

実効増倍率や反応度、反応率など、中性子と原子核との反応に関連する原子炉のパラメータを「核特性パラメータ」と呼ぶ。本稿は、CBZを用いた核特性パラメータの感度解析や、不確かさの定量化方法について解説する。感度解析、不確かさの定量化の基礎については、別資料「実効増倍率の核データに対する感度解析の基礎」(ホームページ上では項目「炉物理基礎」に分類)、「実効増倍率の核データに起因する不確かさの定量化の基礎」(同「不確かさ解析」に分類)を参照してもらいたい。

CBZでは、感度解析、誤差伝播計算はUncertaintyCalculationクラス(略してUNC)を用いて行う。UNCクラスは、多群断面積とその共分散についてはそれぞれ特有のクラスで、感度係数はSensitivityDataクラスで定義する。

なお、本稿は、パッケージに含まれているlanl.tutorialディレクトリのデータを例として扱う。Flatop-25の感度がすでに計算されているという前提で議論を進めるので、感度を計算していない場合には別資料「CBZによる実効増倍率の感度係数の計算」(同「CBZ(マニュアル以外)」に分類)を参考にして感度を計算しておくことよ。

1 感度解析の実施例

ある核特性パラメータを、異なる2つの核データファイルを用いて計算した場合、その2つの計算値の間には差異が生じる。その差異の要因分析を行うことを本稿では感度解析と呼んでいる。ここでは、Flatop-25の実効増倍率の感度係数を用いて、JENDL-4.0とJENDL-3.3の計算値の差異について感度解析を行う例を示す。lanl.tutorialディレクトリではmain.sa.cxxに該当する。

1.1 核特性パラメータデータの定義

UNCでは、取り扱う核特性パラメータのリストを予め作成しておく必要がある。パラメータのリストはParameterListクラスで定義され、そのインスタンスに核特性パラメータの情報を追加していく。例を以下に示す。

Listing 1: 核特性パラメータデータの定義例

```

1 // *****
2 // Create Parameter List
3 // *****
4 ParameterList plist;
5 plist.AddNewData("flatop-u", "keff", 0);

```

ここでは4行目でParameterListクラスのインスタンスplistを生成し、5行目で新しいパラメータの情報をAddNewDataメソッドにより追加している。パラメータについて与える情報は三つあり、一つ目は原子炉の名前を示す文字列、二つ目は核特性パラメータの種類を示す文字列、三つ目はケースIDを示す整数である。本稿ではこれらをまとめて核特性パラメータindexと呼称する。ケースIDは、例えば、同じ原子炉、同じパラメータであっても実験条件が異なる場合があるので、そういった場合に用いる。ケースIDは通常は用いる必要が無く、これを省略した場合はデフォルト値として「0」が設定される。

1.2 多群断面積データの読み込み

UNCには、複数種の多群断面積セットを保持するためのクラスLibraryContainerが実装されている。多群断面積セットはUNCの独自のクラスで定義され、CBZの一般的な多群断面積セットを定義するXSLibraryクラスのインスタンスをLibraryContainerクラスのインスタンスに渡すことにより、UNC独自の多群断面積セットクラスのデータが定義される。

以下に、JENDL-4.0、JENDL-3.3に基づく多群断面積セット(XSLibraryクラスのインスタンス)を読み込み、それらをLibraryContainerクラスのインスタンスに引き渡す例を示す。

¹Document/CBG_Manual/UQ

Listing 2: LibraryContainer クラスのインスタンスへのデータの格納例

```

1 // *****
2 // Cross section data
3 // *****
4 LibraryContainer lib_con;
5
6 string libdir("../CBGLIB/j4.70g.iwt7/");
7 XSLibrary xslib(libdir,"N-ENERGY");
8 string filename[]={ "U235", "U238", "Pu239" };
9 xslib.ReadFile(3,libdir,filename);
10
11 string libdir2("../CBGLIB/j33.70g.iwt7/");
12 XSLibrary xslib2(libdir2,"N-ENERGY");
13 xslib2.ReadFile(3,libdir2,filename);
14
15 lib_con.PutXSLibrary(xslib,"jendl-4");
16 lib_con.PutXSLibrary(xslib2,"jendl-3.3");

```

6 から 9 行目では JENDL-4.0 に基づく多群断面積セットとして XSLibrary クラスのインスタンス xslib を生成している。また、11 から 13 行目でも同様に JENDL-3.3 に基づく断面積セットとして xslib2 を生成している。ここで読み込んだ断面積データが感度解析の対象となる（つまり、ここでデータを読み込まない核種については、その核データの差異の核特性パラメータの差異への影響は計算されない）。なお、XSLibrary クラスについては、別資料「CBZ: チュートリアル」の 4.1.1 節を参照のこと。

LibraryContainer クラスは、PutXSLibrary メソッドにより、引数で与えた XSLibrary クラスのインスタンスの情報を読み込んで、多群断面積セットとして情報を格納する（この例では 15、16 行目に該当）。PutXSLibrary メソッドの二つ目の引数では、与えた多群断面積セットの名前を指定している。LibraryContainer クラス内部での多群断面積セットはこの名前で行われる。

なお、ここでは必要とする核種として 3 つの重核種のデータのみ読み込んでいるが、燃焼計算等、大量の核種の断面積データを感度解析の対象とする場合には、Burner クラスの SetLibrary メソッドのソースを参考に入力を作成する必要がある。

1.3 感度係数データの読み込み

感度係数については、SensitivityData クラスのインスタンス群を UNC の SensitivityContainer クラスのインスタンスが保持する。ファイルからの感度係数の読み込み例を以下に示す。

Listing 3: 感度係数データの読み込み例

```

1 // *****
2 // Sensitivity data for existing and target data
3 // *****
4 SensitivityContainer sens_con(&plist);
5 string sensdir("./");
6 sens_con.ReadSensitivityDataFromFile(sensdir,"sns.flattop-u","flattop-u","keff");
7 //sens_con.GetSensitivityData("flattop-u","keff").ShowSensitivity1D(922380,102);

```

ReadSensitivityDataFromFile メソッドによりデータの読み込みを行っているが、引数の一つ目が感度係数のファイルが置かれているディレクトリ、二つ目が感度係数ファイルの名前、三つ目から五つ目が核特性パラメータ index にそれぞれ対応する。読み込んだ感度係数データは、ここで指定された核特性パラメータ index のものとして SensitivityContainer クラス内で扱われる。五つ目の引数（すなわちケース ID）は省略することが出来、その場合はゼロがデフォルトとして設定される。

なお、GetSensitivityData メソッドにより、SensitivityContainer が保持している SensitivityData クラスのインスタンスを取り出すことが出来る（7 行目に対応）。SensitivityData クラスの詳細については別資料「CBZ による実効増倍率の感度係数の計算」4 節を参照のこと。

1.4 感度解析の実施

多群断面積セットと感度係数データが準備されれば、核特性パラメータの感度解析が可能となる。CBZ では Uncertainty Calculation クラスが感度解析機能を有している。計算例を以下に示す。

Listing 4: 感度解析の例

```

1 // *****
2 // Sensitivity analysis by UNC
3 // *****

```

```

4   UncertaintyCalculation unc(xslib);
5   unc.CalLibraryEffect(sens_con, lib_con, "flattop-u", "keff", 0, "jendl-4", "jendl-3.3");

```

4 行目では UncertaintyCalculation クラスのインスタンス unc を生成している。なお、このインスタンス生成の際には、引数として適当な XSLibrary クラスのインスタンスを与える必要がある（エネルギー群構造の情報を渡すため）。この例では、多群断面積データの読み込みの際に生成した XSLibrary クラスのインスタンス xslib を渡している。

感度解析は UncertaintyCalculation クラスの CalLibraryEffect メソッドが行う。引数は、1 目が Sensitivity Container クラスのインスタンス、2 目が LibraryContainer クラスのインスタンスに対応し、3 から 5 目が感度解析の対象とする核特性パラメータ index、6、7 目が差異を計算する多群断面積セットの名前に、それぞれ対応する。この例では、JENDL-4.0 から JENDL-3.3 に核データを変えた場合の、Flattop-25 の実効増倍率（ケース ID はゼロ）の変化が計算される。

感度解析結果の出力例を以下に示す。

Listing 5: 感度解析結果の出力例

```

1 *****
2 * Library effect calculation
3 *   by UncertaintyCalculation
4 *****
5 * Integral Data : core flattop-u
6 *               : Chara. keff
7 *               : step 0
8 *   jendl-4 -> jendl-3.3
9 *****
10 * mat:922350 & mt: 18 : 0.00952858 (0.00974683, -0.000218241)
11 * mat:922350 & mt:102 : -0.00265759 (2.88949e-05, -0.00268649)
12 * mat:922350 & mt:452 : -0.000493875 (0.00104683, -0.0015407)
13 * mat:922350 & mt:251 : -0.00154376 (2.88489e-05, -0.00157261)
14 * mat:922380 & mt: 18 : 0.00047425 (0.000605516, -0.000131266)
15 * mat:922380 & mt:452 : -0.00028986 (0.00029821, -0.00058807)
16 * mat:922380 & mt:251 : -0.0107885 (0.000198091, -0.0109866)
17 * mat:922380 & mt:181 : 0.000130729 (0.000582164, -0.000451435)
18 * mat:922350 & mt: 2 : 0.000864098 (0.000924557, -6.04595e-05)
19 * mat:922350 & mt: 4 : -3.66416e-05 (0.00136031, -0.00139695)
20 * mat:922350 & mt: 16 : -0.000107623 (2.43056e-06, -0.000110053)
21 * mat:922380 & mt: 2 : 0.00176056 (0.00250955, -0.000748994)
22 * mat:922380 & mt: 4 : 0.000320817 (0.0016789, -0.00135808)
23 * mat:922380 & mt: 16 : -0.000122449 (0, -0.000122449)
24 *****
25 * Total :-0.0029986
26 *****

```

CalLibraryEffect メソッドを実行すると、核種、反応毎の核データの差異に起因する核特性パラメータの差異が出力される。各行の括弧内の数値は、正の影響を与える成分と負の影響を与える成分のそれぞれの総和を示している。全エネルギー群の総和としては影響が小さくても、エネルギー群間での相殺による結果の可能性もあり、その判別のためにこの情報を用いる。

この例からは、Flattop-25 の実効増倍率における JENDL-4.0 と JENDL-3.3 の計算値の差異は、U-235 の核分裂断面積（922350-18）や U-238 の弾性散乱断面積 P1 係数（922380-251）の差異が主要因であること、この両者の差異が相殺して正味の差異が比較的小さな値（-0.0030）となっていることが分かる。

上記の方法で核特性パラメータの差異に与える影響が大きい核データを識別したあとは、差異を与えるエネルギー領域を特定する必要がある。この場合は、下の例に示すように、CalLibraryEffect メソッドの 9 つ目の引数を true にして実行すればよい²。

Listing 6: 感度解析の例（エネルギー群毎の情報も取り出す場合）

```

1 // *****
2 //   Sensitivity analysis by UNC
3 // *****
4 UncertaintyCalculation unc(xslib);
5 unc.CalLibraryEffect
6 (sens_con, lib_con, "flattop-u", "keff", 0, "jendl-4", "jendl-3.3", 0.0001, true);

```

このメソッドを実行した場合は、以下のような出力が得られる。

Listing 7: 感度解析結果の出力例

²CalLibraryEffect メソッドの 8 つ目の引数は、個々の核データの差異による核特性パラメータの差異を表示するときの「閾値」に対応する。この値を小さくすればするほど、多くの計算結果が出力されることになる。また、9 つ目の引数は boolean 変数であるが、これを「true」にすると、個々の核データについて、エネルギー群毎の寄与も表示されることになる。

```

1 # Energy group-contribution : 922350 / 18
2 # [ / lethargy * 0.25 ]
3 1.00000e+07 8.17903e-05
4 7.78801e+06 3.31227e-04
5 6.06531e+06 3.98873e-04
6 4.72367e+06 6.79047e-04
7 3.67879e+06 5.94195e-04
8 2.86505e+06 3.07648e-05
9 2.23130e+06 4.55855e-04
10 1.73774e+06 4.21541e-04
11 1.35335e+06 1.20640e-03
12 1.05399e+06 8.27894e-04
13 8.20850e+05 4.00532e-04
14 6.39279e+05 3.27794e-04
15 4.97871e+05 1.31825e-03
16 3.87742e+05 5.72259e-04
17 3.01974e+05 4.32314e-04
18 2.35177e+05 -1.57473e-04
19 1.83156e+05 7.08123e-04
20 1.42642e+05 2.03993e-04
21 1.11090e+05 1.35448e-04
22 8.65170e+04 5.24952e-04
23 6.73795e+04 -1.39748e-05
24 5.24752e+04 1.60125e-05
25 4.08677e+04 7.93220e-05
26 3.18278e+04 -2.00343e-05
27 2.47875e+04 -1.23717e-05
28
29 [omitted]
30
31 5.31579e-01 1.68029e-15
32 4.13994e-01 1.26176e-15
33 3.22419e-01 -3.74071e-17
34 * mat:922350 & mt: 18 : 9.52858e-03 (9.74683e-03,-2.18241e-04)

```

ここで出力されている数値は、一つ目が対応するエネルギー群の上限エネルギーで、二つ目がエネルギー群毎のパラメータ差異の単位レサジーあたりの値に 0.25 を乗じたものである。これを X 軸にエネルギーの対数をとってプロットすると、Fig. 1 のようになる。この図からは、主に 100keV 以上のエネルギー領域における U-235 の核分裂断面積の差異が、Flatop-25 の実効増倍率の差異に影響していることが分かる。

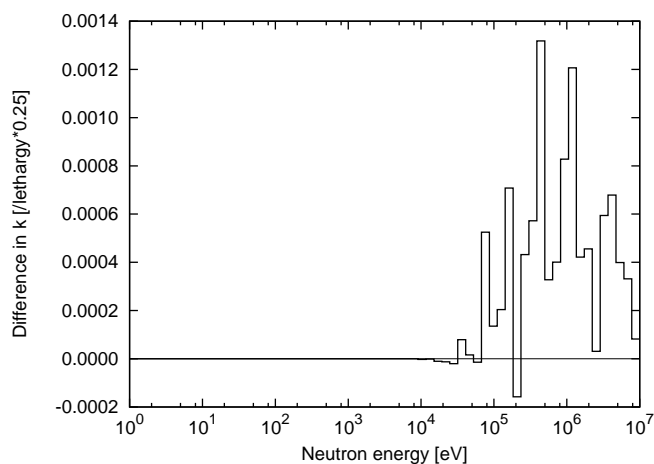


Fig. 1: エネルギー群毎の、核データ差異のパラメータ (Flatop-25 の実効増倍率) 差異への寄与

2 不確かさ評価の実施例

引き続き、不確かさ評価の実施例について解説を行う。はじめに、Flattop-25 の実効増倍率の不確かさ評価を行い、その後、4つの体系の実効増倍率に対する不確かさ（共分散）評価を行う。前者は「lanl.tutorial」ディレクトリの「main.unc.cxx」に、後者は「main.unc2.cxx」に、それぞれ対応する。

2.1 多群断面積の共分散データの読み込み

不確かさ評価は基本的には感度解析と同一の手続きで行うが、核データの不確かさ（共分散）データが必要となる。多群断面積の共分散データは、CBZLIB と同様に一つのディレクトリに核種毎のファイルとして置かれている。UNC では多群断面積セットの共分散データは LibraryCovariance クラスにおいて定義される。多群断面積の共分散データの読み込み例を以下に示す。

Listing 8: 多群断面積の共分散データの読み込み例

```
1 // *****
2 // Cross section covariance
3 // *****
4 LibraryCovariance xscov;
5 string covdir("../CBGLIB/j4cov.70g.iwt7");
6 xscov.ReadCovarianceFromFile(covdir,"U235");
7 xscov.ReadCovarianceFromFile(covdir,"U238");
8 xscov.ReadCovarianceFromFile(covdir,"Pu239");
```

6 から 8 行目ではメソッド ReadCovarianceFromFile により断面積共分散データをファイルから読み込んでいる。なお、ここで共分散データを読み込んだ核種については、前述の多群断面積データ LibraryContainer にもデータを読み込んでおく必要がある。

多群断面積共分散（エネルギー群毎の標準偏差、相関係数行列）を画面に出力させる方法については、この節の最後に説明する。

2.2 単一の核特性パラメータに対する不確かさ評価

多群断面積セットとその共分散のデータ、感度係数データを準備すれば、断面積の不確かさの核特性パラメータへの不確かさ伝播計算が可能となる。CBZ では UncertaintyCalculation クラスが不確かさ伝播計算の機能を有している。計算例を以下に示す。

Listing 9: 不確かさ伝播計算の例

```
1 // *****
2 // Uncertainty quantification
3 // *****
4
5 UncertaintyCalculation unc(xslib);
6
7 sens_con.SetRelativeSensitivity(lib_con.GetLibrary("jendl-4"));
8 sens_con.Produce1DSensitivity();
9
10 unc.CalCrossSectionUncertainty(sens_con,xscov,"flattop-u","keff",0);
```

7 行目の SetRelativeSensitivity メソッドは、感度係数データを全て相対感度にするため³のものであり、引数として多群断面積セット（複数の多群断面積セットを格納するクラス LibraryContainer のインスタンス lib_con の GetLibrary メソッドにより取り出される、「jendl-4」というタグ（名前）を与えられた断面積セット（Listing 2 を参照））を与えている。また、8 行目の Produce1DSensitivity メソッドは、二次元の行列形式で与えられている散乱断面積の感度係数から一次元の感度係数を作成するためのものである。これらのメソッドは不確かさ伝播計算を行う際には必ず実行しておく必要があるものである。

10 行目の CalCrossSectionUncertainty メソッドでは断面積に起因する核特性パラメータの不確かさを計算する。3 つ目から 5 つ目の引数には、不確かさを計算する核特性パラメータ index を与える。この場合は炉心「flattop-u」のパラメータ「keff」（ケース ID はゼロ）についての不確かさを計算することになる。

CalCrossSectionUncertainty メソッドの出力例を以下に示す。

³感度によっては、 $(dp/p)/d\sigma$ の形式で与えられているものがあるのでそれらを $(dp/p)/(d\sigma/\sigma)$ に変換する。

Listing 10: 単一核特性に対する誤差伝播計算の出力例

```

1 *****
2 * Cross section-induced uncertainty
3 *****
4 * Integral Data : core   flattop-u
5 *                : Chara. keff
6 *                : step   0
7 *****
8 * 922350:452 & 922350:452 5.7003e-06 ( 0.002388)
9 * 922350: 2 & 922350: 2 1.2333e-06 ( 0.001111)
10 * 922350: 4 & 922350: 4 5.2093e-06 ( 0.002282)
11 * 922350: 16 & 922350: 16 1.7925e-08 ( 0.0001339)
12 * 922350: 18 & 922350: 18 7.8863e-06 ( 0.002808)
13 * 922350: 18 & 922380: 18 1.5011e-06 ( 0.001225)
14 * 922350:102 & 922350:102 3.5499e-06 ( 0.001884)
15 * 922350:251 & 922350:251 1.8673e-06 ( 0.001366)
16 * 922350:181 & 922350:181 3.5869e-06 ( 0.001894)
17 * 922380:452 & 922380:452 2.4590e-07 ( 0.0004959)
18 * 922380: 2 & 922380: 2 1.2011e-05 ( 0.003466)
19 * 922380: 4 & 922380: 4 1.6081e-05 ( 0.004010)
20 * 922380: 16 & 922380: 16 1.6924e-08 ( 0.0001301)
21 * 922380: 18 & 922380: 18 1.1462e-07 ( 0.0003386)
22 * 922380:102 & 922380:102 6.3519e-07 ( 0.0007970)
23 * 922380:251 & 922380:251 8.7427e-06 ( 0.002957)
24 * 922380:181 & 922380:181 3.2297e-07 ( 0.0005683)
25 *****
26 * Total uncertainty 6.8723e-05 (0.008290)
27 *****

```

核データ A と核データ B の共分散 (A と B が同一のものであれば A の分散) に起因する、核特性パラメータの相対分散が各行に示され、括弧内には分散の平方根、すなわち相対標準偏差が示される。なお、核データは核種 ID と反応を示す MT 番号で示されている。MT 番号については文献 [1] を参照のこと⁴。

この例では、Flattop-25 の実効増倍率について、U-235 の ν に起因する不確かさは 0.002388% と評価されている。また、全ての核データの不確かさに起因する核特性パラメータの不確かさは最後の「Total uncertainty」に示されており、この例では 0.0083% となっている。最も実効増倍率の不確かさに寄与しているのは、U-238 の非弾性散乱断面積であることも分かる。

特定の核種、反応の核データの不確かさに関する詳細な計算は UNC の CalCrossSectionUncertaintyDetail メソッドにより可能である。使用例を以下に示す。この例では、U-235 の核分裂あたりの中性子発生数 (922350-452) の不確かさに起因する実効増倍率の不確かさについて詳細な計算を行う。

Listing 11: 詳細誤差伝播計算の例

```

1 unc.CalCrossSectionUncertaintyDetail(sens_con, xscov, 922380, 452, "flattop-u", "keff", 0);

```

CrossSectionUncertaintyDetail メソッドの出力例を以下に示す。指定された核データに起因する核特性パラメータの不確かさがエネルギー領域毎に出力される。この例では 86.5keV 以上の高エネルギー領域の不確かさが支配的であることを示している。

Listing 12: 詳細誤差伝播計算の出力例

```

1 *****
2 * Cross section-induced uncertainty
3 *****
4 * Integral Data : core   flattop-u
5 *                : Chara. keff
6 *                : step   0
7 * Nuclear Data : (MAT/MT)=(922380/452)
8 *****
9 # [Energy range definition]
10 #
11 # Fast range : 86517 [eV]-
12 # Inter.-1 range : 78.8932 [eV]-
13 # Inter.-2 range : 0.531579 [eV]-
14 # Thermal range : below 0.531579 [eV]
15 #
16 # Range-wise variance & Std.Dev.
17 #
18 # Fast : 2.45838e-07 0.000495821
19 # Inter-1 : 6.61273e-15 8.13187e-08
20 # Inter-2 : 8.82753e-31 9.39549e-16
21 # Thermal : 2.1074e-37 4.59064e-19
22 #
23 # Range-range covariance & correlation
24 #
25 # Fast -Inter-1 : 3.19956e-11 0.793551

```

⁴ 2 が弾性散乱、4 が非弾性散乱、16 が (n,2n)、18 が核分裂、102 が捕獲、181 が核分裂スペクトル、251 が弾性散乱断面積 P1 係数、452 が核分裂あたりの発生中性子数である。

```

26 # Fast -Inter-2 : 3.69213e-19 0.792562
27 # Fast -Thermal : 1.80398e-22 0.792562
28 # Inter-1-Inter-2 : 7.64022e-23 0.999991
29 # Inter-1-Thermal : 3.73302e-26 0.999991
30 # Inter-2-Thermal : 4.31314e-34 1
31 *****

```

2.3 複数の核特性パラメータに対する不確かさ評価

最後に、複数の核特性パラメータの共分散行列を計算する方法について述べる。

この場合には、共分散行列を計算したい核特性パラメータを Parameters クラスのインスタンスとして定義しなければならない。その例を以下に示す。

Listing 13: 核特性パラメータのインスタンス作成例

```

1 // *****
2 // Create target parameter
3 // *****
4 Parameters cal_val(&plist);
5 cal_val.PutValue("jezebel", "keff", 1.);
6 cal_val.PutValue("godiva", "keff", 1.);
7 cal_val.PutValue("flattop-pu", "keff", 1.);
8 cal_val.PutValue("flattop-u", "keff", 1.);

```

ここでは、4つの原子炉の実効増倍率を Parameters クラスのインスタンス cal_val に格納させている。PutValue メソッドの1つ目、2つ目の引数は、核特性パラメータ index のうちの原子炉名、パラメータ名に対応する。3つ目の引数には核特性パラメータの計算値を入力する必要があるが、ここではそれ自身は意味を持たないため、便宜的に 1.0 の値を使っている。4つ目の引数は核特性パラメータ index のケース ID を与えるが、省略することが可能である（その場合はデフォルト値ゼロに設定される）。なお、この4つの原子炉の実効増倍率の感度係数であるが、あらかじめ計算したものをパッケージに内蔵させているため、それを用いることとする。

4つの原子炉の実効増倍率に対する共分散行列の計算例を以下に示す。

Listing 14: 複数の核特性パラメータの共分散行列の計算例

```

1 ParameterCovariance gmg=unc.GetGMG
2 (lib_con.GetLibrary("jendl-4"), xscov, cal_val, sens_con);
3 cal_val.ShowSelf();
4 gmg.GetStandardDeviation().show_self();
5 gmg.GetCorrelationMatrix().show_self();

```

複数の核特性パラメータに対する共分散行列を計算する場合には UncertaintyCalculation クラスの GetGMG メソッドを用いる。計算対象となる核特性パラメータは、3つ目の引数で与えられている Parameters クラスのインスタンス cal_val が格納しているパラメータとなる。GetGMG メソッドは核特性パラメータの共分散行列を返すので、4、5行目で核特性パラメータの相対標準偏差と相関係数行列を出力させている。それら出力例を以下に示す。

Listing 15: 複数の核特性パラメータに対する誤差伝播計算の出力例

```

1 0: [jezebel][keff][0] : 1
2 1: [godiva][keff][0] : 1
3 2: [flattop-pu][keff][0] : 1
4 3: [flattop-u][keff][0] : 1
5 Group :4
6 0 6.570794e-03
7 1 9.937303e-03
8 2 8.060655e-03
9 3 8.289961e-03
10 x:4 & y:4
11 *0*1.000000e+00:1.123230e-01:5.904679e-01:1.253978e-01:
12 *1*1.123230e-01:1.000000e+00:1.288816e-01:5.936770e-01:
13 *2*5.904679e-01:1.288816e-01:1.000000e+00:6.714768e-01:
14 *3*1.253978e-01:5.936770e-01:6.714768e-01:1.000000e+00:

```

1 から 4 行目には Parameters クラスのインスタンス cal_val の持っている情報が ShowSelf メソッドにより示されている。5 から 9 行目には核特性パラメータの標準偏差が示されている。それぞれがどの核特性パラメータに対応しているかについては、1 から 4 行目を参考にするとよい。また 10 行目以降は相関係数行列を示している。対角成分が 1.0 になっていること、全ての核特性パラメータの不確かさについて、正の相関が見られることが分かるであろう。

2.4 核特性パラメータの相関係数行列のプロット

前述のようにして得た核特性パラメータの相関係数行列のプロット方法について考えよう。例えば Excel シートにデータを張り付け、値の範囲毎に異なる色を設定することで、比較的良好な図が作成できるであろう。ただし、核特性パラメータの数が数 10 を超える場合には、このような作業は大変である。

CBZ のパッケージでは、gnuplot を用いた相関係数行列のプロット例があるので、それについて解説を行う。

gnuplot で扱いやすいような形式に相関係数行列を出力するメソッドが GroupData2D クラスに show_plot として実装されているので、それを以下のように用いる。

Listing 16: 核特性パラメータの相関係数行列データの出力例

```
1 gmg.GetCorrelationMatrix().show_plot();
```

その結果、以下のようなファイルが作成されるであろう（ただし以下に示すものはデータファイルの一部である）。

Listing 17: 核特性パラメータの相関係数行列ファイルの中身

```
1 0.5 0.5 1
2 1.5 0.5 1
3 1.5 0.5 0.112323
4 2.5 0.5 0.112323
5 2.5 0.5 0.590468
6 3.5 0.5 0.590468
7 3.5 0.5 0.125398
8 4.5 0.5 0.125398
9
10 0.5 1.5 1
11 1.5 1.5 1
12 1.5 1.5 0.112323
13 2.5 1.5 0.112323
14 2.5 1.5 0.590468
```

それでは show_plot メソッドにより出力した相関係数行列データを「corout」という名前のファイルとして保存させよう。その後、lanl.tutorial/PLOT ディレクトリに移動すると、そこに「plot.kcor.sh」なるシェルスクリプトがあるはずなので、それを実行してもらいたい。その結果、以下のような図が画面に出力されるであろう。

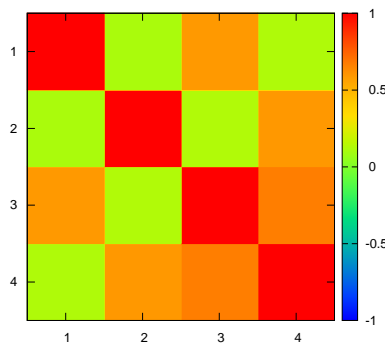


Fig. 2: 核特性パラメータの相関係数行列

2.5 多群断面積共分散データの出力

はじめに多群断面積の標準偏差の出力方法について説明する。

多群断面積の各エネルギー群の断面積に対する標準偏差は UNC クラスの ShowCrossSectionStandardDeviation メソッドにより画面に出力することが出来る。その計算例を以下に示す。

Listing 18: 多群断面積の標準偏差の出力例

```
1 UncertaintyCalculation unc(xslib);
2 unc.ShowCrossSectionStandardDeviation(xscov,922350,18);
```


ShowCrossSectionStandardDeviation メソッドは、1つ目の引数が断面積共分散データを格納する LibraryCovariance クラスのインスタンスに、2つ目と3つ目の引数が標準偏差を出力させたい断面積データの核種 ID と反応を示す MT 番号に対応する。この例では U-235 の核分裂断面積の標準偏差が出力されることになる。以下に出力例を示す。

Listing 19: JENDL-4.0 に与えられている U-235 核分裂断面積の標準偏差

```

1 # Upper      Relative
2 # energy    standard Deviation
3 1.00000e+07 9.15221e-03
4 7.78801e+06 8.41576e-03
5 6.06531e+06 7.42779e-03
6 4.72367e+06 7.72004e-03
7 3.67879e+06 7.65186e-03
8 2.86505e+06 7.77245e-03
9 2.23130e+06 8.99650e-03
10 1.73774e+06 7.96398e-03
11 1.35335e+06 7.30733e-03
12 1.05399e+06 6.29952e-03
13 8.20850e+05 6.48575e-03
14 6.39279e+05 6.11539e-03
15 4.97871e+05 6.66611e-03
16 3.87742e+05 6.82547e-03
17 3.01974e+05 8.14174e-03
18 2.35177e+05 7.81019e-03
19 1.83156e+05 7.41033e-03
20 1.42642e+05 8.20366e-03
21 1.11090e+05 9.43774e-03
22 8.65170e+04 8.23080e-03
23
24 [omitted]
25
26 2.38237e+00 9.77727e-03
27 1.85539e+00 9.95917e-03
28 1.44498e+00 7.05571e-03
29 1.12535e+00 4.35006e-03
30 8.76425e-01 4.80302e-03
31 6.82560e-01 4.68220e-03
32 5.31579e-01 4.35477e-03
33 4.13994e-01 3.77571e-03
34 3.22419e-01 3.64294e-03

```

次に多群断面積の相関係数行列の出力方法について説明する。

この場合は、以下のように UNC クラスの ShowCorrelationForXYPlot メソッドを用いる。この例では、LibraryCovariance クラスのインスタンス xscov に格納されている、U-235 (922350) の核分裂断面積 (18) のエネルギー群間の相関係数行列を出力する。

Listing 20: 多群断面積の相関係数行列の出力例

```

1 UncertaintyCalculation unc(xslib);
2 unc.ShowCorrelationForXYPlot(xscov,922350,18);

```

出力データをファイル「xscor」に格納するようにし、lanl.tutorial/PLOT ディレクトリの plot.xscor.sh を実行すると、画面に相関係数行列が表示されることであろう。

3 燃焼感度を用いた不確かさ評価

前節で述べた不確かさ評価は、核反応断面積（汎用評価済み核データファイルに与えられる核データ）の不確かさに起因するものであったが、燃焼後の核種数密度など、燃焼に関わる炉物理パラメータについては、核反応断面積の不確かさに加えて、燃焼に関する核データの不確かさの影響も考慮する必要がある。燃焼に関する核データとしては、

- 崩壊半減期（崩壊定数）
- 崩壊分岐比
- 核分裂収率
- 核反応分岐比

などが挙げられる。崩壊半減期や崩壊分岐比など、原子核の崩壊に関する核データは崩壊データファイル（Decay data file）に与えられ、核分裂収率データは核分裂収率データファイル（Yield data file）に与えられる。また、核反応分岐比（ (n, γ) 反応などの核反応によって生成される原子核が複数種ある場合の分岐割合で、Am-241(n, γ) 反応の Am-242 と-242m への分岐比が良い例である）については、汎用評価済みデータファイルや放射化断面積ファイルに与えられる。

CBZ の Burner モジュールでは、燃焼後の核種数密度など、燃焼に関わる炉物理パラメータについて、核反応断面積に加えて燃焼に関する核データに対する感度係数を計算することが可能となっており、この感度係数とこれらの核データの不確かさを用いて、核データから炉物理パラメータへの不確かさ伝播計算ができる。

燃焼に関する核データから炉物理パラメータへの不確かさ伝播計算を行う際に気をつけなければならないことは、燃焼に関する核データが燃焼計算に用いる燃焼チェーンに依存するという点である。

評価済み核データファイルには個々の原子核に核データの評価値とその共分散データが定義されている。一方、燃焼計算では、評価済み核データファイルに与えられている全ての核種を含んだ燃焼チェーン（参照チェーン）を用いることは稀であり、一般的には燃焼計算で重要となる数 10 から 100 程度の核種で構成される簡易化チェーンを用いる。前者の参照チェーンを用いた場合は評価済み核データファイルに与えられている不確かさ情報をそのまま用いればよいが、後者の簡易化チェーンを用いた場合は簡易化チェーンで定義される核データに対する不確かさ情報を用いる必要がある。以下、具体例を用いてこのことを説明する。

Fig. 3 に燃焼チェーンの例を示す。左のものは質量数 131 の質量チェーンの一部であるが、仮に簡易化チェーンで Sb-131 が無視された場合、Sb-131 の崩壊分岐比の不確かさは簡易化チェーンにおいて Te-131 と Te-131m の核分裂収率の不確かさとして考慮されることになる。また、右側の図において、左側の参照チェーンでは Eu-152m の崩壊分岐比の不確かさであったものが、右側の簡易化チェーンでは Eu-151 の (n, γ) 反応の分岐比の不確かさとして考慮されることになる。

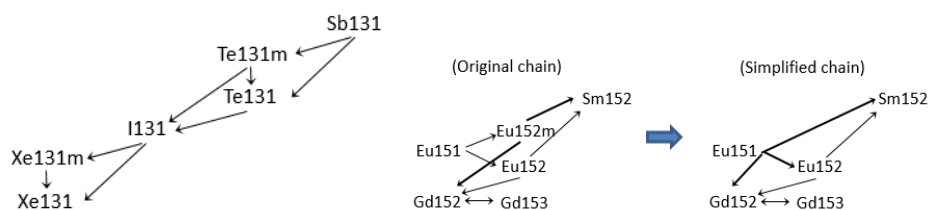


Fig. 3: 燃焼チェーンの例

CBZ において、燃焼に関する炉物理パラメータの不確かさ計算に参照チェーンを用いることは可能であるが、感度係数の計算に時間を要するため、ここでは簡易化チェーンを用いた方法について述べる。簡易化チェーンを用いる場合は、それに対応する核データの共分散データを作成する必要があるが、現在、ランダムサンプリング法によって作成した FP-138 チェーンに対する共分散データが利用可能となっている [2]。以降では、CBZ パッケージの「CBGCAL/Burner」ディレクトリにある「main.uq_nd_fp138.cxx」を例に説明する。

以下に、不確かさ計算において必要となるデータの格納場所を定義する例を示す。この計算に必要となるデータは、FP-138 チェーンに対応する燃焼に関する核データに対する共分散データ、感度係数データ、多群断面積データ、多群断面積に対する共分散データ、そして崩壊データである。以下の例では、これらが格納されているディレクトリがこの順序で定義されている。

Listing 21: 燃焼特性の不確かさ計算において必要となるデータの格納場所の定義例

```

1 // Data-storing directory specification
2 string covdatadir="/home/chiba/CBGCAL/ShortChainCovariance/CovData/";
3 string sensdir("./");
4 string libdir("/home/chiba/CBGLIB/j4.107g.iwt7/");
5 string libcovdir("/home/chiba/CBGLIB/j4cov.107g.iwt7/");
6 string ddfiledir("../CBGLIB.BURN/DDfile/dd.jendl2011");

```

main.uq_nd_fp138.cxx では燃焼後数密度の不確かさを複数の核種について計算する。その指定を行う例が以下である。この例では、Gd-155 の燃焼後数密度の不確かさを計算することになる。なお、ここで用いる感度係数データとして「sns.Gd155」という名称のファイルが想定されることになる。

Listing 22: 不確かさ計算を行う対象核種の指定例

```

1 // Target nuclide specification
2 int nucnum=1;
3 string target[]={ "Gd155" };

```

これ以下については基本的には変更する必要はない。この入力を実行させると、以下の結果を得ることが出来るであろう。この例のように、着目核種（この場合は Gd-155）の燃焼後数密度について、核分裂収率（「Yield」）、崩壊定数（半減期、「DecayConst」）、崩壊分岐比（「BranchRatio」）、断面積（「XS」）起因の不確かさと、それらの総和（「All」）が相対標準偏差で表示される。

Listing 23: 不確かさ計算を行う対象核種の指定例

#	Number	Uncertainty in %					
#	Density	Yield	DecayConst	BranchRatio	XS	All	
3	Gd155	3.06035e-09	1.07756e-02	2.56496e-03	1.73195e-04	2.26069e-02	2.51753e-02

不確かさ計算結果について、より詳細な情報を入手した場合（例えば、崩壊定数であればどの核種の崩壊定数の不確かさが支配的かを知りたい場合など）は、サンプルにおいてコメントアウトされている部分のコメントアウトを外すことで対応できる。断面積起因の不確かさについては 19 行目、半減期（崩壊定数）由来の不確かさについては 24 行目、崩壊分岐比由来の不確かさについては 31、37、44 行目、核分裂収率由来の不確かさについては 57、58 行目がそれぞれ対応する。

Listing 24: 不確かさ計算を行う対象核種の指定例

```

1 // *****
2 // Uncertainty quantification
3 // *****
4
5 UncertaintyCalculation unc(xslib);
6
7 sens_con.SetRelativeSensitivity(lib_con.GetLibrary("jendl-4"));
8 sens_con.Produce1DSensitivity();
9
10 UncertaintyCalculationForYieldDecay ucyd;
11 HalfLifeCovariance hcov;
12 BranchingRatioCovariance bcov, bcov_ng;
13 BCGManager bm;
14 bm.ReadDecayDataFromFile(ddfiledir);
15
16 // ++ Reaction cross section
17 ParameterCovariance mat1=unc.GetGMG(lib_con.GetLibrary("jendl-4"), xscov, cal_val, sens_con);
18 GroupData2D gmgs=mat1.GetCovariance("Relative");
19 //unc.CalCrossSectionUncertaintyDetail(sens_con, xscov, 922380, 452, "flattop-u", "keff", 0);
20
21 // ++ Half life
22 hcov.MakeCovarianceMatrix(bm);
23 GroupData2D gmgh=ucyd.GetHalfLifeGMG(sens_con, hcov);
24 //ucyd.CalHalfLifeUncertaintyDetail(sens_con, hcov, "pincell", "nd", 0, 1e-10); exit(0);
25
26 // ++ Decay branching ratio
27 // (via decay branching ratio in reduced chain)
28 string fname1=covdatadir+"short_cov_br-br-10000";
29 bcov.ReadReducedChainData(fname1.data());
30 GroupData2D gmgb=ucyd.GetBranchingRatioGMG(sens_con, bcov);
31 //ucyd.CalBranchingRatioUncertaintyDetail(sens_con, bcov, "pincell", "nd", 0, 1e-10); exit(0);
32
33 // (via (n,g) branching ratio in reduced chain)
34 string fname4=covdatadir+"short_cov_br-brng-10000";
35 bcov_ng.ReadReducedChainData(fname4.data());
36 GroupData2D gmgb_ng=ucyd.GetBranchingRatioGMG(sens_con, bcov_ng, false); // [false] is for decay BR flag
37 //ucyd.CalBranchingRatioUncertaintyDetail(sens_con, bcov_ng, "pincell", "nd", 0, 1e-10, false); exit(0);
38
39 // (via fission yield in reduced chain)
40 FissionYieldCovarianceCorr fbcov;
41 string fname2=covdatadir+"short_cov_br-fy-10000";
42 fbcov.ReadReducedChainData(fname2.data());
43 GroupData2D gmgyb=ucyd.GetFissionYieldCorrGMG(sens_con, fbcov);

```

```
44 //ucyd.CalFissionYieldCorrUncertainty(sens_con, fbcov, "pincell", "nd", 0); exit(0);
45
46 gmgb=gmgb+gmgb_ng+gmgyb;
47
48 // ++ Fission yield
49
50 IndependentYieldCovariance icov;
51
52 // Reduced chain
53 string fname3=covdatadir+"short_cov_fy_10000";
54 icov.ReadReducedChainData(fname3.data());
55
56 GroupData2D gmgy=ucyd.GetFissionYieldGMG(sens_con, icov);
57 //ucyd.CalFissionYieldUncertainty(sens_con, icov, "pincell", "nd", 0); exit(0);
58 //ucyd.CalFissionYieldUncertaintyDetail(sens_con, icov, "pincell", "nd", 0, 1e-5); exit(0);
```

4 不確かさ伝播計算における (n,α) 反応の取扱い

現在の CBZ では、 (n,p) や (n,α) 等、一部の中性子吸収反応の断面積は、便宜的に (n,γ) 断面積に加えられている。一方、CBZ の多群断面積共分散データではこれらの断面積はファイルに与えられているように定義されている（すなわち (n,γ) 断面積の共分散データに反映されていない）ため、CBZ で計算した感度係数と多群断面積共分散データを用いて不確かさの伝播計算を行う場合には、断面積間の不整合が生じる可能性がある。

一般的に、核特性パラメータに対して影響が現れると考えられる核種、反応は以下の通りである。

- B-10 の (n,α) 反応
- O-16 の (n,α) 反応

B-10 については、 (n,α) 反応断面積は (n,γ) よりもずっと大きいため、CBZ における B-10 の (n,γ) 断面積は (n,α) 断面積と考えて問題ない。そこで、不確かさ解析をする際には、感度係数データに含まれている B-10 の (n,γ) 断面積 (MT=102) のものを (n,α) 断面積 (MT=107) のものとするように情報を書き換えることで上記の不整合を解消させる。その例を以下に示す。

Listing 25: 感度係数ファイルにおいて B-10 の (n,γ) 反応を (n,α) 反応に置き換える操作の例

```
1 SensitivityContainer sens_con(&plist);  
2 string sensdir("./");  
3 sens_con.ReadSensitivityDataFromFile(sensdir,"sns.flattop-u","flattop-u","keff");  
4 sens_con.ChangeMTNumber(50100,102,107);
```

参考文献

- [1] 千葉、「ENDF フォーマットの MAT-ID、MT-ID のルール」、(2012).
- [2] G. Chiba, S. Okumura, “Uncertainty quantification of neutron multiplication factors of light water reactor fuels during depletion,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, (accepted).