

JENDL-3.2 に基づく炉定数

中性子 300 群 γ 線 104 群

JSSTD L-300 ライブラリーについて

(JSSTD L 98 version)

日本原子力研究所核データセンター

長谷川 明

hasegawa@cracker.tokai.jaeri.go.jp

1. はじめに

中性子 295 群、 γ 線 104 群の JSSTD L-295 ライブラリーを JENDL-3 について作成してから約 10 年がたつ。このライブラリーが生まれたのは、JENDL-3 が公開のためのベンチマークテストが実施されていた時代で、ポスト JENDL-3 プロジェクトとして何が必要かが議論され、その結果生まれたのが本ライブラリーである。すなわち、今後の JENDL の公開とともに、利用者に広く・共通的に利用できる群定数の提供を目指して作成された。それからずいぶん時間がたってしまった。このライブラリーもその後、筆者の出向や、なにやかやで、JENDL の改定 (JENDL-3.2) があったものの、それに追隨した作成がのびのびになり、核データセンターが中心になって作成を急いだものの、JENDL フォーマットの特殊性 (天然元素の分離、非分離共鳴のつなぎのエネルギーの不一致) に起因する問題で処理コードの修正を余儀なくされ、作成が遅れてしまった。利用を予定していた方々にはお詫び申し上げるしだいである。ともかくも、数多くの人の手を経て現在 β 版が公開中である。正式公開版は、シグマ委員会炉定数専門部会のワーキンググループ：標準炉定数検討委員会での本作業に関する報告書をまとめて公開したいと考えている。炉定数専門部会のワーキンググループでのこのライブラリーに関する活動については、三菱重工の佐々木誠氏による、WG 活動紹介 (核データニュース No.60 1998 年 6 月号) の記事をご覧ください。

2. JSSTD L ライブラリーの概要

このライブラリーの特徴は、高速炉、核融合炉における核計算、遮蔽計算を対象とし

て広く利用されている Sn 計算に利用でき、かつ利用者が国内で使用されているほとんどすべてのエネルギー群構造での計算を可能としていることにある。すなわち、中性子 300 群（当初のライブラリーでは 295 群） γ 線 104 群の詳細ライブラリーから、簡単に各自の利用する群構造でのライブラリーが再定義でき、ライブラリーに付属する巨視断面積作成コードで、Sn 用の巨視断面積を作成し簡単に Sn 計算につながるようにしているということである。そのために、国内利用されているほぼすべてのライブラリーのエネルギー群境界を有している。一言断っておくが、以上の理由から 300 群での利用は、あまり意味がない。いわゆる、一般の詳細ライブラリーがとっているような 300 群の等間隔ではないからである。遮蔽計算に特有であるが、典型的な群構造はそれぞれ利用する対象（炉系）ならびに核種（組成）に従った群の構造が重要となってくる。大きな共鳴のあるところでは、その共鳴の効果が計算にうまく反映されるような群構造を取っていることが必要である。従って、あくまでも自分の利用したい計算対象にあった群構造での利用をお勧めするしだいである。また、このライブラリーは、共鳴のドップラー効果による温度依存性、組成依存性を表す自己遮蔽因子の広範囲のテーブルを内蔵しており、それらを駆使して燃料材、構造材、冷却材の領域依存の実効断面積を計算するようになっている。

また、ライブラリーに付属する Utility として、数多くの計算コードからなるライブラリー処理システムが、FORTRAN ソースで公開されている。ただ、現状当方では、すべて IBM 大型機の上でのみの開発、実行経験であるため、最近の UNIX への移植にあたっては、多少手直しが必要となることもあることをお断りしておく。

また、300 群のライブラリーに関して言うと、公開ライブラリーは、他プラットフォーム（大型機、ワーク・ステーション、パソコン）との移植性向上のため、ASCII イメージのデータで配布しているため、データ量はかなり多い。300 群の中性子ライブラリーは、3 本に分かれており、それぞれ 120MB、104 群の γ 線ライブラリーは一本ではあるが、やはり 100MB となり、それぞれ圧縮しても 20MB を超えるデータ量となっているので、利用にあたっては、解凍の際のディスク容量や ftp での転送時間等にご注意いただきたい。また、ftp でのデータ転送については、常に binary モードでの転送を行ってください。ライブラリーは、UNIX の compress command で圧縮されているからです。

ライブラリーの基本パラメータは、

a: 群数 中性子：300 群 γ 線：104 群

b: 基本荷重関数

熱群 : 1.0E-5 eV から 0.4114 eV まで Maxwell

それ以外 : 0.4114 eV から 20MeV まで 1/E

c: 非等方性 (P1 展開次数)

P₅

散乱マトリックスは、 σ_e (弾性散乱)、 $\sigma_{\text{non-elastic}}$ (弾性散乱外) の2種類にわけて収納している。

d: 共鳴自己遮蔽因子

1. 媒質温度

4点 (Kelvin)

300.K 600.K 900.K 2100.K

テーブル点を外れての外挿は保証しない (300K 以下もしくは 2100K 以上)。

2. σ_0 back ground cross section

0. 0.1773 1.0 10.0 100.0 1000. 1.0E+4 1.0E+5 1.0E+6

3. 考慮する核反応断面積

4 反応

$\sigma_t(\text{total})$ $\sigma_f(\text{fission})$ $\sigma_c(\text{capture: (n, } \gamma \text{) only})$ $\sigma_e(\text{elastic})$

e: 2次 γ 線生成断面積

収容されているデータは

total gamma

capture(MT:102)

fission(MT:18)

other than capture and fission((n,n'), (n,p), (n, α),...)

ここで

total gamma = capture + fission + other than capture and fission

前回のライブラリー (JENDL-3.1) から、今回のライブラリーに移行するにあたり、数多くの問題点がでてきた。以下に今回の主なる改良点について記す。

1. ライブラリーソースを JENDL-3.1 から JENDL-3.2 へ

2. 中性子群数：295 群から 300 群へ

熱群領域が従来の区切りでは粗すぎたため。熱領域に感度のある JASPER 解析でのフィードバック情報による。

3. 基本荷重関数： Maxwell + 1/E を使用。

ただ、JENDL-3.1 までは、Maxwell と 1/E を 0.3224eV でつなげた荷重関数を使用していたが、その後、JENDL-3.2 の非公開版 JSSTD L (295 群構造：1995 年作成) では Maxwell と 1/E の任意位置での結合では不連続となりその境界で断面積にも大きな不連続性を生じることから、結合点を微分値が一致するエネルギー点で結合した。その後、種々の検討から、最新の 300 群ライブラリー (JSSTD L 98version) では

VITAMINE-E の 0.4114eV での結合したライブラリーとすることとした。これは、JENDL-3.1 のライブラリーとほぼ同じ荷重関数となっている。

4. 利用コードについての手直し、Bug fix を行った。

3. JSSTD L ライブラリーの配布

まだ β 版としての位置付けですが、以下の ftp サイトからデータを配布している。このライブラリーおよび関連コード一式は、炉定数専門部会の標準炉定数検討ワーキンググループでまとめている JSSTD L に関する報告書がまとまった段階で公開版へ移行させる予定である。

配布しているライブラリーの FTP サイトでの DIRECTORY 構造を以下記す。

配布 ftp サイト (anonymous)

ftp://ebisu.tokai.jaeri.go.jp IP: 133.53.31.1

JSSTD L directory (/anonymous/JSSTD L/DIST98/配下)

格納ディレクトリー構造

anonymous/JSSTD L/DIST98/lib	ライブラリーが収容されている。
/program/ibm	大型機コード及び JCL & 入力 DATA 例
/program/unix	unix code. 順次拡張中

1) 中性子ライブラリー

1.1 詳細群ライブラリー (300 群)

3 本に分けて格納

/anonymous/JSSTD L/DIST98/lib/lib300

- ・ jsstd300.bcd.lib1a.Z 25 核種 核種表は、表 1.1 参照
- ・ jsstd300.bcd.lib2b.Z 25 核種 核種表は、表 1.1 参照
- ・ jsstd300.bcd.lib3a.Z 25 核種 核種表は、表 1.1 参照

1.2 JSD-100 群タイプ ライブラリー (JSD100 群)

本ライブラリーは 1.1 の詳細ライブラリーを CNDNSJ コードで JSD-100 群に縮約したライブラリーである。(CNDNSJ コードは、program directory から配布していません。)

/anonymous/JSSTD L/DIST98/lib/lib100

- ・ jsstd100.bcd.lib1a.Z 25 核種 核種表は、表 1.1 参照
- ・ jsstd100.bcd.lib2b.Z 25 核種 核種表は、表 1.1 参照

・jsstd100.bcd.lib3a.Z 25 核種 核種表は、表 1.1 参照

1.3 その他 100 群タイプ ワーキングライブラリー (JSD100 群)

その他以下のライブラリーが準備されている。これは、良く使われる核種 50 核種と、最近まで JENDL のフォーマットと処理コードとの関係で未処理であった 4 核種 (Cd-0, Hf-0, Mo-0, Zr-0) からなるライブラリーであり、上記 1.2 から REEDIT コードで再編集したライブラリーです。

本来なら 54 核種として 1 本化すれば良いのであるが、現状ライブラリーの最大核種数が 50 で制限されているため、こうなっている。

/anonymous/JSSTDLDIST98/lib/lib100

・jsstd100.datan.Z 50 核種 核種表は、表 1.2 参照

・jsstd100.add4nucl.Z 4 核種 核種およびコードナンバーは、
(Cd-0: 4800、Hf-0: 7200、Mo-0: 4200、Zr-0: 4000)

いずれにせよ、必要核種からなるワーキングライブラリーは、別途 REEDIT コードを使って各自作成してください (REEDIT コードは、program directory から配布しています)。

2) ガンマ線ライブラリー

2.1 詳細ライブラリー (中性子 300 群 ガンマ線 104 群)

JENDL-3.2 で γ 線のある主要核種を網羅した、40 核種からなるライブラリー。

/anonymous/JSSTDLDIST98/lib/lib300

・jsstd100.g104bcd.Z 40 核種 核種表は、表 2 参照

2.2 縮約ライブラリー (中性子 JSD-100 群、 γ 線 40 群)

2.1 の詳細ライブラリーを CNDNSJG コードで、中性子 JSD-100 群、 γ 線 40 群に縮約したライブラリーで、収容核種は同じく 40 核種である。

/anonymous/JSSTDLDIST98/lib/

・jsstd300.g40new.Z 40 核種 核種表は、表 2 参照

以上 lib の directory は、ほぼすべて UNIX の compress command で圧縮がかけられたファイルが upload されているので、利用者は、解凍のために、UNIX command uncompress を使用して、元に戻してください。

3) プログラム ファイル (JSSTDLD 利用コード群)

3.1 program/ibm directory

3.1.1 中性子ライブラリー用コード

- 1) `cnvjss.f` 中性子ライブラリー `bcd` → `binary` 変換コード **FORTRAN source**
lib directory の `jsstd100.datan`(解凍したファイル)を入力として
バイナリファイル (MACROJ での入力断面積ライブラリー) を作成する。
`cnvjss.jcl` 中性子ライブラリー `bcd` → `binary` 変換コード **JCL & input data**

- 2) `jsstdmp.f` 中性子ライブラリー (binary file)の内容表示コード **FORTRAN source**
データチェック用コード
`jsstdmp.jcl` 中性子ライブラリー (binary file)の内容表示コード **JCL & input data**

- 3) `macroj.f` ANISN,DOT,TORT 用中性子 MACRO 断面積作成コード
領域依存実効断面積作成コード **FORTRAN source**
`macroj.jcl` **JCL sample**
`macroj.tst3.inp` input data sample case1
`macroj.tst4.inp` input data sample case2

- 4) `cndnsj.f` 中性子ライブラリー縮約コード **FORTRAN source**
`cndnsj.jcl` **JCL sample**

3.1.2 γ 線ライブラリー用コード

- 1) `cnvjgg.f` γ 線ライブラリー `bcd` → `binary` 変換コード **FORTRAN source**
lib directory の `jsstd100.g40`(解凍したファイル)を入力としてバイナリ
ファイル (MACROJG での入力断面積ライブラリー) を作成する。
`cnvjgg.jcl` γ 線ライブラリー `bcd` → `binary` 変換コード **JCL & input data**

- 2) `jstgdmf.f` γ 線ライブラリー (binary file)の内容表示コード
FORTRAN source
データチェック用コード
`jstgdmf.jcl` γ 線ライブラリー (binary file)の内容表示コード
JCL & input data

- 3) macrojg.f ANISN, DOT, TORT 用 中性子 γ 線結合 MACRO 断面積作成コード
 領域依存実効断面積作成コード FORTRAN source
- macrojg.jcl JCL sample
 macrojg.tst1.inp input data sample case1
 macrojg.tst2.inp input data sample case2
- 4) jstgcmp.f γ 線ライブラリー (binary file) の内容比較コード FORTRAN source
 データチェック用コード
- jstgcmp.jcl γ 線ライブラリー (binary file) の内容比較コード JCL & input data
- 5) cndnsjg.f γ 線ライブラリー縮約コード FORTRAN source
 cndnsjg.jcl JCL and input sample

3.1.3 中性子/ガンマ線ライブラリー編集コード

- 1) reedit.f 中性子・ガンマ線 binary library の再編集コード。
 必要核種のみからなるワーキング・ライブラリーを作成する。
 これを用いて、領域依存のマクロ断面積を macroj, macrojg で作成する。
- reedit.jcl 中性子 (ガンマ) ライブラリー編集コード
 JCL & input data

3.2 program/unix directory

unix 用コードの directory

IBM 用コードとは、ファイル OPEN の部分のみ異なる

OPEN のためのファイル名の読み込みが入力として付け加えられる。

動作ロジックは、IBM コードとかわりは全くない。

・現在配布しているのは 2 コードのみ。その他は、現在原研計算科学技術推進センターに依頼して作業中であり、完了は平成 11 年度を予定している。

4) 実際の利用の手順

ftp で上記ファイルを入手する。(前にも書きましたが、転送は binary モードでの転送としてください。すなわち、ftp の command で bin と入力してください。)

4.1 中性子ライブラリー (binary) への変換

たとえば以下のような流れとなります。

- 1) BCD File の解凍 `jsstd100.datan.Z` を `jsstd100.datan` へ (`uncompress` 使用)
- 2) 同上 `jsstd100.add4nucl.Z` を `jsstd100.addnucl` へ (`uncompress`)
- 3) `cnvjss` code で BCD ファイルから binary ファイルへ (上記 2files)
- 4) `reedit` code で上記 2 binary file から 1 本のワークファイル (50 核種まで) を作成
- 5) `macroj` code で実効断面積ファイルの作成
- 6) ANISN, DOT, DORT, TORT 等での利用

4.2 γ 線ライブラリー (binary) への変換

- 1) BCD File の解凍 `jsstd100.g40new.Z` を `jsstd100.g40new` へ
(`uncompress` コマンド使用)
- 2) `cnvjgg` code で BCD ファイルから binary ファイルへ
- 3) `macrojg` code で実効断面積ファイルの作成
この時、前に作成した中性子ライブラリー (binary) も必要となります。
- 4) ANISN, DOT, DORT, TORT 等での利用

4. おわりに

今後、順次利用者からの要求に応じて処理核種を増やしていきたいと考えているので、要求のある方は、筆者まで連絡願いたい。すぐ対処できるかどうかはわからないが、できるだけご希望には添いたいと思っている。

現在のライブラリーについて限界もあるのは事実であり、実際、軽水炉に使うためには、 $S(\alpha, \beta)$ や上方散乱の取り扱い、散乱マトリックスに自己遮蔽効果が入らない点、等があるが、これは順次解決していきたいと考えている。特に遮蔽計算に使う場合、ほぼピュアな媒質からなる領域については、 $\sigma_0 = 0$ の断面積を核種毎に別途用意 (マトリックスを含む実効断面積を用意) してそれを使うようにする等で自己遮蔽因子の導入による散乱マトリックスの複雑化も回避できると考えている。

今回配布しているライブラリー、ソフトウェアも完全ではない。機種によってはとまらないなど問題点もまだまだ残っている。しかし、データソースの公開性、開発者の存在、データの再点検の可能性等、外国産のライブラリーにはない利点もかなり存在すると考えている。最初のハードルは高いかも知れないが、利用してくるとかなりのことが簡単になる。

今後のライブラリーについてであるが、個人的には、もう少し進んだ炉定数処理システムを考えていて、ライブラリー作成を問題毎に行っていくようなことが頭にある。パソコンベースでもかなりのことができるようになってきているので、実現させてみたいが、時間との勝負でできるかどうかかわからない。

表1.1 JSSTD中性子ライブラリー JENDL-3.2

JSSTD300.LIB1A		
ORDER	NUCLIDE	CODE
1	H-1	110
2	H-2	120
3	He-3	230
4	He-4	240
5	Li-6	360
6	Li-7	370
7	Be-9	490
8	B-10	500
9	B-11	510
10	C-12	620
11	N-14	740
12	O-16	960
13	F-19	990
14	Na-23	1130
15	Mg-0	1200
16	Al-27	1370
17	Si-0	1400
18	P-31	1510
19	S-0	1600
20	Cl-0	1700
21	Ar-40	1800
22	U-235	9250
23	U-238	9280
24	Pu-239	9490
25	Pu-240	9400

JSSTD300.LIB2B		
ORDER	NUCLIDE	CODE
1	K-0	1900
2	Ca-0	2000
3	Ti-0	2200
4	V-51	2310
5	Cr-0	2400
6	Mn-55	2550
7	Fe-0	2600
8	Co-59	2790
9	Ni-0	2800
10	Cu-0	2900
11	Ga-0	3100
12	Ge-0	3200
13	Zr-0	4000
14	Nb-93	4130
15	Mo-0	4200
16	Cd-0	4800
17	Eu-0	6300
18	Hf-0	7200
19	Ta-181	7310
20	W-0	7400
21	Pb-0	8200
22	U-235	9250
23	U-238	9280
24	Pu-239	9490
25	Pu-240	9400

JSSTD300.LIB3A		
ORDER	NUCLIDE	CODE
1	Bi-209	8390
2	Th-232	9020
3	U-233	9230
4	U-234	9240
5	U-235	9250
6	U-236	9260
7	U-238	9280
8	Np-237	9370
9	Np-239	9390
10	Pu-236	9460
11	Pu-238	9480
12	Pu-239	9490
13	Pu-240	9400
14	Pu-241	9410
15	Pu-242	9420
16	Am-241	9510
17	Am-242m	9520
18	Am-243	9530
19	Cm-242	9620
20	Cm-243	9630
21	Cm-244	9640
22	Cm-245	9650
23	Cm-246	9660
24	Cm-247	9670
25	Cm-248	9680

表 1.2 JSSTD100 50 核種ライブラリー核種表

JSSTD100.DATAN								
ORDER	NUCLIDE	CODE	ORDER	NUCLIDE	CODE	ORDER	NUCLIDE	CODE
1	H-1	110	21	Ar-40	1800	41	U-233	9230
2	H-2	120	22	K-0	1900	42	U-234	9240
3	He-3	230	23	Ca-0	2000	43	U-235	9250
4	He-4	240	24	Ti-0	2200	44	U-236	9260
5	Li-6	360	25	V-51	2310	45	U-238	9280
6	Li-7	370	26	Cr-0	2400	46	Np-237	9370
7	Be-9	490	27	Mn-55	2550	47	Np-239	9390
8	B-10	500	28	Fe-0	2600	48	Pu-240	9400
9	B-11	510	29	Co-59	2790	49	Pu-241	9410
10	C-12	620	30	Ni-0	2800	50	Pu-242	9420
11	N-14	740	31	Cu-0	2900			
12	O-16	960	32	Ga-0	3100			
13	F-19	990	33	Ge-0	3200			
14	Na-23	1130	34	Nb-93	4130			
15	Mg-0	1200	35	Eu-0	6300			
16	Al-27	1370	36	Ta-181	7310			
17	Si-0	1400	37	W-0	7400			
18	P-31	1510	38	Pb-0	8200			
19	S-0	1600	39	Bi-209	8390			
20	Cl-0	1700	40	Th-232	9020			

表 2 JSSTD104 γ 線ライブラリー

JSSTD104G JENDL-3.2					
ORDER	NUCLIDE	CODE	ORDER	NUCLIDE	CODE
1	H-1	110	21	V-51	2310
2	He-3	230	22	Cr-0	2400
3	Li-6	360	23	Mn-55	2550
4	Li-7	370	24	Fe-0	2600
5	Be-9	490	25	Co-59	2790
6	B-10	500	26	Ni-0	2800
7	B-11	510	27	Cu-0	2900
8	C-12	620	28	Zr-0	4000
9	N-14	740	29	Nb-93	4130
10	O-16	960	30	Mo-0	4200
11	F-19	990	31	Cd-0	4800
12	Na-23	1130	32	Eu-0	6300
13	Mg-0	1200	33	Hf-0	7200
14	Al-27	1370	34	Ta-181	7310
15	Si-0	1400	35	W-0	7400
16	P-31	1510	36	Pb-0	8200
17	S-0	1600	37	Bi-209	8390
18	K-0	1900	38	U-235	9250
19	Ca-0	2000	39	U-238	9280
20	Ti-0	2200	40	Pu-239	9490