

CBZLIB の概要と利用マニュアル¹

千葉 豪

共鳴自己遮蔽効果の評価（実効断面積の計算）に関しては、メモ「共鳴自己遮蔽効果と実効断面積」において解説しているので、そちらを参照されたい。また、熱中性子炉用の CBZLIB の技術的詳細については文献 [1] にまとめられている。

1 概要

多群断面積ライブラリ CBZLIB 関連のクラスは、ソースコードの LibData.h、LibData.cxx に実装されている。

CBZLIB は核種毎に LibData クラスのインスタンスとして定義され、そのインスタンスの集合（LibData クラスのインスタンスをメンバ変数として持つもの）として XSLibrary クラスが定義される。LibData クラスのインスタンスのデータ（CBZLIB の個々の核種データ）は、テキスト形式の外部ファイルに与えられている。以下に、XSLibrary クラスのインスタンスを生成し、外部ファイルから CBZLIB のデータを読み込む例を示す。

Listing 1: CBZLIB の作成例

```
1 string libdir("../CBGLIB/j4.107g.iwt7/");
2 XSLibrary xslib(libdir,"N-ENERGY");
3 string filename[]={ "U234", "U235.U8", "U238.mix", "O016", "A1027", "H001" };
4 xslib.ReadFile(6,libdir,filename);
5 // (thermal data)
6 string libth=libdir+"Thermal/";
7 xslib.GetLibData(10010).GetThScat().ReadFile(libth,"H.H2O");
8 xslib.GetLibData(80160).GetThScat().ReadFile(libth,"O");
```

CBZLIB では、エネルギー群構造や基となる評価済み核データファイルを同一とする核種群をひとつの「ライブラリ」として扱い、そのライブラリの核種データは全て同一のディレクトリに保存されている。ディレクトリ名は基本的に XXX.YYY.ZZZ というように 2 つのピリオドで区切られた形式となっており、一つ目の XXX は基となっている評価済み核データファイルの略称²、二つ目の YYY はライブラリのエネルギー群数、三つ目の ZZZ はライブラリの作成時に用いた重み関数³ にそれぞれ対応する。この例では、JENDL-4.0 ベース、107 群構造のライブラリが 1 行目で指定されたディレクトリに保存されているので、それを読み込んで CBZLIB を作成している。2 行目では XSLibrary クラスのインスタンス xslib を生成している。ここでは 2 行目の引数で指定された名前のファイルを libdir で指定されるディレクトリから読み込んでいく。このファイルには多群断面積の群構造データが収納されていることを想定している。そして 4 行目で 6 つの核種について、外部ファイルからデータを読み込んでいる。5 行目以降は熱中性子散乱データであり、これについてはここでは省略する。

XSLibrary クラスは、エネルギー群構造を定義する GroupData1D クラスのインスタンス enband をメンバ変数として持っている。enband は具体的にはエネルギー群の境界エネルギーを定義しており、エネルギーが高い順に並んでいる。従って、enband のサイズは、エネルギー群数に 1 を足したものとなる。このインスタンスを取り出すメソッドは GetEnband である。例えば g 群の上下限エネルギーを取り出すときは、それぞれ `real etop=xslib.GetEnband().get_dat(g-1)`、`real edwn=xslib.GetEnband().get_dat(g)` となる。

¹ /Document/CBG_Manual/CBZLIB

² 日本の評価済みファイル JENDL の場合は JXX という名称となっており、例えば JENDL-3.3 は J33、JENDL-4.0 は J4 となる。また、米国のファイル ENDF/B の場合は EXX という名称となっており、例えば ENDF/B-VII.0 は E70、ENDF/B-VII.1 は E71 となる。さらに、欧州のファイル JEFF の場合は JFXX という名称となっており、例えば JEFF-3.1 は JF31、JEFF-3.2 は JF32 となる。

³ iwt7 とされているものは、NJOY-99 の iwt オプションを 7 として処理を行ったものであることを示す。

2 多群断面積ライブラリ

核種毎に定義される多群断面積ライブラリデータは大きく分けて四種類あり、それらはファイル名で識別することが出来る。

1. 核種名そのものがファイル名となっているもの (U-235 の場合は U235)。NR 近似に基づいて自己遮蔽因子を作成しており、熱中性子炉の解析に対しては精度が悪い。
2. ファイル名の末尾に「T」がついたもの (U-235 の場合は U235T。これを「T ライブラリ」と呼称する)。中性子束 $\phi(E)$ を連続エネルギー相当の中性子減速計算から求め、自己遮蔽因子を作成している。NR 近似に基づいて作成したライブラリと比べて精度が良い。
3. ファイル名の末尾に他の核種の名前がついたもの (U-235 の場合は U235.U8、U235.P9 など)。T ライブラリと同様に NR 近似を排除し、かつファイル名の末尾に示された核種との共鳴干渉効果を R 因子により考慮している。例えば U235.U8 では U-235 と U-238 との共鳴干渉効果を、U235.P9 では Pu-239 との共鳴干渉効果を考慮している。
4. ファイル名の末尾に「.mix」が付加されたもの。上記 3. のライブラリでは R 因子により共鳴干渉効果を考慮する相手核種が固定されているが、このライブラリではエネルギー群毎に相手核種が異なっている。具体的な相手核種を Table 1 に示す [1]。
5. ファイル名の末尾に「.T2」がついたもの。NR 近似に基づいているが、U-238 の共鳴による中性子束の歪みを自己遮蔽因子計算時の重み関数 $W(E)$ において考慮している [2]。

Table 1: Target nuclides with which resonance interference is taken into account

Nuclide	Target nuclide (Energy group)
Uranium-235	Uranium-238 (All)
Uranium-238	Uranium-235 (57, 58) Plutonium-240 (48 [†] , 50, 51, 53) Plutonium-239 (Other groups, 48 [†])
Plutonium-239	Plutonium-240 (47, 50 [†] , 53 [†]) Plutonium-241 (53 [†] , 54, 55, 56) Plutonium-242 (49) Uranium-238 (Other groups, 50 [†] , 53 [†])
Plutonium-240	Plutonium-239 (47, 50) Uranium-238 (Other groups)
Plutonium-241	Plutonium-239 (52, 54, 55, 56) Americium-241 (59) Uranium-238 (Other groups)
Plutonium-242	Plutonium-239 (49) Americium-241 (61) Uranium-238 (Other groups)
Americium-241	Plutonium-241 (59) Uranium-238 (Other groups)

[†] Multiple resonance interference factors are adopted.

3 多群微視的断面積の表示と値の取り出し

XSLibrary クラスのインスタンスに格納されている多群微視的（無限希釈）断面積の値を表示する、もしくは取り出す方法について説明する。

3.1 表示

多群断面積ライブラリは XSLibrary クラスが保持しており、XSLibrary クラスの ShowCrossSectionData1D メソッドにより多群（無限希釈）断面積を画面に出力することが可能である。このメソッドの引数は対象とする核種の ID である⁴。以下に U-233 の無限希釈断面積を画面に表示させるプログラムの例を示す。

Listing 2: XSLibrary クラスの多群無限希釈断面積の画面表示例

```
1 // xs library
2 string libdir("../CBGLIB/j4.70g.iwt7/");
3 XSLibrary xslib(libdir,"N-ENERGY");
4 string filename[]={
5     "U233","U234","U235","U238","Pu239",
6     "Pu240","Pu241","Pu242","Ga000",
7 };
8 xslib.ReadFile(9,libdir,filename);
9
10 xslib.ShowCrossSectionData1D(922330);
```

また、以下に XSLibrary クラスの ShowCrossSectionData1D メソッドの出力例を示す。一番目の欄の数値が、そのエネルギー群の上限エネルギーを示す。

Listing 3: XSLibrary クラスの多群無限希釈断面積の画面表示例

```
1 #
2 # 1D-data stored in GroupDataSet
3 #
4 #E_up      total      (n,2n)      fission      capture      nu           mu           elastic      chi
5 1.000e+07  6.076e+00  6.186e-01  1.759e+00  1.339e-03  3.662e+00  8.397e-01  2.930e+00  7.086e-03
6 7.788e+06  6.734e+00  3.488e-01  1.397e+00  9.810e-04  3.377e+00  8.488e-01  3.616e+00  1.823e-02
7 6.065e+06  7.469e+00  3.237e-02  1.041e+00  1.169e-03  3.122e+00  8.476e-01  4.259e+00  4.080e-02
8 4.724e+06  7.880e+00  0.000e+00  1.108e+00  2.945e-03  2.950e+00  8.244e-01  4.578e+00  7.009e-02
9 3.679e+06  7.863e+00  0.000e+00  1.183e+00  9.021e-03  2.823e+00  7.747e-01  4.461e+00  9.857e-02
10 2.865e+06  7.562e+00  0.000e+00  1.265e+00  2.313e-02  2.725e+00  6.990e-01  4.027e+00  1.180e-01
11 2.231e+06  7.141e+00  0.000e+00  1.285e+00  4.353e-02  2.651e+00  6.102e-01  3.637e+00  1.223e-01
12 1.738e+06  6.799e+00  0.000e+00  1.246e+00  6.573e-02  2.592e+00  5.417e-01  3.475e+00  1.136e-01
13 1.353e+06  6.723e+00  0.000e+00  1.202e+00  8.793e-02  2.546e+00  5.057e-01  3.623e+00  9.750e-02
```

⁴核種の原子番号を A、質量数を Z、励起レベルを L（基底状態はゼロ）とすると、ID は $A \times 10000 + B \times 10 + L$ で計算される整数となる。例えば、U-233 は原子番号が 92、質量数が 233、励起レベルがゼロ（基底状態）なので 922330 となり、Am-242m は原子番号が 95、質量数が 242、励起レベルが 1 なので 952421 となる。

3.2 値の取り出し

個々の核種に関する核データは LibData クラスで定義されており、XSLibrary クラスのインスタンスは複数の LibData クラスのインスタンスをメンバー変数として保持している。従って、ある核種の核データの情報にアクセスする場合は、XSLibrary クラスから、該当する核種に対応する LibData クラスのインスタンスを呼び出し必要があり、それを行うのが XSLibrary クラスの GetLibData メソッドである。このメソッドの引数は核種の ID が対応する。

LibData クラスは種々の核データの情報を有しているが、微視的断面積については GroupDataSet クラスのインスタンスとして保持している。それにアクセスするための LibData クラスのメソッドが GetXSData である。このメソッドに引数は不要である。

このようにして微視的断面積が定義された GroupDataSet クラスのインスタンスを取り出したあとは、必要としている個々の断面積データにアクセスすればよい。1次元断面積データについては GetData1d メソッド、2次元データ(散乱行列)については GetData2d メソッドを用いる。これらのメソッドの引数は断面積の種類を定義する文字列となっており、対応は以下の Table 2 の通りである。このようにして GroupData1D もしくは 2D クラスのインスタンスにアクセスできる。

Table 2: Reaction of nuclear data which can be perturbed by the CrossSectionPerturbation method

[sigx]	Reaction cross section
nu	$\bar{\nu}$
sigf	(n,f)
sigc	(n, γ)
sigel	(n,n)
siginel	(n,n')
sign2n	(n,2n)
mu	$\bar{\mu}$
chi	χ

XSLibrary クラスのインスタンスが保持する断面積データに対するアクセスの例を以下に示す。

Listing 4: 断面積データへのアクセスの例

```
1 string libdir("/home/chiba/CBGLIB/j4.175g.iwt7/");
2 XSLibrary xslib(libdir,"N-ENERGY");
3 string filename[]={"U235"};
4 xslib.ReadFile(1,libdir,filename);
5
6 xslib.GetLibData(922350).GetXSData().GetData1d(sigc).show_self();
7 xslib.GetLibData(922350).GetXSData().GetData2d(sigel).show_self();
```

4 自己遮蔽因子の表示と値の取り出し

多群微視的断面積データと同様に、LibData クラスが有する自己遮蔽因子データの表示や値の取り出しが可能である。

はじめに自己遮蔽因子テーブルを表示させる例を以下に示す。

Listing 5: 自己遮蔽因子テーブルを表示させる例

```
1 int mtid=4; // 0:(n,f), 1:(n,g), 2:(n,e), 3:CW-total, 4:(n,er)
2 int grp=13;
3 real r_para=0.;
4 xslib.GetLibData(922380).GetFtable().WriteFtableWithSig0Temp(mtid,grp,r_para);
```

CBZLIB では (n,f)、(n,g)、(n,n) 反応に自己遮蔽因子が与えられているが、それに加えて、カレント重み全断面積及び弾性散乱除去断面積の計算用の自己遮蔽因子も与えられている。この例では mtid の数値で出力させる反応を指定しており、ここでは弾性散乱除去反応 (elastic removal) のものが指定されている。この処理を行った際に得られる出力を以下に示す。異なる温度点、背景断面積点での自己遮蔽因子が表形式で出力される。

Listing 6: 自己遮蔽因子テーブルの表示例

```
1 # Reading N-ENERGY data at the directory [../../CBGLIB/j4.107g.iwt7/]
2 #
3 # Sig0      f-factor
4 # Temp.    300.0      800.0      2100.0      4500.0
5 #
6 1.00000e-01 9.69558e-01 9.69558e-01 9.69558e-01 9.69558e-01
7 1.00000e+00 9.72171e-01 9.72171e-01 9.72171e-01 9.72171e-01
8 1.00000e+01 9.85023e-01 9.85023e-01 9.85023e-01 9.85023e-01
9 1.00000e+02 9.97334e-01 9.97334e-01 9.97334e-01 9.97334e-01
10 1.00000e+03 9.99711e-01 9.99711e-01 9.99711e-01 9.99711e-01
11 1.00000e+04 9.99971e-01 9.99971e-01 9.99971e-01 9.99971e-01
12 1.00000e+05 9.99997e-01 9.99997e-01 9.99997e-01 9.99997e-01
13 1.00000e+06 1.00000e+00 1.00000e+00 1.00000e+00 1.00000e+00
14 1.00000e+08 1.00000e+00 1.00000e+00 1.00000e+00 1.00000e+00
15 #
```

次に、自己遮蔽因子の値を取り出したいときの例を以下に示す。

Listing 7: 自己遮蔽因子の値の取り出し例

```
1 int mtid=4; // 0:(n,f), 1:(n,g), 2:(n,e), 3:CW-total, 4:(n,er)
2 int grp=13;
3 real r_para=0.;
4 real temperature=300.; // [K]
5 real sig0=100;
6 real f_factor=xslib.GetLibData(922380).GetFtable().GetF(mtid,grp,0,r_para,temperature,sig0);
```

5 断面積データへの摂動の与え方

ランダムサンプリング法による核データから炉物理パラメータへの誤差伝播計算や、炉物理パラメータの核データに対する感度の直接計算等において、多群断面積ライブラリの断面積の値を直接変化させたい場合がある。そのために、LibData クラスには CrossSectionPerturbation メソッドが実装されている。その利用例を以下に示す。

Listing 8: LibData クラスの CrossSectionPerturbation メソッドの利用例

```
1  int matid=922350;
2  enum xstype sigx=sigf;
3  real r_delta=0.01;
4  xslib.GetLibData(matid).CrossSectionPerturbation(g,sigx,r_delta);
```

この例では、XSLibrary クラスのインスタンス xslib が保持している LibData クラスのインスタンスのうち、核種 ID が 922350 のものに対して CrossSectionPerturbation メソッドを行わせている。このメソッドでは、一つ目の引数に摂動を与えるエネルギー群（「0」が第 1 群になることに注意）、二つ目の引数に摂動を与える核データの種類、三つ目の引数に摂動相対量を与える。この例では摂動相対量として 0.01 が与えられているので、1%の増加が摂動として与えられることになる。

なお、(n,n)、(n,n')、(n,2n) については、与えられた摂動量に応じて散乱行列が規格化される。また、 χ については、入射エネルギー依存の核分裂ベクトルに対しても摂動が与えられるとともに、総和が 1.0 になるように再規格化される。

相対摂動量 δ が与えられたあとに、同一の断面積データを元の値に戻したいときは、 $-\delta/(1+\delta)$ の相対摂動量を与えればよい。

6 多重 R 因子法の適用

文献 [1] に記載されているように、同一エネルギー群において複数の共鳴核種との共鳴干渉効果を考慮するため、CBZ では多重的に R 因子法を適用することが可能となっている。以下に多重 R 因子法を適用した例を示す。

Listing 9: 多重 R 因子法の適用例

```
1 // +++ multiple R-parameter for Cm-244 and U-238 / Cm-244 and Pu-239.
2 XSLibrary xslib2;
3 xslib2.Initialize(libdir,"N-ENERGY");
4 string fname[]={ "U238.P0", "Pu239.U8", "Pu239.P1", "Pu239.P0" };
5 int idtmp[]={1,2,3,4};
6 xslib2.ReadFile(4,libdir,fname,idtmp);
7 xslib.GetLibData(922380).GetFtable().AddData(xslib2.GetLibData(1).GetFtable(),47);
8 // w Pu-240
9 xslib.GetLibData(942390).GetFtable().AddData(xslib2.GetLibData(2).GetFtable(),49);
10 // w U-238
11 xslib2.GetLibData(942390).GetFtable().AddData(xslib2.GetLibData(3).GetFtable(),52);
12 // w Pu-241
13 xslib.GetLibData(942390).GetFtable().AddData(xslib2.GetLibData(4).GetFtable(),52);
14 // w Pu-240
```

同一エネルギー群において複数核種との共鳴干渉効果を考慮させるためには、まず通常の XSLibrary クラスのインスタンスを生成し、断面積ライブラリを読み込ませる。この例では XSLibrary クラスのインスタンス xslib が該当する。この xslib に対して、特定のエネルギー群に異なる共鳴核種との R 因子に依存した自己遮蔽因子テーブルを追加していくことになる。そのため、追加していく断面積ライブラリのデータを格納する XSLibrary クラスのインスタンスを別に作成する。この例では xslib2 が該当する。xslib2 は通常の XSLibrary と同様に断面積ライブラリファイルを ReadFile メソッドにより読み込んでいくが、ここで核種 ID を引数として渡す必要があることに注意が必要である。通常の ReadFile メソッドでは核種 ID を引数として渡す必要はない（読み込んだ断面積ライブラリファイルから自動的に判別する）が、今回の例のように、同一の核種 ID をもつ断面積ライブラリデータが XSLibrary クラスのインスタンスに存在することになる場合には、このような使い方をする⁵。7 行目以降で、特定のエネルギー群に対して、元のライブラリで設定している共鳴核種とは異なる核種との共鳴干渉効果を考慮するための R 因子に依存した自己遮蔽因子テーブルが追加されている。この操作は AddData メソッドで行っているが、この 2 つ目の引数でエネルギー群を指定している（第 g 群の場合は「 $g-1$ 」とすべきことに注意）。

参考文献

- [1] G. Chiba, *et al.*, “Advanced Bondarenko method for resonance self-shielding calculations in deterministic reactor physics code system CBZ,” *Ann. Nucl. Energy*, **96**, p.277-286 (2016).
- [2] G. Chiba, *et al.*, “Sensitivity analysis of fission product concentrations for light water reactor burned fuel,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **47**, p.652-660 (2010).

⁵この例では、Pu-239 のデータが 3 つ XSLibrary クラスのインスタンスに格納されることになる。これらのデータを ReadFile で読み込む際に核種 ID を指定しないと、ID942390 がこれら 3 つのデータに指定されることになってしまう。