

# 第49回炉物理夏期セミナー

## 講義4：評価済み核データライブラリの処理

---

日本原子力研究開発機構 多田 健一

# 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

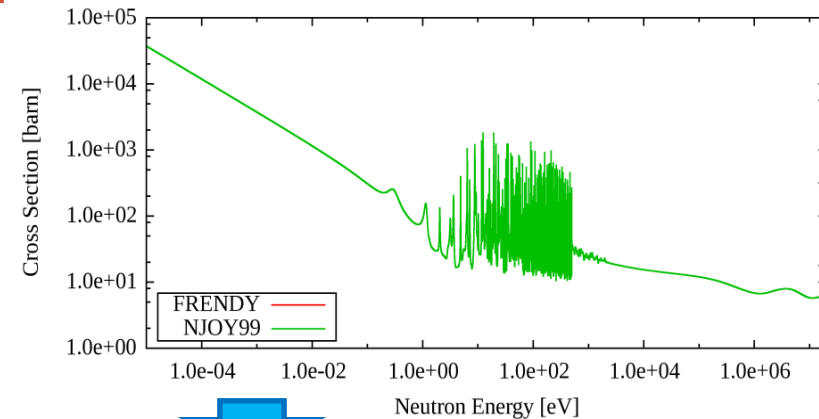
- 評価済み核データライブラリを  
基に、核計算コード用の断面積  
ライブラリを作成するシステム
  - 単にテキスト形式の断面積データを  
核計算コード用に変換するだけで  
なく、多くの演算が必要
- 米国(LANL)のNJOYやIAEAの  
PREPROが有名
  - 日本でも長年独自の核データ処理  
システム開発の要望はあったが、  
実用的な処理システムは開発され  
てこなかった

## 【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

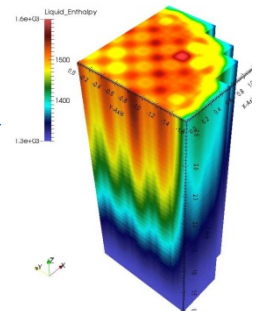


核計算コード

**MVP、  
MARBLE、  
PHITS、  
MCNP**



Flux分布など



# 【参考】FRENDYのSource Lines of Code

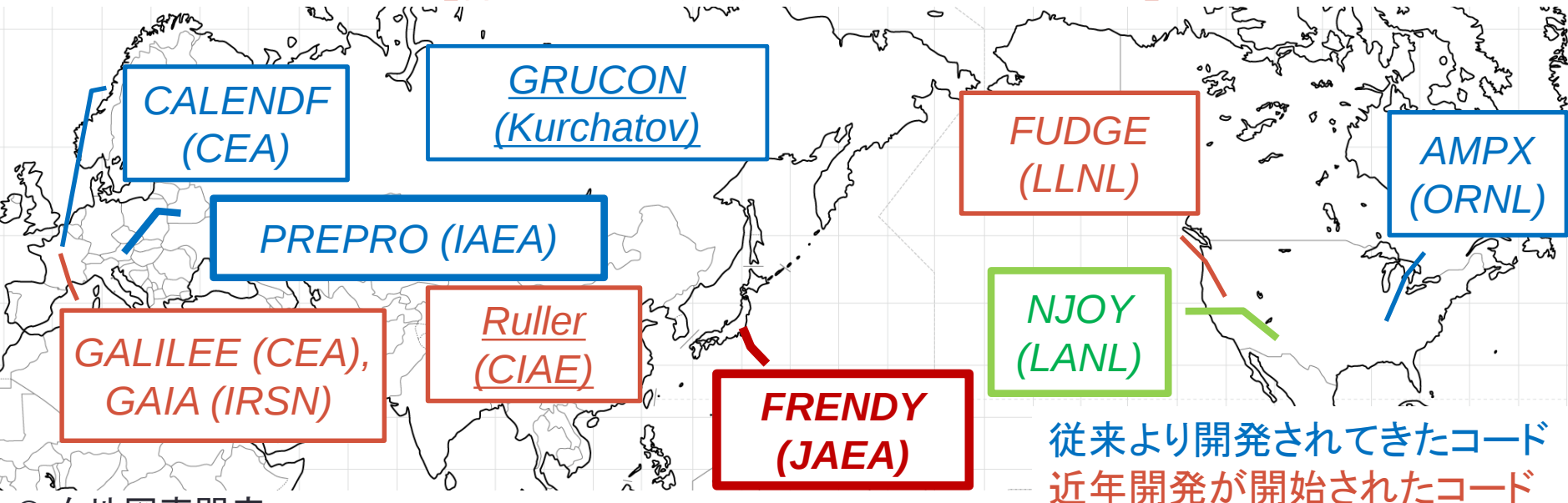
| 機能                        | 行数             | コメント行数       | 空行数           | 有効行数           |
|---------------------------|----------------|--------------|---------------|----------------|
| 共通部分                      | 38,633         | 1,807        | 5,591         | 31,235         |
| ENDF読み書き                  | 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<br>(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】



# 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で利用
    - ENDF-6はフォーマット形式名で、ENDF/B-VI、ENDF/B-VII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

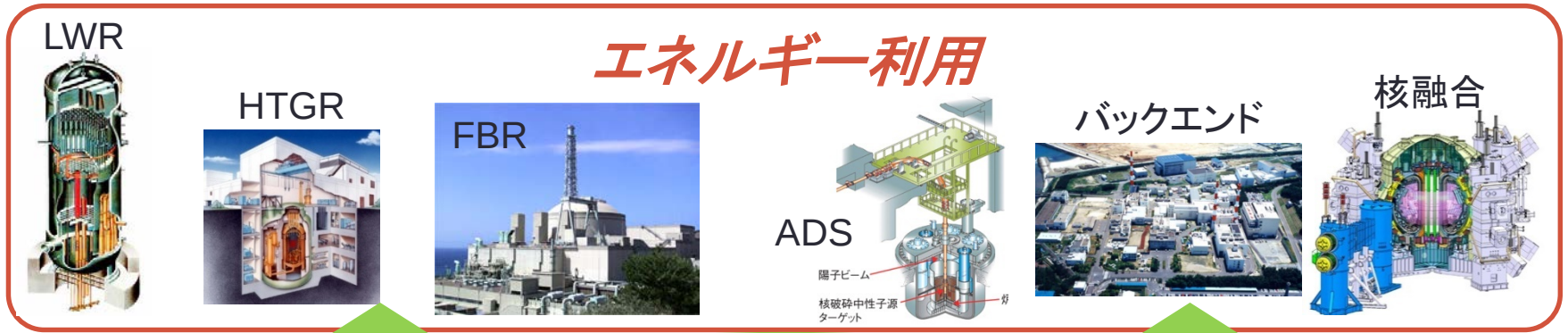
中性子輸送計算で  
主に利用

- 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 ( $S(\alpha, \beta)$ )

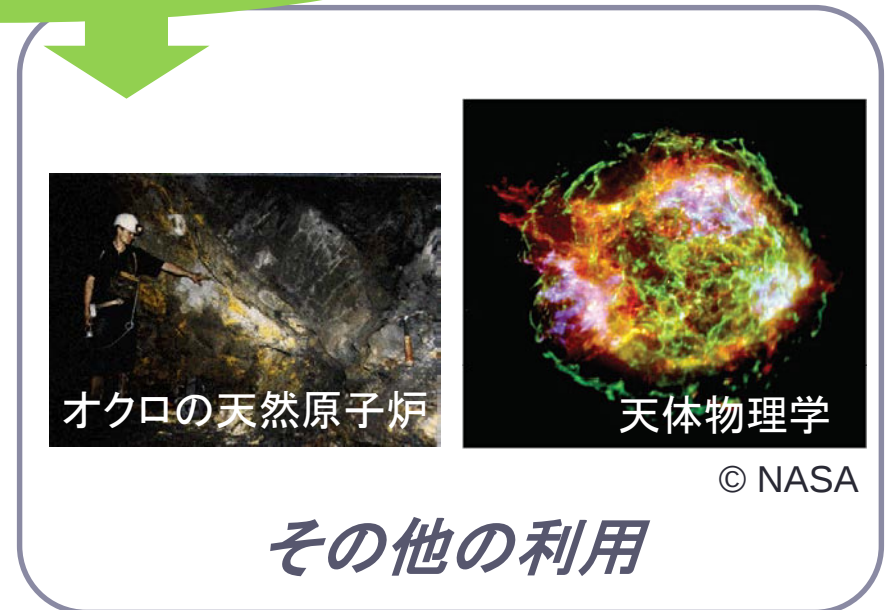
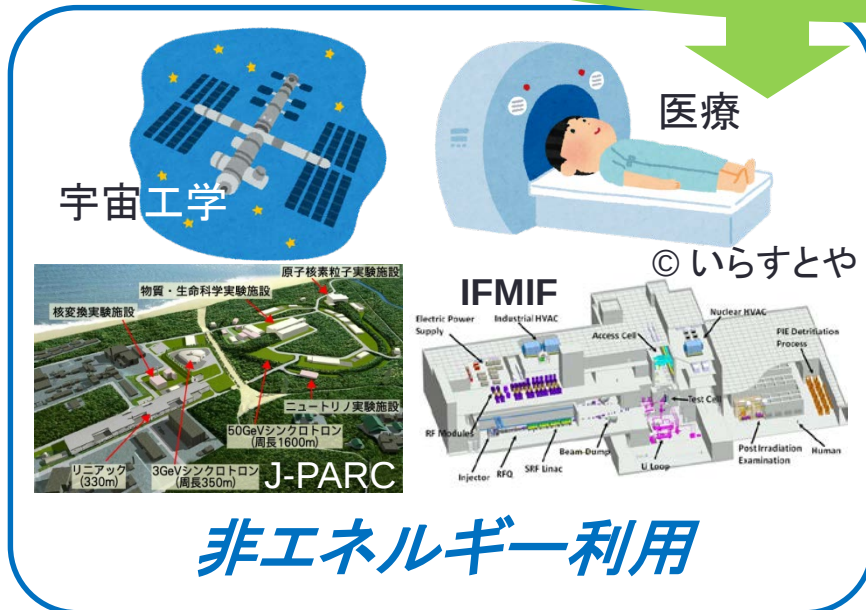
燃焼計算で  
主に利用

- 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

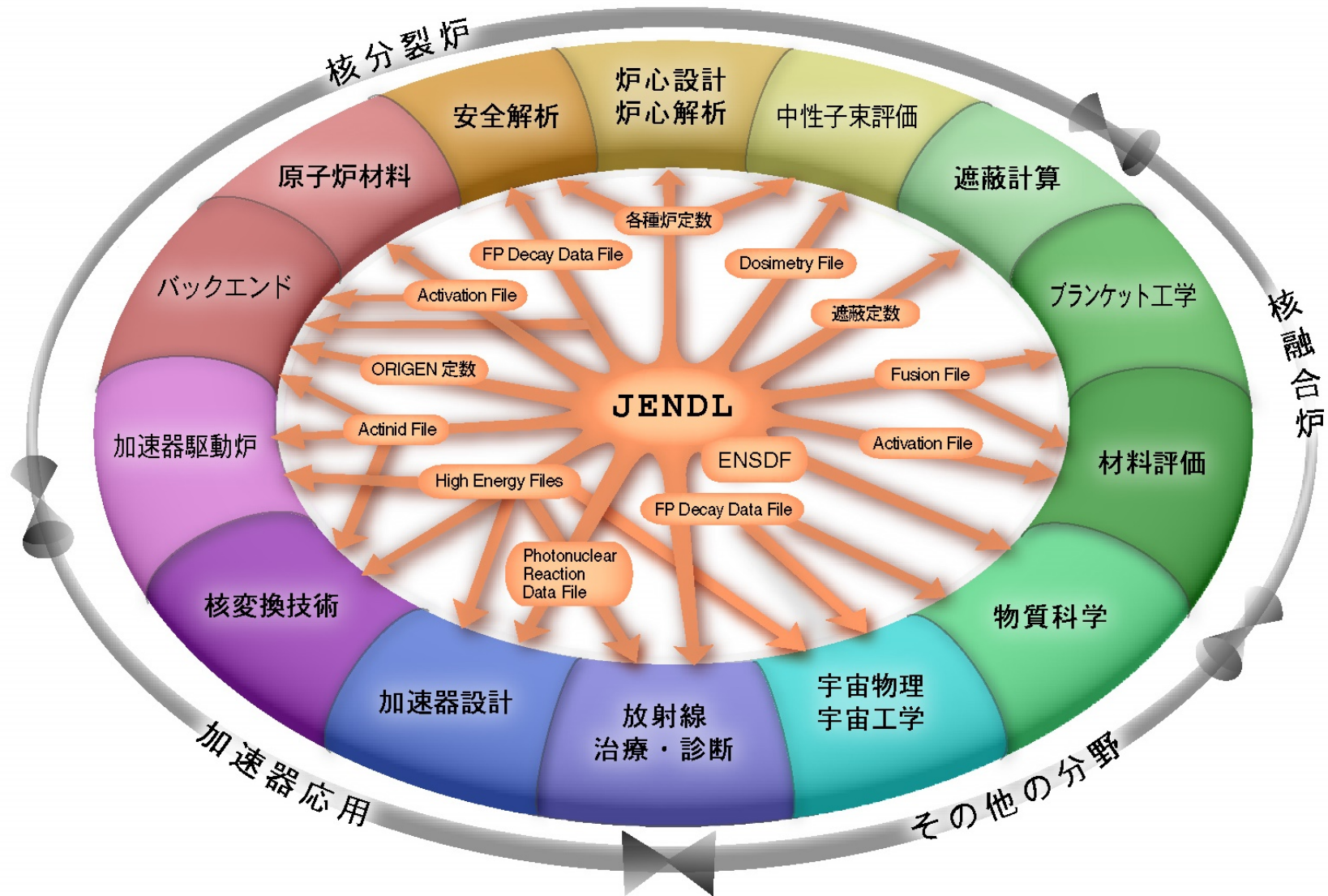
# 評価済み核データの主な利用先



**JENDL**



# 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-3.2 | JENDL-3.3 | JENDL-4.0 |
|-------------|---------|---------|-----------|-----------|-----------|-----------|
| 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      | 1994      | 2002      | 2010      |
| 最大エネルギー     | 15 MeV  | 20 MeV  | 20 MeV    | 20 MeV    | 20 MeV    | 20 MeV    |
| 核種数*        | 66 + 6  | 173 + 8 | 305 + 19  | 318 + 22  | 335 + 2   | 405 + 1   |
| γ線データ       | 0       | 0       | 59        | 66        | 114       | 354       |
| 二重微分断面積     | 0       | 0       | 0         | 0         | 60        | 318       |
| 共分散         | 0       | 0       | 1         | 1         | 20        | 95        |
| データサイズ [MB] | 9       | 26      | 72        | 83        | 110       | 565       |

\*: 同位体 + 天然元素

# 世界三大ライブラリの比較

| Library       | JENDL-4.0    | ENDF/B-VII.1/0* | JEFF-3.1.2/1** |
|---------------|--------------|-----------------|----------------|
| 開発主体          | 日本           | 米国              | 欧州             |
| 公開年           | 2010         | 2011/2006       | 2012/2009      |
| 核種数           | 406          | <b>423</b> /393 | 381/381        |
| γ線データのある核種数   | <b>354</b>   | 286/206         | 216/136        |
| 二重微分断面積のある核種数 | <b>319</b>   | 255/171         | 161/83         |
| 共分散データのある核種数  | 95           | <b>190</b> /26  | 36/36          |
| 核データ評価コード     | CCONE<br>POD | GNASH<br>EMPIRE | TALYS          |
| 自給率           | <b>96%</b>   | <b>51%/60%</b>  | <b>12%/20%</b> |

\*ENDF/B-VIII.0が今年公開予定

\*\*JEFFの最新版はJEFF-3.2 (2014.3公開)

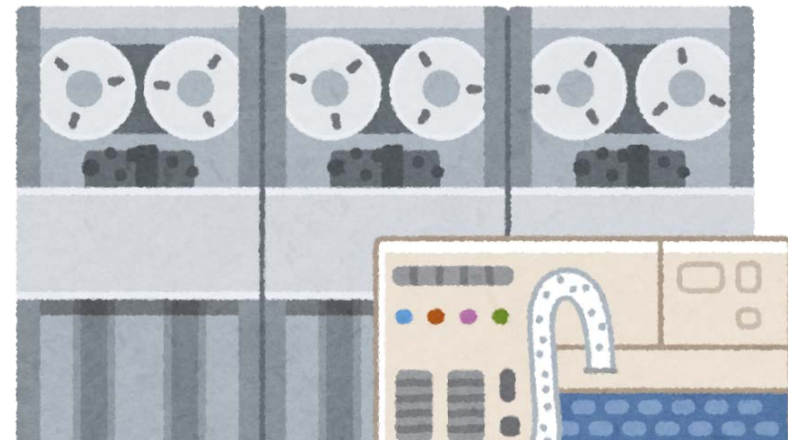
# 評価済み核データのフォーマット



- 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
- 現在、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中
  - **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
  - 今年公開予定のENDF/B-VIIIでは、ENDF-6用とGNDS用の二つのバージョンでの公開を予定
    - JEFF-4.0もENDF-6用とGNDS用の二つのバージョンで公開予定

# 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( $\text{H}_2\text{O}$ 、 $\text{ZrH}$ 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物性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

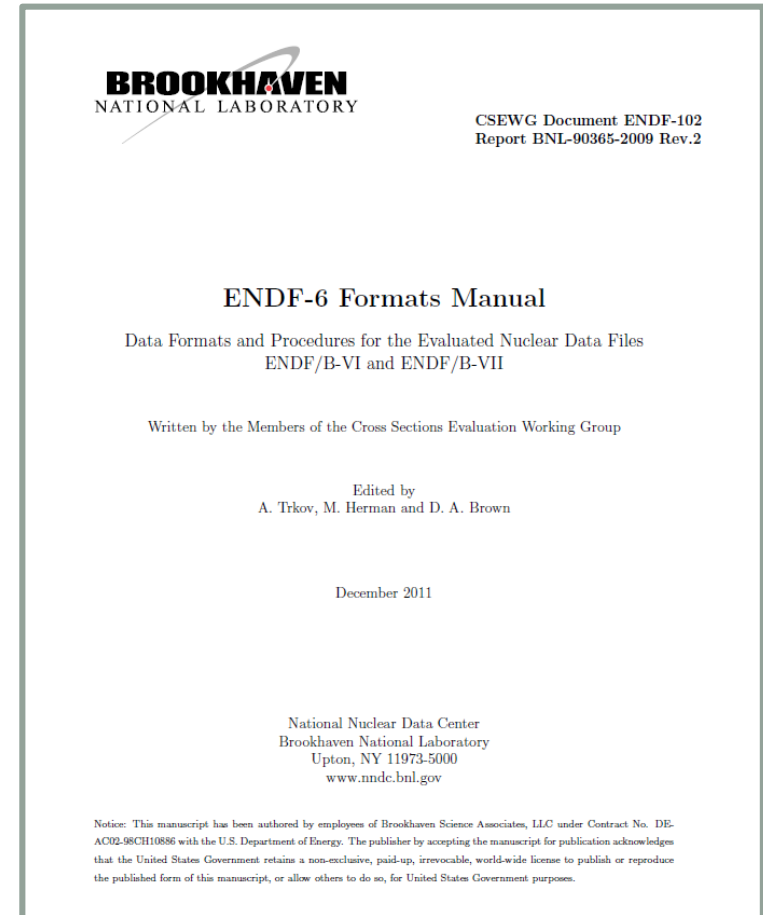


# MAT番号のルール

- 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"
    - 最新の核データライブラリでもCは天然元素(MAT=600)
      - 今年公開予定のENDF/B-VIIIで $^{12}\text{C}$ と $^{13}\text{C}$ が分離される予定
- 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



# 代表的なMT番号

- **MT= 1** : (n, total)
- **MT= 2** : (z, elastic)
- **MT= 3** : (z, nonelastic)
- **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

(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

# 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      |      |
|             |                               | 4    | 2  | 3      | 5    |

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

66

# ENDF-6フォーマットの具体例

## JENDL-4.0 Fe-56の(n,2n)断面積

| JENDL-4.0 Fe-5602(n,2n)断面積 |              |             |             |             |             | MF    |    |        |   |
|----------------------------|--------------|-------------|-------------|-------------|-------------|-------|----|--------|---|
|                            |              |             |             |             |             | MAT   | ↓  | MT     |   |
| 2. 605600+4                | 5. 545440+1  | 0           | 0           | 0           | 02631       | 3     | 16 | 1      |   |
| -1. 120270+7               | -1. 120270+7 | 0           | 0           | 1           | 112631      | 3     | 16 | 2      |   |
| 11                         | 2            | 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 | 2631  | 3  | 16     | 4 |
| 1. 300000+7                | 2. 138200-1  | 1. 400000+7 | 3. 891650-1 | 1. 500000+7 | 5. 134000-1 | 2631  | 3  | 16     | 5 |
| 1. 600000+7                | 5. 817500-1  | 1. 700000+7 | 6. 107500-1 | 1. 800000+7 | 6. 118000-1 | 2631  | 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 |    |        |   |

## 11カラム実数表現

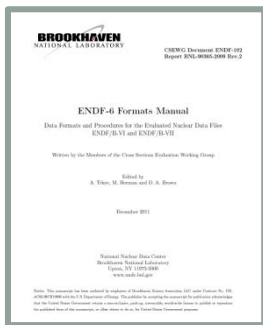
- $\pm 1.234567 \pm n$
- $\pm 1.23456 \pm nn \quad (nn \leq 38)$
- $\pm 1.23456789$

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<br>↓<br>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 |        |
| 11           | 2            | 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 | 2631   | 3 16          | 4 | } TAB1 |
| 1. 300000+7  | 2. 138200-1  | 1. 400000+7 | 3. 891650-1 | 1. 500000+7 | 5. 134000-1 | 2631   | 3 16          | 5 |        |
| 1. 600000+7  | 5. 817500-1  | 1. 700000+7 | 6. 107500-1 | 1. 800000+7 | 6. 118000-1 | 2631   | 3 16          | 6 |        |
| 1. 900000+7  | 5. 977000-1  | 2. 000000+7 | 5. 759000-1 |             |             | 2631   | 3 16          | 7 |        |
|              |              |             |             |             |             | 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

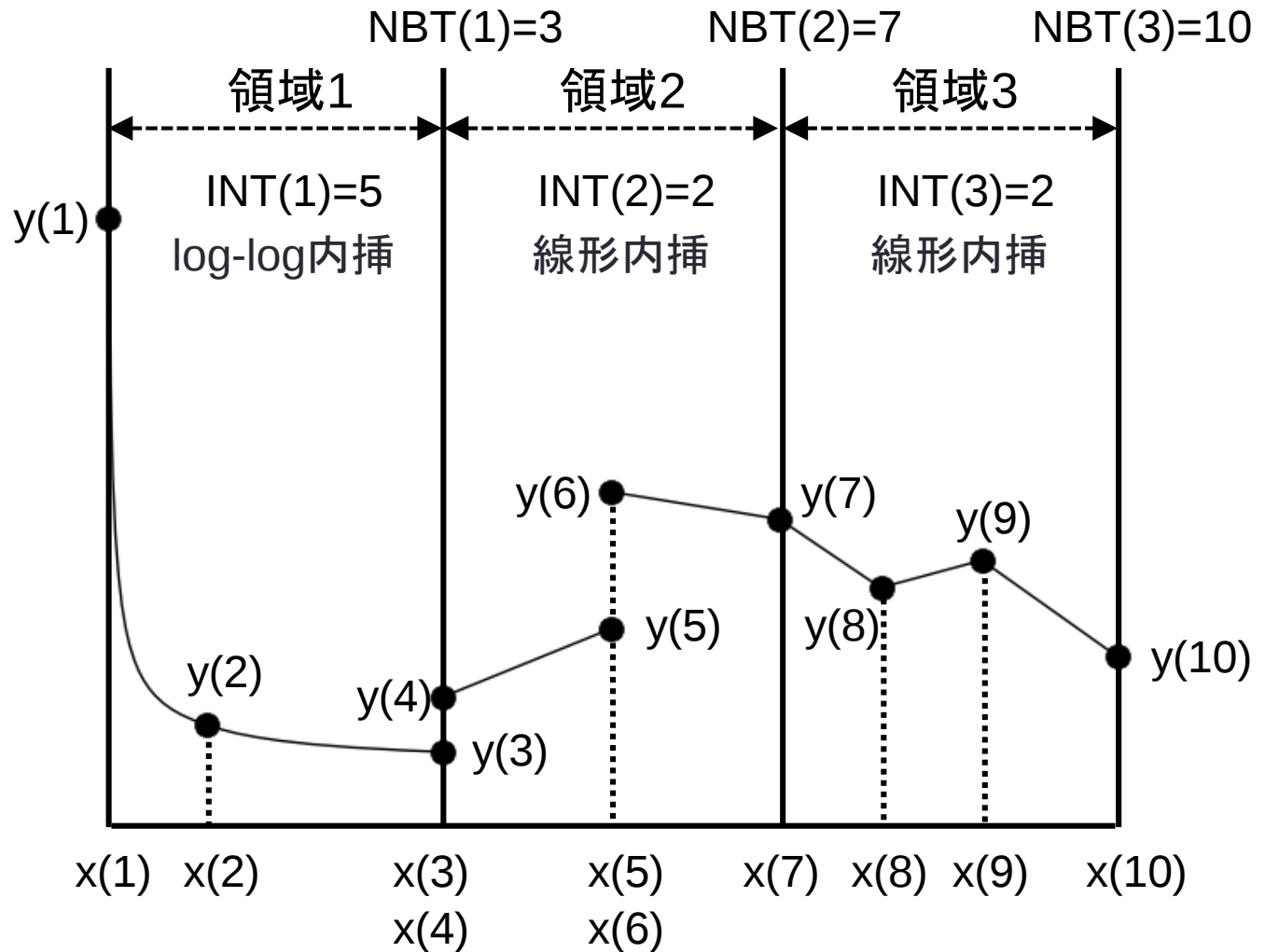
- 関数形を決めて、パラメータを与える形式
  - 例: Breit-Wignerの一準位公式 (共鳴断面積)
- パラメータが別のパラメータ(例えば、エネルギー)に依存する場合、そのパラメータはテーブル形式で与えられる

# 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
  - 今後はWPEC EG-GNDSで管理
- XML言語
- ENDF-6⇔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



参考文献: Nuclear Data Sheets, **113**, pp.3145-3171, (2012).

# GNDSSFォーマットの具体例

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>`

断面積  
データ

`<data> 1.14e7 0.00000 1.17e7 0.0162241 1.20e7 0.0480045  
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 → `<outputChannel genre="NBody" Q="-11202700 eV">`

エネルギー `<product name="n" label="n" multiplicity="2"`

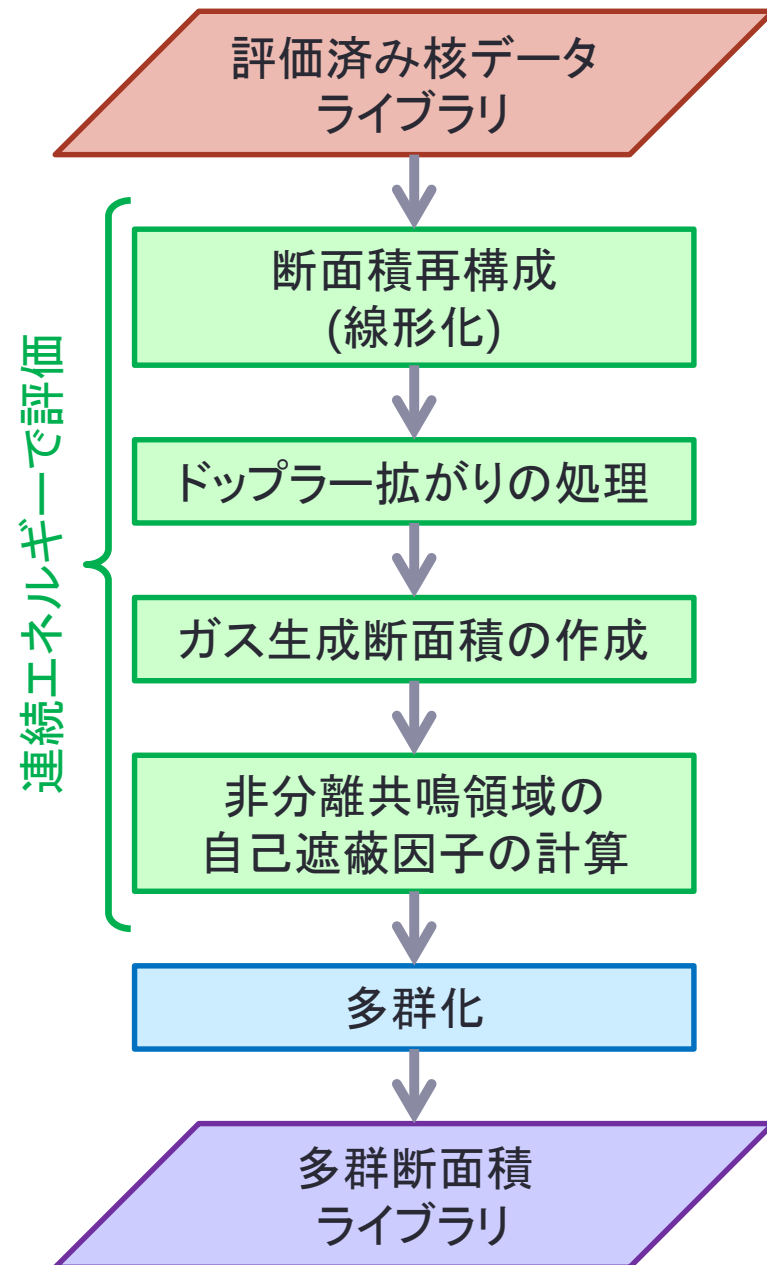
角度分布 `ENDFconversionFlag="MF6">`

の定義 `<distributions nativeData="Legendre">`

`<Legendre nativeData="LegendrePointwise">`

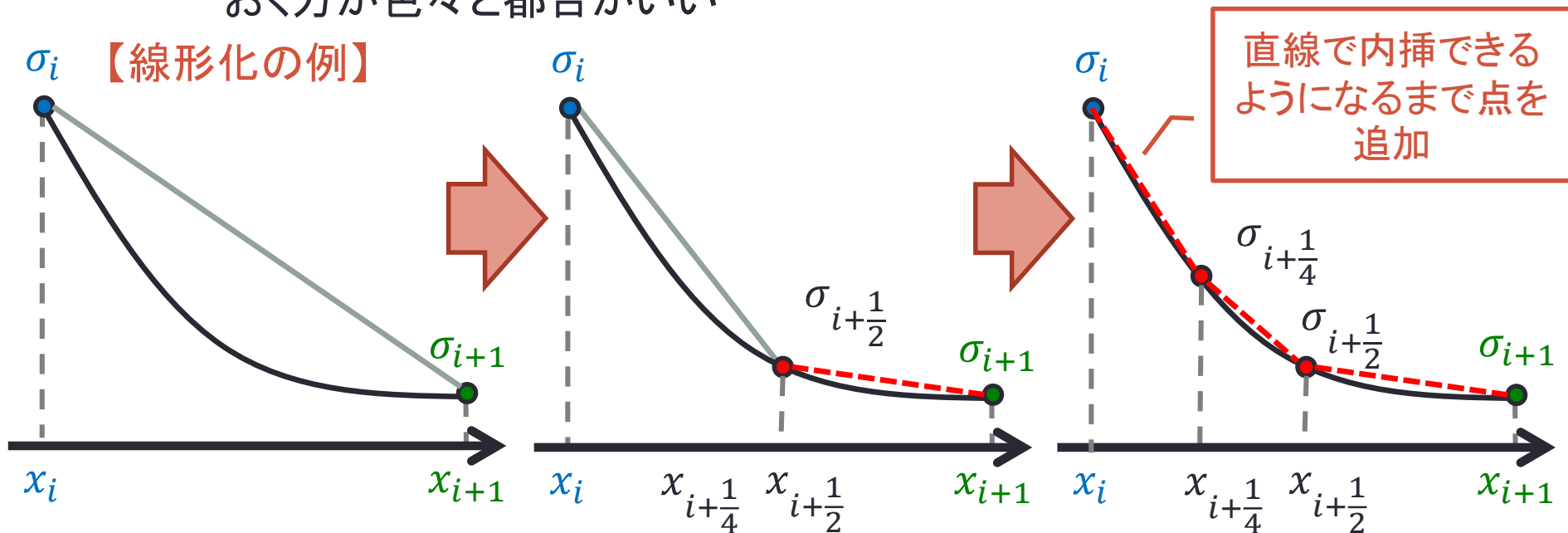
# 核データから多群断面積 ライブラリの作成

- 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
  - 熱中性子散乱則は非考慮



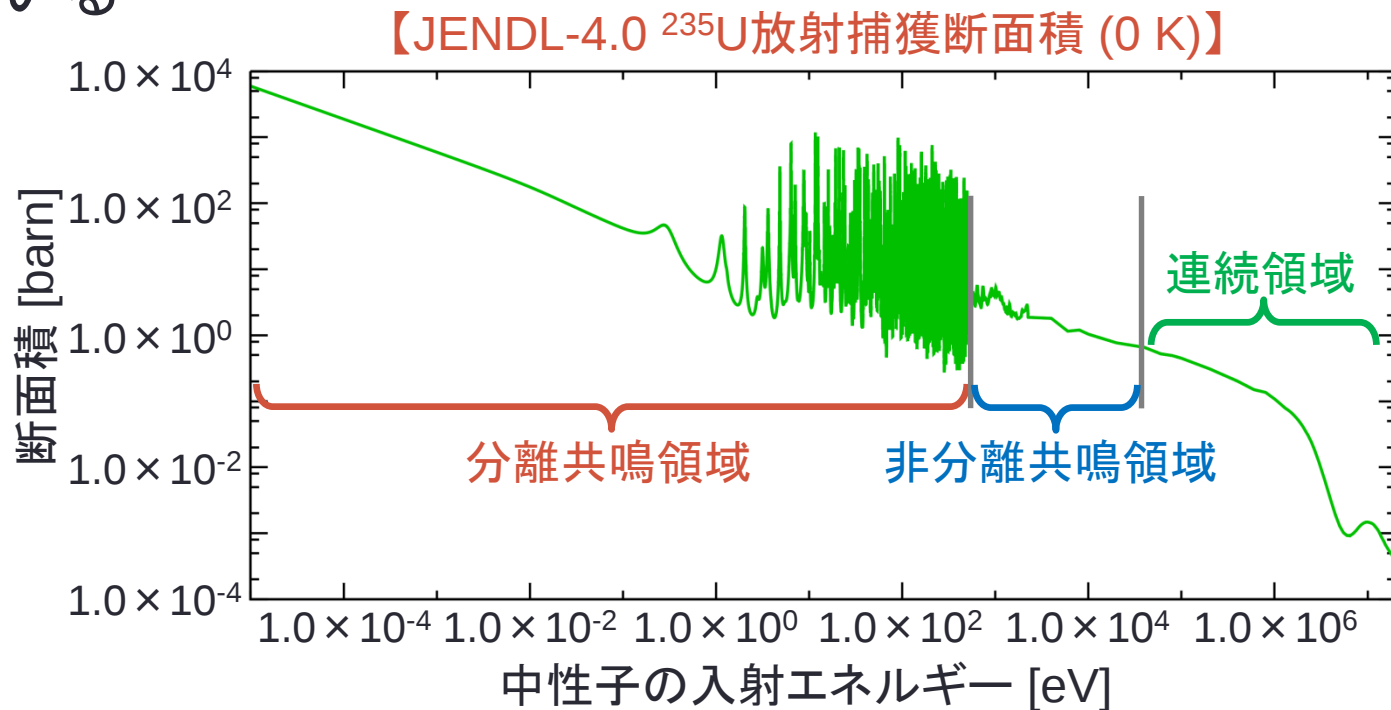
# 断面積の線形化

- 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
    - 例えばドップラー広がり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？

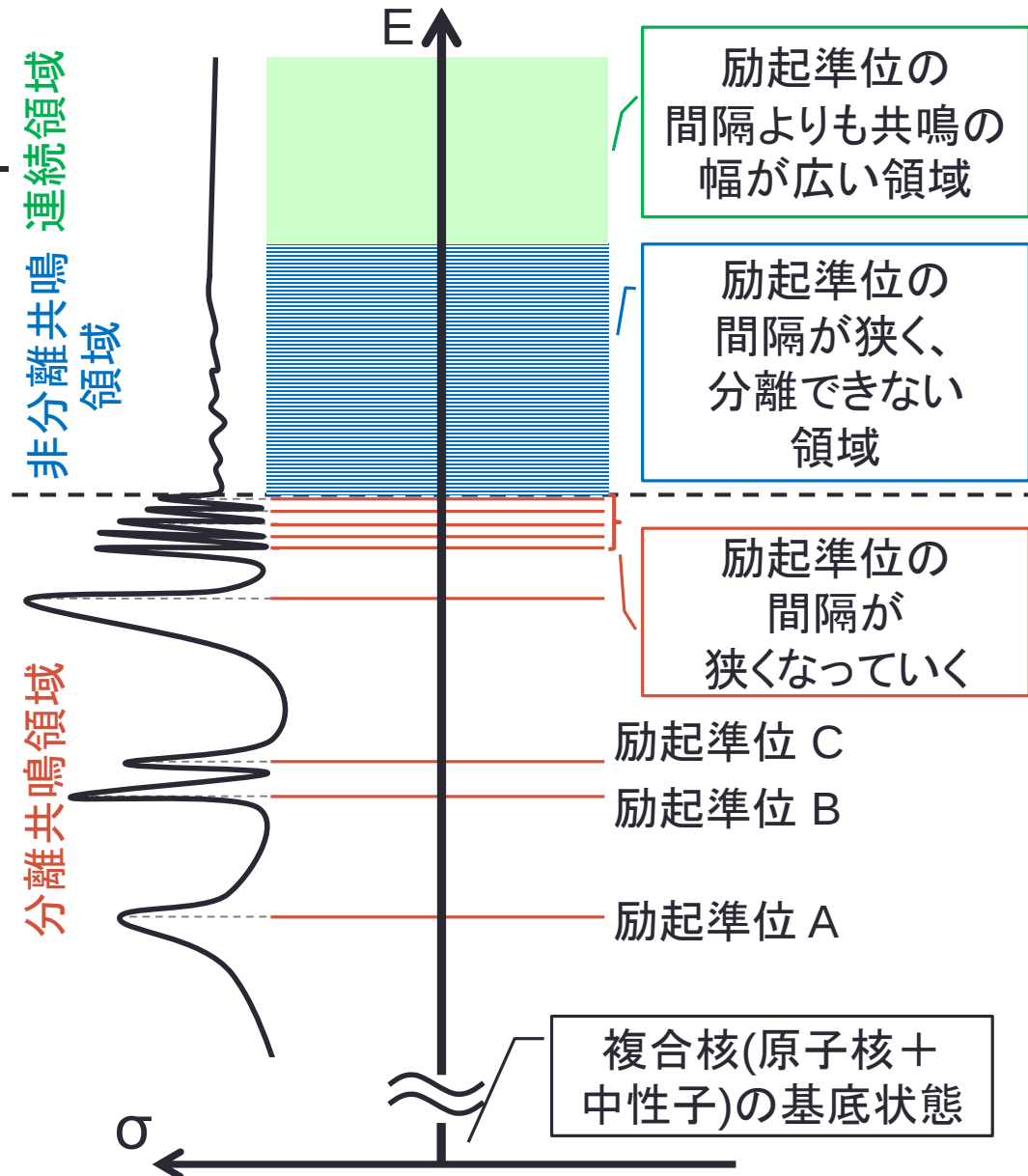
- 分離共鳴領域／非分離共鳴領域の断面積を計算
  - 分離共鳴領域の断面積を断面積公式から計算
  - 非分離共鳴領域の平均断面積を断面積公式から計算
  - 非分離共鳴領域よりも上のエネルギーについてはMF=3で用意されている



# 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

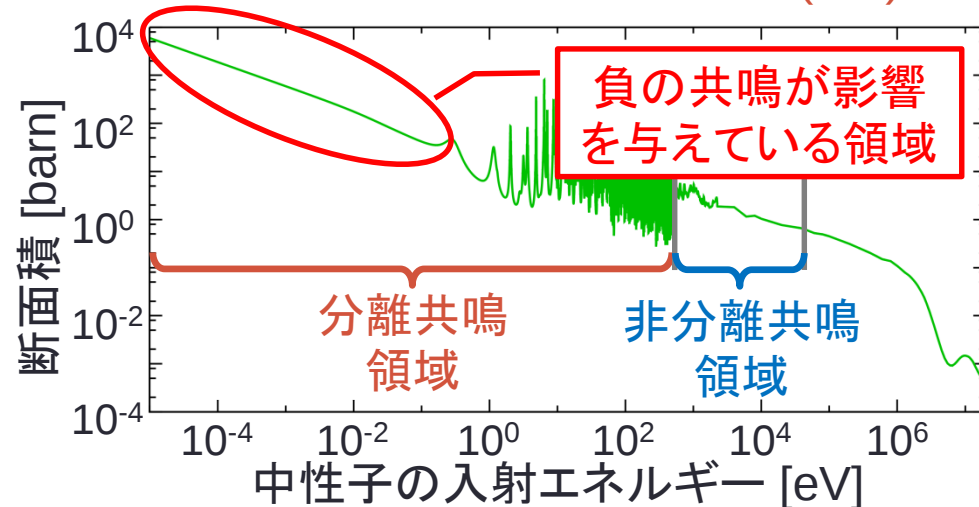
## 【励起準位と共鳴構造の関係】



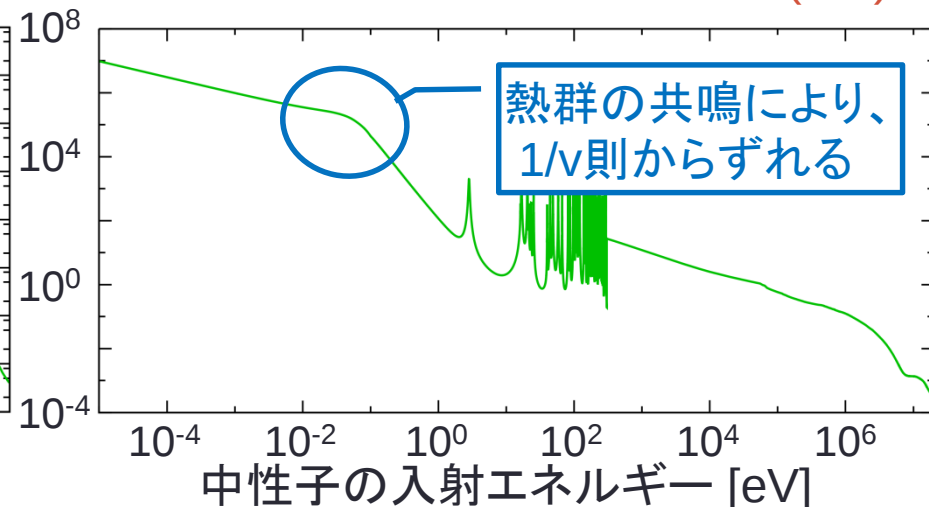
# 低エネルギー領域の断面積

- 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)】

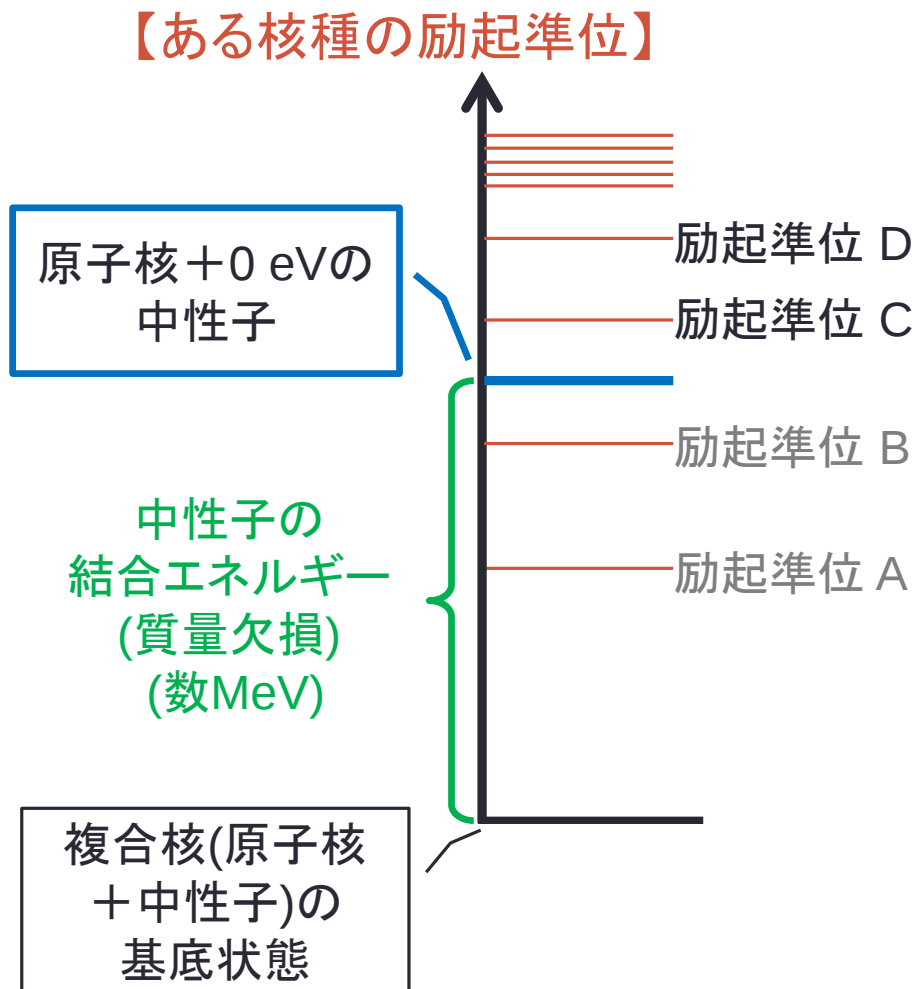


【JENDL-4.0  $^{157}\text{Gd}$  放射捕獲断面積 (0 K)】



# 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、**小林啓介著、「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

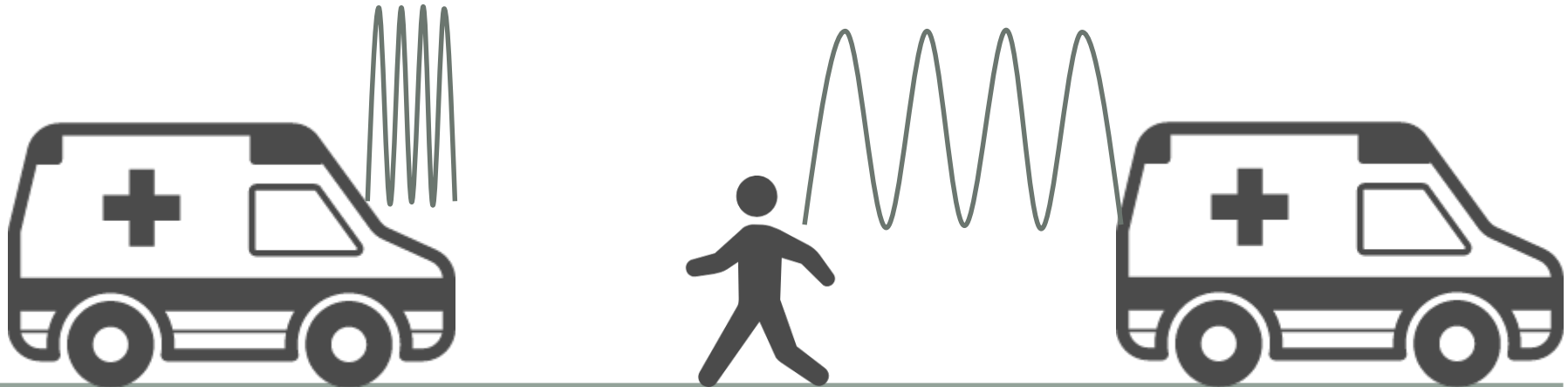
# ドップラー拡がりの処理とは？

- 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

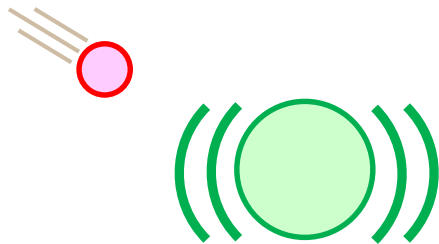
## 【一般的な音のドップラー効果】



# 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、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】

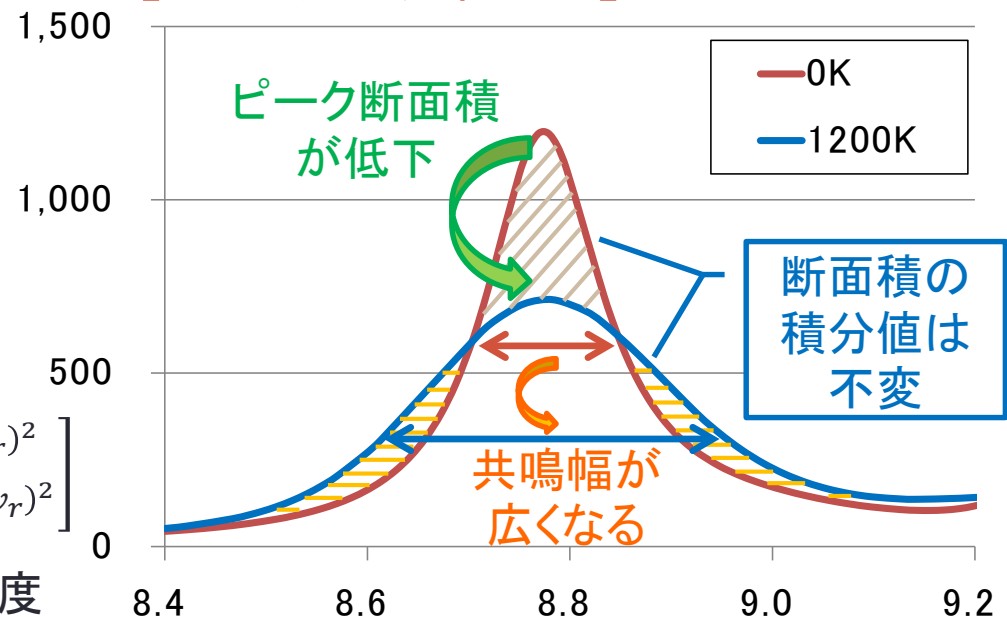


## 【ドップラー拡がりの計算式】

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

$T$ : 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広がりの処理

- 断面積を線形化しているとドップラー広がりの計算式が簡単な形に展開可能

【ドップラー広がりの計算式】

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

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

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

【誤差関数 erf(a)の計算式】

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

- 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、ドップラー広がりの処理の前に断面積を線形化しておく必要がある

# 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

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

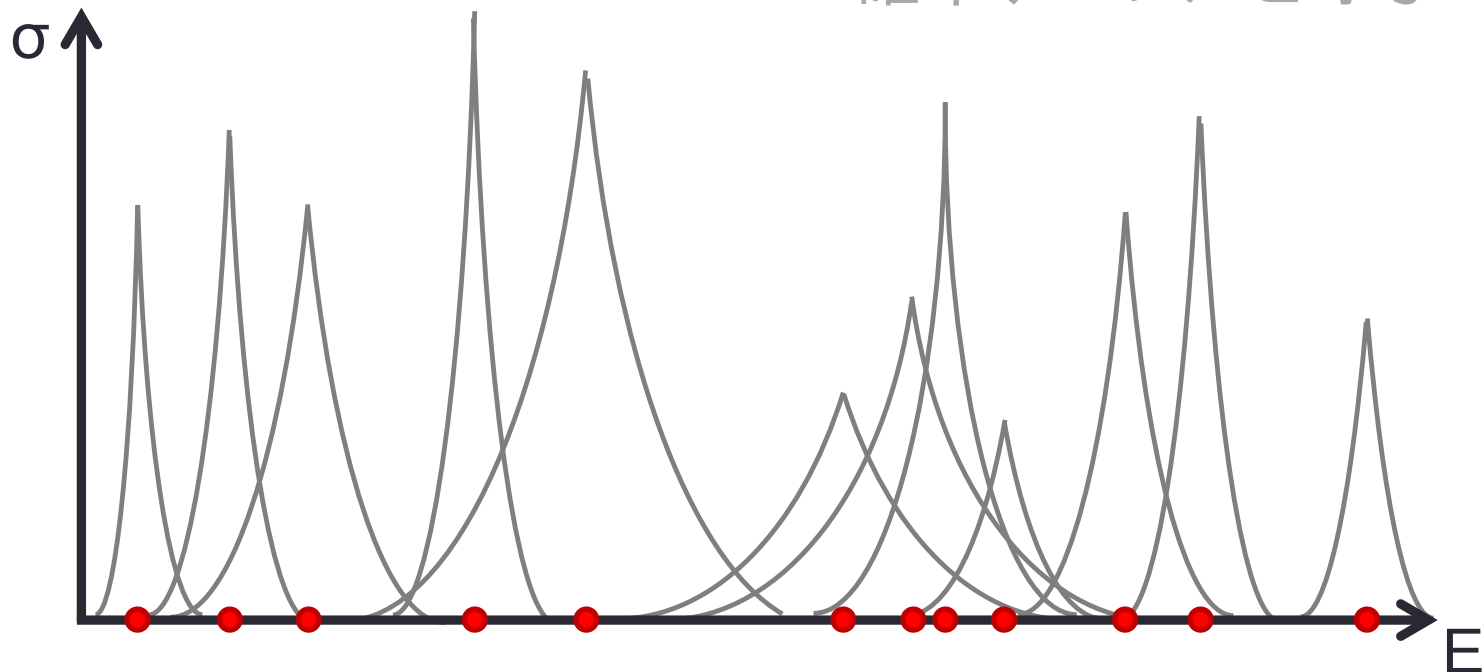
- モンテカルロ計算コードでは確率テーブルを直接利用

## 【確率テーブルの例】

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

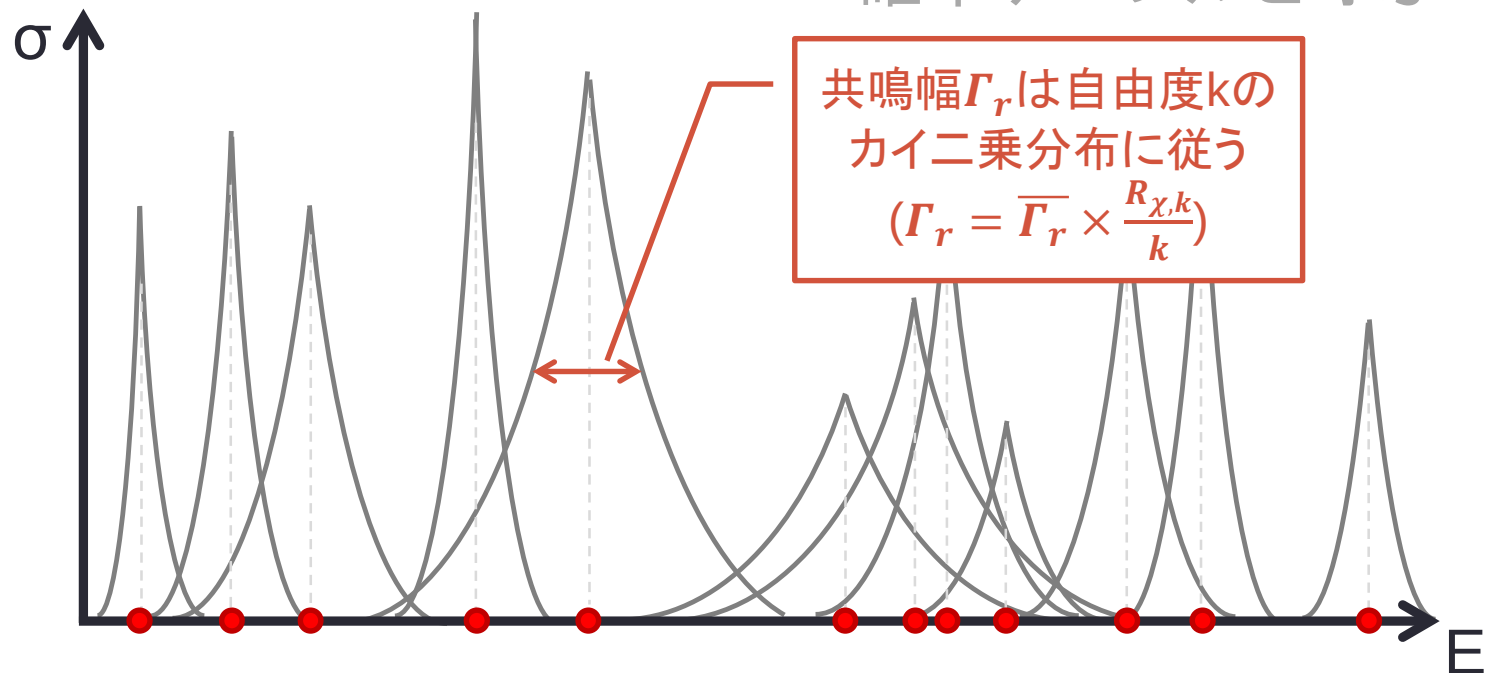
# 乱数を用いた確率テーブルの計算手順 (1/5)

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



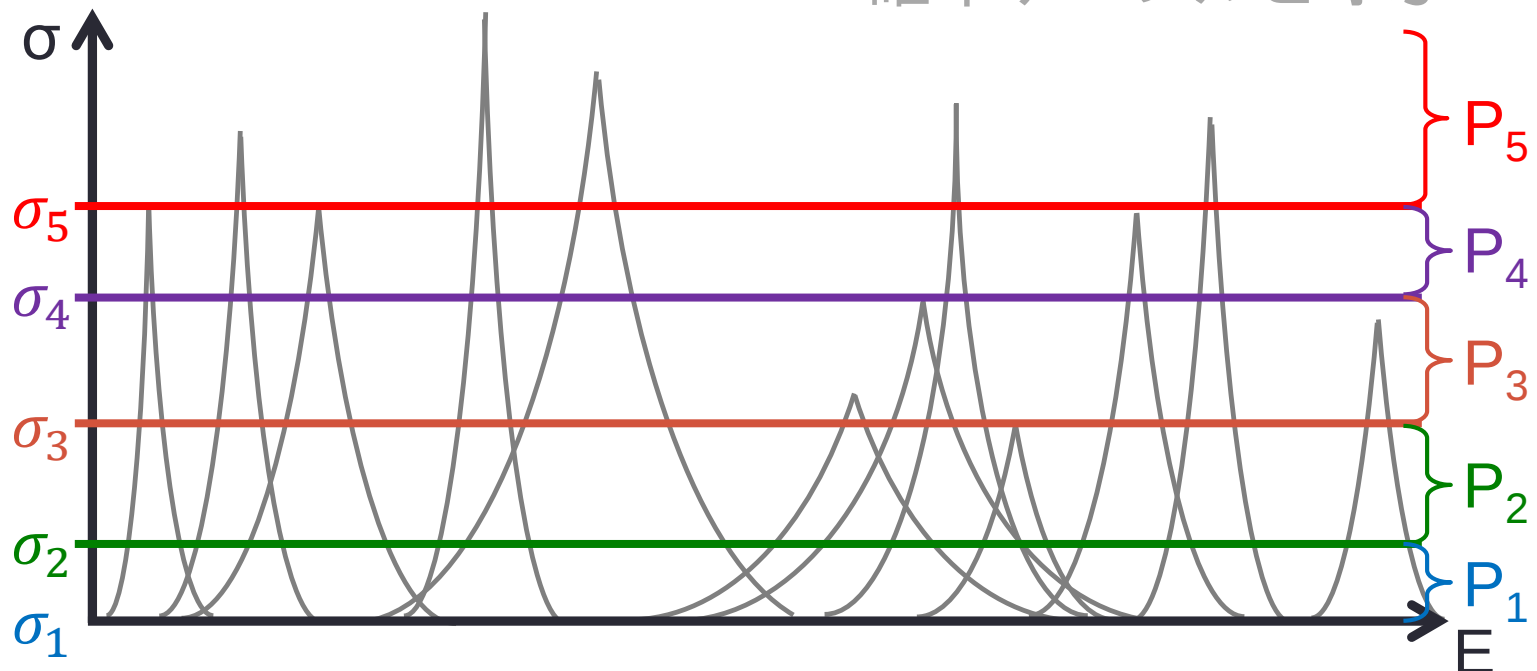
# 乱数を用いた確率テーブルの計算手順 (2/5)

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



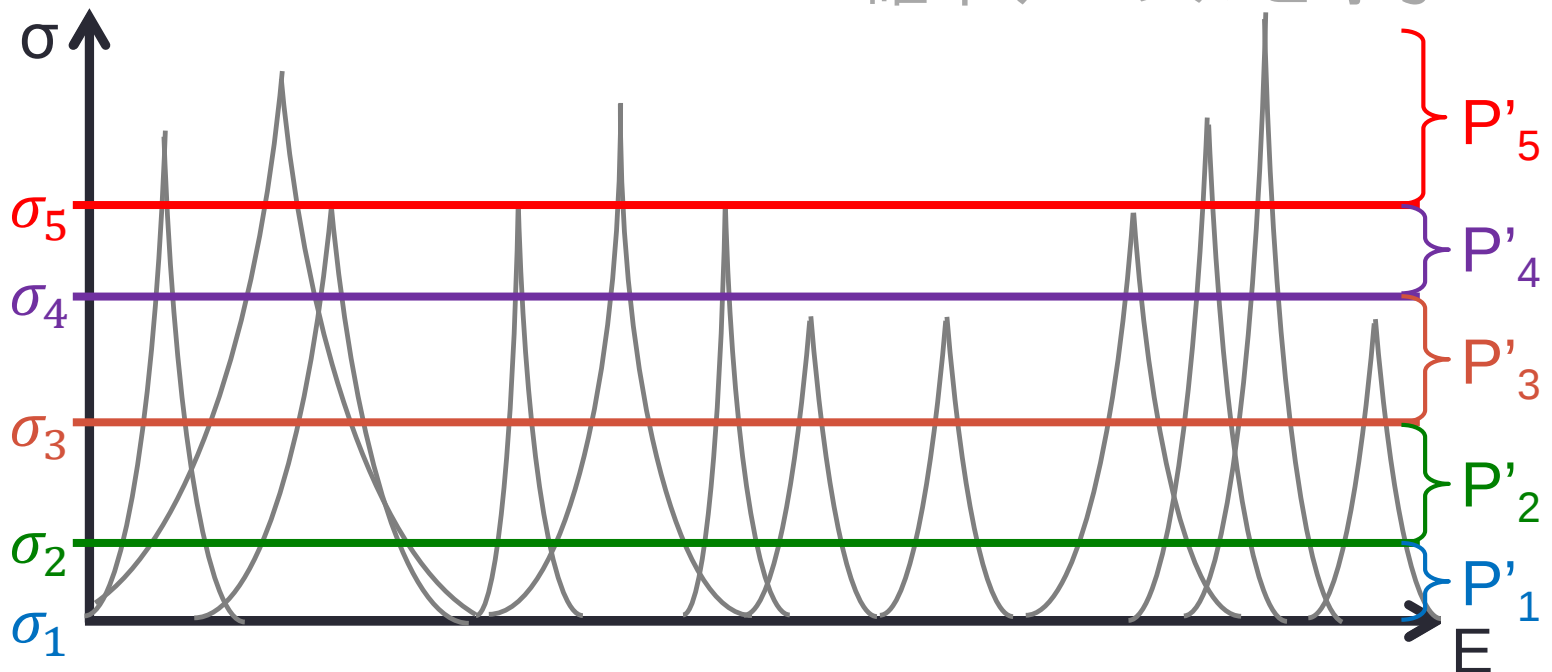
# 乱数を用いた確率テーブルの計算手順 (3/5)

1. 乱数を用いて共鳴ピークのエネルギー一点を選定
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



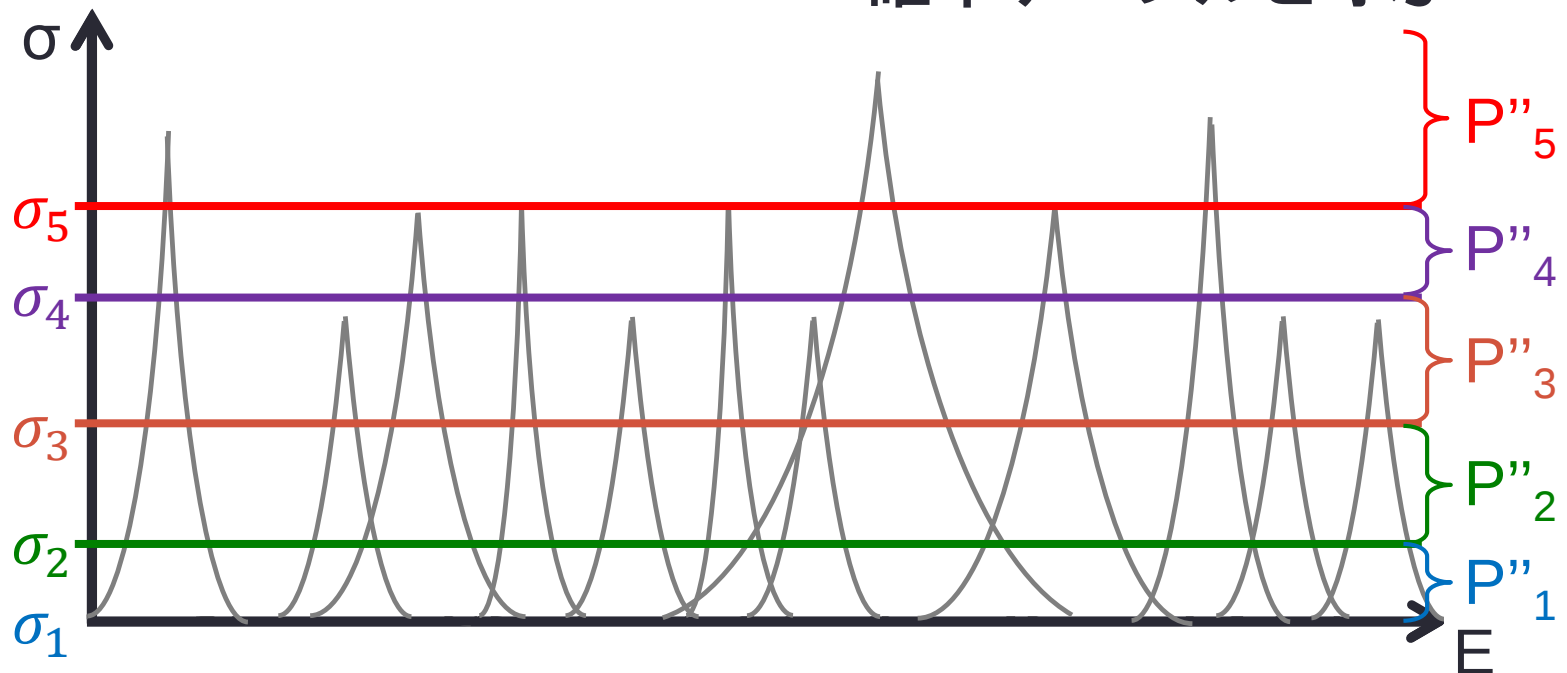
# 乱数を用いた確率テーブルの計算手順 (4/5)

1. 乱数を用いて共鳴ピークのエネルギー一点を選定
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一点を選定
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

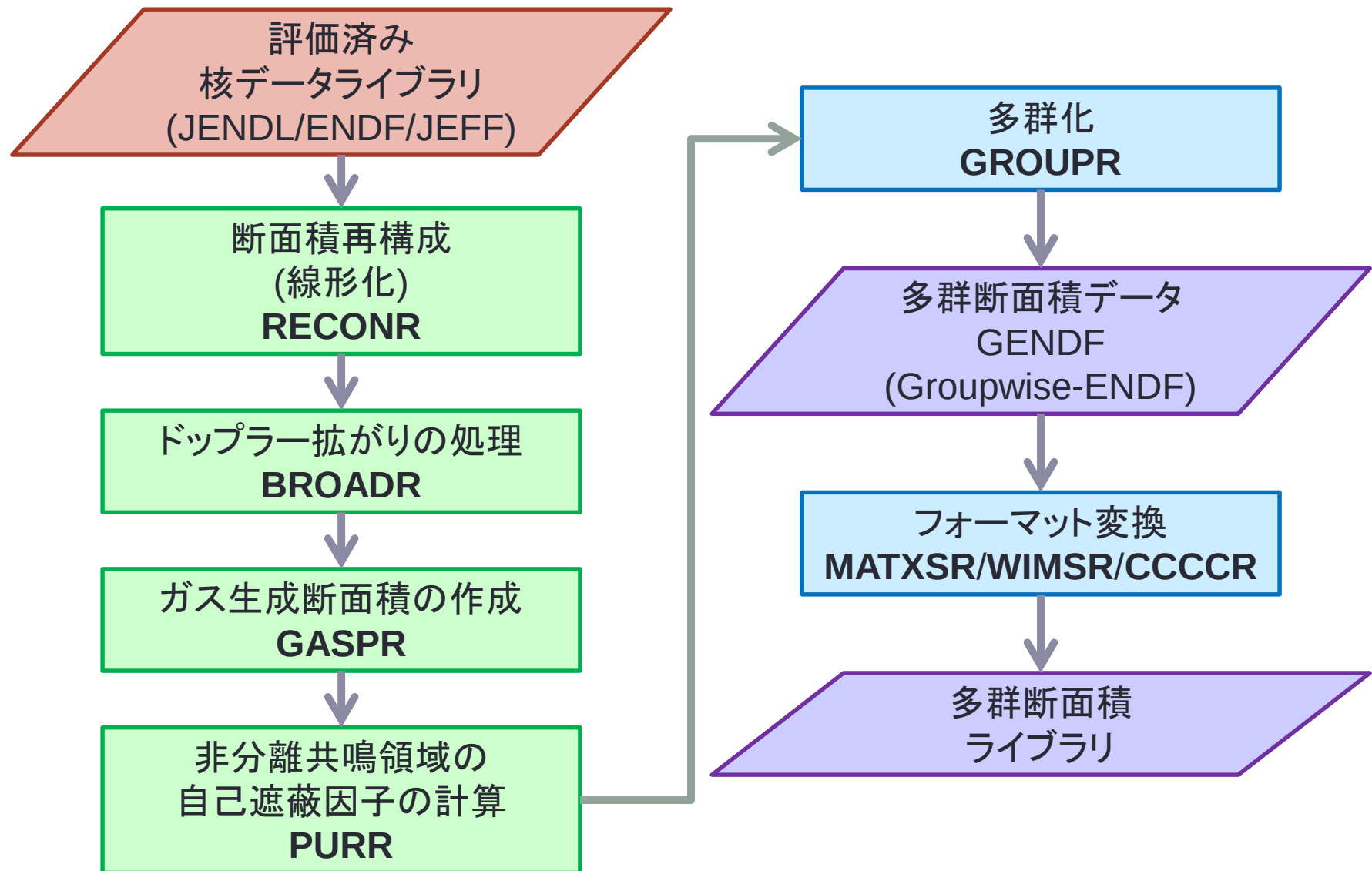
$$\sigma_{l,g}^i = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma^i(E) \phi_l(E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi_l(E) dE}$$

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

- NJOYでは中性子重みとして
  - ユーザー指定のスペクトル、1/E、マクスウェル分布+1/E+核分裂スペクトル

など様々な中性子束を選択可能

# 【参考】NJOYを用いた多群ライブラリの作成



# 熱中性子散乱則の考慮

- 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  $\beta = (E' - E) / k_B T$

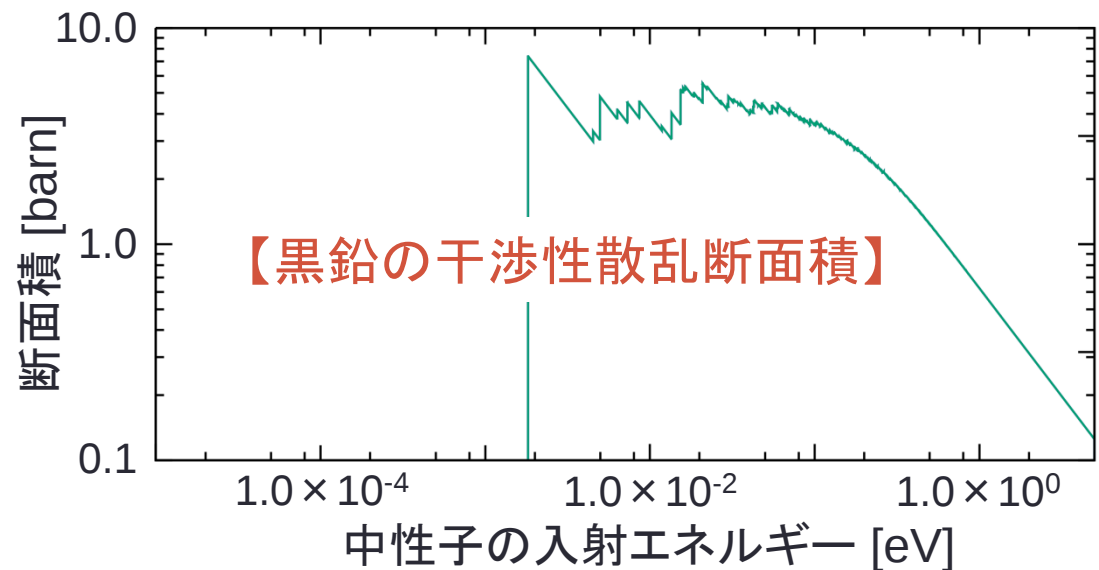
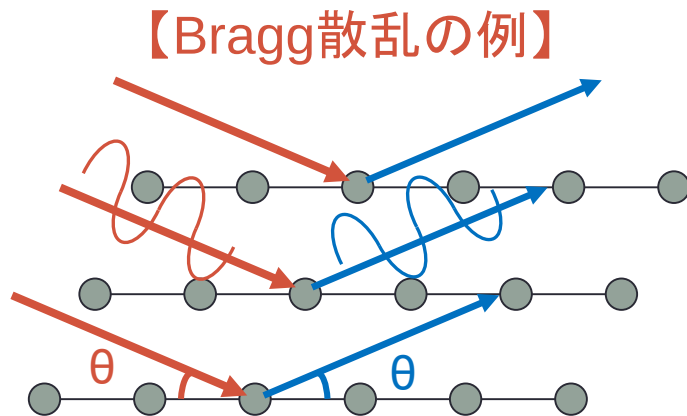
# 熱中性子領域の物質による散乱

- 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

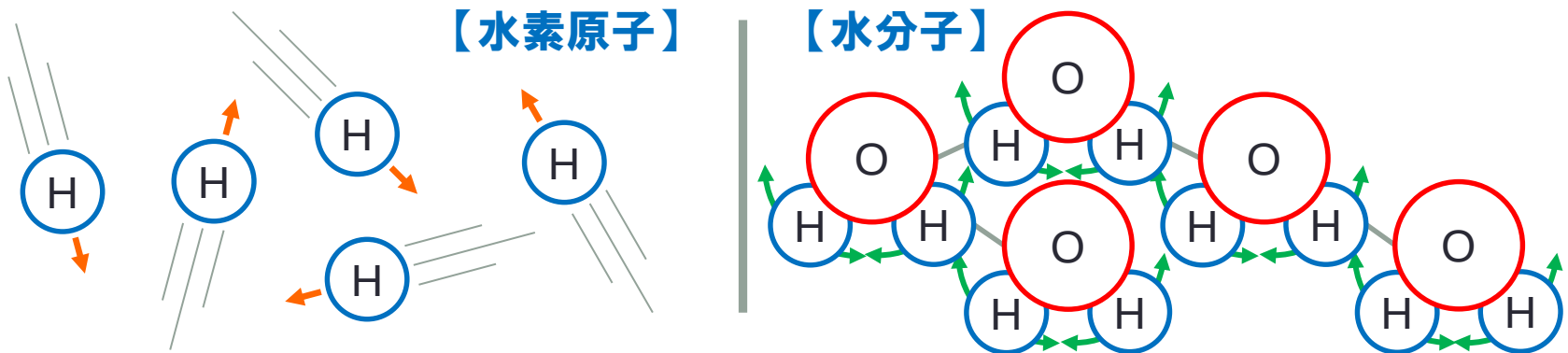
- 金属のように配列的に並んでいることによる散乱
  - 回折現象とも呼ばれる
  - Bragg edgeと呼ばれる特徴的なパターンが見られる
- 核データ上ではブラッグエッジのピークのエネルギーと物理データが記載されている
  - 核データ処理ではそれらのデータから各エネルギー一点での断面積を計算



# 非干渉性非弾性散乱断面積

- $\text{H}_2\text{O}$ 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

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

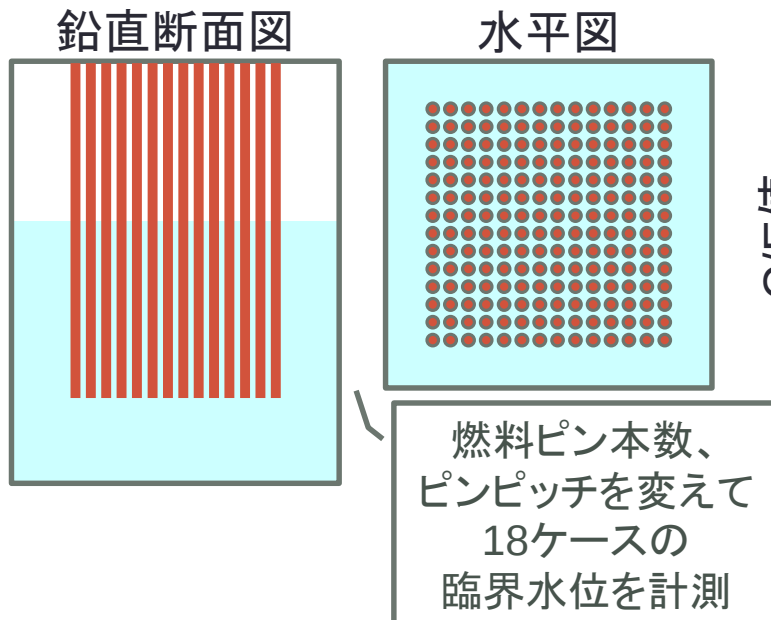
$\mu$ : 方向余弦、 $M_n$ : 物質中の原子数

- 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

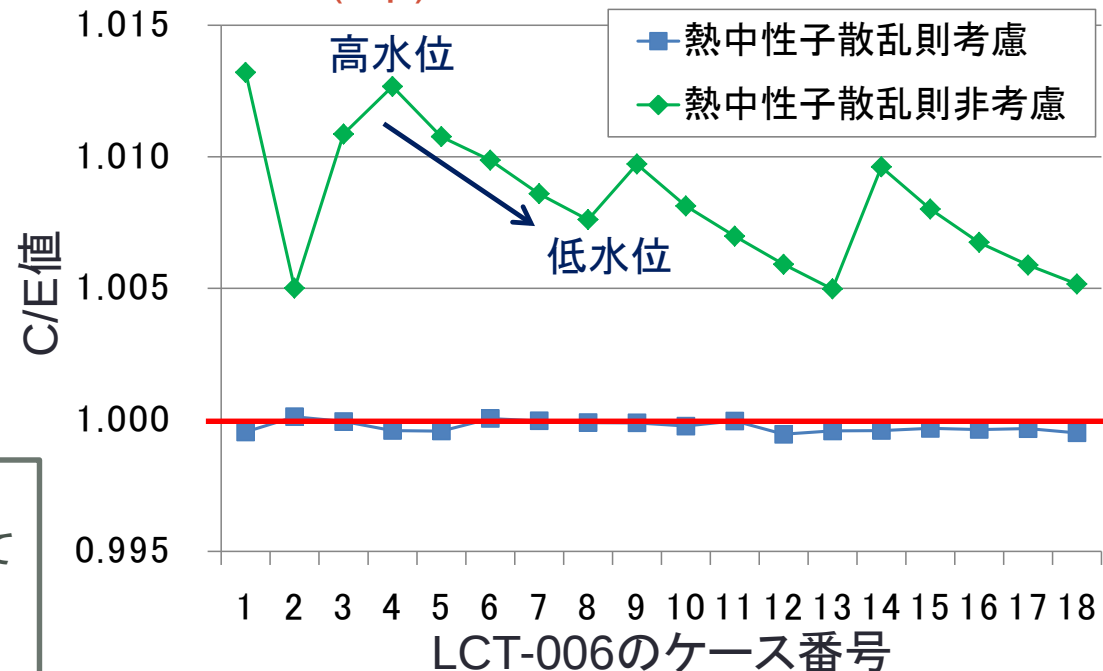
# 熱中性子散乱則が炉心解析に与える影響

- 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】

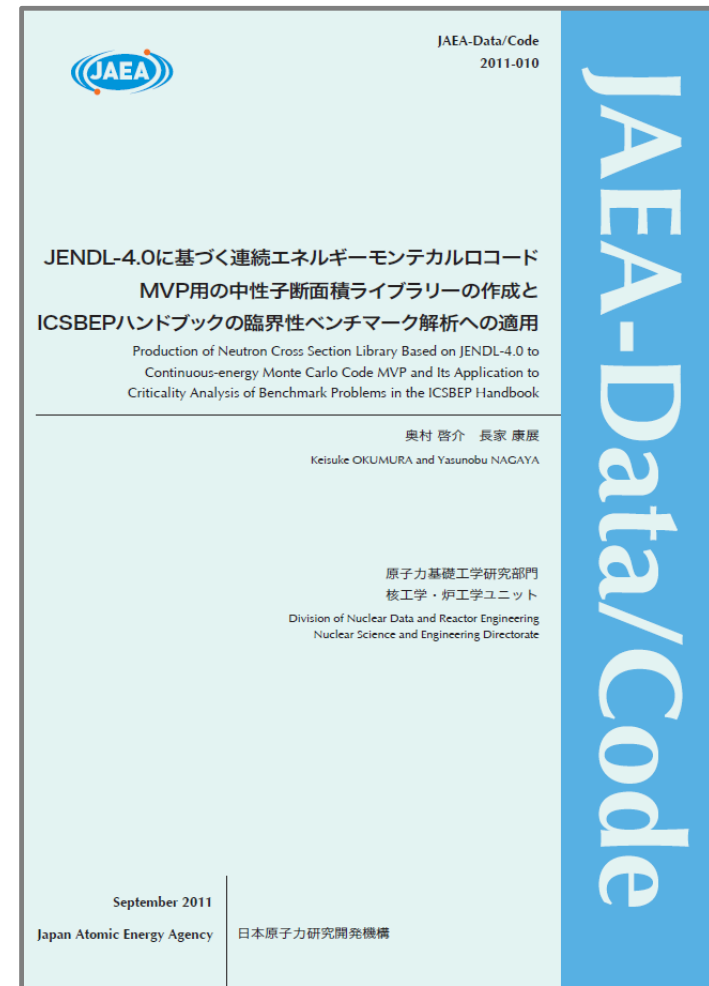


【 $S(\alpha, \beta)$ の有無がC/E値に与える影響】



# 【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
  - $H_2O$ 、 $CH_2$ 、 $C_6H_6$ 、黒鉛、Be、ZrHなど
  - 核種ID(**zzmmmcxxx**)の**C**の部分が異なる
    - $H_2O$ : **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



# 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: Jeremy Conlin (NJOY21の主開発者)
  - 最終バージョン: 無し (Gitにて最新版をpullする形式に変更)
  - NJOY2012と中身は同じ。
  - 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が判別しにくい

# 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 ( $^{235}\text{U}$ )

- 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

## 【 $^{235}\text{U}$ 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 25 / endf, pendf(in), pendf(out)
9228 1 5 20 500 / mat, temp no, sig no, bin no, lad no
296.0 / temp
1E10 1E4 1E3 300 100 30 10 / sig zero
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 8 1 4 1 2 229 0             / mat_e, mat_p, bin no, temp no,
                                   inela opt, ela opt, principal atom no,
                                   mtref, pri opt
296.0                               / temp
1.0E-3 5.0                         / 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)

```

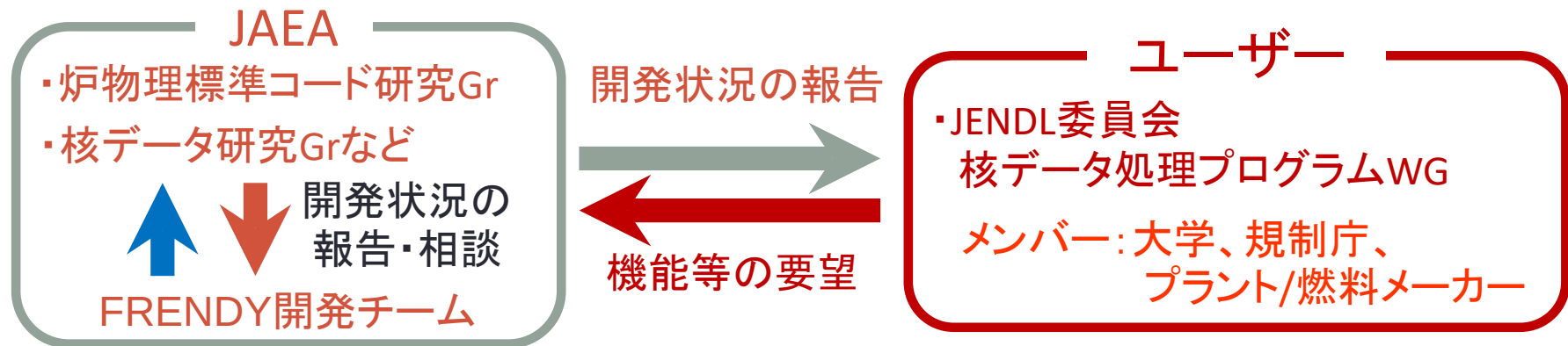
# 輸送計算コードと核データ処理システムの違い

|           | 中性子<br>輸送計算コード                           | 核データ処理<br>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<br>充実し、比較的容易                  | 処理方法を熟知していな<br>ければ適切な入力作成は<br>困難    |
| 妥当性<br>検証 | 体系は画面で確認可能。<br>処理結果の妥当性も他の<br>解析結果から判断可能 | 比較可能な入力例や計算<br>結果が皆無。<br>長年の経験と勘が頼り |
| サポート      | ユーザーが多く、<br>質問しやすい。<br>講習会も適宜実施          | 数名のプロフェッショナル<br>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

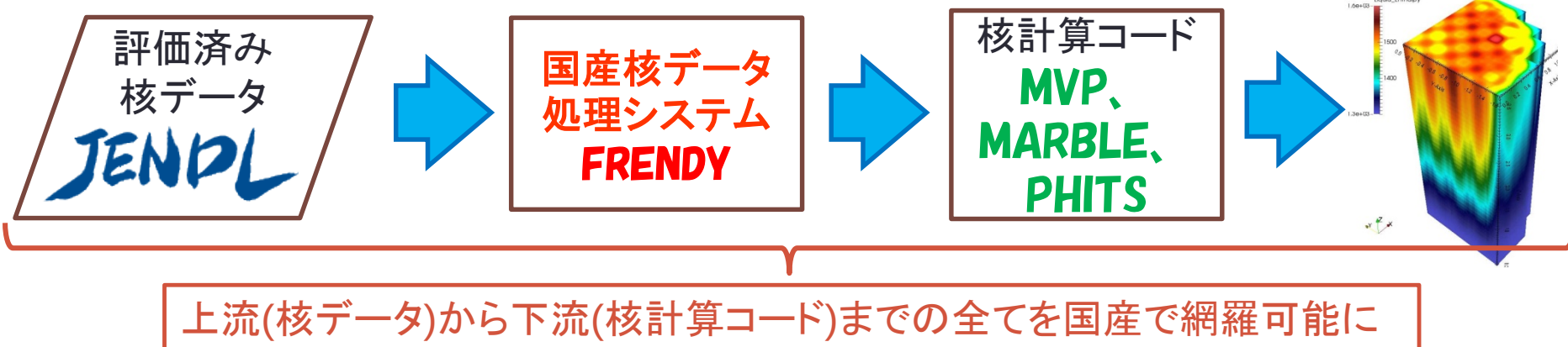
- 世界に先駆けて2013年度より次世代核データ処理システムの開発を開始
  - **FRom Evaluated Nuclear Data librarY to any application**
  - C++を採用することでコードの拡張性や保全性が向上
    - 他のC++コードとの融合や各機能の再利用が容易に
  - テストケースを用いた品質保証
    - 各クラス、各メンバ関数でテストケースを用いた処理の検証を実施
    - テストケースを用いることでコード修正に伴うバグの発見が容易に
  - ユーザーのニーズを逐次反映
    - JENDL委員会経由で産学官の要望を聞き、FRENDY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

## 【FRENDY開発の体制】



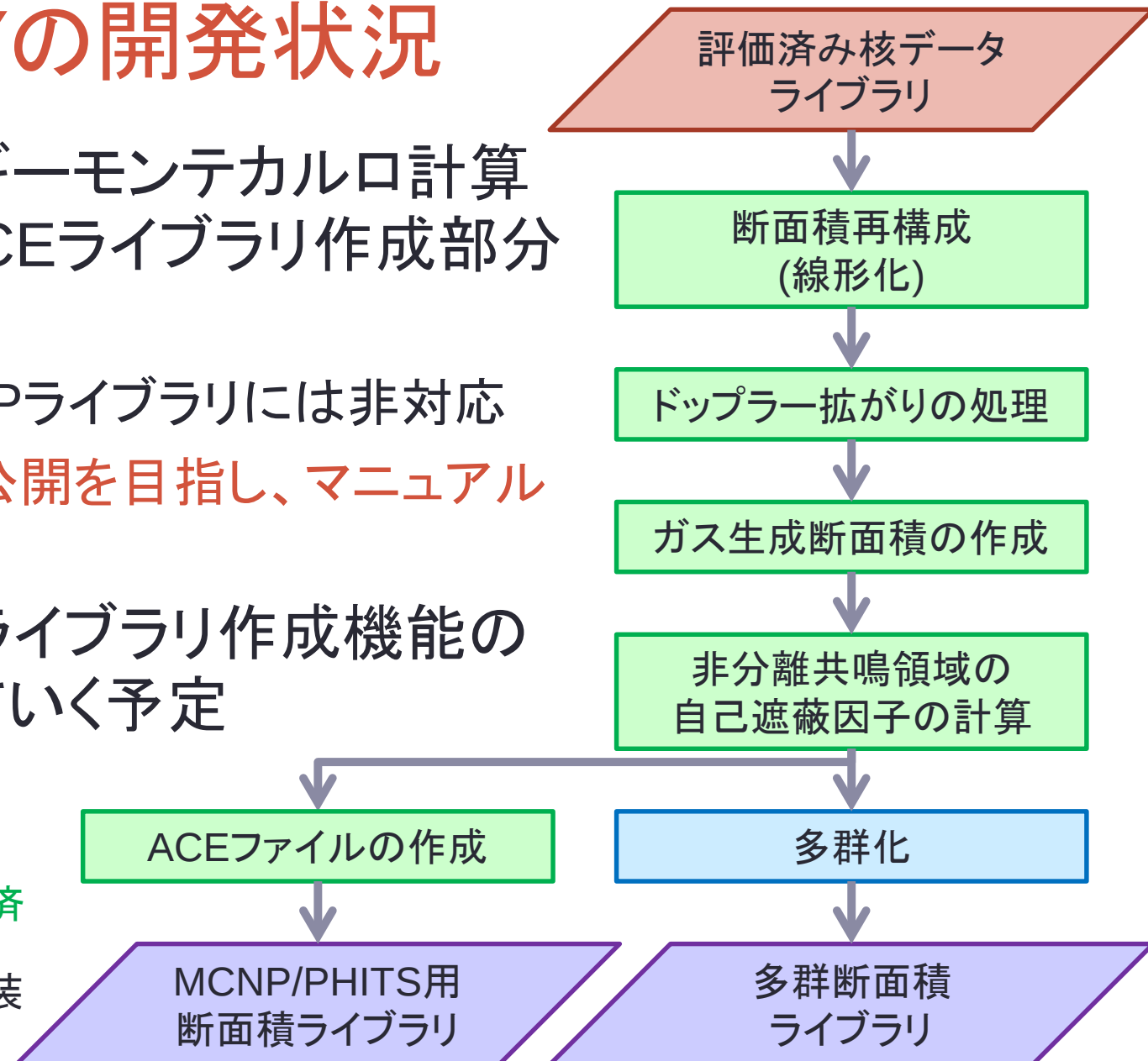
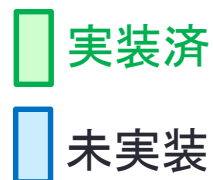
# 核データ処理システムの国産化の利点 —JENDLや核計算コードの信頼性・利便性の向上—

- 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



# FRENDYの開発状況

- 連続エネルギーモンテカルロ計算コード用のACEライブラリ作成部分まで完成
  - 現状ではMVPライブラリには非対応
  - 今年度中の公開を目指し、マニュアル作成中
- 今後は多群ライブラリ作成機能の実装を進めていく予定



# 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

- 小林啓介、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
  - 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>