



JAEA-Data/Code

2024-009

DOI:10.11484/jaea-data-code-2024-009

FRENDY/ACEファイル摂動ツールの機能拡張

—最大エントロピー法に基づく弾性散乱角度分布の摂動機能の実装—

Extension of the ACE File Perturbation Tool in FRENDY

-Implementation of the Perturbation Method for the Elastic Scattering Angle Distribution

Based on the Maximum Entropy Method-

丸山 修平

Shuhei MARUYAMA

大洗研究所

高速炉サイクル研究開発センター

高速炉解析評価技術開発部

Fast Reactor Life-Cycle Safety and Integrity Evaluation Technology Development Department

Fast Reactor Cycle System Research and Development Center

Oarai Research and Development Institute

August 2024

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

JAEA-Data/Code

本レポートは国立研究開発法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。本レポートはクリエイティブ・コモンズ表示 4.0 国際 ライセンスの下に提供されています。本レポートの成果（データを含む）に著作権が発生しない場合でも、同ライセンスと同様の条件で利用してください。（<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ja>）
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ウェブサイト（<https://www.jaea.go.jp>）より発信されています。本レポートに関しては下記までお問合せください。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 研究開発推進部 科学技術情報課
〒319-1112 茨城県那珂郡東海村大字村松4番地49
E-mail: ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency.
This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.en>).
Even if the results of this report (including data) are not copyrighted, they must be used under the same terms and conditions as CC-BY.
For inquiries regarding this report, please contact Library, Institutional Repository and INIS Section, Research and Development Promotion Department, Japan Atomic Energy Agency.
4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1112, Japan
E-mail: ird-support@jaea.go.jp

FRENDY/ACE ファイル摂動ツールの機能拡張
—最大エントロピー法に基づく弾性散乱角度分布の摂動機能の実装—

日本原子力研究開発機構 大洗研究所
高速炉サイクル研究開発センター 高速炉解析評価技術開発部

丸山 修平

(2024年6月20日受理)

国産の核データ処理コード **FRENDY** にはランダムサンプリング法に基づく **ACE** ファイル摂動ツールが実装されており、これを利用して核データ起因不確かさを定量化することが可能である。しかしながら、高速炉の炉心解析や遮蔽解析における不確かさ評価で有意となる散乱角度分布起因の不確かさを評価する機能はこれまで開発されていなかった。近年、平均散乱角余弦の共分散データの情報から最大エントロピー法に基づき、この不確かさを定量化する手法が著者らによって提案された。本報告では、この提案手法に基づく弾性散乱角度分布の不確かさに対する摂動機能を **FRENDY/ACE** ファイル摂動ツールに追加する。

**Extension of the ACE File Perturbation Tool in FRENDY
- Implementation of the Perturbation Method for the Elastic Scattering Angle
Distribution Based on the Maximum Entropy Method -**

Shuhei MARUYAMA

Fast Reactor Life-Cycle Safety and Integrity Evaluation Technology Development Department
Fast Reactor Cycle System Research and Development Center
Oarai Research and Development Institute
Japan Atomic Energy Agency
Oarai-machi, Higashiibaraki-gun, Ibaraki-ken

(Received June 20, 2024)

The Japanese nuclear data processing code FRENDY implements the ACE file perturbation tool based on the random sampling method, which can be used to quantify nuclear data-induced uncertainties. However, it has not been able to evaluate the uncertainty due to the scattering angle distribution, which is not ignored in the uncertainty quantification of fast reactor core analysis and shielding analysis. Recently, a method to quantify the uncertainty based on the maximum entropy method has been proposed by the authors. In this report, a perturbation function for the uncertainty of the elastic scattering angular distribution based on this proposed method has been added to the FRENDY/ACE file perturbation tool.

Keywords: FRENDY, ACE File, Perturbation, Nuclear Data-induced Uncertainty, Scattering Angle Distribution, Maximum Entropy Method

目 次

1. 序論	1
2. 方法論	2
2.1 概要	2
2.2 実装の基本方針	2
2.3 処理の流れ	3
2.4 使用方法	4
3. 検証	5
3.1 内挿機能の検証	5
3.2 摂動機能の検証	5
4. 結論	7
謝辞	8
参考文献	9

Contents

1. Introduction	1
2. Methodology	2
2.1 Overview	2
2.2 Basic implementation policy	2
2.3 Process sequence	3
2.4 How to use	4
3. Verification	5
3.1 For interpolation function	5
3.2 For perturbation function	5
4. Concluding remarks	7
Acknowledgements	8
References	9

This is a blank page.

1. 序論

核データ起因の不確かさを定量化することは原子炉核設計の信頼性を担保する上で重要である。高速炉核設計においては、古くから一般化摂動論に基づいて決定論的手法で評価された核データ感度係数と核データ共分散からサンドイッチルールに基づき核データ起因不確かさが評価されてきた。近年、連続エネルギーモンテカルロコードのライブラリとして使用される ACE ファイルを利用した核データのランダムサンプリングツールが **FRENDY**¹⁾等を実装されたこと²⁻⁴⁾で、解析手法に起因する誤差が小さく、確度の高い不確かさ評価が可能となった。しかしながら、高速炉の炉心解析や遮蔽解析の不確かさ評価を行う上で無視することのできない散乱角度分布に起因する不確かさを定量化する方法が確立していないという 1 つの課題があった。最近になって、著者らにより、平均散乱角余弦の共分散データの情報から、最大エントロピー法⁵⁾に基づきこの不確かさを定量化する手法が開発された⁶⁾。本報告は、**FRENDY/ACE** ファイル摂動ツールに著者らが提案している手法を実装するものである。

究極的には、散乱角度分布に対する Legendre 係数の不確かさが完全に与えられ、これを適正に処理できる核データ処理コードが開発されることが理想であるものの、実現されるまでにはまだ長い時間を要するものと予想される。我が国の評価済み核データライブラリ JENDL では、弾性散乱角度分布の不確かさに対して Legendre 係数の 1 次（平均散乱角余弦 $\bar{\mu}$ ）までの情報しか用意されていないこと（なお、ENDF/B-VIII.0 や JEFF-3.3 では MF34 に高次の不確かさ情報が含まれている）、また NJOY⁷⁾等の核データ処理コードにおいて、高次の Legendre 係数の共分散データを処理できる機能が現状で整備されていないこと等を鑑みると、著者らが提案した手法は今後しばらく利用価値があるものと推測できることから、**FRENDY** に提案手法の実装を行うことにした。

本報告書の構成は次の通りである。2 章で実装の具体的な方法について議論し、3 章で数値解析に基づく実装の検証を行う。最後に 4 章で結論を述べる。

2. 方法論

本章では、本ツールの概要、実装の基本方針、処理の流れ、使用方法について説明する。

2.1 概要

従来の FRENDDY/ACE ファイル摂動ツール（従来ツール）は、Fig.1 に示す MT 番号の核反応を対象として、多群共分散行列のインプット情報に基づき、核データ不確かさに対応した摂動因子をランダムに複数生成させ、その摂動因子を踏まえた ACE ファイル⁸⁾を自動生成するものである。本報告で機能拡張を行った新しいツール（新ツール）では、弾性散乱角度分布が摂動を考慮可能な対象として新たに加わる。摂動因子生成の実行モジュール「make_perturbation_factor.exe」の実行時に、弾性散乱反応の平均散乱角余弦 ($\bar{\mu}$, MT=251) に対する多群共分散行列をインプットとして与えると $\bar{\mu}$ の摂動因子がランダムに生成されるが、新ツールでは、この $\bar{\mu}$ の摂動因子から、最大エントロピー法 (MEM) に基づいて摂動後の弾性散乱角度分布が推定され、摂動を加味した ACE ファイルが生成される。なお、実装にあたって使用した理論式については文献 6 を参照されたい。

2.2 実装の基本方針

実装にあたり採用した基本方針を以下に箇条書きで示す。

- 弾性散乱反応の散乱角度分布のみを対象にする。すなわち、ACE ファイルの AND ブロックで与えられた角度分布データに対してのみ摂動を考慮する。
- 基本的には文献 6 で示した手法の実装を行うが、従来ツールにおける他の核反応に対する実装との整合性を考慮し、必要に応じて文献 6 の方針を変更した実装を行う。
- MT=251 に対する摂動因子が入力されない限りは従来ツールと機能が変わらないように実装を行う。
- 変更するヘッダファイル (.hpp)、ソースファイル (.cpp) は PerturbNuclearData.hpp 及び PerturbNuclearData.cpp のみとする。

文献 6 に示した手法の方針を変更した点について以下に述べておく。従来ツールでは、核分裂スペクトル (χ) や核分裂に伴う中性子発生数 (ν) に対する摂動を考慮する機能が実装されている。ACE ファイルにおける χ や ν のエネルギー依存性の表現方法はいくつかあり、必ずしも汎用的なテーブル形式で与えられていない場合がある。またテーブル形式で与えられている場合でも、断面積データと比較してエネルギーグリッド点が一般的に粗い。そこで既存ツールでは、多群構造の摂動因子に基づいて適切な摂動を与えるため、分布形状がどのような表現で与えられていても、一度、詳細なエネルギーグリッド点を有するテーブル形式に変換し、そのテーブルを使用して摂動因子を考慮するという工夫を行っている。本報告の対象としている弾性散乱角度分布のデータについて目を向けてみると、ACE ファイルにおける散乱角度分布の表現方法は内挿方法の違いを含めて複数（三種類）あり、また、フォーマットの規則上、原理的には、エネルギーグリッド点毎に別々の内挿方法を指定できるという特徴がある。さらに、

散乱角余弦やエネルギーに対するグリッド点についても、断面積データと比較して数が少なく、 χ や ν に対して摂動を考慮する状況と類似している。そこで新ツールでは、 χ や ν に対する実装を参考に、これと整合した実装を行う方針とした。なお、文献 6 では、1 つの ACE ファイルで弾性散乱角度分布の表現方法が統一されているものと仮定し、三種類の角度分布の表現方法に対して個々に別の MEM の適用方法を提案していた。また、エネルギーグリッド点についても、元々のグリッド点を増加させずに摂動を与える方法を示していた。これが文献 6 で示した方針と新ツールで採用した方針の相違点である。

一方で、従来ツールの方針を必ずしも踏襲しなかった点も存在する。従来ツールにおいては、 χ や ν に対する摂動を与える際に基準となる「多数のエネルギーグリッド点を有するテーブル形式」に変換する操作をサンプル毎に繰り返している。本報告で実装の対象とする散乱角度分布に対する摂動に対しては、処理時間の短縮を目的として、最初のサンプルに対してのみ摂動の基準となる確率密度テーブルの作成を行い、残りのサンプルについては、最初のサンプルに対して得られたテーブルを保管したものを再利用する方針をとる。MEM に基づく散乱角度分布の摂動では、各エネルギーグリッド点、サンプル毎に、非線形方程式を解く必要があるため、従来ツールよりも有意に処理時間が増加するものと予測される。そのため、処理時間を少しでも合理化するために、この点においては従来ツールと異なる方針を採用した。

2.3 処理の流れ

$\bar{\mu}$ に対する摂動因子が与えられてから摂動 ACE ファイルが生成されるまでの概略フローを Fig.2 に示す。最初のステップとして、散乱角の値域 $-\pi \leq \theta \leq \pi$ (rad) を n_{μ} 個のビン幅に等分割する。デフォルトでは $n_{\mu} = 100$ が指定されているが、この値は C++ の header ファイル (PerturbNuclearData.hpp) の中で変更可能である。次に、ACE ファイルにおいて指定されている散乱角度分布の表現方法に従って確率密度関数 (PDF) を内挿する。このとき、新しい散乱角度分布の表現方法は、“テーブル化された角度分布+線形内挿 (LOCC₁<0, JJ=2)” に統一する。その後、DF の規格化及び累積分布関数 (CDF) の計算を行う。なお、この内挿オプションの書き換えは、元々の散乱角度分布の表現方法が“LOCC₁<0, JJ=2”以外であった場合には、元のグリッド点近傍で誤差を生む要因となる。しかしながら、 n_{μ} の数が十分に大きければ、この誤差は無視できるほど十分に小さくできるものと予想される (Fig.3 参照)。次に、前の手順で設けた μ の各グリッド点に対して、エネルギー (E) グリッド点に対する PDF の内挿を行う。従来ツールの χ や ν に対する内挿方法と同様に、log scale で 1 のエネルギー間隔を log scale で n_e 個に等分割 (デフォルト値 $n_e = 100$) し、linear-linear 内挿を行う。その後、再び PDF の規格化と CDF の再計算を行う。ここまでの過程で、摂動を行うための基準となる μ 及び E に対する確率密度テーブルが完成する (Fig.4 参照)。

以降の手順では、この基準となる確率密度テーブルを使って、摂動を考慮した ACE ファイルを得る。 $\bar{\mu}$ に対する摂動因子から、摂動された平均散乱角余弦 ($\bar{\mu}^{(i)}$) を計算し、その値から MEM における Lagrange 未定数 λ を評価する⁸⁾。 λ の評価には、二階までの導関数を利用する解探索法: Halley's method⁹⁾を用いる。得られた λ と摂動前の PDF から摂動後の PDF を計算する。最後に PDF の規格化と CDF の計算を行い、ACE ファイルを作成する。以上が

本ツールの処理の流れである。なお、解検索には、Boost C++ライブラリを用いる。

2.4 使用方法

新ツールの使用方法は既存ツールと基本的に同じである。多群共分散行列に基づいてランダムな摂動因子を生成する「make_perturbation_factor.exe」の実行時に、インプットファイルの MT 番号を指定する場所で“251”を併せて入力し、同時に、 $\bar{\mu}$ の共分散を含んだ多群共分散行列を与えれば、弾性散乱角度分布の不確かさを考慮した ACE ファイルを生成することができる。

3. 検証

本章では、前章で示した方法が正しく実装されていることを検証するため、連続エネルギーモンテカルロ法に基づく中性子輸送計算により数値解析を実施する。中性子輸送計算は連続エネルギーモンテカルロコード MCNP5¹⁰⁾を用いて行った。数値解析では、文献 6 でも利用した ORNL のナトリウム遮蔽実験体系¹¹⁻¹²⁾を利用する。摂動は、今回実装の対象とした弾性散乱反応の散乱角度分布に対してのみ考慮するものとし、文献 6 と同様に、JENDL-4.0¹³⁾をベースにして作成された Na-23 の ACE ファイル¹⁴⁾に対してのみ摂動を与えた。 $\bar{\mu}$ に対する摂動因子を与えるための多群共分散行列は文献 15 のものを使用した。ランダムサンプリングにおけるサンプル数は $N_{RS} = 1000$ とした。

3.1 内挿機能の検証

新ツールでは ACE ファイルに摂動を与える前に、基準となる確率密度テーブルを作成するため、①弾性散乱角余弦のグリッド点、②エネルギーグリッド点に対して二段階で確率密度関数の内挿を行う。最初の検証として、この内挿が意図の通り行われていることを確認する。

Fig.5 に弾性散乱角余弦のグリッド点に対する内挿結果を、Fig.6 にエネルギーグリッド点に対する内挿結果を示す。図中の○印が元の ACE ファイルにおけるグリッド点を、●印が内挿により生成された新しいグリッド点を示している。これらの図により、意図した通りに適切に内挿が行われていることが確認できる。

実装された内挿機能により生成された基準の確率密度テーブルが妥当なものであることを確認するため、この確率密度テーブルを ACE ファイルとして出力し、それを使用して ORNL のナトリウム遮蔽実験体系の中性子輸送計算を実施した。中性子検出器の応答に対する解析結果をオリジナルの ACE ファイルを使用して得られた結果とともに Table 1 に示す。両者の相違はわずかであることから、内挿機能の実装は妥当に行われたものと判断した。

3.2 摂動機能の検証

新ツールでは、散乱角余弦やエネルギーのグリッド点に対する確率密度関数の内挿を行っている点や C++を使った実装を行っている点（文献 6 の数値計算では Python を利用していた）において相違がある。新ツールを使ったランダムサンプリングによる不確かさ評価結果を文献 6 における評価結果と比較し、整合性のある結果が得られているか確認する。これにより ACE ファイル摂動機能の検証を行う。

Table 2 に、新ツールで生成された ACE ファイルを使って ORNL のナトリウム遮蔽実験体系で弾性散乱角度分布起因の不確かさ評価した結果を示す。統計誤差は bootstrap 法¹⁶⁾を用いて算出した。新ツールでは文献 6 の結果よりも不確かさの評価結果が若干大きくなる傾向がみられるものの、体系の違いによる不確かさの変化傾向は両手法で同様であることがわかる。この相違の要因は、新ツールにおいて、エネルギーグリッド点をオリジナルの ACE ファイルのものより詳細にして摂動因子を考慮する仕様に変更したことに起因しているものと考えられるが、その影響は核データ起因不確かさと比較して十分に小さく、また、内挿機能の検証につい

ても既に 3.1 節で済んでいることから、摂動機能の実装に問題はないものと判断した。

4. 結論

FRENDY/ACE ファイル摂動ツールの機能を拡張し、弾性散乱角度分布の不確かさに対する摂動を反映した ACE ファイルを、平均散乱角余弦 $\bar{\mu}$ に対する多群共分散行列のインプット情報に基づき生成する機能を実装した。また、ORNL のナトリウム遮蔽実験体系を用いた数値解析により、本ツールの検証を行った。本ツールを利用することで、より確度の高い核データ起因不確かさの定量化が可能になると考えられる。

謝 辞

原子力科学研究所 原子力基礎工学研究センター 炉物理・熱流動研究グループの多田健一氏には、FRENDY 開発者の視点から本ツール開発に関する有益な情報・コメントを多数頂きました。ここに感謝の意を表します。

参考文献

- 1) Tada, K., Yamamoto, A., Kunieda, S., et al., Development of Nuclear Data Processing Code FRENDY Version 2, *J. Nucl. Sci. Technol.*, vol.61, no.6, 2024, pp.830–839. <https://doi.org/10.1080/00223131.2023.2278600>
- 2) Tada, K., Kondo, R., Endo, T., et al., Development of ACE File Perturbation Tool Using FRENDY, *J. Nucl. Sci. Technol.*, vol.60, no.6, 2023, pp.624–631. <https://doi.org/10.1080/00223131.2022.2130463>
- 3) Wieselquist, W., Zhu, T., Vasiliev, A., et al., PSI Methodologies for Nuclear Data Uncertainty Propagation with CASMO-5M and MCNPX: Results for OECE/NEA UAM Benchmark Phase I., *Sci. Technol. Nucl. Inst.*, vol.2013, 2013, 549793. <https://doi.org/10.1155/2013/549793>
- 4) Kleedtke, N., Haecck, W., Hutchinson, J., Utilization of ACE nuclear data file toolkit ACEtk to calculate relative sensitivity coefficients of point-kinetics parameters, *Ann. Nucl. Eng.*, vol.193, 2023, 110031. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2023.110031>
- 5) Wu, N., *The Maximum Entropy Method (Springer Series in Information Sciences 32)*, Springer-Verlag, New York (NY), 1997, 327p.
- 6) Maruyama, S., Yamamoto, A., Endo, T., Quantifying uncertainty induced by scattering angle distribution using maximum entropy method, *Ann. Nucl. Eng.*, vol.205, 2024, 110591. <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2024.110591>
- 7) MacFarlane, R. E., Muir, D. W., Boicourt, R. M., et al., *The NJOY Nuclear Processing System, Version 2016*, LA-UR-17-20093, 2019. <https://doi.org/10.2172/1338791>
- 8) Conlin, J. L.; *A Compact ENDF (ACE) Format Specification*, LA-UR-19-29016, 2019. <https://doi.org/10.2172/1561065>
- 9) Scavo, T. R., Thoo, J. B., On the geometry of Halley's method, *American Mathematical Monthly*, vol.102, no.5, 1995, pp.417–426. <https://doi.org/10.1080/00029890.1995.12004594>
- 10) X-5 Monte Carlo Team, *MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5 – Vol. I: Overview and Theory*, LA-UR-03-1987, 2008.
- 11) Maerker, R. E., Muckenthaler, F. J., Childs, R. L., et al.; *Final Report on a Benchmark Experiment for Neutron Transport in Thick Sodium*, ORNL-4880, 1974.
- 12) Maerker, R. E., Muckenthaler, F. J., Childs, R. L., et al., *The ORNL Benchmark Experiment for Neutron Transport in Thick Sodium*, *Nucl. Technol.*, vol.22, no.2, 1973, pp.275–297. <https://doi.org/10.13182/NT74-A31409>
- 13) Shibata, K., Iwamoto, O., Nakagawa, T., et al., JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering, *J. Nucl. Sci. Technol.*, vol.48, no.1, 2011, pp.1–30. <https://doi.org/10.1080/18811248.2011.9711675>
- 14) Okumura K., *Nuclear Data for Prediction of Isotope Generation and Depletion*, JAEA-

- Conf 2012-001, 2012, pp.39–44. <https://doi.org/10.11484/jaea-conf-2012-001>
- 15) 横山賢治, 杉野和輝, 石川眞ほか, 高速炉用統合炉定数 ADJ2017 の作成, JAEA-Research 2018-011, 2018, 556p. <https://doi.org/10.11484/jaea-research-2018-011>
- 16) Efron, B., Bootstrap Methods: Another Look at the Jackknife, Ann. Statist., vol.7, no.1, 1979, pp.1–26. <https://doi.org/10.1214/aos/1176344552>

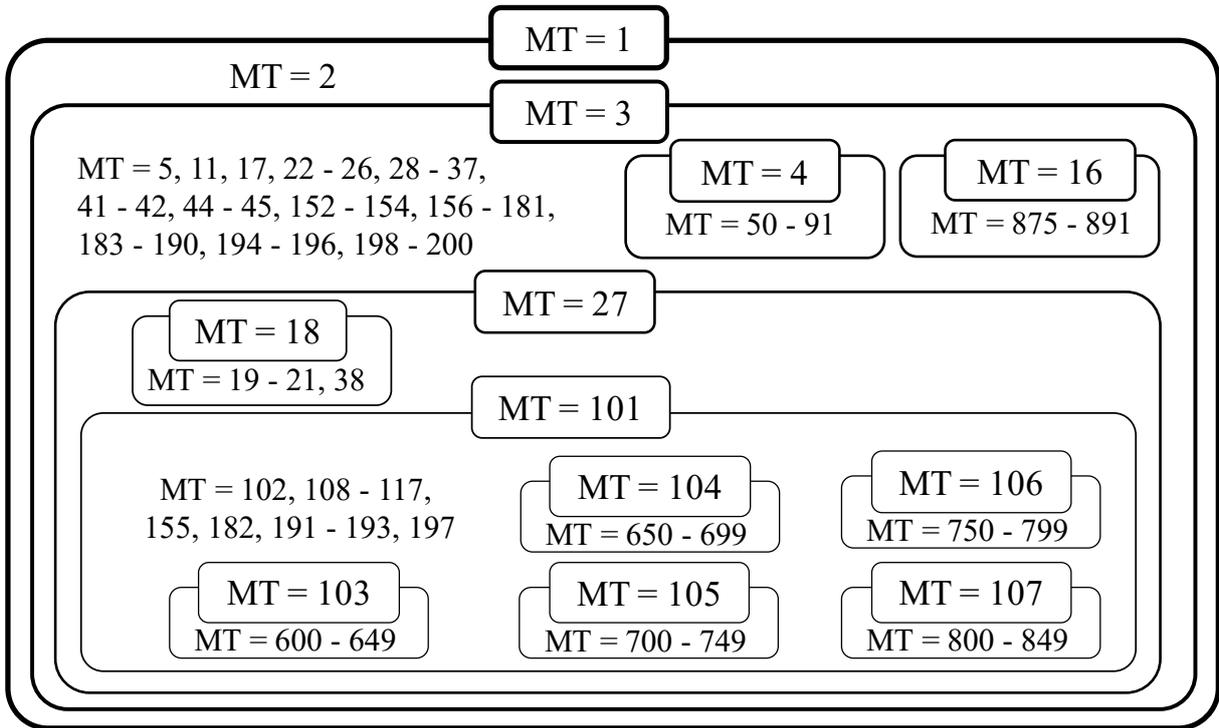


Fig.1 Nuclear reactions that can be handled with the conventional perturbation tool
 (This figure is provided by Dr. Tada.)

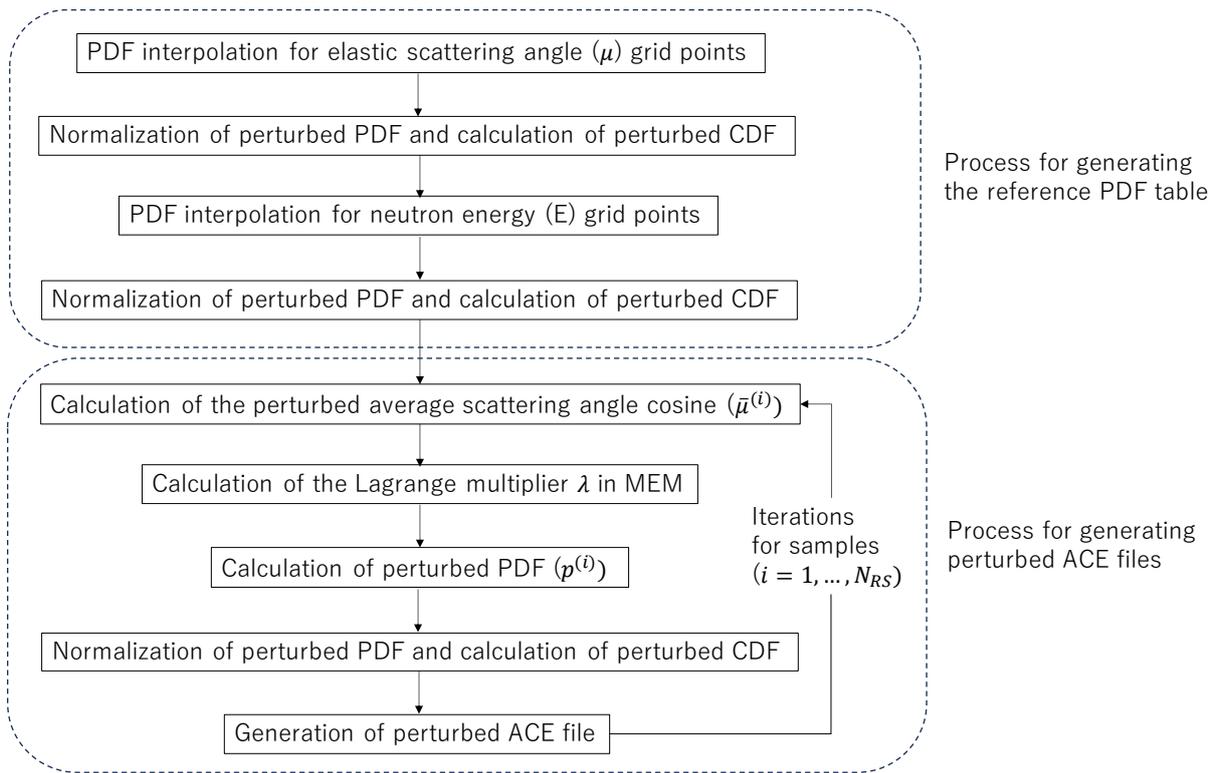


Fig.2 Process sequence for perturbation of elastic scattering angle distribution

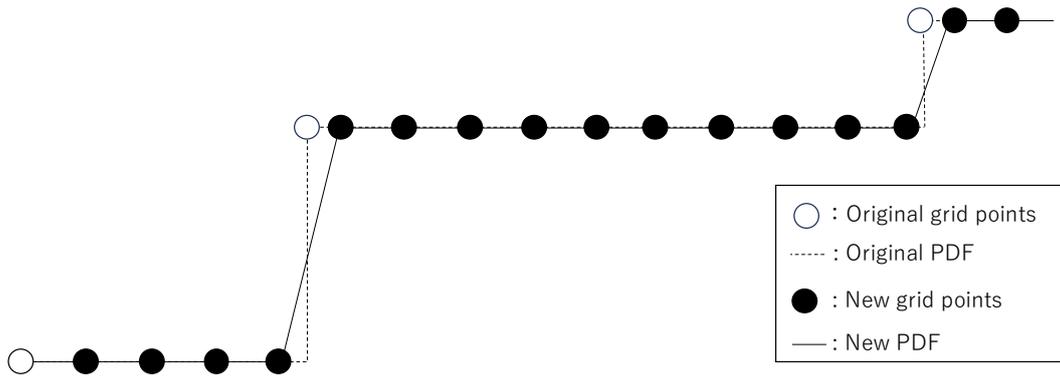


Fig.3 Error factor for PDF in case other than $LOCC_1 < 0, JJ=2$

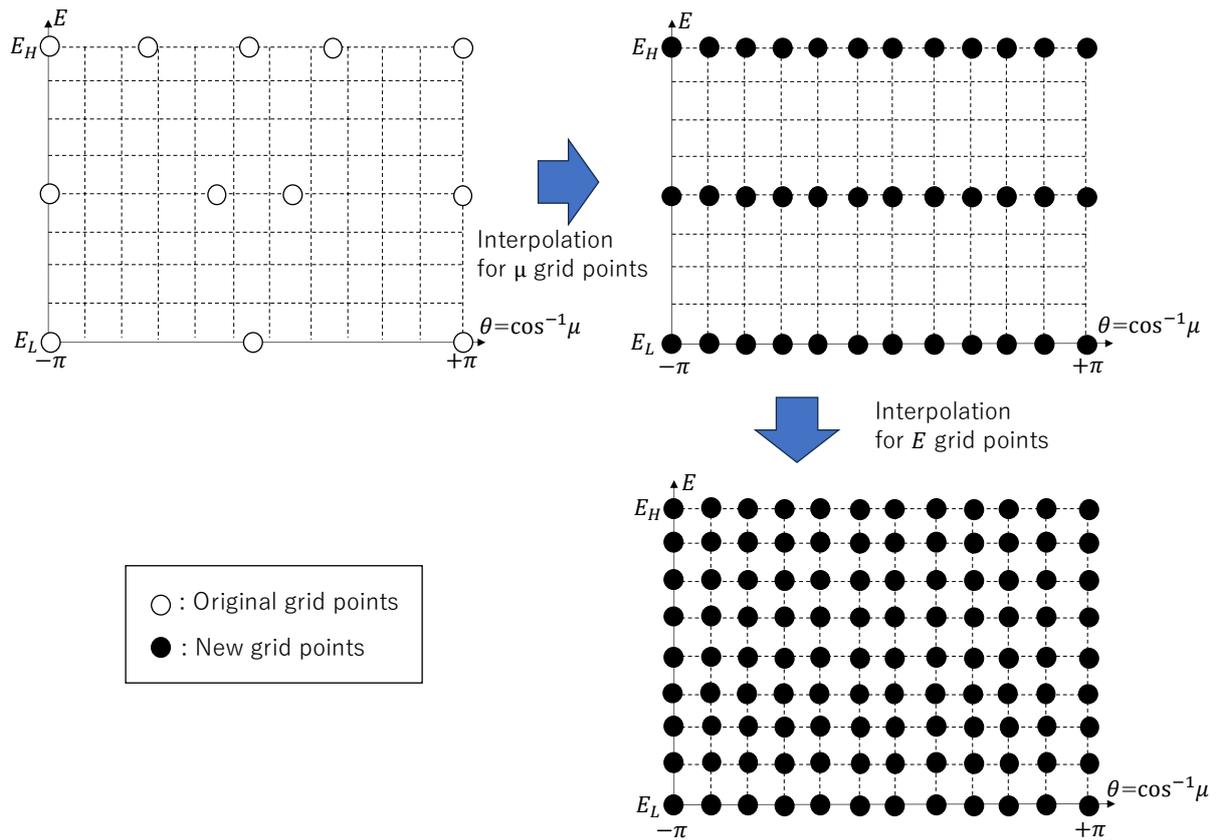


Fig.4 Interpolation procedure for μ and E grid points

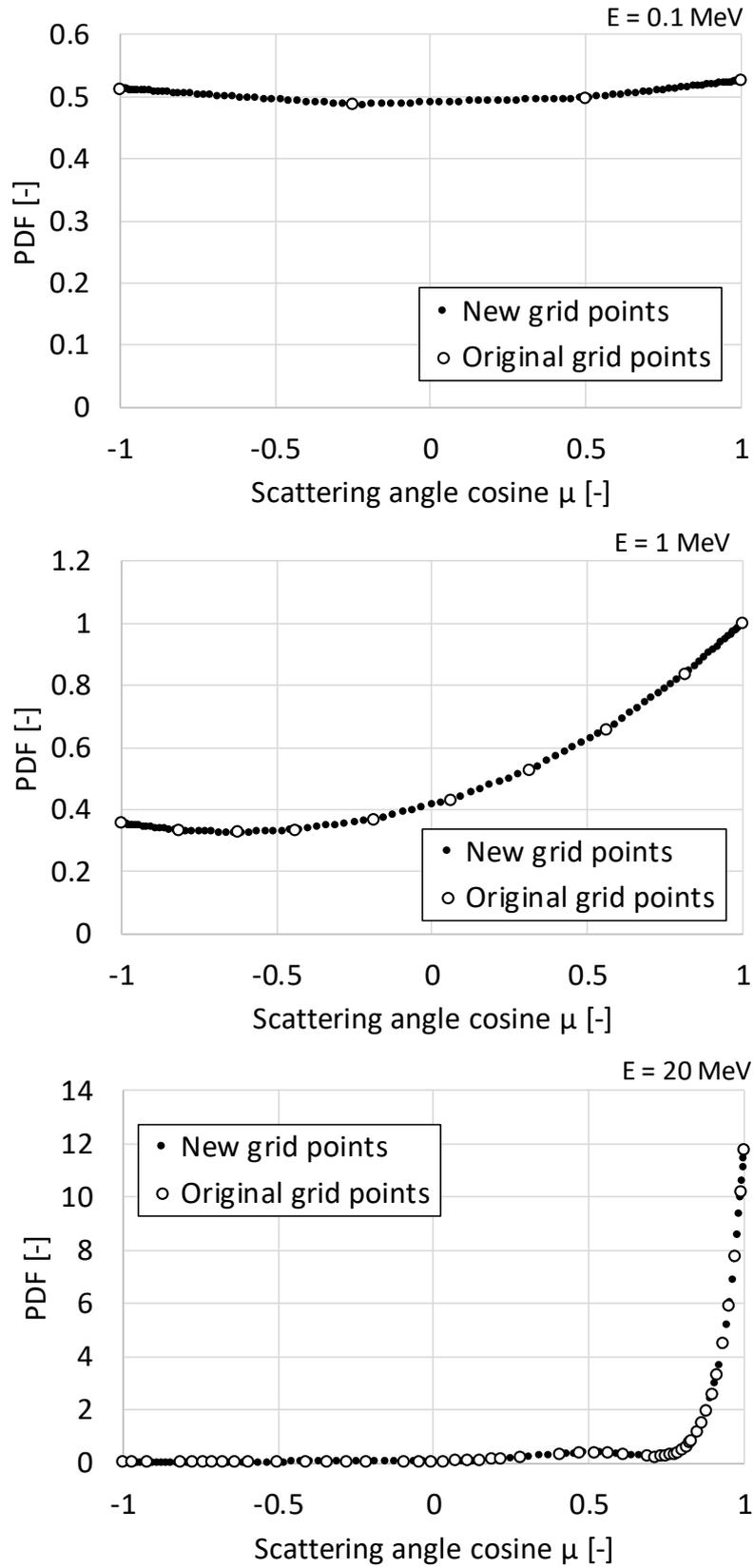


Fig.5 Interpolation results for μ

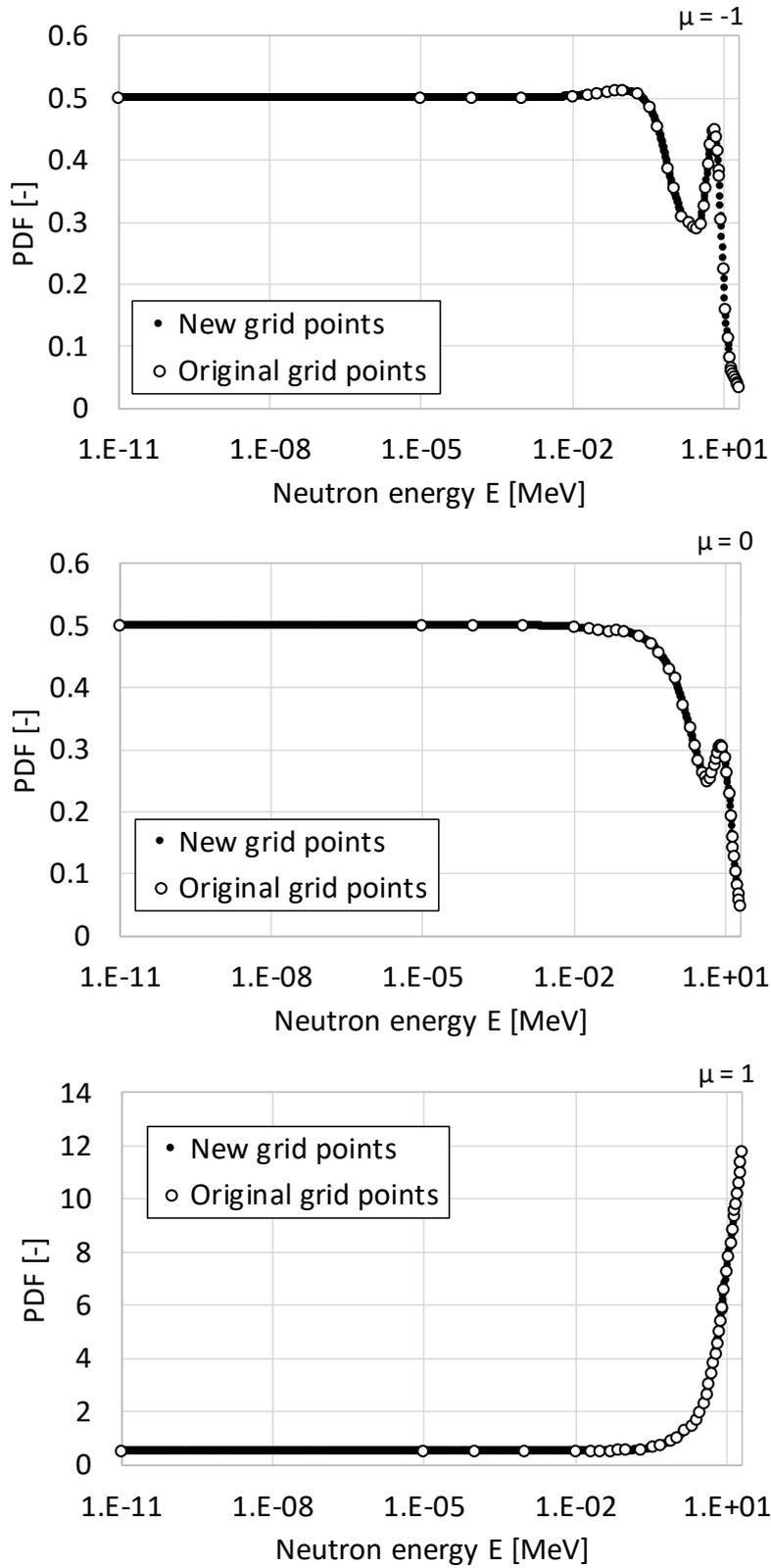


Fig.6 Interpolation results for E

Table 1 Results of verification for linear interpolation function

[unit: s⁻¹W⁻¹]

Neutron counter	6" Bonner Ball		
Shielding thickness	60"	120"	180"
Interpolated ACE file	$(9.43 \pm 0.02) \times 10^0$	$(2.97 \pm 0.01) \times 10^{-1}$	$(4.95 \pm 0.02) \times 10^{-3}$
Original ACE file (ref.)	$(9.46 \pm 0.02) \times 10^0$	$(2.97 \pm 0.01) \times 10^{-1}$	$(4.95 \pm 0.02) \times 10^{-3}$
Difference from ref.	-0.03×10^0	0.00×10^{-1}	0.00×10^{-3}

[unit: s⁻¹W⁻¹]

Neutron counter	Modified Bonner Ball		
Shielding thickness	60"	120"	180"
Interpolated ACE file	$(1.43 \pm 0.00) \times 10^{-1}$	$(7.68 \pm 0.03) \times 10^{-4}$	$(2.29 \pm 0.01) \times 10^{-6}$
Original ACE file (ref.)	$(1.43 \pm 0.00) \times 10^{-1}$	$(7.67 \pm 0.02) \times 10^{-4}$	$(2.28 \pm 0.01) \times 10^{-6}$
Difference from ref.	0.00×10^{-1}	0.01×10^{-4}	0.01×10^{-6}

Table 2 Results of verification for perturbation function

[unit: %]

Neutron counter	6" Bonner Ball		
Shielding thickness	60"	120"	180"
This study	0.74 ± 0.02	1.27 ± 0.03	2.00 ± 0.05
Previous study (ref.)	0.68 ± 0.01	1.21 ± 0.03	1.96 ± 0.04
Difference from ref.	0.06	0.06	0.04

[unit: %]

Neutron counter	Modified Bonner Ball		
Shielding thickness	60"	120"	180"
This study	1.46 ± 0.03	4.01 ± 0.09	6.86 ± 0.15
Previous study (ref.)	1.41 ± 0.03	3.89 ± 0.09	6.65 ± 0.15
Difference from ref.	0.05	0.12	0.21

