

モンテカルロ計算法における分散低減手法の現状

令和6年1月25日

合同会社 ニュークリア・テクノロジー・コンサルティング

<https://nucltech.com>

内 容

- I モンテカルロ法遮蔽計算と分散低減
- II MCNPコードの分散低減法
- III 分散低減のための基本的・一般的な方法 Weight Window法
- IV 最適分散低減法(CADIS理論)
- V CADIS法に基づくMCNP用自動分散低減コードADVANTG
- VI 様々な問題へのCADIS法の適用事例
- VII まとめ

I モンテカルロ法遮蔽計算と分散低減

モンテカルロ法遮蔽解析における分散低減の必要性

モンテカルロ法による放射線遮蔽解析

= 数桁以上の深層透過問題

→ たとえ百万個の粒子を発生させても、数個しか遮蔽体外に到達しない。

→ 「**分散低減法 = 到達粒子数を増やす工夫**」の適用が必須

- スプリットティングとロシアンルーレット

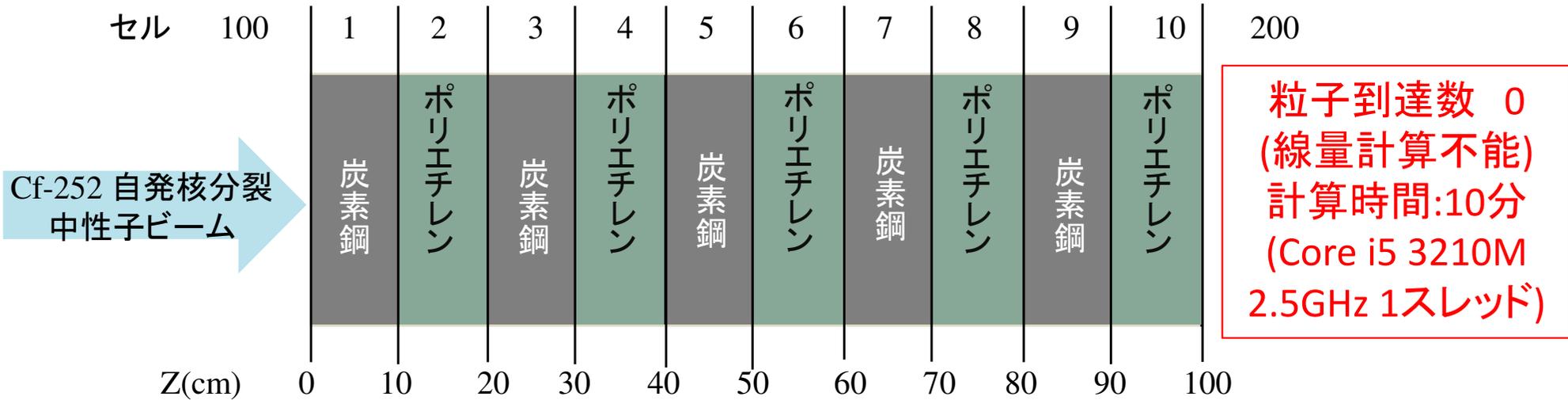
- ✓ Importance Sampling法 空間
- ✓ Weight-Window法 空間・エネルギー

- 線源バイアス（空間・角度・エネルギー）

- 飛程延長(Path Length Stretching)、強制衝突 (Forced Collision)、など

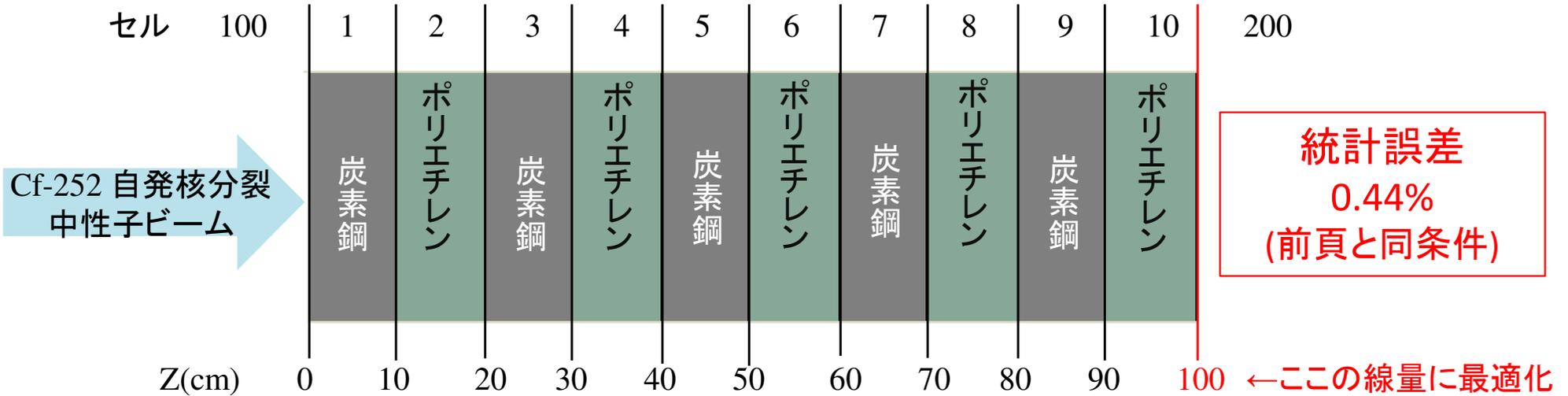
もっともよく
用いられる

深層透過における粒子の減少の例



1neutron activity in each cell							print table 126			
cell	cell	tracks entering	population	collisions	collisions * weight (per history)	number weighted energy	flux weighted energy	average track weight (relative)	average track mfp (cm)	
1	100	1005089	1005089	0	0.0000E+00	6.1329E-02	9.9748E-01	9.8384E-01	0.0000E+00	
2	1	2881229	1862178	17285837	7.8899E+00	4.2606E-03	1.1100E+00	9.3448E-01	3.9878E+00	
3	2	1834128	950246	184989814	5.5383E+01	5.9584E-05	2.7062E-01	6.3431E-01	7.3118E-01	
4	3	519345	253601	3519199	1.2236E+00	4.6785E-04	6.0585E-01	7.5127E-01	2.8132E+00	
5	4	107143	55633	10109627	2.9487E+00	4.9070E-05	2.5158E-01	6.1034E-01	6.7946E-01	
6	5	22584	11360	151534	5.1011E-02	4.7576E-04	7.0583E-01	7.2661E-01	2.7982E+00	
7	6	4510	2347	415846	1.1891E-01	5.3181E-05	2.8745E-01	5.9779E-01	7.1280E-01	
8	7	1031	486	6605	2.1239E-03	4.7771E-04	7.5618E-01	6.9465E-01	2.7548E+00	
9	8	199	104	15847	4.5327E-03	6.2714E-05	3.5732E-01	5.9173E-01	7.8608E-01	
10	9	23	15	137	4.1463E-05	5.0370E-04	9.4051E-01	7.0280E-01	2.9385E+00	
11	10	4	3	868	2.4382E-04	4.2920E-05	3.7174E-01	5.8382E-01	7.2014E-01	
12	200	0	0	0	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	0.0000E+00	
total		6375285	4141062	216495314	6.7622E+01					

分散低減法の効果 (ADVANTGコードでCADIS理論適用)



cell	cell	tracks entering	population	collisions	collisions * weight (per history)	number weighted energy	flux weighted energy	average track weight (relative)	average track mfp (cm)
1	100	59374	59374	0	0.0000E+00	3.9380E-01	9.4357E-01	1.3083E+01	0.0000E+00
2	1	1610862	2352585	3262719	5.4069E+00	3.8678E-01	1.1257E+00	2.7237E+00	4.1141E+00
3	2	1047069	2550142	2295226	4.9261E+00	1.2430E-01	9.6043E-01	5.6262E-01	1.8275E+00
4	3	1031184	2930366	4626505	7.8254E-01	1.9838E-02	7.3500E-01	1.5509E-01	3.2253E+00
5	4	1356259	2625385						
6	5	1013633	2925000						
7	6	1695852	3474583						
8	7	1574699	4034240						
9	8	3214890	5363470						
10	9	2716913	6087208						
11	10	3047627	7566878						
12	200	2950823	2950823						
total		21319185	42920054						

surface 11
7.14578E-07 0.0044

MCNPの10個の統計指標も全てYes

results of 10 statistical checks for the estimated answer for the tally fluctuation chart (tfc) bin of tally 2

tfc bin	--mean-- behavior	-----relative error----- value	decrease	decrease rate	----variance of the variance---- value	decrease	decrease rate	--figure of merit-- value	-pdf- behavior	-slope
desired	random	<0.10	yes	1/sqrt(nps)	<0.10	yes	1/nps	constant	random	>3.00
observed	random	0.00	yes	yes	0.00	yes	yes	constant	random	10.00
passed?	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes

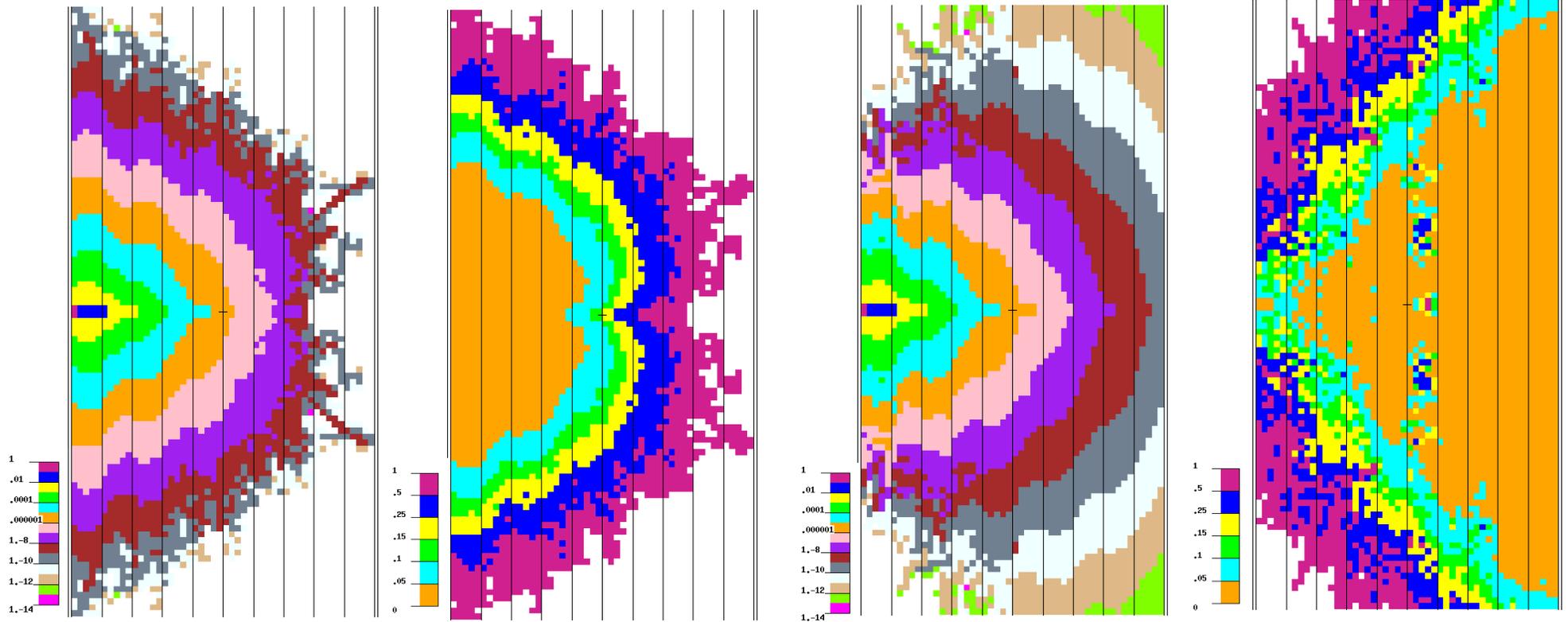
分散低減法の効果(前頁の問題の二次元線量分布)

分散低減なし

側面方向に行く粒子が多く正面に到達していない。

CADIS理論による最適分散低減

粒子が正面に向かい、端まで到達している



実効線量

統計誤差

実効線量

統計誤差

Ⅱ MCNPコードの分散低減法

MCNPで用いられている分散低減法(MCNP5のマニュアルより)

①時間とエネルギーのカットオフ法 (Time and Energy Cutoff)

MCNPでは、粒子が飛行している時間を計測している。これが指定した時間以上になったとき、追跡を終了する。また減速の結果、粒子のエネルギーが指定したエネルギー以下となったときに追跡を終了する。MCNPではCUTカードで指定する。

②空間スプリッティング／ロシアンルーレット (前述) (Geometry Splitting and Russian Roulette)

この方法を用いた場合は、高インポートランス領域から低インポートランス領域へと輸送される粒子はロシアンルーレットを受ける。ロシアンルーレットでは複数の粒子のうち、指定した重みより小さい粒子は、その重みを他の粒子に加えられて追跡が終了する。逆に、低インポートランス領域から高インポートランス領域へ輸送される粒子は分割され、より多くの追跡が行われる。このようにして、計算結果への影響の大きい(重要度の高い)領域を指定してサンプリングを行う方法である。MCNPではセル毎のインポートランス(IMP)を相対値で与えて指定する。

MCNPで用いられている分散低減法(続き)

③エネルギー Splitting / ロシアンルーレット (Energy Splitting/Russian Roulette)

指定したエネルギー群毎に Splitting / ロシアンルーレットを行う方法である。Splittingにより増える粒子数の比を群毎に与えて指定する。MCNPでは、**ESPLT**カードとして独立に与えることもできるが、後述の Weight Window の中でも用いられる。

④強制衝突法 (Forced Collision)

衝突の数が少なく点検出器への寄与が得にくい、薄い物質中で強制的に衝突を起こさせる方法である。点検出器とともに用いて、点検出器に寄与する衝突の数を増やす働きをする。指定したセルで粒子を分割し、重みを衝突粒子と非衝突粒子分に分けてサンプリングする。MCNPでは**FCL**カードとして与える。

⑤DXTRAN

この方法はMCNP独特の方法で、DXTRANと呼ばれる小さな球状の空間を指定し、そこへ散乱の結果到達する粒子を解析的に計算する方法である。散乱に関する角度バイアスの一種である。**DXC**カードで指定する。

MCNPで用いられている分散低減法(続き)

⑦線源バイアス法 (Source Biasing) (前述)

指定した発生位置、エネルギー、角度によって、分布を保存しながら発生する粒子数の数を変える方法である。MCNPでは線源指定でSBカードとして与える。

⑧ 飛程延長法 (Path Length Stretching)

粒子を長い距離にわたって飛行させるために、ある方向について衝突点間の距離を仮想的に延ばし、これに対応して重みを下げる方法である。この方法は、粒子の重みを大きく変動させるために、ウェイトウィンドウ法と組み合わせて使用することが必要である。MCNPではEXTとVECTカードを用いてしている。

⑨ 相関サンプリング法 (Correlated Sampling)

摂動計算に用いられる分散低減法である。摂動前後で各ヒストリーの開始時点の乱数が同一になるようにサンプリングを行い、微少な摂動の影響を調べる方法である。

MCNPで用いられている分散低減法(続き)

⑩ ウェイトウィンドウ法 (Weight Window)

エネルギー及び空間で粒子の取り得る重みの範囲を指定し、範囲以下の粒子はロシアンルーレットをかけ、範囲以上の粒子は重みを分割してサンプリングを続ける方法である。つまり、空間スプリットイング／ロシアンルーレットとエネルギー・スプリットイング／ロシアンルーレットを同時に行う方法である。空間とエネルギーの2次元メッシュ(ウェイトウィンドウ)について、そのウェイトウィンドウの下限重み W_L 、ロシアンルーレットで生き残る下限重み W_S 、及び上限重み W_U を与える。 W_S 及び W_U は、全てのウィンドウについて W_L の定数倍の値が用いられ、 W_L のみを入力で指定する。下限重み W_L 以下の粒子は、ロシアンルーレットにより他の粒子と統合され、上限重み W_U 以上の粒子はスプリットイングを受ける。これにより、粒子の重みは常にウェイトウィンドウの範囲に収まり、重みのゆらぎが小さくなるため、分散低減に寄与する。粒子の重みのばらつきが大きくなるような他の分散低減法(線源バイアス、指数変換法など)は、ウェイトウィンドウ法と併用しないと、誤った計算結果を与えるおそれがある。ウェイトウィンドウ法のパラメータ(以下WWパラメータと呼ぶ) W_L を最適に与える方法は経験に頼るところが大きい。MCNPでは**WWP**,**WWE**,**WWN**カードや外部ファイルの**WWINP**を用いてパラメータを与える。

MCNPの統計指標*)

MCNPでは、評価量(タリー:Tallyと呼んでいる)に関して、次の量を出カリストに出力し、以下の10の判定基準で計算結果の統計的妥当性を判定する。

タリー平均値 Tally Mean \bar{x}

- ① (計算の後半では)ヒストリー数(N)の増減で \bar{x} の値が大きく変動しないこと

相対誤差 Relative Error R

- ② $R < 0.1$ (点検出器では $R < 0.05$)
 ③ R は N とともに単調減少すること
 ④ (計算の後半では) R は $1/\sqrt{N}$ で減少すること

分散の分散 Variance of the the Variance VOV

- ⑤ VOV の値は0.1より小さいこと(すべての種類のタリー)
 ⑥ (計算の後半では) VOV は単調に減少すること
 ⑦ (計算の後半では) VOV は $1/N$ で減少すること

FOM Figure of Merit

- ⑧ (計算の後半では)FOMは統計的に一定値であること
 ⑨ (計算の後半では) FOMは単調減少あるいは増加しないこと

確率密度関数 Tally PDF $f(x)$

- ⑩ 大きい方から201個のスコアリングに関連するイベントのSLOPEが3以上であること。

*) J.K.Shultis and R.E.Faw, *AN MCNP PRIMER*, (December 2011)の内容に基づく。

MCNPの統計指標（出力例と相対誤差R）

```

=====
results of 10 statistical checks for the estimated answer for the tally fluctuation chart (tfc) bin of tally      114
=====
tfc bin      --mean--      -----relative error-----      ----variance of the variance----      --figure of merit--      -pdf-
behavior      behavior      value  decrease  decrease rate  value  decrease  decrease rate  value  behavior  slope
desired      random      <0.10  yes      1/sqrt(nps)    <0.10  yes      1/nps          constant  random  >3.00
observed      random      0.02   yes      yes            0.00   yes      yes            constant  random  4.88
passed?      yes        yes    yes      yes            yes     yes      yes            yes       yes     yes
              ①          ②      ③        ④            ⑤      ⑥        ⑦            ⑧        ⑨      ⑩
=====

```

分散 $\sigma^2 = \int [x - E(x)]^2 f(x) dx = E(x^2) - [E(x)]^2$. の有限個のサンプルでの推定値である、

推定標準偏差 $S^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2}{N-1} \approx \bar{x}^2 - \bar{x}^2$ ただし $\bar{x}^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i^2$.

を用いて、平均値 \bar{x} の推定分散 $S_{\bar{x}}^2 = \frac{S^2}{N}$ を求めることができる。ここで、 x_i

はヒストリー*i*のタリー値、*N*はヒストリー数である。統計的に意味のあるサンプリング (*N*を無限と見なせる) が行われていれば、 \bar{x} の信頼区間は次の通りとなる。

65%信頼区間 $\bar{x} - S_{\bar{x}} < E(x) < \bar{x} + S_{\bar{x}}$,

95%信頼区間 $\bar{x} - 2S_{\bar{x}} < E(x) < \bar{x} + 2S_{\bar{x}}$,

推定分散から相対誤差は $R \equiv \frac{S_{\bar{x}}}{\bar{x}}$ で求められる。

MCNPの統計指標 (FOMとVOV)

相対誤差の判断基準

Range of R	Quality of Tally
> 0.5	Meaningless
0.2 to 0.5	Factor of a few
< 0.1	Reliable (except for point/ring detectors)
< 0.05	Reliable even for point/ring detectors

FOMの定義：大きいほど計算効率が良い

$$\text{FOM} = \frac{1}{R^2 T}$$

VOVの定義

$$\text{VOV} = \frac{S^2(S_x^2)}{S_x^2} = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^4}{\left[\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \right]^2} - \frac{1}{N}$$

MCNPの統計指標(確率密度関数PDFの傾き)

タリーの確率密度関数

タリーするイベントの頻度

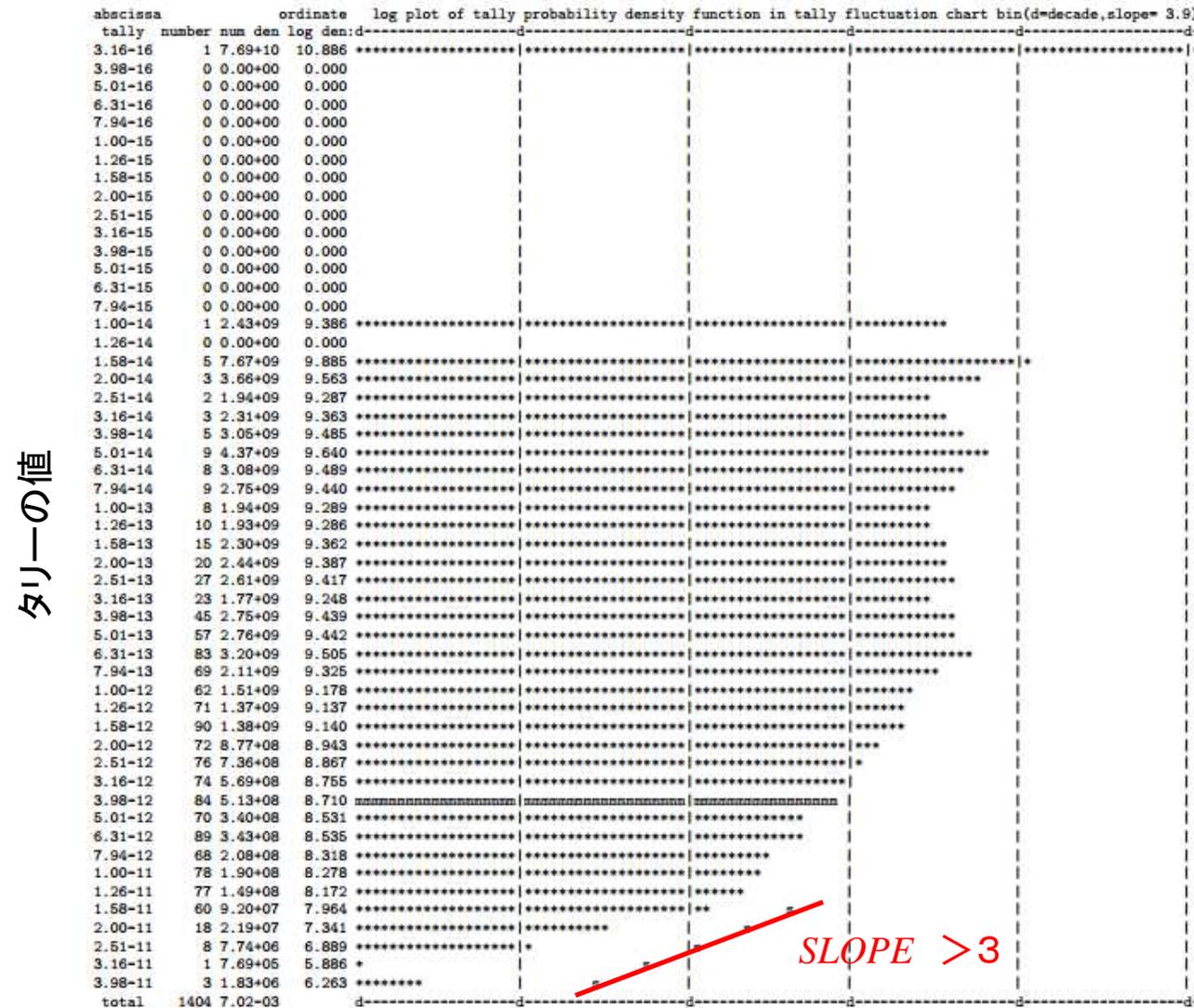


Figure 8. An example of the Tally PDF plot produced in the MCNP output.

Ⅲ 分散低減のための基本的・一般的な方法

Weight Window法

最も基本的な分散低減法の考え方＝重み付き粒子

インプリシット捕獲法とウェイトカットオフ*)

(Implicit capture and Weight Cut off)

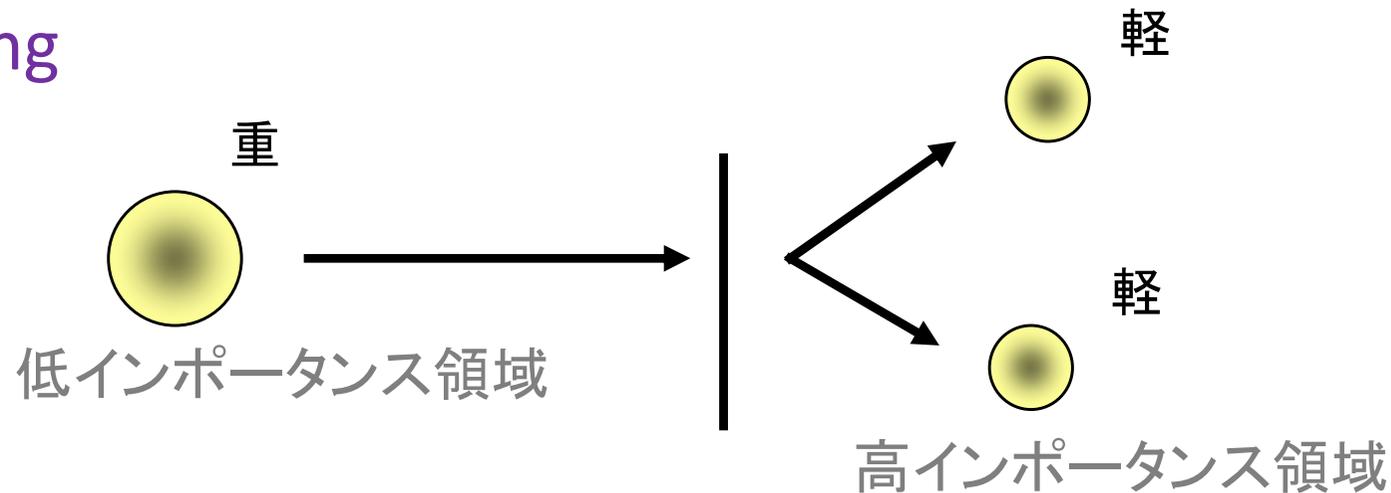
現実の現象に忠実なシミュレーション(アナログモンテカルロ法)では、粒子が捕獲反応を起こすと、その粒子が除去される。これに対して、インプリシット捕獲法では、除去されず捕獲断面積の全断面積に占める割合だけ重みを減らして生き残るように取り扱う。MCNPでは、アナログモンテカルロ法を用いるエネルギー範囲を指定した場合、及び詳細な光子の物理モデルを用いる場合を除き、インプリシット捕獲法が用いられる。インプリシット捕獲法により重みが小さくなった粒子は、ある重み以下となったときにウェイトカットオフにより追跡が終了される。MCNPのアルゴリズムはアナログモンテカルロ法ではなく、このインプリシット捕獲法とウェイトカットオフに基づいている。

*) J.S.Hendricks and T.E.Booth, MCNP VARIANCE REDUCTION OVERVIEW, LA-UR—8501173 (1985)
およびMCNP4Bのマニュアルから。

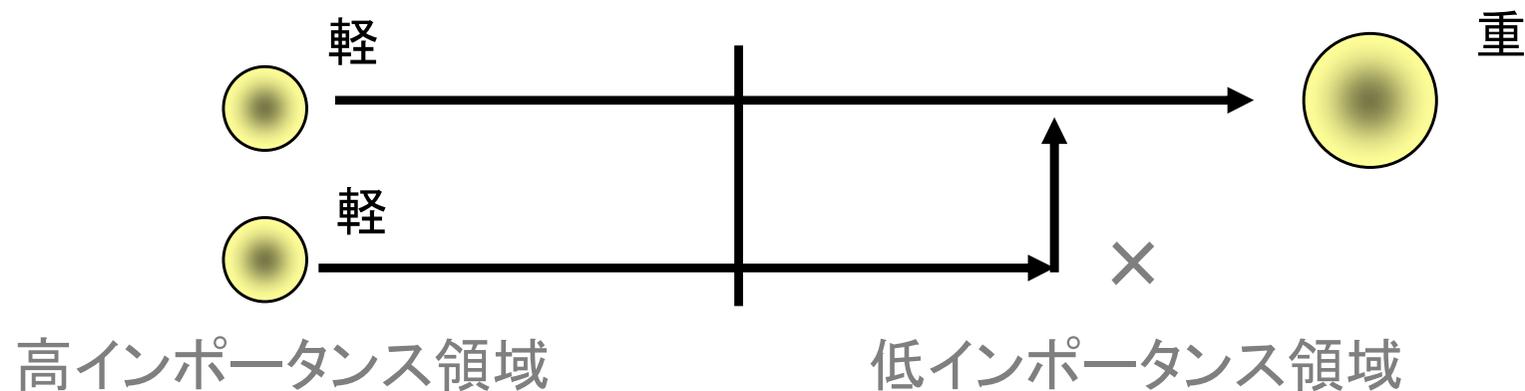
SplittingとRussian Roulette

粒子に「重み」を考えて(これを「バイアスする」という)、計算結果への影響の大きい領域(高インポートランス領域)では粒子を軽くする代わりに数を増やし、影響の小さい領域(低インポートランス領域)では粒子を重くして数を減らす。

Splitting

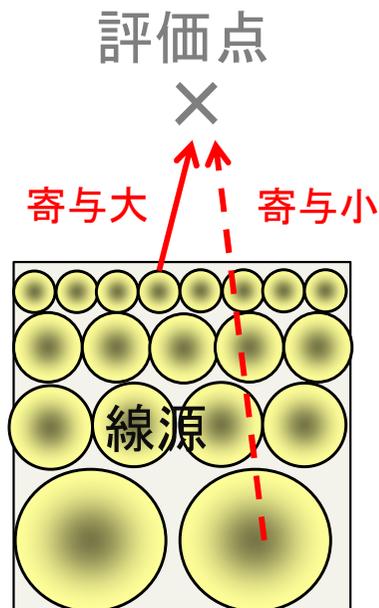


Russian Roulette



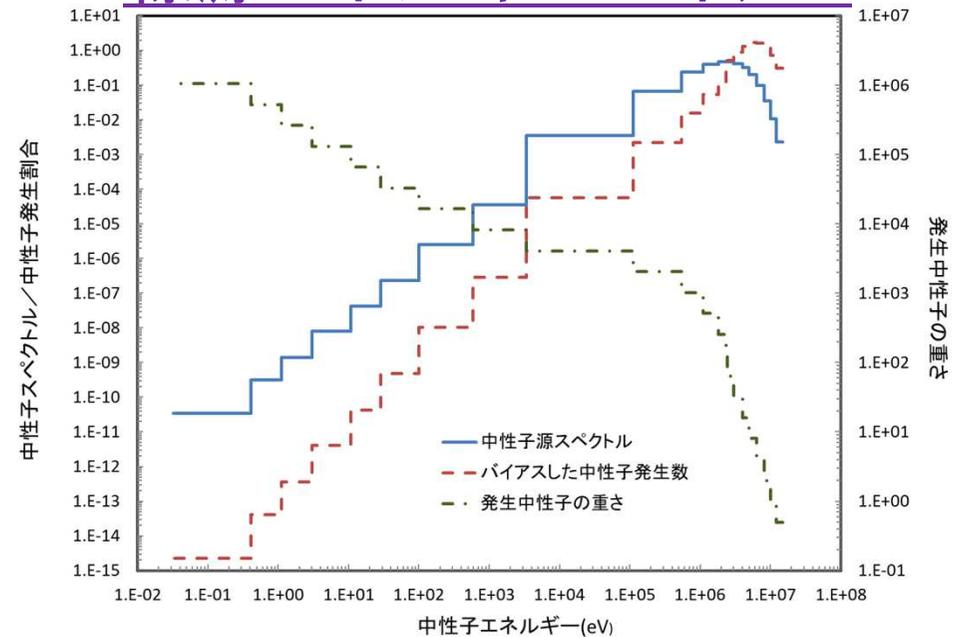
線源バイアス

線源位置バイアス



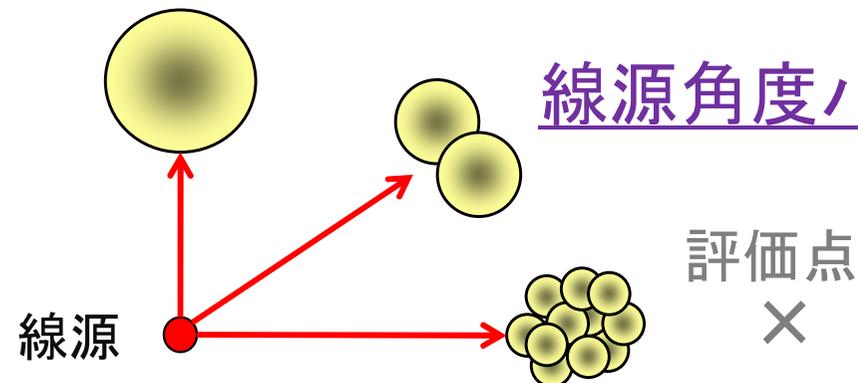
評価点に寄与の大きい近傍の線源は軽くして数多く、寄与の小さい遠い線源は重くして数少なく発生させる。

線源エネルギーバイアス



透過力の強い高エネルギー粒子は軽くして数多く、低エネルギー粒子は重くして数少なく発生させる。

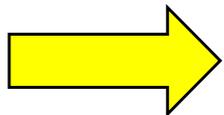
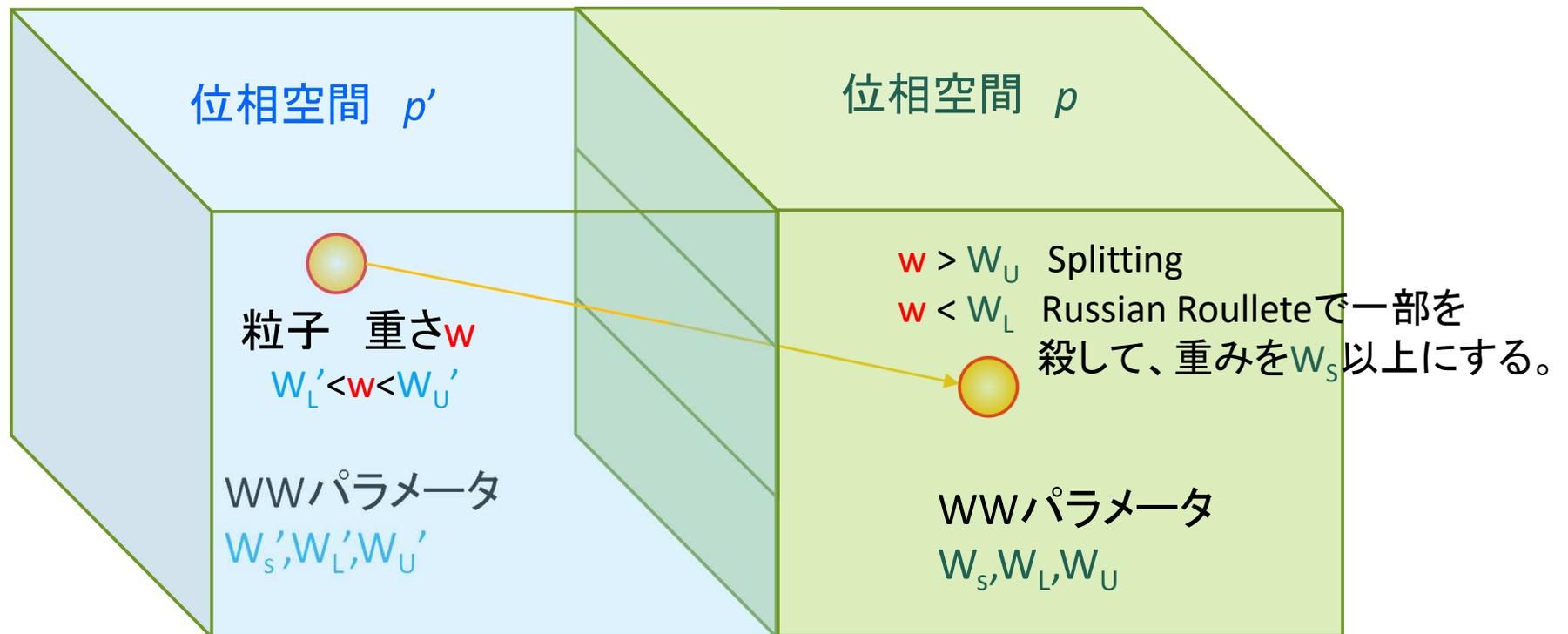
線源角度バイアス



評価点に向かう粒子を軽くして数多く発生させる。

Weight Window法

空間とエネルギーから成る位相空間の「窓」を通るたびに、Russian Roulette/Splittingを行う。



**WWパラメータ W_S 、 W_L 、 W_U の設定が難しい。
経験と試行錯誤が必要。**

Weight Window Generator (WWG)

最初のMCNPを用いたモンテカルロ計算で、最適なWWパラメータを求め、これを次の計算に適用する機能

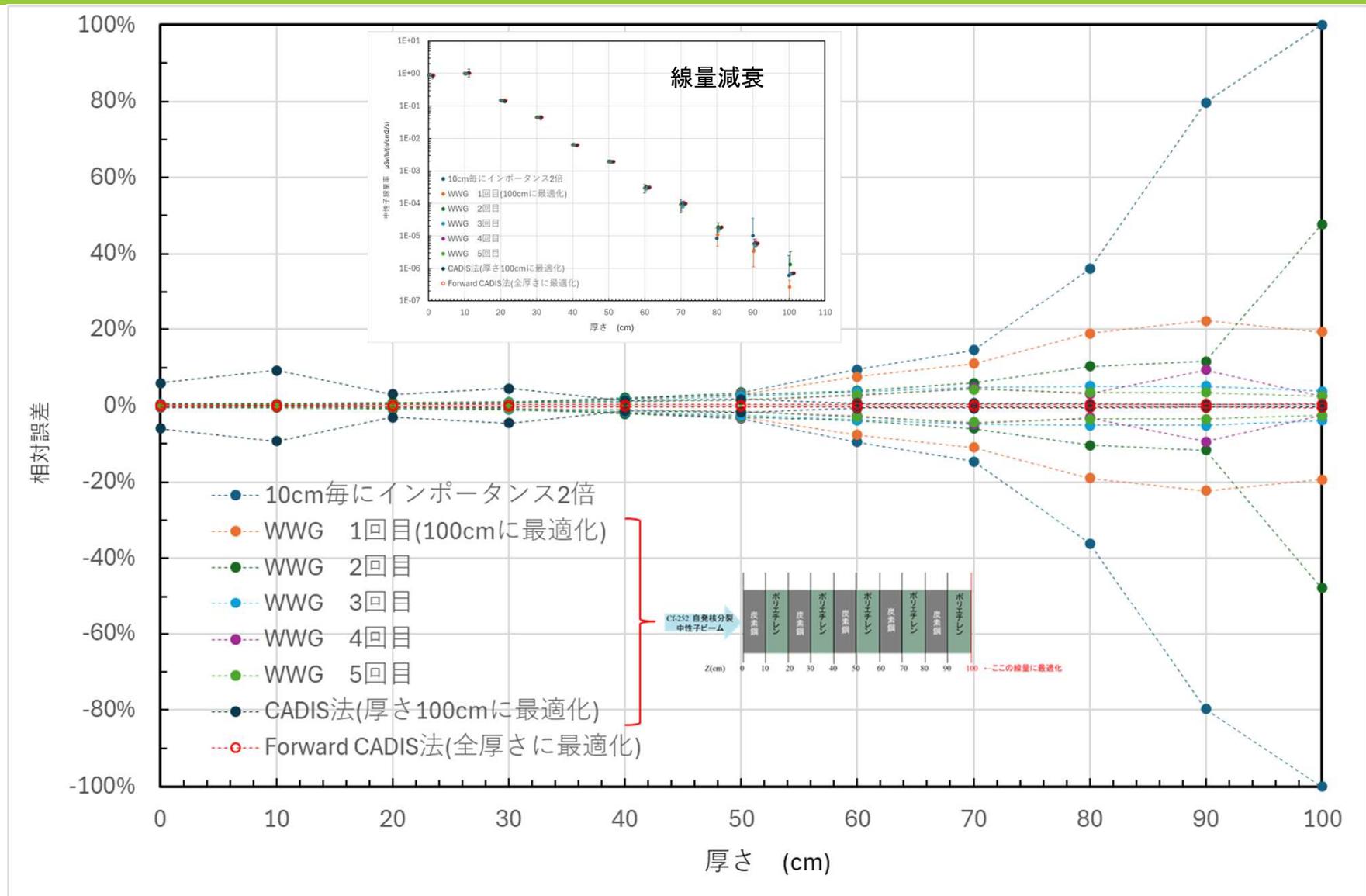


WWGカードでWeight Window Generatorの使用を指定すると、位相空間セル(幾何形状セルとエネルギー群から構成されるウィンドウ)に入射する粒子数からのインポートランスを次の式で計算する。

$$\text{インポートランス} = \frac{\text{位相空間セルに入射する粒子による検出器応答}}{\text{入射した粒子の重さの和}}$$

WWパラメータはセル毎でも、MESHカードで与えるメッシュ毎でも与えることができる。

WWGとCADIS法、Forward CADIS法の比較(1次元平板問題)



- WWGを5回繰り返すことで、Forward CADIS法とほぼ同等な分散低減(0.5%程度)が得られている。
- 4回までの繰り返しでは、全ての統計指標は満たさない。

Weight Window Parameter生成機能(MCNPのWWG)の問題点

モンテカルロ計算でパラメータを求めるため、粒子が検出器に到達しなくてはパラメータが定まらない。

十分に粒子を到達させるには、本計算に匹敵する計算時間が必要。

→計算時間短縮のための分散低減に、余計な計算時間と手間暇を掛けてしまう場合がある。(本末転倒)

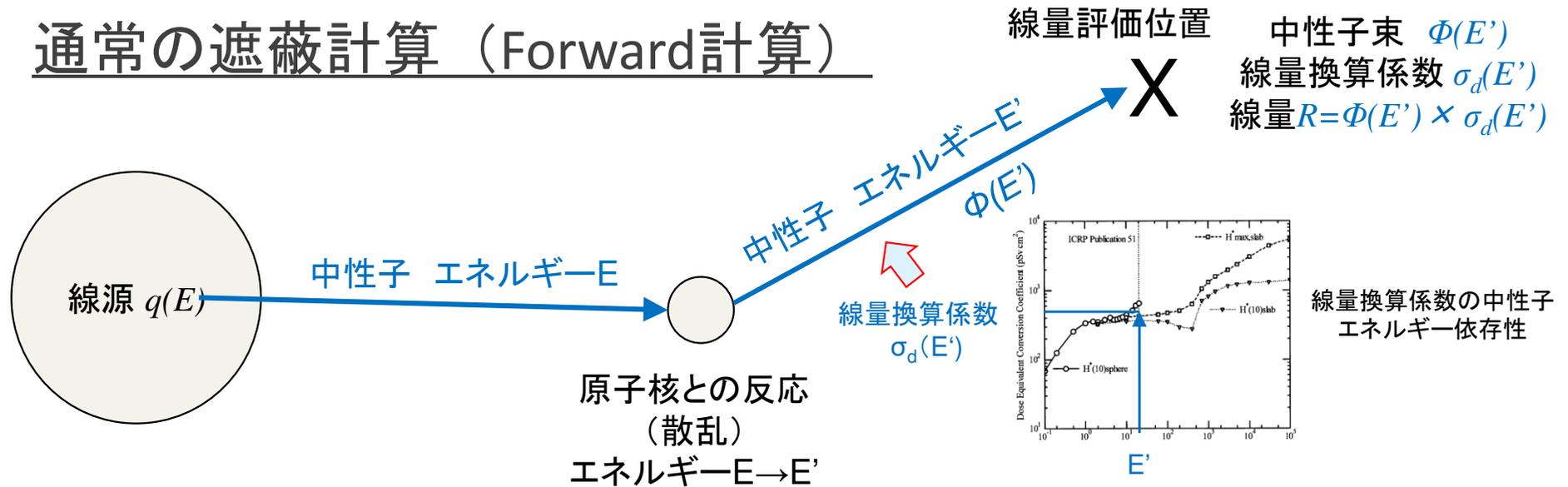
→経験も、試行錯誤も、余分なモンテカルロ計算も行わずに自動的に分散低減が実現できないか？

→ **随伴線束＝インポートランス関数の利用**

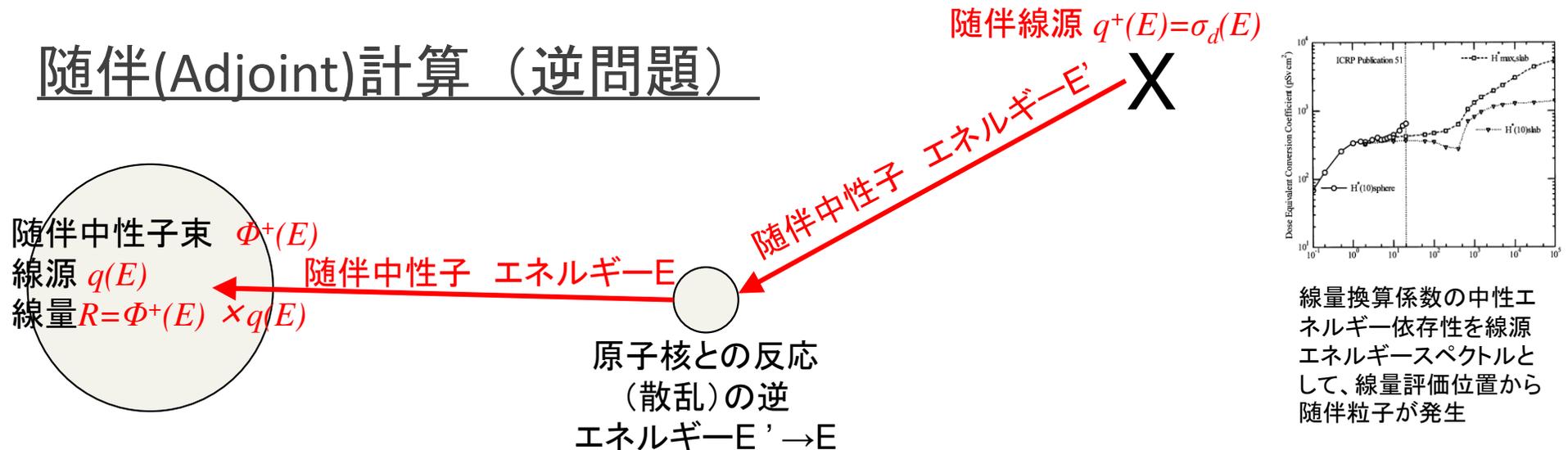
IV 最適分散低減法 (CADIS理論)

随伴(Adjoint)計算とForward計算

通常の遮蔽計算 (Forward計算)



随伴(Adjoint)計算 (逆問題)



随伴計算で、どの位置の線源や反応が線量に効くか、が判る。

随伴計算を用いた分散低減パラメータの設定

古くからアイデアはあった。

- *Tang & Hoffman*(1988)
- *P.C.Miller et al.* for McBEND(1990)
- *M.W.Mickael* for MCNP WWG (1995)

理論の体系化及びMCNPのためのコード化

John.C.Wagner & Alireza Haghghat (1997)

→ **CADIS** (Consistent Adjoint Driven Importance Sampling)

CADIS 理論

(J.C.Wagner and A.Haghighat, N.S.E 128,1998)

CADIS (Consistent Adjoint Driven Importance Sampling)

- インポートランス関数(随伴線束)を、「線源バイアス」と「輸送バイアス」の設定に使用して、「一貫した」取り扱いを行う。
- 随伴線束は離散座標法(Sn法)などの決定論的方法で計算する。
- ただし、あくまで計算効率化のためなので、随伴線束の計算には本番のモンテカルロ法による線束の計算ほどの精度は求められず、モデル、群構造、角度分点などは簡略化して短い時間で計算できるようにしてよい。

CADIS 理論

随伴線束で表した検出器応答(線量率や反応率)

Forward Fluxで表した
検出器応答

$$R = \int_{V_d} \int_E \sigma_d(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E) dE d\vec{r}$$

Adjoint Fluxで表した
検出器応答

$$R = \int_{V_d} \int_E q(\vec{r}, E) \phi^+(\vec{r}, E) dE d\vec{r}$$

$\phi(\vec{r}, E)$ 空間 \vec{r} とエネルギー E における線束 (Forward Flux)

$\phi^+(\vec{r}, E)$ 空間 \vec{r} とエネルギー E における随伴線束 (Adjoint Flux)

$\sigma_d(\vec{r}, E)$ 空間 \vec{r} とエネルギー E での検出器応答関数(線量率換算係数)

$q(\vec{r}, E)$ 空間 \vec{r} とエネルギー E での線源(線源分布・エネルギースペクトル)

R 検出器応答(評価点における線量、反応率など)

CADIS 理論

線源バイアス

バイアスされた線源分布

$$\hat{q}(p) = \frac{\phi^+(p)q(p)}{\int_p \phi^+(p)q(p)dp} = \frac{\phi^+(p)q(p)}{R}$$

最適な粒子の重み

$$W(p) = \frac{R}{\phi^+(p)}$$

p	空間とエネルギーから成る位相空間での座標 $=(\vec{r}, E)$
$\hat{q}(p)$	位相空間座標 p における バイアスされた 線源
$q(p)$	位相空間座標 p における線源＝線源分布・エネルギースペクトル
$\phi^+(p)$	位相空間座標 p における随伴線束
R	検出器応答(評価点における線量、反応率など)
$W(p)$	位相空間座標 p における最適な粒子の重み

CADIS 理論

輸送バイアス = 最適な重みを持った粒子の輸送方程式

通常の輸送方程式

$$\phi(p) = \int_{p'} K(p' \rightarrow p) \phi(p') dp' + q(p)$$

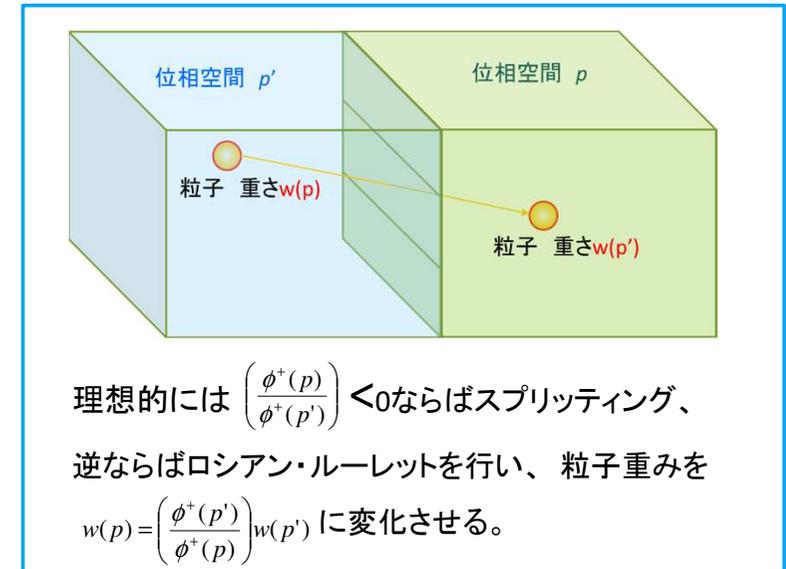
バイアスされた粒子の輸送方程式

$$\hat{\phi}(p) = \int_{p'} \hat{K}(p' \rightarrow p) \hat{\phi}(p') dp' + \hat{q}(p)$$

$$\text{where} \quad \hat{\phi}(p) = \frac{\phi^+(p)\phi(p)}{R} \quad \hat{q}(p) = \frac{\phi^+(p)q(p)}{R}$$

$$\hat{K}(p' \rightarrow p) = K(p' \rightarrow p) \left[\frac{\phi^+(p)}{\phi^+(p')} \right]$$

- $K(p' \rightarrow p)$ 位相空間座標 p' から p への輸送カーネル(移動する確率)
 $\hat{K}(p' \rightarrow p)$ バイアスされた輸送カーネル
 $\hat{\phi}(p)$ 位相空間座標 p におけるバイアスされた線束



CADIS 理論

MCNPのWeight Windowへの適用

目標とする粒子の重み

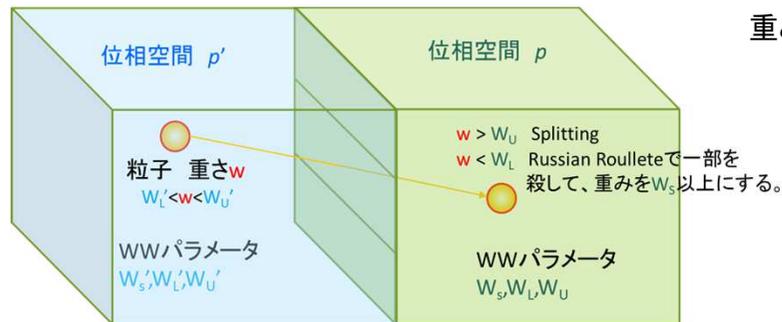
$$W(p) = \frac{R}{\phi^+(p)}$$

粒子をこの重みに
ほぼ保つために

MCNPのWeight Window Parameter

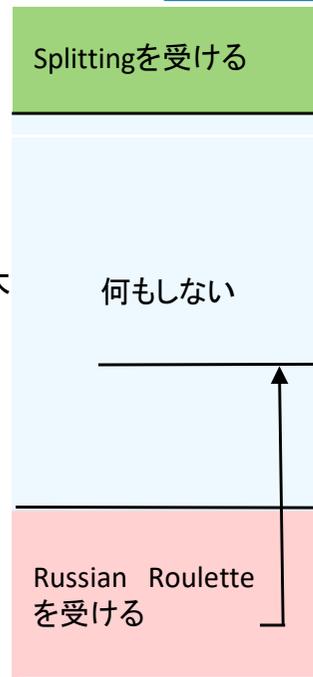
位相空間毎に与える粒子重みの下限 W_L (この重み以下の粒子はロシアルーレットを受ける)を次式で計算する。

$$W_L = \frac{2}{1+C_U} \frac{R}{\phi^+(p)}$$



($0.25 < W_L/W_L' < 4.0$ が望ましい)

重み大



$$W_U = C_U \times W_L$$

次のパラメータはMCNP入力のWWPカードで指定する。

C_U それ以上の重みの粒子をスプリットする重み(W_U)と W_L との比

(WUPN, デフォルト=5)

C_S ロシアルーレットを生き残った粒子に与えられる重み(W_S)と W_L との比

(WSURVN, デフォルト= $0.6 \times C_U$)

Forward CADIS (FW-CADIS)理論

CADIS理論は単一の検出器応答(R)には有効だが...

→ 線量分布のような複数の R の計算の効率化はどうか。

次の随伴線源を考えてCADIS理論を適用することにより、複数の検出器応答(R_1, R_2, \dots, R_N)の統計誤差を一様とすることができる。

$$q^+ = \frac{\sigma_{d,1}}{R_1} + \frac{\sigma_{d,2}}{R_2} + \dots + \frac{\sigma_{d,N}}{R_N}$$

where $\sigma_{d,i}$ i 番目の検出器の応答関数
 R_i i 番目の検出器の応答

R_i の計算にForward計算(通常の輸送計算)による検出器位置での線束の計算が必要なため、“Forward CADIS”と呼ばれる。。

主な随伴計算を用いた自動分散低減の試み

McBEND(UKAEA,1967): 随伴拡散計算による自動分散低減【有償】

AVATAR(LANL+K.A.V.Riper,1997):3次元Sn法随伴計算 (THREEDANT)+MCNP
【非公開】

LIFT (LANL,S.A.Turner,1997):指数変換法やDXTRANに似たゼロ分散理論に基づく方法。【非公開】

A³MCNP(UFL,A.Haghighat,1998):CADIS理論に基づく3次元Sn法随伴計算
(TORT)+MCNP-4A【有償】

ECBO (NUPEC,S.Mitake & MRI,O.Sato):CADIS理論に基づく、公開コード(DORT, ANISN)を組み合わせた1, 2次元Sn法随伴計算でMCNP用のWeight Window Parameterと線源バイアスを生成する。【公開,2007】

MAVRIC (ORNL,J.Wagner,2005): KENO-VI形状を採用した多群モンテカルロコードMONACOとForward CADIS法に基づく自動分散低減による3次元多群モンテカルロ法遮蔽計算【公開,2005】

ADVANTG (ORNL, S.W. Mosher ,2013):3次元離散座標法コードDENOVOを用いて、Forward CADIS法に基づき、MCNPのWeight Window Parameterを生成するコード。【公開,2015】

CADIS理論に基づくコード

深層透過問題の分散低減における現時点での“Gold Standard”

Madicken Munk and Rachel N. Slaybaugh, Nucl. Sci. Eng., 193, pp.1055–1089 (Oct 2019)

Review of Hybrid Methods for Deep-Penetration Neutron Transport

Madicken Munk^{a*} and Rachel N. Slaybaugh^b

^aUniversity of Illinois, Urbana-Champaign National Center for Supercomputing Applications, 1205 West Clark Street, MC-257, Urbana, Illinois 61801

^bUniversity of California, Berkeley, Nuclear Engineering Department, 4155 Etcheverry Hall, MC-1730, Berkeley, California 94720-1730

Received December 7, 2018

Accepted for Publication February 20, 2019

Abstract — *Methods for deep-penetration radiation transport remain important for radiation shielding, nonproliferation, nuclear threat reduction, and medical applications. As these applications become more ubiquitous, the need for accurate and reliable transport methods appropriate for these systems persists. For such systems, hybrid methods often obtain reliable answers in the shortest time by leveraging the speed and uniform uncertainty distribution of a deterministic solution to bias Monte Carlo transport and reduce the variance in the solution. This work reviews the state of the art among such hybrid methods. First, we summarize variance reduction (VR) for Monte Carlo radiation transport and existing efforts to automate these techniques. Relations among VR, importance, and the adjoint solution of the neutron transport equation are then discussed. Based on this exposition, the work transitions from theory to a critical review of existing VR implementations in modern nuclear engineering software. At present, the Consistent Adjoint-Driven Importance Sampling (CADIS) and Forward-Weighted Consistent Adjoint-Driven Importance Sampling (FW-CADIS) hybrid methods are the gold standard by which to reduce the variance in problems that have deeply penetrating radiation. The CADIS and FW-CADIS methods use an adjoint scalar flux to generate VR parameters for Monte Carlo radiation transport. Additionally, efforts to incorporate angular information into VR methods for Monte Carlo are summarized. Finally, we assess various implementations of these methods and the degree to which they improve VR for their target applications.*

V CADIS法に基づく
MCNP用自動分散低減コード
ADVANTG

ADVANTGコードとは

ADVANTGは、オークリッジ国立研究所(ORNL)で開発されたMCNPのWeight Window Parameterと線源バイアスをCADISまたはFW-CADIS理論に基づいて生成するコードである。

S. W. Mosher, A. M. Bevill, S. R. Johnson, A. M. Ibrahim, C. R. Daily, T. M. Evans, J. C. Wagner, J. O. Johnson and R. E. Grove, *ADVANTG—An Automated Variance Reduction Parameter Generator*, ORNL/TM-2013/416 (November 2013)

ADVANTGの公開バージョン

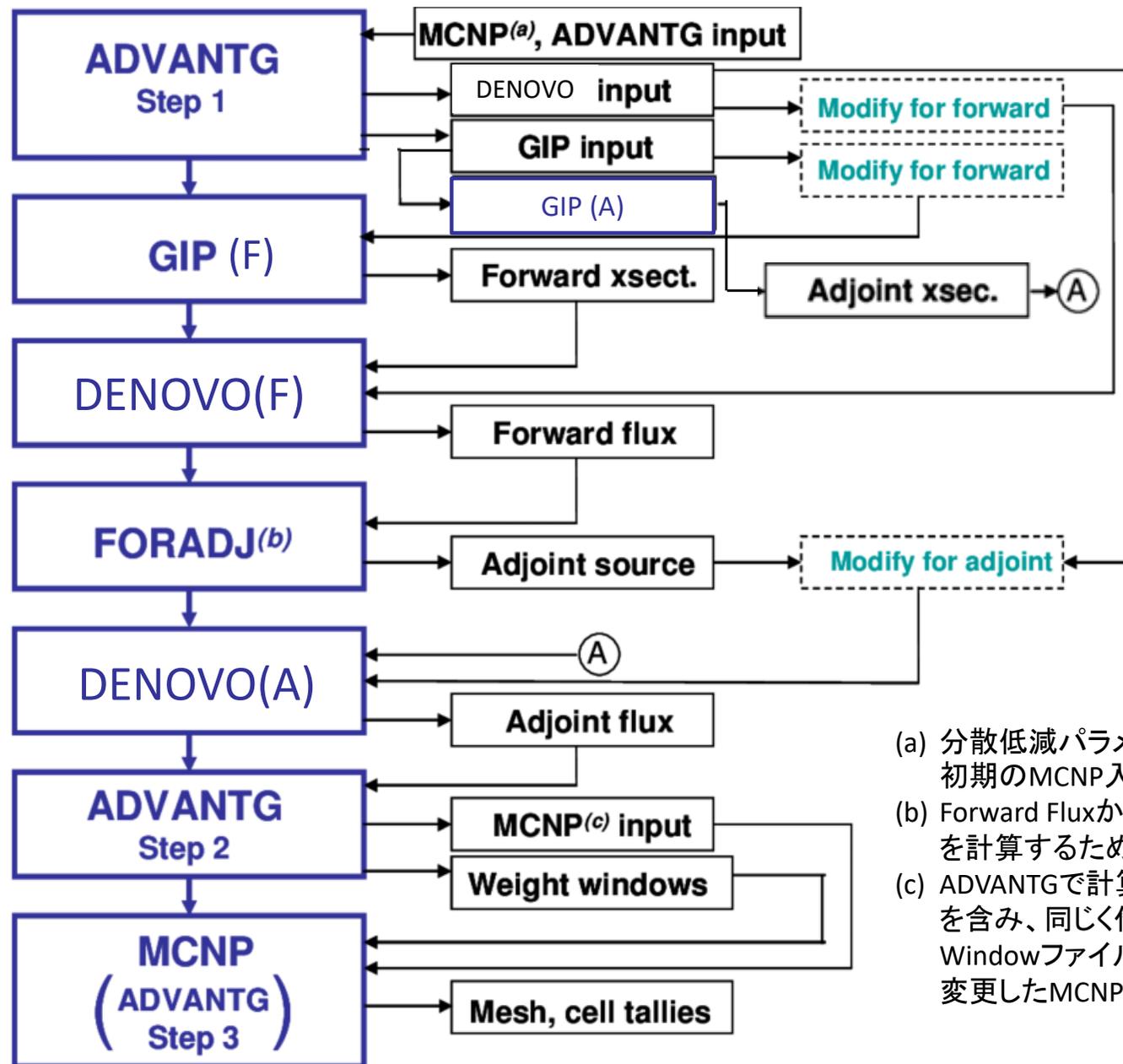
ADVANTG 3.0.1: 2015年に公開された、Forward CADIS法によるMCNP用自動分散低減コード。DENOVOを用いて3次元離散座標法で随伴線束を計算する。

RSICC CODE PACKAGE CCC-831 : ADVANTG 3.0.1: Automated VArIaNce reducTion Generator

ADVANTG 3.2.1: ADVANTG 3.0.1から、複数のセルにまたがる線源や円筒形状メッシュタリーの取扱い、随伴線束計算における反射境界や一回散乱線源の取扱いの追加、などを改良。2019年8月公開

RSICC CODE PACKAGE CCC-854 : ADVANTG 3.2.0: Automated VArIaNce reducTion Generator

ADVANTGコードの処理フロー



- (a) 分散低減パラメータを計算するための初期のMCNP入力データ
- (b) Forward Fluxから随伴計算の線源分布を計算するためのコード
- (c) ADVANTGで計算された線源バイアスを含み、同じく作成された外部Weight Windowファイルを読み込むように(a)を変更したMCNP入力データ

AVANTGコードの処理フロー

ステップ	処理内容	
ADVANTG Step 1	<ul style="list-style-type: none"> ・MCNP入力データを読み込み、次のデータを生成する。 ①Forward 及び Adjoint Flux計算用DENOVO入力データ ②DENOVOで用いる巨視的断面積を計算するためのGIP (ANISN形式群独立巨視的断面積計算コード) 入力データ(材質組成データ) 	
FW-CADIS のときのみ	GIP(F)	DENOVOのForward計算で用いる巨視的断面積を計算する。
	DENOVO(F)	FW-CADIS法で用いるForward Fluxを3次元Sn法で計算する。
	FORADJ	Forward FluxからDENOVOによるAdjoint計算で用いる随伴線源分布を計算する。
	DENOVO(A)	FW-CADIS法及びCADIS法で用いるAdjoint Flux(随伴線束)を3次元Sn法で計算する。
ADVANTG Step 2	最適分散低減のために、Step 1で読み込んだMCNP入力データに線源バイアスデータを書き加えたデータと、外部Weight Window Parameterファイルを作成する。	
MCNP (ADVANTG Step 3)	Step2で作成した線源バイアス付MCNP入力データとWeight Window Parameterファイルを用いたMCNPによるモンテカルロ法計算の実行	

ADVANTGコードから出力されるMCNP用ファイル

● Weight Window Parameter ファイル (WWINPファイル)

- ✓ XYZ体系のスーパーインポーズメッシュ(セル分割とは独立な空間メッシュ)と、ADVANTGで用いる多群断面積の中性子・光子エネルギー境界(下表)に対して、Weight Window下限値 W_L を出力する。

Table 3-1. Multigroup libraries

Library	anisn_library option	# of groups (N / G)	# of isotopes or elements	Evaluation	Reference
27n19g	27n19g	27 / 19	393	ENDF/B-VII.0	Wiarda et al. 2008
200n47g	200n47g	200 / 47	393	ENDF/B-VII.0	Wiarda et al. 2008
BUGLE-96	bugle96	47 / 20	120	ENDF/B-VI.3	White et al. 1995
BPLUS	bplus	47 / 20	393	ENDF/B-VII.0	N/A
DABL69	dabl69	46 / 23	80	ENDF/B-V	Ingersoll et al. 1989
DPLUS	dplus	46 / 23	393	ENDF/B-VII.0	N/A
FENDL67	fendl67	46 / 21	71	FENDL-2.1	López Aldama and Trkov, 2004

● 線源バイアス

- ✓ エネルギー及び空間位置についてのバイアスされた線源分布を計算し、MCNPの入力データに追加する。

```
c Cf-252 SF
spl -3 1.025 2.926
c * added by ADVANTG
sb1 0.00000e+00 2.97456e-08 1.10119e-07 2.66988e-07 2.68669e-07 2.70223e-07
2.71689e-07 2.73092e-07 2.74446e-07 2.75761e-07 2.77045e-07 1.79962e-06
2.73164e-06 2.74357e-06 2.75537e-06 2.76705e-06 2.77863e-06 2.79015e-06
2.80160e-06 2.81300e-06 2.82436e-06 2.83570e-06 2.84703e-06 2.85836e-06
2.86967e-06 2.88101e-06 2.89236e-06 2.90375e-06 2.91517e-06 1.28136e-05
2.93403e-05 2.94204e-05 2.95012e-05 2.95815e-05 2.96628e-05 2.97449e-05
```

● WWPカード

- ✓ WWINPファイルを読み込むようにWWPカードを生成して、MCNPの入力データに追加する。

```
c * added by ADVANTG
wwp:n 5.0 j 100 j -1 0 8.996222181e-08
```

ADVANTGコード(バージョン3.2.1)の適用範囲

- 中性子、光子単独あるいは中性子-光子問題のMCNP計算に適用できる。
- 中性子-光子問題で二次ガンマ線を計算する際には、二次ガンマ線のタリーに対してADVANTGを適用する。中性子のタリーに対して適用する場合は、ガンマ線のWeight Window Parameterが生成されないので、中性子単独の問題として計算しないと、MCNPでエラーとなる。
- 最新のMCNP6.3を含むMCNP4以降の全てのMCNPで用いることのできるWWINPファイルと、線源バイアスデータ(入力データに組み込み)を生成できる。
- ただし、ADVANTG3.2.1から呼び出されるMCNPのバージョンはMCNP5 1.60であるため、ADVANTGに与えるMCNP入力データはこのバージョンまでのものに限られる(例えば、MCNP6で可能になった円筒状面線源は使えない)。
- 連続エネルギーの線源分布(Watt型の核分裂スペクトルなど)もエネルギー分割(SIカード)を指定することで扱えるが、粗すぎる群分割だと誤ったバイアスを与えることがある。
- 波高分布(F8タリー)とともに用いるには注意が必要である。光子-電子問題だけF8タリーとWeight Windowを組み合わせることができるが、ADVANTGと組み合わせた場合、MCNPの計算で多大なコアメモリーを要することがある。中性子-光子-電子問題(二次ガンマ線)での電子のF8タリーにはWeight Windowそのものが使えないので、ADVANTGは適用できない。

VI 様々な問題へのCADIS法の適用事例

1. グラファイト透過実験（海技研）
2. ストリーミングを伴う線量分布の計算（JEZEBEL実験）
3. 事故時原子炉からのスカイシャイン線量

1. グラファイト透過実験(海技研)

- 海技研・植木氏のグラファイト透過実験の解析にADVANTGを使用した例が、サンプル問題としてADVANTGコードのマニュアル*に示されている。

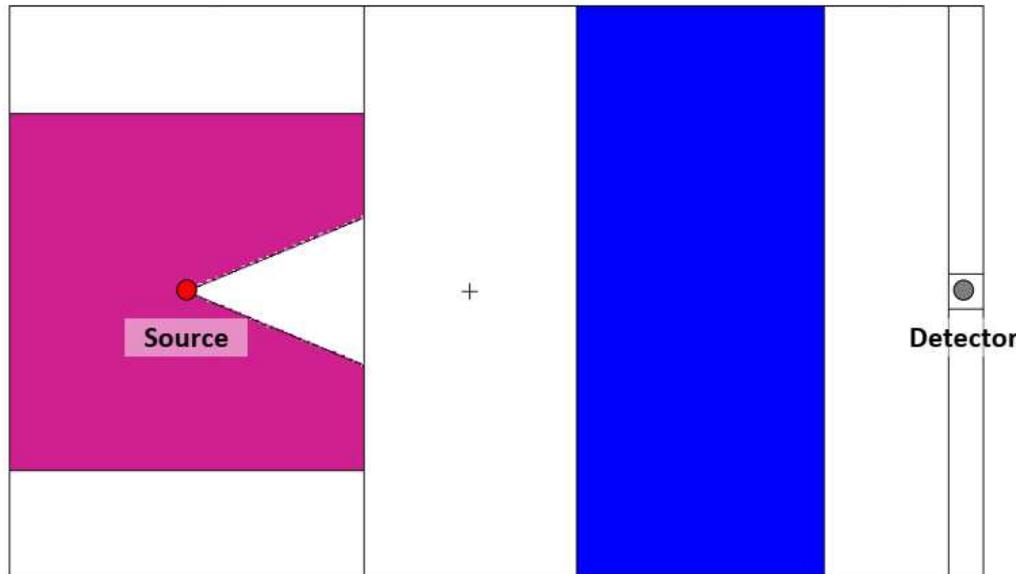


Fig. 7-3. MCNP model of Ueki experiment for the $T = 35$ cm case.

MCNP計算モデル

* S. W. Mosher, S. R. Johnson, A. M. Bevill, A. M. Ibrahim, C. R. Daily, T. M. Evans, J. C. Wagner, J. O. Johnson, R. E. Grove, *ADVANTG—An Automated Variance Reduction Parameter Generator*, ORNL/TM-2013/416 Rev. 1 (August 2015)

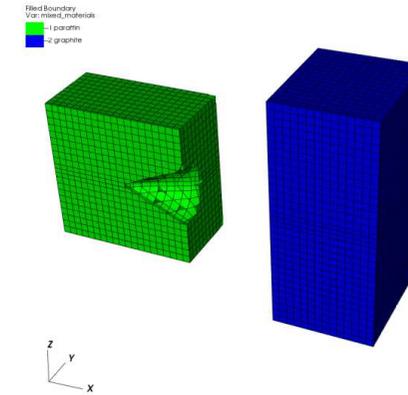


Fig. 7-5. Discretized material map for the Ueki problem.

```

method          cadis

mcnp_input      ueki35      # MCNP input filename
mcnp_tallies    5           # Tally id(s)
mcnp_material_names 1 paraffin # For visualization output
                 2 graphite

anisn_library   27n19g     # Multigroup library for Denovo
                 # SN calculation

denovo_pn_order 1         # Low-order angular approx is
denovo_quad_num_polar 2    # sufficient for this
denovo_quad_num_azim 2    # scattering-dominated problem

# Mesh is nominally uniform with 2.5cm-thick cells. Planes are selected so
# as to avoid putting a mesh boundary on the detector at (110, 0, 0).

mesh_x          -25 107.5 112.5 # Coarse mesh boundaries
mesh_x_ints     53 3          # Number of fine meshes per coarse mesh

mesh_y          -40 -2.5 2.5 40
mesh_y_ints     15 3 15

mesh_z          -40 -2.5 2.5 40 # Same as y dimension
mesh_z_ints     15 3 15
  
```

Fig. 7-4. ADVANTG input for the Ueki experiment, $T = 35$ cm case.

ADVANTGの随伴計算モデルと入力データ

1. グラファイト透過実験(海技研) (続き)

- ADVANTGを適用することで、体積検出器(F4)、点検出器(F5)ともに大幅な計算効率(FOM)の向上が見られている。

体積検出器(F4)

Table 7-5. Comparison of ADVANTG and MCNP5 F4 tally results

Graphite thickness (cm)	MCNP		ADVANTG	
	Dose rate ($\mu\text{Sv/h}$)	FOM	Dose rate ($\mu\text{Sv/h}$)	FOM
0	454 \pm 8%	25	495 \pm 2.2%	376
2	449 \pm 8%	26	438 \pm 1.4%	853
5	359 \pm 9%	20	370 \pm 1.0%	1831
10	245 \pm 10%	16	270 \pm 0.8%	2854
15	182 \pm 12%	11	189 \pm 0.8%	3065
20	133 \pm 14%	8	132 \pm 0.8%	2970
25	89 \pm 17%	6	89 \pm 0.8%	2740
30	56 \pm 20%	4	59 \pm 0.9%	2292
35	45 \pm 23%	3	40 \pm 0.9%	1922

← 約640倍

点検出器(F5)

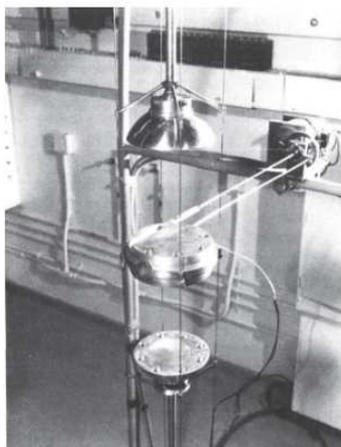
Table 7-6. Comparison of ADVANTG and MCNP5 F5 tally results

Graphite thickness (cm)	MCNP		ADVANTG	
	Dose rate ($\mu\text{Sv/h}$)	FOM	Dose rate ($\mu\text{Sv/h}$)	FOM
0	505 \pm 0.1%	115741	504 \pm 0.03%	1949318
2	442 \pm 0.3%	17343	441 \pm 0.04%	1105217
5	372 \pm 0.5%	7234	371 \pm 0.07%	358877
10	269 \pm 0.7%	3604	271 \pm 0.11%	143522
15	193 \pm 0.9%	2202	192 \pm 0.16%	67349
20	132 \pm 1.0%	1483	132 \pm 0.19%	47528
25	89 \pm 1.3%	986	90 \pm 0.22%	35328
30	59 \pm 1.6%	668	60 \pm 0.26%	25073
35	40 \pm 1.9%	467	40 \pm 0.33%	15595

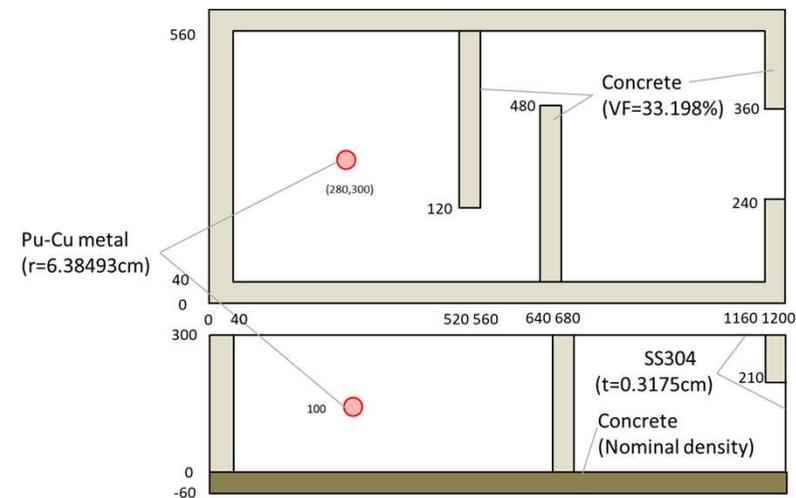
← 約33倍

2. ストリーミングを伴う線量分布の計算 (Jezebel実験)

- Forward CADIS法を用いることにより、CADIS法では難しい線量分布のような複数の点における線量計算値の分散を同時に低減することが可能となる。
- その例として、CADIS法(及びForward CADIS法)による分散低減を行う遮蔽計算システムMAVRIC (SCALEコードシステムの一部)のサンプル問題となっている Jezebel 臨界実験装置の事故解析について示す。
- このサンプル問題は、1954年に実験が行われた球形状のプルトニウム金属の臨界実験装置"Jezebel"が臨界事故を起こした際の実験室周りの線量分布計算を行うものであり、SCALEコードシステムの臨界解析コードKENO-VIを用いて得られた臨界時の中性子源を線源としてMAVRICで線量分布計算を行う。
- ここでは、ADVANTGとMCNPを用いて、この問題をCADIS法及びForward CADIS法を用いた分散低減とともに計算した例を示す。



Jezebelの概観

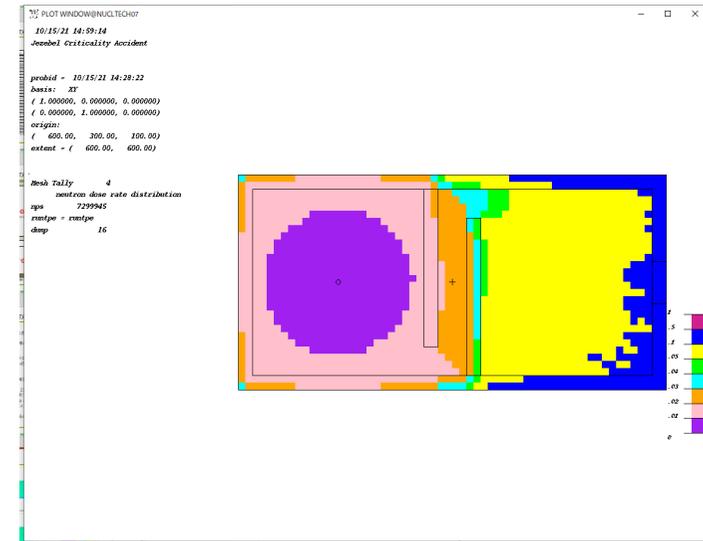
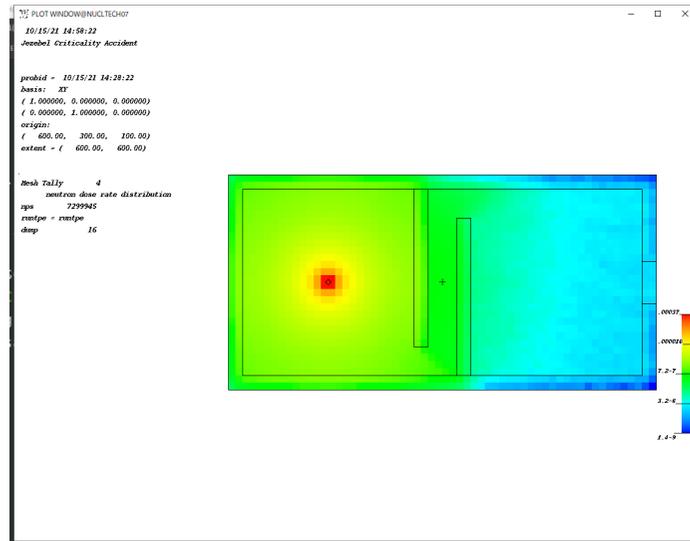


Jezebelの実験室のモンテカルロ法計算モデル

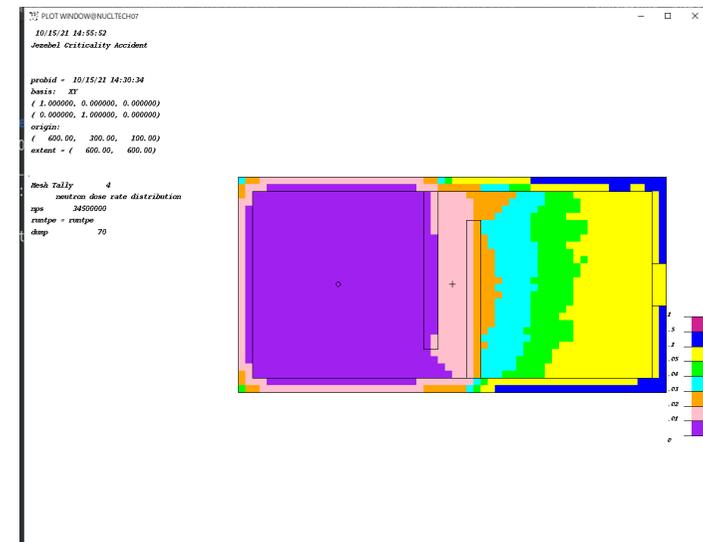
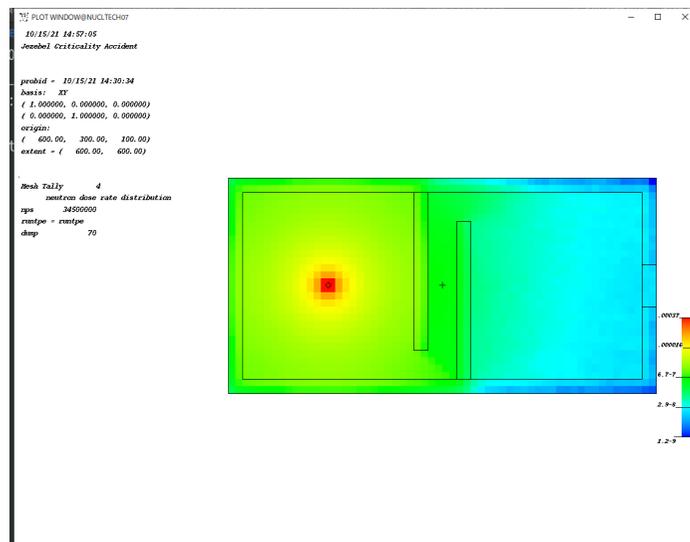
2.ストリーミングを伴う線量分布の計算 (Jezebel実験) (続き)

ADVANTG-MCNPによる計算例

分散低減無し



CADIS



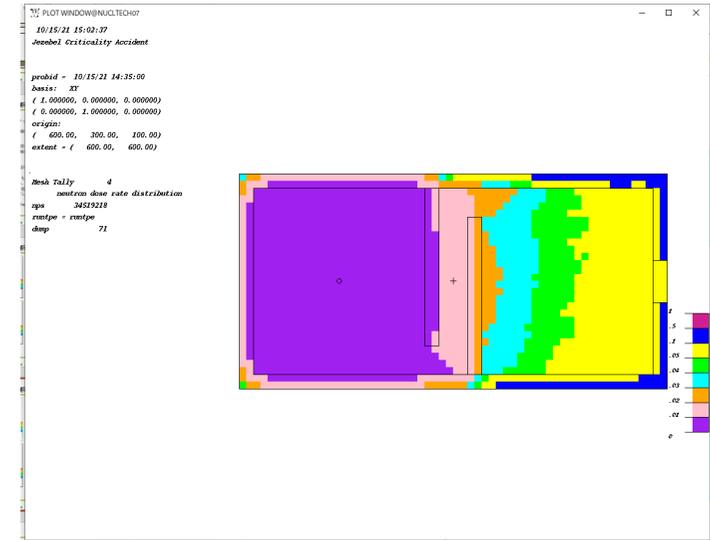
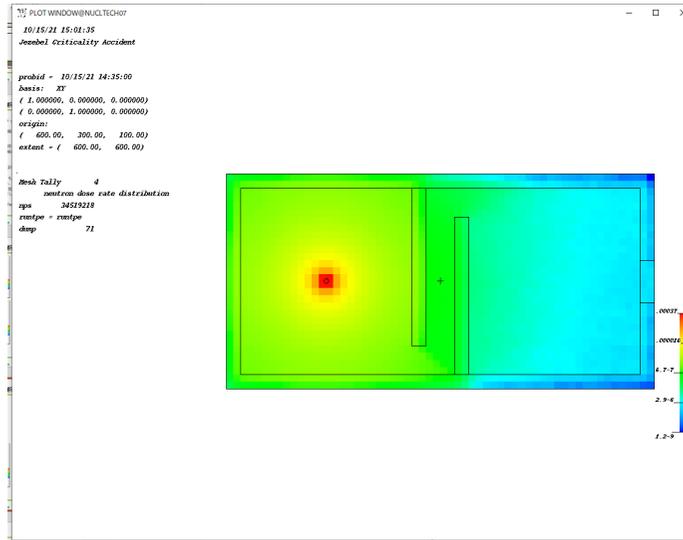
(線量分布)

(統計誤差)

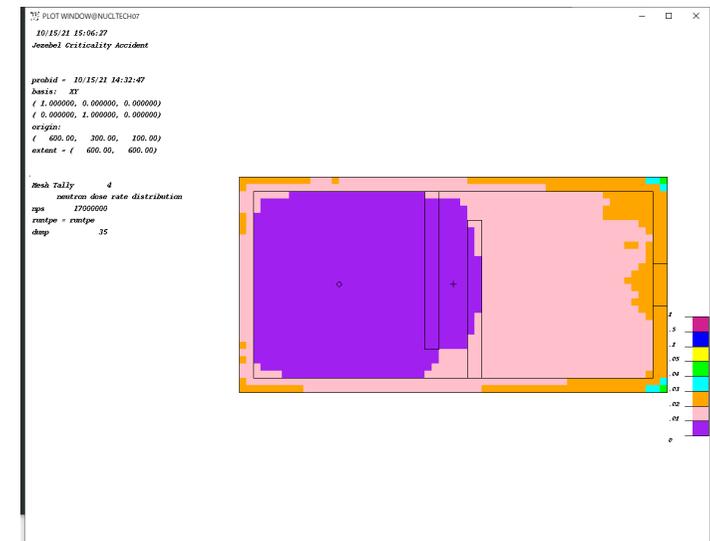
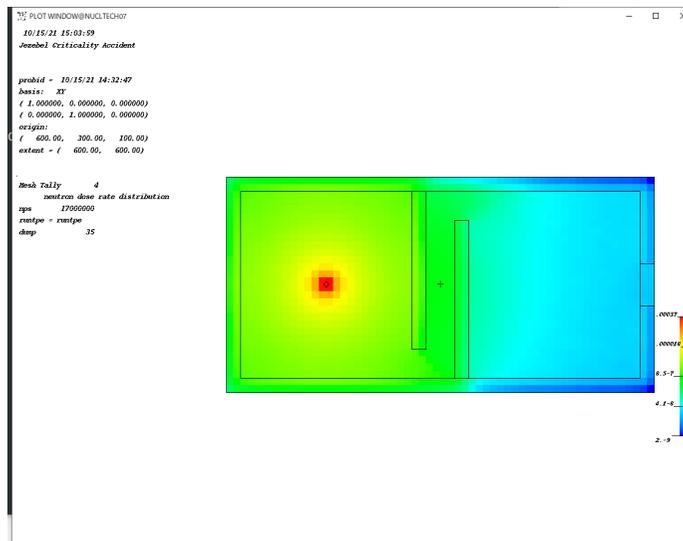
2. ストリーミングを伴う線量分布の計算 (Jezebel実験) (続き)

ADVANTG-MCNPによる計算例(続き)

Forward-CADIS
pathlength



Forward-CADIS
global



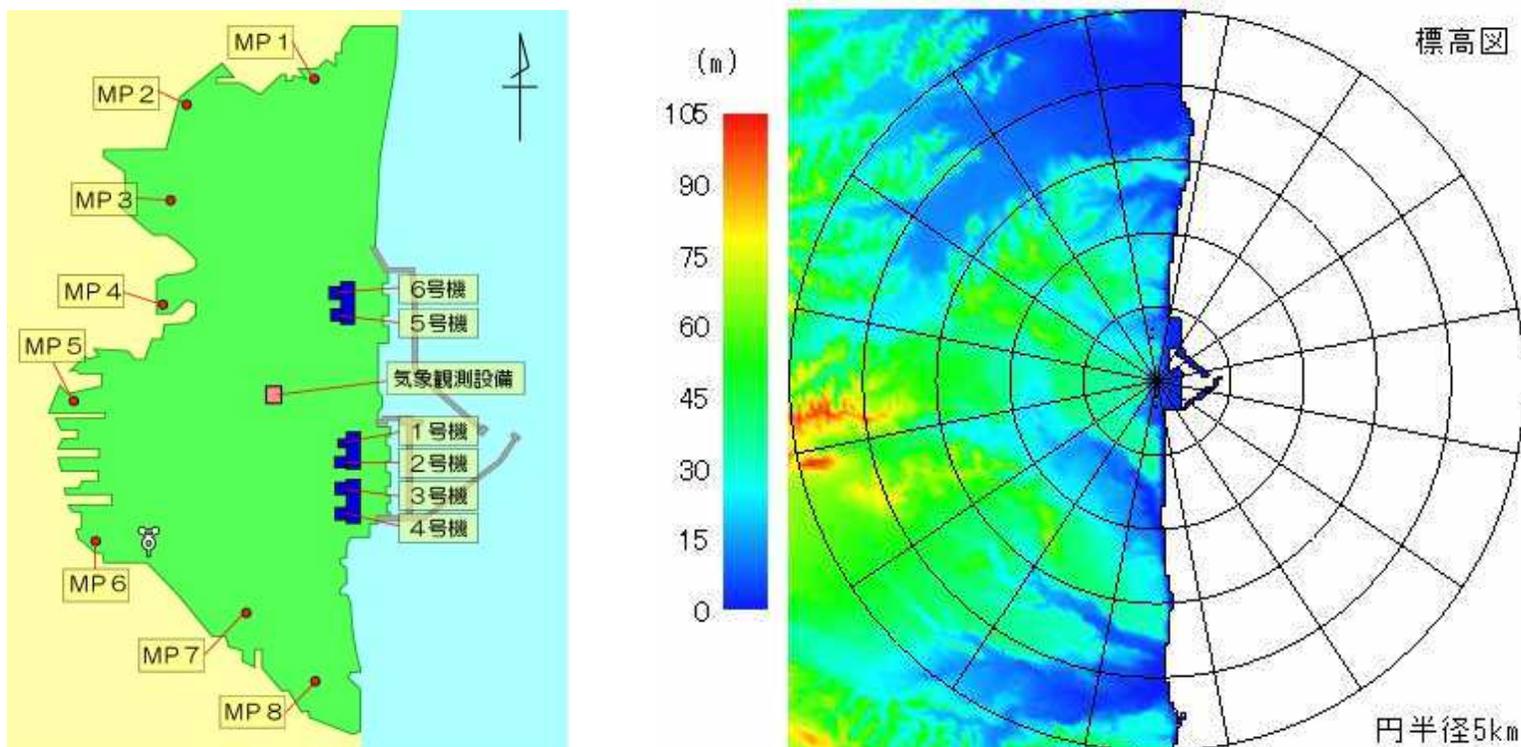
(線量分布)

(統計誤差)

3. 事故時原子炉からのスカイシャイン線量

福島第一原子力発電所周辺(5kmまで)の地形をモデリングして、1号炉の建屋内2-3MeVのガンマ線源が充満した場合の線量率分布を、MCNP4c2に組み込んだ次期イベント面検出器(NESXE)で計算した。

CADIS法(ECBOコード)により、中心から2,3,4kmの円状の検出器に対して分散低減を最適化し、それらの計算結果を統計誤差を重みとして平均した。その結果、当時の計算機能力(シングルコア、Pentium4)でも数時間で、2.5km付近までほぼ10%以下、4km付近でも20%程度の統計誤差で線量率分布を求めることが出来た。

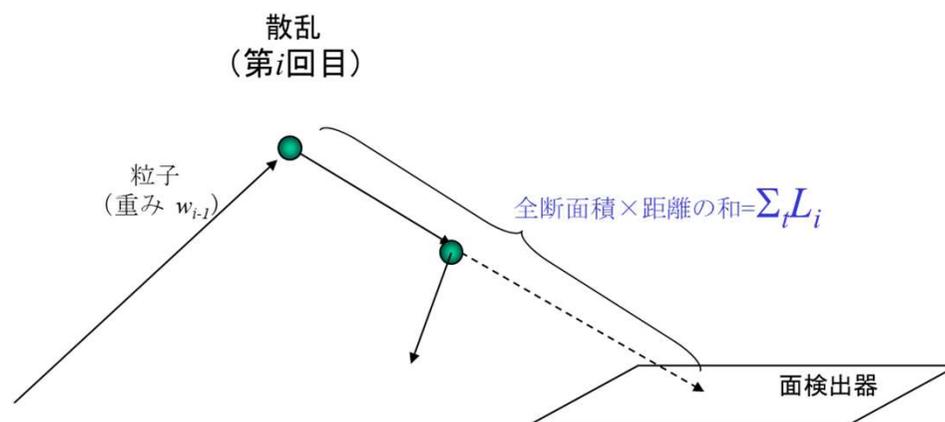


3. 事故時原子炉からのスカイシャイン線量（続き）

次期イベント面検出器(NESXE)

- NESXEは、散乱が生じて粒子の方向が定まったら、散乱後の飛跡の延長が設定した面検出器と交叉するかどうかを調べて、交叉する場合には散乱点から面検出器までの減弱を乗じた粒子の重みをカウントする検出器である。
- 散乱のたびに検出器の方向を向く確率と減弱を乗じた重みを常にカウントする点検出器と比べると、実際にその方向に向いた粒子だけをカウントするNESXEは、突然にタリー値が上昇するような不安定性は少ないと考えられる。
- 面検出器をメッシュ状に与えることにより、平面上での線量率分布をNESXEで容易に求めることができ、NESXEのメッシュ毎の高さを変えることにより、地形に応じた地表の線量分布も求めることができる。
- MCNPのオリジナルのタリーには無いが、MCNP4c2に組み込むためのTALLYXサブルーチンは作成されて使用されたことがある。

NESXEの原理

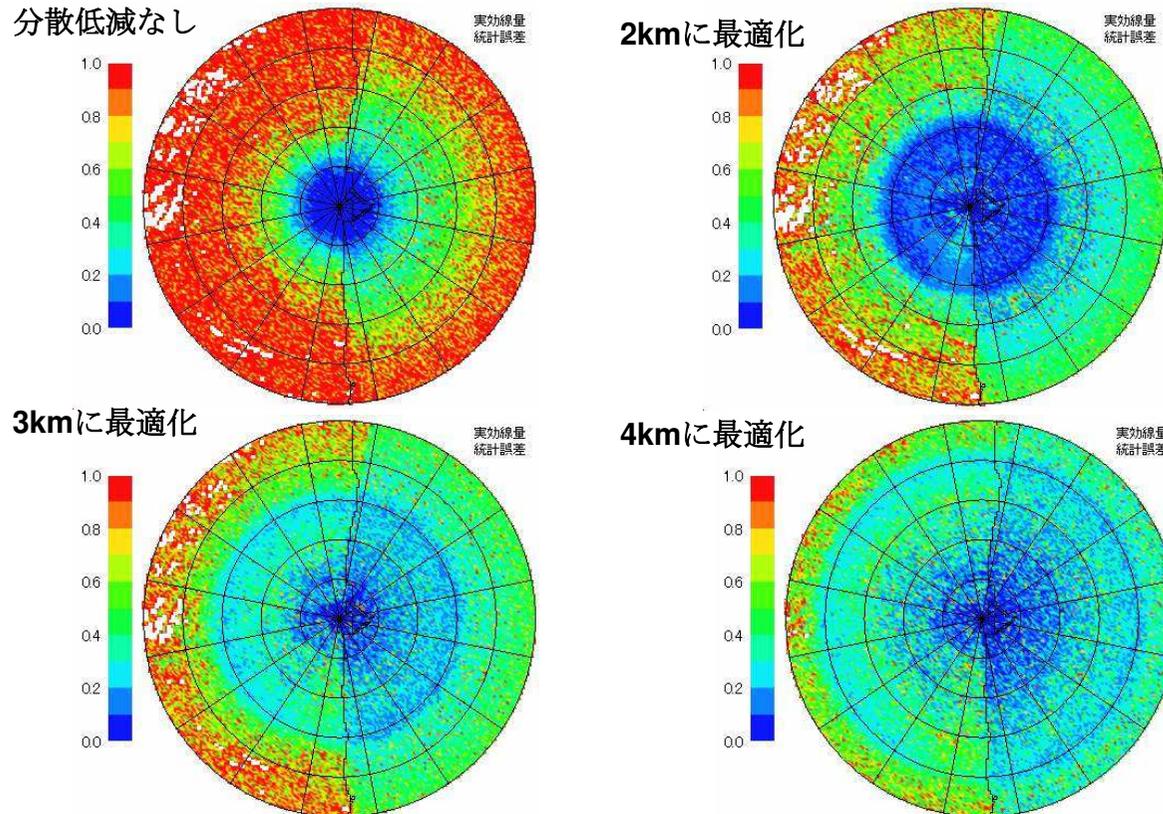


この粒子による面検出器での線束

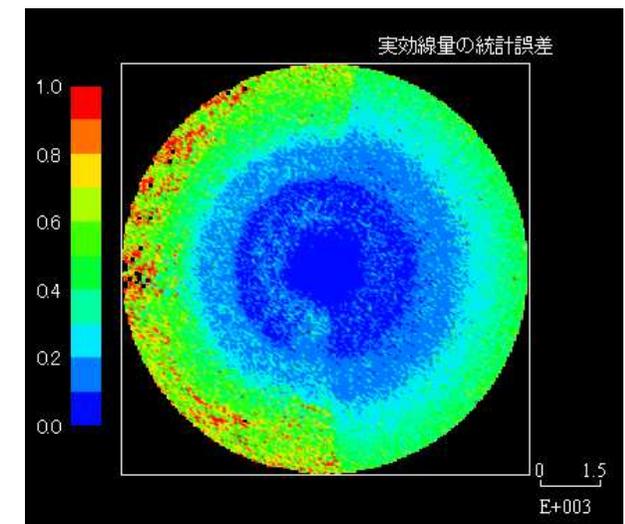
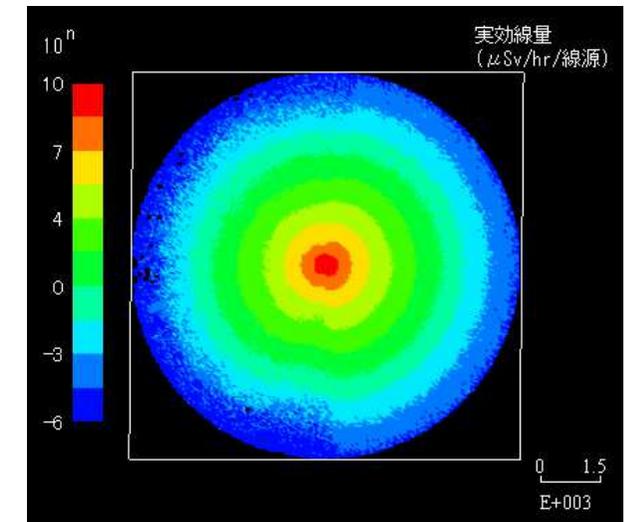
$$\phi = \sum_i \frac{w_i \cdot \exp(-\sum_t L_i)}{\cos \theta_i}$$

3. 事故時原子炉からのスカイシャイン線量（続き）

最適分散低減のターゲットとする距離毎の統計誤差



平均した線量率と統計誤差



VII まとめ

まとめ

- モンテカルロ法遮蔽解析において、自動分散低減法は欠くことの出来ない技術となってきている。
- 自動分散低減法の中でも、CADIS法及びForward CADIS法は現時点での深層透過問題における“Golden Standard”である。
- ORNLによりADVANTGコードが開発されたことで、モンテカルロ法遮蔽解析コードのデファクト・スタンダードであるMCNPでも、CADIS法及びForward CADIS法による自動分散低減が可能になり、許認可申請解析でも用いられるなど、実用化が進んでいる。
- ただし、ADVANTGコードにも、XYZメッシュでしかWeight Window Parameterを与えられない、MCNP5にしか対応していない、などの制限があり、今後、さらに使い勝手のよいCADIS法及びForward CADIS法に基づく自動分散低減コードの開発が期待される。