

JAERI-Data/Code

97-037



共分散評価システム

1997年9月

河野俊彦\*・柴田恵一

日本原子力研究所  
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。  
入手の問合わせは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-11 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越しください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1997

編集兼発行 日本原子力研究所  
印 刷 いばらき印刷(株)

共分散評価システム

日本原子力研究所東海研究所原子炉工学部

河野 俊彦\*・柴田 恵一

(1997年8月12日受理)

評価済み核データライブラリの共分散データを作成するシステムを構築した。共分散評価は、パラメータ推定法によるものと、スプラインを用いた最小二乗法で行なわれる。パラメータ推定法では、核反応模型計算のパラメータの誤差を実験データの誤差から計算し、パラメータから断面積計算値への誤差の伝播を計算することで、評価断面積の共分散を算出する。断面積計算コードには、ELIESE-3、BGNASH4、ECIS、CASTHYが使用される。このシステムを用いて $^{238}\text{U}$ 断面積共分散を評価した。

Covariance Evaluation System

Toshihiko KAWANO\* and Keiichi SHIBATA

Department of Reactor Engineering  
Tokai Research Establishment  
Japan Atomic Energy Research Institute  
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received August 12, 1997)

A covariance evaluation system for the evaluated nuclear data library was established. The parameter estimation method and the least squares method with a spline function are used to generate the covariance data. Uncertainties of nuclear reaction model parameters are estimated from experimental data uncertainties, then the covariance of the evaluated cross sections is calculated by means of error propagation. Computer programs ELIESE-3, EGNASH4, ECIS, and CASTHY are used. Covariances of  $^{238}\text{U}$  reaction cross sections were calculated with this system.

Keywords: Covariance, Uncertainty,  $^{238}\text{U}$

---

\* Kyushu University

## 目 次

1. 序 論 .....	1
2. 共分散算出法 .....	3
2.1 最小二乗法による共分散の算出法 .....	3
2.2 パラメータ推定法による共分散の算出法 .....	5
3. パラメータ推定法の核反応模型計算への応用 .....	9
3.1 感度係数 .....	9
3.2 光学模型 .....	9
3.3 統計模型 .....	10
3.4 前平衡過程 .....	12
4. 共分散評価システム .....	13
4.1 共分散評価システムの概略 .....	13
4.2 実験データの共分散 .....	13
4.3 最小二乗法を使った共分散評価 .....	15
4.4 パラメータ推定法を使った共分散評価 .....	16
5. <sup>238</sup> U断面積共分散の評価 .....	33
5.1 (n, 2n) 反応断面積共分散 .....	33
5.2 (n, 3n) 反応断面積共分散 .....	33
5.3 全断面積共分散 .....	33
5.4 非弾性散乱断面積共分散 .....	34
5.5 放射捕獲断面積共分散 .....	35
6. 結 論 .....	36
謝 辞 .....	36
参考文献 .....	37

## Contents

1. Introduction .....	1
2. Covariance Calculation Method .....	3
2.1 Covariance Calculation with the Least Squares Method .....	3
2.2 Covariance Calculation with the Parameter Estimation Method .....	5
3. Application of the Parameter Estimation Method to the Nuclear Reaction Models .....	9
3.1 Sensitivity .....	9
3.2 Optical Model .....	9
3.3 Statistical Model .....	10
3.4 Pre-compound Process .....	12
4. Covariance Evaluation System .....	13
4.1 Overview of the Covariance Evaluation System .....	13
4.2 Covariance of Experimental Data .....	13
4.3 Covariance Evaluation with the Least Squares Method .....	15
4.4 Covariance Evaluation with the Parameter Estimation Method .....	16
5. Evaluation of Covariances for $^{238}\text{U}$ Cross Sections .....	33
5.1 Covariance of (n,2n) Reaction Cross Section .....	33
5.2 Covariance of (n,3n) Reaction Cross Section .....	33
5.3 Covariance of Total Cross Section .....	33
5.4 Covariance of Inelastic Scattering Cross Section .....	34
5.5 Covariance of Radiative Capture Cross Section .....	35
6. Conclusion .....	36
Acknowledgment .....	36
References .....	37

## 1 序論

世界の主要な評価済み核データライブラリ — JENDL, ENDF, JEF, BROND, CENDL — は現在までに幾度か改訂され、そのうちのいくつかは積分テストやその他のベンチマークテストによって、実用上十分な精度を持っていると評価されている。今後、核データライブラリの更なる精度向上には、断面積データの値そのものだけではなく、評価値の精度、すなわち共分散を明らかにすることが不可欠であり、共分散データをライブラリに格納することを目的にしていかなければならない。

共分散データの重要性については国際的な合意が得られているが、実際に共分散を評価核データライブラリに与える統一的な評価手法が確立されているとは言い難く、多くの困難な点が残されている。そのため、現在ライブラリに共分散を与えているのは ENDF-B/VI に含まれる一部の核種のみであり、日本の評価済み核データライブラリである JENDL-3.2 には共分散ファイルが含まれておらず、評価手法の確立と実際の共分散データの作成が急がれている。

共分散データを特に必要としているのは、原子炉炉心設計や遮蔽設計に使われる核データである。熱中性子炉や高速増殖炉の炉心設計では、評価済み核データを用いて計算される臨界性や制御棒値等の核特性を評価するとともにその予測精度を定量的に評価して、安全基準・性能確保の観点から設計が成立するかどうか判断される。核融合炉や高速増殖炉の核設計・遮蔽設計に要求される核データは、その主要構造材であるステンレス鋼などの構成元素である中重核の MeV 領域での各種の反応断面積であり、このような核データは、中性子の重照射を受ける炉材料の放射化・核発熱・照射損傷を予測する上で重要である。従って、それらのデータに共分散を与えることは、この予測値の精度を与えることになる。また高速中性子 dosimetry で unfolding を行うには、dosimeter の断面積とともに共分散データが必要となる。

一般的な共分散算出方法は、実験データの誤差・共分散から評価済み核データへの誤差の伝播を詳細に追っていくことである。実験データの共分散を与えることができるのは実験者のみであるが、文献に記載された実験条件を詳細に調べることで、ある程度評価者が判断できる可能性はある。一方、要求されている共分散データは、既存の核データライブラリのものである。既存のライブラリに共分散を与えようとするれば、評価の手順を追って誤差の伝播を計算する必要があり、多くの労力を必要とする。さらに、評価手順が完全に記録されているわけではないので、そのような失われた情報に対して誤差の伝播を求めることは不可能である。そのため、すでに評価された核データに対して共分散を与える、何らかの方法を考える必要が生じてきた。

Wien 大学の Vonach のグループ [1] は、評価値の誤差とエネルギー点間の相関係数を独立に与えて、共分散行列を作る簡便な方法を提案している。また ORNL の Hetrick ら [2] は、断面積評価値の大きさに応じて、ある基準を設けて誤差を与える、という方法を提案している。いずれの方法も、現在ある評価核データライブラリに対して効率よく共分散データを与えられるという利点がある。しかし、共分散が本来、実験データの測定法や、その評価の手法によって生じるものであることを考えると、これらの方法で得られる共分散を合理的なものであるとする根拠はない。

断面積評価に於いては、その対象が核反応断面積という測定できるものであるのに対して、共分散データの評価では、対象とするものは誤差の情報であり、測定できる量ではない。同じ断面積測定値に基づいた評価で、評価値がほとんど変わらない2つの評価があっても、その評価方法が違えば共分散データは異なったものになる。このことは、共分散が物理量でなく誤差の情報であるということを考えれば当然なのであるが、通常断面積評価では考えにくい為、共分散算出のいくつかの提案に対しても、多くは合理的な判断を下せない状況にある。

JENDL-3.2 の共分散評価手法に対しては、統一的な手法や判断基準の合意が完全に得られ

ているわけではないが、とりうる戦略がある程度まとまっている段階にある。その一つは、実験データの誤差を統計誤差と系統誤差に分け、GMA コードを使って共分散を算出する方法である。もう一つは、核反応模型を用いるものである。この方法では、核反応模型の模型パラメータを Bayes 推定を用いて推定し、その誤差を実験値から求めて、共分散を算出する。実験データには統計誤差・系統誤差を考慮するが、GMA で得られる共分散とは違い、実験データに系統誤差が与えられていなくても、核反応模型のパラメータ依存性を使って評価値の相関係数を得ることができる。

JENDL-3.2 の核データ評価に用いられた核反応模型は、光学模型やチャンネル結合理論、DWBA 等の直接過程の断面積を計算するもの、複合核過程を計算する Hauser-Feshbach 統計模型や前平衡過程の補正を考慮した多段階 Hauser-Feshbach 統計模型、などがある。光学模型は全断面積の評価に広く用いられ、Hauser-Feshbach 統計模型は中性子・陽子・ $\alpha$ 粒子放出反応断面積とそれらのエネルギースペクトル、 $\gamma$ 線生成断面積の評価に用いられる。このような核反応模型を用いて核データ評価を行った場合、評価値は実験値に対して最適な模型パラメータを推定することで得られる。またこの評価値の共分散行列は、模型パラメータの変動に対する計算値の変動を表す偏微分係数(感度)を媒介とする実験値から模型パラメータへの誤差の伝播を求め、さらに、パラメータの誤差が評価値の誤差に伝播することを利用して作成するものである。

本報告は、これらの共分散評価手法を実際に JENDL-3.2 の $^{238}\text{U}$  評価に応用して評価核データの共分散を算出するとともに、理論的な側面だけでなく実践的な面から、今後 JENDL の共分散評価を評価者が統一的な基盤を持って行えるように、実際面でのアプローチを試みるものである。そのために、JENDL-3.2 の評価者が各自の評価核データに対して効率よく共分散評価を行えるように、共分散評価システムを構築し、その利用について報告する。



## 2 共分散算出法

### 2.1 最小二乗法による共分散の算出法

評価済み核データの共分散（誤差）を考えるには、実験データや模型計算、評価手法の不確かさを定量的に評価しなければならない。その基礎となるのは、よく知られた最小二乗法である。

測定データを  $n$ -次元のベクトル  $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^t$  で表す。この測定値を表現する関数  $y = f(x)$  が与えられているなら、 $\mathbf{y}$  は関数  $f(x)$  のパラメータのベクトル  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m)^t$  と、次式で関連づけられる。

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ f_n(\mathbf{x}) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{e} \quad (1)$$

ここで  $\mathbf{e} = (e_1, e_2, \dots, e_n)^t$  は測定値の誤差ベクトルであり、測定値  $y_i$  の分散  $\sigma_i^2$  は  $e_i^2$  の期待値  $E[e_i^2]$  である。また、測定値の共分散  $V$  は、 $\sigma_{ij} = E[e_i e_j]$  の要素を持つ。最小二乗法は、残差二乗和  $S = \sum_{i=1}^n \{f_i(\mathbf{x}) - y_i\}^2$  を最小にするパラメータの組  $\mathbf{x}$  を求めるものであり、これは  $\partial S / \partial \mathbf{x} = 0$  を解くことで与えられる。 $f(x)$  が  $\mathbf{x}$  に関して非線形なら、これは非線形連立方程式となる。

いま、簡単のために関数  $f(x)$  が  $\mathbf{x}$  に関して線形である場合を考える。このとき、Eq.(1) は行列  $C$  を使って、次のように書き直すことができる。

$$\mathbf{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & \cdots & c_{1m} \\ \vdots & & \vdots \\ c_{n1} & \cdots & c_{nm} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_1 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} = \mathbf{C}\mathbf{x} + \mathbf{e} \quad (2)$$

$C$  は計画行列と呼ばれる。この場合、残差二乗和を最小にする最小二乗解  $\hat{\mathbf{x}}$  は解析的に求められ、 $V$  の逆行列をデータの重みとすると、

$$\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{X}\mathbf{C}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{y} \quad (3)$$

$$\mathbf{X} = (\mathbf{C}^t\mathbf{V}^{-1}\mathbf{C})^{-1} \quad (4)$$

となる。 $\mathbf{X}$  はパラメータの共分散行列であり、Eq.(4) は測定値の共分散  $V$  からパラメータへの誤差の伝播を表している。

最小二乗法の解を得るには、測定データのそれぞれの相対的な重みだけが分かればよい。逆に言うと、相対的な重みから得られる  $\hat{\mathbf{x}}$  の共分散  $\mathbf{X}$  は、定数倍だけ不定ということになる。一般にこの係数は、次の自由度あたりの  $\chi^2$  で与えられる。

$$\chi^2 = \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{C}\hat{\mathbf{x}})^t \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{C}\hat{\mathbf{x}})}{n - m} \quad (5)$$

関数  $f(x)$  が非線形の場合は、 $f(x)$  をパラメータの初期値  $\mathbf{x}_0$  の近傍で 1 次の Taylor 展開し、線形化する。

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) \cong \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) + \mathbf{C}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \quad (6)$$

ここで行列  $C$  は感度行列であり、

$$\mathbf{C} = \left\{ c_{ij} \mid c_{ij} = \left( \frac{\partial f_i(\mathbf{x})}{\partial x_j} \right)_{\mathbf{x}=\mathbf{x}_0}, \quad 1 \leq i \leq n, \quad 1 \leq j \leq m \right\} \quad (7)$$

で与えられる。線形化された関数に対する最小二乗解は、Eq.(3) で与えられる。非線形関数の場合は、パラメータに対して関数が非線形であるため、C が  $x$  の関数となる。  $f(x)$  と測定データの残差二乗和を最小にする解は、数値解法を用いて反復計算により求めることができる。

Eq.(1) のパラメータ  $x$  は、どのようなものをとってもかまわない。核データ評価に最小二乗法を導入する際に最も単純な例は、  $x$  が評価値そのものである場合である。すなわち、  $x = (\sigma(E_1), \sigma(E_2), \dots, \sigma(E_m))^t$  であり、このとき最小二乗法によってあたえられる共分散  $X$  は、そのまま評価値の共分散となる。この  $X$  は、評価値として断面積を代表する“直線”、“曲線”、あるいは“離散的な値”が持つ解析的な性質によって特徴づけられる。例えば、相関をもつデータのあるエネルギー区間で平均して、そのエネルギー区間内の評価値とすることができる。これには、Eq.(2) の行列  $C$  を以下のようにとればよい。

$$c_{ij} = \begin{cases} 1.0 & E_{j-1} \leq \varepsilon_i < (E_{j-1} + E_j)/2 \\ 1.0 & (E_j + E_{j+1})/2 \leq \varepsilon_i < E_j \\ 0 & \text{Otherwise} \end{cases} \quad (8)$$

ここで  $\varepsilon_i$  は  $i$  番目の測定値のエネルギーである。このような評価方法では、評価値は離散的な値で代表されることになり、異なったエネルギー点間での値は互いに独立であるという解析的な性質のため、評価される測定データに相関が無い場合は、評価点での誤差の大きさしか与えられない。測定データに相関がある場合は、評価された断面積のエネルギー点での誤差の間に相関のあるものになる。この関係を Fig.1 に示す。評価値に相関が無い場合、新たな測定データが得られ、評価値が Fig.1 の実線から点線に変化した場合でも、異なるエネルギー点間に相関が無いので、他の区間への影響は無い。

断面積の評価値を直線や曲線で代表する場合は、実験データの誤差の相関の有無に関わらず、評価された値の間に相関が生じる。これは、用いた直線・曲線の解析的な性質に基づくものである。最も単純な例として、評価値が直線と与えられる場合を考える。この場合は、パラメータ  $x$  は直線  $\sigma(E) = x_0 + x_1 E$  の  $(x_0, x_1)^t$  である。Eq.(2) の右辺は次のように書ける。

$$Cx + e = \begin{pmatrix} 1 & E_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & E_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} e_0 \\ \vdots \\ e_n \end{pmatrix} \quad (9)$$

あるエネルギー領域に実験値が存在し、そのデータに対して最小二乗フィッティングを施したとき、得られた直線は実験値の存在するエネルギー領域で、その実験値の測定精度程度の不確かさを持つ。そして、実験値を参照しなかったエネルギー領域では、その不確かさは、より大きいものとなる。評価核データの誤差は、このように決定される。さらに、直線がエネルギー領域内で実験値を代表することを保証するためには、そのエネルギー領域の外側での誤差の相関係数は、負でなくてはならない。この関係を Fig.2 に概念的に示す。

核データ評価でしばしば利用されるフィッティング関数は B-Spline である。通常、B-Spline 関数というと 3 次のをさすが、高次のスプラインは節点の設定に応じて結果が左右されて扱いにくいので、1 次のもが使われる。これは、節点 (= 評価点) の間を直線補間するものである。区間平均は 0 次の B-Spline に相当する。Eq.(2) の  $C$  を以下のようにとると、Eq.(2) は 1 次の B-Spline となる。

$$c_{ij} = \begin{cases} (\varepsilon_i - E_{j-1})/(E_j - E_{j-1}) & E_{j-1} \leq \varepsilon_i < E_j \\ (\varepsilon_i - E_{j+1})/(E_j - E_{j+1}) & E_j \leq \varepsilon_i < E_{j+1} \\ 0 & \text{Otherwise} \end{cases} \quad (10)$$

B-Splineで得られる共分散は、特徴的なものとなる。スプラインの節点と節点の間は直線の断片であり、ここでの特徴はさきに述べた直線による評価と同様のものとなる。すなわち、線分の中心に支点を持ったシーソーのような性質を持つため、線分の両端の間では負の相関を持つ。この小さなシーソーが連結している、という関数の特徴により、B-Splineを使って得られる共分散の相関係数は、互いに隣合う評価点の間の符号が異なっている。この様子を Fig.3 に示す。

このように、最小二乗法によって生じる共分散は、実験データ間に相関がない場合でも、評価値間にフィッティング関数の解析的性質に強く依存した相関が生じる。従って、評価核データの共分散行列を作成するには、実験データの共分散と、実験値に対して適切なフィッティング関数を選択することが問題となる。実験データの共分散は、実験者が与えている場合はそれを利用できるが、多くの場合、誤差のみしか与えられていないので、系統誤差を生じる項目については、評価者が文献などから推定し、与える必要がある。

## 2.2 パラメータ推定法による共分散の算出法

評価値の共分散をカーブフィッティングによって算出する場合、得られる共分散はそのフィッティング関数の解析的な性質に強く依存するため、適切なフィッティング関数が必要である。核データ評価を行う上で最も妥当なフィッティング関数は、核反応模型計算である。核反応模型計算によって、実験値が得られないエネルギー領域や核反応の種類についても物理的な根拠を失うことなく、断面データを外挿することができる。

模型計算を実験値にあてはめる場合、その模型が持つ模型パラメータは、実験値の誤差の大きさに応じてその精度が決定される。その結果、模型計算による評価値は誤差を持ち、模型パラメータが複数のエネルギー点・複数の反応間での計算に共通に使用され、模型パラメータの誤差が伝播することから、異なるエネルギー点間に相関が生じ、評価値の共分散行列が与えられる。

核反応模型パラメータは多くの場合、真値が不明であるため、パラメータを確率変数として、ある分布を考えることができる。パラメータが初期の分布（事前分布）を持っている場合、最小二乗法を一般化して応用することができる。通常、最小二乗法は、一般化された最小二乗法でのパラメータの事前誤差が無限大である極限に相当する。

核反応模型のパラメータを最適化することで核データ評価を行う場合、核反応模型計算が模型パラメータに関して非線形関数であることから、非線形関数の実験値へのあてはめを行わなければならない。この模型パラメータをベクトル  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_m)^t$  で表す。核反応模型計算は、パラメータ  $\mathbf{x}$  が与えられたとき、 $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = (f_1(\mathbf{x}), f_2(\mathbf{x}), \dots, f_n(\mathbf{x}))^t$  で計算されるとする。ここで、 $n$  は評価の判断基準とする実験データ  $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)^t$  の点数である。

ある核反応の断面を与える核反応模型は、そのパラメータを確率変数として取り扱うことにより、データ発生モデルと見なすことができる [3]。このデータ発生モデルはパラメータが与えられたときのデータ  $\mathbf{y}$  の振る舞いを記述し、確率密度関数  $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$  で表される。

パラメータのベクトル  $\mathbf{x}$  に関して *a priori* に持つ知識は理論的な考察や他の実験などによって与えられる。この事前の知識は、パラメータの事前分布の確率密度関数  $p(\mathbf{x}_0)$  で表すことができる。ここで  $\mathbf{x}_0$  は事前パラメータのベクトルである。事後分布の確率密度関数  $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  は、新たな実験によって得られた知識を反映している。Bayes の定理より、 $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  は次式によって与えられる。

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{x})p(\mathbf{x})}{p(\mathbf{y})} \quad (11)$$

ここで  $p(\mathbf{y})$  は周辺確率密度関数と呼ばれ、

$$p(\mathbf{y}) = \int_{R^m} p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) p(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \quad (12)$$

で計算される。

実験データ  $\mathbf{y}$  とデータ発生モデル  $f(\mathbf{x})$  は  $\mathbf{y} = f(\mathbf{x}) + \mathbf{e}$  で関連付けられている。誤差ベクトル  $\mathbf{e}$  に  $n$ -次元の正規分布を仮定すると、データ発生モデルの確率密度関数  $p(\mathbf{y}|\mathbf{x})$  は次式のようになる。

$$p(\mathbf{y}|\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^n |\mathbf{V}|}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{y} - f(\mathbf{x}))^t \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{y} - f(\mathbf{x})) \right\} \quad (13)$$

パラメータのベクトル  $\mathbf{x}$  に対しても、 $m$ -次元の正規分布を仮定する。但し、 $\langle \mathbf{x} \rangle = \mathbf{x}_0$ ,  $\langle (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0), (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^t \rangle = \mathbf{X}$  である。事前パラメータの分布は次式のようになる。

$$p(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^m |\mathbf{X}|}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)^t \mathbf{X}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_0) \right\} \quad (14)$$

Eq.(13), Eq.(14) を Eq.(11) に代入してパラメータの事後分布を計算すれば、実験値の共分散  $\mathbf{V}$  とパラメータの事前共分散  $\mathbf{X}$  からの、事後パラメータへの誤差の伝播が計算される。このために、データ発生モデル  $f(\mathbf{x})$  を、Eq.(6) のようにパラメータの事前値  $\mathbf{x}_0$  の近傍で 1 次の Taylor 展開し、線形化する。感度行列  $\mathbf{C}$  は、Eq.(7) で与えられる。

線形化されたデータ発生モデルと Bayes の定理を用いて、パラメータの事後分布は次式のようになる。

$$p(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^m |\mathbf{P}|}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_1)^t \mathbf{P}^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_1) \right\} \quad (15)$$

ここで、

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &= \mathbf{x}_0 + \mathbf{P} \mathbf{C}^t \mathbf{V}^{-1} (\mathbf{y} - f(\mathbf{x}_0)) \\ &= \mathbf{x}_0 + \mathbf{X} \mathbf{C}^t (\mathbf{C} \mathbf{X} \mathbf{C}^t + \mathbf{V})^{-1} (\mathbf{y} - f(\mathbf{x}_0)) \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= (\mathbf{X}^{-1} + \mathbf{C}^t \mathbf{V}^{-1} \mathbf{C})^{-1} \\ &= \mathbf{X} - \mathbf{X} \mathbf{C}^t (\mathbf{C} \mathbf{X} \mathbf{C}^t + \mathbf{V})^{-1} \mathbf{C} \mathbf{X} \end{aligned} \quad (17)$$

である。

このパラメータの事後分布  $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  を最大にするパラメータを推定値として採用する。Eq.(15) から、 $p(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  は  $\mathbf{x} = \mathbf{x}_1$  で最大値をとる。この  $\mathbf{x}_1$  を事後パラメータと言い、行列  $\mathbf{P}$  を  $\mathbf{x}_1$  の事後共分散と言う。この事後共分散は、 $\mathbf{P} = (\mathbf{X}^{-1} + \mathbf{C}^t \mathbf{V}^{-1} \mathbf{C})^{-1}$  と書けることから分かるように、事前共分散  $\mathbf{X}$  と実験値の共分散  $\mathbf{V}$  の、事後パラメータの誤差への伝播を表している。事前共分散  $\mathbf{X}$  に非対角成分が無い場合、事前パラメータの誤差が無限大であれば、 $\mathbf{X}^{-1} = \emptyset$  であるから、 $\mathbf{P}$  は Eq.(4) の最小二乗法のパラメータの共分散に一致する。

パラメータのベクトル  $\mathbf{x}$  は、核反応模型計算を行う上で必要な模型パラメータである。それらに対する模型計算は非線形であるため、Eq.(6) のように線形化を行なった。そのため、推定されたパラメータ  $\mathbf{x}_1$  を用いた模型計算  $f(\mathbf{x}_1)$  は、

$$\chi^2 = \{\mathbf{y} - f(\mathbf{x}_1)\}^t \mathbf{V}^{-1} \{\mathbf{y} - f(\mathbf{x}_1)\} + \{\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\}^t \mathbf{X}^{-1} \{\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\} \quad (18)$$

を最小にしない。これは、模型計算の非線形性のためである。一方、模型を線形とし、

$$f(x) = f(x_0) + C(x - x_0) \quad (19)$$

で表した場合、 $x_1$ はEq.(18)の $\chi^2$ を最小にする。ここで、ある事前パラメータによる計算値 $f(x_0)$ は定数のベクトルであり、 $c_{ij}$ も定数の係数である。従って、Eq.(19)はスプライン関数と見ることができる。つまり、この線形関数であるEq.(19)が実験データを再現する線であることを表している。このスプラインのパラメータは核反応模型パラメータであるが、スプライン関数を特徴づけるパラメータと見することもできる。

Eq.(16), Eq.(17)を模型パラメータ推定として見る場合、パラメータは一意的値を持つ量であり、その変動範囲は制限される。パラメータの変動は、パラメータの事前値の誤差を小さくすることで制限される。これは、実験値よりパラメータに対する先験的な知識を優先することを表している。この結果、パラメータがモデルの前提条件に反する値に推定されることは避けられるが、事後パラメータが持つ実験誤差の情報は、相対的に小さくなる。

パラメータ推定法を共分散算出に重点を置いて用いるには、このようなパラメータの事前共分散による制限を少なくし、実験値誤差のパラメータへの誤差の伝播のみを求める方がよい。そこで、評価値として事後パラメータでの計算値を採用するのではなく、模型計算が完全に線形であると仮定して、Eq.(19)のスプライン関数を採用する。模型計算による評価値の物理的な裏付けは、感度行列を使用することである程度は得られる。模型パラメータは、単にスプラインを特徴づけるパラメータとみなし、実験データを再現するような評価値を得るため、事前パラメータの誤差は大きくとる。誤差を無限大にしたときは最小二乗法の共分散と同じものが得られる。実験値の誤差と比較して十分大きな事前パラメータの誤差を与えれば、フィッティング関数としてEq.(19)を採用した場合の最小二乗法と同様の結果が得られることになる。

Eq.(17)から、事後パラメータの共分散行列が得られる。実験値の数が多い場合は、事後パラメータの共分散は主に実験値の誤差から決定され、実験値の共分散をパラメータに集約することができる。従って、断面積評価値の共分散Mは、この事後パラメータの共分散から模型計算値への伝播を計算すれば良い。スプラインの節点を断面積の評価点とする場合の評価値共分散Mは、次式で計算される。

$$M = CXC^t \quad (20)$$

任意のエネルギー点に対しては、計画行列 $\Phi$ を用いて、

$$M = \Phi CXC^t \Phi^t \quad (21)$$

で計算できる。 $\Phi$ として、Eq.(10)を利用することができる。

このようにして得られた共分散行列は、次の特徴を持っていると考えられる。

- 実験データの存在する領域では、その測定値の精度を表現する。
- 実験データの存在しない領域では、存在する領域で決定される評価値の精度を、核反応模型を使って外内挿する。

ここで得られた共分散は、Eq.(19)をフィッティング関数として断面積を評価した際の、断面積評価値の共分散行列である。評価済み核データライブラリに必要なものは、JENDLやENDF等の、既存のファイルに対する共分散である。従って両者をつなぐ補正が必要となる。

Eq.(19)によって評価された断面積の評価値は、実験データをよく再現すると考えてよい。また、一般に評価済み核データライブラリは測定値を基礎としているので、特に理由の無い限りは

実験データを再現するように与えられている。従って、Eq.(19) で得られるスプラインと評価済み核データライブラリの値には、大きな差は無いはずである。次に、スプラインに与えられる共分散 Eq.(17) を考えると、これはパラメータと実験データの共分散からスプラインへの誤差の伝播を表しているだけで、線形近似が有効な範囲では、評価値の値そのものには関係しない。つまり、スプラインの共分散を評価核データライブラリの共分散とみなすことができる。実際には、スプラインとライブラリ間には相違があるので、これを実験データとの $\chi^2$ で表現することで、評価済み核データライブラリの共分散行列を与えることができる。

### 3 パラメータ推定法の核反応模型計算への応用

#### 3.1 感度係数

前章で述べたパラメータ推定法による共分散算出の一般的な原理を、実際に核反応模型に適用する方法を述べる。基本的な計算を行う部分は、筆者らが開発し整備したFORTRANプログラムKALMANが行う。KALMANは、Eq.(16),(17)に与えられたパラメータ推定を行い、得られたパラメータの共分散から評価値の共分散を計算するものである。KALMANそれ自身は核データ評価用に特殊化されたものではなく、汎用性のあるプログラムであり、評価するためのモデルとなるもの（通常は核反応計算コード）を別に用意する必要がある。

パラメータ推定法を用いての共分散評価で重要となるのは、模型パラメータの断面積計算値への感度である。KALMANは、得られた感度行列を入力としてパラメータ推定を行う。感度計算は使用する核反応模型計算に合わせて個別に行うことになる。

感度は、フィッティング関数のパラメータに関する微分係数であるが、微分係数を解析的に得るのは多くの場合不可能であるので、数値微分を行なう。すなわち、核反応計算コードの計算パラメータを $\delta p_j$ ずつ変化させて計算結果の変動量 $\delta\sigma_i$ を調べ、 $c_{ij} = \delta\sigma_i/\delta p_j$ を計算する。使用する模型計算コードに応じて、次のような方法が考えられる。

1. パラメータをすべて入力ファイルから読むコードは、入力データファイルの数値に変動を与えて、断面積計算を繰り返す。
2. パラメータをコードに内蔵しているものは、パラメータに摂動を与えることを示すフラグを入力データに用意し、コード内部でパラメータを変化させる。

ELIESE-3[4], ECIS88[5], CASTHY[6]が1の場合に相当し、入力データを読んで、特定の数値のみを変化させるようなフィルタを用意する。これを使うことで評価者はコードの入力データのみを用意すればよいことになる。EGNASH4[4, 7]は2のケースであり、これにはフラグのみを変化させるフィルタがあればよい。

核反応模型を、線形化されたスプラインで表現し共分散算出に用いたとき、スプラインを特徴づけているパラメータは本来、核反応模型パラメータに基づくものであり、その特性は核反応模型と関係している。従って、パラメータの選択が共分散作成時に重要となる。

用いるパラメータの数が多くなればスプラインの自由度は大きくなり、実験値とスプラインの残差二乗和を十分小さくすることができる。一方、模型計算に対する感度が小さいか、感度を持たないパラメータは、共分散作成時にも誤差の伝播にほとんど関与しない。また、感度が小さくても、そのパラメータ以外に実験データを再現するための自由度がなければ、そのパラメータを大きく変化させなければならない。これは、核反応模型パラメータに基づくと言う前提に反する。

以上のことを考慮して、模型計算への感度が大きく、パラメータの小さな変動で実験データをスプラインによって再現できること、を判断基準としてパラメータを選択する。

#### 3.2 光学模型

核データ評価、特に全断面積の評価には、光学模型が広く使用されている。JENDL-3.2における評価では、球形核に対して球形光学模型計算コードELIESE-3が用いられ、変形核に対してはチャンネル結合計算コードECISが使用されている。いずれも光学ポテンシャルが与えられれば断面積は一意的に計算されるので、ポテンシャルパラメータの誤差を実験値から求めれば、評

価値共分散を算出できる。

光学模型に於ける模型パラメータは、光学ポテンシャルの形状を特徴づけるポテンシャルパラメータである。通常用いられる球形光学ポテンシャルは、実部と虚部体積項に Woods-Saxon 型、虚部表面項に Woods-Saxon 微分型、スピン-軌道相互作用項に Thomas 型を用いた球形ポテンシャルであり、次式で表される。

$$-U(r) = Vf(x_V) + iW_v f(x_{W_v}) - 4ia_s W_s \frac{df(x_{W_s})}{dx_{W_s}} - \frac{1}{r} C_{SO} \frac{V_{SO}}{a_{SO}} \frac{df(x_{SO})}{dx_{SO}} s \cdot l + U_{Coul}(r) \quad (22)$$

ここで、 $f(x)$  は Woods-Saxon 型の形状を表し、

$$f(x_i) = \frac{1}{1 + \exp(x_i)} \quad (23)$$

$$x_i = \frac{r - r_i A^{1/3}}{a_i}, \quad i = V, W_v, W_s, SO \quad (24)$$

であり、 $C_{SO}$  は定数である。中性子入射反応での全断面積 ( $\sigma_t$ ) や微分弾性散乱断面積 ( $d\sigma/d\Omega$ ) は、光学ポテンシャル  $U(r)$  を含む Schrödinger 方程式を解き、S 行列要素  $S_\ell^{(j)}$  を計算することで与えられる。

Eq.(22) に含まれるパラメータは、クーロンポテンシャルの半径と、実部・虚部(体積型、表面型)・スピン-軌道相互作用部(実部、虚部)の5項に対して、ポテンシャル深さ・半径・ディフューズネスの3つのパラメータが存在するため、計16個である。この内、クーロン半径は荷電粒子に対するポテンシャルのものであり、ここでは中性子入射を扱っているので含めない。また、実部スピン-軌道相互作用部についても、その影響は小さいので文献値を引用するだけで十分な場合が多い。さらに、評価済み核データライブラリのエネルギー範囲は 20MeV 以下であり、このエネルギー領域で共分散を作成するには、虚部ポテンシャルは表面項のみ考慮すれば十分である。従って、共分散作成に採用するパラメータは、実部・虚部ポテンシャルの深さ  $V, W (= W_s)$ 、半径  $r_V, r_W (= r_{W_s})$ 、ディフューズネス  $a_V, a_W (= a_{W_s})$  の6個となる。

JENDL-3.2 で評価に使用したポテンシャルパラメータが既知なら、これを事前パラメータとして実験データから誤差を見積もることができる。

光学ポテンシャルパラメータは、微分弾性散乱断面積・全断面積・偏極の測定値から決定される。これらのパラメータの、質量依存性・エネルギー依存性・アイソスピン依存性を広範囲に調べ、式にしたものが幾つかある。これらはグローバルパラメータと呼ばれ、実用的な核反応断面積計算では十分な精度を持つものもある。評価が実験データのみに基づいているのであればグローバルポテンシャルパラメータを用いて、これらを事前パラメータとして、このパラメータの共分散を実験値から求めれば、全断面積の共分散を作成できる。

### 3.3 統計模型

JENDL-3.2 の評価で、 $(n, n')$ ,  $(n, p)$ ,  $(n, 2n)$ ,  $(n, \alpha)$  等の断面積、放出粒子エネルギースペクトルは統計模型計算を採用しているものが多い。この断面積計算には、統計模型計算コード GNASH, CASTHY が用いられている。

Hauser-Feshbach 統計模型は、粒子入射による複合核形成と粒子放出による複合核崩壊の2つの過程で、複合核を経由する核反応を取り扱うものである。複合核形成断面積  $\sigma_{CN}$  は、光学模



型での反応断面積 $\sigma_r$ として計算され、使用する光学ポテンシャルによって一意的に決定される。これは、光学模型計算で得られるS行列要素 $S_\ell^{(j)}$ を用いて与えられる透過係数 $T_\ell^{(j)} = 1 - |S_\ell^{(j)}|^2$ で、

$$\sigma_{CN} = \frac{\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} \left\{ (\ell+1)T_\ell^{(\ell+\frac{1}{2})} + \ell T_\ell^{(\ell-\frac{1}{2})} \right\} \quad (25)$$

と計算される。各種の粒子放出反応断面積は、この複合核形成断面積 $\sigma_{CN}$ をエネルギー的に可能な全てのチャンネルに分配することで計算される。従って、複合核形成断面積を精度良く決定することは、以後の反応断面積計算の高精度化に重要である。

入射粒子と標的核の系が、複合核のあるスピン・パリティの状態へ遷移する断面積は、逆過程の反応において同じスピン・パリティを生成する考え得る全ての遷移に対しての逆反応過程の透過係数の総和に対する、ある特定のチャンネルの透過係数の和の比率で分配される。従って、複合核の崩壊で、その残留核が離散準位の状態にあり、その励起エネルギー・スピン・パリティが特定できるような遷移のみを考える場合は、粒子放出反応断面積は粒子透過係数のみで決定されるので、このような断面積は光学模型計算に用いられるポテンシャルパラメータのみから決定される。

残留核の励起エネルギーが高くなると準位の密度が増し、各々の準位を明確に区別することはできなくなる。この励起エネルギーの領域を連続領域と呼び、実際の計算では、連続領域にあるエネルギー幅でいくつかの区間に分け、準位を準位密度として取り扱う。この準位密度の表現方法は幾つか提案されているが、この報告では Gilbert-Cameron[8]を用いる。これは励起エネルギーが低い場合は次式の定温度模型

$$\rho_T(EJ\Pi) = \frac{1}{2T} \exp\{(E - E_0)/T\} \frac{(2J+1) \exp\{-(J+1/2)^2/2\sigma^2\}}{2\sigma^2} \quad (26)$$

励起エネルギーが高い場合は、次式の Fermi 気体模型を採用している。

$$\rho_G(EJ\Pi) = \frac{\sqrt{\pi} \exp\{2\sqrt{aU}\}}{24 a^{1/4} U^{5/4} \sqrt{2\pi\sigma}} \frac{(2J+1) \exp\{-(J+1/2)^2/2\sigma^2\}}{2\sigma^2} \quad (27)$$

ここで、 $a$ は準位密度パラメータである。また、 $U$ は、複合核の励起エネルギー $E$ と中性子と陽子のペアリングエネルギー $P(N), P(Z)$ を用いて $U = E - P(Z) - P(N)$ と表される。定温度模型での $T$ と $E_0$ は、Eq.(26)とEq.(27)で表される準位密度が、あるエネルギー $E_x$ でなめらかに接続し、かつ離散準位のデータをよく再現するように定められる。従って準位密度を特徴づけるのは準位密度パラメータ $a$ であり、Hauser-Feshbach統計模型における重要なパラメータとなる。準位密度パラメータについても幾つかの組が存在するが、この報告では EGNASH4 に内蔵されているパラメータを用いている。

非弾性散乱断面積や荷電粒子放出反応断面積に対しては、粒子放出後の残留核の準位密度が大きな感度を有する。複合核の準位密度については、中性子放射捕獲断面積に対しては大きな感度を持つが、粒子放出の起こる閾値よりエネルギーが高い場合、粒子放出反応の競争過程としての $\gamma$ 崩壊に関与するだけであり、この断面積は一般に小さいので、粒子放出過程への感度も小さい。

複合核が粒子を放出してある残留核へ遷移する場合、その残留核の準位密度の増減によって遷移が増減するので、このパラメータで粒子放出反応の断面積を変化させることができる。しかし、複合核から競合過程として放出される粒子が複数あり、それらの残留核が全て連続状態にある場合、これら全ての残留核の準位密度パラメータが互いに反応断面積計算値に関連するようになる。

### 3.4 前平衡過程

入射粒子のエネルギーが高い場合、前平衡過程が重要になってくるが、ここからの粒子放出断面積はエキシトンモデル [9] で計算され、多段階 Hauser-Feshbach 統計模型の 1 次粒子放出エネルギースペクトルに対して補正がなされる。

エキシトンモデルでは、入射粒子と標的核からなる複合系を、励起された核子の数  $p$  と空孔の数  $h$  を用いて記述する。始めに生成する複合系は  $2p-1h$  状態 (エキシトン数  $n = 3$ ) であり、時間経過とともに  $3p-2h$ ,  $4p-3h$  とエキシトンの数を増しながら平衡状態へと遷移する過程 ( $\Delta n = 2$ )、逆に元の状態へ戻っていく過程 ( $\Delta n = -2$ )、粒子を放出する過程、を取り扱う。各過程での遷移の確率は、

$$\lambda_{\Delta n} = \frac{2\pi}{\hbar} |M|^2 \omega_{\Delta n}(p, h, E) \quad (28)$$

で与えられる。従って、前平衡過程からの粒子放出断面積は、遷移行列要素  $|M|^2$  と、一粒子状態密度  $\omega_{\Delta n}(p, h, E)$  に依存することになる。この  $|M|^2$  は調節可能なフリーパラメータで実験値を再現するように決定され、通常は、Kalbach の定式 [10] で現れる比例係数  $K'$  をパラメータとする。この  $K'$  を  $\text{MeV}^3$  の単位で表したとき、その  $1/100$  を Kalbach 定数と呼ぶことがある。

複合系の一粒子状態密度は、次式で与えられる。

$$\omega(p, h, E) = \frac{g_0^n (E - A_{p,h})^{n-1}}{p! h! (n-1)!} \quad (29)$$

ここで、

$$A_{p,h} = \frac{\max(p, h)^2}{g_0} - \frac{p^2 + h^2 + n}{4g_0} \quad (30)$$

であり、 $n$  はエキシトン数 ( $n = p + h$ )、 $g_0$  は複合状態の一粒子状態密度定数で、フェルミ気体模型での準位密度パラメータ  $a$  とは、

$$g_0 = \frac{6}{\pi^2} a C N \quad (31)$$

に関連づけられる。粒子放出過程では、さらに残留核の状態密度を計算するため、起こり得る崩壊チャンネル全ての状態密度定数  $g_i$  ( $i = n, p, \alpha \dots$ ) が関係する。

以上の式より、前平衡過程からの粒子放出断面積を決定するパラメータは、遷移行列要素  $|M|^2$  と一粒子状態密度定数  $g$  となる。

残留核の状態密度定数は、Eq.(31) から、準位密度パラメータ  $a$  で与えられるため、Hauser-Feshbach 統計模型とは独立でない。また、それらのパラメータは Hauser-Feshbach 統計模型計算での準位密度パラメータの振る舞いと定性的には同等のものである。すなわち、準位密度の増減が、そのまま断面積の増減につながる。しかし、 $g_0$  に関してはその性格が異なる。Hauser-Feshbach 統計模型では、 $g_0$  に対応するのは  $\gamma$  崩壊の残留核の準位密度であり、一般に入射中性子エネルギーが  $\text{MeV}$  領域になると  $\Gamma_\gamma \ll \Gamma_{total}$  であるから、このパラメータの計算断面積への影響は極めて小さい。一方、前平衡過程では  $g_0$  は粒子放出断面積の絶対値を決定するのに関係するので、このパラメータが重要な意味を持つ。また、前平衡断面積は、 $|M|^2 \times g_0$  に逆比例するので、行列要素  $|M|^2$  の比例係数  $K'$  も断面積の絶対値を決定するパラメータである。但し、これらのパラメータは、複合核形成断面積  $\sigma_{CN}$  の内、前平衡過程で粒子放出が起こる断面積を決定するものであり、 $\sigma_{CN}$  は変化しないので、結果として前平衡過程からの粒子放出の割合を決定する。前平衡過程からの粒子放出の割合の変化で、平衡過程からの粒子放出率が変化し、平衡過程では多粒子の放出も起こるので、パラメータの断面積計算値への影響は複雑なものとなる。

## 4 共分散評価システム

### 4.1 共分散評価システムの概略

前章では、パラメータ推定法を使った断面積評価値の共分散の算出方法について、核反応模型計算を行って共分散を算出するために、どのようなパラメータを採用すれば良いかについて検討した。実際に JENDL-3.2 の共分散を作成するには、評価核データの種類の合わせた計算コードの選定とパラメータの選択が必要になる。特に JENDL-3.2 の評価に於いて採用された、光学模型・統計模型・チャンネル結合計算のコードに応じた共分散評価システムの構築を行うことは、共分散評価の効率化と共分散ファイル全体の統一性を保つ上で重要となる。ここでは、一般的に使用される核反応計算コードのいくつかを共分散評価用に改造し、データの入出力・感度係数計算などを行うツール群を提供している。パラメータ推定法での共分散評価においては、これらの核反応模型計算コードとツール群を合わせて、共分散評価システムという形で提供される。

共分散評価システムは UNIX ワークステーション上に構築され、感度係数を計算できるように改造された断面積計算コード、コードの入力データを生成するプリプロセッサ、計算された断面積から感度行列を作成するポストプロセッサ、及び感度行列・実験データから共分散を計算するプログラム KALMAN から構成されている。また、核反応模型計算を行わず、スプライン関数による最小二乗法で評価を行ない共分散を算出するプログラム SPLCOV も用意されている。全体のディレクトリ構成を Fig.4 に示す。

以下の節では、プログラムやファイル名を区別するために、次の表記法を用いる。

Table 1: プログラム, ファイル名の表記法

表記	凡例	意味
大文字 roman 体	ELIESE-3	一般的な総称
小文字 roman 体	eliese3t.f	ソースファイル (text)
Typewriter 体	eliese3	実行可能モジュール (binary)

多くの UNIX の FORTRAN コンパイラは、機番  $N$  への入出力を `fort.N` という名前のついたファイルに自動的に割り当てる。READ(10,\*) という文は、同じディレクトリにある `fort.10` というファイルからの読み込みを表す。但し、機番 5,6 は UNIX の標準入力、標準出力に割り当てられる。

### 4.2 実験データの共分散

KALMAN が読む実験データフォーマットは、全ての核反応断面積計算において共通である。実験データファイルには、測定データ ( $E_n, \sigma$ ) を記述したファイルとその誤差 ( $E_n, \delta\sigma$ ) を記述した2つのファイルが必要である。誤差に相関係数を与える場合はさらに相関係数のファイルを用意する。データの相関係数は与えられていない場合が多いので、そのときは実験者の報告論文を参照し、統計誤差・系統誤差から評価者が推測し作成しなければならない場合が多い。

共分散評価システムでは、実験データとその誤差・相関係数を FORTRAN の機番 10,11,12 に割り当てて使用するので、`fort.10,fort.11,fort.12` の3つのファイルを用意する。機番 10,11 には、測定エネルギー点と測定値を次の FORMAT で用意する。

## 断面積データファイル - UNIT(10)

```
(A43,I5)  TITLE, ND
(6E11.4)  (X(I),Y(I),I=1,ND)
```

## データ誤差ファイル - UNIT(11)

```
(43X,I5)  ND
(6E11.4)  (DUMMY,Z(I),I=1,ND)
```

ここで、TITLEは43文字以内の任意の文字列、X,Y,Zは測定点(エネルギー点)とその値(断面積)、誤差を表す。エネルギーと断面積の単位は、[b],[MeV]である。但し、計算全てにわたって統一するなら何でも良い。誤差Zは、測定値に対する相対値で入力する。例えば0.03は、3%となる。Zに負の値を入れると絶対値と解釈される。例えばY=5.0,Z=-0.1はY=5.0 ± 0.1を表す。

測定値の相関係数を入力する場合は、機番12に用意するが、必ずしも必要では無い。相関係数は、1つの測定について、測定点間のみに与えることができる。異なる測定間の相関は与えられない。

## 相関係数ファイル - UNIT(12)

```
(43X,I5)  NC
          DO I=1,NC
(12F6.3)  (V(I*(I-1)/2+J),J=1,I)
```

Vは相関係数で、 $-1 \leq V \leq 1$ である。NCはNDと同じでなければならない。

複数の測定がある場合は、これらを反復する。その場合、測定値・誤差・相関係数のファイルに入っている各測定のブロックの順序を揃えておく。測定によっては相関係数が与えられるものと与えられないものが混在する。その場合はNCに0を与えると、そのブロックの相関係数データを読まなくなる。

以下にデータファイルの例を示す。ここでは3つの測定があり、その1,3番目のブロックに相関係数が与えられている。

## List 1: データファイル (fort.10)

```
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7
1: 10795004 L.R.VEESER D                    5
2:  1.4700E+01 6.7300E-01 1.6000E+01 4.5100E-01 1.7000E+01 3.6600E-01
3:  1.8000E+01 2.3400E-01 1.9000E+01 2.7300E-01
4: 12459002 J.D.KNIGHT D                    14
5:  6.4200E+00 6.0000E-02 6.8000E+00 2.7000E-01 6.9600E+00 5.4000E-01
6:  7.0000E+00 4.7000E-01 7.2000E+00 5.1000E-01 7.2500E+00 7.9000E-01
7:  7.4500E+00 8.9000E-01 7.5800E+00 9.8000E-01 7.8200E+00 1.1100E+00
8:  7.8800E+00 1.0700E+00 8.4900E+00 1.2100E+00 8.9600E+00 1.3900E+00
9:  9.4800E+00 1.4600E+00 9.9700E+00 1.4900E+00
10: 20416021 J.FREHAUT D                    10
11:  6.8900E+00 2.3300E-01 7.4100E+00 6.0400E-01 7.6700E+00 8.1100E-01
12:  7.9300E+00 8.7900E-01 8.1800E+00 9.9900E-01 8.4400E+00 1.0720E+00
13:  8.6900E+00 1.0290E+00 8.9400E+00 1.1560E+00 9.4400E+00 1.1710E+00
14:  9.9300E+00 1.2320E+00
```

## List 2: 誤差ファイル (fort.11)

```

-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7
1: 10795004 L.R.VEESER E                               5
2: 1.4700E+01-4.1000E-02 1.6000E+01-8.2000E-02 1.7000E+01-7.5000E-02
3: 1.8000E+01-8.5000E-02 1.9000E+01-8.8000E-02
4: 12459002 J.D.KNIGHT E                               14
5: 6.4200E+00-3.0000E-02 6.8000E+00-2.0000E-02 6.9600E+00-4.0000E-02
6: 7.0000E+00-3.0000E-02 7.2000E+00-4.0000E-02 7.2500E+00-5.0000E-02
7: 7.4500E+00-5.0000E-02 7.5800E+00-5.0000E-02 7.8200E+00-5.0000E-02
8: 7.8800E+00-5.0000E-02 8.4900E+00-5.0000E-02 8.9600E+00-5.0000E-02
9: 9.4800E+00-5.0000E-02 9.9700E+00-5.0000E-02
10: 20416021 J.FREHAUT E                               10
11: 6.8900E+00-3.9000E-02 7.4100E+00-5.4000E-02 7.6700E+00-6.2000E-02
12: 7.9300E+00-4.8000E-02 8.1800E+00-4.1000E-02 8.4400E+00-5.2000E-02
13: 8.6900E+00-6.0000E-02 8.9400E+00-4.2000E-02 9.4400E+00-4.6000E-02
14: 9.9300E+00-4.4000E-02

```

## List 3: 相関係数ファイル (fort.12)

```

-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7
1: 10795004 L.R.VEESER D                               5
2: 1.000
3: 0.111 1.000
4: 0.098 0.033 1.000
5: 0.055 0.019 0.016 1.000
6: 0.062 0.022 0.019 0.010 1.000
7: 12459002 J.D.KNIGHT D                               0
8: 20416021 J.FREHAUT D                               10
9: 1.000
10: 0.060 1.000
11: 0.070 0.132 1.000
12: 0.098 0.184 0.216 1.000
13: 0.131 0.245 0.287 0.402 1.000
14: 0.111 0.208 0.243 0.340 0.452 1.000
15: 0.092 0.173 0.202 0.283 0.376 0.318 1.000
16: 0.148 0.277 0.324 0.454 0.604 0.511 0.425 1.000
17: 0.137 0.256 0.300 0.420 0.558 0.472 0.393 0.631 1.000
18: 0.151 0.282 0.330 0.461 0.614 0.520 0.432 0.694 0.642 1.000

```

## 4.3 最小二乗法を使った共分散評価

最小二乗法での核データ共分散評価プログラムとして、SPLCOVを作成している。プログラムは Eq.(3), Eq.(4) を解くもので、計画行列 C として Eq.(8) もしくは Eq.(10) を採用する。Eq.(8),(10) を用いた最小二乗法の場合は、フィッティング関数のパラメータが励起関数そのものであるため、Eq.(4) で得られた共分散が評価値共分散そのものとなる。パラメータの事前値を使用しないので、評価するエネルギー区間に実験データが存在しない場合は評価値が不定になり、共分散の計算はできない。

プログラムへの入力は、評価を行なうエネルギー点のデータであり、次の Format で用意する。

## 評価点データファイル - 標準入力

```
(A43,2I5) TITLE, NP, NO, KCOVEX
(6E11.4) (E(I), I=1, NP)
```

ここで、TITLE は 43 文字以内の任意の文字列、E は評価点 (エネルギー点)、NP は評価点 E の点数、NO はスプラインの次数を表す。NO=0 なら区間平均での評価、=1 なら 1 次のスプラインとなる。KCOVEX は実験データ共分散制御で、1 のとき実験データの相関係数を機番 12 から読む。

```
% splcov < knots.dat
```

のように計算点データを splcov へ渡すと計算が実行される。以下は、区間平均/実験データ相関係数無し、を指定した入力データの例である。

List 4: 評価点データファイル (stdin)

```
-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7
1: Fe56 Total                                     18    0    0
2:  1.0000E+00 2.0000E+00 3.0000E+00 4.0000E+00 5.0000E+00 6.0000E+00
3:  7.0000E+00 8.0000E+00 9.0000E+00 1.0000E+01 1.1000E+01 1.2000E+01
4:  1.3000E+01 1.4000E+01 1.5000E+01 1.6000E+01 1.8000E+01 2.0000E+01
```

splcov は、最小二乗解とその共分散を出力する。さらに得られた結果と実験データとの  $\chi^2$  を計算する。出力される共分散には、この  $\chi^2$  は掛けられていない。JENDL-3.2 との  $\chi^2$  は、別に計算する必要がある。

#### 4.4 パラメータ推定法を使った共分散評価

パラメータ推定法での共分散評価は、実験値の誤差・共分散からパラメータの共分散を作り、逆にパラメータの共分散から評価値への誤差の伝播を計算して共分散を作るものである。この誤差の伝播は、計算値に対するパラメータの感度を介して行なわれる。共分散評価システムでは種々の原子核模型計算コードを用いるが、この感度を作成する部分のみがコードに依存し、その他は共通となっている。パラメータ推定プログラム KALMAN(ver.3.1) は、計算された断面積を機番 50 から、パラメータの感度を機番 52 から読み込んで処理を行なうので、これらの機番に対応するファイル (fort.50, fort.52) を作成する。以下に、これらのファイルのフォーマットを説明し、ELIESE-3, ECIS88, CASTHY, EGNASH4 のコードを使用して感度を求め KALMAN に必要なデータを作成する方法を述べる。

##### 4.4.1 KALMAN

KALMAN に必要なファイルは、実験データ (fort.10) とその誤差 (fort.11) 及び相関係数 (fort.12) と、スプラインデータ (fort.50)、パラメータの事前共分散と感度データ (fort.52) である。その他、計算の制御データを標準入力から読み込む。この制御データのフォーマットは以下のようになっている。

## KALMAN 制御データファイル - 標準入力

```

(A80)      TITLE
(5I5)      NREAC,NPARAM,KCTL1,KCTL2,KCOVEX
(14I5)     (IPARM(I),I=1,NPARAM)
           DO I=1,NREAC
(14I5)     IEXP(I),NMSUR
(7E10.3)   (EW(J),J=1,NMSUR)

```

ここで、TITLEは80文字以内のタイトル、NREAC、NPARAM、KCTL1、KCTL2、KCOVEXはそれぞれ、反応の数、パラメータの数、事前共分散ファイルの読み込み制御、事後共分散出力制御、実験データ共分散制御を表す。KCTL1、KCTL2を0以外にセットすると、パラメータの事前値・事前共分散を機番KCTL1から読み込み、事後値・事後共分散を機番KCTL2に出力する。KCOVEXが1なら、実験データの相関係数を機番12から読む。

NPARAMは推定するパラメータの数であるが、以下のfort.52から読み込まれるパラメータ数NP(=M)とは異なる。Mは全パラメータの数であり、KALMANはMの中の一部のパラメータだけを推定することができる。この数をmとすると、 $M \geq m$ である。推定するパラメータを識別するインデックスがIPARMである。

KALMANは、異なる反応の測定データからパラメータ推定を行なうことができる。反応の種類が複数ある場合、それぞれを一つの反応ブロックとして取り扱う。この反応ブロック数がNREACである。データファイルは、単純にシーケンシャルにつながったもので良い。実験データの対応する反応の種類は、反応ブロックインデックスIEXPで識別される。NMSURは、一つのブロックに含まれる測定データの数で、EW(J)はある測定データの重みを表し、この数値が測定データの誤差に掛けられる。0にすると、その測定を無視する。以下に、この制御データのサンプルを与える。

List 5: KALMAN 制御ファイル (stdin)

```

-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7
1: KALMAN INPUT DATA
2:   2   6   0   0   0
3:   1   2   3   4   5   6
4:   1   4
5:  1.000E+00 1.000E+00 1.000E+00 1.000E+00
6:   2   3
7:  1.000E+00 1.000E+00 1.000E+00

```

この場合、推定するパラメータは6個で、1～6番のパラメータを推定する。測定データは2種類あり、最初の反応ブロックには4つの測定、2番目には3つの測定があることを意味する。4,6行目の第1カラムの数字(1,2)は、反応ブロックのインデックスであり、fort.50,52で与えられるデータのブロックの順序の番号となる。

機番50から読み込まれるのは実験値にフィットするカーブのデータで、1次のスプラインとなる。これは、事前パラメータで計算した結果そのものである。KALMANは、感度を計算したエネルギー点を節とするスプラインを作り、測定値の存在する任意のエネルギー点での感度をス

プラインを使って補間するので、感度計算は機番 50 で与える点だけでよい。このフォーマットを以下に与える。

スプラインデータファイル - UNIT(50)

```
(A43,I5)  TITLE, NS
(6E11.4)  (E(I),S(I),I=1,NS)
```

ここで、TITLE は 43 文字以内の任意の文字列、E,S は計算点 (エネルギー点) とその値 (断面積) を表す。反応ブロックが複数ある場合は、このセットを繰り返して与える。以下は、2 種類のデータがある場合の例である。

List 6: スプラインデータファイル (fort.50)

```
-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7
1: Inelastic 1st level                                24
2:  1.0000E-02  6.5979E+00  1.0000E-01  2.7476E+00  5.0000E-01  1.9889E+00
3:  7.5000E-01  1.6267E+00  1.0000E+00  1.4527E+00  1.2500E+00  1.3435E+00
4:  1.5000E+00  1.2662E+00  1.7500E+00  1.2078E+00  2.0000E+00  1.1615E+00
5:  2.2500E+00  1.0919E+00  2.5000E+00  1.0162E+00  3.0000E+00  8.3853E-01
6:  4.0000E+00  5.9353E-01  5.0000E+00  4.1736E-01  6.0000E+00  3.2365E-01
7:  8.0000E+00  1.7176E-01  1.0000E+01  1.0063E-01  1.2000E+01  3.4596E-02
8:  1.3000E+01  2.4942E-02  1.4000E+01  1.7562E-02  1.5000E+01  1.2131E-02
9:  1.6000E+01  8.2704E-03  1.8000E+01  3.7694E-03  2.0000E+01  1.7137E-03
10: Inelastic 2nd level                                24
11: 1.0000E-02  0.0000E+00  1.0000E-01  0.0000E+00  5.0000E-01  1.3546E-01
12: 7.5000E-01  3.6810E-01  1.0000E+00  4.4806E-01  1.2500E+00  4.8766E-01
13: 1.5000E+00  5.1221E-01  1.7500E+00  5.2979E-01  2.0000E+00  5.4338E-01
14: 2.2500E+00  5.3302E-01  2.5000E+00  5.1264E-01  3.0000E+00  4.5885E-01
15: 4.0000E+00  3.5950E-01  5.0000E+00  2.7149E-01  6.0000E+00  2.2053E-01
16: 8.0000E+00  1.2464E-01  1.0000E+01  7.5152E-02  1.2000E+01  4.3703E-02
17: 1.3000E+01  3.1578E-02  1.4000E+01  2.2305E-02  1.5000E+01  1.5467E-02
18: 1.6000E+01  1.0586E-02  1.8000E+01  4.8735E-03  2.0000E+01  2.2361E-03
```

機番 52 からはパラメータの事前共分散と感度行列を読む。感度は、 $\partial\sigma(E_i)/\partial p_j$  の絶対値で与える。ただし、 $E_i$  は fort.50 で与えたエネルギー点であり、 $p_j$  はパラメータである。

パラメータの事前値・事前共分散・感度 - UNIT(52)

```
(25X,I5)  NP
(11A12)   (PMAME(I),I=1,NP)
(11E12.5) (PO(I),I=1,NP)
(11E12.5) (PE(I),I=1,NP)
          DO I=1,NP
(20F6.3)  (PC(I*(I-1)/2+J),J=1,NP)
          DO K=1,NR
(25X,I5)  NS
          DO J=1,NS
(11E12.5) (A(K,J,I),I=1,NP)
```



ここで、NPは感度を計算したパラメータ数でNP ≥ NPARAM, PO, PE, PCはパラメータの事前値・誤差(相対誤差)・相関係数を表し、このIがパラメータのインデックスとなる。Aが感度であり、ループ変数Kが反応ブロックのインデックスである。

List 7: 事前共分散データファイル (fort.52)

```

-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7
1:      V1          R0          WS1          RS          LDP TARG    LDP CN
2:  4.60000E+01  1.28600E+00  1.40000E+01  1.39000E+00  3.80000E+00  3.99000E+00
3:  5.00000E-02  5.00000E-02  5.00000E-02  5.00000E-02  5.00000E-02  5.00000E-02
4:  1.000 .000 .000 .000 .000 .000
5:  .000 1.000 .000 .000 .000 .000
6:  .000 .000 1.000 .000 .000 .000
7:  .000 .000 .000 1.000 .000 .000
8:  .000 .000 .000 .000 1.000 .000
9:  .000 .000 .000 .000 .000 1.000
10:
11:
12:
.....
33: -2.66704E-07-3.94000E-05 7.74142E-05 1.21887E-03-5.67279E-03-1.90280E-07
34: -2.22372E-07-5.18493E-05 4.07052E-05 5.45543E-04-2.90486E-03-3.44254E-08
35:
36: 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00
37: 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00 0.00000E+00
38: 3.59559E-04 6.53961E-02 1.61677E-03 4.49347E-02 0.00000E+00-4.66948E-09
.....
59: 3.03703E-07 2.07378E-05 5.56431E-05 8.90830E-04-3.79709E-03-4.48954E-08

```

fort.50とfort.52を具体的にどのように準備するかは、次節以降で述べる。fort.10,11,12,50,52と制御データが揃った後、KALMANを実行することができる。UNIXのコマンドラインから、

```
% kalman3.1 < kalman.ct1
```

のように制御データをkalman3.1へ渡す。KALMANは実験データのブロック毎にパラメータ推定を行ない、各ステップでのパラメータの変動をfort.15に記録する。最終的に得られたパラメータとその共分散は、標準出力(コンソール)に出される。さらに、このパラメータと感度行列を使ってスプライン  $f(x) = f(x_0) + C(x_1 - x_0)$  を計算したものを、fort.13に出力する。以下は、fort.14に出力されるこのスプラインの共分散である。

List 8: KALMAN 出力データ (fort.14)

```

-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7
1: DIAGONAL      1
2:              1  2  3  4  5  6  7  8  9
3:  1  1.00E+00  2.08E-01 1000
4:  2  2.00E+00  2.33E-01 -17 1000
5:  3  4.00E+00  2.50E-01 -315 258 1000
6:  4  6.00E+00  3.26E-01 -64  20 202 1000
7:  5  8.00E+00  3.26E-01 -66  67  -5 788 1000
8:  6  1.00E+01  2.77E-01 202 -151 111 118 496 1000
9:  7  1.20E+01  3.49E-01 292 -229 386 -154 -132 704 1000
10: 8  1.60E+01  3.91E-01 205  -7 485 -404 -431 460 918 1000
11: 9  2.00E+01  7.27E-01 167 -268 359 146 -255 185 721 669 1000

```

1行目には、DIAGONALとOFF-DIAGONALの区別と、ブロックのインデックスが記される。DIAGONALは、同じ反応内での共分散であり、OFF-DIAGONALは2つのインデックスで示される反応間の共分散である。2カラム目はエネルギー、3カラム目は評価データの誤差であり%で表示されている。4カラム以降は、1000倍された相関係数である。

#### 4.4.2 ELIESE-3

光学模型計算コード ELIESE-3[4]は、全断面積評価や弾性散乱微分断面積評価に多く利用されている。この ELIESE-3を全断面積と弾性散乱の角分布の評価値共分散作成に用いる。共分散評価システムで使用する ELIESE-3は、計算を全て倍精度で行い、UNIXの環境に合わせて、入力データを FORTRAN の機番 5(標準入力)から読み込み機番 6(標準出力)に出力するように変更されている。さらに計算された断面積を機番 2,3(3は結果確認のモニタ用)に出力するようにしている。出力されるのは、全断面積・弾性散乱断面積・ $\ell=1$ の Legendre 係数である。オリジナルのコードと区別するため、eliese3t.fという名前に変更されている。

Legendre 係数の共分散は、測定データから直接求めるのは殆ど不可能であり、全断面積共分散から演繹的に算出する方法を採る。すなわち、全断面積の測定データから光学ポテンシャルパラメータの共分散を作り、ポテンシャルパラメータから Legendre 係数への誤差の伝播を計算することで、この共分散を算出する。

ELIESE-3の計算に必要なデータは、全断面積を計算するだけなら標的核の  $Z, A$  と入射中性子エネルギー、及び光学ポテンシャルである。入力データフォーマットが比較的単純であるので、入力データを生成する“ELIESE-3 Input Generator”である mkelin.f という FORTRAN プログラムによって入力データを作り、直接 ELIESE-3 の計算を行う。mkelin は、ELIESE-3 の入力データを作成すると同時に、計算に使用したパラメータを fort.1 に書き出す。共分散評価に必要なデータは、この fort.1 と、ELIESE-3 で作られる fort.3 という名前のファイルなので、ELIESE-3 自身の出力は不要である。

光学ポテンシャルには、 $V$  や  $W_s$  などのポテンシャル深さにエネルギー依存項を持つが、実際に共分散評価に関係するのは、感度の大きな定数部のみである。そのため、共分散評価でのパラメータに  $V, r_V, a_V, W_s, r_{W_s}, a_{W_s}$  の 6 つを採用する。共分散評価では、これらのパラメータに

1~6 の整数をパラメータ番号として与えている。

共分散評価者は、Z, A や評価点、使用する光学ポテンシャルを mkelin.f に記述しなければならない。mkelin.f には、あらかじめいくつかの global potential が用意されている。これらを使わないなら、ユーザが SUBROUTINE を用意する。変更する点は、以下の部分である。

1) 計算するエネルギー点を NELAB に定義する。

```
PARAMETER(NELAB=32,NPARM=6)
```

2) 計算するエネルギー点を ELAB に定義する。

```
DATA ELAB/
```

```
1 1.5E-04, 5.5E-04, 1.5E-03, 5.5E-03, 1.0E-02, 3.0E-02,
2 5.0E-02, 1.0E-01, 2.0E-01, 3.0E-01, 4.0E-01, 5.0E-01,
3 6.0E-01, 7.0E-01, 8.0E-01, 1.0E+00, 1.5E+00, 2.0E+00,
4 3.0E+00, 4.0E+00, 5.0E+00, 6.0E+00, 7.0E+00, 8.0E+00,
5 9.0E+00, 1.0E+01, 1.1E+01, 1.2E+01, 1.4E+01, 1.6E+01,
6 1.8E+01, 2.0E+01/
```

3) 原子番号・質量数を定義する。

```
MZT=92
```

```
MAT=235
```

4a) 使用する光学ポテンシャルを選び、コメントを外す。

```
C      CALL BECCHE(ELAB(I),MAT,MZT)
C      CALL WALTER(ELAB(I),MAT,MZT)
C      CALL RAPAPO(ELAB(I),MAT,MZT)
C      CALL MADYUN(ELAB(I),MAT,MZT)
C      CALL RAPAP1(ELAB(I),MAT,MZT)
```

4b) 内蔵ポテンシャルを使用しないなら、SUBROUTINE を作り数値を与える。

```
SUBROUTINE USRDEF(E,MAT,MZT)
```

```
V1 = 40.9
V2 = -0.04
WS1 = 6.5
WS2 = 0.25
VS01= 7.0
R0 = 1.312
A0 = 0.49
RS = 1.375
AS = 0.454
RSO = 1.320
ASO = 0.47
```

編集した mkelin.f をコンパイルし、このプログラムの出力をそのまま ELIESE-3 の入力に連結する。mkelin は 6 つのパラメータに正負の摂動を与えて ELIESE-3 の入力データを標準出力に送り、ELIESE-3 は標準入力からそれを読み込んで計算を行う。UNIX のパイプラインを使って、

```
% mkelin | eliese3t > /dev/null
```

とすることで断面計算ができる。mkelin が作る fort.1 と eliese3t が作る fort.2 の、上の例で

得られたものを以下に示す。

List 9: パラメータテーブル (fort.1)

	1	2	3	4	5	6	7
1:	0.000150						
2:	40.90000	1.31200	0.49000	6.50000	1.37500	0.45400	
3:	41.71800	1.31200	0.49000	6.50000	1.37500	0.45400	
4:	40.08200	1.31200	0.49000	6.50000	1.37500	0.45400	
5:	40.90000	1.33824	0.49000	6.50000	1.37500	0.45400	
6:	40.90000	1.28576	0.49000	6.50000	1.37500	0.45400	
7:	40.90000	1.31200	0.49980	6.50000	1.37500	0.45400	
8:	40.90000	1.31200	0.48020	6.50000	1.37500	0.45400	

List 10: 断面積計算結果 (fort.2)

	1	2	3	4	5	6	7
1:	0.00015	48.7173470	12.0916889	0.000573943436	0.00883405495		
2:	0.00015	39.9989161	11.6386973	0.000525254787	0.00847591758		
3:	0.00015	60.5436549	12.5302861	0.000627150007	0.00918687703		
4:	0.00015	36.4902043	11.5451699	0.000478330331	0.00836510290		
5:	0.00015	70.3694444	12.5343339	0.000649896824	0.00921238875		
6:	0.00015	48.7210532	12.1042375	0.000565372533	0.00883405639		
7:	0.00015	48.7202186	12.0788263	0.000582061914	0.00883338658		

fort.2 の各カラムはそれぞれ,  $E_n$ ,  $\sigma_t$ ,  $\sigma_{el}$ ,  $B_1^{cms}$ ,  $B_1^{ab}$  である。1 行目は通常の計算, 2 行目と 3 行目は  $V$  に正負の摂動を与えて計算した結果であり,  $V$  を 41.718 MeV から 40.082 MeV に減少させたとき,  $\sigma_t$  は 40.0 b から 60.5 b に増加したことから,  $E_n = 0.15$  keV では大きな負の微係数を持つことがわかる。

eliese3t が fort.3 に出力する断面積計算値と List 9 の数値から, KALMAN 入力用の感度行列を作ることができる。これを行う FORTRAN プログラムは mkelsens.f である。

Legendre 係数の共分散評価を行なう場合は mkelsens.f の PARAMETER(IPRM=1, ICRX=3, ILIB=0) の箇所を修正する必要がある。ELIESE-3 が計算する Legendre 展開係数  $B_\ell$  は,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sum_{\ell} (B_{\ell}^{SE} + B_{\ell}^{CE}) P_{\ell}(\theta) \quad (32)$$

で定義されている。ここで  $B_{\ell}^{SE}$  は形状弾性散乱の Legendre 係数,  $B_{\ell}^{CE}$  は複合核弾性散乱の Legendre 係数である。ENDF/B Format では角度分布を確率で与えるため, 変換しなければならない。B-Format の Legendre 係数  $f_{\ell}$  は,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \sigma_{elastic} \sum_{\ell} \frac{(2\ell+1)}{4\pi} f_{\ell} P_{\ell}(\theta) \quad (33)$$

で与えるので,

$$f_{\ell} = \frac{4\pi}{(2\ell+1)\sigma_{elastic}} \{B_{\ell}^{SE} + B_{\ell}^{CE}\} \quad (34)$$

となり,  $\ell = 1$  では Compound 成分がないので,

$$f_1 = \frac{4\pi}{3\sigma_{elastic}} B_1^{SE} \quad (35)$$

となる。  $B_1^{SE}$  の光学ポテンシャルの感度を計算して  $4\pi/3\sigma_{elastic}$  をかければ  $f_1$  の感度が計算される。  $\sigma_{elastic}$  には評価データライブラリの MF=3, MT=2 を使うか、複合核弾性散乱の断面積を別に用意する。

弾性散乱断面積を、ライブラリの MT=2 で与えられているように複合核弾性散乱と形状弾性散乱の和として与えるなら、mkelsens.f の PARAMETER (IPRM=1, ICRX=3, ILIB=0) の箇所を ILIB=4 とし、その断面積を fort.4 に用意する。複合核弾性散乱のみを与えるには、ILIB=-4 とする。この場合、形状弾性散乱は ELIESE-3 の出力から読み込まれる。弾性散乱のデータは、次の FORMAT で用意する。

弾性散乱断面積ファイル - UNIT(4)

```
(43X, I5)  NE
(6E11.4)  (E(I), CE(I), I=1, NE)
```

エネルギー点 E(I) とその点数 NE は、mkelin.f で与えたものと同じでなければならない。以下は、弾性散乱断面積として複合核と形状弾性散乱の和で与えた場合で、ILIB=4 となる。

List 11 : 弾性散乱断面積データ (fort.4)

```
-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7
1:                                     32
2:  1.5000E-04  1.1857E+01  5.5000E-04  1.1739E+01  1.5000E-03  1.1458E+01
3:  5.5000E-03  1.1198E+01  1.0000E-02  1.1071E+01  3.0000E-02  1.1001E+01
4:  5.0000E-02  1.0668E+01  1.0000E-01  9.5514E+00  2.0000E-01  8.0481E+00
5:  3.0000E-01  7.1071E+00  4.0000E-01  6.1986E+00  5.0000E-01  5.6255E+00
6:  6.0000E-01  4.9612E+00  7.0000E-01  4.6753E+00  8.0000E-01  4.3662E+00
7:  1.0000E+00  4.0001E+00  1.5000E+00  3.6198E+00  2.0000E+00  3.7466E+00
8:  3.0000E+00  4.3427E+00  4.0000E+00  4.6750E+00  5.0000E+00  4.5193E+00
9:  6.0000E+00  4.0210E+00  7.0000E+00  3.6421E+00  8.0000E+00  3.2226E+00
10: 9.0000E+00  2.9143E+00  1.0000E+01  2.7506E+00  1.1000E+01  2.7020E+00
11: 1.2000E+01  2.7071E+00  1.4000E+01  2.8707E+00  1.6000E+01  3.0261E+00
12: 1.8000E+01  3.0459E+00  2.0000E+01  3.1505E+00
```

mkelsens を実行すると、摂動を与えない通常の計算結果を fort.50 に、パラメータの事前値・事前共分散・感度行列を fort.52 に、感度を相対値で表しエネルギーの関数としたものを fort.53 に出力する。KALMAN で使用するのは、fort.50,52 である。fort.53 のデータは感度計算が問題なく行われているかを確認するためのモニタであり、パラメータの相対感度が出力される。Fig.5 は、fort.53 の  $\sigma_t$  の部分をプロットしたものである。

#### 4.4.3 ECIS88

チャンネル結合計算コード ECIS88[5] は内部での計算を倍精度で行っており、さらに計算結果を感度を求めるのに十分な有効桁を持って出力するので、プログラム自体は変更しない。

プログラム ecisin.c は、テンプレートとなる ECIS88 の入力データを標準入力から読み込み、特定のパラメータを変更して標準出力に出すフィルタである。入力データ中の中性子エネルギーと光学ポテンシャルパラメータを置換する。また、それらの値を fort.1 というファイルに同時に

書きだす (ファイルが存在すれば追加する). コマンドラインオプション+pn は n 番のパラメータに正の摂動を与えるオプションであり, -pn は負の摂動になる. さらにオプション-ex で入力データの入射中性子のエネルギーを x[MeV] に置換する. 例えば, 次の<sup>238</sup>U の (0<sup>+</sup>-2<sup>+</sup>-4<sup>+</sup>) 結合計算の入力ファイルを-e10 のオプションを付けてecisinに通すと,

List 12: ECIS88 用入力テンプレートデータ

```

-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7
 1: 238U(n,n') 0+ 2+ 4+ Coupling G.Haouat (Bruyeres) NSE81,491(1982)
 2: TTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTT
 3: FFTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTT
 4: 3
 5:
 6: 0.00 + 0.0000 0.5000 1.0073 238.05099 0.0000
 7: 2.00 + 0.04491
 8: 4.00 + 0.14841
 9: 4 4 0
10:
11:
12:
13:
14:
15:
16:
17: 0.0
18: 0.0
19: 1.0 1.0 180.
20: FIN

```

List 13: ecisin 出力

```

-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7
 1: 238U(n,n') 0+ 2+ 4+ Coupling G.Haouat (Bruyeres) NSE81,491(1982)
 2: TTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTT
 3: FFTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTTT
 4: 3
 5:
 6: 0.00 + 10.0000 0.5000 1.0073 238.05099 0.0000
 7: 2.00 + 0.04491
 8: 4.00 + 0.14841
 9: 4 4 0
10: 0.19800 0.05700
11: 43.20000 1.26000 0.63000
12: 0.00000 0.00000 0.00000
13: 0.00000 0.00000 0.00000
14: 7.60000 1.26000 0.52000
15: 6.20000 1.12000 0.47000
16: 0.00000 0.00000 0.00000
17: 0.0
18: 0.0
19: 1.0 1.0 180.
20: FIN

```

このように, エネルギーを 10 MeV とし, プログラム中に記述してあるポテンシャルパラメータを該当する部分に埋め込む. ±pn のオプションを与えると, 対応する番号のパラメータに正負の

摂動を与える。例えば+p4 とすると、 $W_s$ の値が7.6 から7.672 に書き換えられる。

ポテンシャルパラメータを与えるために、ecisin.cを編集する。場所は関数potentialで、この関数にそのまま上書きするか、新たに関数を定義する。p->v, p->wにポテンシャル深さの定数項部分のみを与え、エネルギー依存項がある場合は、関数sensitivをcallした後に書く。

List 14: ecisin.c

```

1: void potential(double e, PotentialParam *p, int k, int s)
2: {
3:     p->v0 = 46.400; p->rv = 1.260; p->av = 0.630;
4:     p->w0 = 3.300; p->rw = 1.260; p->aw = 0.520;
5:     p->vso= 6.200; p->rso= 1.120; p->aso= 0.470;
6:     p->b2 = 0.20 ;
7:     p->b4 = 0.074;
8:
9:     if(k!=0) sensitiv(1.0+s*0.02,p,k);
10:
11:     p->v = p->v0 - 0.3*e;
12:     p->w = p->w0 + 0.4*e;
13: }
```

ecis88の出力から感度のファイルを作成するが、この手順を自動化するためにShellスクリプトecis.sensを用意している。このスクリプトでは、計算された角度分布からLegendre展開係数を求めるために、(1)ECIS88の出力ファイルから角度分布の部分を抜き出すPerlスクリプトgetang.plと、(2)抜き出された角度分布にLegendreフィットを行なうCプログラムpolysqが含まれている。Legendre係数を正しく得るためには計算する角度点が多いほど良いので、List 12の19行目に与える計算角度データを、初期値=1・増分=1・終了値=180にしておく。

List 15: ecis.sens

```

1: #!/bin/sh
2: prm=fort.1
3: ang=fort.2
4: crx=fort.3
5: out=output.dat
6: for e in 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 12 14 16 18 20 ; do
7:     ecisin -e${e} $1 | ecis88 > ${out}
8:     getang.pl < ${out} | polysq -o20 -1 >> ${ang}
9:     grep "==" TOTAL" ${out} >> ${crx}
10:    grep "TOTAL ELASTIC" ${out} >> ${crx}
11:    for p in 1 2 3 4 5 6 7 8 ; do
12:        ecisin -e${e} +p${p} $1 | ecis88 > ${out}
13:        getang.pl < ${out} | polysq -o20 -1 >> ${ang}
14:        grep "==" TOTAL" ${out} >> ${crx}
15:        grep "TOTAL ELASTIC" ${out} >> ${crx}
16:
17:        ecisin -e${e} -p${p} $1 | ecis88 > ${out}
18:        getang.pl < ${out} | polysq -o20 -1 >> ${ang}
19:        grep "==" TOTAL" ${out} >> ${crx}
20:        grep "TOTAL ELASTIC" ${out} >> ${crx}
21:    done
22: done
23: rm ${out}
```

計算を行なうエネルギー点は, `ecis.sens` の 6 行目に定義する. 感度を計算するパラメータは 11 行目に与える. パラメータ番号の 1~6 は, ELIESE-3 での場合と同じである. 7,8 は `ecisn.c` で変形パラメータ  $\beta_2, \beta_4$  に割り当てられている. スクリプトの実行は, List 12 を引数として,

```
% ecis.sens template.dat
```

とする. 結合させる準位の数や基底状態のスピンによって, `ecis.sens` の実行に要する時間は変わるが, 普通は数時間必要である. このスクリプトの実行終了後, `fort.1` (パラメータテーブル), `fort.2` (Legendre 係数), `fort.3` (全断面積, 弾性散乱断面積) の 3 つが出来る. `fort.1` は, List 9 とほぼ同じものである.

List 16:  $l=1$  の Legendre 係数 (`fort.2`)

```
-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7
1:                                     49.875180
2:                                     43.480556
3:                                     55.578334
.....
```

List 17: 全断面積と弾性散乱断面積計算結果 (`fort.3`)

```
-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7
1:  ==> TOTAL CROSS SECTION = 15145.731445 MILLIBARNS
2:  TOTAL ELASTIC CROSS SECTION = 10481.677734 MILLIBARNS
3:  ==> TOTAL CROSS SECTION = 14086.979492 MILLIBARNS
4:  TOTAL ELASTIC CROSS SECTION = 9659.276367 MILLIBARNS
5:  ==> TOTAL CROSS SECTION = 16849.615234 MILLIBARNS
6:  TOTAL ELASTIC CROSS SECTION = 11350.437500 MILLIBARNS
.....
```

これらから KALMAN 用のファイルを作るのが `mkecsens.f` であり, これは `mkelsens.f` と殆ど同じプログラムである. 従って `mkelsens.f` と同様, Legendre 係数の共分散評価を行なう場合は `PARAMETER` 文を修正する必要がある. `PARAMETER(IPRM=1, IANG=2, ICRX=3, ILIB=0)` で, 弾性散乱断面積を複合核弾性散乱と形状弾性散乱の和として与えるなら `ILIB=4` とし, 複合核弾性散乱のみを与えるには `ILIB=-4` とする. `fort.4` の書式は, List 11 と同じである. `mkecsens` を実行すると, KALMAN で利用できる `fort.50, 52` が作成される. Fig.6 は, `fort.53` の Legendre 係数の部分をプロットしたものである.

#### 4.4.4 CASTHY(放射捕獲反応断面積)

統計模型計算コード CASTHY[6] は, Hauser-Feshbach-Moldauer 理論を用いて非弾性散乱断面積と放射捕獲断面積を計算する. このコードを利用してこれらの断面積の共分散を作成することができる. 共分散評価システムで使用する CASTHY は, 計算を全て倍精度で行い, UNIX の環境に合わせて, 入力データを標準入力から読み込み, 標準出力に出力する. さらに, 計算された断面積を `fort.22,23` (23 は結果確認のモニタ用) に出力するようにしている. ELIESE-3 の場



合と同様、オリジナルと区別するため、casthyt.fという名前に変えられている。

CASTHYは複数の入射エネルギーに対する計算を同時に行える。そのため、感度計算では共分散評価を行うエネルギー点全ての計算を行う入力ファイルを用意し、そのファイルの特定のパラメータに摂動を与える。CASTHYの入力データは、各パラメータにアドレスが与えられており、特定のアドレスに数値を書き込むようになっている。Cで書かれたプログラムmkcasin.cはCASTHYの入力データを標準入力から読み込み、ある特定のアドレスに書かれたパラメータのみに摂動を与えて標準出力に出すフィルタである。オプション+pnはn番のアドレスのパラメータに正の摂動を与えるオプションであり、-pnは負の摂動になる。このオプションによってCASTHYの入力のどの数値でも感度を計算する事が可能である。

中性子捕獲反応を計算する際に重要になるパラメータは、光学ポテンシャルパラメータ、標的核と複合核の準位密度パラメータである。捕獲反応断面積の絶対値を決定するのは困難なので、しばしばあるエネルギーで規格化が行われる。このため、規格化を行うエネルギーでは絶対値が固定され、全てのパラメータの感度は0になる。この規格化断面積もCASTHYの入力に与えられており、摂動計算では規格化断面積についても行う必要がある。

中性子捕獲反応断面積の共分散を作成するために、テンプレートとなるCASTHYの入力データを用意する。共分散を計算するエネルギー点は、この入力ファイルに定義される。

List 18: CASTHY 入力データ (放射捕獲反応断面積用)

```

-----1-----2-----3-----4-----5-----6-----7-----
1:      1      1      1      CASTHYT INPUT U-238 CAPTURE 50KEV - 20MEV
2:     24     92    238         28      5      1 -110         -19      1      1      1
3:          1 238.05099          4.803
4:          6  1.264          1.256      1.10
5:         11  0.612          0.553      0.612
6:         16 44.2354          6.3912      6.2
7:         21 -0.354          -0.232
8:         26          +0.03318
9:         32  1.29      0.010
10:        36 0.0000+ 0 0.0449+ 2 0.1484+ 4 0.3072+ 6 0.6801- 1
11:        41 0.7319- 3 0.8267- 5 0.9257+ 0 0.9308- 1 0.9502- 2
12:        46 0.9673+ 2 0.9930+ 0 0.9975- 3 1.0373+ 2 1.0566+ 4
13:        51 1.0595+ 3 1.0603+ 2 1.1057+ 3 1.1126- 1 1.1270+ 4
14:        56 1.1287- 2 1.1680+ 4 1.1704- 3 1.2242+ 2 1.2326- 4
15:        61 1.2692+ 6 1.2785- 1 1.2858- 5
16:        66 29.084      9.56      0.95          3.712
17:        71 29.666      9.69      0.47          2.359
18:        76 0.100      180.21
19:       101 5.000E-02 1.000E-01 2.000E-01 4.000E-01 6.000E-01
20:       106 8.000E-01 1.000E+00 1.200E+00 1.400E+00 1.600E+00
21:       111 2.000E+00 3.000E+00 4.000E+00 5.000E+00 6.000E+00
22:       116 8.000E+00 1.000E+01 1.200E+01 1.400E+01
23:       151 4.8008e-1 1.1078e+1 4.1804e+1 9.7291e+1 1.5562e+2
24:       156 2.3683e+2 3.3862e+2 4.9802e+2 7.8553e+2 1.0913e+3
25:       161 1.3614e+3 1.4619e+3 1.4382e+3 1.3137e+3 1.3139e+3
26:       166 1.6155e+3 1.5157e+3 1.4399e+3 1.5356e+3

```

このテンプレートを引数としてCASTHYの計算が実行できる事が確認できたら、このファイル

をmkcasinに通し、特定のアドレスの数値に摂動を与える。例えば、

```
% mkcasin +p16 template.dat | castyt > /dev/null
```

とすれば、16番のアドレス（実部ポテンシャルの深さ）に正の摂動を加えた計算を行うことになる。これらの計算結果と、mkcasinがfort.1に出力するパラメータの表に基づいて感度行列が作られる。感度行列を作るのはFORTRANプログラムmkcasens.fである。mkcasensは、fort.1からパラメータ、fort.22から断面積計算結果を読んで、結果をfort.50,52,53に出力する。感度計算の手順を自動的に行うShellスクリプトcasthy.sensを用意している。

List 19: casthy.sens

```
1: #!/bin/sh
2: prm=fort.1
3: in=casinput.dat
4: cp $1 ${in}
5: for p in 16 6 11 18 8 13 66 71 77 ; do
6:   mkcasin $1 -p${p} >> ${in}
7:   mkcasin $1 +p${p} >> ${in}
8: done
9: castyt < ${in} > /dev/null
10: mkcasens
11: rm ${in}
```

スクリプトの実行は、List 18を引数として、

```
% casthy.sens template.dat
```

とする。計算時間は、(テンプレートを直接計算するのに要する時間) × (パラメータの個数 × 2 + 1) である。

List 19では、6つの光学ポテンシャルパラメータと、複合核・残留核の準位密度パラメータについての感度計算を行なっている。感度を計算するパラメータを変える場合は、5行目に並べられたパラメータのアドレスを書き換える。mkcasensは、CASTHYの出力とmkcasinの出力から感度のファイルを作る。casthy.sensをそのまま使うなら、このプログラムの編集は特に必要無い。Fig.7は、fort.53の準位密度の部分をプロットしたものである。

CASTHYを使った捕獲反応断面積計算では、中性子のエネルギーが数MeVをこえると断面積が急激に減少する。これはエネルギー増加とともに核反応のチャンネルが増え、 $\gamma$ 線の放出による複合核の崩壊が起きにくくなるためであるが、実験では10MeVを越えるエネルギーでも捕獲反応が観測されている。これは直接過程での捕獲反応と巨大双極子共鳴を経由する捕獲反応が起るためである。評価核データライブラリでは測定値を再現する様な値を与えている場合があるが、この断面積はCASTHYでは計算できないので、このエネルギー領域での共分散評価では評価方法に応じて別の共分散を作成する必要がある。

#### 4.4.5 CASTHY(非弾性散乱断面積)

CASTHY を使って非弾性散乱断面積を計算しその共分散を求める方法は、中性子捕獲反応断面積での方法と同様であり、計算を行う入力ファイルを用意してmkcasinでこの入力ファイルのパラメータに摂動を与えながら感度行列を各離散準位に対して求める。ここで、CASTHY の出力オプション NOUTPT は、離散準位への非弾性散乱断面積を出力するために 100 にする。

List 20 : CASTHY 入力データ (非弾性散乱断面積用)

```

-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7-----*
1:      1      1 100      CASTHYT INPUT U-238 INELASTIC 50KEV - 20MEV
2:     24     92 238          28     5     1 -110          -19     1     1     1
.....
    
```

捕獲反応での感度計算では、各入射エネルギーに対応して捕獲断面積が得られたが、非弾性散乱断面積の場合は、ある入射エネルギーに対して準位の数だけ断面積が与えられる。そのため、実験データは各準位毎に用意する必要がある。実際は、計算する全離散準位の内、幾つかに測定データがあれば他の準位の非弾性散乱断面積共分散も計算できるので、全て用意する必要はない。

#### 4.4.6 EGNASH4

EGNASH4 では入力パラメータの多くを内部で用意するため、入力ファイルの数値に摂動を与えることはできない。そのため共分散評価システムで用意した egnash4t.f は、入力データ中にフラグを作り、そのフラグに応じてプログラム内部でパラメータに摂動を与えるように改造されている。計算は全て倍精度で行い、光学ポテンシャルパラメータ (中性子, 陽子,  $\alpha$  粒子), 準位密度パラメータ, 前平衡パラメータに対して感度が計算される。各パラメータには 1~61 のインデックスがつけられている。これを Table 2,3 に示す。

Table 2: 光学ポテンシャルパラメータのインデックス (10,20,30,40 は未使用)

	中性子		陽子		$\alpha$ 粒子		重陽子
1	V	11	V	21	V	31	V
2	$r_V$	12	$r_V$	22	$r_V$	32	$r_V$
3	$a_V$	13	$a_V$	23	$a_V$	33	$a_V$
4	$W_s$	14	$W_s$	24	$W_s$	34	$W_s$
5	$r_{W_s}$	15	$r_{W_s}$	25	$r_{W_s}$	35	$r_{W_s}$
6	$a_{W_s}$	16	$a_{W_s}$	26	$a_{W_s}$	36	$a_{W_s}$
7	$W_v$	17	$W_v$	27	$W_v$	37	$W_v$
8	$r_{W_v}$	18	$r_{W_v}$	28	$r_{W_v}$	38	$r_{W_v}$
9	$a_{W_v}$	19	$a_{W_v}$	29	$a_{W_v}$	39	$a_{W_v}$
10	—	20	—	30	—	40	—

EGNASH4 の実行には、入力データ他に Mass Excess のファイル (mass.wap) と離散準位データのファイル (glevel.dat) が必要である。これらは egnash4t のあるディレクトリに含まれてい

Table 3: 準位密度パラメータ, 前平衡パラメータのインデックス ( $ZA = 1000 \times Z + A$ )

	ZA	核種
41	ZACN	複合核の準位密度パラメータ
42	ZACN - 1	標的核の準位密度パラメータ
43	ZACN - 1001	(n, p) 反応の残留核
44	ZACN - 2004	(n, $\alpha$ ) あるいは (n, 2d) の残留核
45	ZACN - 1 - 1	(n, 2n) の残留核
46	ZACN - 1 - 1001	(n, np) あるいは (n, d) の残留核
47	ZACN - 1 - 2004	(n, n $\alpha$ ) の残留核
48	ZACN - 1001 - 1001	(n, 2p) の残留核
49	ZACN - 1001 - 2004	(n, p $\alpha$ ) の残留核
50	ZACN - 2004 - 2004	(n, 2 $\alpha$ ) の残留核
51	ZACN - 1 - 1002	(n, nd) あるいは (n, 2np) の残留核
52	ZACN - 1001 - 1002	(n, pd) あるいは (n, n2p) の残留核
53	ZACN - 2004 - 1002	(n, $\alpha$ d) あるいは (n, np $\alpha$ ) の残留核
61		前平衡パラメータ $F_2$

る。さらに、もし必要なら DWUCK など で計算した直接反応断面積のファイルを用意する。共分散評価用に追加された入出力は、fort.21, 22, 23 であり、感度計算で必要なのは 21 番と 23 番だけである。

テンプレートとなる EGNASH4 のの入力データを用意する。共分散を計算するエネルギー点は、この入力ファイルに定義される。List 21 は EGNASH4 入力データの例である。感度計算用のフラグを EGNASH4 に知らせるため、入力ファイルの 3 行目の最後のコラムに整数値を入力するようにしている。この数値が正であればそのインデックスのパラメータに正の摂動が与えられ、負であれば負の摂動が与えられる。感度計算を簡略にするため、このフラグを自動的に書き換えるフィルタ mkegin.c を用意している。

通常の断面積計算を UNIX で行うには、次の様にする。

```
% ln mass.wap fort.1
% ln level.dat fort.8
% egnash4t < input.dat
```

この手順を実行するためのスクリプト egrun を用意している。List 21 のテンプレートファイルが用意できたら、

```
% egrun < input.dat
```

としてみて、正しく計算できるかどうか確認する。

## List 21 : EGNASH4 入力データ

```

-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7-----*-----
1: EGNASH4 INPUT DATA Fe56+n
2:
3:   0   0  11   0   0   1   0  -1   0   0   0
4:   1.000 26056.000   .500   1.000
5:   .000
6:  18
7:   3.000   4.000   5.000   6.000   7.000   8.000   9.000  10.00
8:  11.000  12.000  13.000  14.000  15.000  16.000  17.000  18.00
9:  19.000  20.000
10:   7
11: 26057.000   4.000
12: 26056.000   4.000
13: 26055.000   4.000
14: 25056.000   4.000
15: 25055.000   4.000
16: 24053.000   4.000
17: 24052.000   4.000
18:   .000   .000   .000   .000

```

mkegsens は、fort.21 からパラメータ、fort.23 から断面積計算結果を読んで、結果を fort.50,52,53 に出力する。EGNASH4 での感度計算も、スクリプト egnash.sens で自動化される。

```
% egnash.sens template.dat
```

## List 22 : egnash.sens

```

1: #!/bin/sh
2:
3: cp /dev/null Fort.21
4: cp /dev/null Fort.22
5: cp /dev/null Fort.23
6: in=eginput.dat
7: ./egrun < $1
8: for p in 1 2 4 5 11 12 14 15 21 22 27 28 41 42 43 44 45 46 47 61; do
9:   ./mkegin $1 -p${p} >${in} ; ./egrun < ${in}
10:  ./mkegin $1 +p${p} >${in} ; ./egrun < ${in}
11: done
12: rm ${in}
13: cp Fort.21 fort.21
14: cp Fort.23 fort.23
15: ./mkegsens

```

共分散計算に使用するパラメータの選択は重要である。一般的には、計算対象への感度の大きなものを採用する。List 22 では、 $n$ ,  $p$ ,  $\alpha$  の光学ポテンシャルの深さと半径パラメータと、複合核・残留核の準位密度パラメータ、前平衡パラメータについての感度計算を行なっている。 $n$ ,  $p$ ,  $\alpha$  放出反応で、3 粒子放出過程まで計算する場合は、これらのパラメータだけで十分である。Fig.8 に  $^{56}\text{Fe}(n, p)$  反応に対する  $n$ ,  $p$ ,  $\alpha$  粒子光学ポテンシャルの実部深さの感度を示す。また、Fig.9 には  $^{57}\text{Fe}$ ,  $^{56}\text{Fe}$ ,  $^{56}\text{Mn}$  の準位密度パラメータの感度を示す。

共分散評価は、崩壊する複合核 (List 21 の 11~17 行) の生成断面積に対して行なわれる。

List 21 では,  $(n, \gamma)$ ,  $(n, n')$ ,  $(n, 2n)$ ,  $(n, p)$ ,  $(n, np)$ ,  $(n, \alpha)$ ,  $(n, n\alpha)$  反応の共分散が計算される. 数種の反応断面積が同時に計算されるため, 実験データはそれらの断面積のもので可能なものは全て用意する必要がある. mkegsens は, これら 7 つの複合核の生成断面積を fort.50 に作成する. この順序が, 反応ブロックのインデックスとなる.

List 23 : fort.50

```

-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7
1:      1      26057      18
2:  3.0000E+00  1.2376E-03  4.0000E+00  5.5784E-04  5.0000E+00  1.8375E-04
3:  6.0000E+00  1.0366E-04  7.0000E+00  7.8537E-05  8.0000E+00  6.7998E-05
4:  9.0000E+00  6.4401E-05  1.0000E+01  6.1658E-05  1.1000E+01  6.0125E-05
5:  1.2000E+01  5.9392E-05  1.3000E+01  5.9182E-05  1.4000E+01  5.9231E-05
6:  1.5000E+01  5.9593E-05  1.6000E+01  5.9415E-05  1.7000E+01  5.8725E-05
7:  1.8000E+01  5.7785E-05  1.9000E+01  5.6415E-05  2.0000E+01  5.4654E-05
8:      2      26056      18
9:  3.0000E+00  1.6676E+00  4.0000E+00  1.5556E+00  5.0000E+00  1.5385E+00
10: 9.0000E+00  1.4524E+00  1.0000E+01  1.4252E+00  1.1000E+01  1.3888E+00
.....
11:      7      24052      18
12: 3.0000E+00  0.0000E+00  4.0000E+00  0.0000E+00  5.0000E+00  0.0000E+00
13: 6.0000E+00  0.0000E+00  7.0000E+00  0.0000E+00  8.0000E+00  0.0000E+00
14: 9.0000E+00  0.0000E+00  1.0000E+01  1.3350E-09  1.1000E+01  1.8052E-06
15: 1.2000E+01  2.4112E-05  1.3000E+01  1.4419E-04  1.4000E+01  6.1348E-04
16: 1.5000E+01  2.2867E-03  1.6000E+01  6.2087E-03  1.7000E+01  1.2304E-02
17: 1.8000E+01  2.0278E-02  1.9000E+01  2.8912E-02  2.0000E+01  3.7605E-02

```

KALMAN への入力データは, 実験データの種類と感度の種類が対応するように, ブロックのインデックスを与える. 例えば, ファイルの最初に  $(n, p)$  反応断面積のデータが 4 種類, 次に  $(n, 2n)$  反応が 2 種類, さらに再び  $(n, p)$  反応が 3 種類ある場合の入力ファイルは, 次のようになる.

List 24 : KALMAN 制御ファイル (stdin)

```

-----*-----1-----*-----2-----*-----3-----*-----4-----*-----5-----*-----6-----*-----7
1: KALMAN INPUT DATA
2:      3      20      0      0      0
3:      1      2      3      4      5      6      7      8      9     10     11     12     13     14
4:     15     16     17     18     19     20
4:      4      4
5:  1.000E+00  1.000E+00  1.000E+00  1.000E+00
6:      3      2
7:  1.000E+00  1.000E+00
6:      4      3
7:  1.000E+00  1.000E+00  1.000E+00

```

## 5 $^{238}\text{U}$ 断面積共分散の評価

### 5.1 $(n, 2n)$ 反応断面積共分散

JENDL-3.2 の $^{238}\text{U}(n, 2n)$  反応断面積は測定データに基づいて評価されている。評価に使用されたデータは、Veesser and Arthur[12], Frehaut, *et al.* [13], Karius, *et al.* [14] の測定値である。データ共分散は与えられていないので、文献から統計誤差・系統誤差を調査し、相関係数を与えた。

評価値共分散の算出は SPLCOV を用いて、区間平均による最小二乗法で行なった。得られた共分散を Fig.10 に示す。このときの $\chi^2$ は、JENDL-3.2 に対しては 0.749、ここでの平均値に対しては 4.13 であった。Fig.11 は、評価された誤差を実験値の誤差と比較したものである。実線は実験データの誤差の相関を考慮した場合、点線はデータに相関無しとした場合である。エネルギーが 20 MeV 付近で誤差が極めて大きくなるが、これは断面積そのものが非常に小さいためである。

### 5.2 $(n, 3n)$ 反応断面積共分散

$(n, 3n)$  反応の断面積も、実験データに基づいた評価が行なわれている。評価に使用した実験データは Veesser and Arthur[12] のものである。実験データの誤差の相関は、文献から統計誤差・系統誤差を求めて算出した。SPLCOV を用い、0 次の計算でこの断面積共分散を計算した結果を、Fig.12 に示す。このときの $\chi^2$ は、JENDL-3.2 に対して 10.6、ここでの平均値に対して 4.70 であった。

### 5.3 全断面積共分散

JENDL-3.2 の $^{238}\text{U}$  全断面積は、ECIS88 を使ったチャンネル結合計算で評価されている。使用した光学ポテンシャルは、次式の Haouat *et al.* [15] のものであり、回転バンドの  $0^+ - 2^+ - 4^+$  を結合させた。

$$\begin{aligned}
 V &= 46.2 - 0.3E & r_V &= 1.26 & a_V &= 0.63 \\
 W_s &= 3.6 + 0.4E & r_{W_s} &= 1.26 & a_{W_s} &= 0.52 \\
 V_{SO} &= 6.2 & r_{SO} &= 1.12 & a_{SO} &= 0.47 \\
 \beta_2 &= 0.198 \\
 \beta_4 &= 0.057
 \end{aligned} \tag{36}$$

これを ecisin.c に追加して感度計算を行ない、共分散を算出した。KALMAN に使用した測定データは、Schwartz, *et al.* [16], Whalen and Smith[17], Foster and Glasgow *et al.* [18], Hayes, *et al.* [19], Poenitz, *et al.* [20], Peterson, *et al.* [21], Bratenahl, *et al.* [22], Batchelor, *et al.* [23], Baba, *et al.* [24], Voignier[25], Tsubone, *et al.* [26], Mubarakmand, *et al.* [27], Cabe and Cance[28] である。測定データの誤差には相関無しとした。

得られた光学ポテンシャルの共分散を List 25 に示す。Fig.13 は、全断面積の共分散である。このときの $\chi^2$ は、計算値に対して 2.1、JENDL-3.2 の評価値に対して 3.2 であった。JENDL-3.2

の評価値は、Eq.(36)を用いた計算値に基づいているが、低エネルギー領域では実験データに基づいて修正を行なっているため、 $\chi^2$ の値が異なっている。

List 25 : 光学ポテンシャルパラメータの共分散

1:	PARAMETER	INITIAL	FINAL	ERROR								
2:												
3:	1 V1	4.6200E+01	4.5384E+01	7.7131E-02 (%)								
4:	2 R0	1.2600E+00	1.2833E+00	8.2857E-02 (%)								
5:	3 A0	6.3000E-01	5.8887E-01	3.9791E-01 (%)								
6:	4 WS1	3.6000E+00	3.5643E+00	4.0539E-01 (%)								
7:	5 RS	1.2600E+00	1.2655E+00	2.8387E-01 (%)								
8:	6 AS	5.2000E-01	5.3292E-01	6.8203E-01 (%)								
9:	7 BETA2	1.9800E-01	1.8564E-01	2.5571E-01 (%)								
10:	8 BETA4	5.7000E-02	6.8435E-02	5.6781E-01 (%)								
11:												
12:			1	2	3	4	5	6	7	8		
13:	1 V1	4.54E+01	1000									
14:	2 R0	1.28E+00	-890	1000								
15:	3 A0	5.89E-01	761	-934	1000							
16:	4 WS1	3.56E+00	-366	253	-39	1000						
17:	5 RS	1.27E+00	563	-749	857	32	1000					
18:	6 AS	5.33E-01	-446	594	-790	-243	-887	1000				
19:	7 BETA2	1.86E-01	362	-623	514	-215	410	-284	1000			
20:	8 BETA4	6.84E-02	391	-86	2	26	-10	66	-296	1000		

#### 5.4 非弾性散乱断面積共分散

JENDL-3.2の非弾性散乱断面積の評価は、ECIS88による直接過程の断面積 $\sigma_{DI}$ と、CoH[29]によるHauser-Feshbach-Moldauer計算の断面積 $\sigma_{CN}$ の和で与えられている。直接過程の回転バンドの断面積は、Haouat, *et al.* [15]のパラメータから計算することができる。振動準位への非弾性散乱断面積は、回転バンド-振動バンド結合強度 $\beta$ を求めることで計算される。 $\beta$ は、Baba, *et al.* [30]のDDXデータに基づいて決定した。

直接過程の共分散は、Eq.(36)の非弾性散乱計算への感度をECIS88で計算することで得られる。これには、`ecis.sens`で全断面積計算結果を切り出す部分を、共分散を作成しようとする準位の断面積に置き換える。

複合核過程の共分散は、再規格化因子 $\alpha$ を使って非弾性散乱断面積の励起関数を $\sigma_{incl.} = \sigma_{DI} + \alpha\sigma_{CN}$ と表現し、 $\alpha$ をパラメータとした感度計算を行なった。

$$\frac{\partial \sigma_{incl.}}{\partial \alpha} = \sigma_{CN} \quad (37)$$

であるから、 $\alpha$ の非弾性散乱断面積に対する感度は、複合核過程の断面積そのものとなる。従って、非弾性散乱の共分散に必要な感度行列は、

$$C = \begin{pmatrix} \frac{\partial \sigma_{DI}(E_1)}{\partial V} & \frac{\partial \sigma_{DI}(E_1)}{\partial r_V} & \cdots & \sigma_{CN}(E_1) \\ \frac{\partial \sigma_{DI}(E_2)}{\partial V} & \frac{\partial \sigma_{DI}(E_2)}{\partial r_V} & \cdots & \sigma_{CN}(E_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \end{pmatrix} \quad (38)$$



のような構造を持つ。この感度行列と第一励起準位・第二励起準位の測定値から、パラメータの共分散を求め、非弾性散乱断面積の共分散を計算した。使用した測定値は、第一励起準位では Beghian, *et al.* [31], Guenther, *et al.* [32], Haouat, *et al.* [15], Smith [34], Tsang and Brugger [33], Vorotnikov, *et al.* [35] のデータ、第二励起準位では Beghian, *et al.* [31], Guenther, *et al.* [32], Haouat, *et al.* [15], Smith [34], Vorotnikov *et al.* [35] のデータである。測定データの誤差には相関無しとした。得られた共分散を Fig.14 と Fig.15 に示す。

第三励起準位以上への非弾性散乱断面積では、共分散を評価するのに十分な測定データが存在しないので、第一・二励起準位のデータで得られたパラメータの誤差の伝播から共分散を計算した。この場合、非弾性散乱断面積が複合核の成分のみの場合はパラメータが $\alpha$ のみとなるので、相関係数が全て1になる。

## 5.5 放射捕獲断面積共分散

放射捕獲反応断面積の計算には、CASTHYを使用した。用いた光学ポテンシャルは、Madland-Young [11] の球形光学ポテンシャルである。準位密度パラメータには Gilbert-Cameron [8] を用いた。測定データは、Fricke [36], Drake, *et al.* [37], Lindner [38], Poenitz [39], Diven, *et al.* [40], McDaniel, *et al.* [41], Barry, *et al.* [42], Perkin, *et al.* [43], Broda [44], Huang, *et al.* [45], Panitkin, *et al.* [46], Davletshin, *et al.* [47], Buleeva, *et al.* [48], Kazakov, *et al.* [49] のもので、データに系統誤差の情報が与えられているものはデータの共分散を作成し、その他は誤差だけを用いた。

統計模型計算でエネルギーが数 MeV 以上では中性子放出過程が主であるため、捕獲反応断面積は極めて小さい値となる。しかし McDaniel, *et al.* [41], Drake, *et al.* [37], Huang, *et al.* [45] らの測定では、10 MeV 付近のエネルギー領域で約 1 mb の値を得ている。また、JENDL-3.2 の評価値も CASTHY の計算値でなく、実験値を採用している。

Clement, *et al.* [50] は、重核の MeV 領域の捕獲反応を直接捕獲と巨大双極子共鳴による捕獲で説明し、これを DSD (Direct-Semidirect) 理論と呼んでいる。この断面積を計算するのに必要なパラメータは、Direct 過程の光学ポテンシャルパラメータと、Semidirect 過程の結合強度である。DSD の断面積を計算するプログラムを作成し、パラメータの感度を計算した。DSD 計算に必要な Nilsson 準位の振幅、巨大双極子共鳴のエネルギーと幅、平均二乗半径、は Kitazawa, *et al.* [51] の値を採用した。また、核内波動関数は調和振動子の波動関数で近似し、核外波動関数は球形光学ポテンシャルによる歪曲波を用いた。

この DSD 理論での MeV 領域の捕獲断面積の共分散を CASTHY の計算での共分散に加えて、最終的な捕獲断面積共分散とした。これを Fig.16 に示す。

## 6 結論

本報告では、最小二乗法とパラメータ推定法を用いた共分散評価方法の原理を示し、核データ共分散評価へ応用する方法を与えた。さらに、評価済み核データライブラリに対して共分散を与える標準的な方法を確立し、この方法を JENDL の評価者が利用できるように共分散評価システムを構築した。

共分散評価システムは、パラメータ推定プログラム KALMAN を中心として、核データ評価に広く利用されている球形光学模型計算コード、チャンネル結合理論計算コード、Hauser-Feshbach-Moldauer 統計模型計算コードを利用したプログラム集合体として構築された。

共分散評価の基本は、核反応模型計算のパラメータの誤差を実験データの誤差から見積もり、ここから評価データの共分散を作成するものである。共分散評価システムを利用してこの共分散を効率よく評価できることを<sup>238</sup>U の評価済み核データライブラリの共分散評価に適用して示し、実験データの誤差の情報と矛盾することなく、さらに核反応理論とも矛盾しない共分散が得られる事を示した。

## 謝辞

本報告をまとめるにあたって、中島豊博士(高度情報科学技術研究機構)、長谷川明博士、千葉敏博士、杉本昌義博士、深堀智生博士、岩本修博士、(以上、日本原子力研究所)、石川眞博士(動力炉・核燃料開発事業団)、小田野直光博士(船舶技術研究所)、神田幸則博士(大分工業高等専門学校)、松延廣幸博士(データ工学)、村田徹博士(アイテル技術サービス)、OH Soo Youl 博士(KAERI)の皆様に貴重な助言を頂きましたことを感謝いたします。

## 6 結論

本報告では、最小二乗法とパラメータ推定法を用いた共分散評価方法の原理を示し、核データ共分散評価へ応用する方法を与えた。さらに、評価済み核データライブラリに対して共分散を与える標準的な方法を確立し、この方法を JENDL の評価者が利用できるように共分散評価システムを構築した。

共分散評価システムは、パラメータ推定プログラム KALMAN を中心として、核データ評価に広く利用されている球形光学模型計算コード、チャンネル結合理論計算コード、Hauser-Feshbach-Moldauer 統計模型計算コードを利用したプログラム集合体として構築された。

共分散評価の基本は、核反応模型計算のパラメータの誤差を実験データの誤差から見積もり、ここから評価データの共分散を作成するものである。共分散評価システムを利用してこの共分散を効率よく評価できることを<sup>238</sup>U の評価済み核データライブラリの共分散評価に適用して示し、実験データの誤差の情報と矛盾することなく、さらに核反応理論とも矛盾しない共分散が得られる事を示した。

## 謝辞

本報告をまとめるにあたって、中島豊博士(高度情報科学技術研究機構)、長谷川明博士、千葉敏博士、杉本昌義博士、深堀智生博士、岩本修博士、(以上、日本原子力研究所)、石川眞博士(動力炉・核燃料開発事業団)、小田野直光博士(船舶技術研究所)、神田幸則博士(大分工業高等専門学校)、松延廣幸博士(データ工学)、村田徹博士(アイテル技術サービス)、OH Soo Youl 博士(KAERI)の皆様に貴重な助言を頂きましたことを感謝いたします。

## 参考文献

- [1] H.Vonach, *Proc. of Advisory Group Meeting*, Beijing, Oct. 12-16, 1987, IAEA Vienna(1988).
- [2] D.M.Hetrick, D.C.Larson, and C.Y.Fu : "Generation of Covariance Files for the Isotopes of Cr,Fe, Ni, and Pb in ENDF/B-VI," ORNL/TM-11763, ENDF-350(1991).
- [3] 繁榊算男 : "Bayes 統計学入門," 東京大学出版 (1985).
- [4] S.Igarasi : "Program ELIESE-3, Program for Calculation of the Nuclear Cross Sections by Using Local and Non-Local Optical Models and Statistical Model," JAERI-1224, (1972).
- [5] J.Raynal : Program ECIS88, unpublished.
- [6] S.Igarasi and T.Fukahori : "Program CASTHY, Statistical Model Calculation for Neutron Cross Sections and Gamma Ray Spectrum," JAERI-1321, (1991).
- [7] P.G.Young and E.D.Arthur : "GNASH, A Pre-equilibrium, Statistical Nuclear-Model Code for Calculation of Cross Section and Emission Spectra," LA-6947, (1977).
- [8] A.Gilbert and A.G.W.Cameron : *Can. J. Phys.*, **43**, 1446(1965).
- [9] E.Gadioli and P.E.Hodgson : "Pre-Equilibrium Nuclear Reactions," Oxford, (1992).
- [10] C.Kalbach : *Z. Phys.*, **A287**, 319 (1978).
- [11] D.G.Madland and P.G.Young : *Proc. Int. Conf. Neutron Physics and Nuclear Data for Reactions and Other Applied Purposes*, Harwell, UK, 349(1978).
- [12] L.R.Veeser and E.D.Arthur : *Proc. Int. Conf. Neutron Physics and Nuclear Data for Reactions and Other Applied Purposes*, Harwell, UK, 1054(1978).
- [13] J.Frehaut, A.Bertin, R.Bois, and J.Jary : *Nucl. Sci. Eng.*, **74**, 19(1980).
- [14] H.Karius, A.Ackermann, and W.Scobel : *J. Phys.*, *G*, **5**, 5, 715 (1979).
- [15] G.Haouat, J.Lachkar, Ch.Lagrange, J.Jary, J.Sigaud, and Y.Patin : *Nucl. Sci. Eng.*, **81**, 491 (1982).
- [16] R.B.Schwartz, R.A.Schrack, and H.T.Heaton II : *Nucl. Sci. Eng.*, **54**, 322(1974).
- [17] J.F.Whalen, and A.B.Smith : ANL-7710, 9(1971).
- [18] D.G.Foster and D.W.Glasgow : *Phys. Rev.*, **C3**, 576(1971).
- [19] S.Hayes, P.Stoler, J.M.Clement, C.A.Goulding : *Nucl. Sci. Eng.*, **50**, 243(1973).

- [20] W.P.Poenitz, J.F.Whalen, and A.B.Smith : *Nucl. Sci. Eng.*, **78**, 333(1981).
- [21] J.M.Peterson, A.B.Bratenahl, and J.P.Stoering : *Phys. Rev.*, **120**, 521(1960).
- [22] A.B.Bratenahl, J.M.Peterson, and J.P.Stoering : *Phys. Rev.*, **110**, 927(1958).
- [23] R.Batchelor, W.B.Gilboy, J.H.Towle : *Nucl. Phys.*, **65**, 236(1965).
- [24] M.Baba, K.Nomoto, K.Kanda, N.Hirakawa, J.Mitui, and T.Momota : EANDC(J)-30, 66(1973).
- [25] J.Voignier : CEA-R-3503(1968).
- [26] I.Tsubone, Y.Nakajima, Y.Furuta, Y.Kanda : *Nucl. Sci. Eng.*, **88**, 579(1984).
- [27] S.Mubarakmand, M.Ahmad, M.Anwar, and M.S.Chaudhry : *Nucl. Inst. Method*, **115**, 345(1974).
- [28] J.Cabe, and M.Cance : CEA-R-4524(1973).
- [29] T.Kawano : program CoH, unpublished.
- [30] M.Baba, H.Wakabayashi, N.Ito, K.Maeda, N.Hirakawa : *Nucl. Sci. Technol.*, **27**, 601(1990).
- [31] L.E.Beghian, G.H.R.Kegel, T.V.Marcella, B.K.Barnes, G.P.Couchell, J.J.Egan, A.Mittler, D.J.Pullen, and W.A.Schier : *Nucl. Sci. Eng.*, **69**, 191(1979).
- [32] P.Guenther, D.Havel, and A.Smith : ANL/NDM-16 (1975).
- [33] F.Y.Tsang, and R.M.Brugger : *Nucl. Sci. Eng.*, **65**, 70(1978).
- [34] A.Smith : *Nucl. Phys.*, **47**, 633(1963).
- [35] P.E.Vorotnikov, V.A.Vukolov, E.A.Koltypin, Ju.D.Molchanov, G.A.Otoshchenko, and G.B.Jan'kov : *Proc. Int. Conf. fourth All Union Conf. on Neutron physics*, Kiev, vol.2 119(1977).
- [36] M.P.Fricke : *Proc. third Conf. Neutron Cross-Section and Technology*, Knoxville, 1971, vol.1, 252(1971).
- [37] D.Drake, I.Bergqvist, and D.K.McDaniels : *Phys. Lett.*, **B36**, 557(1971).
- [38] M.Lindner : *Nucl. Sci. Eng.*, **59**, 381(1976).
- [39] W.P.Poenitz : *Nucl. Sci. Eng.*, **57**, 300(1975).
- [40] B.C.Diven, J.Terrell, and A.Hemmendinger : *Phys. Rev.*, **120**, 556(1960).

- [41] D.K.McDaniels, P.Varghese, D.M.Drake, E.Arthur, A.Lindholm, I.Bergqvist, and J.Krumlinde : *Nucl. Phys.*, **A384**, 88(1982).
- [42] J.F.Barry, J.Bunce, and P.H.White : *J. Nucl. Energ.*, **18**, 481(1964).
- [43] J.L.Perkin, L.P.O'Connor, R.F.Coleman : *Proc. Phys. Soc.*, **72**, 505(1958).
- [44] Broda : BR-574 (1945).
- [45] Z.Huang, Z.Cao, H.Wang, J.Liu, and D.Ding : LBL-11118, 243(1980).
- [46] Ju.G.Panitkin, and V.A.Tolstikov : *Atomnaja Energija*, **33**, 782(1972).
- [47] A.N.Dabletshin, A.O.Tipunkov, and V.A.Tolstikov : *Proc. third All Union Conf. on Neutron physics*, Kiev, **4**, 109(1976).
- [48] N.N.Buleeva, A.N.Davletshin, A.O.Tipunkov, S.V.Tikhonov. and V.A.Tolstikov : *Atomnaja Energija*, **65**, 348(1988).
- [49] L.E.Kazakov, V.N.Kononov, G.N.Manturov, E.D.Poletaev, M.V.Bokhovko, V.M.Timokhov, and A.A.Voevodskij : *Jadernye Konstanty*, **3**, 37(1986).
- [50] C.F.Clement, A.M.Lane, and J.R.Rook : *Nucl. Phys.*, **66**, 273(1965).
- [51] H.Kitazawa, T.Hayase, and N.Yamamuro : *Nucl. Phys.*, **A307**, 1(1978).

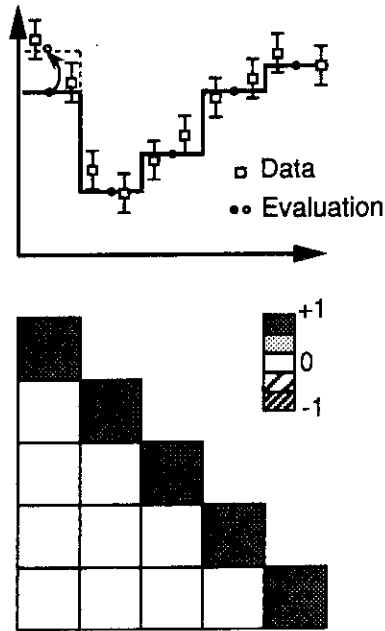


Fig. 1: A schematic drawing of the correlation matrix. The evaluated value is an average of the experimental data within a certain interval.

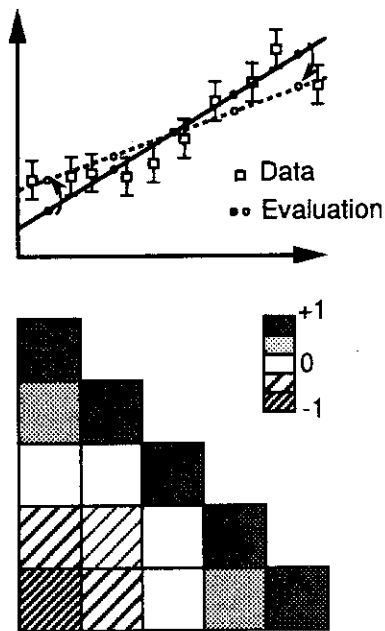


Fig. 2: A schematic drawing of the correlation matrix. A linear function is used to evaluate the experimental data.

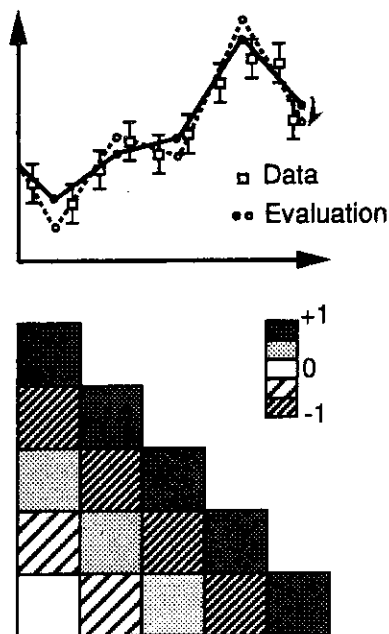


Fig. 3: A schematic drawing of the correlation matrix. A first order B-Spline function is used to evaluate the experimental data.

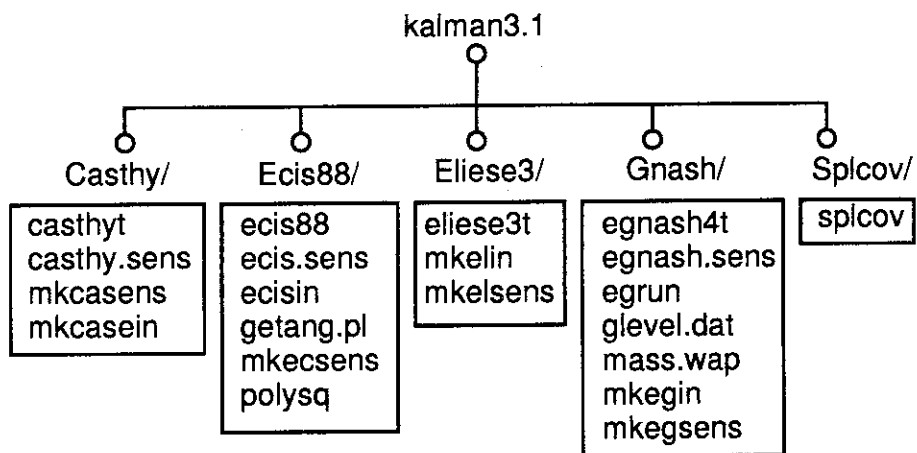


Fig. 4: Covariance evaluation system



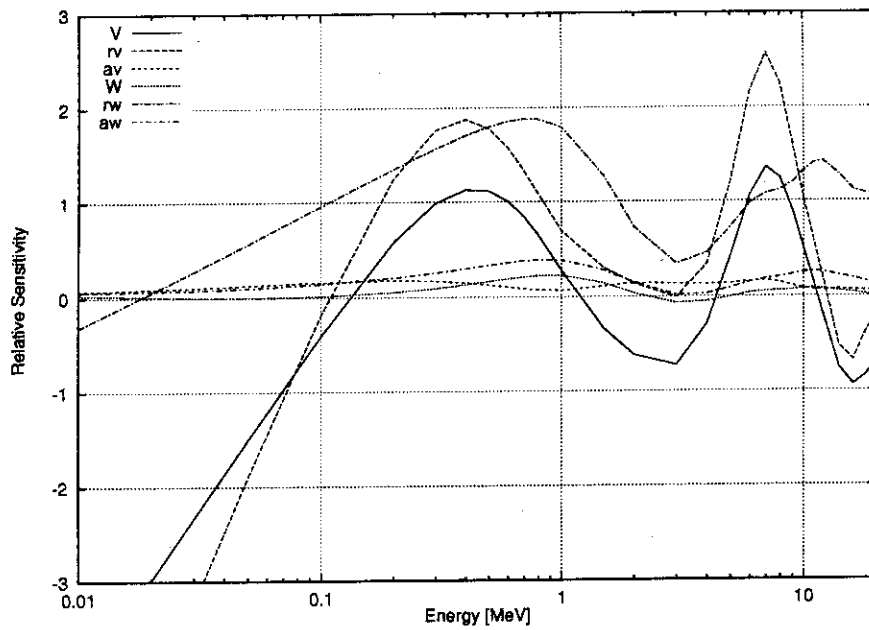


Fig. 5: Relative sensitivities of the spherical optical potential parameters to the total cross sections.

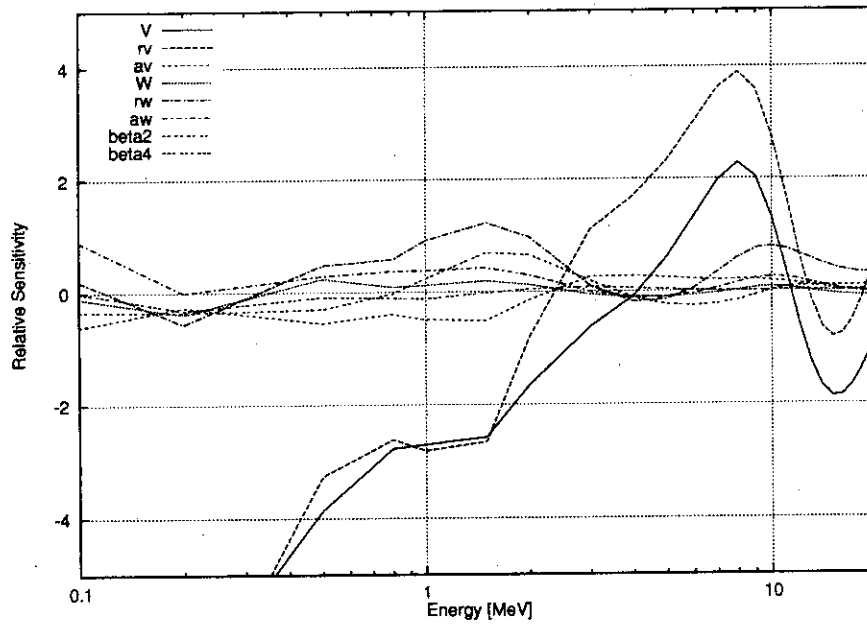


Fig. 6: Relative sensitivities of the deformed optical potential parameters to the Legendre coefficient ( $\ell = 1$ ).

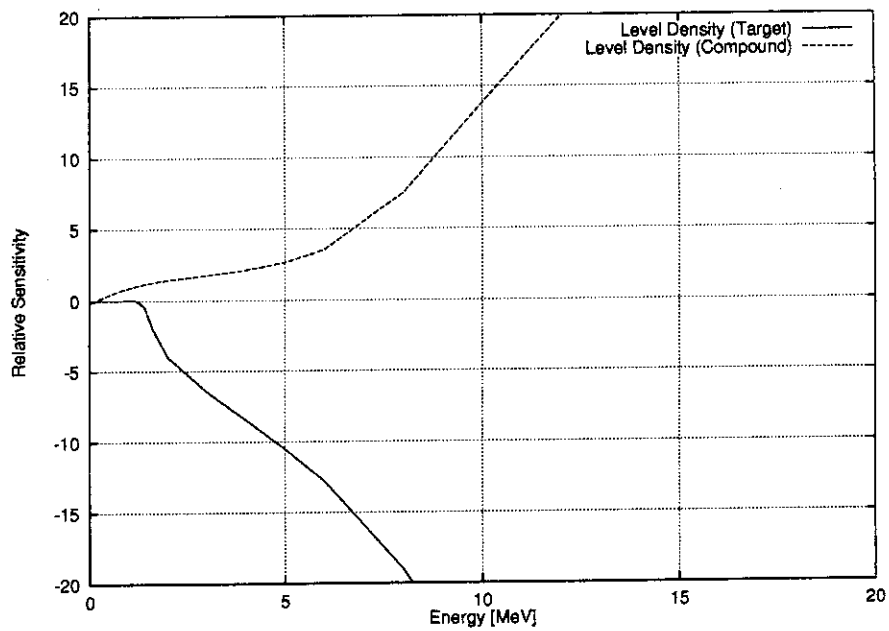


Fig. 7: Relative sensitivities of the level density parameters to the radiative capture cross sections.

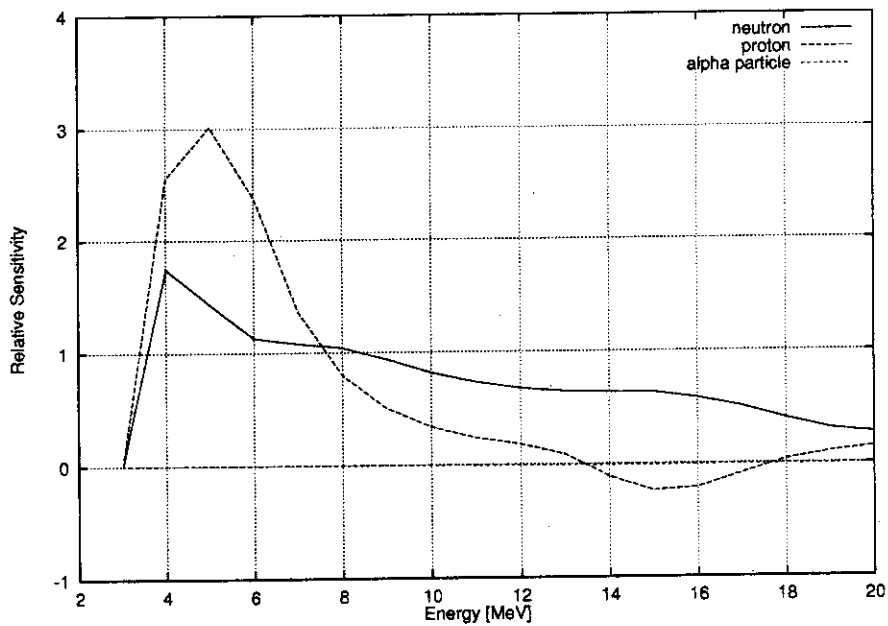


Fig. 8: Relative sensitivities of the depth of the optical potentials to the  $^{56}\text{Fe}(n,p)$  reaction cross sections.

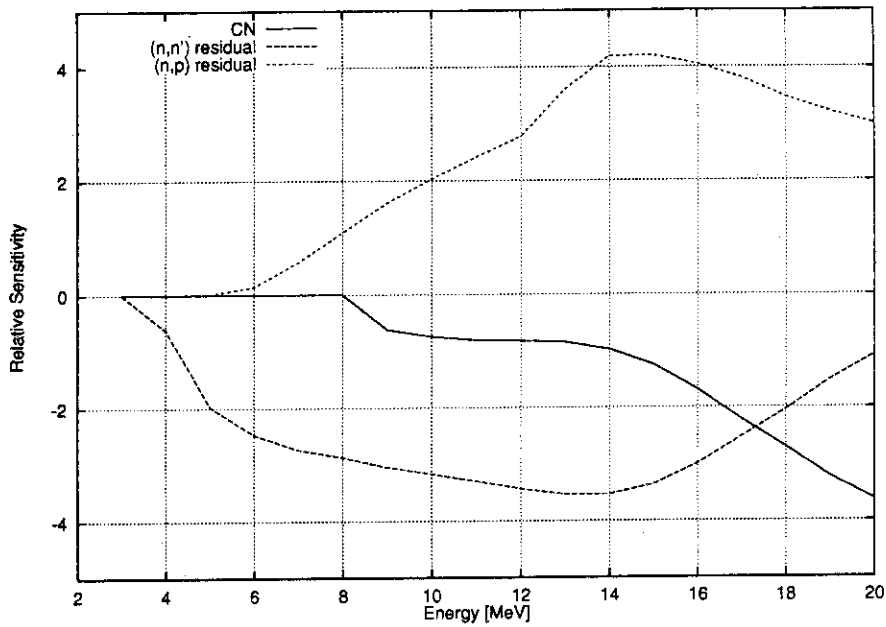


Fig. 9: Relative sensitivities of the level density parameters to the  $^{56}\text{Fe}(n,p)$  reaction cross sections.

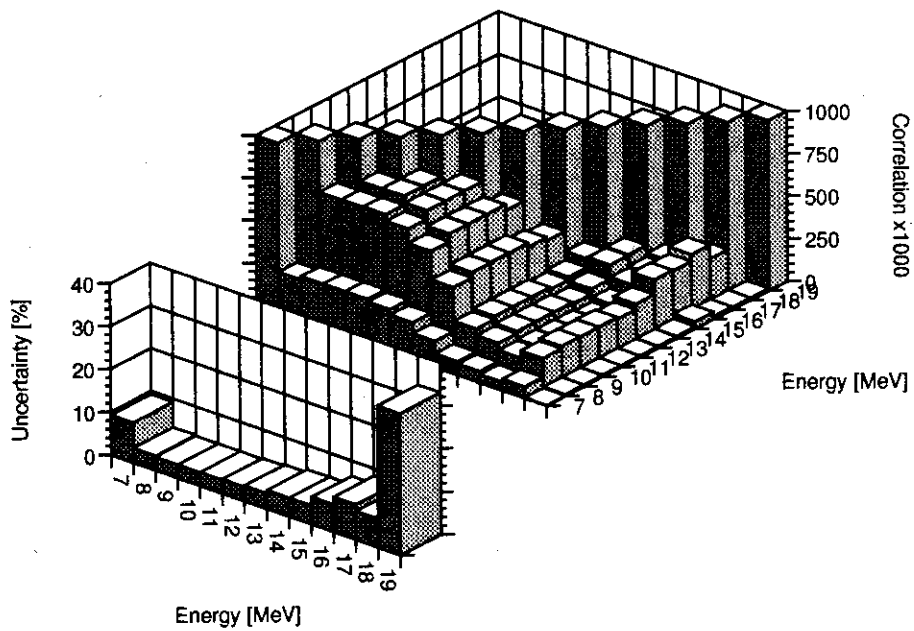


Fig. 10: Covariance of the  $^{238}\text{U}(n,2n)$  reaction cross sections,  $\chi^2 < 1.0$ .

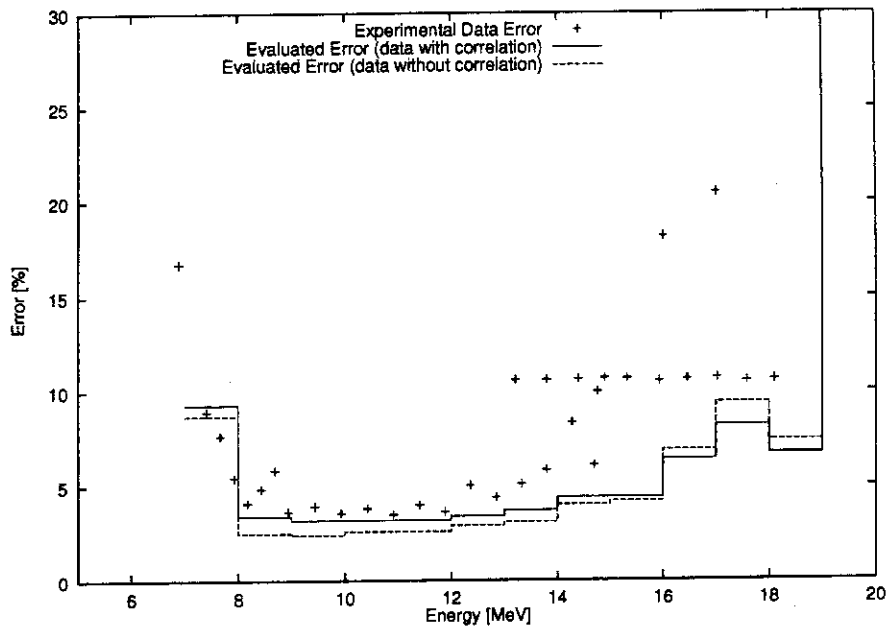


Fig. 11: Comparison of the uncertainties of the evaluated data with those of experimental data.

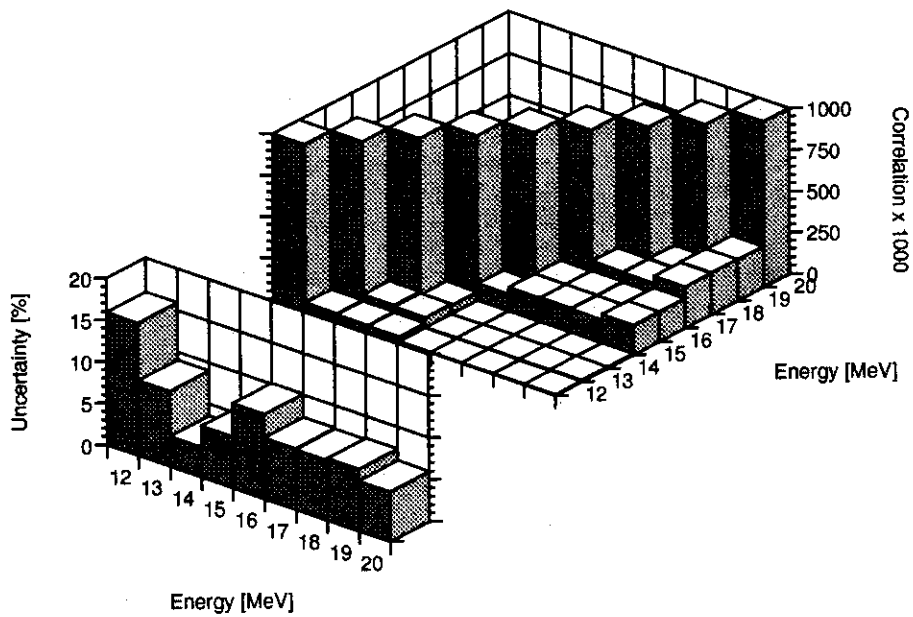


Fig. 12: Covariance of the  $^{238}\text{U}(n, 3n)$  reaction cross sections,  $\chi^2 = 10.6$  for JENDL-3.2 and 4.70 for the KALMAN system.

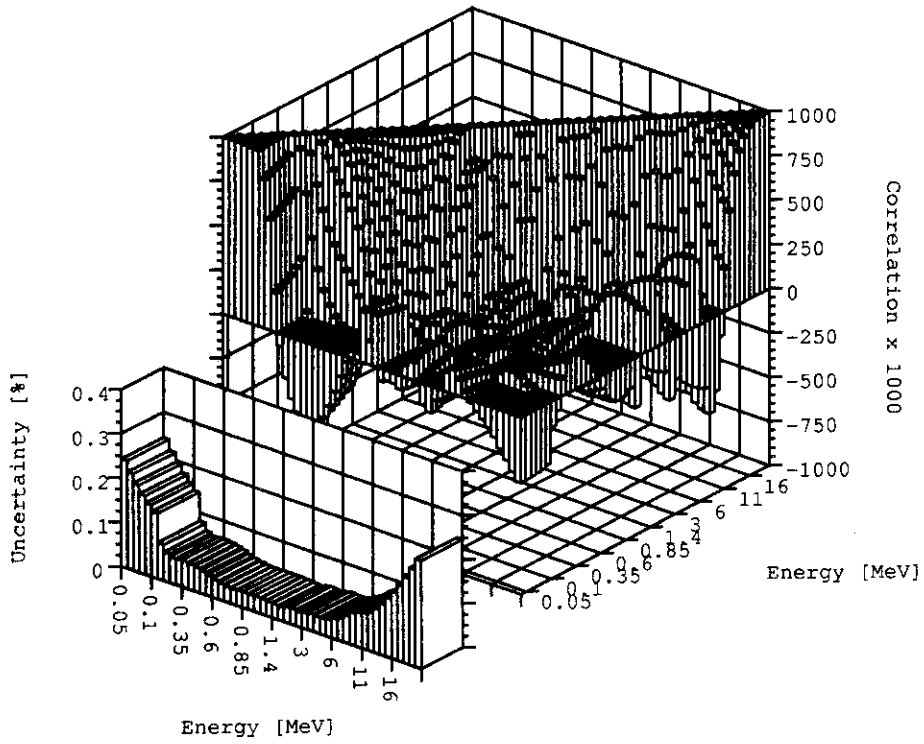


Fig. 13: Covariance of the  $^{238}\text{U}$  total cross sections,  $\chi^2 = 3.2$ .

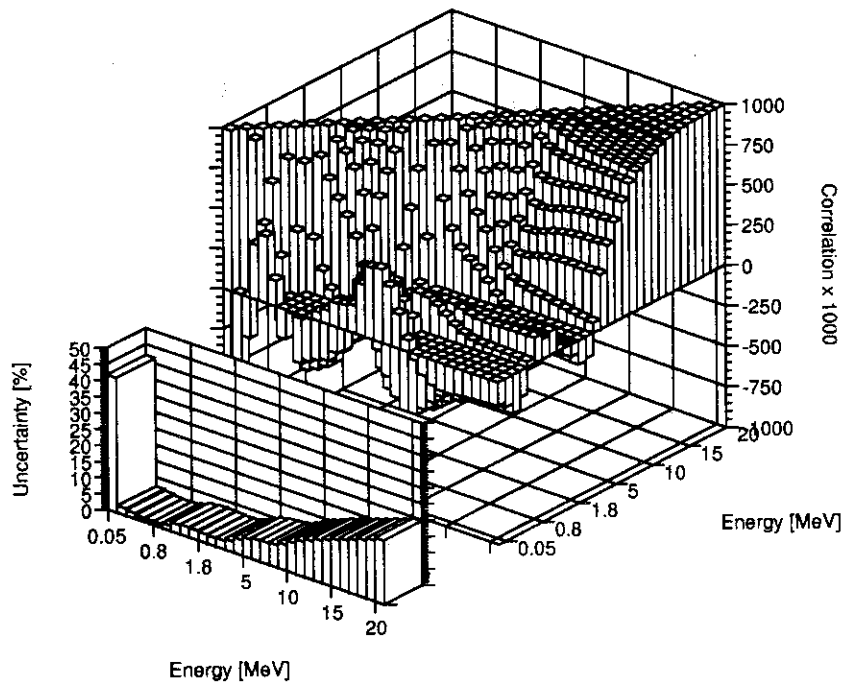


Fig. 14: Covariance of the  $^{238}\text{U}$  inelastic scattering cross sections to the first excited state,  $\chi^2 = 3.7$ .

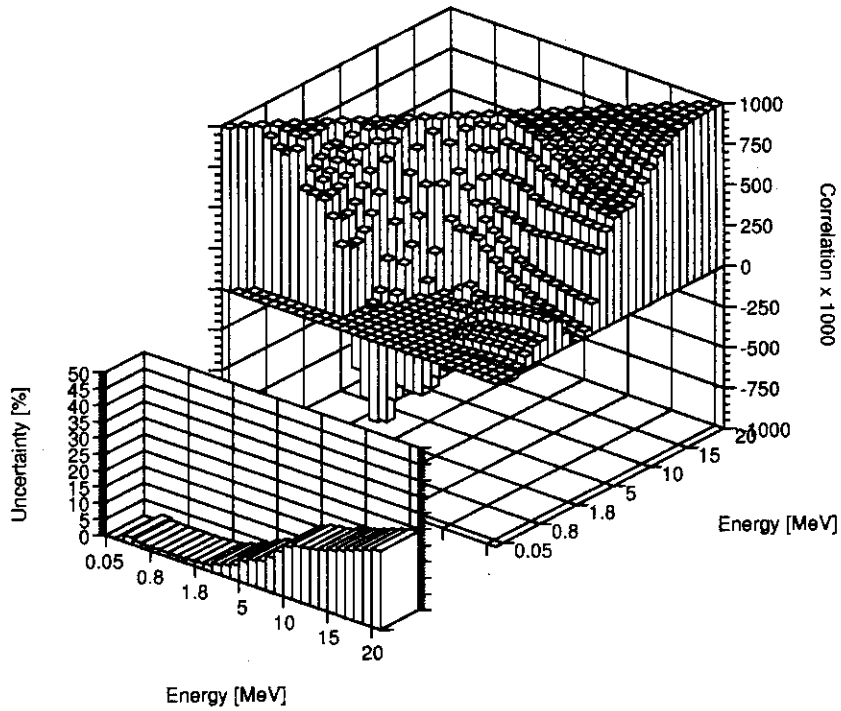


Fig. 15: Covariance of the  $^{238}\text{U}$  inelastic scattering cross sections to the second excited state,  $\chi^2 = 4.0$ .

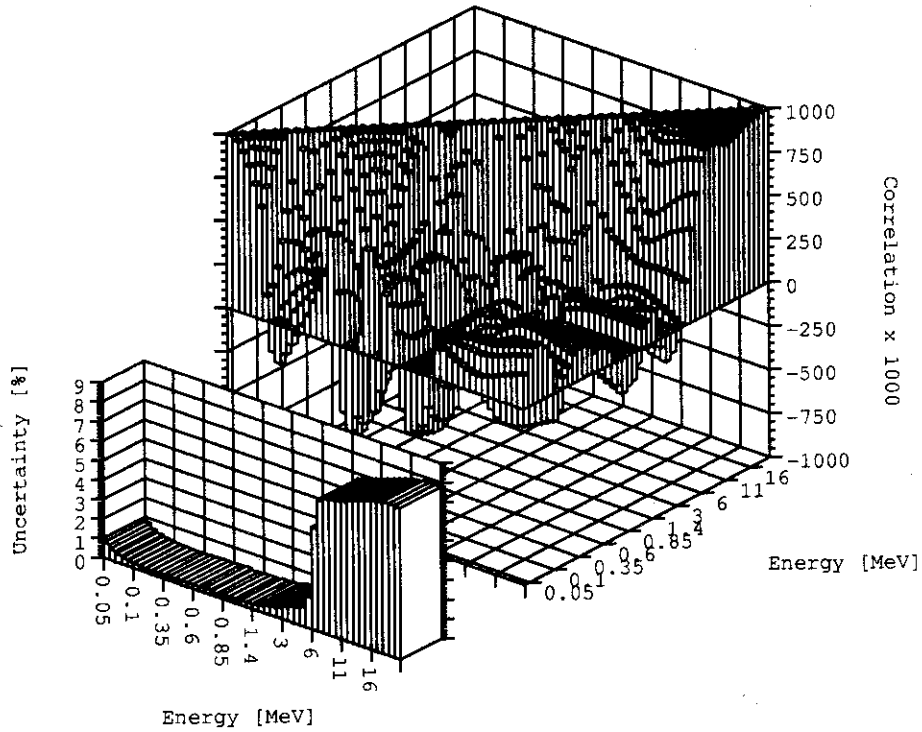


Fig. 16: Covariance of the  $^{238}\text{U}$  capture cross sections. The capture cross sections are sum of the statistical model and the direct/semidirect process,  $\chi^2 = 4.4$  for  $E_n < 5$  MeV.