

# 評価済み核データと 核データ処理の概要

---

[https://rpg.jaea.go.jp/main/ja/program\\_frendy/index.html](https://rpg.jaea.go.jp/main/ja/program_frendy/index.html)

# 本講義の狙い

- 評価済み核データライブラリへの理解を深める
  - 評価済み核データライブラリを見ても戸惑わない程度の知識を身に着ける
    - MF番号、MT番号とは？、核データファイルの読み方、参考資料...etc
- 核データ処理への理解を深める
  - 核データ処理の流れ
    - 評価済み核データライブラリから多群断面積ライブラリ作成まで
  - 個々の処理の概要を知る
    - どのような処理を行っているのかをイメージできるようになるのが目標
    - 数式的なものは参考資料を参考にしてください

# 講義内容

- 核データ処理システムについて
- 評価済み核データライブラリについて
- 評価済み核データのフォーマット
  - ENDF-6フォーマット、GNDSフォーマット
- 多群断面積ライブラリ作成における各処理の概要について
  - 断面積の線形化
  - 共鳴再構成
  - ドップラー拡がりの処理
  - ガス生成断面積の作成
  - 非分離共鳴領域の自己遮蔽の取り扱い
  - 多群断面積ライブラリの作成
- 熱中性子散乱則の考慮
- NJOYを使用する際の注意点
- 国産核データ処理システムFRENDYの開発

# 核データ処理システムについて

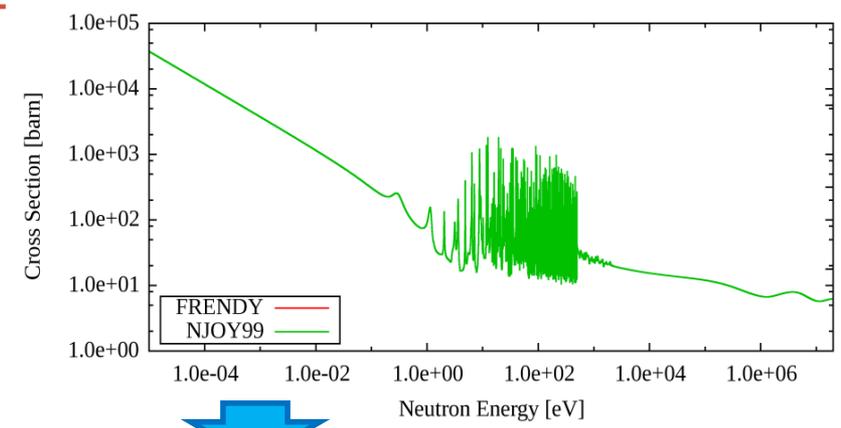
- 評価済み核データライブラリを  
 基に、核計算コード用の断面積  
 ライブラリを作成するシステム
  - 単にテキスト形式の断面積データを  
 核計算コード用に変換するだけで  
 なく、多くの演算が必要
- 米国(LANL)のNJOYやIAEAの  
 PREPROが有名
  - 日本でも長年独自の核データ処理  
 システム開発の要望はあったが、  
 実用的な処理システムは開発され  
 てこなかった

## 【核データ処理の例】

評価済み核データライブラリ  
**(JENDL、ENDF、JEFF)**



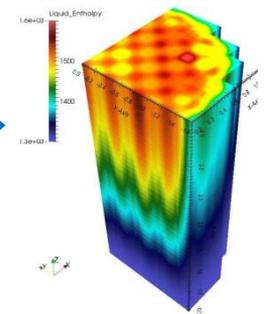
核データ処理システム



核計算コード  
**MVP、  
 MARBLE、  
 PHITS、  
 MCNP**



Flux分布など



# 【参考】FRENDYのSource Lines of Code

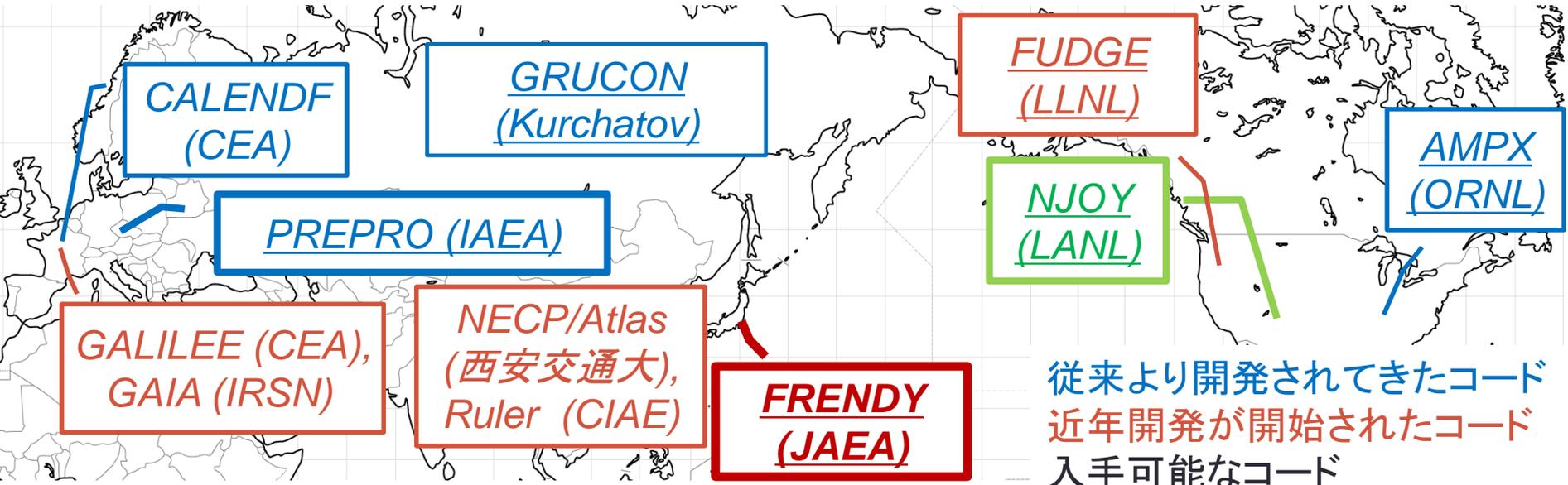
機能	行数	コメント行数	空行数	有効行数
共通部分	38,633	1,807	5,591	31,235
ENDF読み書き	57,521	2,933	8,881	45,707
断面積再構成	9,378	458	1,273	7,647
ドップラー拡がりの処理	5,329	332	749	4,248
ガス生成断面積作成	1,532	60	221	1,251
確率テーブル作成	4,675	231	754	3,690
熱中性子断面積計算	5,750	251	727	4,772
ACEファイル作成	35,998	1,195	5,143	29,660
<b>合計</b>	<b>158,816</b>	<b>7,267</b>	<b>23,339</b>	<b>128,210</b>
MVP	183,397	45,932	29,764	107,701
NJOY2016	116,609	599	5,318	110,692
NJOY2016 (FRENDY相当分のみ)	41,527	108	1,621	39,798

※LOCの計算にはozG4、RakuStepCounterを使用

# 各国の核データ処理システムの開発状況

- 従来はNJOYの一強状態で、一部でPREPROも使用
  - NJOYが実質的なデファクトスタンダード
- NJOYに対する不満と新しい核データフォーマット (GNDS)の導入を契機に独自の核データ処理システム開発が活発化

【諸外国の主な核データ処理システム】



従来より開発されてきたコード  
 近年開発が開始されたコード  
 入手可能なコード

# 評価済み核データライブラリとは？

- 原子核に関する様々な物理量をまとめたもの
  - 断面積や放出粒子のスペクトル、核分裂収率、半減期など

## 世界的には

- 日本(JAEA)のJENDL

- Japanese Evaluated Nuclear Data Library



- 米国(CSEWG)のENDF/B

- Evaluated Nuclear Data File



- 欧州(OECD/NEA)のJEFF

- Joint Evaluated Fission and Fusion File



- JEFFになったのはJEFF-3.0からで、以前はJEFとEFFに分かれていた

が世界三大ライブラリとして有名

- 他にはロシアのBRONDや中国のCENDLなどが知られている

# 【小話】 ENDF/Bの“B”とは？

- ENDF Version Bのこと
- 元々はUKNDLベースのENDF/A (ENDF Version A)があった
  - 1965年に策定 (BNL-8381)
  - 現在のENDF/Bと異なり、こまごまとしたデータや部分的なデータであり、炉心設計への適用性に難あり
- 炉心設計等で利用できるように共通化した核データフォーマットとしてENDF/Bができた
  - 1966年に策定 (BNL-50066)
- 現在のENDF-6フォーマットは1990年に策定
  - ENDF/B-VI、ENDF/B-VII、ENDF/B-VIIIで利用
    - ENDF-6はフォーマット形式名で、ENDF/B-VI、ENDF/B-VII、ENDF/B-VIIIは評価済み核データファイル名なので混同しないように注意!!

# 核データライブラリ中の主な物理量

中性子輸送計算で  
主に利用

- 断面積 : 原子核反応の起こる割合
- 角度分布 : 放出粒子の角度分布
- エネルギースペクトル: 放出粒子のエネルギー分布
- 分離・非分離共鳴パラメータ
- 核分裂あたりの放出中性子数
- 核分裂中性子スペクトル
- 熱中性子散乱則データ ( $S(\alpha, \beta)$ )

燃焼計算で  
主に利用

- 核分裂収率
- 崩壊データ (半減期、遷移確率)
- $\gamma$ 線データ (遷移確率、強度、エネルギー)
- 核構造データ (準位エネルギー、スピン、パリティ)
- 原子核の質量(質量欠損)や存在比

# 評価済み核データの主な利用先

**エネルギー利用**

LWR



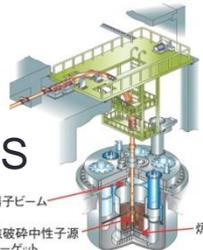
HTGR



FBR



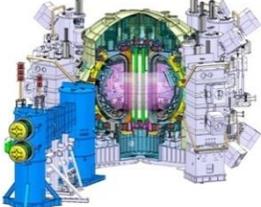
ADS



バックエンド



核融合





**非エネルギー利用**

宇宙工学



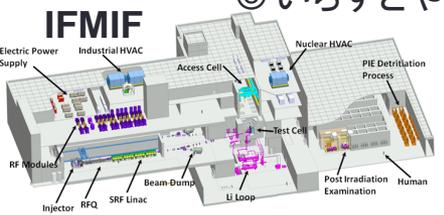
医療



©いらすとや



J-PARC

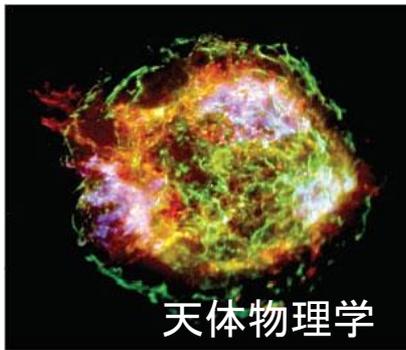


IFMIF

**その他の利用**



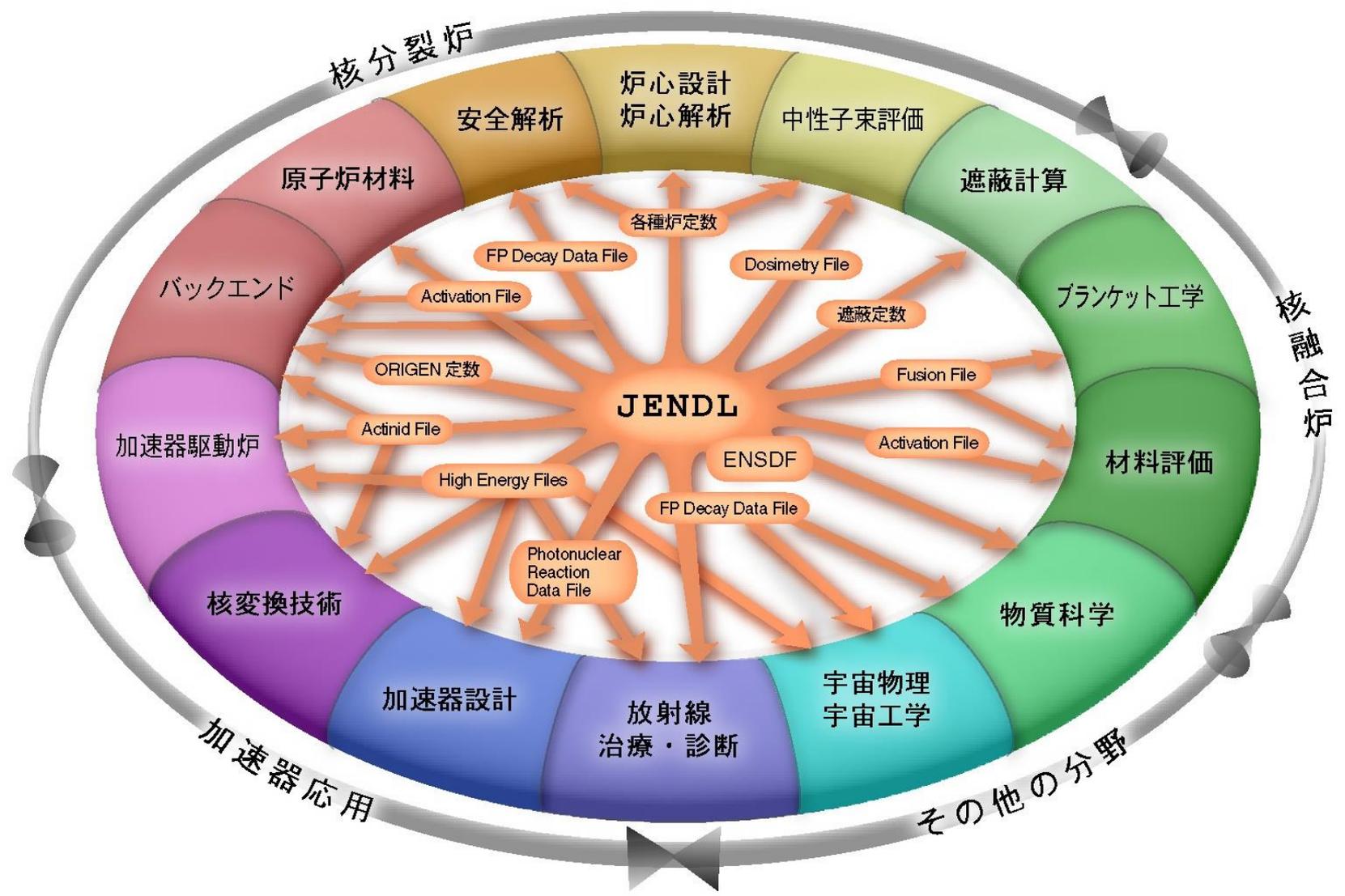
オクロの天然原子炉



天体物理学

© NASA

# 評価済み核データと各分野の関係



# JENDLの歴史

Version	JENDL-1	JENDL-2	JENDL-3.1	JENDL-3.3	JENDL-4.0	JENDL-5
目的	高速炉	軽水炉+高速炉	汎用	汎用	汎用	汎用
公開年	1977	1982	1990	2002	2010	2021
最大エネルギー	15 MeV	20 MeV	20 MeV	20 MeV	20 MeV	200 MeV
核種数*	66 + 6	173 + 8	305 + 19	335 + 2	405 + 1	795 + 0
γ線データ	0	0	59	114	354	788

\*: 同位体 + 天然元素

# 世界三大ライブラリの比較

Library	JENDL-5	ENDF/B-VIII.0	JEFF-3.3
開発主体	日本	米国	欧州
公開年	2021	2018	2017
核種数	795	557	562+1
γ線データのある核種数	788	420	559
放射化データのある核種数	794	119	355

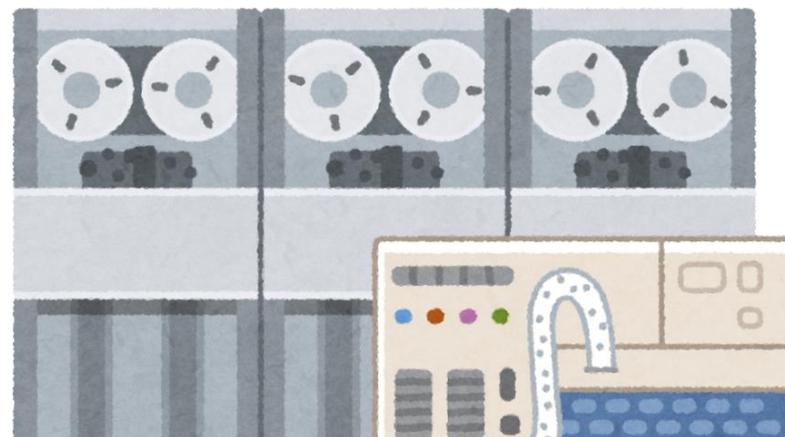
# 評価済み核データのフォーマット

- 現在はENDF-6フォーマットが実質的な標準規格
  - 米国の評価済み核データENDF/Bのために開発されたフォーマット
  - 米国断面積評価ワーキンググループ(CSEWG)によって管理
- OECD/NEAの核データ評価国際協力ワーキングパーティ(WPEC)にて新たな規格を制定
  - **GNDS: Generalized Nuclear Data Structure**
  - XML形式で人にもコンピュータにも読みやすいフォーマット
  - GNDSフォーマットマニュアル
    - Specifications for the Generalized Nuclear Database Structure (GNDS)
    - <https://www.oecd-nea.org/science/wpec/documents/7519-GNDS.pdf>



# ENDF-6フォーマットのデータ構造

- **tape** > **material** > **file** > **section**の四段階で構成
  - **tape** : 1つまたは複数の**material**の束
  - **material** : 1つの核種もしくは化合物( $H_2O$ 、 $ZrH$ など)で、**MAT番号**で区別
  - **file** : 断面積、角度分布、エネルギー分布等の核反応データの種類を示し、**MF番号**で区別
  - **section** : 反応タイプを示し、**MT番号**で区別
- 最近の核データは全て**material**(核種/化合物) で**tape**は使用せず
  - **tape**はオープンリールを使っていた時代の名残
  - 昔はオープンリールを効率的に使うため、複数の核種をまとめて保存



# MAT番号のルール

- MAT: 陽子数"ZZ" + 同位体番号"NN"の四桁の数字
  - 同位体番号は安定核種で最も軽い同位体を25とする
    - ウランなどは天然に存在する同位体で最も軽い同位体を25としている
  - 質量数が1増える毎に+3、1減る毎に-3
    - $^{242m}\text{Am}$ のような準安定核種は+1
  - Np以降の天然に存在しない核種は評価者が任意に設定
  - $Z \geq 99$ の核種は個別に番号設定
  - 天然元素の同位体番号は"00"
    - JENDL-4など比較的新しい核データライブラリでもCは天然元素 (MAT=600)
  
- MAT番号の例
  - $^1\text{H}$ : 125、 $^2\text{H}$ : 128
  - $^{230}\text{U}$ : 9213、 $^{235}\text{U}$ : 9228、 $^{238}\text{U}$ : 9237
  - $^{242}\text{Am}$ : 9546、 $^{242m}\text{Am}$ : 9547

# 代表的なMF番号

- **MF= 1:** コメント、 $v$ 値
- **MF= 2:** 共鳴パラメータ
- **MF= 3:** 反応断面積
- **MF= 4:** 二次粒子の角度分布
- **MF= 5:** 二次粒子のエネルギー分布
- **MF= 6:** 二次粒子エネルギー角度分布
- **MF= 7:** 熱中性子散乱データ
- **MF= 8:** 放射性崩壊&FP収率データ
- **MF= 9:** 放射性崩壊の生成多重度
- **MF=10:** 放射性崩壊の生成断面積
- **MF=11:** 光子生成データコメント
- **MF=12-15:** 光子生成データ
- **MF=30-40:** 共分散データ

**BROOKHAVEN**  
NATIONAL LABORATORY

CSEWG Document ENDF-102  
Report BNL-203218-2018-INRE  
SVN Commit: Revision 215

## ENDF-6 Formats Manual

Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files  
ENDF/B-VI, ENDF/B-VII and ENDF/B-VIII

Written by the Members of the Cross Sections Evaluation Working Group

Edited by  
A. Trkov, M. Herman and D. A. Brown

With contributions from  
N. Holden and G. Hedstrom

February 1, 2018

National Nuclear Data Center  
Brookhaven National Laboratory  
Upton, NY 11973-5000  
[www.nndc.bnl.gov](http://www.nndc.bnl.gov)

Notice: This manuscript has been authored by employees of Brookhaven Science Associates, LLC under Contract No. DE-SC0012704 with the U.S. Department of Energy. The publisher by accepting the manuscript for publication acknowledges that the United States Government retains a non-exclusive, paid-up, irrevocable, world-wide license to publish or reproduce the published form of this manuscript, or allow others to do so, for United States Government purposes.

# 代表的なMT番号

- **MT= 1** : (n, total)
- **MT= 2** : (z, elastic)
- **MT= 3** : (z, nonelastic)
- **MT= 4** : (z, n)
- **MT= 16** : (z, 2n)
- **MT= 18** : (z, fission)
- **MT=51-90**: (z,  $n_x$ )
- **MT= 91** : (z,  $n_c$ )
- **MT=102** : (z,  $\gamma$ )
- **MT=151** : 共鳴パラメータ
- **MT=452** : 核分裂当りの平均全中性子数 $\bar{\nu}_T$

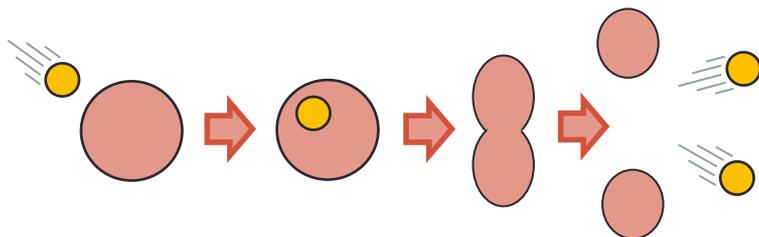
## 中性子入射の場合の反応名

全断面積  
 弾性散乱  
 弾性外散乱 (total-elastic)  
 非弾性散乱 ( $n_x + n_c$ )  
 (n,2n)反応  
 核分裂  
 離散レベル非弾性散乱  
 連続レベル非弾性散乱  
 放射捕獲

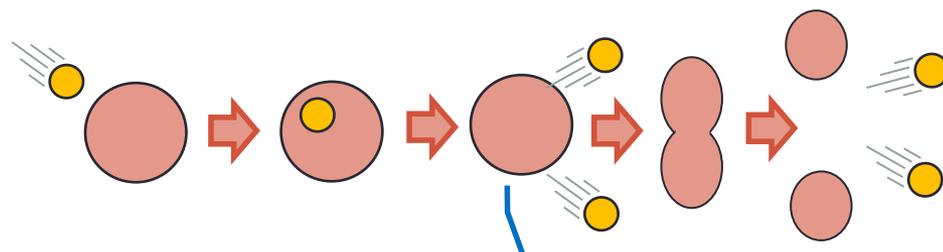
# 【参考】マルチチャンス核分裂

- 核分裂断面積として5種類の反応が記述可能
  - MT=18 (z,fission)
  - MT=19 (n,f) : 1<sup>st</sup> chance fission
  - MT=20 (n,nf) : 2<sup>nd</sup> chance fission
  - MT=21 (n,2nf) : 3<sup>rd</sup> chance fission
  - MT=38 (n,3nf) : 4<sup>th</sup> chance fission
  - 複合核形成後、核分裂よりも前に中性子を放出するマルチチャンス核分裂を記述可能
- 核分裂による中性子生成数 $\nu$ は平均値(MT=18)の値しか記述できないため、MT=20以降は放射線輸送計算では使われない

【通常の核分裂の例】



【マルチチャンス核分裂の例】



複合核を形成後、核分裂よりも前に中性子を放出

# ENDF-6フォーマットの基本データ構造

		MAT	MF	MT	line
	tape id		0	0	
ファイル1	Start of MF1, MT451 (コメント)開始	1111	1	451	1
	...				
	SEND record	1111	1	0	
	FEND record	1111	1	099999	
ファイル2	Start of MF2, MT151 (共鳴パラメータ)	1111	2	151	1
	...				
	SEND record	1111	2	0	
	FEND record	1111	2	099999	
ファイル3	Start of MF3, MT1 (全断面積)	1111	3	1	1
	...				
	SEND record	1111	3	0	
	Start of MF3, MT2 (弾性散乱断面積)	1111	3	2	
	...				
	FEND record	1111	3	099999	
	MEND record	0	0	0	
	TEND record	-1	0	0	

66カラム
4 2 3 5カラム

# ENDF-6フォーマットの具体例

## JENDL-4.0 Fe-56の(n,2n)断面積

						MF			
						MAT	↓	MT	
2. 605600+4	5. 545440+1	0	0	0	0	02631	3	16	1
-1. 120270+7	-1. 120270+7	0	0	1	0	112631	3	16	2
11	2	0	0	0	0	02631	3	16	3
1. 140470+7	0. 000000+0	1. 170000+7	1. 622410-2	1. 200000+7	4. 800450-2	22631	3	16	4
1. 300000+7	2. 138200-1	1. 400000+7	3. 891650-1	1. 500000+7	5. 134000-1	12631	3	16	5
1. 600000+7	5. 817500-1	1. 700000+7	6. 107500-1	1. 800000+7	6. 118000-1	12631	3	16	6
1. 900000+7	5. 977000-1	2. 000000+7	5. 759000-1			2631	3	16	7
						2631	3	099999	
11カラム		11カラム		11カラム					

### 11カラム実数表現

- $\pm 1.234567 \pm n$
- $\pm 1.23456 \pm nn$  ( $nn \leq 38$ )
- $\pm 1.23456789$

単精度  
(32ビット精度)

# 断面積データの意味

## JENDL-4.0, Fe-56の(n,2n)断面積

						MAT	MF ↓ MT		
2. 605600+4	5. 545440+1	0	0	0		02631	3	16	1 } HEAD
-1. 120270+7	-1. 120270+7	0	0	1		112631	3	16	2 } HEAD
11	2	0	0	0		02631	3	16	3 } HEAD
1. 140470+7	0. 000000+0	1. 170000+7	1. 622410-2	1. 200000+7	4. 800450-2	22631	3	16	4 } TAB1
1. 300000+7	2. 138200-1	1. 400000+7	3. 891650-1	1. 500000+7	5. 134000-1	12631	3	16	5 } TAB1
1. 600000+7	5. 817500-1	1. 700000+7	6. 107500-1	1. 800000+7	6. 118000-1	12631	3	16	6 } TAB1
1. 900000+7	5. 977000-1	2. 000000+7	5. 759000-1			2631	3	16	7 } TAB1
						2631	3	099999	} SEND



[MAT, 3, MT/ **ZA**, **AWR**, 0, 0, 0, 0] HEAD  
 [MAT, 3, MT/ **QM**, **QI**, 0, **LR**, **NR**, **NP**/ **Eint**/  $\sigma(E)$ ] TAB1  
 [MAT, 3, 0/ 0.0, 0.0, 0, 0, 0, 0] SEND

ZA, AWR :  $1000.0 \times Z + A$ , mass quantities for materials  
 QM: Mass-difference Q value (eV)  
 QI : Reaction Q value  
 LR : Complex or “breakup” reaction flag

# ENDF-6フォーマットのデータ表現形式

- テーブル形式

- 離散化点を与える形式:  $(E_1, \sigma_1), (E_2, \sigma_2), \dots$
- 汎用的で関数形に依存しない

- 関数形式

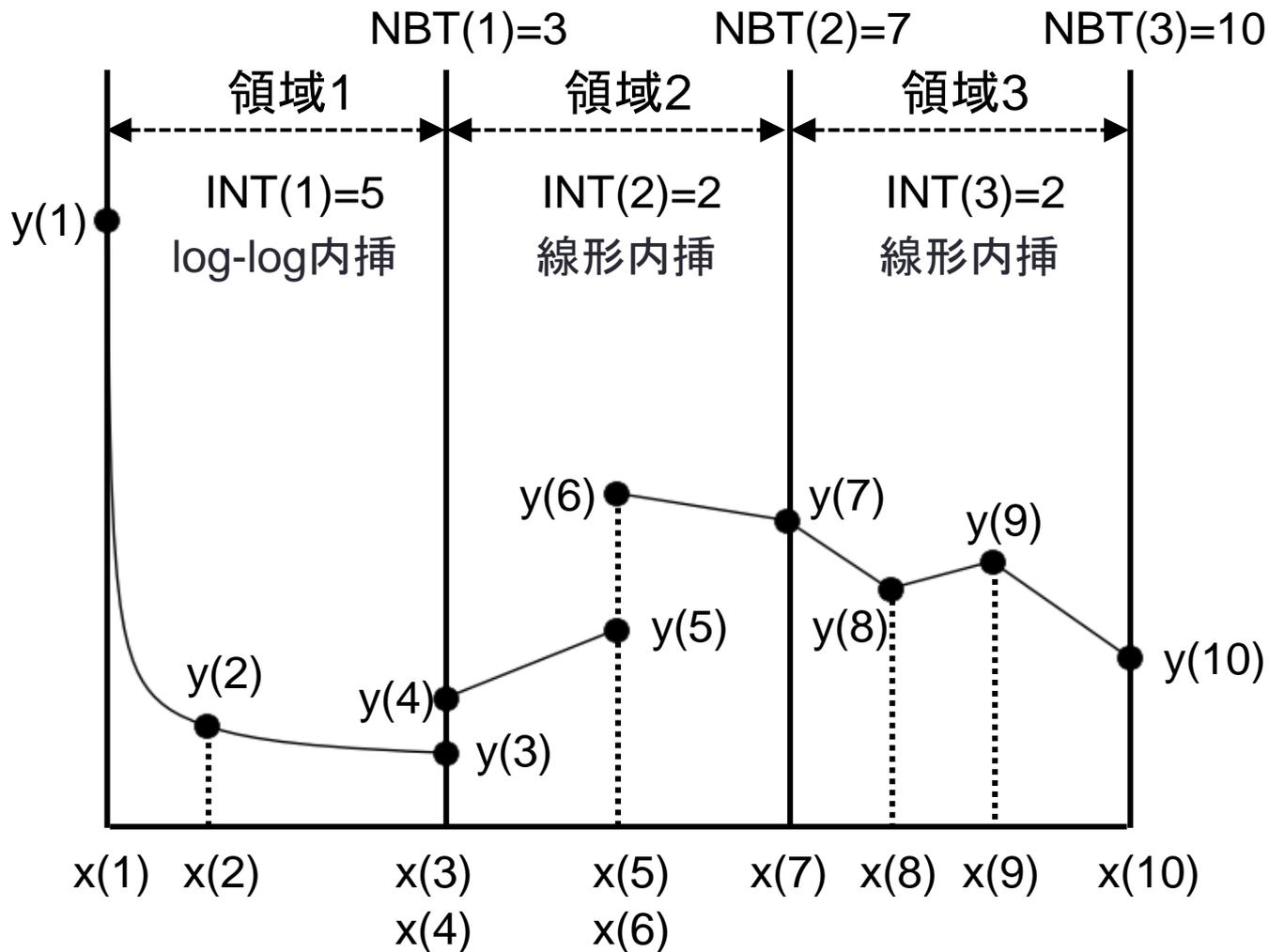
- 関数形を決めて、パラメータを与える形式
  - 例: Breit-Wignerの一準位公式 (共鳴断面積)
- パラメータが別のパラメータ(例えば、エネルギー)に依存する場合、そのパラメータはテーブル形式で与えられる

# テーブル形式のデータ表現

NP = 10  
(ポイント数)  
NR = 3  
(領域数)



ENDFに与えられている



点を与えて、線でつなぐ(内挿法を指定)

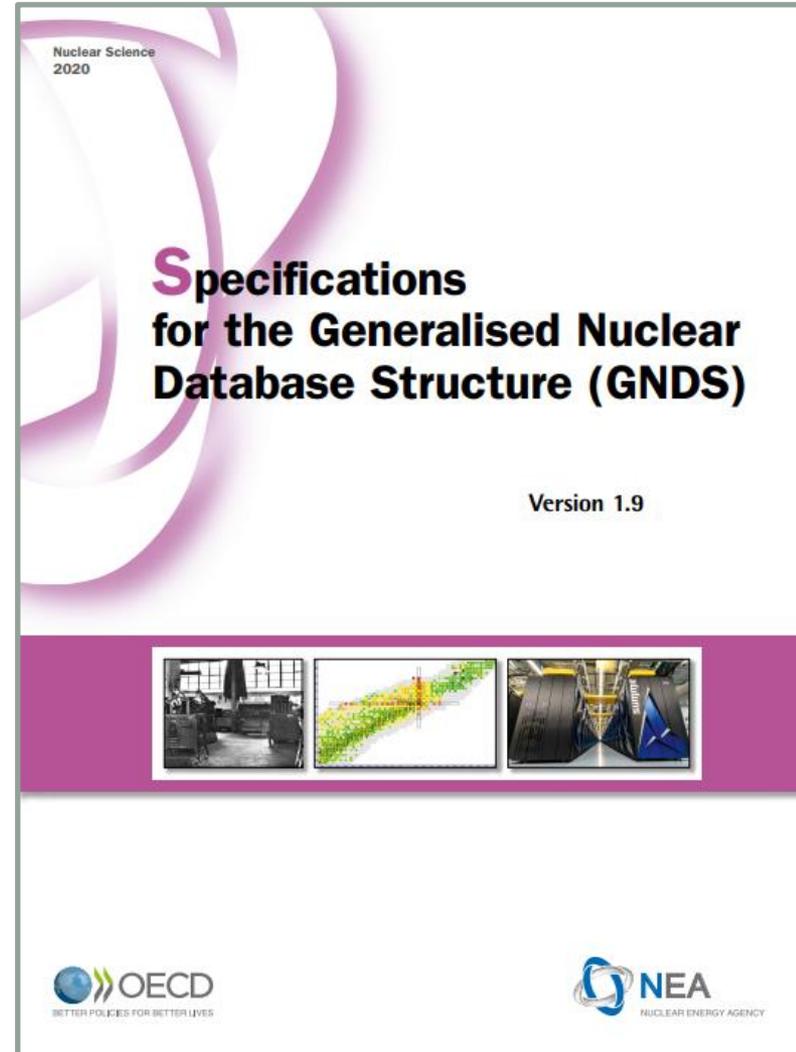
# ENDF-6で用いられる内挿法

- **INT=1:** ヒストグラム (一定)
- **INT=2:** 線形内挿 (linear-linear)
- **INT=3:**  $y - \ln(x)$ 線形内挿 (linear-log)
- **INT=4:**  $\ln(y) - x$ 線形内挿 (log-linear)
- **INT=5:**  $\ln(y) - \ln(x)$ 線形内挿 (log-log)
- **INT=6:** 荷電粒子断面積のための特別内挿法
- **INT=11-15:** method of corresponding points  
(2次元関数内挿)
- **INT=21-25:** ユニットベース内挿  
(2次元関数内挿)

$$\sigma(E) = \frac{A}{E} e^{-\frac{B}{\sqrt{E-T}}}$$

# 新しい核データフォーマット: GNDS

- OECD/NEA WPEC SG-38で策定
  - 現在はWPEC EG-GNDSで管理
- XML言語
- ENDF-6 $\leftrightarrow$ GNDSの変換ツールとして、LLNLを中心にFudgeを開発中
  - LLNLの輸送計算コード用の核データ処理も可能



# GND形式の具体例

JENDL-4.0, Fe-56の(n,2n)断面積

←(n,2n)反応

反応の定義 `<reaction label="29" outputChannel="n[multiplicity:' 2'] + Fe55 + gamma" date="1987-03-01" ENDF_MT="16">`

断面積の定義 `<crossSection nativeData="linear">`

`<linear xData="XYs" length="11" accuracy="0.001">`

`<axes>`

`<axis index="0" label="energy_in" unit="eV"`

内挿法の定義

`interpolation="linear, linear" frame="lab"/>`

`<axis index="1" label="crossSection" unit="b"`

`frame="lab"/></axes>`

`<data> 1.14e7 0.00000 1.17e7 0.0162241 1.20e7 0.0480045`

断面積  
データ

`1.30e7 0.21382 1.40e7 0.3891650 1.50e7 0.5134000`

`1.60e7 0.58175 1.70e7 0.6107500 1.80e7 0.6118000`

`1.90e7 0.59770 2.00e7 0.5759000 </data></linear>`

`</crossSection>`

二次中性子  
エネルギー  
角度分布  
の定義

`<outputChannel genre="NBody" Q="-11202700 eV">`

`<product name="n" label="n" multiplicity="2"`

`ENDFconversionFlag="MF6">`

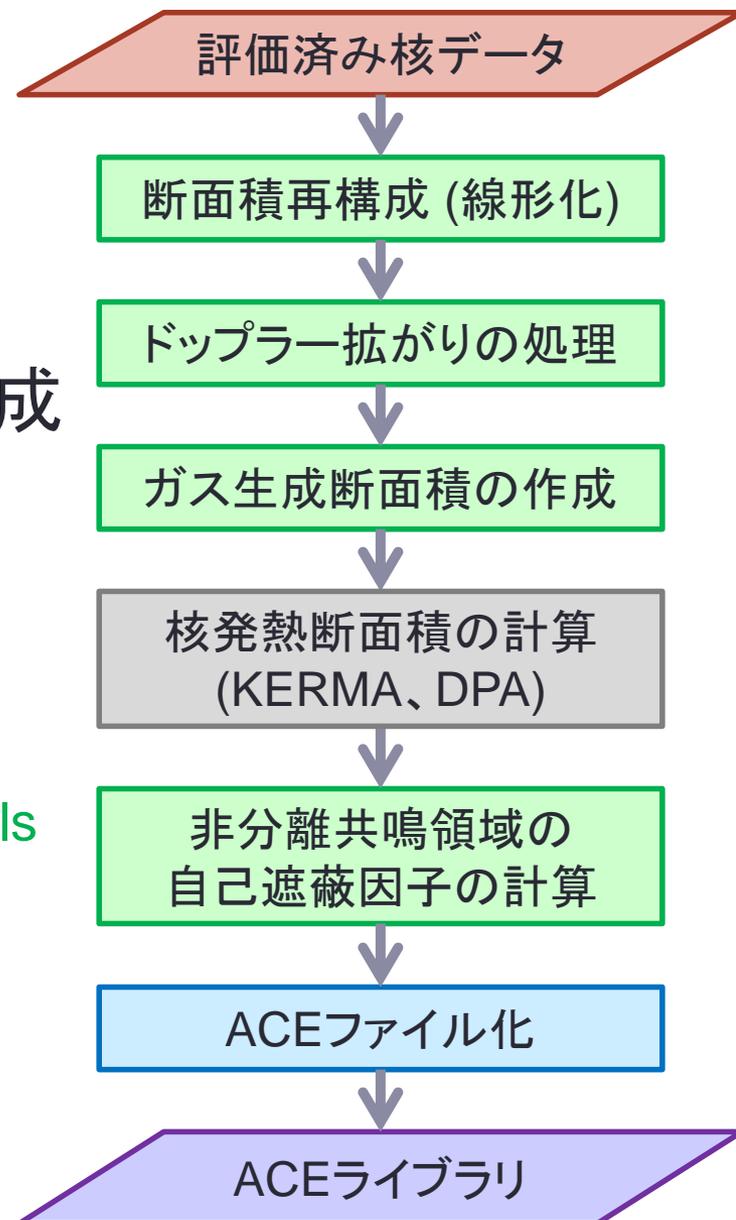
`<distributions nativeData="Legendre">`

`<Legendre nativeData="LegendrePointwise">`

# 核データから連続エネルギーモンテカルロコード用断面積ライブラリの作成

- PHITS/MCNP用のACEファイル作成の流れは右図の通り

- KERMA、DPA計算は、FRENDYでは未実装
  - NJOYのHEATR機能
  - KERMA: kinetic energy release in materials
  - DPA: displacement per atom

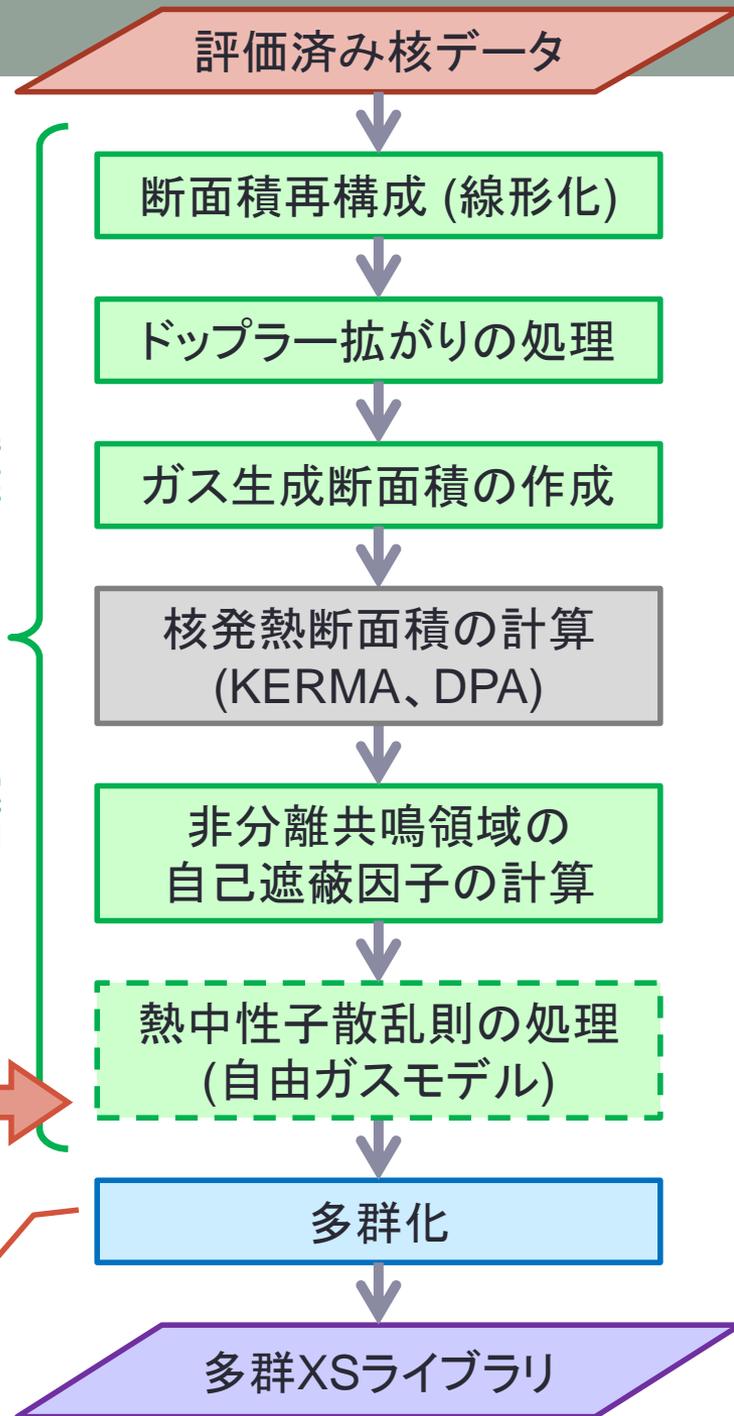


# 核データから多群断面積 ライブラリの作成

- 中性子輸送計算コード用の多群断面積作成の流れは右図の通り
  - 断面積再構成～自己遮蔽因子の計算までの部分は連続エネルギーモンテカルロ計算コード用の断面積ライブラリ作成方法と同じ
- 上方散乱を考慮する場合は、熱中性子散乱則の処理が必須

連続エネルギーモンテカルロとの違いはここだけ

連続エネルギーで評価



評価済み核データ

断面積再構成 (線形化)

ドップラー拡がりの処理

ガス生成断面積の作成

核発熱断面積の計算  
(KERMA、DPA)

非分離共鳴領域の  
自己遮蔽因子の計算

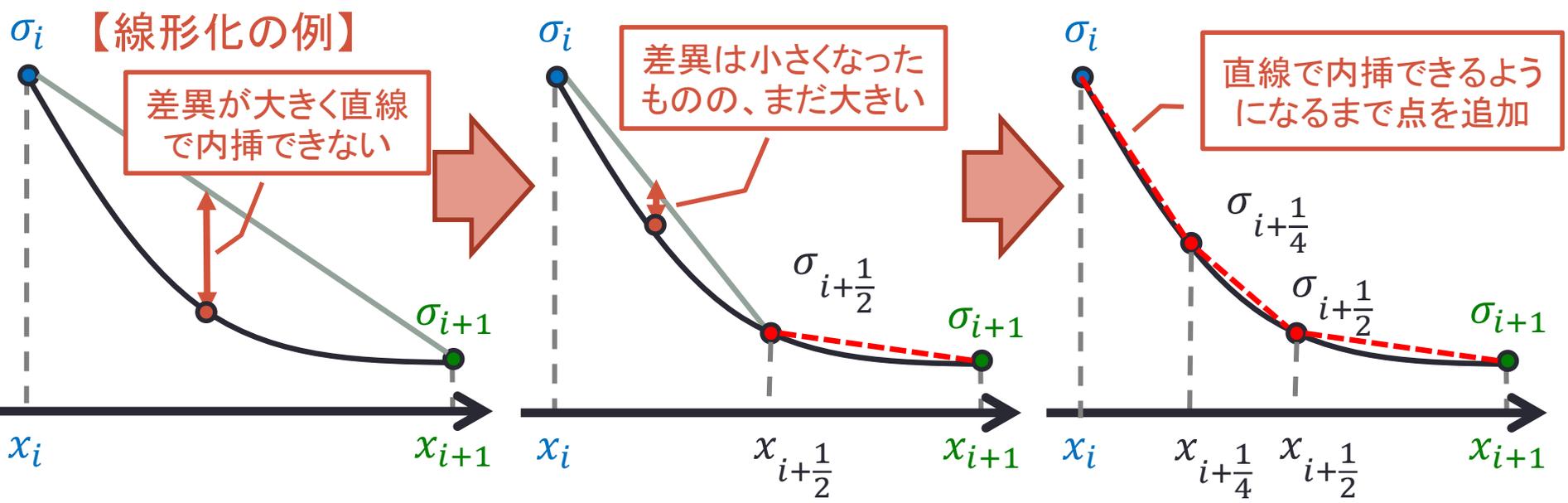
熱中性子散乱則の処理  
(自由ガスモデル)

多群化

多群XSライブラリ

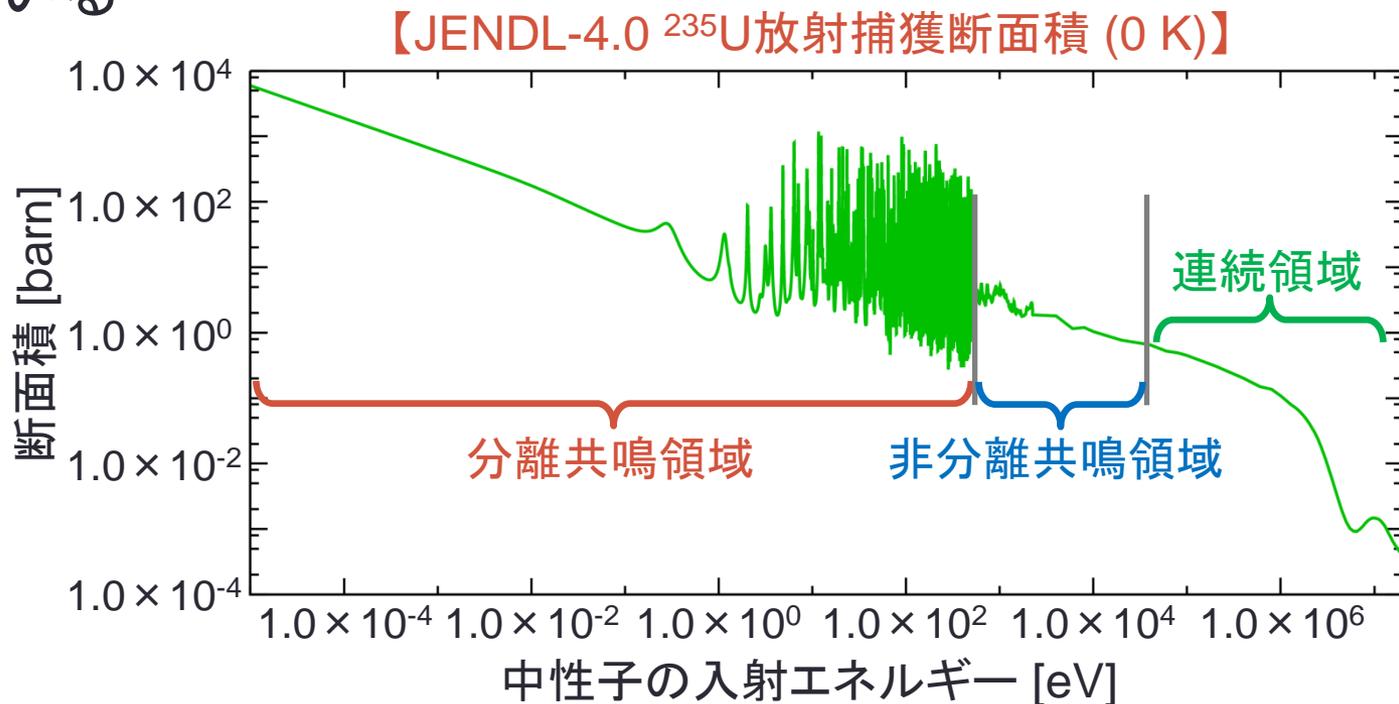
# 断面積の線形化

- 核データライブラリでは断面積データはlog-logなどで表記
  - 以降の処理のために線形化(linear-linearに変換)が必要
    - 例えばドップラー拡がりの処理では線形のデータがあると容易に評価可能に
    - モンテカルロ計算コードでは線形データを取り扱うため、線形化しておく方が色々都合がいい



# 共鳴再構成とは？

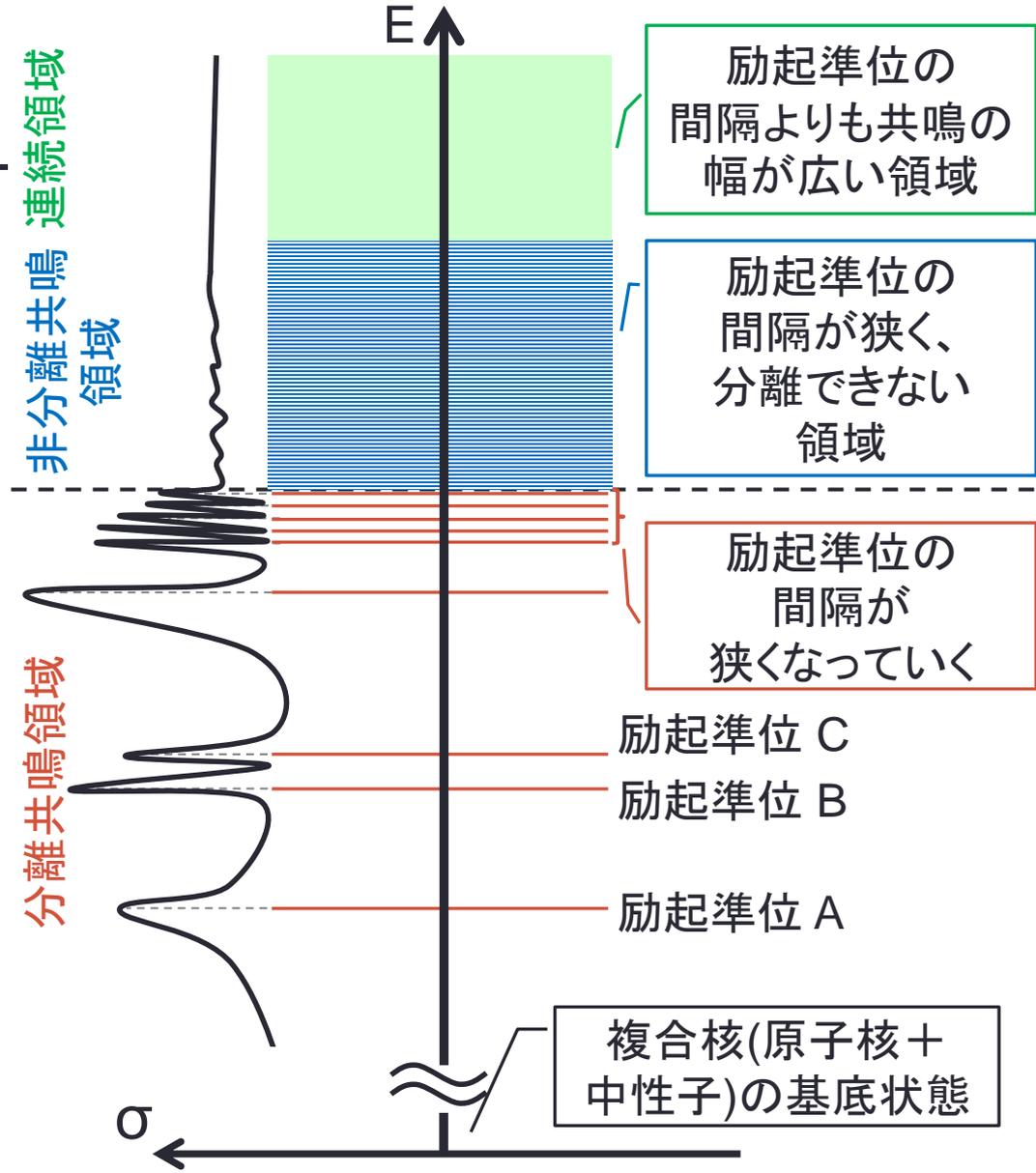
- 分離共鳴領域／非分離共鳴領域の断面積を計算
  - 分離共鳴領域の断面積を断面積公式から計算
  - 非分離共鳴領域の平均断面積を断面積公式から計算
  - 非分離共鳴領域よりも上のエネルギーについてはMF=3で用意されている



# 共鳴とは？

- 中性子の入射エネルギーと結合エネルギーの和が複合核の励起準位と同じ場合に、反応断面積が大きくなること
- 共鳴のエネルギーは複合核の励起準位のエネルギーと一致

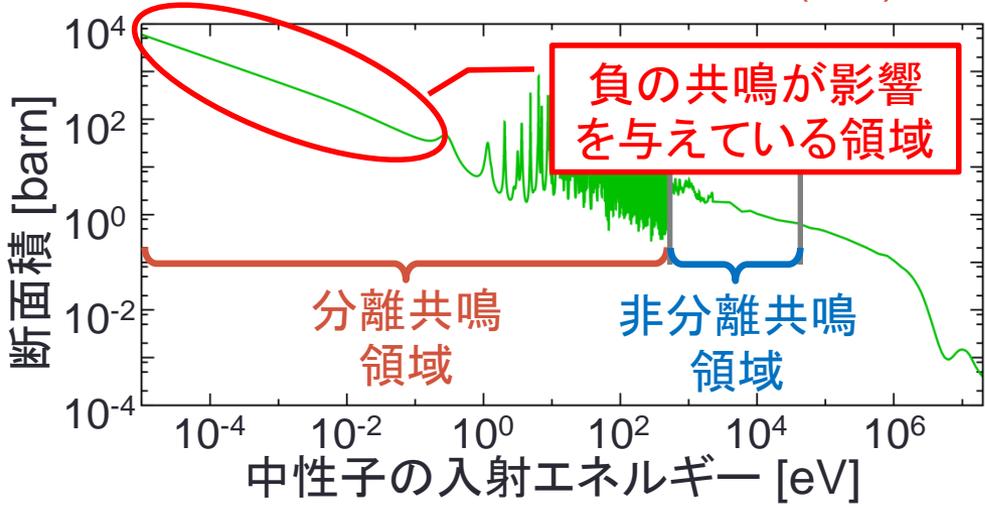
【励起準位と共鳴構造の関係】



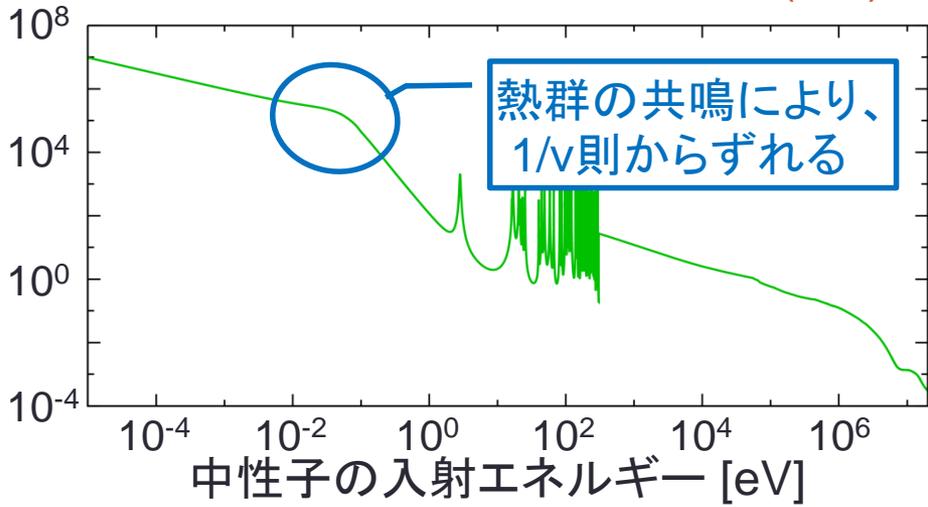
# 低エネルギー領域の断面積

- 低エネルギーの全断面積、放射捕獲断面積などは  $1/v$  則で近似できるが完全に一致する訳ではない
  - この低エネルギー領域の断面積の  $1/v$  則からのずれは **負の共鳴** を考慮することで説明できる
    - $^{157}\text{Gd}$  のように熱領域に共鳴がある場合は、その共鳴の影響で  $1/v$  則からずれることも

【JENDL-4.0  $^{235}\text{U}$ 放射捕獲断面積 (0 K)】

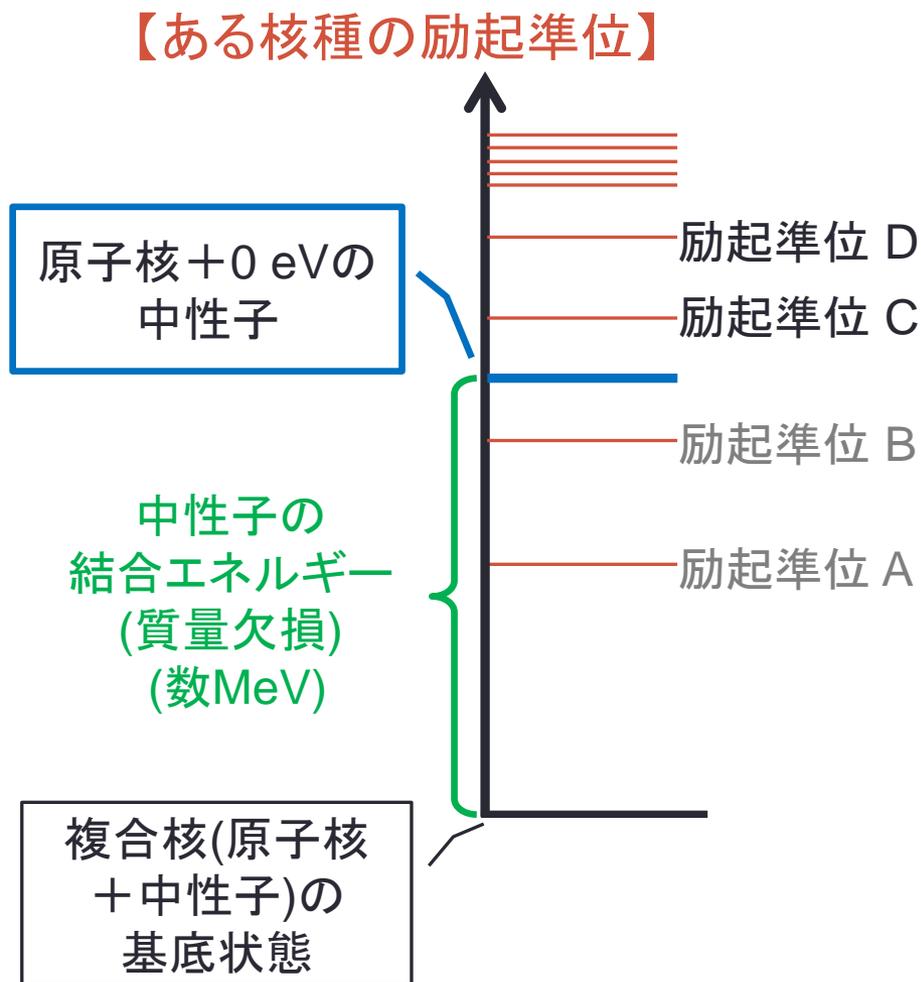


【JENDL-4.0  $^{157}\text{Gd}$ 放射捕獲断面積 (0 K)】



# 負の共鳴 (Negative resonance) とは？

- 中性子の結合エネルギー (分離エネルギー) よりも小さい励起準位による共鳴
  - 複合核を形成すると中性子の質量が減少(質量欠損)
  - 複合核は入射エネルギーが 0 eV でも結合エネルギー分 (質量欠損分) だけ励起された状態になる
- 左図では励起準位 A、B (束縛状態) が負の共鳴となる
  - どこまでの励起準位を考慮するかで低エネルギー領域の断面積が変化



# 核データでの共鳴断面積の格納形式

- 核データライブラリでは共鳴断面積はいくつかの断面積公式の係数として格納
  - Breit-Wignerの一準位公式 (SLBW)
  - Breit-Wignerの多準位公式 (MLBW)
  - Reich-Mooreの断面積公式
  - R-Matrix Limited
- これらの式はスピンをもつ多粒子系のシュレーディンガー方程式を解くことで導出されるが、詳細は省略
  - 核反応断面積公式を解く際の近似が異なる
  - 式の導出の詳細が知りたい場合は、**小林啓祐著、「原子炉物理」第一章**をお読みください
  - 式のイメージが知りたい場合は、**ジョン・R・ラマーシュ著、「原子炉の初等理論(上)」**などをお読みください

# 【参考】Breit-Wignerの一準位公式

- Breit-Wignerの一準位公式では放射捕獲断面積及び弾性散乱断面積は以下の式で表記される
  - 核データライブラリでは、スピンや共鳴幅などのパラメータが与えられている
  - 共鳴再構成ではこれらのパラメータを使って入射エネルギー $E_r$ の断面積を計算
  - **線形化の手法は断面積の線形化と同じで、中点を追加していく**

## 放射捕獲断面積

$$\sigma_{\gamma} = \frac{\pi}{k_1^2} g_j \sqrt{\frac{E_1}{E_r}} \frac{\Gamma_{nr}(E_1)\Gamma_{\gamma r}}{(E_r - E_1)^2 + \Gamma_r^2/4}$$

## 弾性散乱断面積

$$\sigma_{sc} = \frac{\pi}{k_1^2} g_j \frac{\Gamma_{nr}(E_1)^2 - 2\Gamma_{nr}(E_1)\Gamma_r \sin^2(\phi_l) + 2\Gamma_{nr}(E_1)(E_r - E_1)\sin(2\phi_l)}{(E_r - E_1)^2 + \Gamma_r^2/4} + \sigma_p$$

$\Gamma_{nr}$ : 中性子幅、 $E_r$ : 入射エネルギー、 $E_1$ : 共鳴エネルギー、 $k_1$ : 波数  $\propto \sqrt{E_r}$ 、  
 $g_j$ : スピン統計因子、 $\Gamma_r$ : 共鳴幅、 $\phi_l$ : 位相シフト、 $\sigma_p$ : ポテンシャル散乱断面積

# ドップラー拡がりの処理とは？

- 核データでは0 Kでの断面積データと共鳴パラメータが格納
  - 任意温度の断面積を得るためには、0 Kの断面積から作る必要がある
- 温度が上昇するにつれ、共鳴断面積が変化
  - **ドップラー効果**
  - ドップラー効果を考慮して任意温度の断面積を作成することをドップラー拡がりの処理と呼ぶ

# ドップラー効果とは？

- 相対速度によって音の高低に変化が生じる現象
  - 相対速度が速ければ速いほど周波数が高くなる→高音に
- 原子核と中性子の反応も同様のことが起こる
  - 0 Kでは原子核は停止
  - 温度が高くなると原子核の運動エネルギーが上昇
    - 原子核と入射中性子の相対エネルギーを考慮する必要がある

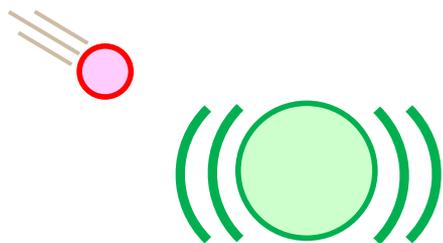
## 【一般的な音のドップラー効果】



# ドップラー効果による共鳴断面積の変化

- 温度が上昇すると原子核の運動エネルギーが増加
  - 共鳴ピークのエネルギー以外でも見かけ上のエネルギー (相対エネルギー) が共鳴ピークとなるように
    - 共鳴幅が広がる効果
  - その代わりに、共鳴ピークのエネルギーでは断面積が低下

## 【中性子と原子核の反応】

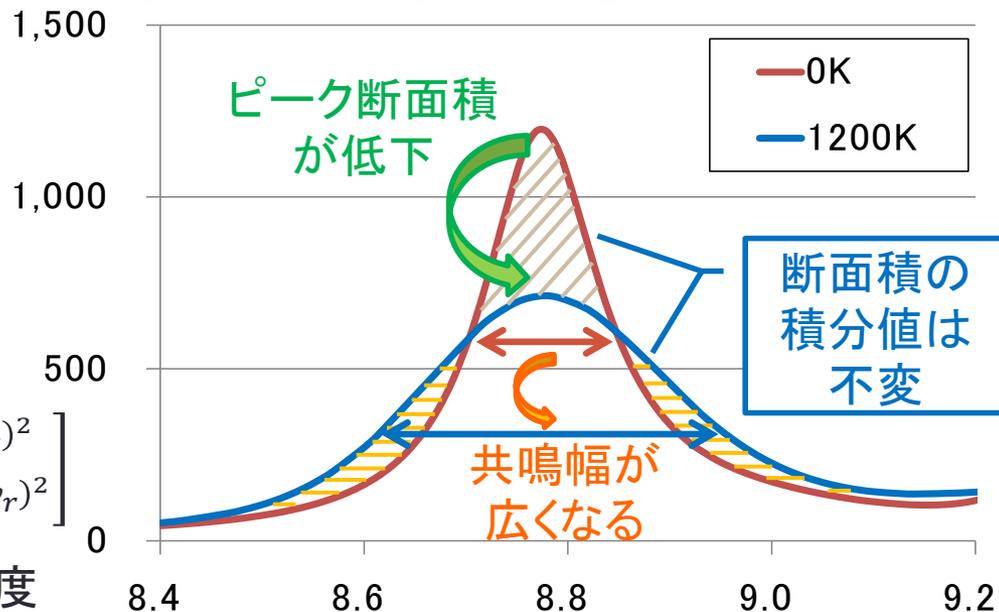


## 【ドップラー拡がりの計算式】

$$\sigma(v, T) = \frac{1}{v^2} \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \int_0^\infty dv_r v_r^2 \sigma(v_r) \left[ \frac{e^{-\beta(v-v_r)^2}}{-e^{-\beta(v+v_r)^2}} \right]$$

$T$ : 温度、 $v$ : 中性子の速度、 $v_r$ : 相対速度

## 【ドップラー効果の例】



# 線形化によるドップラー拡がりの処理

- 断面積を線形化しているとドップラー拡がりの計算式が簡単な形に展開可能
  - 誤差関数が計算できれば近似なく $\sigma(v, T)$ が計算可能
  - 誤差関数の計算は多くのプログラミング言語において標準ライブラリで実装済み
- 核データ処理では、ドップラー拡がりの処理の前に断面積を線形化しておく必要がある

【ドップラー拡がりの計算式】

$$\sigma(v, T) = \frac{1}{v^2} \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} \int_0^{\infty} dv_r v_r^2 \sigma(v_r) \begin{bmatrix} e^{-\beta(v-v_r)^2} \\ -e^{-\beta(v+v_r)^2} \end{bmatrix}$$

$$\sigma(v_r) = \frac{E - E_k}{E_{k+1} - E_k} \sigma_{k+1} + \frac{E_{k+1} - E}{E_{k+1} - E_k} \sigma_k$$

$$E_r = \frac{1}{2} m v_r^2$$

【誤差関数 erf(a)の計算式】

$$\text{erf}(a) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^a e^{-z^2} dz$$

# ガス生成断面積の作成

- 原子核と中性子の反応によっては、ガスが発生する
  - p(proton:  $^1\text{H}$ )、D(deuteron:  $^2\text{H}$ )、T(triton:  $^3\text{H}$ )、 $^3\text{He}$ 、 $\alpha(^4\text{He})$
  - これらのガスの生成量を評価するため、ガスの発生する反応をまとめ、ガス生成断面積を計算する
    - $(z, Xp)$ 、 $(z, Xd)$ 、 $(z, Xt)$ 、 $(z, X^3\text{He})$ 、 $(z, X\alpha)$ の計算
    - MT=203~207に出力
- 反応で生じる核種だけでなく、生成される核種も考慮
  - 例えば $^{12}\text{C}(n, n2\alpha)^4\text{He}$ では $^4\text{He}$ が3個生成されるとカウント
- 中性子輸送計算では利用されないので、場合によってはスキップされることも

# 非分離共鳴領域の自己遮蔽の取り扱い

- 非分離共鳴領域での共鳴パラメータ
  - 各エネルギー領域においてBreit-Wignerの一準位公式の平均的なパラメータ(共鳴幅など)が与えられている
- 核データ上は個々の共鳴構造を分離できないが、共鳴構造を無視して無限希釈断面積と見なすと炉心解析の解析精度が悪化
  - 自己遮蔽の影響を適切に考慮できないため
- 非分離共鳴領域の自己遮蔽をどう考慮するか？
  - 以前はNJOYのUNRESRのように、非分離共鳴領域の共鳴構造を決定論的に評価し、自己遮蔽因子を計算
  - 近年はNJOYのPURRのように、非分離共鳴領域の共鳴構造を乱数を用いて模擬し、自己遮蔽因子を計算

# 確率テーブルを用いた非分離共鳴領域の自己遮蔽の考慮

- 非分離共鳴領域の自己遮蔽断面積はボンダレンコ断面積として評価される
  - ボンダレンコ断面積 $\sigma_x(E)$ は確率テーブル $P_i(E)$ から評価

$$\sigma_x(E) = \frac{\sum_{i=1}^{bin} \frac{P_i(E)\sigma_{x,i}(E)}{\sigma_0 + \sigma_{t,i}(E)}}{\sum_{i=1}^{bin} \frac{P_i(E)}{\sigma_0 + \sigma_{t,i}(E)}} \quad \begin{array}{l} x: \text{反応}(t, sc, f, \gamma), \\ \sigma_0: \text{背景断面積} \end{array}$$

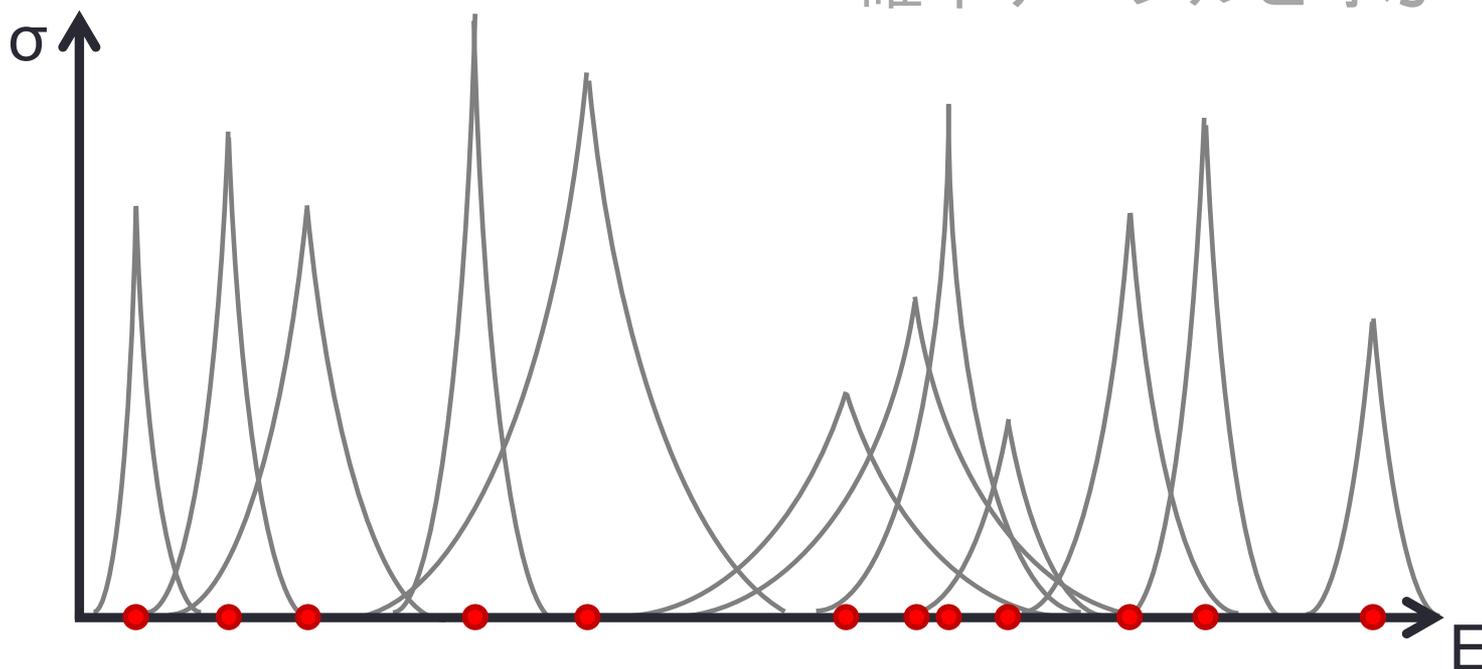
- モンテカルロ計算コードでは確率テーブルを直接利用

## 【確率テーブルの例】

	$\sigma_{x,1}$ (10~16 barn)	$\sigma_{x,2}$ (16~42 barn)	$\sigma_{x,3}$ (42~176 barn)
E=1.2~1.5keV	$P_1 = 0.56$	$P_2 = 0.36$	$P_3 = 0.08$

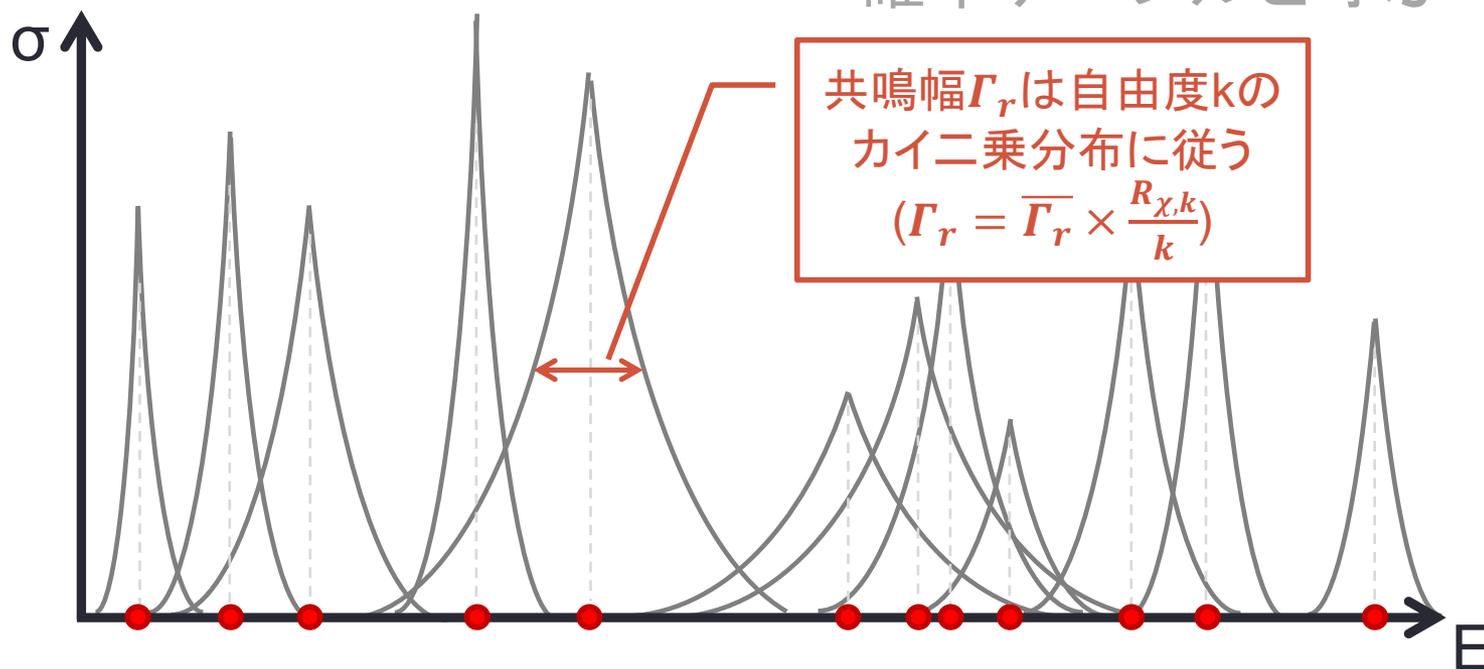
# 乱数を用いた確率テーブルの計算手順 (1/5)

1. 乱数を用いて共鳴ピークのエネルギー点を選定
2. 乱数を用いて共鳴幅を計算
3. 設定された断面積の範囲となる確率(確率ビン)を計算  
(通常は初回の断面積分布から自動的に設定)
4. この操作を繰り返し、設定された断面積の範囲となる確率を計算  
(繰り返す回数をラダー数と呼ぶ)
5. 断面積とその確率の表を確率テーブルと呼ぶ



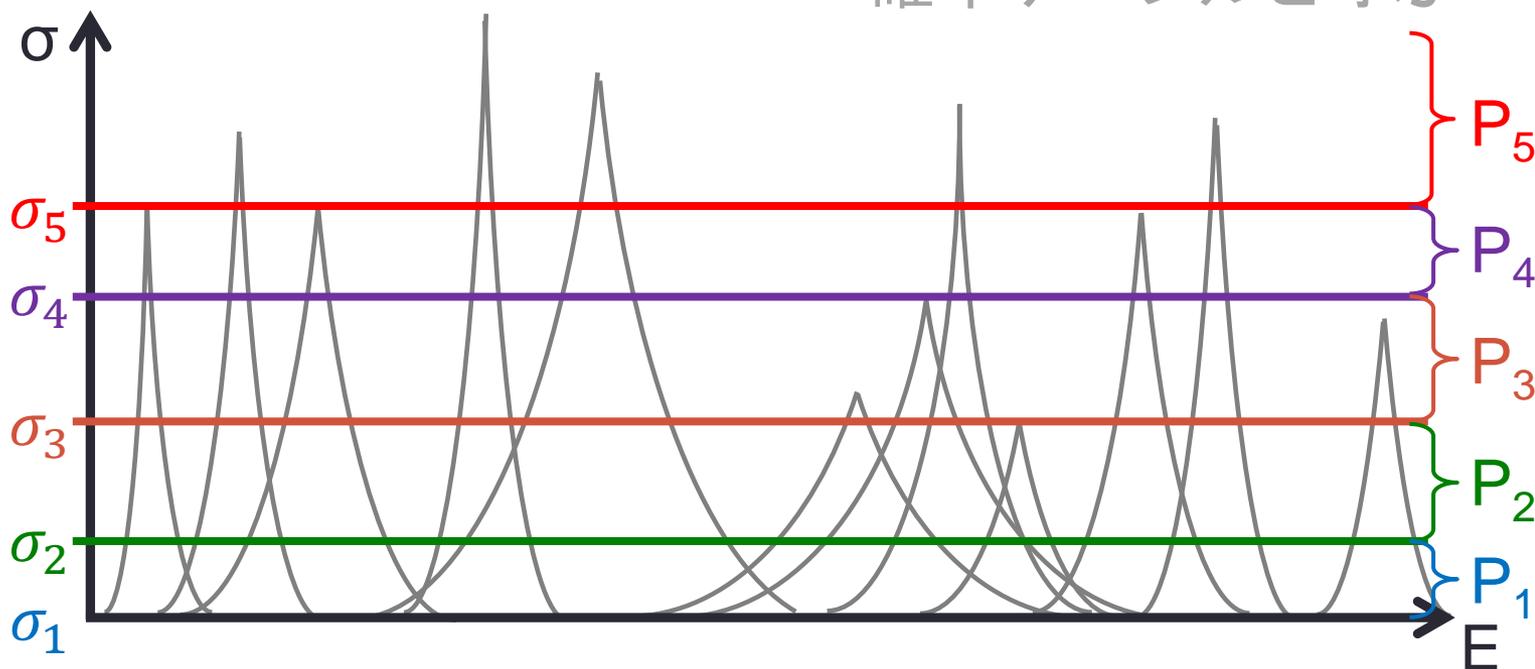
# 乱数を用いた確率テーブルの計算手順 (2/5)

1. 乱数を用いて共鳴ピークのエネルギー点を選定
2. **乱数を用いて共鳴幅を計算**
3. 設定された断面積の範囲となる確率(確率ビン)を計算  
(通常は初回の断面積分布から自動的に設定)
4. この操作を繰り返し、設定された断面積の範囲となる確率を計算  
(繰り返す回数をラダー数と呼ぶ)
5. 断面積とその確率の表を確率テーブルと呼ぶ



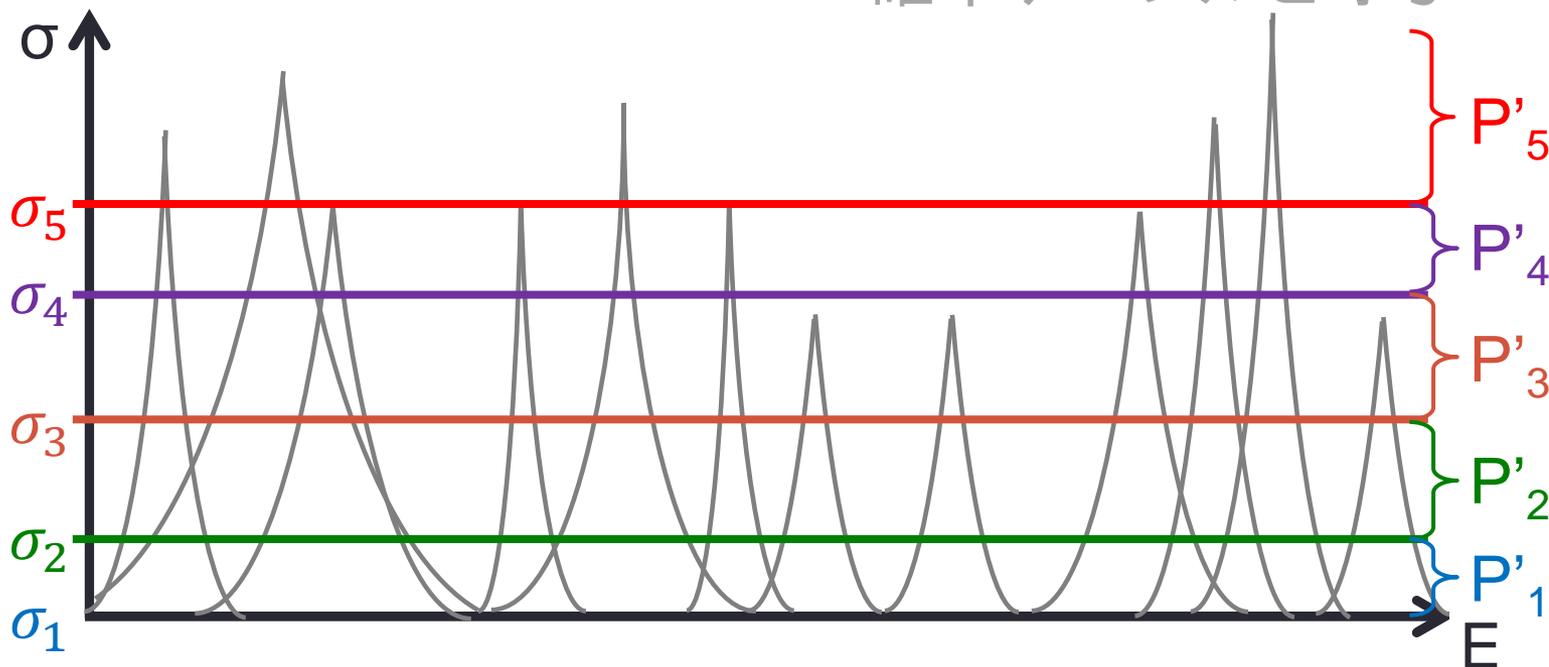
# 乱数を用いた確率テーブルの計算手順 (3/5)

1. 乱数を用いて共鳴ピークのエネルギー点を選定
2. 乱数を用いて共鳴幅を計算
3. **設定された断面積の範囲となる確率(確率ビン)を計算  
(通常は初回の断面積分布から自動的に設定)**
4. この操作を繰り返し、設定された断面積の範囲となる確率を計算  
(繰り返す回数をラダー数と呼ぶ)
5. 断面積とその確率の表を確率テーブルと呼ぶ



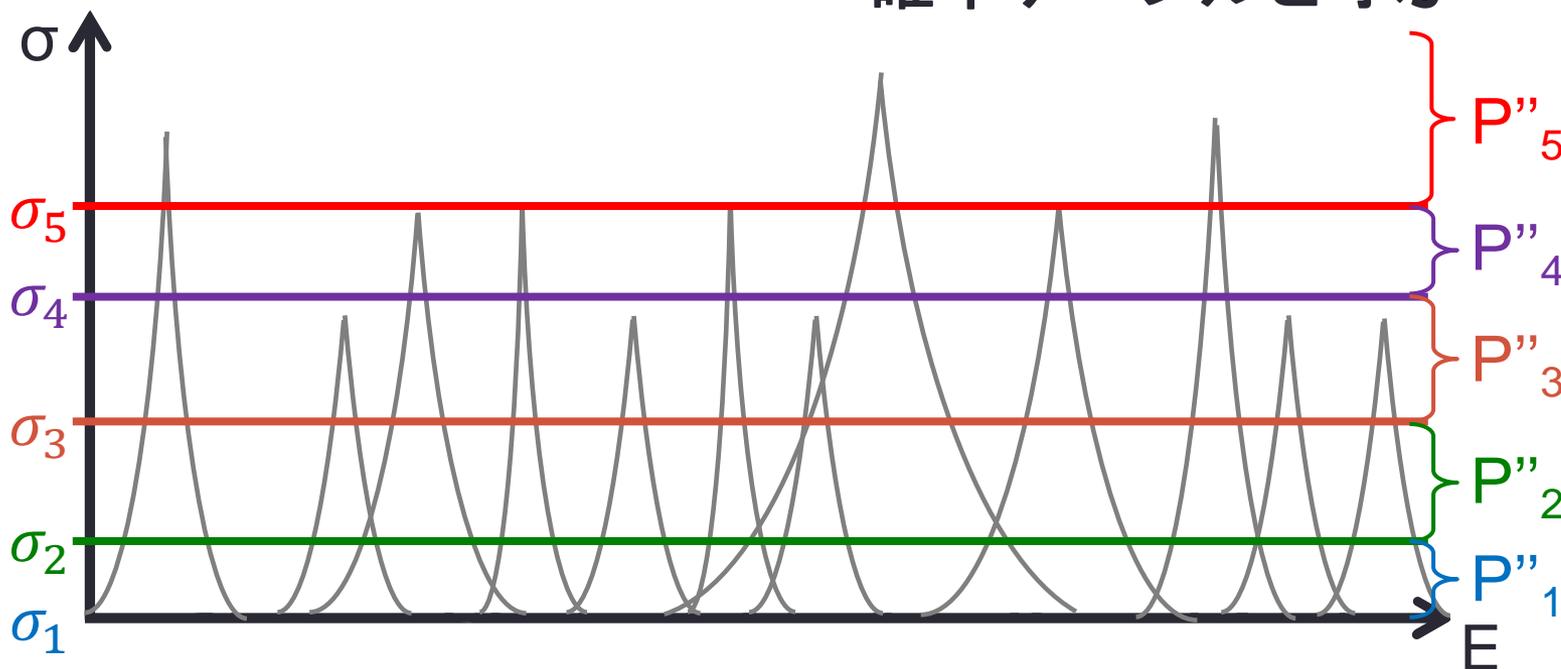
# 乱数を用いた確率テーブルの計算手順 (4/5)

1. 乱数を用いて共鳴ピークのエネルギー点を選定
2. 乱数を用いて共鳴幅を計算
3. 設定された断面積の範囲となる確率(確率ビン)を計算  
(通常は初回の断面積分布から自動的に設定)
4. この操作を繰り返し、設定された断面積の範囲となる確率を計算  
(繰り返す回数をラダー数と呼ぶ)
5. 断面積とその確率の表を確率テーブルと呼ぶ



# 乱数を用いた確率テーブルの計算手順 (5/5)

1. 乱数を用いて共鳴ピークのエネルギー点を選定
2. 乱数を用いて共鳴幅を計算
3. 設定された断面積の範囲となる確率(確率ビン)を計算  
(通常は初回の断面積分布から自動的に設定)
4. この操作を繰り返し、設定された断面積の範囲となる確率を計算  
(繰り返す回数をラダー数と呼ぶ)
5. 断面積とその確率の表を確率テーブルと呼ぶ



# 【参考】確率テーブル作成時の温度T [K]の 断面積の評価方法

- 核データの断面積と共鳴パラメータは0 Kのデータ
  - 基本的にT [K]の断面積を評価するためには、線形化+ドップラー拡がりの処理が必要
- Breit-Wignerの一準位公式では、T [K]の断面積を直接評価可能

放射捕獲断面積

$$\sigma_c(E, T) \cong \frac{\sigma_1 \Gamma_{\gamma r}}{\Gamma_r} \psi(\zeta, x)$$

弾性散乱断面積

$$\sigma_{sc}(E, T) \cong \frac{\sigma_1 \Gamma_{nr}(E_1)}{\Gamma_r} \psi(\zeta, x) + 2\sigma_1 k_1 a_c \chi(\zeta, x) + \sigma_p$$

$$\psi(\zeta, x) = \frac{\zeta}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{1+y^2} e^{-\frac{\zeta^2}{4}(x-y)^2} dy$$

$$\chi(\zeta, x) = \frac{\zeta}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{y}{1+y^2} e^{-\frac{\zeta^2}{4}(x-y)^2} dy$$

$\psi(\zeta, x)$ と $\chi(\zeta, x)$ が解析的に解けないので、近似式の選択が重要

# 多群断面積ライブラリの作成

- 今までのデータは全て連続エネルギーとして取り扱ってきた
- 多群計算コード用の多群断面積ライブラリを作成するためには多群化が必要
  - 主に断面積 (MF=3)、放出粒子の角度分布(MF=4、6)、放出粒子のエネルギー分布(MF=5、6)などを多群化
  - 放出粒子の角度分布、エネルギー分布については断面積と同様に線形化した後に多群化

# 多群断面積の作成

- 連続エネルギーの断面積データをユーザーが設定した中性子束重みで縮約

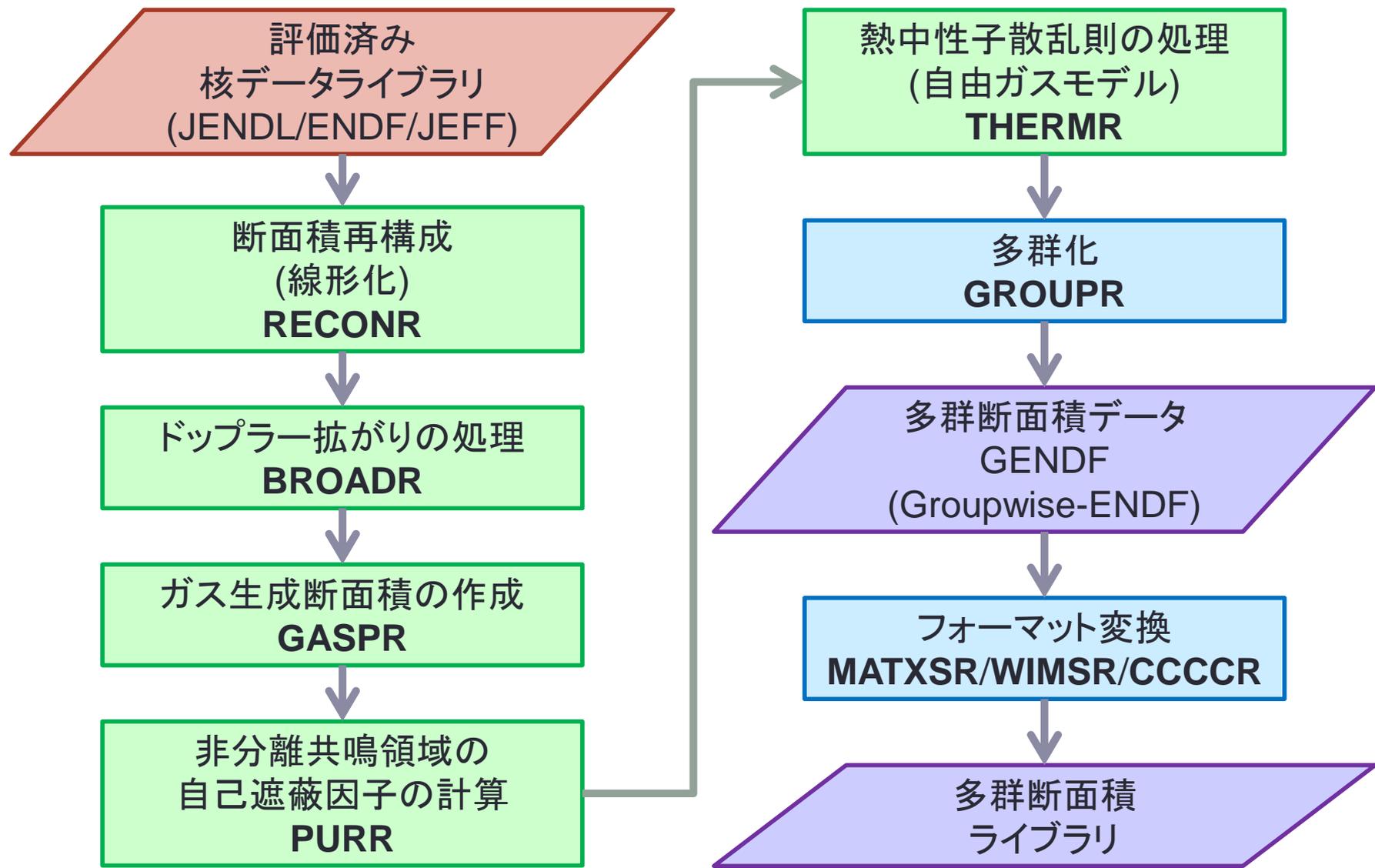
$$\sigma_{l,g}^i = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma^i(E) \phi_l(E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi_l(E) dE}, \quad \sigma_{l,g \rightarrow g'}^i = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma^i(E) \phi_l(E) dE \times \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \int_0^\pi f(E \rightarrow E', \mu) P_l(\mu) d\mu dE'}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi_l(E) dE}$$

- NJOYでは、中性子重みの次の中性子束 $\phi_l(E)$ は自己遮蔽効果を考慮すると核種 $i$ の全断面積 $\sigma_t$ と背景断面積 $\sigma_0$ を含んだ形になる

$$\phi_l^i(E) = \frac{C(E)}{[\sigma_t^i(E) + \sigma_0]^{l+1}}$$

- $C(E)$ はユーザー指定、 $1/E$ 、マクスウェル分布+ $1/E$ +核分裂スペクトルなど、ユーザーの入力によって異なる

# 【参考】NJOYを用いた多群ライブラリの作成



# 熱中性子散乱則(TSL)の考慮

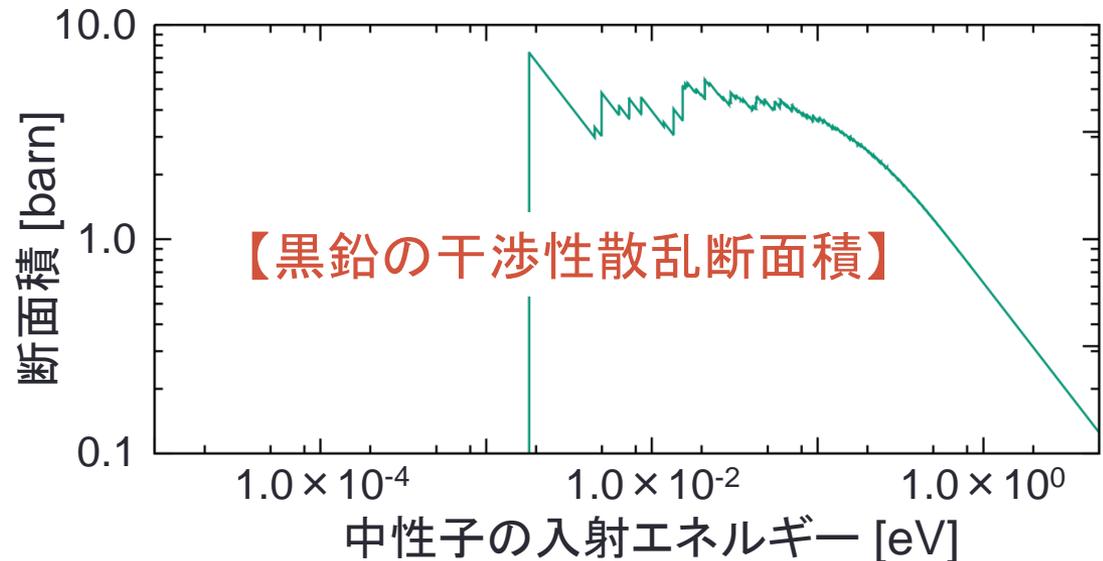
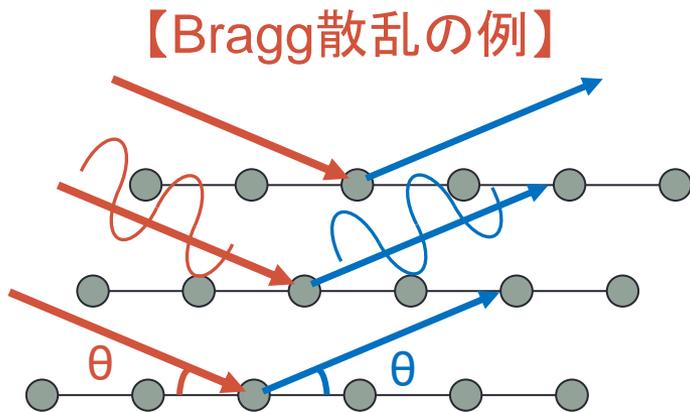
- 軽水炉のように中性子スペクトルの軟らかい炉心では物質の運動や構造が中性子散乱に影響
  - 軽水やポリエチレン、黒鉛、Be、ZrHなど
- これらの物質については核種の断面積とは別に、物質としての散乱断面積を考慮することが重要
  - 各物質の散乱断面積は**熱中性子散乱則 (Thermal Scattering Law : TSL)** と呼ばれる物性値として核データに格納されている
  - 核データ上では $\alpha$ と $\beta$ のテーブルとして与えられているので、**一般的に $S(\alpha, \beta)$ と呼ばれている**
    - $\alpha$ : 運動量移行に関する係数  $\alpha = (E' + E - 2\mu\sqrt{EE'}) / A_0 k_B T$
    - $\beta$ : エネルギー移行に関する係数  $\beta = (E' - E) / k_B T$

# 熱中性子領域の物質による散乱

- 低エネルギー領域では以下の散乱反応を考慮する必要がある
  - 核データ上ではMF=7に収録
- 干渉性弾性散乱 (Coherent elastic scattering)
  - 金属のように配列的に並んでいることによる散乱(回折)
- 非干渉性弾性散乱 (Incoherent elastic scattering)
  - ポリエチレンや $ZrH_x$ のように部分的に規則正しく並んでいる場合の散乱の変化
- 非干渉性非弾性散乱 (Incoherent inelastic scattering)
  - 分子など、自由原子と動きが異なることによる散乱の変化

# 干渉性弾性散乱

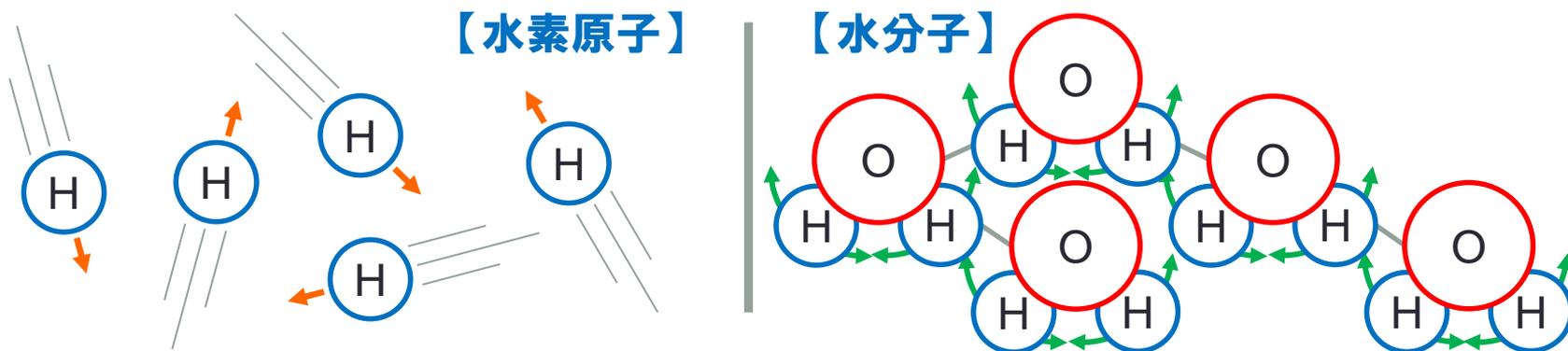
- 金属のように配列的に並んでいることによる散乱
  - 回折現象とも呼ばれる
  - Bragg edgeと呼ばれる特徴的なパターンが見られる
- 核データ上ではブラッグエッジのピークのエネルギーと物理データが記載されている
  - 核データ処理ではそれらのデータから各エネルギー一点での断面積を計算



# 非干渉性非弾性散乱断面積

- $H_2O$ 中の水素は酸素と結合し、かつそれぞれが水素結合で緩く結びついている
  - 水素原子のように自由に動き回ることが出来ない
  - 核データで取り扱われている核種は自由に動き回ることができる自由原子(free gas)とみなされている
  - 非干渉性非弾性散乱断面積で自由原子と分子との運動の違いを考慮

【水素原子と水分子の違い】



# 核データ上での非干渉性非弾性散乱断面積の取り扱い

- 非干渉性非弾性散乱断面積は熱中性子散乱則 $S(\alpha, \beta)$ を用いて以下のように記述される

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}(E \rightarrow E', \mu, T) = \sum_n \frac{M_n \sigma_{bn}}{4\pi k_B T} \sqrt{\frac{E'}{E}} e^{-\frac{\beta}{2} S_n(\alpha, \beta, T)}$$

$\mu$ : 方向余弦、 $M_n$ : 物質中の原子数

- 核データ上では $S_n(\alpha, \beta, T)$ が与えられており、 $S_n(\alpha, \beta, T)$ を用いて上式を計算
- 核データ上は温度内挿により任意温度の $S_n(\alpha, \beta, T)$ を計算できるが、実際には核データに収録されている温度以外では適切な断面積が計算できないことに注意！！
  - $S_n(\alpha, \beta, T)$ の適切な内挿方法は熱中性子散乱則における重要な研究テーマの一つ

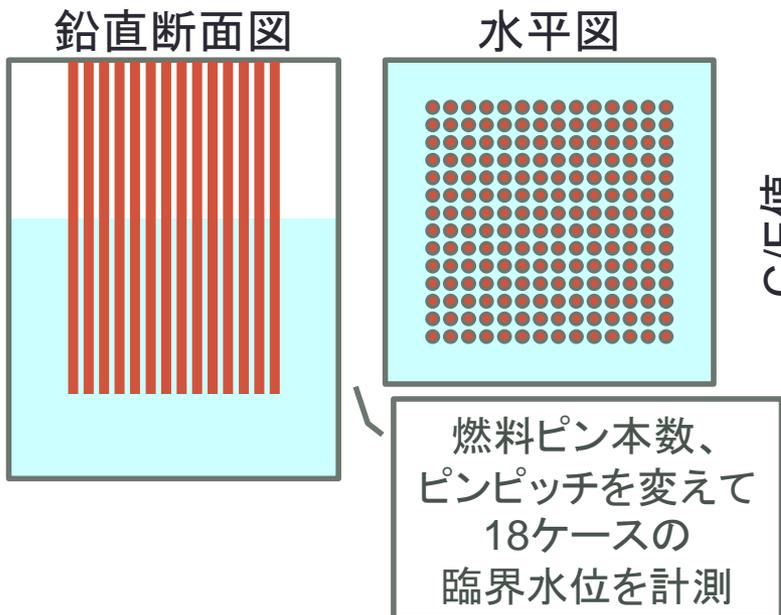
## 【参考】自由ガスの熱中性子散乱則

- 上方散乱などを考慮するには、自由ガス(free gas)のTSLの処理が必要
  - 自由ガスでは、 $S(\alpha, \beta)$ は次式で計算
    - $S(\alpha, \beta) = \frac{1}{\sqrt{4\pi\alpha}} \exp\left\{-\frac{\alpha^2 + \beta^2}{4\alpha}\right\}$
    - 核データは0Kのデータのため、上方散乱などは起きない
- 0Kの核データでは考慮していない上方散乱などを考慮するには、自由ガスのTSLを用いて熱中性子散乱を計算する必要がある
  - 連続エネルギーモンテカルロコードではコード内で計算することが多い
  - 多群の輸送計算コードでは核データ処理コードで計算する必要がある

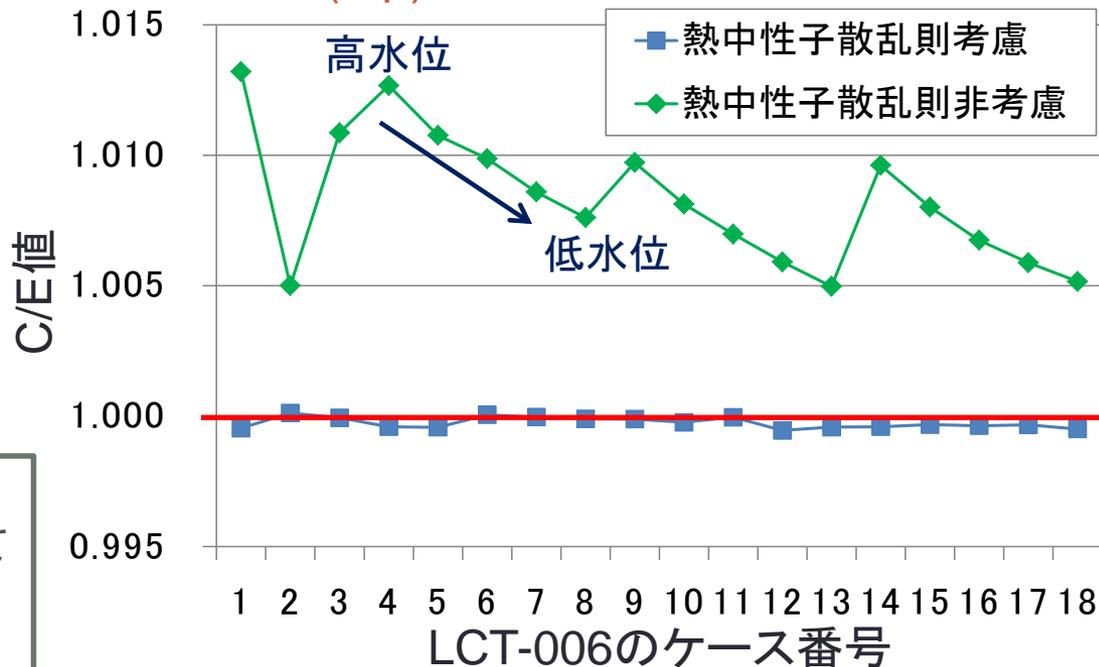
# 熱中性子散乱則が炉心解析に与える影響

- 熱中性子散乱則の有無が実効増倍率(C/E値)に与える影響をMVPを用いて評価
  - ICSBEPのLCT-006(TCA)の各ケースで評価
  - 熱中性子散乱則の有無が実効増倍率に与える影響は1.3~0.5% $\Delta k$ 程度
- 熱中性子散乱則を考慮しないと適切な解析結果は得られない
  - 炉心解析では熱中性子散乱則の断面積ライブラリが用意されているかどうかを常に確認することが重要

【LCT-006 (TCA)の概要図】

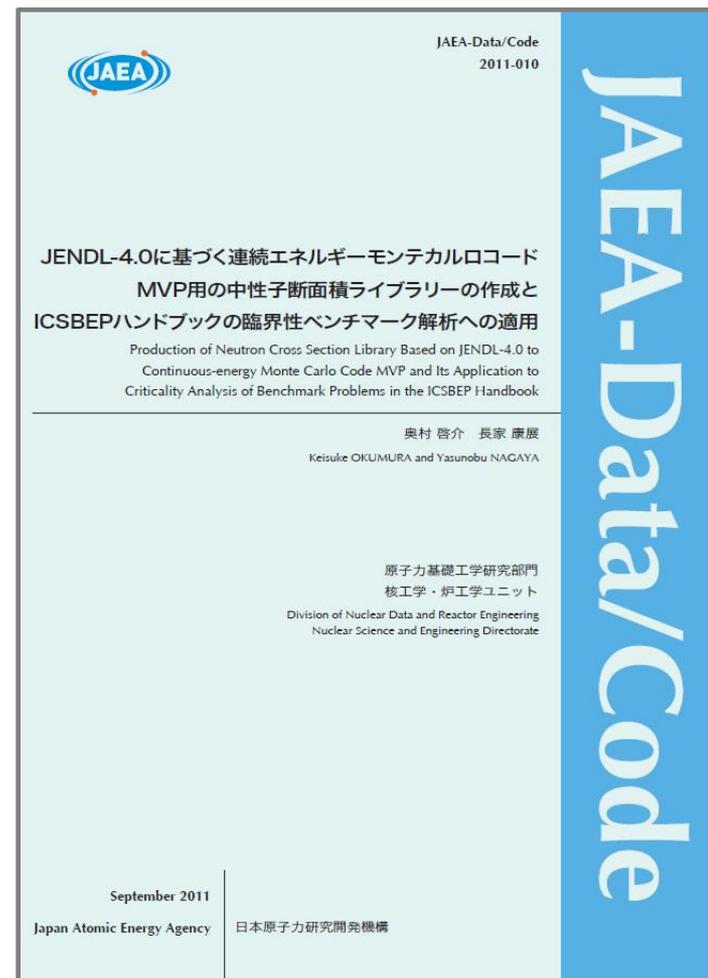


【 $S(\alpha, \beta)$ の有無がC/E値に与える影響】



# 【参考】MVPで熱中性子散乱則が用意されている物質について

- MVPのライブラリでもいくつかの物質で熱中性子散乱則の断面積ライブラリが用意
  - H<sub>2</sub>O、CH<sub>2</sub>、C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>、黒鉛、Be、ZrHなど
  - 核種ID(**zzmmmcxxx**)の**C**の部分が異なる
    - H<sub>2</sub>O: **H0001HJ40**、黒鉛: **C0000CJ40**
- 断面積ライブラリの有無や詳細についてはライブラリ作成時のJAEA報告書やneutron.indexを参照



# 公開済みの主な核データ処理コード

- FRENDY (JAEA): [https://rpg.jaea.go.jp/main/ja/program\\_frendy/](https://rpg.jaea.go.jp/main/ja/program_frendy/)
  - C++ベースの国産の核データ処理コード
  - ACEファイル作成機能を公開中
  - 現在、多群ライブラリ作成機能を開発中
- NJOY2016 (LANL): <https://github.com/njoy>
  - 核データ処理コードのデファクトスタンダードとして世界中で利用
  - M. Farlane氏、A. C. Kahler氏が引退し、現在世代交代中
  - Fortran90ベースのNJOY2016とC++ベースのNJOY21(開発中)がある
- PREPRO (IAEA): <https://www-nds.iaea.org/public/endl/prepro/>
  - D. E. Cullen氏が開発し、IAEAで公開中
  - NJOYと同様に世界中で利用されているが、後継者がいない点が課題
- FUDGE (LLNL): <https://github.com/LLNL/fudge>
  - PythonベースでLLNLコード用の断面積ライブラリ作成が主目的
  - GNDSとENDF-6の変換ツールとしても利用
- AMPX-6 (ORNL)
  - SCALE用の核データ処理コード
  - SCALE6.2よりユーザーが利用可能に
- GRUCON (ロシア): <https://www-nds.iaea.org/grucon/>
  - ロシアのNRCが開発し、IAEAで公開中

# 核データ 処理コード の比較

V&V対応

処理コードユーザーや核  
データ評価者との連携

最新のプログラミング  
技法を適用

核データフォーマットに  
依存しない

初心者でも利用  
しやすい入力

NJOYとの入力互換性

継続的な保守管理

開発人員

MCNP用Lib作成

MVP用Lib作成

多群用Lib作成

共分散データ処理

従来の核データ  
処理コード

NJOY2016

△

○

×

×

×

○

△

1.5

○

×

○

○

PREPRO

△

○

×

×

×

×

△

1

△

×

○

○

新しい核データ  
処理コード

NJOY21

○

○

○

○

×

○

○

2.5

△

×

×

×

FRENDY

○

○

○

○

○

○

○

1.5

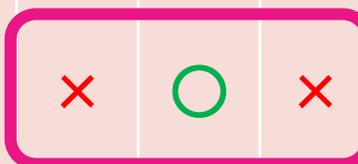
○

×

○

×

今後の課題



# 核データ処理 (NJOY) の注意点

- ここからは実際に核データ処理を行う際の注意点について説明
  - 国内では主にNJOYが使われているため、以降ではNJOYを利用する際の注意点について説明
- NJOY
  - MINX (**M**ultigroup **I**nterpretation of **N**uclear **X**-sections from ENDF/B) の後継コードとして1973年に開発開始
    - **M**→**N**、**I**→**J**、**N**→**O**、**X**→**Y**と一文字ずつずらしたただけで略称ではない
  - 近年はNJOY99、NJOY2012、NJOY2016が利用されている
  - 現在、次世代核データ処理システムNJOY21を開発中

# NJOYの各バージョンの違い

- NJOY99
  - 主開発者: R. E. MacFarlane
  - 最終バージョン: NJOY99.396 (2013.08)
  - FORTRAN77で記述された最後のNJOY
- NJOY2012
  - 主開発者: A. C. (Skip) Kahler
  - 最終バージョン: NJOY2012.82 (2017.01)
  - NJOY99をFortran90で書き直したもの
  - 共鳴公式としてR-matrix Limitedが取り扱い可能に
  - 熱中性子散乱則を取り扱うTHERMRの入力が一部変更
- NJOY2016
  - メンテナンス者: Wim Haeck, Jeremy Conlin (NJOY21の主開発者)
  - NJOY2012の改良版
  - Skip Kahler氏の引退に伴い、名称変更

# NJOYのコンパイル時の注意

- NJOYを入手したらLANLで公開されているパッチを当てる必要がある
  - NJOY2016以外は公開当時の古いバージョンのため
  - IAEAなどで公開されている特殊パッチを当てないと適切に処理できないことも
    - JENDLの処理でもデフォルトバージョンでは処理できないことがあり、JAEAでパッチを配布していたことも
- NJOYの処理ではバージョンだけでなく、どのパッチを当てたかが重要に
  - 核データが適切に処理できていないのが未知の問題なのか、パッチの当て忘れなのかを判別しにくいいため

# NJOYでの核データ処理の問題点 (1/2)

- 入力が分かりにくい
  - NJOYの処理が理解できていないとマニュアルの説明が理解できず、適切なパラメータが設定できない
  - いくつかのパラメータを設定根拠が怪しいままに使っている場合も
- 入力した通りに動作しない場合がある
  - ドップラー拡がりの処理などで顕著
    - 本来は分離共鳴と非分離共鳴の境界までドップラー拡がりの処理をしなければいけないが、しきい値のある反応が複数ある場合、しきい値までしか処理しなくなる
    - この問題はNJOY2016の最新版で解決したものの、その修正のアナウンスは修正パッチのreadmeファイルにひっそりと書かれているだけで、NJOYに精通した人がしっかり読まないで理解できない
  - エラーメッセージを出力してくれるが、素人がチェックするのは困難
    - エラーメッセージの内、どれが注意すべきもので、どれが無視していいものなのかが分からない
  - 輸送計算の結果と違って単なる断面積などのデータの塊であり、その結果が物理的に正しいかどうか判断しにくい

# NJOYでの核データ処理の問題点 (2/2)

- プログラムまで戻って確認することが困難
- 一個の一次元配列A[100,000]で全データをやりとり
  - ソースコードを見ただけではどのデータを扱っているのかが非常に分かりにくい
  - 変数名も短く、どういう変数なのか理解できない
- forループやwhileループのほとんどをGO TO文で表現しているため、処理の流れを追うことが困難
- NJOYのチェック・修正が職人技に
  - 日本でNJOYの中身が分かっている人はほんの数人

# 【参考】NJOYの入力例 (235U)

- NJOYの入力データは数値のみ
  - MAT番号など、現在の核データファイルでは不要な入力データがある
  - コメントを入れないと何のデータか分からない
    - “/”以降がコメント
  - 慣れれば比較的簡単に作ることが出来るが、慣れるまでに時間がかかる

## 【<sup>235</sup>UのNJOY入力例 (多群化の前まで)】

```

reconr                / command
20 21                 / input(tape20), output(tape21)
'pendf tape for JENDL-4 U235' / identifier for PENDF
9228                  / mat
1.00e-03 0.00        / err, temp
0                     /
broadr                / command
20 21 22              / endf, pendf(in), pendf(out)
9228 1                / mat, temp no
1.00e-03 -5.0E+2     / err, thnmax
296.0                 / temp
0                     /
gaspr                 / command
20 22 23              / endf, pendf(in), pendf(out)
purr                  / command
20 23 24              / endf, pendf(in), pendf(out)
9228 1 10 20 100 0   / mat, temp no, sig no, bin no,
                    lad no
296.0                 / temp
1E10 1E4 1E3 300 100 30 10 1 0.1 1.0E-5 / sig0
0                     /
stop                  /
    
```

# 【参考】NJOYの入力例 (水のS( $\alpha$ 、 $\beta$ ))

- S( $\alpha$ 、 $\beta$ )はオプションが多く、通常の核種より分かりにくい
  - NJOYのマニュアルを読んでも理解しにくい
  - THEMURの一部の入力データは核データファイルの中身が読めないと作れない

## 【水のS( $\alpha$ 、 $\beta$ )のNJOY入力例 (多群化の前まで)】

```

reconr                / command
20 21                 / input(tape20), output(tape21)
'pendf tape for JENDL-4.0 H001' / identifier for PENDF
125                   / mat
1.00e-03 0.00        / err, temp
0                     /
broadr                / command
20 21 22              / input(tape20), output(tape21)
125 1                 / mat
1.00e-03              / err
296.0                 / temp
0                     /
thermr                / command
23 22 25              / endf, pendf(in), pendf(out)
1 125 60 1 2 0 0 2 221 / matde, matdp, nbin, ntemp,
                       inela opt, ela opt, iform, principal
                       atom no, mtref
296.0                 / temp
1.0E-3 10.0           / err, max ene
stop                  /
    
```

# 【参考】NJOYのソース例 (1)

- n個の $x_i, y_i$ のデータの内、最初 $(x_1, y_1)$ のデータを削除するプログラム

- 多くのデータを  $a(n)$  でやりとりするため、何のデータを扱っているのか分かりにくい

## 【ACERの一部】

```

nbt1=nint(a(7))
int1=nint(a(8))
nbt2=nint(a(9))
if (nbt2.ne.nbt1+1)&
  call error('chekit','wrong type of nr=2 file 5 mt.',' ')
if (int1.ne.1)&
  call error('chekit','wrong type of nr=2 file 5 mt.',' ')
if (a(nw).ne.zero.or.a(nw-1).ne.a(nw-3).or.a(nw-2).ne.a(nw-4))&
  call error('chekit','wrong type of nr=2 file 5 mt.',' ')
a(6)=a(6)-1
a(5)=1
a(7)=a(6)
nw=nw-4
nwm=nw-1
do i=9,nwm
  a(i)=a(i+2)
enddo
a(nw)=0
  
```

$a(9)$ 、 $a(10)$ をスキップ

## 【参考】

### NJOYのソース例 (2)

- ドップラー拡がりの処理の線形化の一部
  - エネルギー点の間隔などで線形化する場合と線形化しない場合を判別
  - **文番号130**以降で線形化を実施
- 現在のプログラム言語の多くではgoto文は不適切とされている
  - goto文はバグの温床
  - メンテナンス性、可読性向上のためにはwhile文やif文で書き換える必要がある

### 【BROADRの一部】

```

c   ***locate next node for stack
120 et=e(k)**2/alpha
    if (et.ge.thnmax) go to 130
    if (k.ge.nhigh) go to 130
    test=sigfig(et,7,0)
    if (abs(es(2)-test).lt.small*test) go to 126
    if (k.gt.klast+nmax) go to 130
    if (et.gt.step*es(2)) go to 130
    test=sigfig(et,3,0)
    if (abs(et-test).lt.small*test) go to 130
    if (abs(et-therm).lt.small*therm) go to 130
    do 125 i=1,nreac
    dn=s(i,k+1)-s(i,k)
    if (abs(dn).lt.abs(s(i,k))/1000) dn=0
    if (dn.ge.zero) then
        dn=1
    else
        dn=-1
    endif
    if (dn.ne.dl(i)) go to 130
125 continue
126 k=k+1
    go to 120
130 es(1)=sigfig(et,7,0)

```

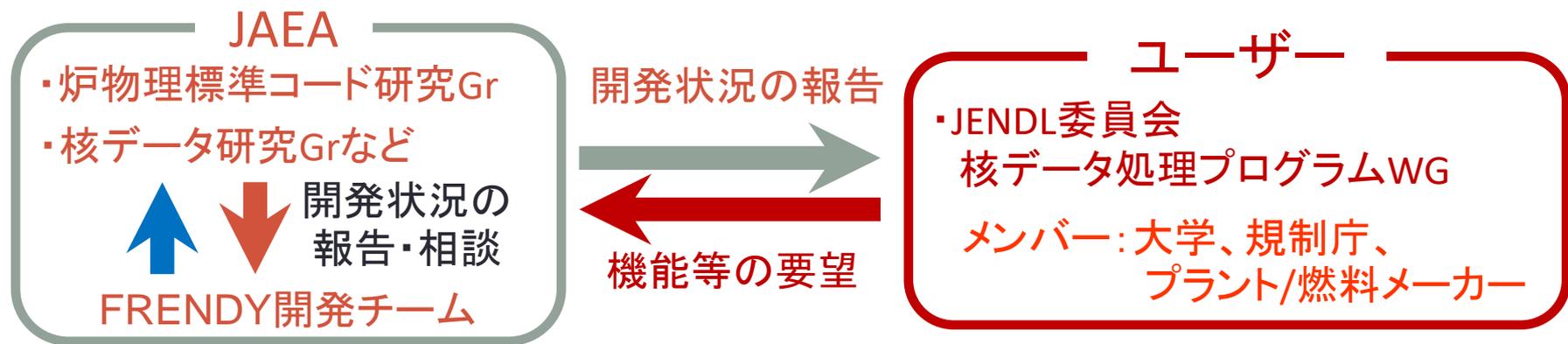
# 輸送計算コードと核データ処理システムの違い

	中性子 輸送計算コード	核データ処理 システム
使用頻度	多い時はほぼ毎日	多くても年に数回
入力	マニュアルや入力例が 充実し、比較的容易	処理方法を熟知していな ければ適切な入力作成は 困難
妥当性 検証	体系は画面で確認可能。 処理結果の妥当性も他の 解析結果から判断可能	比較可能な入力例や計算 結果が皆無。 長年の経験と勘が頼り
サポート	ユーザーが多く、 質問しやすい。 講習会も適宜実施	数名のプロフェッショナル のボランティアに依存

# 国産核データ処理システムFRENDYの開発

- 世界に先駆けて2013年度より次世代核データ処理システムの開発を開始
  - **FR**om **E**valuated **N**uclear **D**ata librar**Y** to any application
  - C++を採用することでコードの拡張性や安全性が向上
    - 他のC++コードとの融合や各機能の再利用が容易に
  - テストケースを用いた品質保証
    - 各クラス、各メンバ関数でテストケースを用いた処理の検証を実施
    - テストケースを用いることでコード修正に伴うバグの発見が容易に
  - ユーザーのニーズを逐次反映
    - JENDL委員会経由で産学官の要望を聞き、FRENDY開発に反映

## 【FRENDY開発の体制】



# 核データ処理システムの国産化の利点

## —JENDLや核計算コードの信頼性・利便性の向上—

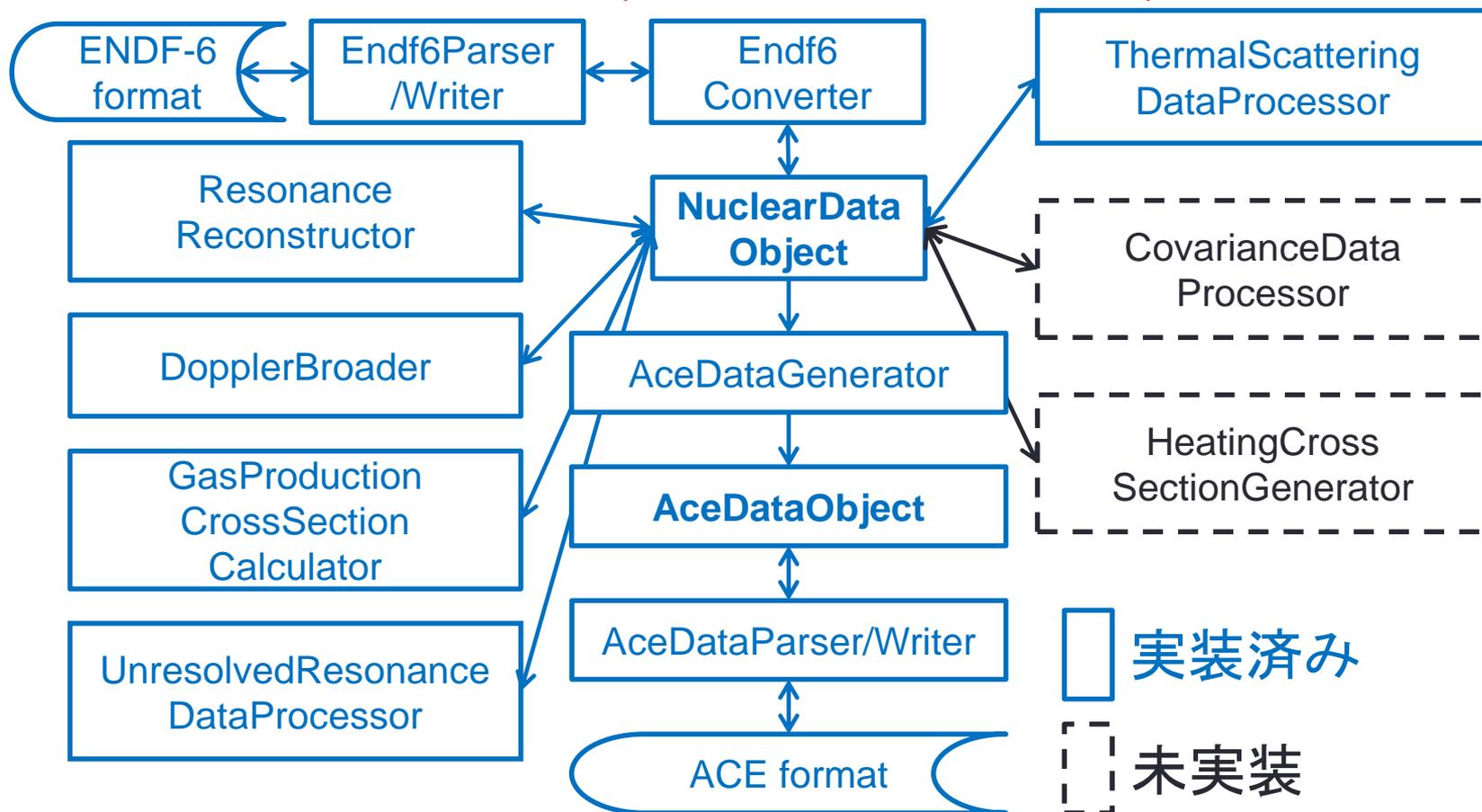
- JENDLの公開と同時に核データ処理が可能に
  - 諸外国の核データ処理システムの改良・修正を待つ必要がない
- 諸外国の輸出規制の影響の低減
- ユーザー自身によるライブラリの作成・検証が可能に
  - 評価済み核データから核計算コードまでの全てを国産で賄うことができるため、核データ処理システムだけでなく、JENDLや核計算コードのユーザー数の増加が期待



上流(核データ)から下流(核計算コード)までの全てを国産で網羅可能に

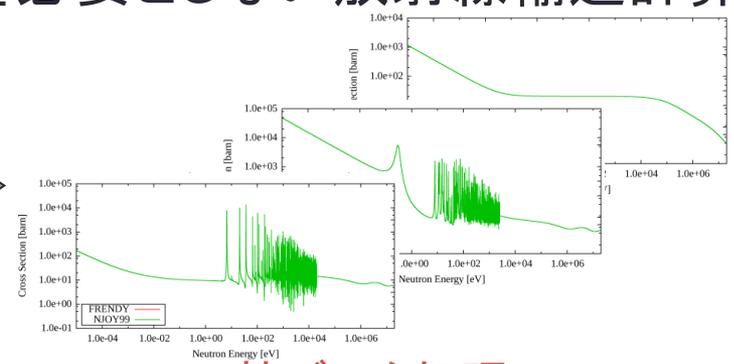
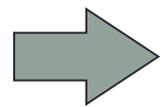
# FRENDYの構造

- 他コードでの利用のため、各機能をモジュール化
  - 各モジュールは数行追加するだけで他のコードで利用可能に
  - ACEファイルの編集機能(AceDataParser/Writer)などに大きな期待

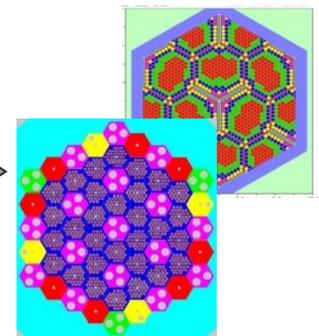
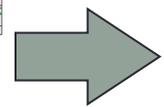


# FRENDYの各機能の利用について

- FRENDYでは他コードへの利用が容易になるように設計
  - 各機能をブラックボックス化
  - Tableデータの内挿や線形化、ルジャンドル展開などの個別機能の利用はもちろん、断面積再構成などの処理機能全般について利用が可能
- 将来的にはFRENDYをモンテカルロ計算コードに組み込むことを検討
  - 核データ処理から放射線輸送計算までを一貫して実施
  - 断面積ライブラリを必要としない放射線輸送計算コードの実現



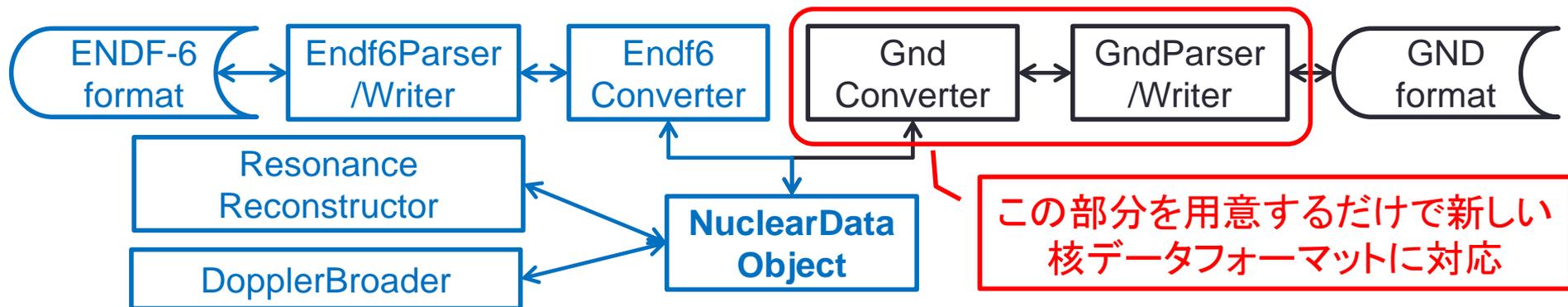
核データ処理



放射線輸送計算

# FRENDYの構造のコンセプト

- NuclearDataObjectを介して各機能とデータをやりとり
  - ENDF-6やGNDと独立したFRENDY独自のデータフォーマット
  - 核データのフォーマットの変更の影響を受けにくい
    - フォーマットの変更による計算コードの修正の手間を最小化
    - Parser/WriterクラスとConverterクラスのための修正で対応可能に
  - 断面積の線形化やドップラー拡がりの考慮など、機能毎に独立して動作可能
    - NuclearDataObjectと必要な計算条件のみで動作
    - 特定の機能のみを別のプログラムに利用(流用)することが可能に



# FRENDYとNJOYの違い

- FRENDYの処理手法は基本的にNJOYと同じ
  - NJOYの処理手法が物理的におかしい場合や核データの指示を無視している場合は手法を改良
    - 詳細はFRENDYマニュアル(JAEA-Data/Code 2018-014)の9.2節をご参照下さい
  - ドップラー拡がりの処理に必要な0eVの断面積の計算
    - NJOYは $1/v$ を仮定しているのに対し、FRENDYは線形内挿
  - 熱中性子散乱則の入射エネルギー点
    - NJOYは117点でのみ $S(\alpha, \beta)$ から計算し、それ以外は5次のラグランジュ内挿で計算しているのに対し、FRENDYは全エネルギー一点で $S(\alpha, \beta)$ から計算
  - 確率テーブル作成時の共鳴構造の計算
    - NJOYでは共鳴幅の設定に用いるカイ二乗分布に従う乱数 $R_{\chi, k}$ を20個に離散化

# FRENDY第1版について

- オープンソースソフトウェアとしてJAEAのHPより公開
  - 2条項BSDライセンス準拠
    - FRENDYを利用していることを記載してもらえれば利用や改変、コードへの取り込みなどに制約はない
  - 改訂版についても随時アップロード
    - [https://rpg.jaea.go.jp/main/ja/program\\_frendy/](https://rpg.jaea.go.jp/main/ja/program_frendy/)
- FRENDY開発のMLも準備
  - FRENDY開発に興味ある方はご連絡下さい
- FRENDYマニュアルもJOPSSから公開
  - JAEA-Data/Code 2018-014
  - Nuclear Data Processing Code FRENDY Version 1
    - <https://jopss.jaea.go.jp/pdfdata/JAEA-Data-Code-2018-014.pdf>



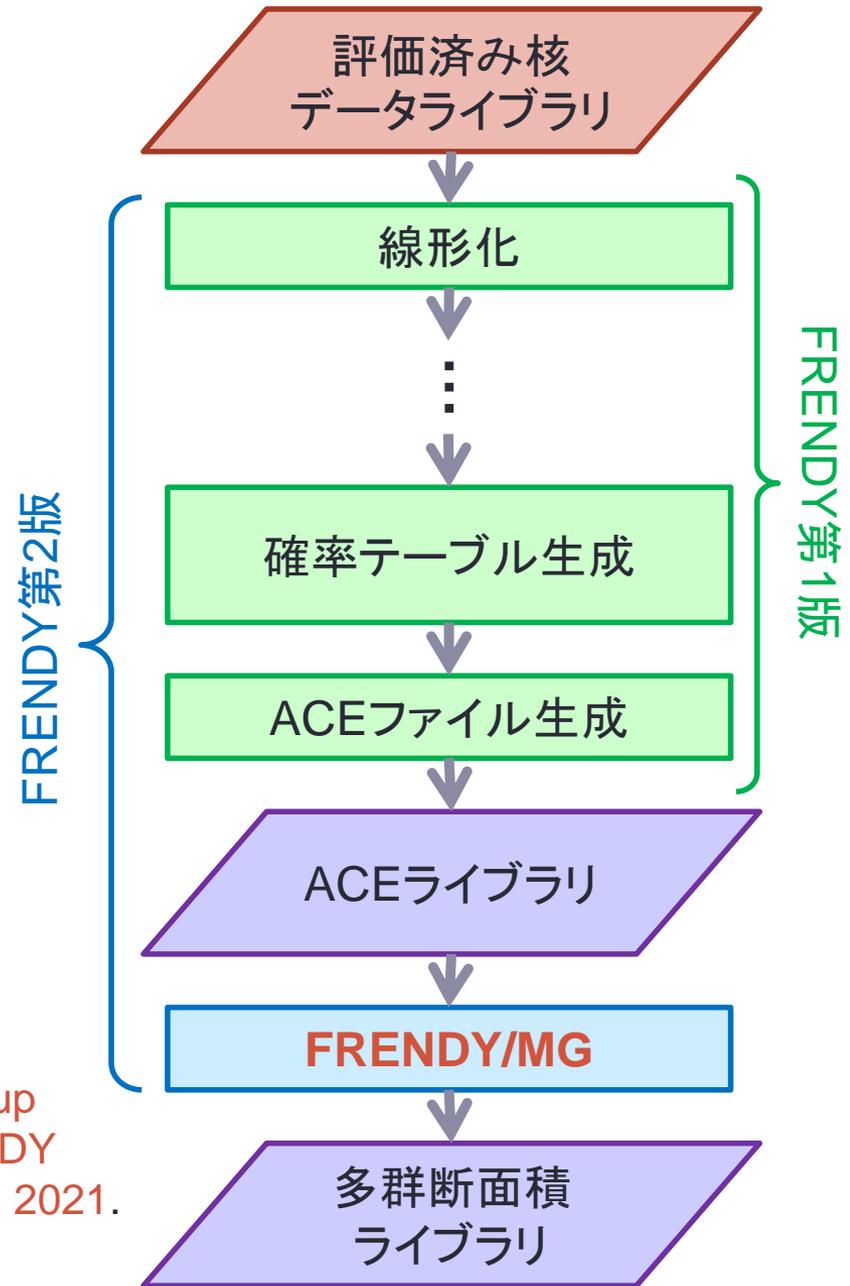
# FRENDY第2版について

- FRENDY第1版開発後に多くの機能を実装
  - 中性子入射の多群断面積生成機能
    - GENDF及びMATXS形式のライブラリを生成
  - ACEファイル摂動機能
    - FRENDY Ver.1.01で実装済み
  - 核データファイルの修正機能
    - 特定のMF/MTの差し替え、削除など
- これらの機能をまとめ、FRENDY第2版として2022年1月に公開
  - [https://rpg.jaea.go.jp/main/ja/program\\_frendy/](https://rpg.jaea.go.jp/main/ja/program_frendy/)

# 多群断面積生成機能

- 多群断面積ライブラリの作成にはFRENDY/MG<sup>\*)</sup>を利用
  - FRENDY/MGはACEファイルから中性子入射の多群断面積を生成
    - 既存のACEファイルからの多群断面積の生成も可能
- NJOY入力を用いた多群断面積ライブラリの作成も可能
  - GROUPRとMATXSРに対応

<sup>\*)</sup> A. Yamamoto, K. Tada, G. Chiba, T. Endo, "Multi-group neutron cross section generation capability for FRENDY nuclear data processing code," J. Nucl. Sci. Technol., 2021. <https://doi.org/10.1080/00223131.2021.1921631>



# FRENDY/MGの主な特徴

- 中性子入射の多群断面積ライブラリ生成に対応
  - fastとthermalのACE形式に対応
- 出力できる多群断面積形式
  - GENDF、MATXS
- 角度・二次エネルギー分布の取り扱い
  - ACEファイルのLAW=3, 4, 7, 9, 11, 44, 61 66に対応
  - JENDL-5、-4.0、ENDF/B-VII.0、B-VII.1、B-VIII.0、JEFF-3.3、TENDL-2019、-2021の全核種を処理可能

# FRENDY/MGの新機能

- 背景断面積の自動設定機能<sup>\*</sup>)
- 共鳴干渉効果を考慮した複数核種の同時処理機能
  - $\text{UO}_2$ 中のU-235、U-238、O-16など
- 中性子流( $P_1$ 中性子束)重みの全断面積計算機能
- 任意エネルギー一群構造の超詳細群減速計算が可能
- 厳密共鳴散乱(resonance upscattering)の効果を取り扱い可能<sup>\*\*</sup>)
  
- これらの機能はFRENDY独自入力に対応

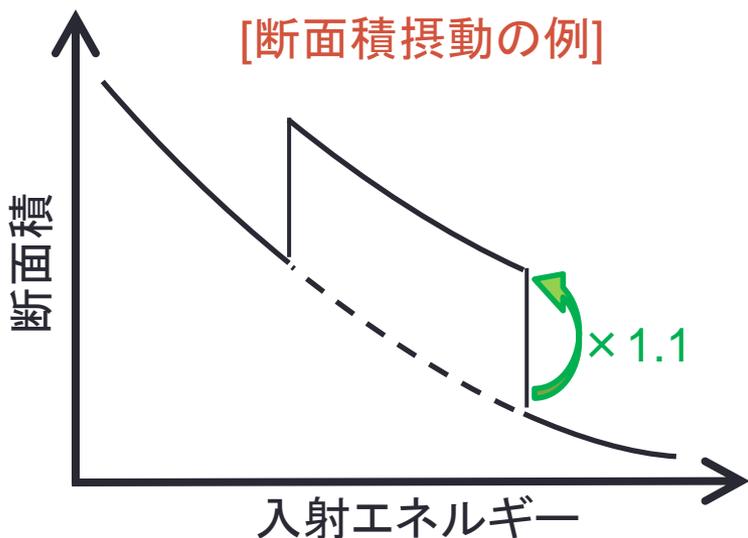
<sup>\*</sup>) A. Yamamoto, T. Endo, K. Tada, “Adaptive setting of background cross sections for generation of effective multi-group cross sections in FRENDY nuclear data processing code,” J. Nucl. Sci. Technol., (2021). <https://doi.org/10.1080/00223131.2021.1944930>

<sup>\*\*</sup>) A. Yamamoto et al., “Implementation of Resonance Up-scattering Treatment in FRENDY Nuclear Data Processing System,” Nucl. Sci. Eng. (2022). <https://www.tandfonline.com/doi/full/10.1080/00295639.2022.2087833>

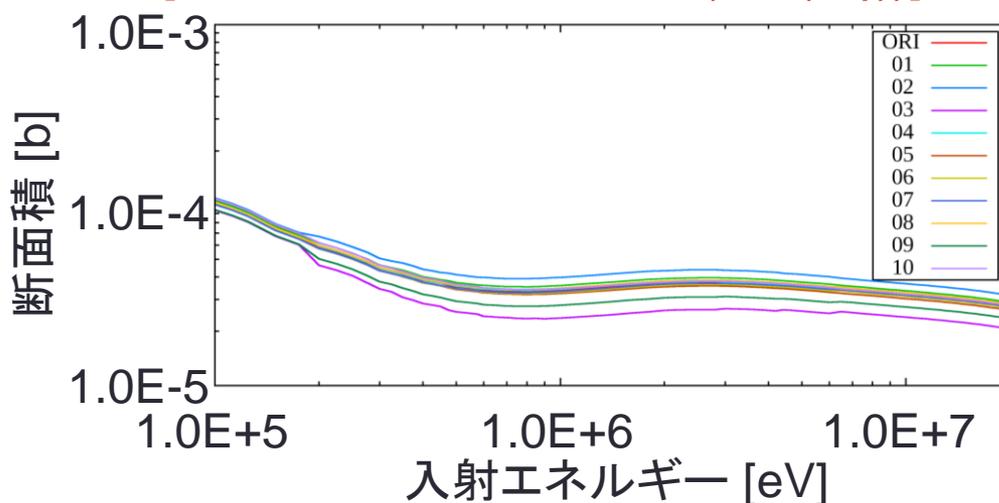
# ACEファイル摂動機能

- ACEファイル中の断面積や核分裂スペクトルを摂動するツールを開発<sup>\*)</sup>.
  - 反応タイプ(MT番号)、摂動するエネルギー範囲、摂動量を指定すれば自動でACEファイルを修正
  - ランダムサンプリングツールを使えば断面積や核分裂率スペクトルをランダムに摂動可能
- 本ツールはFRENDY Ver. 1.01.001から利用可能.

[断面積摂動の例]



[ランダムサンプリングの例( $^1\text{H}$ , (n, $\gamma$ ))]



<sup>\*)</sup> R. Kondo, et al., "Implementation of random sampling for ACE-format cross sections using FRENDY and application to uncertainty reduction," *Proc. M&C2019*, Aug. 25-29 (2019).

# ENDFファイル修正ツールについて

- 特定のMF、MT番号のデータを削除・追加・入替が可能

MF=1
MF=2, MT=151
MF=3, MT=1
MF=3, MT=2
MF=6

※ 追加の場合も元のデータある場合は元のデータ上書きするので、処理内容としては入替と同じ

削除



MF=1
MF=2, MT=151
MF=3, MT=1
MF=6

追加



MF=1
MF=2, MT=151
MF=3, MT=1
MF=3, MT=2
MF=3, MT=102
MF=6

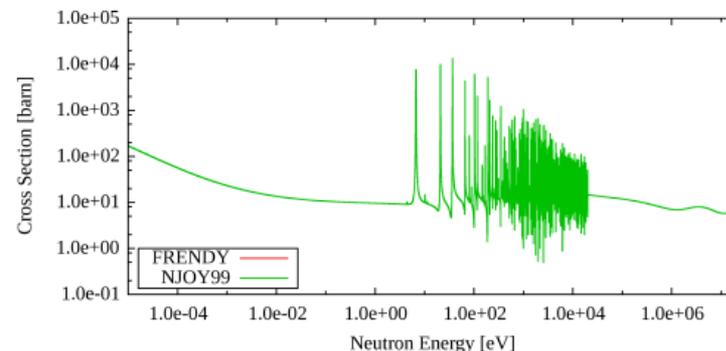
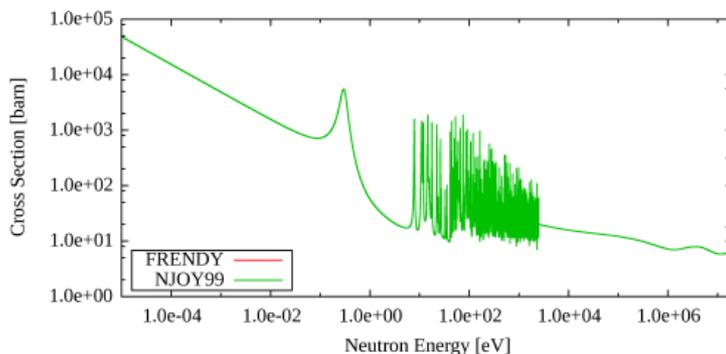
入替



MF=1
MF=2, MT=151
MF=3, MT=1
MF=3, MT=2
MF=6

# 核データの一次元データ出力機能の実装

- 論文作成など必要に応じて核データ (ENDF/ACE/GENDF) の作図機能をチョイプロで作成
  - 一次元データ(X,Y)を出力し、gnuplotで作図
  - 演習ファイルの一部を保存
  - 多群化機能や二重微分断面積の出力など、色々な機能を追加しており、管理が困難に
  - これらの機能を使いたいというニーズも多いはず
- FRENDY本体にこれらの機能を集約することに



# 核データの作図機能について

- ENDF(PENDF)、ACE、GENDFに対応
  - 断面積再構成やDoppler拡がりの処理を行い、核データを調整した上でプロット可能
  - ENDF、ACEについては二つのデータの相対差異のプロットも可能
    - エネルギー点は二つのデータの全エネルギー点に
    - 温度が違っててもドップラー拡がりの処理で指定温度に調整
- ENDF、ACEについても多群の断面積をプロット可能
  - 群構造、中性子束重みについてはユーザー指定(NJOY/GROUPRのign=1~23、iwt=1,2,3,5-12)が可能
  - 1/e+fission+maxwellは非対応
- 出力ファイル中の上部に計算条件等を出力
  - ファイル名、温度点など

# 出力できる一次元データについて

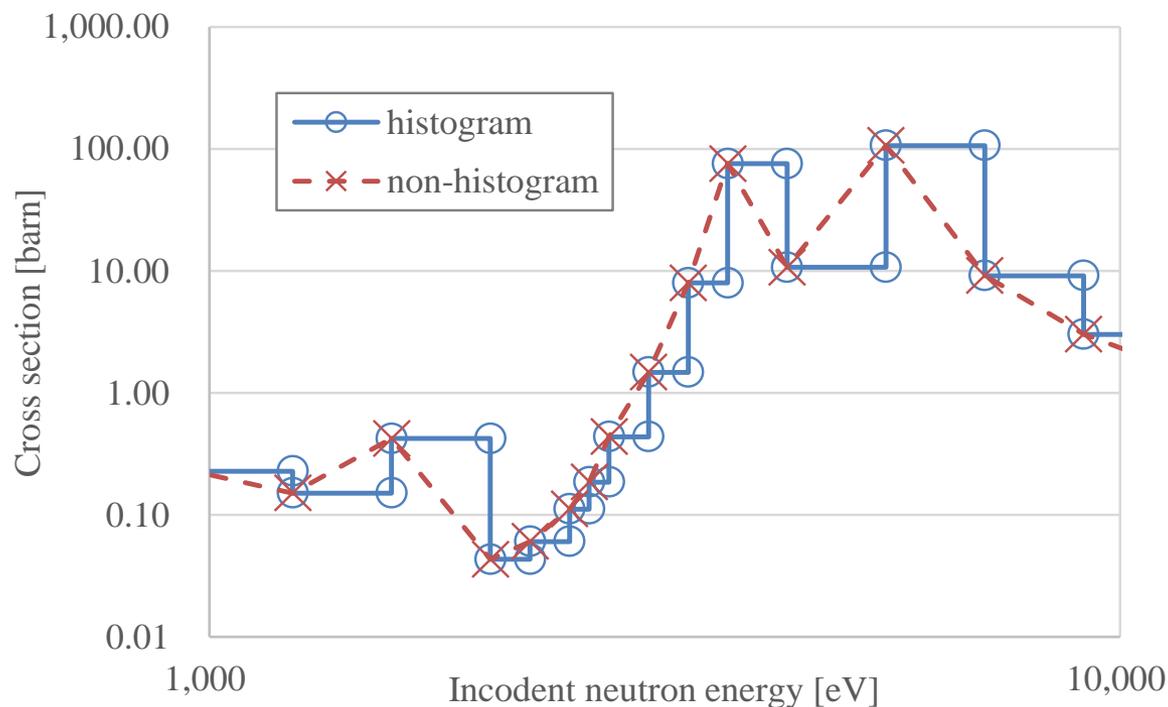
- ENDF(PENDF)
  - 断面積のみ
- ACE
  - 断面積と $v$ 値、核分裂スペクトルを出力可能
  - 中性子入射(fast)だけでなく、熱中性子散乱則(tsl)の断面積も出力可能
- GENDF
  - MF=3、5、6、13、16に対応
    - 各入射エネルギー群での二次エネルギー分布なども出力可能
  - MF=3については高次のルジャンドル次数の断面積も出力
    - 背景断面積については最大のものしか出力せず
  - Ver.2.03.001で全てのルジャンドル次数、背景断面積のデータを出力するように拡張
    - ご要望があればパッチをお渡しします

# 通常の核データ処理との違い (注意点)

- 共鳴再構成やDoppler拡がりの処理で用いる線形化の許容誤差
  - 通常の核データ処理では0.1%なのに対し、本機能では1%
  - エネルギー点数の削減と計算時間高速化のため
    - 入力オプション(error)で変更可能
- Doppler拡がりの処理の上限エネルギー
  - 分離共鳴の上限ではなく、1MeVに固定
- Fission+1/E+Maxwellの中性子重みには非対応
  - FRENDY/MG側で中性子束重みを持っていること、また入力オプションが多いので簡易化のため、スキップ
- TSLの処理には非対応
  - MT=221~250の断面積の出力は可能
  - 中性子入射とは異なり、ENDFファイルを与えても、TSLデータの処理を行って自動的に断面積を出力できるようにはなっていない

# FRENDYの多群プロットについて

- 二つのモード(Histogram／Non-histogram)を用意
  - Histogram: Excelの散布図等で簡単に作図が出来るように、各群の上下限エネルギーの二点で断面積を出力
    - エネルギー一点が重複しないように実際には上限は若干ずらしている
  - Non-histogram: 各群の下限のエネルギー一点でのみ断面積を出力



# 出力ファイルの例

- エネルギーと断面積の一次元データ
- 上部に”#”で書かれている部分が処理条件
  - Gnuplotでは”#”以降はコメントとして扱われるため、このままのファイルでプロット可能
  - 処理条件などを忘れてもここを見ればある程度は理解できるはず

```
# endf/pendf/ace file name (ref)      : ../../njoy/pendf/HinH20.pendf
# endf/pendf/ace file name (comp)    : ../../frendy/pendf/HinH20.pendf
# Temperature [K] (ref / comp)       : 296.000 / 296.000
# MT (reaction type)                 : 1
#
# energy [eV] / ref data / comp data / relative dif (comp - ref)/ref
1.0000000000e-05  1.1819770000e+03  1.1819764600e+03  -4.5686168174e-07
1.0312500000e-05  1.1639350000e+03  1.1639345800e+03  -3.6084489241e-07
1.0625000000e-05  1.1466950000e+03  1.1466947100e+03  -2.5290072770e-07
```

# FRENDYの特徴

- シンプルな入力
  - 核データファイル名と温度のみで処理が可能
  - 核データ処理に詳しくない人でも核データ処理が可能に
- 核データフォーマットの検証
  - 核データを処理するだけでなく、核データがフォーマット通りに格納されているかなどをチェック
  - 本機能によりENDF/B-VIII.0やJEFF-3.3のフォーマット上の問題点を発見
- 核データの編集
  - 特定のMF/MTの削除や他のファイルからの差し込みが可能
    - 物理的な妥当性などは確認しないので使用には注意が必要

# FRENDYの入力形式

- FRENDYでは二種類の入力形式を用意
  - FRENDY独自の入力形式
  - NJOY99/2016の入力形式
- 入力情報の簡素化を実現
  - 従来のコードでは核データ処理システムに精通した人でなければ入力を作れなかったが、誰でも気軽に処理することが可能に
    - FRENDY独自の入力形式では、核種ファイル名のみでACEファイルが作成可能
      - 推奨値をデフォルト値として用意
      - もちろん温度などを自由に設定した処理も可能
    - 特に熱中性子散乱則の入力データは専門的な知識が必要だったが、入力情報のほとんどを自動的に作成可能に

# 【参考】FRENDYの入力例

## • NJOYに比べてシンプルな入力形式

- 入力データ名 + 入力データと  
なっているため、各データの  
意味を理解しやすい
- ほとんどの入力データを  
FRENDYが自動作成
  - 推奨値を用意
  - NJOYのように全データを  
手動で設定することも可能
- **コメントはC++と同じ**
  - “//”以降か、“/\*”と“\*/”で囲まれた  
領域がコメント

### 【FRENDYの入力例 (<sup>235</sup>UのACEファイル作成)】

```
ace_fast_mode
// JENDL
nucl_file_name  U235.dat
/* ace file */
ace_file_name   U235.ace
temp            296.0 // temp [K]
```

### 【FRENDYの入力例 (水のACEファイル作成)】

```
ace_therm_mode //process TSL data
nucl_file_name      H001.dat
nucl_file_name_tsl  H_in_H2O.txt
ace_file_name       H_in_H2O.ace
temp /* temp data */ 296.0 // [K]
```

# 【参考】

## FRENDYのソース例

- goto文の無いスッキリとした表現
- 分かりやすい関数名と変数名
  - どんな操作をしているか直感的に理解しやすい

### 【Doppler Broadeningの線形化部分】

```

int_chk = check_energy_grid_distance
(ene_pre_pre,
P.66の new_ene_part[j-1], new_ene_part[j],
部分 new_sig_part[j-1], new_sig_part[j],
mid_ene, mid_sig);
while( int_chk < 0 || j < new_ene_part.size()-1 ) {
    if( int_chk >= 0 ) j++;
    else {
        insert_middle_energy_grid
            (j, new_ene_part, new_sig_part,
             mid_ene, mid_sig);
    }
    if( j > 1 ) ene_pre_pre = new_ene_part[j-2];
    else ene_pre_pre = -1.0;
    mid_ene = 0.5*(new_ene_part[j] +
                  new_ene_part[j-1]);
    mid_sig = calc_xs_obj.calc_doppler_broadened_xs
                (mid_ene);
    int_chk = check_energy_grid_distance
                (ene_pre_pre,
                 new_ene_part[j-1], new_ene_part[j],
                 new_sig_part[j-1], new_sig_part[j],
                 mid_ene, mid_sig);
}
    
```

中点の  
挿入

中点の  
計算

# まとめ

- 核データライブラリについて解説
  - 評価済み核データライブラリとは？
  - 核データのフォーマット (ENDF-6 / GNDS)
- 核データ処理について解説
  - 核データ処理とは？
  - 多群断面積ライブラリの作成までの流れとその概要
  - 熱中性子散乱則の考慮
- その他
  - NJOYを使用する際の注意点
  - 国産核データ処理システムFRENDYの紹介

# 参考資料 (核データ及び核データ処理手法)

## • 全般

- 長家康展、核データ処理: 評価済み核データから断面積ライブラリへ、第45回炉物理夏期セミナー (2013).
- D. E. Cullen, “4 Nuclear Data Preparation,” Handbook of Nuclear Engineering, Springer (2010).
- R. E. MacFarlane and A. C. Kahler, “Methods for Processing ENDF/B-VII with NJOY,” Nuclear Data Sheets, **111**, pp.2739-2890 (2010).

## • 共鳴公式

- 小林啓祐、原子炉物理 第一章 (1996).
- M. E. Dunn and N. M. Greene, “POLIDENT: A Module for Generating Continuous-Energy Cross Sections from ENDF Resonance Data,” NUREG/CR-ORNL/TM-2000/035 (2000).

## • 熱中性子散乱則

- 鬼柳善明、熱中性子散乱則の表式と現状の断面積の問題点、核データニュース、**108** (2014).
- 池原正、東條匡志、熱中性子散乱則が軽水炉核特性に与える影響、核データニュース、**108** (2014).

# 参考資料 (核データフォーマット)

- ENDF/Bフォーマット
  - A. Trkov, et. al, “ENDF-6 Formats Manual,” CSEWG Document ENDF-102, BNL-90365-2009 Rev.2 (2011).
  - “Introduction to ENDF format,” LA-UR-98-1779 (1998).
    - <http://t2.lanl.gov/nis/endf/>
- GNDS
  - C. M. Mattoon, et.al, “Generalized Nuclear Data: a New Structure (with Supporting Infrastructure) for Handling Nuclear Data, Nuclear Data Sheets, **113**, pp.3145-3171 (2012).
  - GNDS & Fudge
    - <https://ndclx4.bnl.gov/gf/project/gnd/>

# 参考資料 (NJOY)

- NJOY99
  - R. E. MacFarlane, “The NJOY Nuclear Data Processing System Version 91,” LA-12740-M (1994).
  - <http://t2.lanl.gov/nis/codes/njoy99/>
- NJOY2012
  - A. C. Kahler, “The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2012,” LA-UR-12-27079 (2012).
  - <http://t2.lanl.gov/nis/codes/NJOY12/>
- NJOY2016 / NJOY21
  - A. C. Kahler, “The NJOY Nuclear Data Processing System, Version 2016,” LA-UR-17-20093 (2016).
  - <https://njoy.github.io/>
- NJOY使用時の参考資料
  - 小迫和明、炉定数の作成方法 ～NJOYコードの利用方法の初心者講習として～、核データ・チュートリアル
  - [http://www.ndc.jaea.go.jp/nds/tutorial/tutorial2003\\_2.pdf](http://www.ndc.jaea.go.jp/nds/tutorial/tutorial2003_2.pdf)

# 参考資料 (その他の核データ処理システム)

- FRENDY
  - K. Tada, et. al, “Development and verification of a new nuclear data processing system FRENDY,” J. Nucl. Sci. Technol., **54**, pp.806-817 (2017).
- PREPRO
  - IAEAが開発している核データ処理システム
  - <https://www-nds.iaea.org/public/endl/prepro/>
- AMPX
  - ORNLが開発しているSCALE用の核データ処理システム
  - D. Wiarda, “AMPX-6: A Modular Code System for Processing ENDF/B,” ORNL/TM-2016/43 (2016).
- GRUCON
  - ロシアのKurchatov研究所が開発している核データ処理システム
  - <https://www-nds.iaea.org/grucon/>

# 参考資料 (核データの便利ツール)

- Evaluated Nuclear Data File (ENDF)
  - 世界中の核データライブラリの断面積データなどをプロットしてくれるサイト
  - 核データ間の断面積を比較するときなどに便利
  - <https://www-nds.iaea.org/exfor/endl.htm>
- Sigma
  - ENDFと同様に核データをプロットするとき便利
  - <http://www.nndc.bnl.gov/sigma/>
- 核図表 (Web版)
  - 核種の半減期や崩壊図式の一覧
  - 核種の基礎的な物性値を見るとき便利
  - <http://wwwndc.jaea.go.jp/CN14/index.html>