

2006核データ研究会

核データチュートリアル(2)
MVPの利用

日本原子力研究開発機構

森 貴正

内 容

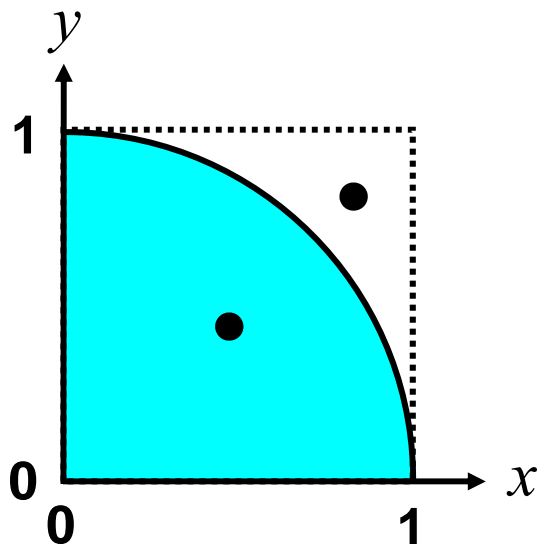
- **モンテカルロ法の基礎**
 - モンテカルロ法による中性子輸送シミュレーション
 - 乱数とサンプリング
 - 物理量の評価法
 - MC法による固有値計算の困難
- **MVPの概要**
 - 機能
 - 幾何形状表現法
 - 物理モデル・核データ表現法
- **MVPの利用例**

モンテカルロ法の基礎

モンテカルロ法とは？

- 乱数(random number)を用いて数学的問題を解く
数値解法
- 統計的手法(確率論的手法) ⇔ 決定論的手法

例：数値積分



ξ_1, ξ_2 は $[0,1]$ の乱数

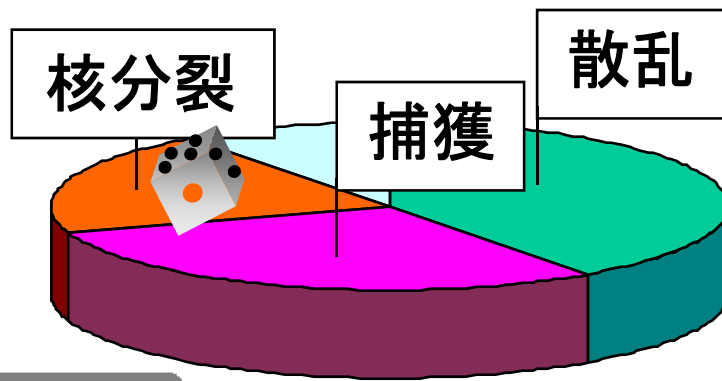
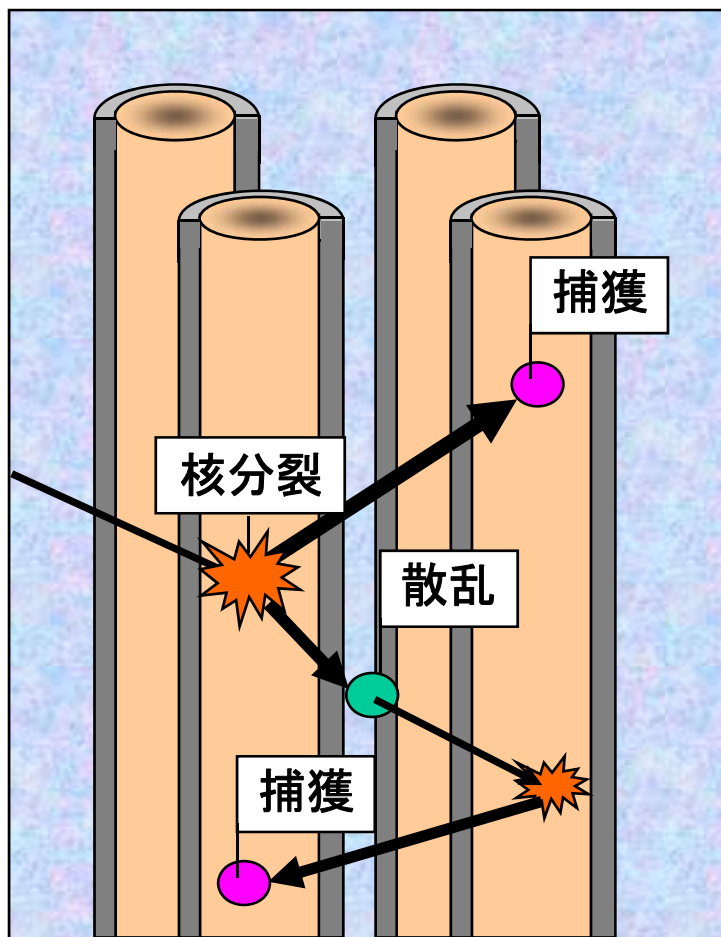
$\xi_1^2 + \xi_2^2 > 1$ → カウントせず

$\xi_1^2 + \xi_2^2 \leq 1$ → カウントする

$$\text{青色の面積} = \frac{\pi}{4} \approx \frac{\text{カウント数}}{\text{総試行回数}}$$

モンテカルロ法による中性子輸送シミュレーション

飛行する個々の中性子を物理法則と核データに従う確率を用いて追跡する(ランダムウォーク)



手順

1. 体系を正確にモデル化
(計算機の中に炉心を構築)
2. 大量の中性子の飛行追跡
3. 統計量から集团的振舞いを評価

本質的な近似が少ない

ランダムウォーク: 自由飛行過程

次の衝突位置までの距離 s の確率密度関数(確率分布)

$$P(s)ds = \Sigma_t(s, E) \exp\left[-\int_0^s ds' \Sigma_t(\mathbf{r}' + s'\boldsymbol{\Omega}, E)\right] ds$$

手順

(1) 無限体系を仮定

$$P(s)ds = \Sigma_t \exp[-\Sigma_t s] ds \Rightarrow s = -\frac{1}{\Sigma_t} \ln(\xi)$$

(2) 領域境界までの距離 d の計算

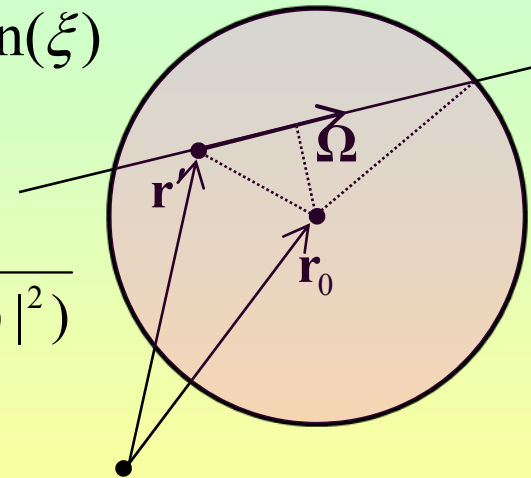
例: 右図(中心 \mathbf{r}_0 、半径 R の球の内部)

$$l = -\boldsymbol{\Omega} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0) \pm \sqrt{R^2 - (|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0|^2 - |\boldsymbol{\Omega} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0)|^2)}$$

簡潔なアルゴリズム $\Rightarrow d$

(3) s と d の比較 \rightarrow 今の領域内で衝突するかどうか決定

(4) 今の領域から出た粒子が入射する領域の探索



ランダムウォーク: 衝突過程

衝突後のエネルギー E と飛行方向 Ω の分布 (連続エネルギー法)

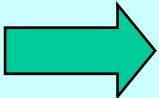
$$C(E \leftarrow E', \Omega \leftarrow \Omega') = \sum_m \underbrace{\frac{\rho^m \sigma_t^m(E')}{\Sigma_t(E')}}_A \sum_r \underbrace{\frac{\sigma_r^m(E')}{\sigma_t^m(E')}}_B \underbrace{v_r^m}_C \underbrace{f_r^m(E \leftarrow E', \Omega \leftarrow \Omega')}_D$$

手順

- (1) 衝突核種の決定 \leftarrow **A**: 核種 m と衝突する確率
- (2) 反応タイプの決定 \leftarrow **B**: 核種 m との衝突で、反応タイプが r である確率
- (3) 衝突から現れる粒子数の決定
 \leftarrow **C**: 核種 m 、反応タイプ r の衝突から出てくる粒子数の期待値
- (4) 衝突後のエネルギーと飛行方向の決定
 \leftarrow **D**: 核種、反応毎の確率分布
弾性散乱等: 散乱角分布 + エネルギー・運動量保存則
その他: 散乱角・エネルギー分布

モンテカルロ法の特徴

利点

- 確率的な事象を忠実に模擬しているので、近似が少ない。
 - 位相空間を離散化する必要がない。
 - 体系を正確に(as built)に模擬できる。
 - 連続エネルギー的取り扱いが可能。
-  **ほぼ核データの精度で計算できる。**

欠点

- 統計的手法であるので解にばらつきがある。
- 解の精度を上げるために試行回数を増やさなければならない。
- 計算時間がかかる。

乱数とサンプリング

積算確率を用いる方法

確率密度関数 $f(x)$: $f(x) \geq 0$, $\int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) = 1$,

積算確率関数 $F(x)$: $F(x) = \int_{-\infty}^x dx f(x)$, $\frac{dF(x)}{dx} = f(x)$.

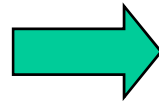
確率変数 $\rho = F(x)$, **その確率密度関数を** $p(\rho)$

$$p(\rho)d\rho = f(x)dx, \quad d\rho = \frac{dF}{dx} dx = f(x)dx$$

$$p(\rho) = 1 = \text{一定} \quad (0 \leq \rho \leq 1).$$

一様乱数 ξ ($0 \leq \xi \leq 1$).

$\xi = F(x)$ を満たす x



$f(x)$ からのサンプリング

離散的事象 $\sum_{i=1}^{k-1} P_i < \xi \leq \sum_{i=1}^k P_i, \quad (k \leq n) \rightarrow$ **事象 k を選択**

その他の種々のサンプリング法

参考文献3): "A Monte Carlo Sampler", LA-5061-MS(1972)

例1: Evaporation spectrumからのサンプリング

$$f(E) \propto E \exp(-E/T), \quad T: \text{核温度}$$



$$E = -T \ln(\xi_1 \cdot \xi_2), \quad \xi_1, \xi_2: \text{一様乱数}$$

例2: Simple fission spectrumからのサンプリング

$$f(E) \propto \sqrt{E} \exp(-E/T), \quad T: \text{核温度}$$



$$E = -T \left\{ \ln \xi_3 + \ln \xi_1 \cdot \cos^2 \left(\frac{\pi}{2} \xi_2 \right) \right\}, \quad \xi_1, \xi_2, \xi_3: \text{一様乱数}$$

粒子輸送モンテカルロ法で用いられる乱数： 合同乗算法(Linear Congruential Generator)

- Lehmerによって提案(1951)
- 乱数 ξ は次の漸化式により生成

$$S_i = (aS_{i-1} + c) \bmod m$$

$$\xi_i = \frac{S_i}{m}$$

- $c = 0$ のとき乗算合同法 (multiplicative CG)
- $c \neq 0$ のとき混合合同法 (mixed CG)

粒子輸送MCコードの線形合同法

コード名	m	a	c	周期
MCNP5 (default)	2^{48}	5^{19}	0	2^{46}
(optional)	2^{63}	9,219,741,426,499,971,445	1	2^{63}
		2,806,196,910,506,780,709	1	2^{63}
		3,249,286,849,523,012,805	1	2^{63}
MCNP (Version 4)	2^{48}	5^{19}	0	2^{46}
MVP (Version 2)	2^{63}	9,219,741,426,499,971,445	1	2^{63}
MVP (Version 1)	2^{31}	32771	1,234,567,891	2^{31}
RACER	2^{47}	84,000,335,758,957	0	2^{45}
VIM	2^{48}	5^{19}	0	2^{46}
MORSE	2^{47}	5^{15}	0	2^{45}
RCP	2^{48}	2^9+1	59,482,192,516,946	2^{48}

物理量の評価法(エスティメータ)

中性子束の評価によく用いられる方法

● 飛程長エスティメータ

小領域 V 内の各トラックからの
寄与 $W_i \cdot l_i / V$ の総和

➡ 領域 A の平均中性子束

● 衝突エスティメータ

小領域 V 内の各衝突からの
寄与 $W_i / \Sigma_{t,i} / V$ の総和

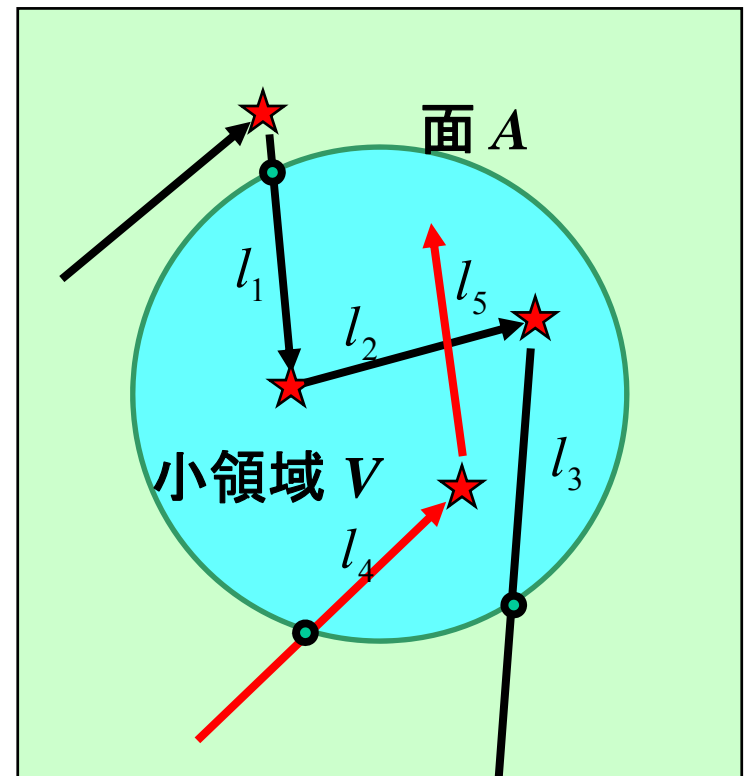
➡ 領域 A の平均中性子束

● 面交差エスティメータ

面 A を横切る毎の寄与 $\frac{W_i}{A |\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Omega}_i|}$

の総和 ➡ 面 A での平均中性子束
(カレント評価にも利用可)

計算体系



固有値 (keff) 計算に用いられる方法

核分裂源反復 世代毎の追跡

- 核分裂で中性子の一生は終了
- 発生する核分裂中性子を保存 → 次世代の線源
- 核分裂源分布の収束後 → 実効増倍率等の評価

実効増倍率keffの評価法

● 中性子増倍による評価

$$k_{eff} = \frac{\text{核分裂により生成される中性子の重み}}{\text{源の中性子の総重み}} = \frac{\int v \Sigma_f \phi dE d\mathbf{r}}{\text{source neutrons}}$$

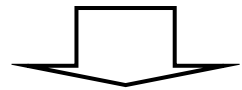
● 中性子バランスによる評価

$$k_{eff} = \frac{\text{核分裂により生成される中性子の重み}}{\text{漏れ + 正味の吸収}} = \frac{\int v \Sigma_f \phi dE d\mathbf{r}}{\text{leakage} + \int \Sigma_{loss} \phi dE d\mathbf{r}}$$

- 断面積を含む項は飛程長エスティメータ等で評価
漏れは面交差エスティメータで評価

誤差評価（期待値と分散の推定）

- n回の試行 → n個のサンプル X_i
- サンプル間の独立性を仮定



期待値の推定:
$$\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$$

分散の推定:
$$\sigma(\bar{X})^2 = \frac{1}{n(n-1)} \sum_{i=1}^n (X_i - \bar{X})^2$$

$$= \frac{1}{n-1} \left(\overline{X^2} - \bar{X}^2 \right), \quad \overline{X^2} = \frac{\sum_{i=1}^n X_i^2}{n}$$

MC法による固有値問題の困難(1)

- 固有値の分散のバイアス
 - 世代(バッチ)間の相関があるために固有値の分散は過小評価される。
 - スーパーヒストリー法
 - Ueki等の方法(MVPで採用している方法)
 - 時系列解析法
- 収束判定
 - 線源分布(核分裂源分布)が何世代(バッチ)で収束するのか分からない。
 - 収束の速さはドミナンス比に依存する。
 - 核分裂源分布の収束は固有値の収束より遅い。

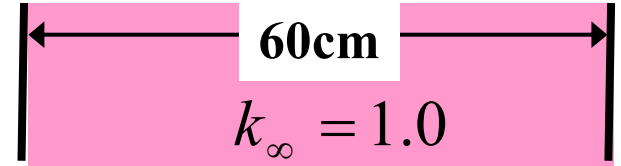
数値計算例: 分散のバイアス

	σ_R^2 / σ_A^2
Case#1	1.43
Case#2	2.13
Case#3	3.07
Case#4	5.62

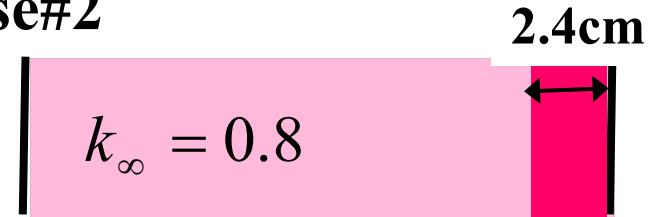
● σ_A^2 : 500ラン毎の $\sigma_{S,i}^2$ の単純平均

● σ_R^2 : 500ラン毎の k_i のばらつきから

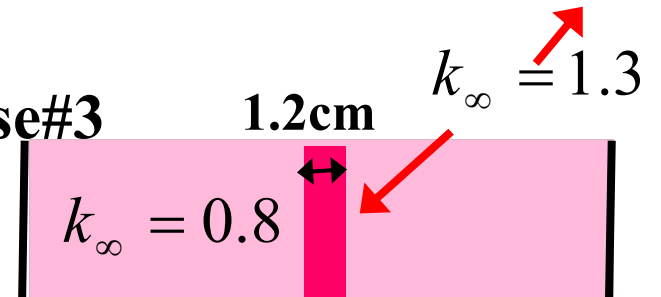
Case#1 一次元平板



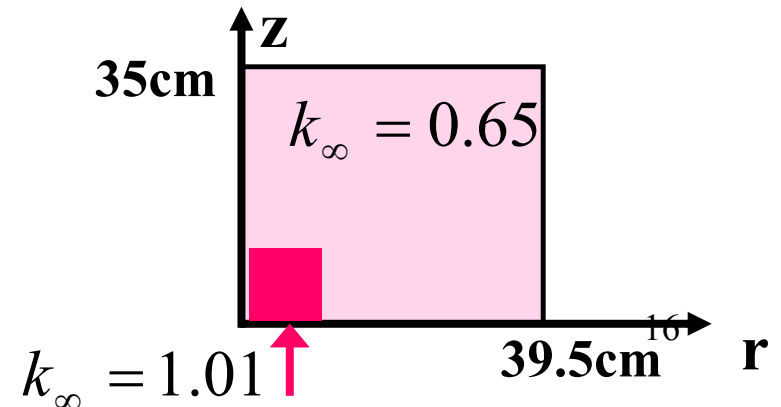
Case#2



Case#3



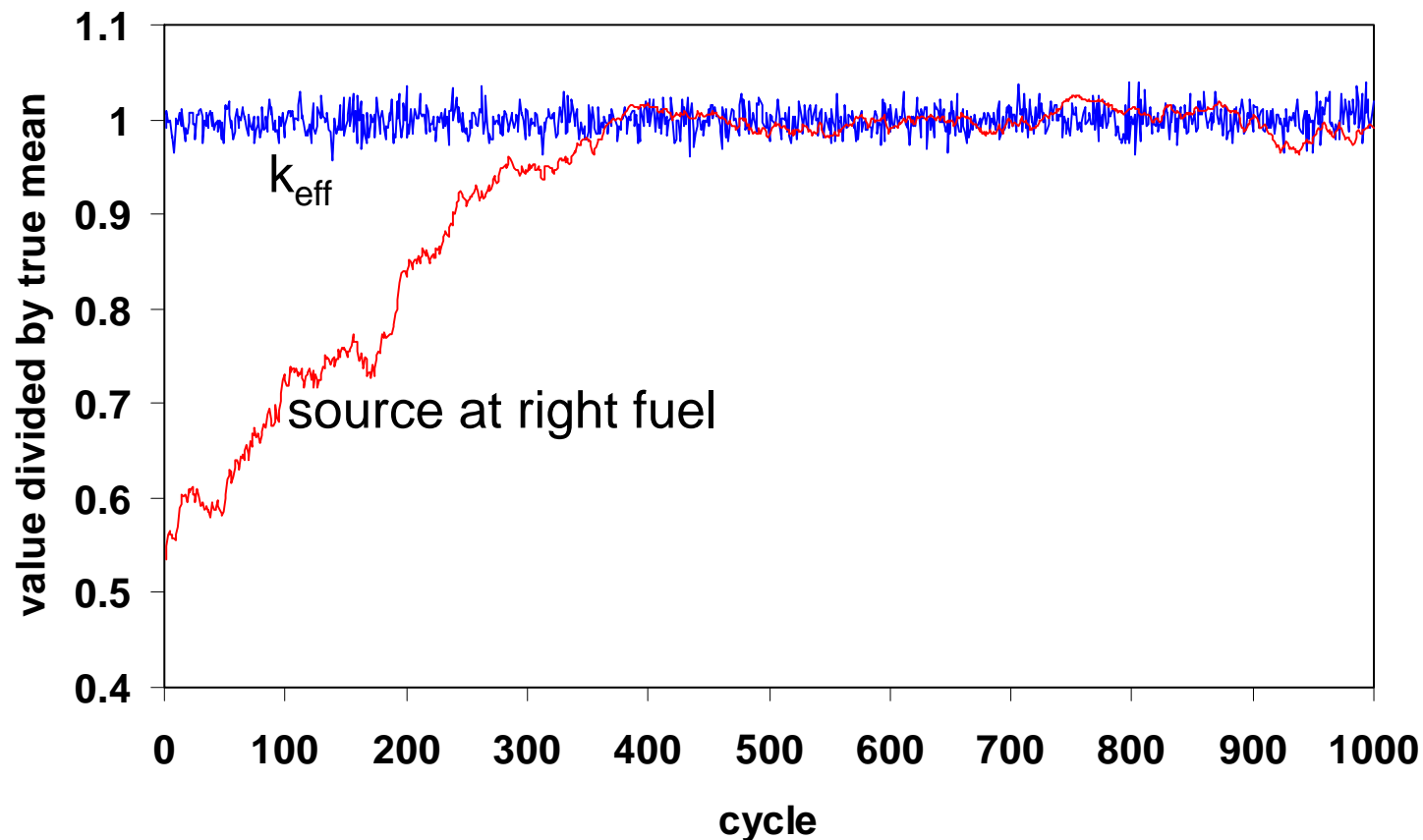
Case#4 3次元円筒



数値計算例：固有値と核分裂源分布の収束性

- K_{eff} is an integral quantity - converges faster than source shape

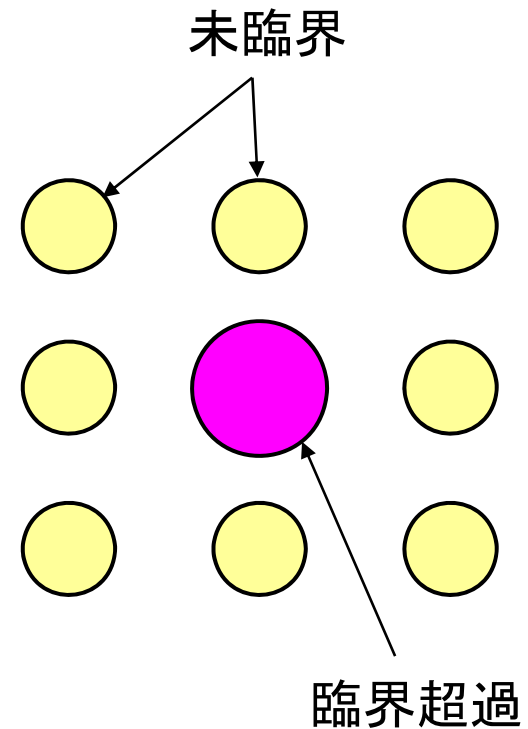
**K_{eff} calculation for 2 nearly symmetric slabs,
with Dominance Ratio = .9925**



Cited from F. Brown's viewgraph at Monte Carlo 2005. Calculated by T. Ueki, UNM¹⁷

MC法による固有値問題の困難(2)

- アンダーサンプリング
 - Whitesidesによって提案された”k-eff of the world”の問題
 - 結合の弱い体系
 - 中性子が入射しないユニットがあることにより、固有値が正しく評価されない。
 - バッチサイズを大きくする。
 - Stratified Sampling



MVPの概要

- MVP : (**M**onte Carlo code for **V**ector **P**rocessors)
 - 連続エネルギー法に基づく汎用モンテカルロコード
- GMVP : (**G**roup-wise **M**onte Carlo code for **V**ector **P**rocessors)
 - 多群法の基づく汎用モンテカルロコード
- 1980年代後半より日本原子力研究機構で開発されているモンテカルロコード。
- 1994年に第1版を国内公開。2005年に第2版を世界に向けて公開。
- MVP/GMVPコードではベクトル計算に適したアルゴリズムを採用。
(事象駆動型アルゴリズム ⇔ ヒストリー駆動型アルゴリズム)
- ベクトル計算機上ではスカラーモンテカルロコードより10倍以上の高速化を達成。(スカラー計算機では計算速度はほぼ同じ。)
- 汎用並列化ライブラリーMPI, PVMを用いた並列化にも対応。

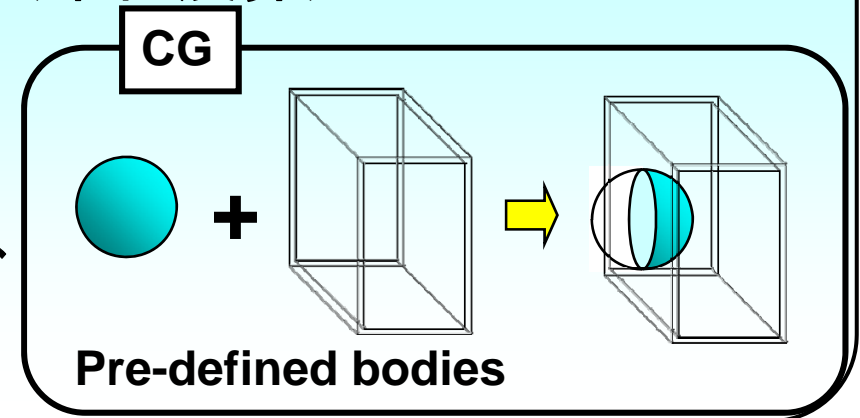
MVPの機能

- 解く問題： 中性子・光子輸送に対する固有値・固定源問題。
時間依存問題も可能。
- エネルギー範囲： 中性子 10^{-5} eV – 20MeV, 光子1keV – 100MeV
- 幾何形状表現： 組み合わせ幾何形状表現(CG)、多重格子形状。
- 粒子源表現： 多数のサンプリング関数により柔軟な指定が可能。
- 断面積：
 - ✓ LICEMコードによって評価済み核データから処理された専用のライブラリを使用。(JENDL-3.3, END/B-VII, JEF-3.1, etc.)
 - ✓ 任意温度における計算が可能。
- 分散低減法： ロシアン・ルーレット、スプリットティング、インポートランス、ウエイト・ウィンドウ、パス・ストレッチング、線源バイアス
- エスティメータ： 飛程長、衝突、面検出器、点検出器が利用可能。
固有値はいくつかの評価法より最尤法により評価。Uekiの方法による真の分散の推定。

MVPの幾何形状表現法

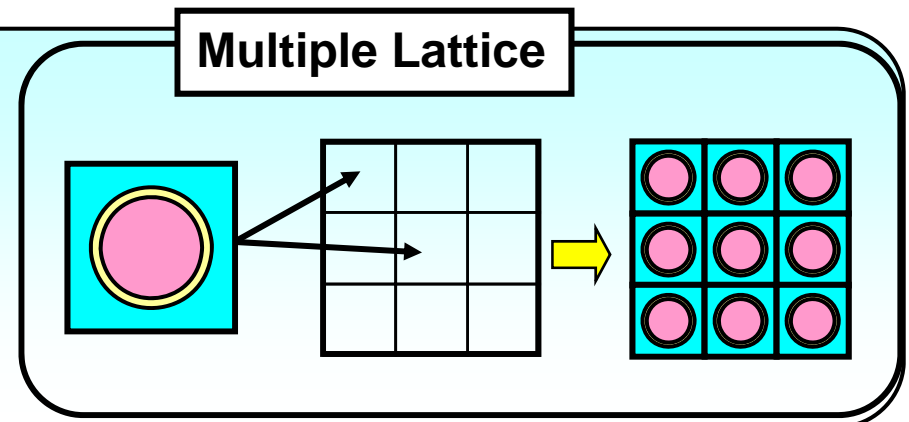
組合わせ形状表現 (CG)

- Bodyと呼ぶ単位形状の組合せ (集合演算) で幾何形状を表現
- 利用できるBody
直方体、円柱、球、円錐台、三角柱、平行六面体、正六角柱、トーラス、一般二次曲面など



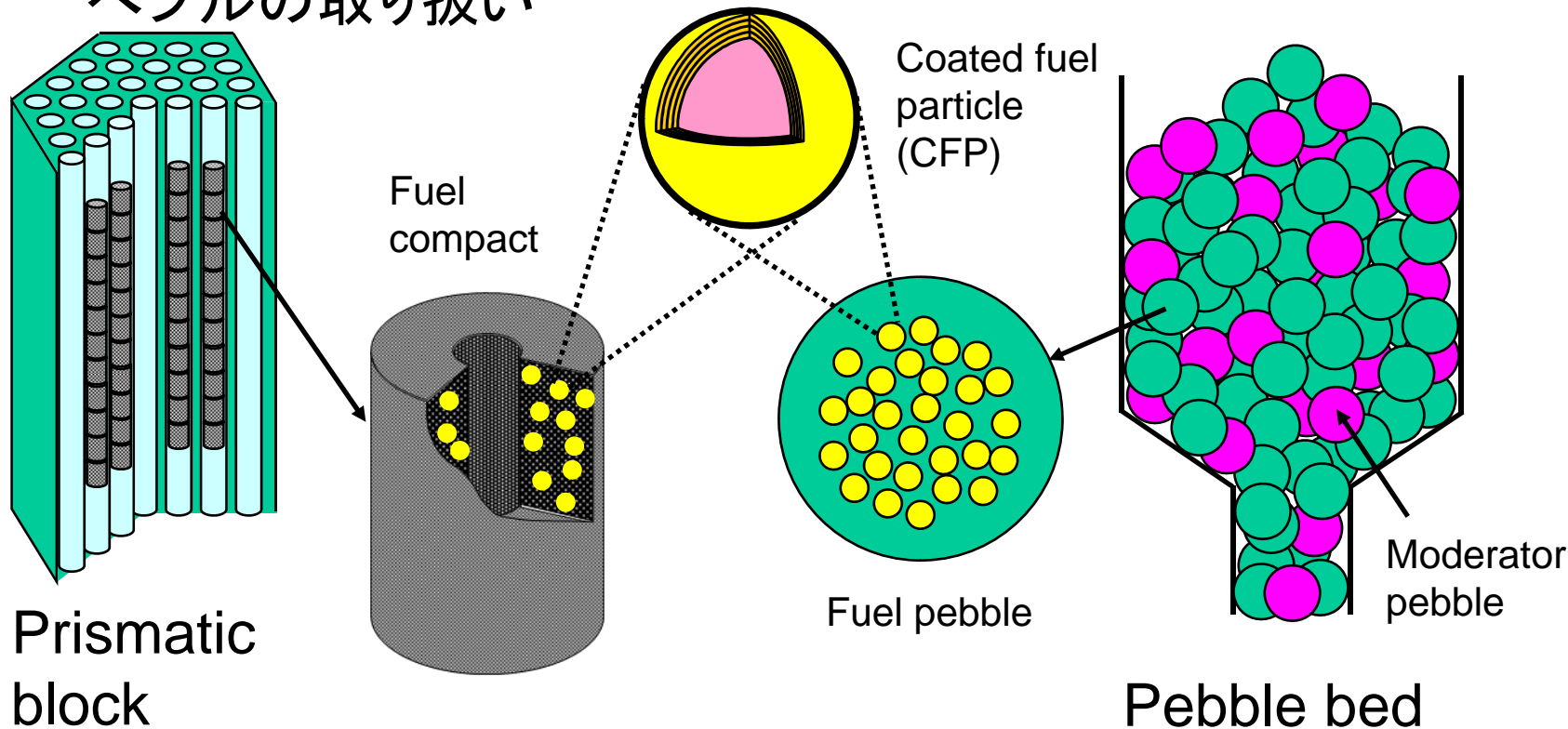
多重格子表現

- 複雑な繰り返し形状の表現
- 多重の四方及び六方格子



確率論的幾何形状モデル(1)

- 高温ガス炉(HTR)の開発
- 膨大な数のランダムに分布する被覆燃料粒子(CFP)、燃料ペブルの取り扱い



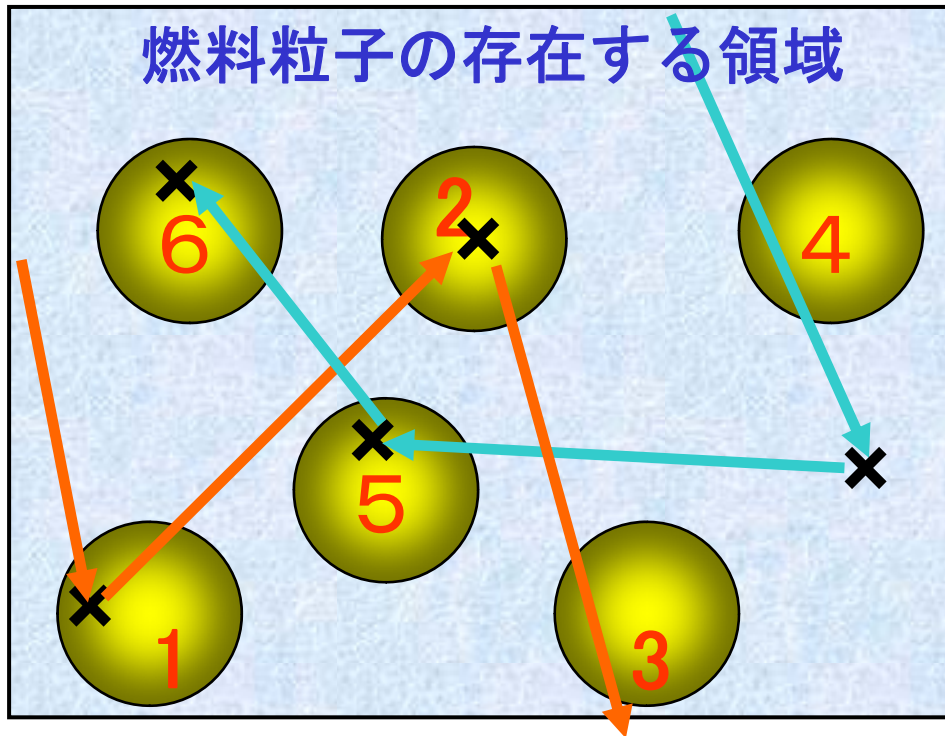
- 個々の粒子位置を知る事は困難
- 入力データ作成が困難
- 非均質性は炉心特性に重要



幾何形状の確率論的取り扱い

確率論的幾何形状モデル(2)

個々の中性子に対して燃料粒子を確率分布(最近接セル分布、NND)を用いて順次配置しながら追跡する



× 原子核との衝突

注目する中性子の飛行に関する燃料粒子のみを配置する

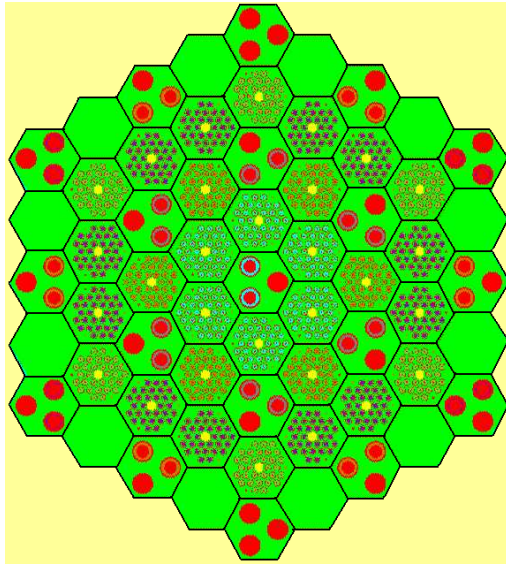
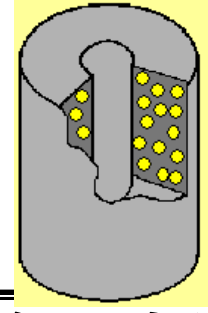
使用するNND

- (1) モンテカルロ最密充填法 (MCRDFコード)
- (2) 統計的一様性を仮定した理論的近似式

$$\frac{dNND(r)}{dr} = \frac{3}{2} \cdot \frac{f_p}{1-f_p} \cdot \exp\left(-\frac{3}{2} \cdot \frac{f_p}{1-f_p} \cdot r\right)$$

f_p : 充填率 23

計算例：HTTR全炉心解析



30燃料カラム装荷炉心

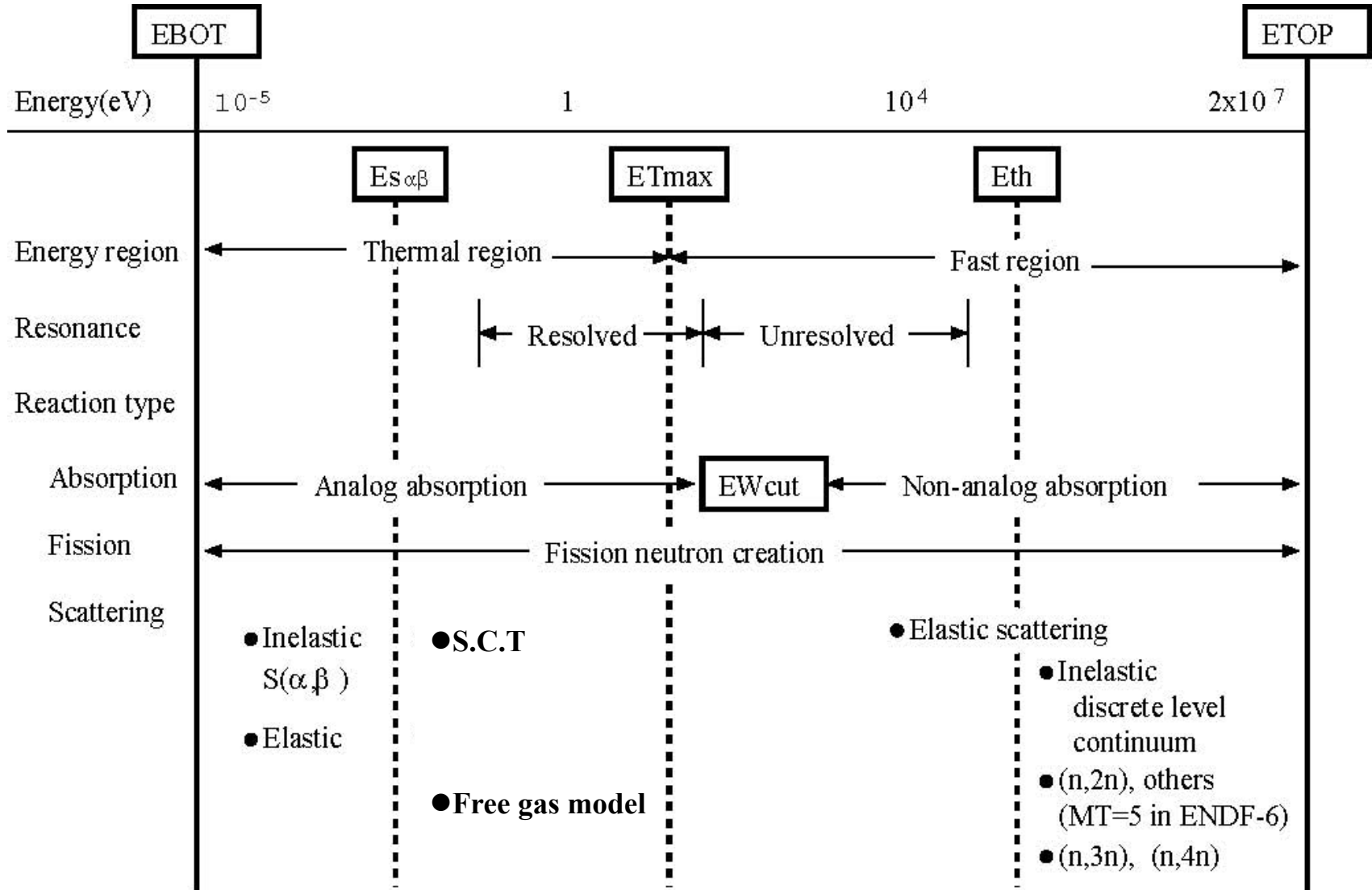
	均質モデル	確立論的幾何形状モデル
実効増倍率 (k)	0.98975 ±0.09%	1.00092 ±0.14%
非均質効果 (% $\Delta k/kk'$)	————	1.13±0.14
追跡粒子数	93 万	47 万
計算時間 (VPP-500)	10 時間	12 時間

*JENDL-3.2 を使用

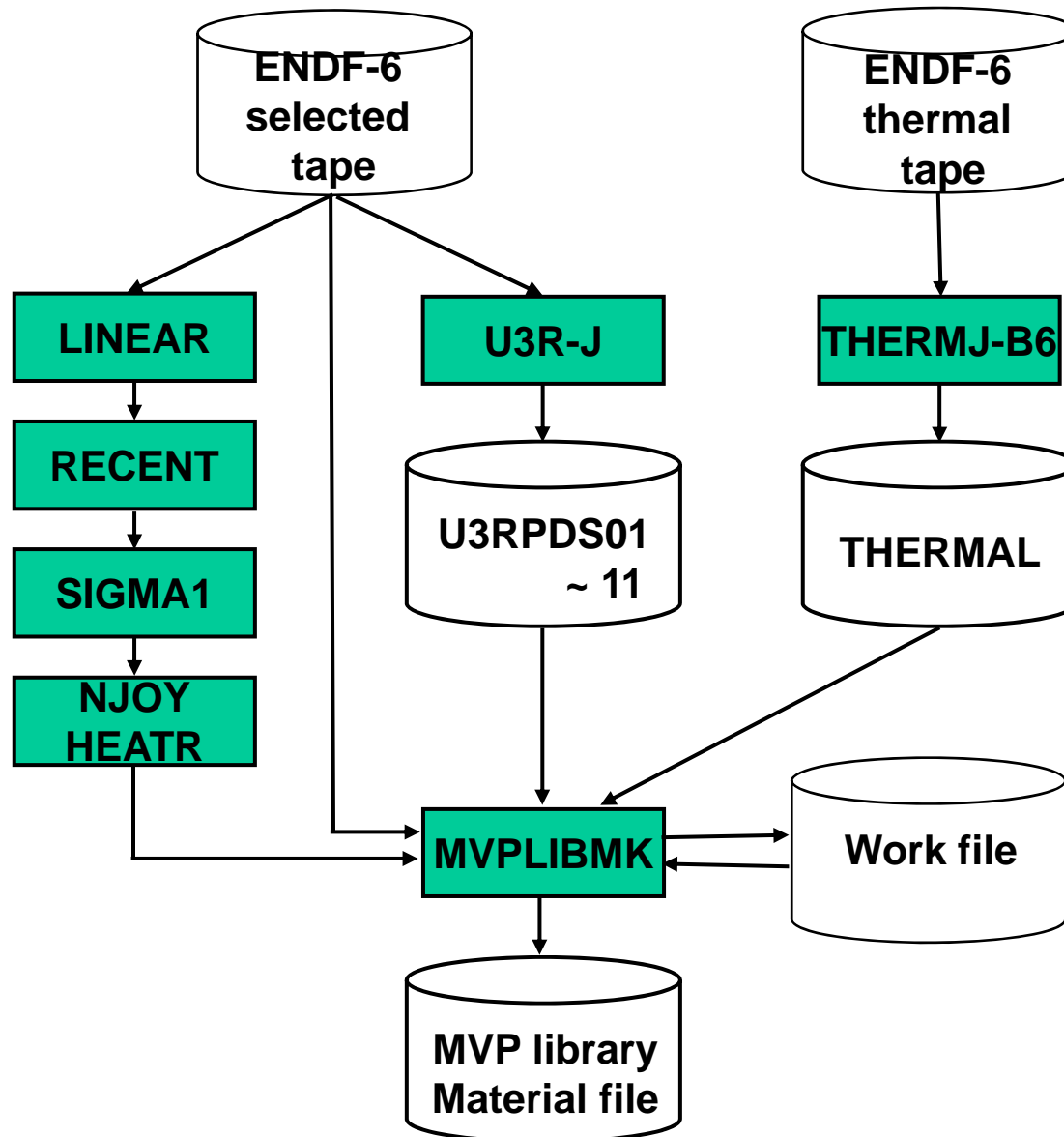
Cf. 21カラム装荷炉心における非均質効果
 $0.52 \pm 0.04 \text{ } \% \Delta k/kk'$
 (HTTR/安藤氏等)

MVPの物理モデル・核データ表現法

ENDF-6形式で表現されたデータのほぼ全てを利用

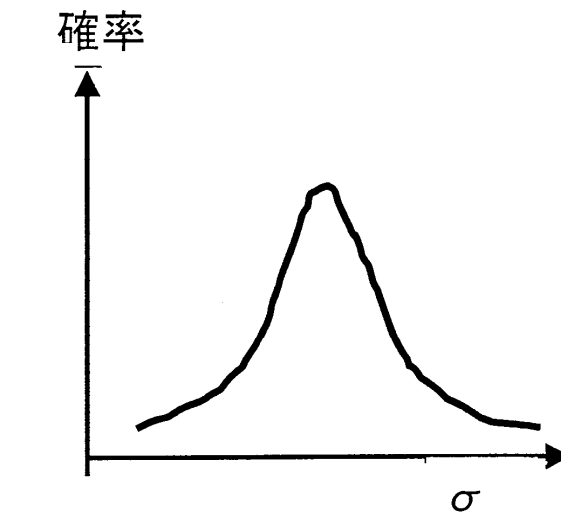
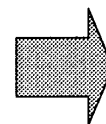
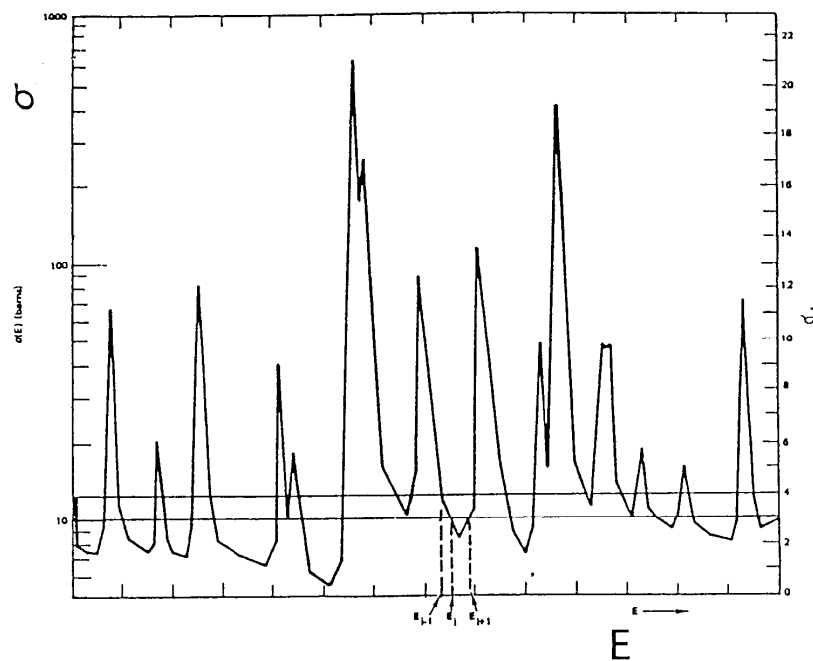


MVPライブラリー作成システム: LICEM

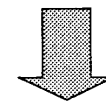


中性子反応断面積

- 分離共鳴領域 + スムーズ断面積
 ➡ 線形内装可能な **point-wise断面積**
- 非分離共鳴領域 ➡ **断面積確率テーブル**



テーブル化

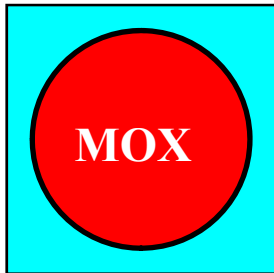


モンテカルロ法によって発生させた
ラダーの例 (ドップラー)

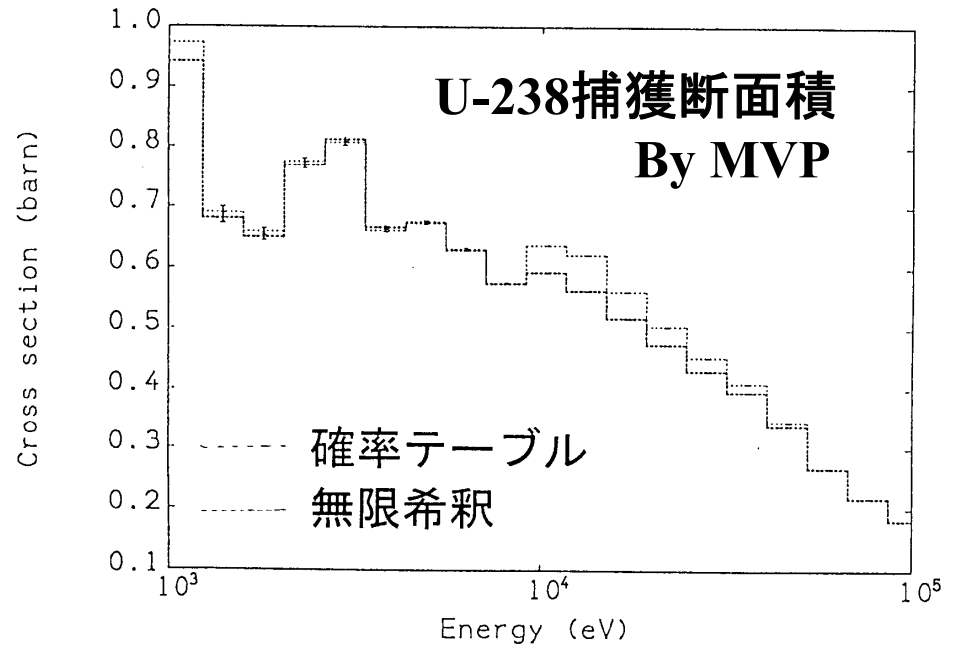
断面積確率テーブル
(温度毎)

断面積確率テーブル法の効果

NEA/NSC MOX燃料
PWRベンチマーク



PWRセル



	k-infinity	
	非ボイドセル	ボイドセル
確率テーブル	1.2160 ± 0.03%	1.2694 ± 0.02%
無限希釈断面積	1.2155 ± 0.03%	1.2612 ± 0.02%
Δk	0.0004	0.0082 ± 4.4%

v値 (MF=1)

評価済み核データに従う

- 多項式表示
- テーブル表示 → 線形内挿可能なエネルギー一点

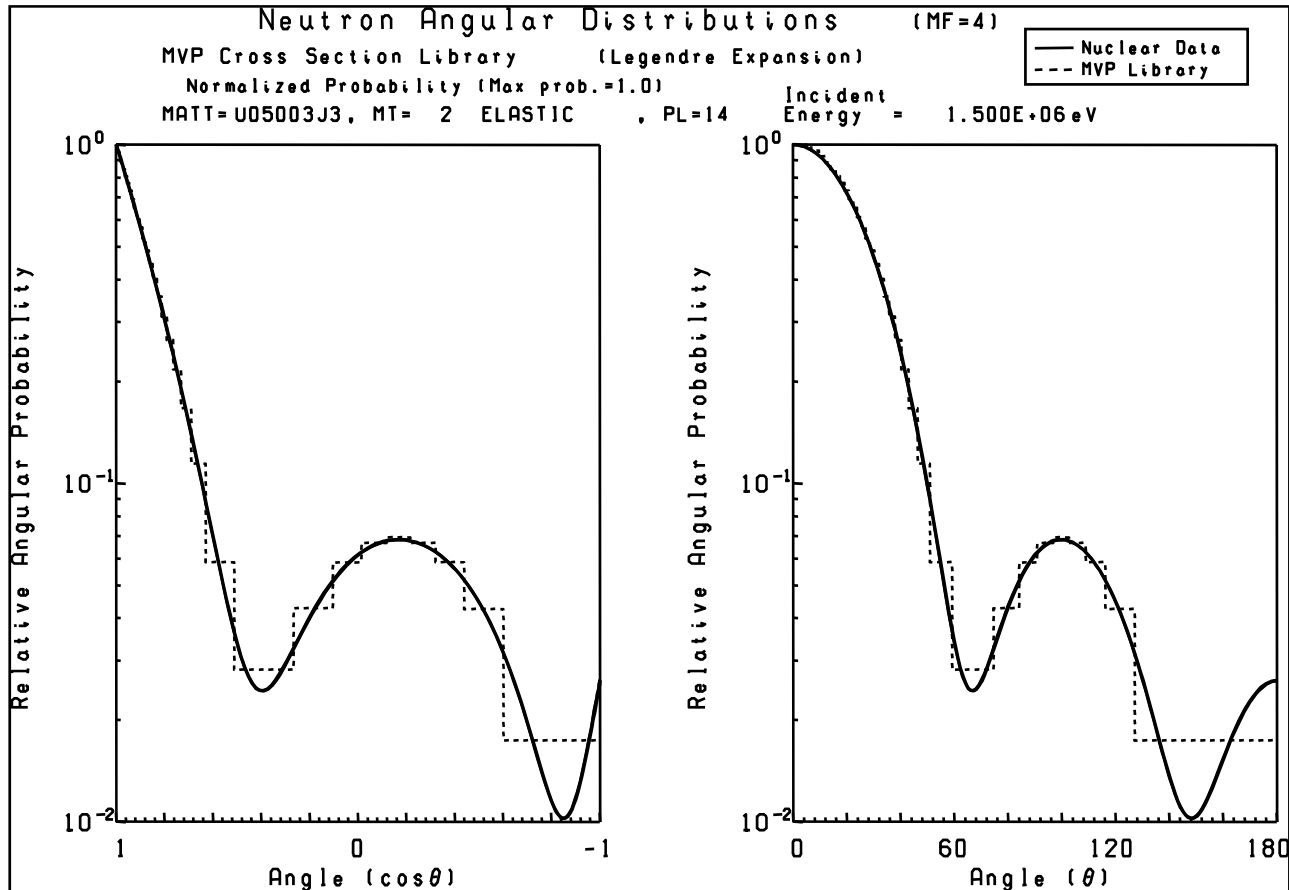
遅発中性子のデータ (MF=1、MF=5)

評価済み核データに従い、 v_d 値、 λ_i , β_i , $\chi_{d,i}$ を格納

- v_d 値: v 値と同じ表現
- β_i , $\chi_{d,i}$: エネルギー分布 (サブセクション)

角度分布 (MF=4)

- テーブル表示 → 32個の等確率ビンで表現
(熱中性子散乱を除く、核分裂は等方を仮定)



エネルギー分布 (MF=5)

評価済み核データに従う

➤ テーブル形式 (LF=1、5)

入射エネルギー毎に、線形内挿可能2次エネルギービン
に対するテーブル (内挿法に従い使用するテーブルを選択)

➤ 関数形式 (LF=7(Maxwellian)、9(Evaporation)、11(WATT))

➤ Madland and Nix fission spectrum (LF=12)

テーブル形式に変換 (LF=1と同じ)

角度エネルギー分布(MF=6)

評価済み核データに従い、次の形で取り扱う

- Kalbach-87分布
- 多体フェーズスペース分布
- 実験室系角度エネルギー分布
- 角度分布のみ(2体反応角度分布)

熱中性子散乱データ

- 干渉性弾性散乱 (MF=7、MT=2、LTHR=1)
評価済み核データ(ブラッグエッジエネルギー等)をそのまま利用
- 非干渉性弾性散乱 (MF=7、MT=2、LTHR=2)
評価済み核データ (Debye-Waller integral) → 32の等確率ビン ($\mu_1 \leq \mu_{\text{Lab}} \leq \mu_{\text{N}+1}$)、エネルギーは変化せず。
- 非干渉性非弾性散乱 (MF=7、MT=4)
162のエネルギー点 (10-5 ~ 12eV) に対する散乱マトリックス
各エネルギートランスファーに対する角度分布: Double P1近似:
5つの事象 (前方 ($\mu > 0$) 等方、後方 ($\mu < 0$) 等方、 $\mu=1, 0, -1$) に対する確率を与える
- Free gas model
マックスウェル分布の標的原子核と中性子が重心系等方散乱

任意温度における計算の準備

New Data Processing Scheme

JENDL-3.3

New LICEM

New MVP library

Interpolation parameters

- Thermal scattering data
- Data in the unresolved resonance region

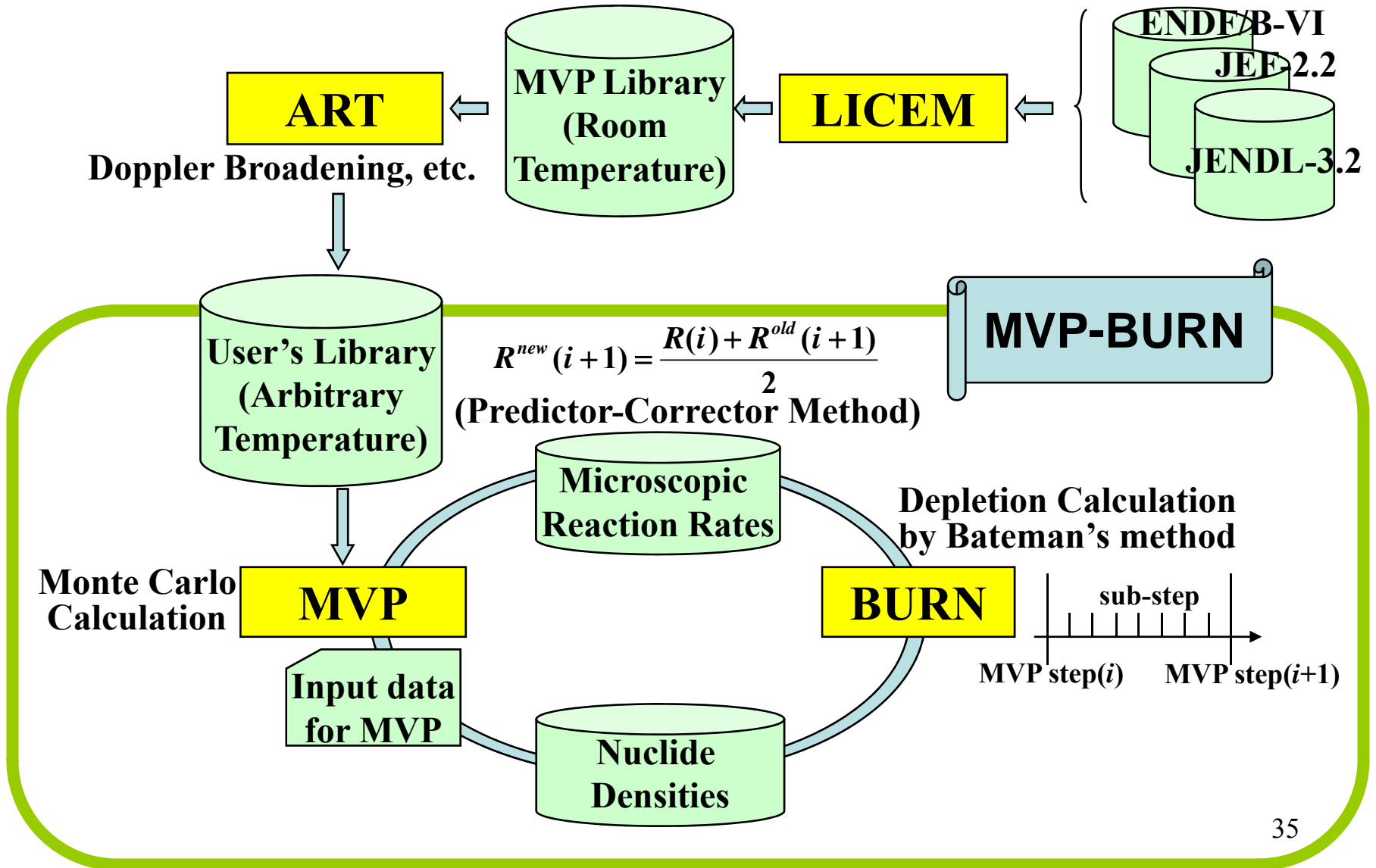
MVP code

ART code

- Doppler broaden data in the resolved resonance region
- Interpolate data for thermal scattering/unresolved resonance

```
$CROSS SECTION  
& IDMAT( 1 )  
  TEMPMT( 600.0 )  
  U02350J33( 5.070E-5 )  
  U02380J33( 1.685E-2 )  
$END CROSS SECTION
```

MVP-BURNにおける燃焼計算手法



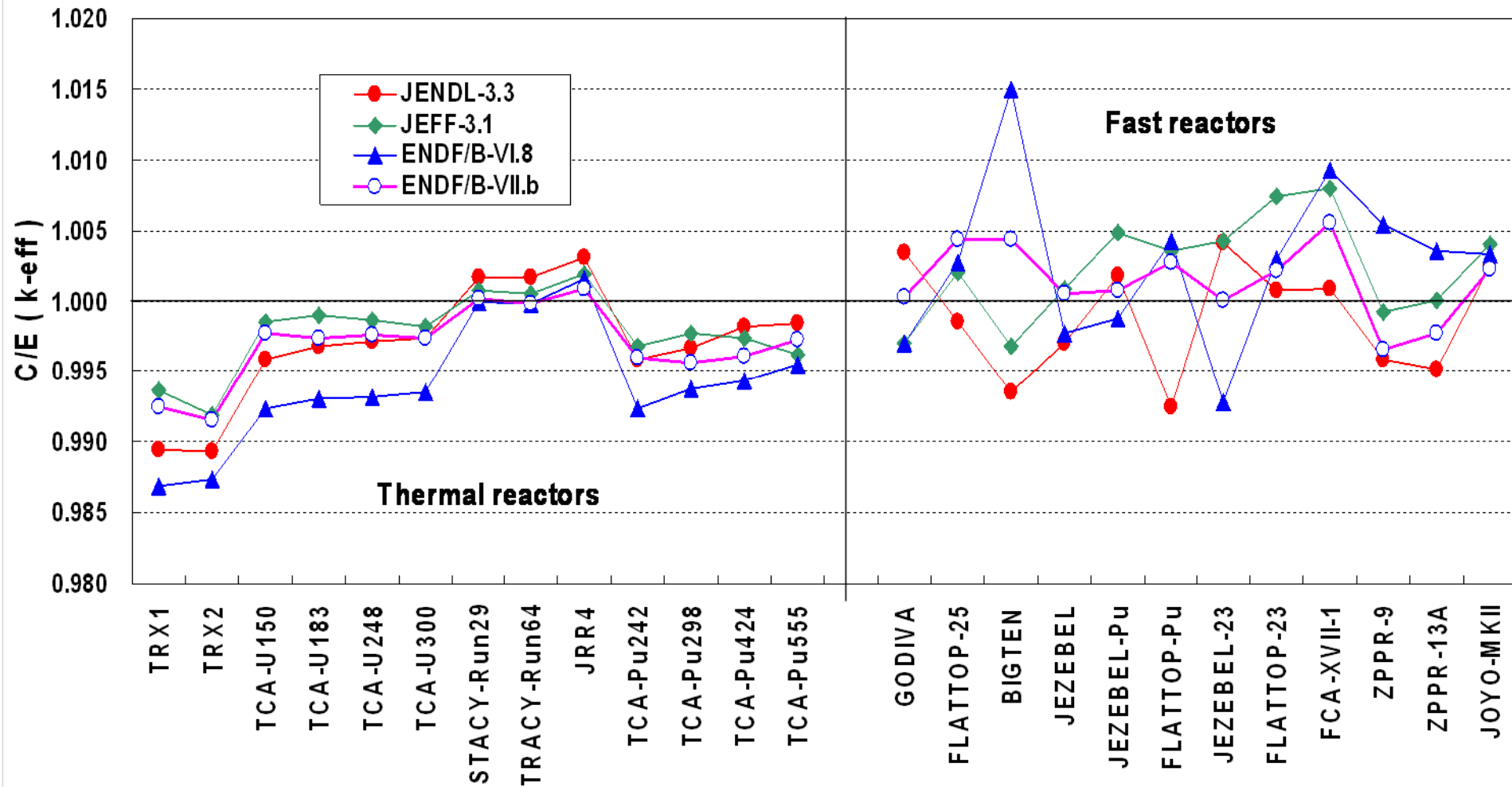
MVPの利用例

- 核データの積分テスト
- 詳細な実験解析
- 決定論的手法の検証と補完

核データの積分テスト

by K. Okumura (2006)

C/E value of keff with a Continuous-Energy Monte Code MVP

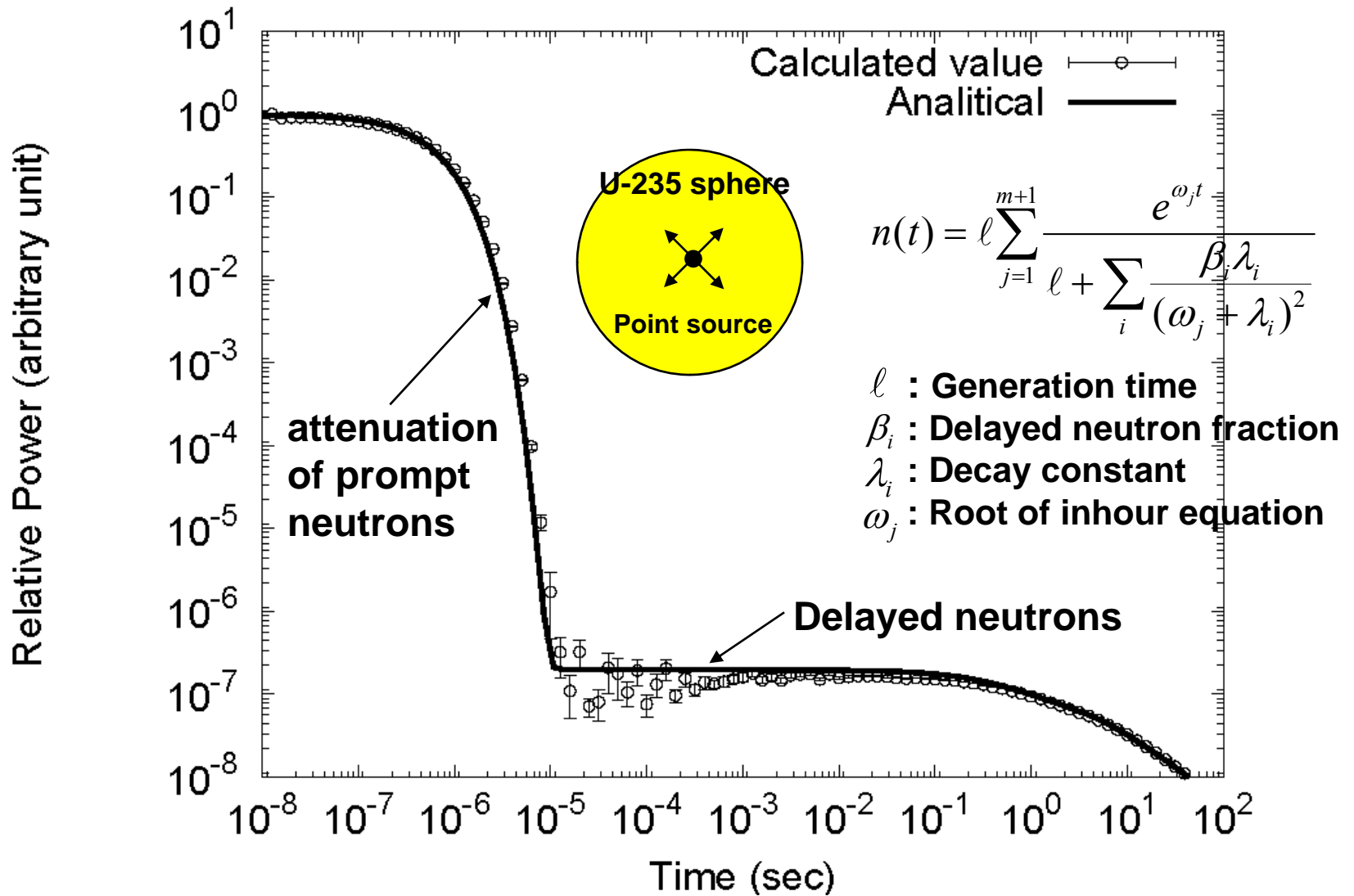


遅発中性子スペクトルの効果 (by Y. Nagaya)

ケース	燃料	漏れ	Δk (DNあり-なし)(1 σ)
Godiva	高濃縮U	57%	0.00012 (0.00003)
ORNL-10	高濃縮U	7%	0.00039 (0.00003)
BIGTEN	中濃縮 (10% ²³⁵ U)	11%	-0.00183 (0.00005)
TCA(1.83U)	低濃縮U 19×19	4%	0.00079 (0.00008)
TCA(3.00U)	低濃縮U 19×19	6%	0.00069 (0.00008)
Jezebel	Pu	67%	-0.00023 (0.00003)
Pu(NO ₃) ₄	Pu	7%	0.00008 (0.00004)

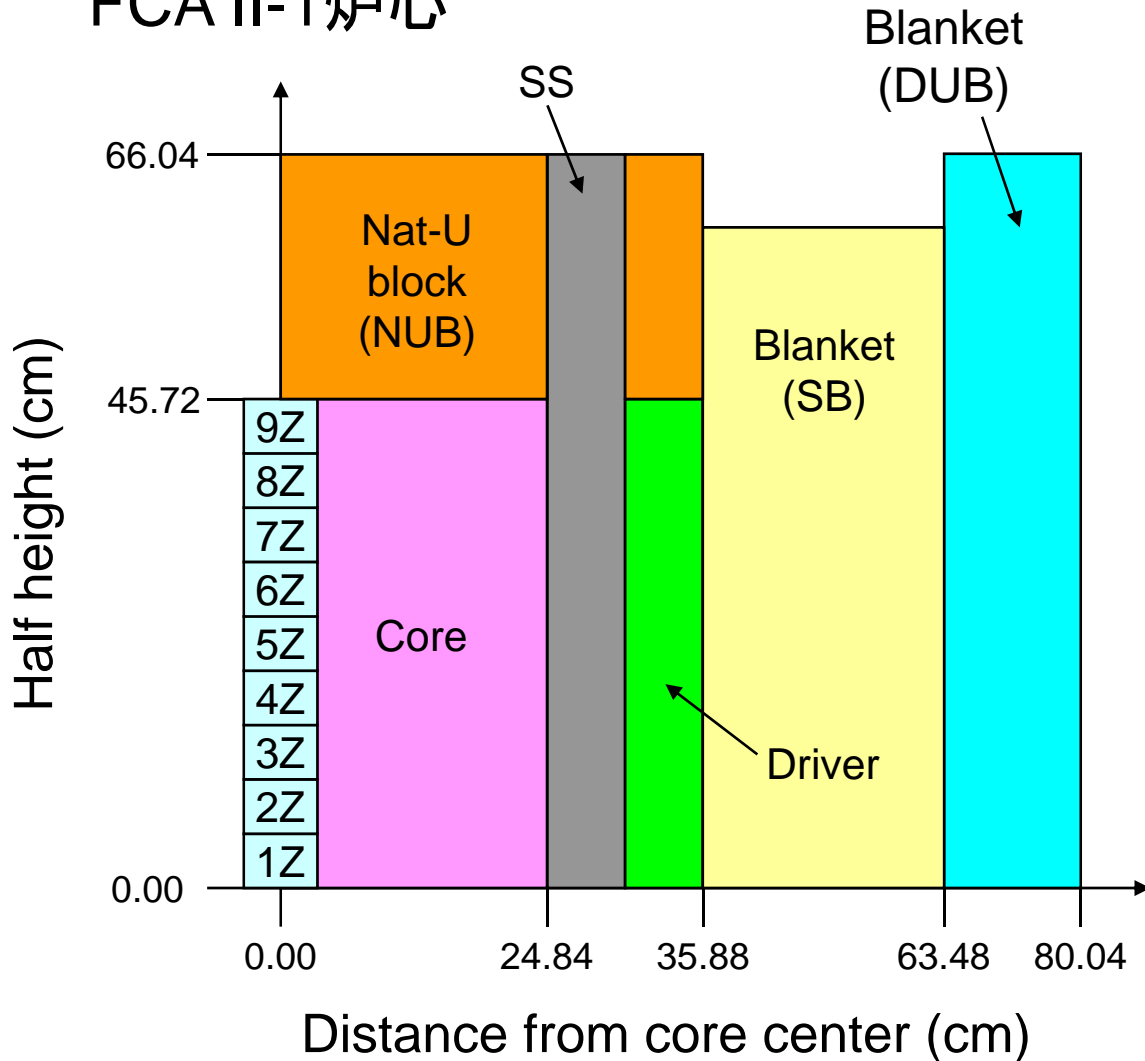
ICSBEPベンチマークから選択。DNあり、なしでそれぞれ10回ずつ実行³⁸

遅発中性子 (by Y. Nagaya)



FCAボイド反応度値測定実験の詳細解析

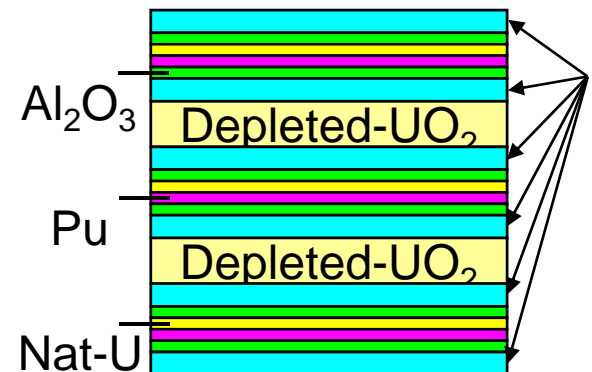
FCA II-1炉心



ボイド反応度値測定で置換された領域

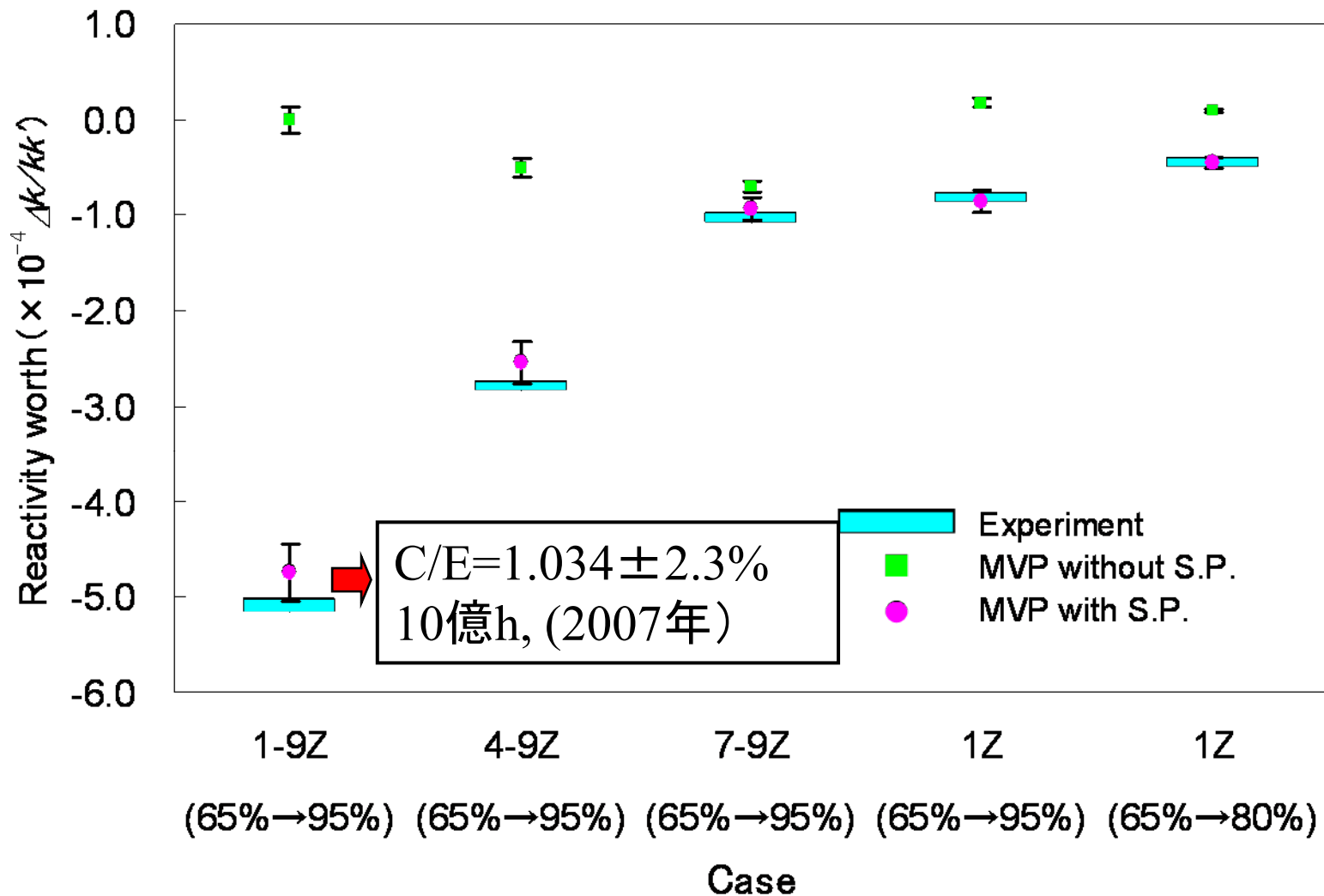
- 1-9Z (65%→95%)
- 4-9Z (65%→95%)
- 7-9Z (65%→95%)
- 1Z (65%→95%)
- 1Z (65%→80%)

ポリスチレン板



ボイド反応度価値

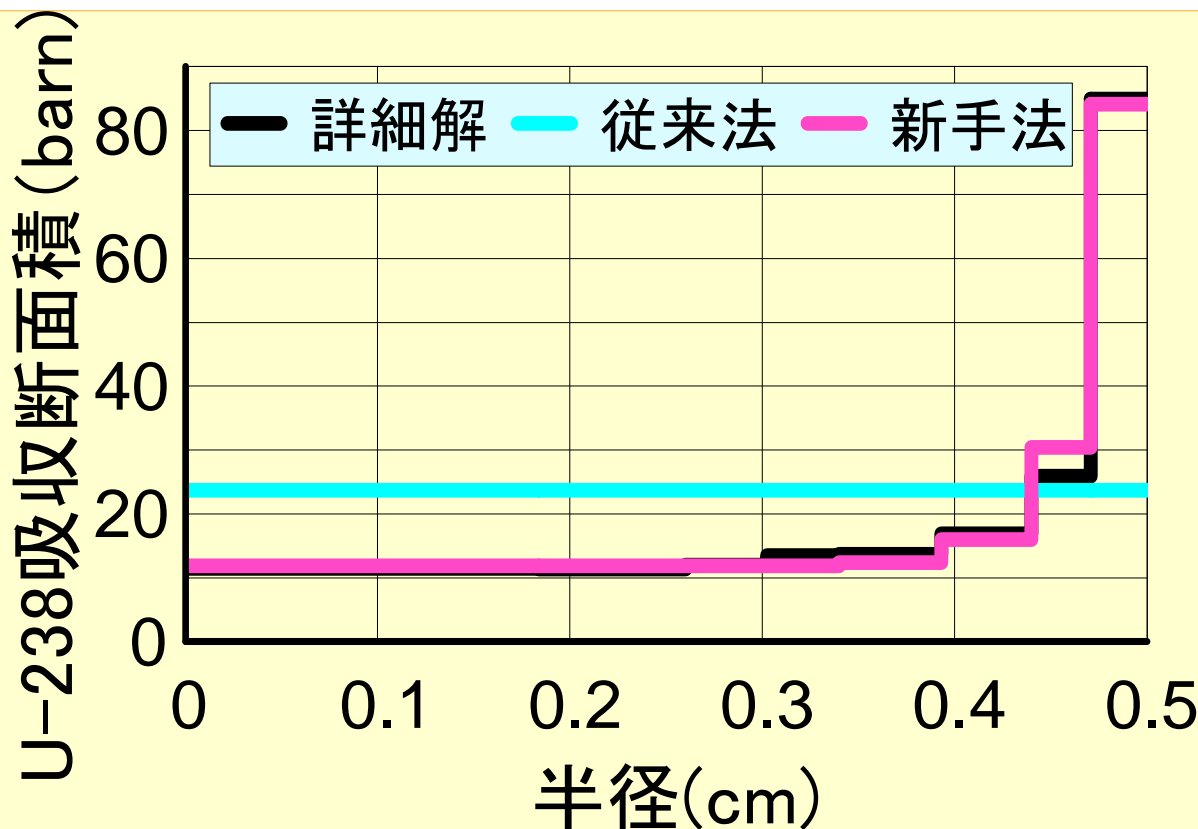
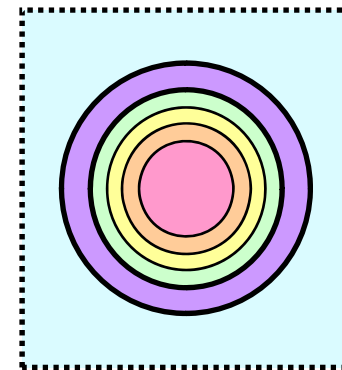
(微分演算子サンプリング法、JENDL-3.3)



空間依存共鳴吸収計算法の計算精度の検証

By T. Kugo

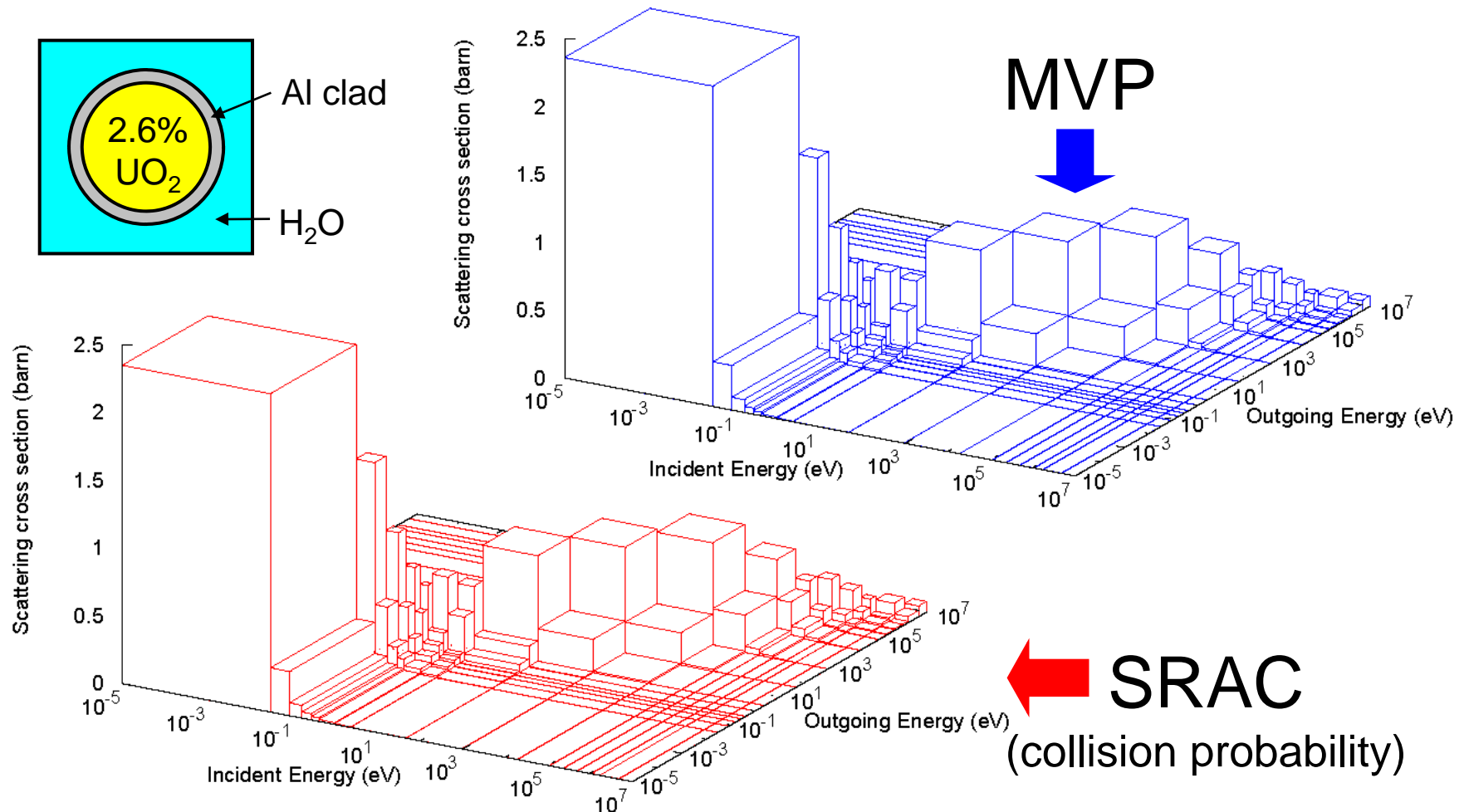
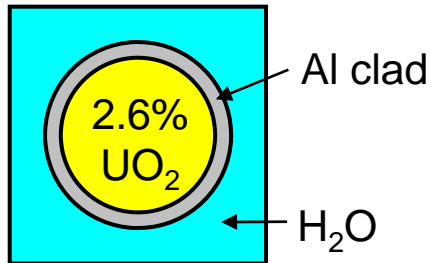
■燃料ペレットを径方向分割した燃料棒
(詳細解:MVP)



中性子増倍率	
詳細解 (MVP)	1.3719
従来法	1.3612 (-0.8%)
新手法	1.3706 (-0.1%)

散乱マトリックスター

17-group macroscopic scattering matrices



最後に、MVPの最近の話題

- 摂動計算機能
 - 実効増倍率への密度摂動、核種数密度摂動
 - 核分裂源分布の変化に対する摂動効果
 - 微分演算子サンプリング法に対する高次の摂動効果
 - 断面積摂動、温度摂動
- 多群定数計算機能
 - 散乱行列タリー
 - 拡散係数計算機能(等方、非等方拡散係数)
 - 輸送断面積用定数(高次のルジャンドル展開散乱係数)

END