

JAERI-M
91-187

FSXLIB-J3: JENDL-3に基づくMCNP用
連続エネルギー断面積ライブラリー

1991年11月

小迫 和明・大山 幸夫・前川 洋

JAERI-Mレポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の間合わせは、日本原子力研究所技術情報部情報資料課（〒319-11茨城県那珂郡東海村）
あて、お申しこしてください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-11茨城
県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

JAERI-M reports are issued irregularly.
Inquiries about availability of the reports should be addressed to Information Division, Department
of Technical Information, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun,
Ibaraki-ken 319-11, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 1991

編集兼発行 日本原子力研究所
印刷 日立高速印刷株式会社

FSXLIB-J3: JENDL-3に基づくMCNP用
連続エネルギー断面積ライブラリー

日本原子力研究所東海研究所原子炉工学部
小迫 和明・大山 幸夫・前川 洋

(1991年10月11日受理)

核融合炉などでの利用を目的として、日本で新しく評価された汎用評価済核データ・ファイルJENDL-3が公開された。核融合中性子工学への応用を目的として、JENDL-3に基づいたMCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーFSXLIB-J3を作成した。本ライブラリーの作成には、核データ処理システムNJOYとMCNP用断面積ライブラリー編集・確認コードMACROSを用いた。本ライブラリーの信頼性は、内包する断面積データとJENDL-3との比較・確認により確かめた。本報告では、MCNP用断面積ライブラリーの形成、FSXLIB-J3作成過程、MACROSコードの使用法、及びFSXLIB-J3の確認について説明し、確認結果の一部を図示する。

FSXLIB-J3: MCNP Continuous Energy Cross Section Library
Based on JENDL-3

Kazuaki KOSAKO, Yukio OYAMA and Hiroshi MAEKAWA

Department of Reactor Engineering
Tokai Research Establishment
Japan Atomic Energy Research Institute
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received October 11, 1991)

The general purpose evaluated nuclear data file, JENDL-3, which was newly evaluated at Japan was released to apply the fusion reactor area and so on. The MCNP continuous energy cross section library, FSXLIB-J3, has been prepared from JENDL-3 for the fusion neutronics application. The FSXLIB-J3 library was produced by the nuclear data processing system, NJOY, and the library compiling and confirming code for the MCNP library, MACROS. The confidence of this library was established by the comparison and confirmation between original JENDL-3 and the cross section data in library. This report describes the format of MCNP cross section library, the production procedure of FSXLIB-J3, the usage of the MACROS code and the confirmation of FSXLIB-J3.

Keywords : Cross Section Library, Nuclear Data, Continuous Energy, MCNP, NJOY, MACROS, Fusion Reactor, Fusion Neutronics, FSXLIB-J3, JENDL-3, Monte Carlo code

目 次

1. はじめに	1
2. MCNP用断面積ライブラリーについて	3
2.1 断面積ライブラリーの概要	3
2.2 連続エネルギー断面積ライブラリーの構成	5
3. FSXLIB-J3の作成	12
3.1 核データ処理システムNJOY	12
3.2 JENDL-3を処理するための修正	14
3.3 作成した断面積ライブラリーFSXLIB-J3	15
4. MACROSコード	25
4.1 入力データ	25
4.2 機能指標の詳細な説明	29
4.3 JCLと入出力ファイル	35
5. FSXLIB-J3の確認	38
5.1 確認方法	38
5.2 確認結果	41
6. まとめ	107
謝 辞	107
参考文献	108
付録A MAKSFコードへの入力データ	109
付録B NJOYシステムのJCLと入力データの例	111
付録C FSXLIB-J3の英文概説	116

Contents

1. Introduction	1
2. Cross Section Library for the MCNP Code	3
2.1 Outline of Cross Section Library	3
2.2 Structure of Continuous Cross Section Library	5
3. Production of FSXLIB-J3	12
3.1 Nuclear Data Processing System NJOY	12
3.2 Modification for Processing of JENDL-3	14
3.3 Produced Cross Section Library FSXLIB-J3	15
4. MACROS Code	25
4.1 Input Data	25
4.2 Detailed Explanation for Functions	29
4.3 JCL and Input/Output Files	35
5. Confirmation of FSXLIB-J3	38
5.1 Confirmation Method	38
5.2 Confirmation Result	41
6. Summary	107
Acknowledgments	107
References	108
Appendix A Input Data of MAKXS Code	109
Appendix B Samples of JCL and Input Data for NJOY	111
Appendix C Outline of FSXLIB-J3 (in English)	116

1. はじめに

核融合炉などの新分野での利用、核分裂炉や高速炉などでの拡充などを目的として、日本で新たに評価された汎用評価済核データ・ファイル JENDL-3¹⁾ が公開された²⁾。この JENDL-3 は、新しい核モデル計算コードの利用や二重微分断面積データなどの最新の断面積測定データを元にしてこれまで以上に高精度なものとなっており、また新たに 2 次ガンマ線生成データが主要な核種に加えられている。

核融合炉の核設計においては、D-T 反応で生じた中性子によるブランケットでのトリチウム増殖、発熱、構造材の放射化及び遮蔽が基本的な設計要素である。これらの要素に対する計算予測精度は、核融合炉開発における重要課題であるトリチウム燃料サイクルの自己充足性などを検討する上で特に高い精度が要求されている。従って、核設計計算に用いる計算手法の精度と適用範囲を確認・検証する必要がある。このために、日本原子力研究所の核融合炉物理用中性子源 FNS (Fusion Neutronics Source) を用いて各種の中性子工学実験が行われ、計算手法を評価できるベンチマーク・データが供給されている。

一般に、核設計計算や中性子工学実験解析に用いる計算手法は、下記のような構成要素から成り、それぞれ不確定性の要因を有している：

計算手法の構成要素	不確定性の要因
1. 評価済核データ ▼	実験データの精度, 核データ評価の精度
2. 断面積ライブラリー ▼	核データ処理手法, ライブラリー形式
3. 輸送計算 ▼	輸送計算の解法, 計算コードへの入力データ
4. 計算結果の評価	計算結果の処理手法, 評価方法, 実験結果の精度

計算手法の精度と適用範囲の検証は、本来、計算手法の構成要素のもつ不確定性を定量的に評価する必要があり、そのためには数多くの適切なベンチマーク実験解析が必要である。個々の不確定性の要因の定量的な評価は、評価の方法や要因の相関などのために非常に困難である（つまり、その要因を評価できる精度と対応した種類のベンチマーク実験が相当数必要となる）。この定量的な評価のため、計算手法全体としての精度と適用範囲の検証が従来行われてきた。しかしこの方法では、真に問題とすべき不確定性の要因とその量がなかなか明確にならず、計算手法の改良が行いにくいという問題がある。このジレンマか

*) 本報告で述べている JENDL-3 は、1990年12月に改訂された Revision 1 である。

ら脱却するためには、現在不確定性の最も小さいと思われる構成要素で計算手法を再構築し、対象となる不確定性の要因と量を低減した上での検証が必要不可欠である。

このためには、計算手法の構成要素として、不確定性の最も小さい輸送計算コードと核データを選定することが当然要求される。輸送コードの選定に際しては、断面積ライブラリーに関しても十分な配慮が必要であり、また核融合中性子工学において対象となる粒子は中性子と光子である。これらを踏まえて、輸送計算コードは3次元モンテカルロ・コードMCNP²⁾を選定した。選定理由は、MCNPコードは非常に精緻なライブラリー形式と精密なモンテカルロ機構を有しているためである。評価済核データは、JENDL-3である。

この組み合わせで計算手法を構築するためには、MCNPが直接JENDL-3を利用できないために、JENDL-3からMCNP用の断面積ライブラリーを作成することが必要となる。このため、核データ処理システムNJOY³⁾とMCNP用断面積ライブラリー編集・確認コードMACROSを用いて、JENDL-3からMCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーFSXLIB-J3を作成した。特に、MCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーは、評価済核データの形式に類似しており、ほぼ核データと同一の精度であると見なせる。これにより、計算手法の断面積ライブラリーに関する不確定性の要因を考慮せずに検証が行える。

本報告では、上記の目的で核融合中性子工学のためにJENDL-3から作成したMCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーFSXLIB-J3について説明する。MCNP用断面積ライブラリーについての基本的な説明に加えて、JENDL-3からNJOYとMACROSによりFSXLIB-J3を作成する過程についても説明する。最後に、FSXLIB-J3がJENDL-3を正しく反映したものになっているかどうかを調べるための確認方法とその確認結果について述べる。

2. MCNP用断面積ライブラリーについて

MCNPは、ロスアラモス国立研究所(LANL)において開発され、現在もなお様々な改良が行われている中性子/光子結合の汎用3次元モンテカルロ輸送計算コードである。このMCNPの特徴は以下のキーワードに代表される: 連続エネルギー, 一般化幾何形状, 高精度な断面積ライブラリー, 時間依存, 中性子/光子結合, 臨界系の固有値, 高性能な線源とtally機能, 豊富な分散低減技法, 汎用モンテカルロ・コード(これらの詳細については、参考文献2を参照されたい)。MCNPは、このような優れた機能によって詳細で高精度な輸送計算を行うことができ、現在世界の輸送計算コードの主流となっている。

MCNPの特徴である連続エネルギーによる計算を実施するには、連続エネルギー相互作用データから成る連続エネルギー断面積ライブラリーが必要不可欠である。しかし、MCNPはそれ以外の数種類の断面積ライブラリーも使用できる。この章では、まずMCNP用断面積ライブラリーの概要について説明し、次いで詳細に連続エネルギー断面積ライブラリーについて述べる。

2.1 断面積ライブラリーの概要

MCNP用断面積ライブラリーは、下記の2つのデータ・テーブル(またはファイル)から構成されている:

- 核データ・テーブル (断面積ファイル)
- 検索データ・テーブル(検索ファイル)

後者の検索データ・テーブルは、ユーザーが指定した核種の断面積データをMCNPが核データ・テーブルから読み込むために必要な検索データが収納されている。検索データ・テーブルは、それぞれの核種についてのTable 2.1に示した検索データ(中性子に関しては10個, 光子に関しては11個のデータ)の表記から成っている。個々の検索データは、ブランクで区切られたfree-field形式で記述されている。検索データ・テーブルのファイル属性は、1レコード80文字のカードイメージBCD形式の順編成ファイルである。

前者の核データ・テーブルは、MCNPが検索データ・テーブルを参照して実際に読み込む輸送計算に必要な断面積データ(核データ)が収納されている。核データ・テーブルの型式には、Type 1, Type 2, Type 3の3型式があり(Table 2.1中のファイル型式の項を参照)、そのいずれでもMCNPは読み込み可能である。それぞれの型式の属性と特徴をTable 2.2に示す。このTable 2.2から、Type 2がMCNPの計算で通常利用される核データ・テーブルの型式であり、Type 1とType 3はその意味で特殊な型式であると言える。これは、Type 2が必要なファイル容量が小さくかつ核データ・テーブルの読み込みが高速で行えるという利点を持っているためである。Type 1は、主に異なる計算機システム間の移動用の型式であり、MCNPコード・パッケージ中のMAKXS FコードによりType 2

型式に変換できる（逆変換も可能である；MAKXS Fの入力データについては付録Aを参照）。

また、MCNP用の核データ・テーブルには、下記の5種類がある（付記した括弧内の英字は核データ・テーブル指標の記号を示す）：

- (1) 連続エネルギー中性子相互作用データ (C)
- (2) 離散反応中性子相互作用データ (D)
- (3) 光子相互作用データ (P)
- (4) 中性子ドジメトリー断面積 (Y)
- (5) 熱中性子散乱法則 $S(\alpha, \beta)$ データ (T)

それぞれのテーブルの用途と内容について以下で述べるが、詳細については参考文献2を参照されたい。

A. 中性子相互作用データ（連続エネルギーと離散反応）

中性子問題において必ず要求されるのが、この中性子相互作用データである。連続エネルギーと離散反応の違いは、断面積が連続エネルギーではpointwiseで与えられているのに対して離散反応では262群に平均化（平坦荷重関数）されていることだけである。小型計算機や記憶容量制限下ではこの離散反応が適していると言える。

中性子相互作用データは、評価済核データで与えられた全ての反応の断面積、全ての非吸収反応の散乱中性子の角度分布、2次中性子のエネルギー分布、そして2次光子生成に関するデータを含むものについては2次光子生成の生成断面積、光子角度分布、光子エネルギー分布が記述されている（第2.2節参照）。

このデータを使用するためにはMCNP入力データ中の物質記述カードのZAID（Table 2.1参照）の中の核データ・テーブル指標に、連続エネルギーはCか空白を記入し、離散反応はDを記入する。

B. 光子相互作用データ

光子相互作用データは光子問題に必ず要求される。中性子／光子結合問題では、中性子相互作用データが入力されればその核種に対応する光子相互作用データが自動的に準備される（従って、入力しない）。

MCNPに付属している光子相互作用データは、 $Z=1$ から $Z=94$ までの全ての元素について用意されている。エネルギーの関数である断面積は、コヒーレント散乱、非コヒーレント散乱、電子対生成と光電効果について与えられている。エネルギー格子は、元素毎に特別に用意され、約40から60点である。散乱光子の角度分布とエネルギー分布は、微分クライン-仁科方程式などによって求められている。

このデータを使用するためにはMCNP入力データ中の物質記述カードのZAIDの中の核データ・テーブル指標に、Pか空白を記入する。

C. 中性子ドジメトリー断面積

中性子ドジメトリー断面積は、輸送計算には使用できないデータであり、tally の反応関数として使用するエネルギー依存断面積である。これは、1つかそれ以上の反応についてのエネルギーと断面積の対の形式で与えられている。隣接するエネルギー点間の内挿は、任意の形式で記述できる。

このデータを使用するためにはMCNP入力データ中のFMカードにより参照される物質記述カードのZAIDの中の核データ・テーブル指標に、Yを記入する。

D. 熱中性子散乱法則 $S(\alpha, \beta)$ データ

$S(\alpha, \beta)$ データは、通常は要求されないが、どんな中性子問題にも使用できる（主に、中性子の熱化を含む問題に使用される）。このデータは、分子や固体結晶による熱中性子散乱の完全な表現に必要とされるものを含んでおり、現行のものは4 eV以下の中性子エネルギーに対して与えられている。

この $S(\alpha, \beta)$ データは、中性子相互作用データの熱エネルギー部分に置き換えられて使用される。しかし、現在限られた分子の核種でしか利用できないので、今後充実させる必要がある。

このデータを使用するためにはMCNP入力データ中の物質記述カードに対応するMTカードのZAIDの中の核データ・テーブル指標に、Tか空白を記入する。

2.2 連続エネルギー断面積ライブラリーの構成

MCNPの特徴である高精度な計算を実施するためには、連続エネルギー断面積ライブラリーの使用が不可欠である。連続エネルギー断面積ライブラリーは、核データ・テーブルの連続エネルギー中性子相互作用データとそれに対応する検索データ・テーブルから成る。検索データ・テーブルはどの核データ・テーブルでも同一形式であるので、連続エネルギー中性子相互作用データの構成について述べれば、断面積ライブラリーの実質的な構成を述べたことになる。

それぞれの核種の連続エネルギー中性子相互作用データ中の基本的な構成は、下記のように分類できる：

構成要素及び内容	MF
1. 核種の基本データと構成要素の位置アドレス	—
2. 主要反応断面積（エネルギー格子，全断面積，弾性断面積，捕獲断面積，発熱数）	3
3. 核分裂中性子放出数（ $\bar{\nu}$ ：核分裂性物質にのみ存在）	3

4. 中性子相互作用反応基本データ (MT番号, Q値, 2次中性子数)	3
5. 中性子相互作用断面積 (アドレスと断面積)	3
6. 中性子角度分布 (アドレスと角度分布)	4
7. 中性子エネルギー分布 (アドレスとエネルギー分布)	5
8. 光子生成データ (光子生成全断面積, 30x20 行列)	1 2, 1 3
9. 光子生成反応データ (MT番号, エネルギー, 光子放出数など)	1 2
10. 光子生成断面積 (アドレスと断面積)	1 3
11. 光子角度分布 (アドレスと角度分布)	1 4
12. 光子エネルギー分布 (アドレスとエネルギー分布)	1 5
13. その他	-

この中の光子は、中性子相互作用に起因して2次的に生成される光子である(中性子誘導光子、または2次光子)。従って、核データ中に2次光子生成データ(MF=12~15)が含まれている核種のみが、連続エネルギー中性子相互作用データ中に光子生成に関するデータを含む。以下で、それぞれの構成要素の具体的な内容について説明する。

1. 核種の基本データと構成要素の位置アドレス: 連続エネルギー中性子相互作用データに収納されているこの核種の基本データが最初に位置する。基本データは、核種識別番号(ZAID), 原子量, 処理温度(MeV単位), 処理した日付, コメント, MAT識別番号, 光子用の元素に含まれる全ての同位体のZAIDと原子量の組(最大16個まで)である。その次に、構成要素の位置アドレスとしてNXSとJXS配列がある。NXS配列は、断面積データ長, ZAID, エネルギー格子数, 弾性散乱を除く反応数と2次中性子反応数, 光子生成反応数を含む。JXS配列は、上記で表記した構成要素のアドレスとデータのそれぞれの開始アドレスを含む。(なお、NXSとJXSの内容は、光子相互作用データ, 中性子ドジメトリ断面積, $S(\alpha, \beta)$ データのそれらとは異なることに注意されたい。)

2. 主要反応断面積: 断面積データはここから始まり、この主要反応断面積に含まれるものは、エネルギー格子, 全断面積, 弾性散乱断面積, 捕獲断面積, 平均発熱数(heating number)であり、断面積はエネルギー格子に対応している。

3. 核分裂中性子放出数: 核分裂性物質についてのみ存在する平均核分裂中性子放出数($\bar{\nu}$)である。これは、入射中性子エネルギーの関数であり、即発と全 $\bar{\nu}$ またはそのどちらかである。

4. 中性子相互作用反応基本データ: ここには、弾性散乱を除く全ての中性子相互作用反応のMT番号(ENDF/B形式の表記に準拠), Q値, 反応型式情報(2次中性子の数及び角度分布系(実験室系または重心系))が含まれる。

5. 中性子相互作用断面積: ここには、弾性散乱を除く全ての中性子相互作用反応のそれぞれの開始アドレスと断面積が含まれ、断面積はエネルギー格子に対応している。

6. 中性子角度分布: ここには、2次中性子を放出する全ての反応のそれぞれの開始アドレスと角度分布が含まれる。この角度分布は、入射中性子エネルギーの関数であり、32個の等確率な方向余弦(μ)区分により表現されている。

7. 中性子エネルギー分布: ここには、弾性散乱を除く2次中性子を放出する全ての反応の開始アドレスとエネルギー分布が含まれ、エネルギー分布は入射中性子エネルギーの関数である。

8. 光子生成データ: ここには、エネルギー格子に対応した光子生成全断面積及び2次光子エネルギー分布の30x20行列(入射中性子エネルギー30群と放出光子エネルギー20群)が含まれる。この光子生成データの形式は、1980年以前に連続エネルギー中性子相互作用データに収納される際に、2次光子生成に関する唯一の表現形式として使用されていたものである。しかし現在は、以下の光子生成反応データ、断面積、角度分布、エネルギー分布の形式で与えられるので、その形式のデータを有する核種はMCNP計算でこの光子生成データは使用されない。

9. 光子生成反応データ: ここには、全ての光子生成反応のMT番号(ENDF/B準拠のMT番号と生成される光子の離散エネルギーにより順序付けられた番号(n)($MT*1000+n$)), MF番号, 反応の生じる入射中性子エネルギーの範囲(上限と下限), 及びMF=12に関しては光子の離散エネルギー毎にmultiplicitiesが含まれる。なお、離散エネルギーに対してMCNPはmultiplicitiesしか認めておらず、遷移確率行列は対応しない。

10. 光子生成断面積: ここには、光子生成断面積が与えられている光子生成反応の開始アドレスと断面積が含まれ、断面積はエネルギー格子に対応している。

11. 光子角度分布: ここには、全ての光子角度分布のそれぞれの開始アドレスと角度分布が含まれる。この角度分布は、入射中性子エネルギーの関数であり、32個の等確率な方向余弦(μ)区分により表現されている。しかしながら、現在の核データの殆どの核種は、この分布が与えられておらず等方分布となっている(但し、JENDL-3のC-12には角度分布がある)。

12. 光子エネルギー分布: ここには、全ての光子エネルギー分布の開始アドレスとエネルギー分布が含まれる。このエネルギー分布は、離散エネルギーかまたは連続エネルギー分布であり、連続エネルギー分布は入射中性子エネルギーの関数である。

13. その他: ここには、光子生成反応データにmultiplicitiesが与えられている反応が光子生成断面積を求めるために必要な中性子相互作用断面積のMT番号(ENDF/B準拠)及びもし核分裂性物質であるならばエネルギー格子に対応した全核分裂断面積を含む。

連続エネルギー中性子相互作用データの大きさ(データ数)は、基本的にはエネルギー格子数と反応数によって決まる。エネルギー格子数は、核データの断面積表記におけるエ

エネルギー点数, 内挿条件, 特に共鳴パラメータに依存している。反応数は最大でも50個程度であるために、エネルギー格子数の方が支配的である。このエネルギー格子の精度については、第3.1節を参照されたい。

中性子相互作用データ中のエネルギーの単位は[MeV]であり、断面積の単位は[barn]である。

Table 2.1 Data in the directory table for the MCNP code

Position	directory items	data format	description
1	Name of the Nuclear Data Table	character * 10	ZAID [atomic number(zzz) + mass number (aaa) + a decimal point (.) + evaluation identification (id) + nuclear data table identification (n)] For example, ^{235}U in continuous energy table is zzzaaa.idn = 92253.01C.
2	Main Atomic Weight	real	The atomic weight must be exactly the same as it appears in the nuclear data table.
3	File Name	character * 8	The file name is a string of up to eight characters in a form allowed by the local installation. At JAERI, this name is an identification for the file of nuclear data table.
4	Access Route	character * 70	The access route tells how to get hold of the file if it is not already accessible. At LANL, it is a CFS path name. If there is no access route, this entry should be a zero (at JAERI, this is a zero).
5	File Type	integer (1, 2, or 3)	MCNP reads from three types of nuclear data tables: Type 1 - standard formatted tables (sequential, 80 characters per a record). Type 2 - standard unformatted tables. These are direct-access, binary files. Type 3 - non-standard tables. These are direct-access, binary files, non-portable ACE format.
6	Record Number	integer	For Type 1 and 2, the record number is the number of the first record of the nuclear data table. For Type 3, this is the disk address of the first word of the table.

Table 2.1 (continued)

Position	directory items	data format	description
7	Table Length	integer	A nuclear data table consists of two blocks. First block is a collection of pointers, counters, and character information. Second is real nuclear data. For Type 1 and 2, the table length is the length of second block. For Type 3, this is the total length of two blocks.
8	Record Length	integer	The record length is the file's attribute of nuclear data tables. At JAERI, this is 2048 for Type 2.
9	Number of Entries per Record	integer	This is the number of data per record in the second block of table. This applies only to Type 2 files, and at JAERI the number is 512.
10	Temperature	real	The temperature (in MeV), at which a neutron table is processed.
11	Pairs of ZA and Atomic Weight	integer, real	These are required for photon tables only. An entry is necessary for each isotope of the element. As with the main atomic weight, the atomic weights here must match the entries in the cross-section table exactly.

Table 2.2 Three types of nuclear data tables for the MCNP code

items	access way	format	record length	portability	description
Type 1	sequential	formatted	80	yes	This is used to transmit nuclear data libraries from one installation to another. This is very bulky and must be read slowly.
Type 2	direct	unformatted (binary)	unknown	no	This is locally generated from Type 1 tables using the MAKXSF code. This is used mostly because this is more compact and faster to read than Type 1.
Type 3	direct	unformatted (binary)	unknown	no	This is the ACE format (A Compact ENDF) that remain as an option to users at LANL and on the MFE network.

3. FSXLIB-J3の作成

MCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーの作成は、通常、核データを処理コードにより処理して核種毎に連続エネルギー中性子相互作用データを作成し、それらを連続エネルギー断面積ライブラリー（核データ・テーブルと検索データ・テーブル）に編集するという手順を踏む。

この章では、その手順に応じて中性子相互作用データを作成する核データ処理システムNJOY, JENDL-3を処理するためにNJOYに施した改良点、及び、編集・作成したFSXLIB-J3ライブラリーについて述べる。

3.1 核データ処理システムNJOY

一般に使用されているMCNP用断面積ライブラリーは、LANLで作成・確認されてMCNPと共に公開されたものである。核データから連続エネルギー中性子相互作用データ（第2.2節参照）を作成するには、その核データの形式に対応した核データ処理コードが必要である。LANLでの連続エネルギー中性子相互作用データの作成にあたっては、ENDF/B形式⁴⁾はNJOY、ENDL⁵⁾はMCPOINT核データ処理コード⁶⁾が使用されている。現在世界的な趨勢として、核データ記述形式はENDF/B形式に統一されてきている（米国でのENDF/Bの評価の歴史的な進展に伴いその形式にはB-IV, -V, -VIのバージョンがある）。従って、NJOYがMCNP用断面積ライブラリーのための核データ処理コードの中核といえる。

NJOYは、ENDF/B形式の核データを処理するコードとしてLANLにおいて開発され、現在も更新がなされている。NJOYが作成できる処理結果は、群定数とACE形式データ（A Compact ENDF type cross section data; 連続エネルギー中性子相互作用データのNJOYにおける呼称）である。特に、群定数は様々な多群断面積ライブラリーの構造に対応した形式で作成でき（例えば、MATXS, CCCC, DTFなど）、世界中の多くの多群断面積ライブラリーの作成のために使用されている。更に、現在ENDF/B形式からACE形式データを作成できる唯一のコードとしてその価値は高まっている。

NJOYにも開発の段階によって幾つかのバージョンがあり、83/6, 87, 89, 89.31, 91の5つのバージョンが1980年以後に公開されたものである。後半の3つはENDF/B-VIを処理できるように改良されてきたもので、最後の91バージョンはACEデータまで完全にカバーしたものとなっている。本報告のJENDL-3に基づいた連続エネルギー断面積ライブラリー作成作業で使用したNJOYは、83/6バージョンである。これは、JENDL-3がB-V形式であることと、NJOY導入時に利用可能な最新版が83/6であったためである。従って、将来B-VI形式を処理するためには最新の91バージョンの導入が必要である（しかし、B-VIの特徴であるエネルギー・角度相関(MF=6)を反映した断面積ライブラリーを作成するためには、MCNPの粒子サンプリング法を含めたライブラリ

一の構成要素の変更が必要となるであろう)。

NJOYには、計算資源の効率的利用という特徴もある。これは余りに複雑な処理手法を用いて計算資源(特に計算時間)を浪費することなしに簡明に核データを処理することに拠っている。非常に厳密な精度での議論をすると幾つかの問題を生じるが、通常の計算の場合には問題とはならない。

NJOYを用いて核データからACE形式データを作成し、それらから断面積ライブラリーを作成するために、構築した処理の流れをFig. 3.1に示す。この流れ中で、核データは、NJOYの各モジュールによる処理を経て、ACE形式データとなってNJOYST2ファイルに出力される。この処理を行うために必要なNJOYのそれぞれのモジュールの機能について下記に述べる。(ACEデータ作成過程に必要なモジュールは省略した。)

モジュール名	機能と内容
1. MODER	: 核データのファイル属性をBCD形式からバイナリー形式に変換する。
2. RECONR	: バイナリー形式の核データからそのエネルギー点間の内挿モードともしあるならば共鳴パラメータに基づいて、ある精度内で線形内挿可能なpointwiseデータ(エネルギーと断面積の対)を再構成し、PENDF(Pointwise ENDF)ファイルを出力する。
3. BROADR	: ある要求された温度でPENDFのpointwise断面積の共鳴ピークなどに対してドブラー拡張を行い、そしてある線形内挿の精度内でエネルギー点の間引きを行なってPENDFファイルを再出力する。
4. UNRESR	: 非分離共鳴領域を持つ核種の共鳴パラメータのエネルギー格子で自己遮蔽非分離共鳴断面積を計算する(GROUPRモジュールのための処理であり、ACEデータ作成過程の本質ではない)。
5. HEATR	: PENDFからエネルギー・バランス法によってpointwise平均発熱数を計算しPENDFファイルに出力する。
6. THERMR	: 中性子熱エネルギー領域での中性子散乱断面積を再作成し、PENDFファイルに出力する。(もし $S(\alpha, \beta)$ データの効果を含んだACEデータを作成したいならば、ここで $S(\alpha, \beta)$ 処理をする。そうでなければ、通常自由気体モデルで処理する。)
7. GROUPR	: ACERモジュールで2次光子エネルギー分布の30x20行列を作成するために必要な多群形式の光子生成断面積を計算する(現在では連続エネルギー形式の光子生成反応データで光子生成が扱われており、ACEデータ作成過程の本質ではない)。
8. ACER	: 上記の処理を経たPENDFファイルから角度分布とエネルギー分布に関する処理を行い、ACE形式に全てのデータを編集・整理し、最終結果としてNJOYST2ファイルにACE形式データを出力する。

NJOYにより核データを処理する際には、当然のことながら幾つかの処理条件を設定

しなければならない。作成したFSXLIB-J3断面積ライブラリーは、核融合炉の核設計や中性子工学実験解析への適用を主目的にしており、それらを反映して下記のような処理条件を設定した。

モジュール	処理パラメータ	設定条件
RECONR	pointwise データの再構成精度	0.5 %
BROADR	ドップラー拡張による再構成精度 ドップラー拡張の上限エネルギー 断面積処理温度	0.5 % 共鳴領域の上限 または 非弾性散乱の最下限閾値 300° K のみ
THERMR	熱領域の上限エネルギー 熱領域の非弾性オプション	4.6 eV 自由気体モデル
GROUPE	多群光子生成	中性子30群, 光子94群, 1/E weight, $P_1=5$
ACER	等確率角度区分数	32

NJOYへの入力データや詳細な内容については、参考文献3を参照されたい。NJOYのFACOM用JCLと実際の処理に用いた幾つかの核種に対する入力データの例を付録Bに示す。

3.2 JENDL-3を処理するための修正

JENDL-3は、1989年12月に日本原子力研究所シグマ研究委員会JENDL-3編集グループから公開された世界でも最新の汎用評価済核データ・ファイルである¹⁾。これには、核分裂炉、核融合炉の設計や遮蔽計算などに必要な171核種の中性子核データが収録されている。また、核データの表記はENDF/B-V形式に準拠している。

このJENDL-3を処理してACE形式データを作成するには、NJOYによる処理が前節で述べたように必要である。そのためには、まずNJOYを原研のFACOM計算機に導入し、その計算状態を確認する。その上でJENDL-3の処理とテストを行い、もし修正が必要ならばそれを行って正しい処理ができるようにしなければならない。これらの過程で行ったNJOYの83/6バージョンに対する修正(改良)事項を述べ、利用者への参考とする。

最初のFACOMへの導入に関しては、導入したNJOYがIBM計算機仕様であったため大きな問題はなかったが、下記のような改良を行った:

1. 文字変数の分離とその宣言文の追加
2. 原子量を格納する変数の倍精度化
3. 幾つかの箇所での倍精度化
4. 入出力ファイルに関するOPEN/CLOSE文の削除
5. その他のマイナー・チェンジ（副プログラムの引数の整合性など）

次にJENDL-3を実際に処理する過程で、主として下記のような改良をNJOYに行った（大括弧はその改良が必要な主なモジュール名を示す）：

1. pointwise データを収納するための配列サイズの拡張 [ACER]
2. Be-9の(n,2n)レベル反応での中性子放出数(MCNPの取り扱いとの整合性) [ACER]
3. 内挿モード(INT=3~5)の追加
4. MF=5のtabulated energy distributions(LF=1)中にNK個のサブセクションがある場合にそれを1個のサブセクションに編集する処理 [GROUPR, ACER]
5. Reich-Moore 形式分離共鳴断面積の処理(ENDF/B-V形式では許されていない共鳴パラメータ表現のため) [RECONR]
6. MF=12の光子生成遷移確率(L0=2)の表記を光子生成multiplicities(L0=1)の表記に変換する処理(MCNPはL0=2を許さないため) [HEATR, GROUPR, ACER]
7. 共鳴エネルギー範囲の最大値の設定(同位体毎にサブセクションが与えられている場合の対策) [RECONR]
8. MF=4のtabulated probability angular distributions(LTT=2)処理の適正化(32等確率余弦区分への変換時の積分計算) [ACER]
9. ドップラー拡張を行う最大エネルギーの選定(最大共鳴エネルギー、非弾性散乱の下限エネルギーと入力上限エネルギーの中からの選定) [BROADR]
10. MF=14の光子角度分布の処理(等方分布取り扱いのみであったが、C-12には角度分布が与えられているので32等確率余弦区分取り扱いを追加した) [ACER]
11. 非分離共鳴(LRU=2)のLRF=2(全パラメータがエネルギー依存)でのpoint-wise断面積の計算 [RECONR]

上記の改良の中で4, 5, 6, 8は、サブルーチンの大幅な修正または追加を必要とした。これらの改良を施したNJOYによりJENDL-3の処理が可能となった。

3.3 作成した断面積ライブラリーFSXLIB-J3

第2.1節で述べたようにMCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーは検索データ・テーブルと核データ・テーブルから成り、その核データ・テーブルは連続エネルギー中性

子相互作用データである。その連続エネルギー中性子相互作用データと検索データ・テーブルは、Fig. 3.1に示した手順で作成される。

JENDL-3を処理できるように改良したNJOYを用いて第3.1節で述べた条件下でJENDL-3のそれぞれの核種を処理してNJOYST2ファイルが作成された。それらのファイルをMACROSCコード(第4章参照)で順次編集し、連続エネルギー断面積ライブラリーFSXLIB-J3を作成した。このFSXLIB-J3は、検索データ・テーブルFSXDIRJ3と核データ・テーブル(連続エネルギー中性子相互作用データ)FSXLIBJ3から成る。FSXLIBJ3テーブルは、ファイル容量の低減化と入出力処理の効率化などのために、Type 2の直接編成ファイル(レコード長2048)で作成した。

FSXLIB-J3ライブラリーは、次の2種類を作成した。1つは核融合炉核設計や核融合中性子工学実験解析に必要と考えられる基本的な46核種を収納し、ファイル容量として419トラックを要する標準FSXLIB-J3である。もう1つはJENDL-3の全核種の約2/3にあたる116核種を収納し、811トラックを要する拡張FSXLIB-J3である。収納されている核種とその特性をTable 3.1に示す。2種類作成した理由は、利用者の使用目的や使用環境(計算機環境など)により、巨大なファイル容量が不適切な場合と限定した核種しか必要ない場合があるためである。しかし、標準FSXLIB-J3でもなお巨大な場合には、MCNPの断面積ライブラリー用ユーティリティー・プログラムMAKXS²⁾またはMACROSを用いて利用者が必要な核種のみからなる新しい断面積ライブラリーを作成することを推奨する。

Table 3.1の断面積テーブル長(LENGTH)を見ると10万を越えているものが幾つもある。これはJENDL-3やENDF/B-VIなどの最近の評価が精度を上げるために非常に微細なエネルギー構造でなされているためである。(核データへの要求精度が高くなったために評価が緻密になりエネルギー点の増加、内挿条件の複雑化、反応形式の細分化、共鳴パラメータの増加、エネルギー・角度分布の詳細化などが行われている。)MCNPは入力データ中で指定された核種の断面積データを直接内部記憶に収納し輸送計算に使用するため、断面積データの大きさがそのままMCNPに必要な記憶容量の大きさを反映している。つまり、もし断面積テーブル長の合計が約100万ならば、MCNPがこの問題の実行に必要とするブランク・コモン領域の大きさは100万+ α となる。将来、この断面積テーブル長とファイル容量の巨大化が問題になると考えられる。

拡張FSXLIB-J3には天然元素とその同位体が多く含まれている(例えば、Fe-0(26000.34C)とFe-54(26054.34C), Fe-56(26056.34C), Fe-57(26057.34C), Fe-58(26058.34C))。同位体の天然存在比を用いて天然元素を合成できるが、それによる詳細な断面積表現が元の天然元素より優れているとは必ずしも言えない。なぜならば、評価の過程で利用する断面積測定データは天然元素に対するものが多いこと、合成したものが天然元素の測定データと矛盾しないという保証はないこと³⁾などのためである。従って、特殊な目的や用途以外には本来の天然元素を使用すべきである。

FSXLIB-J3中の核種が2次ガンマ線(光子)生成データ持っているかどうかはTable 3.1のGPD項に示してある。JENDL-3で2次ガンマ線生成データが与えられ

ている核種は全てFSXLIB-J3でもそれを有しているが、与えられていない核種は有していない。JENDL-3では主要な核種についてのみ2次ガンマ線生成データが与えられているために、2次ガンマ線生成データを有していない核種がMCNPの中性子/光子結合計算に使用された場合に、ガンマ線の計算結果に影響を与える可能性がある。核融合中性子工学実験でのガンマ線測定の要求が強まりつつある現在、JENDL-3以後の核データ・ファイルで大部分の核種に2次ガンマ線生成データが含まれることが大いに要望される。

JENDL-3のN-14は、2次中性子エネルギー分布の評価に大きな問題があり、現在改訂版が準備されている。改訂版が公開され次第、FSXLIB-J3の改訂を行う予定であり、これ以外の核種についても同様である。

包括的なMCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーとしてFSXLIBがある。このFSXLIBは、複数の評価済核データ・ファイルから上記の処理手順で作成した幾つかのMCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーから成る（例えば、標準FSXLIB-J3や拡張FSXLIB-J3など）。

Table 3.1 FSXLIB-J3: Cross sections contained in the MCNP continuous-energy cross section library based on JENDL-3

description of labels in table

- ZAID : the nuclide identification number
 FILE : the name of MCNP cross section libraries
 SOURCE : the name of evaluated nuclear data file
 "JENDL-3" is the Japanese Evaluated Nuclear Data Library, version 3.
 MAT : the material identifier for a particular evaluation
 TYPE : the type of a nuclear data table
 "CONT" indicates a continuous-energy cross section set.
 TEMP : the temperature (in Kelvin) at which the nuclear data were processed
 GPD : the secondary gamma-ray production data
 "YES" means that the pointwise energy-dependent gamma production cross section exist.
 "NO" means that the gamma production cross section do not exist.
 LENGTH : the total length of a particular nuclide in decimal
 NUBAR : for fissionable material, NUBAR indicates the type of fission nubar data available
 "PROMPT" means that only prompt nubar data are given.
 "TOTAL" means that only total nubar data are given.
 "BOTH" means that prompt and total nubar are given.
 Standard : Does this nuclide include in the standard library FSXLIB?
 "YES" means that nuclide includes in the standard and expansion FSXLIB.
 "NO" means that nuclide includes only in the expansion FSXLIB.

nuclide [ZAID]	FILE	SOURCE	MAT	TYPE	TEMP (K)	GPD	LENGTH	NUBAR	Standard
(Hydrogen)									
1001.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3011	CONT	300	YES	2422		YES
1002.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3012	CONT	300	NO	6376		YES
(Helium)									
2003.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3021	CONT	300	NO	2053		YES
2004.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3022	CONT	300	NO	3319		YES
(Lithium)									
3006.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3031	CONT	300	YES	11637		YES
3007.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3032	CONT	300	YES	19526		YES
(Beryllium)									
4009.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3041	CONT	300	YES	18522		YES
(Boron)									
5010.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3051	CONT	300	YES	29462		YES
5011.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3052	CONT	300	YES	42854		YES

Tabel 3.1 (continued)

nuclide [ZAID]	FILE	SOURCE	MAT	TYPE	TEMP (K)	GPD	LENGTH	NUBAR	Stan dard
(Carbon) 6012.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3061	CONT	300	YES	17833		YES
(Nitrogen) 7014.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3071	CONT	300	YES	37816		YES
7015.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3072	CONT	300	YES	29147		YES
(Oxygen) 8016.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3081	CONT	300	YES	43263		YES
(Fluorine) 9019.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3091	CONT	300	NO	14188		YES
(Sodium) 11023.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3111	CONT	300	YES	43710		YES
(Magnesium) 12000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3120	CONT	300	YES	44552		YES
12024.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3121	CONT	300	NO	11943		NO
12025.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3122	CONT	300	NO	16032		NO
12026.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3123	CONT	300	NO	12175		NO
(Aluminum) 13027.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3131	CONT	300	YES	41884		YES
(Silicon) 14000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3140	CONT	300	YES	86018		YES
14028.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3141	CONT	300	YES	41020		NO
14029.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3142	CONT	300	YES	37263		NO
14030.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3143	CONT	300	YES	31540		NO
(Phosphorus) 15031.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3151	CONT	300	NO	21030		YES
(Sulfur) 16000.33C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3160	CONT	300	NO	67590		YES
(Potassium) 19000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3190	CONT	300	NO	53108		YES
19039.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3191	CONT	300	NO	28410		NO
19040.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3192	CONT	300	NO	8822		NO
19041.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3193	CONT	300	NO	23107		NO

Tabel 3.1 (continued)

nuclide [ZAID]	FILE	SOURCE	MAT	TYPE	TEMP (K)	GPD	LENGTH	NUBAR	Stan dard
(Calcium)									
20000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3200	CONT	300	YES	87797		YES
20040.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3201	CONT	300	YES	54170		NO
20042.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3202	CONT	300	NO	31071		NO
20043.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3203	CONT	300	NO	24682		NO
20044.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3204	CONT	300	NO	26534		NO
20046.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3205	CONT	300	NO	3532		NO
20048.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3206	CONT	300	NO	13615		NO
(Scandium)									
21045.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3211	CONT	300	YES	79926		YES
(Titanium)									
22000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3220	CONT	300	YES	64044		YES
22046.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3221	CONT	300	NO	29710		NO
22047.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3222	CONT	300	NO	29725		NO
22048.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3223	CONT	300	NO	20242		NO
22049.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3224	CONT	300	NO	20441		NO
22050.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3225	CONT	300	NO	16522		NO
(Vanadium)									
23051.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3231	CONT	300	NO	39191		YES
(Chromium)									
24000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3240	CONT	300	YES	117591		YES
24050.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3241	CONT	300	NO	47312		NO
24052.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3242	CONT	300	NO	39983		NO
24053.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3243	CONT	300	NO	31758		NO
24054.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3244	CONT	300	NO	24481		NO
(Manganese)									
25055.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3251	CONT	300	YES	201069		YES
(Iron)									
26000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3260	CONT	300	YES	144778		YES
26054.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3261	CONT	300	YES	62131		NO
26056.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3262	CONT	300	YES	72810		NO
26057.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3263	CONT	300	YES	60593		NO
26058.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3264	CONT	300	YES	67076		NO
(Cobalt)									
27059.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3271	CONT	300	NO	79549		YES

Tabel 3.1 (continued)

nuclide [ZAID]	FILE	SOURCE	MAT	TYPE	TEMP (K)	GPD	LENGTH	NUBAR	Standard
(Nickel)									
28000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3280	CONT	300	YES	237991		YES
28058.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3281	CONT	300	YES	82463		NO
28060.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3282	CONT	300	YES	103280		NO
28061.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3283	CONT	300	NO	44481		NO
28062.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3284	CONT	300	NO	42650		NO
28064.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3285	CONT	300	NO	41593		NO
(Copper)									
29000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3290	CONT	300	YES	170023		YES
29063.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3291	CONT	300	YES	144647		NO
29065.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3292	CONT	300	YES	115286		NO
(Zirconium)									
40000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3400	CONT	300	YES	160023		YES
40090.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3401	CONT	300	NO	53750		NO
40091.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3402	CONT	300	NO	67096		NO
40092.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3403	CONT	300	NO	53115		NO
40094.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3405	CONT	300	NO	44262		NO
40096.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3407	CONT	300	NO	30050		NO
(Niobium)									
41093.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3411	CONT	300	YES	119152		YES
(Molybdenum)									
42000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3420	CONT	300	YES	165448		YES
42092.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3421	CONT	300	NO	48160		NO
42094.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3422	CONT	300	NO	41872		NO
42095.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3423	CONT	300	NO	39992		NO
42096.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3424	CONT	300	NO	46780		NO
42097.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3425	CONT	300	NO	42827		NO
42098.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3426	CONT	300	NO	65873		NO
42100.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3428	CONT	300	NO	67388		NO
(Silver)									
47000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3470	CONT	300	YES	183283		NO
(Cadmium)									
48000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3480	CONT	300	YES	153335		YES
(Antimony)									
51000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3510	CONT	300	NO	76427		NO
(Europium)									
63000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3630	CONT	300	YES	56669		NO
63151.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3631	CONT	300	NO	42862		NO
63153.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3633	CONT	300	NO	39469		NO

Tabel 3.1 (continued)

nuclide [ZAID]	FILE	SOURCE	MAT	TYPE	TEMP (K)	GPD	LENGTH	NUBAR	Stan dard
(Hafnium) 72000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3720	CONT	300	YES	85740		YES
(Tantalum) 73181.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3731	CONT	300	YES	166522		YES
(Tungsten) 74000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3740	CONT	300	YES	199104		YES
74182.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3741	CONT	300	NO	105858		NO
74183.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3742	CONT	300	NO	67010		NO
74184.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3743	CONT	300	NO	95032		NO
74186.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3744	CONT	300	NO	86861		NO
(Lead) 82000.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3820	CONT	300	YES	137640		YES
82204.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3821	CONT	300	YES	55113		NO
82206.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3822	CONT	300	YES	107986		NO
82207.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3823	CONT	300	YES	71243		NO
82208.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3824	CONT	300	YES	38091		NO
(Bismuth) 83209.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3831	CONT	300	YES	70146		YES
(Thorium) 90232.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3905	CONT	300	NO	96180	BOTH	YES
(Protactinium) 91233.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3913	CONT	300	NO	13592	BOTH	NO
(Uranium) 92233.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3922	CONT	300	NO	33892	BOTH	NO
92234.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3923	CONT	300	NO	80600	TOTAL	NO
92235.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3924	CONT	300	YES	62587	BOTH	YES
92236.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3925	CONT	300	NO	77518	TOTAL	NO
92238.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3926	CONT	300	YES	235117	BOTH	YES
(Neptunium) 93237.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3931	CONT	300	NO	47171	BOTH	YES
(Plutonium) 94239.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3943	CONT	300	YES	128048	BOTH	YES
94240.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3944	CONT	300	NO	134534	BOTH	YES
94241.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3945	CONT	300	NO	25107	BOTH	NO
94242.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3946	CONT	300	NO	58687	TOTAL	NO

Tabel 3.1 (continued)

nuclide [ZAID]	FILE	SOURCE	MAT	TYPE	TEMP (K)	GPD	LENGTH	NUBAR	Standard
(Americium)									
95241.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3951	CONT	300	NO	50430	BOTH	NO
95242.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3952	CONT	300	NO	13996	BOTH	NO
95243.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3954	CONT	300	NO	57829	BOTH	NO
(Californium)									
98252.34C	FSXLIBJ3	JENDL-3	3984	CONT	300	NO	32666	BOTH	NO

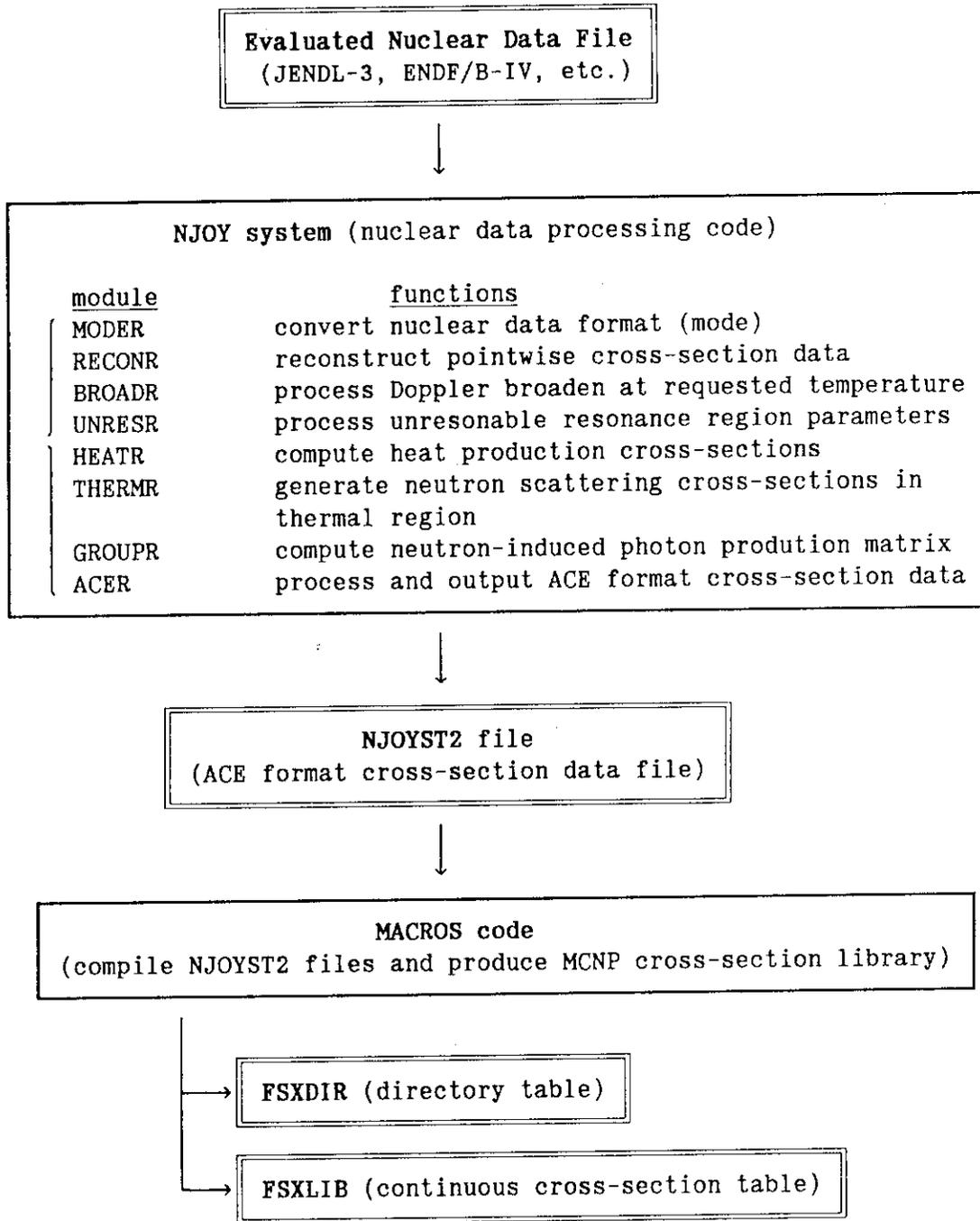


Fig. 3.1 Processing flow of an energy continuous cross-section library for the MCNP code at JAERI

4. MACROSコード

MACROSは、MCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーの編集・確認を行うために開発されたコードである。MACROSに関しては参考文献8でも述べられているが、それ以後大幅な改良が行われており、ここで改めて詳述する。

MACROSの機能は、断面積ライブラリーの編集と確認の2つに大別できる。最初の断面積ライブラリーの編集は、NJOYにより作成された核種毎のACE形式データを連続エネルギー断面積ライブラリーにまとめることと、そうして作成された断面積ライブラリーの保守を行うことである。そのための編集機能として、1)断面積ライブラリーの新規作成、2)ライブラリーへの核種の追加、置換または削除、3)検索データ・テーブル(検索ファイル)の編集、などがある。

2番目の断面積ライブラリーの確認は、作成したライブラリーが果して核データを忠実に表現したものであるかどうかを調べることである。そのための確認機能として、1)ライブラリー中の核種の連続エネルギー中性子相互作用データの印書出力、2)ライブラリー中のデータ(断面積、角度分布、エネルギー分布)のプロット出力、3)MF=5, 12, 13, 14, 15のデータの核データとの直接比較などがある。

MACROSが取り扱う断面積ライブラリーは、Type 2の直接編成形式(direct access)の核データ・テーブル(連続エネルギー中性子相互作用データ)と検索データ・テーブルである。断面積ライブラリーの編集の段階から直接編成形式を採用したのは、Type 1の順編成形式(sequential)よりもファイル容量の低減化、入出力用ポインター(またはアドレスリング)の移動の容易さ、入出力回数の低減化などが計れるためである。Type 1と2の間の断面積ライブラリーの変換は、MAKXS Fコードにより容易に行えるため利便性の高い直接編成形式を採用した。なお、本来検索データ・テーブルは順編成形式であるべきであるが、MACROSでは入出力処理の柔軟性を重視し直接編成形式としていることに注意されたい。FACOMにおいて、MCNPは検索データ・テーブルが順編成であると直接編成であろうとどちらでも読み込み可能である。

MACROSは、FORTRAN77言語で記述され、FACOM計算機環境下で実行されている。プロット・ルーチン・パッケージとして、CALCOMPとARGUS-V4を使用している。

この章では、MACROSへの入力データ、詳細な機能の説明、JCLと入出力ファイルについて述べる。

4.1 入力データ

MACROSへの入力データは、全ての場合に1行から3行までの範囲で記述できる簡便なものである。つまり必要最小限の入力データで要求された処理を実行するようになっている。入力データのフォーマットは、基本的に固定フォーマットであるためカラム位置

に注意しなければならない。

下記の制御カード上の2番目の入力データ(ITYPE)に関する詳しい説明は第4.2節を参照されたい。カード名の後ろの括弧で囲まれているデータが、そのカードの読み込みのための固定フォーマットである。(カード入力の終了条件を二重波線で囲んで示し、入力条件を細線で囲んで示す。)

1 制御カード (5 I 8)

- 1) MATNO 核種識別番号 (ZAIDの整数部に対応)
(通常は[原子番号 * 1000 + 質量数]の式で計算される。)
- 2) ITYPE 連続エネルギー断面積ライブラリーの編集・確認の機能の指標
(第4.2節参照)
- 0 = 新規作成
1 = 追加
2 = 置換
3 = 昇順の並び
4 = 印書出力
5 = 削除
6 = 中性子断面積の比較用プロット出力
7 = 検索ファイルの結合
8 = 検索ファイルの形式変更(正 PS → DA, 負 DA → PS)
9 = 検索ファイル(DA)中の情報の修正
10 = 中性子断面積のプロット出力
11 = 中性子角度分布の比較用プロット出力(簡易型)
12 = 中性子エネルギー分布の確認とプロット出力
13 = 2次ガンマ線生成データの確認とプロット出力
14 = 中性子角度分布の比較用プロット出力(詳細型)
15 = 共鳴中性子断面積のRESEND Dとの比較とプロット出力

(注記)

核種の追加、置換、削除(ITYPE=1,2,5)が行われたならば、その終了後に自動的に昇順への並び換え(ITYPE=3)が行われる。この並び換えを行わないためには、ITYPE= -1, -2, -5 とする必要がある。

- 3) LRECD 直接編成形式の断面積ライブラリーのレコード長(default = 2048)
- 4) LEVELV 評価識別番号 (同じ核種識別番号(MATNO)をもつ核種を識別するための2桁の番号であり、ZAIDの小数点以下の2桁に対応する。これは、核データ・ファイルや処理条件の違いを区別するために使用される。)
- 5) MATID 検証や比較用プロット出力を行うために参照する核データ・ファイルで

の核種の物質識別番号 (MAT ; 4桁の整数) (これは、ITYPE= 6, 11, 12, 13, 14, 15に対してのみ有効である。)

ITYPE = 3, 4, 5 ならば、# 1 カードのみで入力を終了する。
 ITYPE = 7, 8 で処理対象とするレコード番号を指定しないならば、入力を終了する (暗黙指定)。

ITYPE = 0, 1, 2, 6, 10, 11, 12, 13, 14, 15 ならば、# 2 カードを入力する

2 核種標題カード (A 7 0)

BCDA (ITYPE = 0, 1, 2 の場合)

断面積ライブラリーに収納される核種に付ける標題 (この標題は、核データ・テーブル中のそれぞれの核種の第 1 レコードの HK データとして収納され、MCNP 実行時に使用断面積標題として印書される。)

(ITYPE = 6, 10, 11, 15 の場合)

プロット出力するグラフのタイトル

(ITYPE = 12, 13, 14 の場合)

この標題を特には使用しない (空白でもよい)

ITYPE = 0, 1, 2, 13 ならば、入力を終了する。
 ITYPE = 6, 10, 11, 12, 14, 15 でプロット範囲などを指定しないならば、入力を終了する (暗黙指定)。

以下の入力は、ITYPE の条件に適合するカードでのみ行う。

ITYPE = 6, 10 ならば、# 3 カードを入力する

3 断面積プロット範囲カード (4 I 8)

LEXPOD(1) プロットするエネルギーの下限 (eV 単位の指数部)
 LEXPOD(2) プロットするエネルギーの上限 (eV 単位の指数部)
 LEXPOD(3) プロットする断面積の下限 (barn 単位の指数部)

LEXPOD(4) プロットする断面積の上限 (barn単位の指数部)

ITYPE = 7 ならば、#4カードを入力する

#4 検索ファイル結合範囲カード (2 I 8)

LEXPOD(1) 検索ファイルの結合を行うために複写対象の検索ファイルからの複写を開始するレコード番号
 LEXPOD(2) 検索ファイルの結合を行うために複写対象の検索ファイルからの複写を終了するレコード番号

ITYPE = 8 ならば、#5カードを入力する

#5 検索ファイル形式変更カード (2 I 8)

LEXPOD(1) 検索ファイルの形式変更 (DAとPS) を行う時に、その変更対象とするレコード番号の最小値
 LEXPOD(2) 検索ファイルの形式変更 (DAとPS) を行う時に、その変更対象とするレコード番号の最大値

ITYPE = 9 ならば、#6カードを入力する

#6 検索情報カード (7 2 A 1)

BCDA(1:72) 検索ファイル中の1核種の検索情報を修正するためのデータであり、下記の3つのデータを含んでいなければならない。(それぞれのデータは1つ以上のブランクにより区切られる。)

- | | |
|-----------|--------------------------------------|
| 1) NNRECD | 検索ファイル中の修正を行うレコード番号 |
| 2) NNPOST | 修正を行なう核種の検索情報の位置 (最大10, Table 2.1参照) |
| 3) BCDCHA | 修正用文字データ |
| REALDV | 修正用実数データ |
| INTESS | 修正用整数データ |

これらの中から対応するデータを選択

ITYPE = 11, 14 ならば、#7カードを入力する

#7 角度分布プロット範囲カード (3 I 8)

LEXPOD(1) プロットする中性子の反応型式 (MT) 番号
 LEXPOD(2) プロットを開始する入射中性子エネルギーの番号
 LEXPOD(3) プロットを終了する入射中性子エネルギーの番号

ITYPE = 12 ならば、#8カードを入力する

#8 エネルギー分布プロット範囲カード (5 I 8)

LEXPOD(1) プロットする中性子の反応型式 (MT) 番号
 LEXPOD(2) プロットするエネルギーの下限 (MeV 単位の指数部)
 LEXPOD(3) プロットするエネルギーの上限 (MeV 単位の指数部)
 LEXPOD(4) プロットする分布確率密度の下限 (指数部)
 LEXPOD(5) プロットする分布確率密度の上限 (指数部)

ITYPE = 15 ならば、#9カードを入力する

#9 共鳴中性子断面積のRESENDD比較プロット範囲カード (I 8)

LEXPOD(1) 1枚のグラフ上にプロットするpointwise断面積の最大point数
 (暗黙数 500)

4.2 機能指標の詳細な説明

前節でMACROSの機能の項目を述べたが、その機能の内容は、明確には説明していない。この節では、選択された機能 (ITYPE) により実際には何が行われるかを具体的に説明する。

ITYPE

説明

0 = [新規作成]

直接編成形式の連続エネルギー断面積ライブラリー (核データ・テーブルと検索データ・テーブルの両方) を新規に作成し、最初の1核種をライブラリーの先頭 (第1レコードから) に収納する。

1 = [追加]

断面積ライブラリーに1核種を追加する。既にライブラリーが作成され1つ以上の核種が収納されていなければならない (そうでなければ、ITYPE = 0として実行する)。ライブラリー中に既に収納されている核種のZAIDと同じZAIDで追加してはならない (追加された核種は同じZAIDでは検索できないため)。追加は、既存の核種が収納されている最後のレコードの次のレコードから行われる。もしITYPE=1であるならば、核種の追加を行った後でライブラリー中の核種の収納順序の並べ換え (ITYPE=3を参照) が行われる。もしITYPE=-1ならば、追加後の並べ換えは行われぬ。

2 = [置換]

断面積ライブラリー中に既に収納されている核種を新たに処理し直したものに置換する。置換する核種のZAIDは、置換される核種のZAIDと同一でなければならない。また、置換する核種が核データ・テーブル中で必要とする収納レコード数は、置換される核種の収納レコード数と同じかそれ以下であることが望ましい。もしそれ以上のレコード数であるならば、この核種の次に収納されている核種のデータを破壊することになるので、核種は置換されずに既存の収納されている最後のレコードの次のレコードから追加される。もしITYPE=2であるならば、置換を行った後に核種の収納順序の並べ換え(ITYPE=3)が行われる。もしITYPE=-2ならば、置換後の並べ換えは行われぬ。

3 = [昇順の並び]

断面積ライブラリー中に収納されている核種の順序をZAID(核種識別番号と評価識別番号)の昇順に並べ換える。収納されている核種数が多いと相当なI/O回数が必要となる。もしこの機能の実行中にエラーが発生するとライブラリーが破壊される可能性があり注意が必要である。

4 = [印書出力]

断面積ライブラリー中に収納されている1核種の連続エネルギー中性子相互作用データ(データ・アドレス, 断面積, 角度分布, エネルギー分布)を印書出力する。印書出力用フォーマットの基本構造は、NJOYに準拠している。

5 = [削除]

断面積ライブラリー中に収納されている1核種を削除する。この削除過程は、まず検索ファイル中のその核種のレコードを削除し、それから核データ・テーブル中から削除するための核種の並べ換えを行うというものである。従って、もしITYPE=5ならば、削除を行った後に核種の収納順序の並べ換え(ITYPE=3)が行われる。もしITYPE=-5ならば、削除後の並べ換えは行われず、その核種は検索ファイルからのみ削除され核データ・テーブル中のデータはそのまま残っている。

-
- *) 核種の置換ができずに既存のライブラリーの最後のレコードの次のレコードから追加がされた場合、検索データ・テーブルは置換される核種の情報が追加した核種の情報に修正され、見かけ上置換された形になる。従って、後述する並べ換えをしないと、置換される核種の核データ・テーブル中のデータはそのまま残っているが、対応する情報が検索データ・テーブル中にはないことになる(例えそうであっても、使用上の問題はない)。これを避けるには、まず置換される核種の削除(ITYPE=5)を行った後に置換する核種を追加(ITYPE=1)するという手順を踏むと良い。

6 = [中性子断面積の比較用プロット出力]

断面積ライブラリー中に収納されている1核種の中性子断面積を確認するために、その核種の中性子相互作用断面積と核データ・ファイル中の対応する断面積を比較するためのLog-Log グラフをプロット出力する。反応型式 (MT番号) 毎に各一枚のグラフが出力される。全グラフ共通のエネルギー (eV) と断面積 (barn) の範囲が指定できる (#3カード)。もし指定しないならば、グラフの範囲は自動スケージングされる。

グラフにプロットする核データの断面積は、比較のため共鳴処理が必要な反応には共鳴処理を行う。けれども、この共鳴処理はある特定のエネルギー点でのみ行われ、プロットはそれを単に直線で結んだものである。ドブラー拡張処理もされていない。これは、簡略化のためと核データの断面積にあまり手を加えないためである。

プロットする線は、MCNPが実線で、核データが破線である。

この比較プロットでは共鳴処理の厳密な検証が困難であり、共鳴処理が必要な反応 (MT=1, 2, 18, 102) の確認は、ITYPE= 15によって行うのが適切である。それ以外の反応については、この比較プロットにより確認を行う。

7 = [検索ファイルの結合]

2種類の断面積ライブラリーが存在する時に、それらの検索ファイルを結合する。これは、MCNPが1つの検索データ・テーブルだけで複数の核データ・テーブルのアクセスが可能であるために行われる処理である。つまり、検索データ・テーブル中には複数の核データ・テーブルの検索情報が混在できる。実際の結合過程は、基準となる検索ファイルに引用される検索ファイル中の必要な部分の核種 (または全核種) を追加することにより行われる。このためには、引用される検索ファイル中の必要部分の開始と終了のレコード番号を指定 (#4カード) する必要がある。もし指定しないならば、引用検索ファイル全体が追加される。

8 = [検索ファイルの形式変更]

検索ファイルのファイル形式の変更を行う。MCNP用断面積ライブラリーの正規の検索ファイルは順編成形式 (PS) であるが、MACROSが実際に取り扱う検索ファイルは直接編成形式 (DA) であるために、ファイル形式の変更が必要となる場合に対応するためである。但し、MCNPはどちらの形式の検索ファイルでも使用可能である (この場合、DA形式でも検索情報が記入されるレコード長は80でなければならない)。変更される検索ファイル中の必要な部分の核種 (または全核種) のみ変換後の検索ファイルに収納できる (#5カード)。

この指標は、下記のようにファイル形式を変更する:

```
ITYPE = 8,      PS  →  DA
ITYPE = -8,     DA  →  PS
```

9 = [検索ファイル(DA)中の情報の修正]

検索ファイル中の任意の検索情報の修正を行う。この修正は、(1)修正を行う核種の検索情報が記述されている検索ファイルのレコード番号、(2)修正する検索情報(データ)の位置(この位置とは、1核種の検索情報として通常10個の検索データが記述されており、修正しようとしているデータが最初から数えて何番目かを表す)、(3)置換して修正する検索データ(文字、実数、整数の3種類があるが、どれでも任意に指定できる)の3つのデータにより行われる(#6カード)。

10 = [中性子断面積のプロット出力]

断面積ライブラリー中に収納されている1核種の中性子断面積を確認するために、その核種の中性子相互作用断面積をLog-Log グラフにプロット出力する。反応型式(MT番号)毎に1枚のグラフが出力される。全グラフ共通のエネルギー(eV)と断面積(barn)の範囲が指定できる(#3カード)。もし指定しないならば、グラフの範囲は自動スケールされる。プロットする線は、実線である。(基本的にはITYPE=6の変形指標である。)

11 = [中性子角度分布の比較用プロット出力(簡易型)]

断面積ライブラリー中に収納されている1核種の任意の中性子相互作用反応(MT)の角度分布(32等確率余弦区分で表現)を確認するために、その角度分布と核データ・ファイルの対応する角度分布を比較するLinear-Logグラフをプロット出力する。指定したMTの指定したエネルギー範囲内の入射中性子エネルギー点毎に1枚のグラフがプロットされる(#7カード)。もし指定しないならば、暗黙指定のMT=2の全入射中性子エネルギー点が実行される。

プロットする線は、MCNPが階段状の破線で、核データが実線の曲線(ルジャンドル係数表記)または階段状(確率テーブル形式表記)である。等方散乱は0~90度で確率0.5、90~180度も0.5とした。グラフ上の角度と確率の範囲指定はできず、角度は0~180度の角度表示(Linear)であり、確率は最大値と最小値から自動スケール(Log)される。

12 = [中性子エネルギー分布の確認とプロット出力]

断面積ライブラリー中に収納されている1核種の中性子エネルギー分布を確認する。この確認は、ライブラリー中の中性子エネルギー分布と核データ・ファイルの対応するエネルギー分布が同一であるかどうか数値データを1つずつ全て比較することにより行われる。もし比較において違いまたはエラーを検出すると、MACROSはそれに関するメッセージを印書して直ちに停止する。数値比較に加えて、arbitrary tabulated function(LF=1)についてはその分布傾向を知るためのグラフをプロット出力する。入射中性子エネルギー点(MeV単位)毎に1枚のグラフがプロットされ、放出エネルギーと確率密度(Log

-Log, 実線) 及び放出エネルギーと累積確率(Log-Linear, 破線)と一緒にプロットされる。確認を行う中性子の反応型式と確率密度のグラフのエネルギーと確率密度の範囲は指定(#8カード)できるけれども、通常は指定しない方がよい。(全反応型式とグラフの自動スケールが暗黙指定である。)

1 3 = [2次ガンマ線生成データの確認とプロット出力]

断面積ライブラリー中に収納されている1核種の2次ガンマ線生成データを確認する。この2次ガンマ線生成データには、第2.2節で述べたように光子生成反応データ、光子生成断面積、光子角度分布、光子エネルギー分布が含まれる。ライブラリー中の2次ガンマ線生成データと核データ・ファイルの対応するデータが同一であるかどうかを比較可能な数値データ全てについて、1つずつ比較して確認する。比較可能なものは、光子生成反応データと光子エネルギー分布の全部及び光子生成断面積と光子角度分布の一部である。もし比較において違いまたはエラーを検出すると、MACROSはそれに関するメッセージを印書して直ちに停止する。

更に、数値データによる完全な確認ができなかった光子生成断面積と光子角度分布はグラフによる確認を行うため、及び、光子生成反応データと光子エネルギー分布のarbitrary tabulated function (LF=1)についてはその分布傾向を知るため、グラフをプロット出力する。光子生成反応データに関するグラフとして、反応型式毎にmultiplicitiesによる光子生成断面積とmultiplicitiesの値の2枚のグラフがプロット出力される。光子生成断面積に関するグラフは、反応型式毎にプロット出力される。光子角度分布と光子エネルギー分布に関するグラフは、入射中性子エネルギー点毎にプロット出力される。核データが正しく処理されてライブラリーに収納されているかどうかを確認するため、出力されたグラフを詳しく調べる必要がある。1度に光子生成データの全てを扱うため、核種によっては大量のグラフが出力されるので注意が必要である。(取り扱い範囲の指定はできない。)

当然、この指標は2次ガンマ線生成データを有している核種についてのみ有効である(Table 3.1のGPD項を参照)。

1 4 = [中性子角度分布の比較用プロット出力(詳細型)]

断面積ライブラリー中に収納されている1核種の中性子角度分布(32等確率余弦区分で表現)を確認するために、その角度分布と核データ・ファイルの対応する角度分布を比較するLinear-Logグラフをプロット出力する。指定した中性子反応(MT)の指定したエネルギー範囲内の入射中性子エネルギー点毎に1枚のグラフがプロットされる(#7カード)。もし指定しなければ、暗黙指定の全反応と全入射中性子エネルギー点でプロットされる(指定しないことを推奨する)。1枚のグラフに角度(degreesと $\mu = \cos(\theta)$)と確率の2つのグラフがプロットされる。

プロットする線は、MCNPが階段状の破線で、核データが実線の曲線（ルジャンドル係数表記）または階段状（確率テーブル形式表記）である。等方散乱はプロット出力されない。グラフ上の角度と確率の範囲指定はできず、角度は0~180度のdegree表示と-1.0~1.0の μ 表示(Linear)であり、確率は最大値と最小値から自動スケール(Log)される。

ITYPE = 11よりもこの指標の使用を推奨する。

15 = [共鳴中性子断面積のRESENDDとの比較プロット出力]

断面積ライブラリー中に収納されている1核種の中性子断面積の中で共鳴パラメータの処理対象となる断面積を確認するためのグラフをプロット出力する。共鳴パラメータの処理対象となる中性子断面積は、全断面積(MT=1), 弾性散乱断面積(MT=2), 核分裂断面積(MT=18), 放射捕獲断面積(MT=102)の4種類である。共鳴処理を行うと非常に細かい共鳴ピークがpointwise断面積上に現れ、ITYPE = 6のような手法では、核データとの比較は不可能であり、共鳴処理を施したpointwise断面積で確認を行う必要がある。確認用のpointwise断面積は信頼性の高い処理コードであるRESENDD⁹⁾により作成し、pointwise断面積間の数値の直接比較を最初に行う。次に、適当なエネルギー範囲で、ライブラリーのpointwise断面積とRESENDDに対する比のグラフを同一ページにプロット出力する。比が大幅に(5%以内を基準とした)ずれている場合に、その原因を究明する必要がある。

pointwise断面積は、Log-Logグラフにプロットされ、RESENDDに対する比は、Log-Linearグラフにプロットされる。1枚のグラフのエネルギー範囲は、指定されたエネルギーpoint数により決定される(暗黙値は500であり、指定する場合は#9カードで入力する)。

MACROSには、断面積データの迅速な検査や傾向の把握のために特に有用なプロット機能がある。このプロット機能は、CALCOMPとARGUS-V4の2つのプロット・ルーチン・パッケージを使用している。(ARGUS-V4は更にCALCOMPから構成されている原研ユーティリティ・パッケージである。) 下記に機能とパッケージの対応を示す:

機能(ITYPE)	パッケージ	制約条件
6 断面積	CALCOMP	
10 断面積	CALCOMP	
11 角度分布	CALCOMP	50枚まで
12 エネルギー分布	ARGUS-V4	
13 2次ガンマ線生成	ARGUS-V4	
14 角度分布	ARGUS-V4	
15 共鳴断面積	ARGUS-V4	MT=1, 2, 18, 102

4.3 JCLと入出力ファイル

MACROSをFACOM計算機で実行するためには、JCLが必要であり、その中で入出力ファイルを割り当てる必要がある。この節では、断面積ライブラリーの新規作成、核種の追加、プロット出力の3ケースについてのJCLと入力データの例、並びに、入出力ファイルについて説明する。

A. JCLと入力データ

連続エネルギー断面積ライブラリーの新規作成、核種の追加、中性子エネルギー分布のプロット出力の3ケースのJCLと入力データの例を以下に示す。

(1) 連続エネルギー断面積ライブラリーの新規作成

```
T(03) W(02) I(04) C(05) E(00) SRP
/* *****
/* * MACROS : CREATION OF CROSS SECTION LIBRARY *
/* *****
//FORT1 EXEC FORT77,SO='J2773.MACROSA',A='ELM(*)'
//FORT2 EXEC FORT77,SO='J2773.DIMCNTL',A='ELM(ARGUSV4)',DISP=MOD
//SYSPRINT DD DUMMY
//LINK EXEC LKED,PRVLIB='J2636.ARGLIBV4',GRLIB=PNL
//SYSPRINT DD DUMMY
//RUN EXEC GO
/*
//FT10F001 DD DSN=J2773.LI6J3NJ.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//FT11F001 DD DSN=J2773.FSXDIRJ3.DATA,DISP=(NEW,CATLG),UNIT=D0430,
// DCB=(RECFM=F,LRECL=2048,BLKSIZE=2048),SPACE=(TRK,10)
//FT12F001 DD DSN=J2773.FSXLIBJ3.DATA,DISP=(NEW,CATLG),UNIT=D0430,
// DCB=(RECFM=F,LRECL=2048,BLKSIZE=2048),SPACE=(TRK,419)
//FT13F001 DD DSN=J2773.DRTWK.DATA,DISP=NEW,SPACE=(TRK,500),
// DCB=(RECFM=F,LRECL=2048,BLKSIZE=2048),UNIT=TSSWK
// EXPAND GRNLPLIM,SYSOUT=G,LIM=120000
//SYSIN DD *
      3006      0      2048      34      0
1991/08/22 3-LI-6 JENDL-3 FNS-JAERI : NJOY POINTWISE
/*
//
```

(2) 断面積ライブラリーへのFe-0の追加（並べ換えなし）

```
T(03) W(02) I(04) C(05) E(00) SRP
/* *****
/* * MACROS : ADDITION OF CROSS SECTION LIBRARY *
/* *****
```

```

//FORT1 EXEC FORT77,SO=' J2773.MACROSA',A=' ELM(*)'
//FORT2 EXEC FORT77,SO=' J2773.DIMCNTL',A=' ELM(ARGUSV4)',DISP=MOD
//SYSPRINT DD DUMMY
//LINK EXEC LKED,PRVLIB=' J2636.ARGLIBV4',GRLIB=PNL
//SYSPRINT DD DUMMY
//RUN EXEC GO
/*
//FT10F001 DD DSN=J2773.FEOJ3NJ.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//FT11F001 DD DSN=J2773.FSXDIRJ3.DATA,DISP=OLD
//FT12F001 DD DSN=J2773.FSXLIBJ3.DATA,DISP=OLD
//FT13F001 DD DSN=J2773.DRTWK.DATA,DISP=NEW,SPACE=(TRK,500),
// DCB=(RECFM=F,LRECL=2048,BLKSIZE=2048),UNIT=TSSWK
// EXPAND GRNLPLIM,SYSOUT=G,LIM=120000
//SYSIN DD *
26000 -1 2048 34 0
1991/08/22 26-FE-0 JENDL-3 FNS-JAERI : NJOY POINTWISE
/*
//

```

(3) 断面積ライブラリー中のCu-0の中性子エネルギー分布の確認とプロット出力

```

T(04) W(05) I(04) C(05) E(00) SRP
/* *****
/* * MACROS : ADDITION OF CROSS SECTION LIBRARY *
/* *****
//FORT1 EXEC FORT77,SO=' J2773.MACROSA',A=' ELM(*)'
//FORT2 EXEC FORT77,SO=' J2773.DIMCNTL',A=' ELM(ARGUSV4)',DISP=MOD
//SYSPRINT DD DUMMY
//LINK EXEC LKED,PRVLIB=' J2636.ARGLIBV4',GRLIB=PNL
//SYSPRINT DD DUMMY
//RUN EXEC GO
/*
//FT11F001 DD DSN=J2773.FSXDIRJ3.DATA,DISP=OLD
//FT12F001 DD DSN=J2773.FSXLIBJ3.DATA,DISP=OLD
//FT13F001 DD DSN=J2773.DRTWK.DATA,DISP=NEW,SPACE=(TRK,500),
// DCB=(RECFM=F,LRECL=2048,BLKSIZE=2048),UNIT=TSSWK
//FT14F001 DD DSN=J1615.JENDL303.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//FT96F001 DD UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,10)),DISP=NEW
//FT97F001 DD UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(50,10)),DISP=NEW
//FT98F001 DD UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(200,10)),DISP=NEW
//FT99F001 DD UNIT=WK10,SPACE=(TRK,(200,10)),DISP=NEW
// EXPAND GRNLPLIM,SYSOUT=G,LIM=200000
//SYSIN DD *
29000 12 2048 34 3290
1991/08/22 29-CU-0 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION
/*
//

```

B. 入出力ファイル

前節で述べたMACROSのJCLで使用される入出力ファイルの使用目的等の説明を下記に示す：

論理装置番号	説明	ファイル形式
10	入力するACE形式データ・ファイル（連続エネルギー中性子相互作用データ：NJOYにより作成されたNJOYST2ファイル）	PS
11	出力または編集されるMCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーの検索データ・テーブル	DA
12	出力または編集されるMCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーの核データ・テーブル	DA
13	編集される断面積ライブラリーの核データ・テーブルのため の一時待避用ファイル	DA
14	断面積ライブラリー中の断面積データを確認するために参照する核データ・ファイル（対象核種の元の核データ・ファイルの必要がある）	PS
15	断面積ライブラリー中の共鳴断面積データを確認するために参照するRESEND Dのpointwise断面積データ・ファイル	PS
91	MCNP用断面積ライブラリーの検索データ・テーブルの結合のために引用される検索データ・テーブル または、検索データ・テーブルのファイル形式変更のために使用される順編成形式ファイル	DA
		PS
96~99	ARGUS-V4用スクラッチ・ファイル	PS
6	MACROSの印書出力	PS
SYSIN	MACROSへの入力データ（通常装置番号5）	PS

5. FSXLIB-J3の確認

MCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーの構造については、第2章に詳述されている。断面積データは、核データ・ファイルに忠実で、かつ、ほぼ1対1の対応関係をもっていることがその特徴として挙げられる。この特徴に拠って、断面積ライブラリーの確認が可能となる。

従来の多群形式の断面積ライブラリーは、断面積とエネルギー分布を荷重平均した群で、角度分布を有限のルジャンドル展開項で近似した群定数からなっている。この群定数化により多群断面積ライブラリーのデータは、元の核データ・ファイルの表記とは全く異なったものになる。厳密に正しい核データ処理が行われて多群断面積ライブラリーが作成されたかどうかを直接確認できないために、ベンチマーク計算による間接的な確認が行われる。

これに対し連続エネルギー断面積ライブラリーの連続エネルギー中性子相互作用データは、基本的な構造が核データに類似しているので確認が可能となる。ここで言う確認とは、断面積ライブラリーの作成過程に起因する問題点が無いことを明らかにするものであり、断面積ライブラリーの不確定性を低減する上で特に重要となる。作成過程の問題点とは、この断面積ライブラリーに関してはNJOYの処理過程での問題と言い換えられる。この確認と断面積ライブラリー自身の精密さによって、核データのベンチマーク計算は直接核データを反映したものとなる。

この章では、連続エネルギー断面積ライブラリーの具体的な確認方法と、それを用いた確認結果を示す。

5.1 確認方法

連続エネルギー断面積ライブラリーの連続エネルギー中性子相互作用データの構成については、第2.2節で述べた。輸送計算のために必要な断面積データは、断面積、角度分布、エネルギー分布の3種類であり、中性子相互作用データと核データ・ファイル中にはそれぞれ対応するものが含まれている。当然、対応するもの同士の直接比較が確認する上で最も適切である。エネルギー分布は直接比較できるが、断面積と角度分布は一部分を除いて直接比較できない。従って、これらに関しては間接的な比較による確認が必要である。

この節では、連続エネルギー中性子相互作用データ中の3種類の断面積データをMACROSを用いて確認する方法について説明する。もし確認の数値比較で不整合が発見された場合、MACROSはそれに関するメッセージを印書して中断される。断面積データの確認方法とMACROSの入力データの確認指標(ITYPE)の関係をTable 5.1に示す。

A. 断面積

ここで述べる断面積は、中性子相互作用断面積と光子生成断面積の2種類である。両者

には異なる部分があるので別々に述べる。

最初に中性子相互作用断面積の確認方法について説明する。上述したように中性子断面積は直接比較ができない。この理由は、共鳴処理をされたpointwise断面積(MCNP)と共鳴パラメータと内挿条件をもつ限定されたエネルギー点断面積(核データ)との比較になるためである。両者を比較するには、核データの断面積の共鳴パラメータと内挿条件(と温度)のpointwise処理が不可欠である。この時問題となるのは共鳴パラメータであり、これは全断面積、弾性散乱断面積、核分裂断面積、放射捕獲断面積に影響を与える。NJ O Yの処理結果と比較するpointwise断面積を作成できる処理コードは、共鳴処理等に関して信頼性の高いものでなければならない。このような見地から比較用処理コードとしてRESENDD⁹⁾を採用した。比較する手順は下記である：

- (1) RESENDDコードにより比較pointwise断面積ファイルを作成する、
- (2) MACROSによりMCNP用pointwise断面積と比較pointwise断面積の数値比較を行い、全てのエネルギー点で一致度を確認する、
- (3) MACROSによりMCNP用pointwise断面積のプロットとRESENDDに対するMCNPのpointwise断面積の比のプロットを細分化したエネルギー範囲で行う、
- (4) 得られた図から断面積の分布の形状や傾向の矛盾のないことを調べる。

この過程を経て全断面積、弾性散乱断面積、核分裂断面積、放射捕獲断面積の確認は終了する。

前述の4つの断面積以外の非弾性散乱断面積と吸収断面積は、共鳴パラメータの影響がないためにもっと簡単な確認となる。中性子相互作用反応毎に、MACROSによりMCNP用pointwise断面積と核データの限定されたエネルギー点での断面積を(内挿条件を無視して)直線で結んだプロットが比較のために行われる。核データのエネルギー点数はpointwiseに比べて格段に少ないため、内挿条件を無視してLog-Logでプロットすると一見差があるように見える。けれどもこの比較プロットは核データのエネルギー点での断面積が一致しているかどうかを調べるためのものであり、エネルギー点間の差は内挿条件がLog-Logではないことを示してだけである。得られた図から核データのエネルギー点での断面積の一致に加えて、pointwise断面積の分布の形状や傾向の矛盾のないことを調べる。

次に、光子生成断面積の確認方法について説明する。光子生成断面積は、連続エネルギー-中性子相互作用データではmultiplicitiesとpointwise断面積の2つの形式で与えられ、核データではmultiplicities, transition probability arrayと断面積の3つの形式で与えられる。transition probabilityは、multiplicitiesの形式に変換できる。従ってMCNPと核データの光子生成断面積の比較は、multiplicitiesと断面積の2形式が対象となり、MACROSにより行われる。multiplicitiesについては、中性子の反応エネルギー範囲、multiplicities値、放出光子エネルギーなどが直接数値で比較される。次いで、中性子相互作用データの中性子pointwise断面積を基に計算した断面積とmultiplicitiesのプロットが、両方の分布の形状や傾向を調べるためになされる。pointwise断面積については、中性子反応の閾値が直接数値で比較され、個々のpointwise断面積が核データの有

限のエネルギー一点で断面積を内挿することにより比較される。分布の形状や傾向の矛盾のないことを調べるために、中性子相互作用データの光子生成pointwise断面積と全光子生成pointwise断面積のプロットがなされる。

B. 角度分布

上述したようにこの角度分布も直接比較ができない。この理由は、ある入射中性子エネルギーに関して、連続エネルギー中性子相互作用データ中の角度分布の表現が32個の等確率方向余弦区分であるのに対して、核データの表現は等方分布、ルジャンドル展開係数、または規格化確率分布であるからである。但し、中性子相互作用データの角度分布の区分数が0の場合は、等方分布を意味するので、直接比較できる。ここでは、核データの角度分布表現から32等確率余弦区分へのNJOYの処理を説明し、その確認方法について述べる。

核データのルジャンドル展開係数と規格化確率分布は、その分布関数から100（または1000）個の方向余弦区分の確率分布に変換される。その確率分布を32個の等確率な分布に圧縮した時の方向余弦から32等確率余弦区分が得られる。この確認は、MACROSにより、32等確率余弦区分の逆数とルジャンドル分布または規格化確率分布のいずれかを一緒にプロットし、視覚的に比較するという単純明快な方法を取る。このプロットの比較により角度分布の分布形状や傾向に矛盾のないことも調べる。

中性子相互作用データにおいて、中性子と光子生成の角度分布表現は全く同一である。また、32個という等確率区分数は、NJOYの処理段階においては本来任意な数であるが、MCNPではそれを32のみに限定しているので注意が必要である。もしこの確認で32では不十分であると判断される場合には、MCNPとの適合性まで含めて対応しなければならない。

C. エネルギー分布

エネルギー分布は、連続エネルギー中性子相互作用データと核データを直接数値で比較できる。これは、中性子相互作用データのエネルギー分布の表現が核データの表現とほぼ同一なためであり、断面積と角度分布の場合とは違って厳密な確認が可能である。

エネルギー分布を表現するためにENDF/B形式には5つの中性子2次エネルギー分布則が準備されており、中性子相互作用データと核データの表現は同一である。この確認は、MACROSにより行われ、個々の数値が直接比較される。arbitrary tabulated functionに関してのみ、エネルギー分布の分布形状と傾向を調べるために部分確率と累積確率がプロットされる。

中性子相互作用データにおいて、光子生成のエネルギー分布表現は離散光子エネルギーとarbitrary tabulated functionである。離散光子エネルギーは断面積の確認の段階で既に確認されている。tabulated functionは中性子と同様の過程により確認される。

5. 2 確認結果

MCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーFSXLIB-J3は、前節で述べた方法で連続エネルギー中性子相互作用データを確認した。この過程において、NJOYの処理上の問題点が見いだされ、第3.2節で述べた修正やそれ以外の小さな修正がなされた。その上で処理が再度行われ、かつ、確認作業が実施された。

このような修正、処理、確認の繰り返しを経て、最終的に完成したFSXLIB-J3は、MACROSによる確認によってその信頼性が確立された。MACROSによる確認の過程でプロットした下記の図を例証として示す：

(中性子pointwise断面積)

- Fig. 5.1 ~ 5.3 Fe-0の全断面積の比較プロット ($6.0 \times 10^{-2} \sim 8.0 \times 10^{-2}$, 0.25 ~ 0.6, 1.7 ~ 2.0 MeV)
- Fig. 5.4 ~ 5.6 Fe-0の弾性散乱断面積の比較プロット ($6.0 \times 10^{-2} \sim 8.0 \times 10^{-2}$, 0.25 ~ 0.6, 1.7 ~ 2.0 MeV)
- Fig. 5.7 ~ 5.9 Fe-0の放射捕獲断面積の比較プロット ($6.0 \times 10^{-2} \sim 8.0 \times 10^{-2}$, 0.25 ~ 0.6, 1.7 ~ 2.0 MeV)
- Fig. 5.10 Cu-0の全断面積の比較プロット (1.0 $\times 10^{-11}$ ~ 20.0 MeV)
- Fig. 5.11 W-0の弾性散乱断面積の比較プロット (1.0 $\times 10^{-11}$ ~ 20.0 MeV)
- Fig. 5.12 U-235の放射捕獲断面積の比較プロット (1.0 $\times 10^{-11}$ ~ 20.0 MeV)
- (注記) Figure 5.10 ~ 5.12で、RESENDとこの比が共鳴領域の上限エネルギーの直前で大きくずれているのは、RESENDのドップラー拡張上の問題に拠るものである。
- Fig. 5.13 ~ 5.15 U-238の全断面積の比較プロット ($8.0 \times 10^{-4} \sim 1.0 \times 10^{-3}$, $8.0 \times 10^{-3} \sim 8.6 \times 10^{-3}$, 1.0 $\times 10^{-11}$ ~ 20.0 MeV)
- Fig. 5.16 ~ 5.18 U-238の核分裂断面積の比較プロット ($8.0 \times 10^{-4} \sim 1.0 \times 10^{-3}$, $8.0 \times 10^{-3} \sim 8.6 \times 10^{-3}$, 1.0 $\times 10^{-11}$ ~ 20.0 MeV)
- Fig. 5.19 ~ 5.20 Fe-0の非弾性散乱断面積(MT=52,55)のプロット
- Fig. 5.21 C-12の非弾性散乱断面積(MT=51)のプロット
- Fig. 5.22 Ti-0の非弾性散乱断面積(MT=63)のプロット
- Fig. 5.23 Ni-0の(n,d)断面積のプロット
- Fig. 5.24 Pb-0の(n, α)断面積のプロット
- Fig. 5.25 Pu-239の(n,2n)断面積のプロット

(光子生成断面積)

- Fig. 5.26 ~ 5.27 Li-6の光子生成multiplicities(MT=57,102)のプロット
- Fig. 5.28 Li-6の全光子生成断面積のプロット
- Fig. 5.29 Cr-0のnonelastic(MT=3)の光子生成断面積のプロット

- Fig. 5.30~5.32 Fe-0の光子生成multiplicities(MT=3,52)のプロット
 Fig. 5.33 Fe-0の全光子生成断面積のプロット
 Fig. 5.34~5.35 Nb-93の光子生成multiplicities(MT=56,60)のプロット
 Fig. 5.36 U-235のnonelastic(MT=3)の光子生成断面積のプロット

(角度分布)

- Fig. 5.37~5.38 Li-7の弾性散乱の角度分布(E_n =入射中性子エネルギー=4.83, 13.94 MeV)のプロット
 Fig. 5.39~5.40 O-16の非弾性散乱(MT=56)の角度分布(E_n =11.5, 14.096 MeV)のプロット
 Fig. 5.41~5.43 Fe-0の弾性散乱の角度分布(E_n =0.719, 3.672, 14.0 MeV)のプロット
 Fig. 5.44~5.45 Cu-0の非弾性散乱(MT=55)の角度分布(E_n =4.5, 14.0 MeV)のプロット
 Fig. 5.46~5.47 U-238の非弾性散乱(MT=64)の角度分布(E_n =3.0, 14.0 MeV)のプロット
 Fig. 5.48~5.50 C-12の光子生成非弾性散乱(MT=51)の角度分布(E_n =4.85, 7.778, 10.88 MeV)のプロット

(エネルギー分布)

- Fig. 5.51~5.52 Be-9の(n,2n)反応(MT=16)のエネルギー分布(E_n =10.0, 14.0 MeV)のプロット
 Fig. 5.53~5.54 Al-27の(n,n'p)反応(MT=28)のエネルギー分布(E_n =12.0, 14.0 MeV)のプロット
 Fig. 5.55~5.56 Fe-0の連続非弾性散乱(MT=91)のエネルギー分布(E_n =5.0, 14.0 MeV)のプロット
 Fig. 5.57~5.58 W-0の(n,3n)反応(MT=17)のエネルギー分布(E_n =13.021, 15.0 MeV)のプロット
 Fig. 5.59~5.60 Si-0のnonelastic(MT=3)の光子エネルギー分布(E_n =1.0E-11, 13.5 MeV)のプロット
 Fig. 5.61~5.62 Fe-0の放射捕獲(MT=102)の光子エネルギー分布(E_n =0.028, 0.25 MeV)のプロット
 Fig. 5.63 Pu-239の核分裂(MT=18)の光子エネルギー分布(E_n =2.0 MeV)のプロット

Table 5.1 The relation between the confirmation methods and ITYPE in MACROS input data for MCNP continuous cross section library

items	particle	target reactions	confirmation methods	MACROS ITYPE
cross section	neutron	MT=1,2,18, 102	numerical comparison of pointwise cross sections with RESENDD and plotting	15
		all	plotting pointwise cross sections and ENDF ¹⁾	6
	photon	MF=12	numerical comparison of multiplicities with ENDF and plotting	13
		MF=13	numerical comparison of pointwise cross sections with ENDF and plotting	
angular distribution	neutron	all	plotting 32 equiprobable cosine bins and ENDF	11, 14
	photon	all	plotting 32 equiprobable cosine bins and ENDF	13
energy distribution	neutron	all	numerical comparison with ENDF	12
		tabulated function	plotting energy distribution probabilities	
	photon	all	numerical comparison with ENDF	13
		tabulated function	plotting energy distribution probabilities	

Note: 1) ENDF means the evaluated nuclear data file.

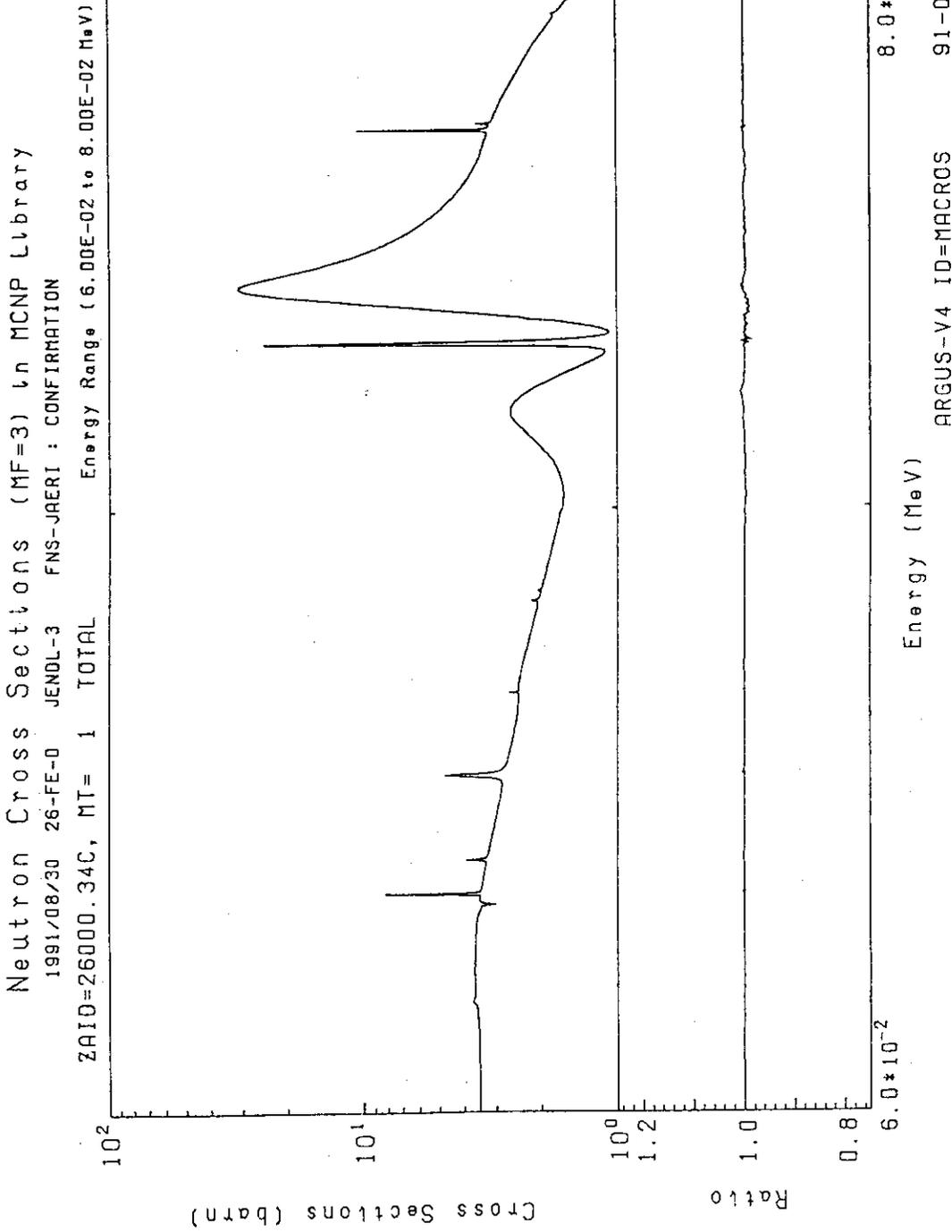
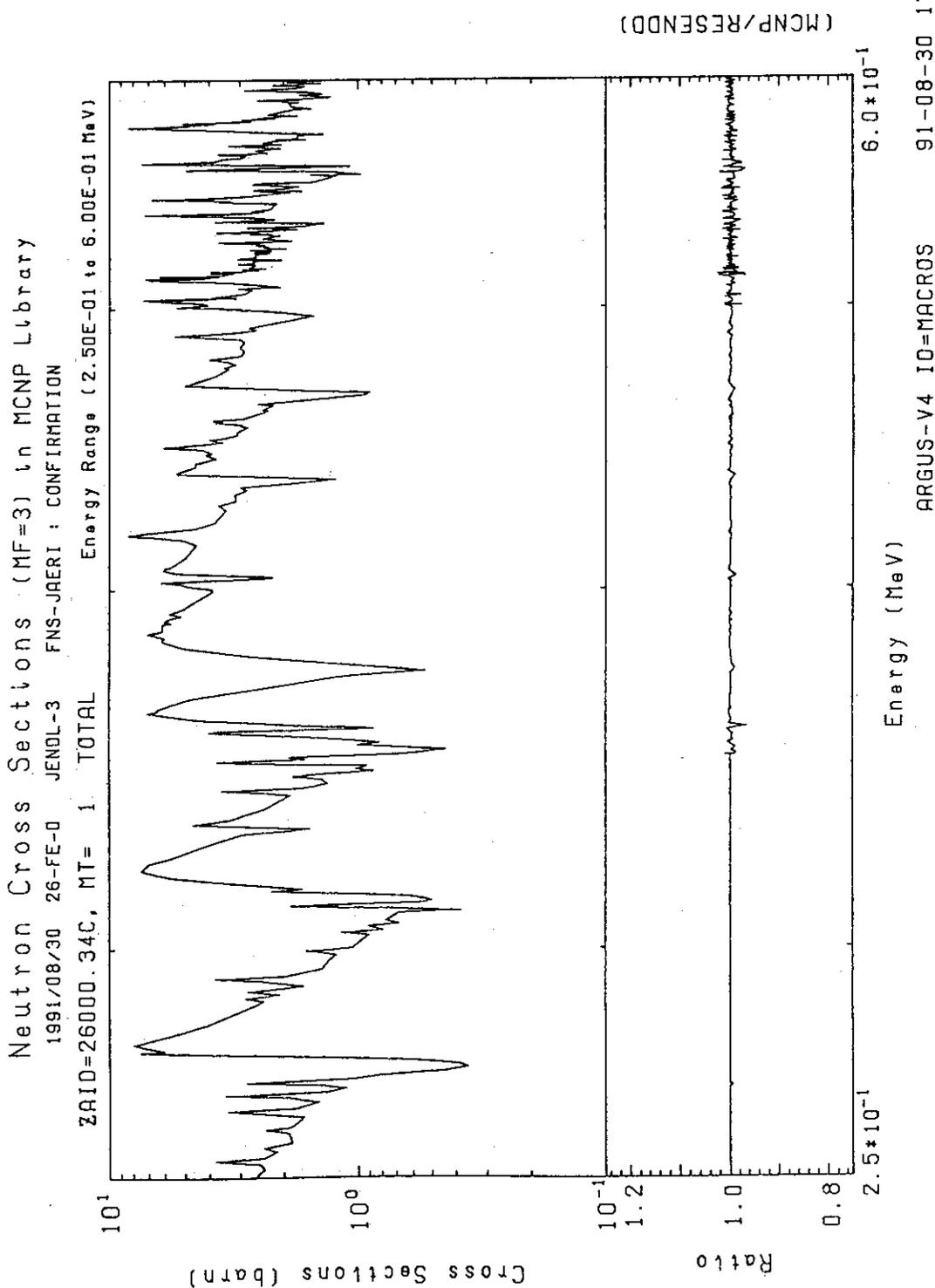
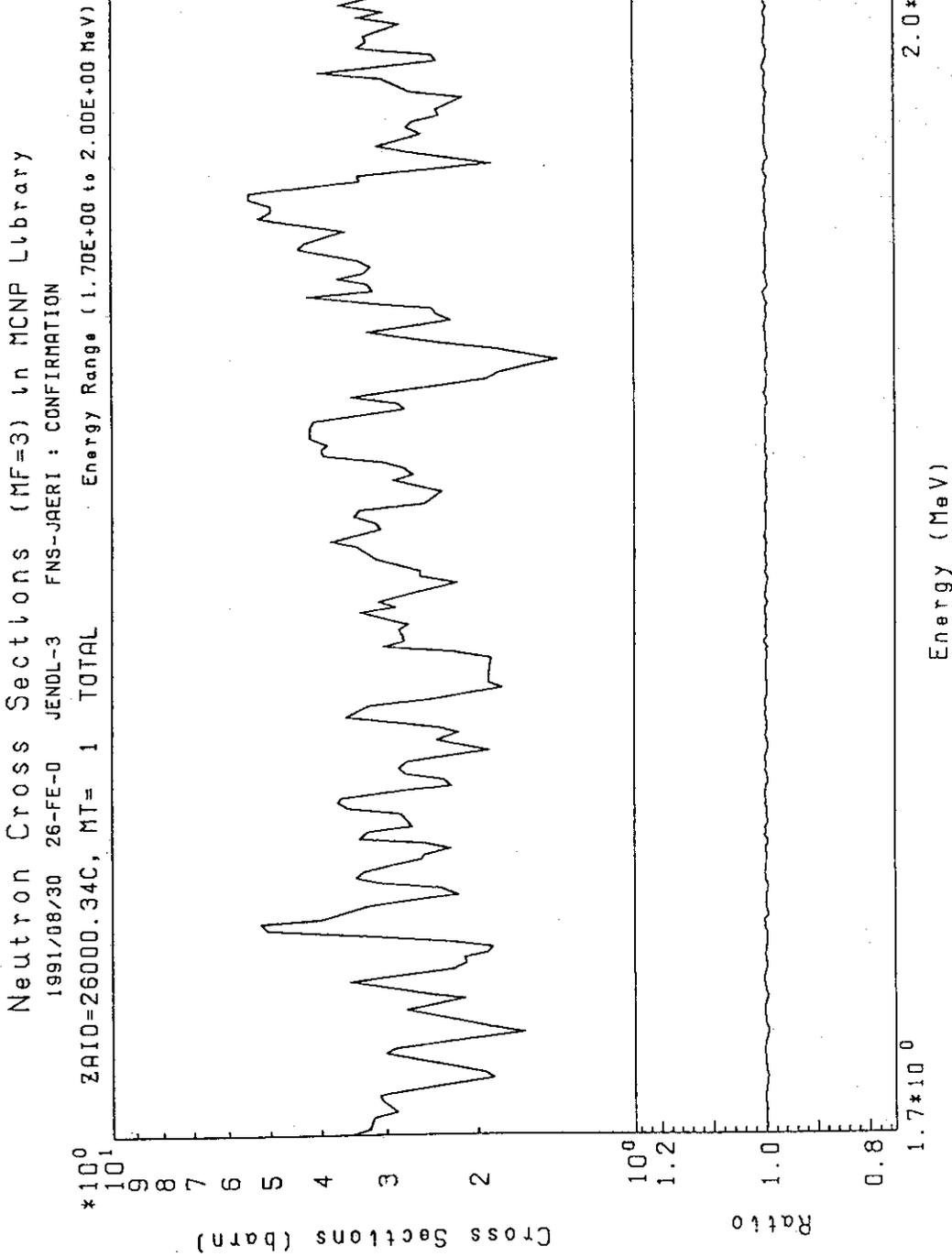


Fig. 5.1 Comparison of total cross sections of Fe-nat. in energy range from 6.0×10^{-2} to 8.0×10^{-2} MeV between FSXLIB-J3 and RESEND



ARGUS-V4 IO=MACROS 91-08-30 17 PAGE

Fig. 5.2 Comparison of total cross sections of Fe-nat. in energy range from 0.25 to 0.6 MeV between FSXLIB-J3 and RESEND



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-08-30 21 PAGE

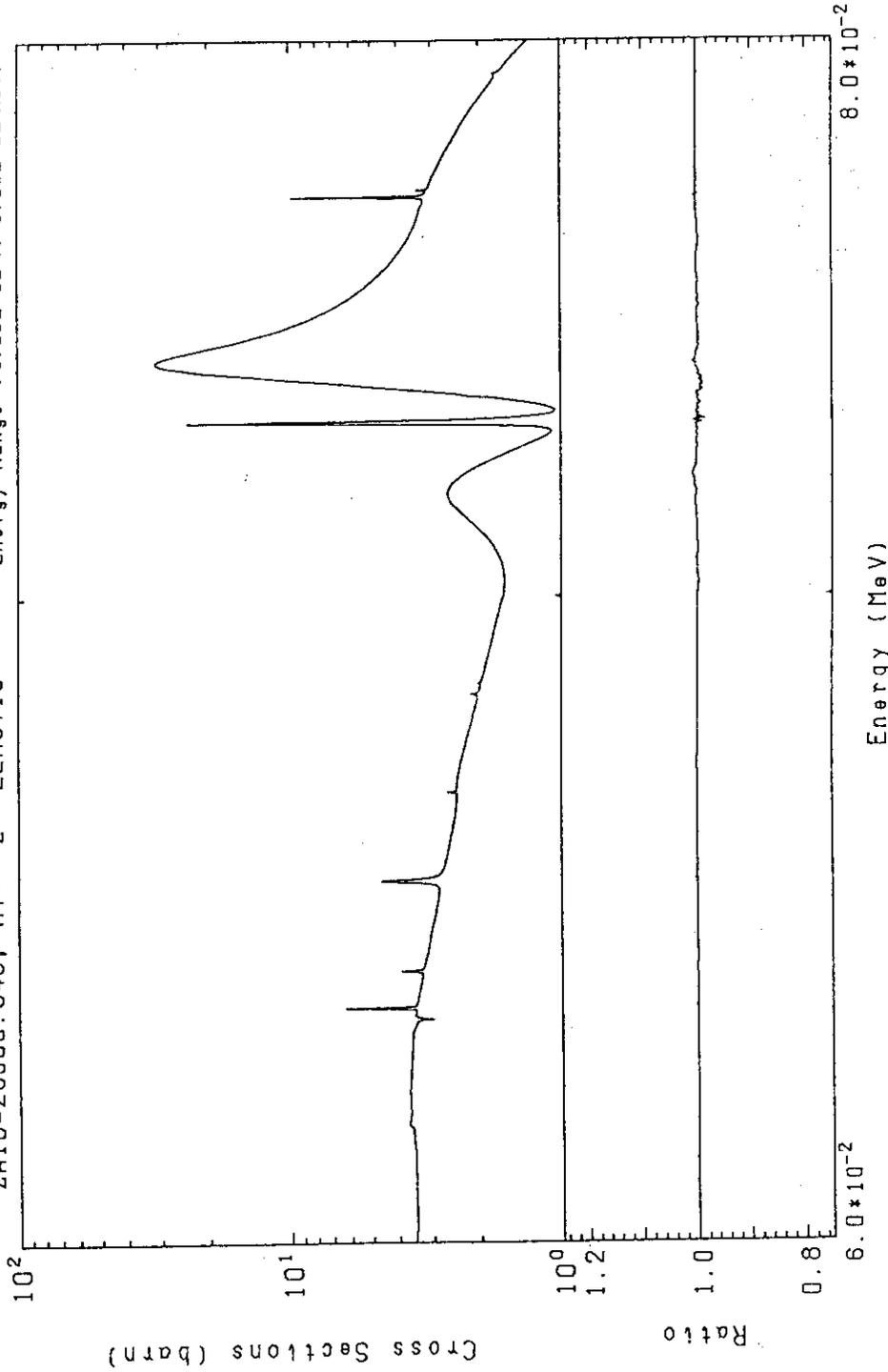
Fig. 5.3 Comparison of total cross sections of Fe-nat. in energy range from 1.7 to 2.0 MeV between FSXLIB-J3 and RESEDD

Neutron Cross Sections (MF=3) in MCNP Library

1991/08/30 26-FE-0 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION

ZAID=26000.34C, MT= 2 ELASTIC

Energy Range (6.00E-02 to 8.00E-02 MeV)



(MCNP/RESEND)

Energy (MeV)

ARGUS-V4 ID=MACROS 91-08-30 31 PAGE

Fig. 5.4 Comparison of elastic scattering cross sections of Fe-nat. in energy range from 6.0×10^{-2} to 8.0×10^{-2} MeV between FSXLIB-J3 and RESEND

Neutron Cross Sections (MF=3) in MCNP Library
 1991/08/30 26-FE-0 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION

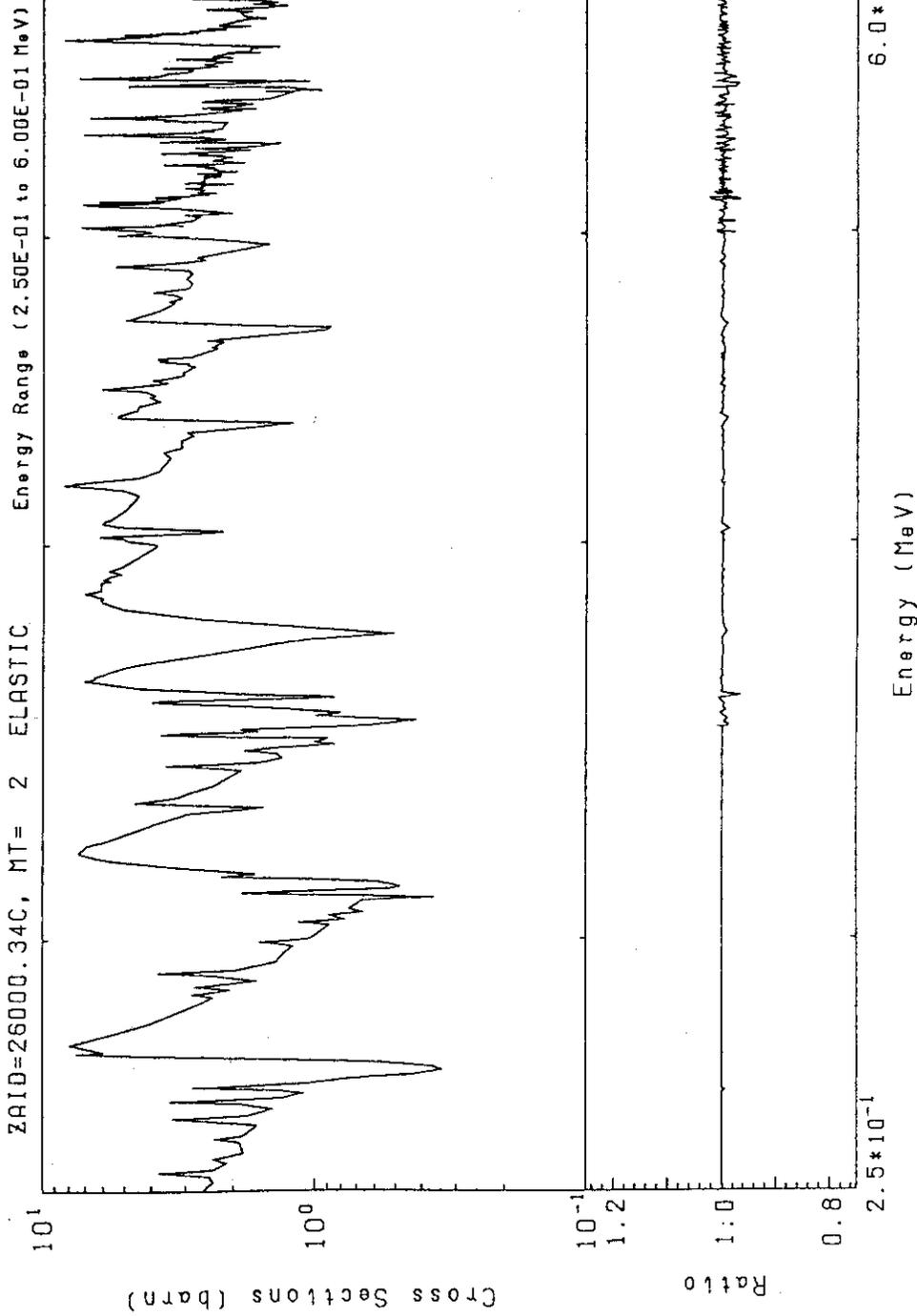
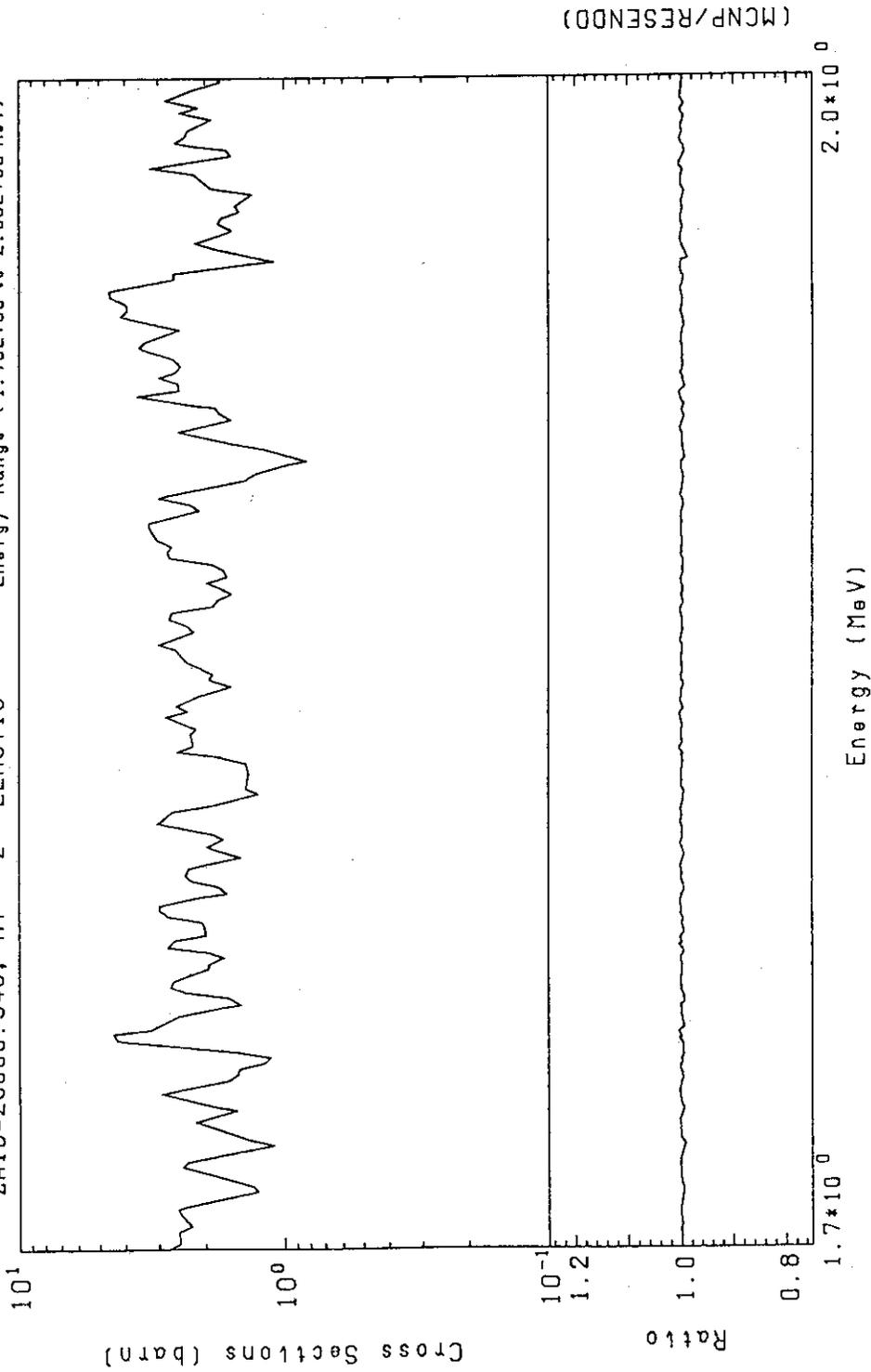


Fig. 5.5 Comparison of elastic scattering cross sections of Fe-nat. in energy range from 0.25 to 0.6 MeV between FSXLIB-J3 and RESEDD

Neutron Cross Sections (MF=3) in MCNP Library

1991/08/30 26-FE-0 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION

ZAID=26000.34C, MT= 2 ELASTIC Energy Range (1.70E+00 to 2.00E+00 MeV)



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-08-30 45 PAGE

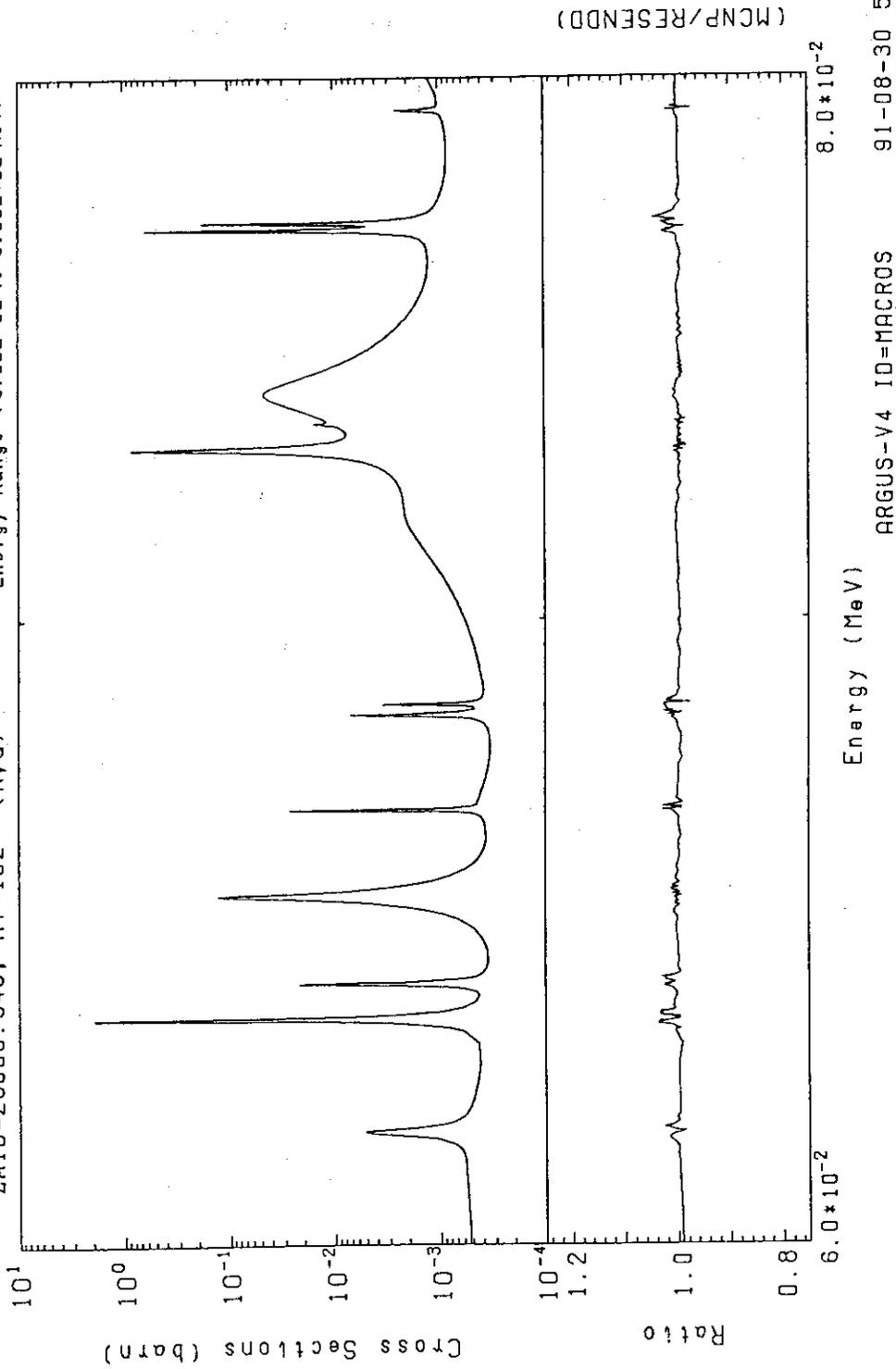
Fig. 5.6 Comparison of elastic scattering cross sections of Fe-nat. in energy range from 1.7 to 2.0 Mev between FSXLIB-J3 and RESEDD

Neutron Cross Sections (MF=3) in MCNP Library

1991/08/30 26-FE-0 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION

ZR10=26000.34C, MT=102 (N,G)

Energy Range (6.00E-02 to 8.00E-02 MeV)



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-08-30 55 PAGE

Fig. 5.7 Comparison of radiative capture cross sections of Fe-nat. in energy range from 6.0×10^{-2} to 8.0×10^{-2} MeV between FSXLIB-J3 and RESEND

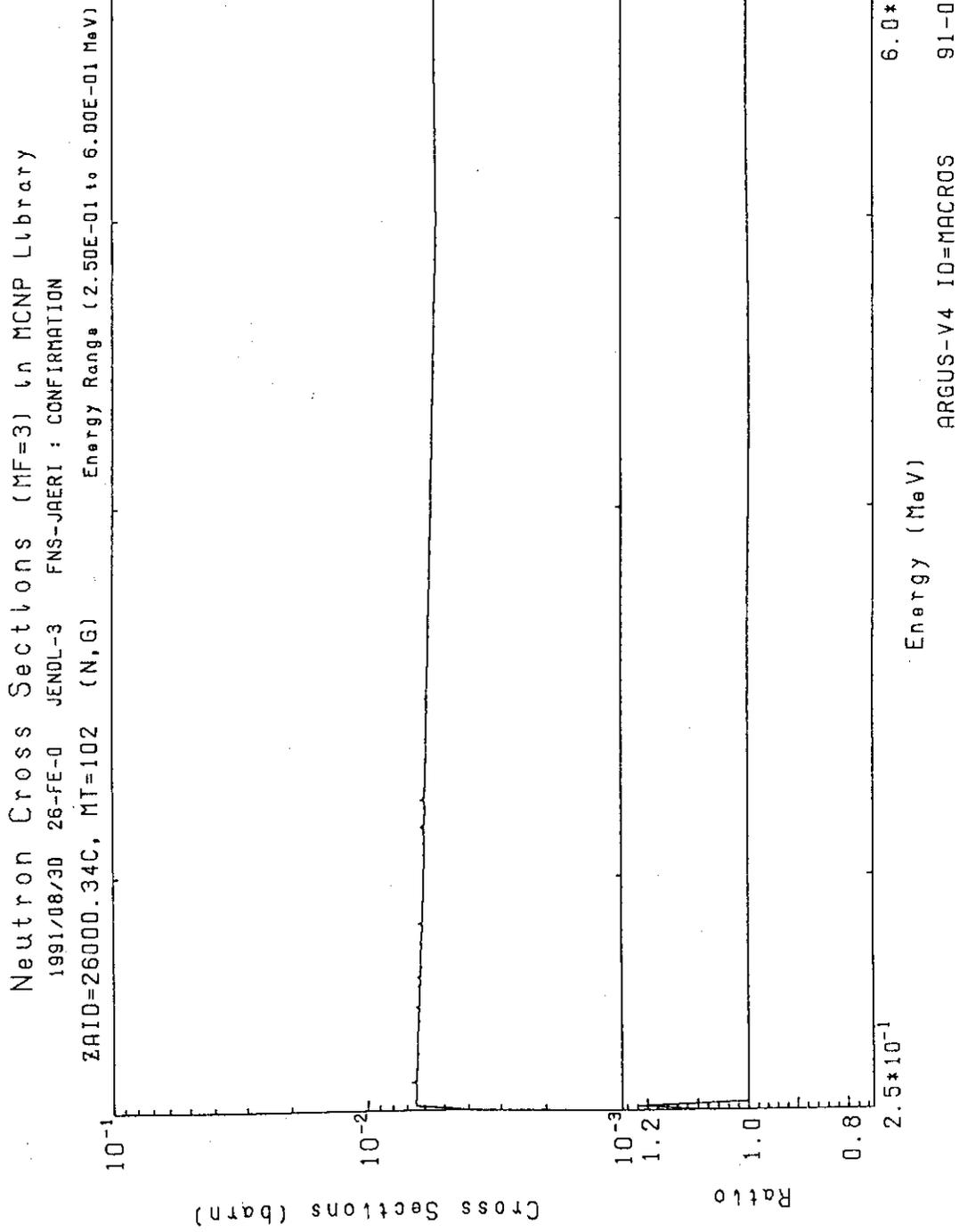
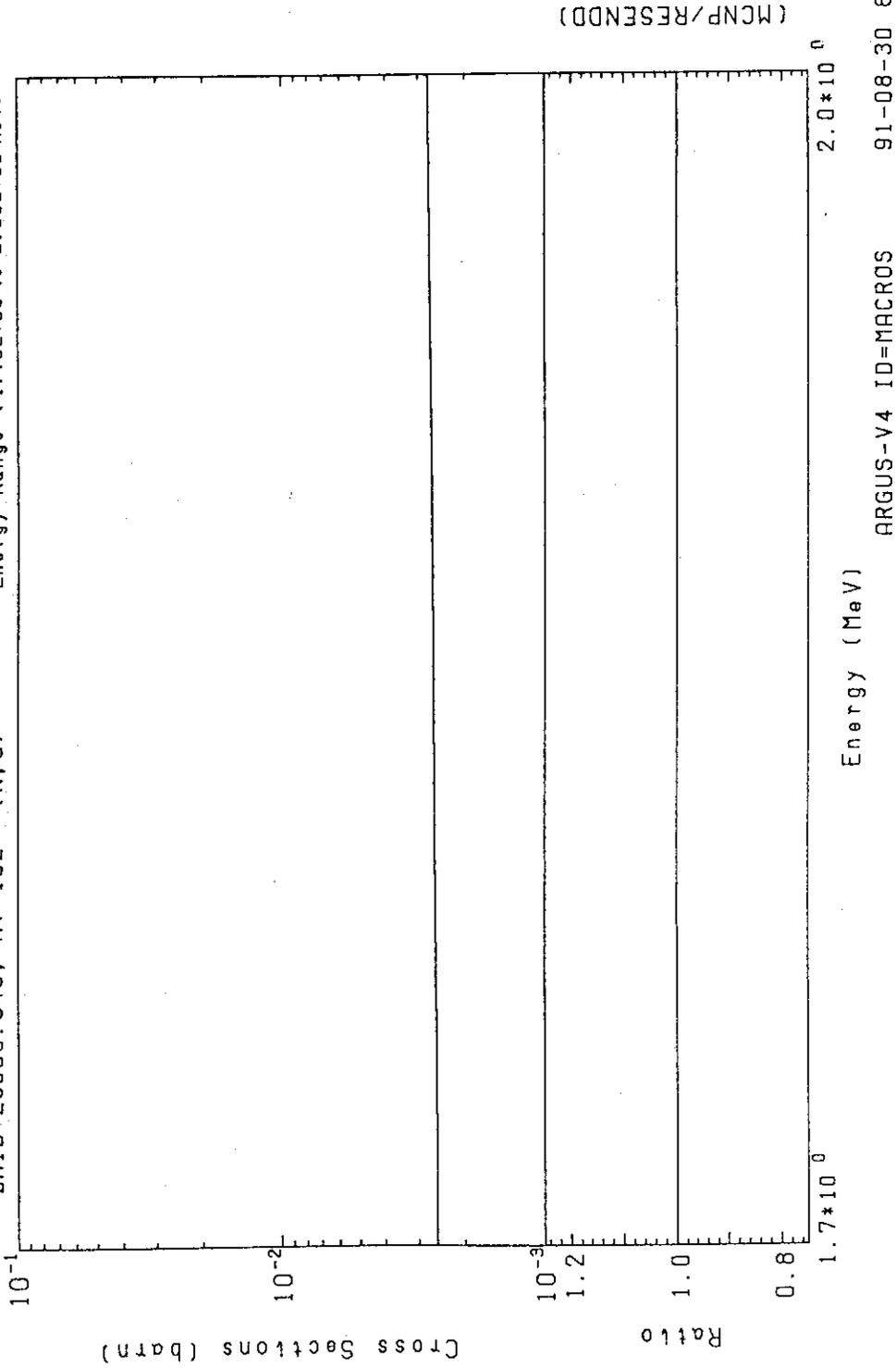


Fig. 5.8 Comparison of radiative capture cross sections of Fe-nat. in energy range from 0.25 to 0.6 MeV between FSXLIB-J3 and RESEND

Neutron Cross Sections (MF=3) in MCNP Library
 1991/08/30 26-FE-0 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION
 ZAID=26000.34C, MT=102 (N,G) Energy Range (1.70E+00 to 2.00E+00 MeV)



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-08-30 69 PAGE

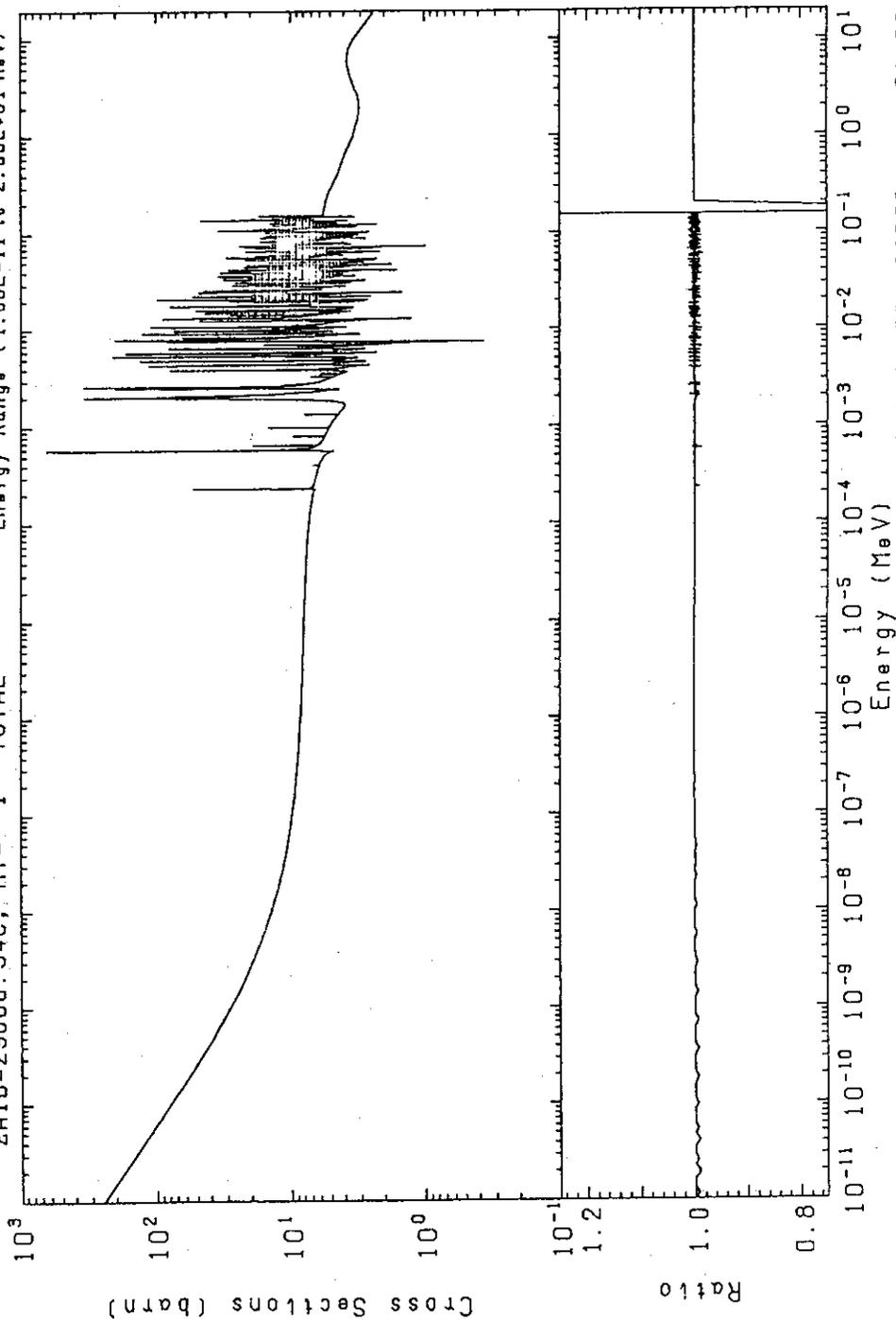
Fig. 5.9 Comparison of radiative capture cross sections of Fe-nat. in energy range from 1.7 to 2.0 MeV between FSXLIB-J3 and RESEDD

Neutron Cross Sections (MF=3) in MCNP Library

1991/09/18 29-CU-0 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION

ZAID=29000.34C, MT= 1 TOTAL

Energy Range (1.00E-11 to 2.00E+01 MeV)



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-13 1 PAGE

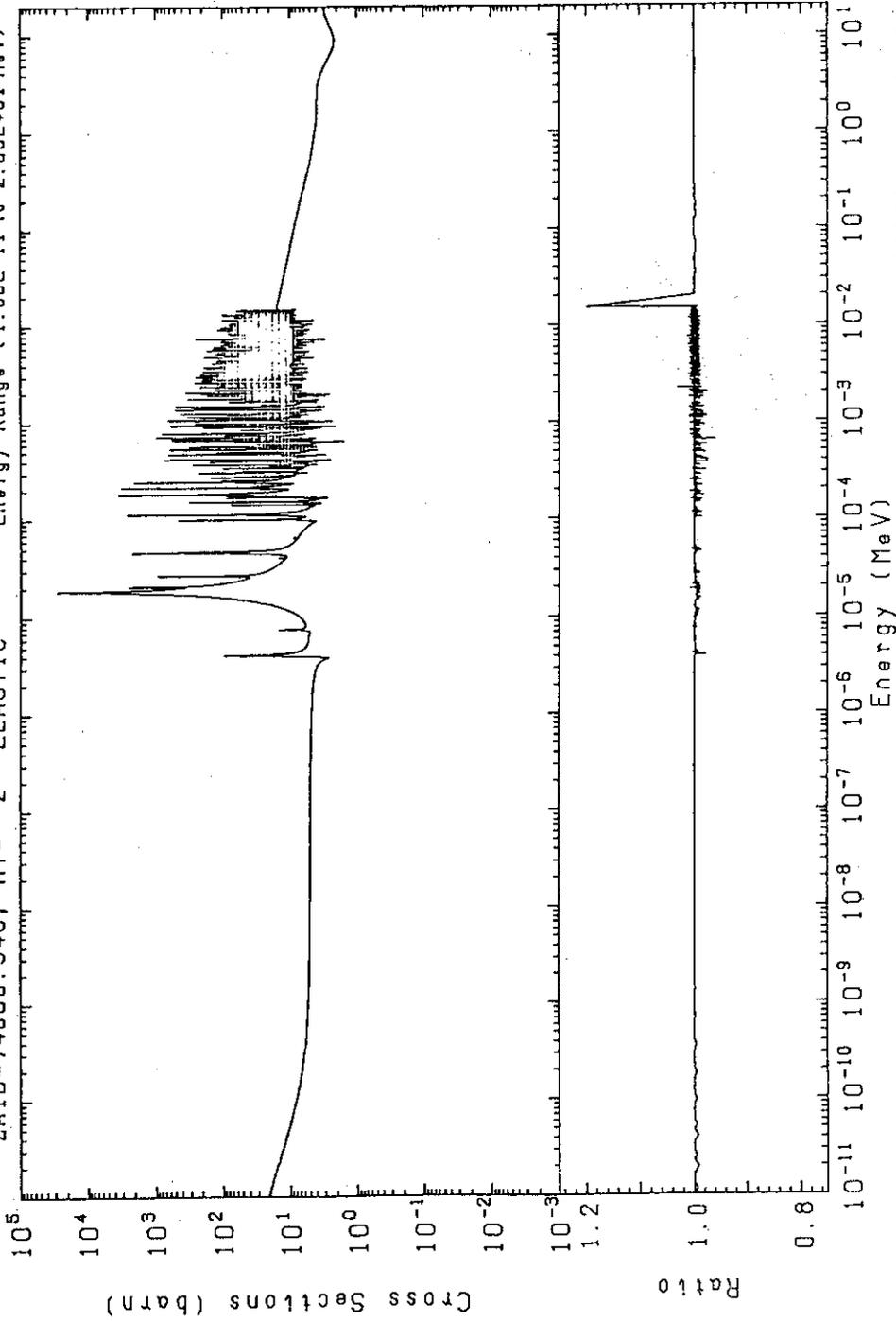
Fig. 5.10 Comparison of total cross sections of Cu-nat. in energy range from 1.0×10^{-11} to 20.0 MeV between FSXLIB-J3 and RESEND

Neutron Cross Sections (MF=3) in MCNP Library

1991/09/17 74-W -0 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION

ZAI0=74000.34C, MT= 2 ELASTIC

Energy Range (1.00E-11 to 2.00E+01 MeV)



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-17 2 PAGE

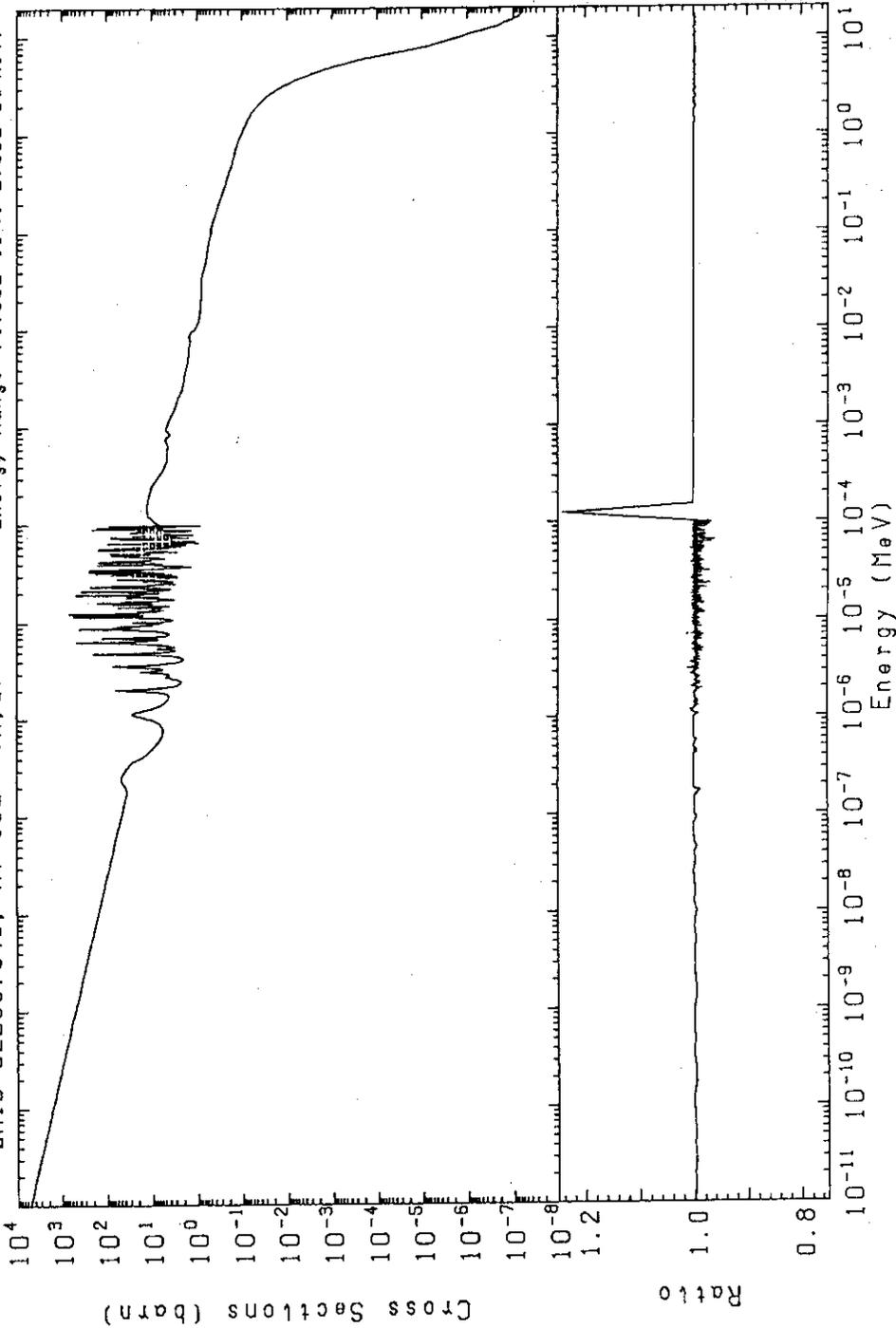
Fig. 5.11 Comparison of elastic scattering cross sections of W-nat. in energy range from 1.0×10^{-11} to 20.0 Mev between FSXLIB-J3 and RESEDD

Neutron Cross Sections (MF=3) in MCNP Library

1991/09/17 92-U -235 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION

ZAI0=92235.34C, MT=102 (N,G)

Energy Range (1.00E-11 to 2.00E+01 MeV)



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-17 4 PAGE

Fig. 5.12 Comparison of radiative capture cross sections of U-235 in energy range from 1.0×10^{-11} to 20.0 MeV between FSXLIB-J3 and RESEDD

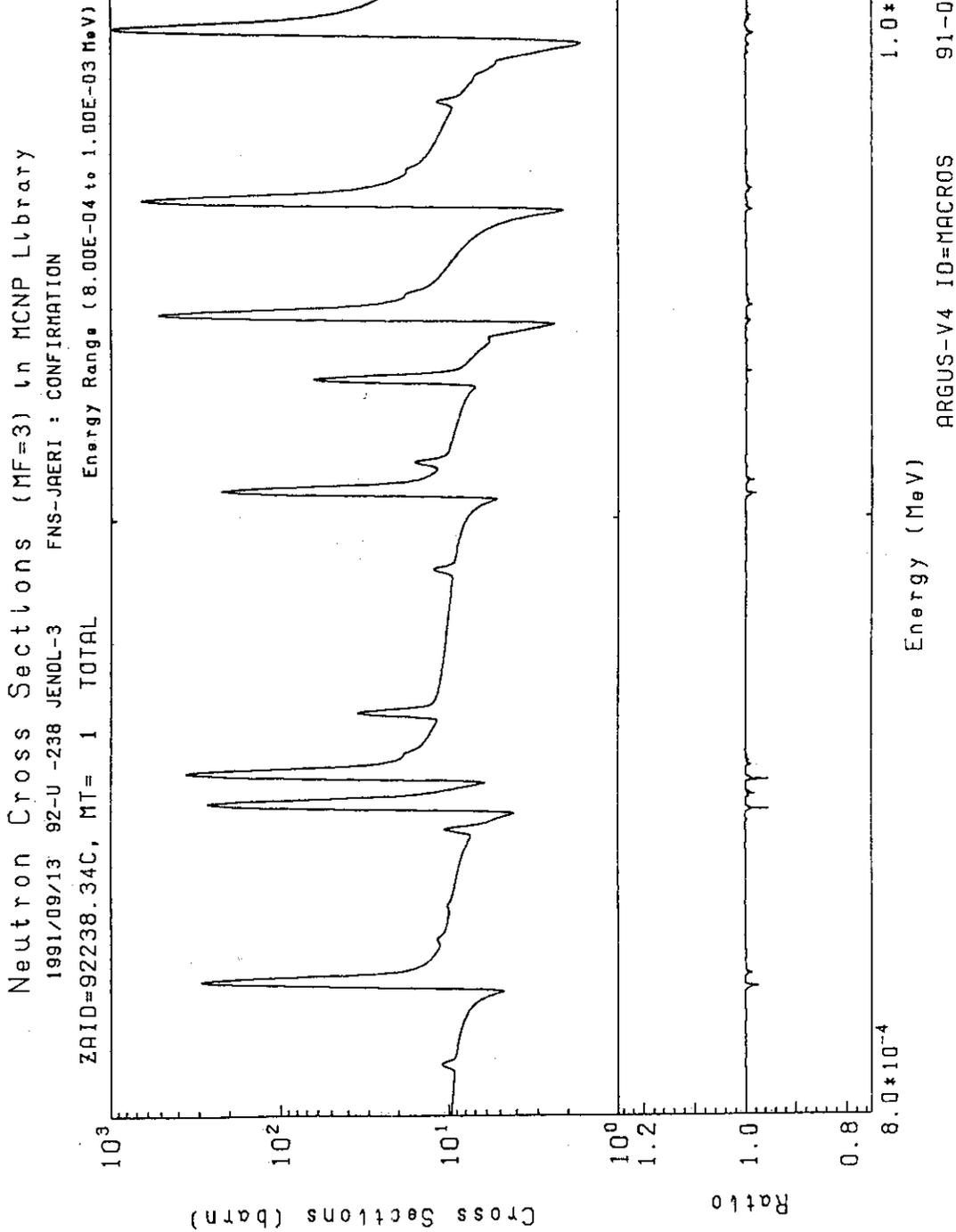


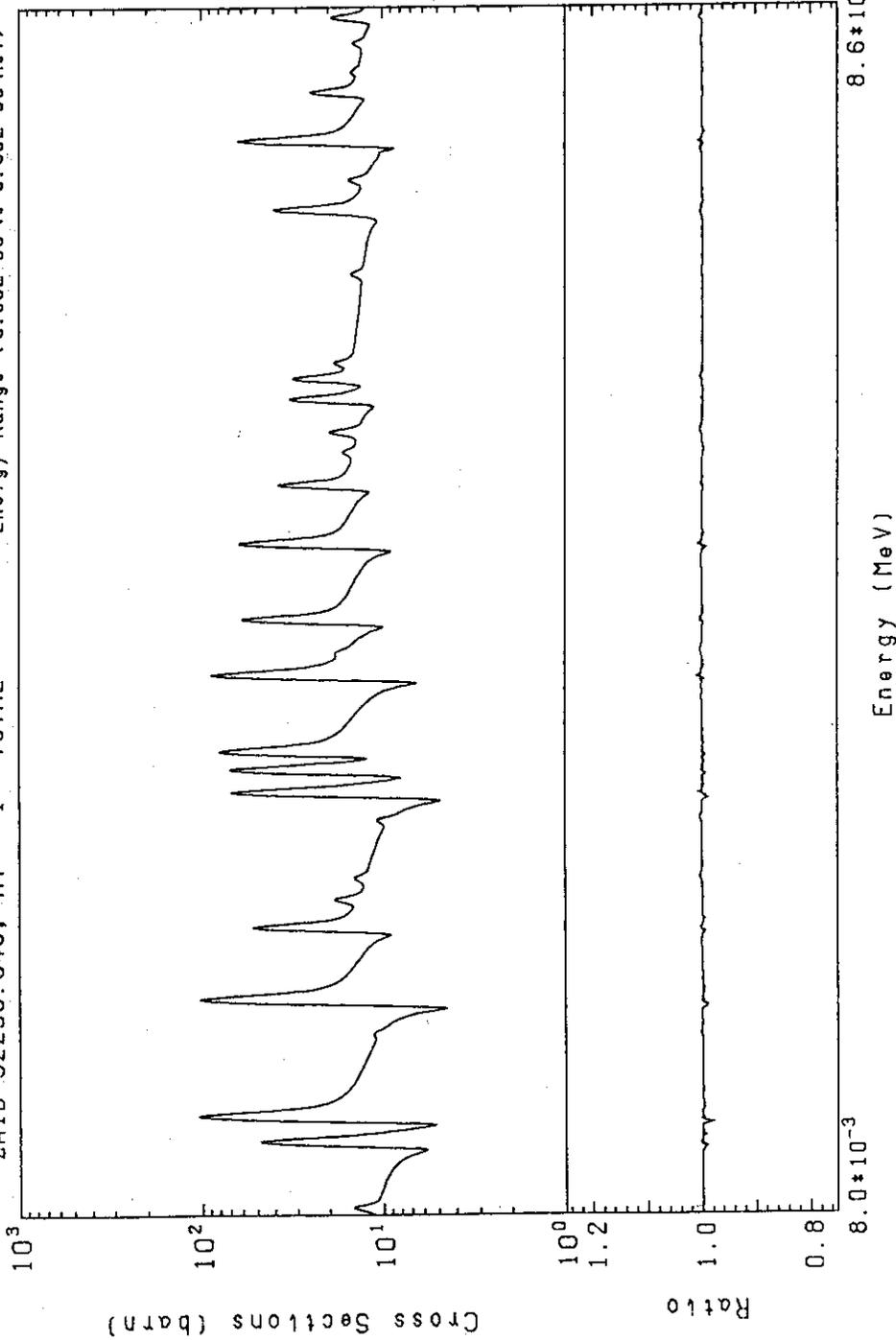
Fig. 5.13 Comparison of total cross sections of U-238 in energy range from 8.0×10^{-4} to 1.0×10^{-3} MeV between FSXLIB-J3 and RESEDD

Neutron Cross Sections (MF=3) in MCNP Library

1991/09/13 92-U-238 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION

ZAID=92238.34C, MT= 1 TOTAL

Energy Range (8.00E-03 to 8.60E-03 MeV)



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-14 31 PAGE

Fig. 5.14 Comparison of total cross sections of U-238 in energy range from 8.0×10^{-3} to 8.6×10^{-3} MeV between FSXLIB-J3 and RESEND

Neutron Cross Sections (MF=3) in MCNP Library

1991/09/13 92-U-238 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION

ZAID=92238.34C, MT= 18 SUM-FISION Energy Range (8.00E-04 to 1.00E-03 MeV)

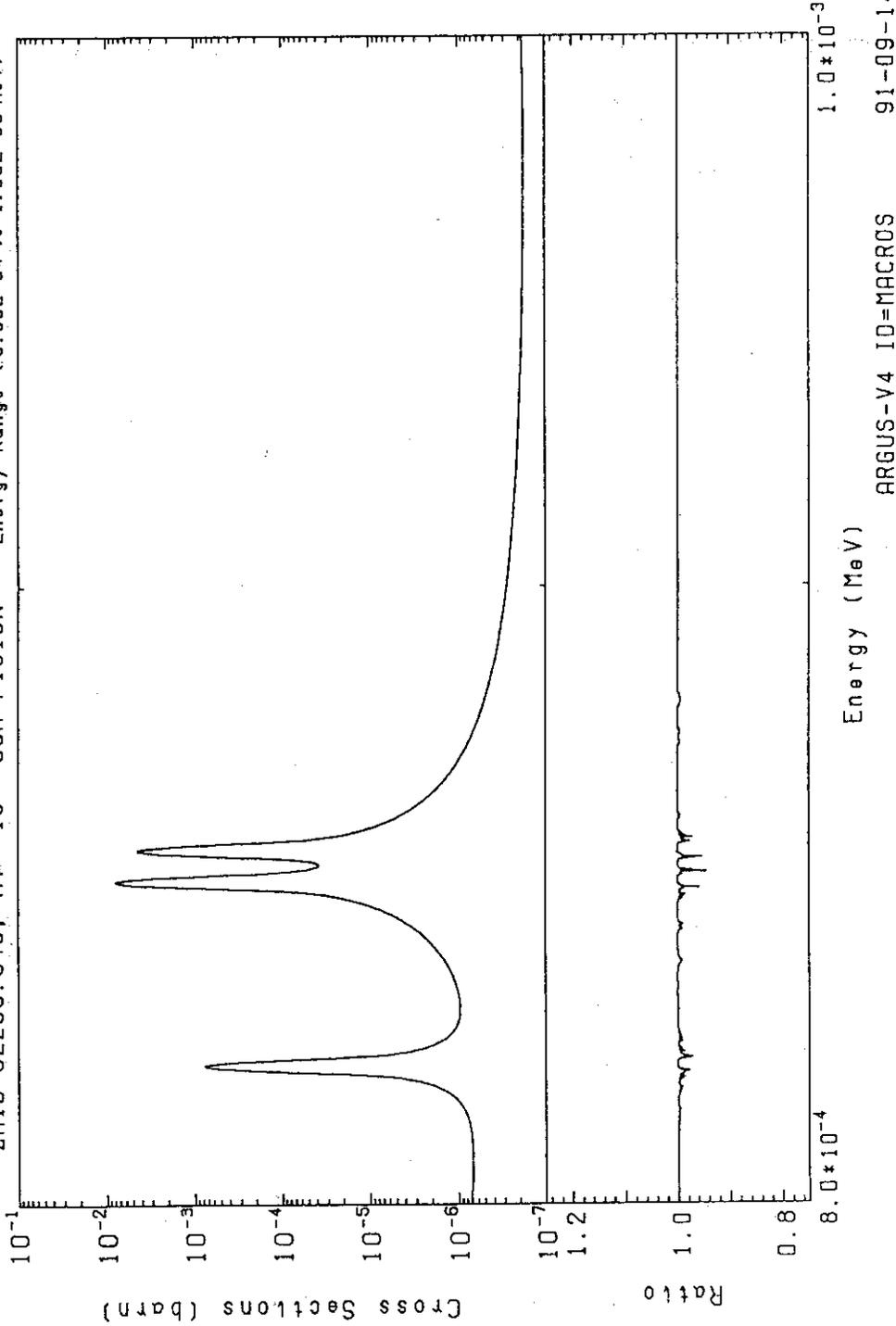


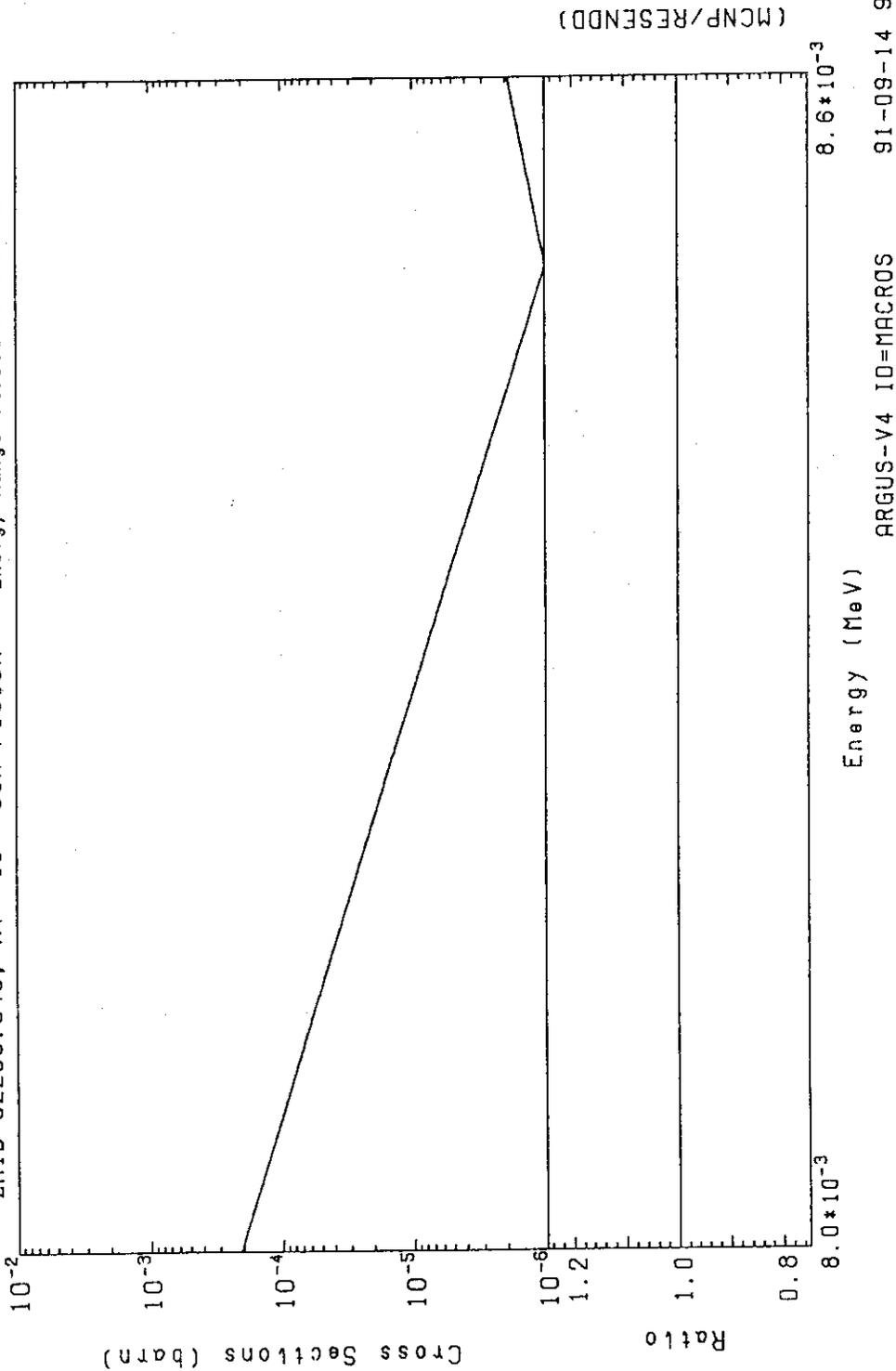
Fig. 5.15 Comparison of total cross sections of U-238 in energy range from 1.0×10^{-4} to 20.0 Mev between FSXLIB-J3 and RESEDD

ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-14 75 PAGE

Neutron Cross Sections (MF=3) in MCNP Library

1991/09/13 92-U -238 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION

ZAID=92238.34C, MT= 18 SUM-FISION Energy Range (8.00E-03 to 8.60E-03 MeV)



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-14 99 PAGE

Fig. 5.16 Comparison of total fission cross sections of U-238 in energy range from 8.0×10^{-4} to 1.0×10^{-3} MeV between FSXLIB-J3 and RESEDD

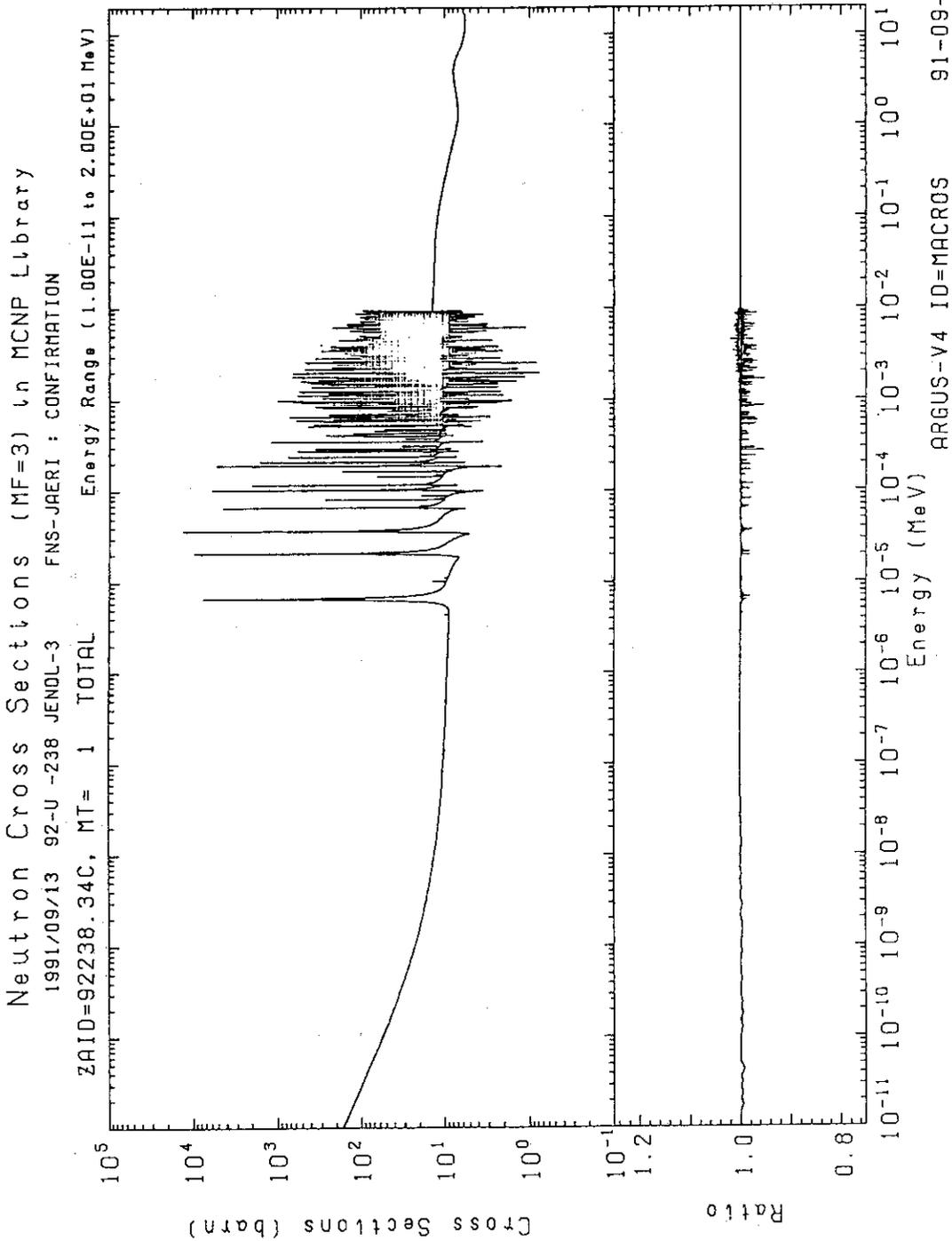
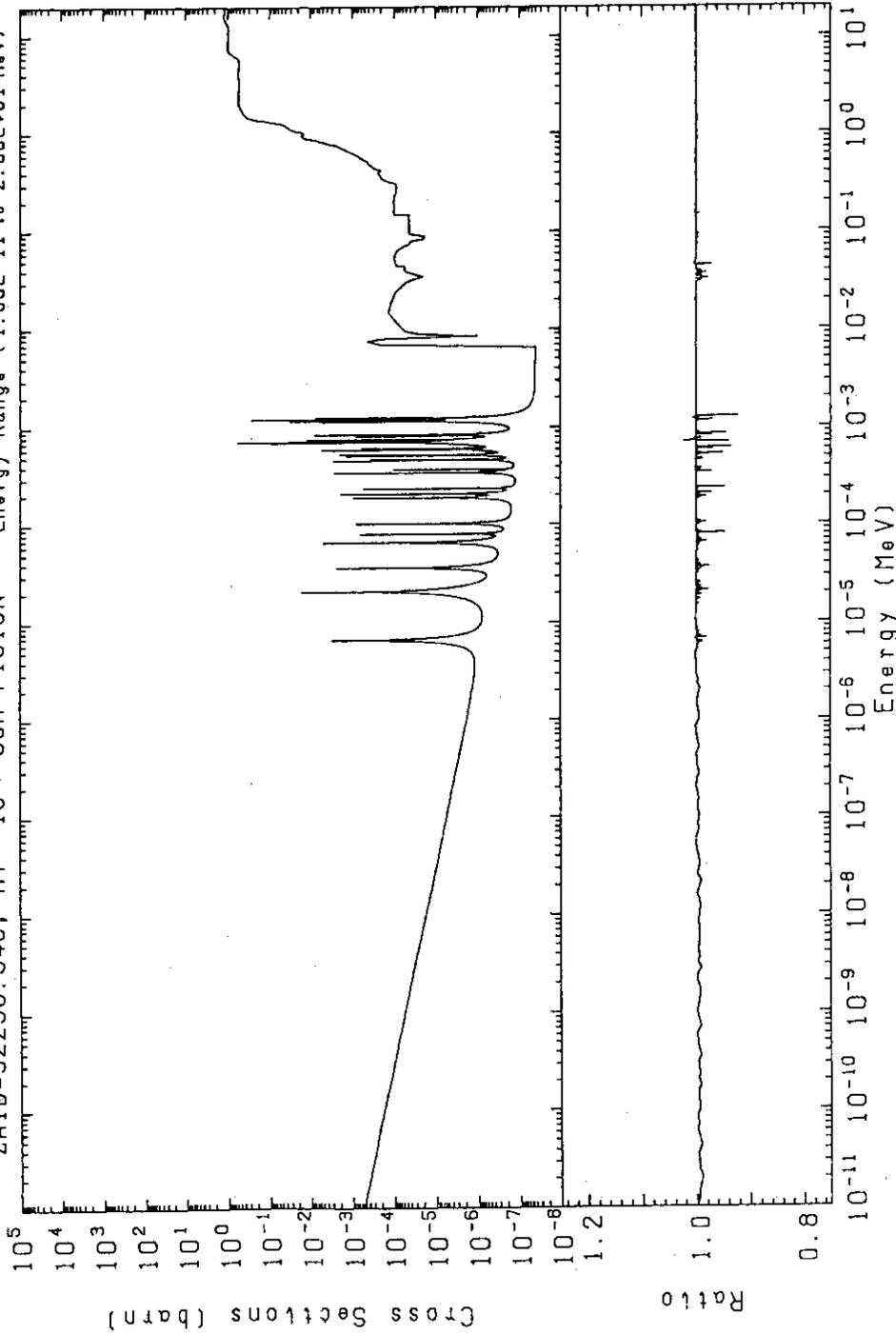


Fig. 5.17 Comparison of total fission cross sections of U-238 in energy range from 8.0×10^{-3} to 8.6×10^{-3} MeV between FSXLIB-J3 and RESEDD

Neutron Cross Sections (MF=3) in MCNP Library

1991/09/13 92-U -238 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION

ZAID=92238.34C, MT= 18 SUM-FISION Energy Range (1.00E-11 to 2.00E+01 MeV)



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-13 3 PAGE

Fig. 5.18 Comparison of total fission cross sections of U-238 in energy range from 1.0×10^{-11} to 20.0 MeV between FSXLIB-J3 and RESEND

1991/09/13 26-FE-0 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION
 (N,N*2) REACTION CROSS-SECTION OF 26000.34 (MT= 52)

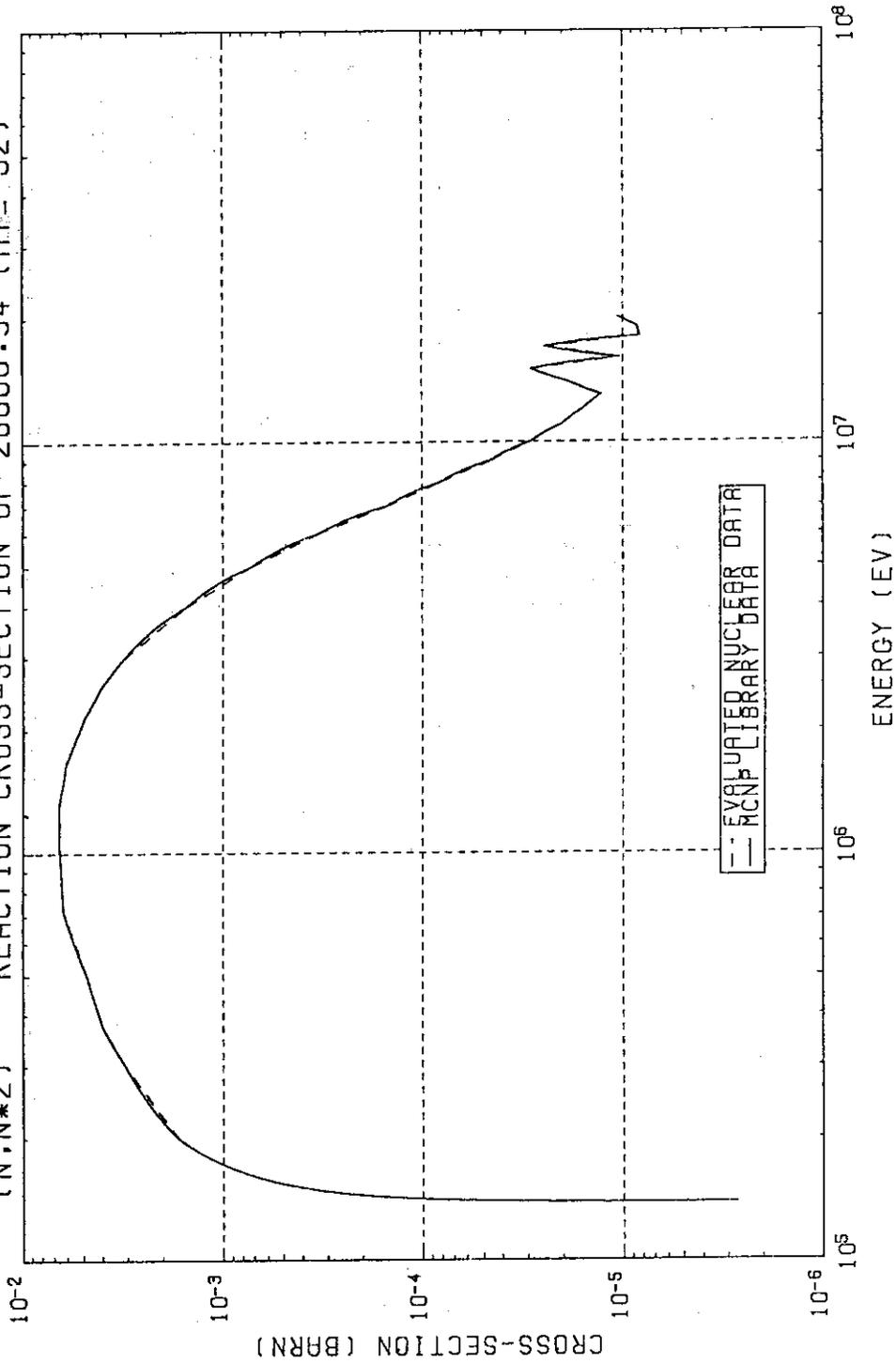


Fig. 5.19 Comparison of inelastic scattering cross sections (MT=52) of Fe-nat. between FSXLIB-J3 and JENDL-3

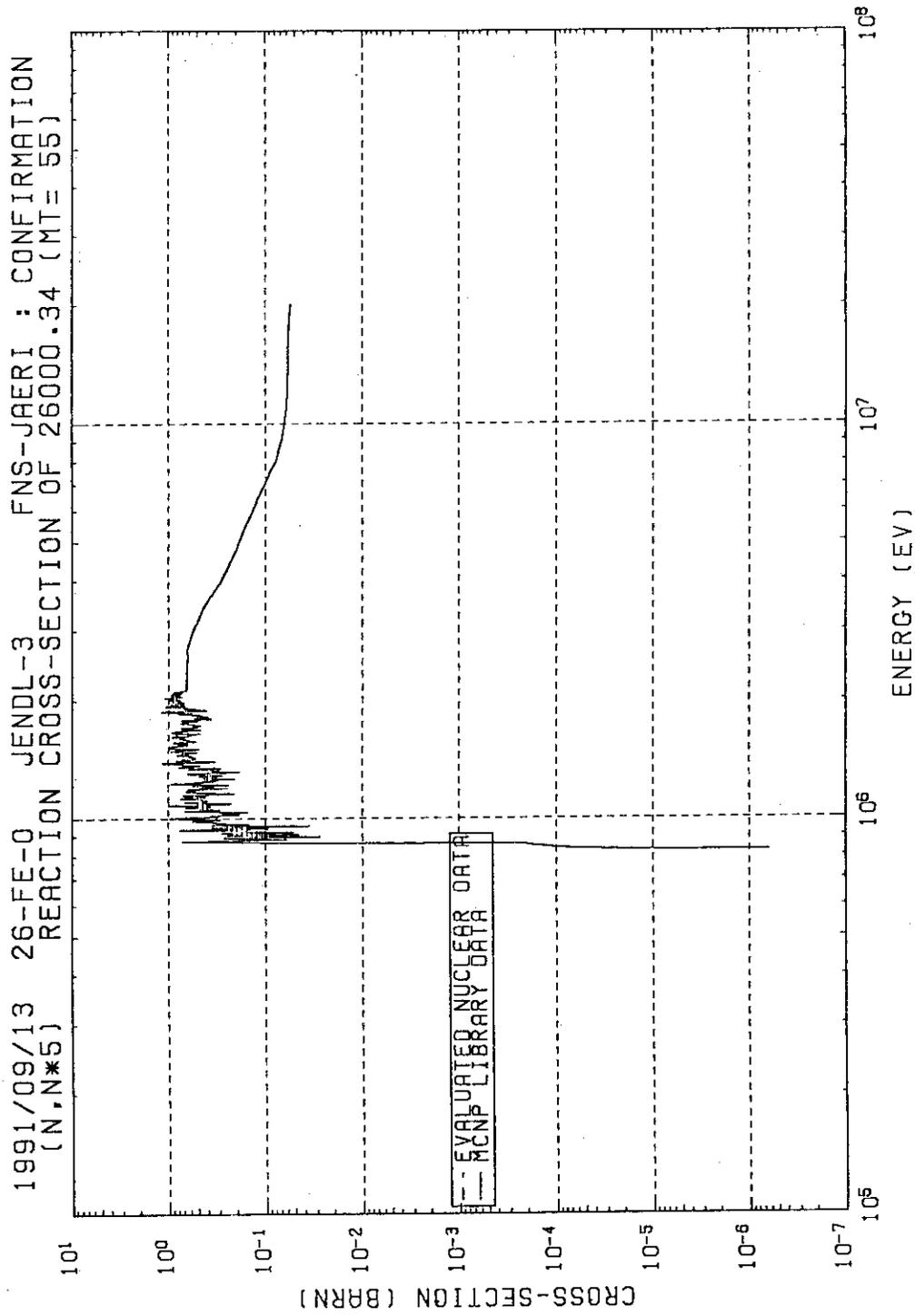


Fig. 5.20 Comparison of inelastic scattering cross sections (MT=55) of Fe-nat. between FSXLIB-J3 and JENDL-3

1991/09/13 6-C -12 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION
(N,N#1) REACTION CROSS-SECTION OF 6012.34 (MT= 51)

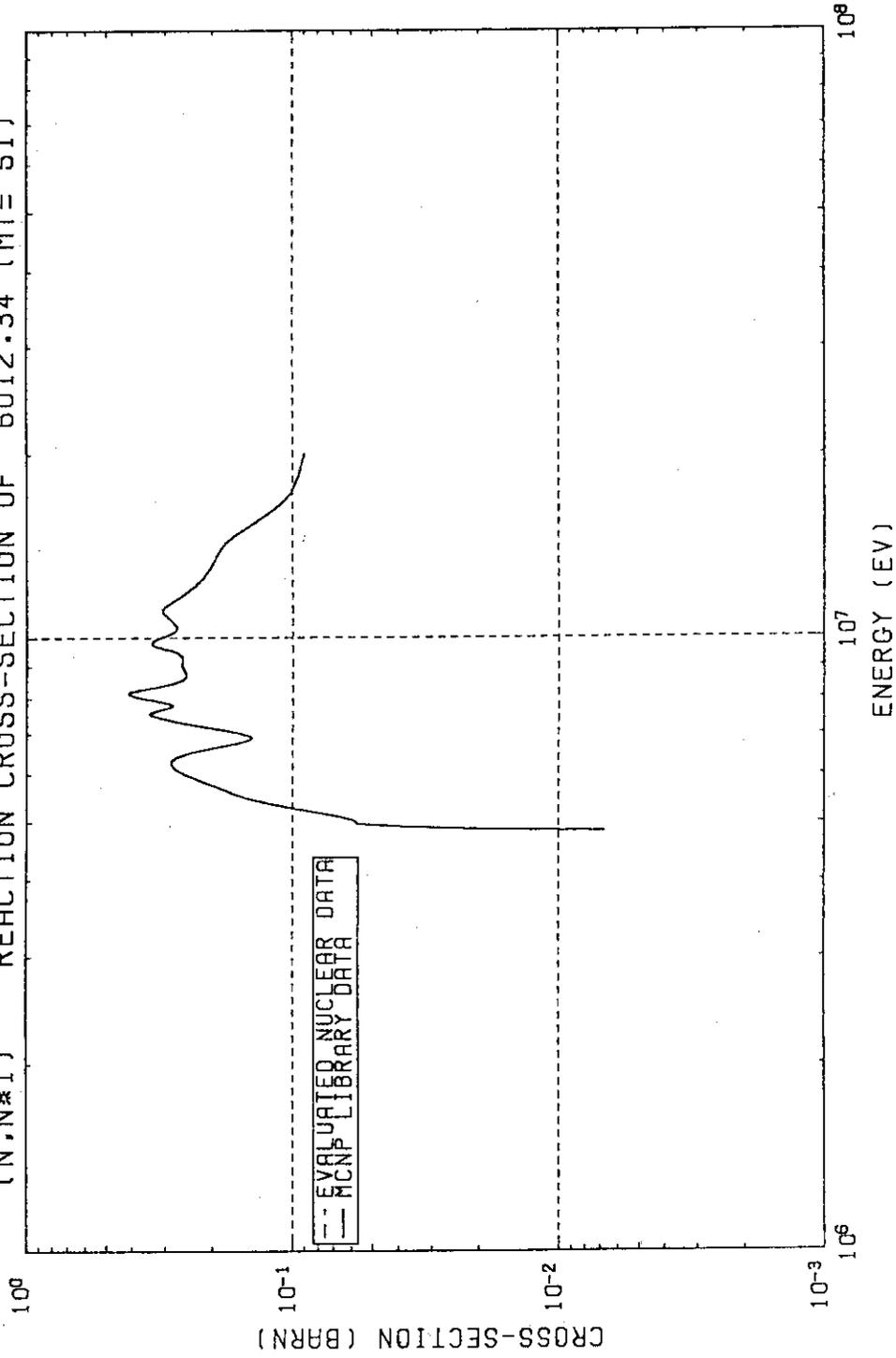


Fig. 5.21 Comparison of inelastic scattering cross sections (MT=51) of C-12 between FSXLIB-J3 and JENDL-3

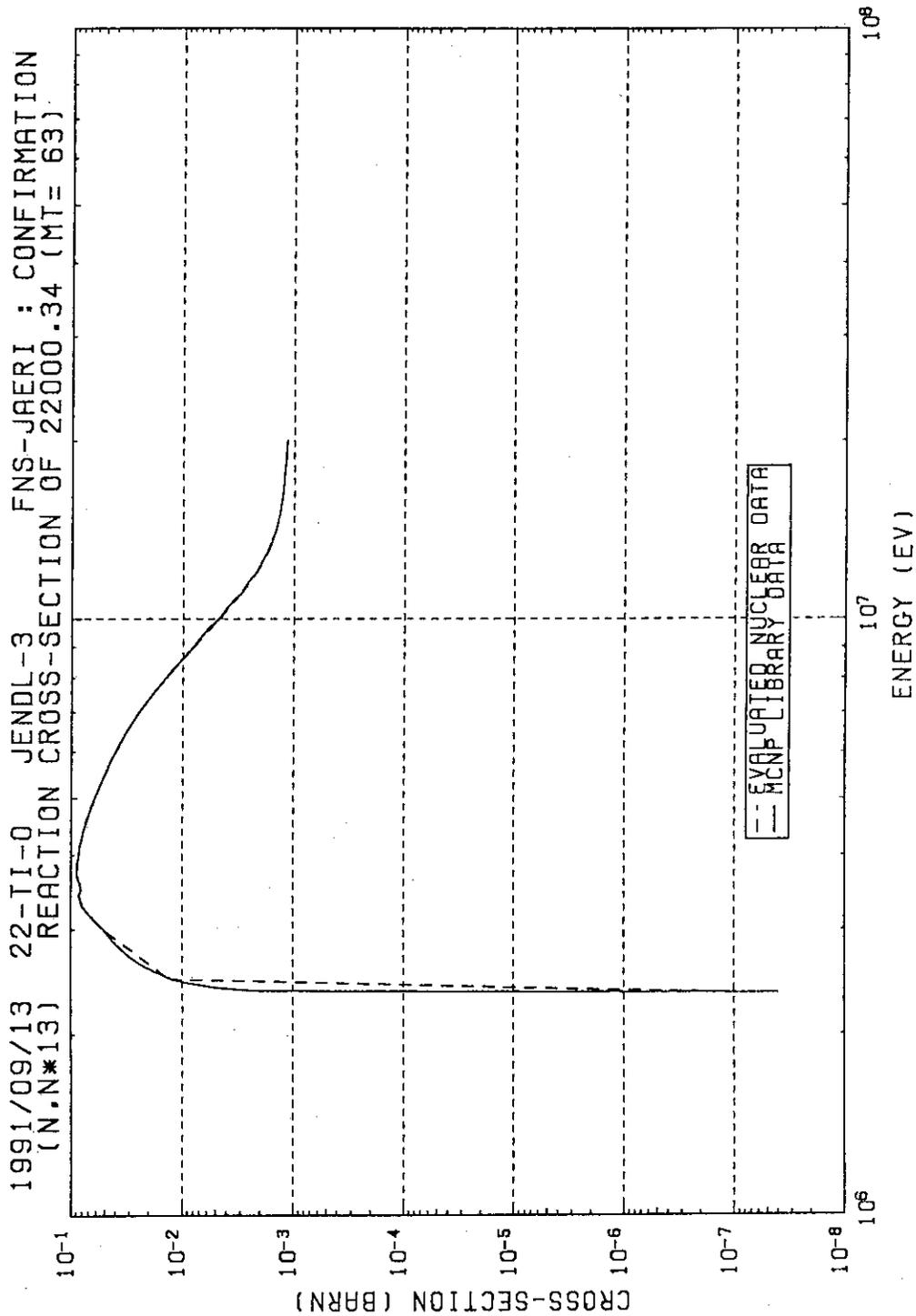


Fig. 5.22 Comparison of inelastic scattering cross sections (MT=63) of Ti-nat. between FSXLIB-J3 and JENDL-3

1991/09/13 28-NI-0 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION
(N,D) REACTION CROSS-SECTION OF 28000.34 (MT=104)

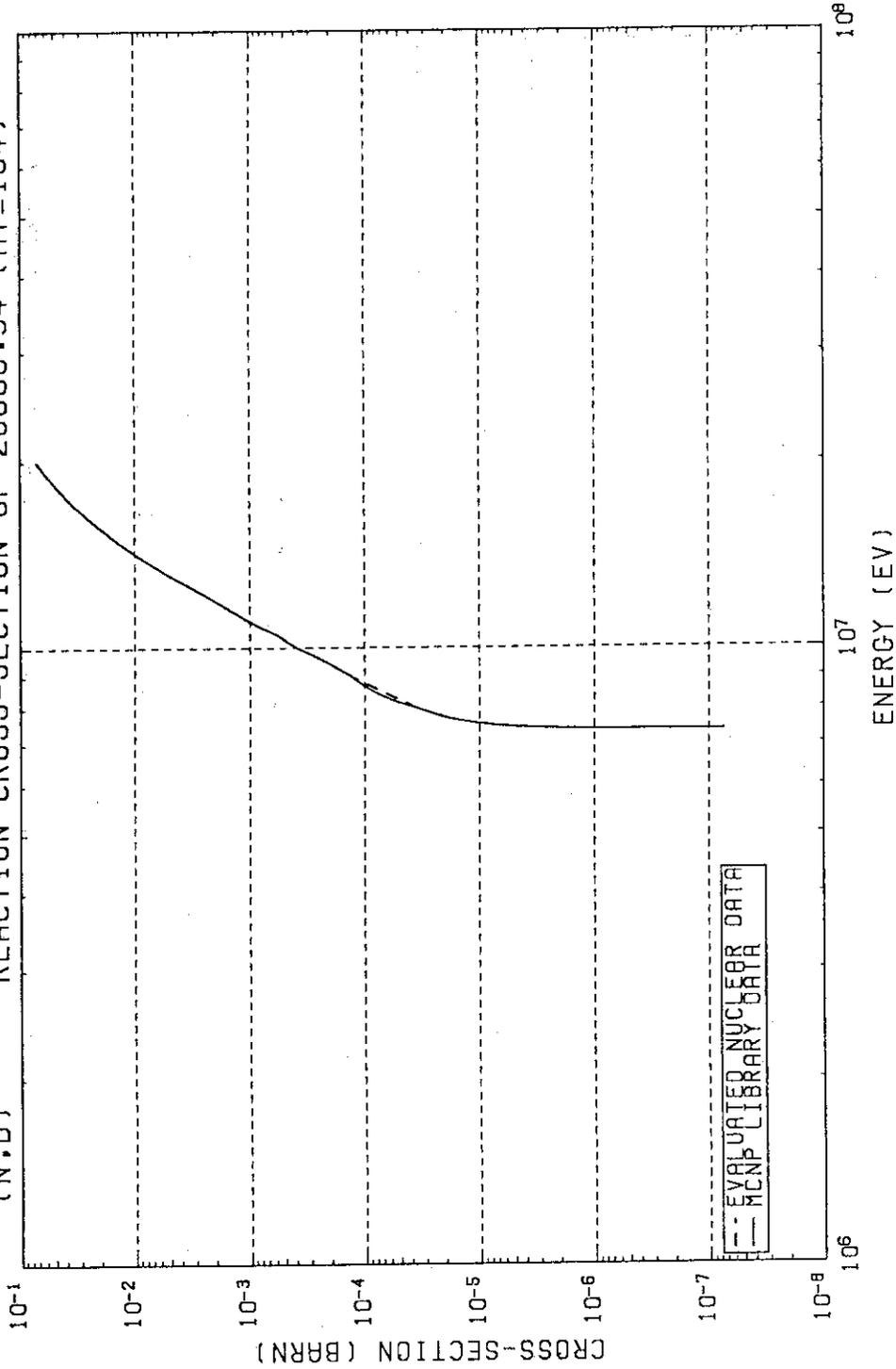


Fig. 5.23 Comparison of (n,d) cross sections of Ni-nat. between FSXLIB-J3 and JENDL-3

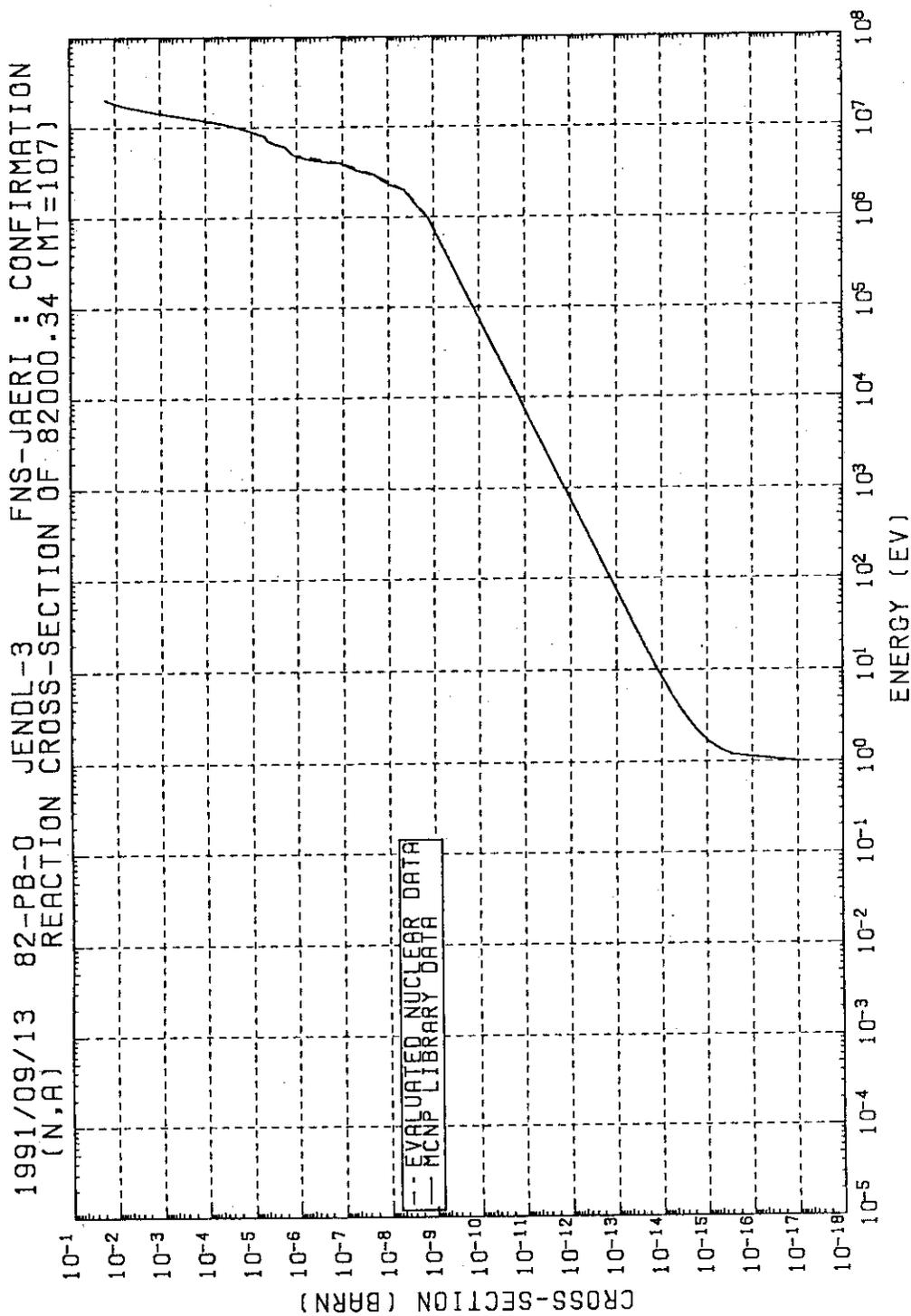


Fig. 5.24 Comparison of (n,α) cross sections of Pb-nat. between FSXLIB-J3 and JENDL-3

1991/09/13 94-PU-239 JENDL-3 FNS-JAERI : CONFIRMATION
(N,2N*DRT) REACTION CROSS-SECTION OF 94239.34 (MT= 16)

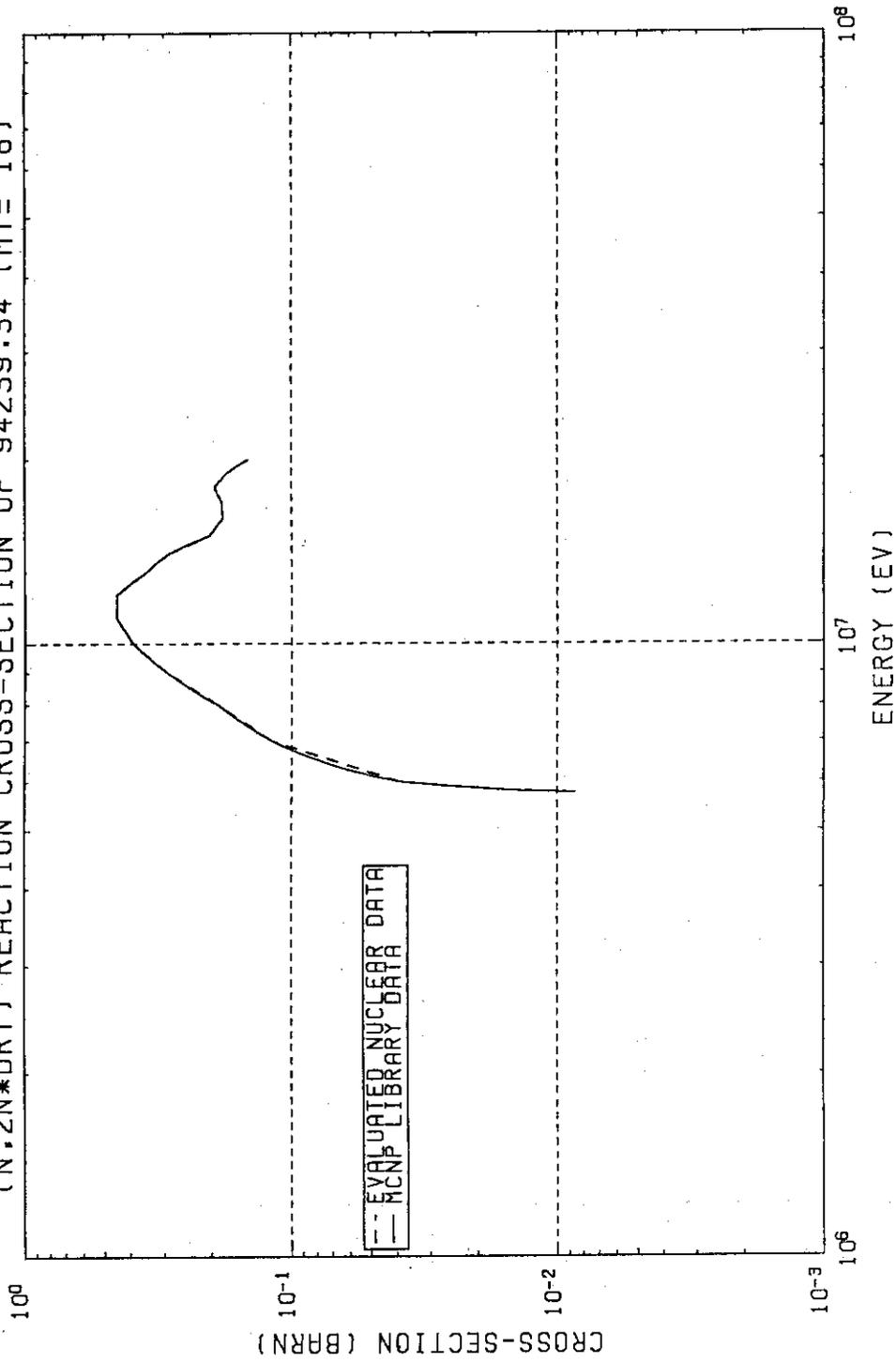
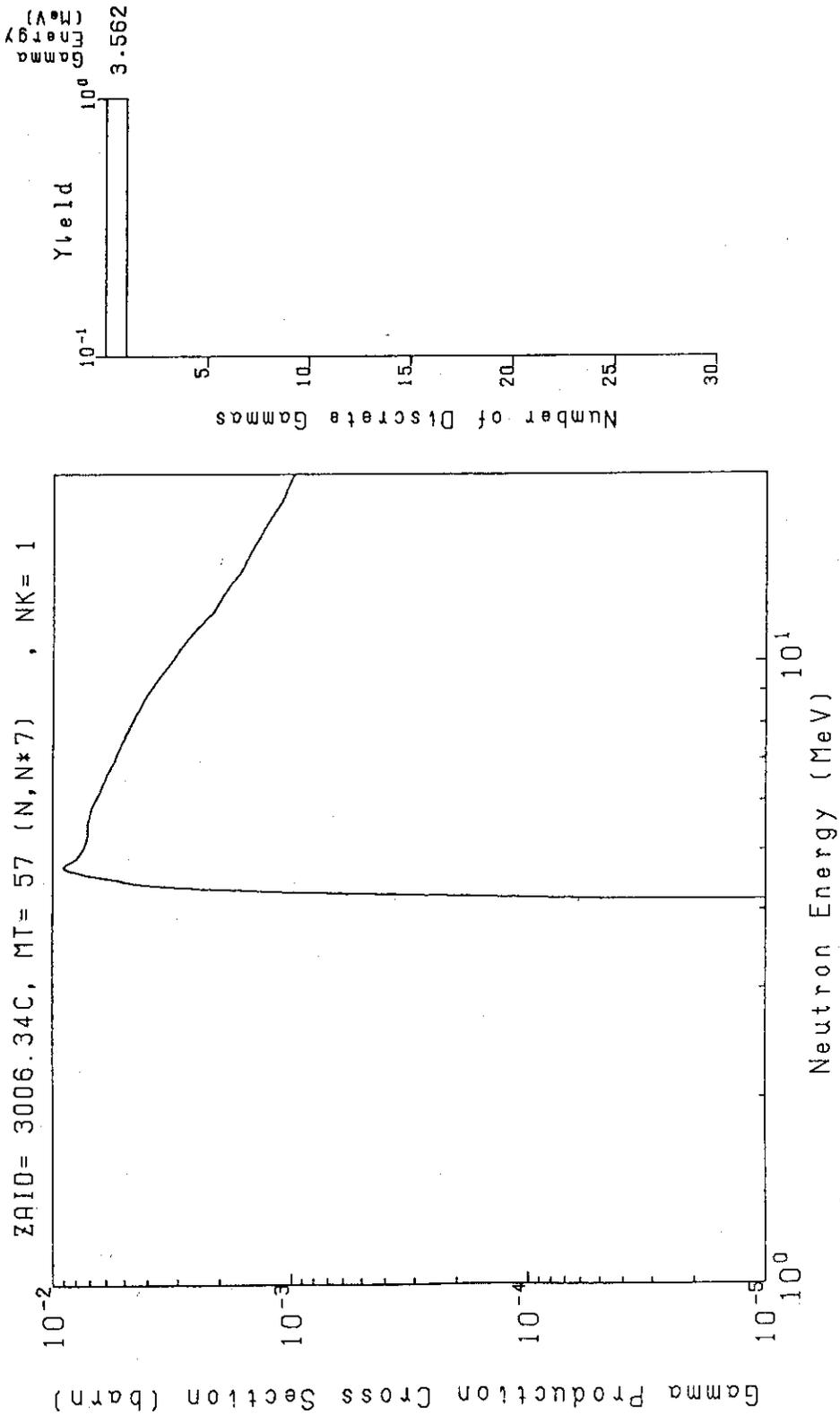


Fig. 5.25 Comparison of (n,2n) cross sections of Pu-239 between FSXLIB-J3 and JENDL-3

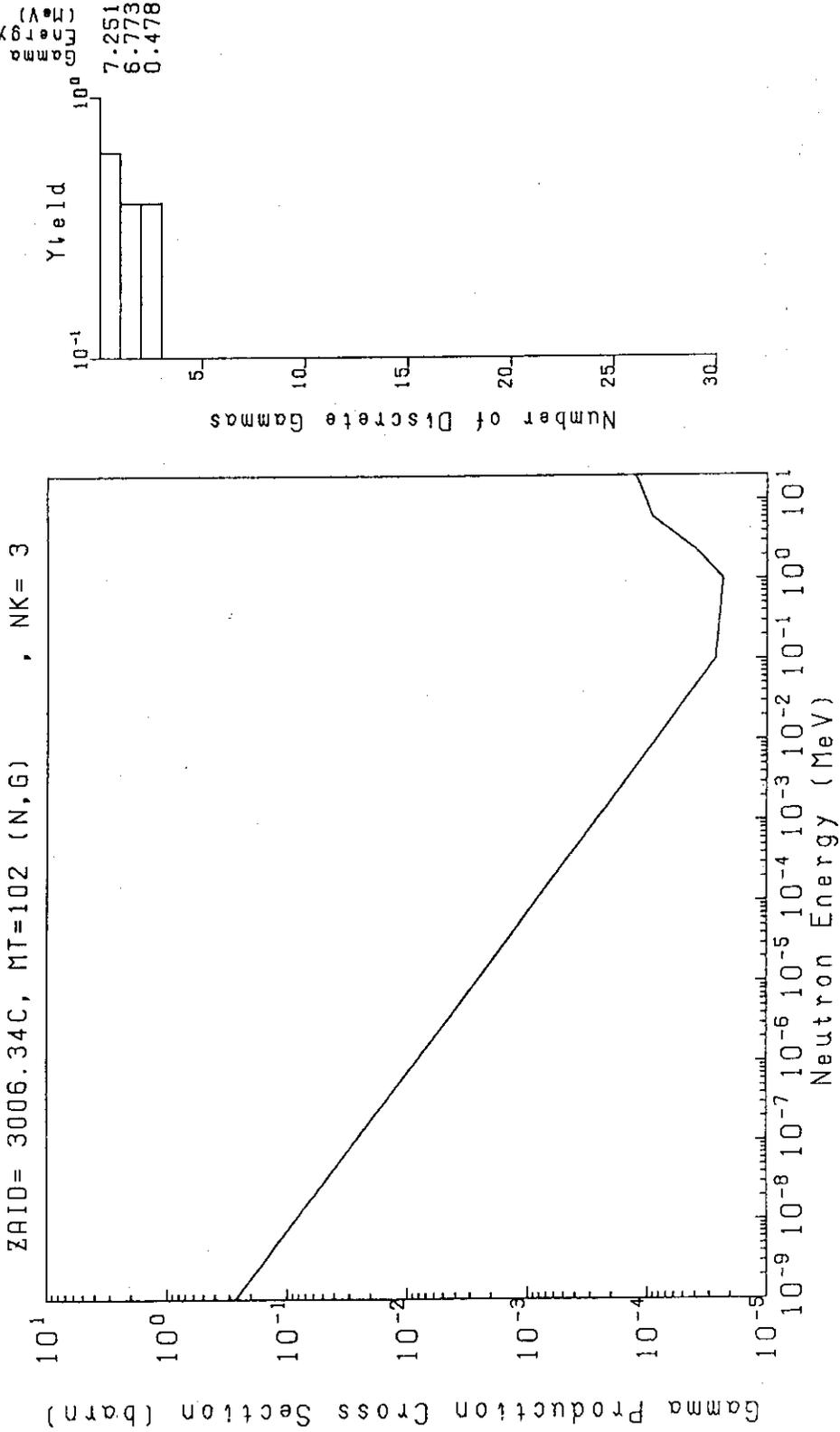
Gamma Production Multiplicities (MF=12)
 MCNP Cross Section Library (a discrete gamma energy).



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-17 1 PAGE

Fig. 5.26 Photon production multiplicities of inelastic scattering cross sections (MF=57) of Li-6 in FSXLIB-J3

Gamma Production Multiplicities (MF=12)
 MCNP Cross Section Library (a discrete gamma energy)

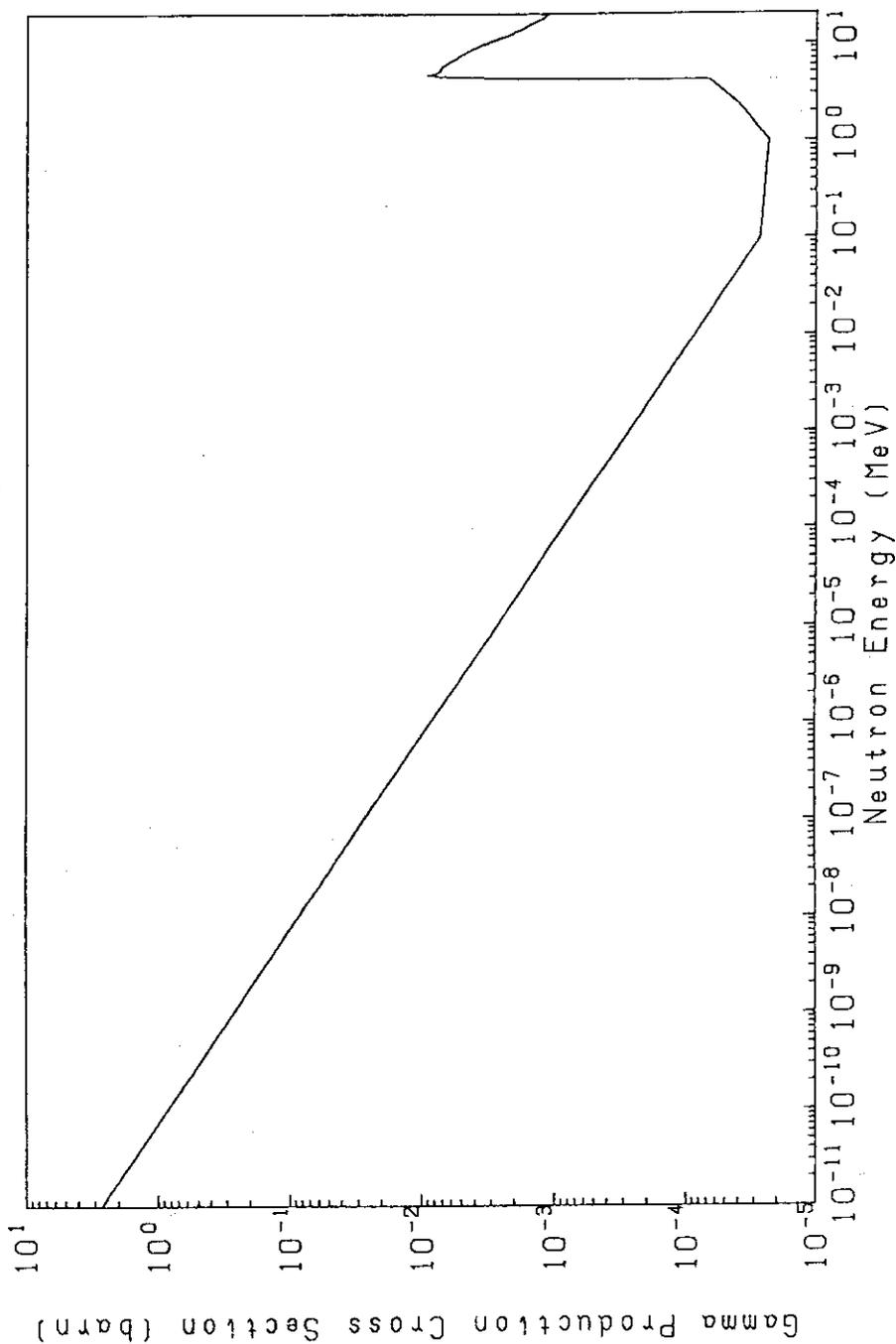


ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-17 2 PAGE

Fig. 5.27 Photon production multiplicities of radiative capture cross sections of Li-6 in FSXLIB-J3

Total Gamma Production Cross Sections
MCNP Cross Section Library

ZAID= 3006.34C

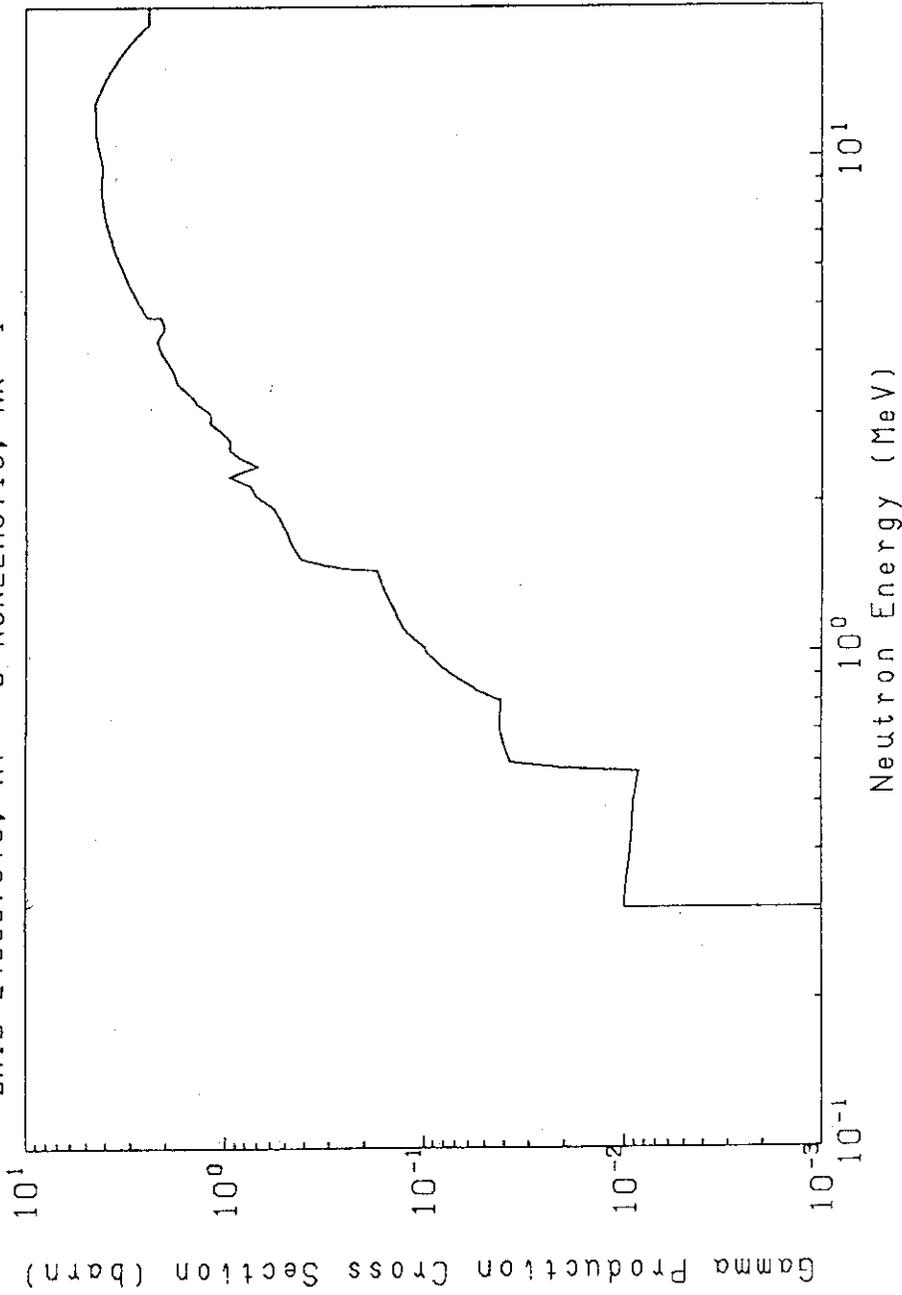


ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-17 3 PAGE

Fig. 5.28 Total photon production cross sections of Li-6 in FSXLIB-J3

Gamma Production Cross Sections (MF=13)
MCNP Cross Section Library (a tabulated function)

ZAID=24000.34C, MT= 3 NONELASTIC, NK= 1

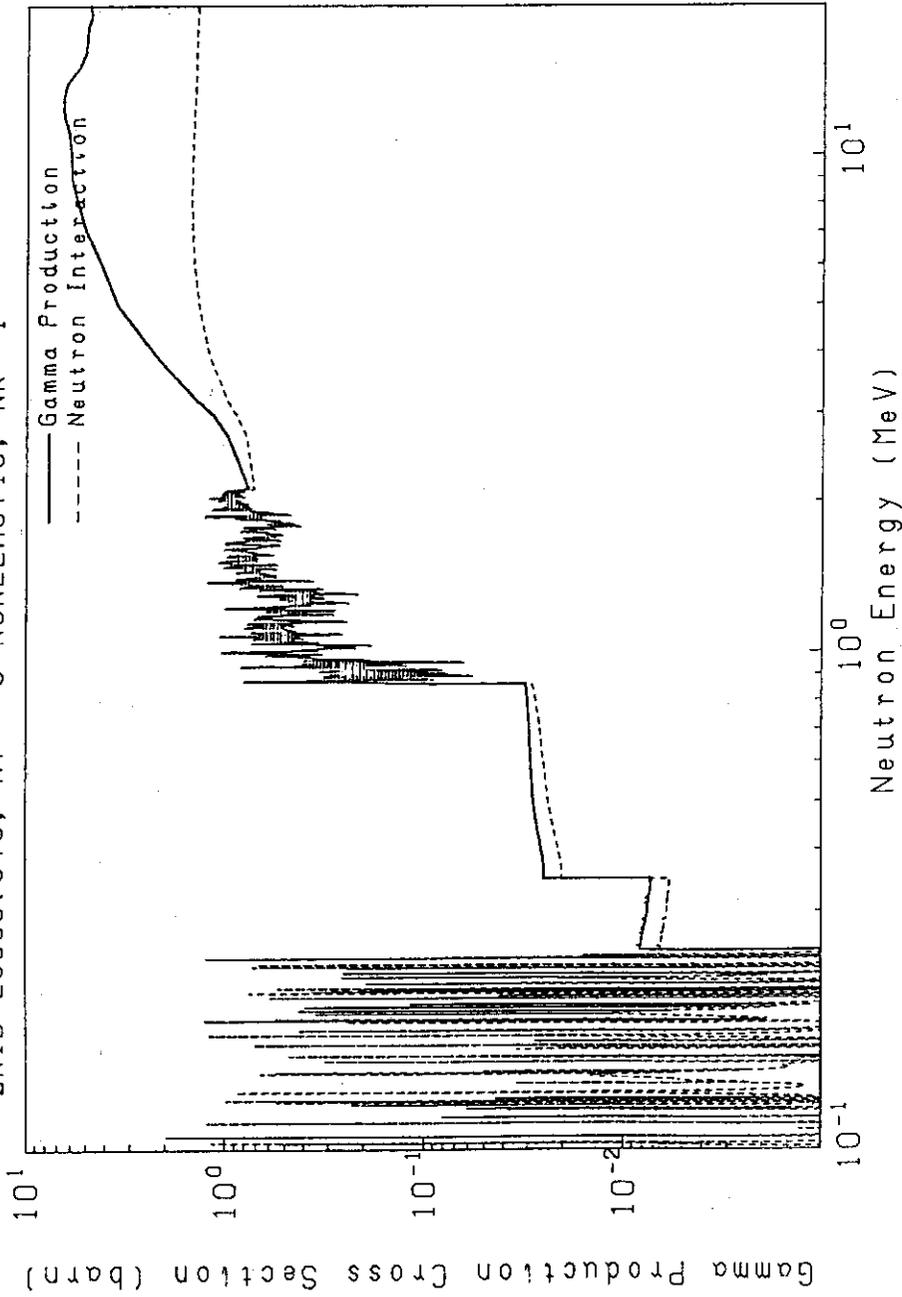


ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-17 3 PAGE

Fig. 5.29 Photon production cross sections of nonelastic scattering cross section of Cr-nat. in FSXLIB-J3

Gamma Production Multiplicities (MF=12)
MCNP Cross Section Library (a tabulated function)

Z=26, A=60, MT=3 NONELASTIC, NK=1



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-17 1 PAGE

Fig. 5.30 Photon production cross sections of nonelastic scattering cross section of Fe-nat. in FSXLIB-J3

Gamma Production Multiplicities (MF=12)
MCNP Cross Section Library (a tabulated function)

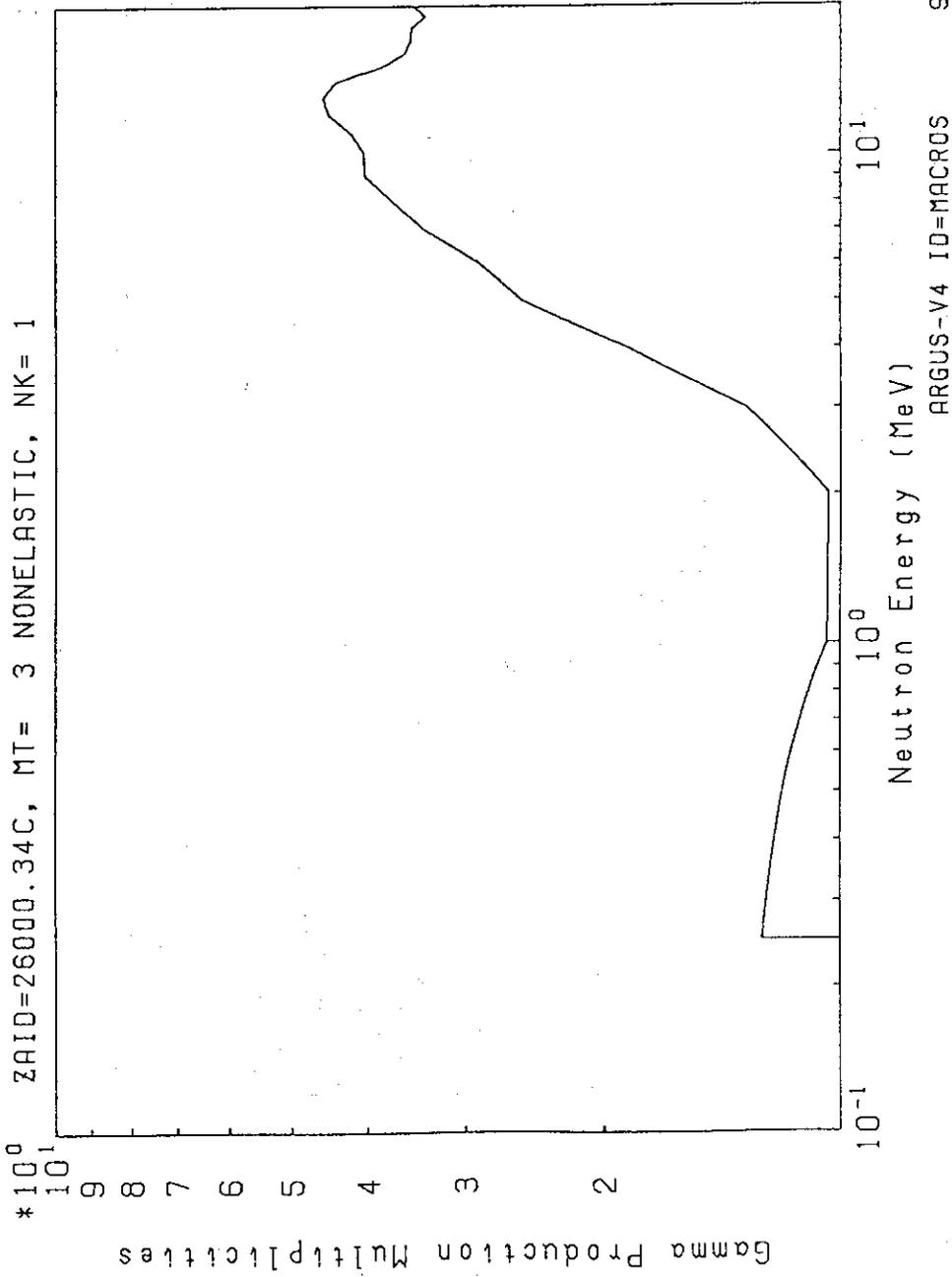
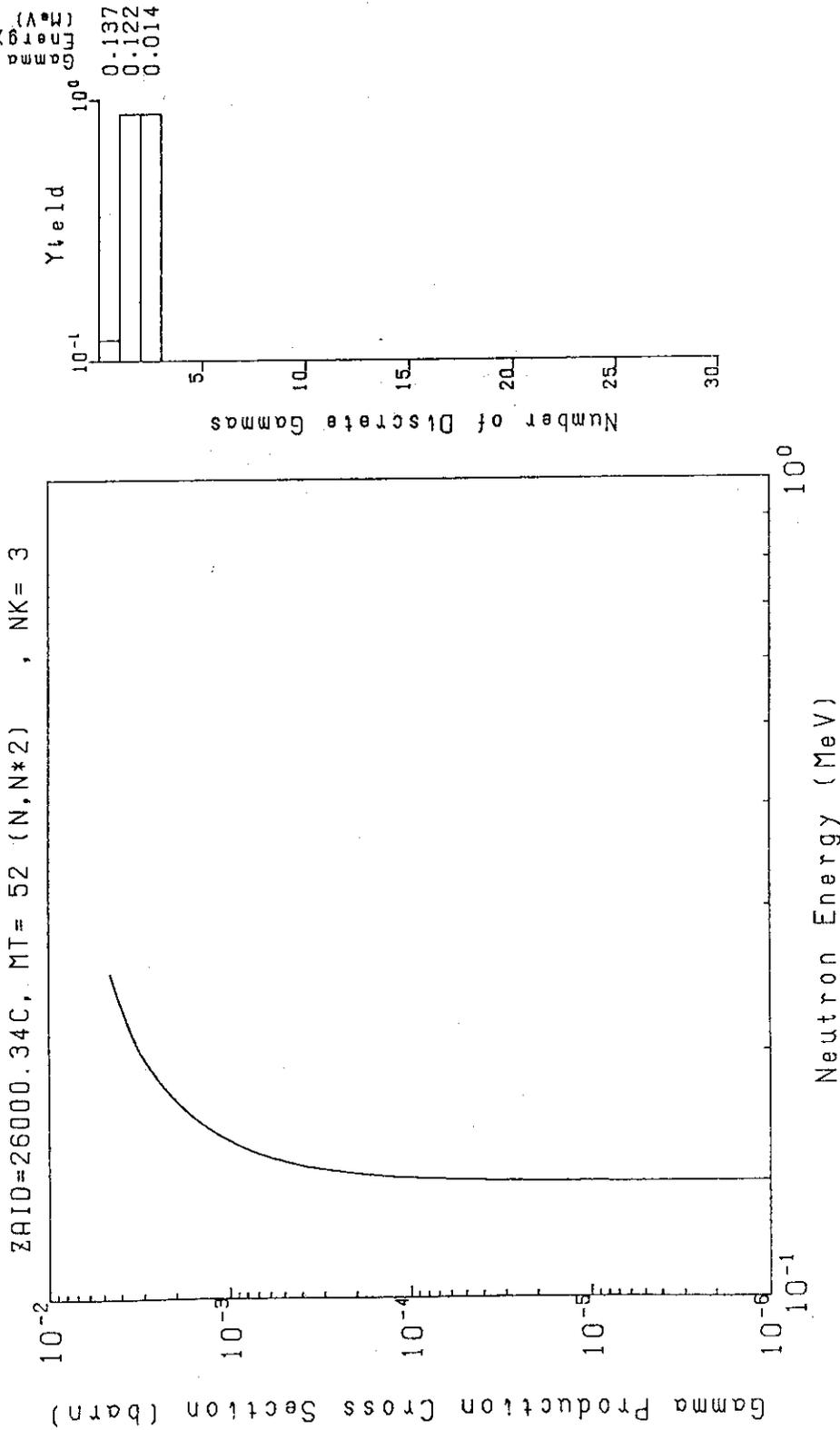


Fig. 5.31 Photon production multiplicities of nonelastic scattering cross section of Fe-nat. in FSXLIB-J3

Gamma Production Multiplicities (MF=12)
 MCNP Cross Section Library (a discrete gamma energy)

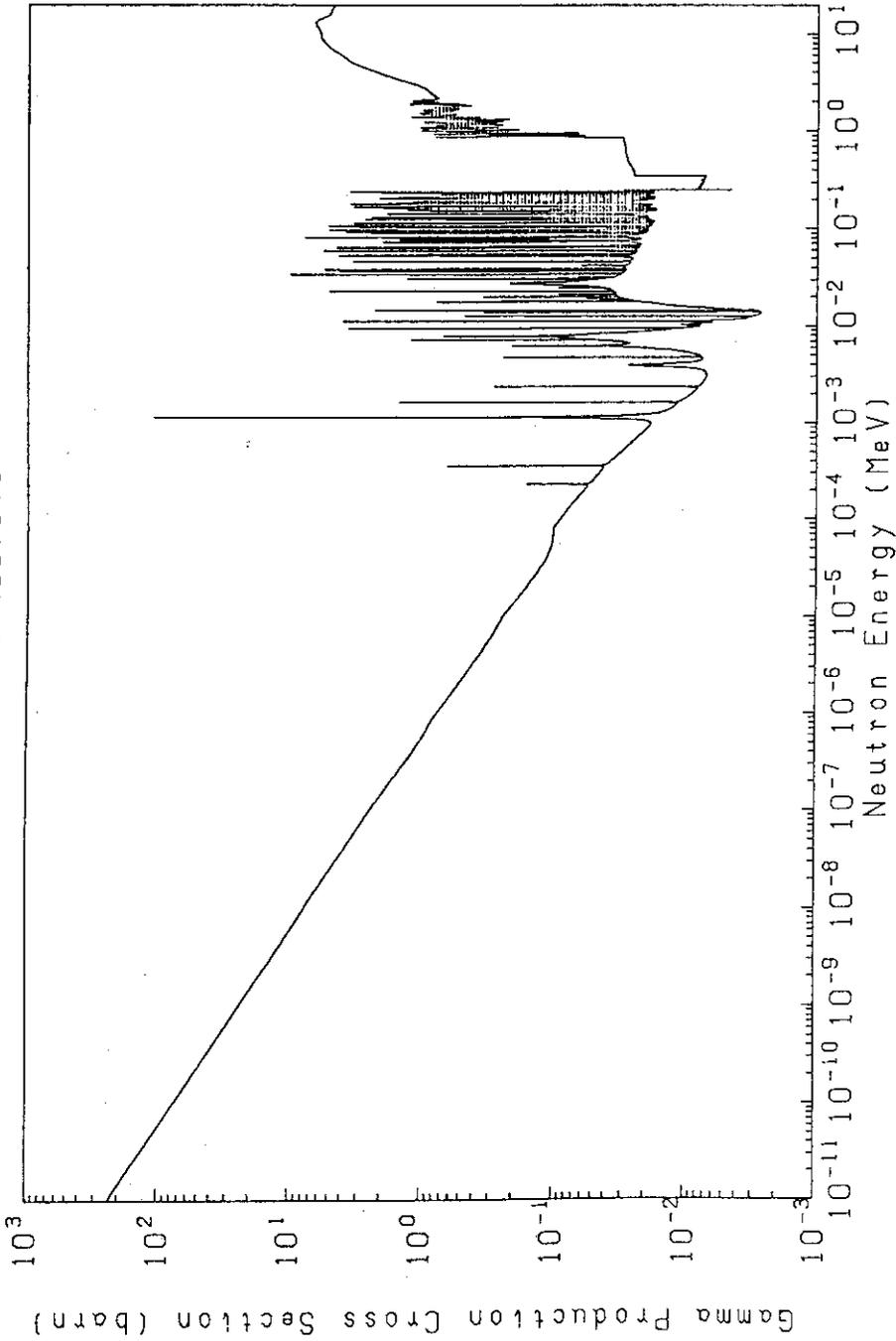


ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-17 4 PAGE

Fig. 5.32 Photon production multiplicities of inelastic scattering cross sections (MT=52) of Fe-nat. in FSXLIB-J3

Total Gamma Production Cross Sections
MCNP Cross Section Library

ZAIID=260000.34C

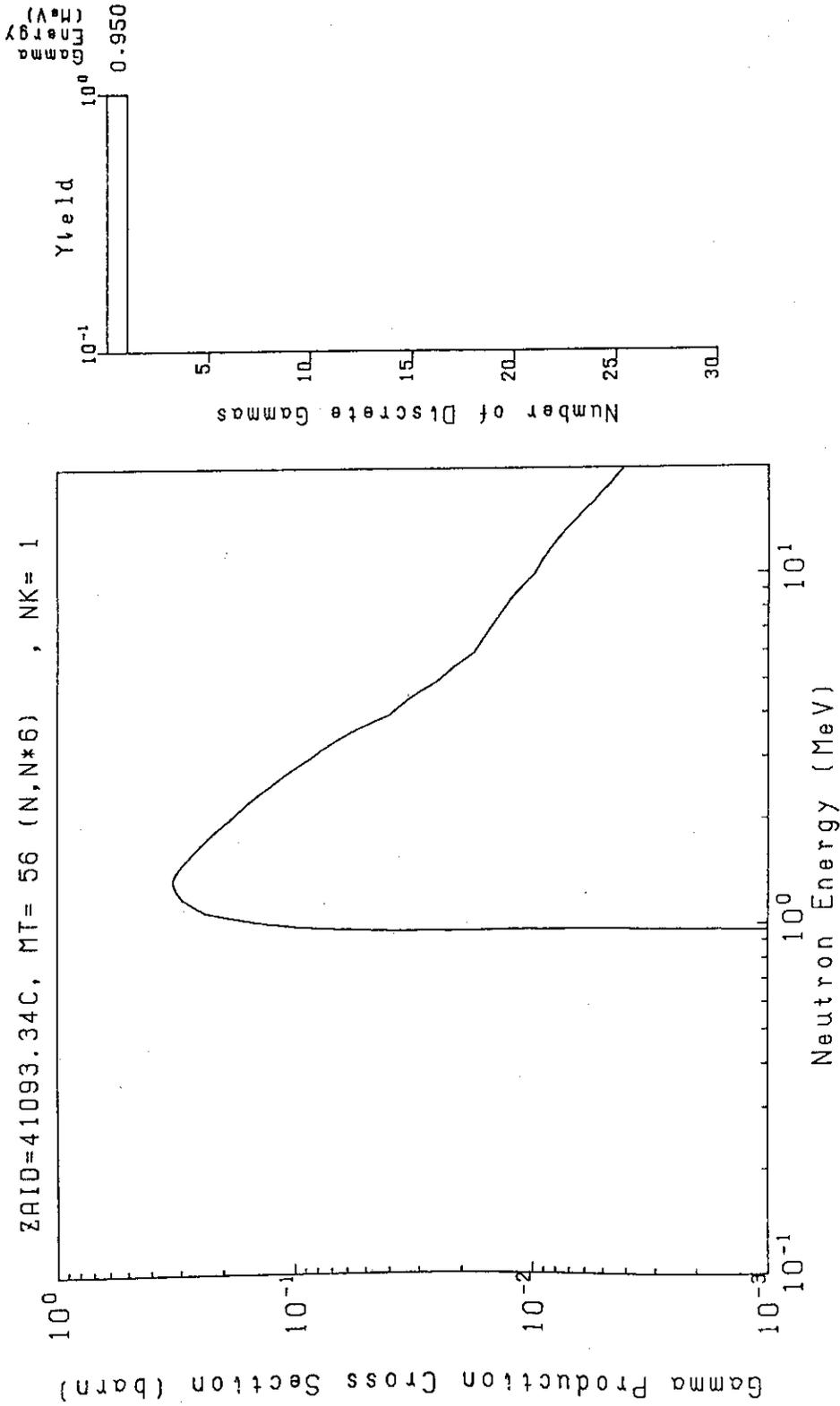


ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-17 7 PAGE

Fig. 5.33 Total photon production cross sections of Fe-nat. in FSXLIB-J3

Gamma Production Multiplicities (MF=12)
 MCNP Cross Section Library (a discrete gamma energy)

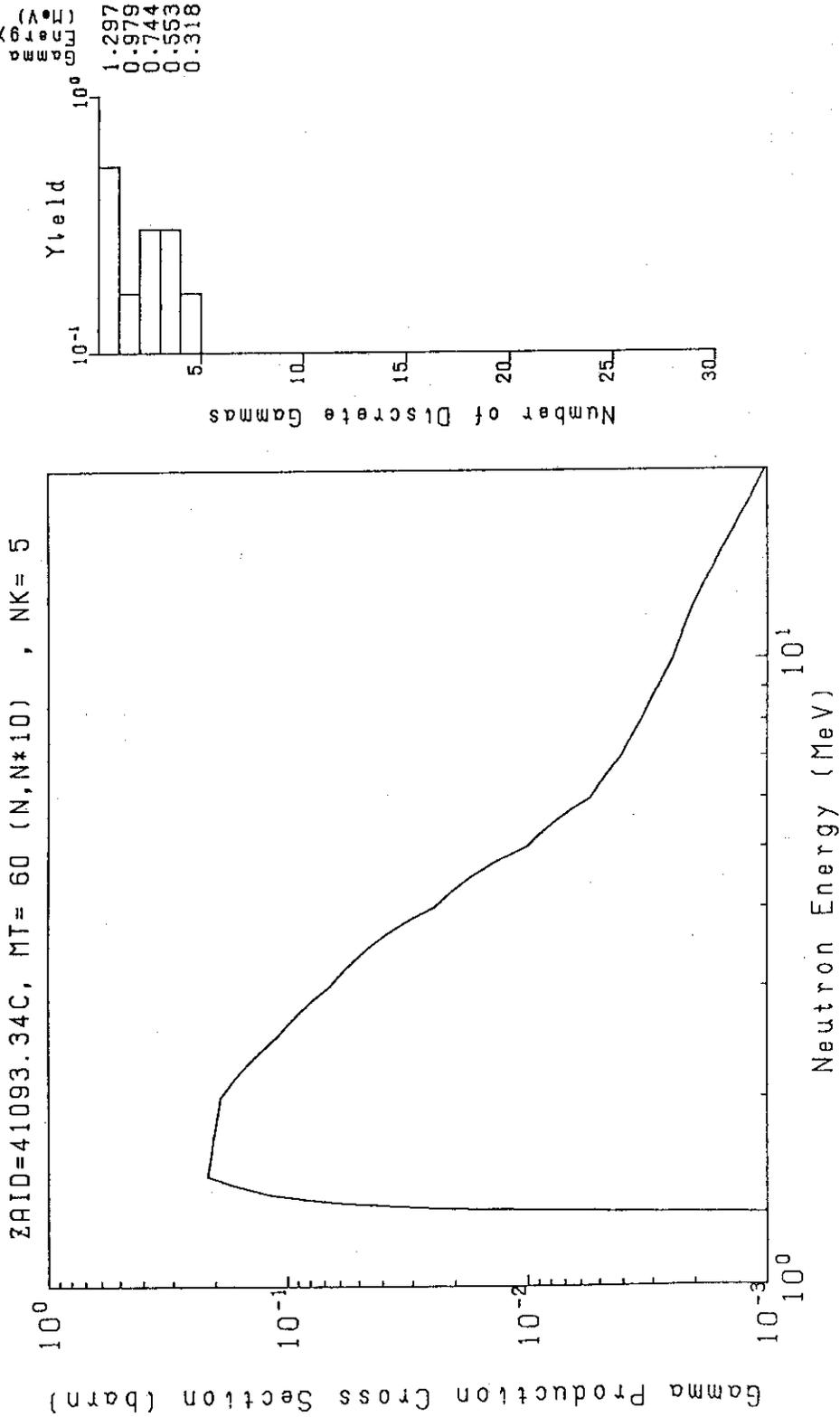
ZAI0=41093.34C, MT= 56 (N,N*6) , NK= 1



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-17 13 PAGE

Fig. 5.34 Photon production multiplicities of inelastic scattering cross sections (MT=56) of Nb-93 in FSXLIB-J3

Gamma Production Multiplicities (MF=12)
 MCNP Cross Section Library (a discrete gamma energy)

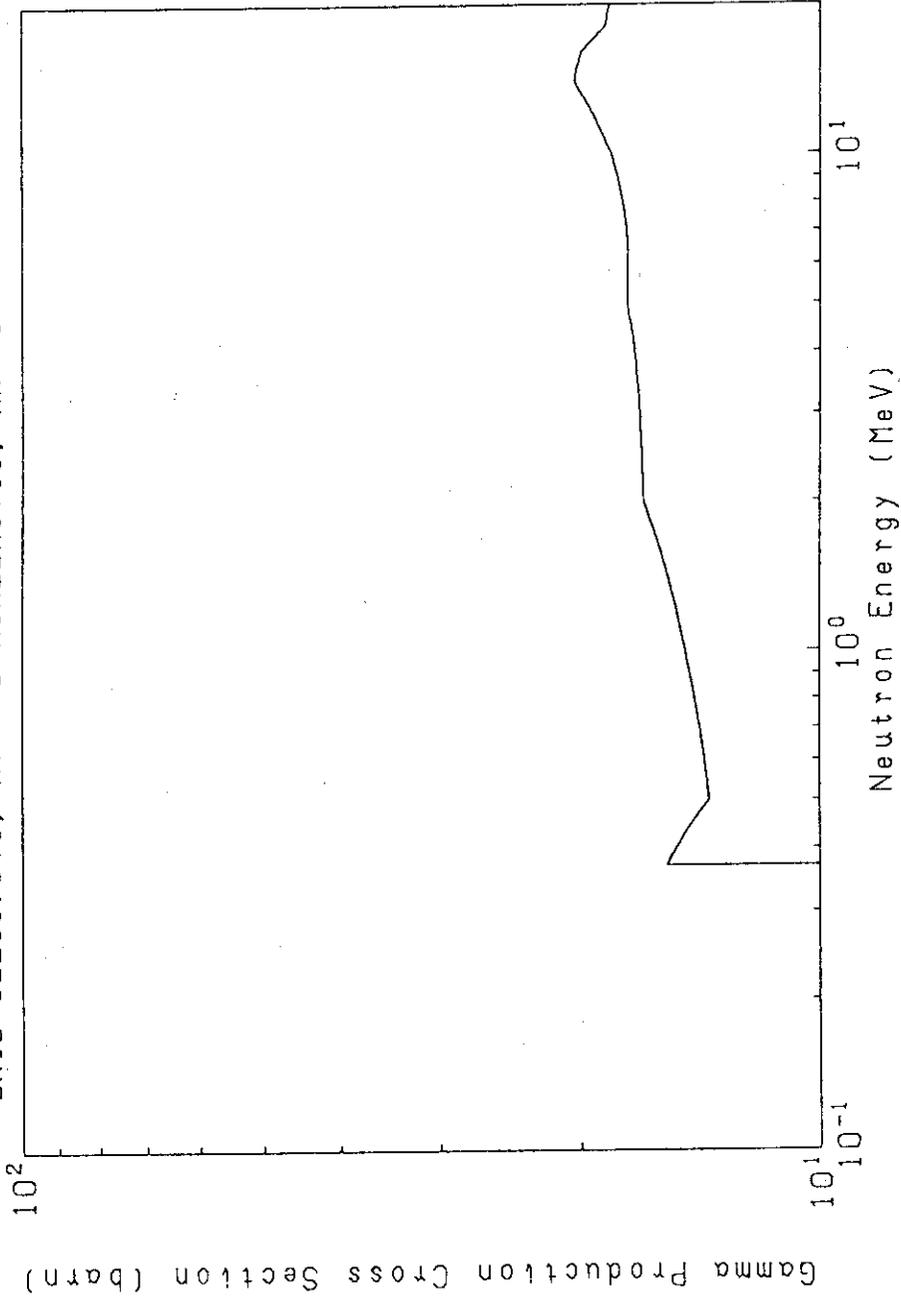


ARGUS-V4 IO=MACROS 91-09-17 17 PAGE

Fig. 5.35 Photon production multiplicities of inelastic scattering cross sections (MF=60) of Nb-93 in FSXLIB-J3

Gamma Production Cross Sections (MF=13)
MCNP Cross Section Library (a tabulated function)

ZAID=92235.34C, MT= 3 NONELASTIC, NK= 1



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-17 24 PAGE

Fig. 5.36 Photon production cross sections of nonelastic scattering cross section of U-235 in FSXLIB-J3

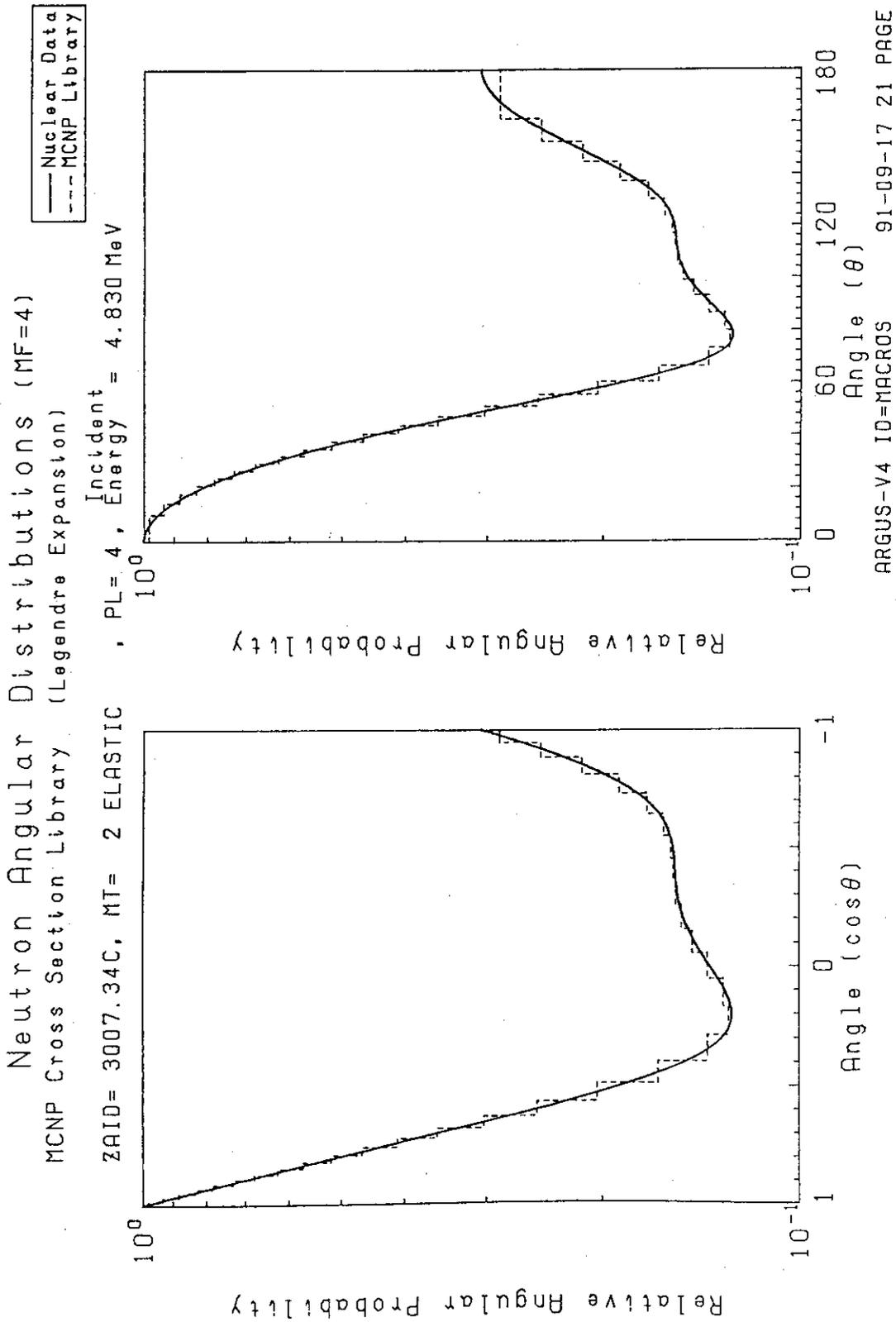


Fig. 5.37 Comparison of angular distributions of elastic scattering to 4.83 MeV incident neutron for Li-7 between FSXLIB-J3 and JENDL-3

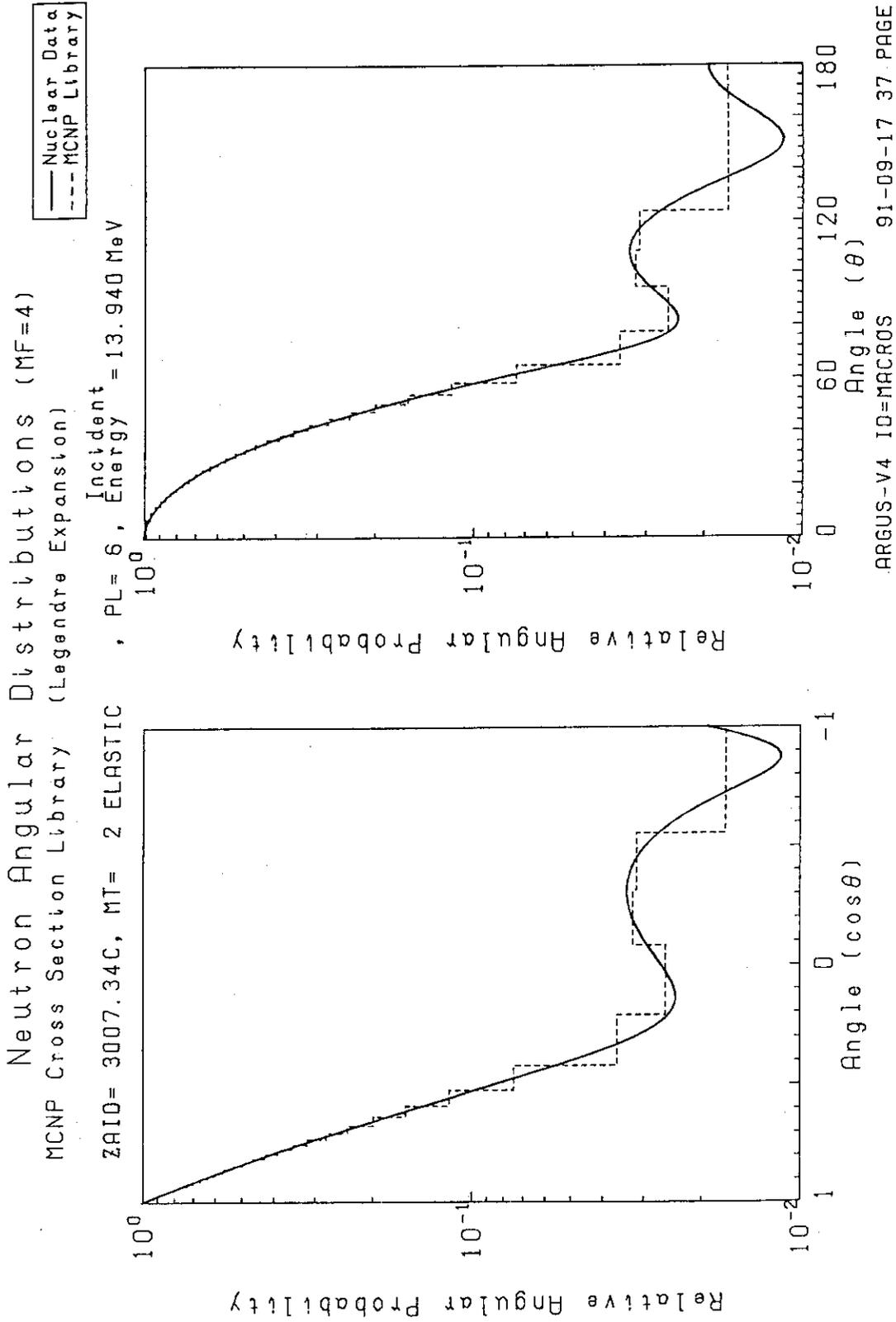


Fig. 5.38 Comparison of angular distributions of elastic scattering to 13.94 MeV incident neutron for Li-7 between FSXLIB-J3 and JENDL-3

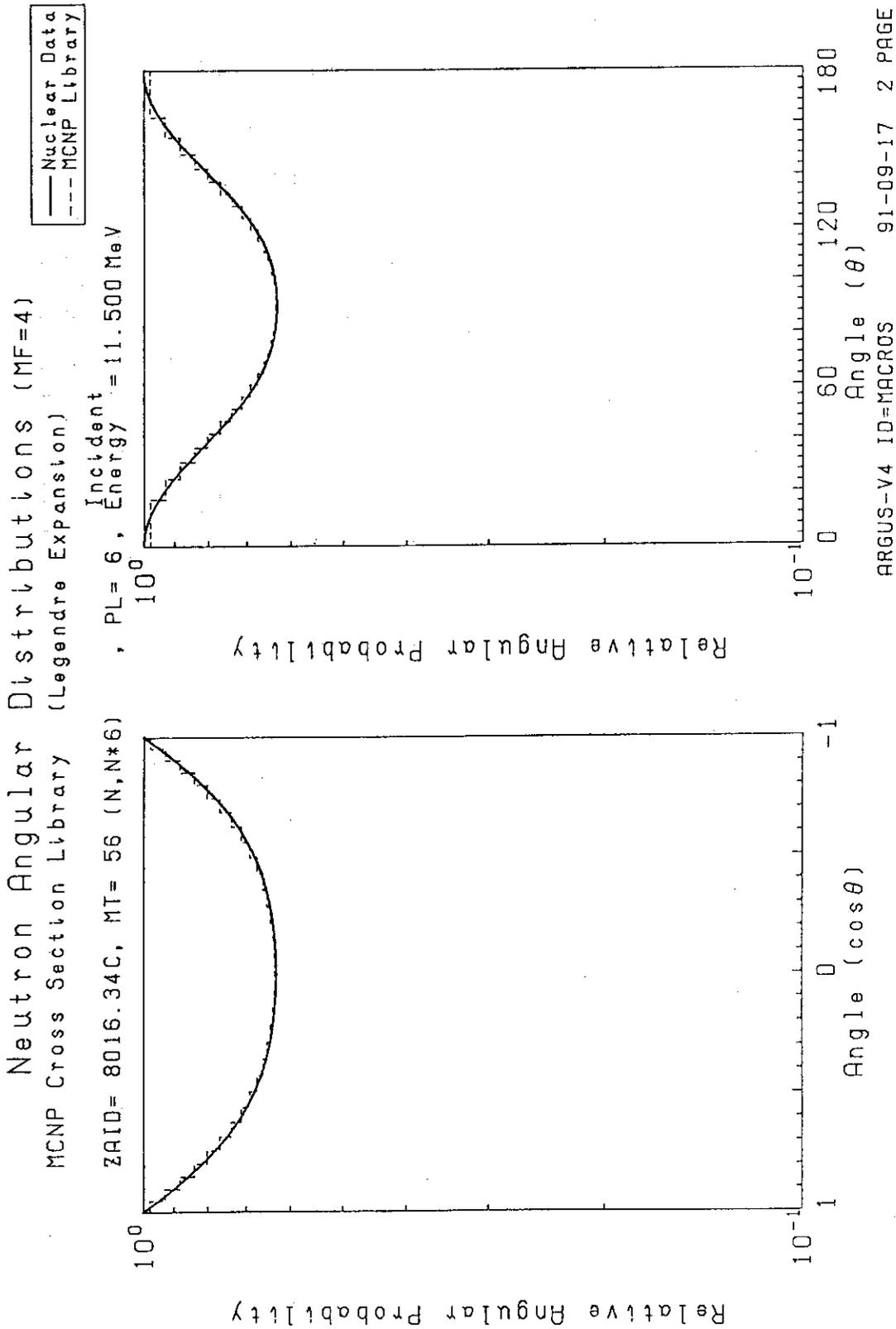


Fig. 5.39 Comparison of angular distributions of inelastic scattering (MT=56) to 11.5 MeV incident neutron for 0-16 between FSXLIB-J3 and JENDL-3

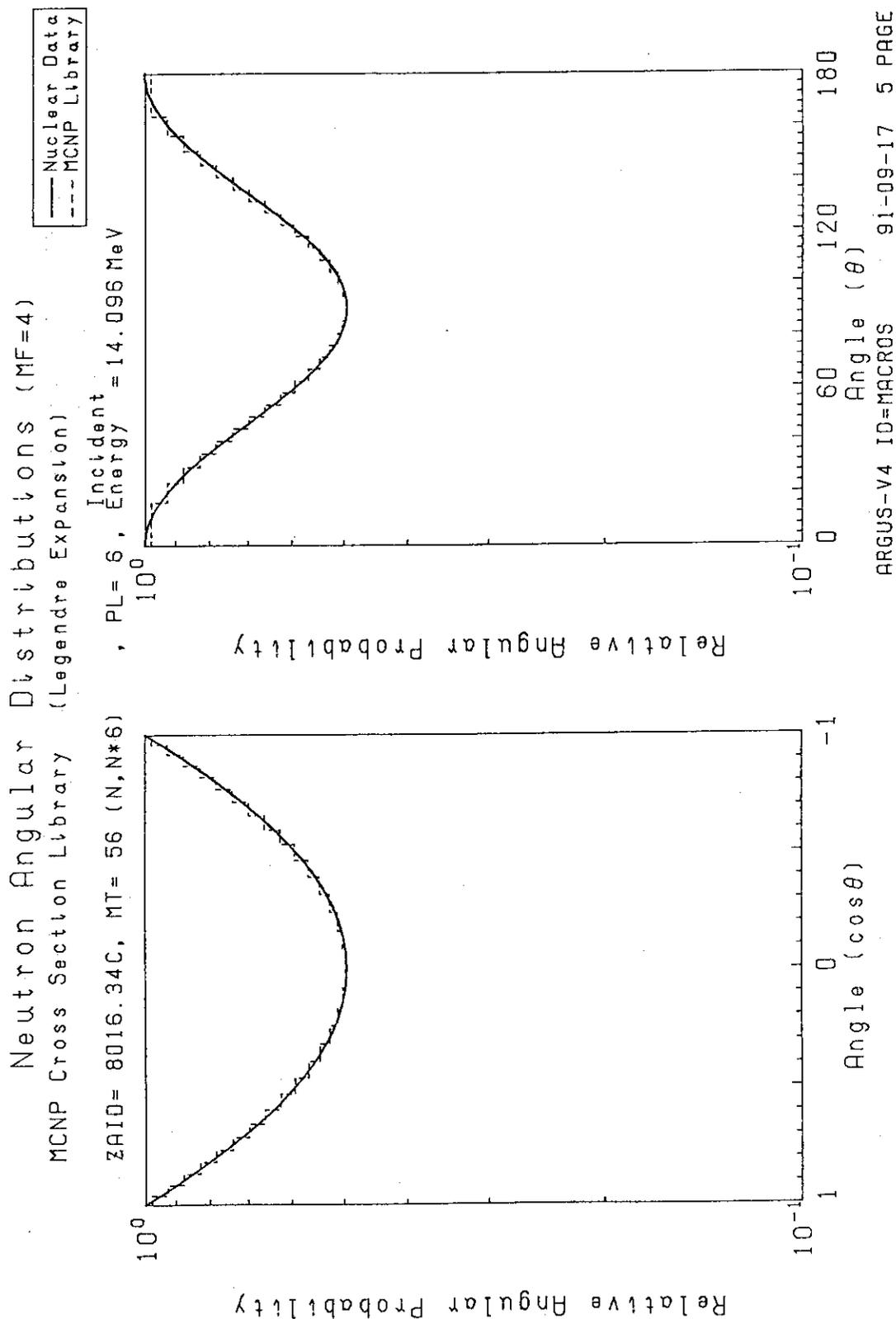


Fig. 5.40 Comparison of angular distributions of inelastic scattering (MT=56) to 14.096 MeV incident neutron for O-16 between FSXLIB-J3 and JENDL-3

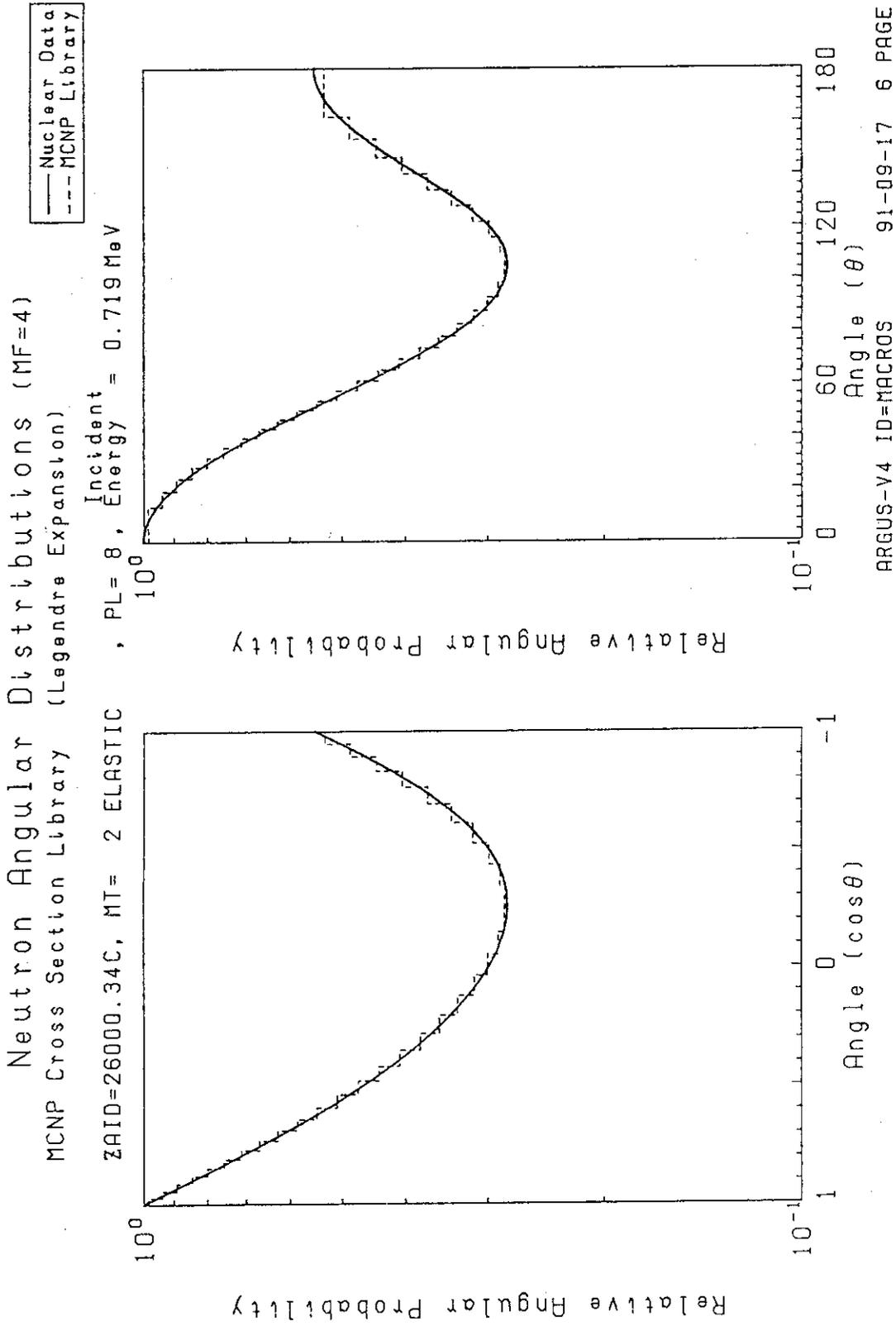


Fig. 5.41 Comparison of angular distributions of elastic scattering to 0.719 MeV incident neutron for Fe-nat. between FSXLIB-J3 and JENDL-3

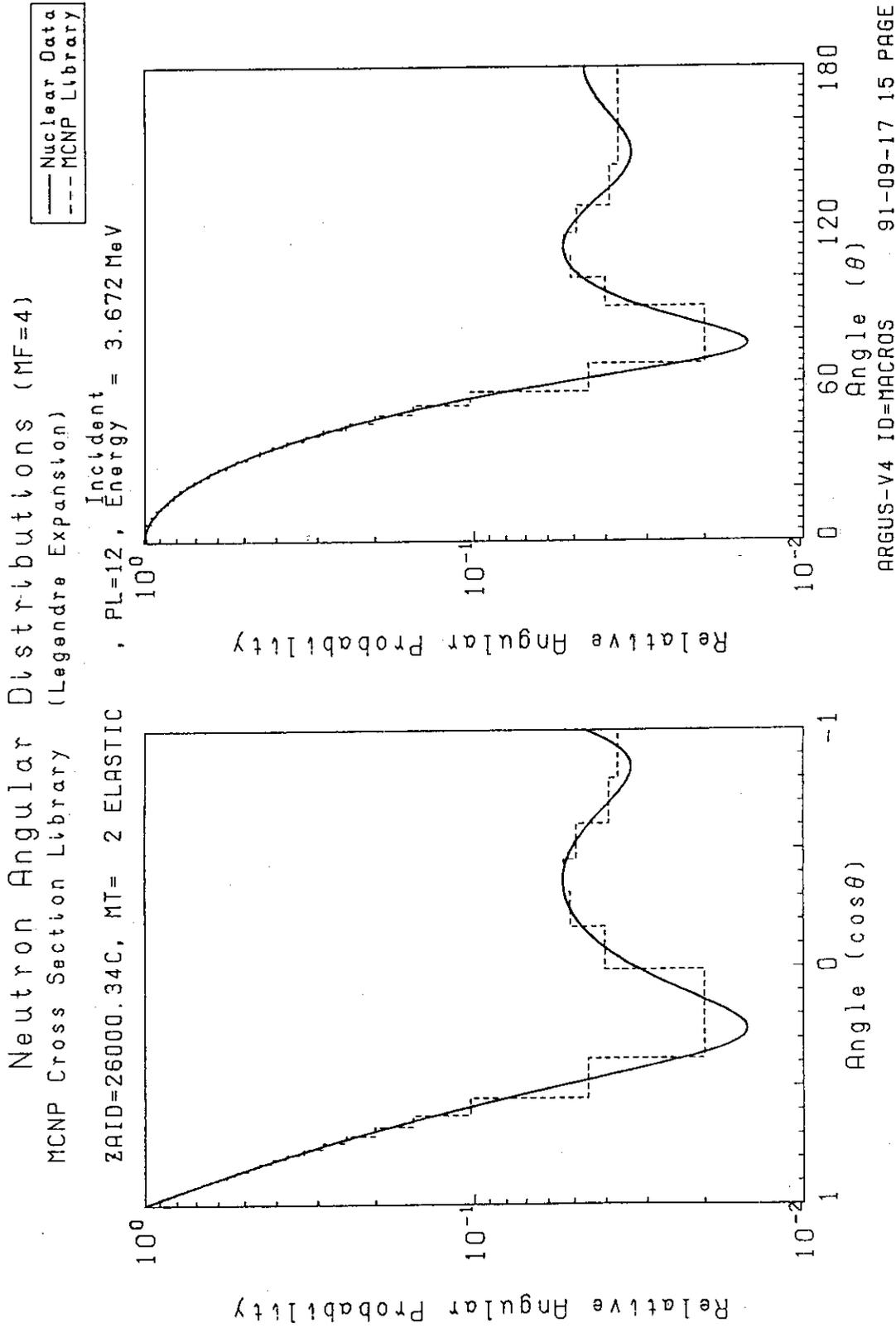


Fig. 5.42 Comparison of angular distributions of elastic scattering to 3.672 MeV incident neutron for Fe-nat. between FSXLIB-J3 and JENDL-3

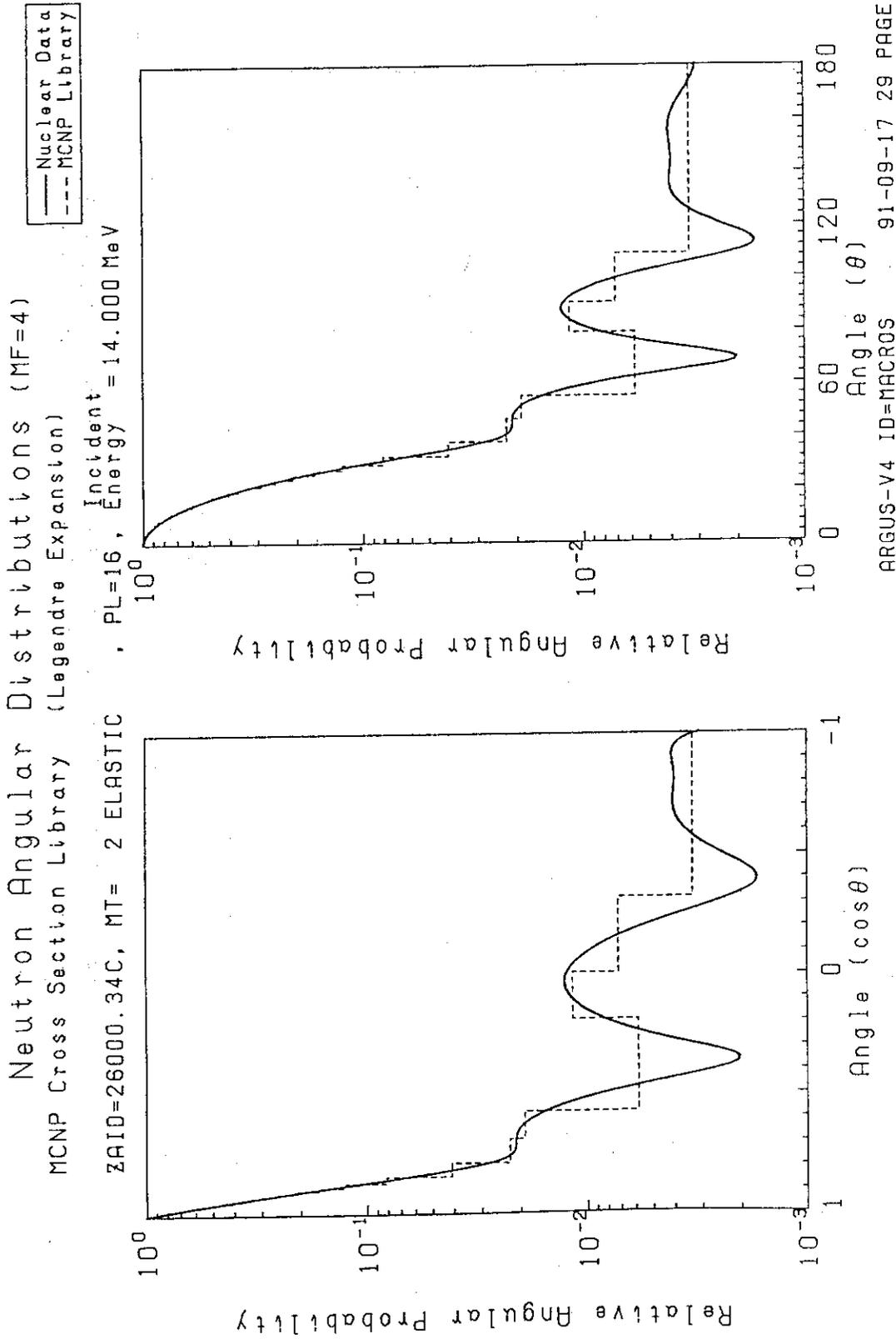


Fig. 5.43 Comparison of angular distributions of elastic scattering to 14.0 Mev incident neutron for Fe-nat. between FSXLIB-J3 and JENDL-3

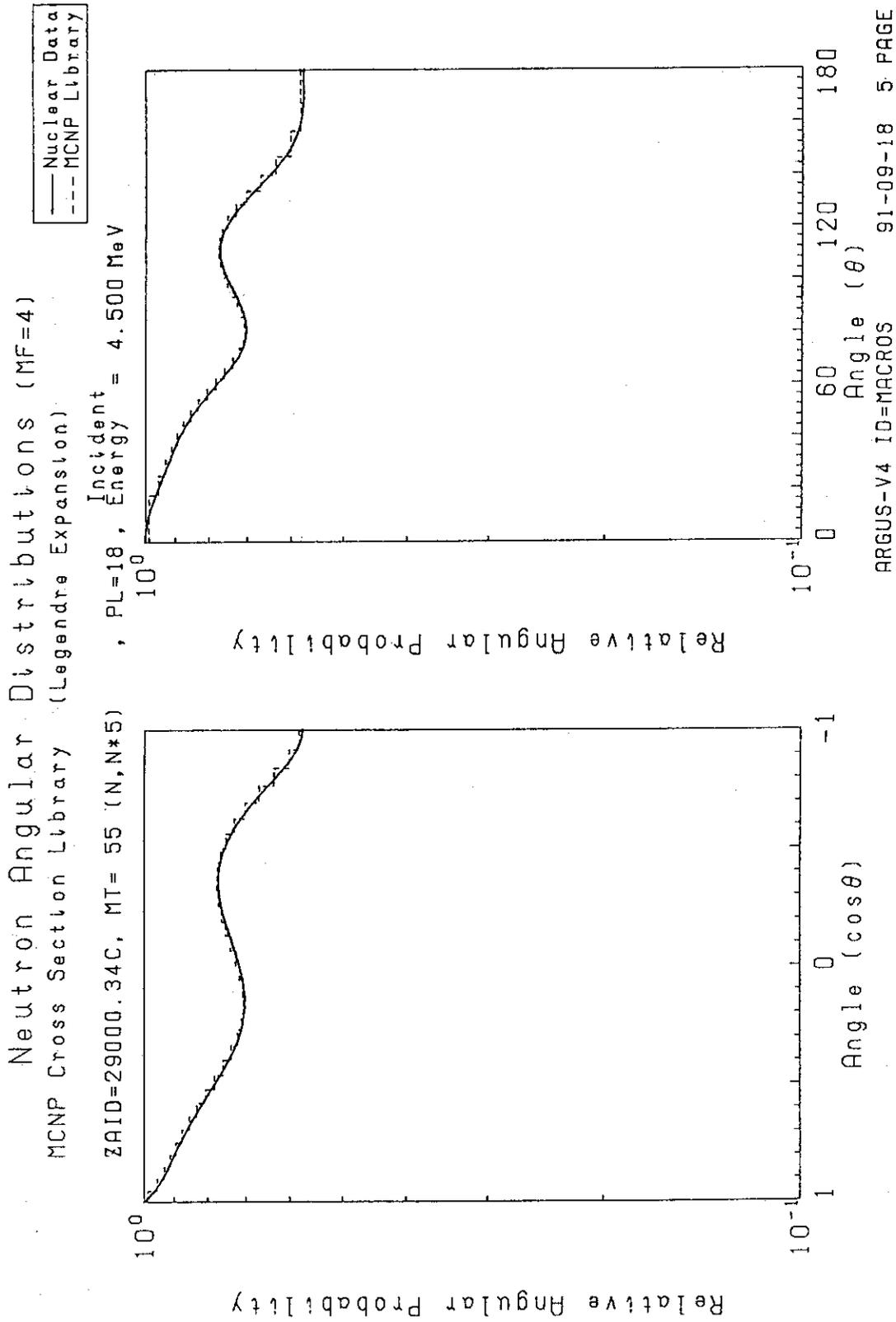


Fig. 5.44 Comparison of angular distributions of inelastic scattering (MT=55) to 4.5 MeV incident neutron for Cu-nat. between FSXLIB-J3 and JENDL-3

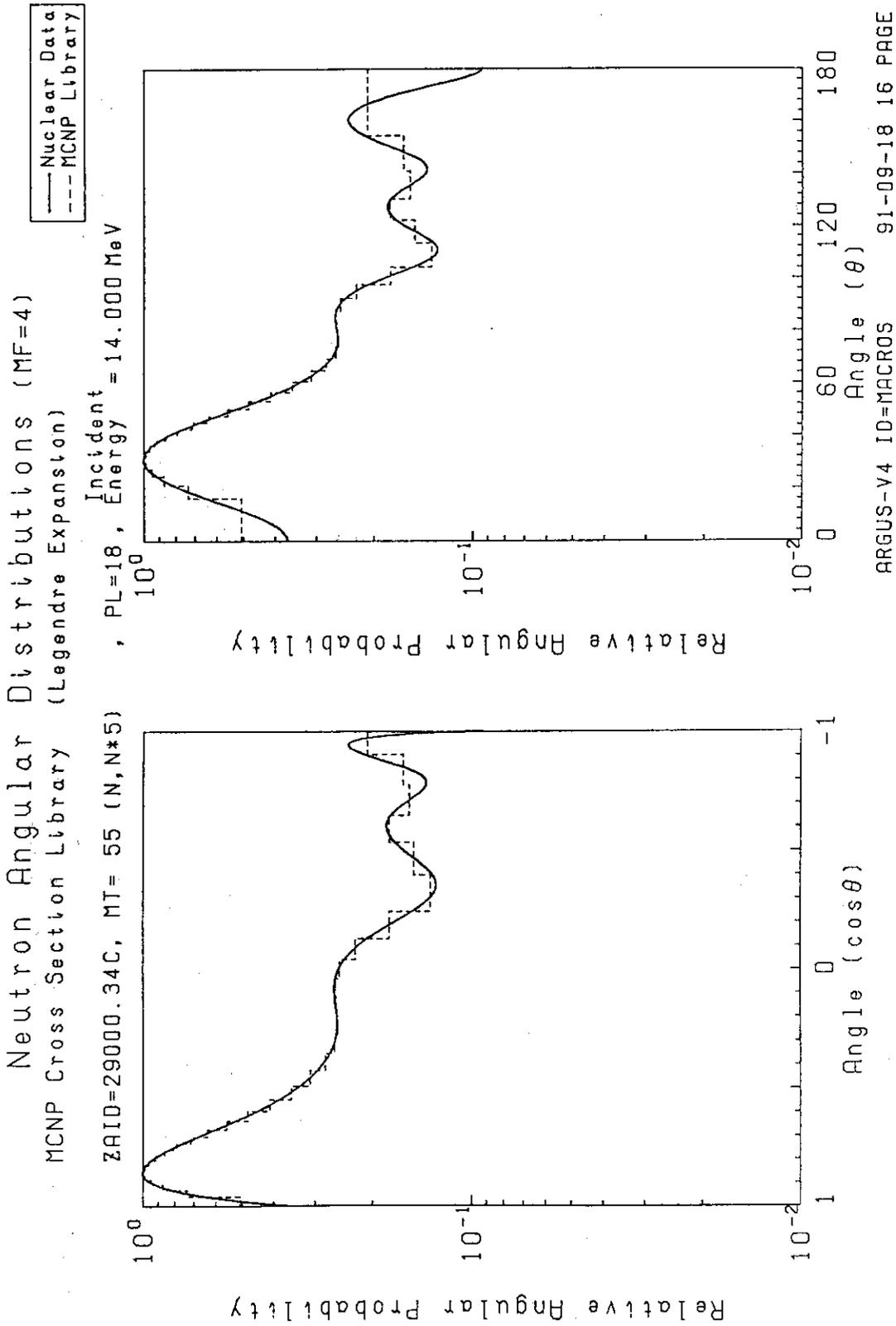


Fig. 5.45 Comparison of angular distributions of inelastic scattering (MT=55) to 14.0 MeV incident neutron for Cu-nat. between FSXLIB-J3 and JENDL-3

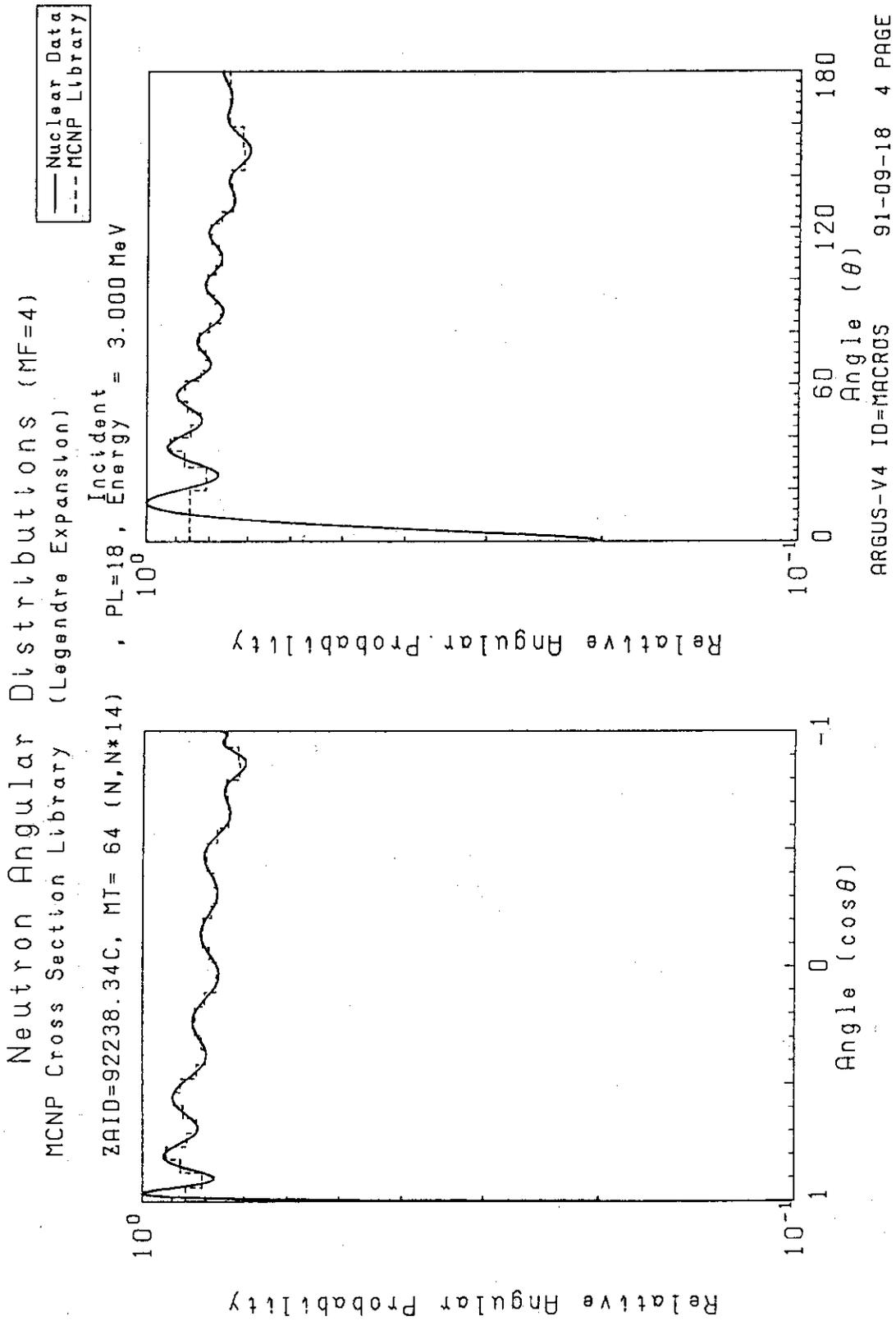


Fig. 5.46 Comparison of angular distributions of inelastic scattering (MT=64) to 3.0 MeV incident neutron for U-238 between FSXLIB-J3 and JENDL-3

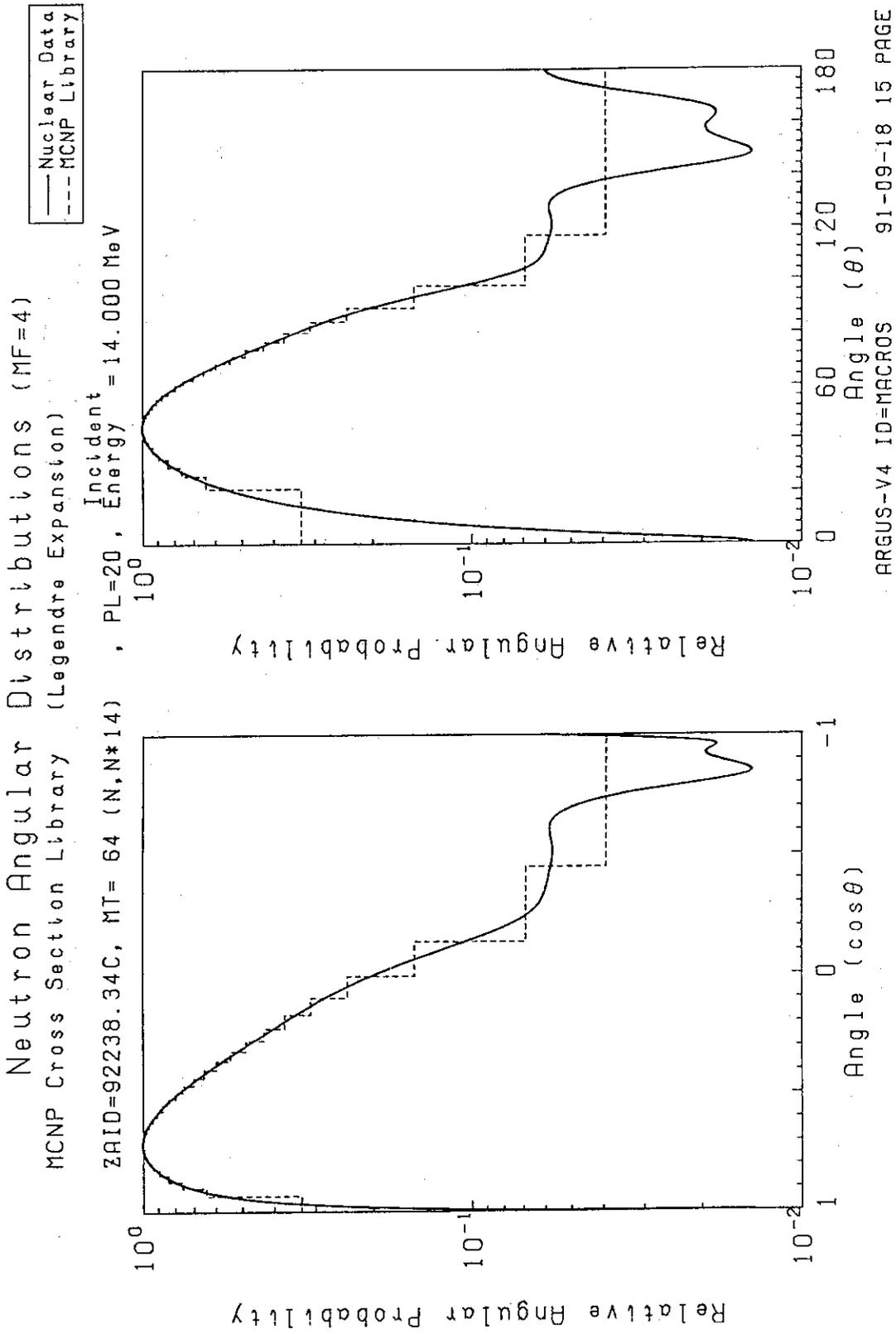


Fig. 5.47 Comparison of angular distributions of inelastic scattering (MT=64) to 14.0 MeV incident neutron for U-238 between FSXLIB-J3 and JENDL-3

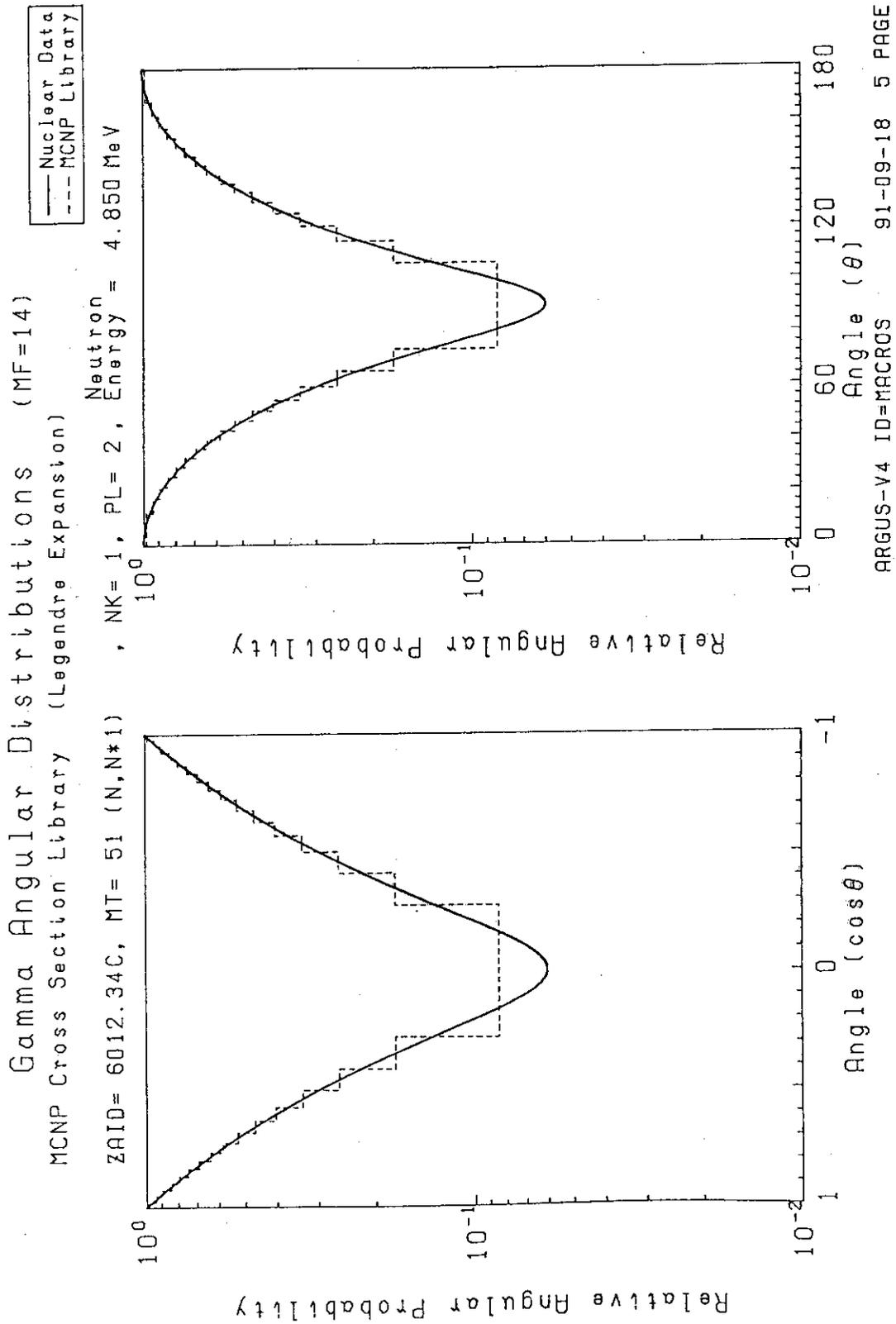


Fig. 5.48 Comparison of photon angular distributions of inelastic scattering (MT=51) to 4.85 Mev incident neutron for C-12 between FSXLIB-j3 and JENDL-3

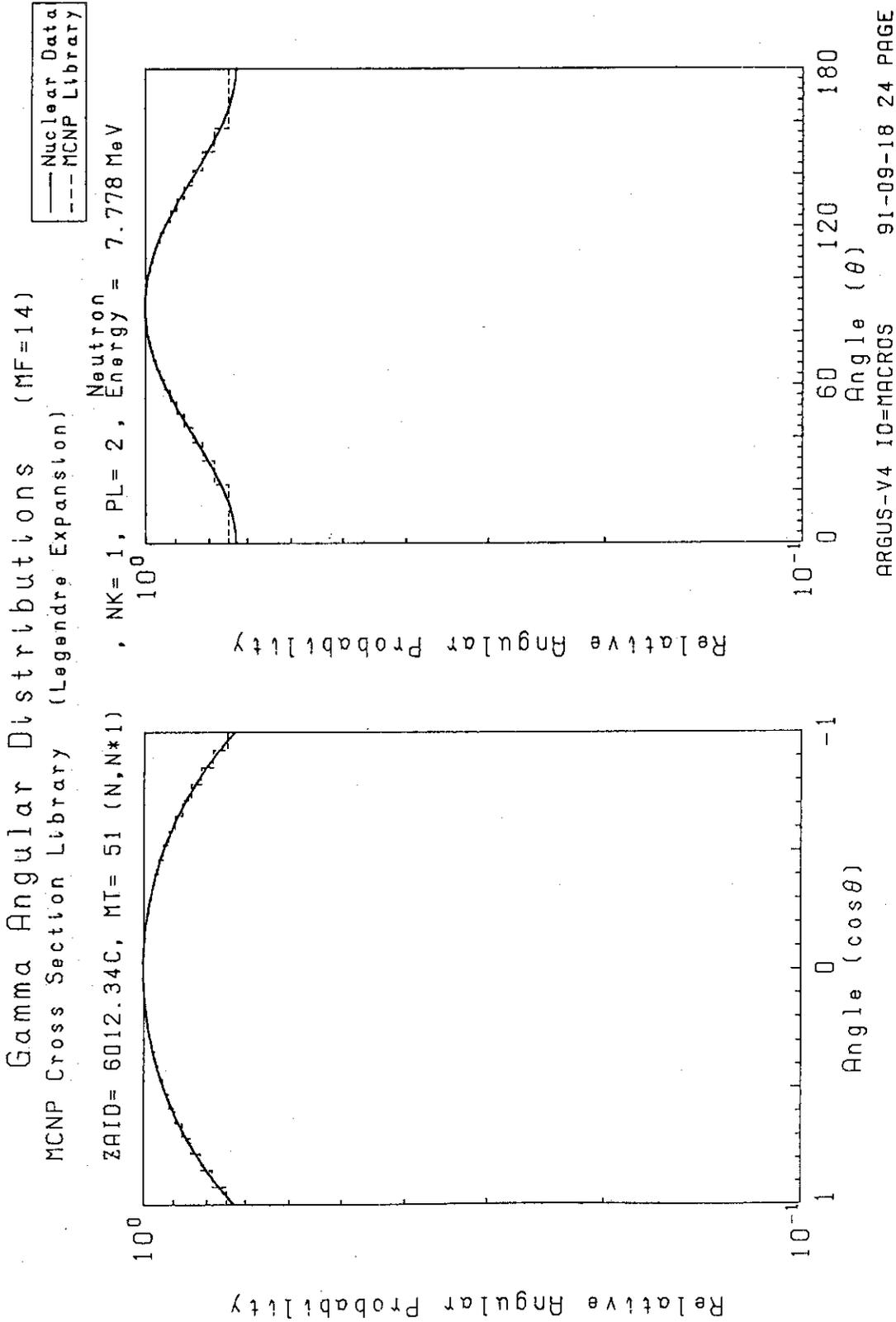


Fig. 5.49 Comparison of photon angular distributions of inelastic scattering (MF=51) to 7.778 MeV incident neutron for C-12 between FSXLIB-J3 and JENDL-3

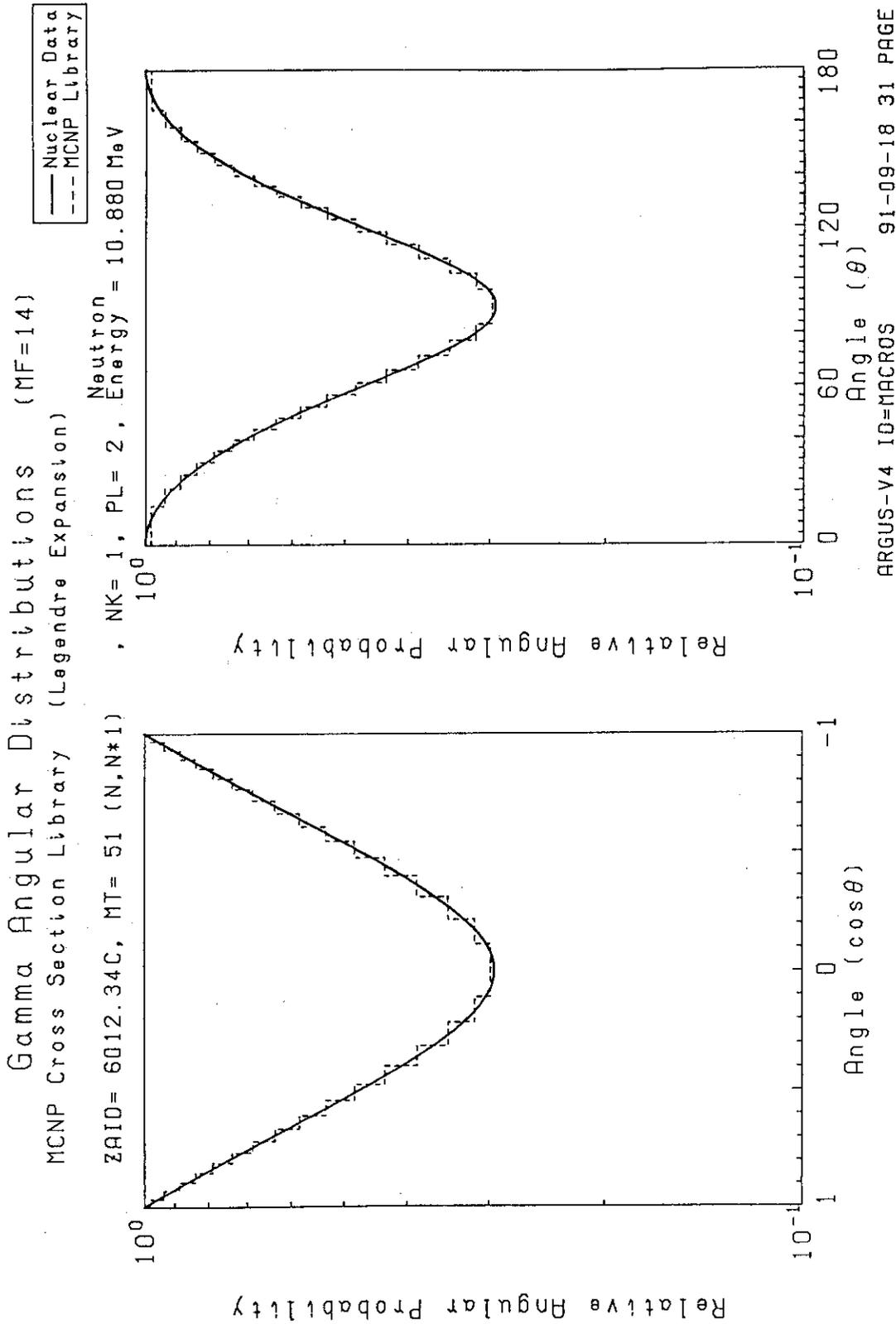


Fig. 5.50 Comparison of photon angular distributions of inelastic scattering (MT=51) to 10.88 Mev incident neutron for C-12 between FSXLIB-J3 and JENDL-3

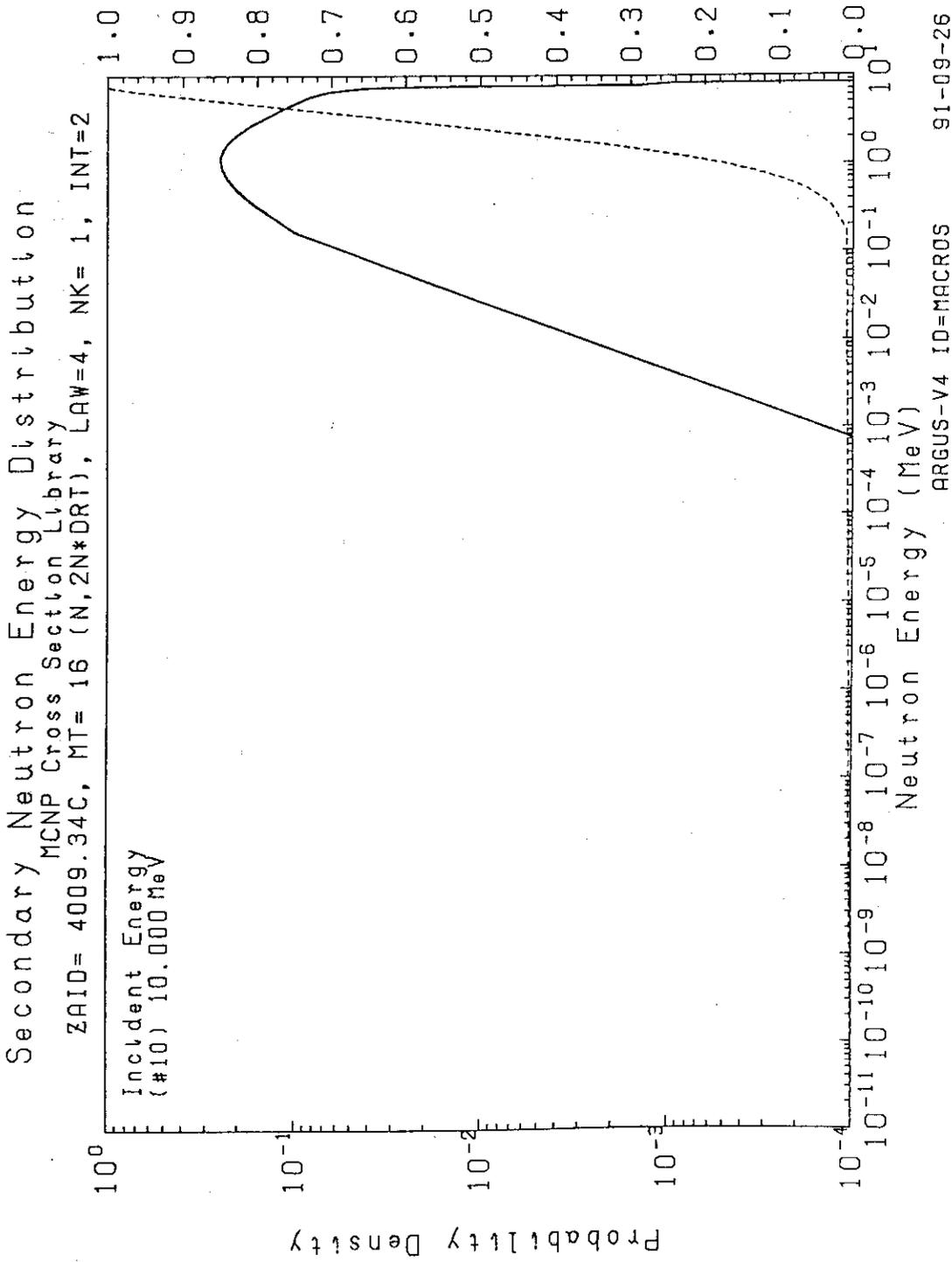


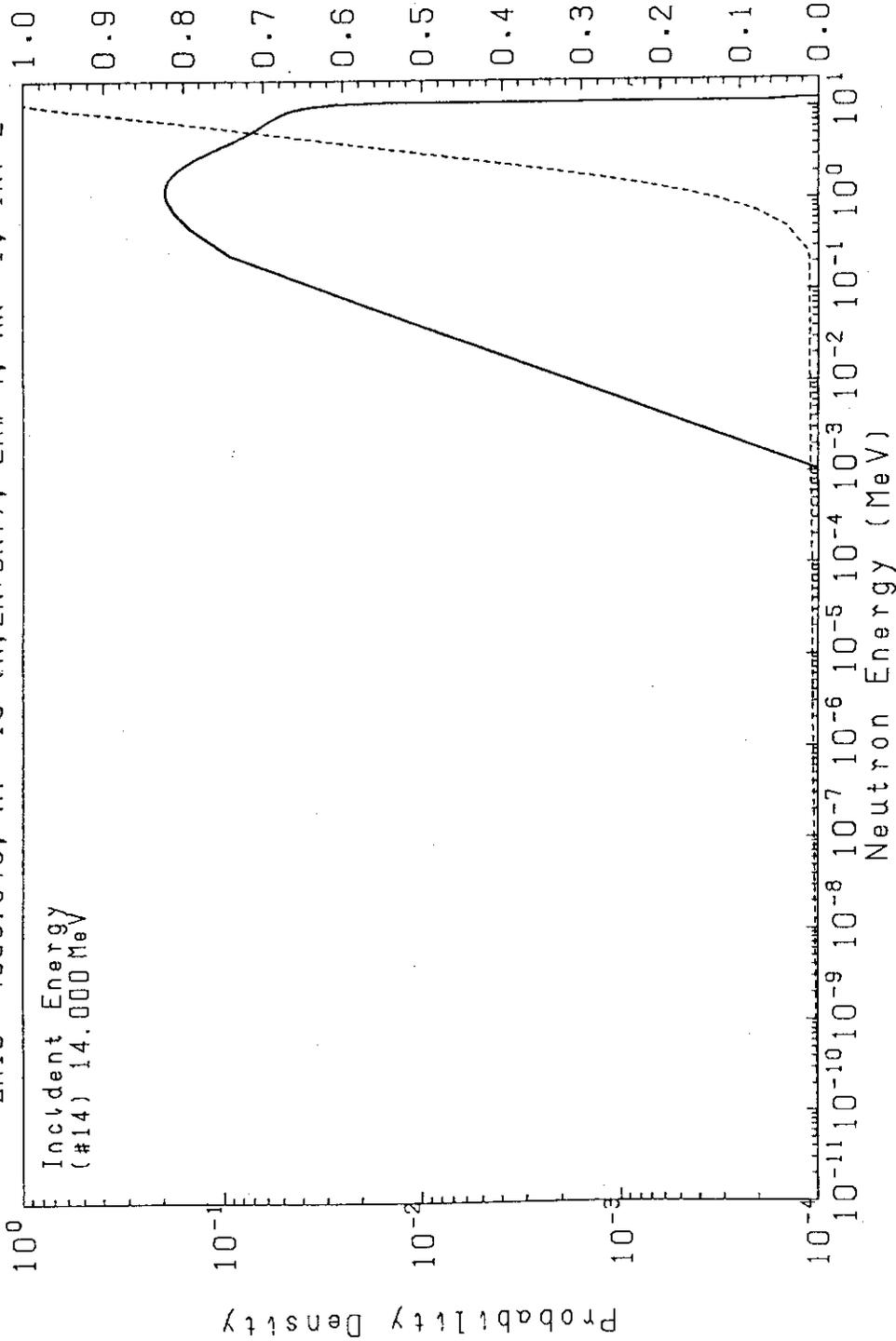
Fig. 5.51 Energy distributions of direct (n,2n) reaction to 10.0 MeV incident neutron for Be-9 in FSXLIB-J3

MACROS 1 1991/09/29 4-BE-9 JENOL-3 FNS-JAERI CONFIRMATION

Secondary Neutron Energy Distribution

MCNP Cross Section Library

ZPID= 4009.34C, MT= 16 (N,2N*DRT), LAW=4, NK= 1, INT=2



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-26 14 PAGE

Fig. 5.52 Energy distributions of direct (n,2n) reaction to 14.0 MeV incident neutron for Be-9 in FSXLIB-J3

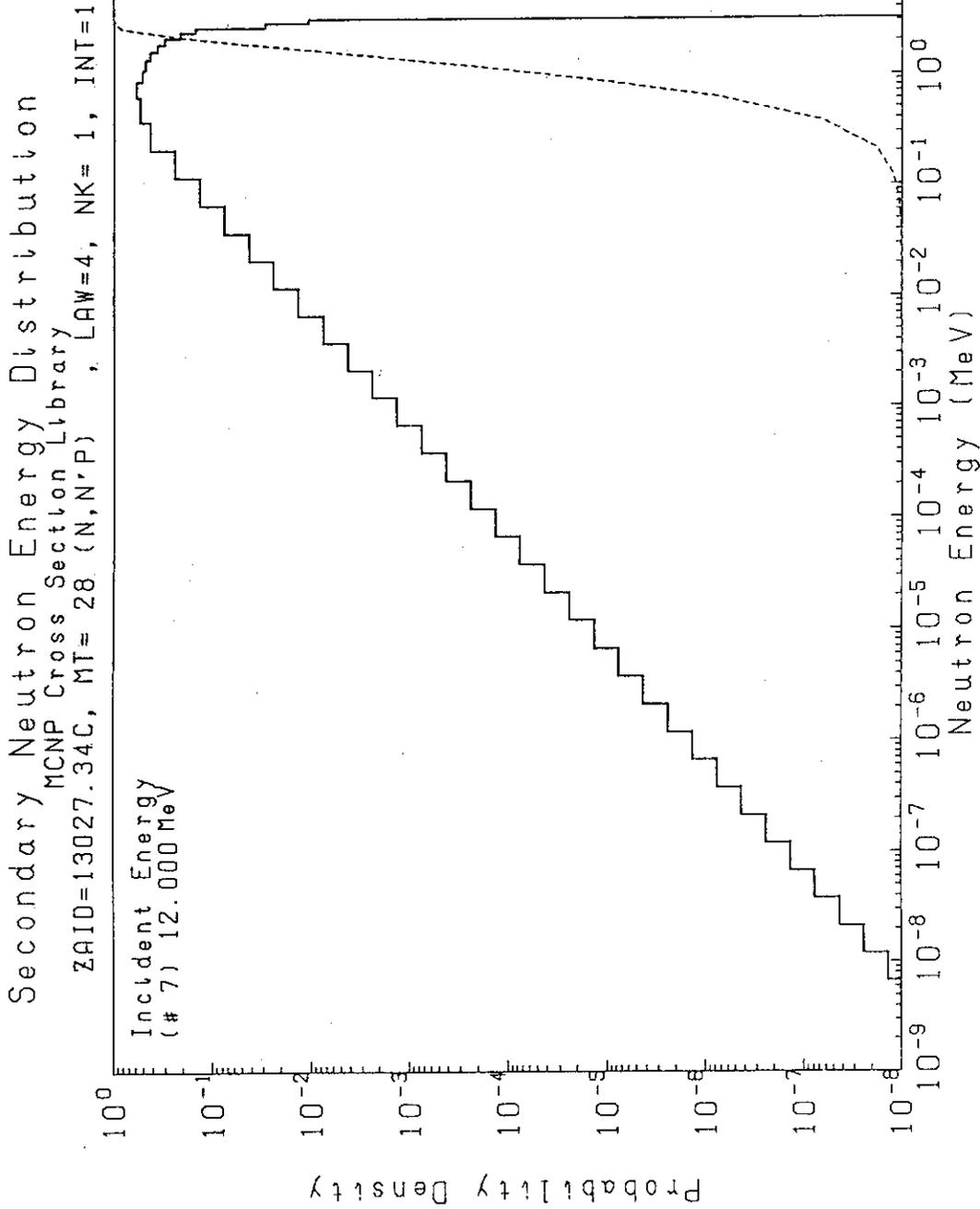


Fig. 5.53 Energy distributions of (n,n'p) reaction to 12.0 MeV incident neutron for Al-27 in FSXLIB-J3

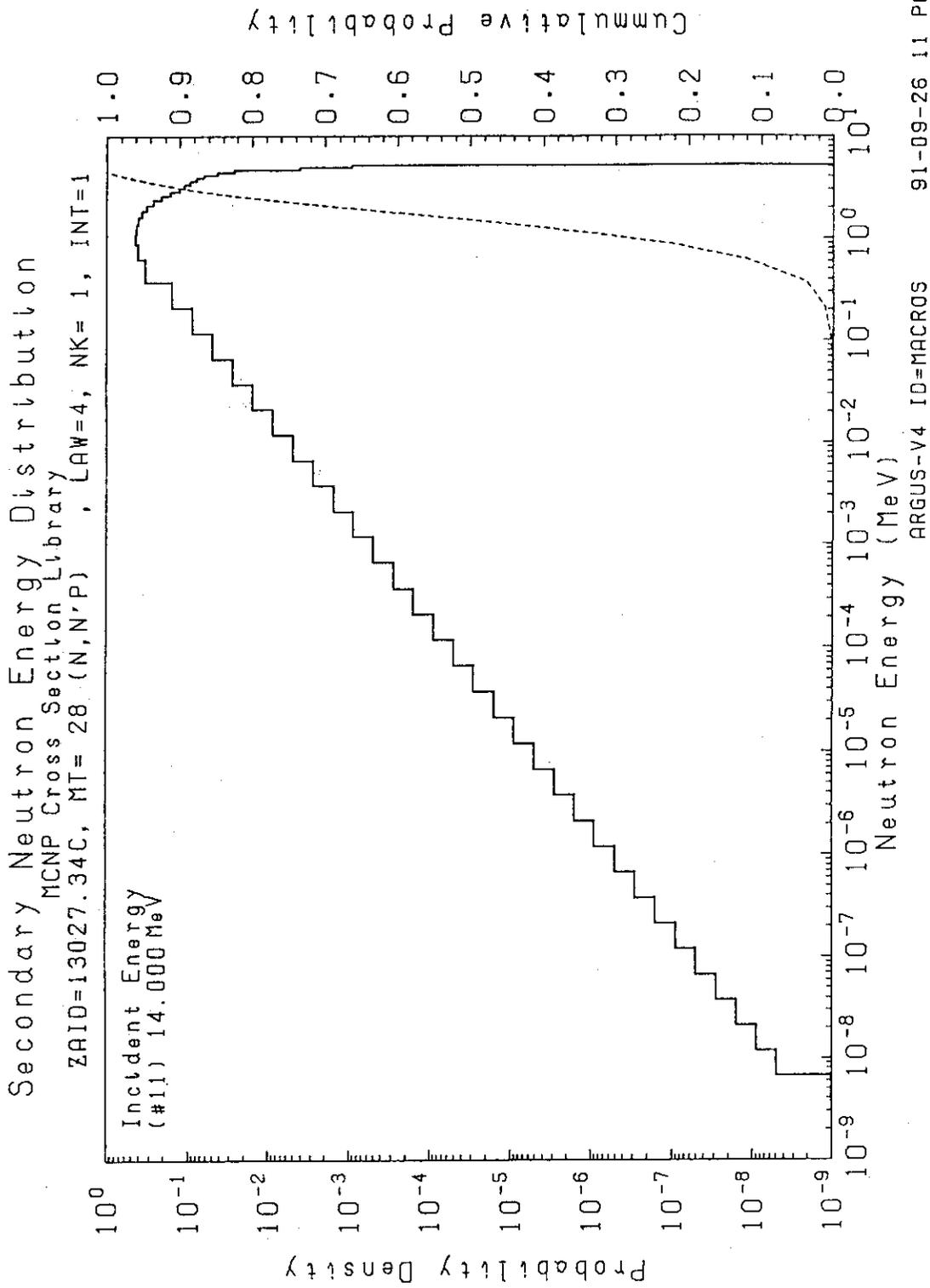


Fig. 5.54 Energy distributions of (n,n'p) reaction to 14.0 MeV incident neutron for Al-27 in FSXLIB-J3

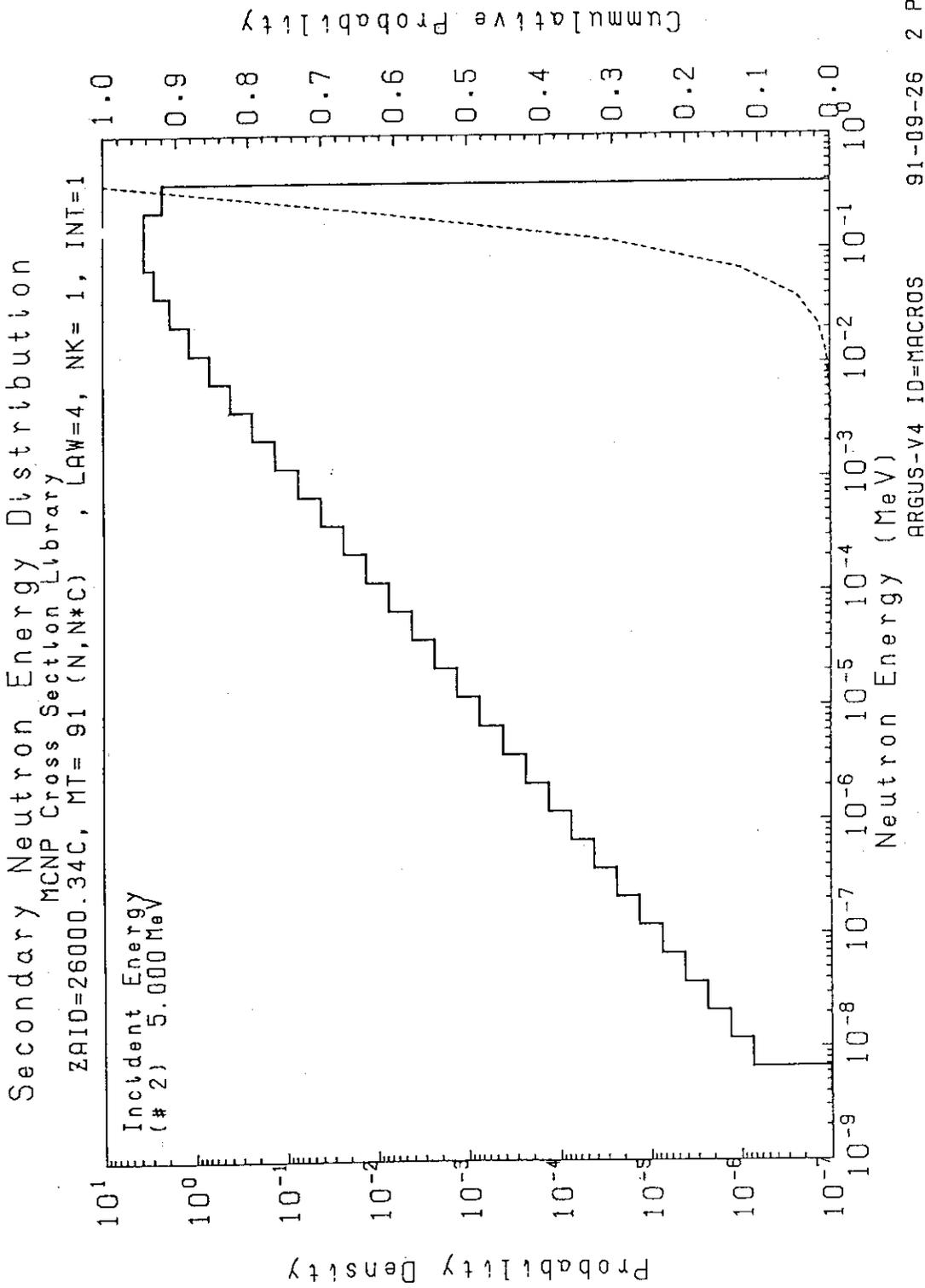
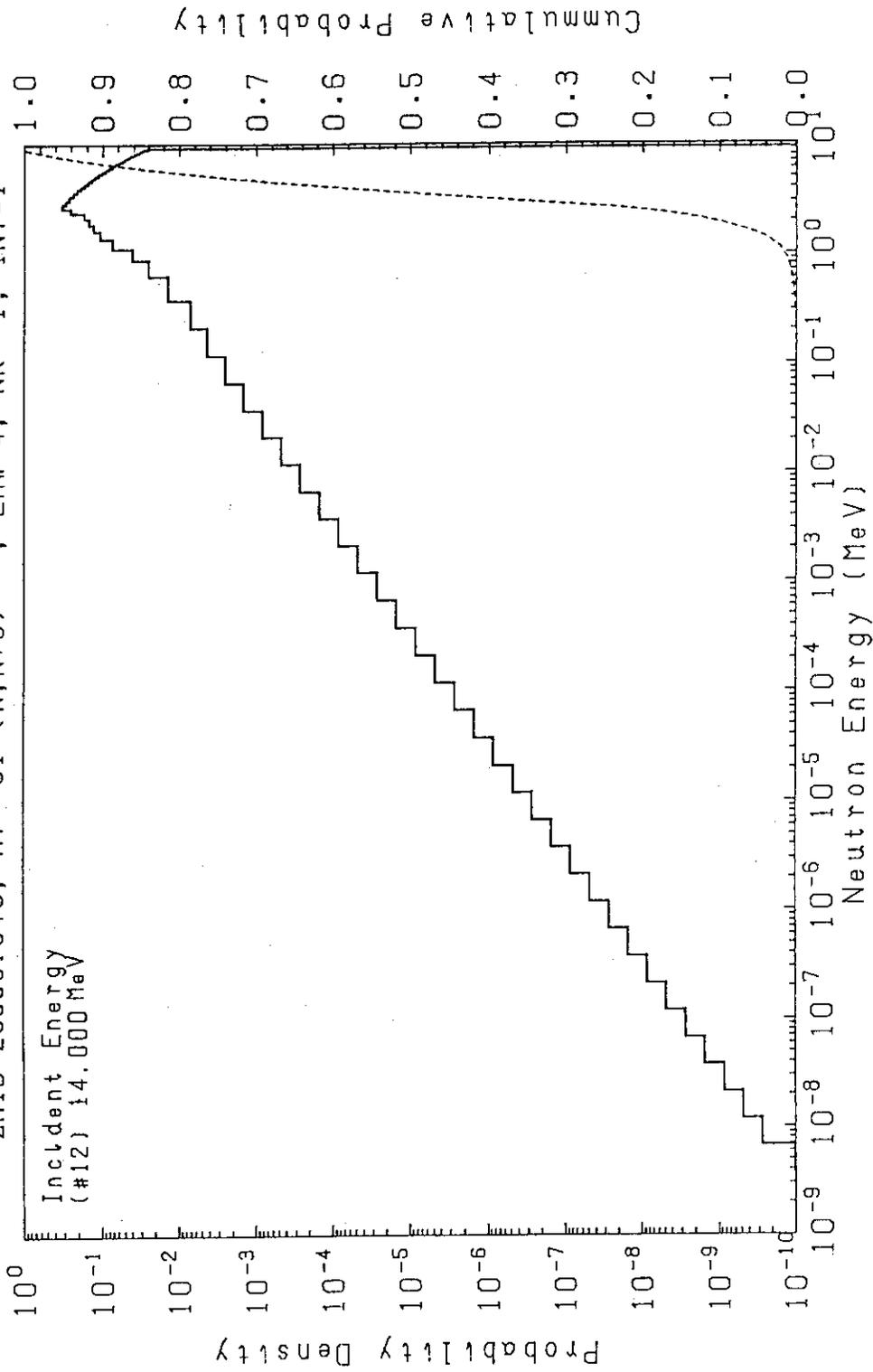


Fig. 5.55 Energy distributions of continuum inelastic scattering (MT=91) to 5.0 Mev incident neutron for Fe-nat. in FSXLIB-J3

Secondary Neutron Energy Distribution

MCNP Cross Section Library
 ZAID=26000.34C, MT= 91 (N,N*C) , LAW=4, NK= 1, INT=1



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-26 12 PAGE

Fig. 5.56 Energy distributions of continuum inelastic scattering (MT=91) to 14.0 MeV incident neutron for Fe-nat. in FSXLIB-J3

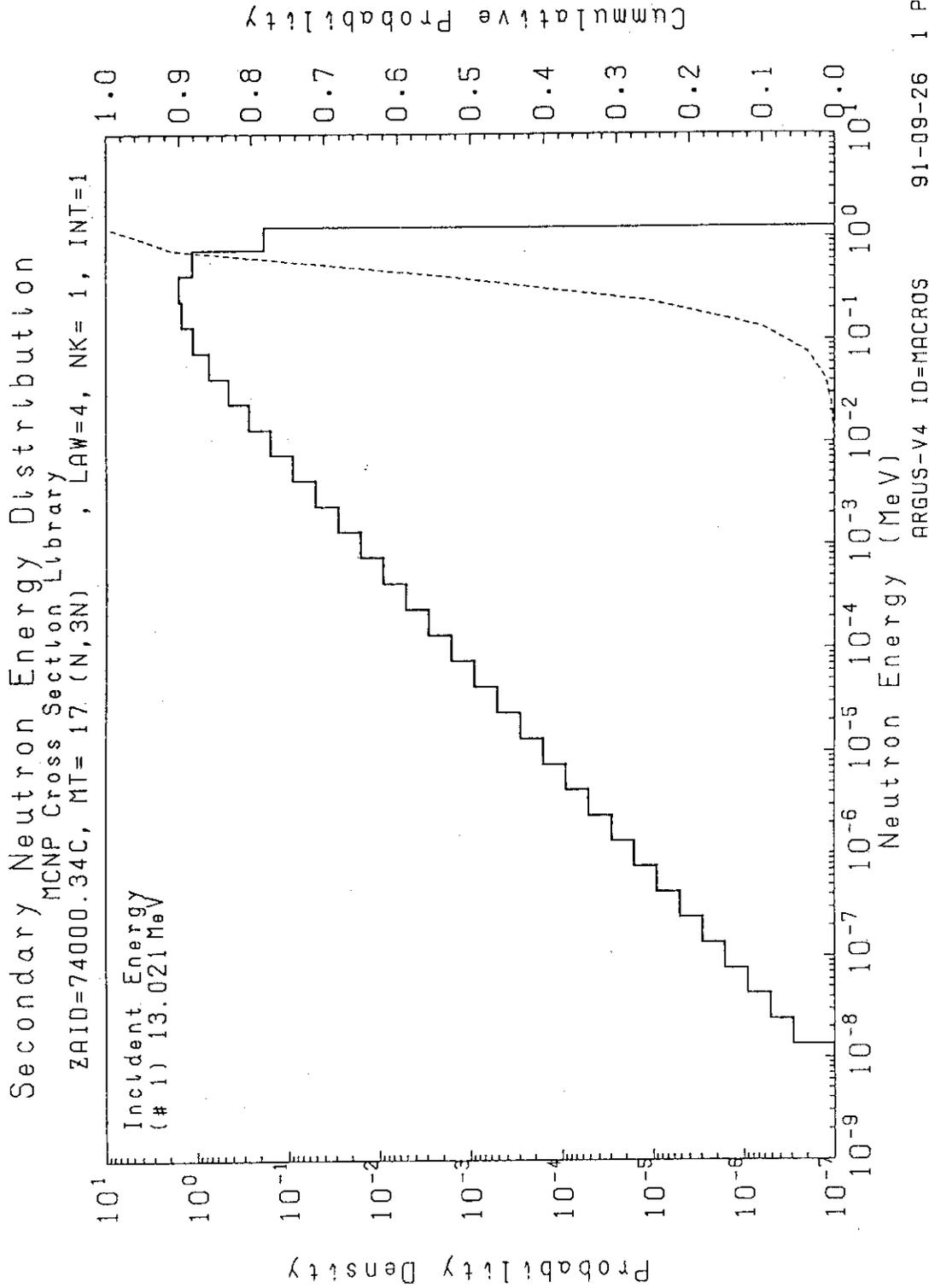
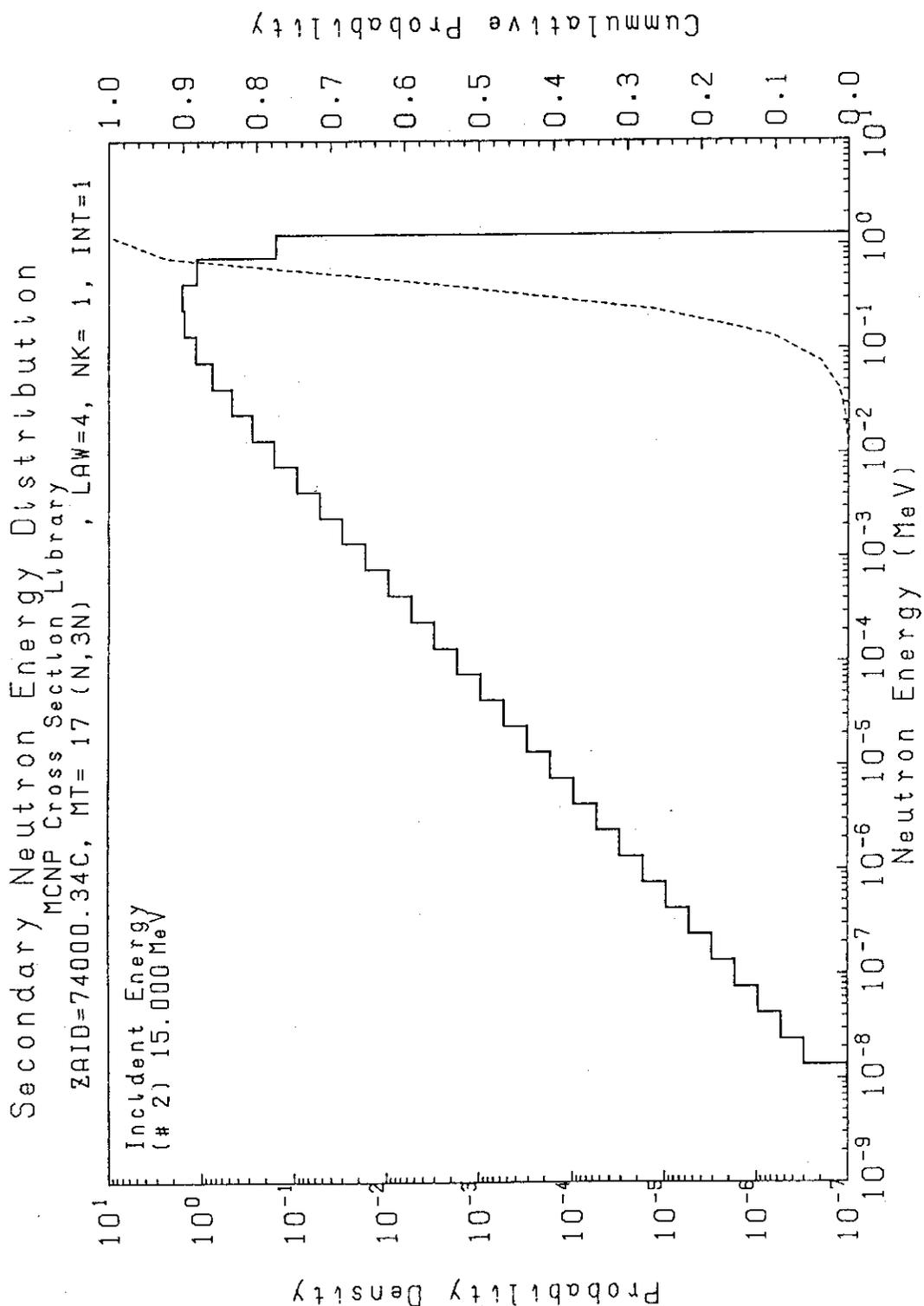


Fig. 5.57 Energy distributions of (n,3n) reaction to 13.021 MeV incident neutron for W-nat. in FSXLIB-J3



ARGUS-V4 ID=MACROS 91-09-26 2 PAGE

Fig. 5.58 Energy distributions of (n,3n) reaction to 15.0 MeV incident neutron for W-nat. in FSXLIB-J3

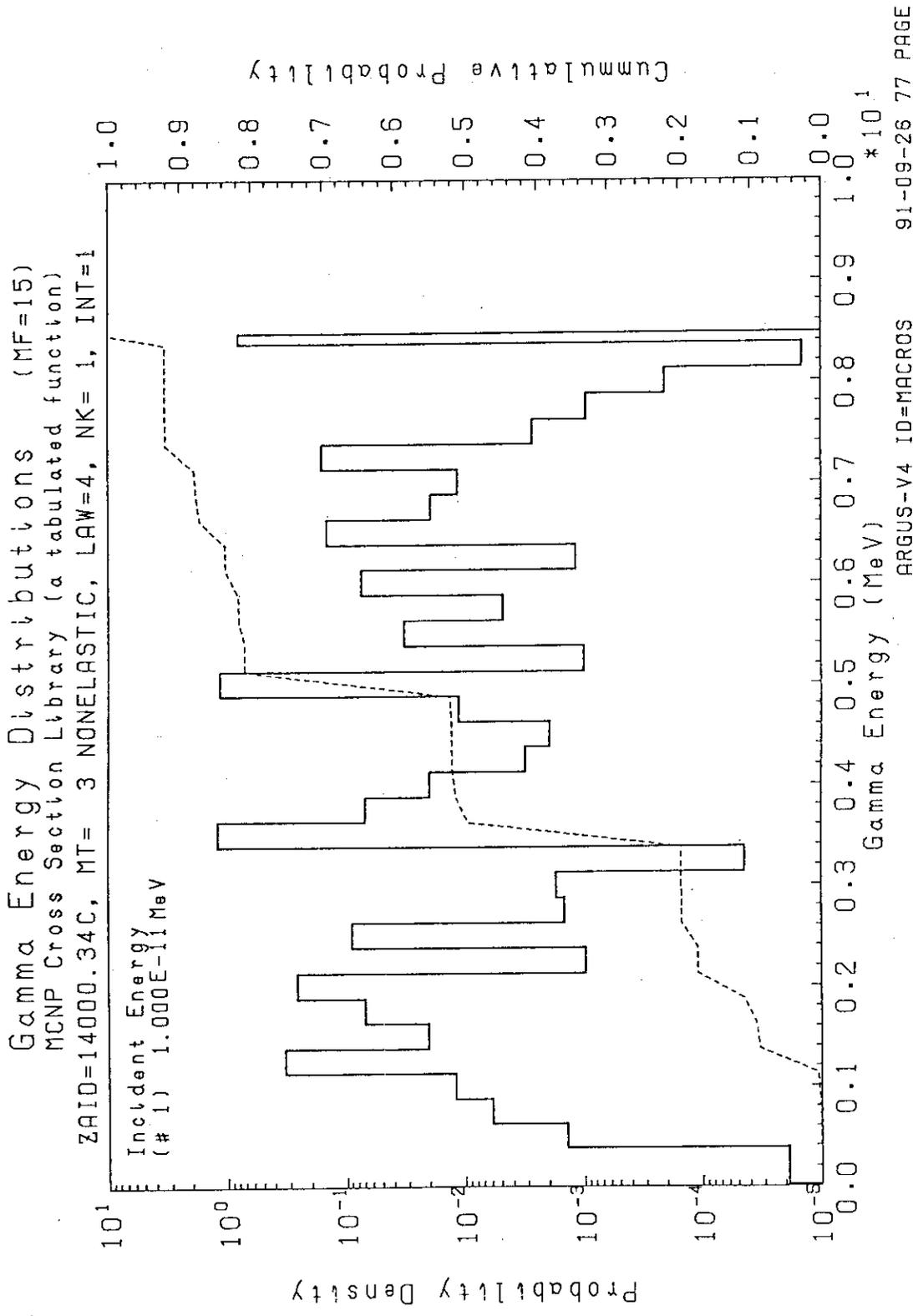


Fig. 5.59 Photon energy distributions of nonelastic scattering to 1.0×10^{-11} MeV incident neutron for Si-nat. in FSXLIB-J3

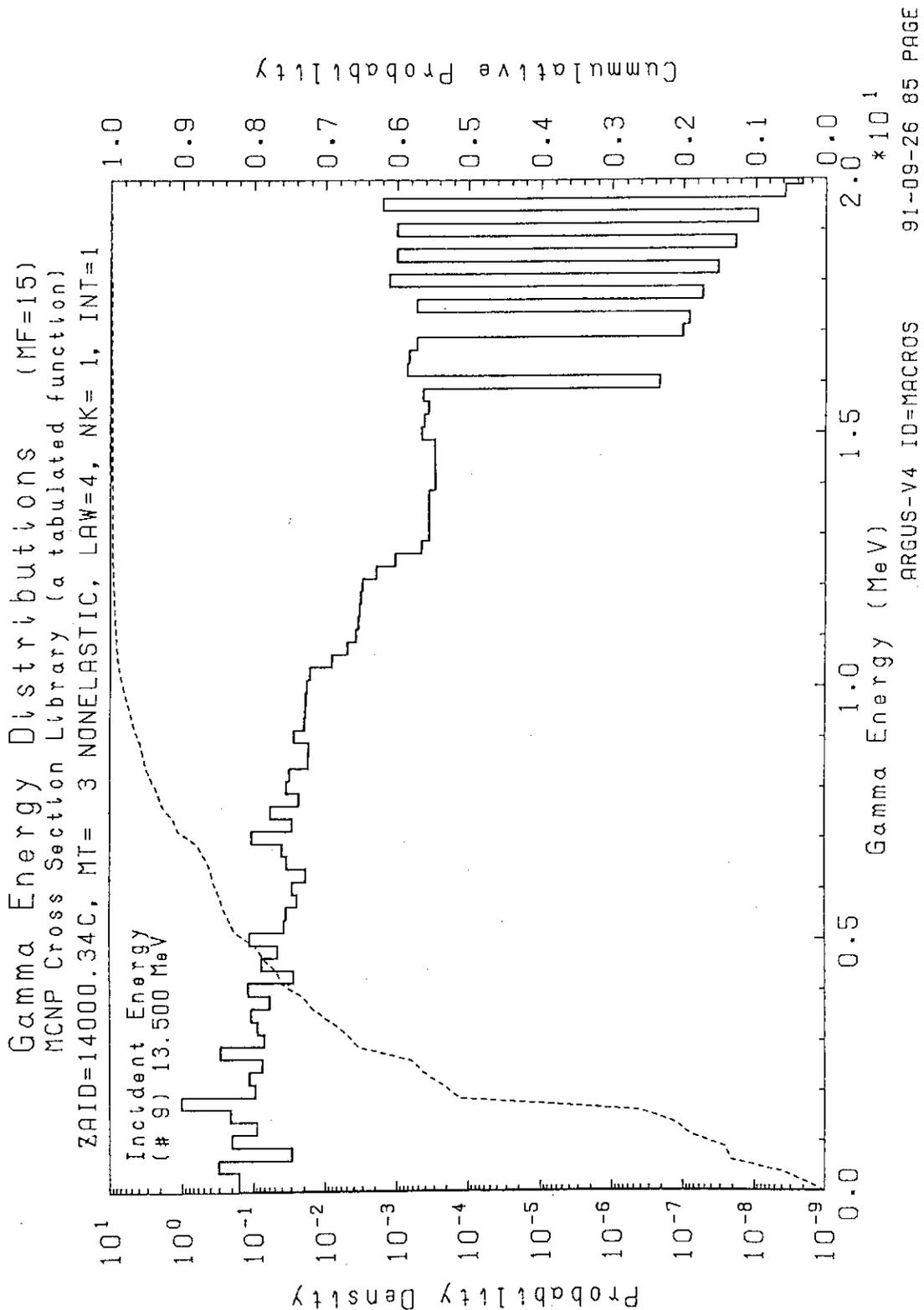


Fig. 5.60 Photon energy distributions of nonelastic scattering to 13.5 MeV incident neutron for Si-nat. in FSXLIB-J3

Gamma Energy Distributions (MF=15)
 MCNP Cross Section Library (a tabulated function)
 ZAID=26000.34C, MT=102 (N,G), LAW=4, NK=1, INT=1

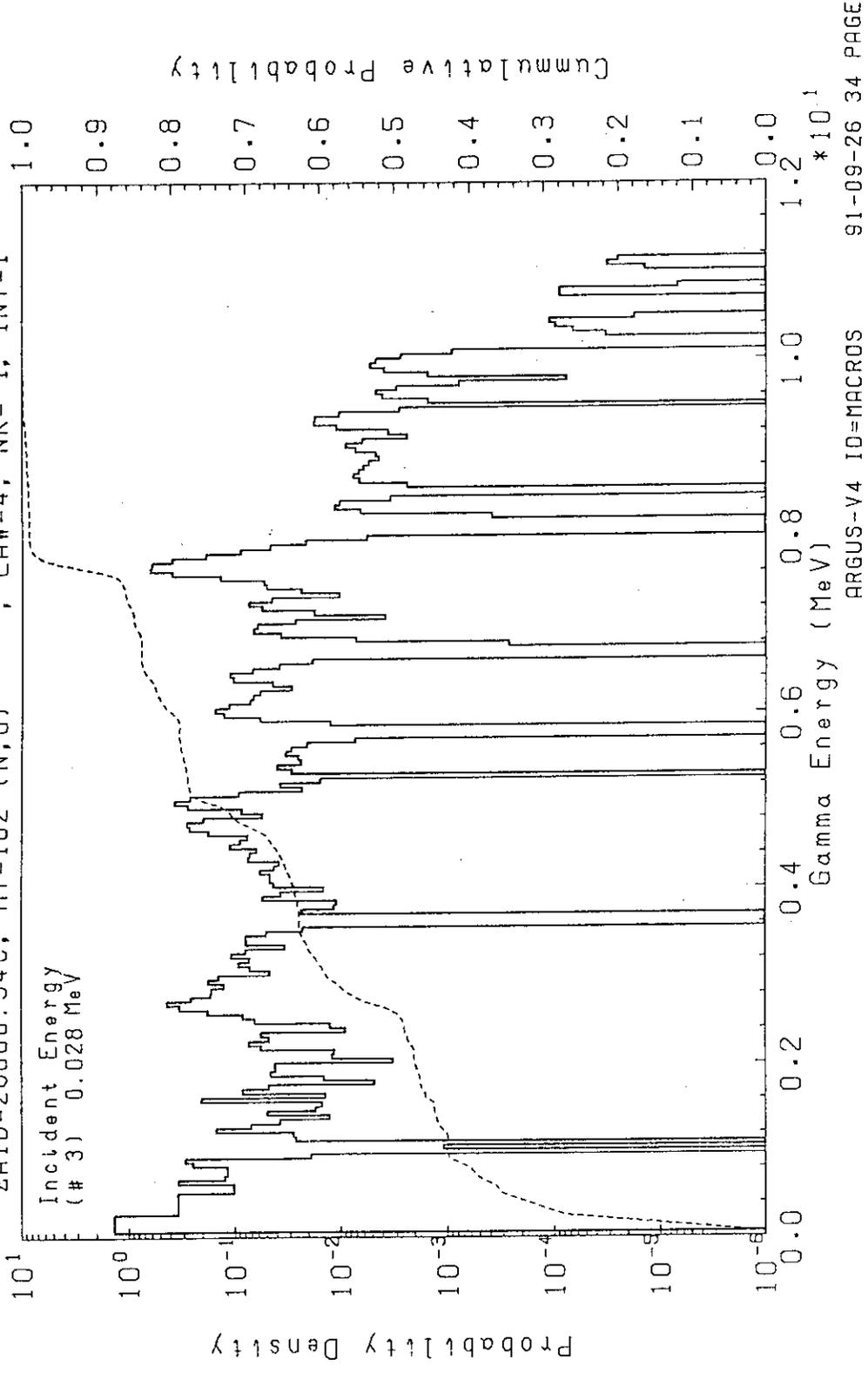


Fig. 5.61 Photon energy distributions of radiative capture to 0.028 MeV incident neutron for Fe-nat. in FSXLIB-J3

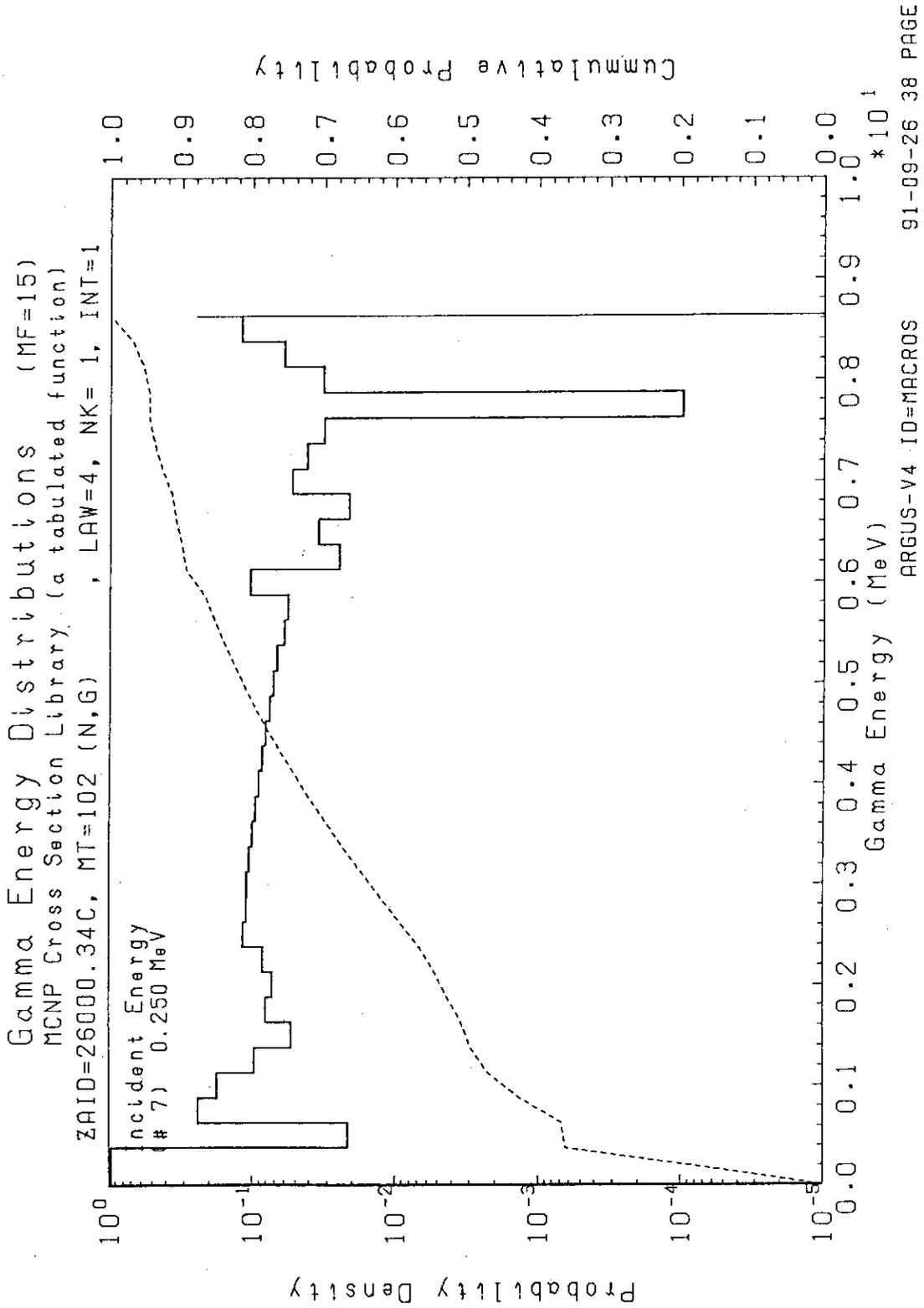


Fig. 5.62 Photon energy distributions of radiative capture to 0.25 MeV incident neutron for Fe-nat. in FSXLIB-J3

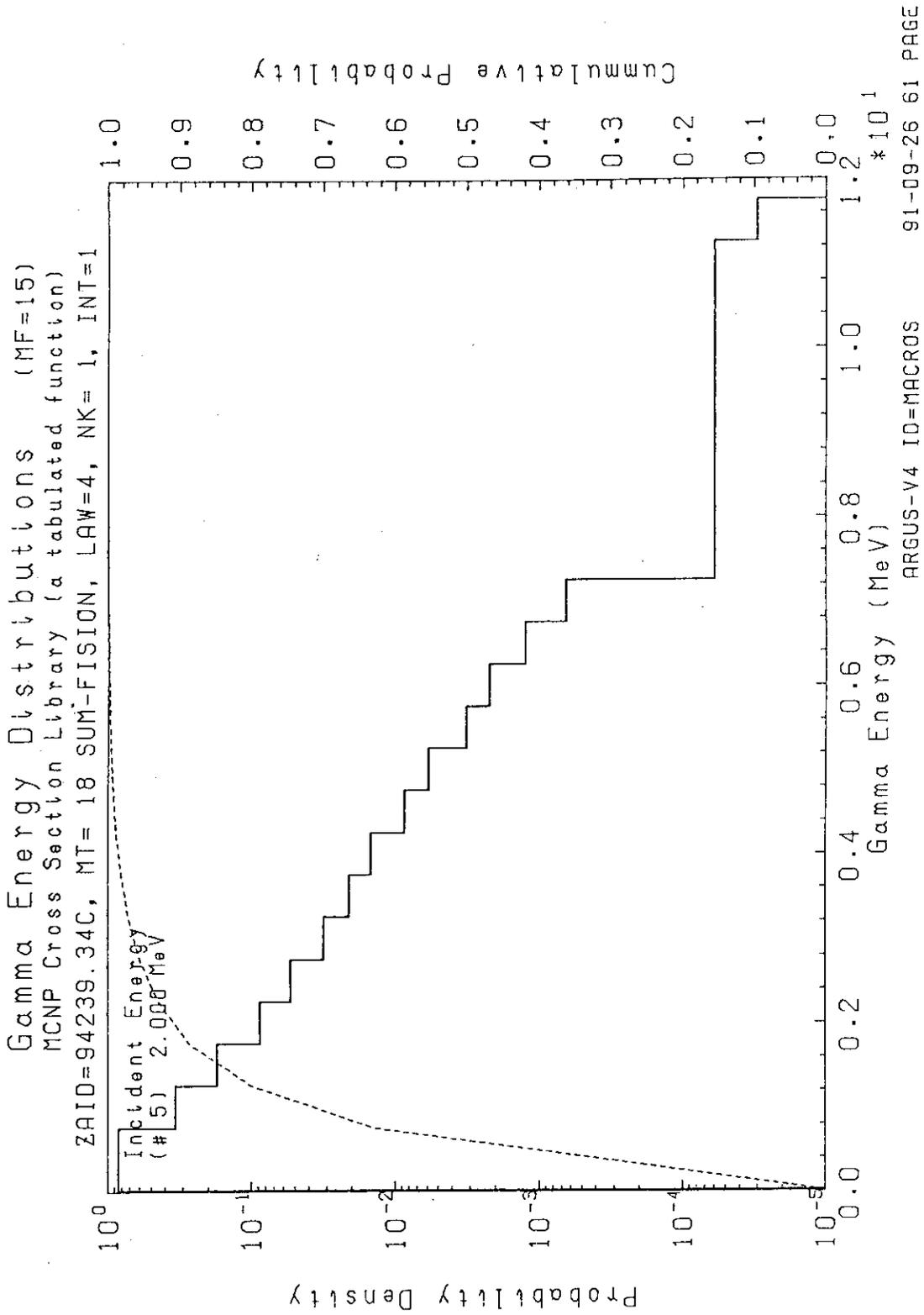


Fig. 5.63 Photon energy distributions of total fission to 2.0 MeV incident neutron for Pu-239 in FSXLIB-J3

6. まとめ

核融合炉の核設計や中性子工学実験解析に用いる最も不確定性の小さい計算手法を構築するために、JENDL-3に基づいたMCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーFSXLIB-J3を作成した。このFSXLIB-J3ライブラリーは、JENDL-3を処理できるように修正したNJOYシステムとMACROSコードにより処理・編集され、46核種（拡張版で116核種）の連続エネルギー中性子相互作用データから成っている。このライブラリーがJENDL-3を忠実に表現しているかどうかを確認し、このライブラリーの信頼性を確めた。

本報告は、MCNP断面積ライブラリーの構成やFSXLIB-J3の作成や確認方法について詳述し、このライブラリーを利用する利用者に基本的な情報を提供するものである。

このライブラリーとMCNPコードを利用した計算手法により、断面積ライブラリー作成段階での不確定性を無視できる、高精度な核融合中性子工学実験解析や核融合炉の核設計が可能となり、計算手法の精度と適用範囲（及び問題点）が明らかになるものと期待される。

謝 辞

FSXLIB-J3に関するさまざまな助言をいただいた核融合炉物理研究室の前川藤夫氏に感謝いたします。

NJOYコードの使用に関して有意義な議論をしていただいたLANL group T-2のR.E.MacFarlane氏に特に感謝いたします。また、MCNPコードの現状と将来計画について説明して下さったLANL group X-6のR.C.Little氏に感謝いたします。

JENDL-3等の核データ・ファイルについてのいろいろな質問に快く応じていただいた物理部核データセンターの中川庸雄氏、千葉敏氏、深堀智夫氏、中島豊氏、成田孟氏、菊池康之氏に感謝いたします。

FSXLIB-J3のベンチマーク計算をして下さったシグマ研究委員会Fusion Neutronics 積分テストWGの山本淳治氏（大阪大学）と市原千博氏（京都大学）に感謝いたします。

最後に、本研究を進めるにあたり多くのご支援をいただいた(財)高輝度光科学研究センターの中村知夫氏に感謝いたします。

6. まとめ

核融合炉の核設計や中性子工学実験解析に用いる最も不確定性の小さい計算手法を構築するために、JENDL-3に基づいたMCNP用連続エネルギー断面積ライブラリーFSXLIB-J3を作成した。このFSXLIB-J3ライブラリーは、JENDL-3を処理できるように修正したNJOYシステムとMACROSコードにより処理・編集され、46核種（拡張版で116核種）の連続エネルギー中性子相互作用データから成っている。このライブラリーがJENDL-3を忠実に表現しているかどうかを確認し、このライブラリーの信頼性を確めた。

本報告は、MCNP断面積ライブラリーの構成やFSXLIB-J3の作成や確認方法について詳述し、このライブラリーを利用する利用者に基本的な情報を提供するものである。

このライブラリーとMCNPコードを利用した計算手法により、断面積ライブラリー作成段階での不確定性を無視できる、高精度な核融合中性子工学実験解析や核融合炉の核設計が可能となり、計算手法の精度と適用範囲（及び問題点）が明らかになるものと期待される。

謝 辞

FSXLIB-J3に関するさまざまな助言をいただいた核融合炉物理研究室の前川藤夫氏に感謝いたします。

NJOYコードの使用に関して有意義な議論をしていただいたLANL group T-2のR.E.MacFarlane氏に特に感謝いたします。また、MCNPコードの現状と将来計画について説明して下さったLANL group X-6のR.C.Little氏に感謝いたします。

JENDL-3等の核データ・ファイルについてのいろいろな質問に快く応じていただいた物理部核データセンターの中川庸雄氏、千葉敏氏、深堀智夫氏、中島豊氏、成田孟氏、菊池康之氏に感謝いたします。

FSXLIB-J3のベンチマーク計算をして下さったシグマ研究委員会Fusion Neutronics 積分テストWGの山本淳治氏（大阪大学）と市原千博氏（京都大学）に感謝いたします。

最後に、本研究を進めるにあたり多くのご支援をいただいた(財)高輝度光科学研究センターの中村知夫氏に感謝いたします。

参考文献 (References)

- 1) Shibata K., et al.: "JENDL-3: Japanese Evaluated Nuclear Data Library, Version-3", JAERI-1319 (1990).
- 2) Briesmeister J. F. (edited): "MCNP - A General Monte Carlo Code for Neutron and Photon Transport", LA-7396-M, revised 2 (1986).
- 3) MacFarlane R. E., Muir D. W., and Boicourt R. M.: "The NJOY Nuclear Data Processing System", LA-9303-M (ENDF-324) (1982).
- 4) BNL: "ENDF/B-IV: Evaluated Nuclear Data File, Version-IV" (1975).
BNL: "ENDF/B-V : Evaluated Nuclear Data File, Version-V" (1979), and its documentation, "ENDF/B Summary-Documentation, third edition (ENDF/B-V)", BNL-17541 (ENDF-201) (1979).
BNL: "ENDF/B-VI: Evaluated Nuclear Data File, Version-VI" (1990).
- 5) Howerton R. J., et al.: "The LLL Evaluated Nuclear Data Library (ENDL): Evaluation Techniques, Reaction Index, and Descriptions of Individual Reactions", Lawrence Livermore National Laboratory report UCRL-50400, Vol. 15, Part A (1975).
- 6) Howerton R. J., et al.: "Omega Documentation", Lawrence Livermore National Laboratory report UCRL-50400, Vol. 25 (1983).
- 7) 中川庸雄: 私信 (1990).
Nakagawa T.: private communication (1990).
- 8) 小迫和明、他: "核融合中性子工学実験解析のための中性子断面積ライブラリー", JAERI-M 88-076 (1988).
Kosako K., et al.: "Neutron Cross Section Libraries for Analysis of Fusion Neutronics Experiments", JAERI-M 88-076 (1988) (in Japanese).
- 9) Nakagawa T.: "Program RESEND (Version 84-07): A Program for Reconstruction of Resonance Cross Sections from Evaluated Nuclear Data in the ENDF/B Format (Modified Version of RESEND)", JAERI-M 84-192 (1984).

付録A MAKXSFCコードへの入力データ

MAKXSFCコードは、MCNPコードに付随して公開されているユーティリティー・コードである。主な使用目的は、第2.1節で述べたようにMCNP用断面積ライブラリーの核データ・テーブルの型式をType 1からType 2へ、またはType 2からType 1へ変換することにある (Table 2.1 参照)。Type 1は順編成ファイルであり、Type 2は直接編成ファイルである。

ここでは、MAKXSFCコードへ入力するデータ・ファイルSPECSについて説明する。データの入力方法は、free-field形式である。

第1レコード

- 1) 元の検索データ・テーブルのファイル名 (8文字まで)
- 2) 新規検索データ・テーブルのファイル名 (8文字まで)

第2レコード

- 1) 新規核データ・テーブルのファイル名 (8文字まで)
- 2) 新規核データ・テーブルの型式指標
 - 1 = 順編成ファイル (80文字/レコード)
 - 2 = 直接編成ファイル (2048バイト/レコード)
- 3) レコード長 (型式指標 = 1 ならば入力しない; = 2 ならば任意であるが、2048を推奨する)
- 4) 1レコード毎の入力データ数 (型式指標 = 1 ならば入力しない; = 2 ならば任意であるが、512を推奨する)

第3レコード

- 1) アクセス・ルート (Type 3以外では意味が無いので、第1カラムにゼロを入力する)

第4レコード

新規核データ・テーブルに収納する核種識別番号 (ZAID) の一覧表
(1核種1レコードの形式で、1001.01Cのように入力する)

最終レコード

ジョブを終了するための空白レコード

(入力データの例: Type 1 からType 2 への変換)

```
FSXDIR1  FSXDIR2
FSXLIB2  2  2048  512
0
1001.01C
```

3006.33C
3007.34C
8016.05C
13027.04C
24000.22C
26000.05C
28000.24C
92235.11C
92235.18C

(J C L の例: Type 1 から Type 2 への変換)

```
T(05) W(04) I(06) C(03) E(00) SRP
//FORT EXEC FORT77,SO='J9067.MCNPUTY',A='ELM(MAKXSF)'
//LINK EXEC LKED
//RUN EXEC GO
//FT31F001 DD DSN=J9067.SPECS.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//FT32F001 DD SYSOUT=*
//FT33F001 DD DSN=J9067.FSXDIR1.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//FT34F001 DD DSN=J9067.FSXDIR2.DATA,DISP=(NEW,CATLG),UNIT=TSSWK,
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=3200),SPACE=(TRK,3)
//FT35F001 DD DSN=J9067.FSXLIB1.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//FT36F001 DD DSN=J9067.FSXLIB2.DATA,DISP=(NEW,CATLG),UNIT=TSSWK,
//          DCB=(RECFM=F,LRECL=2048,BLKSIZE=2048),SPACE=(TRK,220)
//
```

付録B NJOYシステムのJCLと入力データの例

第3.1節で述べたように、核データ・ファイルを処理してACE形式データを作成するにはNJOYシステムの実行が必要である。利用者が処理を行う際の参考のために、NJOYの実行に必要なJCL（原研FACOM大型計算機仕様）と入力データの例を示す。

NJOYの入力データは、free-field形式である。入力データの構成と意味については、参考文献3を参照されたい。入力データの例として、Al-27, Fe-0, U-235の3核種の場合を以下に示す。

(JCLの例)

```
T(05) W(04) I(05) C(07) E(00) SRP
/* *****
/* * NJOY83/6 : NUCLEAR DATA PROCESSING SYSTEM *
/* *****
//FORT EXEC FORT77,SO='J9067.NJOYXX',A='ELM(*)',RGN='2M'
//LINK EXEC LKED
//RUN EXEC GO
/*
//FT06F001 DD DSN=J9067.NJOYLPP.OUTLIST,DISP=(NEW,CATLG),
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=137,BLKSIZE=13700),UNIT=TSSWK,
//          SPACE=(TRK,(60,20))
//SYSIN    DD DSN=J9067.NJOY.DATA(INPUT),DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
/*
//FT90F001 DD DSN=J1615.JENDL301.DATA,DISP=SHR,LABEL=(,,IN)
//FT91F001 DD DSN=J9067.NJOYST1.DATA,DISP=(MOD,CATLG),UNIT=TSSWK,
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=6400),SPACE=(TRK,(40,20))
//FT93F001 DD DSN=J9067.NJOYST2.DATA,DISP=(MOD,CATLG),UNIT=TSSWK,
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=6400),SPACE=(TRK,(40,20))
//FT94F001 DD DSN=J9067.NJOYST3.DATA,DISP=(MOD,CATLG),UNIT=TSSWK,
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=6400),SPACE=(TRK,(40,20))
//FT89F001 DD DSN=J9067.NJOYST4.DATA,DISP=(MOD,CATLG),UNIT=TSSWK,
//          DCB=(RECFM=FB,LRECL=80,BLKSIZE=6400),SPACE=(TRK,(40,20))
/*
//FT10F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT11F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT12F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT13F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT14F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT15F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
```

```

//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT16F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT17F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT18F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT19F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT20F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT21F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT22F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT23F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT24F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//FT25F001 DD UNIT=WK10,DISP=(NEW,DELETE),SPACE=(TRK,(40,20)),
//          DCB=(RECFM=VBS,LRECL=32756,BLKSIZE=32760)
//

```

(入力データの例1: AL-27)

```

0
5
*MODER*
90 -21
*RECONR*
-21 -22
*PENDF TAPE FOR AL-27 FROM JENDL TAPE 301*/
3131 3 0
0.005 0.0 6/
*13-AL-27 FROM TAPE JENDL301*/
*PROCESSED BY THE NJOY NUCLEAR DATA PROCESSING SYSTEM*/
*SEE ORIGINAL JENDL-3 TAPE FOR DETAILS OF EVALUATION*/
0/
*BROADR*
-22 -23
3131 1 0 0 0.0 0.005 1.0+6
300.0
0/
*HEATR*
-21 -23 -22
3131 0 0 0 0 0
*THERMR*
0 -22 -23
0 3131 8 1 1 0 1 221 0
300.0
0.01 4.6
*GROUPR*
-21 -23 0 -25
3131 3 2 3 5 1 1 0
*13-AL-27 CROSS-SECTION GROUPWISE*/

```

```

300.0
1.0E+10
3 1 *TOTAL*/
3 2 *ELASTIC*/
3 4 *INELASTIC*/
3 16 *(N,2N) DIRECT*/
3 22 *(N,N'A)*/
3 28 *(N,N'P)*/
3 51 *DISCRETE INELASTIC*/
3 -66 *CONTINUED HIGHER LEVEL*/
3 91 *CONTINUED INELASTIC*/
3 102 *(N,G)*/
3 103 *(N,P)*/
3 107 *(N,A)*/
3 111 *(N,2P)*/
3 221 *FREE THERMAL SCATTERING*/
3 251 *MUBAR*/
3 301 *TOTAL HEAT PRODUCTION*/
6 2 *ELASTIC*/
6 16 *(N,2N) DIRECT*/
6 22 *(N,N'A)*/
6 28 *(N,N'P)*/
6 51 *DISCRETE INELASTIC*/
6 -66 *CONTINUED HIGHER LEVEL*/
6 91 *CONTINUED INELASTIC*/
6 221 *FREE THERMAL SCATTERING*/
16 51 *DISCRETE INELASTIC GAMMA PRODUCTION*/
16 -66 *CONTINUED INELASTIC GAMMA PRODUCTION*/
16 102 *CAPTURE GAMMA PRODUCTION*/
16 103 *(N,P) CAPTURE GAMMA PRODUCTION*/
16 107 *(N,A) CAPTURE GAMMA PRODUCTION*/
17 3 *NONELASTIC GAMMA PRODUCTION*/
0/
0/
*ACER*
-21 -23 -25 93 94 -24
0 3131 300.0 1 0
0.01 32 20 1
1.001-5 2.00+7 1
*STOP*

```

(入力データの例2: Fe-0)

```

0
5
*MODER*
90 -21
*RECONR*
-21 -22
*PENDF TAPE FOR FE-0 FROM JENDL TAPE 302*/
3260 3 0
0.005 0.0 6/
*26-FE-0 FROM TAPE JENDL302*/
*PROCESSED BY THE NJOY NUCLEAR DATA PROCESSING SYSTEM*/
*SEE ORIGINAL JENDL-3 TAPE FOR DETAILS OF EVALUATION*/
0/
*BROADR*
-22 -23
3260 1 0 0 0.0 0.005 1.0+6
300.0
0/

```

```

*HEATR*
-21 -23 -22
3260 0 0 0 0 0
*THERMR*
0 -22 -23
0 3260 8 1 1 0 1 221 0
300.0
0.01 4.6
*GROU*
-21 -23 0 -25
3260 3 2 3 5 1 1 0
*26-FE-0 CROSS-SECTION GROUPWISE*/
300.0
1.0E+10
3 1 *TOTAL*/
3 2 *ELASTIC*/
3 4 *INELASTIC*/
3 16 *(N,2N) DIRECT*/
3 22 *(N,N'A)*/
3 28 *(N,N'P)*/
3 51 *DISCRETE INELASTIC*/
3 -75 *CONTINUED HIGHER LEVEL*/
3 91 *CONTINUED INELASTIC*/
3 102 *(N,G)*/
3 103 *(N,P)*/
3 107 *(N,A)*/
3 221 *FREE THERMAL SCATTERING*/
3 251 *MUBAR*/
3 301 *TOTAL HEAT PRODUCTION*/
6 2 *ELASTIC*/
6 16 *(N,2N) DIRECT*/
6 22 *(N,N'A)*/
6 28 *(N,N'P)*/
6 51 *DISCRETE INELASTIC*/
6 -75 *CONTINUED HIGHER LEVEL*/
6 91 *CONTINUED INELASTIC*/
6 221 *FREE THERMAL SCATTERING*/
16 3 *NONELASTIC GAMMA PRODUCTION*/
16 51 *DISCRETE INELASTIC GAMMA PRODUCTION*/
16 52 *CONTINUED INELASTIC GAMMA PRODUCTION*/
16 102 *CAPTURE GAMMA PRODUCTION*/
0/
0/
*ACER*
-21 -23 -25 93 94 -24
0 3260 300.0 1 0
0.01 32 20 1
1.001-5 2.00+7 1
*STOP*

```

(入力データの例3: U-235)

```

0
5
*MODER*
90 -21
*RECONR*
-21 -22
*PENDF TAPE FOR U-235 FROM JENDL TAPE 305*/
3924 3 0
0.005 0.0 6/

```

92-U-235 FROM TAPE JENDL305/
 PROCESSED BY THE NJOY NUCLEAR DATA PROCESSING SYSTEM/
 SEE ORIGINAL JENDL-3 TAPE FOR DETAILS OF EVALUATION/

0/

BROADR

-22 -23

3924 1 0 0 0.0 0.005 1.0+6

300.0

0/

UNRESR

-21 -23 -25

3924 1 1 1

300.0

1.0E+10

0/

HEATR

-21 -25 -22

3924 0 0 0 0 0

THERMR

0 -22 -23

0 3924 8 1 1 0 1 221 0

300.0

0.01 4.6

GROUPT

-21 -23 0 -25

3924 3 2 3 5 1 1 0

92-U-235 CROSS-SECTION GROUPWISE/

300.0

1.0E+10

3 1 *TOTAL*/

3 2 *ELASTIC*/

3 4 *INELASTIC*/

3 16 *(N,2N) DIRECT*/

3 17 *(N,3N)*/

3 18 *TOTAL FISSION*/

3 37 *(N,4N)*/

3 51 *DISCRETE INELASTIC*/

3 -79 *CONTINUED HIGHER LEVEL*/

3 91 *CONTINUED INELASTIC*/

3 102 *(N,G)*/

3 221 *FREE THERMAL SCATTERING*/

3 251 *MUBAR*/

3 301 *TOTAL HEAT PRODUCTION*/

6 2 *ELASTIC*/

6 16 *(N,2N) DIRECT*/

6 17 *(N,3N)*/

6 18 *TOTAL FISSION*/

6 37 *(N,4N)*/

6 51 *DISCRETE INELASTIC*/

6 -79 *CONTINUED HIGHER LEVEL*/

6 91 *CONTINUED INELASTIC*/

6 221 *FREE THERMAL SCATTERING*/

16 18 *TOTAL FISSION GAMMA PRODUCTION*/

16 51 *DISCRETE INELASTIC GAMMA PRODUCTION*/

16 -69 *CONTINUED INELASTIC GAMMA PRODUCTION*/

16 102 *CAPTURE GAMMA PRODUCTION*/

17 3 *NONELASTIC GAMMA PRODUCTION*/

0/

0/

ACER

-21 -23 -25 93 94 -24

0 3924 300.0 1 0

0.01 32 20 1

1.001-5 2.00+7 1

STOP

Appendix C Outline of FSXLIB-J3 (in English)

1. Introduction

The general purpose evaluated nuclear data file, JENDL-3¹⁾, which was newly evaluated at Japan was released. The JENDL-3 is available in areas of fusion reactor, fission reactor, etc. This is based on the new nuclear model calculation codes and the newly measured cross sections.

The general Monte Carlo code MCNP²⁾ have been used for transport calculation in fusion neutronics. The characteristic of MCNP has the subtle library format and the sophisticated Monte Carlo calculation scheme.

The MCNP continuous energy cross section library, FSXLIB-J3, was produced from JENDL-3 with the nuclear data processing system, NJOY³⁾, and with the compiling and editing code of MCNP library, MACROS. This report explains the processing of JENDL-3, characteristics of FSXLIB-J3 and confirmation of FSXLIB-J3.

2. Cross Section Library for the MCNP Code

The explanation of cross section library for the MCNP code is not given here. Please see the reference 2.

3. Production of FSXLIB-J3

3.1 Nuclear Data Processing System NJOY

The previous MCNP cross section libraries were released with the MCNP code and have been maintained by the LANL X-6 group. Continuous neutron interaction data from an evaluated nuclear data file written in ENDF/B format⁴⁾ can be produced with NJOY. The NJOY system of version 83/6 was used for preparing FSXLIB-J3.

Figure 3.1 is shown the processing flow to produce the continuous cross section library for MCNP from the nuclear data by NJOY and MACROS. The concrete explanation of NJOY is not given here. Please see the reference 3.

To process the nuclear data, the following conditions in NJOY are selected considering the fusion neutronics application:

Module	Processing Parameters	Selected Condition
RECONR	precision to reconstruct point-wise cross sections	0.5 %
BROADR	precision to reconstruct with Doppler broadening upper-limit energy of Doppler broadening processing temperature of cross sections	0.5 % upper-limit of resonance region or lowest threshold energy of inelastic scattering reactions 300 K
THERMR	upper-limit energy of thermal region inelastic option of thermal region	4.6 eV free gas model
GROUPR	multigroup photon production cross sections	neutron 30-group, photon 94-group, 1/E weight, P _L =5
ACER	number of equal-probability angular intervals	32

3.2 Modification for Processing of JENDL-3

The explanation for JENDL-3 is not given here. Please see the reference 1.

The NJOY system had to be modified for some points in order to process JENDL-3 and to install on the JAERI's FACOM computer system. The modification for installation on FACOM was as follows:

1. typing by character statement,
2. to use double precision variables in some locations,
3. to eliminate the OPEN/CLOSE statements for input/output files, and
4. other minor changes.

The following modification was done to process JENDL-3 (square brackets represent the name of corresponding module):

1. expansion of dimension size to store pointwise cross sections [ACER],
2. the number of outgoing neutrons for Be-9 (n,2n) reaction [ACER],
3. the addition of interpolation mode (INT=3 - 5),

4. the conversion of several NK subsections into one subsection for tabulated energy distribution [GROUPE, ACER],
5. the processing of resolved resonance parameter in Reich-Moore form [RECONR],
6. the conversion photon production transition probability array (LO=2) into photon production multiplicities (LO=1) [HEATR, GROUPE, ACER],
7. the maximum energy for some resonance regions [RECONR],
8. the modification of processing for tabulated probability angular distribution [ACER],
9. the selection of upper-limit energy to perform the Doppler broadening [BROADR],
10. the addition of processing for photon angular distribution [ACER], and
11. the calculation of pointwise cross sections for LRF=2 format in unresolved resonance parameters (LRU=2) [RECONR].

3.3 Produced Cross Section Library FSXLIB-J3

The MCNP continuous cross section library, FSXLIB-J3, was produced. First, the NJOYST2 files were produced by NJOY from JENDL-3, for required nuclides to FSXLIB-J3. Then, FSXLIB-J3 was produced compiling NJOYST2 files in sequence by MACROS.

The MCNP cross section library, FSXLIB, consists of a few continuous cross section libraries, as FSXLIB-J3.

The FSXLIB-J3 library consists of the nuclear data table, FSXLIBJ3, and the directory data table, FSXDIRJ3. The FSXLIBJ3 table is a direct access file (record length 2048) of Type 2 (see Table 2.2). The FSXLIB library includes two kinds of version for FSXLIB-J3: standard FSXLIB-J3 (46 nuclides) and extended FSXLIB-J3 (116 nuclides). The stored nuclides are shown in Table 3.1. These nuclides are relevant to fusion blanket components, structural materials, basic fissionable materials and other important materials.

4. MACROS Code

The MACROS code is used to compile and confirm the MCNP continuous cross section library. Here, only the function of MACROS is listed. The plotting routine packages used in MACROS are the CALCOMP and ARGUS-V4 (constructed by CALCOMP routines).

The functions (ITYPE: the second integer variable on first input card for MACROS) of MACROS are as follows:

- 0 = create a MCNP continuous cross section library
- 1 = add an nuclide to MCNP library
- 2 = replace an nuclide
- 3 = rearrange nuclides in ascending order
- 4 = print out continuous neutron interaction data of a nuclide
- 5 = delete a nuclide
- 6 = plot neutron cross sections of a nuclide with OENDF
- 7 = combine two directory files
- 8 = convert directory file format (sequential and direct access)
- 9 = modify an information in directory file
- 10 = plot neutron cross sections
- 11 = plot neutron angular distributions with OENDF (simple form)
- 12 = confirm and plot neutron energy distributions with OENDF
- 13 = confirm and plot photon production cross sections (including angular distributions and energy distributions) with OENDF
- 14 = plot neutron angular distributions with OENDF (detailed form)
- 15 = plot neutron cross sections concerning with resonance parameter comparing with RESENDD

where, OENDF is original evaluated nuclear data file.

5. Confirmation of FSXLIB

It is very important to confirm whether the present processing was well performed. The MCNP continuous cross section libraries have a special feature that the stored cross section data have one-to-one correspondence with the original nuclear data file. Therefore, the confirmation for the MCNP libraries is possible.

5.1 Confirmation Method

The MACROS code was used to confirm the MCNP continuous cross section library, i.e., to compare the cross section data of a certain nuclide between the library and the original nuclear data file. The comparing items are cross sections, angular distributions and energy distributions of secondary neutron and photon. This is the best way to compare directly both numerical data. If it is impossible, the comparison is made by the indirectly way, i.e., to plot both numerical data. The relation between the confirmation method and MACROS input data (ITYPE) is shown in Table 5.1.

The comparison for neutron cross sections was made by the indirectly way. The neutron cross sections are separated into the ones concerning with resonance parameter and the others. The former (total, elastic, fission and radiation capture cross sections) was compared by numerical data with pointwise cross sections produced by the RESEND code⁹⁾, and was also plotted to examine the both shapes and trends. The latter was plotted only to examine both.

The photon production multiplicities were compared directly by numerical data with the original nuclear data, and plotted to examine the shape for the MCNP library. The photon production cross sections were compared by numerical data with the interpolated cross sections of nuclear data, and were also plotted for data examination.

The angular distributions could not be compared numerically with the original ones, because the representation of angular distribution for the MCNP library was the 32 equiprobable cosine bins. Both original and processed distributions are plotted on the same graph to examine the shapes and trends.

The energy distributions were compared directly by numerical data with the original ones. Furthermore, only arbitrary tabulated function of energy distribution was plotted for the fractional probability and cumulative probability to examine the trend.

5.2 Confirmation Result

The confirmation for the FSXLIB-J3 library was performed through the methods described in the previous section. In this process, some problems were found (see Section 3.2), and the processing and confirmation were repeated.

The figures plotted by MACROS in the confirmation process are shown as some instances:

neutron cross sections	Fig. 5.1 - Fig. 5.26,
photon production cross sections	Fig. 5.27 - Fig. 5.37,
angular distributions	Fig. 5.38 - Fig. 5.52,
energy distributions	Fig. 5.53 - Fig. 5.67.

6. Summary

The continuous cross section library for the MCNP code, FSXLIB-J3, was prepared from the JENDL-3 nuclear data file in order to construct the calculation method with a least uncertainty. The NJOY system and the MACROS code were used for preparation of FSXLIB-J3.

The confirmation of FSXLIB-J3 had been done by comparing with the original JENDL-3, and the confidence of this library was established through this confirmation.