

「シグマ」特別専門委員会、核データ部会、炉物理部会合同セッション

ベンチマーク問題や積分実験を用いた JENDL 及び核計算コードの
V&V の現状と今後の展望

Current Status and Future Perspective of the Verification and Validation (V&V) of JENDL and
Nutronics Calculation Codes by use of the Benchmark Problems and Integral Experiments

(1) 核計算分野における OECD/NEA 国際ベンチマーク

(1) International Benchmarks of OECD/NEA in the field of the Neutronics Calculation

*須山 賢也¹

¹日本原子力研究開発機構

1. 緒言

炉物理・核データ分野では、計算コードによる解析精度の現状把握や入力データである核データの妥当性を確認する事を目的として「ベンチマーク計算」が行われている。多くの人がこの単語を聞いたことがあると思われるが、1970年発刊の「核データニュース」第15号に「ベンチマークについて」という記事があり、「最近、ベンチマークという用語が炉物理研究者の間で使われようになってきている」という記載がある。我が国が NEA データバンクの前身である欧州原子力機関(ENEA)のコンピュータプログラムライブラリ (CPL) と核データ編纂センター (CCDN) に加盟し、国際的な計算コードと核データの流通に関与し始めたのは 1966 年であるので、それから数年後には現在と同様の計算システムの妥当性確認活動が「ベンチマーク」という言葉で代表されるようになった事が窺える。

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) は、その前身の一つである炉物理委員会 (CRP) の頃からベンチマーク計算の実施を活動の柱の一つとしており、現在「国際ベンチマーク」と言うと、NEA/NSC で実施しているベンチマークを指すことが比較的多いと思われる。筆者は NSC の配下にある臨界安全性専門家会合 (WPNCs) 燃焼度クレジット専門家会合 (EGBUC) に長年参加し、そこで実施されるベンチマークの実施状況を見るだけでなく、複数のベンチマークについては運営する立場にあった。本発表では NEA/NSC で実施している炉物理関連のベンチマークの現状や、それらが実際の計算コードの精度評価や開発にどのように役立っているのかの実例を示したい。

2. NEA におけるベンチマーク計算

(1) 燃焼度クレジット臨界安全性専門家会合でのベンチマーク

NEA/CRP 時代から始まる NEA/NSC のベンチマーク計算の歴史は長い。それを俯瞰することはこれまでの炉物理・核データ分野の技術開発の歩みを確認することにも繋がると思われるが、残念ながら NEA/NSC にそういった資料は存在していない。比較的リストが揃っているのは、<https://www.oecd-nea.org/science/wpncs/buc/status.html> に実施されたベンチマークの一覧が掲載されている、「燃焼度クレジット臨界安全性専門家会合 (EGBUC)」における燃焼度クレジットに関係したベンチマークである。1993年に報告書が公刊された、使用済燃料組成を有する単一燃料棒体系での中性子増倍率の確認を目的とした Phase-IA ベンチマークから、2012年に仕様が配布された反応度価値計算の比較を目的とした Phase-VIII ベンチマークまで、15のベンチマークがリストアップされている。これらのリストを見ると、それぞれの時代に関係者がどのような意識をもって研究開発を行っていたかを知ることが出来る。最初に

実施された Phase-I ベンチマークでは、使用済燃料組成を使用したシンプルな臨界計算を実施して燃焼度クレジットの効果を確認する共に、使用済燃料組成を使用した臨界計算結果について計算コード間の比較が行われた。Phase-II ベンチマークでは 1990 年代中頃に問題となっていた使用済燃料の燃焼度分布が反応度に与える影響(端部効果)に着目した評価が行われている。また、Phase-I 及び II ベンチマークでは PWR-UO₂ 燃料を対象にしていたことから、Phase-III ベンチマークでは BWR 燃料を、同じく Phase-IV ベンチマークでは MOX 燃料を対象とした燃焼度クレジットが行われている。また NEA 加盟国の東欧諸国への拡大を反映し、Phase-V 及び Phase-VI ベンチマークでは VVER 燃料を対象としたベンチマークが行われた。その後、使用済燃料の直接処分を視野に入れた超長期冷却後の使用済燃料組成の比較、さらにはサンプルの反応度価値の評価までが、Phase-VII 及び Phase-VIII ベンチマークでそれぞれ実施されている。

EGBUC は 25 年を越える活発な活動を行ってきたが、燃焼度クレジットの導入が欧米各国で進んだ事もあってその活動を閉鎖し、2014 年から使用済燃料の臨界問題全般を扱う「使用済燃料臨界性専門家会合 (EGUNF)」に改組された。EGUNF では、使用済燃料直接処分における臨界安全評価で重要となる SiO₂ の反射体効果や、可燃性毒物として Gd を使用している燃料の臨界性評価に必要な Gd 燃料の燃焼に関するベンチマークを行っている。その他、炉物理に関する専門家会合としては、原子炉システムの科学的課題に関するワーキングパーティー (WPRS) に原子炉物理及び先進原子力システムに関する専門家会合 (EGRPANS) があり、燃焼計算の相互比較を中心としたベンチマークが実施されており、最近では、高温ガス炉の燃料を対象とした燃焼ベンチマークが行われている。このように、NEA の専門家会合では、ある技術的テーマを中心に一連のベンチマークが継続的に行われている状況にある。

(2) BWR 燃料集合体を対象とした燃焼ベンチマークの経験

筆者の関与したベンチマークに、BWR 燃料を対象とした燃焼ベンチマークがある。計算コードの精度評価や機能向上に影響を与えたと思われるので取り上げてみたい。1998 年に原研は BWR 燃料集合体に対する燃焼計算のベンチマーク Phase-IIIB を提案した。このベンチマークは BWR 燃料への燃焼度クレジット適用性を検討する目的で開始された。当時、燃料集合体を対象とした 2 次元あるいは 3 次元の燃焼計算を行えるコードは EGBUC 参加機関(公的研究機関がメイン)ではさほど広く利用されていない状況にあった。多くの参加者が使用する米国の SCALE でさえ多次元燃焼計算が出来ない状況にあって、かなり無理なモデル化をして計算をする参加者もあった。そのため計算結果間の差は非常に大きく、ベンチマーク実施後に重要な問題点を抽出しきれない状況であった。

その後 2011 年の福島事故を受けて BWR 燃料の燃焼計算結果の相互比較が必要となったため、Phase-IIIB ベンチマークを筆者等が最新コードで解析し、Phase-IIIB ベンチマークに参加したコードの中でも正しく多次元燃焼を扱っていると思われるコード群と現在の最新燃焼計算コードの差を把握した。そこで改めて福島事故で発生した燃料デブリの臨界安全評価を視野に入れた最新の BWR 燃料集合体に対する燃焼計算の精度評価の必要性が EGBUC メンバーで共有された。そこで 1F で使用される燃料の仕様をベースとした Phase-IIIC ベンチマークを我が国から提案した。Phase-IIIC ベンチマークは最終的に 30 以上の結果を受けとる大がかりなものとなり、連続エネルギーモンテカルロコードを使用した燃焼計算コードが広く利用されている実態が確認されるとともに、連続エネルギーモンテカルロコードを使用した燃焼計算コードで求めた燃料平均組成を使用することによる反応度評価誤差は、FP を考慮した場合でも 2%以下 (2sigma) であることを評価するなど、Phase-IIIB ベンチマークでは行う事が出来なかった分野までカバーしたベンチマークと

なった。

Phase-IIIB ベンチマークの例が示すように、国際ベンチマークでは時に自分たちの能力を超えた仕様が提示される場合がある。しかし自己の進歩や周囲の技術開発の進展に伴って後年解析が可能となる場合もある。従って、以前行った同様のベンチマークの情報も適切に保存し、我々の技術的進歩を把握する観点でも、定点観測的に過去のベンチマークの再計算を行うことには意義があるものと考えられる。

3. ベンチマーク計算の核計算システムへの反映

(1) 国際ベンチマークの意義

2章で述べた Phase-IIIB 及び Phase-IIIC ベンチマークの例が示すように、次世代に経験を引き継ぐという観点に立てば、考えていたように行われなかったベンチマークでも、次世代の資産として使用される事を念頭にベンチマークの報告書作成に力を注ぐべきであることがわかる。

しかし一方で、NEA のベンチマークの報告書を見ると、どのコードが良くどのコードが悪いという「白黒」が明確に書いていないことに物足りなさを感じる人もおられると思う。NEA で実施している国際ベンチマークは、コードの優劣を決めることを目的としていない。これは国際機関である OECD の考え方と同じであり、お互いが抱える共通の問題とそれらに対するより良い解決策を互いに考え、peer-review を行うことでより良い解決策を目指していくという精神が、その根底に流れていることには注意すべきである。このようなレビューを重ねていくことは、確実に互いの評価につながる。よって、ベンチマーク参加者はできる限り最善の計算値を提出すること、長期に亘ってその委員会に出席して自ら建設的な意見を提示すること、そして得られた結果から最大の成果を抽出する努力をすることが期待される。これは時間のかかる非常に地味な作業ではあるが、国際ベンチマークの醍醐味と意義がこのような研究者間の相互の交流と刺激にもある事は、疑いのない事実である。

このような peer-review の精神がコード開発に与えた影響の例として、Phase-IIIB ベンチマークの後に見られた事例を記しておきたい。Phase-IIIB ベンチマークの現状を見た ORNL の SCALE 開発部隊は、SCALE の多次元燃焼機能の実装の必要性を実感して熱心に取り組み、現在の SCALE の隆盛に繋がっている。拙作の統合化燃焼計算コード SWAT も Phase-IB ベンチマークから活動に参加をしたが、Phase-IIIB ベンチマークで難儀した経験から ORIGEN2 を使った多次元燃焼機能の追求の必要性に目覚め、ORIGEN2 と MVP や MCNP を組み合わせた現在の SWAT4.0 につながった。国際ベンチマークは peer-review の精神があると同時に、お互いのプライドをかけた場でもある。それがコード開発に刺激を与えることは疑いのない事実である。若い研究者にもぜひチャレンジしてもらいたい。

(2) 実験データに基づく国際ベンチマーク

実験値の無い仮想的な問題を対象としたベンチマークは、数値ベンチマークと呼ばれることがある。この場合、初めて実施される場合には予め予測される答えがお互いにわからないことが多いため、ブラインドベンチマークという言い方もされる。計算シミュレーションの分野では近年 Verification and Validation (V&V) (検証と妥当性確認) が一つのキーワードとなっているが、実験値を使用せず計算コードを比較するベンチマークは、それぞれの計算コードが採用した数学モデルや数値計算手法を正しく実装しているか (言い換えればバグなくコーディングされているか) の確認となる Verification に近い活動と言える。計算コードを新たに開発した場合に、これまでに実施された国際ベンチマークの解析を行って従来開発されていたコードとの比較を通じて検証をすることは重要なステップである。

一方で実験値を積極的に使用するベンチマークもある。実験値の解析を行いそれぞれのコードの Validation と同時に他コードとの比較も行うものである。これには高品質な実験データが必須であるが、使用される典型的なデータは「国際臨界安全評価プロジェクト (ICSBEP)」で収集されたデータである。ICSBEP は臨界実験の解析に必要な数多くのデータの妥当性を複数の専門家がレビューした結果を document としてまとめたものであるが、積分テストを通じた Validation を実施する上で欠くことの出来ないデータベースとして使用されている。

ICSBEP を使用する場合に気を付けなければならないことは、例として挙げられているコードの入力データはあくまでも参考として付録されているもので、正しさが保証されているわけではないことである。よって、評価済核データを含む計算システムの精度評価を極限まで追求しようとするれば、そのコード入力データの精査や見直しは必須である。ICSBEP は新規データの登録が一段落し、新しい活動の方向性を探っている時である。ICSBEP の将来を考えれば、それを使用した国際ベンチマークによる計算コードの絶対的な精度評価及び核データへのフィードバックまでを視野に入れ、内蔵データの精査が一つの検討課題となる。

特に、実験データをベンチマークに使用する場合、ベンチマークのスペックを決める際にどの程度の詳細さでデータを与えるか、実験解析として十分なデータを与えているか、そして簡略化したモデルが実験データ解析においてどの程度の誤差を与えるかの事前の検討を十分に行わないと結果の扱いに迷うことがあるため注意が必要である。筆者の例で言えば、上記 EGBUC Phase-IB ベンチマークがこの例に該当する。米国カルバートクリフス炉で照射された燃料を対象とした PIE の解析を題材にした一次元燃焼計算のベンチマークであって、筆者が始めて参加した国際ベンチマークであった。問題の設定が PIE データの解析には不十分であったため実験値と計算値の差が大きく、実験値は参考としてあつかわれ、実験データを使用した意義が不明確になってしまった例であった。ベンチマーク問題を実験ベースで作成する場合、実験値と計算値の差が大きいと計算の妥当性に疑問符が付くこととなる。従ってベンチマークであっても実験の再現性を意識したモデル化をすべきであり、仕様を検討する上で注意すべき項目である。

なお、ICSBEP や NEA の国際ベンチマークに取り上げられたものではないが、Phase-IB ベンチマークと同様に照射後試験データを使って計算コードの精度評価を行ったものに、原研が 1990 年代後半に実施した高浜 3 号炉照射後試験で取得したデータの解析がある。当時は JENDL-3.2 に基づく ORIGEN2 用ライブラリの開発において Validation を目的とした解析が行われたが、後年原子力機構の奥村氏らによって JENDL-4 の開発のための積分テストとして実験解析が行われた。その結果をうけて ^{134}Cs 生成量の過小評価を修正するための ^{133}Cs 断面積の見直しが行われている。また、燃焼度の指標である ^{148}Nd の生成量に影響をもつ ^{147}Nd の中性子捕獲断面積についても、その他の照射後試験の結果も踏まえて見直しが行われている。

この例が示すように、高品質なベンチマークには、高品質な実験データが必要不可欠で、それを適切にベンチマークモデルに落とし込んでいくことが必須となる。計算機の能力向上に伴い計算科学で多くの事が論じられるようになってきたものの、絶対的な精度評価にはやはり高品質な実験データが必須である。炉物理・核データの研究の方向性を考える中で、国際ベンチマークの意義を再確認されるとともに、実験データに求める精度、信頼性についての議論が深まる事を期待したい。

*Kenya Suyama¹

¹Japan Atomic Energy Agency