

部会員の声 (自由投稿)

臨界安全ベンチマークを作る — ICSBEP の活動 —

日本原子力研究開発機構 郡司 智

1. はじめに

臨界安全国際ベンチマークプロジェクト (ICSBEP) をご存知でしょうか。もしかしたら、学生部会員の方々には馴染みがないものかもしれない。しかし、研究活動に何らかの解析計算を使っていることと思う。ICSBEP ハンドブック[1]は世界で過去に行われた臨界実験について、その実験精度を検証し、信用に足る積分実験データとしてまとめられているものであり、新参の計算コードや核データライブラリーの妥当性を示すのに活用されている。例えば、我が国が誇る連続エネルギーコード MVP において JENDL-4.0 公開に合わせてプロセッシングコード LICEM で JENDL-4.0 ライブラリーを作成した報告書[2]では、下記のように記されている。

“完成した JENDL-4.0 ライブラリーと MVP を使用し、国際臨界安全ベンチマーク評価プロジェクトのデータベース (ICSBEP ハンドブック) に収納される約 1,000 ケースの多種多様な臨界実験の解析を行った。得られた中性子増倍率を実験値と比較し、C/E 値を JENDL-4.0 による臨界性予測精度の検証用データとして報告する。”

ICSBEP は経済協力開発機構/原子力機関 (OECD/NEA) の原子力科学委員会 (NSC) 傘下で行われている国際プロジェクトで筆者も参加させていただいている。前記のとおり、計算コード・ライブラリーの妥当性評価に使われ、その計算コード・ライブラリーが許認可にも使われているとなると身が引き締まる思いであるが、いざベンチマーク評価書を作る段となると、各国の臨界実験&計算コードの大家による容赦のないダメ出しコメントに対応しなければならないため、そんなことは忘れてしまうのが常である。

本寄稿では、ほとんどアカデミックな内容ではないが、ベンチマークの裏側についてご紹介したい。ご笑覧ください。

2. ICSBEP の活動

ICSBEP ハンドブックは毎年改訂版が公開されている。最新版は 2021 年 1 月に利用可能となった 2020 年版[1]で、OECD/NEA のホームページに利用目的等を申告することでダウンロードできる。以前は CD や DVD 版も存在したが、容量が大きくなったことと、今や

光学ディスクドライブを装備しないパソコンも増えたので当然の流れであろう。現在ハンドブックは 70,000 ページ超、600 近い評価 (5,000 以上の臨界、臨界近傍、未臨界実験結果からのベンチマーク) が格納されている。これらのベンチマークは(Fissile Material)-(Physical Form)-(Spectrum)-(Three-Digit Numerical Identifier)のような ID で管理されている (図 1 参照)。時に更に短縮形が用いられ、例えば LST といえ、低濃縮ウラン (LEU) の溶液体系 (SOL) の熱中性子スペクトル (THERM) のベンチマークを指す。

Fissile Material		Physical Form		Spectrum	
Plutonium	PU	Metal	MET	Fast	FAST
Highly Enriched Uranium	HEU	Compound	COMP	Intermediate-Energy	INTER
Intermediate Enriched Uranium	IEU	Solution	SOL	Thermal	THERM
Low Enriched Uranium	LEU	Miscellaneous	MISC	Mixed	MIXED
Uranium-233	U233				
Mixed Plutonium - Uranium	MIX				
Special Isotope	SPEC				

図 1 ICSBEP ベンチマークの ID 付与規則

新しいベンチマーク評価を作成する場合、同じ組織あるいは研究グループの内部レビューと独立した他機関による外部レビューを受けた上で、毎年開催されるテクニカルレビュー会合前に事前提出しなければならない。会合では世界各国から集いし 40 名超の精鋭のレビュアーたちを相手に、90 分以上かけて審議される。アジェンダ上は 1 件 90 分であるが、それが 2 時間、3 時間になることも珍しくない。近年、会合は炉物理実験評価プロジェクト (IRPhEP) と共催でパリ近郊 Boulogne-Billancourt の OECD/NEA 本部で 1 週間行われるが、連日 9 時前から 19 時前後まで缶詰である。この間、ほとんど唯一の楽しみは僅かな時間の昼食休憩であり、パリ市内よりは安い値段で食事が楽しめることくらいであろうか。

そのようなレビュー会合も、2020 年は WebEX のオンライン会議システムを使って日本時間の深夜帯 (ヨーロッパでは午後、アメリカでは朝) に行われた。通常はレビューの合間に各国の権威を捕まえて雑談やら相談事をするのだが、オンラインの環境ではそのようなことはなく・・・。また、Chair の John Bess 氏 (INL) の進行で進む通常のレビューでは、評価者に対して直接質問をぶつける、評価者はそれに答える形式であるが、オンライン開催では、そのような通常の質疑応答に加えて WebEX のチャット機能を使って並行してコメントがどんどん付いていく形式であって、被レビュアーは大変な心労であったに違いない。しばらく通常開催はなさそうなので、明日は我が身である。

3. ハンドブック (評価書) の見方

ICSBEP の評価書はフォーマットが定められており[3]、これに基づき作成されている。但し、古い評価はこの限りではないかもしれない。コンテンツの概要を以下に示す。

- 1.0 DETAILED DESCRIPTION
- 2.0 EVALUATION OF EXPERIMENTAL DATA
- 3.0 BENCHMARK SPECIFICATIONS
- 4.0 RESULTS OF SAMPLE CALCULATIONS
- 5.0 REFERENCES
- APPENDICES-

このうち、ICSBEP に収録されている結果を使って妥当性を評価しようという目的で見ている人はほとんどセクション 3 及び 4 と Appendix しか興味がない (=見ていない) と思われる。なぜならば、セクション 3 には各実験体系をベンチマーク用途のために単純化した計算モデル (図 2 参照)、実実験 (詳細体系) との実効増倍率のバイアス、不確かさが示されており (図 3 参照)、つづくセクション 4 には複数の計算コードと核データライブラリーによって計算された実効増倍率及び (C-E) / E 値が示され (図 4 参照)、Appendix にはベンチマークモデルのサンプルインプットが含まれるからである。

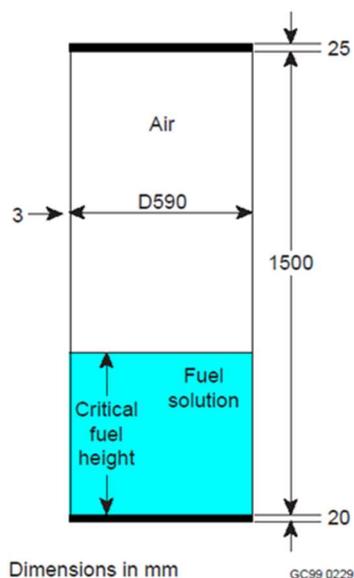


図 2 ベンチマークモデルの例 (LEU-SOL-THERM-007 Figure 5)

LEU-COMP-THERM-074

Table 47. Benchmark k_{eff} and 1σ Uncertainty.

Experiment ID	Case	Experiment k_{eff}	Benchmark k_{eff}	Bias (pcm)	Bias Uncertainty (pcm)	1σ Uncertainty
3034	1	1.0000	0.99963	-37	12	0.0012
3049	2	1.0000	0.99936	-64	21	0.0011
3044	3	1.0000	1.00028	28	9	0.0012
3050	4	1.0000	0.99945	-55	18	0.0011

図 3 セクション 3 における実験及びベンチマーク、バイアス、不確かさの評価 (LEU-COMP-THERM-074 Table 47)

Table 40. Sample Calculation Results.

Code (Cross Section Set) → Case Number ↓	MCNP5 (Continuous Energy ENDF/B-VII.0)	Benchmark Value $k_{eff} \pm \sigma$	(C-E)/E %
C1	0.99994 ± 0.00001	1.0003 ± 0.0008	-0.037 ± 0.080
C3	1.00012 ± 0.00001	1.0003 ± 0.0008	-0.018 ± 0.080
C5	1.00049 ± 0.00001	1.0004 ± 0.0008	0.0089 ± 0.080

図 4 セクション 4 におけるサンプル計算結果 (LEU-COMP-THERM-106 Table 40)

これらのうち図 2 のようなベンチマークモデルと図 4 のようなサンプル計算結果は理解がしやすいと思われる。当然ながらベンチマークモデルが示されるセクション 3 では使うべき原子個数密度等の情報が記述される。

一方で、図 3 に示される情報 (評価書においてはセクション 3.5) は比較的難解かもしれない。基本的に臨界状態での実験の実効増倍率は $k_{eff} = 1$ である。一方、実効増倍率は直接測定できないので、未臨界実験や超過臨界実験では、実効増倍率の評価方法とともにその不確かさが示されなければならない。さて、 $k_{eff} = 1$ とされる「臨界」実験の不確かさであるが、よほどいい加減な実験をしていない限り、これはもうほとんど無視できると言って良いと考える。紙のペンレコーダーに流れていく線形出力計のトレンドを見ながら制御棒や水位を調整した場合でも、十分に時間をかけて臨界判定すれば数セント程度、逆動特性法を利用した原子炉反応度計と操作性の良い反応度制御機構があれば、±1 セント以内で「臨界をとる」ことも普通であろう。 ^{235}U の遅発中性子割合 (β) である 0.0065 を使う

と、1ドルの反応度は $0.65\% \Delta k/k$ に相当するので、1セントであれば $0.000065 \Delta k/k$ である。なので図3に示される実験の k_{eff} は 1.00000 ではなく 1.0000 と記されている。この有効数字は実験者の観点からすれば「まっとうな」標記といえると思う。続くベンチマークモデルの k_{eff} とバイアスは、ある計算コードと核データライブラリーを用いてベンチマークモデルを計算した結果の例であり、実験の k_{eff} とのずれがバイアスとして記されている。これは、ベンチマークモデルが実実験体系から簡素化した部分の合計バイアスであり、ジオメトリの簡素化の効果（例えば炉室や実験支持物の反射・吸収効果が含まれる。これは正確には、実験体系を詳細に再現した詳細モデルと簡素化モデルの差異である。当然ながら詳細モデルの計算結果が $k_{\text{eff}}=1$ となることはない）、考慮しないこととした不純物の効果、温度補正の効果などであり、ベンチマークモデルを作るにあたって評価者がどのように何をどう省いたかがセクション3.1に、それぞれの効果を検証したのがセクション3.2~3.4で述べられている。バイアスの不確かさはケース・バイ・ケースであるが、図3に示される評価では一律 $\pm 30\%$ を採用している。最後に実験の不確かさ (1σ) が右欄に示されている。この評価の詳細はセクション2で述べられるもので、例えば図3におけるケース1では、実験で得られる実効増倍率 $k_{\text{eff}}=1.0000$ に対して、 ± 0.0012 程度の不確かさがあるということを述べている。この不確かさがどこからやってくるのか、それが導かれているのがセクション1とセクション2であり、このセクション1の情報とセクション2の妥当な評価をするのが評価者の仕事としては最も骨が折れるところであったりする。そういう苦労もあるため、ICSBEPで興味があるのはセクション3以降、と言わずにセクション1とセクション2を眺めてみて、評価者の杞憂に思いをはせていただくと、評価者はちょっとだけ浮かばれるかもしれない。

さて、話は核心のセクション1とセクション2である。

セクション1は、評価対象の実験について実測ベースの記述をするところである。ジオメトリ（セクション1.2）、材料（同1.3）、温度（同1.4）などを実測に基づいて記さなければならない。ジオメトリについては、例えば何本ある燃料棒の直径をどういう正確度（Accuracy）の手段で何回どこを測定したか、その結果得られた結果とその精度（Precision）はどうか、ということを書くことが求められる。無論、測定精度は標準偏差であるから測定回数が増えれば上げられるが、対象機器が廃止措置によってもはやこの世に存在しない、なんてことは往々にしてある。原子炉据付時の記録がきつとあるはず、と思って探しに行くと、整理されてしまって見当たらない、散逸している、そもそもあまり重要だと思わず残していない、ホコリまみれになって見つけたはいいけれど、達筆すぎて読めない・・・等々、評価者はまずそこで躓くことになる。設計図面程度しかない、となれば、そこに書かれている数字と工作精度を勘案してエンジニアリングジャッジで不確かさを与える場面も出てくる。ただしこのような扱いをすると、不確かさが大きくなってしまいあまりいいベンチマークにならないことがあるので注意が必要である。また、材料に

ついで言えば、固体燃料の場合にはまだいいが、溶液燃料となると、蒸発その他によりその組成は刻々と変化していく。その中にプルトニウムが含まれれば、価数まで妥当に評価しなければならない。炉心タンクなどの構造物については、材料証明書（或いはミルシート）に記載されている化学成分のwt.%はセクション1に記すことが出来るが、実際に測定されていないものは記載できない。例えば、ステンレス鋼のミルシートがあり、ここから計算のために原子個数密度を作る場合、密度の情報が必要であるが、JIS規格に示される一般的な密度 7.9 g/cm^3 を用いる場合、これは測定値ではないからセクション1に記載してはならない。

そのようにしてひねり出した測定誤差や公差など何らかの土付きの数字をもとに、セクション2ではそれらが実効増倍率に与えるインパクトを評価していく。詳しい評価方法はICSBEPの公開版に添付されている不確かさ評価ガイド[4]を参照されたい。まず、不確かさの種類を見極めなければならない。系統誤差、偶然誤差、・・・その上、不確かさの信頼性、すなわち不確かさの不確かさも検討する必要がある、レビュー会合では親の仇かと思うくらい厳しくチェックする御仁も居られる。評価すべき不確かさがようやく決まると、その不確かさが実効増倍率に与えるインパクトを計算によって評価する。前述したJIS規格の密度なども、考えられうる不確かさを与えて、不確かさ要因ごとにインパクトを評価してそれを積み上げる。こうして積み上がったものが実験の不確かさとしてセクション2の最後にかかれ、同じものがセクション3.5の図3のようなまとめ表にも登場することになる。すべての不確かさ要因がここで網羅されていれば良いが、場合によっては、実験記録に詳細情報が残っていない反射体効果や吸収効果を持つ実験機材（温度計や検出器）が炉心近くに置かれていてその形状や組成を評価者が決めなければならない場合がある。当然ながら不確かさが大きくなるため、あまり良いベンチマークにはならない。セクション4まで進んだときに、セクション2で示した不確かさの範囲に計算結果が入っていないと残念である。実験者には、出来るだけ多くの正確な情報を残していただきたい。

評価者の悲哀はさておき、それぞれ異なる実験条件、例えば高速体系なのか熱体系なのか、固体減速なのか軽水減速なのか、温度は上がるのか上がらないのか、などに着目して一体どのような不確かさが実験精度に寄与するのか、これを理論的に考察しながらいろいろなベンチマークを眺めてみて少しでも中性子の気持ちに近づくことは、実験機会の限られる日本の現状にあって、かつコロナ禍で引きこもりがちな貴方の密かな楽しみになるかもしれない。

4. ベンチマーク評価における最近の傾向

モンテカルロ計算の進化はICSBEPの評価書作成にも及んでいる。例えば、実験用検出器、これは設計図面を用いるか自分で外観を実測するかくらいしかこれまで手段がなかつ

たところ、内部構造に至るまでモンテカルロ法でモデル化してインパクトを評価する、という名目でラジオグラフィを撮るといった評価者まで登場した (図 5 参照)。

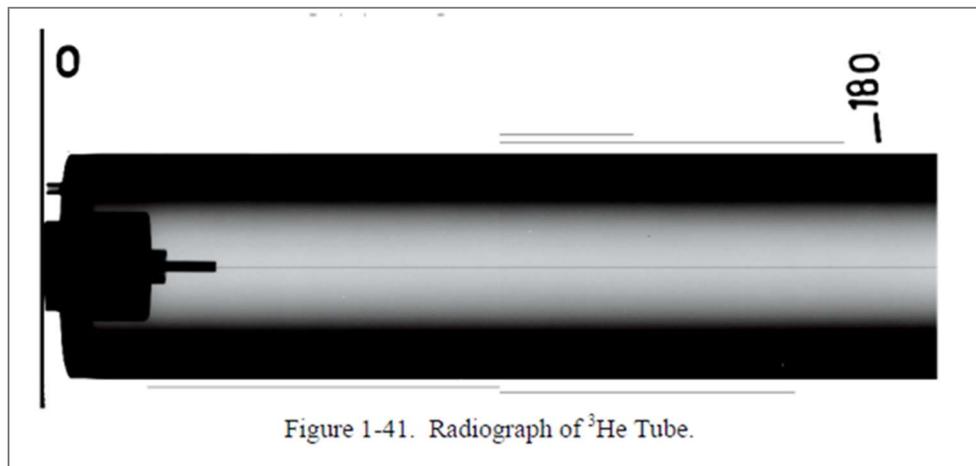


図 5 検出器のラジオグラフィの例
(FUND-LLNL-ALPHAN-HE3-MULT-001 Figure 1-41)

また、不確かさのインパクト評価では、統計誤差が必ずつきまとうモンテカルロ法ではなく、決定論での計算が好まれてきた。なぜならば、不確かさの有無で計算結果の差異を取る場合に何も考えなくて良いからである。これが、モンテカルロ法でやろうとすると、例えば、 $1\sigma \pm 0.00020$ ($= 20 \text{ pcm}$) の計算結果同士を差し引きしようとする、その統計誤差は伝播を考慮して $\pm 28.3 \text{ pcm}$ ($= \sqrt{20^2 + 20^2}$) となり、これ以下の差異は統計誤差に埋もれ、Negligible とせざるを得ない。実際には 20 pcm 程度のインパクトの不確かさが散見されるので、せっかく苦労して評価した不確かさがいざ計算してみると Negligible となるとそれはそれで悲しいものがある。近年は金に計算機資源に物を言わせてロスアラモスのチームなどは 1 バッチあたり 1,000,000 ヒストリの計算を 4,000 バッチ流して統計誤差 ± 0.00001 の評価を出してきたりするので困る。どうしても横並びでレビューを受けるとこちらの計算精度が見劣りしてしまうからである。(で、なにくそと思ってやってみたところ、一時ファイルがデカくなりすぎて計算は逝った)

計算に必要な不可欠な核データライブラリーについても、ACE ファイルを作成するにあたり国産の核データ処理システム FRENDY[5]が使用可能となっている。開発者の労を労うためにも積極的に使用し、表 1 のようにハンドブックに載せていくことを提案していきたいと考えている。

表 1 セクション 4 への記載の例

Case ID	Code Nuclear Data (Data Processing)	Calculated Value k_{eff}
Case 1	MCNP 5.15 JENDL-4.0 (NJOY99.259 + FXJH7)	X.XXXXXX ± X.XXXXXX
Case 1	MCNP 6.1 ENDF/B-VIII.0 (FRENDY 1.03.007)	X.XXXXXX ± X.XXXXXX
Case 1	MVP2.0 ENDF/B-VII.1 (LICEM2010)	X.XXXXXX ± X.XXXXXX

5. まとめ

以上、乱文で申し訳ない限りであるが、評価者側の視点で ICSBEP のベンチマークをご紹介させていただいた。興味を持たれた方は、是非 OECD/NEA のサイトにアクセスしてみていただきたい。日本の主な臨界実験装置も収録されている。以下に一例を示す。

KUCA (B 架台) : LEU-MET-THERM-005
 TCA : MIX-COMP-THERM-004、ほか
 DCA : LEU-COMP-THERM-093
 FCA : IEU-MET-FAST-024
 STACY : LEU-SOL-THERM-008、ほか
 TRACY : LEU-SOL-THERM-012、013

いずれも複数の計算コードによる計算インプットのサンプルが付録に収録されているので、これから計算コードで複雑なインプットを作ってみたいという学生会員の役に立つかもしれない。

また、OECD/NEA/NSC では、ICSBEP ハンドブックのみならずデータベースである DICE や共分散データの整備など、動いている・動きそうなプロジェクトもいくつかあるので興味を持っていただければ幸いである。

参考文献

- [1] OECD/NEA ICSBEP Handbook 2020
https://www.oecd-nea.org/jcms/pl_20291/icsbep-handbook
- [2] 奥村、長家、『JENDL-4.0 に基づく連続エネルギーモンテカルロコード MVP 用の中性子断面積ライブラリーの作成と ICSBEP ハンドブックの臨界性ベンチマーク解析への適用』, 日本原子力研究開発機構, JAEA-Data/Code 2011-010, (2011)
<https://jopss.jaea.go.jp/pdfdata/JAEA-Data-Code-2011-010.pdf>
- [3] ICSBEP Document Content and Format Guide
<https://www.oecd-nea.org/upload/docs/application/pdf/2020-03/nsc-doc-95-03.pdf>
- [4] ICSBEP Guide to the Expression of Uncertainties
https://www.oecd-nea.org/upload/docs/application/pdf/2020-03/icsbep_guide_to_the_expression_of_uncertainties.pdf
- [5] K. Tada, Y. Nagaya, S. Kunieda, K. Suyama, T. Fukahori, "Development and verification of a new nuclear data processing system FRENDY," J. Nucl. Sci. Technol., **54**, pp.806-817 (2017).
<https://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00223131.2017.1309306>