

J A E R I - M
91-073

核発熱定数KERMAライブラリーの作成

—核融合群定数セットFUSION-J3用核発熱定数ライブラリー—

1991年5月

真木 紘一*・川崎 弘光*・小迫 和明・関 泰

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

JAERI-M 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。
入手の問合せは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11茨城県那珂郡東海村）あて、お申しこしください。なお、このほかに財團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。

JAERI-M reports are issued irregularly.

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

©Japan Atomic Energy Research Institute, 1991
編集兼発行 日本原子力研究所
印 刷 いばらき印刷(株)

核発熱定数 KERMA ライブライマーの作成
—核融合群定数セット FUSION - J 3 用核発熱定数ライブラリー—

日本原子力研究所那珂研究所核融合実験炉特別チーム
真木 純一^{*}・川崎 弘光^{**}・小迫 和明⁺・閔 泰

(1991年4月1日受理)

従来の GICX 40 用核発熱定数 (KERMA) ライブライマーに代わるものとして、核融合核計算群定数セット FUSION - J 3 用 KERMA ライブライマーを 1990 年 4 月に公開された評価済み核データファイル JENDL - 3 をベースに作成した。

KERMA ライブライマー中で中性子の KERMA ファクターは、直接法を採用して作成した。直接法は、反応のカイネマティクスから核発熱定数を求める手法で、この方法では、エネルギーバランス法のように大数同志の差を求める必要がないため、算出した KERMA ファクターは計算精度が高く、核発熱計算の信頼性向上につながる。ガンマ線の KERMA ファクターは、持っている運動エネルギーを核発熱として計算すればよく、中性子 KERMA ファクターのようにエネルギーバランス法を用いても問題はないのでそれを採用した。

以上の KERMA ライブライマーは、核融合炉の核計算に適用することができ、信頼性の高い核発熱の計算結果が得られるものと期待され、今後の核融合炉の設計に役立つものと考える。

那珂研究所：〒311-01 茨城県那珂郡那珂町大字向山 801-1

+ 東海研究所原子炉工学部

* (株)日立製作所より出向

** センチュリー・レサーチ・センター(株)

Nuclear Heating Constant KERMA Library
- Nuclear Heating Constant Library
for Fusion Nuclear Group Constant Set FUSION-J3 -

Koichi MAKI^{*}, Hiromitsu KAWASAKI^{**}, Kazuaki KOSAKO⁺ and Yasushi SEKI

Fusion Experimental Reactor Team
Naka Fusion Research Establishment
Japan Atomic Energy Research Institute
Naka-machi, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received April 1, 1991)

Based on evaluated nuclear data file JENDL-3, published in April 1990, we produced a nuclear group constant KERMA library for fusion nuclear group constant set FUSION-J3 instead of the KERMA library for GICX40.

Neutron KERMA factors were calculated directly by considering the kinematics in collisions, called 'Direct Method'. In this method, uncertainties in calculated KERMA factors are expected to be reduced since subtraction between great numbers is not necessary as in the energy balance method. Gamma ray KERMA factors were calculated by the energy balance method. In case of gamma ray, there is no problem in calculating gamma ray KERMA by the energy balance method since gamma ray heating means energy deposition of kinetic energy in gamma ray.

Produced KERMA library is applicable to fusion neutronics calculations. It is expected that highly accurate results will be obtained in nuclear heating calculations for fusion reactor designs.

Keywords: KERMA Library, Nuclear Heating, Fusion Reactor, FUSION-J3, JENDL-3, GICX40, Nuclear Calculation, Neutron, Gamma-ray

+ Department of Reactor Engineering, Tokai Research Establishment

* On leave from Hitachi, Ltd.

** Century Research Center Corporation, Ltd.

目 次

1. 緒 言	1
2. KERMA ファクター直接法計算モデル	3
2.1 KERMA ファクターの定義	3
2.2 直接計算モデル	5
3. KERMA ファクター作成プログラム	10
3.1 プログラムの流れ	10
3.2 入出力ファイルと JCL	10
4. KERMA ライブライアリ	18
4.1 ファイルドキュメント	18
4.2 KERMA ファクターのエネルギースペクトル図	19
5. 結 言	20
謝 辞	21
参考文献	21

Contents

1. Introduction	1
2. KERMA Factor Direct Method Calculational Model	3
2.1 KERMA Factor Definitions	3
2.2 Direct Method Calculational Model	5
3. KERMA Factor Production Program	10
3.1 Program Flow	10
3.2 In/Out Files and JCL	10
4. KERMA Library	18
4.1 File Documentations	18
4.2 KERMA Factor Energy Spectrum Figures	19
5. Conclusion	20
Acknowledgement	21
References	21

1. 緒 言

核融合炉は、核融合反応で生成したエネルギーを熱として取り出す装置である。実用化に最も近いD-T核融合炉の場合には、核融合反応で発生したエネルギーの20%は、プラズマから光子（輻射）のエネルギーや荷電粒子の運動エネルギーとして持ち去られ第一壁やダイヴァータの表面近傍において、熱エネルギーに変換され取り出される。残りの80%のエネルギーは核融合反応で生成される中性子が運動エネルギーとして持ち去る。これらの中性子は第一壁を初めとする構造材と衝突し、二次中性子や光子（ガンマ線）、荷電粒子の生成反応を伴いながら持っている運動エネルギーを熱エネルギーに変えつつ減衰していく。

このような核融合炉の設計において、遮蔽体やブランケット内部の核発熱を評価することが必要となる。核発熱を計算するためには、中性子束やガンマ線束のほかに、核発熱定数が必要である。中性子束やガンマ線束は、ANISN¹⁾やDOT3.5²⁾コード（それぞれ1次元、2次元コード）を用いた放射線輸送計算により求めることができる。これらの中性子束やガンマ線束に核発熱定数KERMAファクター^{3,4)}（Kerma : Kinetic energy released in materials）を乗ずることによって核発熱を求めることができる。

数MeV以下のガンマ線の核発熱は、光反応の効果を無視できるため、持っているエネルギーを熱エネルギーと見做して近似的に求めることができる。ところが、中性子の核発熱を求めるには、中性子が原子核と衝突すると、諸々の反応が起こり、各反応によってエネルギーの出入りがあり、これら全てのエネルギーの出入りを考慮しなければならない。中性子のKERMAファクターは、このようなエネルギーの出入りを考慮して算出しなければならない。

核融合炉の概念設計における核計算の必要性から、1977年にANISNやDOT3.5用の中性子とガンマ線断面積の結合群定数セットGICX40⁵⁾が作成された。この群定数セットにも、KERMAライブラリーが用意されている。

群定数セットGICX40には、エネルギーバランス法によって作成されたKERMAライブラリーが使用されている。エネルギーバランス法というのは、”（入射エネルギー+核反応生成エネルギー(Q値)）- 放出エネルギー=核発熱”のバランスから計算されるのでこの名で呼ばれる。

群定数セット及びKERMAライブラリーがベースとしている評価済み核データファイルがエネルギーバランスを考慮して作成されている場合には、エネルギーバランス法によって算出されたKERMAファクターは原理的には正しい値を出す筈である。しかし、諸々の反応断面積を評価する場合に、反応毎に評価者が異なることが多い。このような場合には、評価済み核データファイルの編者がエネルギーバランスを探ることを基本方針として掲げない限り、エネルギーバランスが成立していないものと考えるべきである。たとえ、核種毎にエネルギーバランスが得られていても、核融合炉群定数セットでは仮想的な天然の核種（天然のアイソトープ比を乗じて作成した仮想的核種）を用いる場合が多く、この場合のエネルギーバランス、特に反応毎のQ値をどのように与えるべきかは、その目的により異なり、議論のあるところである。

もう一つの問題点として、以上の全てのバランスが保たれているとしても、これらのデータは実験値から与えられるため、有効数字が数桁である。核発熱定数は大きな数値同志の数%にも満たない差として与えられるため、計算精度上問題があり、場合によっては負の値をとることにもなり兼ねない。

このような理由から、核融合炉核計算用群定数セット FUSION-J3⁶⁾に用意する KERMA ライブライアリ中で中性子の KERMA ファクターは、評価済み核データファイル JENDL-3⁷⁾をベースとし、エネルギーバランス法ではなく、直接法を採用して作成した。直接法に関しては、反跳スペクトル (PKA) の計算でその手法の概念が示されている⁸⁾。我々は、KERMA ライブライアリを作成するため直接法を改良しコード化した。KERMA ライブライアリ作成の直接法というのは、反応のカイネマティクスを考慮し放出粒子のエネルギーから反跳エネルギーを求め、荷電粒子のエネルギーを足し込むことによって核発熱定数を求めるものである。この方法では、大数同志の差を求める必要がなく、Q 値をバランス式の中に取り入れていないので、求めた核発熱定数が Q 値に大きく左右されることがない。従って、算出した KERMA ファクターは計算の過程で負の値を取ることはなく、計算精度が高くなり、信頼性が向上する。なお、ガンマ線の KERMA ファクターは、上述したように持っているエネルギーから算出できるので、エネルギーバランス法を用いても問題はなく、本 KERMA ライブライアリ作成ではそれを採用した。

本レポートでは、中性子の KERMA ライブライアリを作成するための直接法による計算モデルに関して述べ、そのコード化した内容についても説明する。最後に、FUSION-J3 用に算出した KERMA ライブライアリ（中性子 KERMA、及びガンマ線 KERMA）を図示する。

2. K E R M A ファクター直接法計算モデル

2.1 K E R M A ファクターの定義

D T 核融合炉の場合には、核融合反応で発生したエネルギーの 20% は、プラズマから光子(輻射)のエネルギーや荷電粒子の運動エネルギーとして持ち去られ、第一壁やダイヴァータの表面近傍において、熱エネルギーに変換され取り出される。残りの 80% のエネルギーは核融合反応で生成される中性子が運動エネルギーとして持ち去る。これらの中性子は第一壁を初めとする構造材の原子核と衝突し、二次中性子や光子(ガンマ線)、荷電粒子を生成しつつ運動エネルギーを失い、最後に原子核の中に取り込まれる。これらの過程で、中性子が原子核と衝突し、二次中性子や荷電粒子、光子を放出すると、原子核は反跳を受けそれを熱として放出する。また、生成した荷電粒子は物質中の飛程が短いので、減速されながらその近傍で持っている運動エネルギーを熱として放出する。これらを合計したのが中性子の発熱定数、即ち、中性子 K E R M A ファクターである。

以上を考慮すると、K E R M A ファクター $K(E_n)$ は、以下のように定義される。

$$K(E_n) = \sum_{\text{reaction}}^X \int_{\varepsilon_c} \int_{\Omega} (E_c + E_p) \cdot \sigma_x^{\text{CM}}(E_R, \varepsilon_c, \theta_c) d\varepsilon_c d\Omega_c, \quad (2.1)$$

$$= \sum_{\text{reaction}}^X (\bar{E}_c + \bar{E}_p) \cdot \sigma_x(E_R), \quad (2.2)$$

ただし、 E_n : lab. 系での入射中性子エネルギー、

E_c : lab. 系での荷電粒子エネルギー (charged particle energy) 、

E_p : lab. 系での反跳エネルギー、

σ_x^{CM} : 重心系での反応 x の断面積 、

E_R : 相対運動エネルギー、

ε_c : 重心系での第一放出粒子のエネルギー、

θ_c : 重心系での第一放出粒子の放出角、

Ω_c : 重心系での立体角。

また、 \bar{E}_c 及び \bar{E}_p は、それぞれ、反応断面積で平均した荷電粒子エネルギー及び反跳エネルギーであり、次の式で与えられる。

$$\bar{E}_c = \frac{\int \int E_c \cdot \sigma_x^{\text{CM}}(E_R, \varepsilon_c, \theta_c) d\varepsilon_c d\Omega_c}{\int \int \sigma_x^{\text{CM}}(E_R, \varepsilon_c, \theta_c) d\varepsilon_c d\Omega_c}, \quad (2.3)$$

$$\bar{E}_p = \frac{\int \int E_p \cdot \sigma_x^{CM}(E_R, \varepsilon_c, \theta_c) d\varepsilon_c d\Omega_c}{\int \int \sigma_x^{CM}(E_R, \varepsilon_c, \theta_c) d\varepsilon_c d\Omega_c} \quad (2.4)$$

また、(2.2)式中の $\sigma_x(E_R)$ はエネルギーと角度で積分した反応xの断面積であり、

$$\sigma_x(E_R) = \int \int \sigma_x^{CM}(E_R, \varepsilon_c, \theta_c) d\varepsilon_c d\Omega_c, \quad (2.5)$$

である。以上が直接法におけるK E R M A ファクターの定義である。

これに対して、エネルギーバランス法におけるK E R M A ファクターの定義を示し、その特徴について簡単に述べる。エネルギーバランス法によって表わされるK E R M A ファクターの定義式は次のように表される。

$$K(E_n) = \sum_{reaction}^X (E_n + Q_{n,x}) \cdot \sigma_x(E_n) - (\varepsilon_n \cdot \sigma_{n-prod}(E_n) + \varepsilon_\gamma \cdot \sigma_{\gamma-prod}(E_n)), \quad (2.6)$$

ここで、 $Q_{n,x}$: 反応xのQ値

σ_{n-prod} : 中性子生成断面積（二次中性子を生成する全ての反応を含む）

$\sigma_{\gamma-prod}$: ガンマ線生成断面積

ε_n : 重心系での放出中性子のエネルギー

ε_γ : 重心系での放出光子のエネルギー

(2.6)式から明らかなように、この式によるK E R M A ファクターはエネルギーバランスの小さな乱れに対して敏感である。即ち、(2.10)式の右辺の各項は $E_n \cdot \sigma_x(E_n)$ 程度の大きさであるため、F e 等のA=50の核種では、エネルギーバランスが2%程度崩れるとK E R M A の値は100%以上も変化することになる。従って、K E R M A ライブライアリの作成には、エネルギーバランス法は避けるべきで、特に中重核には適用すべきではない。以下、直接法について述べる。

ここで、(2.3)式、(2.4)式の E_c 及び E_p は、衝突のカイネマティクス及びエネルギー保存則から以下のような関係が与えられる。

$$E_p = \frac{m_2}{M} E_G + \frac{m_1}{M} \varepsilon_c - 2 \sqrt{\frac{m_1 m_2}{M^2} E_G \cdot \varepsilon_c \mu_c}, \quad (2.7)$$

$$E_c = \frac{m_1}{M} E_G + \frac{m_2}{M} \varepsilon_c + 2 \sqrt{\frac{m_1 m_2}{M^2} E_G \cdot \varepsilon_c \mu_c}. \quad (2.8)$$

$$E_p + E_c = E_G + \varepsilon_c. \quad (2.9)$$

ここで、M : 複合核の質量、

$$M = m_{01} + m_{02} = m_1 + m_2,$$

m_{01} : 入射中性子の質量、
 m_{02} : ターゲット核の質量、
 m_1 : 放出粒子の質量、
 m_2 : 残留核の質量、
 μ_c : 重心系での第一放出粒子の放出角 θ_c の余弦、
 $\mu_c = \cos(\theta_c)$ 。
 E_G : 重心の運動エネルギー、

重心の運動エネルギーは、反応のカイネマティクス (Fig. 2.1 参照) 及びエネルギー保存則から以下のように中性子の入射エネルギー E_n によって表すことができる。Fig. 2.1 のように、実験室系 (lab. 系) での重心の移動速度は重心系 (C. M. 系) でのターゲット核の移動速度 v_{02} であるので、重心の運動エネルギーは E_G は、

$$E_G = \frac{1}{2} M \cdot v_{02}^2 .$$

実験室系の入射中性子速度 v_{01} は、Lab. 系と C. M. 系との関係から、

$$v_{01} = v_{01} + v_{02} ,$$

ここで、 v_{01} : 重心系における入射中性子の速度、

v_{02} : 重心系におけるターゲット核の速度。

$m_{01} v_{01} = m_{02} v_{02}$ を用いると、

$$v_{01} = \frac{m_{01} + m_{02}}{m_{01}} v_{02} = \frac{M}{m_{01}} v_{02} .$$

これを用いて、重心の運動エネルギーは E_G は、

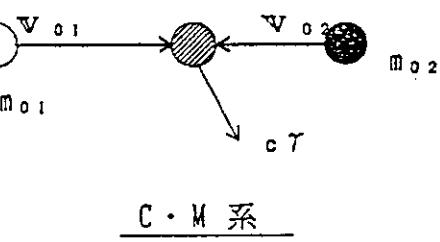
$$\begin{aligned} E_G &= \frac{1}{2} M \left\{ \frac{m_{01}}{M} \right\}^2 v_{01}^2 \\ &= \frac{m_{01}}{M} \left\{ \frac{1}{2} m_{01} v_{01}^2 \right\} . \end{aligned}$$

ここで、入射中性子エネルギー E_n は、

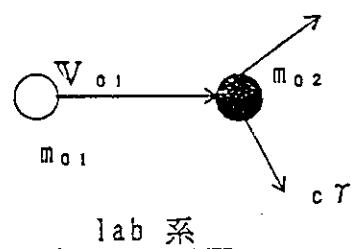
$$E_n = \frac{1}{2} m_{01} v_{01}^2 ,$$

を用いると、次の関係が得られる。

$$E_G = \frac{m_{01}}{M} \cdot E_n . \quad (2.10)$$



C・M 系



lab 系

Fig. 2.1 Kinematics in Center of Mass and Laboratory systems.

2. 2 直接計算モデル

この章の最初に述べたように、FUSION-J3 用の KERMA ライブライマーの作成を目標としている本研究では、直接法を採用している。以下、直接法について説明する。

[1] γ 線生成捕獲反応 (n, γ) (radiative capture)

評価済み核データファイル J E N D L - 3 は、E N D F / B フォーマットで編集されており、それによると (n, γ) 反応断面積は、File 3 (Neutron cross section) の M T = 1 0 2 に納められている。この反応では荷電粒子が生成しないため、核発熱に関与するのは実験室系でのターゲット核の反跳エネルギー E_p である。即ち、(2.9)式より、

$$E_p = E_G + \varepsilon_c . \quad (2.11)$$

となり、K E R M A ファクターは、

$$K(E_n) = \sum_{\text{reaction}}^x \overline{E}_p \cdot \sigma_x(E_R) . \quad (x=(n, \gamma) \text{ 反応}) , \quad (2.12)$$

で表される。ここで、 E_G は(2.10)式によって入射中性子エネルギー E_n で与えることができる。ターゲット核の反跳エネルギー ε_c は、重心系での放出光子（ガンマ線）のエネルギー ε_γ により、 $\varepsilon_\gamma = h\nu$ だから、光子の運動量 p は、

ただし、 h : プランク定数 ($= 6.626176 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$) ,

ν : 光の振動数 (s^{-1}) ,

$$p = \varepsilon_\gamma / c ,$$

で表されるので、ターゲット核と光子の間の運動量保存則より、

$$M \mathbf{v}_2 = p = \varepsilon_\gamma / c ,$$

ここで、 \mathbf{v}_2 : 重心系でのターゲット核の反跳速度,

c : 真空中の光の速度.

この式を用いると、反跳エネルギー ε_c は次のうに求められる。

$$\varepsilon_c = \frac{1}{2} M \mathbf{v}_2^2 = \frac{M}{2} \left\{ \frac{\varepsilon_\gamma}{Mc} \right\}^2 = \frac{\varepsilon_\gamma^2}{2Mc^2} = \frac{\overline{\varepsilon}_\gamma^2}{2Mc^2} Y_\gamma(E_n) . \quad (2.13)$$

ここで、 $Y_\gamma(E_n)$ は入射中性子エネルギー E_n の時の発生するガンマ線の多重度 (Multiplicity) である。 $Y_\gamma(E_n)$ は J E N D L - 3 の File 12 から読み込むことができる。

この式を(2.11)式に代入すると、反跳エネルギー E_p は次のように表すことができる。

$$\overline{E}_p = \overline{E}_G + \frac{\overline{\varepsilon}_\gamma^2}{2Mc^2} Y_\gamma(E_n) . \quad (2.14)$$

(2.14)式を用いて、K E R M A ファクターと表すと、

$$K_{n\gamma}(E_n) = \left\{ \overline{E}_G + \frac{\overline{\varepsilon}_\gamma^2}{2Mc^2} Y_\gamma(E_n) \right\} \sigma_{n\gamma}(E_n) . \quad (2.15)$$

先に述べたように、 $Y_\gamma(E_n)$ は J E N D L - 3 の File 12 から、 $\overline{\varepsilon}_\gamma$ は File 15 から読み込むことができ、 E_G は入射中性子エネルギーで与えることができる。

[2] 弹性散乱 (n, n) (elastic scattering)

弹性散乱 (n, n) 断面積は、File3 (Neutron cross section) の MT = 2 に納められている。この反応では荷電粒子が生成しないため、核発熱に関与するのは実験室系でのターゲット核の反跳エネルギー E_p である。

実験室系でのターゲット核の反跳エネルギー E_p は、Fig. 2.2 に示す、運動量保存則とエネルギー保存則のカイネマティクス (Fig. 2.2 参照) から、次のように与えられる。

$$\overline{E}_p = 2 \frac{m_{01} m_{02}}{M^2} E_n (1 - \bar{\mu}_c) , \quad (2.16)$$

ここで、 $\bar{\mu}_c$ は散乱断面積の Legendre 展開するときに使用している係数、即ち、

$$\sigma(E_n, \theta_c) = \sigma(E_n) \sum_{\ell=0}^{L_{\max}} \frac{2\ell + 1}{4\pi} B_\ell(E_n) \times P_\ell(\cos \theta_c),$$

の係数で、 $\bar{\mu}_c = B_\ell(E_n)$ ，

であり、File4 より与えられる。以上より、弹性散乱の KERMA ファクターは、次式で与えられる。

$$K_{nn}(E_n) = \overline{E}_p \cdot \sigma_{el}(E_n) = \left\{ 2 \frac{m_{01} m_{02}}{M^2} E_n (1 - \bar{\mu}_c) \right\} \cdot \sigma_{el}(E_n) . \quad (2.17)$$

[3] 非弾性散乱 (n, n') (inelastic scattering)

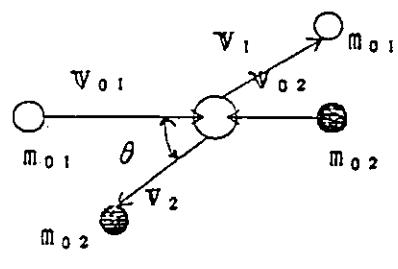
非弾性散乱 (n, n') 断面積は、File3 (Neutron cross section) の MT = 51, 52, ..., 90 に、第1励起レヴェルから第40励起レヴェルまでの各レヴェル毎に納められている。この反応では荷電粒子は生成しないが、二次中性子と光子 (ガンマ線) を放出する。核発熱に関与するのは実験室系でのターゲット核の反跳エネルギー E_p で、重心の移動と放出二次中性子、放出光子の各運動量保存則とエネルギー保存則を考慮することによって求めることができる。

荷電粒子を生成しないことから、実験室系での荷電粒子のエネルギーは '0' である。即ち、

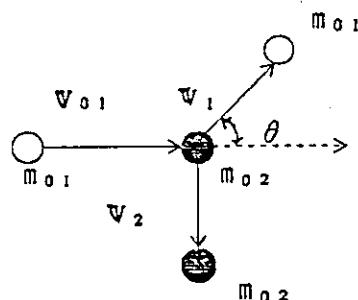
$$E_c = 0 ,$$

である。そこで、実験室系での反跳エネルギーをお求めればよい。(2.7)式の散乱中性子のエネルギー ε_c を各励起レヴェル毎に分離することによって与えられる。

$$E_p = \frac{m_2}{M} E_G + \frac{m_1}{M} \varepsilon_c - 2 \sqrt{\frac{m_1 m_2}{M^2} E_G \cdot \varepsilon_c \frac{(\lambda)}{\mu_c}} . \quad (2.18)$$



C・M 系



lab. 系

Fig. 2.2 Kinematics of elastic scattering in Center of Mass and Laboratory systems.

E_G は重心の移動エネルギーで、(2.10)式より与えられる。即ち、

$$E_G = \frac{m_{01}}{M} \cdot E_n .$$

$\varepsilon_c^{(\lambda)}$ は、重心系の入射中性子エネルギー、即ち相対運動エネルギー E_R と各々の励起レヴェルの反応エネルギー、即ち $Q^{(\lambda)}$ 値によって、

$$\varepsilon_c^{(\lambda)} = E_R + Q^{(\lambda)},$$

で与えられる。ここで、 E_R は次のように実験室系での入射中性子エネルギー E_n で表すことができる。

$$E_R = E_n - E_G = E_n - \frac{m_{01}}{M} \cdot E_n = \frac{m_{02}}{M} E_n . \quad (2.19)$$

従って、

$$\varepsilon_c^{(\lambda)} = \frac{m_{02}}{M} E_n + Q^{(\lambda)},$$

となる。この式と E_G を(2.18)式に代入すると、

$$\begin{aligned} E_p^{(\lambda)} &= \frac{m_2}{M} \cdot \frac{m_{01}}{M} E_n + \frac{m_1}{M} \left\{ \frac{m_{02}}{M} E_n + Q^{(\lambda)} \right\} \\ &- 2 \frac{m_{01}}{M} \sqrt{\frac{m_{02}}{M} E_n \left\{ \frac{m_{02}}{M} E_n + Q^{(\lambda)} \right\}} \mu_c^{(\lambda)}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

(2.20)式を K E R M A ファクターの定義式に代入すれば、K E R M A ファクターを求めることができる。即ち、

$$K_{in}(E_n) = \sum_{\lambda=51}^{90} E_p^{(\lambda)} \sigma_{in}^{(\lambda)}(E_n) . \quad (2.21)$$

なお、 $\varepsilon_c^{(\lambda)} < 0.0$ のときは、 $\varepsilon_c^{(\lambda)} = 0$ 、として計算する。また、 $\mu_c^{(\lambda)}$ は弾性散乱の場合と同様に、File 4 から読み込む。

[4] その他の反応

このジャンルには、弾性と非弾性散乱を除き二次中性子を生成する全ての反応、陽子生成する全ての反応、 α 粒子を生成する全ての反応が含まれる。従って、この場合の K E R M A ファクターは、次のように書くことができる。

$$K_{others}(E_n) \sim \frac{m_2}{M} E_G \sigma_R + \frac{m_1}{M} \sum_n \varepsilon_n \sigma_{n-prod.}(E_n) + \sum_x \varepsilon_x \sigma_{x-prod.}(E_n), \quad (2.22)$$

ただし、 $m_1 \ll M$ 及びこれらの生成粒子は重心系では等方に放出されるものと仮定した。この式に使用されている反応断面積は、上述した全ての反応断面積 σ_R 、二次中性子生成反応断面積 $\sigma_{n-prod.}$ 、陽子生成反応断面積 $\sigma_{p-prod.}$ 、 α 粒子生成反応断面積 $\sigma_{a-prod.}$ を意味しそれぞれ、以下のような反応を含む。

$$\begin{aligned}\sigma_R = & \sigma_{n,n'}^{MT=91} + \sigma_{n,2n}^{16} + \sigma_{n,3n}^{17} + \sigma_{n,n'a}^{22} + \sigma_{n,n'p}^{28} + \sigma_{n,p}^{103} \\ & + \sigma_{n,a}^{107} + \sigma_{n,2a}^{108} + \sigma_{n,2p}^{111},\end{aligned}\quad (2.23)$$

$$\sigma_{n-prod.} = \sigma_{n,n'}, \sigma_{n,2n}, \sigma_{n,3n}, \sigma_{n,n'a}, \sigma_{n,n'p}, \quad (2.24)$$

$$\sigma_{p-prod.} = \sigma_{n,n'p}, \sigma_{n,p}, \sigma_{n,2p}, \quad (2.25)$$

$$\sigma_{a-prod.} = \sigma_{n,n'a}, \sigma_{n,a}, \sigma_{n,2a}. \quad (2.26)$$

(2.22)式中の $\bar{\varepsilon}_n$ は、

$$\bar{\varepsilon}_n = \sum_x \bar{\varepsilon}_n^{(x)} Y_n^{(x)} \sigma_{n,n'x}(E_n) / \sum_x Y_n^{(x)} \sigma_{n,n'x}(E_n), \quad (2.27)$$

で表されるが、File 5 に各反応毎の規格化中性子スペクトル $P(E_n, \varepsilon_n)$ がは収納されているので、これを用いて求めた。なお、 Y_n は多重度で、例えば、($n, 2n$)反応では $Y_n = 2$ とする。

$\bar{\varepsilon}_p$ 、 $\bar{\varepsilon}_a$ の計算については、JENDL-3 には中性子反応で生成した荷電粒子エネルギー分布は収納されていない。そこで、PEGASUS コード⁹⁾を用いて $\bar{\varepsilon}_x(E_n) \cdot \sigma_{x-prod.}(E_n)$ （ただし、 $x=p$ or a ）のスペクトルの平均値を算出することができる。(2.22)式の計算にはこの平均値を用いる。なお、FUSION-J3 に天然元素として収納する原子については、天然の存在比 (abundance) w_1 を重み付けして平均化した値を用いる。即ち、

$$\bar{\varepsilon}_x(E_n) = \sum_1^{\text{isotopes}} w_1 \cdot \bar{\varepsilon}_x^{(1)}(E_n) \cdot \sigma_{x-prod.}^{(1)}(E_n) / \sum_1^{\text{isotopes}} w_1 \cdot \bar{\varepsilon}_x^{(1)}(E_n) \cdot \sigma_{x-prod.}^{(1)}(E_n). \quad (2.28)$$

ただし、 $x=p$ or a である。

3. KERMA ファクター作成プログラム

本レポートで述べるKERMAライブラリー作成用コードを以下'KERMAコード'と記す。この章では、第2章で説明したKERMAライブラリーを作成するために改良した直接法計算モデルをコード化した内容について、プログラムの処理の流れ（プログラムフロー）、プログラムの構造と入出力ファイル及びそのJCLについて述べる。

3.1 プログラムの流れ

KERMAコードで処理しているプログラム上の流れをFig. 3.1に示す。このコードでは核種ごとに処理する。初めに、FUSION-J3の中性子群構造をセットする。次に、処理する順に核種のMAT Noを入力すると、評価済み核データファイルであるJENDL-3に収納されている核データを参照する。File 3から核反応断面積、File 12から多重度（Multiplicity）、File 15から二次ガンマ線のスペクトル等を読み込む。また、核融合炉核計算用群定数セットFUSION-J3を作成する過程で計算される多群化断面積を読み込む。このようにして、KERMAファクターを計算のに使用する諸々の定数が設定される。その後は、第2章で述べたKERMAファクターの計算モデルに従い、ガンマ線放出、弹性散乱、非弹性散乱、荷電粒子生成を含むその他の反応、の順に処理される。

Fig. 3.2 に、KERMAコードのプログラム構成図を示す。

3.2 入出力ファイルとJCL

KERMAファクターを計算するための入出力ファイルとそのLogical unit numberをTable 3.1に示す。KERMAファクターを計算するコードKERMAコードのJCLリストの例をFig. 3.3に、生成された荷電粒子の平均スペクトルを算出するためのPEGASUSコードのJCLと入力データをFig. 3.4に示す。また、既に存在するKERMAライブラリーの一部のKERMAファクターを新たに計算したKERMAファクターに差し替えるためのプログラムリストとJCLをFig. 3.5に示す。

Table 3.1 Input/output files and logical unit numbers
for KERMA code.

Logical unit No	Access file or data
FT01	Evaluated nuclear data JENDL-3 file
FT02	Group wise cros sections produced by MACSN code (σ_g)
FT03	Charged particle energy estimated by PEGASUS code (ε_x)
FT05	Card image input data
FT06	Print out
FT07	Calculated KERMA factor output
FT11	Work file (JENDL-3 file, BCD format)
FT12	Work file (data file estimated by MACSN, Binary format)

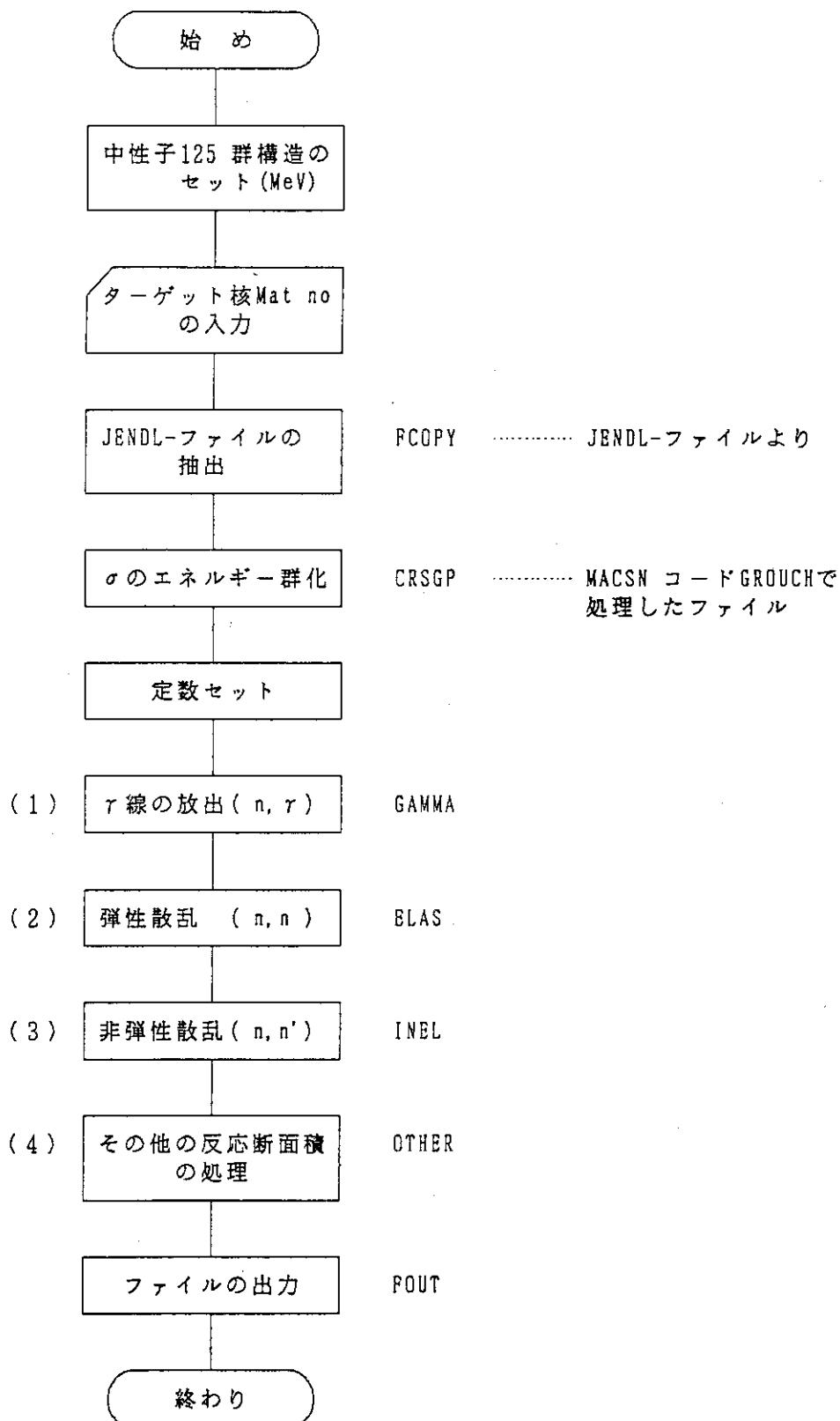


Fig. 3.1 Program processing flow in KERMA code.

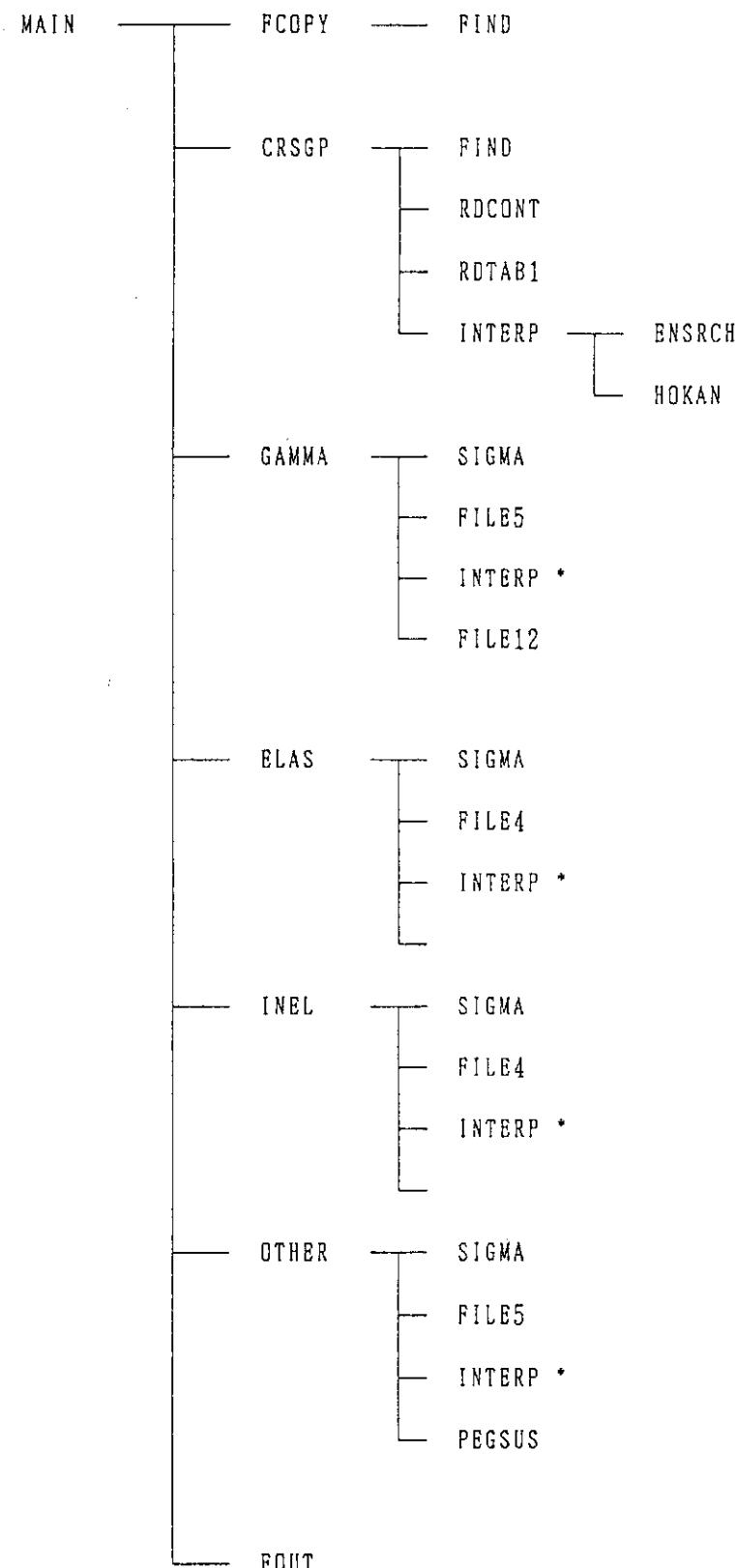


Fig. 3.2 Program structure of KERMA code.

```
MEMBER NAME KERMA
//JCLG JOB
// EXEC JCLG
//SYSIN DD DATA,DLM='++'
// JUSER 16556861,KO.MAKI,0017.01
T.3 C.3 W.4 I.4 SRP GRP
OPTP PASSWORD=IKAM,NOTIFY=J6861
//* -----KERMA FACTOR CALCULATION J6861.CRCJENDL.CNTL(KERMA) --
//COMP EXEC FORT77,SO='J6861.KERMA',Q='FORT77',A='ELM(*)',LCT=66,
// B=NOSOURCE
//LINK EXEC LKED77
//EXQ EXEC GO
//FT05F001 DD DDNAME=SYSIN
//FT06F001 DD SYSOUT=*,DCB=(BLKSIZE=137)
//FT07F001 DD DSN=J6861.0KERBI.DATA,DISP=(,CATLG,DELETE),UNIT=TSSWK,
// DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200),SPACE=(TRK,(5,5),RLSE)
//FT01F001 DD DSN=J6861.0J304.DATA,DISP=OLD,LABEL=(,,,IN)
//FT02F001 DD DSN=J6861.0SIGBI.DATA,DISP=OLD,LABEL=(,,,IN)
//FT03F001 DD DSN=J6861.PEGLIB.DATA(BI209),DISP=OLD,LABEL=(,,,IN)
//FT11F001 DD DISP=(,DELETE),UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(30,10),RLSE),
// DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200)
//FT12F001 DD DISP=(,DELETE),UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(30,10),RLSE),
// DCB=(RECFM=VBS,LRECL=19064,BLKSIZE=19068)
//SYSIN DD *
3831
/*
++
//
```

Fig. 3.3 Typical JCL and data list for KERMA factor calculation.
by KERMA code.

```

MEMBER NAME JCLPEG
//JCLG JOB
// EXEC JCLG
//SYSIN DD DATA,DLM='++'
// JUSER 12862608,TU.NAKAGAWA,0478.01
T.2 W.1 C.3 I.3 SRP
OPTP PASSWORD=TN,NOTIFY=J2608
//**+-----+
//**+      JCL    J2608.CRC.CNTL(JCLPEG)      +
//**+-----+
// EXEC FORT77,SO=J2608.PEGASUS2,A='ELM(*),NUM,AUTODBL(DBLPAD)*
// EXEC LKED
// EXEC GO
//FT07F001 DD SYSOUT=*
//FT06F001 DD SYSOUT=*
//FT01F001 DD DSN=J2608.SGINVPS.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT02F001 DD DSN=J2608.LDPDATA.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT10F001 DD DSN=&&FT10,DISP=(,DELETE,DELETE),UNIT=WK10,
//      SPACE=(TRK,(10,10),RLSE),DCB=(DSORG=PS,LRECL=80,BLKSIZE=11440)
//FT11F001 DD DSN=J2608.@PEGFE.DATA,DISP=(,CATLG,DELETE),UNIT=TSSWK,
//      SPACE=(TRK,(10,10),RLSE),DCB=(DSORG=PS,LRECL=80,BLKSIZE=11440)
//SYSIN DD *
   26   56 2656    0    0    0    1    0    0    0
 -100.0     0.3    0.125           -0.865
   22
   0.5     1.0     2.0     3.0     4.0     5.0     6.0
   7.0     8.0     9.0    10.0    11.0    12.0    13.0
  14.0    14.5    15.0    16.0    17.0    18.0    19.0
  20.0
   11
   1.0     2.0     4.0     6.0     8.0    10.0    12.0
  14.0    16.0    18.0    20.0
   9
   0.0     30.0    60.0    80.0   100.0   120.0   140.0
 160.0   180.0
   0
++
//+
++
//+

```

Fig. 3.4 Typical JCL and data list for PEGASUS code.

```

NAME KERCHG
//JCLG JOB
// EXEC JCLG
//SYSIN DD DATA,DLM='++'
// JUSER 16556861,KO.MAKI,0017.01
      T.2 C.1 W.0 I.3      SRP GRP
      OOPTP PASSWORD=IKAM,NOTIFY=J6861
/* ----FUSION-J3 KERMA FACTOR CHANGING. -J6861.CRCJENDL.CNTL(KERCHG)-
//COMP EXEC FORT77,A=SOURCE
C
C      FUSION-J3 CROSS SECTION KERMA FACTOR (POS=1) CHANGING.
      DIMENSION IPOS(40),CKR(125,40),CRX(169)
      CHARACTER NUCL(40)
      CHARACTER*72 A
C
      IGN = 125
      IGG = 40
      IGM = IGN+IGG
      MAT = 40
      IHM = IGM+4
      LOR = 6
      WATT = 1.6E-13
C
** READ OF KERMA FACTOR SET.
      N = 1
100 READ(5,1000,END=200) NIN,IPOS(N),NUCL(N)
      REWIND NIN
      READ(NIN,1010) A
      WRITE(6,6000) N,NUCL(N),IPOS(N),NIN,A
C
      IG = IGN
      DO 110 I=1,IGN
      READ(NIN,1020) CKR(IG,N)
      IG = IG-1
110 CONTINUE
      N = N+1
      GO TO 100
C
C** CROSS SECTION READ AND KERMA FACTOR CHANGED.
200 CONTINUE
      NMAX = N-1
      REWIND 1
      REWIND 2
      DO 210 IG=1,IGM
      DO 220 M=1,MAT
      DO 230 L=1,LOR
      READ(1) (CRX(IH),IH=1,IHM)
      IF(L.NE.1) GO TO 250
      IF(IG.GT.IGN) GO TO 250
      DO 240 N=1,NMAX
      IF(M.EQ.IPOS(N)) GO TO 245
240 CONTINUE
      GO TO 250
245 CRX(1) = CKR(IG,N)*WATT
250 WRITE(2) (CRX(IH),IH=1,IHM)
230 CONTINUE
220 CONTINUE
210 CONTINUE
      REWIND 1

```

Fig. 3.5 Typical JCL and data list to change new KERMA factors into old ones in KERMA library.

```

ER NAME  KERCHG
        REWIND  2
        STOP
C
1000 FORMAT(2I5,A4)
1010 FORMAT(A72)
1020 FORMAT(5X,E12.3)
6000 FORMAT(I5,' NUCLIDE= ',A4,' POS.=',I4,' UNIT=',I4,' COMMENT=',A72)
      END
//LINK EXEC LKED77
//EXQ EXEC GO
//FT05F001 DD DDNAME=SYSIN
//FT06F001 DD SYSOUT=*,DCB=(BLKSIZE=137)
//FT01F001 DD DSN=J6861.FUSIONXS.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT11F001 DD DSN=J6861.@KERLIB.DATA(MG),DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT12F001 DD DSN=J6861.@KERLIB.DATA(CA),DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT13F001 DD DSN=J6861.@KERLIB.DATA(TI),DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT14F001 DD DSN=J6861.@KERLIB.DATA(CR),DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT15F001 DD DSN=J6861.@KERLIB.DATA(FE),DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT16F001 DD DSN=J6861.@KERLIB.DATA(NI),DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT17F001 DD DSN=J6861.@KERLIB.DATA(CU),DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT18F001 DD DSN=J6861.@KERLIB.DATA(ZR),DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT19F001 DD DSN=J6861.@KERLIB.DATA(W),DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT20F001 DD DSN=J6861.@KERLIB.DATA(BI209),DISP=SHR,LABEL=(,,,IN)
//FT02F001 DD DSN=J6861.@FUSION.DATA,DISP=(,CATLG,DELETE),
//   UNIT=TSSWK,SPACE=(TRK,(800,100),RLSE),
//   DCB=(RECFM=VBS,LRECL=19064,BLKSIZE=19068)
//SYSIN     DD *
      11  15MG
      12  21CA
      13  22TI
      14  24CR
      15  26FE
      16  28NI
      17  29CU
      18  30ZR
      19  34W
      20  36BI
/*
++
//
```

Fig. 3.5 (continued)

4.2 K E R M A ライブライアリのエネルギースペクトル図

Table 4.1 の核種番号順に初めに中性子K E R M A ファクターのスペクトル図、次にガンマ線K E R M A ファクターのスペクトル図という順序で、刊末に示す。

5. 結 言

従来のG I C X 4 0用核発熱定数(K E R M A)ライブラリーに代わるものとして、F U S I O N - J 3用K E R M Aライブラリーを1990年4月に公開された評価済み核データファイルJ E N D L - 3をベースに作成した。

K E R M Aライブラリーの中で中性子のK E R M Aファクターは、直接法を採用して作成した。直接法は、反応のカイネマティクスを考慮して核発熱定数を求める手法で、この方法では、大数同志の差を求める必要がなく、Q値をバランス式の中に取り入れていないため、求めた核発熱定数がQ値に大きく左右されることがない。従って、算出したK E R M Aファクターは計算の過程で負の値を取ることではなく、計算精度が高く信頼性が向上する。ガンマ線のK E R M Aファクターは、持っている運動エネルギーを熱エネルギーと見なして算出できるので、中性子K E R M Aファクターのようにエネルギーバランス法を用いた場合の問題は生じない。そこで、本K E R M Aライブラリー作成においてはそれを採用した。

軽核の一部についてはJ E N D L - 3の核データファイルで考慮していない部分が存在し、直接法では算出できない核種があった。しかし、F U S I O N - J 3のK E R M Aライブラリーとしては、全核種が揃っていることが第一条件であるため、止むを得ずエネルギーバランス法を適用した。軽核の場合は、反跳がエネルギーが比較的大きく、エネルギーバランス法を適用しても'大数-大数'の値が有為な差となるため、算出されたK E R M Aファクターの精度もそれほど低下しない。従って、軽核の一部についてはエネルギーバランス法を適用しても、K E R M Aライブラリーの信頼性を低下させるものではない。なお、F U S I O N - 4 0(中性子42群、ガンマ線21群)⁶⁾用K E R M Aライブラリーも併せて用意している。

以上のK E R M Aライブラリーは、核融合炉の核計算に適用することができ、信頼性の高い核発熱の計算結果が得られるものと期待され、今後の核融合炉の設計に役立つものと考える。

最後に、K E R M Aファクター算出の過程で、生成荷電粒子のエネルギースペクトルが必要となるが、本K E R M AコードではP E G A S U Sコードによりその平均値を算出しそれを用いた。今後、J E N D L - 3ライブラリーを改訂する場合には、生成荷電粒子のエネルギースペクトルを内蔵させるよう要望したい。

謝 詞

本 K E R M A ライブラーを作成するにあたり、(株) 東芝の飯島俊吾氏には直接法について核反応理論の立場からの御議論とコード作成にあたり大変な御援助を戴きました。(株) 東芝の川合将義氏、核データセンターの深堀智生氏には K E R M A コード上の問題点を議論して戴きました。核データセンターの菊池康之室長、中川庸雄氏を始めとして、シグマ研究委員会の多くの方々には J E N D L - 3 の使用に関しての数々の援助と助言を戴きました。また、前川洋核融合炉物理研究室長、更に、核融合実験炉特別チームの方々には有意義な助言を戴きました。以上の方々に感謝の意を表します。最後に、本研究を進めるにあたり多くの御支援を頂いた松田慎三郎核融合実験炉特別チームリーダに感謝致します。

参 考 文 献

- 1) W.W.Engle, "A User's Manual for ANISN, A One-Dimnsional Discrete Ordinate Transport Code with Anisotropic Scattering," K-1693, Union Carbide Corporation, Computing Technology Center (1976).
- 2) W.A.Rhoades and F.R.Mynatt, "The DOT-III Two Dimensional Discrete Ordinates Transport Code," ORNL-TM-4280 (1973).
- 3) M.A.Abdou, C.W.Maynard, "Calculational Methods for Nuclear Heating - Part I : Theoretical and Computational Algorithms," Nucl. Sci. Eng. 56, 360 (1975).
- 4) M.A.Abdou, C.W.Maynard, "Calculational Methods for Nuclear Heating - Part II : Applications to Fusion-Reactor Blankets and Shields," Nucl. Sci. Eng. 56, 381(1975).
- 5) Y.Seki, H.Iida, "Coupled 42-Group Neutron and 21-Group Gamma Ray Cross Section Sets for Fusion Reactor Calculation," JAERI-M8818, (1980).
- 6) K.Maki, et al., "Nuclear Group Constant Set FUSION-J3 for Fusion Reactor Nuclear Calculations Based on JENDL-3," JAERI-M 91-072 (May, 1991).
- 7) K.Shibata, et al. JENDL Compilation Group (Nuclear Data Center, JAERI), "Japanese Evaluated Nuclear Data Library, Version-3 - JENDL-3," Japan Atomic Energy Research Institute, JAERI-1319 (June 1990).
- 8) S.Iijima, M.Kawai, "Simplified Method of Calculation of PKA Spectra, DPA Cross Sections and Kerma Factors for Medium and Heavy Weight Nuclides," J. Nucl. Sci. Technol. Vol.27, 375 (1990).
- 9) S.Iijima, T.Sugi, T.Nakagawa, T.Nishigori, "Program PEGASUS, A precompound and Multi-step Evaporation Theory Code for Neutron Threshold Cross Section Calculation," Proc. of the 1986 Seminar on Nuclear Data, JAERI-M 87-025, p337 (1987).

謝 詞

本 K E R M A ライブラーを作成するにあたり、(株) 東芝の飯島俊吾氏には直接法について核反応理論の立場からの御議論とコード作成にあたり大変な御援助を戴きました。(株) 東芝の川合将義氏、核データセンターの深堀智生氏には K E R M A コード上の問題点を議論して戴きました。核データセンターの菊池康之室長、中川庸雄氏を始めとして、シグマ研究委員会の多くの方々には J E N D L - 3 の使用に関しての数々の援助と助言を戴きました。また、前川洋核融合炉物理研究室長、更に、核融合実験炉特別チームの方々には有意義な助言を戴きました。以上の方々に感謝の意を表します。最後に、本研究を進めるにあたり多くの御支援を頂いた松田慎三郎核融合実験炉特別チームリーダに感謝致します。

参 考 文 献

- 1) W.W.Engle, "A User's Manual for ANISN, A One-Dimnsional Discrete Ordinate Transport Code with Anisotropic Scattering," K-1693, Union Carbide Corporation, Computing Technology Center (1976).
- 2) W.A.Rhoades and F.R.Mynatt, "The DOT-III Two Dimensional Discrete Ordinates Transport Code," ORNL-TM-4280 (1973).
- 3) M.A.Abdou, C.W.Maynard, "Calculational Methods for Nuclear Heating - Part I : Theoretical and Computational Algorithms," Nucl. Sci. Eng. 56, 360 (1975).
- 4) M.A.Abdou, C.W.Maynard, "Calculational Methods for Nuclear Heating - Part II : Applications to Fusion-Reactor Blankets and Shields," Nucl. Sci. Eng. 56, 381(1975).
- 5) Y.Seki, H.Iida, "Coupled 42-Group Neutron and 21-Group Gamma Ray Cross Section Sets for Fusion Reactor Calculation," JAERI-M8818, (1980).
- 6) K.Maki, et al., "Nuclear Group Constant Set FUSION-J3 for Fusion Reactor Nuclear Calculations Based on JENDL-3," JAERI-M 91-072 (May, 1991).
- 7) K.Shibata, et al. JENDL Compilation Group (Nuclear Data Center, JAERI), "Japanese Evaluated Nuclear Data Library, Version-3 - JENDL-3," Japan Atomic Energy Research Institute, JAERI-1319 (June 1990).
- 8) S.Iijima, M.Kawai, "Simplified Method of Calculation of PKA Spectra, DPA Cross Sections and Kerma Factors for Medium and Heavy Weight Nuclides," J. Nucl. Sci. Technol. Vol.27, 375 (1990).
- 9) S.Iijima, T.Sugi, T.Nakagawa, T.Nishigori, "Program PEGASUS, A precompound and Multi-step Evaporation Theory Code for Neutron Threshold Cross Section Calculation," Proc. of the 1986 Seminar on Nuclear Data, JAERI-M 87-025, p337 (1987).

