

修士論文

次元削減を用いた
炉心解析用断面積テーブルの圧縮

名古屋大学大学院

工学研究科博士前期課程

総合エネルギー工学専攻

山本章夫研究室

山本 真人

令和2年2月

目次

第1章	序論	3
1.1	背景	3
1.1.1	核反応断面積	4
1.1.1.1	微視的断面積	4
1.1.1.2	巨視的断面積	5
1.1.1.3	共鳴と実効断面積	6
1.1.2	核計算	9
1.1.2.1	格子計算	11
1.1.2.2	炉心計算	13
1.1.2.3	燃焼計算	15
1.1.3	核反応断面積のテーブル化	17
1.1.4	炉心解析手法の高度化に伴う課題	20
1.2	本研究の目的	22
1.3	本論文の構成	22
1.4	参考文献	22
第2章	次元削減に基づいた断面積圧縮手法	25
2.1	本章の概要	25
2.2	次元削減手法	25
2.2.1	固有値分解	25
2.2.2	特異値分解	27
2.2.3	低ランク近似	32
2.2.4	簡易的な核反応断面積に対する次元削減の適用例	33
2.3	Reduced Order Modeling (ROM)	38
2.4	本章のまとめ	43
2.5	参考文献	43
第3章	巨視的・微視的断面積に対する次元削減手法の適用	44
3.1	本章の概要	44
3.2	本研究における精度目標	44
3.3	本研究で用いた計算コード	44
3.4	巨視的断面積に対する次元削減の適用	46
3.4.1	巨視的断面積を用いた行列の作成手順	46
3.4.2	再構成断面積を用いた集合体計算	48
3.4.2.1	計算条件	48

3.4.2.2	計算結果.....	56
3.5	巨視的・微視的断面積に対する次元削減手法の適用.....	61
3.5.1	巨視的・微視的断面積を用いた行列の作成手順.....	62
3.5.2	巨視的断面積の再構成.....	63
3.5.3	再構成断面積を用いた集合体計算.....	64
3.5.3.1	計算条件.....	64
3.5.3.2	計算結果.....	66
3.6	微視的断面積に対する次元削減手法の適用.....	71
3.6.1	微視的断面積を用いた行列の作成手順.....	72
3.6.2	再構成断面積を用いた集合体計算.....	72
3.6.2.1	計算条件.....	72
3.6.2.2	計算結果.....	73
3.7	重みづけを用いた次元削減手法の検討.....	75
3.7.1	断面積への重みづけの適用.....	75
3.7.1.1	原子数密度を用いた重みづけ.....	75
3.7.1.2	中性子束を用いた重みづけ.....	76
3.7.1.3	原子数密度及び中性子束を用いた重みづけ.....	77
3.7.2	重みづけを用いた再構成断面積の集合体計算の比較.....	77
3.7.2.1	計算条件.....	77
3.7.2.2	計算結果.....	77
3.8	本章のまとめ.....	88
3.9	参考文献.....	88
第4章	次元削減に基づいた炉心解析用断面積テーブルの開発.....	90
4.1	本章の概要.....	90
4.2	ROMを用いた微視的断面積の再構成.....	92
4.2.1	微視的断面積テーブルに対するROMの作成.....	92
4.2.2	再構成された微視的断面積を用いた集合体計算.....	97
4.2.2.1	計算条件及び手順.....	97
4.2.2.2	計算結果.....	100
4.3	本章のまとめ.....	106
4.4	参考文献.....	107
第5章	結論.....	108
5.1	まとめ.....	108
5.2	今後の課題.....	109
公刊論文一覧	111

第1章 序論

1.1 背景

現在の日本国内の原子力発電では、沸騰水型原子炉(**Boiling Water Reactor: BWR**)と加圧水型原子炉(**Pressurized Water Reactor: PWR**)の2種類のどちらかが商業炉として採用されている。現在の日本の商業炉は、燃料装荷後から13ヶ月を1サイクルとした運転が行われ、その後定期検査のため運転は停止される。各サイクルの燃料装荷パターンを決定するには、サイクル運転開始前にそのサイクルでの安全性を予め確認しておく必要がある^{[1],[2]}。そのため、炉心設計時には燃料装荷パターンに対して炉心解析が実施され、得られた炉心特性パラメータが安全解析によって決められた基準値の範囲内であることを確認することによって原子炉の安全性が担保されている。具体的には、各反応度係数、出力ピーキング係数、制御棒価値、スクラム反応度、即発中性子寿命、遅発中性子割合といった炉心特性パラメータの代表値に対して安全解析が予め実施されており、炉心設計時に得られる各炉心特性パラメータが代表値より安全側であることを確認している。このときの安全余裕がどの程度存在しているのかについては現状定量化されていない部分が多く、これをカバーするためにも精緻な炉心解析手法の開発が求められている。

原子炉は、BWRで約760体、PWRで約200体の燃焼度の異なる燃料集合体から構成されている。このとき、燃料集合体は多数の燃料棒から構成され、1本の燃料棒は燃料ペレットと被覆管から構成されている。また、燃料ペレットの組成は原子炉運転による燃焼とともに変化し、その変化割合は燃料の装荷位置によっても異なる。中性子と原子核の相互作用の確率は核反応断面積によって表されるが、炉内の複雑な幾何形状を考慮しつつ核反応断面積を正確に取り扱うことは、現状の計算機の性能では計算時間及び記憶容量の観点から困難である。したがって、現在の炉心解析手法では、まず格子計算によってセル単位あるいは集合体単位といった小規模体系での計算を行い、小規模体系で断面積に対して空間及びエネルギーの平均化を行う^{[3],[4]}。この平均化によって空間・エネルギーについて簡易的に取り扱うことで、次のステップである炉心計算での計算コストを削減している。このとき、平均化される体系が詳細であるほど平均化誤差は低減するため、計算機の性能の向上及び解析手法の高度化に伴い計算条件の詳細化が行われてきた。具体的には、これまでの炉心設計では集合体単位での均質化が行われており、近年はより詳細な方法として燃料セル単位で均質化する詳細メッシュ炉心計算手法が開発されている^{[5],[6],[7],[8]}。

一方で、燃料セル単位の均質化においても、物質毎の断面積を均質化したことによる誤差が生じる。例えば、燃料セル内には燃料棒と、減速材である水の領域が存在している。また、燃料棒は主に燃料ペレットと被覆管から構成されており、更に燃料ペレットのみに注目しても、ペレット中心部と外周では中性子スペクトルの影響が異なるため、同一の組成でも実効的な微視的断面積に差異が生じる。したがって、燃料セル単位で均質化した場合において

も、断面積の異なる複数の物質領域を均質化したことによる均質化誤差が生じている。このことから、将来的には物質領域毎の断面積を考慮し、より空間的に詳細に取り扱える手法が主流になることが予想される。また、エネルギーについても、現行の手法では格子計算の過程で平均化（エネルギー群縮約）を行っており、炉心計算では2~3群まで縮約されているものの、将来的には格子計算で得られたより詳細な群数の断面積を保持して炉心計算を行うことが望ましい。

しかし、空間・エネルギーについて詳細な炉心計算を行う場合、断面積のデータ量が膨大になるという問題が生じ、この場合現実的な計算機資源では処理が難しいため、断面積データの圧縮が求められる。したがって、本研究では将来的な高解像度炉心解析に必要な断面積テーブルに対する効率的な圧縮手法の開発を目的としている。

1.1.1 核反応断面積

中性子などの粒子が原子核に衝突した場合、原子核が別の原子核に変換される、原子核が励起される、等の現象が起こる。これらの原子と粒子の相互作用によって生じる現象を核反応と呼ぶ。原子炉内で核反応を生じさせる粒子は主に中性子である。代表的な核反応を Figure 1-1 に示す。

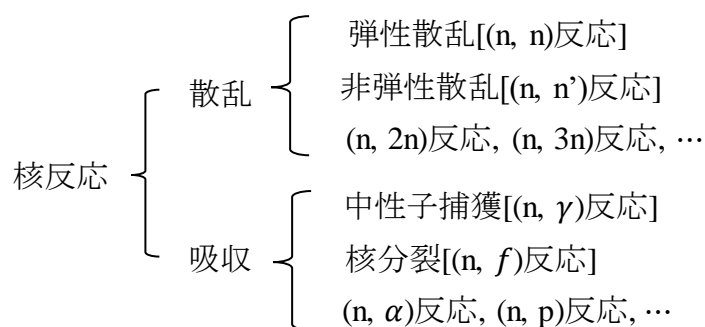


Figure 1-1 核反応の種類^[9]

この核反応を定量的に扱うため、核反応断面積（断面積）を用いる。核反応断面積とは、中性子が原子核と核反応を起こす確率に相当する量である。核反応断面積には微視的断面積、巨視的断面積の2種類が存在し、それぞれの物理的意味について本節で説明する。

1.1.1.1 微視的断面積

微視的断面積とは、1個の原子核が中性子と核反応を起こす確率であり、単位は barn (1 barn = 10^{-24} cm²) を用いる。微視的断面積の概念図を Figure 1-2 に示す。Figure 1-2 は、 n [個/cm³]の中性子が平均速度 v [cm/s] で原子核方向へ飛んでいく様子を示しており、このとき単位時間単位体積あたりに1個の原子核と衝突する中性子の数は $n \cdot v \cdot \sigma$ で表される。ここで、 $n \cdot v$ は中性子束 [1/cm²/s] と呼ばれ、記号 ϕ で表される。

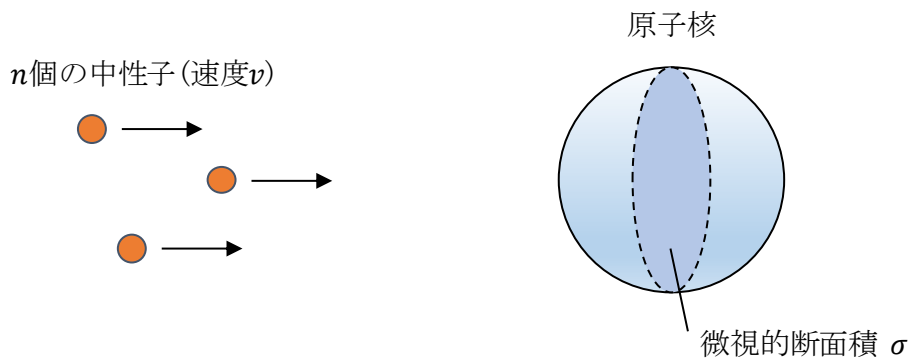


Figure 1-2 微視的断面積の概念図

1.1.1.2 巨視的断面積

微視的断面積は1個の原子核と中性子束のマイクロな体系での相互作用を考慮しているが、これを原子核が複数個存在するマクロな体系に拡張したものが巨視的断面積である。巨視的断面積の概念図を Figure 1-3 に示す。Figure 1-3 では、微視的断面積が σ である原子核が原子数密度 N [1/cm³]で単位体積内に存在している様子を示している。

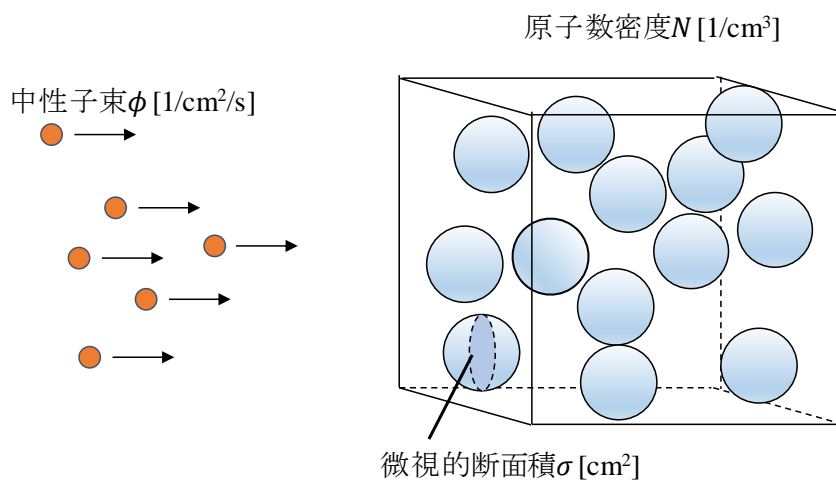


Figure 1-3 巨視的断面積の概念図

巨視的断面積[1/cm]は、単位距離当たりを進む中性子が原子核と衝突する確率を示し、式(1.1)で定義される。

$$\Sigma = N\sigma \quad (1.1)$$

物質の単位体積単位時間あたりに核反応が発生する回数を反応率と呼び、反応率 R は式(1.2)で表される通り、巨視的断面積 Σ と中性子束 ϕ の積で表される。

$$R = N\sigma\phi = \Sigma\phi \quad (1.2)$$

微視的断面積及び巨視的断面積は、Figure 1-1 の各核反応に対して定義される。また、微視的断面積は核種毎に異なるため、原子数密度が同じであっても核種毎の巨視的断面積は異なる。本研究では、単に巨視的断面積と呼ぶ場合、単位体積に存在する全ての核種の巨視的断面積の総和とする。すなわち、巨視的断面積 Σ_x は式(1.3)で定義される。

$$\Sigma_x = \sum_i N_i \sigma_{x,i} \quad (1.3)$$

ここで、 x は反応の種類、 i は核種の種類を表すインデックスである。

炉心解析において原子炉体系での中性子の巨視的な輸送を考える上でこの巨視的断面積を用いており、中性子束との掛け算により炉内の空間的な反応率を計算している。

1.1.1.3 共鳴と実効断面積

1.1.1.1、1.1.1.2 節では、中性子の反応を考える上での微視的断面積及び巨視的断面積の概念を説明した。一方で、微視的断面積は中性子及び核種の密度だけでなく、中性子の相対的な速度ひいては中性子のエネルギーによって変化する。例として、 ^{235}U と ^{238}U のエネルギーに対する微視的断面積の変化をそれぞれ Figure 1-4、Figure 1-5 に示す。

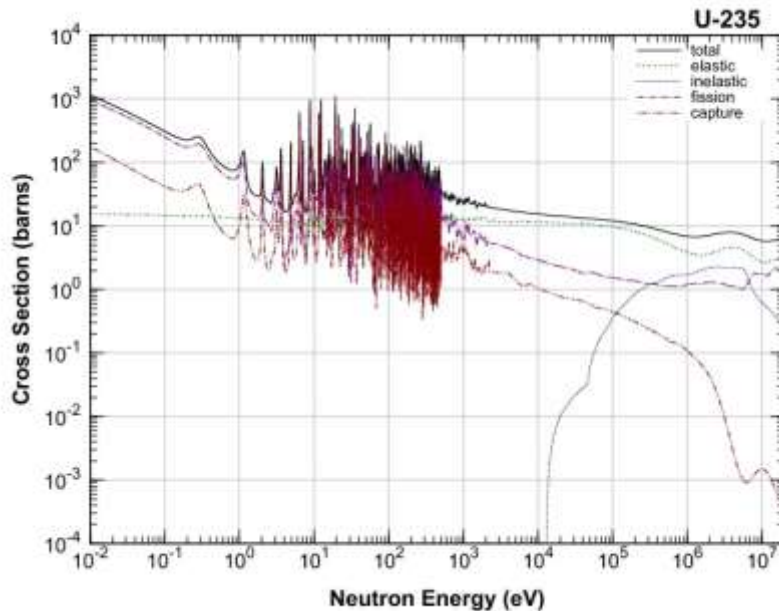


Figure 1-4 ^{235}U の微視的断面積： JENDL-4.0^[10]

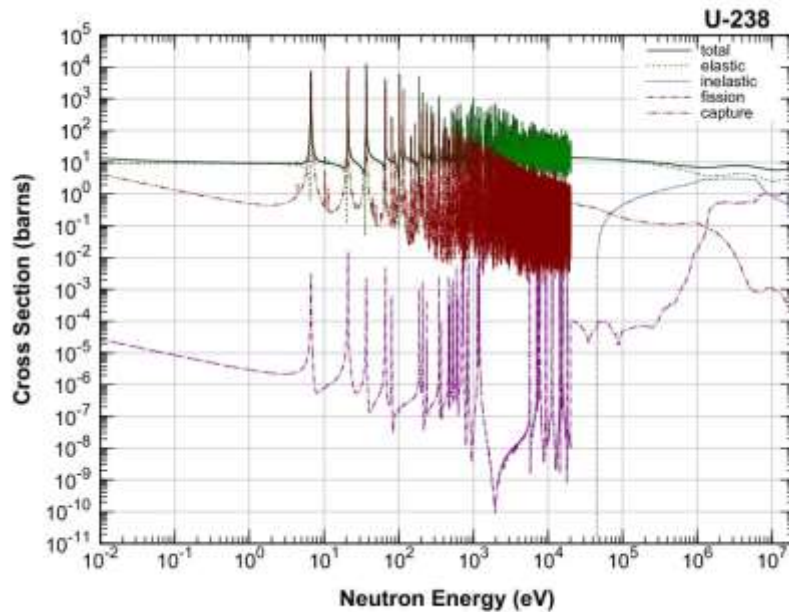


Figure 1-5 ^{238}U の微視的断面積： JENDL-4.0^[11]

Figure 1-4、Figure 1-5 では、各核種の核反応毎に微視的断面積のエネルギーに対する依存性が異なっていることを示している。また、各断面積はあるエネルギー領域において大きく変動していることがわかる。このエネルギーに対する断面積の急激な変化を共鳴と呼ぶ。共鳴は各核種の原子核の励起エネルギー準位に対して中性子のエネルギーが合致することで、中性子と原子核が反応しやすくなることによって生じている。

実験データとして与えられる断面積は数万点分存在し、これらのデータは JENDL や ENDF 等の評価済み核データライブラリに収納されている^{[12], [13]}。したがって、共鳴を正確に取り扱って炉心解析を行うためにはエネルギーを数万点まで離散化することが理想であるが、その場合炉心解析で用いられる全ての断面積のデータ量は極めて膨大になるため非現実的である。

そこで、核計算ではあるエネルギー範囲での中性子及び断面積をエネルギー群として平均化（多群化）しており、中性子のエネルギーへの依存性を離散化して取り扱っている。また、炉心解析は直接炉心体系での計算を行うのではなく、ピンセルといった小規模体系に始まり、集合体体系、炉心体系と段階的に体系を拡張している。このとき、体系規模が大きくなるにつれて、詳細なエネルギー分割から粗いエネルギー分割へとエネルギー群数を少なくして断面積を平均化しており、これによる断面積のエネルギー群数の縮小を群縮約と呼ぶ。

あるエネルギー区間における連続的な微視的断面積の平均値は、中性子束を重みとして式(1.4)で表される^[14]。

$$\sigma_g = \frac{\int_{E_g - \Delta E_g}^{E_g} \sigma(E) \phi(E) dE}{\int_{E_g - \Delta E_g}^{E_g} \phi(E) dE} \quad (1.4)$$

ここで、

E : 連続的なエネルギー

$\sigma(E)$: 連続エネルギーに対する微視的断面積

$\phi(E)$: 連続エネルギーに対する中性子束 (中性子スペクトル)

g : エネルギー群数 (高エネルギー領域から順に 1 群、2 群、…、とする。)

E_g : g 群におけるエネルギーの上限値

ΔE_g : g 群におけるエネルギー区間幅

である。このとき、エネルギーに対して平均化された多群微視的断面積 σ_g を実効断面積と呼ぶ。式(1.4)より、あるエネルギー区間における実効断面積は中性子スペクトルに依存している、そのため、燃料の組成が同じでも中性子スペクトルが空間領域によって異なる場合、空間領域毎の実効断面積は異なる。

式(1.4)を用いて実効断面積を求めるためには、注目する領域の中性子スペクトルが予め求められている必要がある。一方で、そもそも炉心解析の役割の一つが炉内の中性子束分布及び反応率分布を求めることであるため、事前に正確な中性子スペクトルを求めることはできない。したがって実際の解析では、小規模かつ簡略化された体系での中性子スペクトルを近似的に求め、それを用いて実効断面積を計算している。この実効断面積の計算過程は共鳴計算と呼ばれ、共鳴の影響を妥当に考慮するために様々な計算モデルが考案されている。ここでは代表的な近似方法である **Narrow Resonance** 近似 (NR 近似) を説明する^[14]。これは、共鳴の幅が十分小さく、共鳴部分の中性子束のひずみを見捨てるという仮定である。NR 近似を用いることで、減速材核種 m と共鳴核種 r が混合した均質体系での中性子スペクトルは式(1.5)で表現できる。

$$\phi(E) = \frac{1}{E} \frac{N_m \sigma_{s,m} + N_r \sigma_{p,r}}{N_m \sigma_{t,m} + N_r \sigma_{t,r}(E)} \quad (1.5)$$

ここで、

m : 減速材核種を表すインデックス

r : 共鳴核種を表すインデックス

N : 原子数密度

σ_s : 微視的散乱断面積

σ_p : 微視的ポテンシャル散乱断面積

σ_t : 微視的全断面積

である。このとき、共鳴核種 1 個当たりの減速材核種の断面積として、バックグラウンド断面積 σ_b を定義する。

$$\sigma_b = \frac{N_m}{N_r} \sigma_{s,m} = \frac{N_m}{N_r} \sigma_{t,m} \quad (1.6)$$

式(1.6)のバックグラウンド断面積を用いることで、式(1.5)は式(1.7)として変形できる。

$$\phi(E) = \frac{1}{E} \frac{\sigma_b + \sigma_{p,r}}{\sigma_b + \sigma_{t,r}(E)} \quad (1.7)$$

式(1.7)より、中性子スペクトルはエネルギーとバックグラウンド断面積に依存する形で表すことができる。このことから、バックグラウンド断面積の変化、すなわち減速材密度と共鳴核種の密度の比の変化に伴って実効断面積も変化する。

1.1.2 核計算

原子炉内では、中性子と原子核が衝突することで様々な反応が生じている。例えば、 ^{235}U による核分裂反応、 ^{238}U に中性子が捕獲される捕獲反応、減速材である軽水 (H_2O) によって中性子が減速される弾性散乱反応などが挙げられる。核計算では、核分裂、捕獲、散乱といった各核反応による中性子の挙動を取り扱うことで、炉心内の中性子束分布及び反応率分布を計算している。

体系内の中性子の時間及び空間に対する挙動は、式(1.8)のボルツマン輸送方程式によって表される^[15]。

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t)}{\partial t} = & -\boldsymbol{\Omega} \nabla \psi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) - \Sigma_t(E) \phi(\mathbf{r}, E, \boldsymbol{\Omega}, t) \\ & + \int_{4\pi} d\boldsymbol{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, t) \psi(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}', t) \\ & + \frac{\chi(E)}{4\pi} \frac{1}{k_{eff}} \int_{4\pi} d\boldsymbol{\Omega}' \int_0^\infty dE' v \Sigma_f(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}', t) \psi(\mathbf{r}, E', \boldsymbol{\Omega}', t) \end{aligned} \quad (1.8)$$

ここで、

\mathbf{r} : 位置

E : 中性子のエネルギー

$\boldsymbol{\Omega}$: 中性子の飛行方向

t : 時間

v : 中性子の速さ

ψ : 角度中性子束

Σ_t : 巨視的全断面積

Σ_s : 巨視的散乱断面積

$v\Sigma_f$: 巨視的生成断面積

χ : 核分裂スペクトル

k_{eff} : 実効増倍率

である。

式(1.8)において、左辺は角度中性子の時間変化を表している。また、右辺第一項は角度中性子の体系外部への漏洩、右辺第二項は体系内での全反応による角度中性子の吸収、角度変化、エネルギー変化に伴う消失、右辺第三項は散乱による角度変化及びエネルギー変化に伴う角度中性子の生成、右辺第四項は核分裂による角度中性子の生成をそれぞれ表している。

一般に核計算では、時間に依存しない定常状態での中性子束分布を取り扱うため、左辺の時間微分を 0 としている。定常状態でのボルツマン輸送方程式を式(1.9)に示す。

$$\begin{aligned} & \Omega \nabla \psi(\mathbf{r}, E, \Omega) + \Sigma_t(E) \psi(\mathbf{r}, E, \Omega) \\ &= \int_{4\pi} d\Omega' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega) \psi(\mathbf{r}, E', \Omega') \\ &+ \frac{\chi(E)}{4\pi} \frac{1}{k_{eff}} \int_{4\pi} d\Omega' \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, E', \Omega') \psi(\mathbf{r}, E', \Omega') \end{aligned} \quad (1.9)$$

このとき、位置ベクトル \mathbf{r} は (x, y, z) の 3 次元座標で表され、角度ベクトル Ω も極角 θ と方位角 φ で表される。すなわち、角度中性子束の依存性は式(1.10)で表される。

$$\psi(\mathbf{r}, E, \Omega) = \psi(x, y, z, E, \theta, \varphi) \quad (1.10)$$

式(1.10)において角度中性子束は 6 つの独立変数からなるため、炉心体系とって複雑な体系において式(1.9)を厳密に解くことは難しい。したがって、実際の核計算では空間、エネルギー、角度方向に対して近似を適用し、数値計算によって式(1.10)を解いている。

空間的な離散化は有限差分法によって行われることが多い。これは、体系の領域をメッシュで区切り、メッシュ内で中性子を平均化することで離散化している。エネルギーの離散化は、多群化によってエネルギー領域をある区間で区切り、区間ごとに平均化することで行われている (1.1.1.3 節参照)。角度方向の取り扱いは、離散化あるいは関数展開によって行われる^{[15], [17]}。角度方向を離散化して取り扱う手法として、Characteristic 法 (**Method Of Characteristic : MOC**) や S_N 法が存在する。特に MOC は近似が少なく複雑形状への適用性も高いため、セル体系または単一集合体体系での非均質輸送計算において主流な手法の一つである^{[18], [19]}。関数展開では、一般的に角度中性子束を正規直交関数によって展開する。炉心解析手法でよく用いられる正規直交関数は球面調和関数またはルジャンドル多項式であり、これらは角度中性子束の方位角方向への依存性を関数展開するものである。球面調和関数を用いた手法である拡散法 (または P_N 法)、及びルジャンドル多項式を用いた手法である Simplified P_N 法は、MOC ほど高精度ではないものの、計算コストが低いことから大規模な炉心体系での計算で主流な手法である^{[4], [20]}。

例えば、数百群といった詳細群の非均質断面積を用いて、三次元炉心体系に対して詳細群の非均質輸送計算を行うことを考えた場合、その計算コストは極めて膨大である。これは、空間・エネルギー・角度方向を離散化した場合、離散化領域毎にボルツマン輸送方程式を立てて解く必要があるため、三次元炉心体系の詳細群非均質輸送計算では解くべき連立微分方程式が膨大かつ複雑であること、そして必要な断面積のデータ量を入力する上でさらに

膨大な計算メモリが要求されることが原因である。加えて炉心解析全体では、核計算だけでなく燃焼計算、熱水力計算を組み合わせることで炉心状態を更新する必要があり、更新された炉心状態に対して複数回の輸送計算を行う必要がある。

したがって実際の核設計においては、核計算を格子計算と炉心計算の二段階にわけると、空間・エネルギーに関する詳細な情報を極力保ちつつ段階的に情報量を削減し、実用的な計算コスト内で炉心解析が行われている。

1.1.2.1 格子計算

格子計算の目的は、詳細群の非均質実効断面積に対して集合体内中性子束分布を重みとして均質化及び群縮約を行うことで、燃料棒あるいは集合体平均の少数群断面積を算出し、炉心計算の入力（核定数）として供給することである。具体的には、格子計算で得られた少数群均質化断面積を用いて、任意の炉心状態での断面積を参照するための推定モデル（断面積テーブル）が作成される。したがって、炉心計算によって炉心特性を正確に予測する上では、格子計算段階で空間・エネルギーについて詳細に取り扱い、精度良く炉心解析用断面積テーブルを作成することが求められる。格子計算コードによる計算の流れを Figure 1-6 に示す。

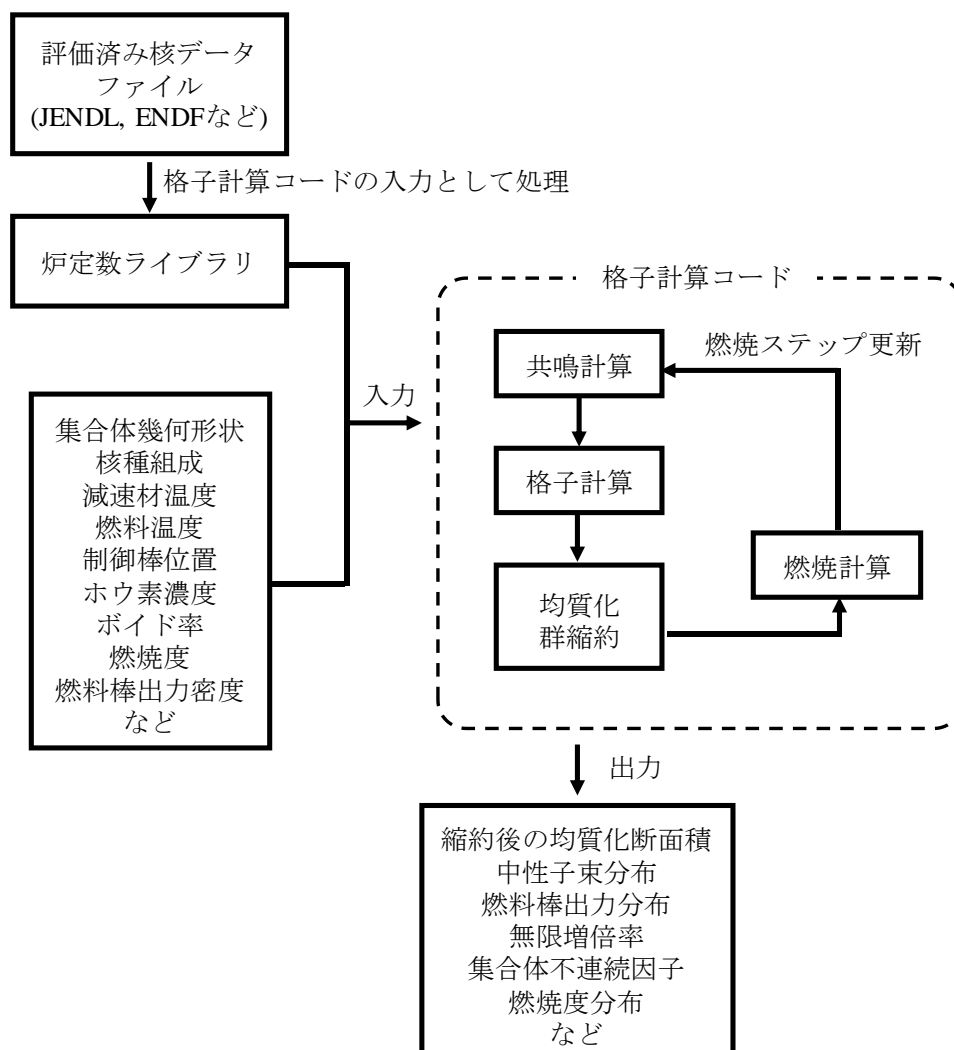


Figure 1-6 格子計算の計算フロー^[8]

Figure 1-6 に示される通り、格子計算コードの入力は大きく分けて 2 種類存在する。一つは断面積データが収納された炉定数ライブラリである。これは、JENDL や ENDF などの評価済み核データライブラリで取り扱われている連続エネルギーでの断面積データを、格子計算コードの入力として 70~200 群程度に離散化して作成される。もう一つは集合体幾何形状、核種組成などの集合体状態が計算条件として入力される。これら二つの入力を用いて、格子計算では大きく分けて 4 段階の計算が行われる。

まず、実効断面積を計算するため共鳴計算が行われる。ここでは、核種毎の詳細群微視的実効断面積が得られる。

次に、詳細群微視的実効断面積から非均質巨視的断面積が計算され、集合体体系での 2 次元非均質輸送計算（格子計算）が行われる。これにより、体系内の中性子束分布や燃料棒出力分布が計算される。

格子計算によって得られた中性子束分布を用いることで詳細群の非均質巨視的断面積は

均質化及び群縮約され、少数群の均質巨視的断面積が計算される。

上記の 3 段階はある燃焼度の入力に対して実施されるため、現在の燃焼度での微視的実効断面積及び中性子束分布を用いて燃焼計算を行い、次の燃焼ステップでの各核種の原子数密度を計算する（燃焼計算の詳細は 1.1.2.3 節にて述べる）。

以上の 4 段階の計算を、入力された全ての燃焼ステップ毎に行うことで、縮約後の均質化巨視的断面積並びに中性子束分布、出力分布などが出力される。得られた均質化巨視的断面積はテーブル化され炉心計算への入力として用いられる。

1.1.2.2 炉心計算

炉心計算の目的は、中性子束分布、出力ピーキング係数などの炉心特性パラメータを計算し、原子炉運転時の炉内全体の挙動を予測することである。炉心解析で得られた炉心特性パラメータは、プラント安全解析によって設定された炉心特性パラメータの基準値と比較され、各炉心特性パラメータが基準値より安全側の値であることを確認することで原子炉の安全性を保障している。すなわち、プラントの安全性及び経済性を評価する上では、炉心計算によって精度良く炉心特性パラメータを計算することが求められる。

炉心計算コードでは、3次元炉心体系を対象として、核特性、熱水力特性、燃焼特性を評価する。炉心計算コードによる計算の流れを Figure 1-7 に示す。

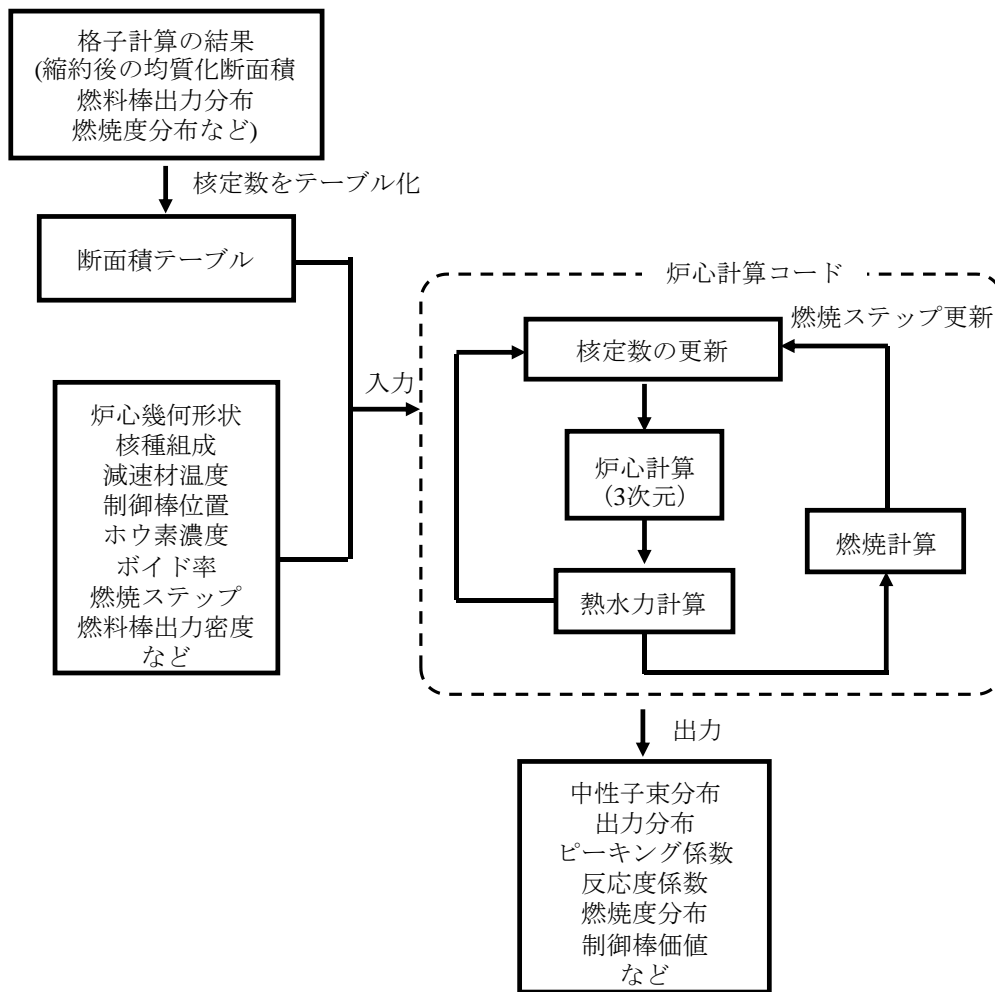


Figure 1-7 炉心計算の計算フロー^[8]

Figure 1-7 に示される通り、炉心計算コードの入力は2種類存在する。一つは、格子計算によって得られた少数群均質断面積がテーブル化された核定数テーブルである。核定数テーブルでは、集合体単位あるいは燃料棒単位での均質化断面積が格納されている。もう一つは、炉心幾何形状、燃料内の核種組成、炉内温度といった炉心状態に関する入力である。これらの入力が炉心計算コードに与えられる。

ある時点での炉心状態を核定数テーブルに入力として与えることで、その状態での断面積を求めることができる。このとき、燃焼度やそれまでの炉心状態の履歴は既知であるが、その時点での炉心状態は既知の情報ではない。したがって、3次元での核計算と熱水力計算を交互に反復させることで、核的及び熱的フィードバック効果を更新していく。ここで、核的フィードバック効果として、ドップラー効果、強吸収体核種 (Xe、Sm) の蓄積、ホウ素濃度の変化が挙げられる。また、熱的フィードバック効果として、燃料温度、減速材温度、減速材密度の変化が挙げられる。一つ前の燃焼ステップでの結果を入力とし、核計算と熱水力計算を反復させることでこれらのフィードバック効果は収束していくため、注目してい

る燃焼度点における炉心特性を計算することができる。

1.1.2.3 燃焼計算

原子炉内では、核分裂のみならず、 β^- 崩壊、 α 崩壊、 (n, γ) 反応等、様々な核反応が常に生じている。そのため、燃料内の組成ひいては核反応断面積は炉心内での燃料の燃焼とともに変化している。この影響を考慮するため、格子計算コード及び炉心計算コードでは核計算が終了する度に燃焼計算が行われ、燃焼度に対する原子数密度及び断面積を計算している。燃焼計算には、ミクロ燃焼計算とマクロ燃焼計算の2種類のモデルが存在する^{[22], [23], [24]}。ミクロ燃焼計算では、核反応による変化を核種毎に取り扱い、原子数密度の変化を考慮している。ミクロ燃焼計算は、核種毎の微視的断面積や原子数密度を直接取り扱う格子計算コードで一般的に採用されている。核反応による核種の挙動として、核分裂による生成、中性子の捕獲反応による生成、他の核種からの壊変による生成、中性子の吸収による消滅、崩壊による消滅が存在する。

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_j \gamma_{j,i} \sigma_{f,j}(t) N_j(t) \phi(t) + \sigma_{c,i-1} N_{i-1}(t) \phi(t) + \sum_k \lambda_k N_k(t) - \sigma_{a,i} N_i(t) \phi(t) - \lambda_i N_i(t) \quad (1.11)$$

ここで、

i, j, k : 核種の種類を表すインデックス

N : 原子数密度

t : 時間

ϕ : 中性子束

$\gamma_{j,i}$: 核種 j の核分裂から核種 i が生成される割合

λ : 崩壊定数

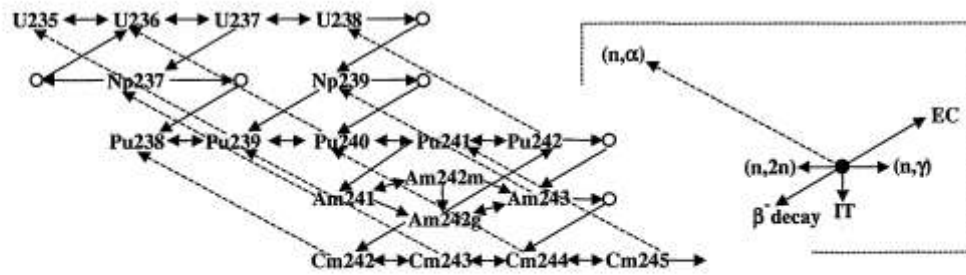
σ_f : 微視的核分裂断面積

σ_c : 微視的捕獲断面積

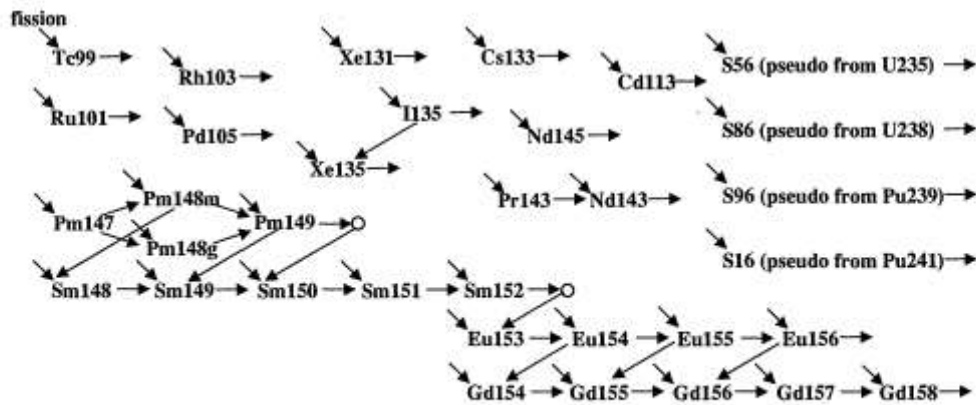
σ_a : 微視的吸収断面積

である。

式(1.11)において、微視的断面積及び中性子束は時間に依存している。また、核種の燃焼経路を示す燃焼チェーンにおいて、一般的に 100~300 種類の核種を取り扱っている。



(a)



(b)

Figure 1-8 MVP-BURN における(a)重核種、(b)核分裂生成物及び可燃性毒物に対する燃焼チェーン^[21]

Figure 1-8 に示される燃焼チェーンに示される通り、数百種の核種は燃焼とともに複雑に変化するため、燃焼方程式を厳密に解析的に解くことは難しい。したがって、詳細に分割した時間幅に対して微視的断面積及び中性子束を一定とした上で、各核種の連立微分方程式を数値計算によって解いている。

マクロ燃焼計算では、微視的断面積や原子数密度の変化は格子計算までに考慮したものとして、巨視的断面積のみを取り扱っている。本来ならば核種毎の原子数密度の変化を考慮しなければならないところを、集合体の燃焼度と他の状態変数を用いて簡略化して巨視的断面積の計算を行う。具体的には、まず核計算で求められた中性子分布から体系内の発熱分布を計算し、その発熱分布を用いてある時間後までの燃焼度の変化量を計算する。マクロ燃焼計算においても、マイクロ燃焼計算の場合同様に、詳細な時間幅に対して発熱分布が一定であると仮定して数値的に解いている。

従来の炉心解析では、炉心計算コードにおいてマクロ燃焼モデルを採用している場合が多かった。これは、炉心計算では計算コスト的な観点から核種毎の詳細な変化を計算することが困難なためであった。一方で、近年開発・改良された炉心計算コードではマクロ燃焼モデルとマイクロ燃焼モデルを組み合わせた方式が主流となっている。特に、2011年の福島第

一原子力発電所事故以降、日本国内の原子力発電所は長期停止しているが、運転停止中の間も炉内の照射済み燃料内の核種の壊変は進んでいる。このため、再稼働時の燃料組成は通常の運転時に考慮されている状態とは異なっており、マクロ燃焼モデルのみでは燃料組成変化に伴う巨視的断面積の変化を正確に取り扱えないことが問題となった。したがって、現在の炉心計算コードでは、反応度に対する影響度の低い核種に対しては従来通りマクロ燃焼モデルで考慮するものの、長期停止期間中の原子核壊変による減衰効果を考慮する必要がある核種や反応度に対する影響度の高い核種に対してはマイクロ燃焼モデルを用いて燃焼を追跡し、原子数密度を詳細に把握している^{[20], [23], [24], [25]}。

1.1.3 核反応断面積のテーブル化

核反応断面積は、燃料集合体の燃焼度、燃料温度、減速材温度といった状態変数及びその履歴に対して依存性がある。したがって、核反応断面積は炉心状態の変化毎に計算する必要があるが、原子炉内で取り得る全ての状態を考慮した上で厳密に核反応断面積を計算することは計算コストの観点から極めて困難である。したがって、格子計算コードでは、様々な状態変数を組み合わせた状態点（ステートポイント）に対する断面積を予めテーブル化し、炉心計算コードでは断面積テーブルを参照して必要な断面積を作成している^[8]。このときの状態変数の組み合わせのリストをケースマトリックスと呼ぶ。ケースマトリックス内で考慮される代表的な状態変数を以下に取り上げる。

燃焼度

燃焼度は、未燃焼の重金属単位重量当たりの積算発熱量として定義され、単位は GWd/t や MWd/kg が用いられる^[9]。また、炉内での核反応による燃料集合体の燃焼の程度を示す指標として用いられる。一般的な UO₂ 燃料集合体内の燃料ペレットは、新燃料の状態 (0 GWd/t) では O、²³⁵U、²³⁸U で構成されているが、燃焼が進むにつれて ²³⁵U、²³⁸U は減少し、それに伴って核分裂生成物が生成される。核分裂生成物に関しても燃料の燃焼による増加と崩壊を繰り返しているため、燃料内の核種毎の原子数密度は絶え間なく変化している。特に、核種毎の巨視的断面積は原子数密度に比例するため、巨視的断面積の変化を考える上で燃焼度は重要な状態変数である。

燃料温度

燃料内の核種は、温度の上昇に伴う熱運動によって共鳴領域の幅が広がりを持ち、微視的断面積も変化する。これをドップラー効果と呼ぶ^[15]。

減速材温度

減速材温度の変化に伴う減速材の熱運動の変化によって、減速材の散乱断面積は変化する。これにより中性子スペクトルが変化し、その影響により核種毎の微視的断面積も変

化する。減速材温度は、炉心下部と上部で異なるため、燃料棒の上部と下部で微視的断面積は異なっている。

ホウ素濃度

ホウ素 (^{10}B) は吸収断面積が大きく、PWR では冷却水中のホウ酸濃度を調整することで炉心の臨界を制御している。したがって、ホウ素濃度が反応度に与える影響は大きく、ホウ酸濃度 (ホウ素の原子数密度) の変化によって中性子スペクトルも変化する。この影響で燃料内の各核種の実効断面積も変化する。

制御棒位置

制御棒は、炉内の反応度に大きな影響を与え、PWR では制御棒操作とホウ素濃度の調整、BWR では制御棒操作と軽水の流量の調整によって炉心の臨界性を制御している。制御棒の挿入によって燃料集合体内の中性子スペクトルが大きく変化するため、燃料内の各核種の実効断面積も変化する。

ボイド率 (減速材密度)

BWR では軽水の沸騰によりボイド (気泡) が発生する。ボイド状態の減速材密度は液体状態に比べて非常に小さいため、バックグラウンド断面積は液体時より大きく異なり、中性子スペクトル変化も変化する。そのため、中性子スペクトルの変化に伴って実効的断面積も変化する。

PWR の場合、通常運転時において原子炉内は加圧されているためボイドが発生することはない。一方で、配管破断等による冷却材喪失事故 (**Loss-Of-Coolant-Accident: LOCA**)、給水喪失などの原子炉の異常な過渡変化に対するスクラム失敗事象 (**Anticipated-Transients-Without-Scram: ATWS**) といった事故発生時に、圧力低下によって原子炉内にボイドが発生する可能性は考えられる。そのうち ATWS に関しては、スクラムが失敗した炉内の挙動を解析する上で、減速材密度変化 (ボイド発生) を考慮した解析が行われる^[16]。

上記の状態変数の履歴

ある燃料集合体において、燃焼度やその他状態変数が同じ値であったとしても、それまでの状態変数の変化履歴 (燃焼履歴) が異なると巨視的断面積は異なる。これは、その状態に至るまでの中性子スペクトルが異なることで、着目している状態における燃料組成が異なるためである。この燃焼履歴に対する断面積の変化を履歴効果と呼ぶ。これに対して、燃焼履歴が同一である中で瞬間的に状態変数が変化することで生じる断面積の変化を瞬時効果と呼ぶ。

断面積のテーブル化手法には、マクロ方式とマイクロ方式の二種類が存在する^{[22]、[23]、[24]}。マ

クロ方式では巨視的断面積を中心にテーブル化を行う。ここで、巨視的断面積は複数の状態変数に対して複雑な依存性を示す。

$$\Sigma_{x,g}(TFA, TCR, EXP, DMO, TFU, TMO, CR, SB, N_{Xe}, N_{Sm}, SI, HDMO, HTFU, HCR, HSB, SH) \quad (1.12)$$

ここで、

TFA: 燃料集合体タイプ

TCR: 制御棒タイプ

EXP: 燃焼度

DMO: 減速材密度

TFU: 燃料温度

TMO: 減速材温度

CR: 制御棒位置

SB: ホウ素濃度

N_{Xe} : Xe の原子数密度

N_{Sm} : Sm の原子数密度

SI: スペクトルインデックス (熱群と高速群の比)

HDMO: 減速材密度履歴

HTFU: 燃料温度履歴

HTMO: 減速材温度履歴

HCR: 制御棒履歴

HSB: ホウ素濃度履歴

SH: スペクトルヒストリー (熱群と高速群の比の履歴)

である。

したがって、マクロ方式テーブルでは、多くの変数に複雑に依存している巨視的断面積を変数分離し、近似的に補正を行っている。

$$\begin{aligned} \Sigma_{x,g}^{actual} = & \Sigma_{x,g}^{base}(TFA, TCR, EXP, DMO_{base}, TFU_{base}, TMO_{base}, CR_{base}, SB_{base}) \\ & + \Delta\Sigma_{x,g}^{inst}(TFA, TCR, EXP, DMO, TFU, TMO, CR, SB, N_{Xe}, N_{Sm}, SI) \\ & + \Delta\Sigma_{x,g}^{hist}(TFA, TCR, EXP, HDMO, HTFU, HTMO, HCR, HSB, SH) \end{aligned} \quad (1.13)$$

ここで、 $\Delta\Sigma$ は断面積の補正量を示しており、各インデックスは以下の意味を表す。

actual: 実際の炉心状態

base: 基準状態

inst: 瞬時効果

hist: 履歴効果

マクロ方式テーブルでは、核種毎の原子数密度の変化を直接取り扱うことはできない。このため、原子炉の起動や出力変更時に影響度が高くなる Xe や Sm については個別に原子数密度の変化に起因する補正を行う。

マイクロ方式では、U、Pu、Gd、Xe、Smといった反応への影響度の高い核種を中心に燃焼計算を行い、核種毎の微視的断面積及び原子数密度の変化を詳細に取り扱う。それ以外の核種については、巨視的断面積として考慮している。

$$\Sigma_{x,g}^{actual} = \Sigma_{x,g}^{base}(TFA, TCR, EXP, \dots) + \sum_i \sigma_{x,g,i}(TFA, TCR, EXP, \dots)(N_i^{actual} - N_i^{base}(TFA, TCR, EXP, \dots)) \quad (1.14)$$

式(1.14)では、着目核種毎の基準状態と実際の炉心状態での原子数密度の差分値と微視的断面積との積を補正值としており、基準状態での巨視的断面積に対し、着目している全ての核種の補正を加えている。

マクロ方式、マイクロ方式どちらのテーブルにおいても補正を考慮する上で、基準状態での燃焼計算を行うだけでなく、瞬時効果による補正を考慮するために燃焼度以外の状態変数変化に対する断面積を計算しておく必要がある。このとき、基準状態からある状態変数が瞬時的に変化した場合の断面積に対する計算をブランチ計算と呼ぶ。ブランチ計算では、燃料棒内の核種の組成は基準状態から変更せず、状態変数のみを変更する。また、履歴効果はブランチ計算では考慮できないため、基準状態以外で燃焼計算を行うことで考慮している。

1.1.4 炉心解析手法の高度化に伴う課題

1.1.1~1.1.3 節では、核計算に必要な微視的断面積及び巨視的断面積のデータ量は以下の4つの条件に依存することを述べた。

- ① 空間的な均質化範囲（集合体単位、燃料棒単位または物質領域単位）
- ② エネルギー群縮約数
- ③ 微視的断面積を考慮する核種数
- ④ 燃焼計算・ブランチ計算のケースマトリックスで考慮されるステートポイント数

ここで、高解像度のPWR炉心解析に必要な断面積のデータ量を考える。代表的な4ループPWRの17×17UO₂燃料集合体を考えると、1集合体当たり264本の燃料棒、24本のI/Tロッド (Instrumental Thimble)、1本のG/Tロッド (Guide Thimble) が存在している。このうち、燃料棒は燃料ペレット、被覆管から構成されており、それらの間にはガスで満たされたわずかなギャップ領域が存在している。また、燃料ペレットの実効断面積を計算する上で、ペレット内部と外周付近で実効断面積が異なることが知られているため、別の領域として考慮する。また、燃料棒を取り巻く減速材領域も、MOCを用いる場合の計算の都合上、一般的に2領域に分割される。すなわち、1つの燃料セルに対して燃料ペレット2領域、ギャップ、被覆管、減速材2領域の計6物質領域が存在している。また、I/T、G/Tロッドに関して、制御棒なしの体系では、一般的にロッド構造材領域とロッド内側及び外側の減速材領域の計3領域に分けられる。以上のことから、集合体全体では燃料セル6領域×264本+ウォーターロッド3領域×25本=1659領域が存在している。2次元炉心体系では、193体の集合体が存在しているため、1659×193=320,187の非均質領域が存在している。3次元PWR体系

の場合、炉心高さ方向に領域を 60 分割することを仮定すると、集合体全体での領域数は $320,187 \times 60 = 19,221,220$ である。

さらに、詳細なエネルギー群として、100 群の断面積を考える。輸送計算で用いられる断面積として、全断面積、生成断面積、吸収断面積、散乱断面積などが挙げられる。このうち、散乱断面積のデータ量は群数の 2 乗に比例し、ほかの反応断面積は群数に比例する。したがって、エネルギー群が多い場合、断面積のうち散乱断面積のデータ量が支配的である。100 群の場合、おおよそ $100^2 = 10,000$ 種類の断面積が領域毎に存在している。

微視的断面積を考慮する核種を 200 核種とし、ケースマトリックスで考慮する状態ポイントを 200 点とすると、単精度計算におけるデータ量は式(1.15)となる。

$$\begin{aligned} & (\text{領域数 } 19,221,220) \times (\text{断面積の種類 } 10,000) \times (\text{核種数 } 200) \\ & \times (\text{状態ポイント数 } 200) \times (\text{単精度 } 8 \text{ [byte]}) = 61.5 \text{ [PB]} \end{aligned} \quad (1.15)$$

よって、詳細群での全炉心非均質輸送計算に必要な断面積の総データ量は数十～数百ペタバイトのオーダーとなり、現在の計算機の記憶容量からすると極めて膨大なデータ量である。

現行の計算手法では、炉心計算においてより少ない群数での均質化断面積を用いているため、上記よりはるかにデータ量は少ない。例えば、断面積は物質領域ではなく集合体単位あるいは燃料棒単位で均質化されており、集合体あるいは炉心の 1/8 対称性を考慮して断面積データを保存している。また、炉心計算でのエネルギー群数は 2~3 群程度まで縮約されており、散乱断面積は核種毎に取り扱うことなく、巨視的断面積として考慮している。

したがって、将来的に炉心体系で取り扱うエネルギー群数を増やす場合、そして 3 次元体系での非均質輸送計算を行う場合のデータ量の増加は、今後の計算機の発達を考慮した上でも常に付き纏う問題である。以上の背景から、炉心解析で取り扱う膨大な断面積データに対する効率的な圧縮手法の開発が望まれている。

一方で、断面積データの中には類似の値も多いと予想される。例えば、実効断面積の変化は、バックグラウンド断面積の変化に伴う中性子スペクトル変化に依存するため、中性子スペクトルの値が近い領域及び燃焼条件での実効断面積を比較すると、各核種の実効断面積は似た値を持つ。したがって、異なる入力条件においても類似している断面積の情報を優先的に削減していくことで、データ圧縮が可能であると考えられる。

そこで本研究では、特異値分解及び低ランク近似を用いた次元削減を断面積データに適用することを考える。次元削減は、データの類似性や変化傾向を考慮した上で、元のデータを構成する上で主要な成分の情報のみを残して情報を削減することができる^[26]。この次元削減を断面積データに対して適用することで、テーブル化に必要な断面積データの圧縮を検討する。

1.2 本研究の目的

本研究では、空間及びエネルギー解像度の高い炉心解析用断面積テーブルの圧縮手法の開発を目的としている。具体的には、断面積データに対して次元削減を適用し、データの削減を試みる。次元削減を用いることで、断面積データ全体の数値変化の傾向や類似性を考慮したデータ削減が期待される。このとき、次元削減を適用された断面積データにはデータ欠損が生じる。このデータ欠損量は断面積によって異なるため、圧縮された断面積データの再構成時の精度は断面積によって異なる。一方で、断面積は炉心解析のための入力データであり、断面積そのもののデータの再構成精度ではなく、再構成断面積を用いて炉心解析を行った場合の炉心特性への影響が評価される必要がある。本研究では、単一集合体計算によって得られる巨視的断面積及び微視的断面積に対して次元削減を適用し、その断面積を用いて集合体計算を再度行った場合の核特性への影響を評価する。

また、断面積テーブルの役割は、テーブル化に用いた炉心状態での断面積を用いて、任意の炉心状態での断面積を瞬時効果や履歴効果を考慮して生成することである。したがって、圧縮された断面積データを断面積テーブルとして用いる場合も同様、元の断面積データの再構成だけでなく任意の炉心状態での断面積を生成できる必要がある。本研究では、次元削減に関連した理論である **Reduced Order Modeling** を用い、圧縮データから断面積を推定できるサロゲートモデルの開発も行う^{[26], [27]}。

1.3 本論文の構成

本章では、本研究の背景及び目的を述べた。2章では、本研究の基礎理論となる次元削減の概要を説明する。3章では、単一集合体計算で得られる巨視的断面積及び微視的断面積に対して次元削減を適用し、再構成断面積を用いて集合体計算を行った場合の影響の検証を行う。また、次元削減を行う上で圧縮性を向上させるための手法を提案する。4章では、圧縮後の断面積データを用いたテーブル化手法を提案し、テーブルから生成される断面積を用いた核計算における精度検証を行う。5章では、本研究の結論と今後の課題を述べる。

1.4 参考文献

- [1] 桐村一生, “PWR の核設計とその考え方”, 第 49 回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2017).
- [2] 光安岳, “BWR の炉心設計とその考え方”, 第 49 回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2017).
- [3] K. S. Smith, “Assembly Homogenization Techniques for Light Water Reactor Analysis,” *Prog.*

- Nucl. Energy*, **17**[3], 303-335 (1986).
- [4] K. R. Rempe, K. S. Smith, “SIMULATE-3 Pin Power Reconstruction: Methodology and Benchmarking,” *Nucl. Sci. Eng.*, **103**, 33-4-342 (1989).
- [5] M. Tatsumi, A. Yamamoto, “Advanced PWR Core Calculation Based on Multi-group Nodal-transport Method in Three-dimensional Pin-by-Pin Geometry,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **40**[6], 376-387 (2003).
- [6] K. Yamaji, H. Matsumoto, M. Nakano *et al.*, “Development of the New Pin-by-Pin Core Calculation Method with Embedded Heterogeneous Assembly Calculation,” *Proc. Physor2006*, Sep. 2006, Vancouver, Canada (2006). [CD-ROM]
- [7] K. Tada, “Study on pin-by-pin fine mesh core calculation method for BWR core analysis,” 博士論文, 名古屋大学 (2012).
- [8] T. Fujita, “Study on Cross Section Generation for BWR Pin by Pin Core Analysis,” 博士論文, 名古屋大学 (2015).
- [9] 社団法人日本原子力学会, “1 原子炉物理 (シリーズ: 現代核科学の基礎)” (2008).
- [10] 日本原子力研究開発機構核データ研究グループ, JENDL-4.0, “https://www.wndc.jaea.go.jp/j40fig/jpeg/u235_fl.jpg” (アクセス日:2019/12/18).
- [11] 日本原子力研究開発機構核データ研究グループ, JENDL-4.0, “https://www.wndc.jaea.go.jp/j40fig/jpeg/u238_fl.jpg” (アクセス日:2019/12/18).
- [12] K. Shibata, O. Iwamoto, T. Nakagawa *et al.*, “JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **48**, 1-30 (2011).
- [13] D. A. Brown, M. B. Chadwick, R. Capote *et al.*, “ENDF/B-VIII.0: The 8th Major Release of the Nuclear Reaction Data Library with CIELO-project Cross Sections, New Standards and Thermal Scattering Data,” *Nucl. Data Sheets*, **148**, 1-142 (2018).
- [14] 宇根崎博信, “実効断面積計算手法の基礎 (超入門)”, 第 36 回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2004).
- [15] 小林啓祐, 原子炉物理, コロナ社 (1996).
- [16] 藤目宏之, 桐村一生, 小坂進矢他, “三菱 PWR 核設計コードシステム GalaxyCosmo-S の開発 (11) GalaxyCosmo-S/K における核定数表現手法の高度化,” 日本原子力学会 2014 年春の年会予稿, 東京都市大学世田谷キャンパス, 3/26-28, 2014, (2014). [CD-ROM]
- [17] 山本章夫, “Boltzmann 方程式の解法～決定論的手法～”, 第 34 回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会, P.45(2002).
- [18] J. Rhodes, K. Smith, D. Lee, “CASMO-5 Development and Applications,” *Proc. Physor2006*, Sep. 2006, Vancouver, Canada (2006). [CD-ROM]
- [19] N. Sugimura, A. Yamamoto, T. Ushio *et al.*, “Neutron Transport Models of AEGIS: An Advanced Next-Generation Neutronics Design System,” *Nucl. Sci. Eng.*, **155**[2], 276-289 (2007).
- [20] S. Lindahl, “Studsvic’s Next Generation Nodal Code SIMULATE-5,” *Proc. ANFM IV*, Apr. 2009,

- South Carolina, USA (2009). [CD-ROM]
- [21] K. Okumura, T. Mori, “Validation of a Continuous-Energy Monte Carlo Burn-up Code MVP-BURN and Its Application to Analysis of Post Irradiation Experiment,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **37**[2], 128-138 (2000).
- [22] 東條匡志, “BWR 炉心計算における 2 段階手法の高度化について”, 第 49 回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 (2017).
- [23] 大堀和真, “PWR 炉心管理と燃焼計算”, 第 51 回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 P.53(2019).
- [24] 東條匡志, “BWR 炉心管理と燃焼計算”, 第 51 回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会, P.75 (2019).
- [25] N. Sugimura, T. Ushio, A. Yamamoto *et al.*, “Calculation Models of AEGIS/SCOPE2, a Core Calculation System of Next Generation,” *Proc. Physor2006*, Sep. 2006, Vancouver, Canada (2006). [CD-ROM]
- [26] H. S. Abdel-Khalik, P. J. Turinsky, M. A. Jessee, “Efficient Subspace Methods-based Algorithms for Performing Sensitivity, Uncertainty, and Adaptive Simulation of Large-Scale Computational Models,” *Nucl. Sci. Eng.*, **159**[3], 256–272 (2008).
- [27] A. Yankov, “Analysis of Reactor Simulation Using Surrogate Model,” Ph.D. thesis, University of Michigan (2015).

第2章 次元削減に基づいた断面積圧縮手法

2.1 本章の概要

本章では、本研究における断面積圧縮の基礎理論である、次元削減手法について説明を行う。2.2節では、次元削減に用いる固有値分解、特異値分解及び低ランク近似について説明する。また、次元削減の適用例として、簡易的な体系での断面積データに対して次元削減を行う。2.3節では、次元削減に関連したモデル化手法である、**Reduced Order Modeling (ROM)**について説明を行う。また、2.2節同様に断面積データを例として、ROMの構築手順を説明する。2.4節では、本章のまとめを述べる。

2.2 次元削減手法

本節では、断面積圧縮に用いる次元削減手法の説明を行う。一般に、次元削減とは観測されるデータの変動を説明する少数の変数を抽出することであり、多変量データ解析や機械学習といった分野では、膨大な情報の中から主要な情報のみを抽出する目的で用いられる^[1]。本研究で用いた次元削減手法は特異値分解及び低ランク近似であるが、特異値分解に関連した数学的手法である固有値分解についても説明を行う。

2.2.1 固有値分解

n 次元の縦ベクトル \vec{v} ($\neq \vec{0}$) に対して、 $n \times n$ の正方行列 \mathbf{A} による座標変換を行うことを考える。このとき、ある定数 λ および \vec{v} が式(2.2)を満たすとき、 λ を固有値、 \vec{v} を固有ベクトルと呼ぶ。

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

$$\mathbf{A}\vec{v} = \lambda\vec{v} \quad (2.2)$$

\vec{v} が式(2.2)を満たす場合、 \mathbf{A} によって \vec{v} の方向は変化せず、ベクトルの大きさだけが λ 倍されることを意味している。この固有値が n 個まで存在する場合を考え、それぞれ $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ ($\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_n$)とする。また、各固有値に対応する固有ベクトル \vec{v} をそれぞれ $\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n$ とする。ここで、固有ベクトルが列として並べられた正方行列 \mathbf{P} 、固有ベクトルを対角成分に持つ対角行列 $\mathbf{\Lambda}$ をそれぞれ式(2.3)、(2.4)に示す。

$$\mathbf{P} = (\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n) \quad (2.3)$$

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_n \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

このとき、式(2.2)の性質から、式(2.5)が成り立つ。

$$\mathbf{A}\mathbf{P} = (\lambda_1 \vec{v}_1, \dots, \lambda_n \vec{v}_n) = \mathbf{P}\Lambda \quad (2.5)$$

ここで、正方行列 \mathbf{P} が正則であり逆行列を持つならば、式(2.5)の両辺の左側から \mathbf{P} の逆行列 \mathbf{P}^{-1} をかけることで、式(2.6)が得られる。

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} = \Lambda \quad (2.6)$$

したがって、正方行列 \mathbf{A} は固有ベクトル \mathbf{P} を用いることで対角行列へと変換でき、この操作を行列の対角化と呼ぶ。

また、式(2.6)を \mathbf{A} について整理することで式(2.7)が得られる。

$$\mathbf{A} = \mathbf{P}\Lambda\mathbf{P}^{-1} \quad (2.7)$$

式(2.7)は \mathbf{A} が固有値からなる対角行列と固有ベクトルの積として分解できることを表しており、このことから対角化は固有値分解とも呼ばれる。式(2.7)に対して、任意の n 次元縦ベクトル \vec{q} ($\neq \vec{0}$)を右側から掛け合わせた場合を考える。

$$\mathbf{A}\vec{q} = \mathbf{P}\Lambda\mathbf{P}^{-1}\vec{q} \quad (2.8)$$

式(2.8)の意味として、まず \vec{q} は直交座標系から固有ベクトルを軸とした座標系への軸変換（回転変換）が行われる。そして Λ によって各固有ベクトル方向のベクトルが拡大され、 \mathbf{P} によって再び元の直交座標系へと軸変換される。2次元直交座標系での固有値分解を例とした場合の式(2.8)の概念図を Figure 2-1 に示す。

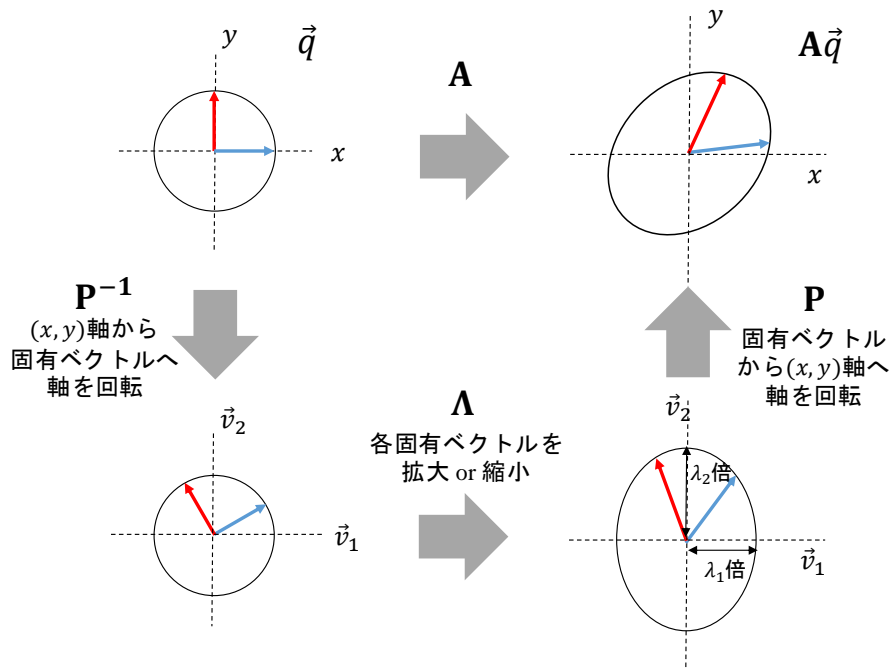


Figure 2-1 (x, y) 直交座標系での正方行列 \mathbf{A} の固有値分解の概念図^[2]

以上のことから、固有値は行列 \mathbf{A} に対する固有ベクトルの影響度を示しており、すなわち固有値の大きい固有ベクトルほど、 \mathbf{A} の座標変換による影響が大きいベクトルであることを表している。

2.2.2 特異値分解

固有値分解が正則な正方行列にのみ適用できたのに対し、特異値分解は任意の実数行列に対して適用できる。 $m \times n$ ($m \geq n$)の実数行列 \mathbf{A} に対する特異値分解は式(2.9)で表される^{[2], [3]}。ここで、上付きの T は転置行列であることを表している。

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \quad (2.9)$$

このとき、 \mathbf{U} は $m \times m$ の正規直交基底 (m 次元空間において各行ベクトルまたは列ベクトルが互いに直交する単位ベクトルである行列) であり、式(2.10)で表される。また、式(2.10)の i 列目の列ベクトル \vec{u}_i は左特異ベクトルと呼ばれる。左特異ベクトルを式(2.11)に示す。

$$\mathbf{U} = (\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_m) = \begin{pmatrix} u_{1,1} & \cdots & u_{1,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{m,1} & \cdots & u_{m,m} \end{pmatrix} \quad (2.10)$$

$$\vec{u}_i = \begin{pmatrix} u_{1,i} \\ \vdots \\ u_{m,i} \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

\mathbf{V} は $n \times n$ の正規直交基底であり、式(2.12)で表される。また、 \mathbf{V} の i 列目の列ベクトル \vec{v}_i は右特異ベクトルと呼ばれる。右特異ベクトルを式(2.13)に示す。

$$\mathbf{V} = (\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n) = \begin{pmatrix} v_{1,1} & \cdots & v_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n,1} & \cdots & v_{n,n} \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

$$\vec{v}_i = \begin{pmatrix} v_{1,i} \\ \vdots \\ v_{n,i} \end{pmatrix} \quad (2.13)$$

Σ は $m \times n$ の対角行列であり、 $m \geq n$ の場合、式(2.14)で表される。

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & \sigma_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

このとき、 Σ の対角成分は特異値と呼ばれる ($\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$)。

固有値分解と同様に考えると、 \mathbf{V} は n 次元空間における特異ベクトルへの軸変換、 Σ は特異ベクトルの拡大または縮小、 \mathbf{U} は m 次元空間への軸変換とみなすことができる。

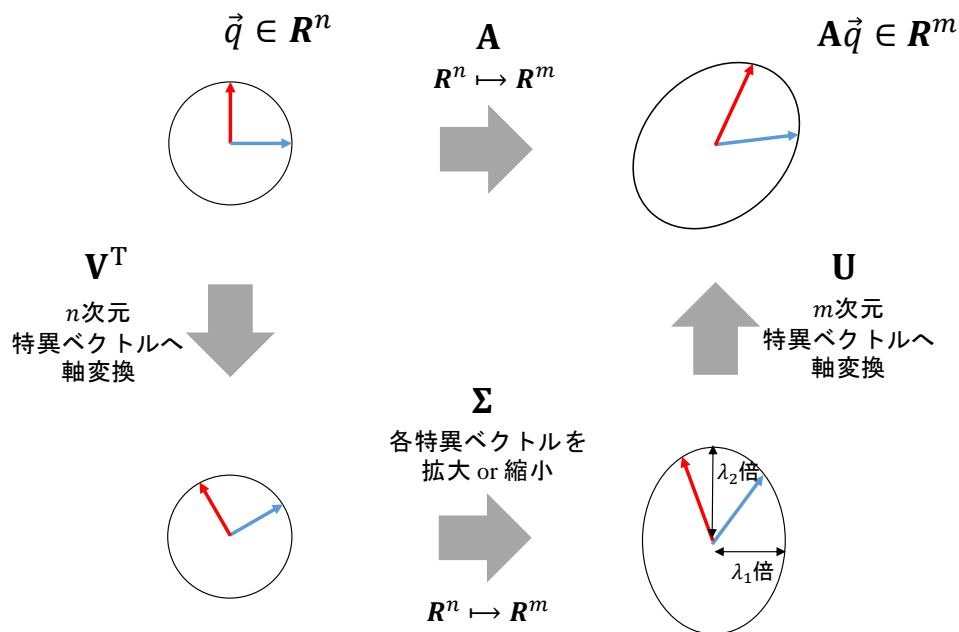


Figure 2-2 $m \times n$ 行列 \mathbf{A} の特異値分解の概念図

ここで、特異値分解と固有値分解の関係を説明する。正規直交基底は転置行列と逆行列が等しいという性質を持っているため、 \mathbf{U} 、 \mathbf{V} に対してそれぞれ式(2.15)、(2.16)が成り立つ。

$$\mathbf{U}^T = \mathbf{U}^{-1} \quad (2.15)$$

$$\mathbf{V}^T = \mathbf{V}^{-1} \quad (2.16)$$

式(2.16)の性質を利用して、特異値分解の定義式(2.9)の両辺に \mathbf{V} を右からかけた場合、式

(2.17)として変形できる。

$$\begin{aligned} \mathbf{AV} &= \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T\mathbf{V} \\ &= \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^{-1}\mathbf{V} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 u_{1,1} & \cdots & \sigma_n u_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_1 u_{m,1} & \cdots & \sigma_n u_{m,n} \end{pmatrix} = (\sigma_1 \vec{u}_1, \dots, \sigma_n \vec{u}_n) \end{aligned} \quad (2.17)$$

式(2.17)より、 i 番目の特異値 σ_i に対応する右特異ベクトル \vec{v}_i の \mathbf{A} による写像は $\sigma_i \vec{u}_i$ となる。

$$\mathbf{A}\vec{v}_i = \sigma_i \vec{u}_i \quad (1 \leq i \leq n) \quad (2.18)$$

次に、特異値分解の定義式(2.9)の両辺に \mathbf{U}^{-1} を左からかけた場合、式(2.19)となる。

$$\mathbf{U}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \quad (2.19)$$

ここで、一般に、任意の行列 \mathbf{A} 、 \mathbf{B} の転置行列の積に関して式(2.20)が成り立つ。

$$(\mathbf{AB})^T = \mathbf{B}^T\mathbf{A}^T \quad (2.20)$$

式(2.20)の性質を用いることで、式(2.19)は式(2.21)へと変形できる。

$$\begin{aligned} \mathbf{U}^{-1}\mathbf{A} &= \mathbf{U}^T\mathbf{A} = (\mathbf{A}^T\mathbf{U})^T \\ \therefore (\mathbf{A}^T\mathbf{U})^T &= \mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \end{aligned} \quad (2.21)$$

さらに、式(2.21)の両辺に対して転置を取ることで、式(2.22)へと変形できる。

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^T\mathbf{U} &= (\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T)^T = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^T \\ &= \begin{pmatrix} \sigma_1 v_{1,1} & \cdots & \sigma_n v_{1,n} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_1 v_{m,1} & \cdots & \sigma_n v_{m,n} & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} = (\sigma_1 \vec{v}_1, \dots, \sigma_n \vec{v}_n, \vec{0}, \dots, \vec{0}) \end{aligned} \quad (2.22)$$

式(2.22)より、 i 番目の特異値 σ_i に対応する左特異ベクトル \vec{u}_i の \mathbf{A}^T による写像は $\sigma_i \vec{v}_i$ となる。

$$\mathbf{A}^T\vec{u}_i = \sigma_i \vec{v}_i \quad (1 \leq i \leq n) \quad (2.23)$$

式(2.18)と式(2.23)を用いることで、右特異ベクトル \vec{v}_i の $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ による写像は式(2.24)で表される。

$$\mathbf{A}^T\mathbf{A}\vec{v}_i = \sigma_i \mathbf{A}^T\vec{u}_i = \sigma_i^2 \vec{v}_i \quad (2.24)$$

同様に、左特異ベクトル \vec{u}_i の $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ による写像は式(2.25)で表される。

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^T\vec{u}_i = \sigma_i \mathbf{A}\vec{v}_i = \sigma_i^2 \vec{u}_i \quad (2.25)$$

式(2.24)、(2.25)を固有値・固有ベクトルの定義式である式(2.2)と比較すると、特異値 σ_i は

$\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ または $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ の固有値の正の平方根であることがわかる。また、 \vec{v}_i は $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ の正規直交化された固有ベクトル、 \vec{u}_i は $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ の正規直交化された固有ベクトルである。

したがって、特異値 Σ は $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ または $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ に対して固有値分解を適用し、各固有値の平方根を計算することで得られる。また、右特異ベクトル \mathbf{V} 及び左特異ベクトル \mathbf{U} は、それぞれ $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ 及び $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ の固有ベクトルを正規直交化することで得られる。

例として、式(2.26)の 3×2 行列の特異値分解を考える。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

まず、式(2.27)の行列から $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ を計算する。

$$\mathbf{A}^T\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix} \quad (2.27)$$

このとき、 $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ の固有値 λ 及び固有ベクトル \vec{v} に対して式(2.28)が成り立つ。

$$\mathbf{A}^T\mathbf{A}\vec{v} = \lambda\vec{v}$$

$$\therefore \begin{pmatrix} 5-\lambda & 1 \\ 1 & 5-\lambda \end{pmatrix} \vec{v} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

$\vec{v} \neq \vec{0}$ より、式(2.28)の行列式は0であるため、固有値は式(2.29)として得られる。

$$\det(\mathbf{A}^T\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = 0$$

$$(5-\lambda)^2 - 1^2 = \lambda^2 - 10\lambda + 24 = (\lambda-6)(\lambda-4) = 0$$

$$\therefore \lambda = 6, 4 \quad (2.29)$$

$\lambda = 6$ のとき、固有ベクトルは式(2.30)を満たす。

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \vec{v} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.30)$$

式(2.30)を満たす規格化された固有ベクトル \vec{v} (右特異ベクトル) として、式(2.31)が得られる。

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (2.31)$$

ここで、式(2.18)より式(2.32)が成り立つ。

$$\vec{u}_i = \frac{1}{\sigma_i} \mathbf{A}\vec{v}_i = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} \mathbf{A}\vec{v}_i \quad (2.32)$$

したがって、特異値 $\sigma_1 = \sqrt{6}$ に対する左特異ベクトル \vec{u} は式(2.33)として得られる。

$$\vec{u} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \quad (2.33)$$

同様に、 $\lambda = 4$ ($\sigma_2 = 2$)のとき、固有ベクトルは式(2.34)を満たす。

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \vec{v} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

式(2.35)を満たす右特異ベクトル \vec{v} として、式(2.35)が得られる。

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

このとき、特異値 $\sigma_2 = 2$ に対する左特異ベクトル \vec{u} は式(2.36)として得られる。

$$\vec{u} = \frac{1}{\sqrt{4}} \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

式(2.31)、(2.35)の右特異ベクトルを \mathbf{V} の列として並べ、式(2.33)、(2.36)の左特異ベクトルを \mathbf{U} の列として並べることで、式(2.26)の行列 \mathbf{A} の特異値分解は式(2.37)で表される。

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & a \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & b \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

ここで、 a 、 b 、 c は任意の定数である。 \mathbf{U} を正規直交基底とする場合、縦ベクトル $\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix}$ の大きさは1で、かつ他の左特異ベクトルと直交する。したがって、式(2.38)、(2.39)、(2.40)を解くことで a 、 b 、 c が定まる。

$$a^2 + b^2 + c^2 = 1 \quad (2.38)$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}}a + \frac{1}{\sqrt{3}}b + \frac{1}{\sqrt{3}}c = 0 \quad (2.39)$$

$$-\frac{1}{\sqrt{2}}a + \frac{1}{\sqrt{2}}c = 0 \quad (2.40)$$

式(2.38)、(2.39)、(2.40)の解の一つに、 $(a, b, c) = \left(\frac{1}{\sqrt{6}}, -\frac{2}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}}\right)$ が存在するため、これを用いることで式(2.41)が得られる。

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 1 & 1 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (2.41)$$

以上、特異値分解の具体的な手順を手計算的に示したが、一般に $m \times n$ 行列 \mathbf{A} の行数あるいは列数が大きくなるにつれて、特異値分解を上記の手順で直接的に解くことは困難になる。したがって本研究では、プログラミング言語 Python の数値計算ライブラリ Numpy の `numpy.linalg.svd` 関数を用いて数値計算的に特異値分解を行っている^[4]。

2.2.3 低ランク近似

固有値と固有ベクトルの関係性と同じく、特異値の大きさは \mathbf{A} に対する特異ベクトルの影響度を示しており、特異値の大きい特異ベクトルほど \mathbf{A} にとって主要な基底である。逆に、特異値の小さい特異ベクトルは \mathbf{A} にとって重要度が低い基底であると考えられるため、特異値の小さい特異ベクトルを削減することで、重要度の高い最低限の基底のみを用いて \mathbf{A} を構成することができる。この操作は基底のランク（行列を構成する線形独立なベクトルの最大個数）を低減することから低ランク近似と呼ばれ、低ランク近似によって \mathbf{A} を構成する情報を大きく削減することができる。

n 個の特異値 $\sigma_1, \dots, \sigma_k, \dots, \sigma_n$ ($\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_k \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$)のうち、 $k+1$ 番目以降の特異値を低ランク近似によって削減する場合、低ランク近似後の左特異ベクトル \mathbf{U}_k 、右特異ベクトル \mathbf{V}_k 、特異値 Σ_k はそれぞれ式(2.42)、(2.43)、(2.44)で表される。

$$\begin{aligned} \mathbf{U} &= \begin{pmatrix} u_{1,1} & \cdots & u_{1,k} & \cdots & u_{1,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{k,1} & \cdots & u_{k,k} & \cdots & u_{k,m} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{m,1} & \cdots & u_{m,k} & \cdots & u_{m,m} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} u_{1,1} & \cdots & u_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{m,1} & \cdots & u_{m,k} \end{pmatrix} \\ \therefore \mathbf{U}_k &= \begin{pmatrix} u_{1,1} & \cdots & u_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{m,1} & \cdots & u_{m,k} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.42)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{V} &= \begin{pmatrix} v_{1,1} & \cdots & v_{1,k} & \cdots & v_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{k,1} & \cdots & v_{k,k} & \cdots & v_{k,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n,1} & \cdots & v_{n,k} & \cdots & v_{n,n} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} v_{1,1} & \cdots & v_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n,1} & \cdots & v_{n,k} \end{pmatrix} \\ \therefore \mathbf{V}_k &= \begin{pmatrix} v_{1,1} & \cdots & v_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{n,1} & \cdots & v_{n,k} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.43)$$

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \sigma_k & 0 & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & 0 & \sigma_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_k \end{pmatrix}$$

$$\therefore \Sigma_k = \begin{pmatrix} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_k \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

低ランク近似後の \mathbf{U}_k , Σ_k , \mathbf{V}_k を掛け合わせることで、元の行列 \mathbf{A} の近似的な行列 \mathbf{A}_k が得られる。

$$\mathbf{A}_k = \mathbf{U}_k \Sigma_k \mathbf{V}_k^T = \begin{pmatrix} u_{1,1} & \cdots & u_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{m,1} & \cdots & u_{m,k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_{1,1} & \cdots & v_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ v_{k,1} & \cdots & v_{k,n} \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

式(2.45)の \mathbf{U}_k の列ベクトルを \vec{u}_i ($1 \leq i \leq k$)、 \mathbf{V}_k の列ベクトルを \vec{v}_j ($1 \leq j \leq k$)で表記することで、式(2.46)として表すことができる。

$$\mathbf{A}_k = \mathbf{U}_k \Sigma_k \mathbf{V}_k^T = (\vec{u}_1 \cdots \vec{u}_k) \begin{pmatrix} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_k \end{pmatrix} (\vec{v}_1 \cdots \vec{v}_k)^T \quad (2.46)$$

次元削減前の行列 \mathbf{A} の要素数は $m \times n$ 個であったが、次元削減後の \mathbf{U}_k ($m \times k$ 行列)、 Σ_k (特異値 k 個)、 \mathbf{V}_k ($n \times k$ 行列)の要素数の総和は $(m + n + 1) \times k$ 個である。したがって、行列 \mathbf{A} で構成されたデータを \mathbf{U}_k , Σ_k , \mathbf{V}_k として保存する場合、低ランク近似後の特異値数 k が元の特異値数 n よりも小さいほど、 \mathbf{U}_k , Σ_k , \mathbf{V}_k のデータ量(要素数)を圧縮することができる。

2.2.4 簡易的な核反応断面積に対する次元削減の適用例

本節では、これまでに説明した次元削減の具体的な適用例として、簡易的な体系での核反応断面積データに対して特異値分解及び低ランク近似を適用することを考える。これによって次元削減に伴うデータの変化のイメージを簡易的に示すとともに、本研究において次元削減に注目した理由を述べる。

検証で用いる断面積の体系は Figure 2-3 のピンセル体系である。Figure 2-3 では、ピンセル内が 6 領域に分割されている。各領域の幾何形状を Table 2-1 に示し、ピンセル体系の状態として仮定した状態変数を Table 2-2 に示す。

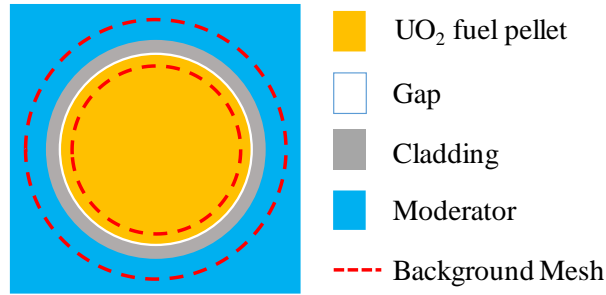


Figure 2-3 ピンセル体系の領域

Table 2-1 ピンセル体系の幾何形状(セルピッチ: 1.26 cm)

物質領域	半径 [cm]
燃料ペレット(内側)	0.3663
燃料ペレット(外側)	0.3663 ~ 0.4095
ギャップ	0.4095 ~ 0.4180
被覆管	0.4180 ~ 0.4750
減速材(内側)	0.4750 ~ 0.5647
減速材(外側)	0.5647 ~ 境界

Table 2-2 ピンセル計算での状態変数

燃焼度	0 ~ 30 GWd/t
ホウ素濃度	600 ppm
減速材温度	576 K
燃料温度	900 K
ボイド率	0 %

Table 2-1 の幾何形状及び Table 2-2 の状態変数を入力として、格子計算コード AEGIS (第 3 章 3.3 節参照) による燃焼計算を含んだピンセル計算を行い、各燃焼度における領域毎の断面積を計算した^{[5], [6]}。

このとき得られた領域の断面積のうち、燃料ペレット外側での巨視的断面積のみに注目する。AEGIS によって出力された 172 群巨視的断面積を 1 群 (0~19.6 MeV^[7]) へと縮約し、そのとき得られた燃焼度毎の 1 群巨視的断面積を Table 2-3 に示す。ここで考慮した巨視的断面積は吸収断面積 Σ_a 、核分裂断面積 Σ_f 、生成断面積 $\nu\Sigma_f$ 、捕獲断面積 Σ_c の 4 種類である。

Table 2-3 燃焼度毎の巨視的断面積

燃焼度[GWd/t]	Σ_a [1/cm]	Σ_f [1/cm]	$\nu\Sigma_f$ [1/cm]	Σ_c [1/cm]
10	8.69E-02	3.86E-02	9.94E-02	4.83E-02
20	9.14E-02	3.71E-02	9.82E-02	5.43E-02
30	9.43E-02	3.56E-02	9.61E-02	5.87E-02

Table 2-3 に示される燃焼度毎の巨視的断面積をベクトルとして表したものを Figure 2-4 に示す。

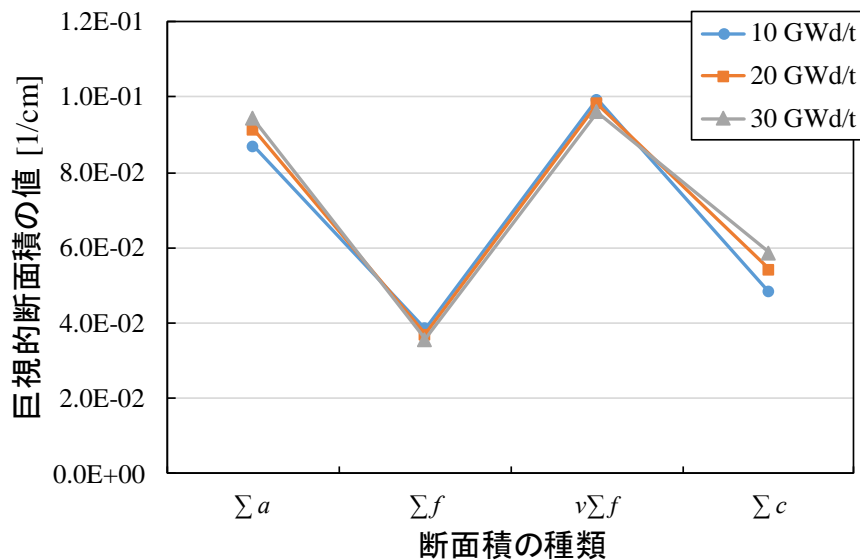


Figure 2-4 燃焼度毎の断面積のベクトル

Figure 2-4 では、燃焼が進んだことで Σ_a と Σ_c は多少変化しているものの、ベクトル全体で見ただけの場合の形状は大きくは変化していないことがわかる。ここで、Table 2-3 を基に燃焼度を行、断面積の種類を列に取った 3×4 の行列 \mathbf{A} を作成する。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 8.69 & 3.86 & 9.94 & 4.83 \\ 9.14 & 3.71 & 9.82 & 5.43 \\ 9.43 & 3.56 & 9.61 & 5.87 \end{pmatrix} \times 10^{-2} \quad (2.47)$$

式(2.47)に対して、Python の数値計算ライブラリ Numpy の `numpy.linalg.svd` 関数を用いて特異値分解を行うことで \mathbf{U} , $\mathbf{\Sigma}$, \mathbf{V}^T が得られる。

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 5.66 \times 10^{-1} & -7.35 \times 10^{-1} & -3.74 \times 10^{-1} \\ 5.80 \times 10^{-1} & 3.22 \times 10^{-2} & 8.14 \times 10^{-1} \\ 5.86 \times 10^{-1} & 6.77 \times 10^{-1} & -4.45 \times 10^{-1} \end{pmatrix} \quad (2.48)$$

$$\mathbf{\Sigma} = \begin{pmatrix} 2.58 \times 10^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 8.82 \times 10^{-3} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 7.70 \times 10^{-5} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.49)$$

$$\mathbf{V}^T = \begin{pmatrix} 6.11 \times 10^{-1} & 2.49 \times 10^{-1} & 6.58 \times 10^{-1} & 3.62 \times 10^{-1} \\ 3.31 \times 10^{-1} & -3.50 \times 10^{-1} & -5.50 \times 10^{-1} & 6.82 \times 10^{-1} \\ -4.29 \times 10^{-1} & -6.94 \times 10^{-1} & 5.14 \times 10^{-1} & 2.66 \times 10^{-1} \\ 5.77 \times 10^{-1} & -5.78 \times 10^{-1} & 2.94 \times 10^{-4} & -5.77 \times 10^{-1} \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

このとき、左特異ベクトル \mathbf{U} は3つの異なる燃焼度に関する変化を表す基底であり、右特異ベクトル \mathbf{V}^T は断面積の種類毎の変化を表す基底であると見なすことができる。ここで、 \mathbf{V}^T の各列ベクトル($\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3, \vec{v}_4$)の形状を Figure 2-5 に示す。

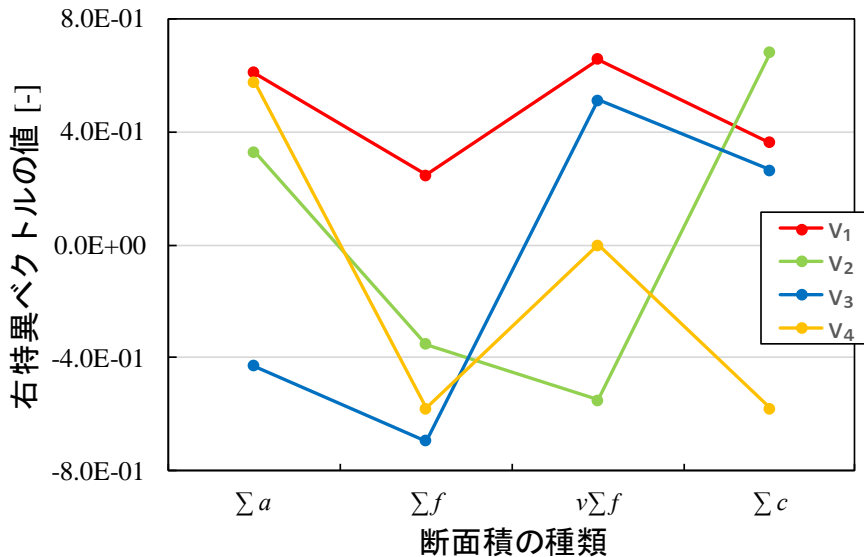


Figure 2-5 右特異ベクトル $\mathbf{V} = (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \vec{v}_3, \vec{v}_4)$ の形状

Figure 2-5 のベクトルは互いに直交しており、各断面積はこれらの基底の線形結合で表されている。次に、特異値 $\mathbf{\Sigma}$ と右特異ベクトル \mathbf{V}^T を掛け合わせることで式(2.51)が得られる。

$$\mathbf{\Sigma V}^T = \begin{pmatrix} 1.58 \times 10^{-1} & 6.43 \times 10^{-1} & 1.70 \times 10^{-1} & 9.34 \times 10^{-2} \\ 2.92 \times 10^{-3} & -3.09 \times 10^{-3} & -4.85 \times 10^{-3} & 6.01 \times 10^{-3} \\ -3.30 \times 10^{-5} & -5.34 \times 10^{-5} & 3.96 \times 10^{-5} & 2.05 \times 10^{-5} \end{pmatrix} \quad (2.51)$$

式(2.51)によって各基底の大きさが変化し、特異値を持たない基底 \vec{v}_4 の貼る空間は潰れることになる。 $\mathbf{\Sigma V}^T = (\sigma_1 \vec{v}_1, \sigma_2 \vec{v}_2, \sigma_3 \vec{v}_3)^T$ の各ベクトルの形状を Figure 2-6 に示す。

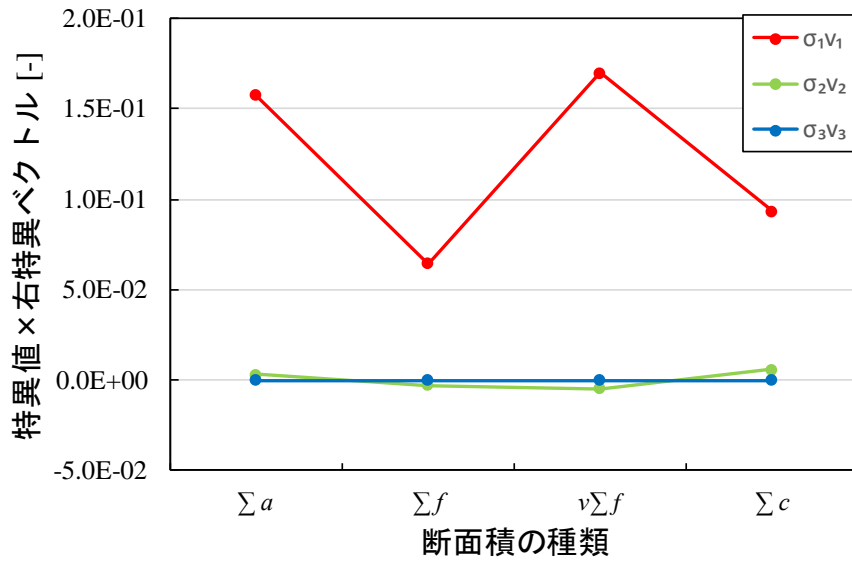


Figure 2-6 $\Sigma V^T = (\sigma_1 \vec{v}_1, \sigma_2 \vec{v}_2, \sigma_3 \vec{v}_3)^T$ の形状

Figure 2-6 では、 $\sigma_1 \vec{v}_1$ の持つ各要素の絶対値が最も大きく、 $\sigma_2 \vec{v}_2, \sigma_3 \vec{v}_3$ の各要素の絶対値は $\sigma_1 \vec{v}_1$ と比べると小さい。また、Figure 2-4 と比較すると、 $\sigma_1 \vec{v}_1$ の形状は各燃焼度での断面積ベクトルの形状と概ね一致していることがわかる。このことから、特異値の最も大きい基底が、元の行列の形状を最も良く再現できるベクトルであることがわかる。

ここで、低ランク近似によって $\sigma_1 \vec{v}_1$ 以外のベクトルを削減すると、式(2.52)が得られる。

$$\mathbf{A} \approx \mathbf{U}_k \Sigma_k \mathbf{V}_k = \begin{pmatrix} 5.66 \times 10^{-1} \\ 5.80 \times 10^{-1} \\ 5.86 \times 10^{-1} \end{pmatrix} (2.58 \times 10^{-1}) \begin{pmatrix} 6.11 \times 10^{-1} \\ 2.49 \times 10^{-1} \\ 6.58 \times 10^{-1} \\ 3.62 \times 10^{-1} \end{pmatrix}^T \quad (2.52)$$

このとき、元の行列 \mathbf{A} の要素数が $3 \times 4 = 12$ であったのに対し、 $\mathbf{U}_k, \Sigma_k, \mathbf{V}_k$ の要素数は 8 であり、元の行列よりも 1/3 のデータ量が削減されている。

$\mathbf{U}_k, \Sigma_k, \mathbf{V}_k$ を掛け合わせることで、再構成された行列 \mathbf{A}_k が得られる。

$$\mathbf{A}_k = \begin{pmatrix} 8.92 & 3.64 & 9.61 & 5.28 \\ 9.14 & 3.73 & 9.85 & 5.42 \\ 9.25 & 3.77 & 9.96 & 5.48 \end{pmatrix} \times 10^{-2} \quad (2.53)$$

再構成された燃焼度毎の断面積のベクトルを Figure 2-7 に示す。

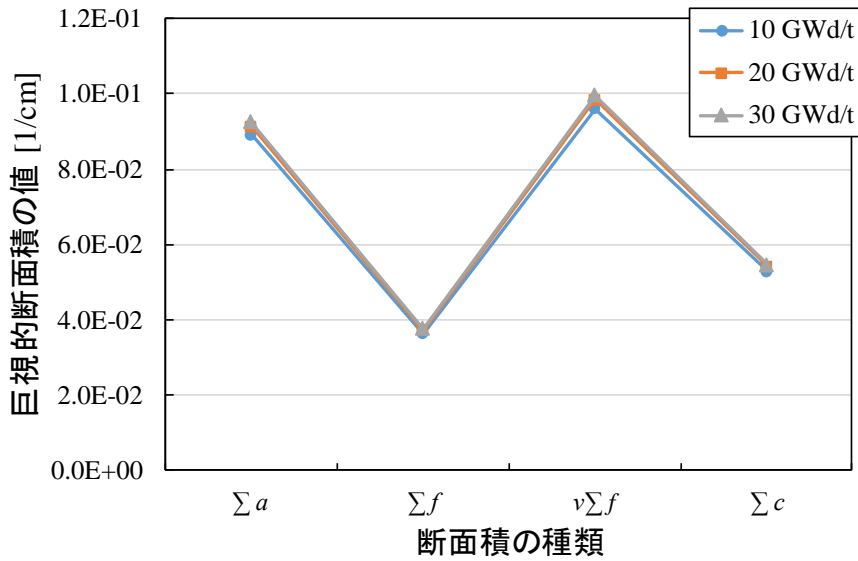


Figure 2-7 再構成された断面積のベクトル

Figure 2-7 の再構成断面積と Figure 2-4 の元の断面積を比較すると、大まかな傾向は再現できているが、例えば Σ_a や Σ_c の各燃焼度での変化は再現できていない。これは、特異値を1つしか用いていないことで、 \vec{v}_1 の定数倍でしか燃焼度に対する変化を表現できないためである。したがって、詳細な変化を再現するためにはより多くの特異値と基底を用いる必要がある。一方で、形状が類似なベクトルを多数集めて作成した行列ならば、もともとのベクトルの数に比べて十分に少数の基底だけで各ベクトルの変化を十分に再現できると考えられる。炉心解析用断面積テーブル内に保存されている断面積データの場合、Figure 2-4 の巨視的断面積のように異なる入力条件に対してベクトルの形状があまり変化しない、または変化傾向が類似であるものが多いと予想されるため、次元削減によって主要な変化を表す基底のみを取り出すことで断面積データの圧縮が可能であると考えられる。

2.3 Reduced Order Modeling (ROM)

本節では、2.2 節で説明した次元削減手法に関連した手法である、低次元化モデル (**Reduced Order Modeling: ROM**) について説明を行う。一般的に ROM とは、本来なら複雑な解析モデルを、できるだけ誤差が小さくなるよう数学的に簡易なモデルとして近似したものである [2], [8], [9]。ROM では、シミュレーションにおける入力データと出力データの主要な相関のみを考慮し、その相関から入力データの次元数あるいは出力データの次元数を削減したモデルを作成している。本来なら多くのデータ量あるいは計算時間を要するシミュレーションに対して ROM を構築することで、シミュレーションに必要な計算コストを低減することができる。

あるシミュレーションにおいて、ある入力パラメータ x の m 個の入力点毎に、 n 種類の出力パ

ラメータが得られている場合を考える。 i 番目 ($1 \leq i \leq n$) の入力点に対する出力パラメータ $a_{i,1}, \dots, a_{i,n}$ が要素として並べられた横ベクトル \vec{a}_i を式(2.54)に示す。

$$\vec{a}_i = (a_{i,1}, \dots, a_{i,n}) \quad (2.54)$$

m 個の入力点に対する \vec{a}_i を行ベクトルとして並べることで $m \times n$ 行列 \mathbf{A} を作成する。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \vec{a}_1 \\ \vdots \\ \vec{a}_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1} & \cdots & a_{m,n} \end{pmatrix} \quad (2.55)$$

\mathbf{A} に対して特異値分解及び低ランク近似を適用した場合、式(2.46) (再掲) が得られる。

$$\mathbf{A}_k = \mathbf{U}_k \mathbf{\Sigma}_k \mathbf{V}_k^T = (\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_k) \begin{pmatrix} \sigma_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \sigma_k \end{pmatrix} (\vec{v}_1 \cdots \vec{v}_k)^T \quad (2.46)$$

再掲

ここで、 \mathbf{U}_k と $\mathbf{\Sigma}_k$ を掛け合わせることで、行ベクトル $\vec{f}_1, \dots, \vec{f}_m$ を定義する。

$$\mathbf{U}_k \mathbf{\Sigma}_k = \begin{pmatrix} \sigma_1 u_{1,1} & \cdots & \sigma_k u_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_1 u_{m,1} & \cdots & \sigma_k u_{m,k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{1,1} & \cdots & f_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{m,1} & \cdots & f_{m,k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{f}_1 \\ \vdots \\ \vec{f}_m \end{pmatrix} \quad (2.56)$$

低ランク近似後の行列 \mathbf{A}_k 内の任意の行ベクトル \vec{a}_i は、 $\vec{f}_i = (f_{i,1}, \dots, f_{i,k})$ を展開係数とした基底 $\mathbf{V}_k = (\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_k)$ の線形結合で表される。

$$\vec{a}_i = f_{i,1} \vec{v}_1 + \cdots + f_{i,k} \vec{v}_k \quad (2.57)$$

以上の \vec{f}_i と \mathbf{V}_k の関係性から、入力パラメータ x に対する出力パラメータが未知の場合においても、各展開係数 $f_1(x), \dots, f_k(x)$ が推定できるならば、入力パラメータ x に対する出力パラメータ $\vec{a}(x)$ は式(2.58)で表すことができる。

$$\vec{a}(x) = (f_1(x), \dots, f_k(x)) (\vec{v}_1 \cdots \vec{v}_k)^T \quad (2.58)$$

したがって、展開係数と入力パラメータの相関をモデル化することで、シミュレーションを実行せずに出力パラメータを推定できる ROM を構築することができる。

具体例として、2.2.4 節で取り上げた次元削減後の断面積データを用いて、燃焼度 (入力パラメータ) から断面積 (出力パラメータ) を推定できる ROM を作成する。2.2.4 節では、低ランク近似によって特異値を 1 個まで削減された断面積データは式(2.52)として得られた。

$$\mathbf{A} \approx \mathbf{U}_k \mathbf{\Sigma}_k \mathbf{V}_k^T = \begin{pmatrix} 5.66 \times 10^{-1} \\ 5.80 \times 10^{-1} \\ 5.86 \times 10^{-1} \end{pmatrix} (2.58 \times 10^{-1}) \begin{pmatrix} 6.11 \times 10^{-1} \\ 2.49 \times 10^{-1} \\ 6.58 \times 10^{-1} \\ 3.62 \times 10^{-1} \end{pmatrix}^T \quad (2.52)$$

再掲

ここで、燃焼度を x [GWd/t] とすると、燃焼度 10、20、30 GWd/t に対する各展開係数 $f_1(x)$ は式(2.59)で表される。

$$\begin{pmatrix} f_1(10) \\ f_1(20) \\ f_1(30) \end{pmatrix} = \mathbf{U}_k \mathbf{\Sigma}_k = \begin{pmatrix} 5.66 \times 10^{-1} \\ 5.80 \times 10^{-1} \\ 5.86 \times 10^{-1} \end{pmatrix} (2.58 \times 10^{-1}) = \begin{pmatrix} 1.46 \times 10^{-1} \\ 1.50 \times 10^{-1} \\ 1.51 \times 10^{-1} \end{pmatrix} \quad (2.59)$$

各燃焼度での展開係数 $f_1(10)$ 、 $f_1(20)$ 、 $f_1(30)$ のプロットを Figure 2-8 に示す。

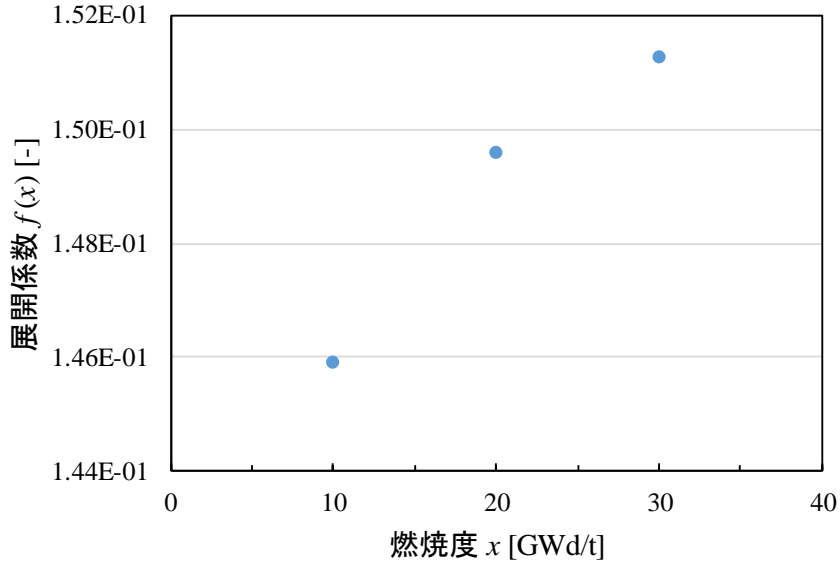


Figure 2-8 燃焼度 x [GWd/t]に対する展開係数

この展開係数を燃焼度の関数としてモデル化することで ROM を作成し、ROM 燃焼度 x [GWd/t]に対する展開係数 $f_1(x)$ を簡易的に計算することができる。モデル化の例として、Figure 2-8 の3点に対して最小二乗法による2次関数フィッティングを行うことで得られる展開係数 $f_1(x)$ を式(2.60)に示す。

$$f_1(x) = -1.02 \times 10^{-5}x^2 + 6.75 \times 10^{-5}x + 1.40 \times 10^{-1} \quad (2.60)$$

例えば、燃焼度 15 GWd/t 及び 25 GWd/t での展開係数を内挿することを考える (Figure 2-9)。

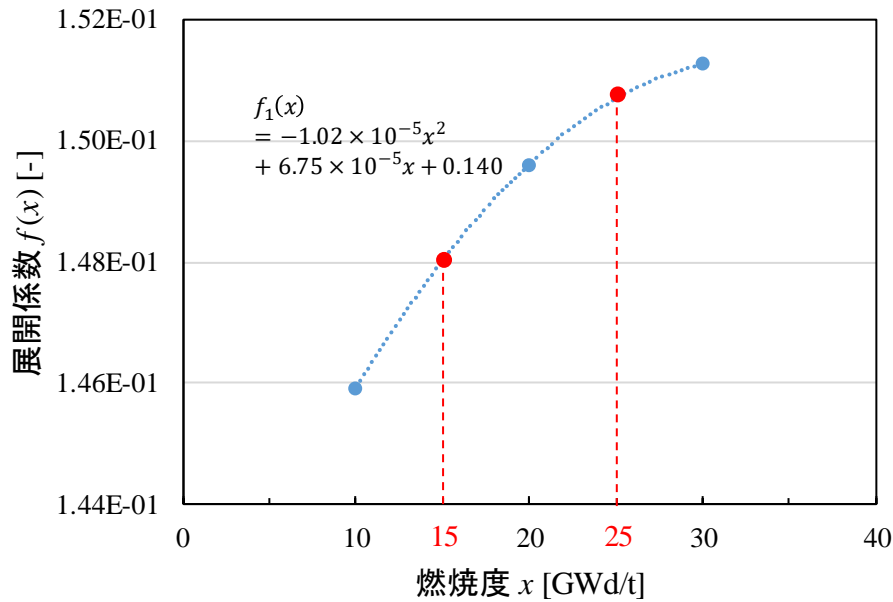


Figure 2-9 展開係数の2次関数フィッティングによる未知の燃焼度(15、25 GWd/t)での展開係数の内挿

15、25 GWd/t での展開係数をそれぞれ式(2.61)、(2.62)に示す。

$$f_1(15) = -1.02 \times 10^{-5} \times 15^2 + 6.75 \times 10^{-5} \times 15 + 1.40 \times 10^{-1} = 1.48 \times 10^{-1} \quad (2.61)$$

$$f_1(25) = -1.02 \times 10^{-5} \times 25^2 + 6.75 \times 10^{-5} \times 25 + 1.40 \times 10^{-1} = 1.51 \times 10^{-1} \quad (2.62)$$

この展開係数を基底 \mathbf{V}_k^T と掛け合わせることで断面積を再構成した。15、25 GWd/t でのROMによる再構成断面積ベクトル $\vec{a}(15)$ 、 $\vec{a}(25)$ をそれぞれ式(2.63)、(2.64)に示す。

$$\vec{a}(15) = f_1(15) \times \mathbf{V}_k^T = (9.05 \times 10^{-2}, 3.69 \times 10^{-2}, 9.74 \times 10^{-2}, 5.36 \times 10^{-2}) \quad (2.63)$$

$$\vec{a}(25) = f_1(25) \times \mathbf{V}_k^T = (9.21 \times 10^{-2}, 3.75 \times 10^{-2}, 9.92 \times 10^{-2}, 5.46 \times 10^{-2}) \quad (2.64)$$

式(2.63)、(2.64)の再構成断面積と、燃焼度 15、25 GWd/t に対して AEGIS による単一集合体計算を行うことで得られた断面積(参照値)を Table 2-4 に示す。また、ROMで推定された $\vec{a}(15)$ 、 $\vec{a}(25)$ と参照値の断面積ベクトルの比較をそれぞれ Figure 2-10、Figure 2-11 に示す。

Table 2-4 ROM 及び AEGIS による燃焼度 15、25 GWd/t の断面積

	燃焼度[GWd/t]	Σ_a [1/cm]	Σ_f [1/cm]	$\nu\Sigma_f$ [1/cm]	Σ_c [1/cm]
ROM	15	9.05E-02	3.69 E-02	9.74 E-02	5.36 E-02
	25	9.21 E-02	3.75 E-02	9.92 E-02	5.46 E-02
AEGIS	15	8.94E-02	3.78E-02	9.90E-02	5.16E-02
	25	9.30E-02	3.63E-02	9.72E-02	5.67E-02

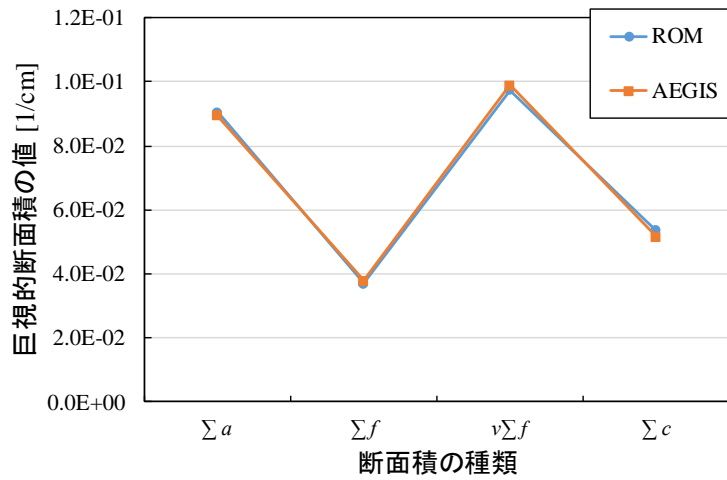


Figure 2-10 ROM または AEGIS による燃焼度 15 GWd/t の断面積

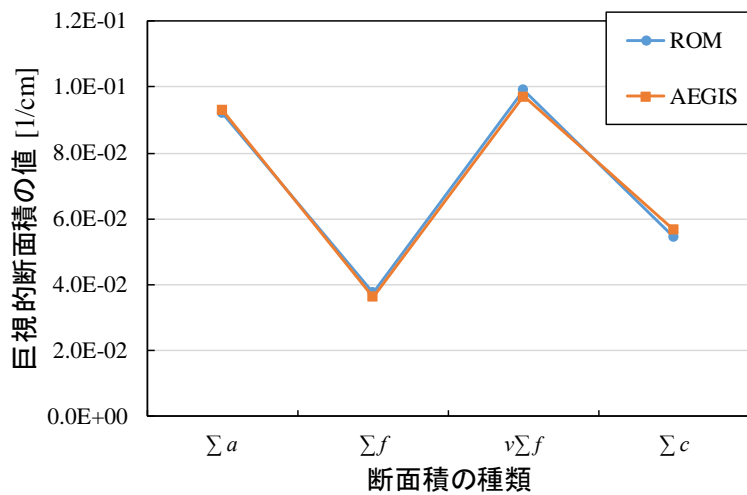


Figure 2-11 ROM または AEGIS による燃焼度 25 GWd/t の断面積

Figure 2-10、Figure 2-11 より、ROM を用いることで AEGIS による詳細な計算で得られる燃焼度 15、25 GWd/t の巨視的断面積を概ね推定できることがわかる。断面積の計算は本来なら共鳴計算、燃焼計算、輸送計算を燃焼ステップ毎に繰り返すことで行われるが、ROM ではそれらの複雑な計算は必要とせず、少数の展開係数への内挿によって断面積を計算することができる。したがって、断面積の推定誤差を最小限に留められる基底のみを用いて ROM を構築することで、計算コストの大幅な低減が期待できる。

2.4 本章のまとめ

本章では、断面積圧縮に用いる次元削減手法について理論的説明を行った。2.2 節では、次元削減に用いる固有値分解、特異値分解、低ランク近似の数学的な説明を行った。また、簡易体系での巨視的断面積に対して次元削減を適用することで、次元削減されたデータの再現性のイメージを説明するとともに、断面積に対する次元の削減性を示した。2.3 節では、次元削減に関連したモデル化手法である ROM についての説明を行い、ROM を用いることでシミュレーションモデルを簡略化できることを説明した。

2.5 参考文献

- [1] 人工知能学会, 深層学習—Deep Learning—, 近代科学社 (2015).
- [2] 松下征輝, “確率的安全余裕評価に向けた過酷事故解析コードの低次元化モデルの開発,” 卒業論文, 名古屋大学 (2018).
- [3] G. Golub, C. Van Loan, *Matrix Computations* 3rd ed., Chapter 2, Johns Hopkins University Press, Baltimore, Maryland (1996).
- [4] Scipy.org, `numpy.linalg.svd`,
“<https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.linalg.svd.html>,” (アクセス日:2019/12/27).
- [5] N. Sugimura, A. Yamamoto, T. Ushio *et al.*, “Neutron Transport Models of AEGIS: An Advanced Next-Generation Neutronics Design System,” *Nucl. Sci. Eng.*, **155**[2], 276-289 (2007).
- [6] A. Yamamoto, T. Endo, M. Tabuchi *et al.*, “AEGIS: An Advanced Lattice Physics Code for Light Water Reactor Analyses,” *Nucl. Eng. Technol.*, **42**[5], 500-509 (2010).
- [7] WIMS Library Update Project, “<https://www-nds.iaea.org/wimsd/energy.htm>”
- [8] 横井公洋, “Reduced Order Modeling を用いた原子炉構造材の放射化量の不確かさ評価及び低減に関する研究,” 修士論文, 名古屋大学 (2018).
- [9] H. S. Abdel-Khalik, P. J. Turinsky, M. A. Jessee, “Efficient Subspace Methods-based Algorithms for Performing Sensitivity, Uncertainty, and Adaptive Simulation of Large-Scale Computational Models,” *Nucl. Sci. Eng.*, **159**[3], 256–272 (2008).

第3章 巨視的・微視的断面積に対する次元削減手法の適用

3.1 本章の概要

本章では、2章で述べた次元削減を単一集合体計算から得られた断面積に適用し、データの圧縮を行う。その後、次元削減後に再構成された断面積を用いて再び単一集合体計算を実施し、出力結果の誤差を評価することで本手法による圧縮性の確認を行う。

3.2節では、次元削減によって生じる誤差を考慮して断面積の圧縮率を決定するため、本研究での精度目標を述べる。

3.3節では、本研究で用いた断面積を生成するにあたって使用した格子計算コード、あるいは検証計算で用いた輸送計算コードの概要を述べる。

3.4節では、単一集合体計算によって得られたセル平均巨視的断面積に対する次元削減の適用性を確認する。

3.5節では、非均質単一集合体計算によって得られた非均質巨視的断面積及び微視的断面積に対する次元削減の適用性を確認する。

3.6節では、3.5節の断面積行列内の巨視的断面積と微視的断面積を分離し、微視的断面積のみに対して次元削減を適用した場合に圧縮率が変化するか検討した結果を示す。

3.7節では、より効率的な次元削減を目的とした断面積データへの重みづけ手法を提案し、重みづけされた断面積の次元削減による圧縮性を示す。

3.8節では、本章のまとめを述べる。

3.2 本研究における精度目標

次元削減による圧縮は、データ圧縮率の増加に伴い、断面積データの誤差が生じる。そのため、データ圧縮率を決定する上では本手法を適用するに当たり許容できる誤差を設定する必要がある。本研究における断面積データの圧縮精度目標は、実効増倍率、3.4節の核分裂反応率分布及び3.5~3.7節の中性子束分布のいずれに対しても、0.1%以下とする。これは、実機設計時の実効増倍率の基準誤差が1%以下、核分裂反応率及び中性子束分布の基準誤差が10%以下であることを踏まえ、炉心計算や評価済み核データファイルなどの誤差を考慮した上で基準を満たせるものとして設定している。

3.3 本研究で用いた計算コード

本研究では、次元削減を適用する対象となる断面積を生成するため、格子計算コードによる単一集合体計算を行っている。本研究で用いた格子計算コードはCASMO-4E及びAEGISである。それぞれの格子計算コードの概要を以下に示す。

・CASMO-4 (または CASMO-4E)

CASMO-4 コードは、Studsvik 社によって開発された格子計算コードである^[1]。CASMO-4 によって計算された断面積はテーブル化され、同社が開発した炉心計算コード SIMULATE-3 への入力として与えられる (CASMO-4/SIMULATE-3 システム)。CASMO-4 の特徴を以下に示す。

- ・MOC に基づく中性子輸送計算による均質化少数群巨視的断面積の計算
- ・等価原理による 70 群での実効断面積の計算

また、CASMO-4E は CASMO-4 の改良コードであり、より複雑な幾何形状 (複数の燃料集合体体系、六角形燃料集合体等) にも対応できるよう改良されたものである。本研究では CASMO-4E を使用している。

・AEGIS

AEGIS コード (**A**nisotropic, **E**xtended **G**eometry, **I**ntegrated **N**eutronics **S**olver)は、株式会社原子力エンジニアリング (Nuclear Engineering, Ltd. : NEL) によって開発された格子計算コードである^{[2], [3]}。AEGIS によって計算された断面積はテーブル化され、原子燃料工業株式会社で開発された炉心計算コード SCOPE2 への入力として用いられる (AEGIS/SCOPE2 システム^[4])。本研究で用いる巨視的断面積及び微視的断面積を生成するにあたって重要となる AEGIS の特徴を以下に示す。

- ・MOC に基づく中性子輸送計算による非均質巨視的・微視的断面積の計算
 - ・超多群計算による 172 群 (XMAS 構造^[5]) 実効断面積の計算
 - ・重核種 28 種類及び核分裂生成物 193 種類 (計 221 種類) を考慮したマイクロ燃焼計算
- 以上の特徴から、AEGIS では空間、エネルギー、核種毎の燃焼に対して CASMO-4E よりも詳細に取り扱うことができる。

また、次元削減後の断面積データを再構成して用いる場合の中性子輸送計算への影響を評価するため、検証計算では再構成断面積を用いて再び単一集合体計算を実施している。そのときに用いた中性子輸送計算コード GENESIS の概要を以下に示す。

・GENESIS

GENESIS コードは、名古屋大学で開発された MOC に基づく 2 次元多群非均質輸送計算、あるいは LEAF 法に基づく 3 次元非均質輸送計算が可能な中性子輸送計算コードである^[6]。LEAF 法 (**L**egendre polynomial **E**xpansion of **A**ngular **F**lux Method) とは、四国電力で開発された SHIKOKU コードに採用されている ASMOC3D 法をベースに、名古屋大学で開発された 3 次元輸送計算手法である。ASMOC 法では、中性子束の空間的変化が大きな領域において、その変化を正確に取り扱うためには詳細な領域分割が必要とされる。そ

のため、詳細な領域分割によって計算コストが増加し、特に計算時間が非実用的な規模となる可能性が存在する。そこで LEAF 法では、角度中性子束及び中性子源に対して関数展開を実施し、効率的に計算を行うことで計算コストの削減を行っている。以上の特徴から、LEAF 法は従来の 3 次元ノード法（拡散法、Simplified P_N 法）よりも幾何形状を精緻に取り扱うことができ、かつ従来の 3 次元非均質輸送計算手法（MOC）と比較して高速に中性子輸送計算を実施できる。

なお、GENESIS の LEAF 法による中性子輸送計算は 3 次元体系で用いられる。本研究では 2 次元単一集合体体系を考慮しており、2 次元体系では GENESIS の中性子輸送計算は従来の MOC に基づく計算となる。

その他にも、LEAF 法及び MOC 内での反復計算を高速に行うため、GENESIS では Generalized Coarse Mesh Rebalance (GCMR)法あるいは Coarse Mesh Finite Difference (CMFD) 法に基づく加速計算を採用している。

3.4 巨視的断面積に対する次元削減の適用

本節では、巨視的断面積への次元削減の検討を行う。炉心計算への入力は基本的に巨視的断面積であるため、巨視的断面積への次元削減の適用性の確認が求められる。以下の節では、巨視的断面積に対して次元削減を適用する手順、及び次元削減後の再構成巨視的断面積を用いた場合の核計算の誤差の検証手順を説明する。

3.4.1 巨視的断面積を用いた行列の作成手順

断面積データに対して次元削減を適用するに当たり、断面積データから行列を作成する必要がある。本節では、燃料セル単位で均質化された巨視的断面積を用いた断面積行列の作成手順を述べる。

本検討では、次の 4 種類の核データを取り扱う。

D : 拡散係数

Σ_a : 巨視的吸収断面積

$\nu\Sigma_f$: 巨視的生成断面積

$\Sigma_{s,g' \rightarrow g}$: 巨視的散乱断面積(g' 群から g 群への散乱)

ここで、拡散係数とは、輸送計算を拡散近似することで得られる拡散方程式の計算に必要な定数であり、巨視的輸送断面積 Σ_{tr} との間に式(3.1)の関係が成り立つ。

$$D = \frac{1}{3\Sigma_{tr}} \quad (3.1)$$

拡散法を用いた 3 次元炉心計算コードでは、拡散係数及び上記の巨視的断面積を用いて式(3.2)の拡散方程式を解いている^[7]。

$$-D_g \nabla^2 \phi_g(\mathbf{r}) + \Sigma_{tr,g} \phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{g'} \Sigma_{s,g' \rightarrow g} \phi_{g'}(\mathbf{r}) + \frac{\chi_g}{k_{eff}} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,g} \phi_{g'}(\mathbf{r}) \quad (3.2)$$

ここで、

ϕ : 中性子束

χ : 核分裂スペクトル

k_{eff} : 実効増倍率

である。また、 \mathbf{r} は位置を表し、添え字の g はエネルギー群を表す。

拡散係数 D は巨視的断面積ではないが、巨視的輸送断面積 Σ_{tr} を用いて式(3.1)で表されること、そして式(3.2)を解く上で重要な核データであることから、本論文では巨視的断面積の一種として取り扱っている。

ある状態ポイントにおける単一集合体計算を実施し、そのうちのある均質化セルに対して上記の4種類の g 群巨視的断面積が得られた場合を考える。そのとき、Figure 3-1 に示される通り、各断面積を横一列に並べる。

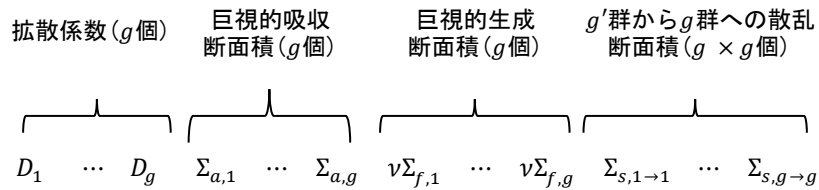


Figure 3-1 ある均質化セルのある状態ポイントにおける巨視的断面積の並び

Figure 3-1 を行ベクトルと見て、同セル内で状態ポイントが変化した場合の断面積を行として追加していくことで、Figure 3-2 の巨視的断面積行列が得られる。

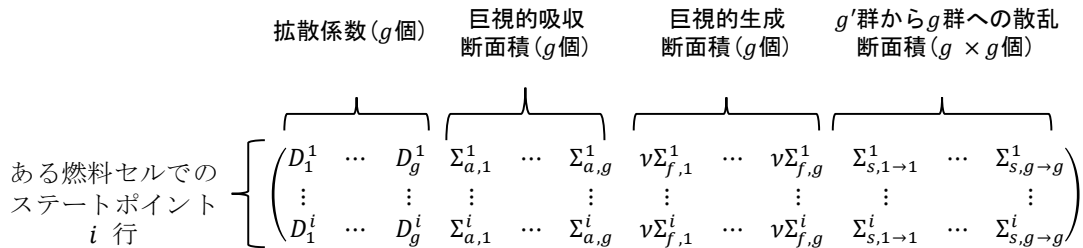


Figure 3-2 ある均質化セルの全状態ポイント(i 個)での巨視的断面積行列

更に、Figure 3-2 の巨視的断面積行列を体系内のセル毎に作成し、全てのセルでの断面積行列を列方向に結合することで、Figure 3-3 に示される体系全体での巨視的断面積行列を作成する。

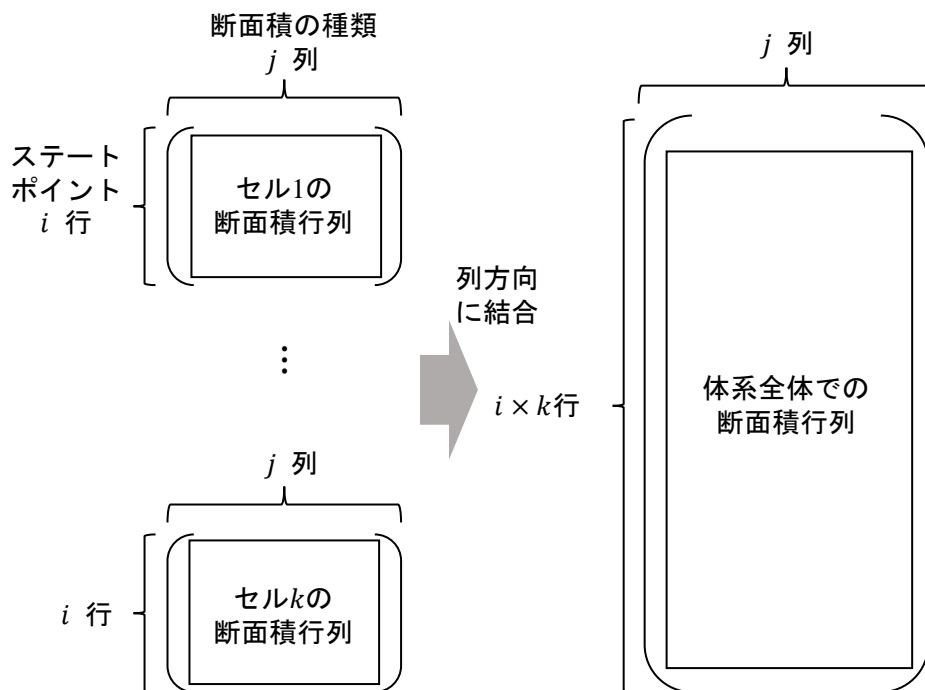


Figure 3-3 全状態ポイントにおける全セルでの巨視的断面積行列

この断面積行列の作成パターンは、Figure 3-3 に示したパターンのみならず複数存在する。例えば、Figure 3-3 において、各セルの断面積行列を列方向ではなく行方向に結合するといった方法も考えられる。断面積行列の並びの妥当性の検証及び最適化の検討に関しては本論文では取り扱っていないが、本論文においては、「状態ポイント毎及びセル毎の断面積情報を行として並べた場合、各行ベクトルの類似性が高いため次元の削減性が高い」という予想のもと、Figure 3-3 の並びを採用している。なお、Figure 3-3 の行列の複数の行ベクトルの位置を入れ替えたとしても、特異値分解によって得られる特異値は一意的であるため、次元削減後の再構成処理における結果は変わらない（列ベクトルについても同様）。

作成した断面積行列に対して特異値分解及び低ランク近似を適用し、次元削減を行う。

3.4.2 再構成断面積を用いた集合体計算

3.4.2.1 計算条件

検証計算に用いた PWR17×17Gd 入り燃料集合体体系を Figure 3-4 に示す。

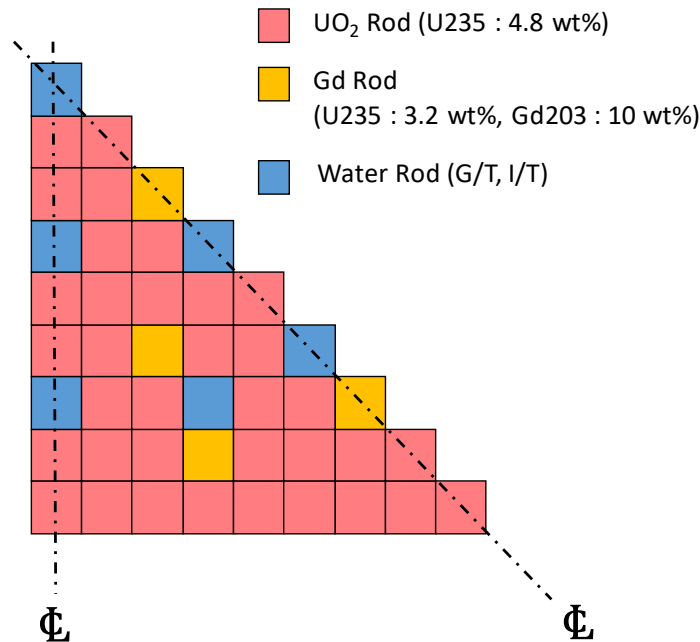


Figure 3-4 PWR17×17Gd 入り燃料集合体(1/8 対称)

Figure 3-4 は、燃料集合体の対称性を考慮した 1/8 体系であり、45 本のセル領域が存在する。このうち、35 本が UO_2 燃料棒、4 本が Gd 入り燃料棒、6 本がウォーターロッドである。この体系に対して、格子計算コード CASMO-4E を用いた一般的なケースマトリックスに対する燃焼計算及びブランチ計算を含んだ単一集合体計算を実行し、燃料セル平均での 16 群巨視的断面積を計算した。このとき、燃焼計算及びブランチ計算で考慮されている状態変数は下記の 6 種類である。

BURNUP: 燃焼度 [GWd/t]

BOR: ホウ素濃度 [ppm]

TMO: 減速材温度 [K]

TFU: 燃料温度 [K]

VOI: ボイド率 [%]

CR: 制御棒挿入(in または out)

これらの状態変数を組み合わせ、基準状態での燃焼計算 (BASE) 及び各状態変数に対するブランチ計算のためのケースマトリックスを作成した。作成した 213 ステートポイントでのケースマトリックスを Table 3-1~Table 3-6 に示す。ここで、Table 3-1~Table 3-6 の Type 欄において、Base は基準状態となる燃焼計算での入力点であることを表し、Base 以外は各状態変数のブランチ計算での入力点であることを表している。

Table 3-1 格子計算に用いたケースマトリックス(No. 1~40)

No.	Type	BURNUP[GWd/t]	BOR[ppm]	TMO[K]	TFU[K]	VOI[%]	CR
1	BASE	0	600	576	900	0	out
2	BASE	0.1	600	576	900	0	out
3	BASE	0.5	600	576	900	0	out
4	BASE	1	600	576	900	0	out
5	BASE	1.5	600	576	900	0	out
6	BASE	2	600	576	900	0	out
7	BASE	2.5	600	576	900	0	out
8	BASE	3	600	576	900	0	out
9	BASE	3.5	600	576	900	0	out
10	BASE	4	600	576	900	0	out
11	BASE	4.5	600	576	900	0	out
12	BASE	5	600	576	900	0	out
13	BASE	5.5	600	576	900	0	out
14	BASE	6	600	576	900	0	out
15	BASE	6.5	600	576	900	0	out
16	BASE	7	600	576	900	0	out
17	BASE	7.5	600	576	900	0	out
18	BASE	8	600	576	900	0	out
19	BASE	8.5	600	576	900	0	out
20	BASE	9	600	576	900	0	out
21	BASE	9.5	600	576	900	0	out
22	BASE	10	600	576	900	0	out
23	BASE	10.5	600	576	900	0	out
24	BASE	11	600	576	900	0	out
25	BASE	11.5	600	576	900	0	out
26	BASE	12	600	576	900	0	out
27	BASE	12.5	600	576	900	0	out
28	BASE	13	600	576	900	0	out
29	BASE	13.5	600	576	900	0	out
30	BASE	14	600	576	900	0	out
31	BASE	14.5	600	576	900	0	out
32	BASE	15	600	576	900	0	out
33	BASE	15.5	600	576	900	0	out
34	BASE	16	600	576	900	0	out
35	BASE	16.5	600	576	900	0	out
36	BASE	17	600	576	900	0	out
37	BASE	17.5	600	576	900	0	out
38	BASE	18	600	576	900	0	out
39	BASE	18.5	600	576	900	0	out
40	BASE	19	600	576	900	0	out

Table 3-2 格子計算に用いたケースマトリックス(No. 41~80)

No.	Type	BURNUP[GWd/t]	BOR[ppm]	TMO[K]	TFU[K]	VOI[%]	CR
41	BASE	19.5	600	576	900	0	out
42	BASE	20	600	576	900	0	out
43	BASE	20.5	600	576	900	0	out
44	BASE	21	600	576	900	0	out
45	BASE	21.5	600	576	900	0	out
46	BASE	22	600	576	900	0	out
47	BASE	22.5	600	576	900	0	out
48	BASE	23	600	576	900	0	out
49	BASE	23.5	600	576	900	0	out
50	BASE	24	600	576	900	0	out
51	BASE	24.5	600	576	900	0	out
52	BASE	25	600	576	900	0	out
53	BASE	27.5	600	576	900	0	out
54	BASE	30	600	576	900	0	out
55	BASE	32.5	600	576	900	0	out
56	BASE	35	600	576	900	0	out
57	BASE	37.5	600	576	900	0	out
58	BASE	40	600	576	900	0	out
59	BASE	42.5	600	576	900	0	out
60	BASE	45	600	576	900	0	out
61	BASE	47.5	600	576	900	0	out
62	BASE	50	600	576	900	0	out
63	BASE	52.5	600	576	900	0	out
64	BASE	55	600	576	900	0	out
65	BASE	57.5	600	576	900	0	out
66	BASE	60	600	576	900	0	out
67	BASE	62.5	600	576	900	0	out
68	BASE	65	600	576	900	0	out
69	BASE	67.5	600	576	900	0	out
70	BASE	70	600	576	900	0	out
71	BOR	0	0.1	576	900	0	out
72	BOR	1	0.1	576	900	0	out
73	BOR	3	0.1	576	900	0	out
74	BOR	5	0.1	576	900	0	out
75	BOR	7	0.1	576	900	0	out
76	BOR	10	0.1	576	900	0	out
77	BOR	15	0.1	576	900	0	out
78	BOR	20	0.1	576	900	0	out
79	BOR	30	0.1	576	900	0	out
80	BOR	40	0.1	576	900	0	out

Table 3-3 格子計算に用いたケースマトリックス(No. 81~120)

No.	Type	BURNUP[GWd/t]	BOR[ppm]	TMO[K]	TFU[K]	VOI[%]	CR
81	BOR	50	0.1	576	900	0	out
82	BOR	60	0.1	576	900	0	out
83	BOR	70	0.1	576	900	0	out
84	BOR	0	1200	576	900	0	out
85	BOR	1	1200	576	900	0	out
86	BOR	3	1200	576	900	0	out
87	BOR	5	1200	576	900	0	out
88	BOR	7	1200	576	900	0	out
89	BOR	10	1200	576	900	0	out
90	BOR	15	1200	576	900	0	out
91	BOR	20	1200	576	900	0	out
92	BOR	30	1200	576	900	0	out
93	BOR	40	1200	576	900	0	out
94	BOR	50	1200	576	900	0	out
95	BOR	60	1200	576	900	0	out
96	BOR	70	1200	576	900	0	out
97	BOR	0	2400	576	900	0	out
98	BOR	1	2400	576	900	0	out
99	BOR	3	2400	576	900	0	out
100	BOR	5	2400	576	900	0	out
101	BOR	7	2400	576	900	0	out
102	BOR	10	2400	576	900	0	out
103	BOR	15	2400	576	900	0	out
104	BOR	20	2400	576	900	0	out
105	BOR	30	2400	576	900	0	out
106	BOR	40	2400	576	900	0	out
107	BOR	50	2400	576	900	0	out
108	BOR	60	2400	576	900	0	out
109	BOR	70	2400	576	900	0	out
110	TMO	0	600	556	900	0	out
111	TMO	1	600	556	900	0	out
112	TMO	3	600	556	900	0	out
113	TMO	5	600	556	900	0	out
114	TMO	7	600	556	900	0	out
115	TMO	10	600	556	900	0	out
116	TMO	15	600	556	900	0	out
117	TMO	20	600	556	900	0	out
118	TMO	30	600	556	900	0	out
119	TMO	40	600	556	900	0	out
120	TMO	50	600	556	900	0	out

Table 3-4 格子計算に用いたケースマトリックス(No. 121~160)

No.	Type	BURNUP[GWd/t]	BOR[ppm]	TMO[K]	TFU[K]	VOI[%]	CR
121	TMO	60	600	556	900	0	out
122	TMO	70	600	556	900	0	out
123	TMO	0	600	596	900	0	out
124	TMO	1	600	596	900	0	out
125	TMO	3	600	596	900	0	out
126	TMO	5	600	596	900	0	out
127	TMO	7	600	596	900	0	out
128	TMO	10	600	596	900	0	out
129	TMO	15	600	596	900	0	out
130	TMO	20	600	596	900	0	out
131	TMO	30	600	596	900	0	out
132	TMO	40	600	596	900	0	out
133	TMO	50	600	596	900	0	out
134	TMO	60	600	596	900	0	out
135	TMO	70	600	596	900	0	out
136	TFU	0	600	576	556	0	out
137	TFU	1	600	576	556	0	out
138	TFU	3	600	576	556	0	out
139	TFU	5	600	576	556	0	out
140	TFU	7	600	576	556	0	out
141	TFU	10	600	576	556	0	out
142	TFU	15	600	576	556	0	out
143	TFU	20	600	576	556	0	out
144	TFU	30	600	576	556	0	out
145	TFU	40	600	576	556	0	out
146	TFU	50	600	576	556	0	out
147	TFU	60	600	576	556	0	out
148	TFU	70	600	576	556	0	out
149	VOI	0	600	576	900	20	out
150	VOI	1	600	576	900	20	out
151	VOI	3	600	576	900	20	out
152	VOI	5	600	576	900	20	out
153	VOI	7	600	576	900	20	out
154	VOI	10	600	576	900	20	out
155	VOI	15	600	576	900	20	out
156	VOI	20	600	576	900	20	out
157	VOI	30	600	576	900	20	out
158	VOI	40	600	576	900	20	out
159	VOI	50	600	576	900	20	out
160	VOI	60	600	576	900	20	out

Table 3-5 格子計算に用いたケースマトリックス(No. 161~200)

No.	Type	BURNUP[GWd/t]	BOR[ppm]	TMO[K]	TFU[K]	VOI[%]	CR
161	VOI	70	600	576	900	20	out
162	VOI	0	600	576	900	40	out
163	VOI	1	600	576	900	40	out
164	VOI	3	600	576	900	40	out
165	VOI	5	600	576	900	40	out
166	VOI	7	600	576	900	40	out
167	VOI	10	600	576	900	40	out
168	VOI	15	600	576	900	40	out
169	VOI	20	600	576	900	40	out
170	VOI	30	600	576	900	40	out
171	VOI	40	600	576	900	40	out
172	VOI	50	600	576	900	40	out
173	VOI	60	600	576	900	40	out
174	VOI	70	600	576	900	40	out
175	VOI	0	600	576	900	60	out
176	VOI	1	600	576	900	60	out
177	VOI	3	600	576	900	60	out
178	VOI	5	600	576	900	60	out
179	VOI	7	600	576	900	60	out
180	VOI	10	600	576	900	60	out
181	VOI	15	600	576	900	60	out
182	VOI	20	600	576	900	60	out
183	VOI	30	600	576	900	60	out
184	VOI	40	600	576	900	60	out
185	VOI	50	600	576	900	60	out
186	VOI	60	600	576	900	60	out
187	VOI	70	600	576	900	60	out
188	VOI	0	600	576	900	80	out
189	VOI	1	600	576	900	80	out
190	VOI	3	600	576	900	80	out
191	VOI	5	600	576	900	80	out
192	VOI	7	600	576	900	80	out
193	VOI	10	600	576	900	80	out
194	VOI	15	600	576	900	80	out
195	VOI	20	600	576	900	80	out
196	VOI	30	600	576	900	80	out
197	VOI	40	600	576	900	80	out
198	VOI	50	600	576	900	80	out
199	VOI	60	600	576	900	80	out
200	VOI	70	600	576	900	80	out

Table 3-6 格子計算に用いたケースマトリックス(No. 201~213)

No.	Type	BURNUP[GWd/t]	BOR[ppm]	TMO[K]	TFU[K]	VOI[%]	CR
201	CR	0	600	576	900	0	in
202	CR	1	600	576	900	0	in
203	CR	3	600	576	900	0	in
204	CR	5	600	576	900	0	in
205	CR	7	600	576	900	0	in
206	CR	10	600	576	900	0	in
207	CR	15	600	576	900	0	in
208	CR	20	600	576	900	0	in
209	CR	30	600	576	900	0	in
210	CR	40	600	576	900	0	in
211	CR	50	600	576	900	0	in
212	CR	60	600	576	900	0	in
213	CR	70	600	576	900	0	in

また、CASMO-4E から出力された 16 群巨視的断面積のエネルギー群構造を Table 3-7 に示す。

Table 3-7 16 群エネルギー構造

	上限	下限
1群	10 MeV	821 keV
2群	821 keV	5.53 keV
3群	5.53 keV	4 eV
4群	4 eV	1.3 eV
5群	1.3 eV	1.15 eV
6群	1.15 eV	1.097 eV
7群	1.097 eV	1.02 eV
8群	1.02 eV	0.972 eV
9群	0.972 eV	0.85 eV
10群	0.85 eV	0.625 eV
11群	0.625 eV	0.35 eV
12群	0.35 eV	0.28 eV
13群	0.28 eV	0.14 eV
14群	0.14 eV	0.058 eV
15群	0.058 eV	0.03 eV
16群	0.03 eV	0 eV

Table 3-1~Table 3-7 の入力に基づき CASMO-4E で計算された巨視的断面積から、Figure 3-3 の並びで断面積行列を作成した。作成した断面積行列を Figure 3-5 に示す。

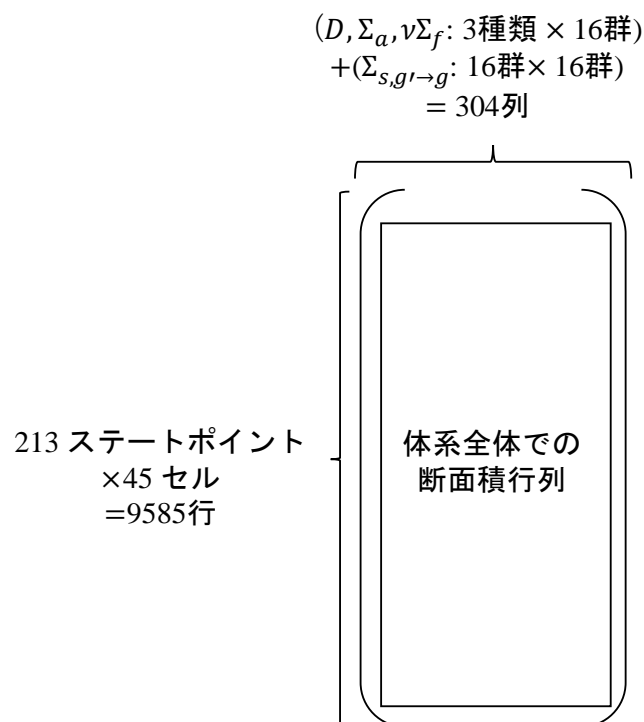


Figure 3-5 単一集合体計算で得られた巨視的断面積行列

Figure 3-5 に示す断面積行列では、1/8 集合体内の 45 セルにおいて、各セルで均質化された断面積が 213 ステートポイント毎に存在するため、行数は 45 セル×213 ステートポイント=9585 行である。また、1 行の中に並べられている断面積は、 D 、 Σ_a 、 $\nu\Sigma_f$ がそれぞれ 16 群存在し、また、 Σ_s が 16^2 種類存在するため、列数は $3 \times 16 + 16^2 = 304$ 列である。この行列に対して次元削減を適用し、データの圧縮を行った。

3.4.2.2 計算結果

Figure 3-5 の断面積行列に対して特異値分解を適用することで得られた 304 個の特異値を Figure 3-6 に示す。ここで、特異値分解には Python の数値計算ライブラリ Numpy の `numpy.linalg.svd` 関数を用いた^[8]。

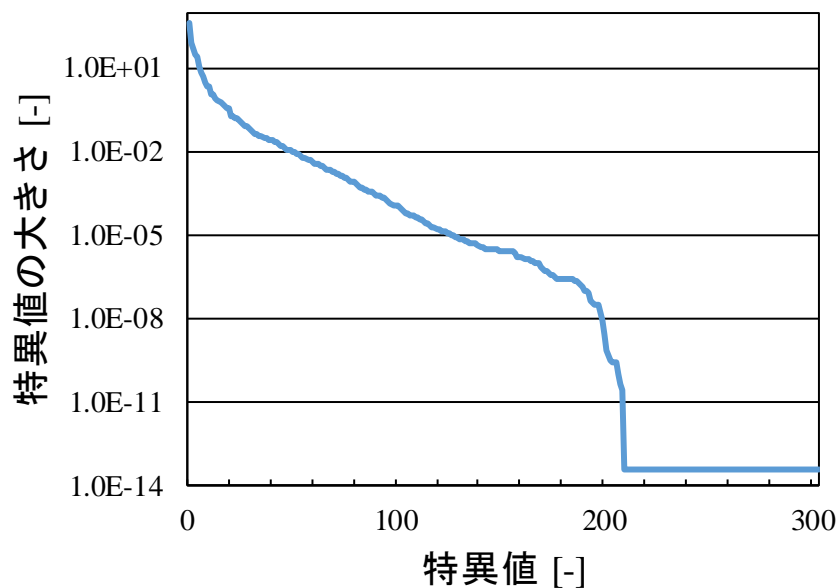


Figure 3-6 単一集合体計算で得られたセル平均巨視的断面積行列の特異値

Figure 3-6 において、特異値は 10^{-14} から 10^2 までの範囲のオーダーである。ここで、210 番目以降の特異値は 10^{-14} のオーダーで一定値となっている。この理由は、断面積行列内の各行の要素のうち、値が 0 の要素数はいずれの行においても 100 個程度（多くは上方散乱の値が 0 となる散乱断面積）存在するためである。また、Figure 3-6 で最大の特異値のオーダーは 10^2 である。このとき、最大の特異値に対応する左特異ベクトルの要素の最大値は 2.04×10^{-2} 、右特異ベクトルの要素の最大値は 5.79×10^{-1} であるため、 10^0 ($\approx 10^2 \times 2.04 \times 10^{-2} \times 5.79 \times 10^{-1}$) のオーダーまでの断面積行列の要素を表現できる。実際、本検討で作成した特異値分解前の断面

断面積行列の要素の最大値（1 群の拡散係数）は 10^0 のオーダーである。

この特異値の数を低ランク近似によって削減し、データの圧縮を行った。検証計算では、まず圧縮された特異値及び特異ベクトルを掛け合わせることで断面積の再構成を行った。その後、再構成断面積を用いて、ステートポイント毎に輸送計算コード GENSIS による単一集合体計算を行い、実効増倍率及び燃料セル単位の核分裂反応率を計算した。

Table 3-8 GENESIS の入力条件

Ray Trace 幅		0.1 [cm]
方位角数		8 方向 (2π)
極角数 (TY 分点)		4 方向 (π)
内部反復回数		2 回
外部反復回数		50 回
MOC 収束判定条件	中性子束	10^{-4} 以下
	実効増倍率	10^{-5} 以下
GCMR 収束判定条件	中性子束	10^{-6} 以下
	実効増倍率	10^{-7} 以下
境界条件		完全反射 (全境界面)

この 213 ステートポイントでの単一集合体計算を、特異値の数を変化させたそれぞれのケースで行い、得られた実効増倍率及び核分裂反応率を参照解と比較した。このときの参照解は、次元削減前の元の巨視的断面積を用いた場合の実効増倍率及び核分裂反応率を用いている。

次元削減後の再構成断面積を用いた場合の*i*番目のステートポイントでの実効増倍率の相対誤差 $\Delta k_{eff,i}$ [%]は、式(3.3)で計算される。

$$\Delta k_{eff,i} = \left| \frac{k_{eff,i,reconstructed} - k_{eff,i,original}}{k_{eff,i,original}} \right| \quad (3.3)$$

ここで、

$k_{eff,i,original}$: 次元削減前の元の断面積を用いた場合の*i*番目のステートポイントでの単一集合体計算による実効増倍率

$k_{eff,i,reconstructed}$: 次元削減後の再構成断面積を用いた場合の*i*番目のステートポイントでの単一集合体計算による実効増倍率

である。

213 ステートポイント毎に得られた $\Delta k_{eff,i}$ に対して、最大誤差及び平均二乗誤差(RMS)を計算した。最大誤差 $\Delta k_{eff,max}$ 及び平均二乗誤差 $\Delta k_{eff,RMS}$ をそれぞれ式(3.4)、(3.5)に示す。

$$\Delta k_{eff,max} = \max_{i \leq 213} \Delta k_{eff,i} \quad (3.4)$$

$$\Delta k_{eff,RMS} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{213} \left(\frac{k_{eff,i,reconstructed} - k_{eff,i,original}}{k_{eff,i,original}} \right)^2}{213}} \quad (3.5)$$

式(3.4)、(3.5)の計算を、再構成断面積に用いる特異値の数を変えた場合毎に行った。304 個の特異値のうち、再構成に用いる特異値数を 5 個おきに変化させた (100 個以下) ケースそれぞれの再構成断面積を用いた場合の $\Delta k_{eff,max}$ 及び $\Delta k_{eff,RMS}$ を Figure 3-7 に示す。

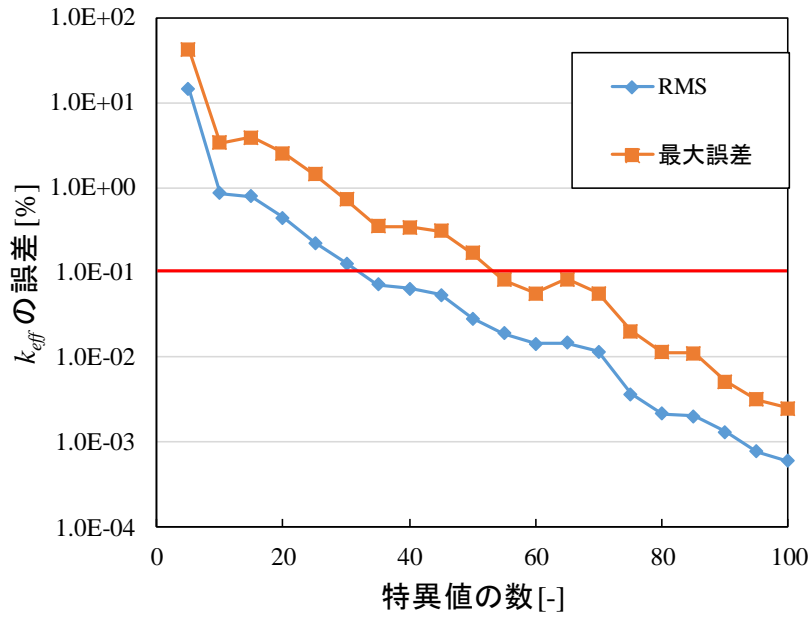


Figure 3-7 再構成巨視的断面積に用いた特異値数に対する k_{eff} の誤差[%]

また、各ステートポイントにおいて実効増倍率が集合体毎に出力されるのに対して、核分裂反応率はセル毎に出力されている。したがって、集合体全体での核分裂反応率の誤差を評価するため RMS を計算する。次元削減後の再構成断面積を用いた場合の*i*番目のステートポイントでの核分裂反応率の RMS を式(3.6)に示す。

$$\Delta R_{RMS,i} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{N_{fuel}} \left(\frac{R_{i,j, reconstructed} - R_{i,j, original}}{R_{i,j, original}} \right)^2}{n_{fuel}}} \quad (3.6)$$

ここで、

$R_{i,j, original}$: 次元削減前の元の断面積を用いた場合の*i*番目のステートポイントでの単一集合体計算による*j*番目のセルの核分裂反応率

$R_{i,j, reconstructed}$: 次元削減後の再構成断面積を用いた場合の*i*番目のステートポイントの単一集合体計算による*j*番目のセルの核分裂反応率

である。また、 n_{fuel} は集合体内で核分裂反応が生じている燃料セルの数であり、17×17 燃料集合体の 289 セルのうち 264 本が燃料セルである。

213 ステートポイント毎の $\Delta R_{RMS,i}$ のうち、最大値 $\Delta R_{RMS,max}$ 及び平均値 $\Delta R_{RMS,average}$ はそれぞれ式(3.7), (3.8)で計算される。

$$\Delta R_{RMS,max} = \max_{i \leq 213} \Delta R_{RMS,i} \quad (3.7)$$

$$\Delta R_{RMS,average} = \frac{\sum_i^{213} \Delta R_{RMS,i}}{213} \quad (3.8)$$

実効増倍率と同様、304個の特異値のうち、100個以下の特異値数で5個おきに変化させた再構成断面積を用いた場合の $\Delta R_{RMS,max}$ 及び $\Delta R_{RMS,average}$ をFigure 3-8に示す。

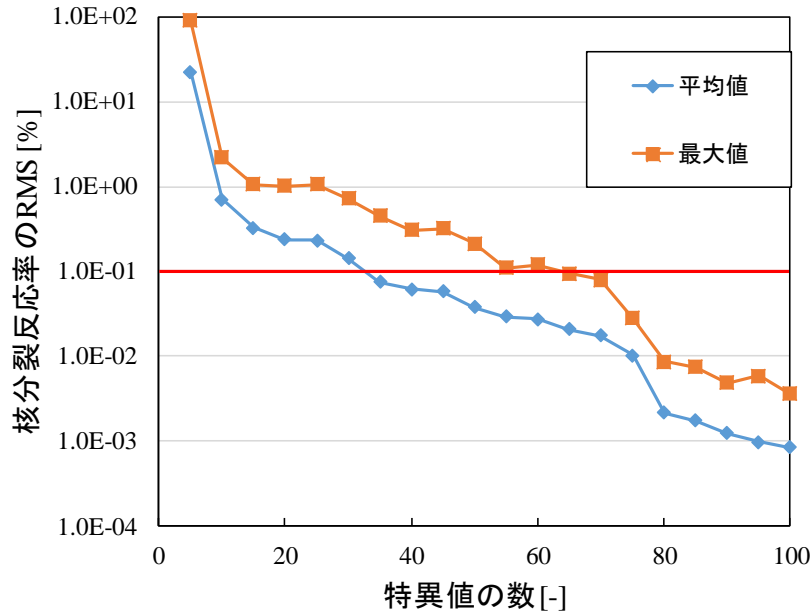


Figure 3-8 再構成巨視的断面積に用いた特異値数に対する核分裂反応率のRMS[%]

Figure 3-7、Figure 3-8より、実効増倍率及び核分裂反応率の誤差は、特異値の数に対してほぼ同じオーダーの誤差が生じていることがわかる。目標誤差0.1%(Figure 3-7、Figure 3-8の赤線)に対しては、実効増倍率、核分裂反応率ともに65個の特異値で達成できる。このとき圧縮率は、元の断面積と圧縮後の特異値及び特異ベクトルの要素数を比較して、式(3.9)で表される。

$$1 - \frac{9585 \times 65 + 65 + 65 \times 304}{9585 \times 304} = 77.94\% \quad (3.9)$$

したがって、巨視的断面積のみの場合、約78%のデータ削減が可能である。

ここで、再構成に用いた特異値と、実効増倍率及び核分裂反応率に生じた誤差の関係を考察する。特異値分解によって得られた n 個の特異値($\sigma_1 \geq \sigma_i \geq \sigma_n$)のうち、低ランク近似によって k 番目までの特異値を用いる場合を考える。このとき、削減された $k+1$ 番目以降の特異値の総和と、 n 個の特異値の総和の比を取ることで $\Delta\sigma$ を定義する。

$$\Delta\sigma = \frac{\sum_{k+1}^n \sigma_i}{\sum_1^n \sigma_i} \quad (3.10)$$

特異値は、対応する左特異ベクトル及び右特異ベクトルが元の行列に対してどの程度影響しているかを表している。そのため、式(3.10)は低ランク近似によって削減した特異ベクトルの、全体の特異ベクトルに対する欠損量を表している。以上の理由から、本研究では $\Delta\sigma$ を特異値の欠損率[%]と定義する。例えば欠損率が0.1%であるとき、再構成断面積の各要素

の誤差は、断面積行列内の最大要素を基準として 10^{-3} 倍以下のオーダーで生じていると推定できる。

特異値の欠損率と、Figure 3-7 の実効増倍率の最大誤差及び Figure 3-8 の核分裂反応率の RMS の最大値を並べてプロットした結果を Figure 3-9 に示す。

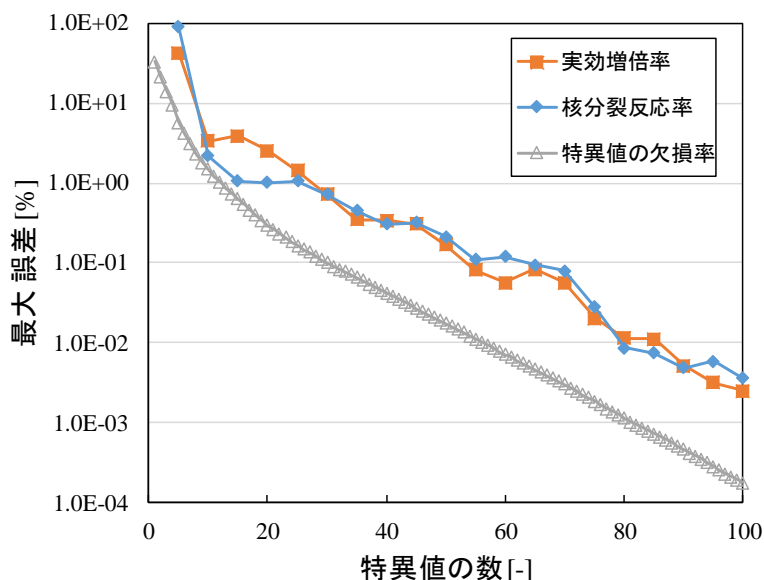


Figure 3-9 次元削減後の再構成巨視的断面積を用いた実効増倍率及び核分裂反応率の最大誤差と特異値の欠損率の比較

Figure 3-9 では、実効増倍率及び核分裂反応率の最大誤差と欠損率のオーダーは一致していない。これは、欠損率は最大要素（巨視的断面積の最大値）を基準とした場合の誤差のオーダーを示しているが、反応率は巨視的断面積と中性子スペクトルの積で決まるため、一部の誤差の大きい巨視的断面積が値の大きな中性子スペクトルと掛け合わされていることが原因として考えられる。一方で、実効増倍率及び中性子束の誤差と欠損率の傾きはほぼ一致しているため、欠損率と精度の間に何らかの相関が存在していると考えられる。本検討においては、実効増倍率及び核分裂反応率の最大誤差は特異値の欠損率のおおよそ 10 倍程度のオーダーで生じている。

3.5 巨視的・微視的断面積に対する次元削減手法の適用

前節では、巨視的断面積への次元削減の適用性を確認した。一方で、マイクロ燃焼モデルでは巨視的断面積のみならず微視的断面積もテーブル化される必要がある。微視的断面積は核種毎に保存されるため、均質化体系毎に保存されている巨視的断面積に比べてデータ量は非常に多い。そのため、本手法の微視的断面積への適用性の確認は、今後の空間・エネルギー

ギー群に対して詳細なマイクロ燃焼モデルに断面積圧縮機能を実装する上で重要となる。したがって、本節では巨視的断面積、微視的断面積の両方を含んだ断面積行列を作成し、それに対して次元削減を適用することを考える。また、3.4節では燃料集合体内の燃料セル毎に均質化された巨視的断面積に対して次元削減を適用したが、本節では燃料集合体の物質領域毎の断面積に対して次元削減を適用する。

3.5.1 巨視的・微視的断面積を用いた行列の作成手順

本検討では、巨視的断面積[1/cm]は散乱断面積 $\Sigma_{s,g' \rightarrow g}$ のみを考慮している。これは、散乱断面積のデータ量は群数の2乗に比例するため、核種毎の16群微視的断面積として考慮した場合のデータ量が膨大になるためである。また、微視的断面積[barn=10²⁴ cm²]は、主に中性子輸送計算及び燃焼計算で用いられる以下の4種類を考慮する。

- σ_a : 微視的吸収断面積
- σ_f : 微視的生成断面積
- $\nu\sigma_f$: 微視的生成断面積
- σ_c : 微視的捕獲断面積

これら4種類の微視的断面積は均質化領域内の核種毎に計算される。ここで、ある領域内に核種が n 種類存在している場合を考え、その時の断面積行列の作成手順を説明する。ある領域内の g 群断面積をステートポイント毎に行ベクトルとして並べることを考えた場合、列として左側からまず巨視的散乱断面積を並べる。そして、巨視的散乱断面積を並び終えた次の列から、1番目の核種の微視的断面積を並べ、同様の手順で後ろの列に n 番目の核種までの微視的断面積を並べる。以上の手順によって作成される断面積行列を Figure 3-10 に示す。

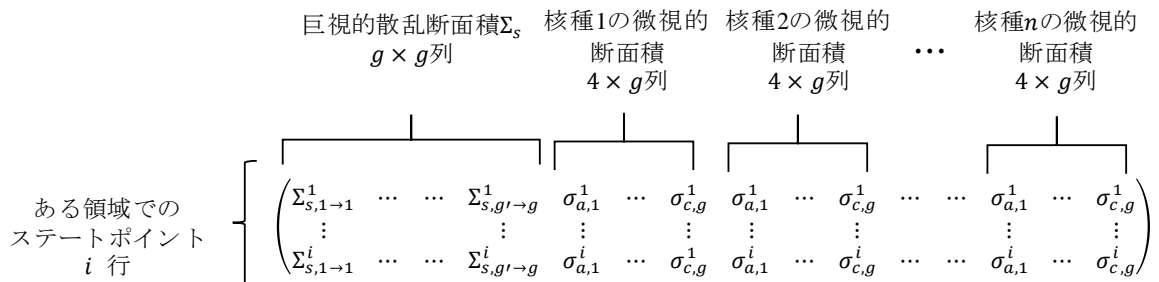


Figure 3-10 ある領域での断面積行列の並び

Figure 3-10 の断面積行列を、同じ核種数である別の領域の断面積行列と結合することで、Figure 3-11 に示される同物質領域全体での断面積行列を作成できる。

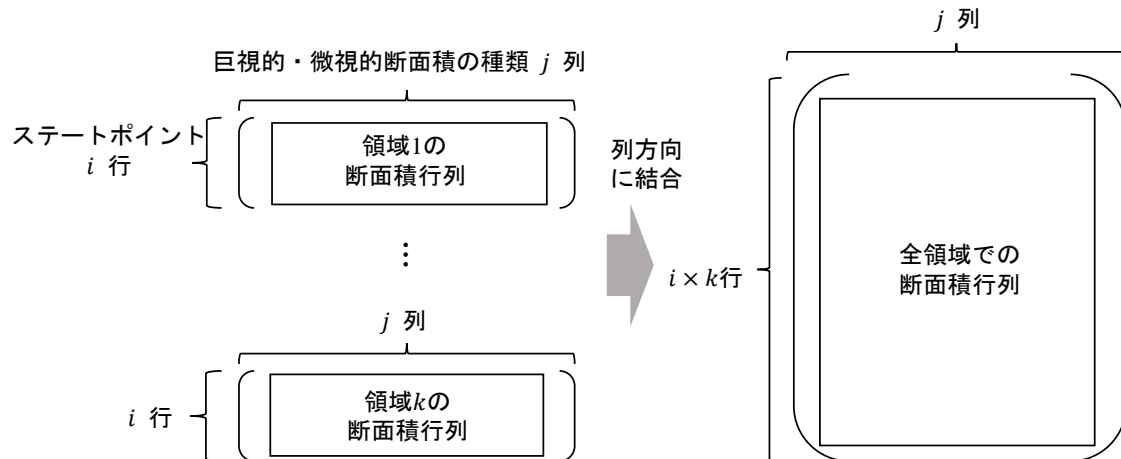


Figure 3-11 同物質領域全体での断面積行列

Figure 3-11 では、領域中に存在する核種が異なる領域、すなわち物質の異なる領域の断面積行列を結合することはできない。例えば、燃料領域では 200~300 核種が考慮されているが、減速材領域では基本的に ^2H 、 ^{10}B 、 ^{11}B 、 ^{16}O といった核種しか考慮されていないことから、断面積行列の列数が異なるため結合できない。したがって、燃焼計算内で考慮される核種数が同じ物質領域毎に、断面積行列を分けて作成する必要がある。本研究では、最も核種数が多い領域である燃料ペレット領域のみに注目し、断面積行列を作成する。なお、例えば UO_2 燃料ペレットと MOX 燃料ペレットが体系内に混在する場合、燃焼時に考慮する核種数が同じであるため、同じ断面積行列内に各断面積を並べることができる。一方で、 Gd 入り燃料ペレットでは、燃焼時に考慮される核種数は UO_2 及び MOX 燃料ペレットよりも多いため、同じ断面積行列内に各断面積を直接並べることができない。そのため、各燃料ペレットの断面積を同じ断面積行列に並べる場合、 Gd 入り燃料ペレットにのみ存在する核種に対しては UO_2 及び MOX 燃料ペレットにおいて断面積を 0 (または代表値) として扱う、といった処理を行う必要がある。

3.5.2 巨視的断面積の再構成

次元削減後の断面積データを用いて中性子輸送計算を行うには、特異値及び特異ベクトルの掛け合わせによる断面積行列の再構成だけでなく、再構成微視的断面積を用いて巨視的断面積を生成する必要がある。反応 x に対する g 群巨視的断面積 $\Sigma_{x,g}$ は式(3.11)で計算される。

$$\Sigma_{x,g} = \sum_{i=1}^n N_i \sigma_{x,g,i} \quad (3.11)$$

ここで、

n : 核種数

$\sigma_{x,g,i}$: 核種 i の g 群微視的断面積

N_i : 核種*i*の原子数密度

である。

また、MOCによる中性子輸送計算に必要な*g*群巨視的全断面積 $\Sigma_{t,g}$ は、巨視的吸収断面積 $\Sigma_{a,g}$ と巨視的散乱断面積 $\Sigma_{s,g' \rightarrow g}$ の総和として計算される。

$$\Sigma_{t,g} = \Sigma_{a,g} + \sum_{g'} \Sigma_{s,g' \rightarrow g} \quad (3.12)$$

以上の手順で再構成された巨視的断面積を GENESIS の入力として用いることで、非均質単一集合体計算を実施する。

3.5.3 再構成断面積を用いた集合体計算

3.5.3.1 計算条件

計算体系は、Figure 3-12 の PWR17×17UO₂ 燃料集合体の非均質体系(1/8 対称)である。このとき、UO₂ 燃料セルは Figure 3-13 に示される 6 領域に分割されている。ここで、燃料領域及び減速材領域はそれぞれ赤色破線の 2 領域に分割されている。この理由は、燃料領域については、ペレット内側と外周付近で中性子スペクトルが異なるため実効断面積が異なるためである。減速材領域は、MOC における計算時の安定性を図るため、このような分割がなされている。Figure 3-13 の非均質幾何形状の範囲を Table 3-1 に示す。

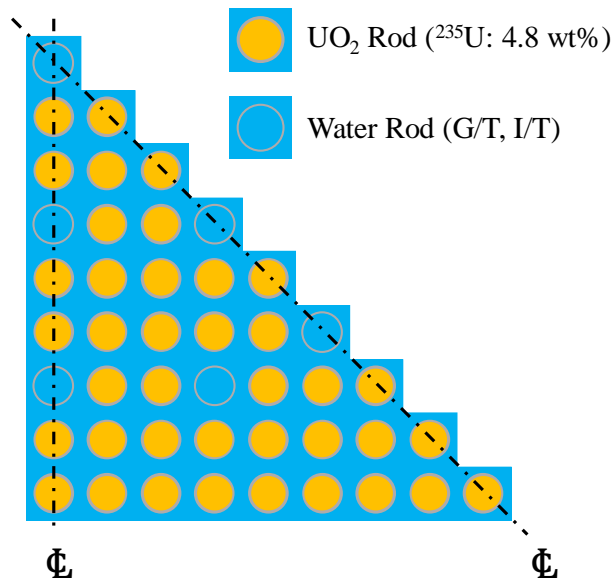


Figure 3-12 PWR17×17UO₂ 燃料集合体体系(1/8 対称)

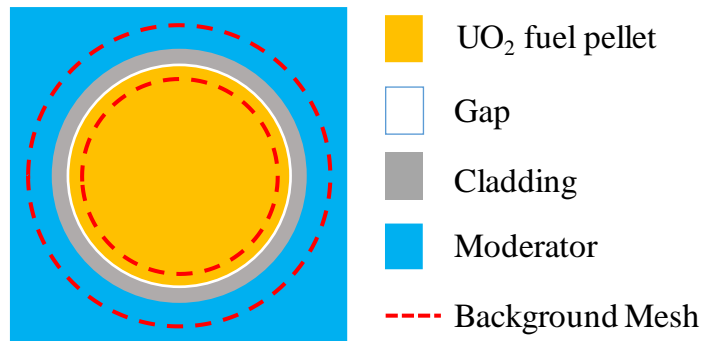


Figure 3-13 非均質燃料セルの領域図

Table 3-9 燃料セル幾何形状(セルピッチ: 1.26 cm)

物質領域	半径 [cm]
燃料ペレット(内側)	0.3663
燃料ペレット(外側)	0.3663 ~ 0.4095
ギャップ	0.4095 ~ 0.4180
被覆管	0.4180 ~ 0.4750
減速材(内側)	0.4750 ~ 0.5647
減速材(外側)	0.5647 ~ 境界

この体系に対して、格子計算コード AEGIS を用いた一般的なケースマトリックスに対する燃焼計算及びブランチ計算を含んだ非均質単一集合体計算を実行し、物質領域単位での16群巨視的断面積及び各核種の微視的断面積を計算した。このときの群構造は Table 3-7 と同様である。また、ケースマトリックスは 3.5.3 節の Table 3-1~Table 3-6 のうち、燃焼度 0 GWd/t の条件 (No. 1, 71, 84, 97, 110, 123, 136, 149, 162, 175, 188, 201) を除外したものを用いている。これは、燃焼度 0 GWd/t の燃料集合体では、核分裂生成物が存在していないため、燃焼が始まった体系と核種数が一致しないためである。また、本検討における体系内幾何形状を統一するため、Table 3-6 の制御棒挿入条件 (No. 201~213) も除外している。また、エネルギー群構造に関しては Table 3-7 とほぼ同様であるが、1群の上限値のみ 10 MeV から 19.6 MeV へと変更している。

AEGIS による非均質単一集合体計算によって得られた巨視的・微視的断面積を用いて作成した断面積行列を Figure 3-14 に示す。Figure 3-14 の行列に対して次元削減を適用し、データの圧縮を行った。

$$\begin{aligned}
 & (\text{巨視的断面積: } 16\text{群} \times 16\text{群}) \\
 & + (\text{微視的断面積: } 4\text{種類} \times 16\text{群} \times 221\text{核種}) \\
 & = 14400\text{列}
 \end{aligned}$$

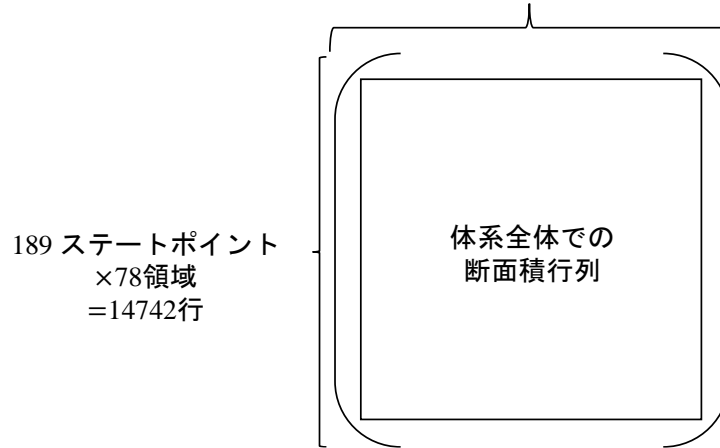


Figure 3-14 非均質集合体計算によって得られた巨視的・微視的断面積行列

3.5.3.2 計算結果

Figure 3-14 の断面積行列に対して特異値分解を適用することで得られた 14400 個の特異値を Figure 3-15 に示す。

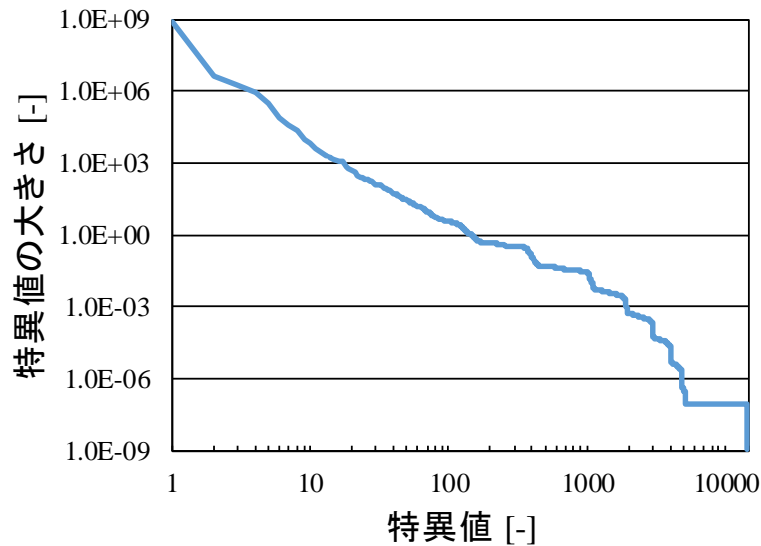


Figure 3-15 非均質集合体計算によって得られた巨視的・微視的断面積行列の特異値

Figure 3-15 において、最大の特異値のオーダーは 10^8 である。断面積行列内で最も大きい微視的断面積のオーダーは 10^6 [barn] (^{135}Xe の熱群での吸収及び捕獲断面積) であるため、最大の特異値と断面積の値で 100 倍程度の差が生じている。

Figure 3-6 のセル均質の巨視的断面積行列の場合と比べると、Figure 3-15 の特異値の数や

オーダーは大きく異なる。一方で、グラフ左端での特異値の傾き（特異値間の変化量）が比較的大きいため、Figure 3-15 も Figure 3-6 と同様に少数の特異値及び特異ベクトルで元の断面積行列の情報を再現できると考えられる。

この特異値の数を低ランク近似によって削減し、データの圧縮を行った。その後、再構成断面積を用いてステートポイント毎に GENSIS を用いた単一集合体計算を行い、実効増倍率及び領域毎の中性子束を計算した。ここで、GENESIS の入力条件は Table 3-8 と同様である。

この 189 ステートポイントでの単一集合体計算を、特異値の数を変化させたそれぞれのケースで行い、得られた実効増倍率及び中性子束分布を、次元削減前の元の巨視的断面積を用いた場合の実効増倍率及び中性子束分布と比較した。

3.4.2節の検討と同様、 i 番目のステートポイントでの実効増倍率の相対誤差 $\Delta k_{eff,i}$ [%]を式(3.3)で計算し、189 ステートポイントでの最大誤差及び平均二乗誤差をそれぞれ式(3.13)、(3.14)で計算した。

$$\Delta k_{eff,max} = \max_{i \leq 189} \Delta k_{eff,i} \quad (3.13)$$

$$\Delta k_{eff,RMS} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{213} \left(\frac{k_{eff,i,reconstructed} - k_{eff,i,original}}{k_{eff,i,original}} \right)^2}{189}} \quad (3.14)$$

14400 個の特異値のうち、再構成に用いる特異値数を 10 個おきに变化させた (150 個以下) ケースそれぞれの再構成断面積を用いた場合の $\Delta k_{eff,max}$ 及び $\Delta k_{eff,RMS}$ を Figure 3-7 に示す。

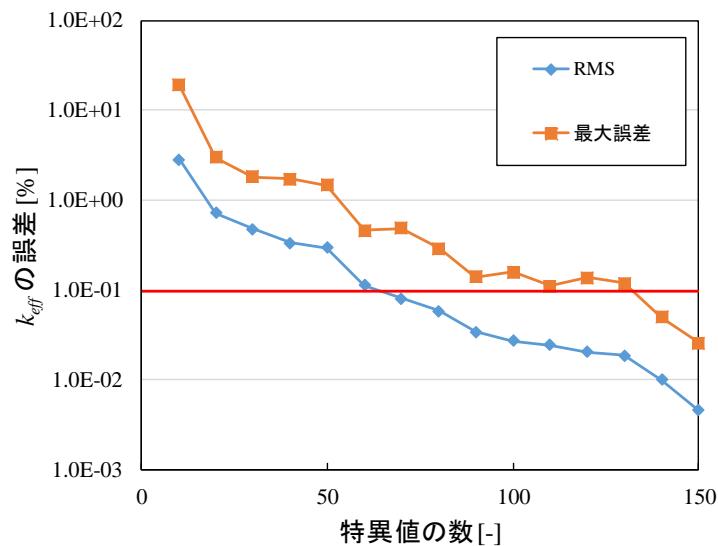


Figure 3-16 再構成巨視的・微視的断面積に用いた特異値数に対する k_{eff} の誤差[%]

また、中性子束は、3.4.2 節での核分裂反応率の評価同様、体系全体での中性子束の RMS

を計算する。次元削減後の再構成断面積を用いた場合の*i*番目のステートポイントでの中性子束の RMS を式(3.6)に示す。

$$\Delta\phi_{RMS,i} = \sqrt{\frac{\sum_{g=1}^{16} \sum_{j=1}^{n_{region}} \left(\frac{\phi_{g,i,j,reconstructed} - \phi_{g,i,j,original}}{\phi_{g,i,j,original}} \right)^2}{16 \times n_{region}}} \quad (3.15)$$

ここで、

$\phi_{i,j,original}$: 次元削減前の元の断面積を用いた場合の*i*番目のステートポイントでの*j*番目の領域の核分裂反応率

$\phi_{i,j,reconstructed}$: 次元削減後の再構成断面積を用いた場合の*i*番目のステートポイントの*j*番目の領域の核分裂反応率

である。また、 n_{region} は、17×17 燃料集合体 1/8 体系内の全領域数を表しており、Figure 3-12 の体系では 252 領域(= 燃料セル 6 領域 × 39 本 + ウォーターロードセル 3 領域 × 6 本)が存在している。

189 ステートポイント毎の $\Delta\phi_{RMS,i}$ のうち、最大値 $\Delta\phi_{RMS,max}$ 及び平均値 $\Delta\phi_{RMS,average}$ はそれぞれ式(3.16), (3.17)で計算される。

$$\Delta\phi_{RMS,max} = \max_{i \leq 189} \Delta\phi_{RMS,i} \quad (3.16)$$

$$\Delta\phi_{RMS,average} = \frac{\sum_i^{189} \Delta\phi_{RMS,i}}{189} \quad (3.17)$$

実効増倍率と同様、14400 個の特異値のうち、150 個以下の特異値数での再構成断面積を用いた場合の $\Delta\phi_{RMS,max}$ 及び $\Delta\phi_{RMS,average}$ を Figure 3-17 に示す。

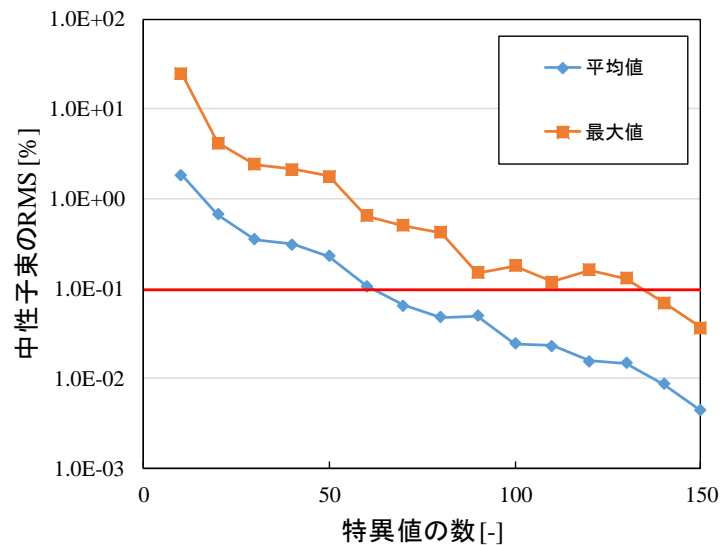


Figure 3-17 再構成巨視的・微視的断面積に用いた特異値数に対する中性子束の RMS[%]

Figure 3-16 での実効増倍率の誤差と Figure 3-17 の中性子束の誤差を比較すると、特異値の数に対する誤差の大きさは概ね一致しており、また、どちらの結果でも最大誤差は平均誤差の 10 倍程度大きい。

Figure 3-16、Figure 3-17 より、巨視的断面積、微視的断面積両方を含む断面積行列であった場合、14400 個の特異値のうち 140 個程度を用いることで、実効増倍率、中性子束ともに精度目標 0.1%を達成できる。このときの次元削減による圧縮率は式(3.9)で表される。

$$1 - \frac{14742 \times 140 + 140 + 140 \times 14400}{14742 \times 14400} = 98.08\% \quad (3.18)$$

これは、3.5.3 節での 9585×304 巨視的断面積行列の圧縮率 77.94%よりも大きな圧縮率である。この理由として、微視的断面積のほうが巨視的断面積に比べてステートポイント変化に対する変化幅が少ないため、各行ベクトルの類似性が高いことが考えられる。したがって、この 140 個の特異値及び特異ベクトルだけで行列内の殆どの断面積を再現できており、今回のケースマトリックスをより詳細なステートポイントに分割した場合においても、140 個の基底で概ね再現できると予想される。この場合、ステートポイントの分割数を増やすほど、データの圧縮率は増加する。したがって、非均質集合体体系においても本手法を用いることで大幅なデータ圧縮が見込まれる。

また、Figure 3-7 のセル均質の再構成巨視的断面積での実効増倍率の誤差との比較を Figure 3-18 に示す。

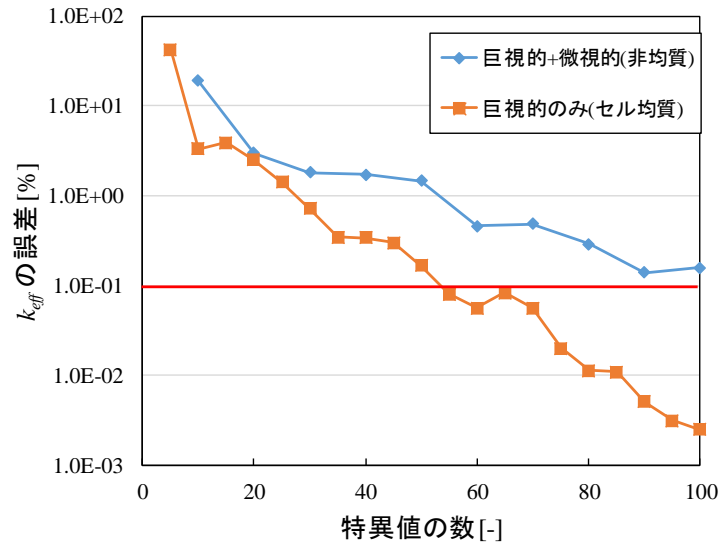


Figure 3-18 非均質再構成巨視的・微視的断面積またはセル均質巨視的断面積を用いた実効増倍率の誤差の比較[%]

Figure 3-18 では、特異値 20 個の場合で非均質再構成巨視的・微視的断面積とセル均質再構成巨視的断面積の誤差は一致している。一方で、それよりも多い特異値数に対してはセル均質巨視的断面積のほうが特異値数に対する精度が良く、同一の精度を保つためには非均質断面積はセル均質巨視的断面積の 2 倍程度の特異値を必要としている。

また、特異値の欠損率と、実効増倍率及び中性子束の最大誤差の比較を Figure 3-19 に示す。

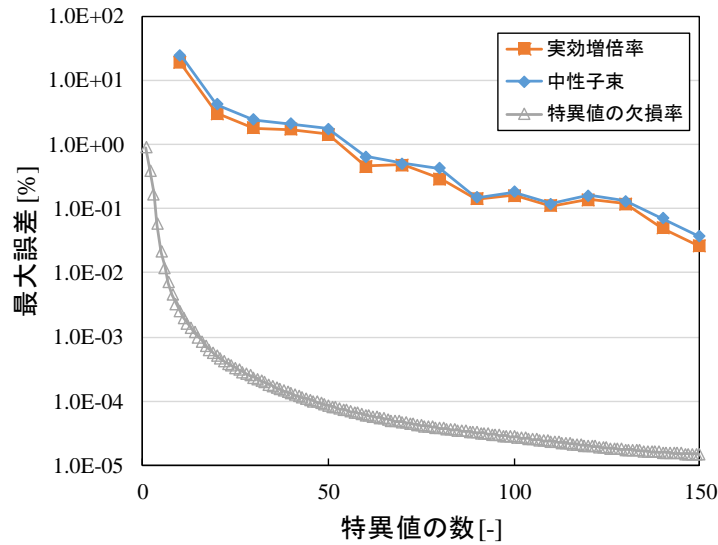


Figure 3-19 次元削減後の再構成非均質巨視的・微視的断面積を用いた実効増倍率及び核分裂反応率の最大誤差と特異値の欠損率の比較

Figure 3-19 では、実効増倍率及び中性子束の誤差と欠損率のオーダーは $10^3 \sim 10^4$ 倍異なっている。先に述べた通り、最大特異値に対応する断面積は ^{135}Xe の熱群での微視的吸収断面積及び微視的捕獲断面積 (10^6 [barn]) であり、これは ^{235}U の熱群微視的核分裂断面積の 10^3 [barn] よりも大きい。一方で、例えば集合体燃焼度 1 GWd/t での原子数密度で考えると ^{235}U の原子数密度は 10^{21} [$1/\text{cm}^3$] であるのに対し、 ^{135}Xe の原子数密度は 10^{16} [$1/\text{cm}^3$] である。そのため、巨視的断面積を生成するときの影響は ^{235}U の核分裂断面積のほうが大きい。したがって、低ランク近似後に優先的に精度が保たれる断面積と、輸送計算への影響が大きい断面積が異なっていることがわかる。

3.6 微視的断面積に対する次元削減手法の適用

3.5 節において、巨視的断面積と微視的断面積両方を含む断面積行列に対して次元削減を検討したが、本節では別の検討として、微視的断面積のみから作成された断面積行列に対して次元削減を行う。微視的断面積が主に中性子スペクトルに依存するのに対し、巨視的断面積は核種毎の微視的断面積と原子数密度の積の総和であるため、一般に微視的断面積よりも巨視的断面積のほうが燃焼度やブランチ変化に対する値の変化は大きい。そのため、巨視的断面積と微視的断面積を同じ行列内に並べることで、どちらかの精度の悪化などが生じている可能性がある。その影響を検証するため、本節では微視的断面積に対してのみ次元削減を適用することで、圧縮率がどのように変化するか確認する。

3.6.1 微視的断面積を用いた行列の作成手順

微視的断面積行列は、Figure 3-14 の巨視的・微視的断面積行列から巨視的散乱断面積を除外することで作成する。ある領域での微視的断面積行列の並びを Figure 3-20 に示す。

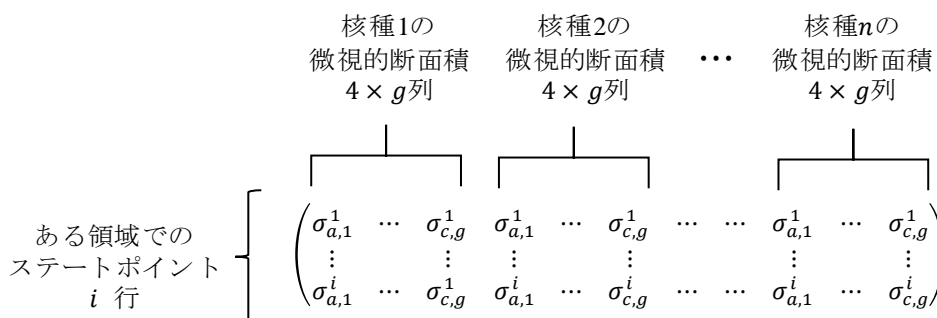


Figure 3-20 ある領域での非均質微視的断面積行列の並び

この微視的断面積行列を領域毎に作成し、Figure 3-15 同様、列方向に結合することで領域全体での断面積行列を作成した。

なお、本検討では除外した非均質巨視的断面積を用いた行列は作成せず、微視的断面積行列のみへの次元削減の適用を検討した。

3.6.2 再構成断面積を用いた集合体計算

3.6.2.1 計算条件

計算条件は、3.5.3.1 節で示された条件と同様である。作成した微視的断面積行列を Figure 3-21 に示す。

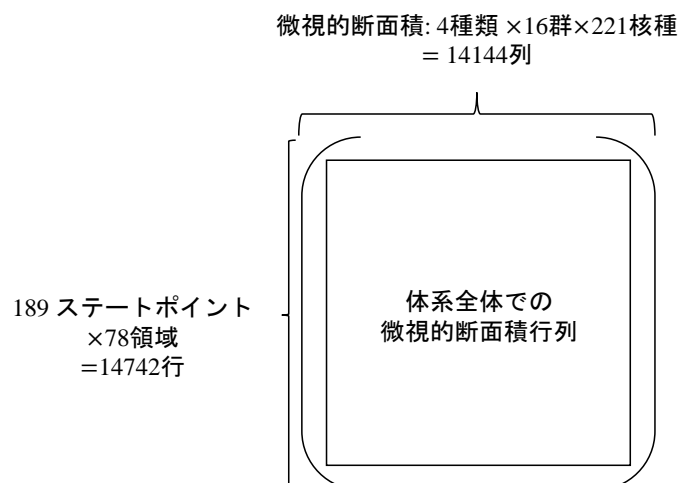


Figure 3-21 作成した非均質微視的断面積行列

Figure 3-21 に対して次元削減を適用し、3.5 節同様、再構成断面積を用いた非均質単一集合体計算での実効増倍率及び中性子束の誤差を計算した。

3.6.2.2 計算結果

Figure 3-21 に特異値分解を適用することで得られた 14144 個の特異値を Figure 3-22 に示す。比較のため、巨視的断面積及び微視的断面積を含んだ断面積行列の 14400 個の特異値 (Figure 3-15) も示している。

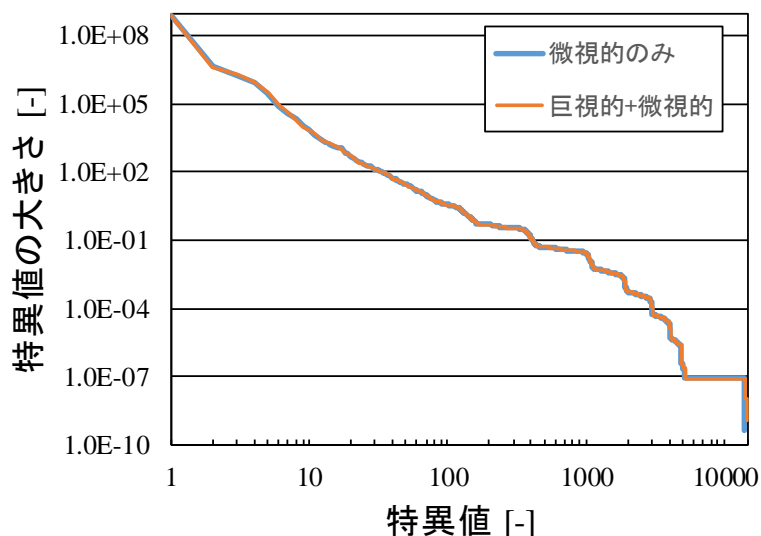


Figure 3-22 微視的断面積行列の特異値

Figure 3-22 では、巨視的断面積の有無で特異値の個数は 256 個異なっているが、各特異値の大きさの分布は殆ど変わっていない。

この特異値の数を変化させて微視的断面積を再構成し、再構成微視的断面積を用いた非均質単一集合体計算を行った。このとき、巨視的散乱断面積に対しては次元削減を適用せず、AEGIS で計算された元の巨視的散乱断面積を用いた。再構成に用いた特異値の数に対する実効増倍率及び中性子束の誤差をそれぞれ Figure 3-23、Figure 3-24 に示す (比較のため、巨視的・微視的断面積行列の結果も示している)。

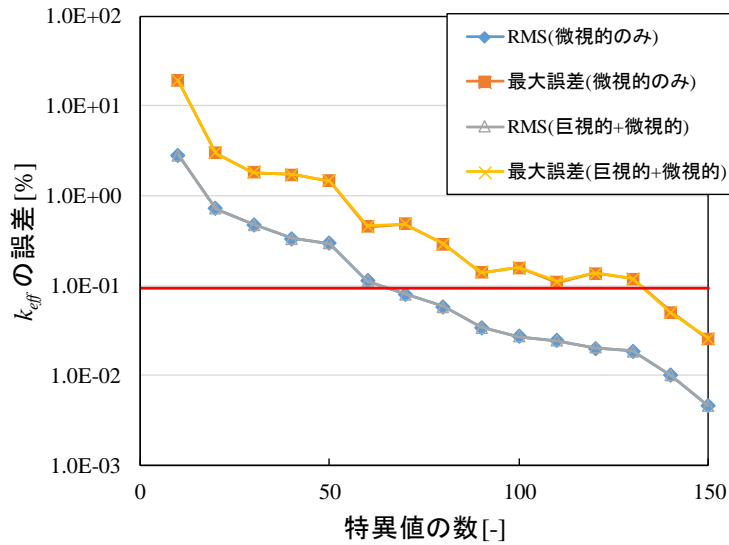


Figure 3-23 再構成断面積を用いた実効増倍率の誤差[%]
(微視的断面積行列及び巨視的・微視的断面積行列)

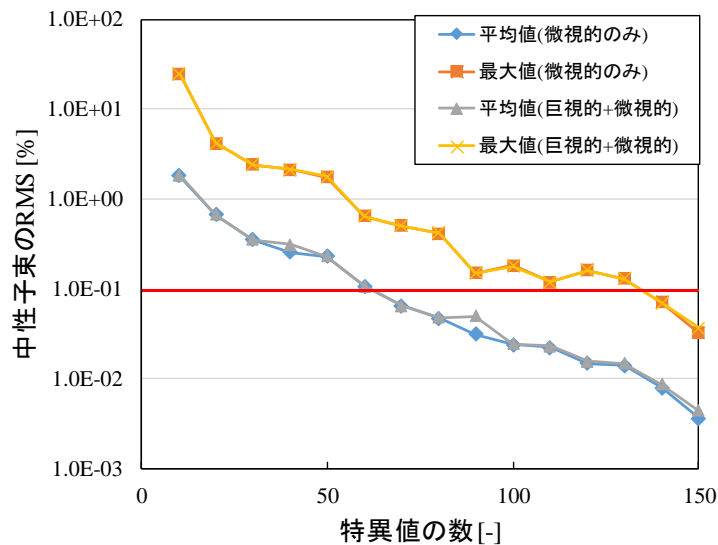


Figure 3-24 再構成断面積を用いた中性子束のRMS[%]
(微視的断面積行列及び巨視的・微視的断面積行列)

Figure 3-23、Figure 3-24 より、行列内の巨視的散乱断面積の有無によって誤差は殆ど変わっていない。このとき、実効増倍率及び中性子束の目標誤差 0.1%に対する特異値数は、巨視的・微視的断面積行列と同様に 140 個であるため、データの圧縮率は式(3.19)で表される。

$$1 - \frac{14742 \times 140 + 140 + 140 \times 14144}{14742 \times 14144} = 98.06\% \quad (3.19)$$

したがって列数が減った分、圧縮率はわずかに低減しており、巨視的断面積の有無による大きな圧縮率変化は生じないことがわかった。

3.7 重みづけを用いた次元削減手法の検討

3.5 節及び 3.6 節では、断面積行列に対して直接的に次元削減を適用した場合のデータの圧縮性を検討した。一方で、これまでの次元削減では、各群あるいは各核種での断面積の重要度は考慮されていない。例えば、炉心解析において重要な核種は核分裂反応を起こす核分裂性核種であり、その中でも核分裂断面積かつ原子数密度が大きい ^{235}U は特に重要な核種であるといえる。しかし、これまで行った次元削減では核種の重要性は考慮せず、微視的断面積を数値の羅列として見た時の特異ベクトル（正規直交基底）を、特異値の大きい順から使用している。この方法だと、 ^{235}U を再現するための基底は、行列全体を再現するために必要な基底としては重要度がそれほど高くはない可能性があり、その場合 ^{235}U が低ランク近似によって精度が悪化しやすいことになる。逆に、少ない基底で微視的断面積が非常に精度良く再現されている核種があったとしても、その核種の原子数密度が非常に少なければ原子炉内での反応に殆ど影響を与えない。

また、エネルギー群についても、例えば軽水炉体系では減速材によって減速された熱群中性子に対する断面積の精度が求められるのに対し、高速炉体系では高速群での断面積の精度が求められる。以上を踏まえると、計算体系において重要度の高い核種及びエネルギー群での断面積の精度を優先的に保ち、なおかつ最低限の基底で行列全体の断面積も再構成できるような改良が求められる。そのための改良として、本節では原子数密度、中性子束を用いた断面積行列の重みづけを検討する。

3.7.1 断面積への重みづけの適用

3.7.1.1 原子数密度を用いた重みづけ

原子数密度を用いた重みづけは、核種毎の微視的断面積の重要度を考慮するための重みづけである。原子数密度は核種毎のオーダーの差が大きい。例えば、燃焼度 35 GWd/t の燃焼計算条件を入力として AEGIS で計算された 221 核種の原子数密度では、 ^{235}U や ^{238}U が $10^{20}\sim 10^{22}$ [$1/\text{cm}^3$] のオーダーであるのに対し、多くの核分裂生成物のオーダーは $10^8\sim 10^{20}$ [$1/\text{cm}^3$] である。したがって、重みの大きさは核種によって大きく異なる。

また、原子数密度を重みとして用いる上で、本検討では全ステートポイントに対して平均化を行っている。これは、燃焼に関わらず重みを一定値とするためである。例えば、 ^{235}U や ^{238}U は燃焼とともに原子数密度が減少していくが、それに伴って核分裂生成物の原子数密度は増加する。また、原子数密度の増減の傾向は核種毎に異なる。したがって、各ステートポイントでの原子数密度を重みとして用いる場合、重みづけ後の断面積行列において行ベクトルの変化が複雑になる。その変化を再構成するためにより多くの特異値及び特異ベク

トルが必要になるため、結果として圧縮時のデータ量が増加する。以上のことから、重みは状態ポイントを通じて変動しない値であることが望ましい。

i 番目の領域内のある核種 n に対する平均原子数密度 $\bar{N}_{n,i}$ は、式(3.20)で表される。

$$\bar{N}_{n,i} = \frac{\sum_j^{m_{state}} N_{n,i,j}}{m_{state}} \quad (3.20)$$

ここで、

$N_{n,i,j}$: j 番目の状態ポイントにおける領域 i 内の核種 n の原子数密度

m_{state} : 状態ポイントの数

である。

反応 x に対する重みづけ後の g 群微視的断面積 $\sigma'_{x,g,n,i}$ は、重みづけ前の g 群微視的断面積 $\sigma_{x,g,n,i}$ と $\bar{N}_{n,i}$ の積で表される。

$$\sigma'_{x,g,n,i} = \bar{N}_{n,i} \sigma_{x,g,n,i} \quad (3.21)$$

式(3.21)の重みづけ後の断面積は巨視的断面積と同じ形を取っているため、単位も $1/\text{cm}$ となる。この重みづけを、断面積行列内の各微視的断面積に対して行う。

また、再構成時には重みを除外するため、重みづけされた再構成断面積に対して式(3.22)の処理を行う。

$$\sigma_{x,g,n,i} = \frac{\sigma'_{x,g,n,i}}{\bar{N}_{n,i}} \quad (3.22)$$

3.7.1.2 中性子束を用いた重みづけ

中性子束による重みづけは、エネルギー群毎の巨視的・微視的断面積の重要度を考慮するために行う。中性子束に関しても、原子数密度同様、状態ポイントに対して依存しないよう平均化を行う。

i 番目の領域内の g 群平均中性子束 $\bar{\phi}_{g,i}$ は、式(3.23)で表される。

$$\bar{\phi}_{g,i} = \frac{\sum_j^{m_{state}} \phi_{g,i,j}}{m_{state}} \quad (3.23)$$

ここで、

$\phi_{g,i,j}$: j 番目の状態ポイントにおける領域 i 内の g 群中性子束

である。

反応 x に対する重みづけ後の g 群微視的断面積 $\sigma'_{x,g,n,i}$ (または巨視的断面積 $\Sigma'_{x,g,n,i}$) は、重みづけ前の g 群微視的断面積 $\sigma_{x,g,n,i}$ と $\bar{\phi}_{g,i}$ の積で表される。

$$\sigma'_{x,g,n,i} = \sigma_{x,g,n,i} \bar{\phi}_{g,i} \quad (3.24)$$

この重みづけを、断面積行列内の各微視的断面積に対して行う。

原子数密度同様、再構成時に重みを除外するため、式(3.25)の処理を行う。

$$\sigma_{x,g,n,i} = \frac{\sigma'_{x,g,n,i}}{\bar{\phi}_{g,i}} \quad (3.25)$$

3.7.1.3 原子数密度及び中性子束を用いた重みづけ

核種とエネルギー群を同時に考慮する場合、式(3.21), (3.24)を組み合わせた重みづけを行う。

$$\sigma'_{x,g,n,i} = \bar{N}_{n,i} \sigma_{x,g,n,i} \bar{\phi}_{g,i} \quad (3.26)$$

式(3.26)の重みづけされた断面積の単位は核反応率の単位と等しいため、平均化された原子数密度と中性子束を与えることで核反応率としての観点からデータの重要性を判断し、次元削減を行っているとならせる。

再構成時に重みを除外するため、式(3.25)の処理を行う。

$$\sigma_{x,g,n,i} = \frac{\sigma'_{x,g,n,i}}{\bar{N}_{n,i} \bar{\phi}_{g,i}} \quad (3.27)$$

3.7.2 重みづけを用いた再構成断面積の集合体計算の比較

3.7.2.1 計算条件

重みづけは3.5節の巨視的・微視的断面積行列及び3.6節の微視的断面積行列に対して適用し、①平均原子数密度のみ、②平均中性子束のみ、③平均原子数密度と平均中性子束、の3種類の重みづけが行われたそれぞれの行列に対して次元削減を適用した。再構成断面積を用いて、3.5.3、3.6.2節と同様、非均質単一集合体計算での誤差を計算した。

このとき、巨視的・微視的断面積行列内の巨視的断面積に対しては、②の重みづけのみを適用している。

3.7.2.2 計算結果

最初に、3.5節の巨視的・微視的断面積行列に対して重みづけを用いた次元削減を適用した結果を述べる。重みづけ毎の巨視的・微視的断面積行列に対して特異値分解を適用することで得られた特異値を Figure 3-25 に示す。

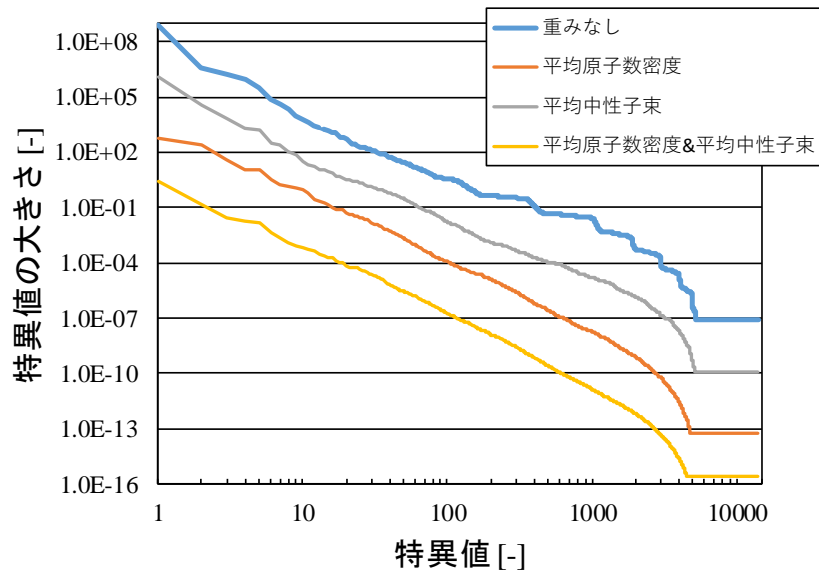


Figure 3-25 重みづけ毎の巨視的・微視的断面積行列の特異値(14400 個)

Figure 3-25 では、特異値の分布は各重みづけで概ね一致しているが、大きさは重みによってオーダーが異なっている。これは、平均中性子束及び平均原子数密度による重みづけによって行列内の各要素（各断面積）のオーダーが変化しているため、それに合わせて特異値のオーダーも変化している。なお、平均原子数密度を重みとする場合、微視的断面積の単位を barn から cm^2 へと変換している。

Figure 3-25 の特異値の数を変化させて微視的断面積及び巨視的断面積を再構成し、非均質単一集合体計算を行った。再構成に用いた特異値の数に対する実効増倍率及び中性子束の誤差をそれぞれ Figure 3-26、Figure 3-27 に示す。

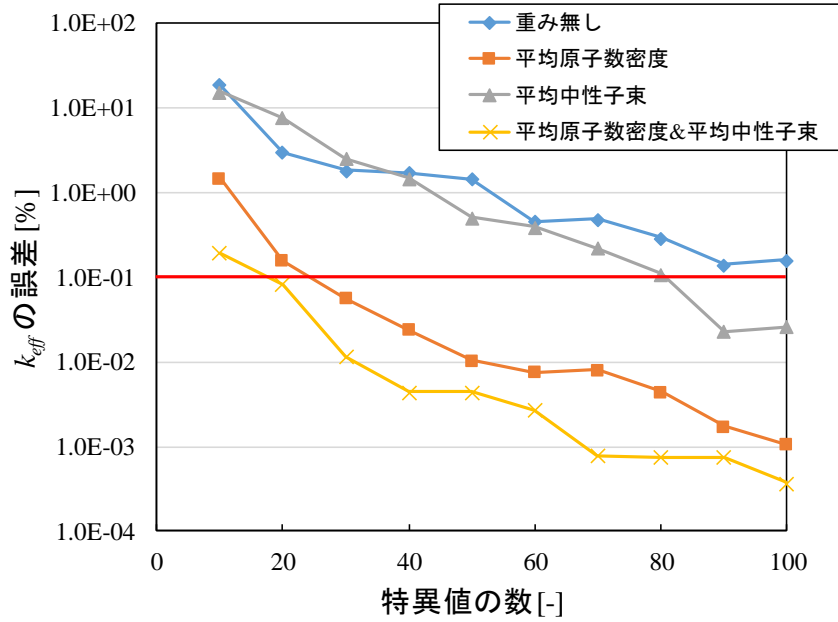


Figure 3-26 重みづけ毎の再構成巨視的・微視的断面積を用いた k_{eff} の最大誤差[%]

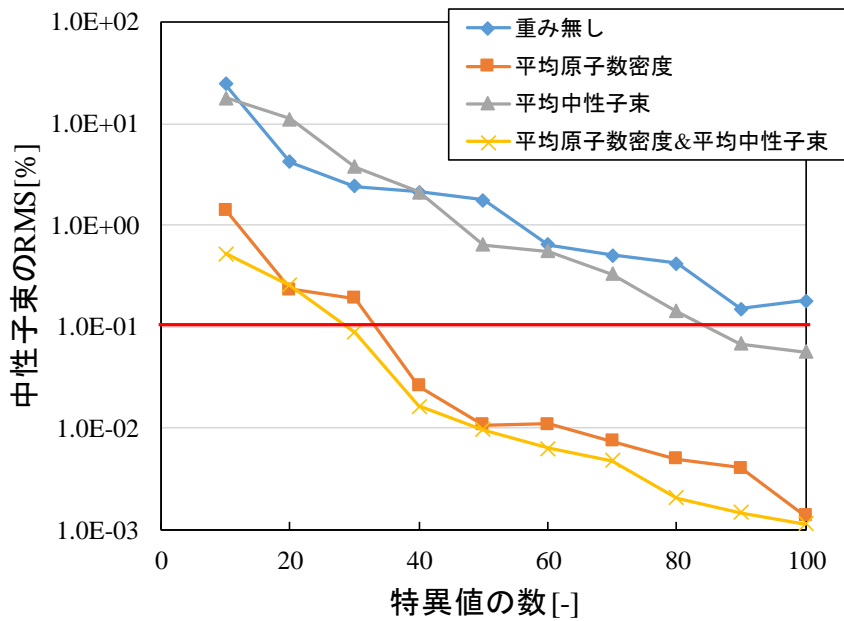


Figure 3-27 重みづけ毎の再構成巨視的・微視的断面積を用いた中性子束の最大誤差[%]

Figure 3-26、Figure 3-27 において、最も誤差が低減した重みづけは平均原子数密度と平均中性子束を同時に用いた場合であり、30 個の特異値で実効増倍率及び中性子束の誤差は 0.1%以下となる。

平均原子数密度のみの重みづけに関しても、40 個程度の特異値で実効増倍率、中性子束の誤差はともに 0.1%以下となる。一方で、平均中性子束のみの重みづけは、特異値数 20～30 個では重み無しの場合よりも誤差が大きく、特異値の数を増やすにつれて重み無しの場合よりも誤差が小さくなる。したがって、重みとしては平均中性子束に比べて平均原子数密度のほうが単一集合体計算に与える影響は大きいものの、両方を組み合わせることで実効増倍率、中性子束計算の精度を保ちつつデータを削減することができる。

次に、3.6 節の微視的断面積行列に対して重みづけを用いた次元削減を適用した結果を述べる。重みづけ毎の微視的断面積行列に対して特異値分解を適用することで得られた特異値を Figure 3-28 に示す。

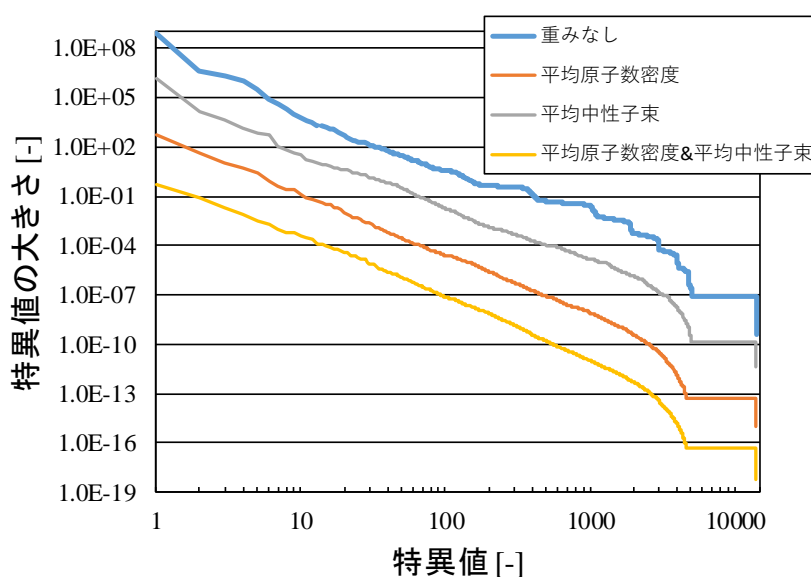


Figure 3-28 重みづけ毎の微視的断面積行列の特異値(14144 個)

Figure 3-28 の各重みづけでの 14144 個の特異値は Figure 3-25 の 14400 個の特異値とほぼ同じ傾向を示していることがわかる。

Figure 3-28 の特異値の数を変化させて微視的断面積を再構成し、非均質単一集合体計算を行った。再構成に用いた特異値の数に対する実効増倍率及び中性子束の最大誤差をそれぞれ Figure 3-29、Figure 3-30 に示す。

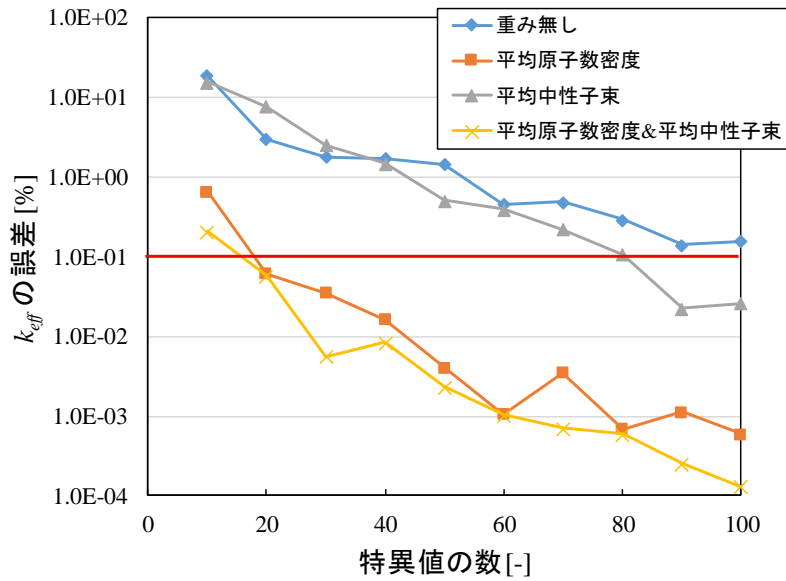


Figure 3-29 重みづけ毎の再構成微視的断面積を用いた k_{eff} の最大誤差[%]

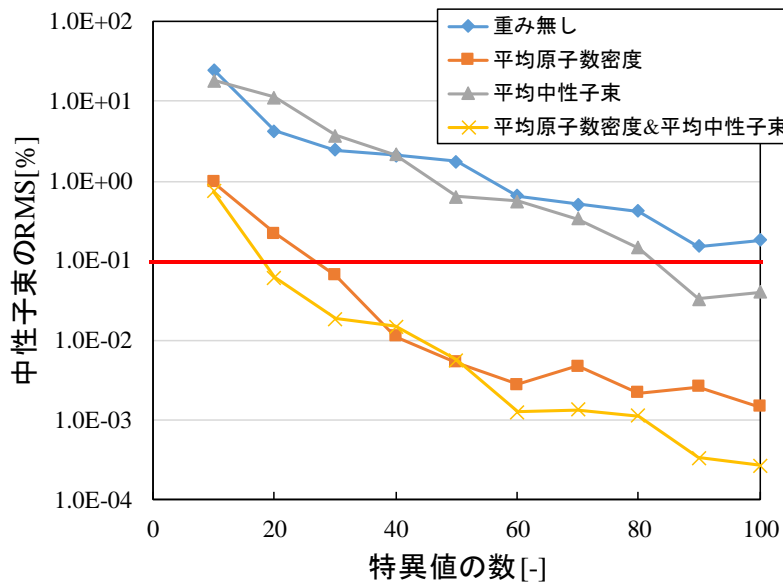


Figure 3-30 重みづけ毎の再構成微視的断面積を用いた中性子束の最大誤差[%]

Figure 3-29、Figure 3-30 では、平均原子数密度と平均中性子束を同時に用いた重みづけでの誤差が最も小さいため、巨視的・微視的断面積行列の場合と同様に重みとして最も有効である。そこで、平均原子数密度と平均中性子束を同時に用いた重みづけのみに注目し、巨視的・微視的断面積行列と微視的断面積行列での実効増倍率の最大誤差 (Figure 3-26 及び Figure

3-29) を比較した結果を Figure 3-31 に、中性子束の最大誤差 (Figure 3-27 及び Figure 3-30) を比較した結果を Figure 3-32 に示す。

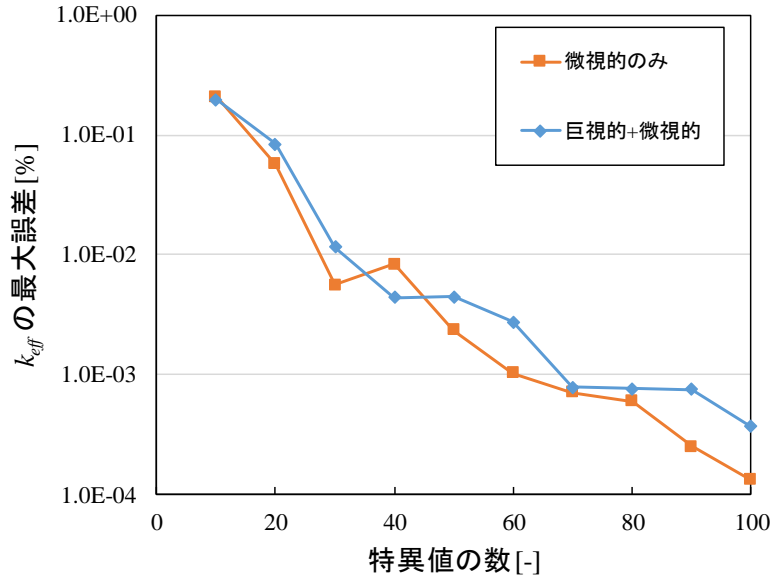


Figure 3-31 微視的断面積行列及び巨視的断面積行列への次元削減による実効増倍率の最大誤差[%] (平均原子数密度&平均中性子束重みづけ)

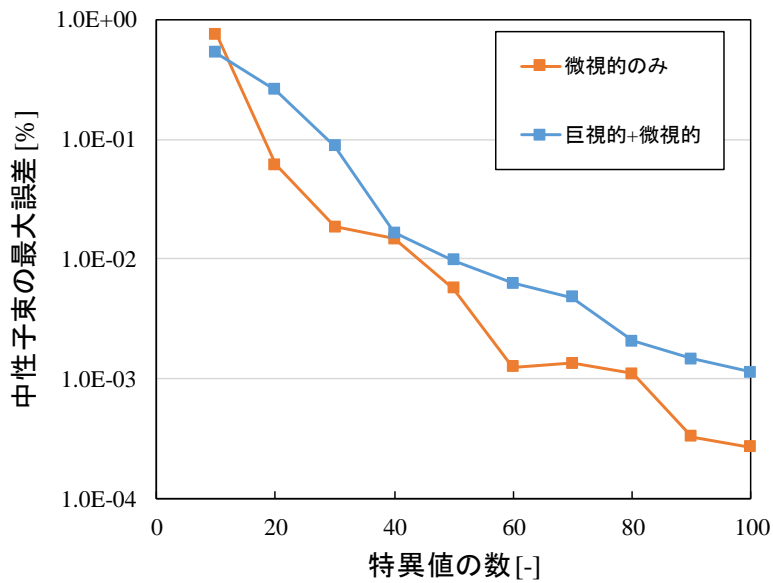


Figure 3-32 微視的断面積行列及び巨視的断面積行列への次元削減による中性子束の RMS の最大値[%] (平均原子数密度&平均中性子束重みづけ)

Figure 3-31、Figure 3-32 において、平均原子数密度と平均中性子束を同時に用いた重みづけを行った場合の実効増倍率及び中性子束の誤差は、微視的断面積行列のほうが巨視的・微視的断面積行列よりも小さい。これは、微視的断面積に比べて変化の大きい巨視的散乱断面積が行列内から除外され、なおかつ平均原子数密度による重みづけを適用したことで、反応率への影響が大きい核種の微視的断面積が少数の基底でも優先的に再構成されるようになったためだと考えられる。Figure 3-31、Figure 3-32 の結果から、20 個の特異値を用いることで実効増倍率及び中性子束の誤差は 0.1%以下となるため、データの圧縮率は式(3.28)で示される。

$$1 - \frac{14742 \times 20 + 20 + 20 \times 14144}{14742 \times 14144} = 99.72\% \quad (3.28)$$

このことから、平均原子数密度と平均中性子束を用いて微視的断面積行列を重みづけすることで、大幅なデータ圧縮が期待できる。ただし、重みとして用いた領域毎の平均原子数密度と平均中性子束も保存する必要があるため、実質的なデータ量はやや増加する。平均原子数密度のデータ量は 78 領域×221 核種=17238、平均原子数密度のデータ量は 78 領域×16 核種=1248 であるため、式(3.28)に重みのデータ量を加味した場合の元の断面積行列に対する圧縮率は式(3.29)で表される。

$$1 - \frac{14742 \times 20 + 20 + 20 \times 14144}{14742 \times 14144} - \frac{17238 + 1248}{14742 \times 14144} = 99.71\% \quad (3.29)$$

したがって、重みによるデータ量は殆ど影響がない。

また、特異値の欠損率と、実効増倍率及び中性子束の最大誤差の比較を Figure 3-33 に示す。

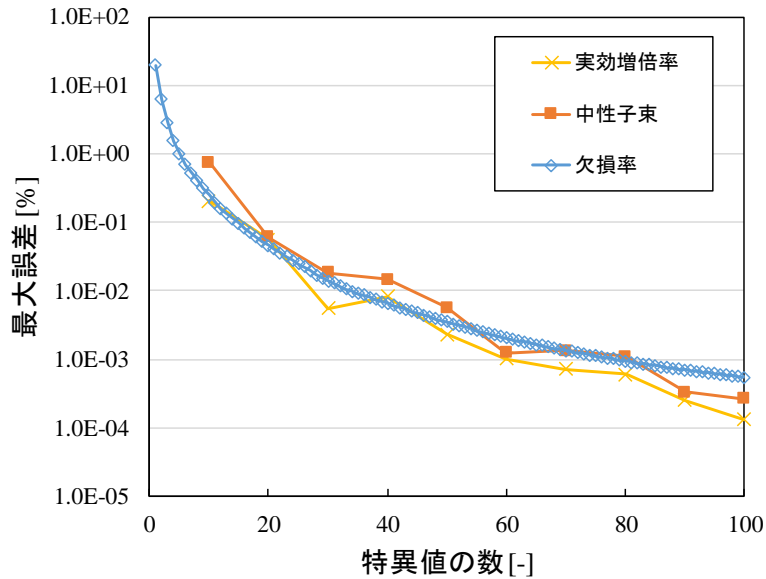


Figure 3-33 次元削減後の再構成微視的断面積（平均原子数密度&平均中性子束重みづけ）による実効増倍率及び核分裂反応率の最大誤差と特異値の欠損率の比較

Figure 3-33 では、実効増倍率及び中性子束の最大誤差は、概ね特異値の欠損率の分布と一致して減少している。これは、重みづけによって平均原子数密度と平均中性子束が掛け合わされた微視的断面積は、その断面積を用いた輸送計算での反応率を概ね再現しているためであると考えられる。すなわち、中性子輸送計算の入力として用いる前に、微視的断面積を仮想的な反応率として変換し、その反応率に対して次元削減を適用しているため、特異値の欠損率が輸送計算後の反応率の誤差のオーダーを示す指標となっている。

以上を踏まえると、格子計算コードでの単一集合体計算によって得られた中性子束、及び燃烧計算によって得られた原子数密度を用いて重みを計算し、その重みを用いた次元削減を微視的断面積に適用することで断面積テーブルの大幅な圧縮が見込まれる。このときの圧縮率は、特異値の欠損率を目標精度に合わせることで決定できる。例えば、目標精度を0.1%程度とするならば、特異値の欠損率が0.1%となるように低ランク近似を行えばよい。

最後に、入力として与えている再構成断面積の誤差の傾向を確認するため、再構成後の断面積行列から1行を抽出し、行内の14144個の要素を16群×884断面積タイプの形の行列として並べかえる。あるステートポイントでのある領域の再構成断面積の抽出及び並び替えの手順をFigure 3-34に示す。

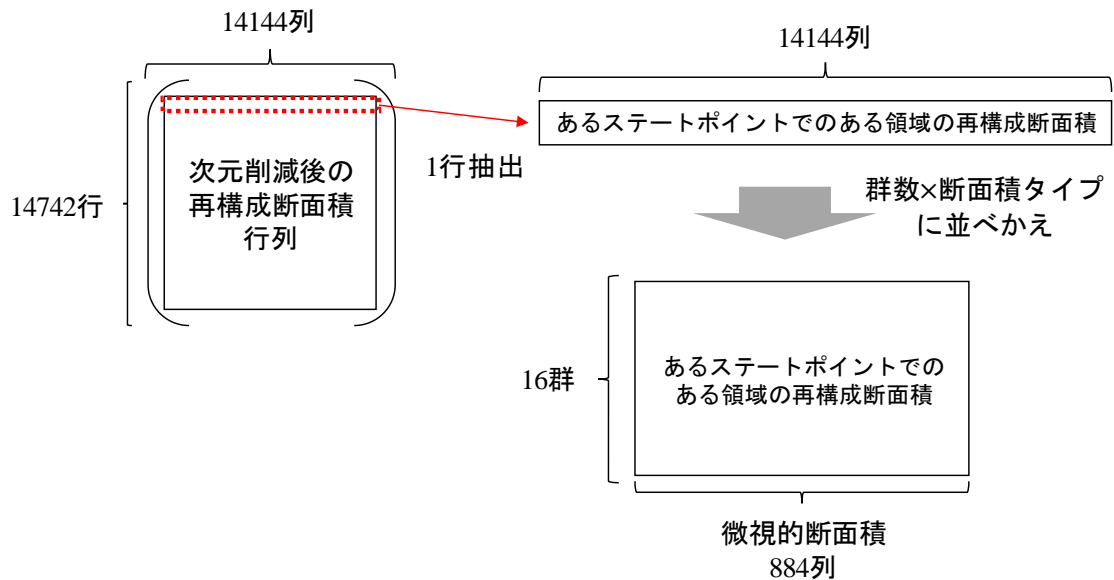


Figure 3-34 断面積行列の行ベクトルの抽出及び並び替え

Figure 3-34 の抽出された再構成断面積に対して、次元削減前の元の断面積との相対誤差を取り、カラーマッピングで表示することで誤差傾向の確認を行った。このとき、断面積行列の i 行 j 列に並べられた再構成断面積の相対誤差 $\Delta\sigma_{i,j}$ は式(3.30)で定義される。

$$\Delta\sigma_{i,j} = \left| \frac{\sigma_{reconstruct,i,j} - \sigma_{original,i,j}}{\sigma_{original,i,j}} \right| \quad (3.30)$$

ここで、

$\sigma_{reconstruct,i,j}$: i 行 j 列目の再構成断面積

$\sigma_{original,i,j}$: i 行 j 列目の元の断面積

である。

Figure 3-4 の 1/8 集合体図における最下段右端セルの燃料ペレット内側領域を対象に、特異値 20 個での断面積を再構成し、Figure 3-34 の並び替えを行った後に各要素の相対誤差を計算した。Table 3-2 のケースマトリックスにおけるステートポイント No.56 (燃焼中期)での重みづけ毎の再構成断面積の相対誤差をカラーマップとしてそれぞれ Figure 3-35~Figure 3-38 に示す。ここで、Figure 3-35~Figure 3-38 の横軸は微視的断面積 σ_a 、 σ_f 、 $\nu\sigma_f$ 、 σ_c を 221 核種毎に並べている。具体的には、左側から ^{16}O 、 ^{73}Ge といった燃料内の軽核種が並べられており、772 番目以降には重核種の断面積が並べられている (一番右端は ^{246}Cm の断面積)。

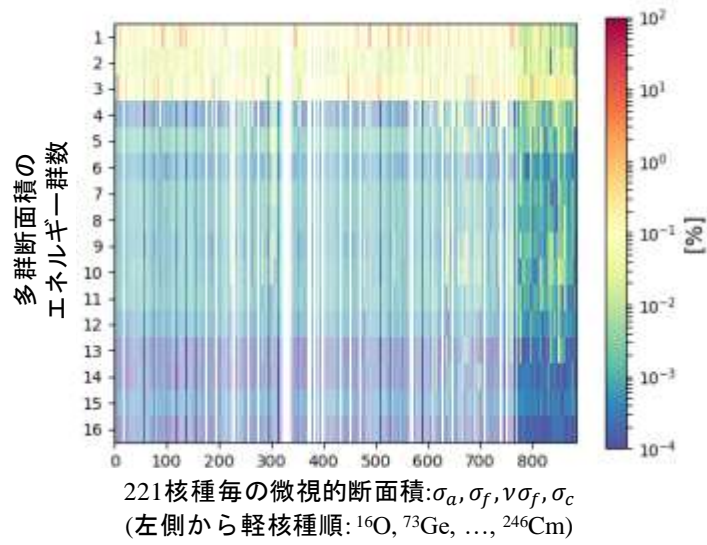


Figure 3-35 ステートポイント No.56 (燃焼度 35 GWd/t) でのある燃料領域における再構成断面積の誤差[%] (重み無し、特異値 20 個)

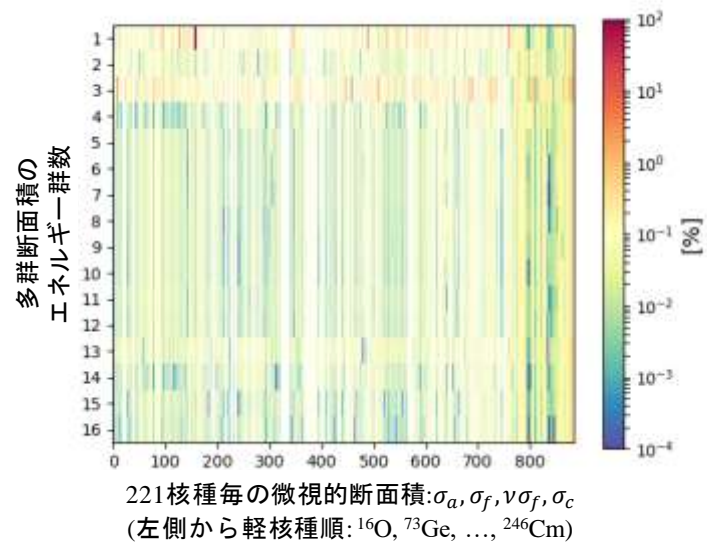


Figure 3-36 ステートポイント No.56 (燃焼度 35 GWd/t) でのある燃料領域における再構成断面積の誤差[%] (平均原子数密度重みづけ、特異値 20 個)

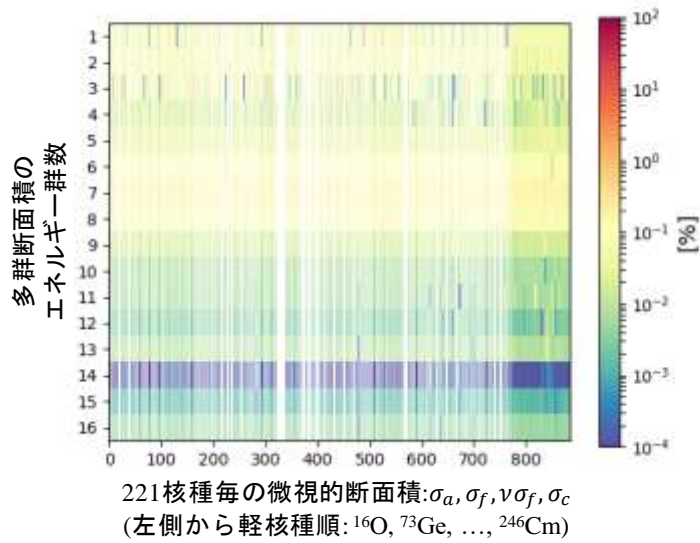


Figure 3-37 ステートポイント No.56 (燃焼度 35 GWd/t) でのある燃料領域における再構成断面積の誤差[%] (平均中性子束重みづけ、特異値 20 個)

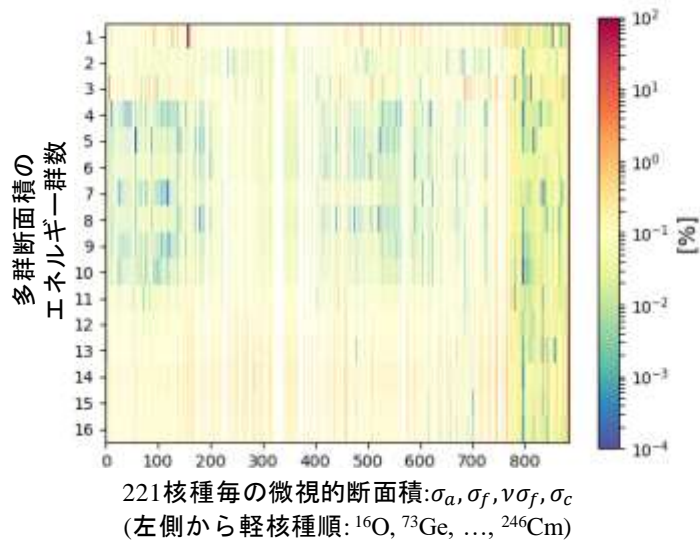


Figure 3-38 ステートポイント No.56 (燃焼度 35 GWd/t) でのある燃料領域における再構成断面積の誤差[%] (平均原子数密度&平均中性子束重みづけ、特異値 20 個)

Figure 3-35 の重み無し断面積の場合、エネルギー群毎で再構成精度に差が生じているのが見受けられるが、Figure 3-36 では列毎に色合いの差が生じているため、平均原子数密度で重みづけしたことによって核種毎の微視的断面積の精度に差が生じていると考えられる。

Figure 3-37 では、平均中性子束で重みづけしたことによってエネルギー群毎の精度が Figure 3-35 とは異なっている。Figure 3-38 では、全体的な誤差は Figure 3-35 よりも大きくなっていると考えられるが、その代わりに集合体計算への影響が大きい一部の断面積の精度が向上していると考えられる。

3.8 本章のまとめ

本章では、単一集合体計算によって得られたセル平均巨視的断面積及び微視的断面積を用いて行列を作成し、次元削減を適用する手順を述べた。また、次元削減後の圧縮データから断面積を再構成し、再構成断面積を用いて単一集合体計算を実施した。そのときの出力結果（実効増倍率、核分裂反応率、中性子束）の誤差を計算し、目標精度を 0.1%以下とした場合のデータの圧縮率を計算した。

3.3 節では、本研究で用いた単一集合体体系での断面積を生成するにあたって使用した格子計算コード、及び検証計算で用いた輸送計算コードの概要を説明した。

3.4 節では、Pin-by-Pin 集合体計算によって得られるセル毎の巨視的断面積に対して次元削減を適用した結果、77.94%のデータを削減できることがわかった。このことから、本手法を用いた場合の断面積データの圧縮の見込みが得られた。その結果を踏まえ、3.5 節ではよりデータ量が多い体系である、非均質集合体での物質毎の巨視的断面積及び微視的断面積に対して次元削減を適用した。その結果、3.4 節よりも大きなデータ量であるにも関わらず 98.08%のデータ削減を達成できた。3.6 節では、行列内の巨視的断面積の有無による圧縮率への影響を確認するため、微視的断面積のみから行列を作成し次元削減を適用した。その結果、必要な特異値の個数は変わらなかったため、圧縮率に大きな変化は見られなかった。一方で、これまでの検討では、核的観点から核種毎あるいはエネルギー毎の断面積の重要性を考慮できておらず、それを考慮することでより効率的なデータ圧縮が可能であると予想された。そのための改良手法として、3.7 節では断面積データへの重みづけを提案した。その結果、ステートポイントに対する平均原子数密度及び平均中性子束による重みづけを微視的断面積行列に対して適用することで、次元削減による圧縮率は 99.72%まで向上したため、重みづけを用いた次元削減の有用性が確認された。

3.9 参考文献

- [1] J. Rhodes, M. Edenius, “CASMO-4 A Fuel Assembly Burn-up Program. User’s Manual,” SSP-09/443 - U Rev 0, Studvik Scandpower, Inc. (2001).
- [2] N. Sugimura, A. Yamamoto, T. Ushio *et al.*, “Neutron Transport Models of AEGIS: An Advanced Next-Generation Neutronics Design System,” *Nucl. Sci. Eng.*, **155**[2], 276–289 (2007).

- [3] A. Yamamoto, T. Endo, M. Tabuchi *et al.*, “AEGIS: An Advanced Lattice Physics Code for Light Water Reactor Analyses,” *Nucl. Eng. Technol.*, **42**[5], 500-509 (2010).
- [4] N. Sugimura, T. Ushio, A. Yamamoto *et al.*, “Calculation Models of AEGIS/SCOPE2, a Core Calculation System of Next Generation,” *Proc. Physor2006*, Sep. 2006, Vancouver, Canada (2006). [CD-ROM]
- [5] WIMS Library Update Project , “<https://www-nds.iaea.org/wimsd/energy.htm>,” (アクセス日:2019/12/27).
- [6] A. Yamamoto, A. Giho, Y. Kato *et al.*, “GENESIS: A Three-Dimensional Heterogeneous Transport Solver Based on the Legendre Polynomial Expansion of Angular Flux Method,” *Nucl. Sci. Eng.*, **186**[1], 1–22 (2017).
- [7] K. Tada, “Study on pin-by-pin fine mesh core calculation method for BWR core analysis,” 博士論文, 名古屋大学 (2012).
- [8] Scipy.org, numpy.linalg.svd, “<https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.linalg.svd.html>,” (アクセス日:2019/12/27).

第4章 次元削減に基づいた炉心解析用断面積テーブルの 開発

4.1 本章の概要

第3章では、単一集合体計算によって得られた巨視的断面積・微視的断面積に対して次元削減を適用することで、大幅なデータ圧縮が見込まれることがわかった。一方で、炉心計算に必要な断面積を参照するための断面積テーブルとして扱うには、圧縮されたデータを保存するのみならず、保存されたデータを用いて任意の炉心状態での断面積を生成するためのモデル化が必要である。

従来のマクロ方式あるいはマイクロ方式の断面積テーブルでは、燃焼計算及びブランチ計算を含んだ単一集合体計算から得られた断面積を組み合わせることでフィッティングモデルを作成し、そのモデルに炉心状態を入力として与えることで、断面積の瞬時効果及び履歴効果に対する補正値を求めている。その後、基準状態での断面積に対して補正値を加えることで、対象とする炉心状態での断面積が得られる^{[1],[2],[3]}。

一方で、本研究におけるデータ圧縮において、断面積データは低次元化された左特異ベクトル（ステートポイント及び領域に関する基底）、特異値、右特異ベクトル（断面積タイプに関する基底）として分解されて保存されている。このとき、左特異ベクトルと特異値を掛け合わせることで右特異ベクトルに対する展開係数を計算できる。この展開係数は各ステートポイントでの状態変数に依存するため、展開係数を用いた内挿モデルを作成することで、2.3節で説明した低次元化モデル（ROM）を作成することができる。

瞬時効果に対する内挿を例として、微視的断面積を用いた瞬時補正 $\Delta\sigma_{inst}$ の従来的な内挿モデルの概念図を Figure 4-1 に、本研究における展開係数の ROM の概念図を Figure 4-2 に示す。

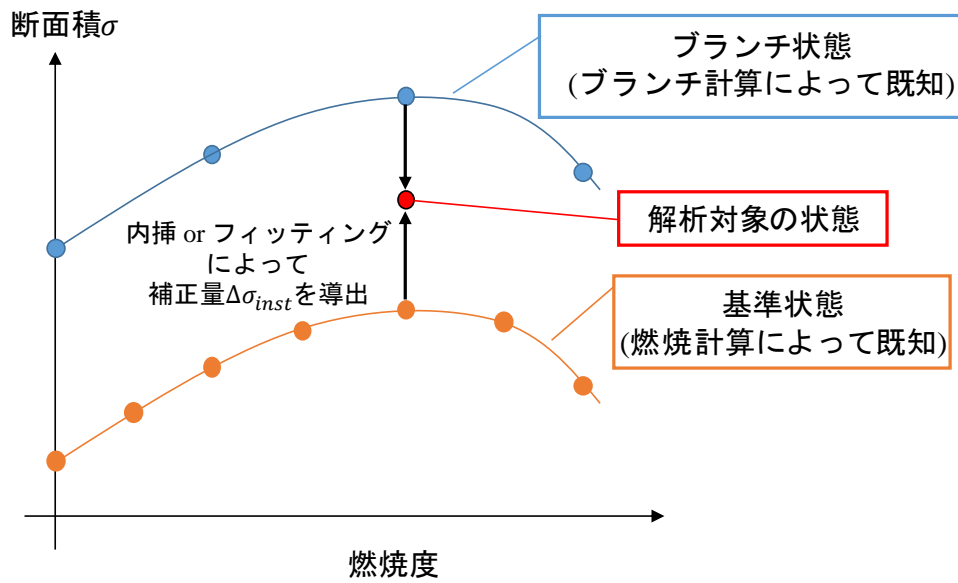


Figure 4-1 従来の断面積の瞬時補正の概念図^[8]

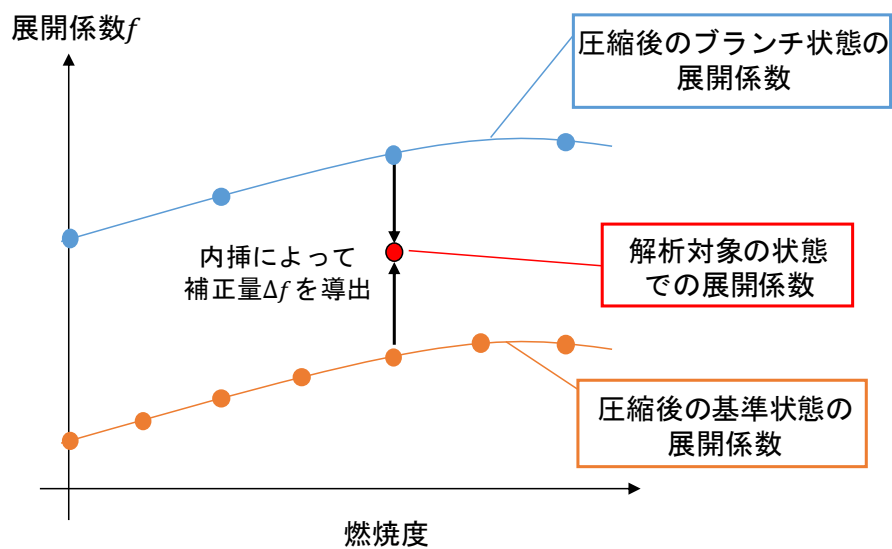


Figure 4-2 本研究における展開係数のROMの概念図

Figure 4-2 の ROM の具体的な作成手順は 4.2.1 節にて示す。また、ROM から推定される微視的断面積の精度の検証計算の手順及び検証結果を 4.2.2 節に示す。4.3 節では、本章のまとめを述べる。

4.2 ROM を用いた微視的断面積の再構成

4.2.1 微視的断面積テーブルに対する ROM の作成

本節では、圧縮後の微視的断面積データを用いた ROM の作成手順を述べる。第3章で作成した断面積行列に対し次元削減を適用した場合のデータは式(4.1)の形で保存される。

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V} \approx \mathbf{U}_k\mathbf{\Sigma}_k\mathbf{V}_k^T \quad (4.1)$$

このとき、左特異ベクトル \mathbf{U}_k と $\mathbf{\Sigma}_k$ を掛け合わせることで展開係数行列 \mathbf{F} が得られる。

$$\mathbf{F} = \mathbf{U}_k\mathbf{\Sigma}_k = \begin{pmatrix} \sigma_1 u_{1,1} & \cdots & \sigma_k u_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_1 u_{m,1} & \cdots & \sigma_k u_{m,k} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

\mathbf{F} の*i*番目の行ベクトルを \vec{f}_i とすることで、式(4.2)は式(4.4)として表される。

$$\vec{f}_i = (f_{i,1}, \dots, f_{i,k}) = (\sigma_i u_{i,1}, \dots, \sigma_i u_{i,k}) \quad (4.3)$$

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \vec{f}_1 \\ \vdots \\ \vec{f}_m \end{pmatrix} \quad (4.4)$$

式(4.4)の各行ベクトルを用いて、未知の炉心状態での展開係数ベクトル $\vec{f}_{unknown}$ を内挿によって求めることを考える。

本研究における展開係数の線形補間を用いたモデルを、

Case 1: 求めたい展開係数が基準状態の場合

Case 2: 求めたい展開係数がブランチ状態の場合

の2ケースに分けて説明する。

Case 1: 基準状態での $\vec{f}_{unknown}$ を求める場合

まず、 $\vec{f}_{unknown}$ の各状態変数が基準状態のものと同じであるが、燃焼計算が行われていない燃焼点である場合を考える。ここで、 $\vec{f}_{unknown}$ の燃焼度 x は、展開係数行列の行ベクトル \vec{f}_i と \vec{f}_{i+1} の燃焼度区間内の値であるとする($x_i \leq x \leq x_{i+1}$)。このとき、各展開係数ベクトルでの*k'*番目の特異値 ($1 \leq k' \leq k$) に対応する展開係数 $f_{i,k'}$, $f_{i+1,k'}$, $f_{unknown,k'}$ を Figure 4-3 に示す。

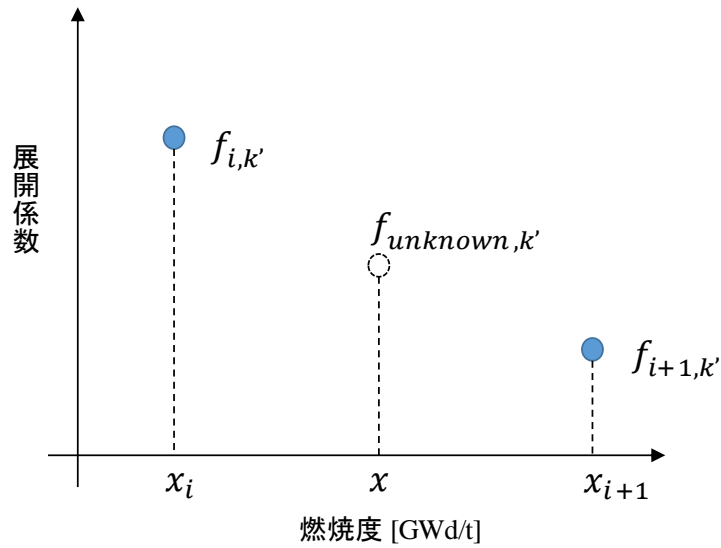


Figure 4-3 基準状態での燃烧度 x [GWd/t]における未知の展開係数

Figure 4-3 において、燃烧度 x に対する未知の展開係数 $f_{unknown,k'}$ を $f_{i,k'}$ 、 $f_{i+1,k'}$ を用いた線形補間によって推定することを考える。線形補間を用いた場合の展開係数の内挿値 $f_{interp,k'}$ は式(4.5)で表される。

$$f_{interp,k'}(x) = \frac{f_{i+1,k'} - f_{i,k'}}{x_{i+1} - x_i} (x - x_i) + f_{i,k'} \quad (4.5)$$

式(4.5)による内挿の概念図を Figure 4-4 に示す。

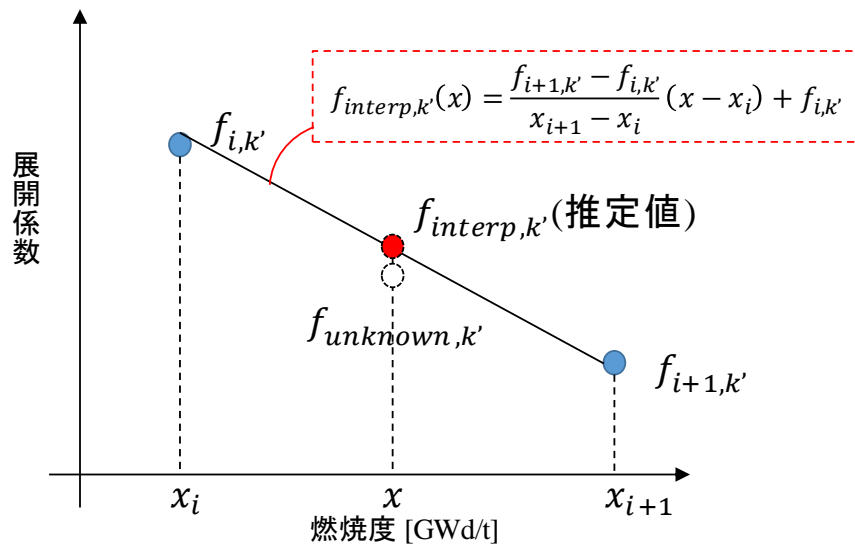


Figure 4-4 基準状態での燃烧度 x [GWd/t]における展開係数の線形補間

また、燃焼計算で考慮されている範囲外の燃焼度における展開係数を推定したい場合、内挿ではなく外挿（補外）によって展開係数を推定する。線形補外を用いる場合の燃焼度 x ($x_{i+1} < x$)に対する展開係数の外挿値 $f_{extrap,k'}(x)$ は式(4.6)で表される。

$$f_{extrap,k'}(x) = \frac{f_{i+1,k'} - f_{i,k'}}{x_{i+1} - x_i}(x - x_i) + f_{i,k'} \quad (4.6)$$

式(4.6)の外挿は、式(4.5)の内挿と同一の式である。この外挿の概念図を Figure 4-5 に示す。

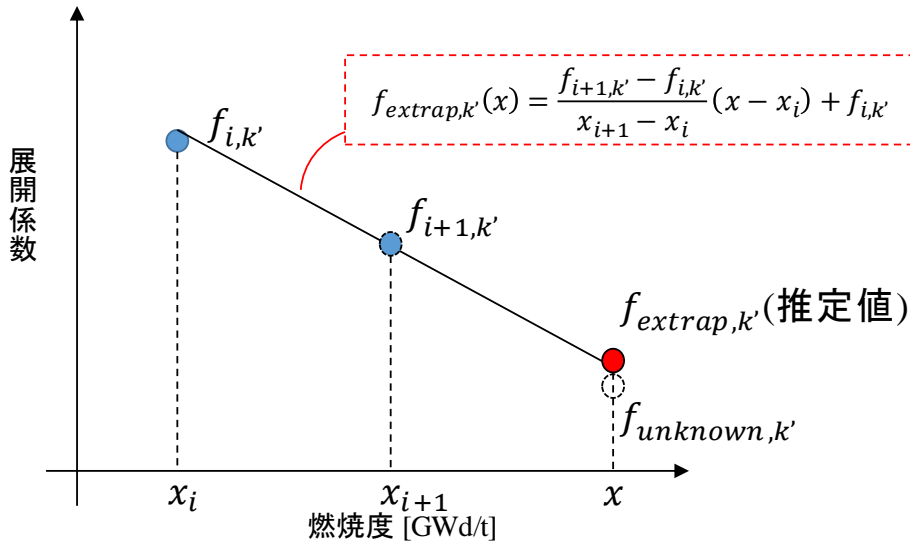


Figure 4-5 基準状態での燃焼度 x [GWd/t]における展開係数の線形補外

Case 2: ブランチ状態での $\vec{f}_{unknown}$ を求める場合

次に、 $\vec{f}_{unknown}$ の各状態変数がブランチ状態のものと同じであるが、ブランチ計算が行われていない燃焼点である場合を考える。ただし、基準状態での燃焼計算では同一の燃焼度を取り扱っているものとする。このとき、各燃焼度及び炉心状態での k' 番目の展開係数を Figure 4-6 に示す。ここで、添え字の *base* は基準状態、*branch* はブランチ状態での展開係数であることをそれぞれ表している。

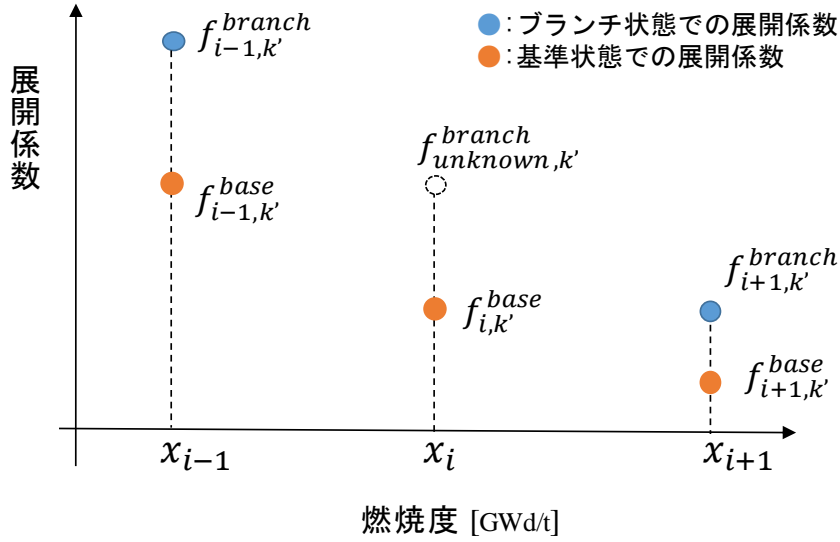


Figure 4-6 ブランチ状態での燃焼度 x [GWd/t]における未知の展開係数

Case 1 が 2 点のみの情報を用いた補間であったのに対し、Case 2 では 5 点の情報を用いて $f_{unknown,k'}^{branch}$ の補間を行うことを考える。

まず、 $i-1$ 及び $i+1$ の燃焼点での基準状態とブランチ状態での展開係数に対して、それぞれ式(4.7)の差分を取る。

$$\Delta f_{i,k'} = f_{i,k'}^{branch} - f_{i,k'}^{base} \quad (4.7)$$

次に、式(4.8)を用いて、 $i+1$ の燃焼点と内挿点 i での燃焼度の差分、及び $i-1$ の燃焼点と内挿点 i での燃焼度の差分をそれぞれ計算する。

$$\Delta x_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+1} - x_i \quad (4.8)$$

補正量 $\Delta f_{interp,k'}$ は、燃焼度差分 $\Delta x_{i+\frac{1}{2}}$ を重みとした $\Delta f_{i,k'}$ の重み付き平均として近似的に求める。

$$\Delta f_{interp,k'} = \frac{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} \Delta f_{i-1,k'} + \Delta x_{i-\frac{1}{2}} \Delta f_{i+1,k'}}{\Delta x_{i+\frac{1}{2}} + \Delta x_{i-\frac{1}{2}}} \quad (4.9)$$

得られた補正量 $\Delta f_{interp,k'}$ を $f_{i,k'}^{base}$ に加えることで、 $f_{unknown,k'}^{branch}$ を推定できる。

$$f_{unknown,k'}^{branch} = f_{i,k'}^{base} + \Delta f_{interp,k'} \quad (4.10)$$

以上のブランチ状態での内挿手順を Figure 4-7 に示す。

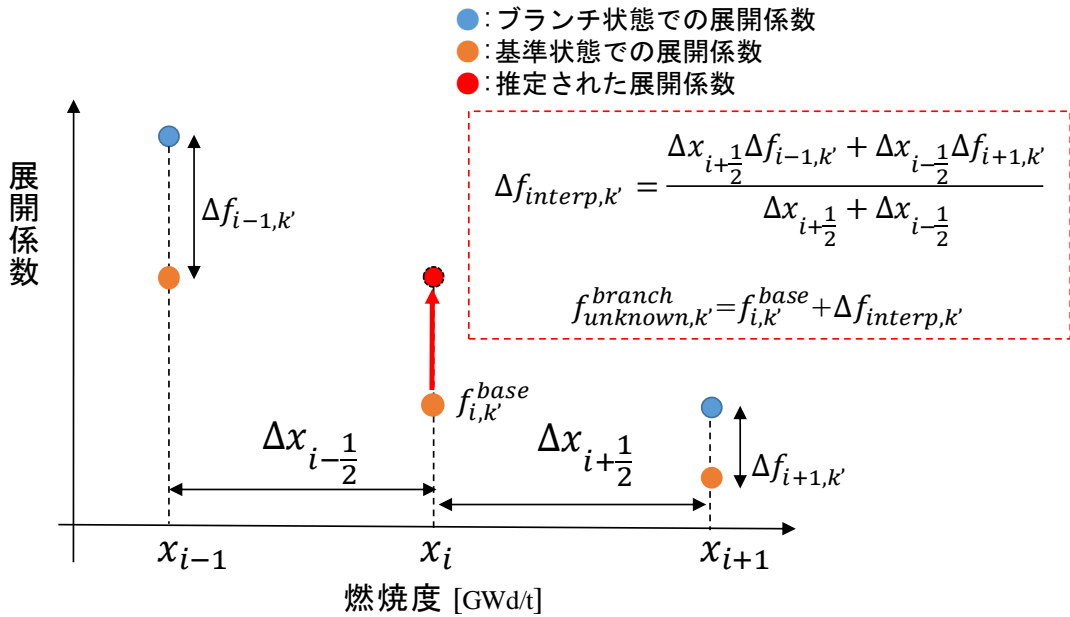


Figure 4-7 線形補間による未知のブランチ点での展開係数の推定

Case 2 では、燃焼計算のみ行われている燃焼点について、ブランチ状態の展開係数の内挿を取り扱った。一方で、燃焼計算もブランチ計算も行われていない燃焼点での展開係数を求める場合、 $f_{i,k'}^{base}$ を Case 1 の式(4.5)で内挿した上で、更に $\Delta f_{interp,k'}$ に対して式(4.9)を用いた内挿を行うことで、 $f_{unknown,k'}^{branch}$ を推定できる。

また、燃焼計算及びで考慮されている範囲外の燃焼度における展開係数を推定した場合、Case 1 同様に外挿によって展開係数を推定する。燃焼度 x ($x_{i+1} < x$)での展開係数 $f_{unknown,k'}^{branch}$ に対して外挿を行う場合、まず基準状態での展開係数 $f_{extrap,k'}^{base}(x)$ に対して式(4.11)の線形補外を行う。

$$f_{extrap,k'}^{base}(x) = \frac{f_{i+1,k'}^{base} - f_{i,k'}^{base}}{x_{i+1} - x_i}(x - x_i) + f_{i,k'}^{base} \quad (4.11)$$

次に、前の燃焼点における基準状態とブランチ状態の展開係数の差分 $\Delta f_{i+1,k'}$ を $f_{extrap,k'}^{base}(x)$ に足すことで $f_{unknown,k'}^{branch}$ が得られる。

$$f_{unknown,k'}^{branch} = f_{extrap,k'}^{base}(x) + \Delta f_{i+1,k'} \quad (4.12)$$

以上のブランチ状態での外挿手順を Figure 4-8 に示す。

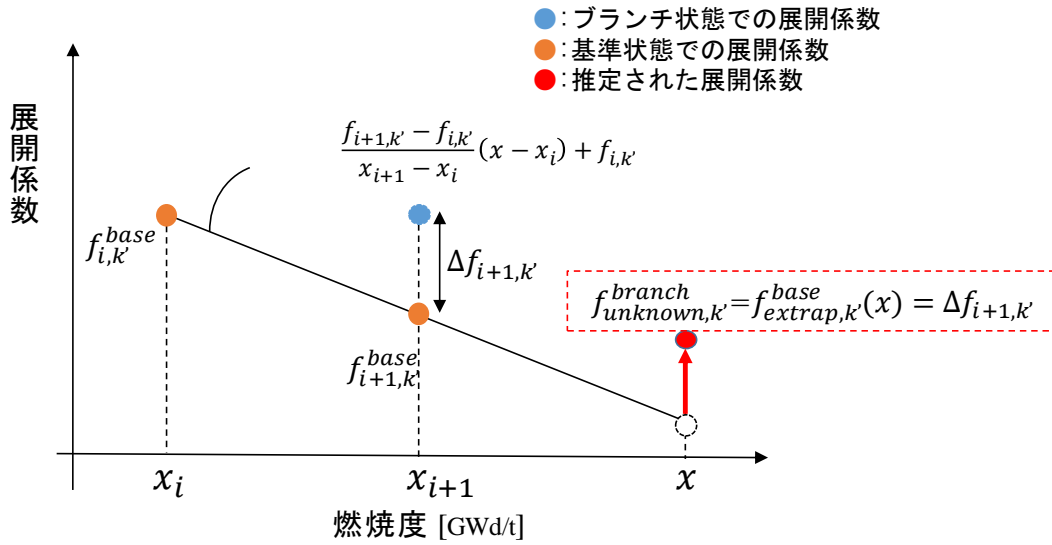


Figure 4-8 線形補外による未知のブランチ点での展開係数の推定

実際の炉心解析においては、複数の状態変数の変化に対する補正を組み合わせることで、任意の炉心状態での展開係数を推定できる。複数の状態変数が変化したブランチ状態での展開係数は、式(4.10)を拡張して式(4.13)で表される。

$$f_{unknown,k'}^{branch} = f_{i,k'}^{base} + \sum_s \Delta f_{s,k'} \quad (4.13)$$

ここで、

$\Delta f_{s,k'}$: ある状態変数 s に対する内挿・外挿によって得られた展開係数の補正量である。以上が Case 2 での展開係数の推定方法である。

Case 1 及び Case 2 の内挿によって得られた展開係数ベクトル \vec{f} と右特異ベクトル \mathbf{V}_k^T を掛け合わせることで、ある炉心状態におけるある領域の再構成微視的断面積を要素に持つベクトル $\vec{\sigma}$ が求められる。

$$\vec{\sigma} = \vec{f} \times \mathbf{V}_k^T \quad (4.14)$$

以上の展開係数の内挿及び断面積の再構成を用いた ROM を断面積テーブルに取り入れることで、圧縮された断面積データから未知の炉心状態での各断面積を参照することができる。

4.2.2 再構成された微視的断面積を用いた集合体計算

4.2.2.1 計算条件及び手順

本節では、3.7 節での平均原子数密度及び平均中性子束によって重みづけされた微視的断面積行列に対して ROM を作成し、ROM による微視的断面積の推定精度の検証を行う。本

検討では ROM 内で用いる線形内挿による推定精度を評価するにあたり、10 個の特異値及び特異ベクトルを用いる。ここで、特異値数 10 個は、約 99.9%の圧縮率に相当する特異値数として決定した（圧縮による精度は考慮していない）。これは比較的少数の情報を用いて内挿を行っていることから、例えば第 3 章の検証での特異値数（重みづけなしで 140 個程度、重みありで 20 個程度）を用いた場合の ROM の内挿精度は本検討よりも高いことが期待される。

検証計算の具体的な手順を①~⑦及び Figure 4-9 に示す。

- ① 微視的断面積行列に次元削減を適用し、14144 個の特異値を 10 個まで削減する。
- ② 14742 行 10 列の左特異ベクトル（189 ステートポイント×78 燃料領域=14742 行）と 10 個の特異値を掛け合わせ、各ステートポイントでの領域毎の展開係数として保存する。
- ③ 14742 行 10 列の展開係数行列 **F** のうち、あるステートポイントでの 78 領域の展開係数を除外する。このときの展開係数行列 **F** の行数は $14742 - 78 = 14664$ 行となる。
- ④ 除外したステートポイントの展開係数を、**F** に対する線形補間によって内挿する。
- ⑤ 内挿で得られた展開係数から微視的断面積を再構成し、それらを用いて GENESIS による非均質単一集合体計算を実施する。このとき、中性子輸送計算に必要な散乱断面積は微視的断面積として考慮されていないため、AEGIS によって出力された巨視的散乱断面積を次元削減せずに直接用いている。
- ⑥ 出力された実効増倍率及び中性子束を参照解と比較し、内挿による展開係数を用いた場合の実効増倍率の誤差及び中性子束の RMS を 3.5 節と同様に計算する。このときの参照解は、除外された元の展開係数を用いた場合の実効増倍率及び中性子束とする。
- ⑦ ③~⑥の計算を、除外するステートポイントを変え、189 点すべてにおいて実施する。

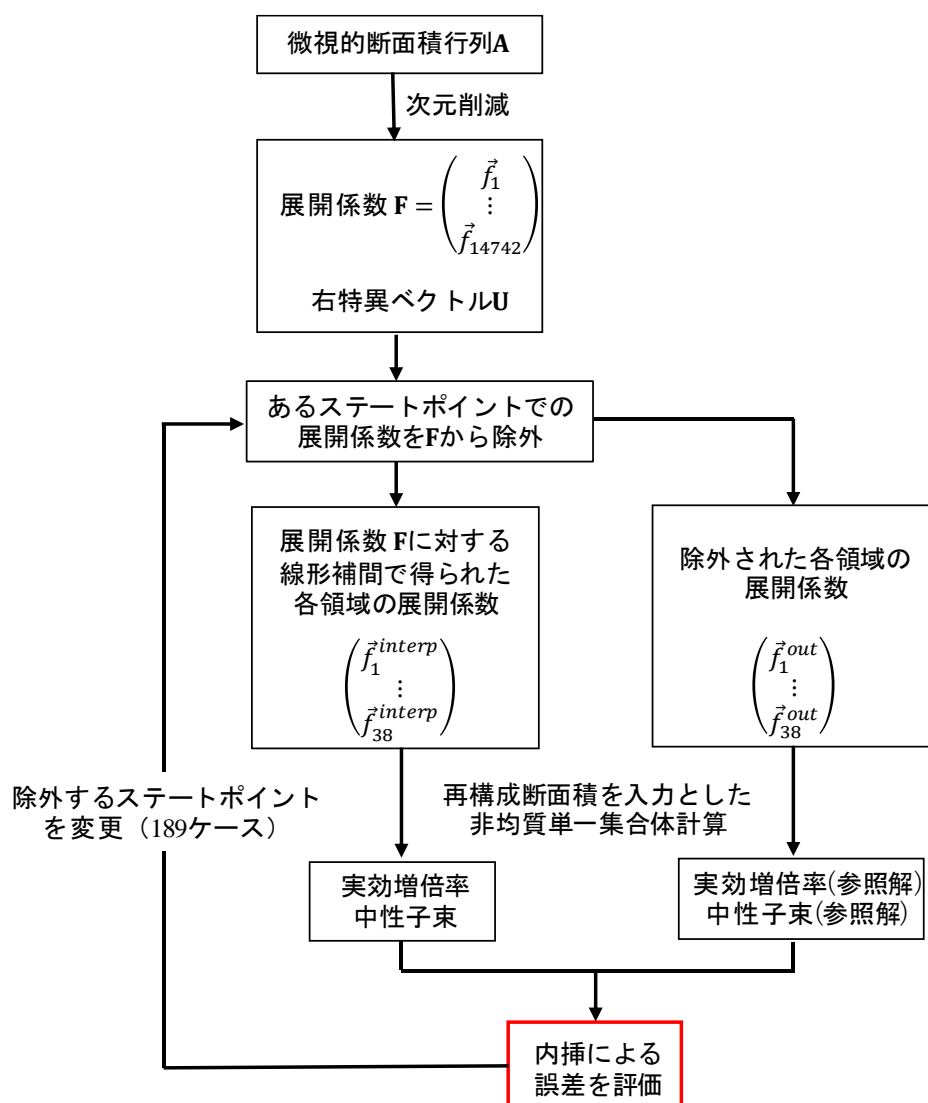


Figure 4-9 検証計算のフローチャート

この検証計算では、基準状態でのステートポイントの展開係数を除外した場合の内挿は4.2.1節の Case 1、ブランチ状態でのステートポイントの展開係数を除外した場合の内挿は4.2.1節の Case 2の方法を用いている。

本検討では、ステートポイント毎の展開係数を除外し、除外した展開係数を内挿によって推定することで、本手法で用いた内挿方法によって生じる誤差を評価している。一方で、実際の炉心解析用断面積テーブルでは本研究とほぼ同様の燃焼点及びブランチ点が考慮されていることを踏まえると、本検討で評価している内挿誤差は実際の断面積テーブルで生じる内挿誤差よりも過大評価であると考えられる。これは、本来なら詳細に得られているはずの展開係数のうち、ある燃焼度に関する展開係数が抜けることでそれを補うための内挿区間が広がり、その区間で生じる内挿誤差が増加するためである (Figure 4-10)。

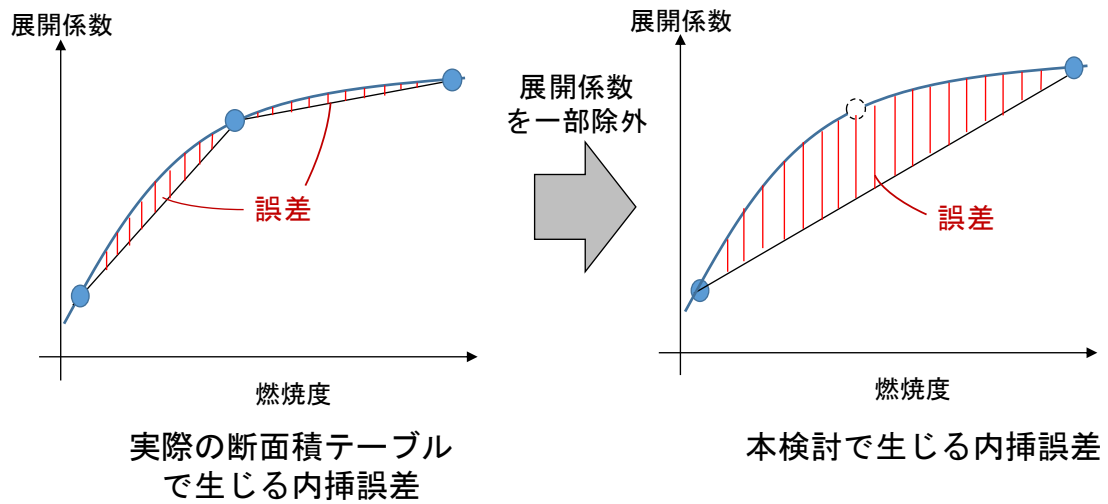


Figure 4-10 実際の断面積テーブルで生じる内挿誤差と本検討で生じる内挿誤差

また、本検討において、基準状態またはブランチ状態での燃焼度 0 GWd/t あるいは 70 GWd/t の点では内挿を行うことができないため、これらのステートポイントでは式(4.6)または式(4.12)の外挿を用いる。

また、本検討における実効増倍率及び中性子束の目標精度は $10^{-2}\%$ ($=0.01\%$) とする。これは、3.7 節での圧縮によって既に 0.1% の圧縮誤差が生じており、それに本検討での誤差を加えても精度的に殆ど影響がないことが望まれるため、圧縮誤差よりも誤差が小さくなるよう目標精度を設定した。

4.2.2.2 計算結果

基準状態（第 3 章 Table 3-1~Table 3-2 のステートポイント No. 2~70）での各燃焼点において、Case 1 の線形補間による展開係数を用いた非均質単一集合体計算を実施して得られた実効増倍率の誤差を Figure 4-11 に、全領域の中性子束の RMS を Figure 4-12 に示す。

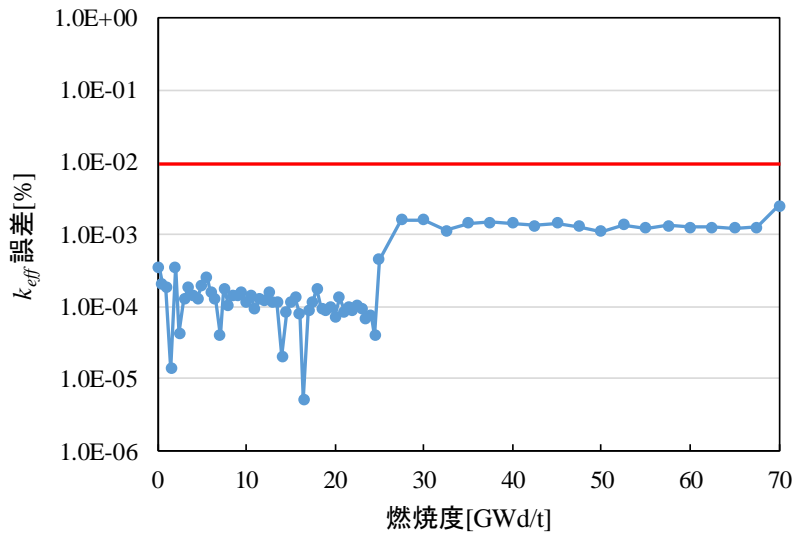


Figure 4-11 基準条件における実効増倍率の誤差[%]

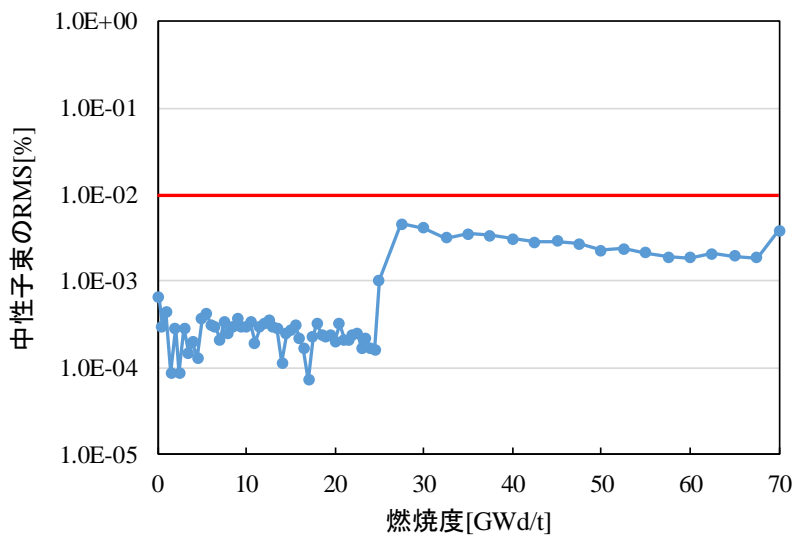


Figure 4-12 基準条件における中性子束の RMS[%]

Figure 4-11 及び Figure 4-12 における実効増倍率及び中性子束の誤差は、燃焼度 25 GWd/t 以下では 10^{-5} ~ 10^{-4} %のオーダーでの誤差であり、燃焼度 25 GWd/t 以上では 10^{-3} %のオーダーの誤差が生じている。このとき、燃焼度 25 GWd/t 以下の燃焼点は 0.5 GWd/t 刻みであり、燃焼度 25 GWd/t 以上の燃焼点は 2.5 GWd/t 刻みであるため、結果として詳細に燃焼度をとった 25 GWd/t 以下の範囲での誤差が小さくなっている。実効増倍率と中性子束では、中性子束のほうが各燃焼点での誤差が大きいが、中性子束の誤差は最大でも 10^{-2} %に満たず、目標精度を達成している。したがって、基準状態における展開係数及び再構成断面積は、線形

補間によって精度良く推定できると考えられる。

また、ブランチ状態での各燃焼点において、Case2の線形補間による展開係数を用いた非均質単一集合体計算を実施した。ホウ素濃度変化のブランチ条件に対する実効増倍率及び中性子束の誤差をそれぞれ Figure 4-11, Figure 4-12 に示す。

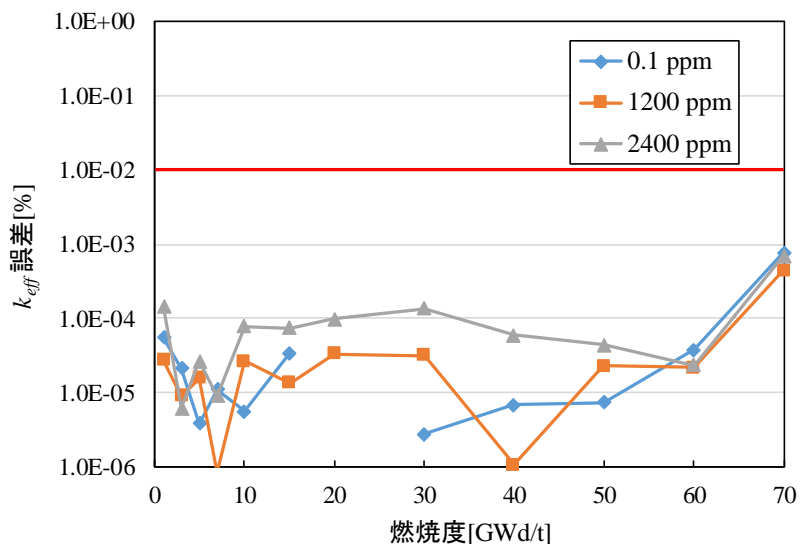


Figure 4-13 ブランチ条件（ホウ素濃度[ppm]の変化）における実効増倍率の誤差[%]

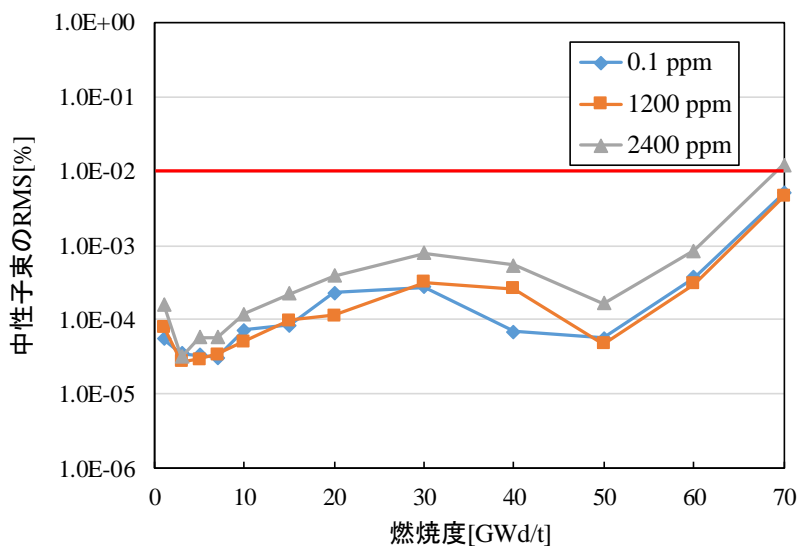


Figure 4-14 ブランチ条件（ホウ素濃度[ppm]の変化）における中性子束の RMS[%]

各ホウ素濃度に対する実効増倍率の誤差は、内挿では 10^{-4} %以下、70 GWd/tの外挿では 10^{-3} %以下である。また、中性子束の誤差は内挿では 10^{-3} %以下であるが、70 GWd/tの外挿

では 2400 ppm にて 10^{-2} %をやや上回っている。したがって、ホウ素濃度が高い場合は外挿を用いないことが望ましい。

減速材温度変化のブランチ条件に対する実効増倍率及び中性子束の誤差をそれぞれ Figure 4-15, Figure 4-16 に示す。

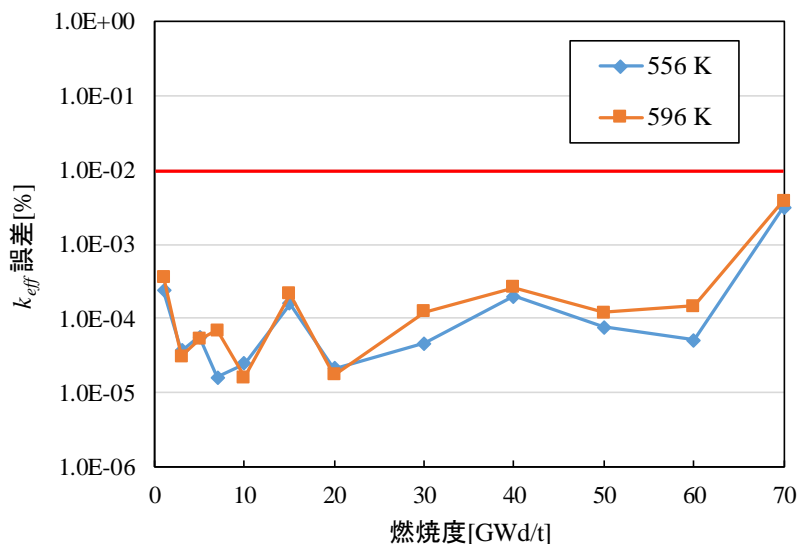


Figure 4-15 ブランチ条件（減速材温度[K]の変化）における実効増倍率の誤差[%]

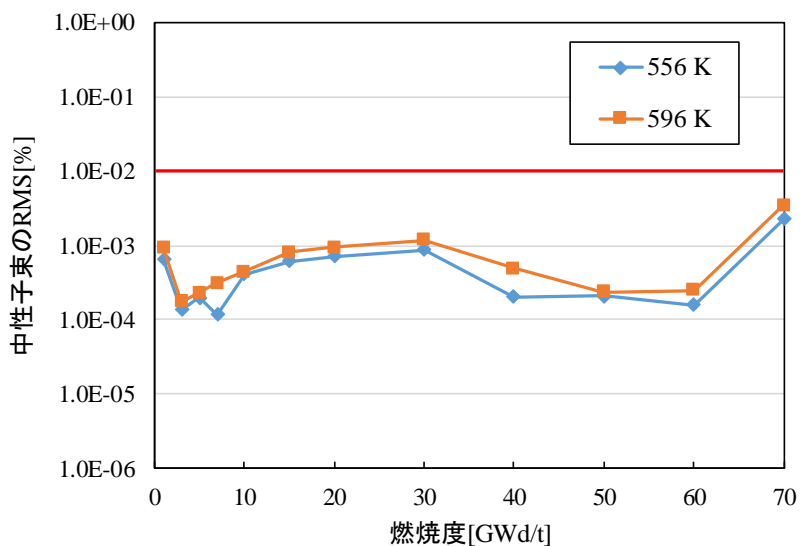


Figure 4-16 ブランチ条件（減速材温度[K]の変化）における中性子束の RMS[%]

減速材温度変化においても、各内挿点と外挿点での実効増倍率及び中性子束の誤差はいずれも 10^{-2} %以下であり、目標精度 10^{-2} %を達成している。

次に、燃料温度変化のブランチ条件に対する実効増倍率及び中性子束の誤差をそれぞれ Figure 4-17 Figure 4-15, Figure 4-18 に示す。

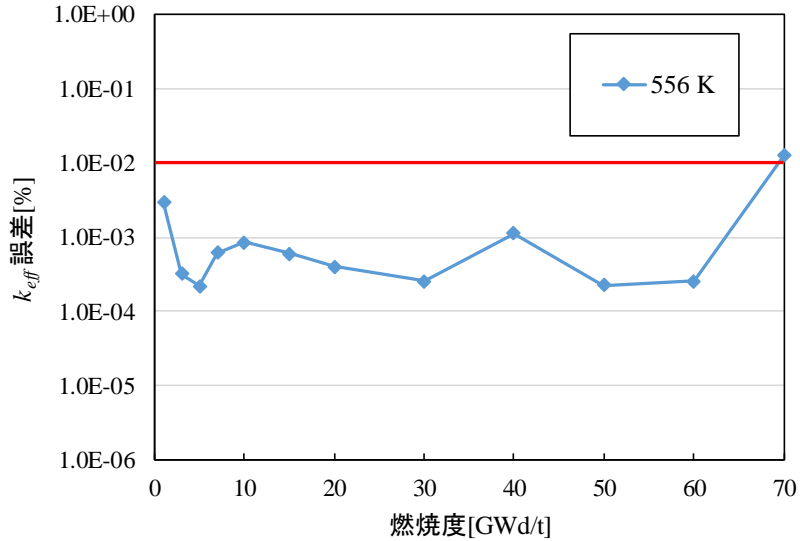


Figure 4-17 ブランチ条件（燃料温度[K]の変化）における実効増倍率の誤差[%]

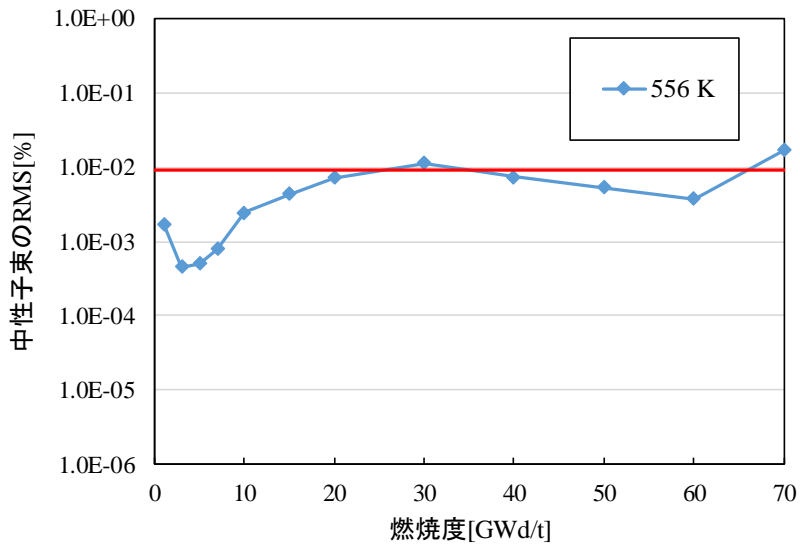


Figure 4-18 ブランチ条件（燃料温度[K]の変化）における中性子束の RMS [%]

燃料温度変化での実効増倍率及び中性子束の誤差は、ホウ素濃度及び減速材温度変化時に比べて誤差が大きい結果となった。これは、燃料温度が変化するとドップラー効果によって共鳴領域が変化し、実効断面積の変化傾向が基準状態での傾向と異なるためであると考えられる。特に中性子束においては 30 GWd/t での誤差はほぼ 10^{-2} % であり、また 70 GWd/t

での誤差は 10^{-2} %より大きい。本検討での誤差は過大評価であり、20 GWd/t 及び 40 GWd/t での誤差は 10^{-2} %を下回っていることから、実際の炉心解析条件における 30 GWd/t 付近の内挿誤差は 10^{-2} %を下回ると考えられる。そのため、燃料温度変化においては内挿のみ許容できる。

最後に、ボイド率変化のブランチ条件に対する実効増倍率及び中性子束の誤差をそれぞれ Figure 4-19, Figure 4-20 に示す。

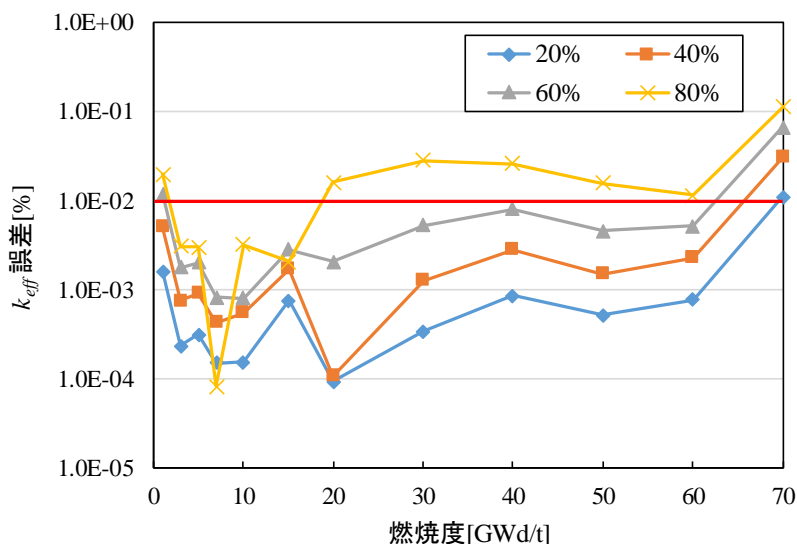


Figure 4-19 ブランチ条件 (ボイド率[%]の変化) における実効増倍率の誤差[%]

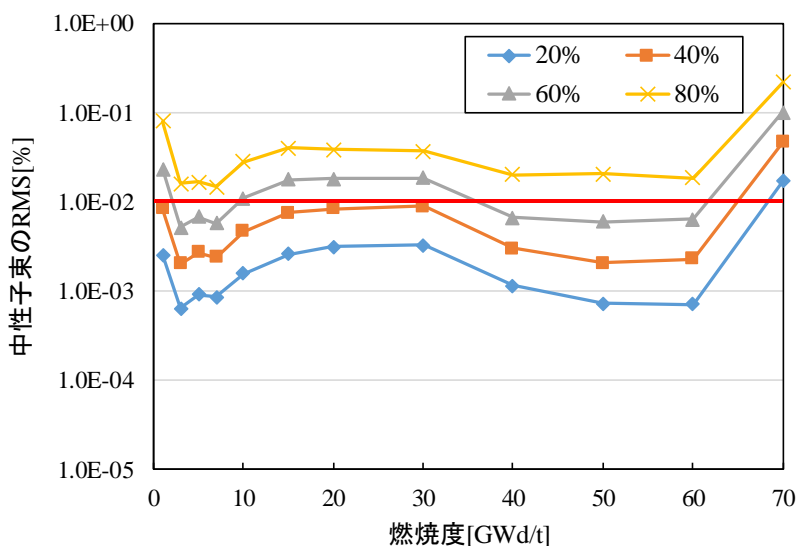


Figure 4-20 ブランチ条件(ボイド率[%]の変化)における中性子束の RMS[%]

ボイド率変化のブランチ条件では他の状態変数の変化に比べて誤差が大きい。これは、水がボイド（気泡）となり減速材密度が小さくなることで中性子の減速及び吸収効果が低下し、それによる中性子スペクトルの変化に伴い実効断面積も変化するためである（ボイド効果）。よって、ボイド効果により実効断面積は基準状態とは大きく異なっているため、内挿及び外挿の精度が低下していると考えられる。70 GWd/t での誤差は、いずれのボイド率においても 10^{-2} %以上であるため目標精度を満たしておらず、特にボイド率 80 %では内挿においても誤差が 10^{-2} %以上、外挿では 0.1 %以上となっている。したがって、高ボイド率状態では Case 2 の線形補間及び補外以外の方法が求められるため、他のフィッティング手法について検討することが今後の課題となる。

4.3 本章のまとめ

本章では、圧縮後の断面積データを用いて未知の炉心状態での断面積を推定できる低次元化モデル（ROM）の開発を検討した。本検討では、ROM に用いるフィッティング方法として線形補間を採用し、基準状態、ブランチ状態での微視的断面積の再構成を行った。得られた再構成断面積を用いて非均質単一集合体計算を行った時の実効増倍率及び中性子束の誤差から、ROM による微視的断面積の推定精度を評価した。内挿の結果として、線形補間によって基準状態及びホウ素濃度変化、減速材温度変化、燃料温度変化の 3 つのブランチ状態は誤差が 10^{-2} %以下で推定できるが、ボイド率変化に関しては誤差が大きくなることがわかった。したがって、ボイド率変化に対して精度良く推定するために他のフィッティング手法を検討することが今後の課題として挙げられる。具体的には、本研究で用いた線形補間（一次スプライン補間）の他に、高次のスプライン補間、最小二乗法による多項式フィッティング等を用いた非線形フィッティングが挙げられる。また、外挿はボイド率変化だけでなくいくつかのブランチ条件において誤差が 10^{-2} %を上回ったため、基本的には外挿を用いないことが望ましい。

また、本検討ではある状態変数のみが瞬時的に変化した場合のブランチ条件のみ取り扱ったが、実際の炉心では、燃料温度が上昇することで減速材温度も上昇する、といったように、一つの状態変数だけでなく複数の状態変数が増加している。そのため、複数の状態変数を変化させた場合に対応できるフィッティングモデルを開発することも今後の課題の一つである。

4.4 参考文献

- [1] T. Fujita, “Study on Cross Section Generation for BWR Pin by Pin Core Analysis,” 博士論文, 名古屋大学 (2015).
- [2] 大堀和真, “PWR 炉心管理と燃焼計算”, 第 51 回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会 P.53(2019).
- [3] 東條匡志, “BWR 炉心管理と燃焼計算”, 第 51 回炉物理夏期セミナーテキスト, 日本原子力学会, P.75 (2019).

第5章 結論

5.1 まとめ

本研究では、空間及びエネルギー解像度の高い炉心解析用断面積テーブルの圧縮手法の開発を目的として、次元削減手法を用いた断面積データの圧縮、および圧縮された断面積データを用いた炉心解析用断面積テーブルの開発を行った。

第1章では、研究の背景として、断面積の概念及び炉心解析で行われている核計算について解説し、炉心解析によって炉内の中性子の挙動を解析する上での断面積の重要性を説明した。そして、高解像度の炉心解析を行うには膨大な断面積が必要とされ、そのときの断面積のデータ量が課題となることを述べた。

第2章では、本研究で用いた次元削減手法である、特異値分解及び低ランク近似の概要を説明した。簡易体系での少数の断面積データを例として、次元削減によるデータ圧縮のイメージを示すとともに、次元削減を用いることで断面積データの圧縮が期待できることを示した。また、次元削減と関連した手法である **Reduced Order Modeling (ROM)** の概要を説明し、次元削減後のデータから **ROM** を作成できることを述べた。

第3章では、**PWR17×17** 燃料集合体での巨視的・微視的断面積に対して次元削減を適用することでデータの削減を検討した。そのときに見込まれる断面積データの圧縮率と、再構成された断面積を用いた単一集合体計算による実効増倍率、核分裂反応率、中性子束の計算精度の関係を評価した。**Pin-by-Pin** 単一集合体計算で得られた16群巨視的断面積から行列を作成し次元削減を適用した結果、77.94%のデータ削減が見込まれた。より多くの断面積データに対する圧縮性を検証するため、より詳細な体系である非均質集合体体系での16群巨視的・微視的断面積に対して次元削減を適用した結果、98.08%のデータの削減が達成できた。また、行列内の巨視的断面積の有無による圧縮率への影響を確認するため、微視的断面積のみから行列を作成し次元削減を適用したが、圧縮率に大きな変化は見られなかった。更に、核的観点から核種毎あるいはエネルギー毎の微視的断面積の重要性を考慮するため、原子数密度及び中性子束を用いて重みづけされた巨視的・微視的断面積行列または微視的断面積行列に対して次元削減を適用した。その結果、微視的断面積行列のほうがより多くの特異値を削減でき、そのときの圧縮率は99.72%まで向上した。

第4章では、まず、圧縮した断面積データから **ROM** を作成し、炉心解析用断面積テーブルとして用いることを検討した。本研究で作成した **ROM** では、圧縮された断面積データから展開係数を計算し、ある炉心状態での展開係数を線形補間によって推定している。線形補間を用いた **ROM** の推定精度を検証するため、**ROM** から得られた微視的断面積を用いた単一集合体計算での実効増倍率と中性子束の誤差を評価した。そのときの **ROM** による断面積の推定精度はブランチ状態で考慮した状態変数の種類によって異なり、ホウ素濃度、減速材温度、燃料温度、低ボイド率(40%以下)のブランチ変化に対しては実効増倍率と中性子束

の誤差をそれぞれ 10^{-2} %程度の精度に保って微視的断面積を内挿・再構成できることがわかった。一方で、ボイド率が 60 %以上の状態では内挿によって実効増倍率と中性子束の誤差が 10^{-2} %を超えるケースが存在した。したがって、PWR においてボイドが発生しているという特殊な条件を除けば、本研究で開発した ROM によって任意のブランチ状態での微視的断面積を精度良く推定できる見込みが得られた。

以上の結果をまとめると、次元削減によって断面積データを効率的に圧縮でき、圧縮された断面積データから作成された ROM を用いることで任意の炉心状態での断面積を精度良く推定できるため、本手法が将来的な高解像度炉心解析用断面積テーブルに対して有効な圧縮手法となる可能性が示された。

5.2 今後の課題

今後の課題として、以下の4つが挙げられる。

① 次元削減後の断面積を用いた燃焼計算の実施

本研究では、次元削減後の核種毎の微視的断面積を合成して巨視的断面積を生成し、中性子輸送計算の入力として用いた。一方で、実際の炉心解析での断面積テーブルは燃焼計算への入力としても用いられる。燃焼計算では、核種毎の微視的断面積を用いて次の燃焼度での原子数密度が計算される。本研究での重みづけを用いた圧縮では、反応率の観点から影響の大きい核種を優先的に精度良く再構成しているため、核種によっては燃焼計算での原子数密度の誤差が大きくなる可能性がある。したがって、次元削減後の微視的断面積を用いた燃焼計算の精度評価が必要である。

② 複数の状態変数が増えた場合の瞬時効果を考慮した展開係数補正の検証

本研究で作成した ROM では、1つの状態変数のみが瞬時的に変化した場合の展開係数の補正を取り扱った。一方で、実際の炉心解析では、各状態変数の瞬時補正を組み合わせることで炉心状態の任意の瞬時変化に対する断面積を計算している。本研究の場合、各状態変数に対する展開係数の補正を組み合わせ、任意の瞬時変化に対する断面積を計算できるよう ROM を改良することが求められる。

③ 次元削減後の断面積を用いた PWR 炉心計算の実施

①及び②の課題を解決した上で、マイクロ燃焼計算による各種瞬時補正を考慮した PWR 炉心計算を実施することが望まれる。本研究では、次元削減による断面積の圧縮率は単一集合体計算で得られる実効増倍率、核分裂反応率、中性子束分布の精度から評価した。一方で、本手法で圧縮された断面積テーブルは炉心計算に対する入力であるため、圧縮後の再構成断面積、あるいは ROM によって推定される断面積が炉心計算の精

度に与える影響を検証する必要がある。このとき、実効増倍率や中性子束分布だけでなく、各種反応度係数や燃焼分布といった各出力に対する断面積圧縮誤差、内挿誤差を総合的に評価して、圧縮率を決定することが望まれる。

④ BWR 燃料集合体での断面積に対する次元削減の適用性の確認

本研究では PWR の炉心解析用断面積テーブルに対して次元削減を用いた圧縮を検討したが、BWR の炉心解析用断面積テーブルに対する次元削減の適用性の確認も望まれる。このとき、BWR では体系内にボイドが存在するため、ボイド率の変化に対する実効断面積の取り扱いは PWR の場合よりも重要となる。本研究では、高ボイド率での断面積に対する ROM の推定精度が比較的低いという結果が得られた。本研究で用いた PWR の一般的なケースマトリックスにおいて、基準状態でのボイド率は 0%としている。そのため、全ステートポイントでの断面積データのうちボイド率 0%での断面積が占める情報量は多く、結果として高ボイド率での断面積を再現する基底が削減されていると考えられる。ボイド率の変化が反応率に与える影響は大きいため、BWR 炉心解析用断面積テーブルに対する次元削減では、ボイド率変化を精度良く再現できる ROM を作成することが求められる。

公刊論文一覧

国内学会

- ・ 山本真人, 遠藤知弘, 山本章夫, 日本原子力学会2018年秋の大会, 岡山大学, 2M19, 9月5日-7日 (2018).
- ・ 山本真人, 遠藤知弘, 山本章夫, 日本原子力学会2019年秋の大会, 富山大学, 1J02, 9月11日-13日 (2018).

国際学会

- ・ M. Yamamoto, T. Endo, A. Yamamoto, *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **119**, pp.1226-1228 (2018).
- ・ M. Yamamoto, T. Endo, A. Yamamoto, *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **121**, pp.1309-1312 (2019).
- ・ M. Yamamoto, T. Endo, A. Yamamoto, *Proc. RPHA19*, Osaka, Dec. 2-3, 2019 (2019).