共鳴パラメータの共分散についても、Single level Breit-Wigner公式で記述されるものについてはNJOYで処理可能である。ところが、Reich-Moore公式に基づく共鳴パラメータの共分散を処理する機能はそれらのコードには無く、JENDL-3.2の共分散ファイル作成当時には新たな処理コードの開発が強く望まれた。それを受けて、旧核燃料サイクル開発機構の資金のもとに、旧住友原子力工業がNJOYの共分散処理モジュールERRORRを基にして処理コードERRORJを開発した。

共鳴パラメータの共分散の処理とは、共鳴パラメータの共分散からエネルギー平均された断面積(群断面積)の共分散を計算することである。この誤差伝播計算は以下の式に基づいて行われる。

$$V_{\sigma_i, \sigma_j} = \sum_{l, m} \left( \frac{\partial \sigma_i}{\partial \Gamma_l} \right) \cdot \left( \frac{\partial \sigma_j}{\partial \Gamma_m} \right) \cdot V_{\Gamma_l, \Gamma_m} \quad (1)$$

従って、共鳴パラメータの共分散処理は、(1) 共鳴パラメータの共分散  $V_{\Gamma_l, \Gamma_m}$  の評価済み核データファイルからの読み込み、(2) 微係数  $\partial\sigma_i/\partial\Gamma_l$  の計算、(3)(1)式に基づく誤差伝播計算、という手順になる。

ここで最も重要なのが微係数の計算であるが、ERRORJ は以下の式、

$$\frac{\partial\sigma_i}{\partial\Gamma_l} = \frac{\sigma'_i - \sigma_i}{\Delta\Gamma_l} \quad (2)$$

に基づいて数值的に行う。なお、 $\sigma_i$  は共鳴パラメータセットから計算した群断面積であり、 $\sigma'_i$  は  $l$  番目の共鳴パラメータを  $\Delta\Gamma_l$  だけ微少変化させた共鳴パラメータセットから計算した群断面積である。つまり、核データファイルにおいて  $N$  個の共鳴パラメータに対して共分散が与えられている場合には、基準の群断面積  $\sigma_i$  と、 $N$  個の摂動群断面積  $\sigma'_i$  を計算しなければならない。共鳴パラメータセットから群断面積を得るためには、ポイントワイズ断面積の作成とそのエネルギー積分の計算が必要となり、これを真面目にやっていたら大変な計算量となる。そこでオリジナルの ERRORJ では、共分散が与えられている共鳴のピークエネルギーを中心とした一定の範囲では詳細なエネルギーグリッド、その他では粗いグリッドを用いることで、処理時間を短縮させていた。

JENDL-3.2、-3.3 の共鳴パラメータ共分散処理ではこのようなアルゴリズムでもなんとかあった（一晩置いておけば翌朝終わっている程度）が、共鳴パラメータ共分散の評価を始めた ORNL の L.Leal が送ってきた 100MB を越す U-233 の共分散ファイルはとて一晩で終わるような代物ではなかった。

そこで、以下のような処理アルゴリズムの改良を行った。

まずは、Reich-Moore 公式による共鳴パラメータから計算されるポイントワイズ断面積が、共鳴パラメータの中性子角運動量とスピンについて独立に計算されることに着目した。すなわち、微係数  $\partial\sigma_i/\partial\Gamma_l$  を求める際に、 $\sigma'_i$  と  $\sigma_i$  は、 $\Gamma_i$  と同一の中性子角運動量、スピンを有する共鳴パラメータのみから計算すればよいことになる。

また、微係数の計算式自体を以下のように変更した。

$$\frac{\partial\sigma_i}{\partial\Gamma_l} = \frac{1}{\Delta E} \int_{E \in i} \frac{\partial\sigma(E)}{\partial\Gamma_l} dE = \frac{1}{\Delta E} \int_{E \in i} \frac{\sigma^+(E) - \sigma^-(E)}{2\Delta\Gamma_l} dE \quad (3)$$

ここで、 $\sigma^+(E)$  ( $\sigma^-(E)$ ) は  $l$  番目の共鳴パラメータに  $\Delta\Gamma_l$  ( $-\Delta\Gamma_l$ ) という摂動を与えて計算したポイントワイズ断面積である。この場合、摂動を与える共鳴パラメータの共鳴エネルギーから離れた領域では、 $(\sigma(E)^+ - \sigma(E)^-)$  はほぼゼロとなることから、エネルギーグリッドを粗く設定することができる。このアルゴリズムでは共鳴パラメータセットからのポイントワイズ断面積の計算数が従来のアルゴリズムの約二倍となる（ $\sigma_i$  を摂動毎に計算する必要があるため）が、計算する

エネルギーグリッド数が格段に小さく済むため、処理時間は大幅に短縮される。図 2 に、全エネルギーを詳細に分割して処理した結果（図中「reference grid」）と、エネルギーグリッドを適切に設定して処理した結果とを併せて示すが、両者に有意な差がないことを確認した。

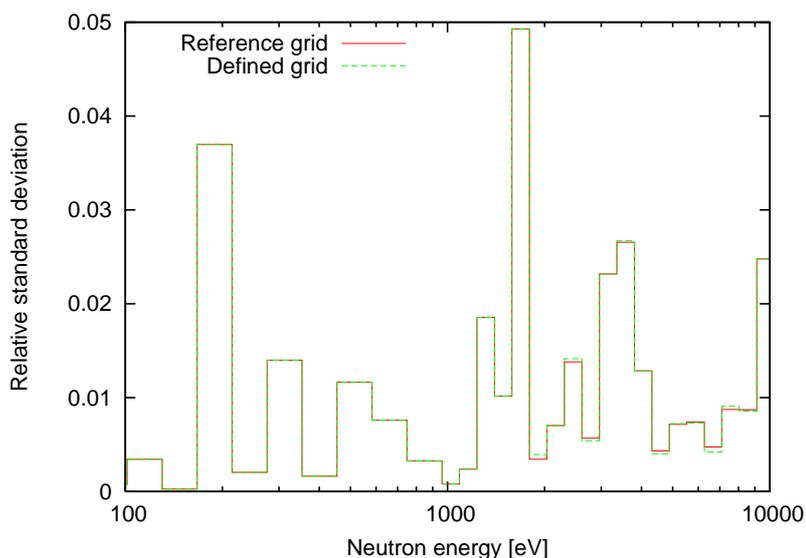


図 2: JENDL-3.3 の U-238 捕獲断面積の相対標準偏差

これらの変更により、Leal 評価の U-233 の共分散処理は五時間で終了した。なお、Leal は変更前の ERRORJ での処理を辛抱強く行い、五日程度でようやく終了したことを教えてくれた。

一方、ORNL でも APMX システムの共分散処理コードの更新が行われ、PUFF-IV として国際会議等の場で紹介されている。PUFF-IV では、群断面積の Reich-Moore 公式の共鳴パラメータに対する微係数を、共鳴解析コード SAMMY のモジュール SAMRML を用いて解析的に計算する。

ERRORJ と PUFF-IV の処理結果の比較も行われている。その結果の一部を図 3 と図 4 に示す。図中の「ERRORJ(MFCOV=-33)」とあるのは、ERRORJ の高速計算オプション（エネルギーグリッドを粗くすることで処理時間を短縮する）を利用した場合の結果である。1eV 以下の核分裂断面積の標準偏差において有意な相違が見られている。ERRORJ ではこのエネルギー領域で 1% を越える相対誤差となっており、「若干高すぎるのではないか」という声も聞こえてきたが、最終的には PUFF-IV が使用している SAMRML のバグに起因していることが分かった。両コードの処理結果の比較は、現在、BNL、ORNL で継続して行われている模様である。

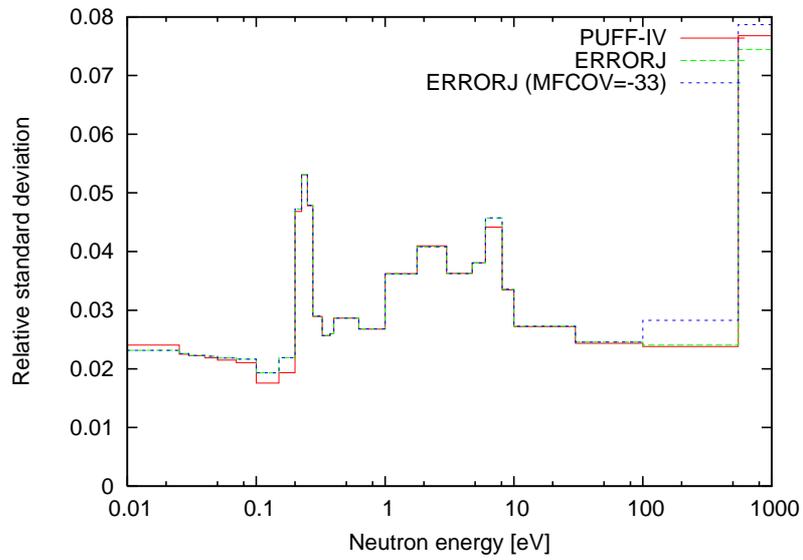


図 3: Leal 評価の U-233 捕獲断面積の相対標準偏差

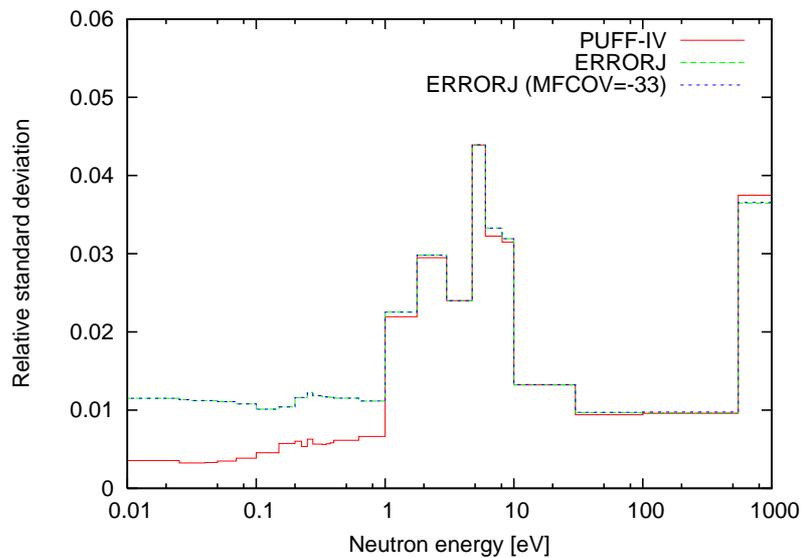


図 4: Leal 評価の U-233 核分裂断面積の相対標準偏差

## 5 おわりに

断面積共分散の評価については、この十年で大きく進歩し、評価手法の整備は着実に進んだ。今後は評価手法の開発から共分散評価作業に重点が移ることであろう。

断面積共分散の処理は原理自体も簡単であり、課題点はそれほど見当たらない。ただし、処理コードの維持、管理に費やすマンパワーは小さくない。コードの管理コストを極小化するためには、世界的な枠組みでのコードの管理、可読性、拡張性の高いプログラミング言語の採用等が必要であろう。

断面積共分散の評価、処理技術の開発は、その最終目的が断面積共分散の原子力プラント設計等への適用にあることを忘れてはいけない。それらの技術開発を進めると同時に、実社会への反映の仕方についての具体的な議論を核データ、炉物理のコミュニティで始める時期と考える。