

(2) 理論・断面積計算手法に関する報告

九州大学大学院総合理工学研究院

渡辺 幸信

watanabe@aees.kyushu-u.ac.jp

日本原子力研究開発機構

国枝 賢、千葉 敏

本報では、著者らが主に参加した理論や断面積計算手法（共分散含む）に関連したセッションの研究発表内容を整理し、印象や感想を述べる。初めに、概要と会議の全体的印象を述べ、その後、個別セッション毎の口頭発表内容を要約し、最後に、国内における組織立った核データ研究の必要性について言及し、いくつかの提案（千葉・渡辺案）を行う。

まず、欧米における核データ研究の“底力”を見せつけられたというのが正直な印象である。核データという研究領域が炉工学の一分野と見なされる傾向にある日本とは違って、欧米では物理の一分野であることを反映して、参加したセッションの多くが、原子核物理の研究者（若手・中堅層が多くを占める）による発表で構成されていた。理論・評価手法は核データ研究の基礎分野であり、それを支える原子核物理分野の研究結果が発表されるのは当然であり、この状況はもちろん今回に限ったことでない。核データが核物理の一分野と見なされる欧米に比べ、そうではない日本側の貢献（発表件数やインパクト）が減ってきたことにある種の危機感を感じた次第である（実は、その兆候は前回 ND2004 ですでに現れていたのではあるが.....）。

理論分野では、微視的アプローチが一つの流れとしてはっきりと見えてきた点が今回の特徴である。日本では現在あまり行われていない核分裂の微視的研究が欧米では精力的に行われており、ポテンシャル表面の計算から中性子断面積の計算までが一貫して遂行可能になってきている。反応理論でも共鳴を含む軽い原子核同士の反応や前平衡多段階直接過程の微視的理論、核構造計算ではハートリー・フォック・ボゴリューボフ (HFB) 理論に基づく原子核質量、準位密度計算の改良などに関する多くの発表があった。現時点でこれらの微視的計算を核データ評価に適用するには、まだ精度的に十分とは言えないが、着実に成果が上がってきている印象を持った。核データ評価で一般に使用されている現実的な現象論的アプローチに比べ、微視的理論は第一原理に基づいた計算で物理

的に興味深く、今後ますます測定が困難な核種に対する核データが必要とされた場合の外挿性という点で現象論に対して有利である可能性もあり、核データ理論研究を若手研究者にアピールするためにも、国内にこの流れを作る必要性を痛感した次第である。

核データ計算・評価手法に関しても、欧米では少数の研究者等が核となって現象論モデル（前平衡・統計模型）を核にした汎用的計算コードシステム（TALYS や EMPIRE）が構築され、最近ではその中に共分散計算が組み込まれ、さらに上記の微視的理論がモデルとして、あるいは計算結果が入力パラメータとして適用され、驚くべき高度化・進化が図られつつある。また、断面積計算に加えて、共分散生成、ファイル化、断面積処理、ベンチマーク計算までをほぼ自動で一括して行う計算システム構築を目指して、開発が進められている。国内でも JENDL-4 の評価には JAEA で新しく開発された計算コードシステム（CCONE や POD）が使用されているが、それに関連した発表が殆どなかったのは残念であった。

本報告の範囲を少し逸脱するが、実験の中で特に関心を引いたのが、“surrogate（代理）”法と呼ばれている間接測定法の進展である。これは、複合核を経由して進む二段階反応に対する断面積測定に適用される。まず実験では、測定すべき反応の第一段階（特定の複合核形成）を別の代理反応に置き換え、複合核崩壊の測定（注目する崩壊の分岐比を測定）を行う。複合核形成断面積は理論計算によって求め、代理反応を使って測定した分岐比と組み合わせて、最終的な断面積を算出する。この代理法により、測定が困難であった中性子捕獲や中性子誘起核分裂断面積についての多くの新しい測定結果が報告された。上述のように、これらの測定は最終的に複合核形成断面積と結びつけるために理論の助けが必要であり、実験と理論がタイアップして、近年、欧米において精力的に取り組みられている印象を強く持った。Flocard (CSNSM, 仏) による基調講演 (Advances in Basic Nuclear Science Associated with Nuclear Energy Data) や次に述べる Chadwick (LANL) による基調講演を始め、いくつかの測定以外の講演でも取り上げられ、その成果や有効性が強調された。国内では代理反応法による核データ測定研究はまだ皆無に近い状況なので、今後、実験と理論が融合して推進すべき課題の 1 つであろう。

以下、関連したセッション毎の口頭発表について内容を簡潔にまとめる。

(1) Chadwick (LANL) による基調講演

“Recent nuclear data developments and needs for improved simulation” という題目で、核データ生産に必要とされるシミュレーションコードと実験データの進展についてレビューがなされた。最近公開された ENDF/B-VII に焦点を置き、アクチノイド核に対する核分裂、捕獲、非弾性散乱、 (n, xn) 断面積の改善と、それらを用いた積分実験の再現性の改善を例として取り上げて、示唆に富む報告内容であった。これらの改善には米国 LANL を中心

に測定された新しい実験データ（先述の代理反応データ含む）が大きく貢献したことが強調された。また、あるエネルギー点での較正（計算値の実験値への規格）を厳密に行うために、共分散情報の重要性が説明され、宇宙物理分野の最先端で開発された計算手法を応用する可能性について言及された。また、次世代核データファイル（2015年？）の評価作業では、微視的理論アプローチ（特に軽核、準位密度や光学ポテンシャルなどの計算コードの入力パラメータ）と高性能コンピューティングの進展がその変化をもたらし、現実的かつ包括的な共分散データ処理、実験（微分+積分）と理論で利用可能なベストな情報に基づく評価・ベンチマークが自動化された計算システムでなされるであろうという将来予測が述べられた。

(2) 核模型及び理論研究（核分裂理論含む）

関連講演は全23件であった。核模型のセッションでは、まず、核子直接・半直接捕獲反応断面積の計算について、L. Bonneau (LANL) と E. Betak (スロバキア) の発表があった。前者は、不安定核への適用を念頭に置き、微視的な Hartree-Fock-BCS 理論で計算した束縛状態の一粒子波動関数を用いた結果について報告した。後者は、前平衡モデルと直接・半直接捕獲モデルとの相補性について議論を展開した。B.V. Carlson (ブラジル) は、現象論的前平衡モデルの枠内で、内部状態配位混合の割合について調査した結果を報告した。V. Avrieganu (ルーマニア) は α 粒子の光学ポテンシャルについて、微視的な folding モデルによる結果も含めて彼等のこれまでの研究成果をレビューした。

理論研究のセッションでは、K. Amos (メルボルン大) は Multi-Channel Algebraic Scattering (MCAS) 理論（複素結合チャンネル理論の1つ）を軽核（例えば ${}^7\text{Li}$ ）の共鳴領域における散乱の記述への適用した結果が示された。H. Chau (CEA/DAM) は独自に開発した CDCC コードを変形核の重陽子弾性・非弾性散乱断面積計算へ適用した結果を報告した。T. Kawano (LANL) は、直接過程が存在する際の複合核反応断面積計算を厳密に定式化した Kawai-Kermann-McVoy 理論（1973）に基づく具体的な数値計算を初めて成功させ、単純な HF 計算や Moldauer の fluctuation 補正を考慮した HF 計算結果との比較を示した。これは理論提唱から30数年経って初めてなされた大きな成果で、河野氏の實力を誇示する発表であった。今後の核データ計算への応用が楽しみである。M. Dupuis (LANL) は、多段階直接 (MSD) 過程の微視的理論計算を変形核である ${}^{238}\text{U}$ の(n,n')連続スペクトル解析へ適用した。現時点では1段階過程のみの計算であるが、集団的励起を RPA-BCS 計算で考慮でき、M3Y 相互作用を使うことで絶対値も調整可能なパラメータなしに決定することができており、まずまずの実験データ再現性を達成した。

さらに、準位密度計算についても微視的理論が適用され、S. Hilaire (CEA/DAM) は、Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) 理論と組み合わせ (combinatorial) 法を使う計算手法を発表した。8500以上の核種の準位密度の数値データが核計算へ利用可能な状況に

なっているとのことである。また、微視的理論信奉者の代表格である S. Goriely (ブリュッセル) は HFB 質量公式の最新状況について講演を行った。

核分裂理論関連の講演では、微視的構造模型と核データ評価のための反応模型へ与えるインパクトについて、H. Goutte (CEA/DAM) の招待講演があった。時間依存一般化座標法に基づく核分裂生成物の収量や性質、アクチニドの核分裂障壁や寿命の系統性等に対する微視的計算が示され、反応計算で使われる核構造模型の改良に生かす方法について議論があった。M. Sin (ブカレスト) は、HFB 理論に基づく計算結果を用いたアクチニド核種に対する中性子誘起核分裂断面積計算について報告した。P. Talou (CEA/DEN) は、核分裂片からの即発中性子とガンマ線放出をモンテカルロ法で計算する手法を提案し、入射エネルギーや核分裂片収量の対称・非対称比との関係性に関する研究結果を発表した。最後に、N. Carjan (ボルドー) によって、2次元の現実的な原子核形状を使った ^{236}U の低エネルギー核分裂における scission 中性子の多重度やフラグメントの励起エネルギーに関する研究成果が報告された。

(3) 高エネルギーモデル

A. Boudard (CEA/Saclay) による招待講演「高エネルギーモデルの進展」を含め 8 件の講演があった。うち 4 件が核内カスケードモデルで、QMD 関連が 2 件、その他が 2 件 (核分裂と knockout-ablation モデル) という内容であった。近年、高品位な実験データ (主に GSI での測定) が出てきたことで、スプレッション反応機構に対する理解も深まり、モデル計算の予測精度の向上が見られる。

まず、A. Boudard と J. Cugnon (Liege) は、核内カスケードモデルに基づく INCL コード (現 INCL4) の現状と改良点について報告した。Coalescence モデルを導入した軽クラスタ生成計算、アイソスピン・エネルギー依存の核子ポテンシャルの導入による準弾性散乱ピーク位置の改善、標的核中の核子位置と運動量の相関の考慮などが INCL4 に導入された。さらに J. Cugnon はパイオンの平均場にも現象論的なアイソスピン・エネルギー依存性を導入し、パイオン入射反応や核子入射パイオン生成計算の改良を行った。

なお、INCL4 (カスケード) +ABLA (蒸発・核分裂) コードが MCNPX にも移植されて、近く GEANT4 にも入る予定である。高エネルギーコード業界では、系統的かつ精密なコード間の相互比較する時期に来ているという認識で、来春にワークショップの企画が予定されている旨の報告があった。

H. Duarte (CEA/DAM) は、弾性散乱以外の反応断面積計算コード BRIEFF について報告した。彼は、まず独自の INC コード BRIC を開発しており、微視的模型 HFB 計算による核密度分布を用いる等の特徴を有している。それに蒸発モデル (フラグメント計算用の Fermi Breakup モデルや核分裂モデルも含む) 計算部を追加して、BRIEFF が完成した。低エネルギーから中間エネルギー領域におけるベンチマーク結果が発表された。なお、

BRIC も MCNPX に組み入れられたとのことである。もう 1 件の INC モデル関連は、ISABEL コード開発者である Y. Yariv (CEA/Saclay) がカスケードモデルの低エネルギー (20~100MeV 領域) までの拡張可能性について彼なりの考察を述べた。

QMD に関連した 2 件の発表のうち、M.V. Garzelli (Milano) は FLUKA コードに標準的な QMD 計算を組み込み、薄い標的や厚い標的に対する重イオン反応実験データを解析し、QMD+FLUKA 計算のベンチマーク結果を示した。もう 1 件は、渡辺 (九大) が核子入射反応に QMD を使った場合に軽クラスタ生成を大きく過小評価する問題を現象論的手法 (surface coalescence モデル) を導入することによって改善できることを報告した。

(4) 核データ計算・評価手法

このセッションの冒頭の Koning (NRG) の招待講演で、現在主流となっている核データ評価の方法論についての解説、及び今後の要求事項について彼の主張が述べられた。例えば、要求事項として、実験値のデータベースである EXFOR の充実、計算コードの検証とパラメータの整備 (RIPL)、スクリプト言語を用いた計算の自動化が挙げられた。また、今後のデータファイルに対する要求として、完全な再現性、ENDF フォーマットの変更や汎用ファイルと特殊目的ファイルの区別の必要性に対する疑問、軽核の取り扱い等について言及された。さらにモンテカルロ法や決定論的手法を用いたベンチマーク法が紹介され、またモンテカルロ法による共分散の導出方法についても説明があり、全断面積、弾性散乱断面積、中性子捕獲断面積に対する具体例が示された。今後の評価対象としては ITER や IFMIF の核融合関連データや、FP、構造材や冷却材に対する核データのさらなる拡充、マイナーアクチニドに対する予測精度の向上に力を注ぐべきとの意見であった。また近年注目されている代理法による間接測定の有用性、及び微視的理論に対する期待を述べていた。

E. Dupont (CEA) による TALYS を用いた 130MeV までのアクチニド核種の光核反応断面積評価が報告された。巨大双極子共鳴 (GDR) と擬似重陽子分解 (QDM) によるガンマ線の吸収過程を計算し、励起子模型と HF 統計模型によりその崩壊過程を計算する標準的手法である。Soukhovitskii らによる CC グローバル中性子 OMP や核分裂断面積には Double humped parabolic model が使用された。さらに、A. Trokov (IAEA) によるタングステン同位体に対する中性子入射の核データ評価について発表があった。タングステン同位体は核破砕ターゲット、核融合炉第一壁の候補材料であり、それが動機になっているようである。EMPIRE の最新バージョンを用い、共分散も含めた共鳴領域から連続領域にわたる改定・新評価結果が示された。さらにベンチマーク計算に関しても報告があった。

その他、核模型・コードのセッションでは、M. Herman (BNL) と S. Hilaire (CEA/DAM) がそれぞれ現時点での代表的な計算コードである EMPIRE と TALYS の最新バージョンの現状並びに拡張計画について発表した。EMPIRE の拡張として、分離・非分離共鳴領域へ

の断面積計算と、KALMAN コードやモンテカルロアプローチによる共分散計算が報告された。TALYS の方は、TALYS-1.0 (公式版) リリースと TALYS コードのみを使った (実験データによるパラメータ調整なし) 核データライブラリ (SALTY) について報告された。後者のライブラリは、入射粒子として中性子、光子、荷電粒子に対するすべての安定同位体の反応をエネルギー領域 $1e^{-5}eV$ から 200MeV までをカバーする ENDF-6 ファイル形式である。

(5) 共分散

E. Bauge (CEA/DAM) はモンテカルロ法を用いて理論パラメータの共分散と、それを用いて計算された断面積の共分散を求める方法について講演した。理論パラメータの共分散は、基本的に D.L. Smith の提案した方法 (ANL/NDM-159) に基づいて、パラメータをランダムに振って得られたカイ二乗の分布から推定するものである。次に計算値の共分散は、共分散に基づいて振り出されたパラメータ分布から推定しようというものである。どういう理由かは分からないが、1000 ヒストリーで良しとしてこれらの結果を求めていた。このやり方は誤差が非常に大きく、そのために一次の誤差伝搬則の精度が疑わしい場合にはそれなりに意味があるかもしれない。結果はもっともらしく出ていたが、個人的には本来分布を持つべきではない物理量と確率変数とを取り違えた議論をしているように思われた。また、普通に感度行列を使って計算した方がはるかに計算量は少なく、モンテカルロに伴う誤差も無い。

H. Leeb (オーストリア大) は、最大エントロピー法によるパラメータ事前分布の求め方、及びモデルの欠陥に伴う誤差、理論計算と実験データをベイズ推定法によって組み合わせる方法について説明した。

M. Herman (BNL) は、共鳴領域、及びスモース領域における共分散評価計算について説明した。共鳴領域では、BNL で評価された *Atlas of neutron resonances* を基に、またスモース領域では EMPIRE を用いて感度を計算し、河野氏の KALMAN と組み合わせて共分散を計算しようという正統的な方法である。ただし、彼のやり方では理論計算のパラメータが基本にあり、その共分散から誤差伝搬則によって断面積の共分散を計算し、さらにそれを群定数の共分散に伝搬させ、積分実験との比較を通して元々の理論パラメータとその共分散も更新しようというなかなか野心的な方法である。このやり方は理論計算が全てを記述できるという楽観論に基づいてはいるものの、共分散に関する形式論としては究極の姿であると言える。

最後に J.J. Wagshal (ヘブライ大) が、通常は無視される事前分布とそのレスポンスの間の相関について述べた。その精神は、最近の核データは k_{eff} 等の積分量を再現するようにある程度調整されているので、核データと積分量の間に関係があるべきである、というものである。

以上、理論や評価手法、共分散に関連したセッションにおける口頭発表内容について要約した。ポスター発表についても多くの研究成果が報告されていたが、紙面の都合上割愛した。ND2007のHP (http://www-dapnia.cea.fr/Sphn/nd2007/site_nd2007/) 上で各論文のサマリーが公開されているので、そちらを参考にして頂きたい。

冒頭に述べたように、欧米（特にフランスと米国）における応用関連の核物理分野の実力を痛感した次第である。Gen-IVを旗印として20代から40代前半の評価・理論・実験研究者が有機的に機能しあう様相は、さながら“核データルネッサンス”と言うべき活況であった。それに対して日本では炉工学と核物理の分野が疎遠であるため、現状のままでは欧米の核データルネッサンスの時代を勝ち抜くのは容易では無いという印象を持った。21世紀の原子力の基盤を支える核データ研究に対する国内でのアクティビティを維持・発展させていくためにも、欧米での現状・将来計画を冷静に分析し、中・長期戦略に立った組織的な研究活動を開始すべき時期が来ていることを強く認識させられた。

最後に、この場を借りて、組織的活動に関連した幾つかの提案（千葉・渡辺案）を述べさせて頂く。これらに対する読者の皆様からの忌憚のない意見を頂戴できれば幸いである。今後、意見集約を図りながら、将来に向けた建設的な議論を盛り上げて、アクティビティ向上に繋げる第一歩にしたいと考えている。

- 評価・計算方法に関して、TALYS、EMPIREに相当する高エネルギー領域まで含む国産汎用計算コードの開発・サポート体制の確立
- 理論については、統計モデルが必ずしも有効でないような軽い核と核分裂が関連する重い領域に関する共同研究チームを立ち上げ、微視的理論アプローチを導入。
- 国産PHITS輸送計算コードで使われるevent-generator用核反応物理モデル(INC, QMD, GEM等)の改良や新規開発・導入
- 核データ関連で、組織的な予算獲得を目指す。(研究会用、国際会議参加、実験用、大型プロジェクト用など)
- 核データ研究に物理研究者の興味を喚起する。例えば、物理学会に定常的に参加して核データに関連した研究を発表する。逆に原子力学会に参加してもらう。共同研究テーマを掲げ、共同で予算獲得を目指す、等。
- JAEA タンデム、理研 RIBF、RCNP、東北 CYRIC 等における新しい核データ測定（例えば、代理反応法等）を計画し、大学・研究所等の合同チームで実施
- 大学、JAEA、産業界のネットワークを活用した若手人材の育成
- 誰がこれらの音頭を取るべきか？ シグマ委員会？ 核データ部会？ 原子力機構？ 筆者としては核データ部会ではないかと考えている。