

木綿豆腐コードのマニュアル

千葉豪

平成 28 年 7 月 23 日

1 はじめに

木綿豆腐コードは、そもそも炉物理計算に用いる確率テーブルを作成するために開発された MOMENTOF コード [1] をベースに開発されたものであるが、ENDF 形式¹ で記述された種々のデータを読み取る機能が備えられており、いろいろと便利なので、その機能のいくつかを解説する。

2 インストール方法

まずはパッケージ「momentof.tgz」を解凍する。「.tgz」ファイルは、ディレクトリがひとつのファイルに固められ（「tar」コマンドによる）かつ圧縮された（「gzip」コマンドによる）ファイルである。このファイルを解凍すると、もとのディレクトリ構造が復活する。tgz ファイルを解凍するためには、「tar xvfz momentof.tgz」と打ち込めばよい。

tgz ファイル解凍後は「momentof」なるディレクトリが生成される筈なので、そのディレクトリに移動する（「cd momentof」）。木綿豆腐は FORTRAN で記述されたプログラムであるので、コンパイルを行い、実行形式（ロードモジュール）を作成しなければならない。コンパイル方法はディレクトリ「momentof」の「@ReadMe」ファイルに記述されているので、それに従って作業を行う。コンパイルが成功した場合、ディレクトリ「momentof」にロードモジュール「momentof.lm」が生成されるので、そのファイルが存在することを確認する²。

3 ポイントワイズ断面積データの読み込み

評価済み核データファイルには様々な種類がある。そのうち、中性子と原子核との反応確率（断面積）を記述するものが「汎用評価済み核データファイル（General purpose evaluated

¹実験データや核模型計算により核データの尤も確からしい値を決めることを「評価」といい、評価された核データをファイル化したものを「評価済み核データファイル（Evaluated nuclear data file）」と呼ぶ。その代表的なものとして挙げられるものが米国が開発した ENDF であり、最新のバージョンは ENDF/B-VII.1 となっている。ENDF では、データの記述方法に厳密なルールが定められており、そのルール、形式を「ENDF 形式」「ENDF フォーマット」と呼ぶ。欧州の評価済み核データファイル JEFF や日本のファイル JENDL は、いずれも ENDF 形式を採用してデータを記述しており、ENDF 形式が現在の世界標準となっている。

²コンパイラ gfortran がインストールされていない場合には、「sudo apt-get install gfortran」でインストールすること。

nuclear data file)」と呼ばれているものである³。汎用ファイルには、中性子捕獲、核分裂、弾性散乱といった種々の反応の断面積が定義されている。それらの断面積は中性子の入射エネルギーに依存するため、中性子入射エネルギーに応じて断面積が定義されている。詳細なエネルギー点に対して断面積を定義したファイルを「ポイントワズデータファイル (point-wise ENDF, PENDF)」と読んでいる。その例として、「momentof/PENDF」ディレクトリに「Pu241.t0269.dat」というファイルがある。これは評価済み核データファイル JENDL-4.0 の Pu-241 データの PENDF ファイルである。試しに開いてみてほしい (vi, emacs 等、適当なエディタで)。おそらく、大量の数字が羅列されていることのみが分かるであろう。このデータから必要なデータを読み取ることは、よほどの熟練者でないと難しい。

木綿豆腐コードは PENDF で記述されているデータから、ユーザが必要とする反応の断面積データを取り出す機能を持つ。試しに、「Sample」ディレクトリのシェルスクリプト「go.pdf.sh」を実行してみるとよい (「./go.pdf.sh」⁴)。すると、同じディレクトリに「output.pdf」なるファイルが生成されたことが分かる。この「output.pdf」ファイルを開くと数字のペアが並んでいることが分かるであろう。この数字のペアは、中性子の入射エネルギーと反応断面積に対応している。このテキストデータを Excel 等にもっていけば、断面積と入射エネルギーの関係を示した図を得ることができる (Gnuplot を使えば非常に簡単)。

なお、この処理で取り出した断面積は「弾性散乱反応」のものである。取り出したい断面積の種類を指定するのは「go.pdf.sh」の入力ファイル「input.pdf」である。このファイルの 4 行目の最初の数値が反応の種類を決めるものであり、「2」は弾性散乱反応に該当する。この数値は ENDF フォーマットでは「MT 番号」と呼ばれる。MT 番号と反応の種類の対応の主なものについて Table 1 にまとめる。MT として 451 を指定することにより、 η 値を取り出すことができる。また、MT として 42 を指定したときに取り出される弾性散乱断面積 P1 係数は、弾性散乱反応の平均散乱角余弦 $\bar{\mu}$ に他ならない。

Table 1: MT number and its corresponding reaction type in the ENDF format

MT	Reaction type
1	Total (全反応)
2	Elastic scattering (弾性散乱)
4	Inelasctic scattering (非弾性散乱)
16	(n,2n)
18	Fission (核分裂)
102	Capture (中性子捕獲)
452	The number of neutrons by fission reaction (核分裂あたりの中性子発生数)
451	η -value ($\nu\sigma_f/\sigma_a$) (η 値)
42	P1 Legendre coefficient of elastic scattering (弾性散乱断面積 P1 係数)

³その他にも、原子核の崩壊様式を記述する「崩壊データファイル」、核分裂で発生する核分裂生成物核種の数を定義する「核分裂収率データファイル」、光子と原子の反応確率を記述する「光子-原子データファイル」などがある。

⁴このファイルが実行可能となっていない場合には、「chmod +x go.pdf.sh」により、実行可能なファイルにする必要がある。

Pu-241 の種々の反応断面積をプロットし、各々の特徴について観察するとよいであろう。

また、「go.pdf.sh」では、PENDF ディレクトリの「Pu241.t0269.dat」ファイルを入力として読み込んでいるが、異なるファイルのデータを読み込むことも可能である。読み込む入力ファイルは「go.pdf.sh」の一行目で指定しているため、その部分を変更すればよい。

H-1 の弾性散乱断面積、中性子捕獲断面積をプロットしてみよ。

H-1 と H-2 の中性子捕獲断面積をプロットし、比較してみよ。

H-1 と Xe-135 の中性子捕獲断面積をプロットし、比較してみよ。

なお、このように PENDF ファイルから必要なデータを抽出する処理は、木綿豆腐コードにキーワード「WRTPDF」を与えることで行われる。このキーワードは入力ファイルで与えられる。例えば「input.pdf」ファイルを眺めると、二行目に「WRTPDF」が記述されていることが分かるであろう。

4 多群無限希釈断面積の計算

木綿豆腐コードには、ポイントワイズ断面積データから多群形式の断面積データを作成する機能がある。

多群の無限希釈断面積は以下の式で計算される。

$$\sigma_g = \frac{\int_{E \in g} \sigma(E)W(E)dE}{\int_{E \in g} W(E)dE} \quad (1)$$

ここで $W(E)$ は重み関数であり、いくつかの種類を指定することができる。

試しに、「Sample」ディレクトリのシェルスクリプト「go.inf.sh」を実行してみよう。これを実行すると、Pu-241 の SRAC107 群構造での多群無限希釈断面積が表形式で与えられるファイル「output_inf」が生成されるであろう。また、他で活用しやすいように、数値データの羅列が「siginf」ファイルに与えられる。

無限希釈断面積を計算する核種を変更するときは、「go.inf.sh」ファイルの 1 行目で指定する PENDF ファイルを変更すればよい。また、多群の構造を変更するときは、「input_inf」ファイルの 3 行目の数字のペアを変更すればよい⁵。

Pu-241 の核分裂断面積について、連続エネルギーのものと SRAC の 107 群構造のもの、VITAMIN-J の 175 群構造のものを同一の図に示してみよ。

⁵SRAC107 群の場合は「107」と「4」の組み合わせだが、JFS-70 群の場合には「70」と「1」、VITAMIN-J の 175 群の場合には「175」と「2」を与えればよい。

5 核分裂収率データの読み込み

U-235、Pu-239 といった核分裂性核種 (fissile) が核分裂した場合、様々な種類の核分裂生成物核種が、ある確率分布 (収率) をもって生成する。この分布は核分裂性核種によっても異なり、また、核分裂を起こした中性子のエネルギーによっても異なる。核分裂収率を定義するものが核分裂収率データファイル (Fission yields data file) である。

核分裂収率には、「独立収率 (Independent yield)」と「累積収率 (Cumulative yield)」の二種類がある。前者は核分裂反応によりその核種が「直接」発生する量を示すのに対して、後者は核分裂反応で発生した様々な核種の崩壊の結果、その核種が発生する量を示す。従って、独立収率は累積収率よりも小さい。また、全ての核分裂生成物核種について独立収率の和をとった場合は2近傍の値をとるが (一般的に核分裂反応により原子核はふたつに分裂するため) 累積収率の和をとった場合はそのようにはならない。

木綿豆腐コードは核分裂収率データファイルを読み込み、人間が判読しやすい形式に出力する機能を有する。そのための実行シェルスクリプトが「Sample/go.fy.sh」に与えられている。このシェルスクリプトでは、「Files」ディレクトリに与えられている JENDL/FPY-2011 の U-235 のファイルからデータを読み出す。インプットはシェルに直接与えられている。その内容は極めて簡単であり、まずキーワード「READFY」により Fission yields data の読み込む処理を行うことを宣言する (その機能をもつモジュールを呼び出す)。その次の行には数値 (「454」) が与えられているが、ここでは読み込むデータの種類を指定する (独立収率では「454」、累積収率では「459」)。

シェルスクリプト「go.fy.sh」を実行すると、画面上に結果が出力されるため、ファイルに落とすようにする (「./go.fy.sh > output」等)。中性子の入射エネルギーに応じた核分裂収率データが判読しやすい形式で出力されているであろう。なお、出力中の「G/M」は基底状態 (ground) か励起状態 (excited) かを示す数値であり、「0」では ground、それ以外が excited に対応する。

5.1 核分裂収率データのテキスト出力

燃焼チェーンの構築等に必要となるデータをテキスト形式で論理機番7に出力する機能も有する⁶。ソースコードの出力該当部を以下に示す。「le1」は収率データが評価された中性子の入射エネルギー点数である。各入射エネルギー点毎に、入射エネルギー (「e」)、核分裂生成物核種の数 (「nfp」) が与えられ、さらに核分裂生成物核種毎に、原子番号 (「iz」)、質量数 (「ia」)、励起準位 (「ist」)、核分裂収率 (「yc」) とその絶対標準偏差 (「dyc」) が与えられる。

Listing 1: 論理機番7への核分裂収率データの出力処理部分

```
1 io2=7
2 write(io2,*) le1
3 do ie = 1 , le1
4   write(io2,*) e
5   write(io2,*) nfp
6   do i = 1 , nfp
```

⁶このテキスト形式のファイルは CBZ/BurnupChainGenerator モジュールの入力のひとつとして利用される。

```

7      write(io2,*) iz
8      write(io2,*) ia
9      write(io2,*) ist
10     write(io2,*) yc
11     write(io2,*) dyc
12     enddo
13     enddo

```

6 崩壊データの読み込み

一部の安定な原子核を除いて、大多数の原子核は崩壊により別の原子核に変わる。崩壊の半減期や、崩壊様式 (α 崩壊、 β 崩壊、等) を記述するデータファイルが崩壊データファイル (Decay data file) である。

木綿豆腐コードでは、「READDD」により、崩壊データを読み込み、人間が判読しやすい形式に出力することができる。シェルスクリプトの例として「Sample/go.dd.sh」がある。このシェルスクリプトでは、「Files」ディレクトリに与えられている JENDL/FPD-2011 の I-138 のファイルからデータを読み出す。これを実行すると、画面上に結果が出力されるため、前節で述べたように、「./go.dd.sh > output」等によりファイルに落とすとよいであろう。

出力の最初の部分に、データの読み方に関する説明が記載されているので、それを参照するとよい。

その後、読み込んだ Decay data file に定義されている全ての原子核について、原子核毎に、半減期、崩壊様式、崩壊の際に放出されるエネルギーが出力される。崩壊の際に放出されるエネルギーとしては E_{LP} 、 E_{EM} 、 E_{HP} に分類されており、それぞれ、ベータ線、ガンマ線、アルファ線のエネルギーに対応している。また、「Decay channel」以下では、ふたつめの (欄の) 数値は崩壊によって放出される粒子を示している。例えば、「1550000」が与えられている場合は、ベータ線 (「1」に対応) が一本、中性子 (「5」に対応) が二個放出されることになる (この数値がどの粒子に対応するかは、出力の冒頭部分に説明がある)。原子核によっては複数の崩壊様式をもつ場合があり、その数が「Decay channel」の数に対応する。三つめの (欄の) 数値は、そのチャンネルで崩壊する割合 (分岐比) を示しており、その後には、崩壊後の原子核の情報 (元素記号、原子番号、質量数、励起準位) が記載されている。

6.1 崩壊データのテキスト出力

燃焼チェーンの構築等に必要となるデータをテキスト形式で論理機番 7 に出力する機能も有する⁷。ソースコードの出力該当部を以下に示す。下記の処理が原子核毎に行なわれ、ファイルの最後には「-1」が出力される。「t」は半減期 (単位は秒)、「elp」「eem」「ehp」はそれぞれ崩壊エネルギーを示し、それらの頭に「d」がついたものは絶対標準偏差を示す。また、「ndk」は崩壊チャンネルの総数に対応しており、崩壊チャンネル毎に、そのチャンネルへの分岐比 (br) とその絶対標準偏差 (dbr)、崩壊後の原子核の原子番号 (iz2)、質量数 (ia2)、励起準位 (irfs)、さらに崩壊により発生する中性子数 (idn) が出力される。

⁷このテキスト形式のファイルは CBZ/BurnupChainGenerator モジュールの入力のひとつとして利用される。

Listing 2: 論理機番 7 への崩壊データの出力処理部分

```

1      io2=7
2      write(io2,*) iz
3      write(io2,*) ia
4      write(io2,*) liso
5      write(io2,*) awr
6      write(io2,*) t
7      write(io2,*) dt
8      write(io2,*) elp
9      write(io2,*) delp
10     write(io2,*) eem
11     write(io2,*) deem
12     write(io2,*) ehp
13     write(io2,*) dehpc
14     write(io2,*) lis
15     write(io2,*) ndk
16 c
17     do i = 1 , ndk
18         write(io2, '(1pe22.15)') br
19         write(io2, '(1pe22.15)') dbr
20         write(io2,*) iz2
21         write(io2,*) ia2
22         write(io2,*) irfs
23         write(io2,*) idn
24     enddo

```

6.2 崩壊により発生するガンマ線と中性子のエネルギースペクトルの出力

さらに高度な使い方として、READDD モジュールは、崩壊により発生するガンマ線と中性子のエネルギースペクトルを出力することができる。

入力において、READDD モジュールを起動させるためのキーワード「READDD」の次の行には通常「0」を指定しておくが、この値を「1」にすると、放出放射線のエネルギースペクトル出力機能が動作する。なお、出力されるスペクトルは多群化されるため、さらに次の行に、エネルギー群数とエネルギー群構造を指定するパラメータ⁸を入力する必要がある。

計算結果は論理機番 6 に出力されるとともに、ガンマ線については論理機番 9、中性子については 10 に、それぞれシンプルなフォーマットで出力される。

参考文献

- [1] 千葉豪：”サブグループパラメータ計算コード MOMENTOF の開発,” JNC TN9400 2003-074, 核燃料サイクル開発機構 (2003).

⁸1 が JFS-3 の 70 群、2 が VITAMIN-J の 175 群、4 が SRAC の 107 群、5 がガンマ線用の 42 群である。