修士論文

エネルギーに関する中性子束の展開基底を 用いた共鳴計算手法に関する研究

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

近藤諒一

令和3年2月

第1章	序論	4
1.1	背景	4
1.2	共鳴計算の概要	5
1.2	.1 核計算の流れ	5
1.2	.2 共鳴計算	8
1.2	.3 主な共鳴の効果	
1.3	従来の共鳴計算手法	
1.3	.1 超詳細群計算	
1.3	.2 等価原理	
1.3	.3 サブグループ法	
1.3	.4 従来手法の課題	
1.4	本研究の目的	
1.5	本論文の構成	17
第2章	エネルギーに関する展開基底を用いた共鳴計算手法	
2.1	本章の概要	
2.2	中性子東モーメントに関する輸送方程式の導出	
2.3	エネルギーに関する直交基底の作成	21
2.3	.1 直交基底を作成するスペクトルの選定	21
2.3	 ・2 特異値分解による直交基底の作成	21
2.3	.3 RSE 法の適用例	
2.4	MOC を用いた RSE 法の実装	
2.5	RS E 法の計算手順	
2.6	本章のまとめ	
第3章	ベンチマーク体系を用いた RSE 法の適用性検討	
3.1	本章の概要	
3.2	マルチセル体系	
3.2	.1 計算条件	
3.2	.2 計算結果	
3.3	燃料内に温度分布を持つ単一セル体系	45
3.3	.1 計算条件	45
3.3	.2 計算結果	46
3.4	単一集合体体系	
3.4	.1 計算条件	
3.4	.2 計算結果	54
3.5	中性子源を考慮した基底を用いた RSE 計算	55
3.5	.1 直交基底による中性子源の展開	55
3.5	.2 計算条件	
3.5	.3 計算結果	

目次

3.6	本章0	のまとめ	60
第4章	RSI	E 法の高速化	61
4.1	本章(の概要	61
4.2	低ラン	ンク近似	61
4.2.	1	特異値の寄与率を用いた低ランク近似	61
4.2.2	2 言	計算条件	62
4.2.	3 言	計算結果	65
4.3	MOC	における離散化条件	69
4.3.	1 言	計算条件	69
4.3.2	2 言	計算結果	70
4.4	RSE 🧎	法の輸送計算におけるエネルギー群構造	74
4.4.	1 棋	既要	74
4.4.2	2 言	計算条件	74
4.4.	3 言	計算結果	78
4.5	減速□	中性子源の取り扱い	81
4.5.	1 🗖	中性子源の取り扱い	81
4.5.2	2 言	計算条件	86
4.5.	3 言	計算結果	86
4.6	本章0	のまとめ	91
第5章	結論	<u>这</u> 冊	92
5.1	まとぬ	ø	92
5.2	今後0	の課題	94
参考文南	犬		96
公刊論文	て一覧.		99

第1章 序論

1.1 背景

我が国における原子力発電の重要性は二つの観点から説明できる。一つ目は、エネルギ ーセキュリティである。日本における一次エネルギー自給率は1割を下回っており、9割 以上を輸入に頼っている^[1]。海外の情勢に影響されることなく、エネルギーを安定供給す るためには、エネルギーミックス、すなわち、エネルギー供給方法の多様化が重要であ る。その中で、少ない燃料で長期間の発電が可能であることから準国産といわれる原子力 が重要となり得る。もう一つは、地球温暖化の抑制である。2015年に採択された気候変動 に関する国際的な枠組みであるパリ協定^[2]に参加する日本は、先進国として排出量の削減 に大きな責任がある。CO2 排出量の少ない発電方法には、原子力発電、風力発電や太陽光 発電などの再生可能エネルギーの利用が挙げられる。これらの中でも、原子力発電は比較 的長期にわたって安定的な電力供給を実現してきた実績がある。したがって、全体に占め る原子力の割合を増やすことが、CO2 排出量削減の選択肢になり得る。

一方で、原子力発電では、核燃料を取り扱うことから、十分な安全性の確保が必要であ る。2011年の福島第一原子力発電所事故では、原子炉の冷却機能の喪失により、燃料が溶 融し、最終的には格納容器破損によって公衆への放射性物質の放出が発生する事態となっ た。原子力に対する信頼を回復し、今後もその運用を続けていくためには、より一層の安 全性向上が必要である。

原子力発電の最も重要な構成要素の一つが、核分裂反応によってエネルギーを発生させ る炉心である。炉心における中性子の挙動を正確に把握することが、原子力発電の安全確保 の基礎であり、また、経済性の向上にもつながる。日本で運転されている商業用の軽水炉で は、事前に数値計算によるシミュレーションを行うことで、その経済性や安全性を確認して いる^{[3][4]}。これは炉心解析と呼ばれる。

現在の炉心解析では、ボルツマン輸送方程式^[5]を解くことで中性子の挙動を計算し炉心特 性を得ている。実際の炉心に対して解析的に輸送方程式を解くことは不可能であるため、数 値計算を利用している。しかしながら、現代の計算機能力の観点から、炉心の複雑な形状や 核反応断面積のエネルギー依存性を忠実に取り扱いつつ、中性子と原子核の相互作用を正 確に取り扱うことは現実的ではない。これまでの炉心解析では様々な近似的なモデルや手 法を取り入れることにより炉心特性を予測しているが、これを高度化することが原子力発 電の安全性向上につながると言える。

ここで、炉心解析における核設計に注目する。核設計では、単一セル等の小規模体系にお いて詳細な空間・エネルギー依存性を考慮する計算から、規模を拡大しつつ、空間・エネル ギー依存性の粗い計算を行うという多段階の計算が行われる。これを大きく分類すると共 鳴計算、格子計算、炉心計算の三つに分けられる。本研究では、この中でも最上流にあたる 共鳴計算に注目して、その高度化に取り組む。

1.2 共鳴計算の概要

本節では、共鳴計算の概要について説明する。まず核計算において共鳴計算が占める役割 を示した後、共鳴計算の概要と共鳴による効果を示す。

1.2.1 核計算の流れ

原子炉内における中性子と原子核の相互作用はボルツマン方程式の輸送方程式で記述で きる。定常状態のボルツマン方程式を式(1.2.1)に示す^[5]。

 $\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$

$$= \int_{0}^{\infty} dE' \int_{4\pi} d\mathbf{\Omega}' \Sigma_{s}(\mathbf{r}, E' \to E, \mathbf{\Omega}' \to \mathbf{\Omega}) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E')$$

$$+ \frac{\chi(E)}{4\pi} \frac{1}{k_{eff}} \int_{0}^{\infty} dE' \int_{4\pi} d\mathbf{\Omega}' \nu \Sigma_{f}(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}') \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E')$$
(1.2.1)

各変数は以下のものを示す。

- **r**: 位置
- **Ω**: 中性子の飛行方向
- E: 中性子のエネルギー
- 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
- Σ_f : 巨視的核分裂断面積
- χ: 核分裂スペクトル
- ν: 核分裂あたりに放出される中性子の数
- *k_{eff}*: 実効増倍率

理論的には、全炉心に対して式(1.2.1)を解くことができれば、炉心における中性子束および反応率を得ることができる。しかしながら、式(1.2.1)には、位置 $r(3 \ \text{変数})$ 、角度 $\Omega(2 \ \text{gx})$ 、エネルギーEの計 6 つの独立した変数が含まれ、直接的に解くことは難しい。したがって、現在の炉心解析では各変数を離散化した数値計算によって、ボルツマン方程式を近似的に解いている。

ボルツマン方程式を近似的に解く手法は、拡散方程式や衝突確率法、S_N法、Characteristics 法など^[6]、様々な手法が開発・適用されてきた。しかしながら、どの計算手法を用いても、 空間やエネルギーが詳細なまま全炉心を計算することは計算コストの観点から現実的では ない。したがって、これまでの炉心解析では、小規模な体系で空間やエネルギーを詳細に取 り扱う計算を行い、離散化の程度を大きくしつつ体系を拡張していくという多段階の計算 方法がとられてきた^{[7][8]}。

炉心解析における核設計の流れの一例を図 1.1 に示す。



図 1.1 炉心核設計の流れ^[8]

図 1.1 の核設計は、格子計算と炉心計算の2段階に分かれている。格子計算の目的は、詳細な空間とエネルギーで輸送計算を行い、集合体内で均質化、群縮約された実効断面積を得ることである。炉心計算では、格子計算で得られた実効断面積を入力として、中性子束分布や出力分布などを計算する。炉心計算では様々な燃料装荷パターンで計算を行うことから、格子計算の段階で均質化、群縮約された断面積を求めておくことにより、効率化を図っている。

格子計算の流れを図 1.2 に示す。



図 1.2 格子計算の流れ^[8]

図 1.2 の格子計算は、共鳴計算と輸送計算の2つに分けられる。輸送計算では数十群から 数百群のエネルギー群を取り扱う。一方で、断面積ライブラリはエネルギー的に連続に近い 形で与えられているため、あらかじめ群縮約する必要がある。この群縮約の過程は共鳴計算 と呼ばれる。

以上より、核設計は共鳴計算、格子計算、炉心計算の3つに分類することができる。本研 究では、最上流にあたる共鳴計算の手法について検討を行う。

1.2.2 共鳴計算

共鳴計算とは、格子計算の入力となる実効断面積を求める過程のことである^[7]。すなわち、 断面積ライブラリで与えられるエネルギー的に連続に近いような数万群の断面積を、数十 群から数百群まで群縮約することである。

例えば、JENDL-4.0^[9]に含まれる U-238 の断面積を図 1.3 に示す。1 eV から 10⁵ eV にかけ て急峻で複雑な形をしており、この領域の断面積は共鳴断面積と呼ばれる。



図 1.3 断面積ライブラリに含まれる U-238 の断面積(JENDL-4.0)

また、UO2 燃料セルにおける共鳴計算で得られる U-238 の実効全断面積を連続エネルギー断面積と比較して図 1.4 に示す。急峻な形の共鳴断面積が、エネルギー群内で一定値を取るように群縮約されていることがわかる。



図 1.4 U-238 の連続エネルギー断面積と実効断面積の一例

核計算の最終的な目的は、反応率を正確に評価することである。したがって、実効断面積 は式(1.2.2)に示すように反応率が保存されるように計算される。

$$\sigma_{g,eff} = \frac{\int_{\Delta E_g} \sigma(E)\phi(E)dE}{\int_{\Delta E_g} \phi(E)dE}$$
(1.2.2)

各変数は以下を示す。

σ(*E*): ポイントワイズ断面積

φ(E): ポイントワイズ中性子束

g: エネルギー群

 ΔE_g : g群のエネルギー幅

 $\sigma_{q,eff}$: g群の実効断面積

式(1.2.2)では、ポイントワイズの断面積(連続エネルギー断面積)をポイントワイズの中 性子束で重みづけすることにより、あるエネルギー群内の平均的な断面積を求めている。ポ イントワイズの断面積は断面積ライブラリから与えられるため、共鳴計算で計算するべき パラメータはポイントワイズの中性子束である。代表的な共鳴計算手法は 1.3 節に記述す る。

1.2.3 主な共鳴の効果

先に述べた通り共鳴領域では局所的に断面積が非常に大きくなるため、大きな共鳴が存 在するエネルギー領域では、中性子が吸収され、中性子束が落ち込む。例えば、UO2 燃料内 の中性子束は図 1.5 のようになる。



このように共鳴のピークに対応するエネルギーの中性子束が歪み、反応率が低下する効 果は、共鳴のエネルギー自己遮蔽効果と呼ばれる^{[7][10]}。

エネルギー自己遮蔽効果は最も単純な共鳴効果であるが、その他にも共鳴断面積によっ て現れる効果がある。代表的な共鳴の効果を以下に示す。

A) 空間自己遮蔽効果

空間自己遮蔽効果とは、燃料領域に入射する中性子が燃料領域外側で吸収され、燃料内側の中性子束が小さくなる効果である。減速材領域で減速された中性子が共鳴エネルギー領域に達すると、共鳴断面積の大きい燃料で吸収される。図 1.6 に UO2 燃料内を円環状に分割した単一セルで計算された中性子束分布を示す。エネルギー領域は U-238 の大きい共鳴がある 6.7 eV 付近である。図 1.6 のように、燃料の表面付近でほとんどの中性子が吸収され、内部まで到達する中性子が少ない。



図 1.6 UO2 燃料内中性子束の径方向の分布(超詳細群計算)

B) 共鳴干渉効果

共鳴干渉効果とは、複数の共鳴核種による共鳴吸収により、中性子束のエネルギー依存性 が複雑になる効果である。例として、1 eV から 10 eV における MOX 燃料内の主な共鳴核種 のポイントワイズ断面積を図 1.7 に示す。



図 1.7 MOX 燃料に含まれる核種のポイントワイズ全断面積

UO2 燃料及び MOX 燃料では、共鳴核種となり得る重核種のうち U-238 の割合が多いため、U-238 による共鳴吸収が支配的である。そのため、その他の重核種(U-235、Pu-239 など)の反応率を精度良く計算する際、U-238 と共鳴干渉効果を考慮することが必要となる。例えば、図 1.7 において、6.8 eV に U-238 の共鳴が、その裾野部分に U-235 の共鳴が存在する。この部分のエネルギースペクトルは、U-238 が存在する場合としない場合で全く異なるため、

U-235の反応率は大きな影響を受ける。また、燃焼計算の過程において、多数の核種が生成し、これらの反応率を計算する際にも、共鳴干渉効果の考慮が重要となる場合がある^[10]。

C) スペクトル干渉効果

スペクトル干渉効果とは、異なる組成の燃料が隣接する場合に、互いの共鳴吸収が異なる ことによる影響が伝播する効果である。一般的に、共鳴計算は同一の単一セルが無限に配列 された体系を対象とする。実際には、燃焼とともに燃料棒ごとの組成が変化し、異なる組成 の燃料が並んでいることになる。そのため、隣接する燃料からの影響を考慮する必要がある。 このような空間的な共鳴干渉効果は、一般的にスペクトル干渉効果と呼ばれている。



図 1.8 異なる組成の燃料が隣接する場合のイメージ図

1.3 従来の共鳴計算手法

本節では、代表的な三つの共鳴計算手法について説明する。それぞれの手法の特徴を述べ、 共鳴計算における課題を示す。

1.3.1 超詳細群計算

超詳細群計算^{[10][11]}は、数十万群の連続に近い詳細なエネルギー依存性を取り扱う輸送計 算により、図 1.5 のような詳細な中性子束を得る直接的な手法である。精度が高い一方で、 多くの計算資源を必要とすることがら、一般的に単一セル等の小規模体系までに適用され る。輸送計算手法には衝突確率法や Characteristics 法が用いられる^[12]。

超詳細群計算は直接的な手法であるが、共鳴領域の実効断面積を得るという観点から、以下の近似が加えられている。まず、輸送計算は固定源計算であり、核分裂源は近似的に固定値として与えらえる。これは共鳴エネルギー領域における核分裂源が散乱源と比較して小さいからである^[13]。さらに、散乱源は、弾性散乱による下方散乱のみを考慮する減速方程式^{[5][10]}と同様の形で取り扱う。減速方程式を以下に示す。

$$\Sigma_t(E)\phi(E) = \int_0^\infty dE' \,\Sigma_s(E' \to E)\phi(E') \tag{1.3.1}$$

超詳細群計算は計算コストが大きいという欠点がある一方で、中性子の減速を考慮した 精度の高い中性子束が得られ、前述の共鳴干渉/スペクトル干渉効果を陽に取り扱うことが できるという利点がある。本論文では、超詳細群計算を参照計算として利用している。

1.3.2 等価原理

等価原理^{[10][14]}は歴史的な手法であり、計算コストの低さから最も広く使われている手法 である。この手法では、非均質体系における中性子束の空間的な依存性を、均質体系におけ るバックグラウンド断面積というパラメータを用いて間接的に取り扱う。すなわち、非均質 体系と均質体系の「等価性」を利用した手法であると言える。

ここで、代表的な近似手法である Narrow Resonance 近似(NR 近似)^[10]を考える。NR 近似 とは、共鳴の幅が十分に狭く、中性子束の歪みが無視できるというものである。例えば、均 質体系に共鳴核種*r*と非共鳴核種*m*が含まれる場合、NR 近似による中性子束は式(1.3.2)で表 現できる。

$$\phi(E) = \frac{N_r \sigma_{p,r} + N_m \sigma_{p,m}}{N_r \sigma_{t,r}(E) + N_m \sigma_{p,m}} \frac{1}{E}$$
(1.3.2)

r: 共鳴核種のインデックス
 m: 非共鳴核種のインデックス
 N: 原子数密度
 σ_t: 微視的全断面積

ここで、バックグラウンド断面積 σ_b を式(1.3.3)で定義すると、式(1.3.2)は式(1.3.4)のようになる。

$$\sigma_b = \frac{N_m \sigma_{p,m}}{N_r} \tag{1.3.3}$$

$$\phi(E) = \frac{\sigma_{p,r} + \sigma_b}{\sigma_{t,r}(E) + \sigma_b} \frac{1}{E}$$
(1.3.4)

式(1.3.3)に示すように、バックグラウンド断面積は共鳴核種と非共鳴核種の原子数密度の 比である。軽水炉のように水の減速材中に UO2 燃料がある体系では、U238 を代表とする共 鳴核種に非共鳴核種の水素が含まれると仮定し、その割合を変化させることで中性子束の 歪み度合を調整している。例えば、UO2 の均質体系において、NR 近似により得られる中性 子束を図 1.9 に示す。エネルギー領域は U-238 の大きい共鳴がある 6.7 eV 付近である。



図 1.9 様々なバックグラウンド断面積における UO2 均質体系の中性子束 (凡例はバックグラウンド断面積[barn])

図 1.9 より、バックグラウンド断面積が小さい、すなわち、共鳴核種の割合が大きいほど には中性子束は大きく歪むことがわかる。

前述の図 1.6 と図 1.9 を比較すると、非均質体系における中性子束の歪みと均質体系におけるバックグラウンド断面積による歪みが類似していることがわかる。等価原理ではこ

の性質を利用している。あらかじめ均質体系においてバックグラウンド断面積に対する実 効断面積の値をテーブル化し、非均質体系のバックグラウンド断面積を評価することによ り、対応する実効断面積を得ることができる。バックグラウンド断面積に対する実効断面積 のテーブル化の例を図 1.10 に示す。



バックグラウンド断面積

図 1.10 均質体系で計算される実効断面積とバックグラウンド断面積の関係

等価原理では、均質体系で得られる情報から非均質体系のエネルギー依存性を推定する ため、計算コストは非常に小さい。一方で、計算体系の非均質性が高い場合には、手法の適 用には限界が生じる。また、エネルギー的また空間的な共鳴干渉効果を正確に取り扱うこと は困難である。

1.3.3 サブグループ法

サブグループ法^{[10][15]}は、断面積の大きさに応じたエネルギー群に分割して、実効断面積 を作成する手法である。分割されたエネルギー群はサブグループと呼ばれる。サブグループ を作成するイメージを図 1.11 に示す。



図 1.11 サブグループ法のイメージ

断面積の大きさに応じてエネルギー群をサブグループに分割することで、サブグループ 内の中性子スペクトルの変化を少なくし、共鳴領域における反応率を比較的正確に評価す ることができる。また、数群のサブグループで精度が得られる^[16]ことから、計算コストを抑 えることができる。

実際には、サブグループの構造が特定のエネルギー範囲と一対一に対応しているわけで はなく、バンド確率と対応する実効断面積(バンド断面積)という形で確率的に与えられる。 したがって、燃料内に温度分布があり、ドップラー効果を考慮する必要がある場合など、共 鳴の形が変化する場合には直接適用することが困難である。また、複数の核種による共鳴干 渉効果やスペクトル干渉効果を取り扱うことも難しい。さらに、バンド確率の決定には NR 近似が用いられており、十分な精度が得られない場合がある。

1.3.4 従来手法の課題

ここで、先に述べた代表的な三つの従来手法の課題をまとめる。

まず、超詳細群計算は、共鳴断面積のエネルギー依存性を詳細に扱うことから、非常に高 い精度である一方で、計算コストが大きく小規模な体系への適用に限られる。

等価原理は、均質体系であらかじめバックグラウンド断面積に対する実効断面積の関数 を求めておくことで、計算対象の実効断面積を内挿する手法である。非均質体系で詳細なエ ネルギーを陽に取り扱うことがないので計算コストは小さい。一方で、均質体系と非均質体 系をあたかも「等価」であるように近似することから、その精度には限りがある。

サブグループ法は、共鳴断面積の大きさに応じて効率的にエネルギー群を作成すること で、比較的高い精度と速度を達成している。しかしながら、サブグループの作成に近似をお 用いていることや共鳴干渉効果/スペクトル干渉効果を取り扱うことができないといった問 題がある。

以上より、従来の共鳴計算手法の特徴を表 1.1 に示す。これまでの歴史において、高い計 算精度と計算速度を両立する手法は開発されていないと言える。

	計算精度	計算速度	課題
超詳細群計算	Ø	Δ	非均質大規模体系
			複雑な非均質性
举任百田	^		共鳴干涉効果
守恤尿垤		スペクトル干渉効果	
			空間自己遮蔽効果
			複雑な非均質性
サブガループ社	0		温度分布付体系
リノクルーノ伝	0	0	スペクトル干渉効果 空間自己遮蔽効果 複雑な非均質性 温度分布付体系 共鳴干渉効果 スペクトル干渉効果
			スペクトル干渉効果

表 1.1 代表的な共鳴計算手法の特徴

1.4 本研究の目的

先に述べたとおり、これまでの共鳴計算手法において、計算の精度と速度を両立するよう な手法は存在しなかった。そこで、本研究では新しく提案された共鳴計算手法である RSE 法^[17]の基礎的な検討を行う。本研究の目的は二つある。一つは、共鳴効果が現れるベンチマ ーク体系において、本手法で得られる実効断面積の精度を確認することである。もう一つは、 アルゴリズムの改良や計算条件のパラメータサーベイを行い、本手法の高速化を試みるこ とである。

1.5 本論文の構成

本論文は全5章で構成される。本章では、背景および目的について述べた。

第2章では、新しい共鳴計算手法である RSE 法の理論について説明する。簡単な適用例 を示すとともに、本手法の特徴を述べる。

第3章では、ベンチマーク体系に RSE 法を適用する。最も精度の高い超詳細群計算と比較することで、本手法が主な共鳴の効果を取り扱うことができることを確認する。また、 RSE 法の基礎方程式に関する妥当性を確認する。

第4章では、RSE 法の高速化に関する検討を行う。計算条件に対するパラメータサーベ イや手法の改良を行い、本手法の高速化を試みる。

第5章では、結論を述べる。本論文で示された成果をまとめるとともに、RSE法の向上に 必要な検討事項を述べる。

第2章 エネルギーに関する展開基底を用いた共鳴計算手法

2.1 本章の概要

本章では、エネルギーに関する展開基底を用いた共鳴計算手法である RSE 法 (Resonance calculation using energy Spectrum Expansion method) について記述する。

RSE 法ではエネルギー群内のポイントワイズ中性子束をエネルギーに関する直交基底で 展開する。直交基底を用いて展開することを考慮すると、中性子束に対する展開係数(以後、 中性子束モーメント)に対する輸送方程式が導かれる。中性子束モーメントに対する輸送方 程式は従来の方程式と非常に類似しており、数値的に解くことが可能である。中性子束モー メントに対する輸送方程式の導出は 2.2 節に記述する。

直交基底は複数の背景断面積を与えた均質体系の超詳細群スペクトルから生成する。こ の過程では、特異値分解(SVD)と低ランク近似(LRA)を用いることで効率的に基底を抽 出する。本手法の計算コストは直交基底が計算体系のスペクトルの特徴をどの程度よく捉 えているかに依存するため、直交基底の選定が極めて重要である。2.3 節では、直交基底の 作成や実際の適用を交えて RSE 法の特徴を示す。

原理的に RSE 法はどんな輸送計算手法にも適用が可能である。本論文では、近年の集合体計算における輸送計算手法で主流となっているキャラクタリスティックス法(Method Of Characteristics: MOC)を用いて RSE 法を実装する。RSE 法の MOC への適用は 2.4 節に示す。

最後に、RSE 法の計算の流れを 2.5 節に示す。

2.2 中性子東モーメントに関する輸送方程式の導出

本節では、従来の輸送方程式を出発点として、エネルギーに関する中性子束の展開基底を用いた輸送方程式を導出する。

まず、固定源計算の輸送方程式は式(2.2.1)で記述される。

 $\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$

$$=\frac{1}{4\pi}\int_{0}^{\infty} dE' \int_{4\pi} \Sigma_{s}(\mathbf{r}, E' \to E, \mathbf{\Omega}' \to \mathbf{\Omega}) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E') d\mathbf{\Omega}' + q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$$
(2.2.1)

ここで、**r**は位置、**Ω**は角度、*E*はエネルギー、 $\Psi(\mathbf{r}, \Omega, E)$ は角度中性子束、 $\Sigma_t(\mathbf{r}, E)$ は巨視的 全断面積、 $\Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega)$ は巨視的散乱断面積、 $q(\mathbf{r}, \Omega, E)$ は固定源を表す。

共鳴計算に対する非等方散乱の影響は小さいことから^[14]、等方散乱および等方な中性子 源を仮定すると $\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E)$

$$= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \to E) \int_{4\pi} \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E') d\mathbf{\Omega}' dE' + \frac{1}{4\pi} Q(\mathbf{r}, E)$$

$$= \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \to E) \phi(\mathbf{r}, E') dE' + \frac{1}{4\pi} Q(\mathbf{r}, E)$$
(2.2.2)

ここで、

$$\phi(\mathbf{r}, E') = \int_{4\pi} \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E') d\mathbf{\Omega}'$$

$$Q(\mathbf{r}, E) = \int_{4\pi} q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) d\mathbf{\Omega}$$
(2.2.3)

である。

あるエネルギー範囲 (g or g', $1 \le g \le G$, $1 \le g' \le G$)を考慮すると式(2.2.3)は次のよう に表される。

 $\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E_g) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E_g) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E_g)$

$$=\sum_{g'=1}^{G}\frac{1}{4\pi}\int_{\Delta E_{g'}}\Sigma_{s}(\mathbf{r},E_{g'}\to E_{g})\phi(\mathbf{r},E_{g'})dE_{g'}+\frac{1}{4\pi}Q(\mathbf{r},E_{g})$$
(2.2.4)

ここで、 E_g はg群のエネルギー領域である。

角度中性子束、全中性子、外部中性子源をエネルギーに関する直交基底で展開すると以下 のように記述される。

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E_g) = \sum_{i=1}^{N} f_{i,g}(E_g) \Psi_{i,g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$$
(2.2.5)

$$\phi(\mathbf{r}, E_g) = \int_{4\pi} \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E_g) d\mathbf{\Omega} = \int_{4\pi} \sum_{i=1}^N f_{i,g}(E_g) \Psi_{i,g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega}$$
$$= \sum_{i=1}^N f_{i,g}(E_g) \phi_{i,g}(\mathbf{r})$$
(2.2.6)

$$Q(\mathbf{r}, E_g) = \sum_{i=1}^{N} f_{i,g}(E_g) Q_{i,g}(\mathbf{r})$$
(2.2.7)

ここで、iは展開次数、Nは展開次数の最大値、 $f_{i,g}(E_g)$ は直交基底、 $\Psi(\mathbf{r}, \Omega, E_g)$ は角度中性子 束の展開係数、 $Q_{i,g}(\mathbf{r})$ は中性子源の展開係数である。また、全中性子束の展開係数 $\phi_{i,g}(\mathbf{r})$ は 式(2.2.8)で表される。

$$\phi_{i,g}(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} \Psi_{i,g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega}$$
(2.2.8)

基底の直交性は式(2.2.9)で表される。

$$\int_{\Delta E_g} f_{i,g}(E_g) f_{j,g}(E_g) dE_g = \delta_{ij}$$
(2.2.9)

ここで、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。基底の直交性を利用すると、それぞれの展開係数は式(2.2.10)で得られる。

$$\Psi_{i,g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \int_{\Delta E_g} f_{i,g}(E_g) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E_g) dE_g$$

$$\phi_{i,g}(\mathbf{r}) = \int_{\Delta E_g} f_{i,g}(E_g) \phi(\mathbf{r}, E_g) dE_g$$

$$Q_{i,g}(\mathbf{r}) = \int_{\Delta E_g} f_{i,g}(E_g) Q(\mathbf{r}, E_g) dE_g$$
(2.2.10)

式(2.2.4)に式(2.2.5)、式(2.2.6)、式(2.2.7)を代入すると式(2.2.11)が得られる。

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \sum_{i=1}^{N} f_{i,g}(E_g) \Psi_{i,g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E_g) \sum_{i=1}^{N} f_{i,g}(E_g) \Psi_{i,g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$$

$$= \sum_{g'=1}^{G} \frac{1}{4\pi} \int_{\Delta E_{g'}} \Sigma_s(\mathbf{r}, E_{g'} \to E_g) \sum_{j=1}^{N} f_{j,g'}(E_{g'}) \phi_{j,g'}(\mathbf{r}) \, dE_{g'} \qquad (2.2.11)$$

$$+ \frac{1}{4\pi} \sum_{i=1}^{N} f_{i,g}(E_g) Q_{i,g}(\mathbf{r})$$

式(2.2.11)の両辺に基底 $f_{i,g}(E_g)$ をかけ、エネルギー範囲 ΔE_g で積分することで、式(2.2.9)の 直交性より式(2.2.12)が得られる。式(2.2.12)が RSE 法における中性子東モーメントに対する 輸送方程式となる。

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Psi_{n,g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sum_{i=1}^{N} \Sigma_{t,g,n,i}(\mathbf{r}) \Psi_{i,g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$$

$$= \frac{1}{4\pi} \sum_{g'=1}^{G} \sum_{j=1}^{N} \Sigma_{s,jg' \to ng}(\mathbf{r}) \phi_{j,g'}(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi} Q_{n,g}(\mathbf{r})$$
(2.2.12)

ここで、

$$\Sigma_{t,g,n,i}(\mathbf{r}) = \int_{\Delta E_g} f_{n,g}(E_g) \Sigma_t(\mathbf{r}, E_g) f_{i,g}(E_g) dE_g$$

$$\Sigma_{s,jg' \to ng}(\mathbf{r}) = \int_{\Delta E_g} \int_{\Delta E_{g'}} f_{n,g}(E_g) \Sigma_s(\mathbf{r}, E_{g'} \to E_g) f_{j,g'}(E_{g'}) dE_{g'} dE_g$$
(2.2.13)

である。式(2.2.12)と式(2.2.4)に示した従来の多群輸送方程式を比較すると非常に類似していることがわかる。一方で、相違点もある。式(2.2.12)の左辺第2項の衝突項はN個の足し合わせとなっており、式(2.2.12)はエネルギーg群に対するN個の一階連立微分方程式である。また、式(2.2.13)の散乱マトリックス $\Sigma_{s,jg' \to ng}(\mathbf{r})$ は従来のものと比べて複雑であり、g'群からg群のエネルギー群間の輸送に加えて、j次からn次の展開次数間の輸送が含まれる。

2.3 エネルギーに関する直交基底の作成

前節では中性子束がエネルギーに関する直交基底で展開されると仮定して、中性子束モ ーメントに関する輸送方程式を導出した。本節では、直交基底の作成方法を記述する。

2.3.1 直交基底を作成するスペクトルの選定

ここでは、直交基底を作成するための中性子束の選定方法について記述する。理想的には、 単一集合体や全炉心などの計算体系全体に対する超詳細群計算を行うことができれば、得 られた超詳細群スペクトルから基底を作成することが可能である。しかしながら、前述の通 り規模の大きい体系に対する超詳細群計算は計算時間の観点から非現実的である。そもそ も、規模の大きい体系で超詳細群計算が可能であれば、その超詳細群計算の結果を用いて実 効断面積の計算も可能である。

そこで、現実的な計算時間で計算体系のスペクトルのエネルギー依存性をよく表すよう な直交基底を作成する方法として以下のものが考えられる。

- (a) 単一セルなどの小規模体系において、複数の代表的なステートポイント、燃料組成、温 度の条件で超詳細群計算を行う。
- (b) 均質体系において、複数の代表的な燃料組成、温度、背景断面積の条件で超詳細群計算 を行う。
- (c) 均質体系において、複数の代表的な共鳴核種、温度、背景断面積の条件で超詳細群計算 を行う。

(a)は、単一セルなどの小規模な形状で超詳細群計算を行うという現在の手法を取り入れ るものである。一方で、(b)や(c)は、適当な背景断面積を用いて近似的に超詳細群スペクト ルを再現するという等価原理の考え方に基づくものである。(c)は格子計算用多群断面積ラ イブラリの作成する手法として使われている。(c)の利点は単純であることだが、異なる核種 間の共鳴干渉効果を考慮できない。一方で、(b)は計算時間を抑えたまま、直接的に共鳴干渉 効果を取り扱うことができる。したがって、本手法では(b)のように、計算体系に含まれる組 成の均質体系に対して、複数の温度や背景断面積の条件を与えた超詳細群計算を行う。

得られた複数の超詳細群スペクトルから、計算体系のスペクトルを近似的に再構成する 基底を抽出する。式(2.2.5)に示すように、直交基底はエネルギー群に依存しており、エネル ギー群ごとの基底が必要である。また、計算体系の全領域に対して同一の直交基底を用いる ため、直交基底の作成に用いるスペクトルは計算体系の全領域の条件を網羅するように作 成する必要がある。

2.3.2 特異値分解による直交基底の作成

直交基底の作成には特異値分解 (SVD) と低ランク近似 (LRA) ^{[18][19]}を用いる。この手法 は ROM^[20]の概念の一つである。

まず、特異値分解のより超詳細群スペクトルから直交基底を抽出する。例えば、m種類の

超詳細群スペクトルを考え、あるエネルギー群にt個の超詳細群があるとする。これらを並べた $m \times t$ の行列Aを式(2.3.1)に示す。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \phi_1(E_1) & \cdots & \phi_1(E_t) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_m(E_1) & \cdots & \phi_m(E_t) \end{pmatrix}$$
(2.3.1)

式(2.3.2)に示すように、行列Aは行列U = $(\vec{u}_1, \vec{u}_2, ..., \vec{u}_m)$ とV = $(\vec{v}_1, \vec{v}_2, ..., \vec{v}_t)$ を用いて、 $m \times t$ の対角行列**Σ**に変形される。

$$^{\mathrm{T}}\mathrm{UAV} = \Sigma \tag{2.3.2}$$

ここで

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0\\ 0 & \sigma_2 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots\\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & \ddots & \vdots\\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_m & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$
(2.3.3)

である。

行列**Σ**の対角要素は特異値であり、 $\sigma_1 > \sigma_2 > \cdots > \sigma_i \ge 0$ (1 $\le i \le m$)という特徴を持つ。 mは行列**A**のランクに対応する。行列**U**と**V**がユニタリ行列であるため、式(2.3.2)は以下のように変形される。

$$^{\mathrm{T}}\mathrm{U}\mathrm{A}\mathrm{V}^{\mathrm{T}}\mathrm{V} = \mathrm{U}\Sigma^{\mathrm{T}}\mathrm{V}$$
$$\mathrm{U}\mathrm{U}^{-1}\mathrm{A}\mathrm{V}\mathrm{V}^{-1} = \mathrm{U}\Sigma^{\mathrm{T}}\mathrm{V}$$
(2.3.4)

 $\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma}^{\mathrm{T}} \mathbf{V}$

ここで、Uは左特異ベクトルとVは右特異ベクトルである。特異ベクトルの累積寄与率は式 (2.3.5)で表される。

(The cumulative contribution ratio of the 1st – kth vectors) =
$$\frac{\sum_{i=1}^{k} \sigma_i^2}{\sum_{i=1}^{m} \sigma_i^2}$$
 (2.3.5)

例えば、k番目のベクトルまでの累積寄与率が 0.99 のとき、1 からk番目のベクトルは行列Aの要素の特徴を 99 %再現することになる。すなわち、1 からk番目のベクトルは行列Aの特徴をほとんど捉えていることになる。これは小さい特異値を切り捨てても、大きい特異値とその特異ベクトルによって行列Aが精度よく再構成されるという LRAの概念である。

ランクm (m < t)の行列Aは、以下のように分解される。

$$\mathbf{A} = (\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_m) \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0\\ 0 & \sigma_2 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots\\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & \ddots & \vdots\\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_m & \cdots & 0 \end{pmatrix}^{\mathrm{T}} (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_t)$$
(2.3.6)

行列 A の主要な特徴が 1 からk番目($k \le m$)の特異値で表せるとすると、式(2.3.7)のように近似できる。

$$\mathbf{A} \approx \mathbf{A}' = (\vec{u}_1, \vec{u}_2, \dots, \vec{u}_k) \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_k \end{pmatrix}^{\mathrm{T}} (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_k)$$
(2.3.7)

近 似 さ れ た 行 列 A' は 要 素 が 削 減 さ れ た 直 交 基 底 ^T($\vec{v}_1, \vec{v}_2, ..., \vec{v}_k$) と 展 開 係 数 $\begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_k \end{pmatrix}$ ^T($\vec{v}_1, \vec{v}_2, ..., \vec{v}_k$)で再構成される。特異値分解により得られる行列**V**の一部

を超詳細群スペクトルの直交基底として用いる。

以上より、特異値分解を用いることで超詳細群スペクトルを再構成するための支配的な 展開基底を選出する。本手法で用いる直交基底の効率は特異値の挙動に依存する。もし次数 の増加につれて特異値が急速に減少するのであれば、少数の直交基底で効率的に超詳細群 スペクトルを再構成することができる。

2.3.3 RSE 法の適用例

本節では、RSE 法の適用例を示し、その特徴を確認する。

ここでは、図 2.1 に示す単一セル体系の実効断面積を RSE 法で求めることを考える。燃料には、濃縮度 4.8 wt%の UO2 燃料または富化度 7.2 wt%の MOX 燃料を用いる。温度は全領域で 600 K で、境界条件は反射境界条件である。



表 2.1 は、直交基底を作成するための均質体系の超詳細群スペクトルを計算する際に与 えるバックグラウンド断面積である。

	バックグラウンド断面積 [barn]
燃料	1.00e+10, 2.00e+04, 3.60e+03, 1.00e+03, 2.60e+02, 1.40e+02, 6.40e+01,
(UO ₂ または MOX)	5.20e+01, 2.80e+01, 1.00e+01, 1.00E-03
減速材	1.00e+10
(H ₂ O)	
被覆管	5.00e+06, 5.00e+05, 1.00e+05, 5.00e+04, 1.00e+04, 5.00e+03, 1.00e+03,
(Zirconium)	5.00e+02, 5.00e+01

表 2.1 基底作成に使用する均質体系のスペクトルのバックグラウンド断面積

以下では、U-238の大きな共鳴が存在する XMAS172 群構造の 88 群(6.16 eV - 7.52 eV) に着目する。

例えば、バックグラウンド断面積を与えた UO2 均質体系または MOX 均質体系における 超詳細群スペクトルを図 2.2 に示す。図 2.2 は、600 K の濃縮度 4.8 wt% UO2 均質体系およ び富化度 7.2 wt% MOX 燃料において、超詳細群計算により得られるスペクトルである。共 鳴吸収に起因する落ち込みが大きいスペクトルから、ほとんど落ち込みのないものまでが 含まれることがわかる。





MOX 燃料

図 2.2 バックグラウンド断面積を与えた UO2 または MOX 均質体系における超詳細群ス ペクトル (88 群: 6.16 eV - 7.52 eV)

表 2.1 のバックグラウンド断面積を用いて得らえた均質体系のスペクトルを特異値分解 して得られる特異値と直交基底をそれぞれ図 2.3 と図 2.4 に示す。ただし、図 2.3 の特異値 は最大の特異値の値で規格化されている。







図 2.4 均質体系のスペクトルから得られた直交基底(88 群: 6.16 eV - 7.52 eV)

まず、図 2.3 は片対数プロットにおいて直線状に特異値が変化していることを示してい る。すなわち、次数に対して特異値が急激に減少していることから、得られた基底の寄与は 低次のものが大部分を占めていることになる。したがって、少ない次数で計算体系のスペク トルを再構成できることが示唆される。図 2.4 では、低次の基底は振動が少ないなめらかな 形であり、次数が上がるにつれて振動が多い詳細な形を示している。これは、フーリエ級数 による展開と同様であると考えることができる。すなわち、実際の中性子スペクトルを再現 するために、振動が少ないなめらかな基底と、より細部を表現するための振動が多い複雑な 基底が用いられていると理解できる。

以上の基底を用いて、単一セル体系のスペクトルを再構成する。超詳細群計算で得られる スペクトルを参照値(reference)とし、RSE 法で得られたスペクトルを図 2.5 で比較する。









図 2.5 より、RSE 法で得られたスペクトルは、展開次数が大きくなるほど、参照値のスペクトルに近づいていくことがわかる。また、5 次程度でも参照値のスペクトルに非常に近づくことがわかる。

続いて、RSE 法で得られる実効断面積の精度と展開次数の関係を示す。超詳細群計算で 得られる実効断面積を参照値として、RSE 法で得られる実効断面積との差異を図 2.6 に示 す。





図 2.6 では、3 次から 5 次程度までは実効断面積の参照解との差異が大きいが、それ以降 は差異が小さくなり、10 次程度で実効断面積の精度が飽和していることがわかる。これは、 低ランク近似によりすべての基底を使わずともスペクトルを再構成できることを示唆して おり、計算時間の短縮につながる。実用的な低ランク近似は第4章に記述する。

以上より、RSE 法における直交基底の特徴や展開次数と計算精度の関係を確認することができた。

2.4 MOC を用いた RSE 法の実装

本研究では、RSE 法を適用する輸送計算手法として、近年の格子計算でよく用いられている MOC を用いる。本研究では、2 次元の MOC を対象として説明する。

まず、n次の中性子東モーメントに対する輸送方程式である式(2.2.12)を式(2.4.1)のように 書き直す。式(2.4.1)では簡単のために散乱源と固定源を右辺の*Q_{n,g}*(**r**)にまとめた。

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Psi_{n,g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) + \sum_{i=1}^{N} \Sigma_{t,g,n,i}(\mathbf{r}) \Psi_{i,g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = Q_{n,g}(\mathbf{r})$$
(2.4.1)

MOC の理論に基づき、領域内で中性子束と巨視的断面積が一定と仮定し、中性子の飛行 方向を離散化すると式(2.4.1)は以下のように記述される。

$$\frac{d}{ds}\Psi_{n,g,m,l}(s) + \sum_{i=1}^{N} \Sigma_{t,g,n,i,r}\Psi_{i,g,m,l}(s) = Q_{n,g,r}$$
(2.4.2)

ここで、lは領域rに含まれるセグメント、sはセグメントlにおける中性子の座標、 $\Psi_{n,g,m,l}$ と $Q_{n,g,r}$ はそれぞれn次の角度中性子束と中性子源のモーメント、gはエネルギー群、rは領域、 mは中性子の飛行方向、 $\Sigma_{t,g,n,i,r}$ は領域の平均巨視的全断面積である。

式(2.4.2)の各項は以下のように定義される。

$$\Psi_{n,g,m,l}(s) = \Psi_{n,g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_m)$$

$$Q_{n,g,r} = \frac{1}{4\pi} \frac{\int_{\mathbf{r} \in r} Q_{n,g}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int_{\mathbf{r} \in r} d\mathbf{r}}$$
(2.4.3)
$$\Sigma_{n,g,r} = \frac{\int_{\mathbf{r} \in r} \Sigma_{t,g,n,i}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int_{\mathbf{r} \in r} d\mathbf{r}}$$

$$\Sigma_{t,g,n,i,r} = \frac{\int_{\mathbf{r}\in r} \Sigma_{t,g,n,i}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int_{\mathbf{r}\in r} d\mathbf{r}}$$

式(2.4.1)は従来の MOC の輸送方程式と類似しているが、衝突項が複数の角度中性子束モーメントの線形結合となっている。式(2.4.1)は一階の連立微分方程式であるため、いくつかの数値解法がある。式(2.4.2)の左辺にある $\sum_{i=1}^{N} \Sigma_{t,g,n,i,r} \Psi_{i,g,m,l}(s)$ について反復解法を用いて更新する場合には、式(2.4.2)は以下のように変形される。

$$\frac{d}{ds}\Psi_{n,g,m,l}(s) + \Sigma_{t,g,n,n,r}\Psi_{n,g,m,l}(s) = Q_{n,g,r} - \sum_{i \neq n} \Sigma_{t,g,n,i,r}\Psi_{i,g,m,l}(s)$$
(2.4.4)

式(2.4.4)は、右辺第2項を除いて従来の MOC の輸送方程式と同一であるため、既存の MOC 計算コードの適用が容易である。ここで、右辺第2項Ψ_{i,g,m,l}(s)には角度中性子束が一定で あるという近似が使われる。しかしながら、これまでの検討で全断面積モーメントが対角優 位でない ($\Sigma_{t,g,n,i,r} > \Sigma_{t,g,n,n,r}$, $i \neq n$) ことが確認されており、反復解法が適用できないと見 込まれる。

代替として、本研究では式(2.4.2)を式(2.4.5)のような行列式に書き直し、直接的に解くこととした。

$$\frac{d}{ds} \vec{\Psi}_{g,m,l}(s) + \Sigma_{t,g,r} \vec{\Psi}_{g,m,l}(s) = \vec{Q}_{g,r}$$

$$\vec{\Psi}_{g,m,l}(s) = {}^{\mathrm{T}}(\Psi_{1,g,m,l}(s) \quad \Psi_{2,g,m,l}(s) \quad \dots \quad \Psi_{N,g,m,l}(s))$$

$$\Sigma_{t,g,r} = \begin{pmatrix} \Sigma_{t,g,1,1,r} & \Sigma_{t,g,1,2,r} & \dots & \Sigma_{t,g,1,N,r} \\ \Sigma_{t,g,2,1,r} & \Sigma_{t,g,2,2,r} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \Sigma_{t,g,N,1,r} & \dots & \dots & \Sigma_{t,g,N,N,r} \end{pmatrix}$$

$$\vec{Q}_{g,r} = {}^{\mathrm{T}}(Q_{1,g,r} \quad Q_{2,g,r} \quad \dots \quad Q_{N,g,r})$$

$$(2.4.5)$$

式(2.4.5)は以下のように解くことができる。

$$\vec{\Psi}_{g,m,l}(s) = e^{-\Sigma_{t,g,r}s} \vec{\Psi}_{g,m,l}(0) + \left(\mathbf{I} - e^{-\Sigma_{t,g,r}s}\right) \Sigma_{t,g,r}^{-1} \vec{Q}_{g,r}$$
(2.4.6)

ここで、 $e^{-\Sigma_{t,g,r^s}}$ は行列指数、Iは単位行列である。エネルギー群g、飛行方向m、セグメント lに対する平均角度中性子東モーメント $\vec{\Psi}_{a,m,l}$ は以下のように表される。

$$\vec{\Psi}_{g,m,l} = \left(\Sigma_{t,g,r}S\right)^{-1} \left(\vec{\Psi}_{g,m,l}(0) - \vec{\Psi}_{g,m,l}(S) + \vec{Q}_{g,r}S\right)$$
(2.4.7)

ここで、Sは極角方向を考慮したセグメント長であり、2次元平面上のセグメント長を $S_{m,l}$ 、飛行方向mの極角を θ_m として、 $S = S_{m,l}/\sin \theta_m$ で表される。

本研究では、C++用行列計算ライブラリ Eigen^[21]を用いて式(2.4.6)や式(2.4.7)を解いた。数 値計算の詳細については、次節に記載する。

従来の2次元のMOCと同様に、領域r平均の角度中性子束モーメントは次式で得られる。

$$\vec{\Psi}_{g,m,r} = \frac{\sum_{l \in r} \frac{S'_{m,l}}{\sin \theta_m} \delta A_{m,l} \vec{\Psi}_{g,m,l}}{\sum_{l \in r} \frac{S'_{m,l}}{\sin \theta_m} \delta A_{m,l}}$$
(2.4.8)

ここで、 $\delta A_{m,l}$ はレイトレース幅である。 $S'_{m,l}$ は領域rの体積 V_r を保存するように補正された セグメント長であり次式で表される。

$$S'_{m,l} = S_{m,l} \frac{V_r}{\sum_{l \in r} S_{m,l} \delta A_{m,l}}$$
(2.4.9)

また、 $\vec{\Psi}_{g,m,l}$ は、 $S = S'_{m,l} / \sin \theta_m$ として式(2.4.7)で計算される。

領域r平均の角度中性子東モーメント $\vec{\Psi}_{g,m,r}$ が得られれば、領域rの全中性子東モーメントは式(2.4.10)で得られる。

$$\vec{\phi}_{g,r} = \sum_{m} \omega_m \vec{\Psi}_{g,m,r}$$

$$\vec{\phi}_{g,r} = {}^{\mathrm{T}}(\phi_{1,g,r} \quad \phi_{2,g,r} \quad \dots \quad \phi_{N,g,r})$$
(2.4.10)

ここで、 $\vec{\phi}_{g,r}$ は領域rの全中性子モーメント、 ω_m は立体角に対する重みで $\sum_m \omega_m = 4\pi$ を満た す。領域rの超詳細群スペクトルは、中性子束 $\vec{\phi}_{a,r}$ を用いて式(2.2.6)で解ける。

上記のように、行列式を直接解くことで中性子東モーメントを計算することができる。一 方で、式(2.4.6)に含まれる行列指数e^{-Σ}tg,r^sは、一般的に計算量が多く、さらにセグメント長 に依存することから、膨大な計算量となる。したがって、計算量削減のため行列指数を以下 のように解く。

まず、 $\Sigma_{t,q,r}$ は対称行列であるため、固有値分解により以下のように分解される。

$$\boldsymbol{\Sigma}_{t,g,r} = \mathbf{V}\boldsymbol{\Lambda}\mathbf{V}^{\mathrm{T}} = (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n) \begin{pmatrix} \lambda_1 & & 0 \\ & \lambda_2 & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix} (\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n)^{\mathrm{T}}$$
(2.4.11)

ここで、 \vec{v}_i は固有ベクトル、 λ_i は固有値である。式(2.4.11)を $e^{-\Sigma_{t,g,r^s}}$ に代入すると、式(2.4.12) のように表される。

$$e^{-\Sigma_{t,g,r}s} = e^{-s(\mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^{\mathrm{T}})} = \mathbf{V}e^{-s\mathbf{\Lambda}}\mathbf{V}^{\mathrm{T}} = \mathbf{V}\begin{pmatrix} e^{-s\lambda_{1}} & 0\\ & e^{-s\lambda_{2}} & \\ & \ddots & \\ 0 & & e^{-s\lambda_{n}} \end{pmatrix}\mathbf{V}^{\mathrm{T}}$$
(2.4.12)

行列指数 $e^{-s\Lambda}$ は対角行列であるため、式(2.4.12)に要する計算コストは小さい。固有値分解は セグメント長に依存しないため、群ごと・物質ごとに実施すればよく、これに係る計算コス トも小さい。また、全断面積モーメント $\Sigma_{t,g,r}$ は比較的小さい行列であるため固有分解の計 算時間は小さい(例えば、3章以降の検討では最大で 21× 21)。 $\Sigma_{t,g,r}$ のサイズが大きい場合 や数値的に安定に解くことが困難である場合には、固有値分解の代わりに特異値分解を用 いることが可能である。

また、行列ΛとVはエネルギー群や物質領域に依存し、角度やレイトレースに対して独立 であるため、データ容量は比較的小さく、輸送計算時にはメモリ上に保存しておくべきであ る。実用的には、燃焼や温度分布に伴う多くの物質を考慮する必要があるが、行列ΛとVは ステートポイントごとに決まる値であるため、輸送計算の前にデータを準備することが可 能である。 さらに、MOC計算の効率を向上させるため、式(2.4.6)は次のように書ける。

$$\begin{aligned} \vec{\Psi}_{g,m,l}(s) &= (\mathbf{V}e^{-s\mathbf{\Lambda}}\mathbf{V}^{\mathrm{T}})\vec{\Psi}_{g,m,l}(0) + \left(\mathbf{V}\mathbf{V}^{\mathrm{T}} - (\mathbf{V}e^{-s\mathbf{\Lambda}}\mathbf{V}^{\mathrm{T}})\right)(\mathbf{V}\mathbf{\Lambda}\mathbf{V}^{\mathrm{T}})^{-1}\vec{Q}_{g,r} \\ &= \mathbf{V}\left((e^{-s\mathbf{\Lambda}}\mathbf{V}^{\mathrm{T}})\vec{\Psi}_{g,m,l}(0) + \left((\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{V}^{\mathrm{T}})\vec{Q}_{g,r}\right) - e^{-s\mathbf{\Lambda}}\left((\mathbf{\Lambda}^{-1}\mathbf{V}^{\mathrm{T}})\vec{Q}_{g,r}\right)\right) \end{aligned} (2.4.13) \\ &= \mathbf{V}\left(e^{-s\mathbf{\Lambda}}\left(\mathbf{V}^{\mathrm{T}}\vec{\Psi}_{g,m,l}(0)\right) + \vec{C}_{g,r} - e^{-s\mathbf{\Lambda}}\vec{C}_{g,r}\right) \end{aligned}$$

ここで、 $\vec{C}_{g,r}$ は($\Lambda^{-1}V^{T}$) $\vec{Q}_{g,r}$ であり、角度やセグメントに依存しない。一度、領域に対して $\vec{C}_{g,r}$ が得られれば、式(2.4.13)のように行列間の積をなくすことができる。例えば、展開次数 がn次の場合には $\vec{\Psi}_{g,m,l}(s)$ がn個の要素を持っており、スカラー積の演算が n^{2} 回である。これ は式変形を行わない場合と比較して1/nの計算コストである。

2.5 RSE 法の計算手順

本節では、RSE 法によって実効断面積を求める計算手順を示す。 まず、計算手順を図 2.7 に示す。



計算手順は以下である。

- Step1: 超詳細群減速計算により、代表的な燃料組成、温度、背景断面積の均質体系の超詳 細群スペクトルを計算する。
- Step2: Step1 で得られた複数のスペクトルを特異値分解することで直交基底 $f_{i,g}(E_g)$ を作成する。
- Step3: 式(2.2.13)により、断面積モーメント $\Sigma_{t,g,n,i}(\mathbf{r})$ と $\Sigma_{s,jg' \rightarrow ng}(\mathbf{r})$ を作成する。
- Step4: MOC 計算のレイトレース情報を作成する。
- Step5: エネルギー群g、領域r、次数iの全中性子東モーメントφ_{i,g,r}を初期化する。本研究では、ある群に対して空間的、エネルギー的に一定の全中性子束を初期値とし、これを 基底で展開することにより全中性子束モーメントを求めている。
- Step6: 境界の角度中性子束を初期化する。ここでは等方な角度中性子束を仮定する $(\Psi(\mathbf{r}, \Omega_m, E_g) = \phi(\mathbf{r}, E_g)/4\pi)$ 。ここで、エネルギー群内の角度中性子束分布は一定で あり、これを直交基底で展開する。
- Step7: 中性子源 $Q_r(E_q)$ を初期化する。減速源の初期値はゼロである。
- Step8: 中性子源のモーメントQ_{n,g,r}を式(2.2.10)により計算する。
- Step9: 式(2.4.1)を用いて Transport sweep を行う。角度中性子東モーメント $\Psi_{n,g,r,m}$ を立体角 で積分して、領域ごとの全中性子東モーメントを求める。

Step10: 式(2.5.1)を用いて中性子東モーメントの収束判定を行う。

$$\varepsilon_{j} = \left| \left(\left(\sum_{n} \phi_{n,g,r} \right)^{(j-1)} - \left(\sum_{n} \phi_{n,g,r} \right)^{(j)} \right) \middle/ \left(\sum_{n} \phi_{n,g,r} \right)^{(j)} \right|$$
(2.5.1)

*εj*は*j*回目の反復で得られた全中性子束モーメントの相対残差である。なお、それぞれの次数における中性子束モーメントが非常に小さい値を取り得るため、本研究では中性子束モーメントの和を収束判定に用いている。

- Step11: 中性子東モーメントが収束判定基準を満たさない場合は減速中性子源に対するモ ーメントを更新する。
- Step12: Step8 から Step11 を繰り返し、全エネルギー群の中性子東モーメントを計算する。 Step13: 超詳細群スペクトル $\phi_r(E_g)$ を再構成し、式(2.5.2)により実効断面積 $\sigma_{x,g,r,eff}^k$ を計算 する。

$$\sigma_{x,g,r,eff}^{k} = \frac{\int_{\Delta E_{g}} \sigma_{x,r}^{k}(E)\phi_{r}(E)dE}{\int_{\Delta E_{g}} \phi_{r}(E)dE}$$
(2.5.2)

ここで、 $\sigma_{x,r}^k(E)$ は反応x、核種k、領域rの微視的断面積である。

2.6 本章のまとめ

本章では、エネルギーに関する展開基底を用いた共鳴計算手法である RSE 法について説 明した。

2.2 節では、従来の中性子束に関する多群輸送方程式に基づいて、中性子束モーメントに 関する輸送方程式を導出した。

2.3 節では、エネルギーに関する直交基底の作成方法を示した。また、ROM の概念に基づき RSE 法の特徴を示した。

2.4節では、輸送計算手法である MOC を用いた RSE 法の実装方法を示した。

2.5 節では、RSE 法を用いた共鳴計算の手順を示した。

次章では、ベンチマーク体系に対する RSE 法の適用性を確認する。

第3章 ベンチマーク体系を用いた RSE 法の適用性検討

3.1 本章の概要

本章では、共鳴の取り扱いが重要となるベンチマーク体系に対して RSE 法を適用する。 超詳細群計算(以下、UFG 計算)の結果を参照値として、RSE 法の妥当性を確認する。3.2 節では、異なる組成のセルが隣接する 2×2マルチセル体系を対象とし、共鳴干渉効果およ びスペクトル干渉効果の取り扱いを確認する。3.3 節では、燃料棒内を複数の円環状に分割 した MOX 燃料の単一セルを対象とし、空間的自己遮蔽効果の取り扱いを確認する。3.4 節 では、UO2 単一集合体体系を対象とし、比較的規模の大きい体系における共鳴の取り扱い を確認する。また、集合体計算で得られた実効断面積を用いて固有値計算を実施し、核特性 への影響を確認する。さらに、3.5 節では中性子源を考慮した基底による RSE 法を実施し、 RSE 法で中性子源が中性子束に関する基底で展開されることの妥当性を確認する。

3.2 マルチセル体系

本節では、マルチセル体系を用いて、共鳴干渉効果とスペクトル干渉効果の取り扱いを確認する。U-238 に加えて Pu-239 などの複数の共鳴核種が含まれる MOX 燃料を用いて共鳴 干渉効果の検討を行う。また、UO2 燃料と MOX 燃料という異なる組成の燃料を隣接させ た体系を用いてスペクトル干渉効果の検討を行う。

3.2.1 計算条件

まず、マルチセル体系を図 3.1 に示す。また、単一セルの寸法を表 3.1 に、各物質の組成 を表 3.2 に示す。境界条件は反射境界条件であり、温度は 600 K である。なお、簡単のた め、燃料と被覆管の間のギャップは考慮しない。







図 3.1 マルチセル体系

表 3.1 単一セルの寸法 [cm]

燃料棒半径	0.4095
被覆管外側半径	0.4750
セルピッチ	1.2600

	広 孫	原子数密度		 坊孫	原子数密度
	修悝	[1/barn/cm]		修悝	[1/barn/cm]
松井 半月	¹⁶ O	4.68618E-02		¹⁶ O	4.59163E-02
	²³⁵ U	1.13836E-03		²³⁵ U	4.16028E-05
(002)	²³⁸ U	2.22834E-02		²³⁸ U	2.04972E-02
減速材	$^{1}\mathrm{H}$	4.41629E-02		²³⁸ Pu	4.87049E-05
(H ₂ O)	¹⁶ O	2.20897E-02	燃料	²³⁹ Pu	1.40652E-03
	⁹⁰ Zr	1.96348E-02	(MOX)	²⁴⁰ Pu	5.55429E-04
妆	⁹¹ Zr	4.28188E-03		²⁴¹ Pu	2.40495E-04
恢復日	⁹² Zr	6.54495E-03		²⁴² Pu	1.19746E-04
(Zircolliulli)	⁹⁴ Zr	6.63272E-03		²⁴¹ Am	4.80973E-05
	⁹⁶ Zr	1.06856E-03			

表 3.2 各物質の組成

断面積ライブラリには JENDL-4.0^[9]を用いる。核データ処理コード FRENDY^[22]を用いて ENDF 形式^[23]の断面積ライブラリを ACE 形式^[24]のファイルに変換し、ACE ファイル内のデ ータから超詳細群構造に対応するポイントワイズの断面積を作成する。

参照値には超詳細群計算(UFG 計算)を用いる。UFG 計算は MOC 輸送計算コード GENESIS^[25]により実施する。MOC における計算条件を表 3.3 に示す。超詳細群構造は 表 3.4 を用いる^[26]。また、実効断面積は表 3.5 の XMAS172 群構造^[10]で作成する。

レイトレース幅	0.05 cm		
方位角分割数(2π)	32		
極角分割数(π)	6 (TY 分点 ^[27])		
	多群構造	XMAS 172	
エネルギー群構造	却我们我	120,000	
	但计和由我	(表 3.4)	
山市判宁久开	全中性子束 (UFG)	1×10^{-5}	
	中性子束モーメント: <i>ɛ_j</i> (RSE)	1×10^{-5}	

表 3.3 MOC の計算条件

エネルギー群上限 [eV]	分割数 (等レサジー分割)		
20,000,000	10,000		
52,475	56,000		
9118.8	12,000		
4307.4	12,000		
961.12	8,000		
130.07	12,000		
0.32242	10,000		
下限: 0.00001 eV			

表 3.4 超詳細群構造
Crown	Upper energy						
Group	boundary [eV]						
1	1.964033E+07	44	1.503439E+04	87	8.315287E+00	130	9.100000E-01
2	1.733253E+07	45	1.113775E+04	88	7.523983E+00	131	8.60000E-01
3	1.491825E+07	46	9.118820E+03	89	6.160116E+00	132	8.50000E-01
4	1.384031E+07	47	7.465858E+03	90	5.346430E+00	133	7.90000E-01
5	1.161834E+07	48	5.530844E+03	91	5.043477E+00	134	7.80000E-01
6	1.00000E+07	49	5.004514E+03	92	4.129250E+00	135	7.05000E-01
7	8.187308E+06	50	3.526622E+03	93	4.00000E+00	136	6.250000E-01
8	6.703200E+06	51	3.354626E+03	94	3.380750E+00	137	5.400000E-01
9	6.065307E+06	52	2.248673E+03	95	3.300000E+00	138	5.00000E-01
10	5.488116E+06	53	2.034684E+03	96	2.767920E+00	139	4.850000E-01
11	4.493290E+06	54	1.507331E+03	97	2.720000E+00	140	4.330000E-01
12	3.678794E+06	55	1.433817E+03	98	2.60000E+00	141	4.00000E-01
13	3.011942E+06	56	1.234098E+03	99	2.550000E+00	142	3.910000E-01
14	2.465970E+06	57	1.010394E+03	100	2.360000E+00	143	3.50000E-01
15	2.231302E+06	58	9.142423E+02	101	2.130000E+00	144	3.20000E-01
16	2.018965E+06	59	7.485183E+02	102	2.100000E+00	145	3.145000E-01
17	1.652989E+06	60	6.772874E+02	103	2.020000E+00	146	3.00000E-01
18	1.353353E+06	61	4.539993E+02	104	1.930000E+00	147	2.80000E-01
19	1.224564E+06	62	3.717032E+02	105	1.840000E+00	148	2.480000E-01
20	1.108032E+06	63	3.043248E+02	106	1.755000E+00	149	2.20000E-01
21	1.002588E+06	64	2.039950E+02	107	1.670000E+00	150	1.890000E-01
22	9.071795E+05	65	1.486254E+02	108	1.590000E+00	151	1.80000E-01
23	8.208500E+05	66	1.367420E+02	109	1.500000E+00	152	1.60000E-01
24	6.081006E+05	67	9.166088E+01	110	1.475000E+00	153	1.40000E-01
25	5.502322E+05	68	7.567357E+01	111	1.445000E+00	154	1.340000E-01
26	4.978707E+05	69	6.790405E+01	112	1.370000E+00	155	1.150000E-01
27	4.504920E+05	70	5.559513E+01	113	1.337500E+00	156	1.00000E-01
28	4.076220E+05	71	5.157802E+01	114	1.300000E+00	157	9.50000E-02
29	3.019738E+05	72	4.825160E+01	115	1.235000E+00	158	8.00000E-02
30	2.732372E+05	73	4.551744E+01	116	1.170000E+00	159	7.70000E-02
31	2.472353E+05	74	4.016900E+01	117	1.150000E+00	160	6.70000E-02
32	1.831564E+05	75	3.726653E+01	118	1.125400E+00	161	5.80000E-02
33	1.227734E+05	76	3.372015E+01	119	1.110000E+00	162	5.00000E-02
34	1.110900E+05	77	3.051126E+01	120	1.097000E+00	163	4.20000E-02
35	8.229747E+04	78	2.760773E+01	121	1.071000E+00	164	3.50000E-02
36	6.737947E+04	79	2.498050E+01	122	1.045000E+00	165	3.00000E-02
37	5.516564E+04	80	2.260329E+01	123	1.035000E+00	166	2.50000E-02
38	4.086771E+04	81	1.945484E+01	124	1.020000E+00	167	2.00000E-02
39	3.697864E+04	82	1.592827E+01	125	9.960000E-01	168	1.50000E-02
40	2.928300E+04	83	1.370959E+01	126	9.860000E-01	169	1.00000E-02
41	2.739445E+04	84	1.122446E+01	127	9.720000E-01	170	6.90000E-03
42	2.478752E+04	85	9.905554E+00	128	9.500000E-01	171	5.000000E-03
43	1.661557E+04	86	9.189814E+00	129	9.300000E-01	172	3.00000E-03

表 3.5 XMAS172 群構造

Lower energy boundary [eV] 1.000010E-05

37

次に、RSE 計算の条件を示す。中性子東モーメントの輸送計算には XMAS172 群構造を用 いる。すなわち、172 個のエネルギー群ごとに作成された直交基底を用いる。実効断面積も 同様に XMAS172 群構造で作成する。また、MOC の計算条件は表 3.3 のとおりであり、UFG 計算と同様である。

最後に、RSE 計算に用いる直交基底の作成条件を示す。表 3.6 は、直交基底の作成で用い る均質体系の超詳細群スペクトルを計算するときのバックグラウンド断面積である。上述 の通り、RSE 法における展開次数の最大値は、バックグラウンド断面積の種類またはエネ ルギー群に含まれる超詳細群数のうち小さいものである。例えば、図 3.1-(a)では、UO2 燃 料と MOX 燃料のそれぞれで11 種類、減速材で1 種類、被覆管で9 種類、計 32 種類のバッ クグラウンド断面積が用いられる。このとき、最大の展開次数は 32 次もしくは超詳細群数 のうち小さい方となる。展開次数はそれぞれの群で最大とする。

	バックグラウンド断面積 [barn]		
燃料	1.00e+10, 2.00e+04, 3.60e+03, 1.00e+03, 2.60e+02, 1.40e+02, 6.40e+01,		
(UO ₂ または MOX)	5.20e+01, 2.80e+01, 1.00e+01, 1.00E-03		
減速材	1.00e+10		
(H ₂ O)			
被覆管	5.00e+06, 5.00e+05, 1.00e+05, 5.00e+04, 1.00e+04, 5.00e+03, 1.00e+03,		
(Zirconium)	5.00e+02, 5.00e+01		

表 3.6 各物質の均質体系における超詳細群計算で用いるバックグラウンド断面積

なお、本章の計算で用いる核データ、原子数密度、輸送計算の条件は、すべての節におい ても同様であるため、以降の検討では特筆しない限り省略する。

3.2.2 計算結果

RSE 計算で得られた実効断面積を参照値である UFG 計算の結果と比較する。まず、図 3.1 の(a)と(b)に含まれるすべての共鳴核種について、共鳴領域における実効断面積差異をそれ ぞれ図 3.2 と図 3.3 に、差異の最大値をそれぞれ表 3.7 と表 3.8 に示す。共鳴領域は 1 eV-10⁵ eV とする。実効断面積の差異は、参照値からの相対差異として、(RSE-UFG)/UFG と定 義する。







		実効全断面積差異		
組成	核種	皇士美田[0/]	対応する	
		取八左共[%]	エネルギー群	
	²³⁵ U	0.07	69	
	²³⁸ U	0.30	64	
	²³⁸ Pu	0.30	69	
MOX 游客	²³⁹ Pu	0.10	63	
MOA RAAY	²⁴⁰ Pu	0.58	63	
	²⁴¹ Pu	0.13	64	
	²⁴² Pu	0.17	64	
	²⁴¹ Am	0.30	69	
山口、海北	²³⁵ U	0.07	64	
UU2 72274	²³⁸ U	0.25	64	
	⁹⁰ Zr	0.09	47	
址 要 <i>答</i>	⁹¹ Zr	0.77	49	
恢復目	⁹² Zr	0.59	49	
$(MOX^{-2})^{\nu})$	⁹⁴ Zr	0.16	47	
	⁹⁶ Zr	1.47	63	
	⁹⁰ Zr	0.09	47	
妆 要答	⁹¹ Zr	0.80	49	
恢復目	⁹² Zr	0.60	49	
$(UU_2 \leftarrow) \lor)$	⁹⁴ Zr	0.16	47	
	⁹⁶ Zr	1.56	63	

表 3.7 図 3.1-(a)における共鳴核種の実効断面積差異の最大値

		実効全断面積差異		
組成	核種	旱土美田[0/]	対応する	
		取八左共[%]	エネルギー群	
	²³⁵ U	0.16	75	
	²³⁸ U	0.11	64	
	²³⁸ Pu	0.30	69	
MOV 辦約	²³⁹ Pu	0.08	60	
MOA KANA	²⁴⁰ Pu	1.58	63	
	²⁴¹ Pu	0.12	64	
	²⁴² Pu	0.41	64	
	²⁴¹ Am	0.32	69	
	⁹⁰ Zr	0.41	49	
	⁹¹ Zr	1.04	49	
被覆管	⁹² Zr	0.32	51	
	⁹⁴ Zr	0.22	47	
	⁹⁶ Zr	1.72	63	

表 3.8 図 3.1-(b)における共鳴核種の実効断面積差異の最大値

表 3.7 と表 3.8 より、すべての核種について実効断面積の差異が2%未満であり、本手法 が参照値をよく再現していることがわかる。UO2 燃料に加えて MOX 燃料内核種の実効断 面積の精度が高いことから、共鳴干渉効果を取り扱うことができていると言える。

また、図 3.2 と図 3.3 の MOX 燃料内の共鳴核種に注目すると、図 3.2 の方が全体的に差 異が小さい。すなわち、UO2 と MOX が隣接する体系の方が精度良く計算されている。これ は、RSE 法の特徴を表している。基底の作成において、図 3.1-(a)では UO2 燃料および MOX 燃料の均質媒体のスペクトルを考慮している一方で、図 3.1-(b)では MOX 燃料のスペクト ルのみしか考慮していない。スペクトルの種類が増えるほど、より多様な基底が作成される ため、非均質体系のスペクトルを基底で展開しやすくなったと考えらえる。なお、この特徴 については、次節の「燃料内に温度分布を持つ単一セル体系」を用いてより詳しく記述する。 次に、異なる燃料セルが隣接する場合のスペクトル干渉効果について確認する。図 3.1 の (a)と(b)の MOX 燃料について、参照値である UFG 計算で得られた実効断面積を比較する。 核特性に影響が大きい U-235、U-238、Pu-239、Pu-240 の実効断面積の差異を図 3.4 に示す。 差異は(a-b)/b と定義する。







Pu-240

図 3.4 UFG 計算で得られた図 3.1-(a)と(b)の MOX 燃料内における共鳴核種の 実効断面積差異(差異は(a-b)/b)

図 3.4 より、特に Pu の実効断面積に差異が現れており、スペクトル干渉効果が確認できる。RSE 計算の精度は

表 3.7 と表 3.8 ですでに確認しているが、図 3.4 のスペクトル干渉効果の程度と比較する ため、共鳴領域の実効断面積差異を図 3.5 と図 3.6 に示す。













図 3.6 図 3.1-(b)の MOX 燃料内共鳴核種の実効断面積差異

図 3.5 と図 3.6 より、図 3.4 でスペクトル干渉効果の現れているエネルギー群について、 図 3.1 の MOX 燃料内共鳴核種の実効断面積差異が非常に小さいことが確認できる。この結 果は、異なる共鳴核種を含む燃料が隣接する場合でも、それぞれの均質体系におけるスペク トルのすべてを用いて基底作成することにより、スペクトル干渉効果の影響を受けた非均 質体系のスペクトルを展開できることを示している。

以上の検討より、共鳴干渉効果およびスペクトル干渉効果を考慮すべき体系に対する RSE 法の適用性が確認できた。

3.3 燃料内に温度分布を持つ単一セル体系

本節では、燃料棒内を円環状に分割した MOX 燃料セル体系を用いて、空間自己遮蔽効果 の取り扱いを確認する。また、燃料領域に温度勾配をつけることで、より非均質性の高い条 件での検証を行う。

3.3.1 計算条件

燃料棒内を円環状に 10 分割した MOX 燃料セル体系を図 3.7 に示す。燃料セルの寸法は 前述の表 3.1 と同様であり、燃料棒内はそれぞれの領域が等体積になるよう分割する。各領 域の温度は、表 3.9 に示すように燃料棒内の温度勾配の有無により2種類を考慮する。各物 質の組成は前述の表 3.2 と同様である。



図 3.7 燃料棒内を円環状に 10 分割した MOX 燃料セル

領域		温度 [K]		
		勾配無し	勾配有り	
	01 (内側)		1190	
	02		1140	
	03		1100	
	04		1060	
(好) 半二	05	997 (各領域で同一)	1010	
が公本主	06		970	
	07		930	
	08		890	
	09		860	
	10 (外側)		820	
被覆管				
Ì	咸速材	600		

表 3.9 燃料セル内の各物質の温度

また、RSE計算の基底作成に用いる均質体系のバックグラウンド断面積は表 3.6を用い、 展開次数は最大とする。ここで、勾配無しの場合は燃料温度が1点であるため、基底作成に 用いるスペクトルの種類は21種類(燃料11点×1温度点、減速材1点、被覆管9点)であ るが、勾配有りの場合は燃料温度が10点あるため、スペクトルの種類は120種類(燃料11 点×10温度点、減速材1点、被覆管9点)である。したがって、勾配有りの場合の最大次数 は120次となる。

3.3.2 計算結果

RSE 計算または UFG 計算により実効断面積を計算した。表 3.9 に示した温度勾配無しと 勾配有りの体系について、実効全断面積の差異を図 3.8 から図 3.11 に示す。実効断面積の 差異は、参照値からの相対差異として、(RSE-UFG)/UFG と定義する。



(凡例は表 3.9 に示す燃料棒内の位置)



















図 3.10 温度勾配有りの体系における U の実効全断面積の差異 (凡例は表 3.9 に示す燃料棒内の位置)



(凡例は表 3.9 に示す燃料棒内の位置)

図 3.8 から図 3.11 より実効断面積の差異は U-238 とその他ほとんどの共鳴核種で1%未満であり、RSE 計算で得られた実効断面積が、温度勾配の有無や領域にかかわらず UFG 計算の結果を再現していることがわかる。

ここで、図 3.8 と図 3.10 における U-238 の実効全断面積に注目すると、温度勾配無し(図 3.8)の方が温度勾配有り(図 3.10)の場合と比較して、RSE 計算と UFG 計算の差異が大き

く RSE 計算の精度が低くなるがわかる。温度勾配有りの体系は燃料内に複数の温度点を持ち、体系の非均質性がより複雑であるため、直感的には温度勾配有りの体系でより再現精度が下がると予想されるが、計算結果は逆の傾向を示している。

この原因は RSE 法の特徴により説明できる。計算条件に示した通り、直交基底の作成に おけるスペクトルの種類は、温度勾配無しの場合 21 種類、温度勾配有り場合は 120 種類で ある。したがって、温度勾配有りの計算ではより多様なスペクトルを考慮した基底が得られ ており、スペクトルの再現性が向上したと考えられる。

この特徴を確かめるため、表 3.9 の温度勾配有りの条件で作成した基底を用いて、温度勾配無しの体系のRSE計算を実施する。RSE計算における展開次数は最大である。UFG計算と比較した実効全断面積の差異を図 3.12 に示す。図 3.8 と図 3.12 を比較すると、図 3.12の方がRSE計算の精度が高いことがわかる。



図 3.12 温度勾配有りの条件で作成した基底を用いた場合の、温度勾配無しの体系における U-238 の実効全断面積差異

(凡例は表 3.9 に示す燃料棒内の位置)

最後に、ペレットの半径方向に対する実効断面積と反応度の精度を確認する。ここで、反応度は式(3.3.1)で計算した。

$$R_{x,g,r}^{k} = \int_{\Delta E_g} N_r^k \sigma_{x,r}^k(E) \phi_r(E) dE$$
(3.3.1)

ここで、kは核種、xは核反応、gはエネルギー群、rは領域の添え字を示し、Rは反応率、Nは原子数密度、 $\sigma(E)$ はポイントワイズの微視的断面積、 $\phi(E)$ は超詳細群スペクトルである。

RSE 計算と UFG 計算で得られた実効断面積および反応率について、その差異を燃料棒の 半径方向に対してプロットする。温度勾配無しおよび温度勾配有りのそれぞれの体系つい て、U-238 の大きな共鳴が存在する XMAS172 群構造の 88 群(6.16 eV - 7.52 eV)の差異を 図 3.13 と図 3.14 に示す。図の横軸は燃料棒半径を1とした相対値である。







図 3.14 温度勾配有りの体系における 88 群の実効全断面積と全反応の差異

図 3.13 と図 3.14 より、実効断面積差異および反応率の差異は 0.2%未満であり、非常に 小さい。その上で、図 3.13 と図 3.14 を比較すると、温度勾配有りの体系で差異がより小さ い。これは、前述の通り、温度勾配有りの体系で用いた基底の種類が多様であるためである。

また、温度勾配無し(図 3.13)の場合には、差異が半径方向に対して単調に変化する傾向が ある。これは、まさに空間自己遮蔽効果の影響である。温度勾配無しの場合に作成した基底 では、燃料棒の中心ほど共鳴吸収による落ち込みが大きくなるスペクトルを、再現しきれな かったと考えられる。ただし、上記の通り、実効断面積の精度は非常に高く、温度点が1点 の燃料にバックグラウンド断面積を与えたスペクトルから得られる基底でも、燃料棒内の 空間自己遮蔽効果を考慮できていると言える。

以上より、空間的自己遮蔽効果および温度勾配がある非均質性の強い体系における共鳴 の取り扱いが可能であることが確認できた。また、再現したいスペクトルを包絡するよう な多様なスペクトルを用いて基底を作成することで、実効断面積の精度が向上するという RSE 法の特徴を確認した。

3.4 単一集合体体系

本節では、より規模の大きい単一集合体体系における共鳴の取り扱いを確認する。また、 RSE 計算で作成した実効断面積を用いて固有値計算を行い、核特性に対する影響を確認す る。

3.4.1 計算条件

VERA ベンチマーク^[28]をもとにした UO2 単一集合体体系を図 3.15 に示す。集合体に含まれる要素の寸法を表 3.10 に、各物質の組成を表 3.11 に示す。簡単のため、体系を次のように近似した。(1) 3.1 wt%の UO2 燃料は U-235、U-238、O-16 の 3 核種のみを含む。(2) 燃料棒のギャップと被覆管は均質化する。(3) 集合体間ギャップは考慮しない。(4) 減速材内にはホウ素を含まない。温度は全領域で 600 K とし、境界はすべて反射境界条件である。



図 3.15 1/4 集合体体系

燃料棒半径	0.4096
被覆管外側半径	0.4750
セルピッチ	1.2600
ガイドチューブ内側半径	0.5610
ガイドチューブ外側半径	0.6020
計装管内側半径	0.5590
計装管外側半径	0.6050

表 3.10 集合体に含まれる要素の寸法 [cm]

	拉话	原子数密度
	似悝	[1/barn/cm]
松井 半江	¹⁶ O	4.57640E-02
	²³⁵ U	7.18132E-04
(UU_2)	²³⁸ U	2.21639E-02
減速材	$^{1}\mathrm{H}$	4.42033E-02
(H ₂ O)	¹⁶ O	2.21017E-02
被覆管、	⁹⁰ Zr	1.96035E-02
計装管、	⁹¹ Zr	4.27506E-03
または	⁹² Zr	6.53451E-03
ガイドチューブ	⁹⁴ Zr	6.62215E-03
(Zirconium)	⁹⁶ Zr	1.06686E-03

表 3.11 集合体内の各物質の組成

RSE 計算の基底作成に用いる均質体系のバックグラウンド断面積は表 3.6 を用い、展開 次数は最大とする。展開次数の最大値は 21 次である(燃料 11 点、減速材 1 点、被覆管 9 点)。

次に、固有値計算における計算条件を示す。固有値計算には MOC 輸送計算コード GENESIS^[25]を用いる。MOC の計算条件を表 3.12 に示す。

レイトレース幅	0.05 cm		
方位角分割数(2π)	32		
極角分割数(π)	4 (Gauss-Legendre 分点)		
多群構造	XMAS 172		
山市判宁久开	全中性子束	1×10^{-5}	
- 収朱刊疋宋针	実効増倍率	5×10^{-6}	
境界条件	全境界で反射境界条件		

表 3.12 固有値計算における MOC の計算条件

また、固有値計算に用いる多群断面積は RSE 計算または UFG 計算で得られる実効断面積 を利用して以下のように作成する。

(1) FRENDY/MG^[29]を用いて、GENESIS コードで採用されている KRAM 形式^[30]の多群断 面積を作成する。等価原理により燃料、減速材、被覆管の3種類の断面積を作成する。 なお、減速材と被覆管の断面積は無限希釈断面積として作成する。

(2) 作成した KRAM 形式断面積のうち、共鳴領域における燃料と被覆管の断面積を RSE 計算または UFG 計算で作成した実効断面積に置き換える。断面積の種類は、捕獲断 面積、生成断面積、弾性散乱断面積、全断面積である。また、共鳴領域は 1 eV から 1E5 eV までとし、XMAS172 群構造では 34 群(上限 1.11E5 eV) から 124 群(下限 0.996 eV) が対応する範囲である。

以上より、RSE 計算または UFG 計算で得らえた実効断面積から、主要な共鳴領域以外の 条件を揃えた多群断面積を作成することで、固有値計算に対する共鳴領域における実効断 面積の影響を評価する。

3.4.2 計算結果

まず、RSE 計算で得られた実効断面積の精度を確認する。図 3.15 の集合体体系のうち、 位置 A (周囲に比較的燃料が多い)と位置 B (周囲に比較的減速材が多い)に着目して、RSE 計算と UFG 計算でられた実効断面積を比較する。位置 A、B における共鳴核種 U-235 と U-238 の実効断面積の差異を図 3.16 に示す。





位置 B



図 3.16 より、共鳴エネルギー領域における実効全断面積の差異は1%未満であり、RSE 計算で得らえた実効断面積は参照値をよく再現している。また、1/4 集合体のすべての燃料 棒における実効断面積差異の最大値は U-235 で 0.22%、U-238 で 0.19%であり、単一集合体 の全領域で実効断面積の精度が高いことがわかる。

54

次に、RSE計算またはUFG計算で得られた実効断面積を用いた固有値計算の結果を示す。 実効増倍率と燃料棒出力の比較結果を表 3.13 に示す。

宝动描述卖		実効増倍率の差異 [%]	燃料棒出力の差異 [%]	
夫劝增倍举			(RSE – UFG)/UFG	
RSE	UFG	(KSE - OFG)/OFG	MAX	RMS
1.33894 1.33932		2.9E-02	1.7E-03	7.4E-04

表 3.13 RSE 計算または UFG 計算の実効断面積を用いた固有値計算の結果とその差異

燃料内共鳴核種の実効断面積差異が最大で 0.2 %程度のとき、表 3.13 より固有値計算で 得られる実効増倍率や燃料棒出力の差異は非常に小さいことがわかる。なお、VERA ベンチ マーク^[28]に記載の固有値は 1.183360 ± 0.000024 である。本検討では、減速材中のホウ素を 考慮しなかったため、文献の値^[28]よりも実効増倍率が高くなっている。

以上より、比較的規模の大きな非均質体系においても RSE 法が十分な精度を達成していることを確認した。また実効断面積の精度が固有値計算で得られた核特性に与える影響が小さいことを確認した。

3.5 中性子源を考慮した基底を用いた RSE 計算

本節では、RSE 計算に用いる直交基底を抽出する行列に含まれるパラメータとして、中 性子束に加えて中性子源を含めた場合の挙動について確認する。

3.5.1 直交基底による中性子源の展開

RSE 法の最大の特徴は、中性子束を直交基底で展開する点である。実効断面積を精度よ く求めるためには、微視的断面積の重みづけとなる中性子束を精度よく解く必要がある。し たがって、本手法では解析対象の中性子束を包絡するような均質体系の中性子束の形から、 直交基底を作成している。

さらに、式(2.2.5)に示すように、RSE 法の基礎方程式である中性子東モーメントに関する 輸送方程式の導出では、中性子東に加えて中性子源が直交基底で展開できると仮定してい る。

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E_g) = \sum_{i=1}^{N} f_{i,g}(E_g) \Psi_{i,g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$$

$$\phi(\mathbf{r}, E_g) = \sum_{i=1}^{N} f_{i,g}(E_g) \phi_{i,g}(\mathbf{r})$$

$$Q(\mathbf{r}, E_g) = \sum_{i=1}^{N} f_{i,g}(E_g) Q_{i,g}(\mathbf{r})$$
(3.5.1)

図 3.17 に示すように中性子源は、中性子束と比較して、エネルギーに対する急峻で大幅 な変化が少ないことから、この仮定は妥当なものだと考えられる。また、前述の検討におい て実効断面積が精度よく得られていることからも、この仮定が裏付けられる。



図 3.17 UO2 燃料内の中性子束と中性子源のエネルギー依存性 (1 eV - 10⁵ eV)

一方で、中性子束と中性子源の両方を用いて直交基底を作成すれば、中性子源が精度よく 展開されることで、中性子束の精度が向上する可能性がある。逆に、中性子源を考慮した基 底で中性子束を展開することで、精度が低下することも考えられる。以下では、中性子束と 中性子源の両方を用いて直交基底を作成し、RSE計算で得られる中性子束、中性子源、実効 断面積の精度を確かめる。

中性子源を考慮した基底を作成する際に特異値分解する行列は以下のように作成する。 あるエネルギー群にt個の超詳細群が存在し、バックグラウンド断面積を含むm種類の均質 体系のスペクトルがあるとする。このとき、中性子束φ(E)と中性子源Q(E)を並べて式(3.5.2) のように2m×tの行列Aを作成する。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \phi_{1}(E_{1}) & \cdots & \phi_{1}(E_{t}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{m}(E_{1}) & \cdots & \phi_{m}(E_{t}) \\ Q_{1}(E_{1}) & \cdots & Q_{1}(E_{t}) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ Q_{m}(E_{1}) & \cdots & Q_{m}(E_{t}) \end{pmatrix}$$
(3.5.2)

本検討では、式(3.5.2)のように中性子源を中性子束の種類と同じ数だけ並べる。また、中性 子束と同様に、中性子源もエネルギー群内で規格化する。

なお、中性子源を考慮した基底を用いる場合でも、中性子東モーメントの輸送計算の手順 は、第2章に示した手順と同様である。

3.5.2 計算条件

計算体系には、前節の VERA ベンチマーク^[28]をもとにした UO2 単一集合体体系に含まれる<u>単一燃料セル</u>を用いる。組成および寸法は、表 3.11 と表 3.14 に示したとおりである。温度は全領域で 600 K とし、境界はすべて反射境界条件である。

X $3.14 + 0.000$	
燃料棒半径	0.4096
被覆管外側半径	0.4750
セルピッチ	1.2600

表 3.14 単一セルの寸法 [cm]

RSE 計算の基底作成に用いる均質体系のバックグラウンド断面積は表 3.6 を用いる。均 質体系の種類は、21 種類(燃料 11 点、減速材 1 点、被覆管 9 点)であるため、中性子源を考 慮して基底を作成する場合の最大次数は 21 × 2 = 42 次である。展開次数は最大とする。

3.5.3 計算結果

単一セルにおいて、直交基底の作成に中性子束のみ、または中性子束と中性子源の両方を 考慮した RSE 計算を行った。得られたパラメータを UFG 計算で得られた結果と比較する。

まず、RSE 計算と UFG 計算で得られた中性子源を比較する。共鳴領域における中性子源の比較を図 3.18 に示す。図 3.18 では、左が基底の作成に中性子束のみを考慮した結果、右が中性子束と中性子源の両方を考慮した結果である。



図 3.18 中性子源の比較(展開次数最大): (RSE-UFG)/UFG

図 3.18 より、基底の作成に中性子束のみを考慮する場合には、共鳴領域における中性子 源の差異が局所的に非常に大きな値をとることがあり、100%以上の差異が見られる。一方 で、基底の作成に中性子源も考慮する場合には、中性子源の差異はほとんどのエネルギー範 囲で非常に小さく、最大でも10%程度である。



Difference of spectra

20

0

-20

-40

-60

-80

104

 10^{-2}

ence of spectra

Diff -40

20

0

-20

-60

-80

<u>_______</u>100 10⁵

Spectrum [a.u.]

10-

 10^{-5}

10

10⁰

Spectrum (RSE)

--- Spectrum (UFG)

101

10²

10³

Energy [eV]

中性子束+中性子源

104

 10^{-2}

10-3

10

10-5

 10^{-6}

100

Spectrum (RSE)

--- Spectrum (UFG)

101

10²

103

Energy [eV]

中性子束

Spectrum [a.u.]

次に、中性子束について RSE 計算と UFG 計算を比較する。共鳴領域における中性子束の 比較を図 3.19 に示す。



図 3.19より、基底の作成に中性子源を考慮するか否かにかかわらず、共鳴領域におけ る中性子束の差異は非常に小さい。10³ eV – 10⁴ eV の範囲において、局所的に差異が大き くなっており、中性子源を考慮しない場合には最大で80%程度、中性子源を考慮する場合 には最大で 50%程度の差異が確認できる。したがって、本検討においては、中性子源を考 慮することで中性子束の精度が改善された。また、中性子源を考慮して作成された基底が 中性子束の展開に対して精度を低下させる作用がないことがわかった。

最後に、RSE 計算と UFG 計算で得られた実効断面積を比較する。共鳴領域における実 効断面積の比較を図 3.20 に示す。



図 3.20 実効断面積の比較(展開次数最大): (RSE-UFG)/UFG

中性子源を考慮した基底を用いることで中性子束の精度が向上したため、図 3.20 では 実効断面積の精度も向上している。ただし、精度向上のオーダーは 10⁻¹%程度である。こ こで、RSE 計算に要した時間は、基底と断面積モーメントの生成を除いて、基底の作成に 中性子束のみを考慮した計算では約 150 [s]、中性子源も考慮した計算では約 300 [s]であっ た。この時間の差は展開次数の最大値がそれぞれ 21 次と 42 次となっていることに起因す る。したがって、計算コストを倍増すれば、実効断面積の精度を 10⁻¹%程度向上させるこ とができるが、これは実用的なアプローチとは言えない。

以上より、本検討では基底の作成に中性子源を考慮することで、実効断面積の精度が向上 することが確認できた。しかしながら、実効断面積の精度向上の大きさと比較して、計算コ ストの増加が膨大であるため、RSE 計算の基底作成において中性子源を考慮する必要性は 小さい。したがって、RSE 法において、中性子束から抽出された直交基底を用いて中性子源 を展開することの妥当性が確認できた。

3.6 本章のまとめ

本章では、ベンチマーク体系に RSE 法を適用し、実効断面積について UFG 計算の結果と 比較することで、本手法の適用性を確認した。

3.2 節では、スペクトル干渉効果が現れるような異なる組成の燃料が隣接するマルチセル 体系に対する適用性を示した。同時に、MOX 燃料における共鳴干渉効果の取り扱いが可能 であることを示した。

3.3 節では、燃料棒内を円環状に分割した単一セル体系を用いた検討を行った。空間的自 己遮蔽効果や温度勾配のある体系への適用性を示した。

3.4 節では、比較的規模の大きい単一集合体体系への適用性を示した。RSE 法で得られた 実効断面積を用いて固有値計算を行うことで、実効増倍率と燃料棒出力への影響を示した。

3.5 節では、中性子源を考慮した基底を用いた RSE 計算により、実効断面積の精度が向上 する一方で、計算コストの観点から中性子束のみを考慮した基底で中性子源を展開するこ とが妥当であることを示した。

以上 4 つの検討により、RSE 法が主な共鳴の効果を取り扱うことが可能であることを示 すとともに、RSE 法の妥当性を示した。次章では、RSE 法の高速化について検討する。

第4章 RSE 法の高速化

4.1 本章の概要

本章では、RSE 法の高速化を目的として、計算手法や計算条件の最適化を行う。4.2 節で は、RSE 法の特徴である次元削減手法により高速化を試みる。4.3 節では、RSE 法の輸送計 算における MOC の離散化条件を粗くすることで高速化を試みる。4.4 節では、RSE 法の輸 送計算におけるエネルギー群を粗くすることで高速化を試みる。4.5 節では、減速中性子源 の取り扱いについてデータ量と計算時間の観点から検討を行う。

4.2 低ランク近似

本章では、RSE 法の特徴である中性子束の関数展開に対して低ランク近似を適用することで、計算の高速化を行う。

4.2.1 特異値の寄与率を用いた低ランク近似

第2章で説明したように、RSE 法では中性子束の関数展開に対して低ランク近似を適用 することができる。すなわち、中性子束の展開次数を削減することにより、計算コストの削 減が可能である。また、RSE 法ではエネルギー群ごとに超詳細群スペクトルを直交基底で 展開するため、エネルギー群ごとに展開次数を決定することが可能である。

本研究では、それぞれのエネルギー群について、特異値の寄与率を利用することで展開次 数を決定する。前述の通り、特異値の累積寄与率は式(4.2.1)で表される。

(The cumulative contribution ratio of the 1st – kth vectors) =
$$\frac{\sum_{i=1}^{k} \sigma_i^2}{\sum_{i=1}^{m} \sigma_i^2}$$
 (4.2.1)

一方で、特異値の欠損率[31]を式(4.2.2)で定義する。

$$1 - \frac{\sum_{i=1}^{k} \sigma_i}{\sum_{i=1}^{m} \sigma_i} \tag{4.2.2}$$

例えば、3.1 wt%の UO2 単一燃料セルに含まれる各組成に対して、表 4.1 のバックグラウンド断面積を与えて直交基底を作成した場合を考える。U238 の大きい共鳴がある 88 群における特異値の次数に対する欠損率を図 4.1 に示す。

	バックグラウンド断面積 [barn]		
燃料	1.00e+10, 2.00e+04, 3.60e+03, 1.00e+03, 2.60e+02, 1.40e+02, 6.40e+01,		
(UO ₂ または MOX)	5.20e+01, 2.80e+01, 1.00e+01, 1.00E-03		
減速材	1.00e+10		
(H ₂ O)			
被覆管	5.00e+06, 5.00e+05, 1.00e+05, 5.00e+04, 1.00e+04, 5.00e+03, 1.00e+03,		
(Zirconium)	5.00e+02, 5.00e+01		

表 4.1 燃料の各組成に対するバックグラウンド断面積



図 4.1 特異値の次数と欠損率の関係

次数に対して特異値が急激に減少することから自明ではあるが、図 4.1 では欠損率が次 数に対して急減に減少していることがわかる。

欠損率を用いた低ランク近似では、それぞれのエネルギー群における特異値の欠損率を 満たすように展開次数を決定する。なお、第2章で示した通り、展開次数が10次程度まで 大きくすれば、実効断面積の精度が収束することが確認されている。図 4.1 では10次のと きの欠損率がおおよそ 10⁻⁵ であるため、以降の検討ではこの欠損率を基準として欠損率に 対する実効断面積の精度を確認する。

4.2.2 計算条件

計算体系には図 4.2 の VERA ベンチマーク^[28]に基づく単一集合体体系を用いる。燃料 が UO2 のみ、または MOX のみの 2 種類の集合体を用いる。各物質の組成を表 4.2 に示す。 境界条件は完全反射である。



図 4.2 1/4 集合体体系

Matarial	Nuclida	Number density	
Wateriai	Nuclide	[1/barn/cm]	
	¹⁶ O	4.57640E-02	
然种	²³⁵ U	7.18132E-04	
(00_2)	²³⁸ U	2.21639E-02	
	¹⁶ O	4.59163E-02	
	²³⁵ U	4.16028E-05	
	²³⁸ U	2.04972E-02	
	²³⁸ Pu	4.87049E-05	
深い 本 キ MOX)	²³⁹ Pu	1.40652E-03	
(MOA)	²⁴⁰ Pu	5.55429E-04	
	²⁴¹ Pu	2.40495E-04	
	²⁴² Pu	1.19746E-04	
	²⁴¹ Am	4.80973E-05	
減速材	$^{1}\mathrm{H}$	4.42033E-02	
(H ₂ O)	¹⁶ O	2.21017E-02	
被覆管	⁹⁰ Zr	1.96035E-02	
計装管	⁹¹ Zr	4.27506E-03	
または	⁹² Zr	6.53451E-03	
ガイドチューブ	⁹⁴ Zr	6.62215E-03	
(Zirconium)	⁹⁶ Zr	1.06686E-03	

表 4.2 集合体の各物質の組成

MOC の条件は表 4.3 に示すものを用いる。

レイトレース幅	0.05 cm	
方位角分割数(2π)	32	
極角分割数(π)	6 (TY 分点 ^[27])	
エネルギー群構造	多群構造	XMAS 172
	超詳細群数	120,000
収束判定条件	全中性子束 (UFG)	1×10^{-5}
	中性子束モーメント: ɛ _j (RSE)	1×10^{-5}

表 4.3 MOC の計算条件

RSE 計算の基底作成に用いる均質体系のバックグラウンド断面積は表 4.1 を用いる。展 開次数の最大値は 21 次である(燃料 11 点、減速材 1 点、被覆管 9 点)。

RSE 計算は表 4.4 の 4 ケースで行う。

	計算ケース
1	欠損率 1E-1
2	欠損率 1E-3
3	欠損率 1E-5
4	欠損率ゼロ(展開次数最大)

表 4.4 RSE 計算の計算ケース

RSE 計算の展開次数は表 4.4 の欠損率に応じて決定する。UO2 集合体、MOX 集合体のそれぞれについて、エネルギー群ごとに欠損率を満たす展開次数を図 4.3 に示す。



UO2 集合体MOX 集合体図 4.3 欠損率別のエネルギー群に対する展開次数(凡例は欠損率)

図 4.3 より、UO2 と MOX は同様の傾向を示すことがわかる。また、1 eV から 1E5 eV の 共鳴領域では次数が大きくなっているが、これは複雑な共鳴断面積を表現するためには多 くの基底が必要となることを示している。

4.2.3 計算結果

UFG 計算で得られた実効断面積を参照値として、RSE 計算で得られた実効断面積の精度 を確認する。集合体の位置 B(図 3.9)における実効断面積の精度を図 4.4 から図 4.6 に示 す。







図 4.5 MOX 集合体位置 B における U の実効断面積の比較: (RSE-UFG)/UFG



図 4.6 MOX 集合体位置 B における Pu と Am の実効断面積の比較: (RSE-UFG)/UFG

図 4.4 から図 4.6 の結果を観察すると、実効断面積の精度は欠損率を 1E-3 まで大きくし ても欠損率がゼロの場合と同等の精度が保たれることがわかる。図 4.3 より、欠損率が 1E-3 のときの共鳴領域における展開次数は最大で 7 次程度であり、展開次数の最大値 21 次と 比較して、少ない次数でも実効断面積を高い精度で再現できることがわかった。

次に計算時間について示す。基底と断面積モーメントの生成を除いた RSE 計算の輸送計 算および実効断面積の計算に要した時間を図 4.7 に示す。なお、図 4.7 では欠損率がゼロの 場合の計算時間を 100 としており、実際の計算時間は UO2 集合体で 4975 [s]、MOX 集合体 で 4964 [s]である。



図 4.7 UO2 集合体または MOX 集合体の RSE 計算における計算時間(欠損率ゼロの場合を 100 とする)

図 4.7 より、低ランク近似を適用した場合の計算時間は3割から4割程度までに削減されることがわかる。全体的に展開次数が半分以下であるのに対して、計算時間の削減がそれに満たないのは、データの読み込みや実効断面積等の輸送計算以外の処理が含まれているためである。

4.3 MOC における離散化条件

本節では、RSE 法の輸送計算における MOC の離散化条件について検討する。UO2 単一 集合体体系において、MOC の各離散化パラメータが実効断面積の精度に対してどの程度感 度を持つのか確認するとともに、計算時間の削減を試みる。

4.3.1 計算条件

計算体系には、前述の 3.4 節と同様に VERA ベンチマークに基づく単一集合体体系を用いる。燃料は UO2 燃料とする。

参照値は UFG 計算する。参照計算で用いる MOC の離散化条件を表 4.5 に示す。

レイトレース幅 [cm]	0.05	
方位角分割数 (2π)	32	
極角分割数 (π)	6 (TY 分点 ^[27])	
燃料セルの 空間メッシュ		

表 4.5 参照計算における MOC の離散化条件

RSE 計算の MOC の離散化条件は表 4.5 を基準とする。表 4.5 のうち1 つのパラメータを 表 4.6 に示した粗い条件に変更して RSE 計算を行う。

レイトレース幅[cm]	0.20
方位角分割数 (2π)	4
極角分割数 (π)	2 (TY 分点 ^[27])
空間メッシュ	

表 4.6 RSE 計算に用いる MOC の離散化パラメータ

したがって、RSE 計算は表 4.7 に示す5ケースを行う。

Case1	参照計算と同一条件
Case2	レイトレース幅のみ変更
Case3	方位角分割数のみ変更
Case4	極角分割数のみ変更
Case5	空間メッシュのみ変更

表 4.7 離散化パラメータ別 RSE 計算の計算ケース

4.3.2 計算結果

まず、RSE 計算で得られた実効断面積を参照値と比較する。集合体の2つの位置における実効断面積の比較を図4.8から図4.12に示す。



















図 4.12 実効断面積の比較 [Case5: 空間メッシュのみ粗いものに変更]

図 4.8 から図 4.12 より、特に Case5 の空間メッシュを粗くした場合には、Case1 の傾向 と同様であり、実効断面積の精度に対する空間メッシュの影響が小さいことがわかる。ま た、レイトレース幅も比較的影響が小さいことがわかる。一方で、方位角や極角の分割数 は共鳴群の広い範囲に対して影響があることがわかる。

また、それぞれの計算時間を図 4.13 に示す。


図 4.13 計算ケースごとの計算時間

空間メッシュを粗くした場合には、計算時間は半分程度まで削減される。その他のパラメ ータも適切に組み合わせることで、実効断面積の精度を保ちつつ、さらに計算時間の削減が 可能であると言える。

4.4 RSE 法の輸送計算におけるエネルギー群構造

本節では、RSE 法の輸送計算におけるエネルギー群構造に粗いエネルギー群を適用し、 実効断面積の精度や計算時間について確認する。

4.4.1 概要

RSE 法では中性子東モーメントに関する輸送方程式をエネルギー群ごとに解き、得ら れた中性子東モーメントを基底で展開することによって超詳細群の中性子束が得られる。 最終的には全エネルギー範囲に対して超詳細群の中性子束が得られるため、輸送計算に用 いるエネルギー群構造と実効断面積を算出するエネルギー群構造が一致する必要はない。

より粗いエネルギー群構造で輸送計算を行った場合に、再構成されたスペクトルおよび 実効断面積の精度が高いまま得ることができれば、計算時間を削減することが可能である。 一方で、エネルギー群内のスペクトルを基底で展開することが困難になる可能性がある。

本検討では、RSE 計算に以降に示す粗いエネルギー群を適用する。超詳細群のスペクト ルおよび XMAS172 群で算出された実効断面積の精度を確認する。

4.4.2 計算条件

まず、適用するエネルギー群構造を示す。第3章に示した XMAS172 群構造に加えて、 MOC 輸送計算コード MPACT で採用されている 51 群構造^[32]を用いる。表 4.8 に 51 群構造 を示す。ただし、全エネルギー範囲の上限と下限はこれまでの計算と一致させるようにした。 さらに、51 群構造の共鳴領域(1 eV – 1E5 eV)を粗くした 29 群、26 群、25 群を用いる。

		*			
Group	Upper energy	Group	Upper energy	Group	Upper energy
Oloup	boundary [eV]	Group	boundary [eV]	Group	boundary [eV]
1	1.964033E+07	18	4.830000E+01	35	1.080000E+00
2	6.434000E+06	19	3.000000E+01	36	1.010000E+00
3	4.304000E+06	20	1.440000E+01	37	9.750000E-01
4	2.354000E+06	21	1.190000E+01	38	9.250000E-01
5	1.356000E+06	22	8.100000E+00	39	7.500000E-01
6	8.200000E+05	23	7.150000E+00	40	6.250000E-01
7	4.920000E+05	24	6.250000E+00	41	5.000000E-01
8	2.000000E+05	25	5.400000E+00	42	3.500000E-01
9	7.300000E+04	26	5.000000E+00	43	2.750000E-01
10	5.000000E+04	27	4.700000E+00	44	2.000000E-01
11	2.000000E+04	28	3.730000E+00	45	1.500000E-01
12	9.500000E+03	29	2.470000E+00	46	1.000000E-01
13	2.250000E+03	30	1.860000E+00	47	8.000000E-02
14	9.500000E+02	31	1.450000E+00	48	6.000000E-02
15	3.050000E+02	32	1.250000E+00	49	4.000000E-02
16	1.430000E+02	33	1.175000E+00	50	3.000000E-02
17	7.600000E+01	34	1.130000E+00	51	1.000000E-02
Lower energy boundary [eV]					1.000010E-05

表 4.8 MPACT51 群

Group	Upper energy	Comm	Upper energy
	boundary [eV]	Group	boundary [eV]
1	1.964033E+07	16	9.250000E-01
2	6.434000E+06	17	7.500000E-01
3	4.304000E+06	18	6.250000E-01
4	2.354000E+06	19	5.000000E-01
5	1.356000E+06	20	3.500000E-01
6	8.200000E+05	21	2.750000E-01
7	4.920000E+05	22	2.000000E-01
8	2.000000E+05	23	1.500000E-01
9	1.000000E+05	24	1.000000E-01
10	1.000000E+04	25	8.000000E-02
11	1.000000E+03	26	6.000000E-02
12	1.000000E+02	27	4.000000E-02
13	1.000000E+01	28	3.000000E-02
14	1.010000E+00	29	1.000000E-02
15	9.750000E-01		
	Lower energy bound	1.000010E-05	

表 4.9 29 群構造

Crown	Upper energy	Crown	Upper energy
Group	boundary [eV]	Group	boundary [eV]
1	1.964033E+07	14	7.500000E-01
2	6.434000E+06	15	6.250000E-01
3	4.304000E+06	16	5.000000E-01
4	2.354000E+06	17	3.500000E-01
5	1.356000E+06	18	2.750000E-01
6	8.200000E+05	19	2.000000E-01
7	4.920000E+05	20	1.500000E-01
8	2.000000E+05	21	1.000000E-01
9	1.000000E+05	22	8.000000E-02
10	1.000000E+03	23	6.000000E-02
11	1.010000E+00	24	4.000000E-02
12	9.750000E-01	25	3.000000E-02
13	9.250000E-01	26	1.000000E-02

表 4.10 26 群構造

Lower energy boundary [eV]

1.000010E-05

表 4.11 25 群構造

Group	Upper energy	Group	Upper energy
	boundary [eV]	Oroup	boundary [eV]
1	1.964033E+07	14	6.250000E-01
2	6.434000E+06	15	5.000000E-01
3	4.304000E+06	16	3.500000E-01
4	2.354000E+06	17	2.750000E-01
5	1.356000E+06	18	2.000000E-01
6	8.200000E+05	19	1.500000E-01
7	4.920000E+05	20	1.000000E-01
8	2.000000E+05	21	8.000000E-02
9	1.000000E+05	22	6.000000E-02
10	1.010000E+00	23	4.000000E-02
11	9.750000E-01	24	3.000000E-02
12	9.250000E-01	25	1.000000E-02
13	7.500000E-01		

Lower energy boundary [eV] 1.000010E-05

計算体系には VERA ベンチマークの UO2 単一セルを用いる。境界条件は完全反射である。特異値が参照値は UFG 計算とし、MOC の計算条件は表 4.3 と同様である。

RSE 計算のバックグラウンド断面積は表 4.1 を用い、展開次数は最大である。また、実効 断面積は XMAS172 群構造で作成する。

4.4.3 計算結果

上記のそれぞれのエネルギー群において RSE 計算を行う。まず、超詳細群スペクトルを UFG 計算と比較する。図 4.14 に UO2 燃料内の共鳴領域における RSE 計算と UFG 計算の スペクトルの差異を示す。なお、25 群構造では中性子束モーメントの計算が収束しなかっ たため計算結果は示さない。



図 4.14 UO2 燃料内の超詳細群スペクトルの差異: (RSE-UFG)/UFG

図 4.14 より、29 群まで粗くしても中性子束は全体的に一致しており、局所的に大きな差 異が現れるのみである。262 群まで粗くすると、全体的に差異が現れる。



次に、実効断面積の差異を群構造ごとに図 4.15 から図 4.18 に示す。



図 4.18 UO2 燃料内共鳴核種の実効断面積の比較 (26 群)

172 群の場合は差異が±1 %未満であるのに対して、51 群まで粗くすると±2 %未満の精度 となる。それ以上粗くした場合には、差異が 10 %を超えており精度が低い。したがって、 XMAS172 群構造では 1 eV – 1E5 eV のエネルギー領域を約 90 群に分割しているが、51 群構 造のように 20 群程度の分割でも、実効断面積に対してある程度の精度を確保することがで きることがわかる。

最後に計算時間について示す。UO2の単一集合体に適用した場合、172群構造で約5000 [s]、51群構造で約2000[s]であり、大幅な削減が可能である。UO2単一集合体に適用した場 合の内部反復回数を図4.19に示す。エネルギー群を粗くしたときには共鳴領域で反復回数 が数回増えるが、群構造を減らしたことにより全体の計算時間は削減されたと言える。



図 4.19 UO2 単一集合体 RSE 計算における各エネルギー群の内部反復回数

4.5 減速中性子源の取り扱い

本節では、RSE 法における減速中性子源の取り扱い方法について検討する。第2章で示した中性子源の計算方法とは別に、計算過程で保存しておくべきデータ量を削減するような2つの計算方法を提案する。

4.5.1 中性子源の取り扱い

まず、RSE 法における中性子束モーメントの輸送方程式を式(4.5.1)に示す。

$$\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Psi_{n,g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) + \sum_{i=1}^{N} \Sigma_{t,g,n,i}(\mathbf{r}) \Psi_{i,g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = Q_{n,g}(\mathbf{r})$$
(4.5.1)

式(4.5.1)右辺の中性子源項は、以下のように散乱源と固定源が含まれる。

$$Q_{n,g}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{g'=1}^{G} \sum_{j=1}^{N} \Sigma_{s,jg' \to ng}(\mathbf{r}) \phi_{j,g'}(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi} Q_{fixed,n,g}(\mathbf{r})$$
(4.5.2)

散乱断面積モーメントは式(4.5.3)で定義される。

$$\Sigma_{s,jg'\to ng}(\mathbf{r}) = \int_{\Delta E_g} \int_{\Delta E_{g'}} f_{n,g}(E_g) \Sigma_s(\mathbf{r}, E_{g'} \to E_g) f_{j,g'}(E_{g'}) dE_{g'} dE_g$$
(4.5.3)

ここで、RSE 法における散乱断面積モーメント $\Sigma_{s,jg' \to ng}(\mathbf{r})$ は従来の輸送方程式における 散乱マトリックス比べて複雑である。なぜなら、エネルギー群間の輸送に加えて展開次数間 の輸送が含まれるからである。散乱断面積モーメントは位置に依存するため、多領域体系に 適用するためには、断面積モーメント作成の段階で比較的多くのデータを保存しておくこ とが必要となる。

この問題を回避する方法として、RSE 法の輸送計算の前に散乱断面積モーメントをあら かじめ作成せずに輸送方程式を解く方法を説明する。

A) 減速方程式を利用する方法

まず、中性子源モーメント $Q_{n,g}(\mathbf{r})$ は超詳細群の中性子源 $Q(\mathbf{r}, E_g)$ を用いて以下のよう得られる。

$$Q_{n,g}(\mathbf{r}) = \int_{\Delta E_g} f_{n,g}(E_g) Q(\mathbf{r}, E_g) dE_g$$

$$= \int_{\Delta E_g} f_{n,g}(E_g) \{Q_{sld}(\mathbf{r}, E_g) + Q_{fixed}(\mathbf{r}, E_g)\} dE_g$$
(4.5.4)

ここで、 $Q_{sld}(\mathbf{r}, E_g)$ は減速中性子源、 $Q_{fixed}(\mathbf{r}, E_g)$ は固定源である。減速中性子源は減速方程 式^{[5][10]}により、以下のように計算できる。

$$Q_{sld}(\mathbf{r}, E_g) = \sum_k \int_{E_g}^{E_g/\alpha_k} \frac{N_k \sigma_{s,k}(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E)}{(1 - \alpha_k)E} dE$$
(4.5.5)

ここで、kは核種、 N_k は原子数密度、 $\sigma_{s,k}(\mathbf{r}, E)$ は核種kの微視的弾性散乱断面積である。また

 α_k は中性子に対する相対質量 A_k を用いて以下で表される。

$$\alpha_k = \left(\frac{A_k - 1}{A_k + 1}\right)^2 \tag{4.5.6}$$

式(4.5.5)には超詳細群スペクトル**(r,E)**が含まれるが、これが最終的に求めたいパラメー タである。したがって、反復計算で更新される中性子東モーメントから超詳細群のスペクト ルを再構成することで、減速中性子源を計算する。

なお、中性子東モーメントの反復計算毎にスペクトルを再構成し、減速計算を行う必要が あることから、オリジナルの手法よりも計算時間を要する。

手法Aの計算フローを図 4.20 に示す。



B) 減速方程式と散乱断面積モーメントを組み合わせる方法

本手法は、前述の手法 A とオリジナルの手法を組み合わせるものである。まず、散乱源 項を自群散乱(*isld*)と下方散乱(*usld*)に分割して、中性子源のモーメントを以下のように記 述する。

$$Q_{n,g}(\mathbf{r}) = Q_{sld,n,g}(\mathbf{r}) + Q_{fixed,n,g}(\mathbf{r})$$

= $Q_{isld,n,g}(\mathbf{r}) + Q_{usld,n,g}(\mathbf{r}) + Q_{fixed,n,g}(\mathbf{r})$ (4.5.7)

自群散乱のモーメントはオリジナルの手法と同様に断面積モーメントを用いて式(4.5.8) で計算する。

$$Q_{isld,n,g}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \sum_{j=1}^{N} \Sigma_{s,g,j \to n}(\mathbf{r}) \phi_{g,j}(\mathbf{r})$$
(4.5.8)

ただし、エネルギー群間の散乱は考慮しないので、輸送計算の前にあらかじめ計算するべき 散乱断面積モーメント $\Sigma_{s,g,j \to n}(\mathbf{r})$ は展開次数間の散乱だけを考慮すればよい。

下方散乱のモーメントは手法Aと同様に減速方程式を用いて式(4.5.9)で計算する。

$$Q_{usld,n,g}(\mathbf{r}) = \int_{\Delta E_g} f_{n,g}(E_g) Q_{usld}(\mathbf{r}, E_g) dE_g$$

$$Q_{usld}(\mathbf{r}, E_g) = \begin{cases} \sum_k \int_{E_{g-1}}^{E_g/\alpha_k} \frac{N_k \sigma_{s,k}(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E)}{(1 - \alpha_k)E} dE & (E_{g-1} < E_g/\alpha_k) \\ 0 & (E_{g-1} \ge E_g/\alpha_k) \end{cases}$$
(4.5.9)

ただし、式(4.5.9)では自群散乱は考慮せず、g群より高いエネルギー群からの下方散乱のみ を考慮するので、 $E_{g-1} \ge E_g/\alpha_k$ の範囲で散乱源をゼロとしている。

手法Bの計算フローを図 4.21 に示す。



図 4.21 手法 B: 減速方程式と散乱断面積モーメントを組み合わせる手法

手法 B では、あらかじめ計算しておく散乱断面積モーメントを自群散乱に限定すること で、オリジナルの手法よりもデータ量を削減している。また、減速計算に用いる中性子束は 輸送計算途中のエネルギー群に依存しないため、減速計算とそれに必要な中性子束モーメ ントの再構成は、エネルギー群ごとに1回である。したがって、手法 A よりも計算時間は 少ない。

以下では、上記2種類の手法およびオリジナルの手法を用いて、RSE 計算を行う。

4.5.2 計算条件

計算体系は MOX の単一集合体体系とする。形状と組成は 4.2 節と同様である。UFG 計算 を参照値とし、MOC の計算条件は表 4.3 と同様である。

RSE 計算のバックグラウンド断面積は表 4.1 を用いる。また、展開次数は 16 次である。

4.5.3 計算結果

散乱源の取り扱いが異なる3つのRSE計算を行い、UFG計算と比較する。まず、図4.22 に MOX 燃料の位置 B における超詳細群の中性子束の比較を示す。差分は(RSE-UFG)/UFG で定義する。



手法 B

図 4.22 MOX 燃料内の超詳細群スペクトルの比較: (RSE-UFG)/UFG

図 4.22 より、共鳴領域における中性子束の精度は、散乱源の取り扱いの違いに依らない ことがわかる。実効断面積の精度も同様であることは自明であるが、実効断面積の精度を図 4.23 と図 4.24 に示す。





図 4.23 MOX 燃料内 U の実効断面積の比較: (RSE-UFG)/UFG



手法 B

図 4.24 MOX 燃料内 Pu と Am の実効断面積の比較: (RSE-UFG)/UFG

以上より、RSE 計算では中性子源の取り扱いによって、実効断面積の精度に変化がない ことを確認した。

次に計算時間を図 4.25 で比較する。なお、計算時間は RSE 計算の輸送計算に要する時間 であり、基底と断面積モーメントの作成時間は含まれない。



図 4.25 MOX 集合体における RSE 計算の計算時間(オリジナルを 100 とする)

図 4.25 より、すべての散乱断面積モーメントがあらかじめ計算されているオリジナルの 手法で最も計算時間が小さい。一方で、中性子束モーメントの反復計算毎に超詳細群スペク トルの再構成と減速計算を行う手法 A で最も時間がかかる。

最後に、RSE 計算の輸送計算を行う前に必要となる散乱断面積モーメントのデータ量の 概算を示す。散乱断面積モーメント $\Sigma_{s,jg' \to ng}(\mathbf{r})$ は式(4.5.3)に示すように、エネルギー群g'と g、展開次数jとn、そして位置 \mathbf{r} に依存する。ただし、式(4.5.5)に含まれる散乱マトリックス $\Sigma_s(\mathbf{r}, E_{g'} \to E_g)$ は、式(4.5.5)の減速方程式と同様の形(中性子束を除く)で評価されるため、位 置 \mathbf{r} は、位置 \mathbf{r} における核種の原子数密度とポイントワイズの微視的散乱断面積のみに依存 することと同じである。また、微視的散乱断面積は核データライブラリから与えられるため、 基本的には温度のみに依存する。したがって、散乱断面積モーメントの位置 \mathbf{r} は、温度を含 めた組成に対する依存性と同義である。

本検討では、エネルギー群数が172群、展開次数が16次である。また、MOX集合体に含まれる組成は、MOX燃料、減速材、被覆管の3種類であり、温度はすべて600Kである。 したがって、散乱断面積モーメントのデータ量は、倍精度の場合には以下のとおりである。

・ オリジナルの手法の場合

 $(エネルギー群 172)^2 \times (展開次数 16)^2 \times (組成 3) \times (8 byte) \approx 170 MB$ ただし、本検討では下方散乱のみ $(g' \leq g)$ 考慮したので以下となる。

$$\left(\frac{172(172+1)}{2}\right) \times \left(\text{ K H } \times 3 \right)^2 \times \left(\text{ A } \text{ K } 3 \right) \times (8 \text{ byte}) \approx 90 \text{ MB}$$

手法Aの場合

保存する散乱断面積モーメントなし。

手法 B の場合

(エネルギー群 172)×(展開次数 16)²×(組成 3)×(8 byte)≈1 MB

オリジナルの手法の場合では、その他 2 つの手法と比較してデータ量が多いことがわか る。オリジナルと手法 B の違いは、エネルギー群間の輸送を考慮するか否かであるため、 数百群のエネルギー群を用いる場合には 10²のオーダーの差が出ることになる。今回の検討 では、MOX 集合体に含まれる組成が 3 種類であるため、データ量の大きさは非現実的なほ どではない。一方で、燃料棒ごとに組成の異なる体系など、組成や温度が多様な体系に適用 する場合には、さらにデータ量が増加するため、注意が必要である。

以上より、あらかじめ散乱断面積モーメントを計算せずに、中性子束モーメントの輸送計 算途中に散乱源を計算する手法を提案した。組成や温度が同様な体系で繰り返して RSE 計 算を行う場合には、計算時間の観点からオリジナルの手法が有効である。一方で、散乱断面 積モーメントは位置に依存する量であるため、多様な体系に対する断面積モーメントのデ ータ量が膨大となる場合には、手法 A や B が有効となる。

4.6 本章のまとめ

本章では、RSE 法の高速化に関する検討を行った。4.2 節では、特異値の寄与率に基づく 低ランク近似を適用し、計算時間を半分以下に削減できることを確認した。4.3 節では、RSE 法の輸送計算における MOC の離散化条件のパラメータサーベイを行い、実効断面積に対す る各パラメータの感度を確認した。4.4 節では、粗いエネルギー群で輸送計算を行い、共鳴 領域が 20 群程度でも十分な精度が得られることを確認した。4.5 節では、減速方程式を取り 入れた RSE 法により、断面積モーメントのデータ量が膨大になることを回避する手法を提 案した。

本検討では、それぞれの高速化を組み合わせた検討は行っていないため、より詳細な検討が必要である。

第5章 結論

5.1 まとめ

本研究では、従来の共鳴計算手法における課題を解決すべく、新しく提案された共鳴計算 手法である RSE 法(Resonance calculation using energy Spectrum Expansion method)に関する検 討を行った。各章のまとめを以下に記述する。

第1章では、本論文の背景と目的を述べた。現在の炉心解析における核設計では、計算機 資源と計算効率の観点から、詳細な空間・エネルギー依存性を考慮する小規模体系の計算を 始点として、規模を拡大しつつ、空間・エネルギー依存性の粗い計算を行うという多段階の 計算が実施される。大別すると、共鳴計算、格子計算、炉心計算の三段階に分類される。本 研究では、核設計の中でも最上流である共鳴計算の高度化に着目した。

共鳴計算の目的は、断面積ライブラリで与えられる連続エネルギー相当の断面積を数十 群から数百群まで群縮約し、格子計算の入力となる実効断面積を求めることである。共鳴断 面積は中性子束に対して種々の効果を与えるので、反応率を保存するような実効断面積を 求めるには、共鳴の複雑なエネルギー依存性を正しく評価する必要がある。

代表的な共鳴計算手法には、超詳細群計算、等価原理、サブグループ法の三つがある。しかしながら、それぞれの手法には利点と欠点があり、共鳴計算の歴史において、高い計算精度と計算速度を両立する手法は確立されていない。したがって、従来手法の欠点を克服しうる RSE 法の精度確認とその高速化を本研究の目的とした。

第2章では、共鳴計算手法である RSE 法の理論とその特徴を述べた。RSE 法は中性子束 をエネルギーに関する直交基底で展開する手法である。中性子束が基底で展開できると仮 定すると、中性子束モーメント(展開係数)に対する輸送方程式が導出される。中性子束モー メントに対する輸送方程式は、従来のそれと非常に類似しており、数値的に解くことが可能 かつ実装が容易である。また、対象とする非均質体系のスペクトルの形を網羅するような複 数の均質体系のスペクトルを特異値分解することで、直交基底が抽出される。得られる特異 値の大きさは展開される基底の寄与を示している。寄与の小さい基底を削減して展開する ことで計算量が削減できる。これは ROM の概念に基づく。理論的には、RSE 法はどんな輸 送理論にも適用可能であるが、本研究では Characteristics 法を用いて RSE 法を実装し、その 計算手順を示した。

第3章では、三つのベンチマーク体系に対する RSE 法の適用性を示した。超詳細群計算 を参照値として、実効断面積の精度を確かめるとともに、それぞれの体系において、主な共 鳴の効果の取り扱いが可能であること示した。1. マルチセル体系では、共鳴干渉効果・ス ペクトル干渉効果、2. 燃料内に温度分布を持つ単一セル体系では、空間自己遮蔽効果・共 鳴干渉効果、3. 単一集合体体系では、大規模非均質体系に対する適用性を示した。さらに、 単一集合体において固有値計算を実施し、RSE 法で得られた実効断面積の精度は十分高く、 参照となる超詳細群計算で得られた実効断面積を用いた結果と比較しても実効増倍率と出 力分布の差異が小さいことを確認した。

また、RSE 法では中性子束から抽出された基底を用いて解析対象の中性子束を展開する と同時に、中性子源も同じ基底を用いて展開している。この妥当性を確認するため、中性子 束だけでなく中性子源を考慮した基底を用いた RSE 計算を実施した。基底の作成に中性子 源を用いることで、中性子源の再現性が向上するとともに、中性子束および実効断面積の精 度も向上した。一方で、精度の向上度合いは小さく、RSE 法において中性子源を中性子束か ら抽出した基底で展開することの妥当性を示した。

第4章では、RSE 法の高速化を試みた。以下、四つの検討を行った。まず、低ランク近似 による計算量の削減を試みた。特異値の欠損率に応じた低ランク近似により、全エネルギー 群に対して一意に展開次数を決定した。UO2 または MOX の単一集合体において、6 割近く 計算量を削減できた。二つ目は、RSE 法の輸送計算における MOC の計算条件のパラメータ サーベイである。本研究の範囲では、空間メッシュとレイトレース幅は RSE 法で得られる 実効断面積の精度に対して、感度が小さいことを示した。 三つ目は、RSE 法の輸送計算に対 する粗いエネルギー群構造の適用である。RSE 法は超詳細群スペクトルを再構成する手法 であるため、輸送計算で用いるエネルギー群構造と実効断面積を作成する構造が一致する 必要はない。共鳴領域(1 eV- 1E5 eV)が約 90 群された XMAS172 群構造を基準として、共鳴 領域が約 20 分割された 51 群構造でも比較的精度よく実効断面積を得られることを示した。 また、共鳴領域を1群まで粗くした場合には、中性子東モーメントの輸送計算が収束せず、 本手法の適用限界を示した。最後に、減速中性子源の取り扱いについて、計算過程で必要と なるデータ量と計算量の観点から、オリジナルの手法と異なる二つの計算アルゴリズムを 提案した。これらの手法は、RSE 法における散乱源に対応する散乱断面積のモーメントと 中性子束モーメントの積において、その一部またはすべてを減速方程式で代用する手法で ある。すべての手法において、中性子束と実効断面積の精度がほとんど一致することを示し た。計算時間はオリジナルの手法で最も小さいが、散乱断面積モーメントをあらかじめ計 算・保存しておく必要があることから、断面積モーメントのデータ量が膨大になる場合にお いては、減速方程式を利用する二つの手法が有用である。

以上より、RSE 法は共鳴効果を陽に取り扱い、精度の高い実効断面積を得られる手法で あることを確認した。また、計算条件を工夫することで高速化が可能であることが確かめら れた。最後に、計算時間と計算速度の観点から、従来の共鳴計算手法に対する RSE 法の位 置づけを図 5.1 に示す。計算精度の観点からは、最も詳細な超詳細群計算とほぼと同等であ る。一方で、RSE 法の計算時間は超詳細群計算より短い。等価原理やサブグループ法と同等 まで計算時間を縮めれば、非常に有効な手法となり得る。



図 5.1 従来手法に対する RSE 法の位置づけ

5.2 今後の課題

前節にまとめた通り、本研究では、代表的な体系において RSE 法が超詳細群計算と同等の計算精度を得られることを確かめた。本手法の実用性を高めるための課題を以下に示す。

(1) CMFD 加速計算の適用

本研究では、RSE 法の実装における輸送計算手法として MOC を用いた。一般的に、MOC の収束性を加速する手法として、非線形加速法である CMFD 加速法(Coarse Mesh Fine Difference 加速法)^[33]が適用される。MOC による中性子束モーメントの輸送計算に対して CMFD 加速計算を適用することで、高速な計算を実施できる可能性がある。

ここで、第4章の低ランク近似で利用した UO2 単一集合体の RSE 計算における、内部反 復回数と展開次数をそれぞれ図 5.2 と図 5.3 に示す。図 5.2 より、各エネルギー群での反復 回数は 10-20 回程度である。また、図 5.3 に示すように低ランク近似により展開次数が減少 しても、反復回数の変化が見られない。これは、低ランク近似を適用してもなお、CMFD 加 速法の有効性があることを示している。



図 5.2 特異値の欠損率ごとの、各エネルギー群における内部反復回数



図 5.3 特異値の欠損率ごとの展開次数

RSE 法に対する CMFD 加速法において十分な加速効果を得るためには、中性子東モーメントに対する加速計算を適用することが望ましい。しかしながら、中性子東モーメントは正 負の値を取り、従来の CMFD 加速方程式を直接適用できないことが予想されるため、検討 を行う必要がある。

(2) 体系の拡張

本研究では、単一集合体体系までの体系を取り扱った。これを拡張してマルチ集合体や全 炉心に対する本手法の適用性検討が望まれる。もし、全炉心に対する適用が可能であれば、 核計算における多段階のステップが削減され、空間やエネルギーをより詳細に評価した計 算が可能となる。

また、先に述べた通り、燃焼燃料への適用性を確認する必要がある。なお、MOX 燃料は UO2 燃料の燃焼燃料と組成が類似していることから、本研究の範囲でも本手法が燃焼燃料 に適用可能であるという推測ができる。

(3) 効率的な直交基底作成方法の開発

RSE 法では、展開次数が計算コストに直結することから、少ない次数で精度良く中性子 束を展開できるような直交基底を作成することが望ましい。本研究では、解析対象に含まれ る均質媒質のスペクトルにバックグラウンド断面積を与えることで基底を作成したが、一 方で、小規模な非均質体系のスペクトルを用いるというような方法もあり得る。また、燃焼 燃料など様々な組成を対象とする場合には、すべての組成に対して同じ基底で展開できる ことが望まれるが、このような検討は本研究では実施していない。したがって、効率的な直 交基底の作成方法を開発することが望まれる。

参考文献

- 1. 原子力委員会, "平成30年度版 原子力白書" (Sep. 2019).
- UNITED NATIONS, "Framework Convention on Climate Change, Report of the Conference of the Parties on its twenty-first session, held in Paris from 30 November to 13December 2015," GE.16-01194(E) (Jan. 2016).
- 3. 桐村一生,「PWRの核設計のその考え方」,第49回炉物理夏期セミナー「炉心設計とその解析手法の基礎を学ぶ」テキスト,日本原子力学会,(2017).
- 4. 光安岳,「BWRの炉心設計のその考え方」,第49回炉物理夏期セミナー「炉心設計とその解析手法の基礎を学ぶ」テキスト,日本原子力学会,(2017).
- 5. 小林啓祐, 原子炉物理, コロナ社 (1996).
- 6. 山本章夫,「Boltzmann方程式の解法、A決定論的手法」,第34回炉物理夏期セミナー 「Boltzmann方程式ルネッサンス」テキスト,日本原子力学会,(2002).
- 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「基礎から学ぶ炉心解析」テキスト,日本原子力学会,(2004).
- H. KOIKE, "Development of A Unified Resonance Self-Shielding Methodology for Lattice Physics Calculation in Light Water Reactor Core Analysis," Ph.D Thesis, Nagoya University (2017).
- K. SHIBATA et al., "JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering," J. Nucl. Sci. Eng., 48, 1, 1 (2011).
- 10. D. G. CACUCI Ed., *Handbook of Nuclear Engineering*, Vol. 2, Chap.9, Springer, New York (2010).
- 11. P. H. KIER and A. A. ROBBA, "RABBLE, A Program for Computation of Resonance Absorption in Multiregion Reactor Cells," ANL-7326, Argonne National Laboratory (Apr. 1967).
- 12. 小池啓基,「格子計算の基礎」,第49回炉物理夏期セミナー「炉心設計とその解析手法の 基礎を学ぶ」テキスト,日本原子力学会,(2017).
- 13. N, SUGIMURA, and A. YAMAMOTO, "Resonance Treatment Based on Ultra-fine-group Spectrum Calculation in the AEGIS Code," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **44**, *7*, 958 (2007).
- 14. R. J. J. STAMM'LER and M. J. ABBATE, *Methods of steady-state reactor physics in nuclear design*, Academic Press, London (1983).
- 15. M. N. NIKOLAEV et al, "The Method of Subgroups for Considering the Resonance Structure of the Cross Sections in Neutron Calculations (Part 1)," *Sov. At. Energy.*, **29**, *1*, 689 (1970).
- T. YAMAMOTO, and T. TAKEDA, "Subgroup Parameters based on Orthogonal Factorization," J. Nucl. Sci. Technol., 44, 1, 36 (2007).
- R. KONDO et al., "A New Resonance Calculation Method Using Energy Expansion Based on a Reduced Order Model," *Nucl. Sci. Eng.* DOI:10.1080/00295639.2020.1863066

- 18. A. YANKOV, "Analysis of Reactor Simulation Using Surrogate Model," Ph.D. Thesis, University of Michigan (2015).
- M. MATSUSHITA, A. YAMAMOTO, and T. ENDO, "Development of a Reduced Order Model for Severe Accident Analysis Codes by Singular Value Decomposition Aiming Probabilistic Safety Margin Analysis," *J. Nucl. Sci. Technol.*, 57, 5, 573 (2020).
- H. S. ABDEL-KHALIK, "Feasibility Study of an Integrated Framework for Characterization of Uncertainties with Application to CANDU Steady State and Transient Reactor Physics Simulation," Canadian Nuclear Safety Commission (Jun. 2015).
- 21. EIGEN; http://eigen.tuxfamily.org/index.php?title=Main_Page (accessed, 2017).
- 22. K. TADA et. al., "Development and Verification of a New Nuclear Data Processing System FRENDY," J. Nucl. Sci. Technol., 54, 7, 806 (2017).
- A. TRKOV, M. FERMAN, and D. A. BROWN, "ENDF-6 Formats Manual," CSEWG Document ENDF-102 Report BNL-90365-2009 Rev.2SVN Commit: Revision 212M, Brookhaven National Laboratory, (Jan. 2018).
- 24. J. L. CONLIN and P. ROMANO., "A Compact ENDF (ACE) Format Specification," LA-UR-19-29016, Los Alamos National Laboratory (Sep. 2019).
- 25. A. YAMAMOTO 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 (2017).
- H. KOIKE et al, "Integration of Equivalence Theory and Ultra-fine-group Slowing-down Calculation for Resonance Self-shielding Treatment in Lattice Physics Code GALAXY," J. Nucl Sci Technol., 53, 6, 842 (2016).
- A. YAMAMOTO et al., "Derivation of Optimum Polar Angle Quadrature Set for the Method of Characteristics Based on Approximation Error of the Bickley Function," *J. Nucl. Sci. Technol.*, 44, 2, 129 (2007).
- A. T. CODFREY., "VERA Core Physics Benchmark Progression Problem Specifications," CASL-U-2021-0131-004, Oak Ridge National Laboratory (Aug. 2014).
- A. YAMAMOTO, T. ENDO, K. TADA, "Development of FRENDY Nuclear Data Processing Code: Generation Capability of Multi-group Cross Sections from ACE File," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **122**, 714 (2020).
- D. Knott, "KRAM, A Lattice Physics Code for Modeling the Detailed Depletion of Gadolinia Isotopes from BWR Fuel Designs," PhD Thesis, The Pennsylvania State University, University Park, PA, (1991).
- M. YAMAMOTO, A. YAMAMOTO, and T. ENDO, "Compression of Cross-Section Data Size for High-Resolution Core Analysis Using Dimensionality Reduction Technique," *Nucl. Sci. Eng.*, 195, 1, 33 (2021).

- K. S. KIM, "Generation of the V4.2m5 AMPX and MPACT 51 and 252-Group Libraries with ENDF/B-VII.0 and VII.1," CASL-U-2016-1177-000 Rev.0, Oak Ridge National Laboratory (Dec. 2016).
- 33. K. S. SMITH, "Nodal Method Storage Reduction by Non-Linear Iteration," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 44, 265 (1984).

公刊論文一覧

- R. Kondo, T. Endo, A. Yamamoto, S. Takeda, H. Koike, K. Yamaji, and D. Sato, "A New Resonance Calculation Method Using Energy Expansion Based on a Reduced Order Model," *Nucl. Sci. Eng.* DOI: 10.1080/00295639.2020.1863066
- [2] A. Yamamoto, R. Kondo, T. Endo, S. Takeda, H. Koike, K. Yamaji, and D. Sato, "Resonance Calculation using Energy Spectral Expansion based on Reduced Order Model: Application to Heterogeneous Geometry," *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **121**, 1316-1320 (2019).
- [3] R. Kondo, T. Endo, A. Yamamoto, S. Takeda, H. Koike, K. Yamaji, and D. Sato, "Performance of the RSE (Resonance calculation using energy Spectral Expansion) Method for Heterogeneous Pin-cell Geometry," *Proc. RPHA19*, Osaka, Japan, Dec. 2-3, 2019.
- [4] 近藤諒一,遠藤知弘,山本章夫,竹田敏,小池啓基,山路和也,左藤大介,"Reduced Order Modelに基づくエネルギー展開基底を用いた共鳴計算(3)マルチセル体系への適用,"日 本原子力学会春の年会,福島大学,3月16日 - 18日,(2020).
- [5] R. Kondo, T. Endo, A. Yamamoto, S. Takeda, H. Koike, K. Yamaji, K. Ieyama, and D. Sato, "A Resonance Calculation Method using Energy Expansion based on A Reduced Order Model: Use of Ultra Fine Group Spectrum Calculation and Application to Heterogeneous Geometry," *Proc. PHYSOR 2020*, Cambridge, UK, Mar. 29-Apr. 2, 2020.
- [6] 近藤諒一,遠藤知弘,山本章夫,竹田敏,小池啓基,山路和也,左藤大介,"Reduced Order Modelに基づくエネルギー展開基底を用いた共鳴計算(4)減速方程式を用いた中性子源 計算の実装,"日本原子力学会春の年会,オンライン開催,9月16日-9月18日,(2020).
- [7] R. Kondo, T. Endo, A. Yamamoto, S. Takeda, H. Koike, K. Yamaji, and D. Sato, "Fuel Assembly Analyses with Resonance Calculation using Energy Spectrum Expansion Method," *Proc. M&C2021*, Raleigh, NC, Oct. 3-7 2021. (submitted)