

(r, θ) 中性子輸送計算モデルにおける水分子中の H-1 の熱中性子散乱データの不確かさに起因する中性子束分布の不確かさ評価¹

2025/4/2 千葉 豪

これまでに構築した高速・高精度の遮蔽計算手法の活用例として、水分子中の H-1 の $S(\alpha, \beta)$ データの不確かさに起因する中性子束分布の不確かさの評価を、 (r, θ) 体系のプラントモデルに対して行うこととした。

不確かさ評価をランダムサンプリングで行う際の必要な標本数については以下のように見積もった。標本分散の分散は、着目する確率変数が正規分布に従うとするならば、標本数が N 、標本分散が V であるとき、 $(2V^2)/(N-1)$ で与えられる。従って、標本標準偏差 $\sigma = \sqrt{V}$ の分散は、 $\left(\frac{d\sigma}{dV}\right)^2 \frac{2V^2}{N-1} = \frac{1}{4V} \frac{2V^2}{N-1} = \frac{V}{2(N-1)}$ と与えられるので、標本標準偏差の標準偏差は $\frac{\sigma}{\sqrt{2(N-1)}}$ となる。これに基づくと、 $N=51$ の場合には標本標準偏差の $1/10$ 程度、 $N=100$ の場合には $1/15$ 程度となる。計算時間の制約も踏まえて、本検討では $N=100$ として評価を行うものとした。

はじめに、TENDL2021 に与えられている NJOY/LEAPR モジュールのための 2,000 のランダムファイル [1] をダウンロードし、必要な温度点 (今回は 600K とした) のみの情報を Python スクリプトにより抽出したうえで、NJOY2016 で処理を行い ENDF 形式のファイルを作成した (計 101 ファイル)。その後、FRENDY を用いてそれぞれに対応する ACE ファイルを作成した。以上の処理は Calc/XS.sys/leapr にて実施した。

次に、一連の手続きを確認する目的で、ACE ファイルと FRENDY により 47 群の実効断面積を計算し、その群数のまま二次元 (r, θ) 体系での中性子輸送計算を行い不確かさ評価を行った。媒質毎の実効断面積データはこれまでに計算していたもの (ディレクトリ KRAMXS_47G の収納データ) を用い、H-1 が含まれる媒質である H2O、FUEL、CON について、上記で生成した ACE ファイルから再計算した。この際、CBZ の FRENDY/MG 入力自動作成モジュール FMG_Tool では H-1 の $S(\alpha, \beta)$ データファイルの指定はハードコーディングされていたことから、上記の ACE ファイルを用いるため、対応するメソッド input_generator_mix に引数を一つ追加し、それを指定することで今回の計算に用いるファイルを参照できるようにした。このための CBZ のスクリプトとしては main.xs_fmgs.cxx を使用した。また、複数のランダムファイルに対する処理はシェルスクリプト rs.sh により行った。47 群の中性子輸送計算 (main.rtheta_rs.cxx により実施) に要する時間は 18 分程度であった (FRENDY による断面積処理と並行して輸送計算を行う場合には、CBZ のコンパイルの都合上、別の Run ディレクトリにて行うこととした)。計算終了後、全メッシュでの 1 MeV 以上、0.1 MeV 以上、熱外、熱領域の中性子束がファイルに出力されるので、それを保存しておき、全てのサンプルでの計算が完了した後に、それらに基づく統計処理を行い、 (r, θ) 座標系での全メッシュについて中性子束の標準偏差を出力した。以上の処理は Run/POST ディレクトリの main_rs.cxx にて実施した。このようにして得られた中性子束分布の標準偏差を Fig. 1 に示す。

これまでに構築した高速・高精度の遮蔽計算手法では、はじめに 4,412 群の媒質の巨視的断面積を FRENDY で計算する。この処理時間が律速になる可能性が高いことから、H-1 が含まれる媒質について、影響が小さいと考えられる核種を無視する (組成情報を簡易化する) こととした。これにより、媒質に含まれる核種数は、FUEL については 16 から 11 に、CON については 25 から 15 に低減した。このようにして前述と同様の手続きにより得られた中性子束分布の標準偏差を Fig. 2 に示す。Fig. 1 と同様の結果が得られたことから、以上で行った組成情報の簡易化は結果に大きく影響しないものと判断した。

組成情報の簡易化により、4,412 群の媒質断面積計算のための FRENDY の処理に要する時間は、H2O、FUEL、CON のそれぞれで 40、160、300 分となり、媒質の巨視的断面積計算全体に 500 分を要することが分かった。また、これまでの検討で、16 核種からなる媒質の 4,284 群の断面積を FRENDY により計算したときに 40GB 程度を要することが分かっているので、今回の 4,412 群の計算でも同程度のメモリを要するも

¹ /Document/Study/Activation_JSPS/UQ

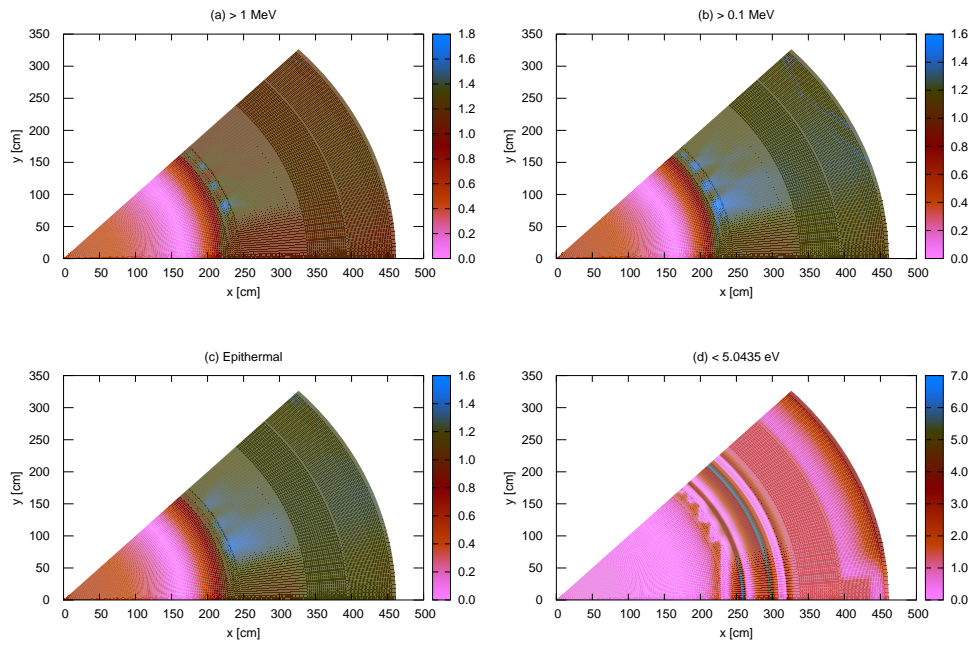


Fig. 1: Neutron flux spatial distribution error with the 47-group calculation (unit: %)

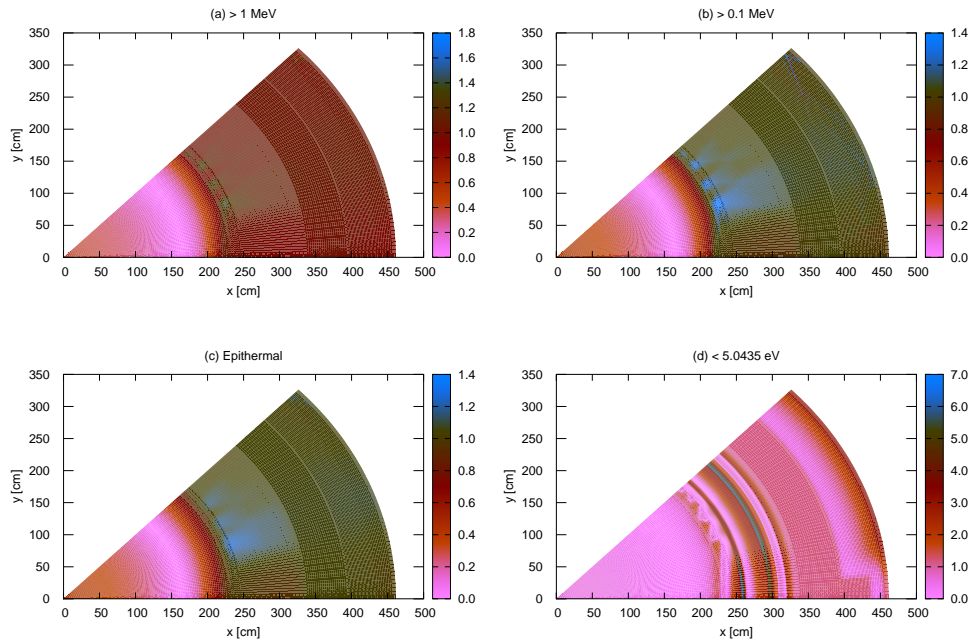


Fig. 2: Neutron flux spatial distribution error with the 47-group calculation with simplified composition (unit: %)

のと予測された。そこで、非等方散乱次数の最大値を、FMG_Tool のデフォルトである P5 から P1 に変更することにより計算負荷のさらなる低減を図った。その結果、必要とされるメモリは 12GB 程度となった。また、計算時間も僅かに短縮され、それぞれの媒質で 40、140、260 分となり、全体で 440 分となった。その後の、1次元球体系の 4,412 群 P1S4 計算には 20 分を要したので、47 群 2 次元中性子輸送計算も含める

と、1 ケースあたり 8 時間程度を要する見込みとなった。

4,412 群の媒質断面積計算、1 次元 4,412 群による縮約スペクトルの計算と 47 群への縮約 (SUS 領域に限る) 2 次元 47 群の輸送計算により、中性子束空間分布の不確かさの定量化を行った。中性子束分布の標準偏差を Fig. 3 に示す。

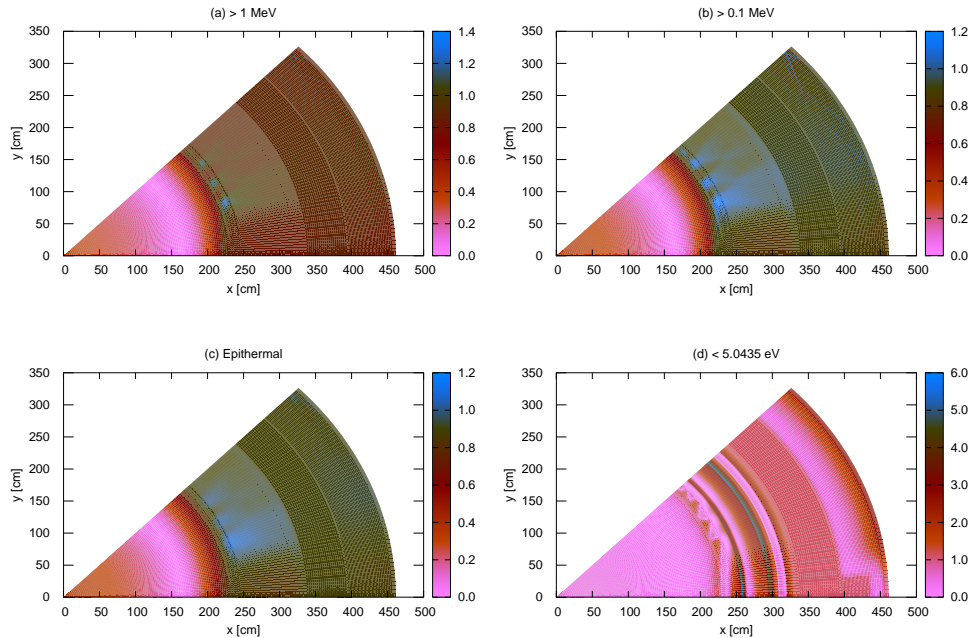


Fig. 3: Neutron flux spatial distribution error with the 4412- and 47-group calculation with simplified composition (unit: %)

Fig. 3 に結果を示した計算は 100 個の標本に基づいたものであることから、得られた相対標準偏差に対して 7% 程度の不確かさが存在する。一方、文献 [2] では、TENDL2021 に与えられている水分子中の H-1 の $S(\alpha, \beta)$ の不確かさ情報に基づいた決定論的サンプリングによる不確かさ評価が行われている。そこで、同文献と同様の方法、データに基づいて中性子束分布の不確かさ評価を行った。具体的な手続きは以下の通りである。

- 文献 [2] で作成された 13 個の LEAPR の入力ファイルを手入し Calc/XS_sys/leapr/njoyinp_harada フォルダに置いた。
- Python スクリプト data_editor_harada.py により 574.0 K のデータを抽出し、output*なるファイルとして、それらを OUTPUT_harada に置いた。なお、これまでの検討では 600 K のデータを対象としていたが、入手したデータには 600 K のデータが含まれていなかったため、574.0 K で代用させた。
- シェルスクリプト njoy_only_leapr.sh により、それぞれの LEAPR 入力に対応する ENDF ファイルを作成し ENDF_harada に置いた。
- シェルスクリプト acef_frendy_ts1_harada.sh により ENDF ファイルから ACE ファイルを作成した。なお、これまでの検討で得られた ACE ファイルが格納されているフォルダを ACEF_org とし、新たに作成した ACEF フォルダに格納することで、以降の処理をこれまでの同様の手続きで行えるようにした。

- 断面積計算、輸送計算を RunFine 等のディレクトリで並列に行い、得られた結果を Run4412_harada フォルダにまとめた。

得られた中性子束分布の標準偏差を Fig. 4 に示すが、Fig. 3 と同程度の標準偏差が得られていることが分かる。

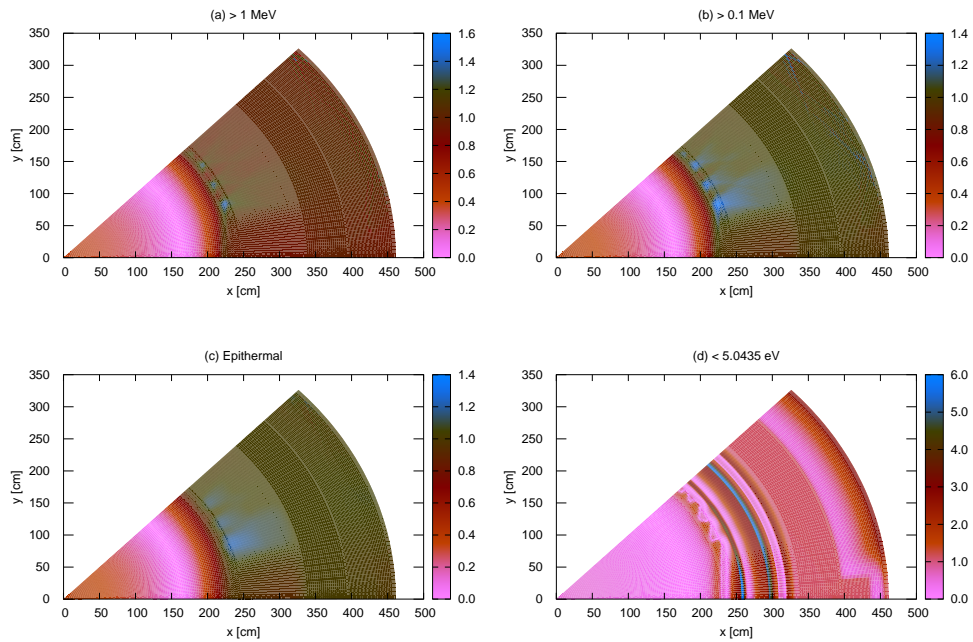


Fig. 4: Neutron flux spatial distribution error with the 4412- and 47-group calculation with simplified composition and the deterministic sampling method (unit: %)

参考文献

- [1] G. Noguere, *et al.*, *Ann. Nucl. Energy*, **104**, p. 132-145 (2017).
- [2] 原田善成、「即発中性子減衰定数を活用した軽水の熱中性子散乱則のデータ同化」、令和6年度名古屋大学修士論文.