



2.6 MCNP用断面積自動作成システムの整備

前川 藤夫

日本原子力研究所 東海研究所
物質科学研究部 核融合強力中性子源研究室
E-mail: fujio@fnshp.tokai.jaeri.go.jp

桜井 淳

日本原子力研究所 東海研究所 安全性試験研究センター
E-mail: sakurai@melody.tokai.jaeri.go.jp

(1) 背景及び経緯

原研の核データセンターが中心となり、シグマ研究委員会の活動として日本独自の評価済み核データファイル JENDL (Japanese Evaluated Nuclear Data Library)¹⁾の作成が進められてきた。JENDLには原子力全般の核計算を行うために必要な各種の断面積データが含まれており、現在広く利用されている。一方、米国のロスアラモス国立研究所(以下、LANLと略す)ではモンテカルロ法に基づく連続エネルギー輸送計算コードMCNP²⁾の開発を行っている。このMCNPコードによりJENDLの核データを用いて輸送計算を行うには、やはりLANLで開発されているNJOYコード³⁾によりACE形式と呼ばれるMCNP用断面積ライブラリにデータを変換しなければならない。

JENDLの最新バージョンはJENDL-3.2¹⁾であり、これに基づくMCNP用断面積ライブラリ“FSXLIB-J3R2”⁴⁾は以前に作成されていて、現在広く使われている。このライブラリでは室温(300度K)の温度条件の下で断面積の共鳴のドップラー処理が行われているため、原則として室温近傍の体系の計算にしか使えない。しかし一部のユーザーから、室温以外の高温、例えば600度Kや900度Kの温度の体系の計算を行いたいという要望が出された。この要望に対処するため、原子力コード評価専門部会の下に「MCNP高温ライブラリ作成ワーキンググループ」が設立され、平成10年度から活動を開始した。ワーキンググループでは平成10年内に3回の会合を開き、ライブラリ作成の進め方について討議した。初めに、作成する高温ライブラリの主な仕様として、以下の項目を設定した。

- (a) 近い将来に公開されるJENDL-3.3に基づくライブラリを作成する。
- (b) 平成10年春に実施された高温ライブラリ用核種・温度に関するアンケート結果に基づいてライブラリに含める核種及び温度を決定する。

一方、原研の計算科学推進センターから、平成10年度に限りライブラリ作成に対して支援が行われることとなった。ここで、上記の2つの仕様を満たすライブラリを作成することに関し、いくつかの困難が生じた。まず、JENDL-3.3の公開は2000年とされており、計算科学推進センターの支援がある平成10年度内には利用できないため、仕様(a)を満たせない。また、仕様(b)により必要な核種及び温度を選択してライブラリを作成した場合、それ以外の核種や温度による計算をユーザーが希望した場合に対処できない。

そこで、上記の仕様(a)、(b)に基づく高温ライブラリを作成する代わりに、ユーザーが任意の温度で任意の核種を選択して簡易にMCNP用断面積ライブラリを作成できるシステム「MCNP用断面積自動作成システム」を整備するに至った。

JENDL-3.2には340核種に対して断面積データが与えられており、仮にこの340核種すべてをNJOYコードで処理するとなると、340個の入力データを作成し、340回NJOYを実行し、340個の出力結果をまとめなければならず、多大な労力を必要とする。また、米国で開発されているNJOYコードは米国産の評価済み核データファイルはほぼ問題なく処理できるが、日本のJENDLの中にはいくつか処理を行えないデータが存在する。そこで本システムは、最小限の労力で、既存のJENDL-3.2のデータすべてを問題なく処理して、1つのMCNPライブラリとしてまとめあげることが出来るものとした。このシステムにより、高温ライブラリを必要とするユーザーは、必要な任意の温度において任意の核種を含むJENDL-3.2に基づくMCNP用断面積ライブラリを容易に作成できることになる。

(2) MCNP用断面積自動作成システム

MCNP用断面積作成編集システム“autonj”の構成図を図1に示す。図1では、実行モジュール部を太線の四角で、データとファイルを角の丸い四角で表してある。このシステムは以下の5つの実行モジュール（FORTRANプログラム）から成り、Cシェルスクリプトで記述されている。

(a) 核データファイル中の核種識別モジュール [MATLIST]

ユーザーにより指定された核データファイル中の核種のMAT番号とファイル名のリストテーブルを作成する。このリストに従ってNJOY97の核種ループが回る。

(b) NJOY97入力データ作成モジュール [NJ-INP]

ユーザーの指定した処理条件でACE形式断面積ファイルを作成するためのNJOY97入力データを核種毎に作成する。

(c) NJOY97モジュール [NJOY97]

NJOYコードを実行し、核種ごとに検索ファイルxsdirとtype-1形式のACE形式断面積ファイルを作成する。使用したNJOYコードのバージョンは1998年11月23日にLANL/T-2のWWWホームページ上で公開されたNJOY 97.45である。

(d) type-1形式編集モジュール [MKXSDIR]

核種毎に作成された検索ファイルxmdirとACE形式断面積ファイル (type-1形式) からそれらをまとめたtype-1形式のMCNP用断面積ライブラリーを作成する。

(e) MAKXSFモジュール [MAKXSF]

ユーザーがライブラリーの形式としてtype-2を指定した場合に、type-1形式のライブラリーをtype-2形式に変換する。

バイナリデータであるtype-2形式MCNPライブラリーを除き、図1中のファイルはすべてテキストデータである。

autonjシステムでMCNP用ライブラリーを作成するために必要な入力データは以下のとおりである。(なお、本稿執筆段階において本システムは未完成であるため、完成版では多少の変更があり得る。)

- (a) 実行する計算機環境・・・HPとSUNの2種類
- (b) 処理条件入力データの入力形式・・・会話形式とファイル形式
- (c) NJOY97出力リストファイルの保存・・・保存と保存せず
- (d) 処理を行う核データファイルの計算機上のファイル名・・・複数のファイルが指定可能で、ディレクトリ名も指定できる (ディレクトリ名の場合、その中の全ファイルが処理対象となる)
- (e) 処理を行う核種の物質番号 (MAT番号)・・・複数のMAT番号が指定可能で、指定無しの場合は(d)で指定したファイル中の全核種が対象となる
- (f) 断面積処理温度・・・Kと℃ {暗黙値= 293 K @ 20℃}
- (g) ライブラリー識別番号・・・ZAIDのid番号で、2桁の整数 {暗黙値=38}
- (h) ライブラリー共通タイトル・・・最大62文字の任意の文字列
{暗黙値='jendl-3.2 with njoy97'}
- (i) 作成するMCNP用断面積ライブラリーの形式・・・type-1, type-2, type-1&type-2 から選択 {暗黙値=type-2}
- (j) 作成するMCNP用断面積ライブラリー名・・・最大7文字の任意な名称 {暗黙値='fsxlb32'}
- (k) 作成するMCNP用断面積ライブラリーの検索ファイル名・・・任意な名称 {暗黙値='xmdir.fsxlb321' ; 下線部は(i)の形式と(j)の名称に依存}

処理条件入力データファイルに含まれるのは、上記の(d)～(h)である。それ以外は、会話形式でデータを入力する必要がある。図2に、autonjの実行例を示す。

(3) ベンチマーク計算

今回整備したMCNP用断面積自動作成システムにより作成したJENDL-3.2に基づくMCNP用ライブラリが正常に動作し、また正しい結果を与えるかどうかを確認するため、ベンチマーク計算を実施した。ベンチマーク問題として、核分裂や核融合の分野から5題を選定した。これらの問題につき、以前に作成されたJENDL-3.2に基づくライブラリFSXLIB-J3R2及び今回同じくJENDL-3.2から作成したライブラリを用い、ライブラリの違い以外は全く同一のMCNPの入力データを用いて計算を行い、両者を比較した。

その結果、核分裂炉の臨界計算では、モンテカルロ計算の統計誤差を考慮すればお互いに一致する実効増倍率を得た。図3、4には核融合炉のためのベンチマーク実験⁵⁻⁷⁾の解析例を2つ示す。これらはそれぞれ中性子及び γ 線スペクトルであるが、どちらの場合も2つの計算結果は見分けが付かないほどに良く一致している。以上のベンチマーク計算から、今回作成したシステムにより作成したライブラリが正常であることを確認した。

(4) 将来計画

本システムは、平成11年1月末に完成予定である。その後、いくつかの典型的な温度点において実際に高温ライブラリを作成し、これらを原研の登録プログラムとして外部に公開する予定である。また、計算科学推進センターの協力を得て、同センターの計算機上でも本システム及び作成した高温ライブラリを利用可能にする予定である。平成11年度には、これらの作業を包括したレポートを作成する予定である。

(5) 謝 辞

本システムを作成するにあたり様々な議論をしていただき、また貴重なご意見をいただいた原子力コード評価専門部会、MCNP高温ライブラリ作成ワーキンググループのメンバーの方々に感謝いたします。本システム作成にあたり多大なご支援をいただいた計算科学推進センター情報システム管理課の藤井実課長に感謝いたします。

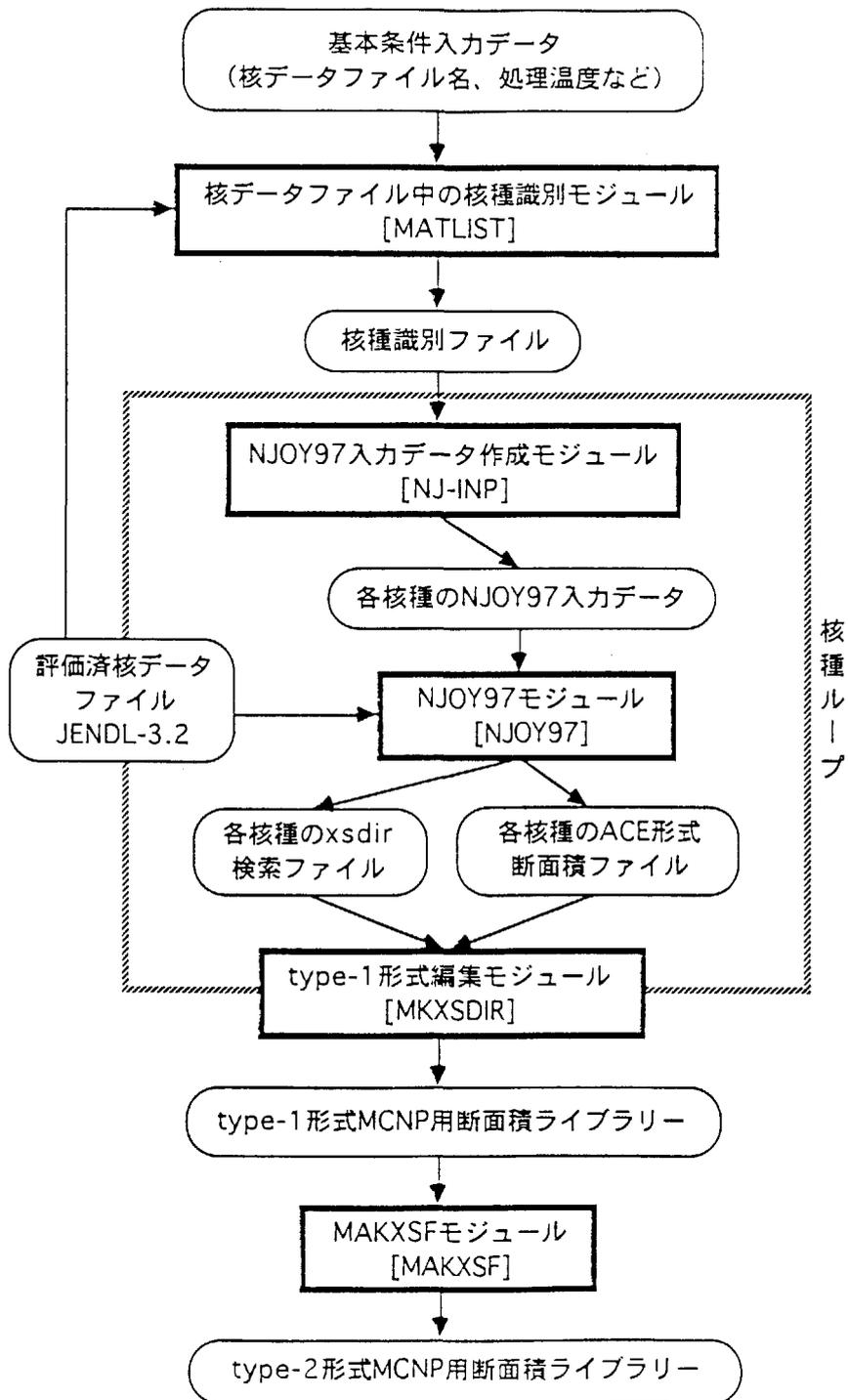


図1 MCNP用断面積自動作成システムの構成図.

```

$ autonj.sh

:.....
autonj ..... automatic production system of a mcnp cross section
                library from JENDL by the NJOY97 code.
:.....

Please select your computer environment.
  HP = HP9000-series, HP-C-series
  SUN = Sun SparcStation4/5
=====> HP

Please select an input mode.
  0 = input from a file.
  1 = interactive input on this terminal.
=====> 1

Please select one of options for disk space (or producing files).
  0 = minimum disk size (mcnp library)
  1 = medium disk size (mcnp library and output list)
  2 = maximum disk size (library, list and ace file)
(maximum size is about 1.4 GB for JENDL-3.2.)
(If blank, default size is minimum.)
=====> 0

Please enter the path name where JENDL file are located.
(When you finish entering all file names, please enter a blank.)
(If a directory name is given, all files in the directory are
 processed. Only one directory name is allowed. The last
 character must not be a slash (/).)
=====> J3R2
      list of files in the directory above
      J3R2/j32f6301
      J3R2/j32f6302
      J3R2/j32f6303
      J3R2/j32f6304
      J3R2/j32f6305
      J3R2/j32f6306
      J3R2/j32f6307
      J3R2/j32f6308
      J3R2/j32f6309
      J3R2/j32f6310
      J3R2/j32f6311
      J3R2/j32f6312
      J3R2/j32f6313
      J3R2/j32f6314

Please enter the MAT numbers of nuclides that you want to process.
(If blank, all nuclides contained in the specified files are processed.)
=====>

```

図2 MCNP用断面積自動作成システムの実行例。(1/2)

```

Please enter the processing temperature with NJOY97.
(If blank, default temperature is 293 K.)
(for example: 300      <--- 300 kelvin)
(
                27C      <--- 27 celsius = 300.15 K)
=====>

Please enter a library identification number in zaid for MCNP.
(It corresponds to the "suff" parameter in input data of NJOY/ACER.)
(It must be integer with two degits.)
(If blank, default identification number is 38. (If Fe, 26000.38c))
=====>

Please enter a tolerance of pointwise cross section data.
(The unit of tolerance is [%].)
(If blank, default tolerance is 0.2 %.)
=====>

Please enter the maximum number of discrete gamma-ray energies.
(It must be less than 1000 for MCNP-4B or 200 for the previous version.)
(If blank, default number is 1000.)
=====>

Please enter a title to be labeled in the library.
(It will be a part of the "hk" in input data of NJOY/ACER.)
(Maximum 62 characters.)
(Blank characters can not be used. Please replace blank characters
 with cap (^).)
(If blank, default title is "JENDL-3.2 with NJOY97".)
(for example: jendl-3.2^with^njoy97 )
                (...+...1...+...2...+...3...+...4...+...5...+...6...)
=====>

Please enter types of MCNP cross section library.
(If blank, default type of library is Type-2.)
 1 = Type-1 (text format)
 2 = Type-2 (binary format)
12 = Type-1 and Type-2
=====>

Please enter a file name of the MCNP cross section library.
(Maximum 7 characters.)
(When the given name is "fsxlib2", the complete name is "fsxlib21",
 if it is Type-1.)
(If blank, default library name is "fsxlib32".)
=====>

Please enter a file name of the directory file for the library.
(If blank, default library name is "xmdir.fsxlib322".)
=====>

```

図2 MCNP用断面積自動作成システムの実行例。(2/2)

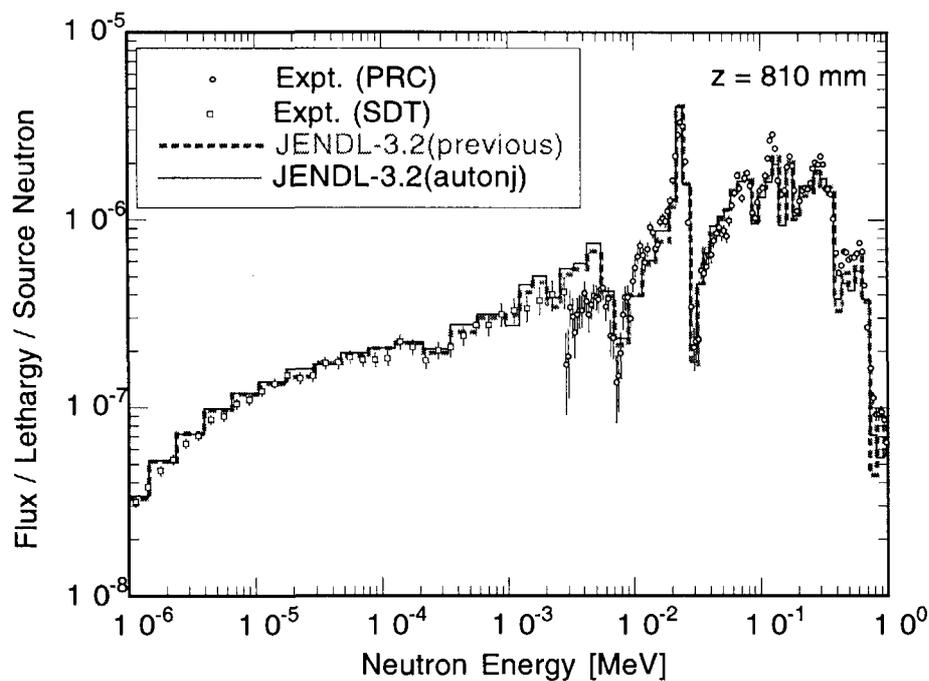


図3 鉄体系中の中性子スペクトルのベンチマーク計算例.

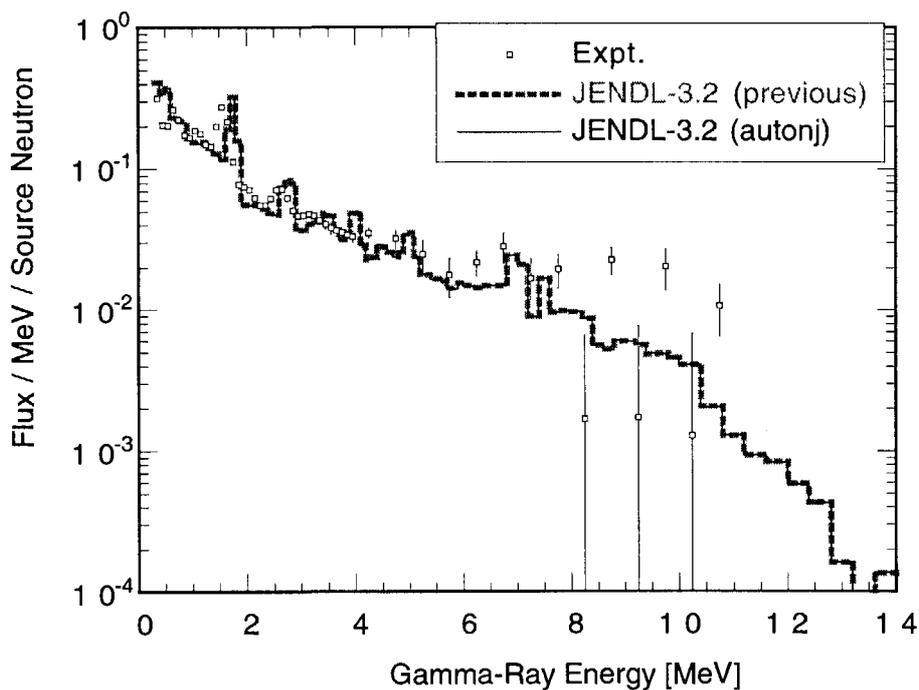


図4 珪素球からの漏洩 γ 線スペクトルのベンチマーク計算例.

参考文献

- 1) 内藤・桜井編:原子力研究におけるMCNPの使用経験、JAERI-Review 97-003(1997)
- 2) 桜井・山本編:原子力研究におけるMCNPの使用経験(II)-分散低減法の検討-, JAERI-Review 98-010(1998)