# テクニカル・コメント

# JENDL-3.3 の共分散データを用いた 軽水炉ドップラー係数不確かさの簡易評価

日本原子力研究開発機構 千葉 豪 chiba.go@jaea.go.jp

#### 1 はじめに

原子炉の温度核特性に対する核データ誤差の伝播計算の理論的枠組みは、1994 年頃に 行われた旧動燃、日立、阪大の共同研究により整備された。その後、(株)ナイスと原 子力機構は、核データファイルに与えられた共鳴パラメータの共分散から自己遮蔽因子 とその温度勾配の共分散を計算する汎用的なコード ERRORF を開発し、JENDL-3.3 に基 づくそれらの共分散を計算した[1, 2, 3]。本検討では、ERRORF コードを用いて軽水炉の ドップラー係数 (Mosteller の提案したベンチマーク問題[4]) に対する核データ誤差の伝 播計算を簡易的に[2, 3]行い、ドップラー係数に対する核データ誤差の程度を把握する。

### 2 Mosteller ベンチマーク問題の計算

軽水炉のドップラー係数に対するベンチマーク問題が LANL の Mosteller により提案されている。この問題では、軽水炉ピンセルにおいて燃料温度を 600K から 900K に増加させた際のドップラー係数が計算対象となっており、UO2燃料、原子炉級 MOX 燃料、兵器級 MOX 燃料の問題が与えられている。また、各々の燃料に対して U-235 濃縮度もしくは Pu 濃度を変化させた組成がいくつか与えられており、それらに対するドップラー係数の依存性も評価対象となっている。

このベンチマーク問題を中性子輸送計算コードシステム CBG により計算した。CBG は 著者が独自に整備しているコードシステムであり、NJOY 等のコードで作成した多群ライ ブラリ(無限希釈断面積、自己遮蔽因子テーブル、熱中性子散乱行列等を含む)を出発 点として、中性子輸送に関する多様な計算(臨界計算、遮蔽計算等)を行うことが可能 である。

核データライブラリとしては JENDL-3.3 を使用し、中性子輸送方程式は衝突確率法に より解いた。Tables 1, 2 に、UO<sub>2</sub> セル及び MOX セルに対するドップラー係数の計算結果 をそれぞれ示す。なお、ドップラー係数 C は以下の式で定義される。

$$C = \rho / \Delta T_{Fuel} = \left(\frac{k_{900K} - k_{600K}}{k_{900K} \cdot k_{600K}}\right) / \Delta T_{Fuel}$$
(1)

Uranium enrichment (wt.%)	Doppler coefficient (pcm/K)
0.711	-4.87
1.6	-3.28
2.4	-2.79
3.1	-2.55
3.9	-2.37
4.5	-2.28
5.0	-2.21

Table 1: Doppler coefficient of UO<sub>2</sub> cell

Table 2: Doppler coefficient of MOX cell

MOX composition	Doppler coefficient (pcm/K)		
$(PuO_2 wt.\%)$	Reactor-recycle	Weapons-grade	
1.0	-3.78	-2.83	
2.0	-3.70	-2.86	
4.0	-3.55	-2.79	
6.0	-3.40	-2.67	
8.0	-3.25		

UO<sub>2</sub> セルの計算結果で、濃縮度の増加に伴いドップラー係数が増加していることが分かるが、これは濃縮度が低いほど実効増倍率の値が小さくなることに由来する(実効増倍率が小さいほど中性子の吸収の影響が大きいためと理解してよいであろう)。Figure 1 に、UO<sub>2</sub> セルでは U-235 濃縮度 0.711wt%、MOX セルでは Pu 濃度 1.0wt%の場合のドップラー反応度をエネルギー群別に示す<sup>1</sup>。UO<sub>2</sub> セルでは 6.67eV、20.9eV といった U-238 の巨大共鳴に対応するエネルギー領域と数十 eV 以上の領域の寄与が大きいこと、MOX セルではそれに加えて Pu-240 の 1.06eV の巨大共鳴の寄与が大きいことが分かる。兵器級 MOX セルのドップラー係数が原子炉級 MOX セルと比較して小さいのは、Pu-239 の純度が高く Pu-240 の含有量が小さいことに起因する。

Figure 2 に、異なる Pu 濃度における原子炉級 MOX セルのドップラー反応度のエネル

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> ベンチマーク問題では高温時で燃料ピンが膨張するモデルとなっているが、この計算は摂動 理論を利用するため、膨張を考慮していない。

ギー群別寄与を示す。Pu 濃度が増加するに従い、3eV 付近の Pu-242 の共鳴の寄与が大き くなり、逆に 1eV 付近の Pu-240 の共鳴の寄与が小さくなることが分かる。



Fig. 1: Energy-wise Doppler reactivity for various fuel cells



Fig. 2: Energy-wise Doppler reactivity for reactor-recycle MOX cell

## 3 ドップラー係数不確かさの簡易評価

今回のドップラー係数の不確かさの評価では、中性子捕獲断面積を介した成分のみを

簡易的に考える。ドップラー反応度は厳密摂動理論を用いて以下の式で記述できる。

$$\rho = \frac{\sum_{g} \left\langle \phi_{g}^{+} \Delta \Sigma_{g} \phi_{g} \right\rangle}{I_{p}}$$
(2)

ここで、gはエネルギー群を、 $\phi^+$ は低温での随伴中性子束を、 $\phi$ は高温での中性子束を それぞれ示し、中括弧は空間に関する積分を示す。 $I_p$ は摂動分母と呼ばれるものである。 捕獲断面積の変動  $\Delta \Sigma_g$ は次のように書ける。

$$\Delta \Sigma_g = \sum_n N^n \Delta \sigma_g^n = \sum_n N^n \left( f_{g,H}^n - f_{g,L}^n \right) \sigma_{g,\infty}^n \tag{3}$$

ここで、n は核種を示し、N は数密度、 $\sigma_{g,\infty}$ は無限希釈断面積、 $f_g$  は自己遮蔽因子をそれ ぞれ示す。自己遮蔽因子の下添字 H、L はそれぞれ高温状態、低温状態を示す。無限希釈 断面積は核種固有の定数である一方、自己遮蔽因子は媒質の状態に依存する変数である。 ここで、自己遮蔽因子が燃料内の位置に依存しないとすると、ドップラー反応度は次の ように書ける。

$$\rho = \frac{\sum_{g} \sum_{n} N^{n} \left( f_{g,H}^{n} - f_{g,L}^{n} \right) \sigma_{g,\infty}^{n} \left\langle \phi_{g}^{+} \phi_{g} \right\rangle}{I_{p}}$$
(4)

ここで、

$$f_{g,H}^{n} \approx f_{g,L}^{n} + \frac{\partial f_{g}^{n}}{\partial T} \Delta T$$
(5)

を仮定し、

$$\alpha_g^n = \frac{\partial f_g^n}{\partial T} \frac{1}{f_g^n} \tag{6}$$

なる量(自己遮蔽因子の温度勾配)を導入すると、ドップラー係数 C=p/AT は、

$$C = \frac{\sum_{g} \sum_{n} N^{n} \alpha_{g}^{n} f_{g,L}^{n} \sigma_{g,\infty}^{n} \left\langle \phi_{g}^{+} \phi_{g} \right\rangle}{I_{p}}$$
(7)

と書くことが出来る。

ドップラー係数に対する核データの誤差伝播計算を行うためには、式(7)分子の各項を 介した影響を考慮しなければならない。中性子束、随伴中性子束を介した成分の計算に は高度な処理が必要であるが、これらの寄与は比較的小さいと予想されることから、こ こではαとfを介した成分のみを考慮することとする。

ドップラー係数 C の $\alpha$ に対する感度  $S_{\alpha}^{C}$  は次のように書ける。

$$S_{\alpha_{g}^{n}}^{C} = \frac{\partial C}{\partial \alpha_{g}^{n}} \cdot \frac{\alpha_{g}^{n}}{C} = \frac{N^{n} \alpha_{g}^{n} f_{g,L}^{n} \sigma_{g,\infty}^{n} \left\langle \phi_{g}^{+} \phi_{g} \right\rangle}{\sum_{g'} \sum_{n'} N^{n'} \alpha_{g'}^{n'} f_{g',L}^{n'} \sigma_{g',\infty}^{n'} \left\langle \phi_{g'}^{+} \phi_{g'} \right\rangle} = \omega_{g,n}$$
(8)

— 59 —

ここで $\omega_{g,n}$ は、ドップラー係数に対する核種n, g群の成分の寄与割合を示す。また、Cのfに対する感度 $S_g^{C}$ も同様に

$$S_{f_g^n}^C = \omega_{g,n} \tag{9}$$

と書ける。

本検討では *ω*<sub>g,n</sub>を摂動計算により求めることとした。MOX 燃料において見られる 1eV 付近の成分については Pu-240 によるもの、3eV 付近の成分については Pu-242 によるもの、 それ以外の成分については U-238 によるものと見なした。

パラメータα、fに対する誤差は ERRORF コードにより計算した<sup>2</sup>。ERRORF コードは、 評価済み核データファイルに与えられている共鳴パラメータの共分散から、任意の背景 断面積におけるα、f の誤差を計算するコードシステムである。自己遮蔽因子の計算には NJOY コードを用いており、中性子束のエネルギースペクトルは Narrow resonance 近似に 基づいて計算する。本検討では、U-238、Pu-240 のα、f の誤差を考慮した。Pu-242 につ いては、共鳴パラメータが Multi-level Breit-Wigner 公式で記述されており、ERRORF は対 応していないため、今回の検討では考慮しなかった。ERRORF による処理では、NJOY の荷重関数オプションは iwt=7 (軽水炉スペクトル)とし、背景断面積は U-238 について は 50 バーン、Pu-240 については 10000 バーンと設定した。

得られた結果を **Tables 3, 4, 5** に示す。なお、ERRORF はα、*f*の相関は計算しないため、 相関はゼロと仮定した。

いずれのケースにおいても、自己遮蔽因子に起因する誤差が、その温度勾配に起因する誤差よりも大きいことが分かった。なお、MOX 燃料のケースでは、U-238 の誤差が支配的であった。

Uranium enrichment	Total	α-	<i>f</i> -	
(wt.%)	uncertainty (%)	induced (%)	induced (%)	
0.711	1.45	0.86	1.17	
1.6	1.50	0.90	1.21	
2.4	1.53	0.92	1.22	
3.1	1.54	0.93	1.22	
3.9	1.54	0.94	1.22	
4.5	1.54	0.94	1.22	
5.0	1.54	0.94	1.22	

Table 3: Uncertainty in Doppler coefficient of UO<sub>2</sub> cell

<sup>2</sup> なお、ここでの「fに対する誤差」は、ある特定の温度、背景断面積における f の誤差を示しており、背景断面積の不確かさ等は含んでいない。

MOX composition	Total	α-	<i>f</i> -
(PuO <sub>2</sub> wt.%)	uncertainty (%)	induced (%)	induced (%)
1.0	1.32	0.84	1.02
2.0	1.27	0.78	0.99
4.0	1.07	0.69	0.81
6.0	1.01	0.65	0.76
8.0	0.97	0.64	0.73

Table 4: Uncertainty in Doppler coefficient of reactor-recycle MOX cell

Table 5: Uncertainty in Doppler coefficient of weapons-grade MOX cell

MOX composition	Total	α-	f-
(PuO <sub>2</sub> wt.%)	uncertainty (%)	induced (%)	induced (%)
1.0	1.55	0.93	1.24
2.0	1.37	0.84	1.09
4.0	1.23	0.77	0.96
6.0	1.16	0.74	0.89



Fig. 3: Standard deviations of self-shielding factor and its temperature gradient of uranium-238

Figure 3 に U-238 の自己遮蔽因子とその温度勾配の標準偏差を示す。この図より、 20.9eV の共鳴が含まれるエネルギー群の自己遮蔽因子の誤差が大きいことが分かる。ド ップラー係数の誤差は、前述のように、各エネルギー群でのこれらの誤差とドップラー 反応度の積を全群で足しあわせて決まる。従って、自己遮蔽因子の誤差に起因するドッ プラー係数の主たる誤差は、20.9eV の共鳴の誤差に由来するものであるということが言

### える。

JENDL-3.3 では、U-238 の Γ, に対する誤差として、6.67eV の共鳴に対して 2.4%、36.7eV の共鳴に対して 4.9%が与えられている一方、20.9eV の共鳴に対しては 19.6%もの大きな 値が与えられている。JENDL-3.3 の共鳴パラメータの共分散の評価では、20eV 毎に区切 られたエネルギーグリッドに対して、平均断面積の誤差として 5%が仮定されて共鳴パラ メータの誤差が決定された[5]。従って、20.9eV の共鳴はグリッド境界で分割されたが、 各エネルギーグリッド平均断面積の誤差の相関はゼロと仮定されたため、結果的に 20.9eV の共鳴パラメータの誤差を大きく見積もることとなった(小さくならなかった) と考えられる。JENDL-3.3 の共分散は高速炉への適用を想定して評価されたものであり、 それを軽水炉に適用することは妥当ではないと言える。今後、共鳴パラメータの共分散 を評価する際には、軽水炉への適用も視野に入れる必要があろう。

### 4 おわりに

JENDL-3.3の共分散データを用いて、自己遮蔽因子とその温度勾配の不確かさに起因する軽水炉ピンセルのドップラー係数の不確かさを簡易的に評価した。

UO<sub>2</sub>セル、MOX セルにおけるドップラー係数の誤差は 1%前後と評価され、U-238 の 20.9eV における共鳴の誤差が主要因であることが分かった。この共鳴の誤差はその近傍 の共鳴の誤差と比較して大きく、その原因が共鳴パラメータ共分散の評価方法にあるこ とを指摘した。

今回は簡易的な方法で誤差評価を行ったが、より詳細に行うためには、(1)中性子束、 随伴中性子束を介した誤差伝播を考慮する、(2)自己遮蔽因子とその温度勾配の相関を考 慮する、(3) ERRORF/NJOY において Flux calculator により中性子束エネルギースペクトル を計算する、等が挙げられる。

#### 参考文献

- N. Otuka, *et al.*, "ERRORF A Code to Calculate Covariance of Self-shielding Factor and Its Temperature Gradient," JAEA-Data/Code 2008-012, (2008).
- [2] N. Otuka, *et al.*, "Covariance Analyses of Self-shielding Factor and its Temperature Gradient for Uranium-238 Neutron Capture Reaction," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **45**[3], p.195, (2008).
- [3] A. Zukeran, *et al.*, "Covariances of Resonance Self-Shielding Factor and its Temperature Gradient for Uncertainty Evaluation of Doppler Reactivity," JAEA-Research 2008-091, (2008).
- [4] R. D. Mosteller, "The Doppler-defect Benchmark: Overview and Summary of Results," *Proc.* of M&C+SNA 2007, Monterey, California, (2007).
- [5] T. Kawano, K. Shibata, "Evaluation of Covariances for Resolved Resonance Parameters of <sup>235</sup>U, <sup>238</sup>U, and <sup>239</sup>Pu in JENDL-3.2," JAERI-Research 2003-001, (2003).