

1 核データの積分テスト

粒子は、原子核との相互作用を、粒子自身の入射エネルギーに依存した確率のもとで起こす。この相互作用確率は「断面積」として定義され、一般には、原子核 n 、反応 x 、粒子の入射エネルギー E に対して、 $\sigma_{n,x}(E)$ というような形式で記述される。また、断面積には、相互作用の結果放出される二次粒子のエネルギーの依存性を考慮するものがある。その例としては散乱反応などが挙げられるが、この場合、断面積は二次放出粒子のエネルギー E' を用いて $\sigma_{n,x}(E \rightarrow E')$ と書ける。このような表式の断面積は、入射エネルギーのみに対する依存性を考慮する断面積 $\sigma(E)$ と区別して、「微分断面積」と呼ばれる。 $\sigma_{n,x}(E \rightarrow E')$ のように二次放出粒子のエネルギー依存性を考慮する場合はエネルギー微分断面積、角度依存性を考慮する場合は角度微分断面積と呼ばれる。さらに、二次粒子のエネルギー E' と散乱角の余弦 μ ² の両方への依存性を考慮し $\sigma_{n,x}(E \rightarrow E', \mu)$ と記述する断面積もあり、このようなものを「二重微分断面積」と呼ぶ。

上記のような断面積、エネルギー、角度微分断面積、二重微分断面積に、核分裂あたりの平均中性子発生数 $\nu(E)$ や核分裂スペクトル $\chi(E)$ などを加えたものを総称して「核データ」と呼ぶ。

核データの真値を理論的に導出することは不可能と言ってもよい。測定データや原子核模型計算等により尤も確からしい値を推定する。このような作業を「核データの評価」と呼ぶ。この核データの評価に用いる「測定データ」というのは、(微分)断面積に対するデータ、ということになる。一方、評価された核データを用いることにより、原子炉の様々な特性を数値的に評価することが可能となる。原子炉の特性データを測定することが出来るならば、核データを用いた原子炉特性の数値計算結果との照合、比較を通して、核データの良し悪しを議論することが出来る。一般に、(微分)断面積に対する測定データを「微分データ」、原子炉特性の測定データを「積分データ」と呼称して区別するのが通例となっている。微分データは個々の断面積に対応する一方、積分データは複数の断面積によって決まるものである。なお、「微分断面積」と「微分データ」にはいずれも「微分」という用語が使われているが、若干ニュアンスが異なることに注意が必要である。

一般に、核データは「評価済み核データファイル」として利用に供されることになるが、以上で示したように、その検証には積分データが非常に有用となる。積分データを用いた核データファイルの検証作業は、核データの積分テスト、ベンチマークテスト等と呼ばれる。

さて、ここで核データファイルの積分テストの一例を示そう。4種の(2022時点では古い部類に入る)評価済み核データファイル(JENDL-3.3、JEFF-3.1、ENDF/B-VII.1、JENDL-3.2)を用いたときの、超小型高速臨界集合体の臨界データに対する計算値と実験値の比(C/E値)をFig. 1に示す。なお、図中の誤差棒は測定値の不確かさを示す。

米国の評価済み核データファイル ENDF/B-VII はすべての臨界データにおいて0.4%以内で実験値を再現していることから、ここで扱った臨界データに関しては最も再現性が良いということが言えるであろう。一方、日本の核データファイル JENDL-3.3 は、C/E値が臨界データによって上下しており、ENDF/B-VIIほどの良好な再現性は見られていない。

では、JENDL-3.3を改善する立場からこの結果を見たときに、どのような情報を読みとればよいであろうか。

以下に、ここで挙げている5つの臨界データの概要について示す。

- Jezebel : Pu-239 が95%、Pu-240 が5%のPuからなる裸の球形炉心

¹/Document/Education/Sens

²反応前後の中性子の進行方向をそれぞれ $\vec{\Omega}$ 、 $\vec{\Omega}'$ と記述したとき、散乱によって中性子の進行方向が $\vec{\Omega}$ から $\vec{\Omega}'$ に変わる確率はこの2つのベクトルがなす角(散乱角と呼ぶ)に依存し、一般的にはその余弦で反応確率を考える。

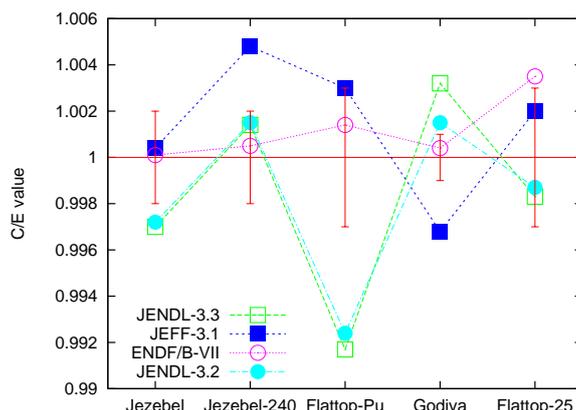


Fig. 1: 超小型高速臨界集合体の臨界データに対する C/E 値

- Jezebel-240 : Pu-239 が 77%、Pu-240 が 20% の Pu からなる裸の球形炉心
- Flattop-Pu : Jezebel で用いられた燃料の周囲に劣化ウランの反射体を巻いた炉心
- Godiva : ほぼ U-235 からなる裸の球形炉心
- Flattop-25 : Godiva で用いられた燃料の周囲に劣化ウランの反射体を巻いた炉心

これらの積分データの再現性を向上させるため、JENDL-3.3 ではどのような改善を行えばよいか、考えてみよう。

まずは、Jezebel において JENDL-3.3 が過小評価となっていることが指摘できるであろう。Jezebel はほぼ Pu-239 のみからなる体系であるため、JENDL-3.3 の Pu-239 の核データが反応度を過小評価している、と言えるであろう。

このように C/E 値の「絶対値」で議論することは重要であるが、測定値には不確かさが存在することに注意が必要である。その一方、Jezebel と Jezebel-240 のように、例えば同一の装置で測定された積分データなどにおいては、測定値の不確かさに強い関係性（相関）がある可能性が高い。その場合、測定値の不確かさは同じ方向に同じ程度現れると考えられるため、これら二つの臨界データに対する C/E 値の「差異」に着目することが有効となる。

この点を考えると、まずは、Jezebel と Jezebel-240 の C/E 値の差異に着目できるであろう。いずれも裸炉心であるが、微妙に燃料組成が異なっている。Pu-240 の含有量が大きい Jezebel-240 の C/E 値が Jezebel と比較して大き目であることから、Pu-240 の反応度への寄与が過大評価されている、もしくは Pu-239 の反応度への寄与が過小評価されている可能性を指摘できるであろう。

また、Jezebel と Flattop-Pu、Godiva と Flattop-25 の C/E 値の差異にも着目できるであろう。いずれのペアも同一の燃料を利用しており、差異は、裸炉心であるか、劣化ウラン反射体が巻かれているか、にある。C/E 値を観察すると、裸炉心と比べて、反射体が巻かれている炉心は、C/E 値が小さくでていることが分かる。このことから、劣化ウランに含まれる U-238 の中性子反射効果が過小評価されている可能性を指摘できるであろう。

以上のように、積分テストの結果 (C/E 値) から、核データファイルの精度について様々な可能性を挙げることはできるわけだが、「なぜ ENDF/B-VII は C/E 値が良好なのだろうか」「JENDL-3.3 と ENDF/B-VII との差は、どの核種、どの反応、どのエネルギー領域の断面積に由来しているのか」について知りたくなるのが人情というものである。

そのようなニーズに応えるものが「核データに対する感度解析」である。

2 実効増倍率の核データに対する感度解析

実効増倍率 k_{eff} は中性子輸送（拡散）方程式を数值的に解くことによって得られる。中性子輸送方程式の各項には中性子と原子核との反応断面積などの核データが用いられるため、核データが変われば、得られる実効増倍率も変わることになる。

ここで、計算される実効増倍率が、個々の核データにどれだけ影響を受けるかを定量的に示す指標として感度係数 S を導入する。 S は一般的に以下のように定義される。

$$S = \frac{\partial k_{\text{eff}}}{\partial \sigma} \cdot \frac{\sigma}{k_{\text{eff}}} \quad (1)$$

ここで、 σ はある核データとする。この場合、 S を「 k_{eff} の σ に対する感度係数」と呼ぶ。

感度係数の物理的意味を考えるため、式 (1) を以下のように書き直す。

$$S = \frac{\Delta k_{\text{eff}}/k_{\text{eff}}}{\Delta \sigma/\sigma} \quad (2)$$

ここで、 Δk_{eff} は核データ σ が $\Delta \sigma$ だけ変動したときの k_{eff} の変動量を示す。これより、感度係数 S は σ の相対変動に対する k_{eff} の相対変動の比を意味していることが分かるであろう。仮に感度係数 S が 0.5 であるならば、 σ が 100% 変動したときには k_{eff} が 50% 変動することになる。

ここで、核データファイルが二つあるとし、それらの評価値を σ^A 、 σ^B と書くこととする。それぞれの核データファイルを用いて実効増倍率を計算したならば、結果として k_{eff}^A 、 k_{eff}^B が得られるであろう。ここで、 k^A 、 k^B （下添字 $_{\text{eff}}$ は以後省略）の差 Δk は以下の式から計算できる。

$$\Delta k = \left(\frac{\Delta k}{\Delta \sigma} \right) (\sigma^A - \sigma^B) \quad (3)$$

また、 k の相対変動 $\Delta k/k^B$ は、式 (1) で定義される感度係数を用いると以下のように書ける。

$$\frac{\Delta k}{k^B} = \frac{k^A - k^B}{k^B} = \left(\frac{\partial k^B}{\partial \sigma^B} \cdot \frac{\sigma^B}{k^B} \right) \frac{\Delta \sigma}{\sigma^B} = S^B \cdot \frac{\sigma^A - \sigma^B}{\sigma^B} \quad (4)$$

つまり、 k の相対変動は、 σ の相対変動と感度係数の積により得られることが分かる。

さて、ここで、 σ^B が与えられ、それに基づいて k^B を計算したとする。 k の計算に莫大な時間を要する（例えば 1 ヶ月）とした場合、異なる核データファイル σ^A に対応する k^A を計算するのは非常に億劫である。だが、仮に感度係数 S が予め求まっていれば、 k^A を直接計算する必要がなく、上式で計算出来ることが分かる³。なお、感度係数 S^B は核データファイル σ^B を用いて計算したものを示している。核データファイル σ^A と σ^B にそれほど大きな違いが無い場合は、 $S^A \approx S^B$ と見做すことが出来る。

核データは原子核の種類、反応の種類、エネルギー群に依存する。核種 n 、反応 x 、エネルギー群 g の核データを $\sigma_{n,x,g}$ 、 k に対する $\sigma_{n,x,g}$ の感度を $S_{n,x,g}$ と記述すると、式 (4) は次のように書ける。

$$\frac{k^A - k^B}{k^B} = \sum_n \sum_x \sum_g S_{n,x,g}^B \frac{\sigma_{n,x,g}^A - \sigma_{n,x,g}^B}{\sigma_{n,x,g}^B} = \sum_n \sum_x \sum_g (\Delta k/k)_{n,x,g} \quad (6)$$

ここで、 $(\Delta k/k)_{n,x,g}$ は、核種 n 、反応 x 、エネルギー群 g の核データの差異が k に及ぼす（相対的な）影響を示している。

核データファイル σ^A 、 σ^B の違いがどの程度 k に影響を及ぼすかを定量的に知るためには、中性子輸送計算により k^A と k^B を求め、差をとってやればよい。しかし、このような評価で分かることは $(k^A - k^B)$ のみであり、具体的に、どの核種の、どの反応の、どのあたりのエネルギー領域の核データの差異が影響しているかを知ることはできない。一方、式 (6) に基づいて感度を用いて $(\Delta k/k)_{n,x,g}$ を求めることにより、 k^A と k^B の違いが $\sigma_{n,x,g}$ のどの違いからきているかを定量的に評価することが可能となる。

³厳密に言うと、この計算は近似に過ぎない。式 (3) を正確に書くと、

$$\Delta k = \left(\frac{\partial k}{\partial \sigma} \right) \Delta \sigma + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 k}{\partial \sigma^2} \right) (\Delta \sigma)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{\partial^3 k}{\partial \sigma^3} \right) (\Delta \sigma)^3 + \dots \quad (5)$$

となり、式 (3) はあくまで二次以上の項を落としたものであることが分かる。 $\Delta \sigma$ が小さいときは二次以上の項の影響は無視できると考えられるが、そうでない場合にはこれらの項も影響することになる。

3 感度係数の計算

実効増倍率の核データに対する感度係数を計算する方法としてはいくつか挙げられる。最も単純な方法は、着目した核データをわずかに変動させ、それに対応した実効増倍率の変動量から感度を計算するというものである。これを式で表すと、以下のように書ける。

$$\frac{\partial k}{\partial \sigma_i} = \frac{\Delta k}{\Delta \sigma_i} = \frac{k' - k}{\Delta \sigma_i} \quad (7)$$

ここで、 k' は核データ σ_i に対して変動 $\Delta \sigma_i$ を与えた場合に得られる実効増倍率を示す。原理的にはこの方法で任意の核データに対する感度を計算することが出来るが、核データは核種、反応、エネルギー群に依存しており、取り扱う核種数が N 、反応数が X 、エネルギー群数が G の場合には、計算すべき感度は $(N \times X \times G)$ 個となる。それら全ての核データに対する感度係数を計算するためには k' の計算をその回数行うことになるため、膨大な計算時間が必要となる。

以上の直接的な方法に対して、中性子輸送方程式の随伴方程式の解を用いて感度を計算する方法（摂動論に基づく方法）がある。摂動論の解説については、「炉物理プログラム演習」に「随伴方程式と摂動計算」というものがあり、そこに概要が述べてあるので、まずはそれを参照してもらいたい。

摂動論（一次摂動）では、体系の摂動（微小な変動）による反応度を、摂動が与えられる前の系の中性子束と随伴中性子束から容易に求めることが出来る。 k の感度係数は、式 (7) に示されているように断面積の変動に伴う k の変動から計算できるので、断面積の変動を摂動と見做し、それによる反応度を摂動計算で求めればよい。一次摂動では断面積の変動後の系の中性子束を計算する必要がないので、予め摂動が与えられる前の系（基準系）の中性子束と随伴中性子束を計算しておけば、任意の核データに対する k の感度を摂動計算で求めることができる。

CBZ の中性子輸送（拡散）計算ソルバーの殆ど全てに随伴方程式を解くためのメソッド、中性子束分布、随伴中性子束分布を用いて感度係数を計算するメソッドが実装されている。

4 感度解析の実施例

ここでは、感度解析の実施例として、冒頭に挙げた超小型高速臨界集合体の例を示す。

Jezebel と Jezebel-240 における JENDL-3.3 と ENDF/B-VII との計算値の差異は、感度係数を用いて以下のように核データ毎の差異に分解することが出来る。

Table 1: Jezebel と Jezebel-240 における感度解析結果（ENDF/B-VII 計算値の JENDL-3.3 計算値に対する差異。単位： $\% \Delta k / k k'$ ）

Nuclide	Reaction	Jezebel	Jezebel-240
Pu-239	(n,f)	-0.20	-0.15
	(n, γ)	+0.18	+0.16
	ν	+0.29	+0.24
	$\bar{\mu}$	-0.18	-0.15
	(n,n')	+0.40	+0.35
Pu-240	ν		+0.11
	$\bar{\mu}$		-0.36
	χ		-0.15
	(n,n)		+0.12
	(n,n')		-0.16
Total		+0.44	+0.11

Fig. 1において、Pu-239のみが含まれると考えるとよい Jezebel では、ENDF/B-VII は JENDL-3.3 と比べて 0.3%dk/kk' 程度 C/E 値が大きくなっているが、この主な要因として、Pu-239 の非弾性散乱断面積と核分裂あたりの平均中性子発生数における差異を挙げることができる。なお、Pu-239 の核分裂断面積、平均散乱角余弦については、JENDL-3.3 のほうが k_{eff} を大きく評価するように寄与している。一方、Pu-239 の含有量が小さい Jezebel-240 では、ENDF/B-VII と JENDL-3.3 との Pu-239 核データの差異の影響は Jezebel と比較して小さくなっている。それでも、Jezebel-240 においては、Pu-239 核データの差異は ENDF/B-VII が k_{eff} を大きめに評価するように寄与するが、それに対して Pu-240 核データの差異がそれを相殺する効果となり、正味の核データの差異は小さいものとなっている。

以上では、JENDL-3.3 と ENDF/B-VII の C/E 値の差異について、核種、反応毎に分解した結果を示したが、感度解析では、さらにエネルギー群毎にも分解することが出来る。Jezebel-240 の臨界データに対する、ENDF/B-VII 計算値の JENDL-3.3 計算値に対する差異の要因を、Pu-240 の核データの反応、エネルギー群毎に示したものを Fig. 2 に示す。この図より、どのあたりのエネルギー領域における断面積差異が k_{eff} 計算値に影響しているのかが一目瞭然となる。

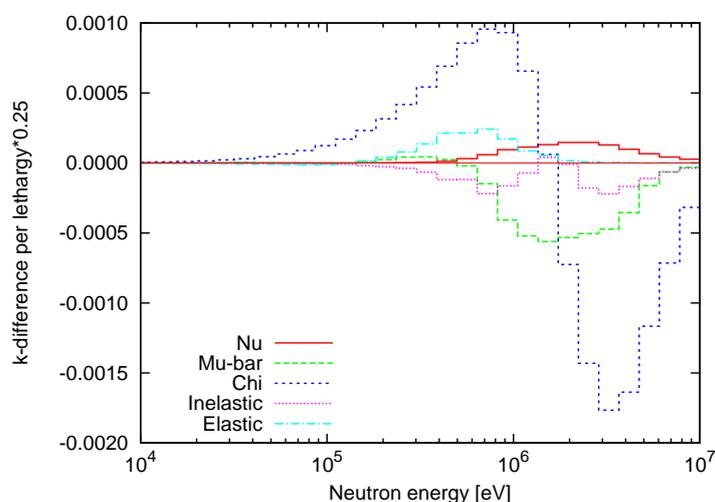


Fig. 2: Jezebel-240 における感度解析結果 (ENDF/B-VII 計算値の JENDL-3.3 計算値に対する差異。Pu-240 の核データ)

また、JENDL-3.3 が大幅な過小評価となっている Flattop-Pu について感度解析を行うと、JENDL-3.3 と ENDF/B-VII の k_{eff} 計算値の差異には U-238 の平均散乱角余弦 $\bar{\mu}$ の差異が大きく影響しているという結果が得られる。U-238 の平均散乱角余弦を Fig. 3 に示すが、全てのエネルギー領域において、JENDL-3.3 の評価値が大きいことが分かる。平均散乱核の余弦の値が大きいということは、散乱角が大きい (散乱の前方性が強い) ということになるため、中性子の体系からの漏れが促進され、 k_{eff} が小さくなる。なお、このような積分テスト、感度解析の結果を受けて、JENDL-4.0 ではこの核データは大幅に見直されている。

5 むすび

核データの積分テストや感度解析というのは、このテキストから分かるように、極めて地味な作業である。しかし、評価済み核データファイルの性能を担保する、そして、核データファイルの性能をさらに向上させるためには必須の作業であり、このような解析技術は非常に重要である。

JENDL-4.0 の開発においては感度解析の技術が有効に活かされた。興味があれば、文献 [1, 2] を読んでみるとよいだろう。

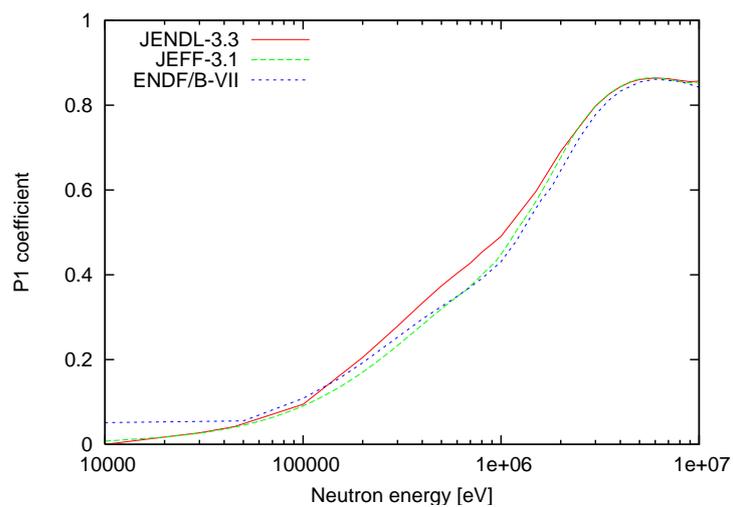


Fig. 3: U-238 の弾性散乱反応における平均散乱角余弦

参考文献

- [1] 千葉豪、他、「高速炉核特性に対する評価済み核データファイルのベンチマークテスト」、JAEA-Research 2007-051 (2007).
- [2] 千葉豪、奥村啓介、「JENDL-4 開発のための評価済み核データファイルのベンチマークテスト」、JAEA-Research 2008-089 (2008).