

修士論文

軽水炉炉心解析における
炉心特性予測値の不確かさ低減に関する研究

名古屋大学大学院

工学研究科博士課程(前期課程)

マテリアル理工学専攻

量子エネルギー工学分野

量子エネルギーシステム工学講座

エネルギー量子制御工学グループ

加藤慎也

平成 25 年 2 月

目次

第1章	序論	- 1 -
1.1	背景	- 1 -
1.1.1	不確かさの評価と低減	- 3 -
1.1.2	感度解析	- 5 -
1.2	研究目的	- 5 -
1.3	本論文の構成	- 7 -
第2章	ランダムサンプリング法に基づく 断面積調整法の軽水炉炉心解析への適用性の研究	- 8 -
2.1	本章の概説	- 8 -
2.2	数学的準備	- 11 -
2.2.1	分散共分散行列	- 11 -
2.2.2	特異値分解	- 15 -
2.2.3	一般化逆行列	- 17 -
2.3	断面積調整法	- 18 -
2.3.1	概説	- 18 -
2.3.2	断面積調整の対象となる断面積	- 19 -
2.3.3	理論式の導出	- 20 -
2.3.4	断面積調整法への一般化逆行列の適用	- 25 -
2.3.5	理論的考察	- 28 -
2.4	ランダムサンプリング法	- 31 -
2.4.1	概説	- 31 -
2.4.2	計算理論	- 31 -
2.4.3	理論的考察	- 35 -
2.5	コードの開発	- 37 -
2.5.1	全体概要	- 38 -
2.5.2	ランダムサンプリングコード	- 42 -
2.5.3	感度解析コード	- 46 -
2.6	適用計算	- 47 -
2.6.1	概説	- 47 -
2.6.2	方法	- 47 -
2.6.3	計算体系および計算条件	- 49 -
2.6.4	計算結果および考察	- 55 -
2.7	本章のまとめ	- 76 -
第3章	一般化摂動論に基づく集合体感度解析手法の開発	- 77 -
3.1	本章の概説	- 77 -
3.2	数学的・物理的基礎	- 79 -
3.2.1	感度解析理論の基礎	- 79 -
3.2.2	輸送理論の基礎	- 81 -
3.2.3	一般化摂動論の基礎	- 82 -
3.3	断面積転置法	- 86 -
3.4	輸送理論に基づく一般化摂動論の導出	- 90 -
3.5	ノイマン級数法	- 93 -
3.6	角度分布再計算法	- 101 -
3.7	一般化摂動計算コードの開発	- 103 -
3.8	検証計算	- 106 -
3.8.1	計算体系	- 106 -
3.8.2	計算条件	- 108 -
3.8.3	一般化摂動計算コードと直接法の比較	- 109 -

3.9	集合体均質化断面積に対する一般化摂動計算の適用.....	- 131 -
3.10	本章のまとめ.....	- 136 -
第4章	結論.....	- 137 -
4.1	結論.....	- 137 -
4.2	今後の課題.....	- 138 -
	謝辞.....	- 140 -
	参考文献.....	- 141 -
	公刊論文.....	- 144 -
Appendix A	断面積調整法とバイアス因子法の比較.....	- 145 -
Appendix B	特異値分解の具体例.....	- 148 -
Appendix C	Moore-Penrose 逆行列の計算方法.....	- 156 -
Appendix D	衝突確率法の計算理論.....	- 157 -
Appendix E	拡散理論に基づく一般化随伴方程式の導出.....	- 160 -
Appendix F	直接法における断面積摂動量の決定.....	- 163 -
Appendix G	角度中性子束および一般化随伴角度中性子束の 領域内空間変化を考慮した一般化摂動計算手法.....	- 171 -
Appendix H	SRAC PIJ コードによる格子燃焼計算の入力ファイル.....	- 181 -

第1章 序論

1.1 背景

近年、環境問題やエネルギー問題への社会の関心の高まりとともに、二酸化炭素をほとんど排出せず、石油などの化石燃料を必要としない発電方法が注目を集めてきた。上記のような利点を有する発電方法の1つとして原子力発電が挙げられる。原子力発電はウランやプルトニウムなどの核種の核分裂エネルギーにより発電を行う発電方法であり、その発電過程において排出される二酸化炭素は火力発電に比べ格段に少ない。また、高速増殖炉を含む核燃料サイクルの導入によりウラン資源を有効活用することが可能であると見積もられ、エネルギー問題の一つの解決策となりうることから、我が国においても原子力発電の導入や技術開発が積極的に行われてきた[1]。

しかしながら、2011年3月11日に東京電力福島第一原発事故が発生し、国内外において原子力発電の意義について疑問視する声が一層大きくなることとなった。そのため、日本国内において原子力発電所の再稼働に関する問題や将来的なエネルギーミックスの選択に関する問題が活発に議論され、2012年12月16日に執行された第46回衆議院議員総選挙においても大きな争点となった。2012年12月現在、我が国の原子力政策に関する明確な方向性は打ち出されていないが、原子力発電所の維持・廃止のいずれの方向性に定まるとしても、既存の原子力関連施設の安全性確保およびその信頼性向上は引き続き重要な課題である。さらに言えば、上記のような原子力利用を取り巻く環境の変化により、原子力関連施設の安全性に関する社会的な関心が高まりつつあるため、必然的に原子力関連施設の安全評価に関する信頼性の向上が要求されることとなると思われる。

一方、国外では、人口増加や経済発展に伴うエネルギー需要の増加に対応するため、中国やインドを始めとする幾つかの発展途上国において、福島第一原発事故以降も原子力発電所の計画・建設が進んでいる[2]。しかし、原子力発電に対する社会的な不安感が大きくなっていることから、国外の原子力関連施設においても安全性確保および信頼性の向上は極めて重要な課題であると言える。

原子力発電所などの原子力関連施設の安全性は数値シミュレーションにより担保される。具体的には、事故時を含めた様々な状況を数値シミュレーションにより予測し、事故時の燃料や被覆管温度など燃料健全性に関するパラメータが基準値を満足することを確認することで、事象の収束性などが担保される。一方、数値シミュレーションには数理モデル構築における不確かさや数値解析・入力パラメータにおける不確かさなど多くの不確かさが含まれる。従って、確実に安全性を担保するために燃料ペレットの融点などに安全裕度を設けたものが安全パラメータの基準値として設定されている。しかしながら、現行の原子力関連施設の安全評価においては数値シミュレーションの不確かさを体系的に評価/低減する手法は確立されていない。従って、体系的な数値シミュレーションの不確かさ評価/低減する手法を確立することは、原子炉関連施設の安全評価に対する信頼性を向上させることにつながる。

原子炉炉心解析では、ボルツマン中性子輸送方程式に基づき中性子の輸送現象をシミュレーションすることで、原子炉内の出力分布や臨界性を評価する。すなわち、これは原子

炉という巨大な系において中性子と物質の衝突という非常に微視的な現象を予測することを意味している。しかし、原子炉内のすべての中性子に対してその挙動を予測することは極めて困難である。そこで、原子炉炉心解析においては様々な近似を用いることにより、現実的な計算コストで炉心特性を評価することが可能となった。故に、炉心解析により炉心特性予測値には様々な要因に起因する不確かさが付随することとなる。なお、原子炉炉心解析において生じる不確かさは以下の2つの要因に大別できる。

① 解析モデル起因の不確かさ

例：メッシュ誤差・エネルギー離散化誤差・幾何形状の近似等

② 入力データ起因の不確かさ

例：核データの不確かさ・炉内構造物の設計公差等

また、①の「解析モデル起因の不確かさ」は計算手法の高度化あるいは計算条件の詳細化により低減することが可能であり、その特性を利用し、より詳細な計算モデルの結果と比較することで定量評価することが可能である。一方、②の「入力データ起因の不確かさ」は上記のような解析モデルに対する操作では低減することができず、また、入力データに含まれる不確かさの情報がない場合には、不確かさを定量評価することも不可能である。その一方で、核データに関する不確かさの情報を共分散データとして評価する取り組みが活発になりつつある。この共分散データを利用することで、炉心解析における入力データの1つである核データに起因する炉心特性予測値の不確かさを評価/低減することが可能となる。このような現状から、入力データに起因する不確かさに対する不確かさ評価/低減手法の需要が高まっている。

原子炉炉心解析の結果に不確かさをもたらす入力データとして、核データの不確かさ、運転パラメータ、燃料や炉内構造物の製造公差などが挙げられる。これらに起因する不確かさは物質組成や燃料の燃焼度に伝播し、中性子束分布や臨界固有値、さらには燃料被覆管温度や事故時の原子炉出力など、様々な炉心特性に不確かさをもたらすこととなる。入力データに起因する不確かさは、様々な入力の不確かさと複雑に関係し合いながら伝播する。例えば、核データの不確かさは核反応を利用している中性子計装の測定の不確かさと密接に関係し、運転パラメータの不確かさに伝搬する可能性等が考えられる。従って、炉心特性値の不確かさ評価/低減は最終的にこれらすべての不確かさ要因を考慮して行われる必要がある。しかしながら、これらの入力データに起因する炉心特性予測値の不確かさを評価/低減する手法は十分な検討がなされていない。その一方で、近年、核データの不確かさは共分散データという形で評価されつつある。上述のように、炉心特性値の真の不確かさを評価/低減するためには、すべての不確かさ要因を考慮する必要がある。しかし、その不確かさは非常に複雑なフローを経て伝搬している可能性があり、これを評価/低減するための先駆的取り組みとして、共分散データに基づく炉心特性値の核データ起因の不確かさ評価および低減手法を検討することは非常に意義深い。

1.1.1 不確かさの評価と低減

参考文献[3]に因れば、「不確かさ」とは「測定(評価)結果の疑わしさを数値で表したもの」として定義される。一方、「誤差」は「測定しようとするものについての、測定された値と『真の値』との差」として定義されている。これらのイメージを Fig. 1-1-1-1 に示す。

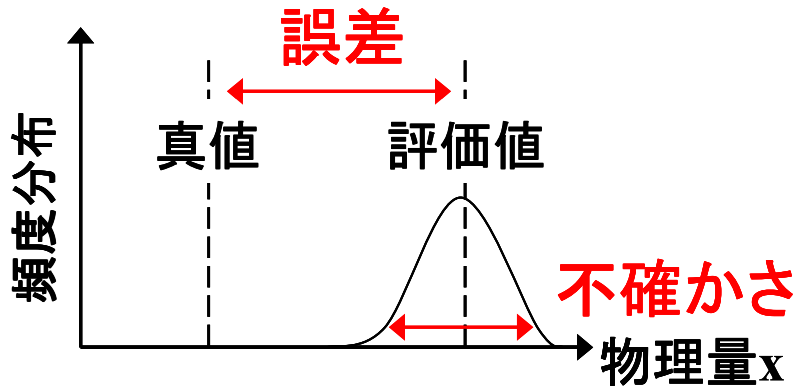


Fig. 1-1-1-1 不確かさと誤差のイメージ

あらゆる測定やシミュレーションにおいて、我々が求めるべきものは「真の値」である。しかしながら、真値を得ることは一般的には不可能であり、それ故に狭義の「誤差」を評価することは不可能である¹。そこで、測定値や評価値の信頼性を定量的に評価するために不確かさが用いられる。具体的には、不確かさは「測定値(評価値)からどの程度のばらつきの範囲に真値があるか」を確率的に表現したものである。つまり、不確かさは測定値や評価値が真値に近いか遠いかを評価する極めて重要なパラメータであると言える。

ある物理量 A が不確かさを有する物理量 B に従属する場合、物理量 B の不確かさが物理量 A に伝播することとなる。なお、核データの不確かさのみに着目する本研究において、物理量 A は炉心特性予測値、物理量 B は核データあるいはそれを処理した断面積に対応する。この時、物理量 A の不確かさを求める方法は大きく 2 つに大別することができる。1 つ目は乱数を用いて物理量 B をその不確かさの範囲で変動させ、それによる物理量 A の変化を統計的に評価する方法である。2 つ目は誤差伝播式に基づき、不確かさの誤差伝播を評価する手法である。これらはそれぞれ、確率論的手法と決定論的手法であると言え、不確かさの定量評価はいずれかの方法に基づくことで可能である。しかしながら、不確かさの低減はこれとは全く異なる概念である。

前述のように不確かさとは、「測定値(評価値)からどの程度のばらつきの範囲に真値があるか」を確率的に表現したものである。従って、不確かさを低減させる事は評価値をより「もっともらしく」することに他ならない。この不確かさ低減のイメージを Fig. 1-1-1-2 に示す。

¹ 「注意深く測定した測定値は極めて真値に近い」という仮定に基づき、測定値≒真値として用いる事がある。

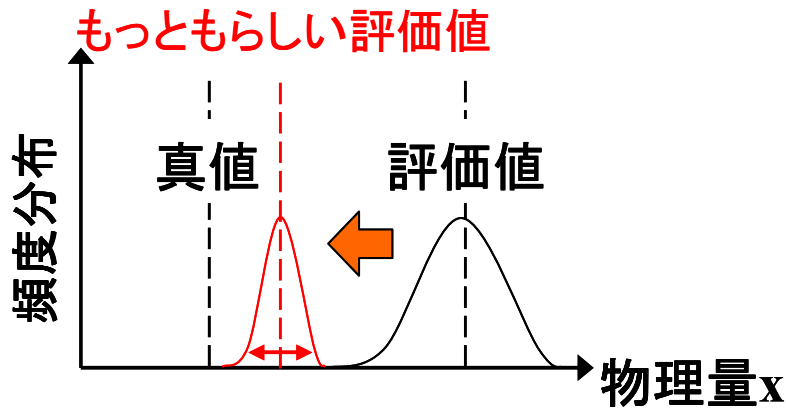


Fig. 1-1-1-2 不確かさ低減のイメージ

上述のように、ある物理量 A が不確かさを有する物理量 B に従属することを考えた場合、物理量 A のおよびその不確かさは確率的な方法あるいは決定論的な方法の 2 つの方法のいずれかにより評価することができる。一方、物理量 A およびその不確かさがそれとは独立な方法(例えば、物理量 A の測定)により新たに得られたとする。この場合、新しい評価値を考慮することで物理量 A をよりもっともらしい推定値に更新することが可能である。ここで、物理量 A の推定値の更新には 2 つの方法が考えられる。1 つは物理量 A 自体をもっともらしい推定値に更新する方法である。そして、もう 1 つは物理量 B をもっともらしい推定値に更新することで、それに従属する物理量 A をもっともらしく更新する方法である。これら 2 つの方法は、原子炉工学の分野において、前者は炉心特性予測値自体をもっともらしく更新することで炉心特性予測値の不確かさ低減を図ることを意味し、後者は断面積をもっともらしい推定値に更新することで、炉心特性予測値の不確かさ低減を図ることを意味する。この考え方はそれぞれ、バイアス因子法[4]と断面積調整法[5]の基本概念として利用されている。ここで、後者の断面積調整法に注目すると、もっともらしい断面積の推定値を決定するためには、炉心特性値と断面積調整の対象となる断面積の不確かさの関係性を考慮する必要がある。例えば、ある炉心特性値 R に対して非常に大きな影響力(感度)を持つ断面積 x があるとする。この時、この断面積 x が大きな不確かさを有するならば、当然ながら断面積 x の不確かさの影響を受けることで炉心特性値 R の不確かさも大きくなる。故に、合理的に炉心特性値 R の不確かさを低減するためには、炉心特性値 R に大きな感度を持ち、かつ、不確かさが大きな断面積を選択的に調整することが必要である。すなわち、断面積調整法を適用するためには、炉心特性値と断面積の不確かさの関係性を考慮する必要がある。ここで、2 つの物理量間における不確かさの伝播性を表すものとして感度係数がある。この感度係数を求める取り組みは感度解析と呼ばれる。感度解析については次項で説明する。なお、バイアス因子法については Appendix A で説明する。

1.1.2 感度解析

ある物理量 A が物理量 B に従属するとき、物理量 B の変化は物理量 A に変化をもたらすこととなる。この時、物理量 B の変化が与える物理量 A の変化の程度を感度と呼ぶ。さらに、物理量 B の変化が物理量 A に線形に変化を与えるという線形性を仮定した時、感度 S は次式で表される。

$$S = \frac{\delta x_A}{\delta x_B} \quad (1-1-2-1)$$

なお、(1-1-2-1)式は絶対感度係数と呼ばれる²。すなわち、感度係数は物理量 B の物理量 A に対する変化の割合を意味する。また、この感度を求める取り組みを感度解析と呼ぶ。

上述のように、感度解析を実施することで、ある物理量 B からある物理量 A への不確かさの伝播を評価することが可能となる。これを示すために、(1-1-2-1)式を次式のように変形する。

$$\delta x_A = S \delta x_B \quad (1-1-2-2)$$

(1-1-2-2)式より、事前に感度係数を評価しておけば、物理量 B の不確かさに基づいて物理量 A の不確かさを評価することが可能となる。さらに、前項で断面積調整法として説明したように、物理量 A とその不確かさを測定等により新たに得られた時、感度係数を利用してその不確かさの伝播を考慮することで、もっともらしい物理量 B の推定値を逆算することができ、これにより物理量 A の推定値をもっともらしく更新することができる。このように、感度解析を実施することは不確かさ評価および不確かさの低減において非常に意義深い。

原子炉工学の分野において、感度解析の方法は大きく 3 つの方法に分類することができる。1 つ目は Forward 法であり、物理量 B を基準状態からわずかに変化させ、物理量 A の変化を求めることでその変化の割合、すなわち感度係数を求める。2 つ目は一般化摂動論に代表される Adjoint 法である。詳しくは 3 章で説明するが、Adjoint 法は物理量 A と物理量 B の関係式に対する重要度関数を解くことで感度係数を求める方法である。そして、3 つ目の方法は上記 2 つ以外の方法であり、この例としては Forward 法と Adjoint 法を組み合わせた GPT-Free や Ep GPT などの方法が挙げられる。

1.2 研究目的

本研究の最終的な目標は軽水炉炉心解析における核データに起因する不確かさを低減する手法を開発することにある。核データ起因の予測炉心特性値の不確かさを低減する手法の 1 つに断面積調整法がある[5]。断面積調整法は臨界実験において測定した炉心特性値を用いて、核データをもっともらしく調整する方法である。この断面積調整法は高速炉の分野で大きな実績を有しているが、同様の手法を軽水炉に適用することで軽水炉炉心解析の核データ起因の不確かさを低減させ、炉心特性値予測精度の向上に貢献できる可能性がある。しかしながら、軽水炉の炉心解析フローは高速炉のそれと比べ多段的で複雑であり、

² x_A および x_B の大きさを規格化した感度係数 ($S = \frac{\delta x_A / x_A}{\delta x_B / x_B}$) は相対感度係数と呼ばれる。

また、フィードバック効果や燃焼に伴う燃料特性の変化も大きいことから、高速炉と同様の方法で断面積調整法を導入することは大きな困難が伴うため、これまでに行われていない。従って、現行の軽水炉炉心解析フローにおいて適用できる断面積調整法を導入するための研究は非常に意義深い。そこで、本研究では現行の炉心解析フローに断面積調整法を体系的に導入する手法を開発し、その適用性を検討することを目的とした。

軽水炉炉心解析に断面積調整法を適用するための研究は、2004年にノースカロライナ州立大学(当時)の Abdel-Khalik 氏により検討がなされている[6]。上述のように、断面積調整法を適用して炉心特性値の不確かさを低減するためには、調整対象の入力パラメータの変化が炉心特性値に与える影響(感度)を評価する感度解析が不可欠である。一般的な感度解析の方法として Forward 法が挙げられるが、Forward 法では入力パラメータの数だけ再計算が必要となるため、炉心解析のように入力パラメータが極めて多い場合は適用することが困難である。これは軽水炉炉心解析への断面積調整法の適用が困難であることの要因の 1 つである。これに対し、Abdel-Khalik 氏は効率的な感度解析手法として Efficient Subspace Methods (ESM)-based Sensitivity Analysis を適用することで軽水炉炉心解析へ断面積調整法を適用する手法を提案した。

一方、本研究においては上記の手法と異なる 2 つの手法について検討を行った。1 つ目は、ランダムサンプリング法に基づく断面積調整法についての検討である(検討 1)。断面積調整法には、調整対象の断面積の不確かさおよび調整対象の断面積と炉心特性値の不確かさの関係性を表す感度係数が必要となる。先行研究においては、調整対象の断面積を多群微視的断面積としたため、集合体均質化断面積に対する感度解析と炉心特性値に対する感度解析の 2 つの感度解析を行う必要がある。一方、検討 1 における提案手法では調整対象の断面積を集合体均質化断面積とし、集合体均質化断面積の不確かさを評価するためにランダムサンプリング法を適用する。これにより、先行研究では集合体均質化断面積に対する感度解析と炉心特性値に対する感度解析の 2 度の感度解析を行う必要あるのに対し、本提案手法では感度解析を 1 度だけ行うことで断面積調整法を適用することが可能となる。また、本研究では上記の提案手法に基づく計算コードを開発し、仮想的な軽水炉解析モデルにおいて提案手法の適用計算を実施し、その適用性を評価した。2 つ目は、一般化摂動論を利用した感度解析手法に基づく断面積調整法についての検討である(検討 2)。なお、検討 2 においては、先行研究と同様のフローで軽水炉炉心解析へ断面積調整法を適用する事を目的としたが、断面積調整法を適用するためには少なくとも 1 度の感度解析が必要となるため、検討 1 と検討 2 は相反する手法では無いことをここに明記する。先行研究においては、ESM-based Sensitivity Analysis によって断面積の感度解析を実施し、断面積の不確かさを伝搬させているに対して、本研究では一般化摂動論を用いて効率的に感度解析を行う手法について検討を行い、さらにその有効性について評価した。

1.3 本論文の構成

本論文は全 4 章で構成されており、本章においては本研究の背景および目的について説明した。また、本論文は「ランダムサンプリング法に基づく軽水炉炉心解析への断面積調整法の適用性の研究」および「一般化摂動論に基づく集合体感度解析手法の開発」の 2 つの研究により構成されている。

2 章では、「ランダムサンプリング法に基づく軽水炉炉心解析への断面積調整法の適用性の研究」について、その計算原理および適用計算の説明を行う。さらに、本検討の結果についてまとめる。

3 章では、「一般化摂動論に基づく集合体感度解析手法の開発」について、その計算原理および検証計算の説明を行い、結果をまとめる。

最後に 4 章において、2 章および 3 章について纏め、本研究の結論を述べる。

第2章 ランダムサンプリング法に基づく 断面積調整法の軽水炉炉心解析への適用性の研究

2.1 本章の概説

本章ではランダムサンプリング法に基づく断面積調整法の軽水炉炉心解析への適用性の研究(2章では、本研究と呼ぶ)について説明する。

本研究では、現行の軽水炉炉心解析フローに体系的に断面積調整法を導入し、核データの不確かさに起因する予測炉心特性値の不確かさを低減するためにランダムサンプリング法と断面積調整法を組み合わせた方法を提案する。本提案手法では、格子燃焼計算の入力値となる多群微視的断面積を対象にランダムサンプリングを行い統計的に集合体均質化断面積の共分散行列を評価した後、この集合体均質化断面積を対象として断面積調整を行う。

これまで、断面積調整法はナトリウム冷却高速炉などの革新炉の炉心解析へ適用することを念頭に開発されてきた。高速炉は減速材を持たないことから軽水炉に比べ高速中性子の割合が大きい。また、一般的に核種の高速中性子に対する反応断面積は熱中性子に対するそれよりも小さいため、高速中性子の飛程は熱中性子の飛程よりも長い。従って、高速炉では軽水炉に比べ中性子の空間的な中性子束分布の変化が小さく、それ故に炉心解析のフローが大きく異なっている。以下に高速炉と軽水炉のそれぞれの炉心解析フローの略図を示す[7]。

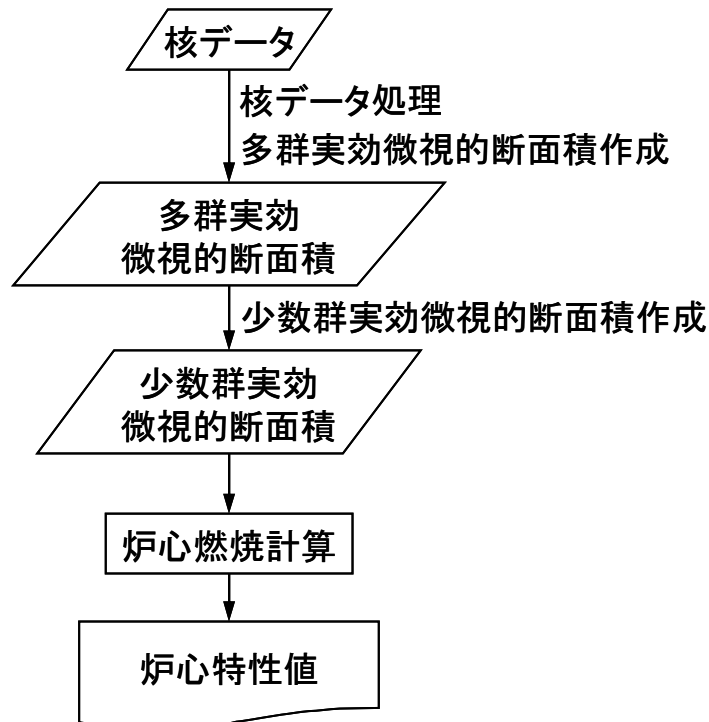


Fig. 2-1-1 高速炉の炉心解析フローの略図

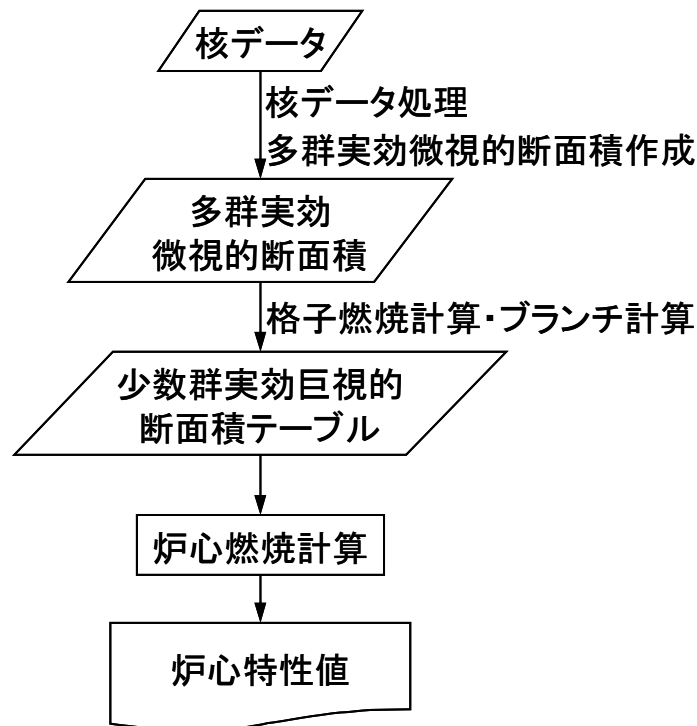


Fig. 2-1-2 軽水炉の炉心解析フローの略図

Figure 2-1-1 および Fig. 2-1-2 には高速炉および軽水炉の炉心解析フローの略図を示した。なお、これらの略図は、実際の炉心解析フローを大幅に単純化したものである。これらの図から、高速炉と軽水炉の炉心解析フローが大きく異なっていることが分かる。具体的には、高速炉炉心解析では炉心燃焼計算のインプットとして、断面積の処理により得られた少数群の実効微視的断面積を利用するのに対して、軽水炉炉心解析においては炉心燃焼計算のインプットとして、格子燃焼計算およびにブランチ計算により得られた少数群の実効巨視的断面積テーブルを使用する。すなわち、高速炉炉心解析では微視的断面積を炉心燃焼計算に直接利用しているのに対して、軽水炉炉心解析においては微視的断面積を巨視的断面積テーブルに処理した後に炉心燃焼計算を行なっている。この観点から、軽水炉炉心解析の解析フローが多段的であると言える。

高速炉炉心解析における断面積調整法では、炉心燃焼計算に対する燃焼感度解析を行うことで、少数群実効微視的断面積を対象に断面積調整を行う。この場合、燃焼に伴う断面積の不確かさの伝播も考慮されることとなる。しかしながら、軽水炉炉心解析において多群実効微視的断面積を対象に断面積調整を行うためには、炉心燃焼計算に対する燃焼感度解析のみならず、格子燃焼計算に対する燃焼感度解析も行う必要がある。一般的に、燃焼感度解析は大きな計算コストを必要とするため、軽水炉炉心解析において多群実効微視的断面積を対象に断面積調整を行う事は現実的な方法ではない。一方、少数群実効巨視的断面積テーブルを対象に断面積調整を行う場合は、何らかの方法で少数群実効巨視的断面積の不確かさを評価する必要がある。

そこで、本研究では現行の軽水炉炉心解析フローに現実的な計算コストで断面積調整法を適用するため、ランダムサンプリング法を利用して少数群実効巨視的断面積の不確かさ

を評価した上で、少数群実効巨視的断面積を対象に断面積調整法を適用する手法を開発した。本手法では、統計的な手法に基づくことで、格子燃焼計算に対する燃焼感度解析を行うことなく、現実的な計算コストで少数群実効巨視的断面積の不確かさを評価することが可能となる。また、ランダムサンプリングにおいて、異なる燃焼集合体タイプ間の共分散を評価することで、断面積調整においても異なる燃焼集合体タイプ間の相関関係を考慮した調整を行うことが可能となる。従って、提案手法は現状の炉心解析フローに体系的に断面積調整法を導入する現実的な手法となる可能性がある。

さらに、高速炉と軽水炉の大きな相違点の一つとして、フィードバック効果の大きさの違いがあげられる。具体的な例として、沸騰水型軽水炉とナトリウム冷却高速炉の温度フィードバック効果について考える。沸騰水型原子炉では軽水を減速材として用いており、その運転は最適減速に近い状態で行われる。そのため、何らかの外乱により炉心温度が上昇した際には、炉内のボイド率が上昇することにより中性子減速が低下し炉心出力の低下をもたらす。厳密に言えば、炉心の温度上昇による中性子の漏れ量の増加による負の反応度、ドップラー効果による負の反応度、冷却材の中性子捕獲量の減少による正の反応度等の相殺関係で、結果として炉心に負の反応度が加わる。一方、ナトリウム冷却高速炉においては減速材を使用しないため、冷却材の温度上昇による出力の変化は、主に中性子漏れ量の増加による負の反応度、中性子スペクトルの硬化に伴う実効中性子放出数 η の増加による正の反応度、ドップラー効果による負の反応度の相殺関係により定まる。これらの反応度効果の相殺関係は炉心により異なるため一概に議論はできないが、軽水炉と高速炉の温度フィードバック効果の有無や大きさに違いがあるものと推測される。また、燃料の燃焼に伴うフィードバック効果(燃焼度フィードバック効果)に着目すれば、高速炉では燃料物質の核分裂に伴う反応度低下と燃料の増殖による反応度増加の相殺関係により、炉心の反応度は緩やかに低下する。一方で、一般的に軽水炉においては燃料の増殖が見込めないために、高速炉の反応度低下と比較して急激に反応度が低下する。このようなフィードバック効果の発現の違いにより、高速炉炉心解析において実用化された断面積調整法をそのまま軽水炉炉心解析に転用できるかは疑問が残る。具体的には、高速炉炉心解析においてはこれらのフィードバック効果に伴う炉心特性値の変化が十分に小さく、一次精度の感度係数で評価が可能であるという仮定に基づいている。しかしながら、軽水炉炉心解析においてはこれらのフィードバック効果が非線形な効果をもたらす、一次精度の感度係数だけでは十分な評価ができない可能性がある。一方で、本研究で説明するランダムサンプリング法を利用して断面積調整を実施する場合には、これらの非線形なフィードバック効果を含めて集合体均質化断面積の不確かさを評価するために³、上記の問題に対する解決策となる可能性がある。

本章においては、ランダムサンプリング法に基づく断面積調整法について、その計算理論および適用計算について説明する。さらに、適用計算の結果を示し、本検討の結論を述べる。具体的には、2.2 節で本研究の理解に必要な数学的手続きについて説明し、2.3 節お

³ 本研究においては、燃焼度フィードバック効果のみ考慮している。

よび 2.4 節で断面積調整法およびランダムサンプリング法の計算理論について説明する。続いて、2.5 節では本研究で開発した計算コードに関して言及し、2.6 節で提案手法の適用計算について説明する。最後に、2.7 節で本章のまとめを述べる。

2.2 数学的準備

本節では数学的準備として、断面積調整法およびランダムサンプリング法を理解するために必要な数学的基礎について説明する。具体的には、2.2.1 項において分散共分散行列、2.2.2 項において特異値分解、2.2.3 項において一般化逆行列について説明する。

2.2.1 分散共分散行列

本項では、分散共分散行列について説明する。

まず、以下の 2 つのデータ列 \mathbf{x}, \mathbf{y} について考えることとする。

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (2-2-1-1)$$

$$\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N) \quad (2-2-1-2)$$

また、これらのデータ列から導かれる評価値、すなわち平均値をそれぞれ x_0, y_0 と表せば、それらはそれぞれ下式で定義される。

$$x_0 \equiv \mathbf{E}[\mathbf{x}] \quad (2-2-1-3)$$

$$y_0 \equiv \mathbf{E}[\mathbf{y}] \quad (2-2-1-4)$$

ここで、 \mathbf{E} は期待値演算子を意味し、離散型確率分布 $f(x_k)$ を用いて以下のように表される。

$$\mathbf{E} \equiv \sum_k x_k f(x_k) \quad (2-2-1-5)$$

このとき、データ列 \mathbf{x}, \mathbf{y} の共分散は下式により定義される。

$$\text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \equiv \mathbf{E}[(\mathbf{x} - x_0)(\mathbf{y} - y_0)] \quad (2-2-1-6)$$

より具体的には、 $\text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は次式で計算される。

$$\text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{N-1} \cdot \sum_{n=1}^N (x_n - x_0) \cdot (y_n - y_0) \quad (2-2-1-7)$$

ここでは、共分散の定義として不偏分散を利用した。この不偏分散の他に標本分散がある。この違いについては本項後半で述べる。

また、データ列 \mathbf{y} として \mathbf{x} を選んだ時、共分散 $\text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ は分散 $\text{Var}(\mathbf{x})$ と呼ばれ、下式で定義される。

$$\text{Var}(\mathbf{x}) \equiv \text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \mathbf{E}[(\mathbf{x} - x_0)^2] \quad (2-2-1-8)$$

なお、データ列 \mathbf{y} についても同様である。以上に示した分散と共分散を用いて、データ列 \mathbf{x}, \mathbf{y} の分散共分散行列 \mathbf{C} は以下のように定義される。

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &\equiv \begin{pmatrix} \text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{x}) & \text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ \text{Cov}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) & \text{Cov}(\mathbf{y}, \mathbf{y}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \text{Var}(\mathbf{x}) & \text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \\ \text{Cov}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) & \text{Var}(\mathbf{y}) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2-2-1-9)$$

ただし、

$$\text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \text{Cov}(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \quad (2-2-1-10)$$

(2-2-1-9)式および(2-2-1-10)式から分かるように、分散共分散行列は対角成分を軸とした対称な行列である。この分散共分散行列において、対角成分の要素 C_{ii} は要素 i のばらつきの大きさを、非対角成分 C_{ij} は要素 i と要素 j のばらつきの相関関係を表す。

[標本分散と不偏分散]

分散の定義は2種類存在する。1つが本文中で取り扱った不偏分散であり、もう一つの定義は標本分散である。これらは定義式が若干異なるものの、いずれも標本のばらつき具合を表しており、標本数が十分に多い時に得られる分散はほとんど等しくなる。以下では、この定義の違いについて簡単に説明する。

(a)標本分散

分散は標本のばらつき具合を表す指標であり、標本分散は以下のように定義される。

$$\text{Var}[\mathbf{u}] \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u_i - \bar{u})^2 \quad (2-2-1-11)$$

(2-2-1-11)式は「1 標本あたりの平均値からのばらつき」として認識することができる。従って、標本分散は純粋な標本のばらつきの指標として扱うことができる。

しかしながら、標本分散はその期待値が母集団の分散よりも小さくなることが知られている。例えば、母集団を世界中のカラス、標本をサンプルとして捕獲した N 羽のカラスとし、世界中のカラスの体重を調べるために、サンプルのカラスの体重を量る実験を行うこととする。このとき、世界中のカラスの体重の平均値を μ 、分散を σ^2 とし、各サンプルカラスの体重を u_i ($i=1, 2, \dots, n$)、サンプルのカラスの体重の平均値を \bar{u} 、分散を $\hat{\sigma}^2$ で表すこととする。すなわち、

$$\bar{u} = \mathbf{E}[u_i] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u_i \quad (2-2-1-12)$$

$$\hat{\sigma}^2 = \mathbf{E}[(u_i - \bar{u})^2] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u_i - \bar{u})^2 \quad (2-2-1-13)$$

と表すこととする。このとき、得られた N 羽のサンプルのカラスの分散の期待値 $\mathbf{E}[\hat{\sigma}^2]$ を求めることで、世界中のカラスの体重のばらつきを求めたい。そこで分散の期待値 $\mathbf{E}[\hat{\sigma}^2]$ が母集団の分散と一致し σ^2 となることが期待される。ここで、分散の期待値 $\mathbf{E}[\hat{\sigma}^2]$ を求める。

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}[\hat{\sigma}^2] &= \mathbf{E}\left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u_i - \bar{u})^2\right] \\
&= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\mathbf{E}[u_i^2] - 2\mathbf{E}[u_i \bar{u}] + \mathbf{E}[\bar{u}^2]) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u_i^2 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{u}^2\right) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u_i^2 - \bar{u}^2\right) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{E}[u_i^2] - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{u}^2 \\
&= \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{E}[u_i^2] - N\mu^2\right) - \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \bar{u}^2 - \mu^2\right) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\mathbf{E}[u_i^2] - \mu^2) - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\bar{u}^2 - \mu^2) \\
&= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma^2 - \mathbf{E}[\bar{u}^2 - \mu^2] \tag{2-2-1-14}
\end{aligned}$$

ここで、 $\mathbf{E}[\bar{u}^2 - \mu^2]$ は平均値の分散を表し、中心極限定理によれば、これは σ^2/N に収束する。ゆえに、分散の期待値 $\mathbf{E}[\hat{\sigma}^2]$ は以下のように得られる。

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}[\hat{\sigma}^2] &= \sigma^2 - \frac{\sigma^2}{N} \\
&= \frac{N-1}{N} \sigma^2 \tag{2-2-1-15}
\end{aligned}$$

すなわち、これは N 個の標本から得られた分散の期待値が母集団の分散より若干小さく見積もられることを意味する。つまり、サンプルのカラスの体重のばらつきは世界中のカラスの体重のばらつきより若干小さく評価されたこととなり、実用上非常に不便である。そのため、標本から得られた分散の期待値が母集団の分散に一致するように補正をかける必要がある。そこで、次に説明する不偏分散が用いられる。

(b)不偏分散

前述のように、標本分散を用いた場合、標本の分散の期待値が母集団の分散と一致せず、この補正が必要である。このズレの原因は標本の自由度にある。統計の分野において、独立に得られた N 個の観測データがある場合に「このデータ群は N 自由度である」と表現される。例えば、 N 個の観測データのうち、1 個の観測データは独立でなく他のいくつかのデータに従属し定められた場合、その自由度は 1 減り $N-1$ 自由度となる。ここで、 N 個の独立な観測データにより求められる標本分散の定義に立ち返る。

$$Var[\mathbf{u}] \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (u_i - \bar{u})^2 \quad (2-2-1-11)(再掲)$$

上式を見る限り、上式右辺の $1/N$ は標本の自由度で除されているとも捉えることができる。しかしながら、上式において導入されている標本の平均値 \bar{u} は下式により束縛された従属関数である。

$$\bar{u} = \mathbf{E}[u_i] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N u_i \quad (2-2-1-12)(再掲)$$

さらに、それと同時に(2-2-1-11)式において平均値 \bar{u} は定数として扱われており、 N 個の測定データのうち、1 点が欠けたとしても他の測定データと平均値から導くことができる。すなわち、(2-2-1-11)式を考えるにあたり、(2-2-1-12)式の束縛条件の下で N 個の独立な測定データは $N-1$ 自由度となる。そこで、不偏分散はこの束縛条件による補正を加えるために、 N ではなく $N-1$ で除す形となり、すなわち下式で定義される。

$$Var[\mathbf{u}] \equiv \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (u_i - \bar{u})^2 \quad (2-2-1-16)$$

分散として(2-2-1-16)式を使用して分散の期待値 $\mathbf{E}[\hat{\sigma}^2]$ を求めた場合、その期待値は母集団の分散と一致する。それ故に、一般的に分散として不偏分散を用いる場合が多い。

2.2.2 特異値分解

本研究において、特異値分解を以下の2つの目的のために利用する。

- ① ランダムサンプリングにおける多変量正規乱数の生成のため
- ② 断面積調整における一般化逆行列計算のため

これらは、本研究の中核に位置する。故に、この特異値分解は本研究において、非常に重要な数学的手続きである。ここでは、参考文献[8][9]に準じて、特異値分解について説明を行う。なお、ここでは上記の参考文献に基づき概念的な説明に徹することとし、Appendix Bにおいて具体例を挙げて説明する。

任意の $n \times m$ 行列 $\mathbf{A} (m \geq n)$ は、適当な $n \times n$ ユニタリ行列 \mathbf{U} および $m \times m$ ユニタリ行列 \mathbf{V} を用いて、以下のように分解できる。⁴

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{W}\mathbf{V}^* \quad (2-2-2-1)$$

ここで、

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & 0 & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_n & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (2-2-2-2)$$

なお、*は複素転置行列を意味する。(2-2-2-1)式および(2-2-2-2)式で表される分解を行列の特異値分解と呼び、行列 \mathbf{W} の非負実数値 $\{\sigma_i \geq 0\}_{i=1}^n$ を行列 \mathbf{A} の特異値という。また、ユニタリ行列 \mathbf{U} は行列 $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ の固有ベクトルを列ベクトルとして有する行列であり、これを左特異ベクトル列と呼ぶ。一方、ユニタリ行列 \mathbf{V} は行列 $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ の固有ベクトルを列ベクトルとして有する行列であり、これを右特異ベクトル列と呼ぶ。この時、左特異ベクトル列 $\mathbf{U} = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n)$ および右特異ベクトル列 $\mathbf{V} = (\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_m)$ は特異値 $\{\sigma_i \geq 0\}_{i=1}^n$ で表される固有値に対応した固有ベクトルとして順番付けられる。ここまでの説明では特異値分解の対象として任意の $n \times m$ 行列 \mathbf{A} を考えた。しかし、本研究においては特異値分解の適用範囲を $n \times n$ 実行列に限定できる。この適用範囲においては、実行列 \mathbf{A} の特異値分解は次のように表せる。

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{W}\mathbf{V}^T \quad (2-2-2-3)$$

なお、ここで添字 T は転置行列を表す。また、実行列を対象とした特異値分解により得られる行列 \mathbf{U} および \mathbf{V} はその要素に虚数を持たないことから、ユニタリ行列ではなく直交行列である。このとき、実行列 \mathbf{A} の特異値 $\{\sigma_i \geq 0\}_{i=1}^n$ は行列 $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ あるいは $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ の固有値の平方根である。なお、「行列 $\mathbf{A}^T\mathbf{A}$ あるいは $\mathbf{A}\mathbf{A}^T$ の固有値」という表現に関して参考文献[8]

⁴ ユニタリ行列 \mathbf{U} とは以下の関係式を満たす行列である。

$$\mathbf{U}^*\mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{U}^* = \mathbf{E}$$

すなわち、その逆行列が

$$\mathbf{U}^* = \mathbf{U}^{-1}$$

で与えられる行列である。また、正方行列 $\mathbf{U} = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n)$ がユニタリ行列である事と、 $(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n)$ が正規直交基底となることは同値である。なお、列ベクトルだけでなく、行ベクトルに着目した場合も同様に正規直交基底を成す。

に基づき補足すると、 $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ と $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ の固有値のうち0でないものの個数およびそれらの値は一致するため、特異値を求める際には行列の次数に関して $n < m$ ならば $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ の、 $m < n$ ならば $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ の固有値を求めれば良い事に留意されたい。これを踏まえて、 $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ あるいは $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ の固有値を $\{\lambda_i \geq 0\}_{i=1}^n$ ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0$)と表せば、行列 \mathbf{A} の特異値は下式により表される⁵。

$$\sigma_i = \sqrt{\lambda_i} \quad (2-2-2-4)$$

ここで、行列 \mathbf{A} の特異値のうち0でないものの個数 r は、

$$r = \text{rank}(\mathbf{A}) \quad (2-2-2-5)$$

で表される。

次に、特異値分解の一意性について考える。特異値分解において、特異値の重複が無いと仮定すれば、対角行列 \mathbf{W} の要素を $\{\sigma_i \geq 0\}_{i=1}^n$ ($\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_n \geq 0$)の順に並べることで、一意に行列 \mathbf{U} および \mathbf{V} を定めることができる。一方、特異値の重複がある場合、行列 \mathbf{U} および \mathbf{V} のベクトル列を一意に定めることができない。従って、特異値分解は特異値の重複がない場合に限って一意性を有しているといえることができる。また、特異値分解の対称を実対称行列 \mathbf{A} とすると、 $\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \mathbf{A}^2$ となることから特異値と固有値が一致する⁶。さらに、 \mathbf{A}^n の固有ベクトルと \mathbf{A} の固有ベクトルは一致する。以上から、実対称行列の特異値分解は、特異値の重複が無い場合に限って、その固有値分解と等価である。なお、固有値分解は $n \times n$ 正方行列にのみ適用可能であるが、特異値分解は $m \times n$ 行列に対して適用が可能である。故に、特異値分解は固有値分解の一般化とも言える。ここまでは、特異値分解に関して数学的な性質を述べた。次に、特異値分解の特性について幾何的観点から説明する。

特異値分解を行うことで、任意の $n \times m$ 実行列 $\mathbf{A} (m \geq n)$ は(2-2-2-3)式のように分解することができる。ここで、直交行列 \mathbf{U} および \mathbf{V} の i 番目の列ベクトルは特異値を $\{\sigma_i \geq 0\}_{i=1}^n$ ($\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_n \geq 0$)と並べた時の i 番目の特異値に対応する $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ および $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ の固有ベクトルである。また、これらのベクトルは正規直交基底を成していることから直交性を有する。ここで、特異値分解後の行列、すなわち、行列 \mathbf{A} を変換行列とみなすと、任意の行列 \mathbf{y} 、 \mathbf{x} を用いて、

$$\mathbf{y} = \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{U} \mathbf{W} \mathbf{V}^T \mathbf{x} \quad (2-2-2-6)$$

と表せる。故に、この変換は

$$\mathbf{x} \xrightarrow{\mathbf{V}^T} \tilde{\mathbf{x}} \xrightarrow{\mathbf{W}} \tilde{\mathbf{y}} \xrightarrow{\mathbf{U}} \mathbf{y}$$

という三種の変換により成り立つことが分かる。ここで、行列 \mathbf{U} および \mathbf{V} が直交行列であることから、 \mathbf{x} から $\tilde{\mathbf{x}}$ の変換および \mathbf{y} から $\tilde{\mathbf{y}}$ の変換では行列のノルムが変化しない(等長性を有する)直交変換であり、各要素の長さは \mathbf{W} の対角成分のみに依存する。従って、行列 \mathbf{A} による線形変換において、行列 \mathbf{W} のより上位、すなわち、大きな特異値に対応する固有ベクトルが大きな影響を与えることとなる。これは言い換えれば、大きな特異値に対応する

⁵任意の実正方行列 \mathbf{A} に対して $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ あるいは $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ は半正定値対称行列 $\Leftrightarrow \mathbf{A}^T \mathbf{A}$ あるいは $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ の固有値は非負実数値

⁶ λ を行列 \mathbf{A} の固有値とすると、 \mathbf{A}^m の固有値は λ^m である。

固有ベクトルが行列の主成分であると言える。特異値分解のこの特性を利用することで、行列のランク削減や行列の主成分分析を行うことが可能となる。なお、ここで説明した特異値分解は Appendix C で説明する一般化逆行列の計算においても利用される。

2.2.3 一般化逆行列

一般化逆行列は逆行列の概念を非正則行列へ拡張した行列であり、擬似逆行列と呼ばれることもある。一般化逆行列の定義は様々あるが、ここでは一般的な一般化逆行列である Moore-Penrose 逆行列について説明する。

ある正方行列 \mathbf{A} が $\det(\mathbf{A}) \neq 0$ を満たすとき、行列 \mathbf{A} は正則であり $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$ を満たす逆行列 \mathbf{A}^{-1} が存在する。故に、例えば下式のような逆問題が与えられた時、

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y} \quad (\text{ベクトル } \mathbf{y} \text{ が既知、ベクトル } \mathbf{x} \text{ が未知}) \quad (2-2-3-1)$$

(2-2-3-1)式の両辺に行列 \mathbf{A} の逆行列 \mathbf{A}^{-1} を左から作用させることで、

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y} \quad (2-2-3-2)$$

により、ベクトル \mathbf{x} を一意に決定できる。しかしながら、行列 \mathbf{A} が正則でない、すなわち、行列 \mathbf{A} が正方でなかったり、 $\det(\mathbf{A})=0$ であったりした場合、 \mathbf{A}^{-1} は存在しないことから (2-2-3-2)式の変形が適用できず、ベクトル \mathbf{x} を決定することができなくなる。具体的に『 \mathbf{A} が正則でない』とは(2-2-3-1)式の連立一次方程式において、変数の数と式の数的一致していない(\mathbf{A} が正方でない)、あるいは連立一次方程式内に独立でない方程式が含まれている ($\det(\mathbf{A})=0$)ことと同値となる。従って、 \mathbf{A}^{-1} が存在しない時にベクトル \mathbf{x} の要素を一意に決定することができないのは当然のことである。

さて、ここで逆問題について簡単に概要を述べる。逆問題とはその名から分かるようにある系の出力から入力を推定する問題である。現在の社会においてこの逆問題は広く浸透しており、例えば非破壊検査や CT スキャンあるいはレーダー探査などはこの逆問題を応用したものである。この逆問題においては、(2-2-3-1)式のようにベクトル \mathbf{y} が既知でベクトル \mathbf{x} が未知の条件の元に未知ベクトル \mathbf{x} を求めることが求められる。しかしながら、多くの場合において既知ベクトル \mathbf{y} の要素の数は未知ベクトル \mathbf{x} の要素数に比べて少なく(あるいは多く)、行列 \mathbf{A} が正則であることは非常に稀であると言える。そこで、行列 \mathbf{A} が正則でなくとも安定的にもっともらしく未知ベクトル \mathbf{x} の要素を推定する手法が求められた。その方法として最も一般的な手法の 1 つが一般化逆行列である。一般化逆行列の定義は様々あるが、本研究では Moore-Penrose 逆行列を扱うこととする。行列 \mathbf{A} に対する Moore-Penrose 逆行列を \mathbf{A}^+ と表すと \mathbf{A}^+ には以下の 4 つの関係(定義)が成り立つ。

$$\textcircled{1} \mathbf{A}\mathbf{A}^+\mathbf{A} = \mathbf{A} \quad (2-2-3-3)$$

$$\textcircled{2} \mathbf{A}^+\mathbf{A}\mathbf{A}^+ = \mathbf{A}^+ \quad (2-2-3-4)$$

$$\textcircled{3} (\mathbf{A}\mathbf{A}^+)^T = \mathbf{A}\mathbf{A}^+ \quad (2-2-3-5)$$

$$\textcircled{4} (\mathbf{A}^+\mathbf{A})^T = \mathbf{A}^+\mathbf{A} \quad (2-2-3-6)$$

(2-2-3-3)式において、行列 \mathbf{A} が正則であり逆行列を持つとき、 \mathbf{A}^+ は \mathbf{A}^{-1} と一致し(2-2-3-3)式を満足することが分かる。その意味で一般化逆行列は逆行列の概念を正則行列以外の行列

に対し拡張し、一般化したものと言える。

また、(2-2-3-3)式から(2-2-3-6)式の4式により一意に定められる Moore Penrose 逆行列を用いて逆問題を解くという事は誤差 $\|\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\|$ あるいはノルム $\|\bar{\mathbf{x}}\|$ を最小化する近似解 $\bar{\mathbf{x}}$ を求めることと同値である。この理由を以下で説明する。

いま、(2-2-3-1)式で定義される連立一次方程式に対し、誤差ノルム $\|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$ を最小にする問題を考える。この時、その一般解は

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \mathbf{b} + (\mathbf{I} - \mathbf{A}^+ \mathbf{A}) \mathbf{k} \quad (2-2-3-7)$$

で与えられる[8]。ここで、 \mathbf{k} は任意の n 次元ベクトルである。(2-2-3-7)式が意味するところは、(2-2-3-1)式が解を持てばその一般解を与え、解を持たなければ(2-2-3-7)式のノルムを最小にするという意味で最適な近似解の一般解を与えるというものである。さらに、これらの解が一意でない場合に、解のうちで解自身のノルム $\|\mathbf{x}\|$ を最小にするものは

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^+ \mathbf{b} \quad (2-2-3-8)$$

で与えられる。なお、『あくまで一般化逆行列 \mathbf{A}^+ は \mathbf{A}^{-1} と異なるものであり、 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ を満たすベクトル \mathbf{x} を求めているのではなく、誤差 $\|\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\|$ あるいはノルム $\|\bar{\mathbf{x}}\|$ が最小となるという観点からベクトル $\bar{\mathbf{x}}$ の最適解 $\bar{\mathbf{x}}$ を求めている。』という点に留意されたい。なお、Moore-Penrose 逆行列の計算方法については、Appendix C で説明する。

2.3 断面積調整法

2.3.1 概説

本節では、断面積調整法について説明する。

序論で述べたように、断面積調整法は実験で得られた積分データを断面積の調整という形で核設計に反映させる手法であり、その基本原理はベイズの定理に基づく。また、炉心特性値の断面積誤差、モデリング誤差、実験誤差は各々独立な多変量正規分布を成しているものと仮定する。この仮定に基づけば、ある臨界実験により炉心特性が測定得られた時に、事後の断面積の確率分布を求めることにより断面積セットをよりもっともらしく更新することが可能である。本節では、この断面積調整法の基礎式を導出することで、その数学的な意味を説明する。また、それに先立ち、本研究で断面積調整の対象を集合体均質化定数とした理由について説明する。

2.3.3 項において説明する断面積調整法の基礎式は、高速炉炉心解析の分野で広く使われており、大きな実績を残してきたものである。しかし、炉心特性値間に非常に強い相関関係があるとき、あるいは、不確かさが完全に0の炉心特性値が存在した場合には、これらを断面積調整の調整対象から除外しなければならない。すなわち、そこに工学的判断が介入し、ノウハウが必要となる。本研究では、Moore-Penrose 逆行列を導入することでこの工学的判断を排除する手法を適用した。2.3.4 項では、その手法について説明する。また、2.3.5 項において断面積調整法全体に対し、理論的考察を加える。

2.3.2 断面積調整の対象となる断面積

序論において述べたように、本研究は商用軽水炉炉心解析に断面積調整法を体系的に導入するための技術的な見通しを得るためのものである。従って、現行の炉心解析フローに断面積調整法を体系的に導入するための技術的筋道を明らかにすることを第一命題と捉え、現実な計算コストで現行の炉心解析フローに可能な限り沿って断面積調整を可能とする手法を検討した。

一般的に原子核物理の分野において、断面積とは微視的反応断面積を指す。この理由としては、その単位が $[m^2]$ の次元を有するからである。しかしながら、炉心解析の分野においては微視的断面積 $\sigma [m^2]$ と原子数密度 $n [1/m^3]$ の積、すなわち、

$$\Sigma \equiv n\sigma \quad (2-3-2-1)$$

により定義される Σ が巨視的断面積と呼ばれ、数値計算の入力パラメータとして利用される。なお、巨視的断面積の次元は $[1/m]$ であることに留意されたい。炉心解析では、原子核と中性子の衝突という微視的な現象から出発し、断面積の縮約やテーブル化を行うことで計算コストを抑えながら、炉内の出力分布や臨界性など巨視的な炉心特性を評価する。この計算の過程において、巨視的断面積の形で断面積を利用することは材料の巨視的な特性を簡略に表せるという点で優れている。そのため、炉心解析では Fig. 2-3-2-1 に示される手順により断面積を処理することで微視的な情報をできる限り保存しながら巨視的な炉心特性を評価する。

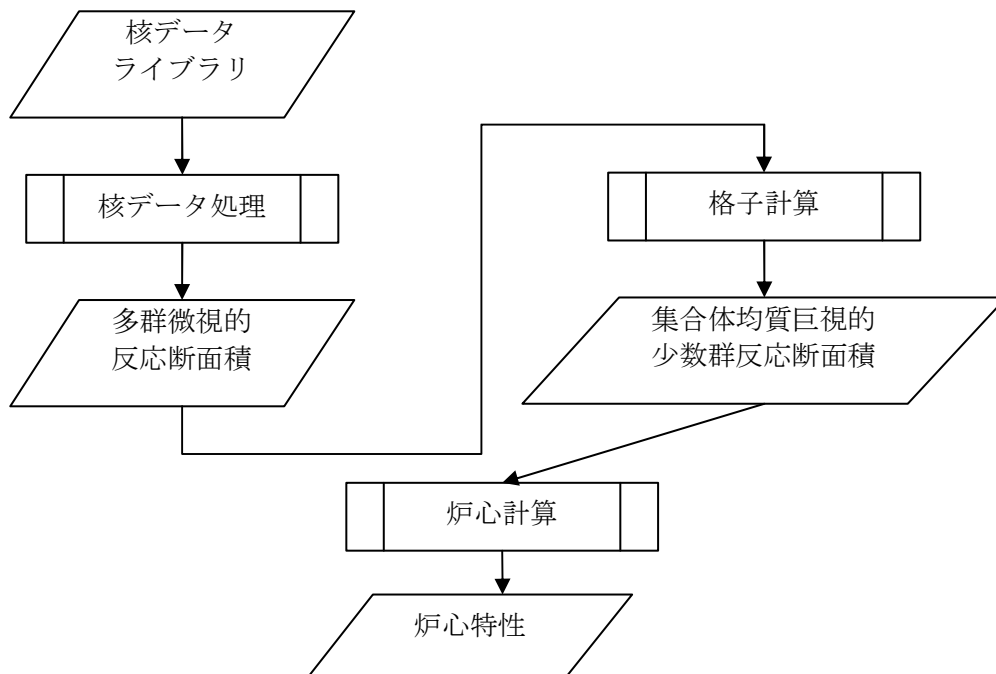


Fig. 2-3-2-1 炉心解析のフロー

Figure 2-3-2-1 に示される炉心解析フローを見ることで断面積調整を行う方法として、原理的には、以下の3つの断面積を調整する方法が考えられる。

- ①評価済み核データの超多群反応断面積
- ②多群微視的反應断面積(107群 SRACLIB 等)
- ③集合体均質巨視的少数群反應断面積

この3つのうち、①を適用するためには反応断面積あたり数万点にも及ぶ大規模なデータを考慮する必要があり、感度係数を求める計算量の観点から非現実的であると言える。また、②の方法については、断面積調整を実施するにあたり必要となる感度係数の計算に非常に大きな計算コストが必要となると見積もられることから、感度解析手法の大幅な効率化がなされない限りは現実的ではないと言える⁷。一方、③の方法に関しては、集合体タイプおよび燃焼度毎の断面積の相関関係を予め評価すれば、現実的な計算コストで現行の軽水炉炉心解析フローに体系的に導入できることが見込まれる。そこで、本研究においては集合体均質巨視的少数群反應断面積に対して断面積調整を実施する手法を検討する。

2.3.3 理論式の導出

本項においては、条件付き正規分布に基づき、断面積調整法の基礎式の導出を示す[10]。

いま、確率変数ベクトル $\mathbf{x} \sim N_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ を考える。ここで、 $\mathbf{x} \sim N_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ は「確率変数ベクトル \mathbf{x} が平均ベクトル $\boldsymbol{\mu}$ 、共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ により定義される n 次元多変量正規分布に従う」という意味を表す。すなわち、 \mathbf{x} が次式により定義されることを意味する。

$$\mathbf{x} = \boldsymbol{\mu} + \mathbf{C}\mathbf{z} \quad (2-3-3-1)$$

ただし、

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{C}^T \mathbf{C} \quad (2-3-3-2)$$

ここで、 \mathbf{z} はそれぞれの要素が平均 0、分散 1 の標準正規分布 $N(0,1)$ に従う乱数、すなわち、標準正規乱数により構成されるベクトルである。

確率変数ベクトル \mathbf{x} は任意の k ($<n$) 次元の部分集合を利用して、下式のように分解することができる。

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix} \quad (2-3-3-3)$$

なお、本項では分散共分散行列の部分集合 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ が正則であると仮定する。ここで、発見的ではあるが、次式で定義される行列 \mathbf{E} を考える。

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & -\boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \mathbf{O} & \mathbf{I}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E}^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \mathbf{O} & \mathbf{I}_2 \end{pmatrix} \quad (2-3-3-4)$$

この時、行列 \mathbf{E} の余因子展開より、明らかに $\det(\mathbf{E})=1$ である。さらに、行列 \mathbf{E} の転置行列は

⁷ 本研究では、3章で述べる研究において一般化摂動論に基づく高効率な感度解析手法の開発を試みた。

$$\mathbf{E}^T = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & \mathbf{O} \\ -\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{I}_2 \end{pmatrix} \quad (2-3-3-5)$$

となる。これを利用することで、以下の関係式を導くことができる。

$$\begin{aligned} \det(\mathbf{E}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{E}^T) &= \det\left\{\begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & -\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \mathbf{O} & \mathbf{I}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & \mathbf{O} \\ -\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{I}_2 \end{pmatrix}\right\} \\ &= \det\begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix} = \det(\boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21})\det(\boldsymbol{\Sigma}_{22}) \end{aligned} \quad (2-3-3-6)$$

一方、

$$\det(\mathbf{E}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{E}^T) = \det(\mathbf{E})\det(\boldsymbol{\Sigma})\det(\mathbf{E}^T) = \det(\boldsymbol{\Sigma}) \quad (2-3-3-7)$$

となることから⁸、次式を導く。

$$\det(\boldsymbol{\Sigma})\det(\boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21})\det(\boldsymbol{\Sigma}_{22}) \quad (2-3-3-8)$$

次に、確率変数ベクトル \mathbf{x} の確率密度関数 $f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ を考える。

$$f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^n \det(\boldsymbol{\Sigma})^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right\} d\mathbf{x} \quad (2-3-3-9)$$

さらに、直交行列 \mathbf{E} を導入することで、(2-3-3-9)式を以下のように変形することができる。

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^n \det(\boldsymbol{\Sigma})^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{E}^T (\mathbf{E}^T)^{-1} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{E}^{-1} \mathbf{E}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right\} d\mathbf{x} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^n \det(\boldsymbol{\Sigma})^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{E}^T \left[(\mathbf{E}^T)^{-1} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{E}^{-1}\right] \mathbf{E}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right\} d\mathbf{x} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^n \det(\boldsymbol{\Sigma})^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{E}^T (\mathbf{E}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{E}^T)^{-1} \mathbf{E}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right\} d\mathbf{x} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^n \det(\boldsymbol{\Sigma})^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{E}^T \left[\begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & -\boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \\ \mathbf{O} & \mathbf{I}_2 \end{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & \mathbf{O} \\ -\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{I}_2 \end{pmatrix}\right]^{-1} \mathbf{E}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right\} d\mathbf{x} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^n \det(\boldsymbol{\Sigma})^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})^T \mathbf{E}^T \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix}^{-1} \mathbf{E}(\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu})\right\} d\mathbf{x} \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\right)^n \det(\boldsymbol{\Sigma})^{-\frac{1}{2}} \exp\left\{-\frac{1}{2}(\mathbf{x}_1^T - \boldsymbol{\mu}_1^T - (\mathbf{x}_2^T - \boldsymbol{\mu}_2^T)\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} \quad \mathbf{x}_2^T - \boldsymbol{\mu}_2^T) \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2) \\ \mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2 \end{pmatrix}\right\} d\mathbf{x} \end{aligned} \quad (2-3-3-10)$$

ここで、(2-3-3-3)式の分解においてサブベクトル \mathbf{x}_1 および \mathbf{x}_2 が独立である必要十分条件は $\boldsymbol{\Sigma}_{12} = \mathbf{O}$ であること、並びに(2-3-3-6)式から、(2-3-3-10)式で表される確率密度関数を下式のように分解することができる。

⁸ 定理 : n 次正方行列 \mathbf{A}, \mathbf{B} に対して、 $\det(\mathbf{AB}) = \det(\mathbf{A})\det(\mathbf{B})$ を利用した。

$$\begin{aligned}
f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^p \det(\boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{21})^{-\frac{1}{2}} \\
&\quad \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}^{(1)})^T (\boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{21})^{-1} (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}^{(1)}) \right\} d\mathbf{x} \\
&\quad \times \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^q \det(\boldsymbol{\Sigma}_{22})^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}^{(2)})^T \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}^{(2)}) \right\} d\mathbf{x}
\end{aligned} \tag{2-3-3-11}$$

ただし、 $p + q = n$ である。

なお、(2-3-3-10)式から(2-3-3-11)式の変形において、以下のように簡略化している。

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\mu}^{(1)} &= \boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2) \\
\boldsymbol{\mu}^{(2)} &= \boldsymbol{\mu}_2
\end{aligned} \tag{2-3-3-12}$$

ここで、次式で表されるベイズの定理を考える。

$$P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = P(\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2) \cdot P(\mathbf{x}_2) = P(\mathbf{x}_2 | \mathbf{x}_1) \cdot P(\mathbf{x}_1) \tag{2-3-3-13}$$

これは確率変数 \mathbf{x}_1 および \mathbf{x}_2 の同時確率 $P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ は、確率変数 \mathbf{x}_2 の事前確率 $P(\mathbf{x}_2)$ と確率変数 \mathbf{x}_2 が得られた時の確率変数 \mathbf{x}_1 の条件付き確率 $P(\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2)$ の積で表すことができ、また、 \mathbf{x}_1 と \mathbf{x}_2 の扱いを逆としても $P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ が得られる事を意味している。(2-3-3-13)式を利用することで、次式により確率変数 \mathbf{x}_2 が起こった時の確率変数 \mathbf{x}_1 の条件付き確率を求めることができる。

$$P(\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2) = \frac{P(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)}{P(\mathbf{x}_2)} \tag{2-3-3-14}$$

ここで、(2-3-3-11)式に立ち返ると、(2-3-3-11)式左辺はサブベクトル \mathbf{x}_1 および \mathbf{x}_2 の同時成立確率を表していることが分かる。従って、(2-3-3-14)式と同様の演算を行うことでサブベクトル \mathbf{x}_1 の条件付き確率 $f(\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2)$ を求めることができる。すなわち、

$$\begin{aligned}
f(\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2) &= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^p \det(\boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{21})^{-\frac{1}{2}} \\
&\quad \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}^{(1)})^T (\boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{21})^{-1} (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}^{(1)}) \right\} d\mathbf{x} \\
&\quad \times \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^q \det(\boldsymbol{\Sigma}_{22})^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}^{(2)})^T \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}^{(2)}) \right\} d\mathbf{x} \\
&\quad \times \frac{1}{\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^q \det(\boldsymbol{\Sigma}_{22})^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}^{(2)})^T \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}^{(2)}) \right\} d\mathbf{x}} \\
&= \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \right)^p \det(\boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{21})^{-\frac{1}{2}} \\
&\quad \times \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}^{(1)})^T (\boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{21})^{-1} (\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\mu}^{(1)}) \right\} d\mathbf{x}
\end{aligned} \tag{2-3-3-15}$$

が得られる。(2-3-3-15)式により表される条件付き確率変数 $\mathbf{x}_1|\mathbf{x}_2$ は多変量正規分布に従うことが分かる。よって、 $\mathbf{x}_1|\mathbf{x}_2$ は次式で表される多変量正規分布に従う。

$$\mathbf{x}_1|\mathbf{x}_2 \sim N\left(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2), \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\right) \quad (2-3-3-16)$$

以上の数学的な手続きにより、断面積調整法を導出するための重要な定理を導くことができた。次に、(2-3-3-16)式で示された定理に基づき、断面積調整法の基礎式の導出を行う。

いま、ある臨界実験により n 個の炉心特性が測定され、これを n 次元列ベクトル \mathbf{Re} に格納したとする。一方で、 m 個のパラメータから成る断面積セット \mathbf{T}_0 に基づく臨界実験を模擬した数値シミュレーションを行い、同様の炉心特性を評価したものを、 n 次元列ベクトル $\mathbf{Rc}(\mathbf{T}_0)$ に格納したとする。なお、 $\mathbf{Rc}(\mathbf{T}_0)$ は断面積セット \mathbf{T}_0 に基づき計算された炉心特性予測値を意味する。この時、断面積セットの真値を \mathbf{T} と表せば、 \mathbf{T} は \mathbf{T}_0 の周りに正規分布を成して分布していると考えられる。すなわち、本来であれば真値 \mathbf{T} の周りに断面積の評価値 \mathbf{T}_0 が正規分布を成して分布しているが、これは断面積の評価値 \mathbf{T}_0 の周りに真値 \mathbf{T} が正規分布を成していることと等価であると解釈できる。同様に、 \mathbf{Re} も $\mathbf{Rc}(\mathbf{T}_0)$ の周りに正規分布を成していると考えられる。以下では、これらの考え方に基づき式変形を考える。これらの正規分布群を $\mathbf{x} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ と表すこととし、 $\mathbf{x}_1 = \mathbf{T}$ 、 $\mathbf{x}_2 = \mathbf{Re}$ 、 $\boldsymbol{\mu}_1 = \mathbf{T}_0$ 、 $\boldsymbol{\mu}_2 = \mathbf{Rc}(\mathbf{T}_0)$ により、臨界実験により実験値 \mathbf{Re} が得られた時の \mathbf{T} の事後の確率変数 $\mathbf{T}|\mathbf{Re}$ を考えれば、(2-3-3-16)式より以下のように表すことができる。

$$\mathbf{T}|\mathbf{Re} \sim N\left(\mathbf{T}_0 + \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}(\mathbf{Re} - \mathbf{Rc}(\mathbf{T}_0)), \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12}\boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1}\boldsymbol{\Sigma}_{21}\right) \quad (2-3-3-17)$$

次に、正規分布群 $\mathbf{x} \sim N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ の共分散 $\boldsymbol{\Sigma}$ に注目する。まず、実験値と計算値の残差は実験誤差による残差 $\Delta\mathbf{e}$ 、解析誤差による残差 $\Delta\mathbf{m}$ および核データに起因する残差 $\mathbf{G}\Delta\mathbf{T}$ の線形結合として表す事ができ、

$$\mathbf{Re} - \mathbf{Rc}(\mathbf{T}_0) = \Delta\mathbf{e} + \Delta\mathbf{m} + \mathbf{G}\Delta\mathbf{T} \quad (2-3-3-18)$$

と表すことができる。なお、 \mathbf{G} は着目する炉心特性値 R に対する断面積の絶対感度係数行列、すなわち、

$$G_{ij} = \frac{\delta R_i}{\delta T_j} \quad (2-3-3-19)$$

により定義される要素を持つ行列である。また、これらの残差には相関関係はない、すなわち、

$$\begin{aligned} E[\Delta\mathbf{m}\Delta\mathbf{e}^T] &= E[\Delta\mathbf{e}\Delta\mathbf{m}^T] = \mathbf{O} \\ E[(\mathbf{G}\Delta\mathbf{T})\Delta\mathbf{e}^T] &= E[\Delta\mathbf{e}(\mathbf{G}\Delta\mathbf{T})^T] = \mathbf{O} \\ E[(\mathbf{G}\Delta\mathbf{T})\Delta\mathbf{m}^T] &= E[\Delta\mathbf{m}(\mathbf{G}\Delta\mathbf{T})^T] = \mathbf{O} \end{aligned} \quad (2-3-3-20)$$

が成立するとする。なお、 $E[\]$ は期待値演算子である。ここで、共分散 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$ について考える。

$\mathbf{x}_1 = \mathbf{T}$ としたことにより、 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$ は下式により定義される。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma}_{11} &= \text{Cov}(\mathbf{T}, \mathbf{T}) = \text{Cov}(\mathbf{T}_0 + \Delta\mathbf{T}, \mathbf{T}_0 + \Delta\mathbf{T}) \\ &= E[\Delta\mathbf{T}\Delta\mathbf{T}^T] \equiv \mathbf{M} \end{aligned} \quad (2-3-3-21)$$

なお、 \mathbf{M} は断面積調整前の断面積セット \mathbf{T}_0 の共分散行列である。同様にして、 $\boldsymbol{\Sigma}_{12} (= \boldsymbol{\Sigma}_{21}^T)$ について考えれば、

$$\begin{aligned}
\Sigma_{12} &= \Sigma_{21}^T = Cov(\mathbf{T}, \mathbf{Re}) = Cov(\mathbf{T}_0 + \Delta \mathbf{T}, \mathbf{Rc}(\mathbf{T}_0) + \Delta \mathbf{e} + \Delta \mathbf{m} + \mathbf{G} \Delta \mathbf{T}) \\
&= E[\Delta \mathbf{T} \Delta \mathbf{e}^T] + E[\Delta \mathbf{T} \Delta \mathbf{m}^T] + E[\Delta \mathbf{T} \Delta \mathbf{T}^T] \mathbf{G}^T \\
&\equiv \mathbf{O} + \mathbf{O} + \mathbf{M} \mathbf{G}^T = \mathbf{M} \mathbf{G}^T
\end{aligned} \tag{2-3-3-22}$$

が得られる。さらに、 Σ_{22} も同様にして、

$$\begin{aligned}
\Sigma_{22} &= Cov(\mathbf{Re}, \mathbf{Re}) = Cov(\mathbf{Rc}(\mathbf{T}_0) + \Delta \mathbf{e} + \Delta \mathbf{m} + \mathbf{G} \Delta \mathbf{T}, \mathbf{Rc}(\mathbf{T}_0) + \Delta \mathbf{e} + \Delta \mathbf{m} + \mathbf{G} \Delta \mathbf{T}) \\
&= E[\Delta \mathbf{e} \Delta \mathbf{e}^T] + E[\Delta \mathbf{m} \Delta \mathbf{m}^T] + \mathbf{G} E[\Delta \mathbf{T} \Delta \mathbf{T}^T] \mathbf{G}^T \\
&\equiv \mathbf{V} \mathbf{e} + \mathbf{V} \mathbf{m} + \mathbf{G} \mathbf{M} \mathbf{G}^T
\end{aligned} \tag{2-3-3-23}$$

となる。ただし、 $\mathbf{V} \mathbf{e}$ および $\mathbf{V} \mathbf{m}$ はそれぞれ実験誤差とモデル誤差の共分散行列を意味し、次式により定義される。

$$\mathbf{V} \mathbf{e} = E[\Delta \mathbf{e} \Delta \mathbf{e}^T] \tag{2-3-3-24}$$

$$\mathbf{V} \mathbf{m} = E[\Delta \mathbf{m} \Delta \mathbf{m}^T] \tag{2-3-3-25}$$

(2-3-3-21)式から(2-3-3-23)式をまとめると、部分集合に分解する前の共分散 Σ は次式で表せる。

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M} & \mathbf{M} \mathbf{G}^T \\ \mathbf{G} \mathbf{M} & \mathbf{V} \mathbf{e} + \mathbf{V} \mathbf{m} + \mathbf{G} \mathbf{M} \mathbf{G}^T \end{pmatrix} \tag{2-3-3-26}$$

ここで、(2-3-3-17)式に立ち返り、(2-3-3-26)式の各要素を(2-3-3-17)式に代入することで、

$$\mathbf{T} | \mathbf{Re} \sim N(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{T} | \mathbf{Re}}, \Sigma_{\mathbf{T} | \mathbf{Re}}) \tag{2-3-3-27}$$

ただし、

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{T} | \mathbf{Re}} = \mathbf{T}_0 + \mathbf{M} \mathbf{G}^T (\mathbf{V} \mathbf{e} + \mathbf{V} \mathbf{m} + \mathbf{G} \mathbf{M} \mathbf{G}^T)^{-1} (\mathbf{Re} - \mathbf{Rc}(\mathbf{T}_0))$$

$$\Sigma_{\mathbf{T} | \mathbf{Re}} = \mathbf{M} - \mathbf{M} \mathbf{G}^T (\mathbf{V} \mathbf{e} + \mathbf{V} \mathbf{m} + \mathbf{G} \mathbf{M} \mathbf{G}^T)^{-1} \mathbf{G} \mathbf{M}$$

を得る。(2-3-3-27)式が断面積調整法の基礎式である。

ここでは、参考文献[12]に基づき、断面積調整法の基礎式の導出を示した。なお、ここでは分散共分散行列の部分集合 Σ_{22} が正則、すなわち、着目する炉心特性値セットに相関係数が1となるものや分散が0となるものが含まれないという仮定の元で式変形を行ったことをここに明記する。

2.3.4 断面積調整法への一般化逆行列の適用

前項では、着目する炉心特性値セットに相関係数が1となるものや分散が0となるものが含まれないという仮定のもとで式変形を行い、断面積調整法の基礎式を導いた。しかし、本研究においては断面積調整法の適用計算として、乱数を利用して生成した断面積セットに基づき計算した炉心特性を仮想的な実験値として断面積調整に利用したため、炉心特性値セットに相関係数が1となるものや分散が0となるものが含まれる⁹。従って、この仮定を排除した断面積調整法(以降、一般化断面積調整法と呼ぶ。)の適用が必要であった。そこで、(2-3-3-27)式で示された従来の断面積調整法に一般化逆行列を導入することで、この仮定を排除した手法を適用した[6]。ここでは、一般化逆行列を利用した断面積調整法の基礎式を導出する¹⁰。

一般化断面積調整法の導出に先立ち、この導出に必要な定理の導出を行う[11]。前項では、確率変数ベクトル $\mathbf{x} \sim N_n(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ について、(2-3-3-3)式の部分集合に分解した際に $\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ が正則であることを仮定して(2-3-3-16)式の導出を行った。ここで、(2-3-3-16)式を再掲する。

$$\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2 \sim N(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2), \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^{-1} \boldsymbol{\Sigma}_{21}) \quad (2-3-3-16)(\text{再掲})$$

これを一般化した定理として、 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ が正則か否かに関わらず、

$$\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2 \sim N(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2), \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ \boldsymbol{\Sigma}_{21}) \quad (2-3-4-1)$$

が成り立つ。以下では、(2-3-4-1)式の証明を行う。

いま、下式で表される $m \times m$ 行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ を考える。

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix} \quad (2-3-4-2)$$

なお、 $\boldsymbol{\Sigma}$ は半正定値な行列であるとする¹¹。ここで、 $\boldsymbol{\Sigma}_{11}$ を $k \times k$ 行列($k < m$)、 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ を $(m-k) \times (m-k)$ 行列としたとき、その零空間および列空間に対して以下の2式が成立する。

$$K(\boldsymbol{\Sigma}_{22}) \subset K(\boldsymbol{\Sigma}_{12}) \quad (2-3-4-3)$$

$$R(\boldsymbol{\Sigma}_{21}) \subset R(\boldsymbol{\Sigma}_{22}) \quad (2-3-4-4)$$

ただし、 $K(\mathbf{M})$ および $R(\mathbf{M})$ はそれぞれ行列 \mathbf{M} の零空間と列空間、記号 \subset は集合の包含関係を表す。まず、列空間の意味するところは「行列 \mathbf{M} の各列ベクトルを基底とする空間」である。また、「行列 \mathbf{M} の各行ベクトルを基底とする空間」は行空間と呼ばれる。一方、零空間の意味するところは「行空間のどのベクトルに対しても直行するベクトルで張られたベクトル空間」である。従って、行列 \mathbf{M} の列空間 $R(\mathbf{M})$ と行列 \mathbf{M} の転置行列 \mathbf{M}^T の行空間は一致し、行列 \mathbf{M} の零空間の直行補空間 $K(\mathbf{M})^\perp$ と行列 \mathbf{M} の行空間は一致する。すなわち、

⁹ 例えば、対称炉心において対称な位置の集合体平均核分裂率は、数値計算上では相関係数が1となりうる。

¹⁰ ここでは、参考文献[6]とは異なる導出法を示す。

¹¹ $m \times m$ 実行列 \mathbf{A} が任意の m 次元列ベクトル \mathbf{u} に対して、

$$\mathbf{u}^T \mathbf{A} \mathbf{u} \geq 0$$

を満たすとき、行列 \mathbf{A} が半正定値であるという。また、半正定値の行列のすべての固有値は非負である。なお、分散共分散行列は半正定値である。

下式が成立する。

$$K(\mathbf{M})^\perp = R(\mathbf{M}^T) \quad (2-3-4-5)$$

次に、(2-3-4-3)式および(2-3-4-4)式の証明を以下に示す。なお、これらの関係式は次式を満たす行列 \mathbf{B} の存在を保証するために不可欠である。

$$\Sigma_{12} = \mathbf{B} \Sigma_{22} \quad (2-3-4-6)$$

$\mathbf{z} \in K(\Sigma_{22})$ を満たす行列 \mathbf{z} を考えた時、すべての $\mathbf{y} \in R^k$ と $\alpha \in R^1$ に対して、下式が成立する。

$$\begin{aligned} (\mathbf{y}^T \quad \alpha \mathbf{z}^T) \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{y} \\ \alpha \mathbf{z} \end{pmatrix} &= \mathbf{y}^T \Sigma_{11} \mathbf{y} + 2\alpha \mathbf{y}^T \Sigma_{12} \mathbf{y} + \alpha^2 \mathbf{y}^T \Sigma_{22} \mathbf{y} \\ &= \mathbf{y}^T \Sigma_{11} \mathbf{y} + 2\alpha \mathbf{y}^T \Sigma_{12} \mathbf{y} \quad (\Sigma_{22} \mathbf{z} = \mathbf{O} \text{ であるから}) \\ &\geq 0 \quad (\text{半正定値であるから}) \end{aligned} \quad (2-3-4-7)$$

ここで、任意の \mathbf{y} として $\mathbf{y} = \Sigma_{12} \mathbf{z}$ を考えると、(2-3-4-7)式より

$$\mathbf{z}^T \Sigma_{21} \Sigma_{11} \Sigma_{12} \mathbf{z} + 2\alpha (\Sigma_{12} \mathbf{z})^T (\Sigma_{12} \mathbf{z}) \geq 0 \quad (2-3-4-8)$$

を得る。(2-3-4-8)式が任意の α に対して成立するためには、 $\Sigma_{12} \mathbf{z} = \mathbf{O}$ となることが不可欠である。すなわち、 $\mathbf{z} \in K(\Sigma_{12})$ であり、それ故に、 $K(\Sigma_{22}) \subset K(\Sigma_{12})$ である¹²。また、(2-3-4-3)式より明らかに $K(\Sigma_{12})^\perp \subset K(\Sigma_{22})^\perp$ である。従って、これに(2-3-4-5)式を代入することで、 $R(\Sigma_{21}) \subset R(\Sigma_{22})$ は示される。以上で、(2-3-4-1)式を導くための定理が示された。続いて、(2-3-4-1)式の証明を行う。

いま、確率変数ベクトル $\mathbf{x} \sim N_n(\boldsymbol{\mu}, \Sigma)$ を考える。これを(2-3-3-3)式と同様に部分集合に分解することとする。

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 \\ \boldsymbol{\mu}_2 \end{pmatrix}, \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_{11} & \Sigma_{12} \\ \Sigma_{21} & \Sigma_{22} \end{pmatrix} \quad (2-3-3-3)(\text{再掲})$$

ただし、 \mathbf{x}_1 と $\boldsymbol{\mu}_1$ は k 次元列ベクトル、 Σ_{11} は $k \times k$ 行列である。なお、部分集合 Σ_{22} が正則であることは保証されないとする。ここで、(2-3-4-4)式より次式を満たす $k \times (m-k)$ 行列が存在する。

$$\Sigma_{12} = \mathbf{B} \Sigma_{22} \quad (2-3-4-6)(\text{再掲})$$

故に、以下の式変形が可能である。

$$\Sigma_{12} \Sigma_{22}^+ \Sigma_{22} = \mathbf{B} \Sigma_{22} \Sigma_{22}^+ \Sigma_{22} = \mathbf{B} \Sigma_{22} = \Sigma_{12} \quad (2-3-4-9)$$

ここで、次の行列 \mathbf{E} を導入する。

$$\mathbf{E} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & -\Sigma_{12} \Sigma_{22}^+ \\ \mathbf{O} & \mathbf{I}_2 \end{pmatrix} \quad (2-3-4-10)$$

この時、行列 \mathbf{E} の転置行列 \mathbf{E}^T は

¹² $\mathbf{z} \in K(\Sigma_{22})$ を満たす任意の \mathbf{z} に対して $\Sigma_{12} \mathbf{z} = \mathbf{O}$ となるためには、 \mathbf{z} により張られる空間を Σ_{12} により張られる空間が包含しなければならない。すなわち、 $K(\Sigma_{22}) \subset K(\Sigma_{12})$ であるといえる。

$$\mathbf{E}^T = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & \mathbf{O} \\ -\boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{I}_2 \end{pmatrix} \quad (2-3-4-11)$$

となる。ここで、(2-3-4-10)式で定義した行列 \mathbf{E} を利用して、次式により定義される確率変数を考える。

$$\mathbf{E} \mathbf{x} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ \mathbf{x}_2 \\ \mathbf{x}_2 \end{pmatrix} \quad (2-3-4-12)$$

この確率変数の分布は平均が

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ \boldsymbol{\mu}_2 \\ \boldsymbol{\mu}_2 \end{pmatrix} \quad (2-3-4-13)$$

共分散行列が

$$\begin{aligned} \mathbf{E} \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{E}^T &= \begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & -\boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ \\ \mathbf{O} & \mathbf{I}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{\Sigma}_{12} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & \mathbf{O} \\ -\boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{I}_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{O} \\ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{I}_1 & \mathbf{O} \\ -\boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{I}_2 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ \boldsymbol{\Sigma}_{21} & \mathbf{O} \\ \mathbf{O} & \boldsymbol{\Sigma}_{22} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2-3-4-14)$$

で表される。また、(2-3-4-14)式より確率変数 $\mathbf{x}_1 - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ \mathbf{x}_2$ および \mathbf{x}_2 が独立であることがわかるので、前項で示した導出と同様な手順でベイズの定理を導入することで、 \mathbf{x}_2 が得られたときの \mathbf{x}_1 の事後確率 $\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2$ を導くことができ、すなわち、(2-3-4-1)式を得る。

$$\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_2 \sim N(\boldsymbol{\mu}_1 + \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ (\mathbf{x}_2 - \boldsymbol{\mu}_2), \boldsymbol{\Sigma}_{11} - \boldsymbol{\Sigma}_{12} \boldsymbol{\Sigma}_{22}^+ \boldsymbol{\Sigma}_{21}) \quad (2-3-4-1)(\text{再掲})$$

ここでは、 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ が正則である保証が無いという前提の元に式変形を行ったが、 $\boldsymbol{\Sigma}_{22}$ が正則である場合には(2-3-4-1)式は(2-3-3-16)式に帰着する。

(2-3-4-1)式を(2-3-3-16)式の代わりに用いて、 $\mathbf{x}_1 = \mathbf{T}$ 、 $\mathbf{x}_2 = \mathbf{Re}$ 、 $\boldsymbol{\mu}_1 = \mathbf{T}_0$ 、 $\boldsymbol{\mu}_2 = \mathbf{Rc}(\mathbf{T}_0)$ とした後に、前項の(2-3-3-17)式以降の手順と同じ手順を踏むことにより、次式で示される一般化断面積調整法の基礎式を導くことができる。

$$\mathbf{T} | \mathbf{Re} \sim N(\boldsymbol{\mu}_{\mathbf{T} | \mathbf{Re}}, \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{T} | \mathbf{Re}}) \quad (2-3-4-15)$$

ただし、

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_{\mathbf{T} | \mathbf{Re}} &= \mathbf{T}_0 + \mathbf{M} \mathbf{G}^T (\mathbf{V} \mathbf{e} + \mathbf{V} \mathbf{m} + \mathbf{G} \mathbf{M} \mathbf{G}^T)^+ (\mathbf{Re} - \mathbf{Rc}(\mathbf{T}_0)) \\ \boldsymbol{\Sigma}_{\mathbf{T} | \mathbf{Re}} &= \mathbf{M} - \mathbf{M} \mathbf{G}^T (\mathbf{V} \mathbf{e} + \mathbf{V} \mathbf{m} + \mathbf{G} \mathbf{M} \mathbf{G}^T)^+ \mathbf{G} \mathbf{M} \end{aligned}$$

2.3.5 理論的考察

2.3.3 項および 2.3.4 項では、断面積調整法の基礎式の導出およびに一般化逆行列を適用した断面積調整法の基礎式の導出を行った。本項においては、これらの基礎式からその数学的意味について考察を加える。

断面積調整法の基礎式およびに一般化逆行列を適用した断面積調整法の基礎式はそれぞれ(2-3-3-27)式および(2-3-4-15)式に示される。ここで、調整後の断面積セットを \mathbf{T} 、 \mathbf{T} の共分散行列を \mathbf{M}' と表すこととし、再度(2-3-3-27)式および(2-3-4-15)式を書き下すと、それぞれ(2-3-5-1)式および(2-3-5-2)式として表される。

[断面積調整法の基礎式]

$$\begin{aligned}\mathbf{T} &= \mathbf{T}_0 + \mathbf{M}\mathbf{G}^T (\mathbf{V}\mathbf{e} + \mathbf{V}\mathbf{m} + \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T)^{-1} (\mathbf{R}\mathbf{e} - \mathbf{R}\mathbf{c}(\mathbf{T}_0)) \\ \mathbf{M}' &= \mathbf{M} - \mathbf{M}\mathbf{G}^T (\mathbf{V}\mathbf{e} + \mathbf{V}\mathbf{m} + \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T)^{-1} \mathbf{G}\mathbf{M}\end{aligned}\quad (2-3-5-1)$$

[一般化逆行列を適用した断面積調整法の基礎式]

$$\begin{aligned}\mathbf{T} &= \mathbf{T}_0 + \mathbf{M}\mathbf{G}^T (\mathbf{V}\mathbf{e} + \mathbf{V}\mathbf{m} + \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T)^+ (\mathbf{R}\mathbf{e} - \mathbf{R}\mathbf{c}(\mathbf{T}_0)) \\ \mathbf{M}' &= \mathbf{M} - \mathbf{M}\mathbf{G}^T (\mathbf{V}\mathbf{e} + \mathbf{V}\mathbf{m} + \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T)^+ \mathbf{G}\mathbf{M}\end{aligned}\quad (2-3-5-2)$$

(2-3-5-1)式と(2-3-5-2)式を比較した際、異なっている点は右辺第 2 項に含まれる不確かさの項が逆行列として利用されているか、一般化逆行列として利用されているかの点のみである。前述のように、正則行列に対する一般化逆行列は通常逆行列に一致することから、不確かさの項、すなわち、 $(\mathbf{V}\mathbf{e} + \mathbf{V}\mathbf{m} + \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T)$ が正則行列である場合には(2-3-5-2)式は(2-3-5-1)式に帰着する。言い換えれば、(2-3-5-2)式は(2-3-5-1)式の一般化であると言える。

また、(2-3-5-1)式に注目し、非現実的ではあるが、仮に $\mathbf{M}\mathbf{G}^T$ と $(\mathbf{V}\mathbf{e} + \mathbf{V}\mathbf{m} + \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T)$ が正則な行列であるとすれば断面積の調整量 $\Delta\mathbf{T}$ を導入し、以下の式変形を行うことができる。

$$\begin{aligned}\Delta\mathbf{T} &= \mathbf{T} - \mathbf{T}_0 = \mathbf{M}\mathbf{G}^T (\mathbf{V}\mathbf{e} + \mathbf{V}\mathbf{m} + \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T)^{-1} (\mathbf{R}\mathbf{e} - \mathbf{R}\mathbf{c}(\mathbf{T}_0)) \\ (\mathbf{V}\mathbf{e} + \mathbf{V}\mathbf{m} + \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T) (\mathbf{M}\mathbf{G}^T)^{-1} \Delta\mathbf{T} &= (\mathbf{R}\mathbf{e} - \mathbf{R}\mathbf{c}(\mathbf{T}_0))\end{aligned}\quad (2-3-5-3)$$

(2-3-5-3)式右辺は実験測定値と断面積セット \mathbf{T}_0 を用いた数値計算により得られるベクトルである。一方、(2-3-5-3)式左辺においても $\Delta\mathbf{T}$ 以外の行列は既知である。すなわち、(2-3-5-3)式は逆問題とみなすことができる。さらに言えば、(2-3-5-3)式で定義される逆問題を解くということは次式を満たす $\Delta\mathbf{T}$ を求めることに他ならない。

$$\|(\mathbf{V}\mathbf{e} + \mathbf{V}\mathbf{m} + \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T) (\mathbf{M}\mathbf{G}^T)^{-1} \Delta\mathbf{T} - (\mathbf{R}\mathbf{e} - \mathbf{R}\mathbf{c}(\mathbf{T}_0))\| = 0 \quad (2-3-5-4)$$

ここで、さらに簡略化するために $\mathbf{V}\mathbf{e} = \mathbf{V}\mathbf{m} = \mathbf{O}$ と仮定する。この時(2-3-5-4)式は更に次のように式変形できる。

$$\begin{aligned}\| \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T (\mathbf{M}\mathbf{G}^T)^{-1} \Delta\mathbf{T} - (\mathbf{R}\mathbf{e} - \mathbf{R}\mathbf{c}(\mathbf{T}_0)) \| &= 0 \\ \| \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T (\mathbf{G}^T)^{-1} \mathbf{M}^{-1} \Delta\mathbf{T} - (\mathbf{R}\mathbf{e} - \mathbf{R}\mathbf{c}(\mathbf{T}_0)) \| &= 0 \\ \| \mathbf{G}\Delta\mathbf{T} - (\mathbf{R}\mathbf{e} - \mathbf{R}\mathbf{c}(\mathbf{T}_0)) \| &= 0\end{aligned}\quad (2-3-5-5)$$

また、(2-3-3-19)式で示される絶対感度係数行列 \mathbf{G} の定義より、 \mathbf{G} は一次精度で断面積の摂

動量と炉心特性計算値を結びつける量である。故に、(2-3-5-5)式の演算は「一次精度で実験値と計算値が一致するような断面積調整量を決定する」事を意味している。

ここまででは、 \mathbf{MG}^T と $(\mathbf{Ve} + \mathbf{Vm} + \mathbf{GMG}^T)$ が正則な行列であるという非常に仮想的な仮定の下に、断面積調整法を逆問題の一種であると捉え考察を進めてきた。これを一般化すると、 \mathbf{MG}^T と $(\mathbf{Ve} + \mathbf{Vm} + \mathbf{GMG}^T)$ が正則な行列ではないときには、変数が方程式の数より少ない優決定系あるいは変数が方程式の数より多い劣決定系の下で逆問題を解く事が要求されているものと考えることができる。

また、参考文献[13]には断面積調整法の特徴が纏められている。以下ではこれを引用し、断面積調整の特徴を示す。

- ① ある核特性の C/E 値の改良に寄与するのは、その核特性に対する感度が大きく、かつ、調整前の断面積誤差が大きい核種反応の断面積である。逆に言えば、仮にある核特性に大きな感度を有する核種反応であっても、断面積誤差が小さい場合にはその核種反応の断面積は動けないので、C/E 値の改良には寄与しないことになる。すなわち、炉定数調整は、核断面積誤差の範囲内で断面積を動かすため、核データ評価側と矛盾するものではない。
- ② 炉定数調整が有効であるためには、実験解析誤差 $(\mathbf{Ve} + \mathbf{Vm})$ の大きさが、断面積誤差に起因する核特性予測誤差 \mathbf{GMG}^T と比べて小さいことが必要である。ただし、実験解析誤差が大きくても、(2-3-5-1)式によれば、 \mathbf{T} は \mathbf{T}_0 に、 \mathbf{M}' は \mathbf{M} に戻るだけなので、結果に悪影響を与えることはない。言い換えれば、実験解析誤差が大きい C/E 値に対しては、C/E 値が 1.0 に近いことが必ずしも真値に近いことではないため、炉定数調整でも無理に C/E 値を 1.0 に近づけることはしないということである。
- ③ 炉定数調整法での核特性予測精度の向上は、断面積共分散の縮小 ($\mathbf{M} \rightarrow \mathbf{M}'$) により達成されるが、その縮小の度合には C/E 値自体は関係がない。仮に、調整前の C/E 値がもともと 1.0 であったとしても、その核特性に感度があれば予測精度の向上が図れる。また、(2-3-5-1)式からは、共分散の縮小は対角成分(標準偏差)の減少のみではなく、非対角成分(相関係数)の負の方向への変化からも寄与を受けることが推定される。

①に示される特徴は、(2-3-5-1)式において断面積調整量が断面積の不確かさ \mathbf{M} と感度係数行列 \mathbf{G} の積、すなわち \mathbf{MG}^T に依存している点から明らかである。さらに言えば、断面積の調整量はその不確かさに依存するために、不確かさが小さい断面積は大きな調整がなされないために核データ評価側との矛盾が生じにくいといえる。

次に②の特徴について考える。(2-3-5-1)式による断面積と不確かさの変化量に着目すると、いずれの式においても実験解析誤差 $(\mathbf{Ve} + \mathbf{Vm})$ は逆行列として作用していることが分かる。従って、実験解析誤差 $(\mathbf{Ve} + \mathbf{Vm})$ のノルムが大きい時には、断面積と不確かさの変化量が 0 に漸近すると考えられることから、実験解析誤差が大きい積分データを利用して断面積調整の結果に悪影響を及ぼすことは(実験解析値の不確かさが正確に評価されている場合に

限り)起こり得ない¹³。なお、実際的には、後述の理由で断面積調整の実施により必ず真の C/E 値が低減され、かつ、炉心特性予測値の真の不確かさが低減されることは保証されない。

さらに、③の特徴は(2-3-5-1)式の断面積の不確かさの変化を表す式から得られる。(2-3-5-1)式の断面積の調整量に関する式では実験値と計算値の差($\mathbf{Re} - \mathbf{Rc}(T_0)$)を利用しているのに対して、不確かさの変化量に関する式には実験値と計算値の差($\mathbf{Re} - \mathbf{Rc}(T_0)$)は利用されていないことが分かる。従って、断面積調整法による不確かさの低減においては C/E 値を利用しておらず、仮に調整前の調整対象パラメータの C/E 値が 1.0 であったとしても、調整対象パラメータに感度のある断面積の不確かさは低減されるといえる。

本節では、参考文献[12][13]に基づき断面積調整法について数学的な説明を行なった。ただし、ここまでの説明では重大な仮定として、様々な物理量(炉心特性値、断面積等)の誤差が正規分布に従い、かつ、正確に評価されているという仮定に基づいている。しかしながら、実際の物理量のばらつきが正規分布に従わない可能性や何らかの系統誤差により物理量の真の不確かさと我々が知り得る偶発的なばらつきが異なっている可能性が存在する。従って、断面積調整法は「不確かな不確かさ」に基づくものであるともいえる。この問題点として、例えば実験解析誤差が過小評価されている積分データを利用して断面積調整を実施することを考える。この場合には、断面積調整法の適用によって数値上では C/E 値が低減され、その不確かさも低減されることとなる。しかしながら、それは必ずしも真の C/E 値が低減されること若しくは真の不確かさが低減されることを意味しない。このような場合には、断面積調整の実施により炉心特性予測値に悪影響をおよぼすことも十分に考えられる。従って、断面積調整を実施するにあたっては、断面積調整が基づく物理量の「不確かさ」が「不確かな不確かさ」であることに十分留意する必要があるといえる。

¹³ 詳しくは Appendix A で述べるが、この特徴はバイアス因子法と断面積調整法の大きな相違点の一つである。

2.4 ランダムサンプリング法

2.4.1 概説

本研究では、集合体均質巨視的少数群反応断面積の共分散行列を評価するために、ランダムサンプリング法を適用した。ランダムサンプリング法では、乱数によりランダムに摂動させた入力パラメータ群を数多く用意し、それぞれの計算により得られる応答を統計処理することで出力の不確かさを評価する。また、この時利用する乱数の種類として、一様乱数や正規乱数あるいは多変量正規乱数など複数種類が考えられるが、これは物理的観点から最も現実的な乱数を選ぶべきである。

本研究では、集合体均質巨視的少数群反応断面積の共分散行列を評価するため、格子計算コードSRAC[14]のPublic Libraryに格納される107群微視的反応断面積に対してランダムサンプリングを実施し、出力される集合体均質巨視的少数群反応断面積に対して統計処理を行うことで集合体均質巨視的少数群反応断面積の共分散行列を評価した。また、一般的に、核種の微視的断面積は実験により評価されることから、実験誤差の評価で利用される正規分布に基づき、ランダムサンプリングを実施することとした。さらに、微視的反応断面積は中性子の入射エネルギーの数万群といった非常に細かいエネルギー点に対して評価されている。この時、あるエネルギー群*i*の近傍のエネルギー群の評価値は*i*群の評価値と強い相関関係を持つことが容易に想像できる。故に、研究におけるランダムサンプリングでは各入力パラメータの相関関係を考慮した正規乱数である多変量正規乱数を利用することとした。

本節においては、多変量正規乱数を利用したランダムサンプリングの計算理論および理論的考察について説明する。

2.4.2 計算理論

本項では多変量正規乱数を利用したランダムサンプリングの計算理論について説明する。ここで、ランダムサンプリングの計算理論に先立ち、多変量正規分布の定義について説明する。

今、ベクトル \mathbf{x} 、 \mathbf{z} および $\boldsymbol{\mu}$ を以下のように定義することとする。

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_n \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu} = \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \vdots \\ \mu_n \end{pmatrix} \quad (2-4-2-1)$$

そして、行列 \mathbf{C} を任意の $n \times n$ 行列とする。ここで、 \mathbf{z} が n 次元の標準多変量正規分布に従うとする。すなわち、 $z_i \sim N(0,1)$ で表せるとする。このとき、 $n \times n$ 行列 \mathbf{C} と n 次元ベクトル $\boldsymbol{\mu}$ を用いて \mathbf{x} を以下のように定義する。

$$\mathbf{x} = \mathbf{Cz} + \boldsymbol{\mu} \quad (2-4-2-2)$$

(2-4-2-2)式で定義される \mathbf{x} を多変量正規分布と呼び、これが多変量正規分布の定義となる。さらに、 $\mathbf{E}[\mathbf{z}] = \bar{\mathbf{0}}$ および $\mathbf{V}[\mathbf{z}] = \mathbf{I}$ を念頭において確率変数 \mathbf{x} の期待値及び分散を求めると

以下のようになる¹⁴。

$$\mathbf{E}[\mathbf{x}] = \mathbf{E}[\mathbf{Cz} + \boldsymbol{\mu}] = \mathbf{C}\mathbf{E}[\mathbf{z}] + \boldsymbol{\mu}\mathbf{E}[1] = \mathbf{C} \cdot \mathbf{0} + \boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu} \quad (2-4-2-3)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{V}[\mathbf{x}] &= \mathbf{E}[(\mathbf{Cz} + \boldsymbol{\mu} - \boldsymbol{\mu})^2] \\ &= \mathbf{E}[\mathbf{CzCz}] \\ &= \mathbf{E}[\mathbf{Cz}(\mathbf{zC})^T] \\ &= \mathbf{E}[\mathbf{Cz zC}^T] \\ &= \mathbf{C}\mathbf{V}[\mathbf{z}]\mathbf{C}^T = \mathbf{C}\mathbf{C}^T \end{aligned} \quad (2-4-2-4)$$

以上から、(2-4-2-2)式に従い確率変数 \mathbf{x} を多変量正規分布と定義したとき、 \mathbf{x} は平均 $\boldsymbol{\mu}$ 、分散 $\mathbf{C}\mathbf{C}^T$ の $N(\boldsymbol{\mu}, \mathbf{C}\mathbf{C}^T)$ の正規分布に従う確率変数となることが分かる。故に、ある確率変数の分散共分散行列 $\boldsymbol{\Sigma}$ に対して、

$$\boldsymbol{\Sigma} = \mathbf{C}\mathbf{C}^T \quad (2-4-2-5)$$

となる行列 \mathbf{C} を計算し、これを(2-4-2-2)式に代入した場合、得られる確率変数 \mathbf{x} は $N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ に従う確率変数となる。すなわち、 $N(\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ に従う多変量正規乱数を生成するとき、(2-4-2-5)式を満たす行列 \mathbf{C} を計算した後、(2-4-2-2)式の演算を行えばよい。これを炉心解析に当てはめた場合に $\boldsymbol{\mu}$ は断面積のノミナル値、 $\boldsymbol{\Sigma}$ は断面積の共分散行列である。故に、 $\boldsymbol{\mu}$ および $\boldsymbol{\Sigma}$ は与えられているため、 $\boldsymbol{\Sigma}$ から行列 \mathbf{C} を計算できれば多変量正規分布に基づくサンプル断面積セットを生成することが可能となる。

(2-4-2-5)式はある対称行列を行列 \mathbf{C} とその転置行列 \mathbf{C}^T の積に分解することを意味する。この方法として、コレスキー分解を用いた方法と特異値分解を用いたものが挙げられる。なお、すべての固有値が非負の対称行列(半正定値対称行列)に対して、固有値分解と特異値分解は等価である。本研究では特異値分解に基づく手法を適用したが、本項においてはコレスキー分解に基づく手法と特異値分解に基づく方法の両手法について説明し、本研究で特異値分解に基づく手法を採用した理由を示す。

[コレスキー分解に基づく手法]

広義のコレスキー分解とは、対称行列に特化した LU 分解と言える。コレスキー分解では実対称行列 \mathbf{A} に対して以下を満たす行列 \mathbf{L} を求める。

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T \quad (2-4-2-6)$$

この説明のために、簡単に LDU 分解について述べる。

ほとんどの行列において LU 分解が適用可能であり、そのまま LU 分解が適用できない場合でもピボットリングを行うことで LU 分解ができる事は広く知られている[15]。すなわち、任意の行列 \mathbf{A} は下三角行列 \mathbf{L} と上三角行列 \mathbf{U} に分解することができる。ただし、 \mathbf{L} の対角成分を 1 とする。

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U} \quad (2-4-2-7)$$

ここで、さらに上三角行列 \mathbf{U} の対角要素となるピボットを括り出す。例えば、 \mathbf{U} が 3×3 の

¹⁴ ここでは $Var(\mathbf{x}) \cdot Cov(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ の表記をスカラー量、 $\mathbf{V}[\mathbf{x}]$ の表記をベクトル量として定義する。

行列の上三角行列であったならば、以下のようになる。

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} \\ 0 & c_{22} & c_{23} \\ 0 & 0 & c_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & 0 & 0 \\ 0 & c_{22} & 0 \\ 0 & 0 & c_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & c_{12}/c_{11} & c_{13}/c_{11} \\ 0 & 1 & c_{23}/c_{22} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{D}\mathbf{U}^T \quad (2-4-2-8)$$

すなわち、

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{U}^T \quad (2-4-2-9)$$

以上の手続きにより、下三角行列 \mathbf{L} と上三角行列 \mathbf{U} は対角成分に 1 を持つ行列となった。

なお、行列の LDU 分解は一意的に行列セットが得られる。

(2-4-2-9)式より対称行列 \mathbf{A} に対しては下式が成立する。

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{U} = \mathbf{A}^T = (\mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{U})^T = \mathbf{U}^T \mathbf{D} \mathbf{L}^T \quad (2-4-2-10)$$

ここで、LDU 分解の一意的性より以下の関係式が得られる。

$$\mathbf{L} = \mathbf{U}^T \quad (2-4-2-11)$$

$$\mathbf{U} = \mathbf{L}^T \quad (2-4-2-12)$$

故に、下式に帰着する。

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^T \quad (2-4-2-13)$$

(2-4-2-13)式の分解は修正コレスキー分解と呼ばれる。ここで、対角行列 \mathbf{D} が対角成分のみ持つ行列であるという性質と仮にこの対角成分がすべて正の実数であるという仮定を用いると(2-4-2-13)式を以下のように変形することが可能となる。

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{D}\mathbf{L}^T = \mathbf{L}\sqrt{\mathbf{D}}\sqrt{\mathbf{D}}\mathbf{L}^T = (\mathbf{L}\sqrt{\mathbf{D}})(\mathbf{L}\sqrt{\mathbf{D}})^T \quad (2-4-2-14)$$

ただし、 $\sqrt{\mathbf{D}}$ は以下のように求めることができる。

$$\sqrt{\mathbf{D}} = \begin{pmatrix} \sqrt{c_{11}} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sqrt{c_{22}} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \sqrt{c_{mm}} \end{pmatrix} \quad (2-4-2-15)$$

さらに、下三角行列 $\mathbf{L}\sqrt{\mathbf{D}}$ を改めて \mathbf{L} と置き直すと、(2-4-2-14)式は以下のように表すことができる。

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T \quad (2-4-2-16)$$

(2-4-2-16)式から、対称行列が下三角行列とその転置行列に分解されたことが理解できる。

すなわち、コレスキー分解されたことが分かる。

ただし、コレスキー分解において、対角行列 \mathbf{D} の要素がすべて正の実数であるという重大な仮定を用いた。この条件が保証されなければ、(2-4-2-15)式の計算において負数の平方根をとることになるため計算出来ない。また、この条件は行列 \mathbf{A} が正定値であるという条件と同値である。ここで、正定値は「半正定値かつ非退化な行列」 \Leftrightarrow 「すべての固有値が正の行列」を指す。一方で、分散共分散行列の定義より、分散共分散行列が半正定値であることは証明されているが正定値となることは保証されない。従って、分散共分散行列の分解にコレスキー分解を適用することは汎用的な手法ではないと言える。

[特異値分解に基づく方法]

実際に分散共分散行列を(2-4-2-5)式の形に分解するためには、任意の対称行列に対しても分解出来なければならない。そのため、任意の $n \times m$ 行列も安定的に分解することが可能な特異値分解に着目する。

2.2.2 項で説明したように特異値分解とは、任意の行列を次のように分解する方法である。

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{W}\mathbf{V}^* \quad (2-2-2-1)(再掲)$$

また、非零の固有値の重複がない実対称行列を対象に特異値分解を行うことを考えれば、特異値分解が一意に定まることから、

$$\mathbf{A}^T = (\mathbf{U}\mathbf{W}\mathbf{V}^T)^T = \mathbf{V}\mathbf{W}\mathbf{U}^T \quad (2-4-2-17)$$

一方、行列 \mathbf{A} は実対称行列であることから、下式が成り立つ。

$$\mathbf{A}^T = \mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{W}\mathbf{V}^T \quad (2-4-2-18)$$

(2-4-2-17)式および(2-4-2-18)式により、

$$\mathbf{U} = \mathbf{V} \quad (2-4-2-19)$$

が得られる。ただし、非零の固有値の重複がある実対称行列において、これは近似的な扱いとなり、

$$\mathbf{U} \approx \mathbf{V} \quad (2-4-2-20)$$

となる。この特性を利用し、実対称行列 \mathbf{A} を以下のように分解する。

$$\mathbf{A} \cong \mathbf{U}\mathbf{W}\mathbf{U}^T \quad (2-4-2-21)$$

ここで、行列 \mathbf{W} の対角成分(特異値)はすべて正の値をとることから、行列 \mathbf{W} のすべての対角成分に対して平方根をとった行列を \mathbf{W}' と表すと、(2-4-2-21)式は以下のように変形することができる。

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\cong \mathbf{U}\mathbf{W}\mathbf{U}^T \\ &= \mathbf{U}\mathbf{W}'\mathbf{W}'\mathbf{U}^T \\ &= (\mathbf{U}\mathbf{W}')(\mathbf{W}'\mathbf{U}^T) \\ &= (\mathbf{U}\mathbf{W}')(\mathbf{U}\mathbf{W}')^T = \mathbf{Q}\mathbf{Q}^T \end{aligned} \quad (2-4-2-22)$$

ただし、

$$\mathbf{Q} = \mathbf{U}\mathbf{W}' \quad (2-4-2-23)$$

特異値分解では、対角行列 \mathbf{W} の要素が非負であることからどのような分散共分散行列を与えたとしても、安定的に(2-4-2-22)式の分解を行うことができる。そこで、本研究では多変量正規乱数を発生させるために特異値分解を用いることとした。

以上より、(2-4-2-2)式および(2-4-2-22)式を利用することで、任意の分散共分散行列に対して多変量正規乱数を生成する事が可能である。

2.4.3 理論的考察

2.4.2 項では、コレスキー分解と特異値分解を用いた多変量正規乱数の発生方法について説明した。本節では、具体的な行列に対してこれらの手法を適用することを考え、それらの幾何学的イメージについて説明する。

ここで、例として次の相関係数が 0.8 の相関行列 \mathbf{A} を考える¹⁵。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0.8 \\ 0.8 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-4-3-1)$$

この行列 \mathbf{A} をコレスキー分解及び特異値分解により分解した下三角行列 \mathbf{L} および分解行列 \mathbf{Q} は以下ようになる。

$$\text{コレスキー分解: } \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0.8 & 0.6 \end{pmatrix} \quad (2-4-3-2)$$

$$\text{特異値分解: } \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 9.49\text{E}-01 & -3.16\text{E}-01 \\ 9.49\text{E}-01 & 3.16\text{E}-01 \end{pmatrix} \quad (2-4-3-3)$$

これらの行列を(2-4-2-2)式に代入することを考える。

$$\mathbf{x} = \mathbf{Cz} + \boldsymbol{\mu} \quad (2-4-2-2)(\text{再掲})$$

ただし、(2-4-2-2)式中の行列 \mathbf{C} に対して、 $\mathbf{C} = \mathbf{L}$ を代入した場合にはコレスキー分解を利用した多変量正規乱数が得られ、 $\mathbf{C} = \mathbf{Q}$ を代入した場合には特異値分解を利用した多変量正規乱数が得られる。

[コレスキー分解]

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0.8 & 0.6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 \\ 0.8z_1 + 0.6z_2 \end{pmatrix} \quad (2-4-3-4)$$

これにより定められる乱数 x_1 及び x_2 のイメージを以下に示す。

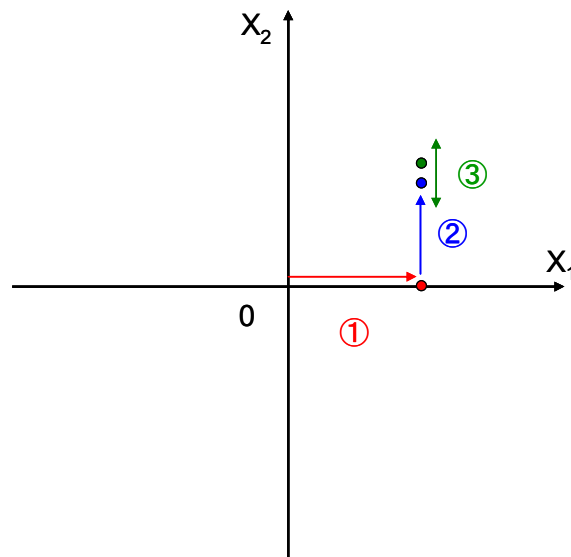


Fig. 2-4-3-1 コレスキー法のイメージ

① 正規乱数 z_1 により、 x_1 の変位を定める。

¹⁵ ここでは簡単のため、相関行列を例に挙げられるが、共分散行列も同様の取り扱いが可能である。

② x_1 が正の値として定まったことから、正の相関を持つ x_2 に対しても正の効果が生じる。
 ③②を考慮した点において、 z_2 に起因するばらつきが発生する。なお、 z_2 の係数0.6は元々の x_2 の分散を1として与えたことから、元の分散を保存するように決定される。
 コレスキー法では、上記のようなイメージで2変量の正規乱数が発生させられる。

[特異値分解]

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.49E-01 & -3.16E-01 \\ 9.49E-01 & 3.16E-01 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix} \quad (2-4-3-5)$$

特異値分解による相関乱数の発生イメージはコレスキー法よりも煩雑であるため、幾つかの相関係数に対して分解を試み、以下の様な分解行列を得た。

$$\text{相関係数}-0.8 \text{の時} : \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 9.49E-01 & 3.16E-01 \\ -9.49E-01 & 3.16E-01 \end{pmatrix} \quad (2-4-3-6)$$

$$\text{相関係数}0 \text{の時} : \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2-4-3-7)$$

$$\text{相関係数}0.2 \text{の時} : \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 7.75E-01 & -6.32E-01 \\ 7.75E-01 & 6.32E-01 \end{pmatrix} \quad (2-4-3-8)$$

$$\text{相関係数}-0.2 \text{の時} : \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 7.75E-01 & 6.32E-01 \\ -7.75E-01 & 6.32E-01 \end{pmatrix} \quad (2-4-3-9)$$

以上から、特異値分解により得られる行列 \mathbf{Q} の特長として以下の点に分かる。

- ①1列目の列ベクトルのノルムの方が2列目の列ベクトルのノルムより大きい。
- ②相関が小さい時、1列目の列ベクトルのノルムと2列目の列ベクトルのノルムの差が小さくなる。
- ③正の相関があるときは1行2列目の要素が負
- ④負の相関があるときは2行1列目の要素が負

これらの特長を考慮すると、「相関の強い相関乱数の分布の決定において、乱数 z_1 の影響が大きい。」ということが考えられる。すなわち、正の強い相関を持つとき((2-4-3-5)式)、 x_1 と x_2 がいずれも z_1 の影響を強く受け同じ符号の方向に分布しやすい。一方で、負の強い相関を持つとき((2-4-3-6)式)、 x_1 と x_2 が z_1 の影響を相反する方向に強く受け、異なる符号の方向に分布しやすい。結局、1列目の列ベクトルが相関関係を支配し、2列目の列ベクトルが無相関なばらつきを支配しているように考えられる。そこで、特異値分解法のイメージは以下のようになる。

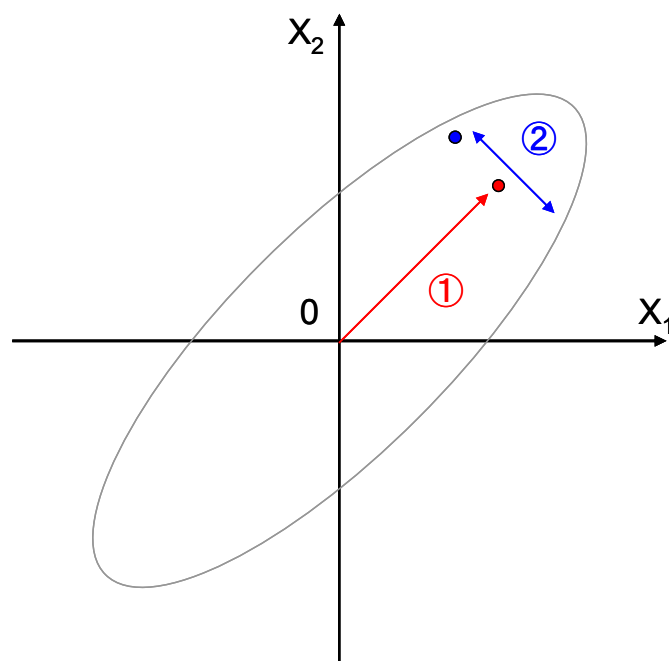


Fig. 2-4-3-2 特異値分解法のイメージ

①1列目のベクトルによる相関度の強さに支配される変換。相関が強い時のほうがこのベクトルが長くなる。

②①により行われた変換後の点で、ばらつきが発生する。なお、この時の2列目のベクトルの長さは、1列目の列ベクトルが長いほど短くなり、元の分散を保存する。

これに関して、線形代数の観点から考察する。特異値分解においては最も特異値の大きい、すなわち、行列の特性を最もよく表すベクトルに対して基底を作り、次に、2番目の特異値に対応し、第一の基底と直交関係にある基底を作る。また、これらの直交基底の大きさは行列 \mathbf{U} が直交行列であることから特異値の大きさにより定められる。従って、(2-4-3-5)式においては、「まず、 z_1 が第一の基底上を1番目の特異値の大きさにより増幅されて定まり、次に、 z_1 がこれと直行する基底上を2番目の特異値の大きさにより増幅されて定まる。」と考えることができる。

2.5 コードの開発

本研究では、2.3節で説明した断面積調整法および2.4節で説明したランダムサンプリング法を適用した断面積調整コードを開発した。本節では開発コードについて説明を行う。

詳しくは後述するが、本研究で開発したコードはランダムサンプリングコード、統計処理コード、感度解析コード、断面積調整コードの全4コードにより構成される。そのうち、統計処理コードおよび断面積調整コードは前述の計算理論に基づき集合体均質化断面積の統計処理および断面積調整を行う。一方、ランダムサンプリングコード並びに感度解析コードにおいては、様々な制約条件が加わるためにコード開発上近似的な取り扱いを行った部分がある。そこで、本節ではそれらの近似的取り扱いについても説明する。そこで、本節では2.5.1項においてコードの全体概要、2.5.2項においてランダムサンプリングコード、2.5.3項において感度解析コードについて説明する。なお、本説で説明する各コードにおい

て線形代数ライブラリ EIGEN[16]を利用し、ランダムサンプリングコードにおいて Mersenne Twister[17]を利用したことをここに明記する。

2.5.1 全体概要

本項では、本研究で開発したランダムサンプリングに基づく断面積調整コードの全体概要について説明する。開発コードの全体的な計算手順を Fig. 2-5-1-1 に示す。

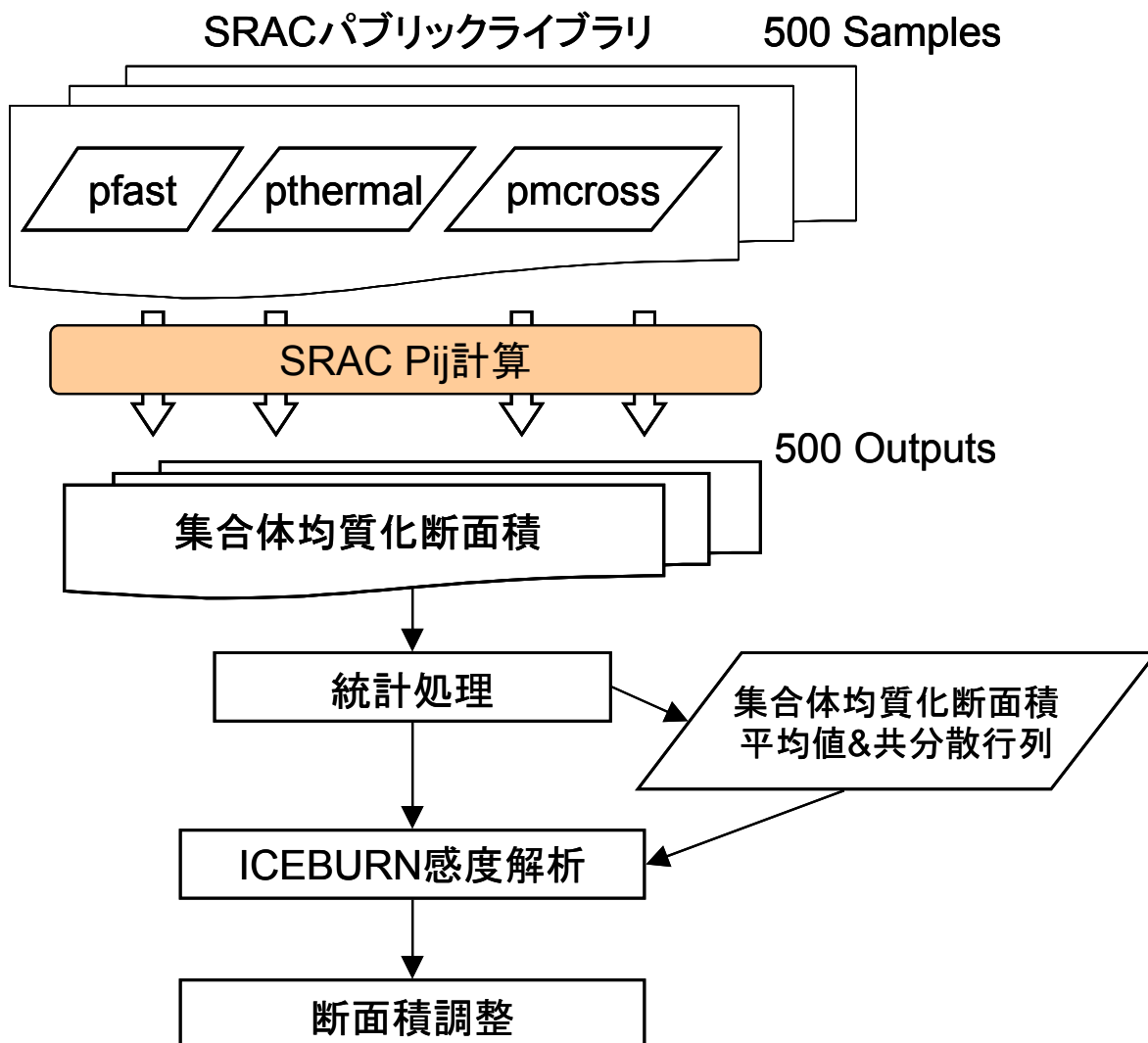


Fig. 2-5-1-1 ランダムサンプリングに基づく断面積調整コードの全体概要

開発コードではまず、SRAC Public Library に格納されている無限希釈断面積に対して開発したランダムサンプリングコードを利用し、500 個のサンプル断面積セットを生成する¹⁶。続いて、得られた 500 個のサンプル断面積セットそれぞれを利用して、格子燃焼計算を行い 500 個の集合体均質化断面積を生成する。次に、500 個の集合体均質化断面積に対して統計処理を行うことで、集合体均質化断面積の共分散と平均値を評価する。その後、名古屋大学により開発された炉心燃焼計算コード ICEBURN において forward 法(直接法)により着目

¹⁶ 適切なサンプル数の設定に関する検討は本研究では実施していないが、先行研究[18]を踏襲した。

炉心特性に対する集合体均質化断面積の燃焼感度解析を実施し、この結果を利用して集合体均質化断面積に対して断面積調整を実施した。

本研究においては、格子計算として衝突確率法に基づく SRAC Pij を、炉心燃焼計算においては拡散計算に基づく ICEBURN を利用した。一方で、格子計算として Characteristics 法に基づく CASMO[19]、炉心燃焼計算としてノード法に基づくや SIMULATE[20]などのより高次の計算コードが存在する。以下では、本研究において SRAC および ICEBURN を利用した理由について説明する。

① SRAC : Public Library の利便性

SRAC の Public Library のフォーマットが公開されており、また、SRAC2006 には TXT 形式(PDS 形式)の Public Library を PDS 形式(TXT 形式)に変換するためのユーティリティ(TXTTOPDS および PDSTOTXT)が付属している。このような観点から、ランダムサンプリングが容易であると考え採用した。

② ICEBURN : 集合体均質化巨視的断面積を TXT 形式で入力可能である点

SIMULATE などの計算コードでは摂動計算などを実施することを考慮しておらず、また、集合体均質化巨視的断面積ファイルのフォーマットも公開されていないため、ユーザー側による集合体均質化巨視的断面積の操作は困難である。一方、名古屋大学で開発された ICEBURN では TXT 形式で燃焼度毎の集合体巨視的断面積を入力するため、摂動計算が容易である。

③ SRAC・ICEBURN : 本研究の目的

本研究の目的は、実用的な断面積調整コードの開発ではなく、ランダムサンプリングに基づく断面積調整法の適用性の検討である。故に、適用コードに最新の計算手法を用いることではなく、適用手法の導入の容易さに重点をおいて計算コードの選定を行った。

以上では本研究において SRAC および ICEBURN を利用した理由について説明した。さらに、以下ではそれぞれの計算コードについて簡単に説明する。なお、本研究においては、SRAC2006 を SRAC と呼称する事をここに明記する[14]。

[SRAC の概要]

日本原子力研究所により開発された SRAC は、様々なタイプの原子炉の炉心解析に適用できる核計算コードシステムである。SRAC は主要な核データライブラリ (JENDL-3.3, JENDL-4.0, ENDF/B-VII.0 等) と、中性子輸送及び拡散計算のための統合された 5 つの要素コードを含んでいる。5 つの要素コードとは、16 種類の格子形状に適用できる衝突確率法に基づく PIJ コード、 S_N 法輸送計算コード ANISN(一次元)及び TWOTRAN(二次元)、拡散計算コード TUD(一次元)及び CITATION(多次元)を指す。また、多次元炉心燃焼計算のための補助コード COREBN がシステムに含まれる。

SRAC コードシステムにおいては、核データライブラリは 107 群の多群形式で格納されており、PDS ファイルと呼ばれるバイナリー形式で保存される。このとき、核データのエネ

ルギー群の違いや断面積の違いなどにより PFAST、PTHERMAL 及び PMCROSS の 3 つの Public Library に分割される。SRAC の 5 つの要素コードはこの 3 つの PDS ファイルを読み込み、最終的に少数群巨視的断面積(MACRO)、中性子束分布(FLUX)、詳細群巨視的断面積(MACROWRK)及び実効微視的断面積(MICREF)の 4 つの出力ファイルを PDS ファイルとして生成する。さらに、必要に応じて出力された少数群巨視的断面積を COREBN で読み取り、炉心燃焼計算を行なうことも可能である。ここで、Fig. 2-5-1-2 に SRAC コードシステムにおける入出力の伝達関係を示す。

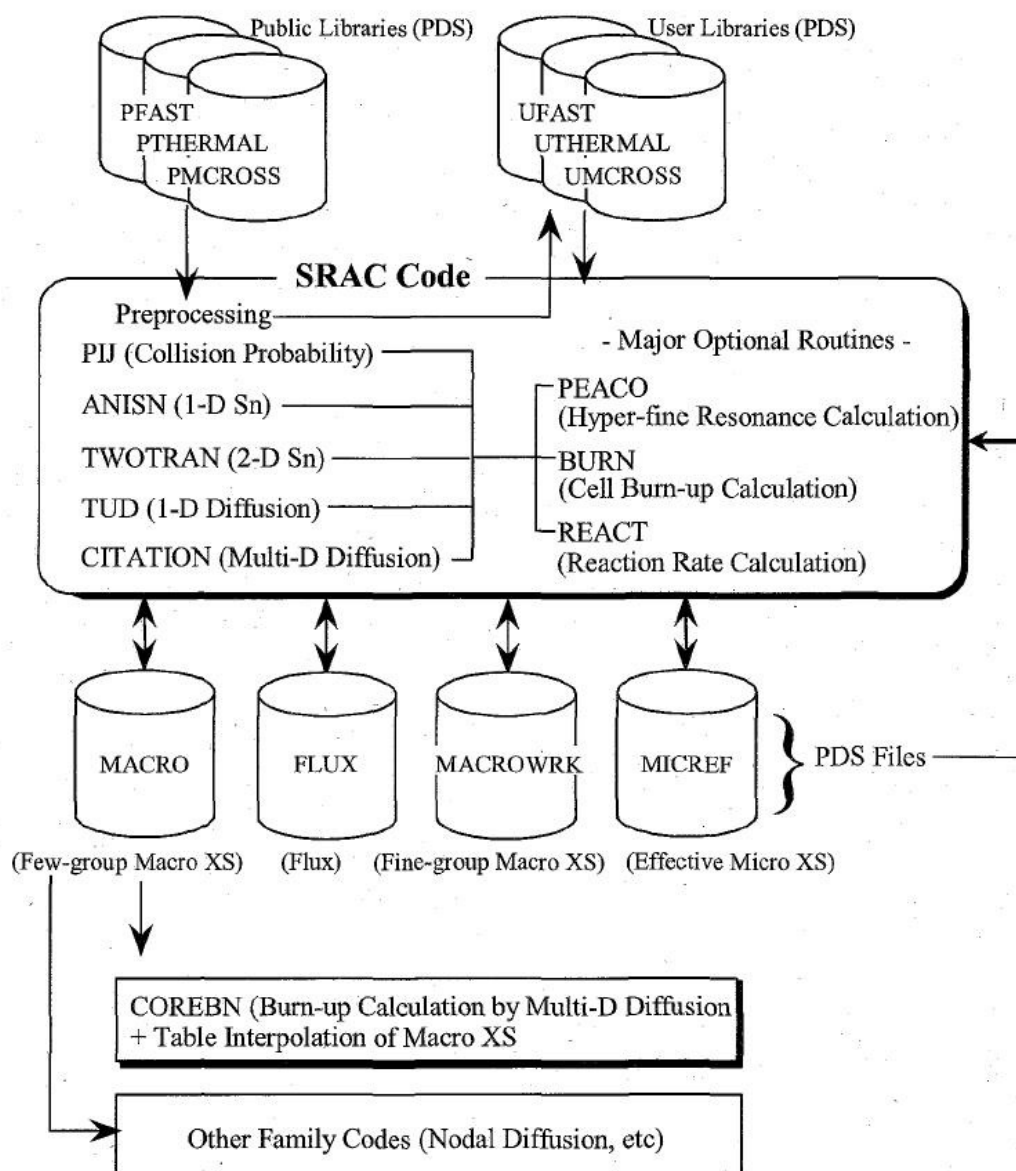


Fig. 2-5-1-2 SRAC コードシステムにおける入出力の伝達関係[14]

3 つの Public Library と 4 つの出力ファイルは特殊なバイナリー形式を利用している。従って、これらのファイル内容のままでは評価することができない。そのため、これらの PDS ファイルを TXT 形式に変換するためのいくつかのユーティリティが SRAC に付属している。この主なものが、Public Library を PDS 形式から TXT 形式に変換する PDSTOTXT、

Public Library を TXT 形式から PDS 形式に変換する TXTTOPDS あるいは Fig. 2-5-1-2 における MACRO を TXT 形式に変換する MACROEDIT 等である。これらを用いることで、PDS ファイルの内容を TXT として読み込むことや変更した核データに基づき格子計算を行なうことが可能となる。しかしながら、PDS 形式の MACRO を TXT 形式に変換するユーティリティは存在するが、TXT 形式の MACRO を PDS 形式に変換するユーティリティは存在しない。従って、炉心燃焼計算に COREBN を利用した際には、集合体均質化少数群巨視的断面積に変更を施すことはできない。すなわち、これは本章で提案した手法を適用することが不可能であることを意味する。そこで、本研究においては格子燃焼計算として SRAC の PIJ コードを利用し、炉心燃焼計算には以下で概説を述べる ICEBURN を利用した。なお、衝突確率法については Appendix D で説明する。

[ICEBURN の概要]

炉心燃焼計算コード ICEBURN は名古屋大学において開発された 2 群拡散計算に基づく炉心燃焼計算コードである。ICEBURN の計算には、入力パラメータとしての集合体均質の拡散係数 D 、吸収断面積 Σ_a 、除去断面積 Σ_r 、全断面積 Σ_t 、生成断面積 $\nu\Sigma_f$ 、核分裂スペクトル χ およびに散乱マトリックス \mathbf{S} ¹⁷が必要であり、さらに、燃焼を考慮する集合体に関しては燃焼度ごとにこれら入力パラメータを入力する必要がある。本研究では、SRAC PIJ コードを利用して計算した集合体均質化断面積を SRAC に付属するユーティリティである MACROEDIT を利用して TXT 形式で取り出し、統計処理や断面積間の関係式に基づく処理を実施した後に、その結果を TXT 形式で ICEBURN に渡すシステムを構築した。ICEBURN では、TXT 形式で入力されるこれらのパラメータに基づき拡散計算に基づく固有値計算を行い、炉内の中性子束分布及びに臨界固有値を評価する。また、この際、実際の原子炉であれば体系が未臨界ならば燃料の燃焼は進まない。しかしながら、本研究では ICEBURN では常に一定の出力で原子炉が運転されているという格子計算と同様な仮定に基づいて運用したため、得られた中性子束分布を利用して各燃料集合体の燃焼ステップあたりの燃焼度を算出する。従って、本研究における ICEBURN を利用した燃焼計算では原子炉の臨界固有値に関わらず燃料の燃焼が進むことをここに明記する。また、ICEBURN の拡散計算で利用する集合体均質化断面積に関して、入力されていない燃焼度の断面積データを利用する際には、その前後の入力された燃焼度の集合体均質化断面積を内挿することでこれを評価する。

¹⁷ なお、 $\mathbf{S} = \begin{pmatrix} \Sigma_{s,1 \rightarrow 1} & \Sigma_{s,1 \rightarrow 2} \\ \Sigma_{s,2 \rightarrow 1} & \Sigma_{s,2 \rightarrow 2} \end{pmatrix}$

2.5.2 ランダムサンプリングコード

本項では、ランダムサンプリングコードについて説明する。本ランダムサンプリングコードにおいては、JENDL-4.0 およびその修正ファイル(JENDL-4.0u[21])の共分散ファイルに基づき、多変量正規分布に従うサンプル断面積セットを生成する。さらに言えば、JENDL-4.0 および JENDL-4.0u に基づき、NJOY により 107 群形式の相対共分散として処理した後に Public Library に格納される無限希釈断面積を利用してランダムサンプリングを実施する。本項においては、その具体的な手法およびコードの仕様について説明する。

2.4 節ではランダムサンプリングの計算理論として、絶対共分散行列を利用した多変量正規乱数の発生方法について説明した。そこで示した手順に従えば、絶対共分散行列に基づき多変量正規乱数を発生させることができる。しかし、実際に微視的他群断面積のランダムサンプリングを行なうためには断面積の絶対共分散行列を求める必要がある。そこで、本研究では、NJOY を用いて JENDL-4.0 で評価される断面積の共分散行列を次式で定義される相対共分散 $RCOV(x, y)$ として 107 群形式へ処理した。

$$RCOV(x, y) = \frac{COV(x, y)}{x \cdot y} \quad (2-5-2-1)$$

なお、相対共分散は(2-5-2-1)式の定義より、絶対共分散 $COV(x, y)$ をその評価値(平均値)の大きさと規格化しているものであると分かる。SRAC Public Library の 107 群断面積で用いられるエネルギー群構造で(2-5-2-1)式で定義される相対共分散を計算した後、相対共分散に 107 群断面積を乗じることで絶対共分散を得る。すなわち、

$$x_{PL} \cdot RCOV(x_{ND}, y_{ND}) \cdot y_{PL} = x_{PL} \cdot \frac{COV(x_{ND}, y_{ND})}{x_{ND} \cdot y_{ND}} \cdot y_{PL} \approx COV(x_{PL}, y_{PL}) \quad (2-5-2-2)$$

により Public Library の絶対共分散を生成した。なお、(2-5-2-2)式において添字 PL は Public Library の評価値を意味し、添字 ND は核データライブラリ(Nuclear Data Library)の評価値を意味する。また、(2-5-2-2)式では、

$$\begin{aligned} x_{PL} &\approx x_{ND} \\ y_{PL} &\approx y_{ND} \end{aligned} \quad (2-5-2-3)$$

とした。また、本来、すべての核種・反応に対してランダムサンプリングを行うべきであるが、JENDL-4.0 および JENDL-4.0u において共分散データが与えられている核種は下表に示される 91 核種のみである。従って、共分散を与えられていない核種はランダムサンプリングの対象外とした。

Table 2-5-2-1 JENDL-4.0 で共分散が与えられる核種

B-10	B-11	N-15	O-16	Na23	Ti-48	Mn-55	Fe-56
Co-59	Ni-58	Ni-60	Zr-90	Ac-225	Ac-226	Ac-227	Th-227
Th-228	Th-229	Th-230	Th-231	Th-232	Th-233	Th-234	Pa-229
Pa-230	Pa-231	Pa-232	Pa-233	U-230	U-231	U-232	U-233
U-234	U-235	U-236	U-237	U-238	Np-234	Np-235	Np-236
Np-237	Np-238	Np-239	Pu-236	Pu-237	Pu-238	Pu-239	Pu-240
Pu-241	Pu-242	Pu-244	Pu-246	Am-240	Am-241	Am-242	Am-242m
Am-243	Am-244	Am-244m	Cm-240	Cm-241	Cm-242	Cm-243	Cm-244
Cm-245	Cm-246	Cm-247	Cm-248	Cm-249	Cm-250	Bk-245	Bk-246
Bk-247	Bk-248	Bk-249	Bk-250	Cf-246	Cf-248	Cf-249	Cf-250
Cf-251	Cf-252	Cf-253	Cf-254	Es-251	Es-252	Es-253	Es-254
Es-254m	Es-255	Fm-255					

また、Es や Cm などの一部のマイナーアクチノイド核種において、その断面積の不確かさの大きさからサンプル断面積が負の値となる可能性がある。例として、Es の捕獲反応の断面積とその不確かさを下図に示す。

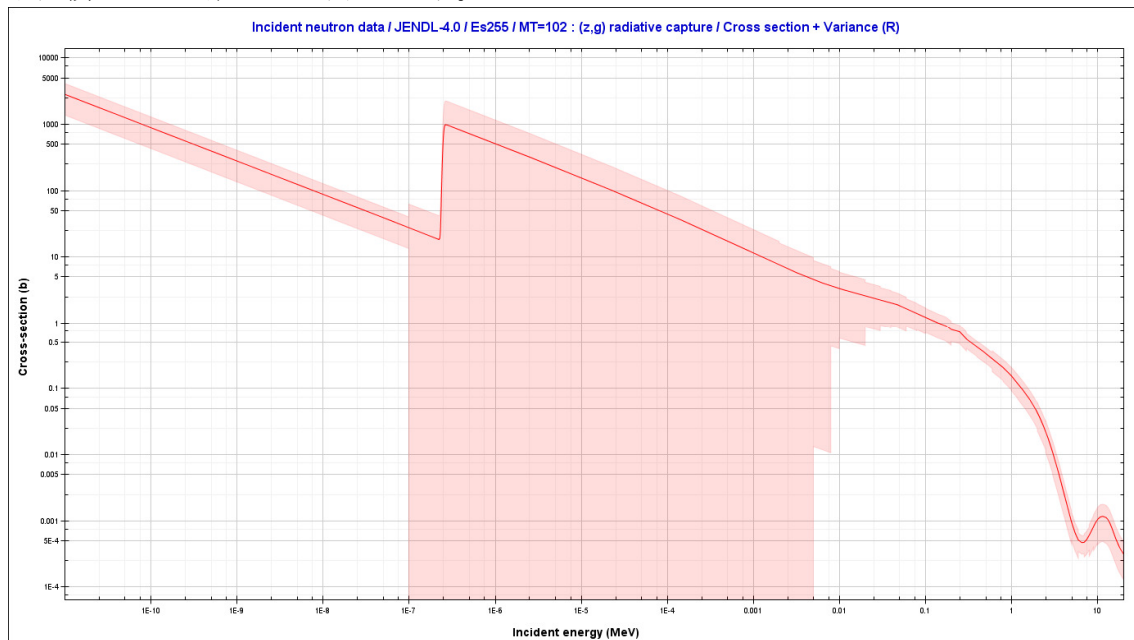


Fig. 2-5-2-1 Es255 の捕獲断面積とその標準偏差

Figure 2-5-2-1 から、JENDL-4.0 の共分散に基づきランダムサンプリングを行うとき、サンプル断面積が負の値をとる可能性があることが分かる。しかし、断面積が負の値をとることは物理的な矛盾を含んでおり、負の断面積を核計算コードに入力した場合には計算が破綻するため、この補正が必要となる。この補正方法には幾つかの方法が考えられるが、本研究では断面積評価値の平均値を保存するように補正する方法を適用した。具体的には、 i 番目のランダムサンプリングで負の断面積が得られた場合、負値の断面積には正值の極めて小さい断面積を代入し、 $i+1$ 番目のサンプル断面積から i 番目のサンプルに施した調整量だけ引くという操作が行われる。すなわち、下図で表される操作が行われる。

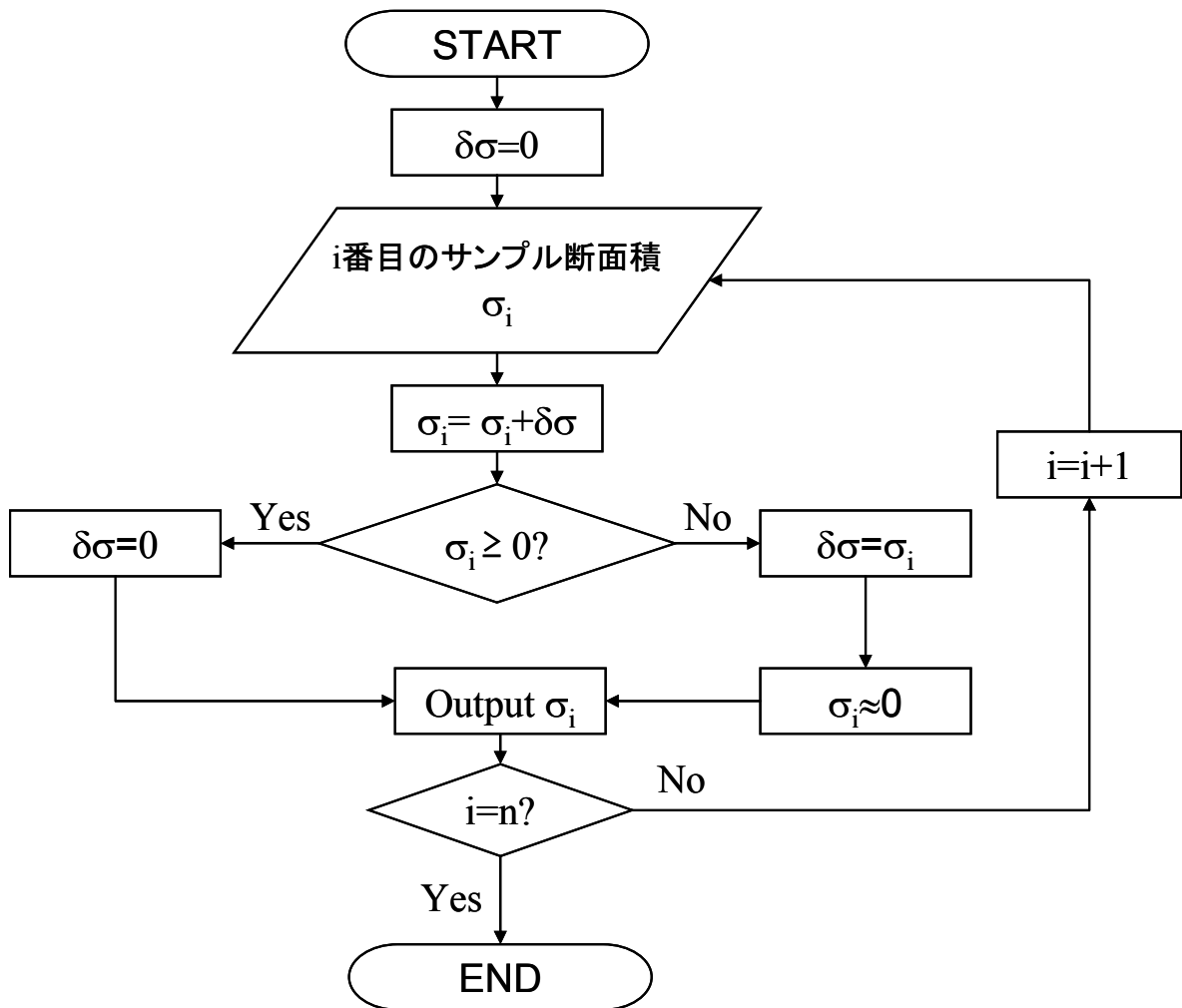


Fig. 2-5-2-2 負の断面積補正のフロー

本補正法では、最後の(n番目の)サンプルが負となっていた場合には厳密に平均値を保存することができないが、多くのサンプルを用意した場合には平均値をほぼ正確に保存することができる。ただし、本補正法では負数の断面積を0に極めて近い正值とし、次のサンプルから調整分を引くことから、サンプル断面積の分散が元の分散よりも過小評価されることは避けられない。しかしながら、この点に関しては、Fig. 2-5-2-1で非常に大きな断面積誤差が見積もられていることから、断面積評価側の課題であると思われる。

また、ランダムサンプリングの対象となる反応断面積を、捕獲断面積、核分裂断面積、散乱断面積、1核分裂あたりの平均発生中性子数(ν 値)、核分裂スペクトル(χ 値)の5種の断面積とした。なお、535×535の共分散行列¹⁸を利用することで、共分散データが与えられているものについては反応間の相関関係を考慮することが可能である。その一方で、断面積の核種間の相関はJENDL-4.0においては評価されていないため、考慮することはできない。また、散乱断面積の不確かさは散乱断面積の総和 $\Sigma_{s,total,g}$ ¹⁹に対して評価されているた

¹⁸ 107(エネルギー群)×5(反応の種類)=535

¹⁹ $\sigma_{s,total,g} = \sum_{g'} \sigma_{s,g \rightarrow g'}$

め、散乱マトリックスの各要素に対して以下の演算を行うことで散乱マトリックスのサンプルを生成した。

$$\sigma_{s,g \rightarrow g'}^{SAMPLE} = \frac{\sigma_{s,total,g}^{SAMPLE}}{\sigma_{s,total,g}^{NOMINAL}} \sigma_{s,g \rightarrow g'}^{NOMINAL} \quad (2-5-2-4)$$

ここで、上添字 SAMPLE はサンプル断面積を意味し、上添字 NOMINAL は断面積のノミナル値を意味する。一方、サンプルの χ 値に対しては、下式により規格化を行った。

$$\sum_g \chi_g^{SAMPLE} = 1 \quad (2-5-2-5)$$

また、SRAC Public Library において、無限希釈断面積は高速エネルギー(1~74 群)に対して pfast に、熱エネルギー(59~107 群)に対して pthml に格納される。この時、pthml は物質の熱運動を考慮して、12 点以下の温度点に対して評価され、格納されている。従って、温度点の数だけ断面積サンプルが必要となる。しかし、断面積の温度間の相関は極めて強い正の相関関係にあることが想定される。そこで、本研究では代表的な温度でのみランダムサンプリングを行い、その温度点での摂動量をノミナル値の大きさを規格化することで代表温度以外の温度点のサンプル断面積を生成する。すなわち、

$$\sigma_t^{SAMPLE} = \sigma_t^{NOMINAL} + \Delta\sigma_T \times \frac{\sigma_t^{NOMINAL}}{\sigma_T^{NOMINAL}} \quad (2-5-2-6)$$

により、代表温度以外の温度点のサンプル断面積を生成する。なお、ここで下添字 t は着目する温度点の断面積である事を表し、下添字 T は基準温度点の断面積であることを表す。これは温度点間の相関係数が 1 であることと等価となる。

本研究で開発したランダムサンプリングコードは、本項で説明した仮定を含んでいる事に留意が必要である。

2.5.3 感度解析コード

本項では、ICEBURN の計算結果を利用した感度解析コードに関して説明する。この感度解析では、Forward 法(直接法)に基づき炉心特性値(実効増倍率、相対出力、etc.)に対する断面積の感度解析を実施する。この際、各データの標準偏差(1 σ)を摂動量として与えることとした。なお、断面積調整を実施する際に絶対感度係数が必要となるため、下式で定義される絶対感度係数 S を求める。

$$S = \delta R / \delta \Sigma \quad (2-5-3-1)$$

(5-2-3-1)式から感度係数はある入力パラメータとある炉心特性値の変化の割合として定義されている事がわかる。実際の炉心解析においては、入力パラメータおよび出力炉心パラメータは複数存在するため、(5-2-3-1)式を次式のように行列形式に拡張したものを利用する。

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \delta R_1 / \delta \Sigma_1 & \delta R_1 / \delta \Sigma_2 & \cdots & \delta R_1 / \delta \Sigma_N \\ \delta R_2 / \delta \Sigma_1 & \ddots & & \\ \vdots & & & \vdots \\ \delta R_M / \delta \Sigma_1 & & \cdots & \delta R_M / \delta \Sigma_N \end{pmatrix} \quad (5-2-3-2)$$

ここで、添字 N は入力パラメータの数、添字 M は出力パラメータの数を表す。

また、(5-2-3-1)式で定義される感度係数を数値計算に求める場合、差分式を利用する方法が一般的である。また、差分法には、前進差分、中心差分、後退差分の 3 種類が存在し、このうち次式で表される中心差分に基づき感度係数を求める方法が近似精度の観点から最も優れていると言える。

$$S = \frac{\delta R}{\delta \Sigma} = \frac{R(\Sigma + \Delta \Sigma) - R(\Sigma - \Delta \Sigma)}{2 \Delta \Sigma} \quad (5-2-3-3)$$

なお、ここで $R(\Sigma)$ は着目断面積 Σ に基づき計算された炉心特性値、 $\Delta \Sigma$ は断面積摂動量を意味する。しかし、中心差分に基づき感度係数を計算する場合、前進差分または後退差分に基づく場合に比べ 2 倍の摂動計算が必要となる。そこで、本研究では感度係数を計算するために前進差分に基づく方法を適用した。すなわち、次式により感度係数を計算することとした。

$$S = \frac{\delta R}{\delta \Sigma} = \frac{R(\Sigma + \Delta \Sigma) - R(\Sigma)}{\Delta \Sigma} \quad (5-2-3-4)$$

また、ICEBURN では 2 群拡散計算を行うが、その断面積の入力値として、拡散係数 D 、吸収断面積 Σ_a 、除去断面積 Σ_r 、全断面積 Σ_t 、生成断面積 $\nu \Sigma_f$ 、核分裂スペクトル χ およびに散乱マトリックス \mathbf{S} を利用する。また、これらの断面積は(5-2-3-5)式から(5-2-3-8)式に示される関係式を満たす。

$$D_g = \frac{1}{3 \Sigma_{t,g}} \quad (5-2-3-5)$$

$$\Sigma_{r,g} = \Sigma_{t,g} - \Sigma_{s,g \rightarrow g} \quad (5-2-3-6)$$

$$\Sigma_{t,g} = \Sigma_a + \sum_{g'} \Sigma_{g,g \rightarrow g'} \quad (5-2-3-7)$$

$$\sum_g \chi_g = 1 \quad (5-2-3-8)$$

なお、ここで添字 g はエネルギー群を表す。さらに、捕獲断面積 Σ_c を考えれば、(5-2-3-9) 式の関係式も満たされる必要がある。

$$\Sigma_{a,g} = \Sigma_{c,g} + \Sigma_{f,g} \quad (5-2-3-9)$$

以上の関係式より、ICEBURN の入力となる断面積は捕獲断面積 Σ_c 、核分裂断面積 Σ_f 、核分裂あたりの平均発生中性子数 ν 、核分裂スペクトル χ およびに散乱マトリックス \mathbf{S} を用いて表現することが可能である。そこで、SRAC 計算により得られる集合体均質化断面積からこれら 5 種類の断面積を利用して ICEBURN の入力となる断面積を計算することとした。開発コードにおける感度解析においても(5-2-3-5)式から(5-2-3-9)式の関係式を満たすように上記の 5 種類の断面積を摂動させる。具体的には、摂動ごとに断面積を(5-2-3-5)式から(5-2-3-9)式の関係式により再計算することで、これらの関係式を満たすことを担保する。

また、本研究で適用した感度解析手法は forward 法に基づくため、入力パラメータの数だけ摂動計算が必要となる。本研究で使用している ICEBURN では熱水力のフィードバックを考慮しておらず、計算体系も非常に簡単な体系を設定していることから燃焼感度解析に必要な計算時間は現実的なものとなっているが、実機解析を考えた場合には、GPT Free[22]や Ep GPT[23]などの高効率な感度解析手法を使用する必要があるものと思われる。

2.6 適用計算

2.6.1 概説

本研究では、提案手法の軽水炉炉心解析への適用性を評価するため、簡略化した軽水炉炉心解析モデルにおいて提案手法の適用計算を実施した。本節においては、実施した適用計算について説明する。なお、2.6.2 項で当該適用計算の実施方法について、2.6.3 項でその計算体系および計算条件について説明する。さらに、2.6.4 項で適用計算の結果について説明し、その結果について考察する。

2.6.2 方法

本研究は軽水炉炉心解析に断面積調整法を体系的に導入するための方策を開発し、その適用性を評価することを目的とした研究である。故に、問題を簡略化しその適用性を合理的に評価するため、適用計算は実際の炉心解析を簡略化したモデルにおいて行うこととした。具体的には、軽水炉炉心解析の炉心燃焼計算においては、原子炉内を流動する減速材の熱水力的な効果や制御棒の操作を考慮し、その非線形なフィードバック効果を解析モデルに組み込む必要がある。しかしながら、本研究においてはそれらのフィードバック効果を見捨て、燃料の燃焼に伴うフィードバック、すなわち燃焼度フィードバックのみを考慮することとした。

断面積調整法では、核断面積の調整に際して臨界実験により得られた実験測定値と臨界実験解析値を利用する。しかしながら、本研究においては実際の炉心解析で用いられるモデルに比べ大幅な簡易化を施した解析モデル、すなわち熱水力計算等を排除した解析モデル

ルを用いている。故に、この簡易モデルを用いて正確に実機プラントでの実験解析を行うことは困難である²⁰。そこで、本研究の適用計算においてはランダムサンプリングにより得られたある多群微視的断面積のセットに基づき計算された炉心特性値を仮想的な実験値として、断面積調整のターゲットに利用することとした。この適用計算フローを Fig. 2-6-2-1 に示す。

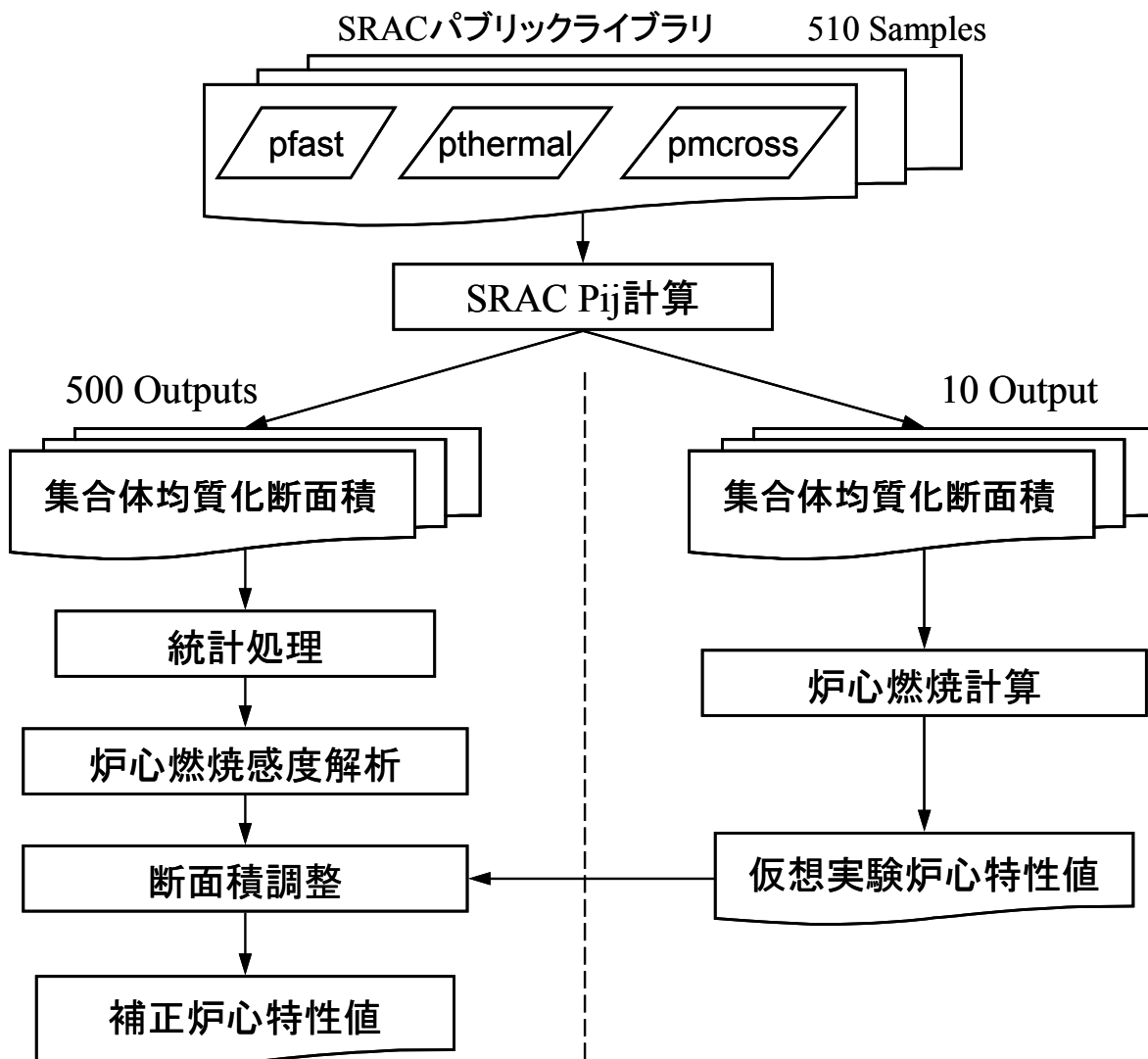


Fig. 2-6-2-1 適用計算のフロー

Figure 2-6-2-1 に従って断面積調整法の適用計算を行う場合、簡略化された解析モデルにおいても断面積調整の適用計算が可能になる。また、実験を行わないために実験誤差を無視することができる。さらに、仮想的な実験値を求める際に解析モデルと同じ計算コード・計算条件を用いることで解析モデル誤差も無視できることとなる。これらの誤差を無視することで、断面積調整による効果がより顕著に現れることとなると考えられる。また、本研究においては、仮想的な実験値を求めるために乱数を変化させることで10ケースの仮想

²⁰ 熱水力計算等を考慮すれば、実機プラントの運転データに基づき断面積調整法を適用することが可能である。

実験炉心特性値を求め、それらに対してそれぞれ独立に断面積調整法を適用した。適用計算においては、これらの独立した計算についてそれぞれ簡単に説明する。

断面積調整法では臨界実験炉心において予測炉心特性値と実験測定値を最小化するように断面積の調整を行う。従って、断面積調整法の適用性を正しく評価するためには、断面積調整前後の臨界実験炉心の炉心特性値予測精度ではなく、断面積調整前後の設計炉心の炉心特性値予測精度に着目すべきである。故に、本適用計算においては臨界実験炉心と設計炉心の 2 つの炉心体系を利用し、臨界実験炉心において実施された断面積調整の結果を用いた場合の設計炉心の炉心特性値予測精度の変化に着目した。なお、これら計算体系については次項で説明する。

2.6.3 計算体系および計算条件

本項では、適用計算の計算体系と計算条件について説明する。

[計算体系]

本適用計算の計算体系として、商用軽水炉であり、かつ、その設計情報が明らかにされているという観点から Peach Bottom 原子力発電所 2 号機(PB-2)を利用することとした[24]。PB-2 は原子炉熱出力 3293MWt、炉心流量 $46.5 \times 10^3 \text{t/hr}$ の GE 社製の BWR プラント(BWR/4)である。これは、プラントサイズとしては国内 1100MWe クラスの BWR/5 と同規模であり、大型の炉心と言える。

PB-2 では、Table 2-6-3-1 に設計情報を示す 6 種類の燃料集合体が用いられる。

Table 2-6-3-1 燃料集合体の設計情報[24]

	Initial load		Reload	Reload	LTA special	
Assembly type	1	2	3	4	5	6
No. of assemblies, initial core	168	263	333	0	0	0
No. of assemblies, Cycle 2	0	261	315	68	116	4
Geometry	7×7	7×7	7×7	8×8	8×8	8×8
Assembly pitch, mm	152.4	152.4	152.4	152.4	152.4	152.4
Fuel rod pitch, mm	18.75	18.75	18.75	16.23	16.23	16.23
Fuel rods per assembly	49	49	49	63	63	62
Water rods per assembly	0	0	0	1	1	2
Burnable poison positions	0	4	5	5	5	5
No. of spacer grids	7	7	7	7	7	7
Inconel per grid, kg	0.225	0.225	0.225	0.225	0.225	0.225
Zr-4 per grid, kg	1.183	1.183	1.183	1.353	1.353	1.353
Spacer width, cm	4.128	4.128	4.128	4.128	4.128	4.128
Assembly average fuel composition:						
Gd ₂ O ₃ , g	0	441	547	490	328	313
UO ₂ , kg	222.44	212.21	212.06	207.78	208.0	207.14
Total fuel, kg	222.44	212.65	212.61	208.27	208.33	207.45

このうち、燃料集合体タイプ 1~3 は 7×7 の初装荷燃料である。また、燃料集合体タイプ 1 には可燃性毒物である Gd が含まれていない。本研究における適用計算では、簡略化のためすべての燃料集合体を燃料集合体タイプ 2 と同様な設計であると仮定した。また、燃料集合体タイプ 2 の詳細な設計情報を Fig. 2-6-3-1 および Fig. 2-6-3-2 に示す。

Rod type	Number of rods	Pellet density		Stack density (g/cm ³)	Gd ₂ O ₃ (g)	UO ₂ (g)	Stack length (cm)
		UO ₂ (g/cm ³)	UO ₂ +Gd ₂ O ₃ (g/cm ³)				
1	25	10.42	—	10.32	0	4 352	365.76
1s	1	10.42	—	10.32	0	3 935	330.20
2	12	10.42	—	10.32	0	4 352	365.76
3	6	10.42	—	10.32	0	4 352	365.76
4	1	10.42	—	10.32	0	4 352	365.76
5A	3	—	10.29	10.19	129	4 171	365.76
6B	1	10.42	10.29	10.27	54	4 277	365.76

Pellet outer diameter = 1.21158 cm.

Cladding = Zircaloy-2, 1.43002 cm outer diameter × .09398 cm wall thickness, all rods.

Gas plenum length = 40.132 cm.

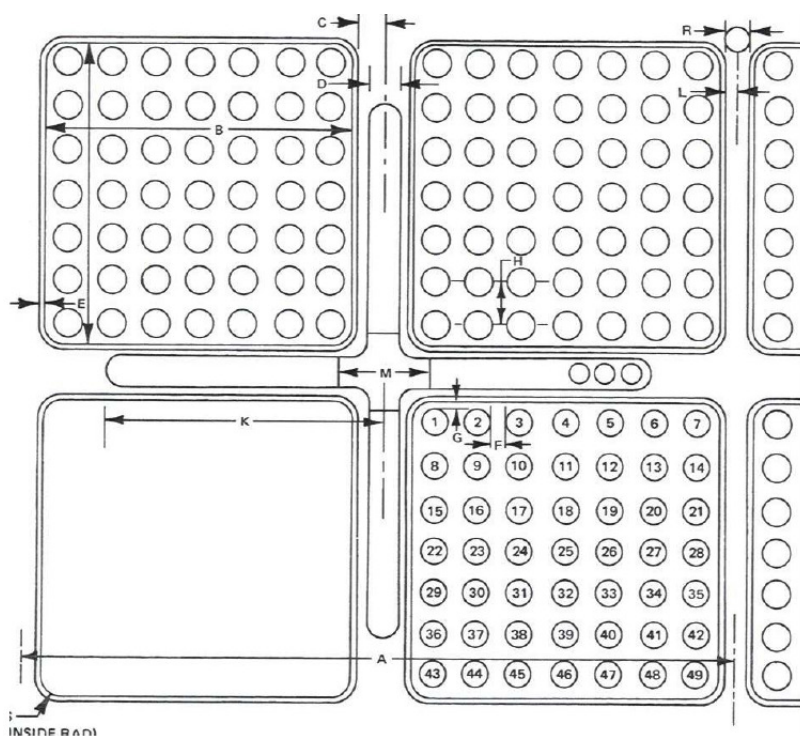
Assembly design for Type 2 initial fuel

Rod type	²³⁵ U (wt.%)	Gd ₂ O ₃ (wt.%)	No. of rods
1	2.93	0	26
2	1.94	0	12
3	1.69	0	6
4	1.33	0	1
5A	2.93	3.0	3
6B	2.93	3.0	1

WIDE-WIDE CORNER

4	3	3	2	2	2	3
3	2	1	1	1	1	2
3	1	5A	1	1	5A	1
2	1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	6B	1	1
2	1	5A	1	1	1	2
3	2	1	1	1	2	2

Fig. 2-6-3-1 燃料集合体タイプ 2 の詳細な燃料配置および組成[24]



Dim. ID	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
Dim. (cm)	30.48	13.40612	0.9525		0.2032	0.4445	0.36449	1.87452		
Dim. ID	K	L	M	N	O	P	Q	R	S	
Dim. (cm)		0.47498							0.9652	

Fig. 2-6-3-2 7×7燃料集合体の幾何形状[24]

なお、本研究においては SRAC Pij 計算を多くのサンプル断面積に対して行う必要があるため、一回あたりの格子燃焼計算の計算時間を十分に短くする必要がある。Appendix D において述べたように、Pij 計算(衝突確率法の計算)では計算時間が体系の領域数の 2 乗に比例して増大することとなる。そこで、計算時間を削減するためには、可能な限り計算体系の領域数を減らす必要がある。そこで、本適用計算においても計算体系を簡易化し、計算時間の低減を図った。具体的には、SRAC PIJ コードの固有値計算モードでは領域の設定に関する入力として Sub-Region・R-Region・X-Region の 3 つの領域設定があり、それぞれに関する説明を以下に示す。

1. Sub-Region : 衝突確率法の計算において幾何形状モデルを記述するために、便宜上用いられる領域分割の概念であり、中性子束計算の精度に直接影響を及ぼさない。
2. R-Region : いくつかの Sub-Region の結合により構成される領域。固有値計算モードにおいては、R-Region をその中性子を一定とする Flat Flux Region として使用する。
3. X-Region : 格子燃焼計算において均質化断面積を計算する際に、均質化する領域範囲を指定するための領域。

以上より、衝突確率法の計算に必要となる計算時間を低減するためには、R-Region の数を削減する必要がある。このため、本適用計算の計算体系では同一組成の Sub-Region に対して、いくつかの隣接する領域内で中性子束が一定になると仮定し、いくつかの Sub-Region

を組み合わせたものを R-Region として設定した。また、特に大きいと想定される近似としては、各燃料棒の周りの減速材領域を 1 つの R-Region として設定した点である。この概念図を Fig. 2-6-3-3 に示す。

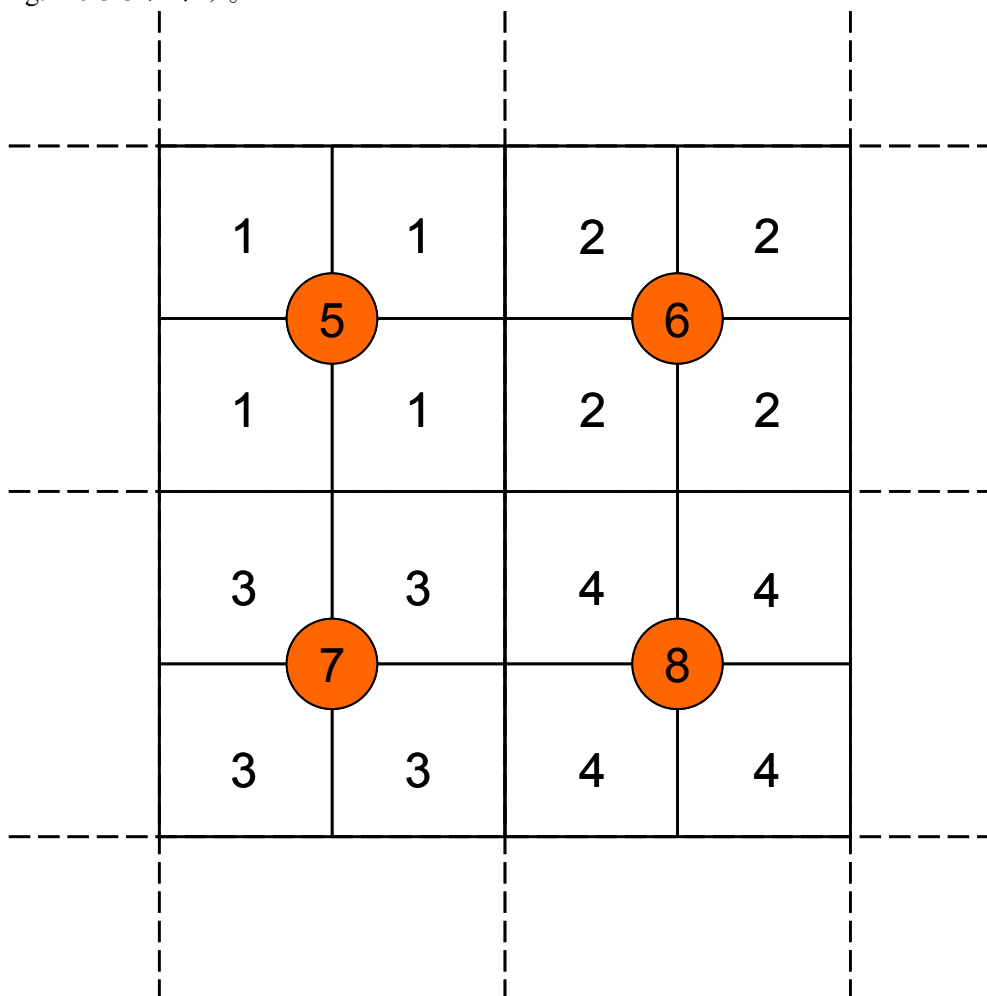


Fig. 2-6-3-3 R-Region の設定による燃料棒周辺の Flat Flux 近似の概念図

なお、Fig. 2-6-3-3 中の数字は R-Region 番号を表し、同一 R-Region 番号の領域は中性子束が一定であるとして取り扱われる。例えば、R-region 1 の領域に注目すると、右下方向と左上方向の中性子束が等しいと仮定されていることがわかるが、物理的に考えると R-Region 8 の燃料棒の影響を受ける右下方向とその影響を受けにくい左上方向の中性子束は等しいとは考えにくく、この観点からこの仮定は大きな近似であると考えられる。なお、本適用計算では同様の計算体系で計算された集合体均質化断面積を用いて評価した炉心特性値を仮想的な実験値として利用しているため、体系の近似的な取り扱いに起因する悪影響はない。また、Appendix H には、本適用計算における制御棒ありの SRAC PIJ コードによる格子燃焼計算の入力ファイルを示す。

ここまで、適用計算における格子燃焼計算の計算体系について説明を行った。次に、炉心燃焼計算の計算体系について説明する。本適用計算では、仮想実験炉心の計算体系として PB-2 の Colorset 体系を利用した[24]。仮想実験炉心の計算体系を Fig. 2-6-3-4 に示す。

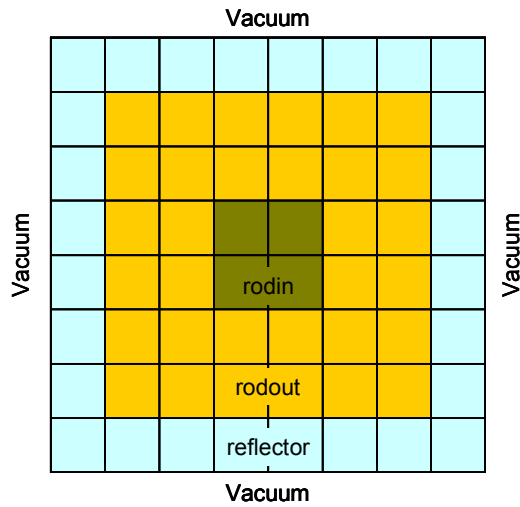


Fig. 2-6-3-4 仮想実験炉心の計算体系

また、設計炉心として、PB-2 Colorset 体系の集合体配置(制御棒配置)を入れ替えたものを利用した。Figure 2-6-3-5 には設計炉心の計算体系を示す。

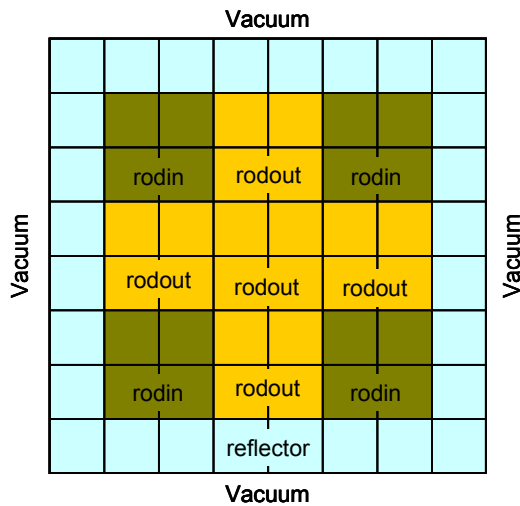


Fig. 2-6-3-5 設計炉心の計算体系

次に、断面積調整の実施の際に利用した計算条件について説明する。なお、ここでは以下の2点の観点で適用計算の計算条件について説明することとする。

- ① 格子燃焼計算および炉心燃焼計算の計算条件
- ② 断面積調整法の計算条件

[格子燃焼計算および炉心燃焼計算の計算条件]

開発コードにおいては、格子燃焼計算により得られた集合体タイプおよび燃焼度毎の集合体均質化断面積を炉心燃焼計算の入力値として利用する。さらに、炉心燃焼計算においては入力された燃焼度毎の断面積に基づき、各燃料集合体の燃焼度に対して断面積の内挿を行うことで着目燃焼度における集合体均質化断面積として利用する。従って、格子燃焼計算および炉心燃焼計算において出力する集合体均質化断面積および炉心特性値の燃焼度には任意性がある。上述のように、本研究の目的は軽水炉炉心解析に断面積調整法を体系

的に導入するための方策を開発し、その適用性を評価することにあるため、本適用計算においてはこれらの燃焼計算の計算条件を粗く設定した。具体的には、下表に示される計算条件を設定した。

Table 2-6-3-2 格子燃焼計算および炉心燃焼計算の計算条件

格子燃焼計算	燃焼ステップ数	15				
	燃焼ステップ [GWd/t]	0	0.1	0.5	1	5
		10	15	20	25	30
		35	40	45	50	55
炉心燃焼計算	燃焼ステップ数	12				
	燃焼ステップ [GWd/t]	0	5	10	15	20
		25	30	35	40	45
		50	55			

[断面積調整法の計算条件]

本適用計算においては、断面積調整の対象となる炉心特性値を変えた 2 種類の適用計算を実施した。具体的には、断面積調整の対象を燃焼ステップごとの実効増倍率とした計算(全 12 点)と断面積調整の対象を燃焼ステップごとの実効増倍率に加え、燃焼ステップごとの各集合体の相対出力分布とした計算(全 780 点)を実施した。これらの計算条件それぞれに対して、次項では計算結果を示す。

また、本適用計算においては乱数を用いて生成した仮想的な断面積の真値に基づき、同計算条件の下で計算した炉心特性値を仮想的な実験値として断面積調整に利用した。従って、本適用計算においては実験に起因する不確かさは生じない。さらに、炉心特性計算値と仮想実験値を同一の計算条件(メッシュ設定等)において計算しているため、解析に起因する不確かさも生じない。そのため、本適用計算においては実験および解析誤差を 0 として取り扱った。

[まとめおよび考察]

本項で述べた計算条件と前項で述べた計算体系についてここで簡単にまとめ、これらに関する考察を述べる。本適用計算においては、実験炉心として Fig. 2-6-3-4 に示した計算体系を利用し、設計炉心として Fig. 2-6-3-5 に示した計算体系を利用した。また、燃料集合体の計算体系は Fig. 2-6-3-1 および Fig. 2-6-3-2 で示したタイプ 2 の設計情報に基づき作成した。なお、この際の計算条件として Table 2-6-3-2 に示される燃焼ステップを利用したが、炉心体系には計 3 つの領域、すなわち制御棒なしの燃料集合体、制御棒ありの燃料集合体および反射体が存在する。この内、制御棒なし/ありの燃料集合体は Table 2-6-3-2 の格子燃焼計算の燃焼ステップに基づき燃焼計算を実施したが、反射体の断面積の計算では燃焼計算を実施していない。故に、断面積調整の対象となる集合体均質化断面積は 31 セットの断面積セットからなる。さらに、ICEBURN の入力となる 2 群断面積は捕獲断面積 Σ_c 、核分裂断面積 Σ_f 、核分裂あたりの平均発生中性子数 ν 、核分裂スペクトル χ およびに散乱マトリックス \mathbf{S} を用いて表現することが可能である。従って、入力パラメータ数は

$$31(\text{セット}) \times 12(\text{各ステップにおける断面積数}) = 372(\text{個}) \quad (2-6-3-1)$$

となる。本適用計算においては、この 372 個の入力パラメータ群が断面積調整の対象となる。

また、断面積調整を適用する際の調整対象パラメータとして、本適用計算では実効増倍率と集合体平均相対出力の 2 つを用いることとした。そこで、断面積調整法の調整対象パラメータへの依存性を確認するため、本研究では 2 つの検討を行った。1 つ目は炉心平均燃焼度 5[GWd/t]ごとの実効増倍率を調整対象パラメータとする検討である。この場合、調整対象パラメータは 12 個となり、調整対象パラメータに比べ入力パラメータが極めて多いことから、断面積調整の自由度が高く妥当な調整が行われにくい可能性が考えられる。2 つ目は炉心平均燃焼度 5[GWd/t]ごとの実効増倍率に加え、炉心平均燃焼度 5[GWd/t]ごとの集合体平均相対出力を調整対象パラメータとする検討である。この場合は、調整対象パラメータは 780 個となり²¹、1 つ目の検討に比べ断面積調整の自由度が小さくなることから、さらに妥当な調整が行われやすくなると推測される。

2.6.4 計算結果および考察

本項では、前述の適用計算の計算結果およびその考察を示す。なお、ここでは断面積調整の適用計算に先立ち、ランダムサンプリングにより得られた集合体均質化断面積の相関行列を示す。その後、本適用計算で実施した 2 通りの検討、すなわち調整対象パラメータを実効増倍率のみとした適用計算と調整対象パラメータを実効増倍率と集合体平均相対出力とした適用計算の計算結果および考察をそれぞれについて示す。なお、断面積調整の適用計算においては、断面積の仮想真値を乱数により生成したため、乱数を変えた 10 個のケースに対してそれぞれ独立に断面積調整を実施した。この別を Case No.として示すことをここに明記する。

²¹ 炉心の対称性や反射体領域を考慮すると独立な調整対象パラメータは 780 個よりも少なくなる。

[ランダムサンプリング結果]

ここでは、ランダムサンプリングの計算結果を示す。本研究で開発したランダムサンプリングコードにより得られた集合体均質化断面積の共分散行列を処理し、相関行列として作図したものを Fig. 2-6-4-1 に示す。

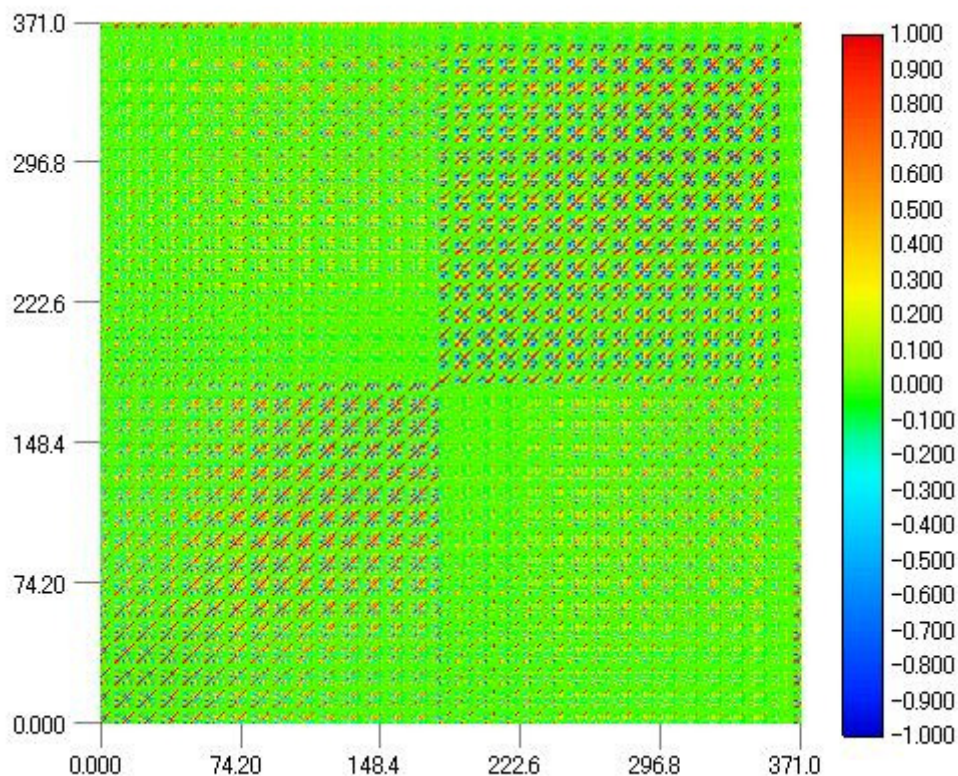


Fig. 2-6-4-1 集合体均質化断面積の相関行列

なお、Fig. 2-6-4-1 において、縦軸・横軸共に、制御棒なし燃料集合体→制御棒あり燃料集合体→反射体の順、各領域で燃焼ステップに昇順、さらに、各燃焼ステップで核分裂断面積(1群、2群)、捕獲断面積(1群、2群)、核分裂あたりの平均発生中性子数(1群、2群)、核分裂スペクトル(1群、2群)、散乱断面積(1群→1群、1群→2群、2群→1群、2群→2群)の順で断面積の相関関係が表されている。これを視覚的に説明するため、Fig. 2-6-4-1 に示される相関行列の左下の部分を拡大したものを Fig. 2-6-4-2 に示す。

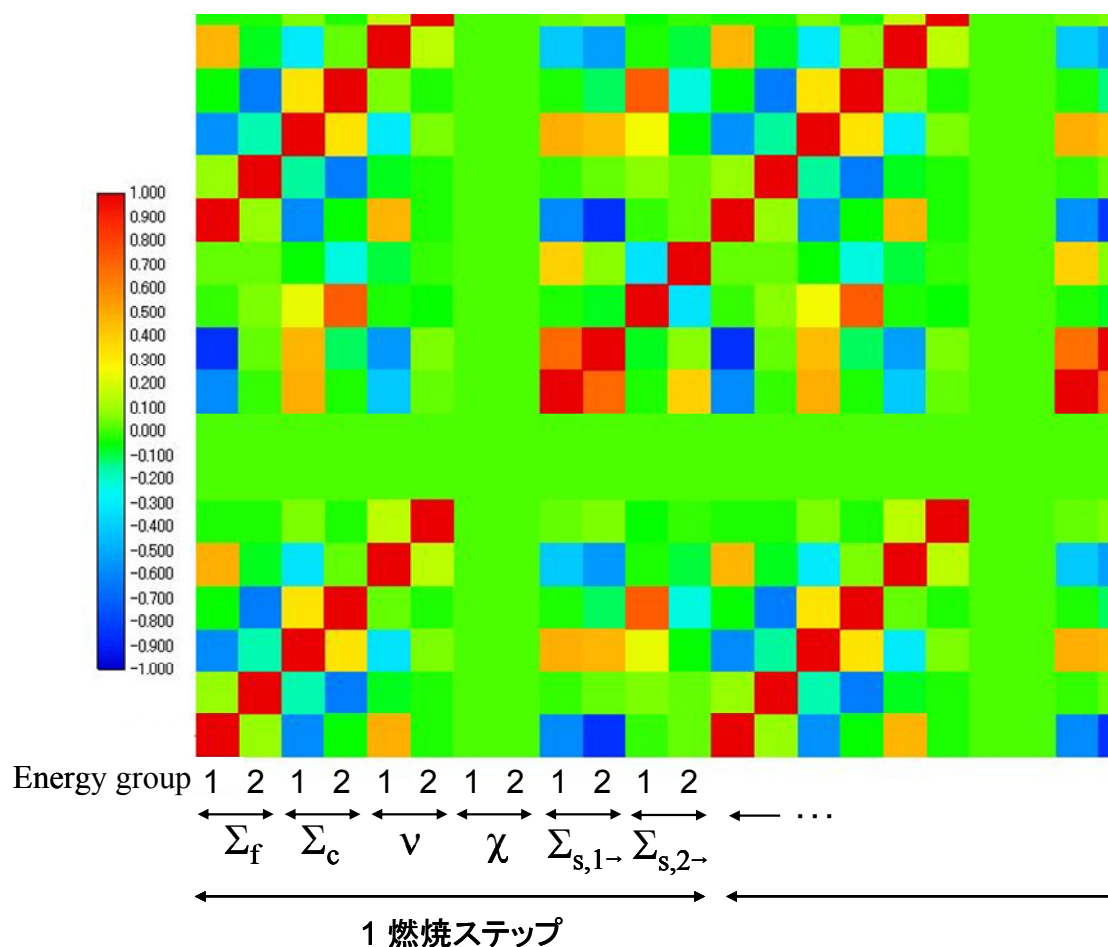


Fig. 2-6-4-2 相関行列の拡大図(左下部)

Figure 2-6-4-1 から、燃料集合体タイプ間(制御棒なし/あり)には断面積に比較的弱い相関関係があり、同一燃料集合体タイプの近い燃焼ステップには断面積に比較的強い相関関係があることが分かる。とりわけ、制御棒ありの燃料集合体は燃焼ステップ間の断面積の相関関係が強いことが分かる。また、Fig. 2-6-4-1 において、格子状の緑線が確認できるが、これはすべてのサンプルにおいて核分裂スペクトルが 1 群で 1.0、2 群で 0.0 となり、ばらつきが生じなかったためである。

本適用計算では、Fig. 2-6-4-1 の相関行列の共分散行列を利用して集合体均質化断面積に対して断面積調整を実施した。以降では、この断面積調整の結果および考察を示す。

[実効増倍率を調整対象とした場合]

ここでは、実効増倍率のみを調整対象パラメータとした断面積調整の結果とそれに対する考察を示す。なお、本適用計算では、多数のパラメータにより構成されるベクトル間の差異を次式で定義される誤差ノルムとして評価した。

$$\begin{aligned} (\text{誤差ノルム}) &= \|\mathbf{x}_{reference} - \mathbf{x}_{estimate}\| \\ &= \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_{i,reference} - x_{i,estimate})^2} \end{aligned} \quad (2-6-4-1)$$

しかし、(2-6-4-1)式に基づき多数のパラメータにより構成されるベクトルの差異を評価する際、大きさの異なるパラメータの誤差を同時に評価することが難しくなる。例えば、断面積の誤差ノルムを評価することを考えた場合、それ自体の値が大きい平均発生中性子数などは値の小さい核分裂断面積に比べ差異が大きく見積もられると思われる。故に、このような場合には相対値として差異を評価するべきである。そこで、相対値に対する誤差ノルム(相対誤差ノルム)を次式で定義した。

$$(\text{相対誤差ノルム}) = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left(\frac{x_{i,reference} - x_{i,estimate}}{x_{i,reference}} \right)^2} \quad (2-6-4-2)$$

従って、本研究では規格化された値として出力される実効増倍率および集合体平均相対出力に対しては、それらのreferenceとの差異を評価する際には誤差ノルムを用いることとし、規格化が行われない断面積に対しては、そのreferenceとの差異を評価する際には相対誤差ノルムを用いることとした。

以下では、実効増倍率を調整対象パラメータとしたときの断面積調整の適用結果と考察を示す。まず、断面積の仮想真値を利用して計算された実効増倍率と断面積調整法の適用前/後の実効増倍率予測値の誤差ノルムの変化を Table 2-6-4-1 に示す。

Table 2-6-4-1 断面積調整法の適用による実効増倍率の誤差ノルムの変化

Case No.	誤差ノルム(調整前)		B/A
	A	B	
1	1.2E-02	3.7E-03	0.30
2	8.4E-03	1.2E-02	1.38
3	3.0E-02	3.0E-03	0.10
4	2.0E-02	1.4E-03	0.07
5	1.2E-02	3.1E-03	0.27
6	1.3E-02	6.0E-03	0.45
7	3.4E-02	2.2E-03	0.06
8	1.6E-02	3.3E-03	0.21
9	2.3E-02	3.4E-04	0.02
10	1.7E-02	8.4E-03	0.49

Table 2-6-4-1 から Case2 以外では、断面積調整により実効増倍率予測値の誤差ノルムが低減されていることが分かる。なお、断面積調整法では実験炉心の実験測定値と炉心特性予測値の誤差ノルムを最小化するように断面積を調整するため、Fig. 2-6-4-1 で示される設計炉心の誤差ノルムが低減されることはその原理上、保証されない。従って、断面積調整法を適用することで設計炉心の炉心特性予測精度が悪化することは起こり得る。Table 2-6-4-1 において示された Case 2 における実効増倍率予測値の誤差ノルムの増大はそれを示すものと考えている。

次に、仮想真値を利用し算出した集合体平均相対出力と断面積調整前後の予測値の誤差ノルムの変化を Table 2-6-4-2 に示す。

Table 2-6-4-2 断面積調整法の適用による相対出力の誤差ノルムの変化

Case No.	誤差ノルム(調整前)		B/A
	A	B	
1	3.79E-01	3.77E-01	0.99
2	7.17E-01	9.15E-01	1.28
3	5.30E-01	2.04E-01	0.39
4	3.18E-01	9.70E-02	0.31
5	1.41E-01	3.79E-01	2.68
6	1.58E-01	5.70E-01	3.60
7	8.99E-01	1.53E-01	0.17
8	5.26E-01	2.39E-01	0.46
9	6.45E-01	6.29E-02	0.10
10	1.30E-01	6.92E-01	5.32

Table 2-6-4-2 に示される計算結果から、Case 1,3,4,7,8,9 においては断面積調整により誤差ノルムが低減されたことがわかるが、Case 2,5,6,10 においては誤差ノルムが増大していることが確認できる。なお、ここで説明している適用計算においては、相対出力を調整パラメータとして扱っていない。すなわち、本計算結果から断面積調整法により調整対象パラメータ以外のパラメータの予測精度が向上する傾向はないといえる。次に、断面積調整法の適用による断面積の仮想真値と断面積の相対誤差ノルムの変化を Table 2-6-4-3 に示す。

Table 2-6-4-3 断面積調整法の適用による断面積の相対誤差ノルムの変化

Case No.	相対誤差ノルム	相対誤差ノルム	B/A
	(調整前)	(調整後)	
	A	B	
1	2.0E-01	1.3E-01	0.64
2	3.6E-01	4.8E-01	1.31
3	2.4E-01	9.5E-02	0.39
4	3.7E-01	2.8E-01	0.75
5	1.5E-01	1.7E-01	1.13
6	1.9E-01	2.4E-01	1.27
7	5.1E-01	2.6E-01	0.51
8	2.5E-01	1.8E-01	0.71
9	2.9E-01	1.5E-01	0.51
10	3.6E-01	4.8E-01	1.35

Table 2-6-4-3 の結果から、いくつかの Case において、断面積調整法の適用により断面積値とその仮想真値の相対誤差ノルムが増大していることがわかる。また、Table 2-6-4-3 に示される断面積調整法の適用による断面積の相対誤差ノルムの変化と Table 2-6-4-2 に示される集合体平均相対出力の誤差ノルムの変化を比較すると、断面積調整により断面積の相対誤差ノルムが増大した Case と相対出力の誤差ノルムが増大した Case は一致していることが分かる。ここまで本項では、実験炉心に断面積調整法を適用した場合に設計炉心の炉心特性値あるいは断面積値自体が断面積調整により真値に近づくか否かという観点で評価を行ってきたが、これらの評価の結果から「断面積調整により設計炉心の炉心特性値あるいは断面積が真値に近づくことは保証されない」といえる。この理由としては、断面積調整法が「実験炉心の炉心特性予測値と測定値の誤差ノルムを最小化するように断面積を調整する手法」であることが考えられる。さらに言えば、断面積調整法では実験炉心にのみ着目してその実験炉心の炉心特性予測値を測定値に近づける方向に断面積を調整するが、このとき断面積の調整量はその断面積の不確かさの大きさと着目する炉心特性値への感度の大きさにより定まる。しかしながら、炉心特性予測値とその実験値の差異に対して感度と不確かさの大きな断面積の断面積真値からのずれが必ずしも大きく寄与するわけではなく、確率的には稀ではあるが感度と不確かさが小さな断面積が大きくその断面積の真値からずれることが炉心特性予測値とその実験値の差異に寄与することは十分に起こり得る。従って、断面積調整を実施することによりすべての断面積が必ず真値に近づくことは保証されず、それゆえに設計炉心の炉心特性予測値とその真値との差異が断面積調整法の適用によって大きくなる可能性は否定できない。しかしながら、断面積調整の目的は、「臨界実験等で得られた積分データを核設計に反映させるために断面積をもっともらしく調整する事により断面積の不確かさを低減し、これにより炉心特性予測値の不確かさを低減する」ことにある。従って、炉心特性値および断面積値自体が真値に近づくか否かは重要ではなく、それらの不確かさを低減する事が重要であるといえる。逆を返せば、炉心特性値の評価値がその真値に近づいたとしても、不確かさが低減されなければ偶発的にそのような結果が得られただけであり、炉心特性値予測精度の向上には寄与しないと言える。

そこで、次に、断面積調整法の適用による炉心特性予測値の不確かさの変化として、実

効増倍率および相対出力の不確かさの変化を Table 2-6-4-4 に示す。また、これに併せて集合体均質化断面積の不確かさの変化も示す。

Table 2-6-4-4 断面積調整法の適用による実効増倍率・相対出力・断面積の不確かさの変化

	平均標準偏差 (調整前)	平均標準偏差 (調整後)	B/A
	A	B	
実効増倍率	6.7E-03	2.9E-03	0.43
集合体平均 相対出力	4.2E-02	3.3E-02	0.78
集合体均質化断面積	1.2E-02	1.0E-02	0.86

Table 2-6-4-4 に示された不確かさの変化から、実効増倍率・集合体平均相対出力および集合体均質化断面積のいずれの不確かさも低減されている事が分かる。とりわけ、断面積調整の調整対象パラメータである実効増倍率は調整対象パラメータではない集合体平均相対出力より大幅な不確かさ低減がなされていることが分かる。また、集合体均質化断面積全体の不確かさ低減率に比べて、実効増倍率と集合体平均相対出力の不確かさの低減率のほうが大きいことが確認できる。これは実効増倍率と集合体平均相対出力に大きな感度をもつ断面積の不確かさが重点的に低減されたためと考えられる。なお、Table 2-6-4-4 に示した比較結果では、各種のパラメータの不確かさを標準偏差として評価し、さらに標準偏差の平均を用いて実効増倍率、相対出力および集合体均質化断面積の全体の不確かさとして評価した。ただし、前述のように、断面積調整法による不確かさ低減には C/E 値自体は無関係であるため、Case 1～Case 10 のいずれにおいても不確かさの変化は等しい。

以上には、実効増倍率を対象パラメータとした断面積調整法の適用計算結果を示した。ただし、本適用計算では断面積の仮想真値として乱数を用いて作成した断面積を利用したため、乱数を変えて 10 通りの計算を行った。ここまでの説明では、各 Case における計算結果を誤差ノルムや平均値などを用いて評価した結果を示したが、断面積調整法の軽水炉炉心解析への適用性を評価するためには各パラメータに対して、物理的・数学的観点から断面積調整の妥当性を評価する必要がある。そこで、ここまです示した結果において、断面積調整法の適用により断面積の相対誤差ノルムが最も増大した例である Case 10 を例に取り、断面積調整による各パラメータの変化および不確かさの挙動を以下で詳細に評価する。まず、Fig. 2-6-4-3 には、Case10 における断面積調整法適用による実効増倍率予測値の変化を示す。

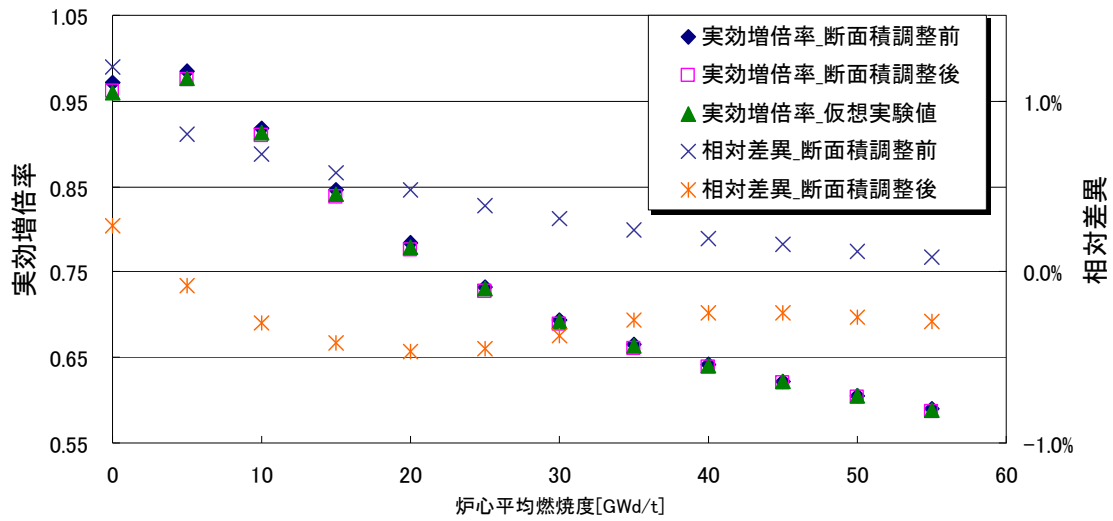


Fig. 2-6-4-3 Case10 における断面積調整法適用による実効増倍率予測値の変化

Figure 2-6-4-3 に示された結果において、断面積調整前には正側に評価されていた実効増倍率が断面積調整後には負側に評価されていることから、Case10 における断面積調整法では実効増倍率予測値が過調整となっていると解釈できる。次に、断面積調整前後の実効増倍率予測値の断面積起因の不確かさとして各燃焼度点における実効増倍率予測値の相対標準偏差を Fig. 2-6-4-4 に示す。

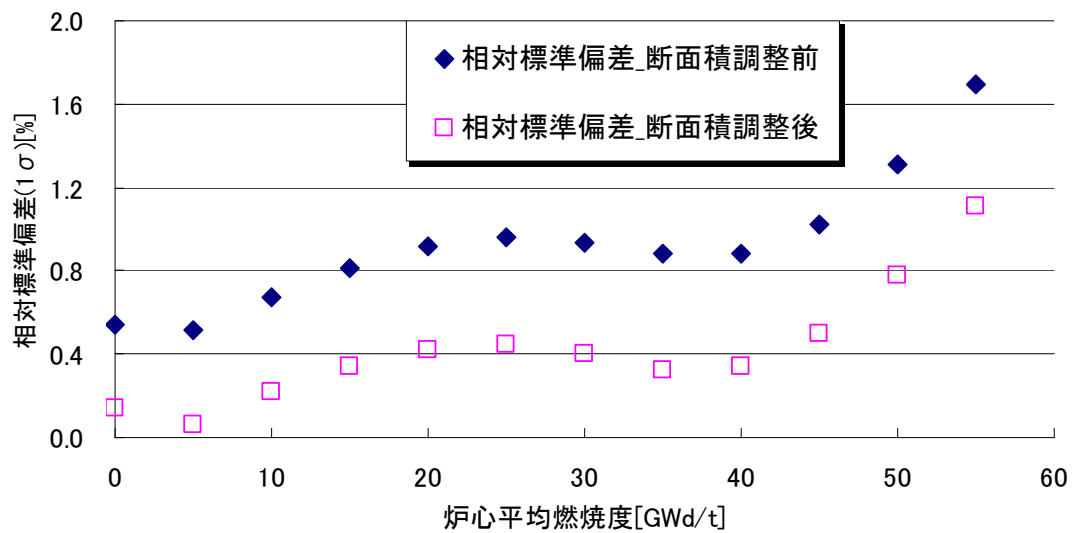


Fig. 2-6-4-4 Case10 における断面積調整法適用による実効増倍率予測値の不確かさの変化
 なお、ここでは炉心特性予測値の不確かさを断面積調整前および断面積調整後の集合体均質化断面積の共分散行列 \mathbf{M} および \mathbf{M}' ならびに炉心特性値に対する断面積の感度係数行列 \mathbf{G} を利用して、次式に基づき算出した。

$$\begin{aligned}
 \mathbf{C}_{Original} &= \mathbf{G}^T \mathbf{M} \mathbf{G} \\
 \mathbf{C}_{Adjusted} &= \mathbf{G}^T \mathbf{M}' \mathbf{G}
 \end{aligned}
 \tag{2-6-4-3}$$

Figure 2-6-4-4 に示される計算結果から、断面積調整法の適用によりすべての燃焼度点の実効増倍率予測値の不確かさが低減されたことが分かる。ここで、Fig. 2-6-4-3 に示される結果と Fig. 2-6-4-4 に示される結果の両方を考慮すると、本適用計算における Case10 の計算では偶発的に断面積調整前の断面積に基づく実効増倍率予測値が真値に近い値をとったことにより、見かけ上断面積調整法の適用で過調整となったといえる。なお、実際には我々が炉心特性値の真値を知るすべはない。従って、炉心解析では炉心特性予測値の周りに不確かさを伴って真値が分布すると考える。そのため、本提案手法の有用性は炉心特性予測値が仮想真値に近づくか否かのみならず、炉心特性予測値の不確かさの大きさも考慮して評価されるべきである。本適用計算において、断面積調整法の適用により、実効増倍率予測値の不確かさがすべての燃焼度点において低減され、また、予測値の相対誤差も不確かさの範囲内に存在していることから、調整対象パラメータである実効増倍率に対しては有効な断面積調整がなされたといえる。

次に、調整対象外のパラメータである相対出力について、断面積調整の結果を詳細に評価する。なお、本適用計算では 36 体の燃料集合体を利用しており、これらすべての相対出力について議論することは困難であるため、ここでは Fig. 2-6-4-5 に示す燃料集合体の集合体平均相対出力の予測値に着目して議論を行うこととする。

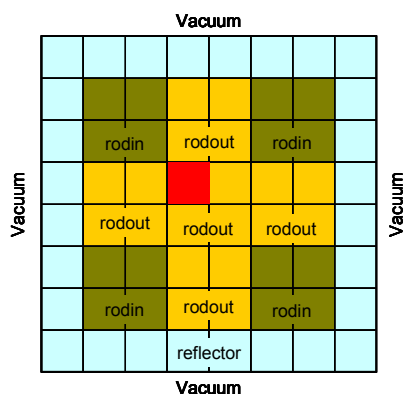


Fig. 2-6-4-5 着目燃料集合体(赤色)の配置

なお、Fig. 2-6-4-5 に示される燃料集合体およびその 1/4 対称の位置に配置される燃料集合体は設計炉心の最大出力分担を有する燃料集合体であり、炉心設計の観点から相対出力の不確かさ低減の需要が高いと考えたため、当該燃料集合体に着目した。まず、Case10 における断面積調整法適用による相対出力予測値の変化を Fig. 2-6-4-6 に示す。

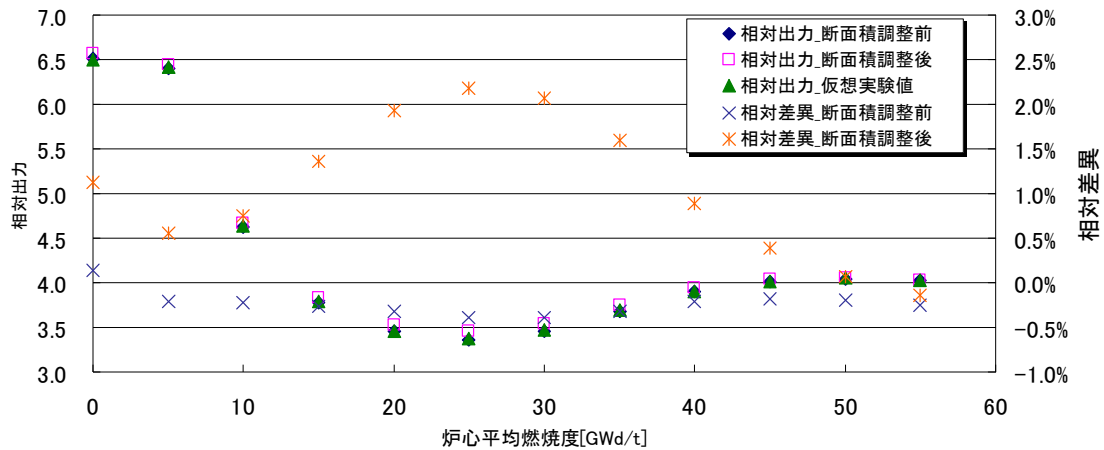


Fig. 2-6-4-6 Case10における断面積調整法適用による相対出力予測値の変化

Figure 2-6-4-6 に示される計算結果からは断面積調整法の適用により炉心中心集合体の集合体平均相対出力予測精度が悪化したと解釈できる。とりわけ、炉心平均燃焼度が 10[GWd/t] ~ 40[GWd/t]の範囲では断面積調整前に比べて、大幅な予測精度の悪化が見受けられる。次に、これらの予測値の不確かさの変化を Fig. 2-6-4-7 に示す。

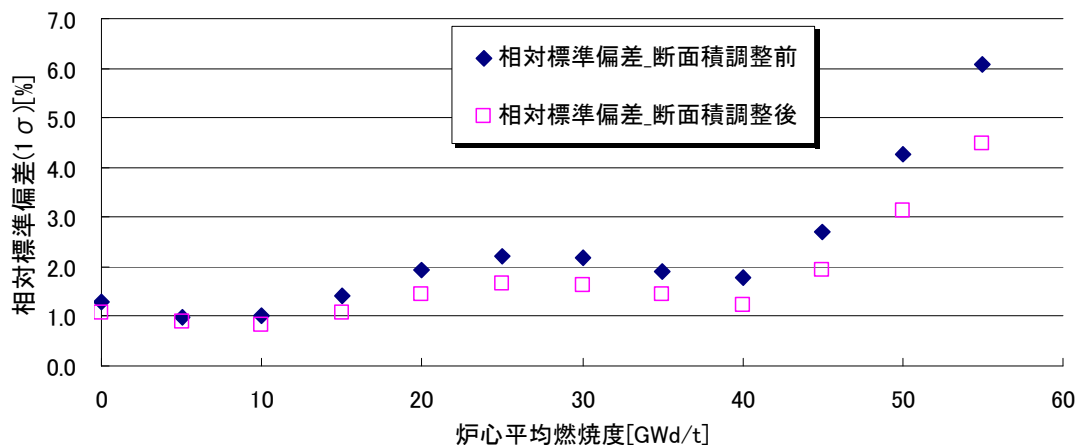


Fig. 2-6-4-7 Case10における断面積調整法適用による相対出力予測値の不確かさの変化

Figure 2-6-4-7 に示される結果から、実効増倍率のみを調整対象パラメータとした断面積調整法の適用により相対出力予測値の不確かさも低減されるものの、実効増倍率予測値の不確かさ低減率に比べて集合体相対出力予測値の不確かさの低減率は低いことが分かる。これは実効増倍率に対する断面積の感度と相対出力に対する断面積の感度が異なることに起因するものであると推測される。すなわち、断面積調整法では調整対象の断面積に大きな感度をもつ断面積がそうでない断面積に比べて大きく調整される(もっともらしく調整されやすい)ために、調整対象パラメータへの感度が大きな断面積の不確かさがそうでない断面積よりも不確かさ低減されやすいと推測される。これにより、設計炉心の実効増倍率に大きな感度を持つ断面積の不確かさは大きく低減された反面、設計炉心の相対出力に大きな感度を持つ断面積の不確かさ低減量は小さく、結果として設計炉心の相対出力予測値の不

確かさ低減率は実効増倍率のそれよりも小さなものとなったと考えられる。また、Fig. 2-6-4-6 に示した相対出力予測値の変化と Fig. 2-6-4-7 を比較すると、断面積調整前と断面積調整後のいずれの相対出力予測値も不確かさの範囲に入るものと解釈できる。この観点から、実効増倍率に対して行った議論と同様に、相対出力分布についても断面積調整前の断面積に基づく相対出力もまた偶発的に仮想真値に基づき計算された相対出力の近くに分布したことで、見かけ上、断面積調整法の適用により相対出力予測精度が悪化したものと考えられる。

次に、断面積調整法の適用による断面積の変化に着目する。ここでは、入力パラメータとして利用した断面積のうち、特徴的な調整がなされたという観点で、制御棒なし燃料集合体の 2 群核分裂断面積と制御棒あり燃料集合体の 1 群捕獲断面積の 2 種類の断面積に着目する。Figure 2-6-4-8 と Fig. 2-6-4-9 にはそれぞれ、断面積調整法の適用による制御棒なし燃料集合体の 2 群核分裂断面積の変化とその不確かさの変化を示す。

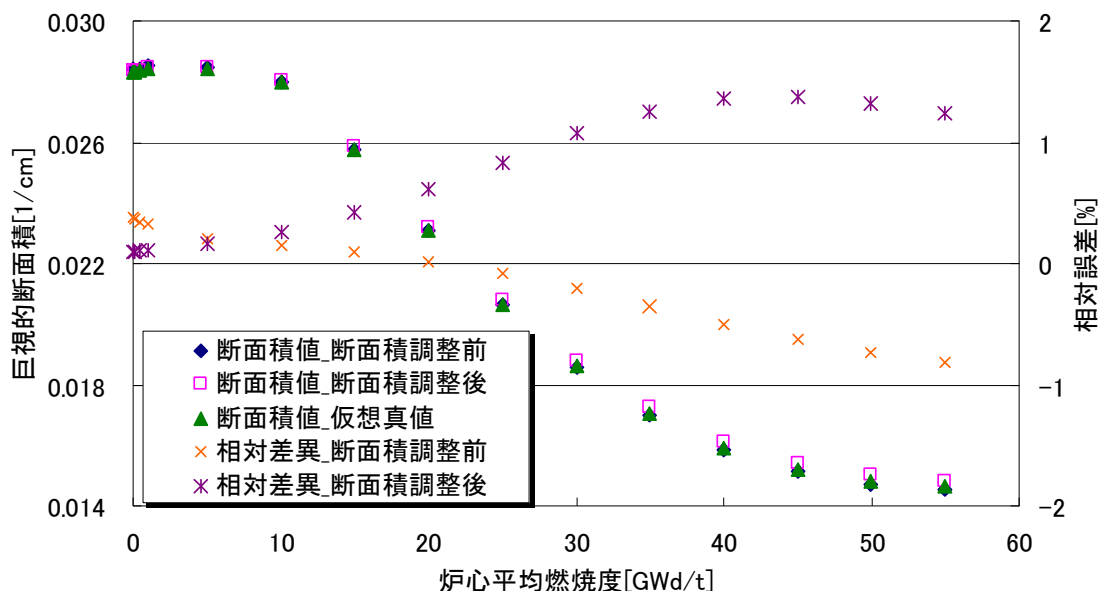


Fig. 2-6-4-8 Case10 における断面積調整法適用による制御棒なし燃料集合体の 2 群核分裂断面積の変化

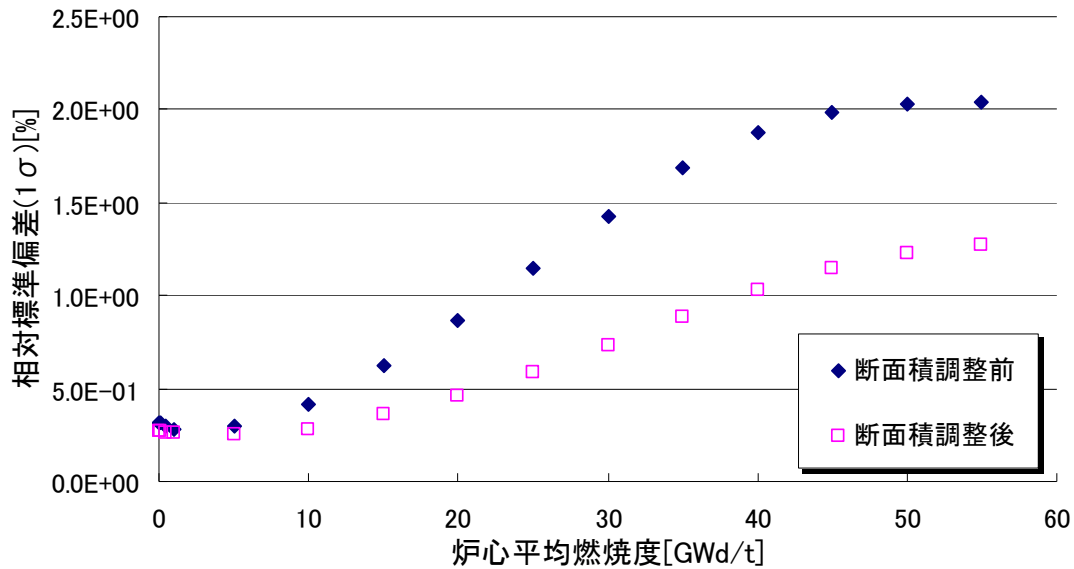


Fig. 2-6-4-9 Case10 における断面積調整法適用による制御棒なし燃料集合体の 2 群核分裂断面積の不確かさの変化

Figure 2-6-4-8 に示される断面積調整法の適用による断面積の変化から、制御棒なし燃料集合体の 2 群核分裂断面積の断面積値は断面積調整前/後で相対差異の符号が変わっており、さらに相対差異の大きさも断面積調整前に比べ断面積調整後のほうが大きくなっていることから過調整となっているように見える。しかしながら、Fig. 2-6-4-9 と比較すれば、断面積調整後の仮想真値は調整後の断面積の不確かさの範囲内に存在しており、かつ、断面積調整により不確かさが低減されていることから有効な調整がなされたといえる。同様に、断面積調整法の適用による制御棒あり燃料集合体の 1 群捕獲断面積の変化とその不確かさの変化を Fig. 2-6-4-10 および Fig. 2-6-4-11 に示す。

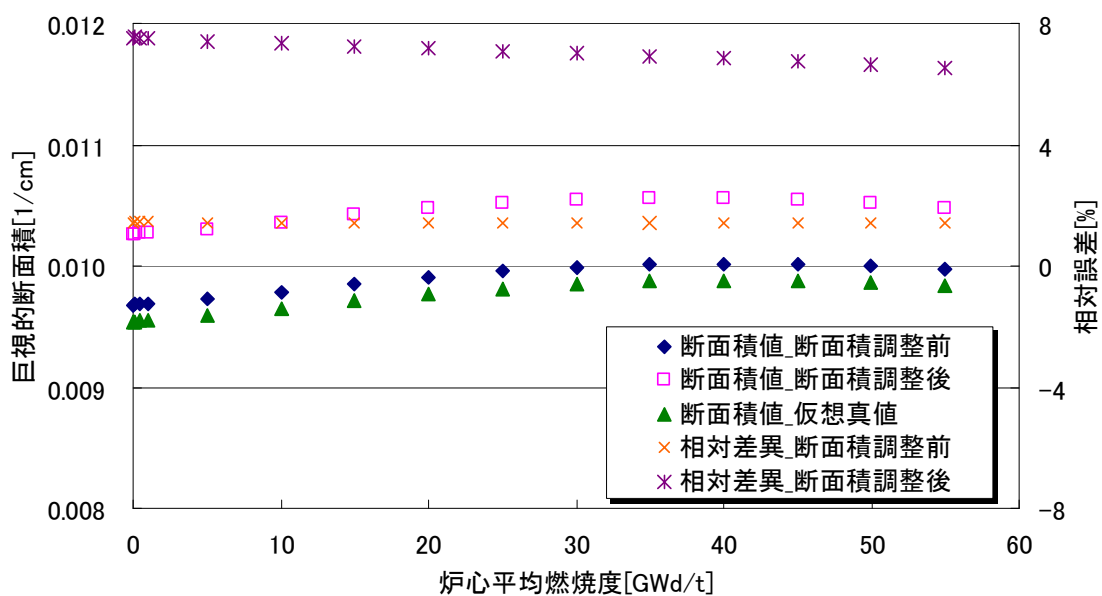


Fig. 2-6-4-10 Case10 における断面積調整法適用による制御棒あり燃料集合体の 1 群捕獲断面積の変化

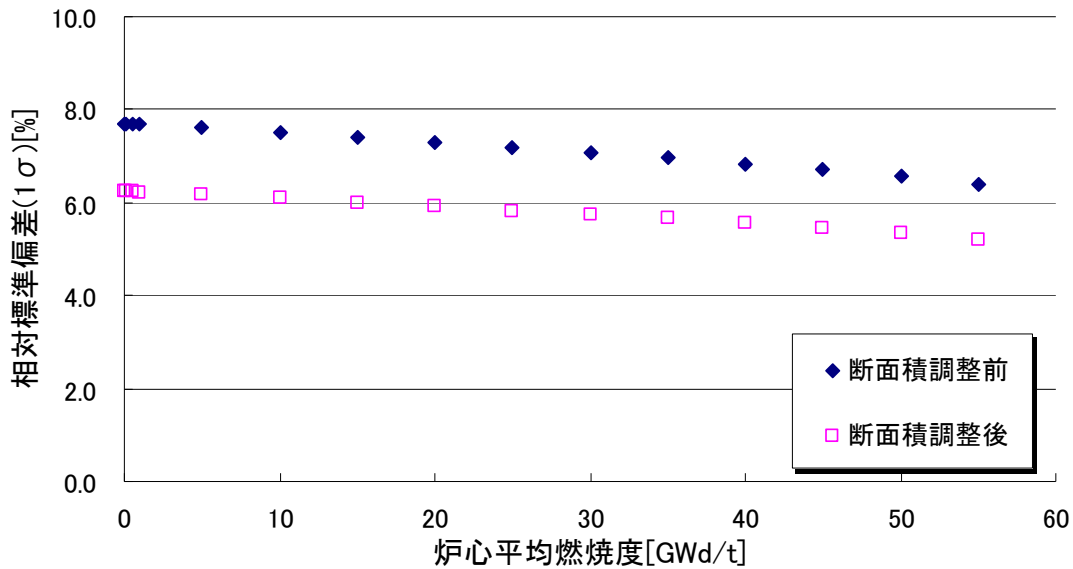


Fig. 2-6-4-11 Case10における断面積調整法適用による制御棒あり燃料集合体の1群捕獲断面積の不確かさの変化

Figure 2-6-4-8 に示した制御棒なし燃料集合体の2群核分裂断面積においては、断面積調整の結果として見かけ上過調整となっていることを示した。一方、Fig. 2-6-4-10 に示した制御棒あり燃料集合体の1群捕獲断面積においては、断面積調整により断面積が真値から遠ざかる方向に調整されていることが分かる。しかしながら、調整後の断面積の不確かさの範囲に断面積の仮想的な真値が存在し、かつ、断面積の不確かさが低減されていることから、当該断面積に関しても妥当な調整がなされたと判断できる。

ここでは断面積調整により異なる性質の調整がなされた2種類の断面積に着目して、断面積調整の有効性を議論したが、ここで示していないその他の断面積においても同様の性質が見受けられた。これらの結果から、断面積調整法の適用により必ずしも断面積の真値に近づくように断面積が調整されることは保証されない。しかしながら、断面積調整法の適用により積分データに基づく断面積の測定値が増加したと解釈することができ、これにより断面積の不確かさは必ず低減されると言える。なお、断面積調整法の適用により断面積の不確かさが必ず低減されることはそれに基づき算出される炉心特性予測値の不確かさが必ず低減されることと等価である。

また、実効増倍率のみを調整対象パラメータとした本適用計算において、実効増倍率予測値とその仮想実験値の誤差ノルムと不確かさの低減率に比べ、集合体平均相対出力予測値とその仮想実験値の誤差ノルムと不確かさの低減率が小さかった。その理由としては、実験炉心の調整対象パラメータ(実効増倍率)に対する感度が大きい断面積が重点的に調整され、それに伴い不確かさが低減されるためであると考えられる。従って、実効増倍率に加えて集合体平均相対出力も断面積調整の調整対象パラメータとして利用することで、設計炉心の集合体平均相対出力予測値と仮想実験値との誤差ノルムおよびその不確かさも低減されるものと考えられる。そこで、次に示す適用計算では、本適用計算において調整対象パラメータとした実効増倍率に加えて集合体平均相対出力を調整対象パラメータとした

適用計算について適用計算結果と考察を示す。

[実効増倍率と相対出力分布を調整対象とした場合]

ここでは、断面積調整法を適用する際に、実験炉心の実効増倍率と集合体平均相対出力を調整対象パラメータとした適用計算の結果を示す。なお、以下でも前述の誤差ノルムと相対誤差ノルムを利用して適用計算結果の評価を行った。

まず、断面積調整前後の断面積に基づき計算された実効増倍率と断面積の仮想真値を利用して計算された炉心特性値の参照解の誤差ノルムの変化を Table 2-6-4-5 に示す。

Table 2-6-4-5 断面積調整法の適用による実効増倍率の誤差ノルムの変化

Case No.	誤差ノルム(調整前)	誤差ノルム(調整後)	B/A
	A	B	
1	1.2E-02	2.4E-03	0.20
2	8.4E-03	2.5E-03	0.29
3	3.0E-02	3.0E-03	0.10
4	2.0E-02	1.3E-03	0.06
5	1.2E-02	1.4E-03	0.12
6	1.3E-02	1.6E-03	0.12
7	3.4E-02	6.8E-04	0.02
8	1.6E-02	1.8E-03	0.11
9	2.3E-02	9.1E-04	0.04
10	1.7E-02	8.9E-04	0.05

Table 2-6-4-5 に示された各 Case における断面積調整法適用による実効増倍率の誤差ノルムの変化から、誤差ノルムの低減率にばらつきはあるものの、全ての Case において誤差ノルムが低減されていることが分かる。また、Table 2-6-4-1 に示された結果と比較すると、Table 2-6-4-5 に示された結果のほうが断面積調整後の誤差ノルムが小さくなっていることがわかる。すなわち、これは調整対象のパラメータが増えたことにより断面積が真値の方向に調整されやすくなるという性質を示していると考えられる。さらに言えば、この結果は断面積調整法の重要な特性を示しているといえる。具体的には、調整対象のパラメータ数が断面積調整の自由度よりも多くなった場合、その断面積調整は優決定系、すなわち断面積調整の自由度よりも束縛条件が多い条件下でなされることとなる。その場合、すべての調整対象パラメータの誤差ノルムの総和を最小にすることを目的とした調整がなされるため、各パラメータの誤差ノルムは劣決定系の場合に比べ増大する可能性がある。本適用計算においては、断面積調整の調整対象パラメータが増加したことにより実効増倍率予測値の誤差ノルムが低減したことから、断面積調整の自由度は十分に大きいものと推測される。すなわち、本適用計算の結果からは多くの測定可能な炉心特性値を断面積調整の調整対象パラメータとすることで、より一層効果的な断面積調整がなされる可能性を示唆している。

次に、仮想真値を利用し算出した集合体平均相対出力と断面積調整前後の予測値の誤差ノルムの変化を Table 2-6-4-6 に示す。

Table 2-6-4-6 断面積調整法の適用による相対出力の誤差ノルムの変化

Case No.	誤差ノルム(調整前)	誤差ノルム(調整後)	B/A
	A	B	
1	3.79E-01	5.98E-02	0.16
2	7.17E-01	4.30E-02	0.06
3	5.30E-01	3.09E-02	0.06
4	3.18E-01	1.90E-02	0.06
5	1.41E-01	3.01E-02	0.21
6	1.58E-01	3.17E-02	0.20
7	8.99E-01	3.43E-02	0.04
8	5.26E-01	1.04E-01	0.20
9	6.45E-01	2.56E-02	0.04
10	1.30E-01	2.20E-02	0.17

Table 2-6-4-6 に示される結果から、実験炉心の実効増倍率と集合体平均相対出力を調整対象パラメータとした場合にはすべての Case において集合体平均相対出力の誤差ノルムが低減されていることが分かる。次に、断面積の仮想真値と断面積調整前後の断面積の相対誤差ノルムの変化を Table 2-6-4-7 に示す。

Table 2-6-4-7 断面積調整法の適用による断面積の相対誤差ノルムの変化

Case No.	相対誤差ノルム (調整前)	相対誤差ノルム (調整後)	B/A
	A	B	
1	2.0E-01	1.2E-01	0.60
2	3.6E-01	1.5E-01	0.41
3	2.4E-01	6.2E-02	0.25
4	3.7E-01	2.6E-01	0.70
5	1.5E-01	1.1E-01	0.75
6	1.9E-01	1.3E-01	0.68
7	5.1E-01	2.5E-01	0.50
8	2.5E-01	2.4E-01	0.95
9	2.9E-01	1.3E-01	0.47
10	3.6E-01	4.3E-01	1.21

Table 2-6-4-7 に示された結果より、Case10 以外の Case においては断面積調整法の適用により断面積の仮想真値との相対誤差ノルムが低減されていることが分かる。また、Table 2-6-4-3 と Table 2-6-4-7 を比較すると、実効増倍率のみを調整対象パラメータとした場合に比べ、実効増倍率と集合体平均相対出力を調整対象パラメータとした場合のほうが断面積の相対誤差ノルムの低減率が向上することが分かる。さらに、Table 2-6-4-7 に示された結果から、Case10 においては断面積調整により断面積の相対誤差ノルムが増大していることがわかるが、その一方で、Table 2-6-4-5 および Table 2-6-4-6 に示された結果は実効増倍率と相対出力分布の誤差ノルムは低減されたことを示している。すなわち、これらの結果から Case10 においては実効増倍率および集合体平均相対出力に大きな感度を持つ断面積に関しては妥当な調整がなされた一方で、それらに大きな感度を有さない断面積に関しては真値に近づくような調整がなされなかったと推測される。なお、Case10 における断面積調整法適用による各パラメータの調整結果については後述する。

次に、断面積調整法の適用による実効増倍率、相対出力および断面積の不確かさの変化を Table 2-6-4-8 に示す。

Table 2-6-4-8 断面積調整法の適用による実効増倍率・相対出力・断面積の不確かさの変化

	平均標準偏差 (調整前)	平均標準偏差 (調整後)	B/A
	A	B	
実効増倍率	6.7E-03	4.3E-04	0.06
集合体平均 相対出力	4.2E-02	1.6E-03	0.04
集合体均質化断面積	1.2E-02	3.6E-03	0.29

Table 2-6-4-8 に示された結果から、実効増倍率と集合体平均相対出力を調整対象パラメータとした断面積調整法の適用により、実効増倍率と集合体平均相対出力の予測値の不確かさが大幅に低減されたことが分かる。また、Table 2-6-4-5 に示された結果と比較すると、実効増倍率に加え集合体平均相対出力を調整対象パラメータとしたことによりその低減量が増加したことが分かる。

ここまででは、Case1～10 の適用結果について誤差ノルムや不確かさの平均値に基づき適用手法の有効性を確認してきた。次に、本適用計算において断面積調整法の適用により断面積の相対誤差ノルムが増大した例として Case10 に再度着目し、その適用結果について詳細に評価する。まず、Case10 における断面積調整法適用による実効増倍率予測値およびその不確かさの変化をそれぞれ Fig. 2-6-4-12 および Fig. 2-6-4-13 に示す。

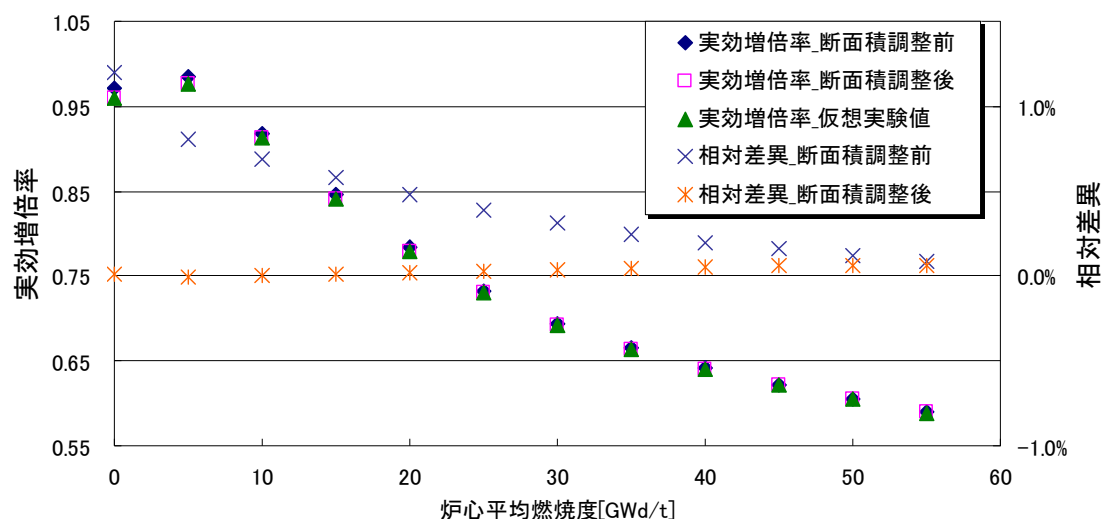


Fig. 2-6-4-12 Case10 における断面積調整法適用による実効増倍率予測値の変化

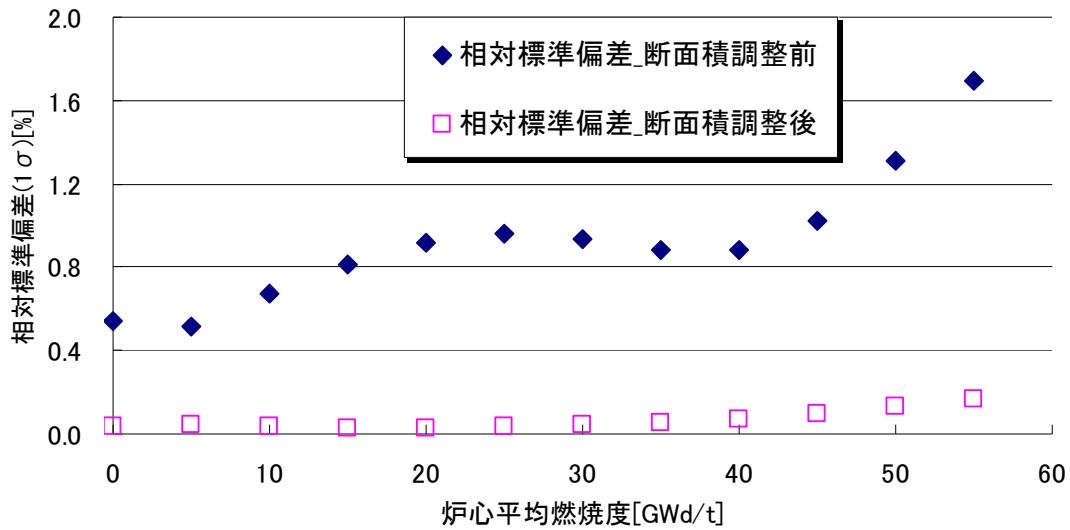


Fig. 2-6-4-13 Case10における断面積調整法適用による実効増倍率予測値の不確かさの変化
 Figure 2-6-4-12 および Fig. 2-6-4-13 に示された結果から、断面積調整法の適用により実効増倍率予測値と仮想真値との誤差ノルムおよび実効増倍率予測値の不確かさが大幅に低減されたことが分かる。また、Fig. 2-6-4-3 および Fig. 2-6-4-4 に示された結果と比較すると、実効増倍率と集合体平均相対出力を調整対象パラメータとした場合の方が、断面積調整法の効果が大きいことが分かる。

次に、集合体平均相対出力に対する断面積調整結果を Fig. 2-6-4-14 および Fig. 2-6-4-15 に示す。なお、ここでは Fig. 2-6-4-5 に示される燃料集合体の相対出力について議論することとする。

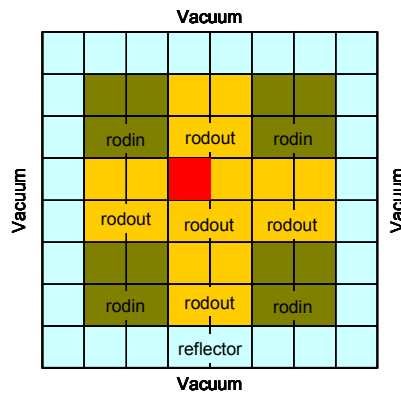


Fig. 2-6-4-5 着目燃料集合体の配置(再掲)

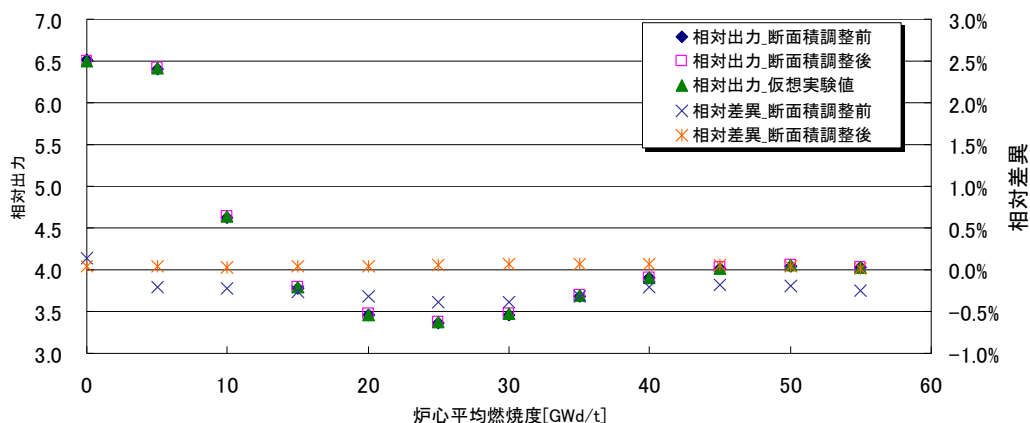


Fig. 2-6-4-14 Case10 における断面積調整法適用による相対出力予測値の変化

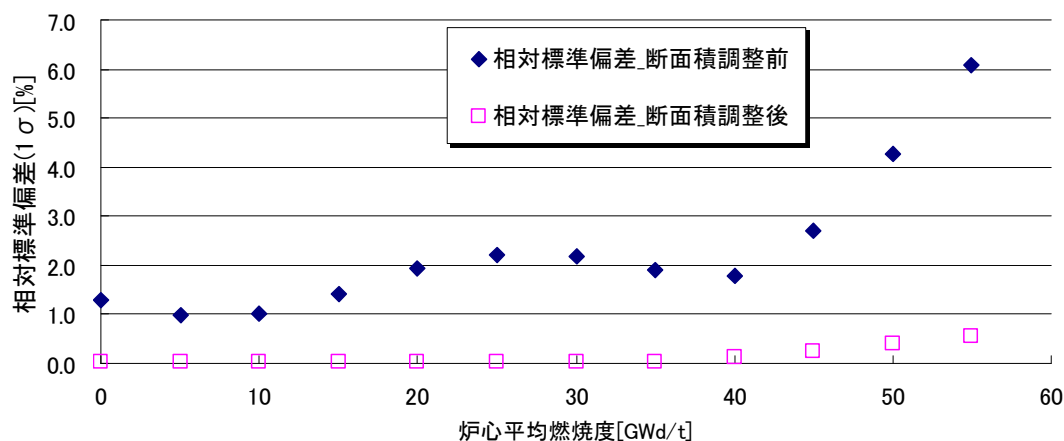


Fig. 2-6-4-15 Case10 における断面積調整法適用による相対出力予測値の不確かさの変化
 Figure 2-6-4-14 および Fig. 2-6-4-15 に示された結果と、Fig. 2-6-4-6 および Fig. 2-6-4-7 の結果との比較から、実効増倍率と集合体平均相対出力を調整対象パラメータとした断面積調整法を適用した場合には、実効増倍率のみを調整対象パラメータとして扱った場合に比べて相対出力の不確かさの低減量が極めて大きいことが分かる。また、相対出力予測値と仮想真値との誤差ノルムも低減されていることが分かる。

次に、断面積調整法の適用による断面積の変化に着目する。ここでは、前述の結果と同様に、制御棒なし燃料集合体の 2 群核分裂断面積と制御棒あり燃料集合体の 1 群捕獲断面積に注目して結果を示すこととする。以下では、実効増倍率と相対出力を調整対象パラメータとした断面積調整法の適用による制御棒なし燃料集合体の 2 群核分裂断面積およびその不確かさの変化をそれぞれ Fig. 2-6-4-16 および Fig. 2-6-4-17 に示す。

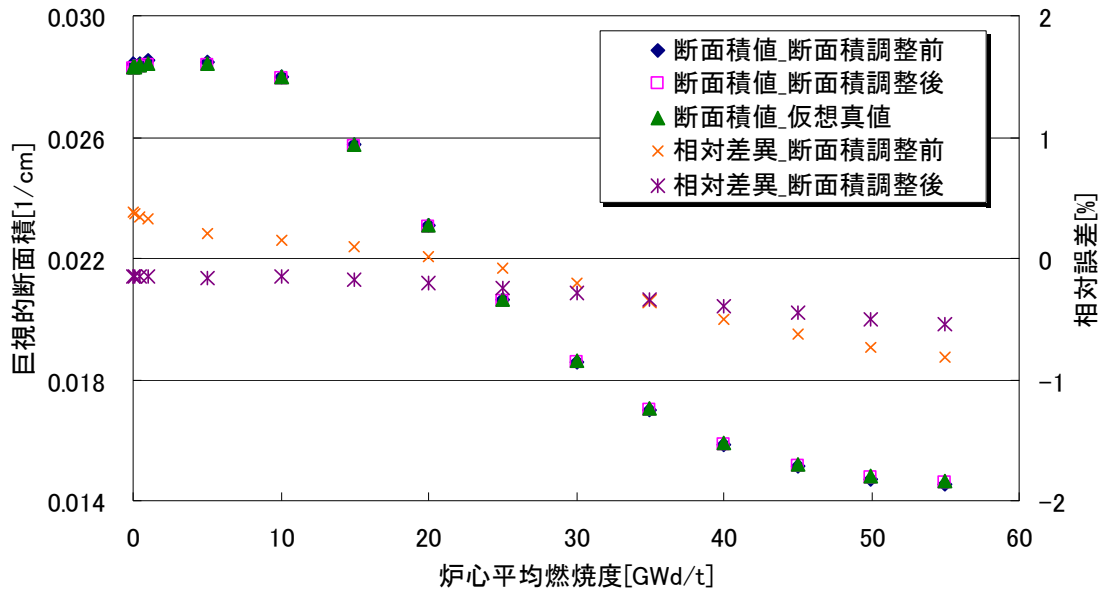


Fig. 2-6-4-16 Case10 における断面積調整法適用による制御棒なし燃料集合体の 2 群核分裂断面積の変化

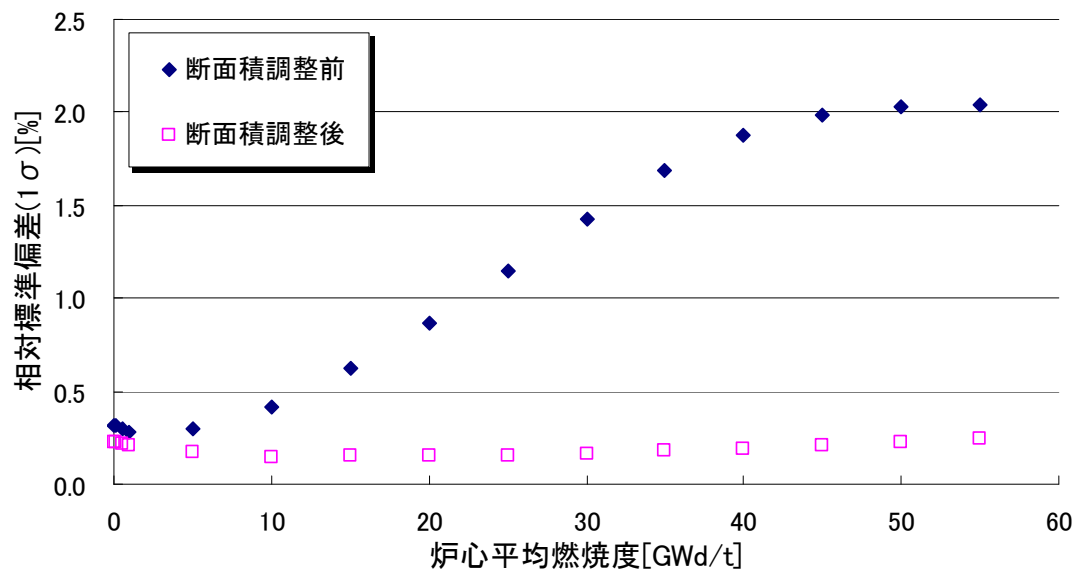


Fig. 2-6-4-17 Case10 における断面積調整法適用による制御棒なし燃料集合体の 2 群核分裂断面積の不確かさの変化

Figure 2-6-4-17 に示された結果より、断面積調整法の適用により断面積の不確かさが大幅に低減されていることが分かる。また、Fig. 2-6-4-16 に示された結果から、断面積の値自体は大幅な改善は見られないが、調整後の断面積値はその不確かさの範囲に存在しており有効な調整がなされたと思われる。

次に、実効増倍率と相対出力を調整対象パラメータとした断面積調整法の適用による制御棒あり燃料集合体の 1 群捕獲断面積およびその不確かさの変化をそれぞれ Fig. 2-6-4-18 および Fig. 2-6-4-19 に示す。

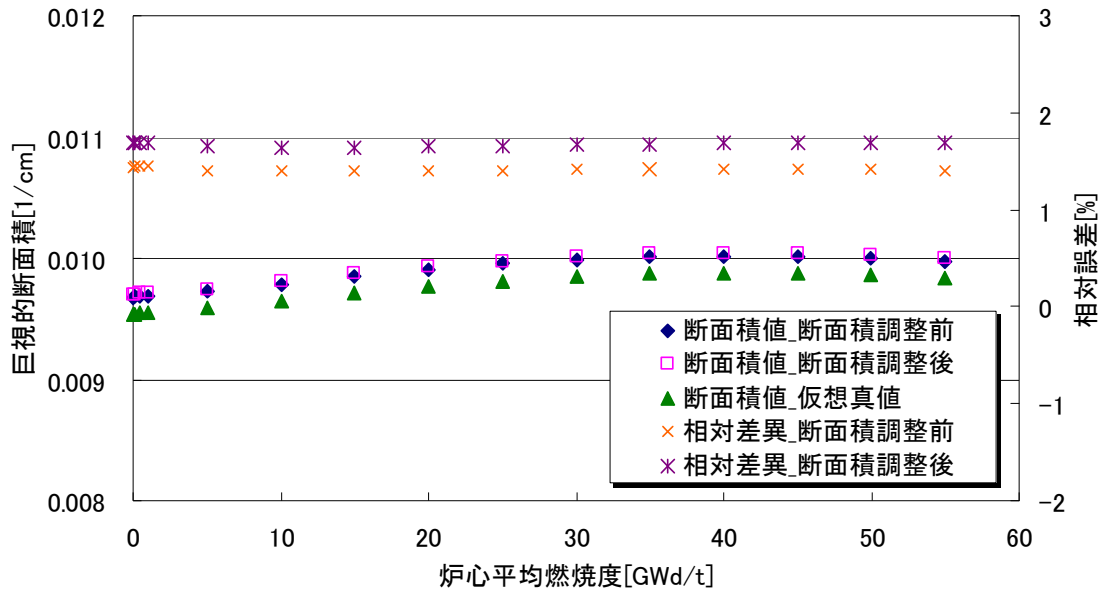


Fig. 2-6-4-18 Case10 における断面積調整法適用による制御棒あり燃料集合体の 1 群捕獲断面積の変化

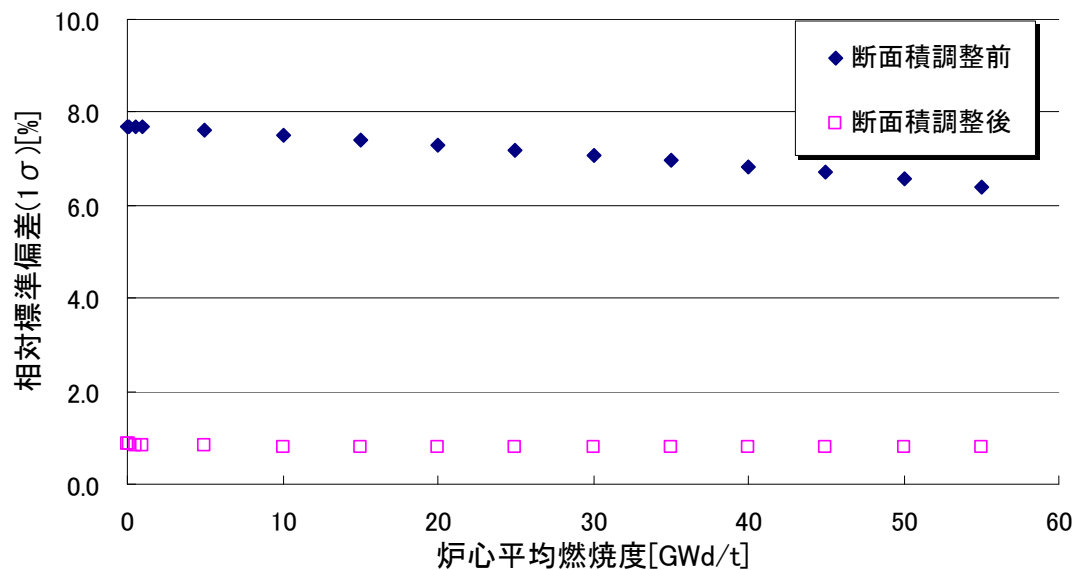


Fig. 2-6-4-19 Case10 における断面積調整法適用による制御棒あり燃料集合体の 1 群捕獲断面積の不確かさの変化

Figure 2-6-4-19 に示された結果より、実効増倍率と集合体平均相対出力を調整対象パラメータとした断面積調整法の適用により、制御棒あり燃料集合体の 1 群捕獲断面積の不確かさが大幅に低減されたことが分かる。なお、Fig. 2-6-4-19 と Fig. 2-6-4-11 を比較すると、調整パラメータの選定により不確かさの低減量が大きく異なることが分かる。これは、制御棒あり燃料集合体の 1 群捕獲断面積が実効増倍率に対して小さな感度、集合体平均相対出力に対しては大きな感度をもつ断面積であるためと考えられる。また、制御棒あり燃料集合体の 1 群捕獲断面積は断面積調整法の適用によりその不確かさは低減されている反面、Fig. 2-6-4-18 に示される結果から断面積の値自体は仮想真値から遠ざかる方向に調整がなされ

ていることが分かる。しかしながら、調整後の断面積はその不確かさの範囲であると考えられ、不確かさが大幅に低減されたという観点から有効な調整がなされたと言える。

[計算時間]

集合体均質化断面積に対して断面積調整法を適用するためには、断面積調整の調整パラメータに対する各断面積の感度係数が必要となる。前述のように、本検討では直接法(Forward法)に基づく感度解析を実施した。Forward法では入力パラメータの数だけ入力パラメータを微小に変化させた体系で再度炉心特性値を計算する必要があるため、その計算コストは入力パラメータに比例することとなる。本検討では、入力パラメータ数は372個であり、本体系におけるIECBURNによる炉心燃焼計算の1回あたりの計算時間がおおよそ110[s]であることを考慮すると、本検討で使用した感度係数行列を評価するための計算時間はおおよそ下式により推定される²²。

$$110[s] \times 372[\text{個}] \approx 41000[s] \approx 11[h] \quad (2-6-4-3)$$

なお、本検討では以下に示す性能の計算機を利用した。

Table 2-6-4-9 適用計算に使用した計算機の性能

CPU	Intel® Core™ i7-3960X
クロック数	3.30 GHz
メモリ	32.0 GB

本研究では非常に簡易的な計算条件と計算体系を利用して適用計算を実施したが、実機体系において提案手法を実用化するためには入力パラメータ数が大幅に増加する。さらに、実機解析では1回あたりの炉心燃焼計算に必要となる計算コストも大幅に増大する。従って、実機軽水炉炉心解析に断面積調整法を適用するためには、炉心燃焼計算に対する効率的な燃焼感度解析手法が必要であるといえる。

[まとめ]

本節では、提案手法の適用計算の結果および考察について説明した。具体的には、実効増倍率のみを断面積調整法の調整対象パラメータとした適用計算と実効増倍率と集合体平均相対出力を断面積調整法の調整対象パラメータとした適用計算の2通りの計算の結果および考察を示し、さらに本適用計算の計算時間についても言及した。本適用計算の結果より、いずれの場合においても実効増倍率および集合体平均相対出力の不確かさが低減されたことが示された。さらに、実効増倍率のみを調整対象パラメータとする場合よりも実効増倍率と集合体平均相対出力を調整対象パラメータとする場合の方が不確かさの低減率が大きく、断面積調整法の効果が大きいことが示された。一方、入力パラメータである断面積および炉心特性予測値は断面積調整法の適用により必ずしもその真値に近づくことは保証されないことが明らかとなった。しかしながら、調整後の断面積および炉心特性値の仮想真値との差異は調整後の不確かさの範囲にあるものと評価でき、かつ、断面積調整法の適用により断面積と炉心特性予測値の不確かさが必ず低減されたと言えることから、本研

²²減速材領域の核分裂断面積に対する感度解析などを省略せずに実施すると仮定

究の提案手法により断面積と炉心特性予測値に対し有効な調整がなされたと評価できる。また、適用計算の計算コストに着目すると、適用計算で利用した Forward 法に基づく感度解析に必要な計算コストが大きく、さらに提案手法を実機炉心解析に拡張することを考えた際にはより一層計算コストが大きくなるものと推測した。これを踏まえて、実機軽水炉の炉心解析に提案手法を適用するためには、高効率な燃焼感度解析手法を検討する必要があると結論づけた。

2.7 本章のまとめ

本章では、ランダムサンプリング法に基づく断面積調整法の軽水炉炉心解析への適用性の検討について説明した。まず、2.1 節で本研究の概説を述べ、2.2 節で本研究の理解に必要な数学的・物理的基礎について説明した。

次に、2.3 節では断面積調整法の基礎式の導出を行い、その数学的構造について説明した。また、そこで、断面積調整法を適用するためには断面積調整の対象となる断面積の共分散行列と断面積調整で調整の対象とする炉心特性値に対する断面積の感度係数行列を評価する必要があることを述べた。

さらに、2.4 節ではランダムサンプリング法の理論的説明を行い、集合体均質化断面積の共分散行列を評価するための具体的な手順を明らかにした。

そして、2.5 節では開発コードについて説明した。ここでは、開発コードの仕様について説明すると同時に、開発コードでは Forward 法に基づき感度係数行列を評価していることについて言及し、実機体系において断面積調整法を適用するためにはさらに高効率な感度解析手法が必要であることを述べた。

最後に、2.6 節で適用計算について説明した。本研究の適用計算において、ランダムサンプリング法に基づく断面積調整法を軽水炉炉心解析へ適用することの有効性が示された。しかしその一方で、ランダムサンプリング法に基づく断面積調整法を実機軽水炉の適用するためには、効率的な燃焼感度解析手法が必要であると結論づけた。

第3章 一般化摂動論に基づく集合体感度解析手法の開発

3.1 本章の概説

本章では一般化摂動論に基づく集合体感度解析手法の開発(本章では、本研究と呼ぶ)について説明する。

まず初めに、本手法と2章で提案した手法の違いについて説明する。このため、Fig. 2-2-2で示した軽水炉の炉心解析フローの略図を再掲する。

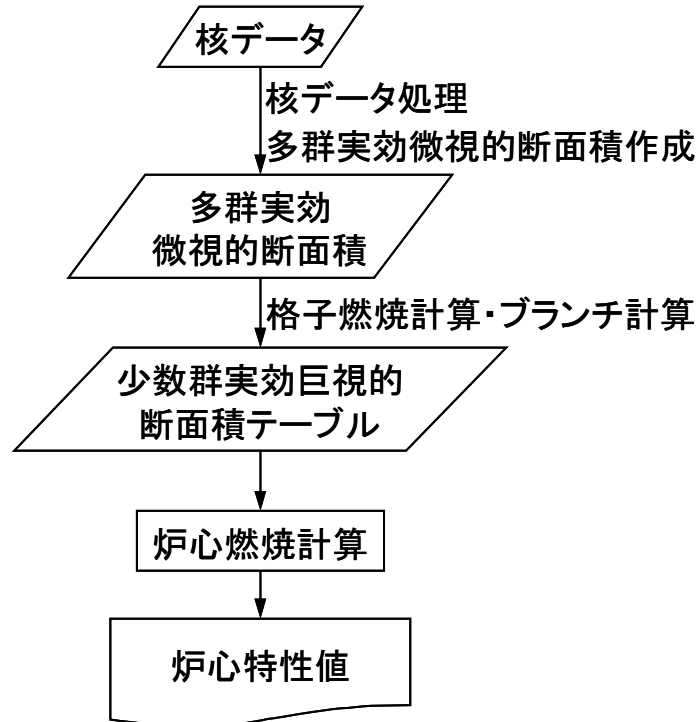


Fig. 2-2-2 軽水炉の炉心解析フローの略図(再掲)

本研究と2章で示した研究のいずれにおいても、最終的な目標は現行の軽水炉炉心解析フローに体系的に断面積調整法を導入し、核データの不確かさに起因する炉心特性予測値の不確かさを低減することにある。そのためには、断面積調整の対象となる断面積(調整対象断面積)の不確かさを評価し、さらに、調整対象断面積と炉心特性予測値の関係性、すなわち、感度係数を何らかの方法により評価する必要がある。2章においては、調整対象断面積を集合体均質化断面積とし、その不確かさを評価する手法としてランダムサンプリングを使用し、感度解析手法としてForward法を利用する手法を提案した。その提案手法は、調整対象断面積の不確かさをランダムサンプリングにより評価する点から確率論的手法により不確かさの伝播を評価する手法であると言える。

一方、本章において提案する手法では、決定論的な手法により集合体均質化断面積に対する感度解析および炉心特性値に対する感度解析を実施することで多群微視的断面積に対して断面積調整法を適用することを考える。本手法では集合体均質化断面積に対する感度解析および炉心特性値に対する感度解析の2度の感度解析が必要となる。しかしながら、一般的に感度解析は多くの摂動計算を必要とするため、大きな計算コストを必要とする。従って、本章で目的とする決定論的な手法を適用するためには高効率な感度解析手法が必要となる。そこで、本研究では決定論的な感度解析理論の1つである一般化摂動論に

基づき、軽水炉炉心解析フローに適用可能な感度解析手法の開発を目的とした。なお、本研究では 2 章で説明したランダムサンプリングに基づく断面積調整法と異なったフローで断面積調整を行うことを最終的な目標としているが、序論でも述べたように 2 章の手法においても感度解析は不可欠であるため、本章で説明する手法を集合体感度解析から炉心階度解析に拡張すれば 2 章で説明した手法においても本章で説明する手法を利用することができる。その意味で、本章で説明する手法と 2 章で説明した手法は相反するものではない。

感度解析においては、解析モデルの入力となるパラメータの微小変化(摂動)に対する出力パラメータの応答からその差分商である感度係数を求める。従って、感度解析では入力パラメータの摂動に対する出力パラメータの応答が得られれば、出力パラメータ自体は不要である。炉心解析においては、炉内の中性子挙動の予測のために、これまで多くの計算手法が開発されてきた。それら計算手法はそれぞれ異なった特徴を持っているが、多くの場合に計算精度が高い計算手法には大きな計算コストが付随することとなる。しかし、近年の計算機性能の向上とともに、高精度・高計算コストの手法が軽水炉炉心解析において導入されつつある。この場合、一般的な方法で感度解析を行うためには入力パラメータの数だけ摂動計算を行う必要があるため、さらに大きな計算コストが必要となる。そこで、上述のように、感度解析では入力パラメータの摂動に対する出力パラメータの応答のみが必要であるため、感度解析を低精度・低計算コストの計算手法で代用する方法が浮かび上がるであろう。しかし、計算手法間の摂動計算の応答が等しい事が保証されない限りは、この手法は近似の域を出るものではないといえる。そのため、低計算コストの計算手法で代用する感度解析においては、計算手法の違いにより生じる不確かさを評価する必要が生じるが、これを正確に評価する場合には更に大きな計算コストが生じる可能性もある。故に、それを低計算コストで評価する方法が確立されていない現時点において、感度解析においても炉心解析で利用される計算手法と同じ計算手法に基づくことで、計算手法の違いによる不確かさを排除することが最も有効な方法であると言える。

上述のように、炉心解析の分野ではこれまで多くの計算手法が開発されてきた。その中で、近年の計算機性能の向上に伴い、近似の少ない計算手法が一般的になりつつある。具体的には、集合体計算手法として Characteristics 法(MOC)、炉心計算として輸送ノード法を利用した次世代炉心解析コード AEGIS/SCOPE2 などがその一例である[25][26]。従って、前述の理由により、これらの厳密な中性子輸送計算手法を利用した感度解析手法の需要が高まっている。そこで、本研究では厳密な中性子輸送計算手法である MOC に着目し、MOC に基づく高効率な感度解析手法の開発を試みた。具体的には、現行の MOC コードを利用し、一般的な加速法を利用することができる感度解析手法の開発を試みた。これにより、感度解析の計算コストの低減が可能となるばかりでなく、現行の軽水炉炉心解析フローに体系的に感度解析および核データ起因の不確かさ評価/低減手法を適用することが可能になると考えられる。また、集合体計算手法として主流になりつつある MOC と、炉心計算手法として利用されている輸送ノード法は異なる手法ではあるが、両手法とも輸送理論に基づくものであり、本研究で開発した集合体感度解析手法を類似した手順により拡張することで、

輸送ノード法に基づく炉心燃焼感度解析手法を開発することが可能であると思われる。従って、本研究で開発した手法と 2 章で説明したランダムサンプリング法に基づく断面積調整法は両立するものである。

3.2 数学的・物理的基礎

次節では、輸送理論に基づく一般化摂動論について説明する。そこで、本節ではその説明のために必要な準備として、感度解析理論、輸送理論および一般化摂動論の理解に必要な数学的あるいは物理的基礎について説明する。なお、3.2.1 項では感度解析理論の基礎として Forward 法と Adjoint 法について説明し、3.2.2 項では輸送理論の基礎として中性子輸送方程式について説明する。さらに、3.2.3 項では一般化摂動論の導出に必要な随伴方程式と随伴関数についての説明および中性子輸送方程式に対する随伴方程式の導出を示す。

3.2.1 感度解析理論の基礎

1 章で述べたように、感度解析手法は Forward 法、Adjoint 法、その他の方法の 3 つに大別することができる。ここでは、それら 3 つのうち Forward 法および Adjoint 法について説明する。なお、その他の方法としては GPT-Free[22]や EpGPT[23]などが挙げられるが、ここではその説明は割愛する。

この説明のため、以下では n 個の入力パラメータ $\mathbf{x} \in x_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$) と m 個の出力パラメータ $\mathbf{y} \in y_j$ ($j = 1, 2, \dots, m$) により構成される以下の解析モデルを考えることとする。

$$\boldsymbol{\varphi} = \mathbf{A}(\mathbf{x}) \quad (3-2-1-1)$$

$$\mathbf{y} = \mathbf{B}(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{x}) \quad (3-2-1-2)$$

ここで、 $\mathbf{A}(\mathbf{x})$ および $\mathbf{B}(\boldsymbol{\varphi})$ は \mathbf{x} および $\boldsymbol{\varphi}$ を入力としたモデル解析を意味する。また、 \mathbf{x} は入力となる断面積、 \mathbf{y} は出力となる炉心特性値、 $\boldsymbol{\varphi}$ は中性子束と考えれば、(3-2-1-1)式および(3-2-1-2)式は核計算における計算モデルを表すことが分かる。なお、(3-2-1-2)式から \mathbf{y} が $\boldsymbol{\varphi}$ と \mathbf{x} の両方に従属しているのがわかる。これは炉心特性値の計算において、中性子束と断面積の両方が利用されることから容易に理解できると思われる。従って、 \mathbf{x} が摂動した時、 \mathbf{y} は(3-2-1-2)式により直接的に与えられる影響と $\boldsymbol{\varphi}$ の変化を介して与えられる影響の 2 つの経路により影響を受けることとなる。これらはそれぞれ直接効果と間接効果と呼ばれる。

また、この表記に従えば、求めるべき感度は $n \times m$ 行列の感度係数行列 \mathbf{G} として、次式のように表されることとなる。

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} \frac{\delta y_1}{\delta x_1} & \frac{\delta y_2}{\delta x_1} & \dots & \frac{\delta y_m}{\delta x_1} \\ \frac{\delta y_1}{\delta x_2} & \frac{\delta y_2}{\delta x_2} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ \frac{\delta y_1}{\delta x_n} & \dots & & \frac{\delta y_m}{\delta x_n} \end{pmatrix} \quad (3-2-1-3)$$

[Forward 法]

Forward 法では、基準となる系に対して各入力パラメータを摂動させた系での計算(摂動計算)を行い、入力パラメータの摂動に対する出力の応答から感度係数を算出する。すなわち、入力パラメータ x_i のみを δx_i だけ摂動させた入力パラメータを利用して(3-2-1-1)式および(3-2-1-2)式の演算を再度行うことで、すべての出力パラメータ y_j ($j=1,2,\dots,m$)は x_i の摂動の影響を受けることとなる。故に、その基準状態からの差分を利用することにより感度係数行列の i 行目の行ベクトルの要素を計算することができる。すなわち、

$$G_{ij} = \frac{\delta y_j}{\delta x_i} \quad (j=1,2,\dots,m) \quad (3-2-1-4)$$

を求めることができる。さらに、同様の操作をすべての入力パラメータに対して行うことで、感度係数行列 \mathbf{G} のすべての要素を求めることができる。また、Forward 法においては、入力パラメータを摂動させた系での計算を(3-2-1-1)式および(3-2-1-2)式の両方に基づき行うことが必要であるため、必然的に直接効果と間接効果を包括した形で感度係数が得られることとなる。

Forward 法は後述の Adjoint 法のような複雑な数学的操作を行うことなく感度解析を行うことができることから、最も一般的な感度解析手法であるといえる。しかしながら、感度係数行列 \mathbf{G} を評価するためには、全ての入力パラメータに対して摂動計算を実施する必要がある。そのため、入力パラメータの増加に伴い、Forward 法に基づく感度解析に必要な計算コストも増加することとなる。

[Adjoint 法]

Adjoint 法は、摂動論および本研究で検討した一般化摂動論に代表される感度解析手法である。Adjoint 法では、着目する方程式に対する随伴方程式を考える事により、その随伴方程式に従う随伴関数を利用して感度係数を計算する。詳しくは 3.2.3 項で述べるが、随伴方程式に従う随伴関数は重要度関数とも呼ばれ、重要度の大きさを表す関数となっている。なお、随伴方程式は着目する出力パラメータ毎に定義される。そのため、随伴関数も出力パラメータの数だけ存在することとなる。従って、Adjoint 法に基づく感度解析に必要な計算コストは出力パラメータ数の増加に伴い増大する。また、炉心解析においては、Adjoint 法に基づく感度解析を実施する際に、(3-2-1-1)式のみに対する随伴方程式を考える。このとき、感度係数は間接効果のみを含む形で得られるため、Adjoint 法においては明示的に間接効果と直接効果を考慮する必要がある。これに関しては 3.4 節で詳しく説明する。

以上には、Forward 法と Adjoint 法のそれぞれに基づく感度解析手法について簡単に説明した。これらの中で特に注目すべき点としては、

Forward 法：計算コストが入力パラメータ数に依存

Adjoint 法：計算コストが出力パラメータ数に依存

という点である。すなわち、Forward 法と Adjoint 法の計算コストに大きな違いがないとす

れば、(入力パラメータ数)<(出力パラメータ数)であるときには Forward 法を利用した方が効率的であり、また、(入力パラメータ数)>(出力パラメータ数)であるときには Adjoint 法を利用した方が効率的である。核計算においては、一般的に出力する炉心特性値数に比べて入力する断面積数の方が多い。従って、核計算においては Forward 法に比べ Adjoint 法の方が計算コストの観点から有効であると言える。ただし、Adjoint 法では 1 次近似を使用するため、非線形性の強いモデル(燃焼や熱水力フィードバック)では Forward 法に比べ精度が悪化する可能性があることに留意する必要がある。

3.2.2 輸送理論の基礎

本項では輸送理論の基礎として、輸送方程式について説明する[27]。

原子炉内の中性子の挙動はボルツマンの中性子輸送方程式により記述される。ここで、ボルツマンの中性子輸送方程式を次に示す。

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \\
 &= -\vec{\Omega} \nabla \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) - \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t) \\
 & \quad + \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) \\
 & \quad + \frac{\chi(\vec{r}, E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' v \Sigma_f(\vec{r}, E') \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}', t) \\
 & \quad + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)
 \end{aligned} \tag{3-2-2-1}$$

上式においては単位体積、単位エネルギー、単位立体角、単位時間あたりの中性子数のバランスを表す式となっている。また、各項の意味として、左辺第一項は中性子の増加率、右辺第一項は流入する中性子数、右辺第二項は物質の原子核との衝突する中性子数、右辺第三項は散乱反応によりそのエネルギーが変化する中性子数、右辺第四項は核分裂により生成される中性子数、そして右辺第五項が外部中性子源から発生する中性子数を表す。なお、上式では中性子同士の衝突を無視しているが、一般的な軽水炉の炉内中性子密度のオーダーは $\sim 10^{10}$ [neutrons/cm³]であり、原子核の数密度のオーダー $\sim 10^{19}$ [atoms/cm³] (ウラン)と比べると十分に小さいため、中性子同士の衝突を無視した(3-2-2-1)式により炉内の中性子の集団的挙動を精度良く予測することが可能である。また、(3-2-2-1)式において外部中性子源 $S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ がゼロの場合、中性子数密度の時間微分項がゼロとなる臨界状態でなければ定常状態の原子炉を考えることができない。一方で、核分裂の項を調整することにより超臨界や未臨界の体系に対しても仮想的な臨界状態とすることを考えれば、外部中性子源 $S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}, t)$ がゼロの定常状態を考えることができる。それが、(3-2-2-2)式で定義される k_{eff} 固有値方程式である。

$$\begin{aligned}
& \vec{\Omega} \nabla \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \\
&= \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \\
&+ \frac{\chi(\vec{r}, E)}{4\pi k_{eff}} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \psi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}')
\end{aligned} \tag{3-2-2-2}$$

上式、右辺第二項の分母にある k_{eff} は実効増倍率と呼ばれる無次元量で、この値が 1 より大きければ超臨界、1 ならば臨界、1 より小さければ未臨界となる。以降の議論では、原子炉の臨界性に依らず、定常状態の原子炉を考えて議論を行うため、(3-2-2-2)式を中性子輸送方程式と呼ぶこととする。

3.2.3 一般化摂動論の基礎

本項では、一般化摂動論を理解するための数学的基礎として、随伴方程式および随伴関数について説明する[28]。なお、「随伴」は数学の世界において「エルミート共役」を指すが、本研究において以下のような性質を持つものであると定義する。

いま、ある演算子 \mathbf{M} と関数 ϕ が、ある境界条件を満たすことと共に、次式を満たすように定義されたとする。

$$\mathbf{M}\phi = 0 \tag{3-2-3-1}$$

このとき、上式に対する随伴方程式は次式により定義される。

$$\mathbf{M}^\dagger \phi^\dagger = 0 \tag{3-2-3-2}$$

ここで、 \mathbf{M}^\dagger は演算子 \mathbf{M} に対する随伴演算子、 ϕ^\dagger は関数 ϕ に対する随伴関数である。この随伴関数 ϕ^\dagger は(3-2-3-2)式を満たすだけでなく、 ϕ に与えられた境界条件も満足する。また、随伴演算子 \mathbf{M}^\dagger は以下のような性質を持つ。

$$\langle \bar{\mathbf{u}} \mathbf{M} \bar{\mathbf{v}} \rangle = \langle \bar{\mathbf{v}} \mathbf{M}^\dagger \bar{\mathbf{u}} \rangle \tag{3-2-3-3}$$

上式において、ブラケットは全位相空間での積分を示す。すなわち、ブラケット内の関数に含まれるすべての変数についての積分を表す。また、 $\bar{\mathbf{v}}$ および $\bar{\mathbf{u}}$ は任意のベクトルである。以上に示した条件を満たすものとして随伴方程式を定義し、以降それに基づき議論を進めていくこととする。次に、中性子輸送方程式に対する随伴方程式の導出を示す[27]。

定常状態の原子炉における輸送方程式はボルツマンの輸送演算子 \mathbf{B} を用いて以下のように表される。

$$\begin{aligned}
\mathbf{B}\psi &= \left(\mathbf{A} - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F} \right) \psi = 0 \\
\mathbf{A} &= \vec{\Omega} \nabla + \Sigma_t(\vec{r}, E) - \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \\
\mathbf{F} &= \frac{\chi(\vec{r}, E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E')
\end{aligned} \tag{3-2-3-4}$$

上式において、 \mathbf{A} は漏れ、吸収および散乱を含む演算子、 \mathbf{F} は核分裂を含む演算子を意味する。ここで、(3-2-3-4)式に対する随伴方程式を下式のように表すこととする。

$$\mathbf{B}^\dagger \psi^\dagger = \left(\mathbf{A}^\dagger - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \right) \psi^\dagger = 0 \quad (3-2-3-5)$$

以降では、随伴輸送演算子 \mathbf{B}^\dagger を導出し、輸送方程式に対する随伴方程式を導出する。輸送演算子 \mathbf{B} は漏れ、衝突、散乱、核分裂等の物理現象に対応した各項の線形結合で表されるため、各項についてその随伴系の導出を行う。

まず、(3-2-3-4)式右辺第一項の漏れの項に対する随伴系の導出を行う。ただし、ここでは簡単のためにエネルギーについては考えないこととする。以降では、漏れの演算子 \mathbf{L} と次の関係を持つ随伴演算子 \mathbf{L}^\dagger の導出を行う。

$$\langle \psi^\dagger \mathbf{L} \psi \rangle = \langle \psi \mathbf{L}^\dagger \psi^\dagger \rangle \quad (3-2-3-6)$$

ただし、(3-2-3-6)式は(3-2-3-3)式で示した随伴の性質に基づいている。漏れの演算子 \mathbf{L} は、 $\mathbf{L} \equiv \bar{\mathbf{\Omega}} \cdot \nabla$ で定義されるため、(3-2-3-6)式は次のように表すことができる。

$$\langle \psi^\dagger \bar{\mathbf{\Omega}} \cdot \nabla \psi \rangle = \langle \psi \mathbf{L}^\dagger \psi^\dagger \rangle \quad (3-2-3-7)$$

ここで、次式の利用する。

$$\bar{\mathbf{\Omega}} \nabla (\psi \psi^\dagger) = \psi \bar{\mathbf{\Omega}} \nabla \psi^\dagger + \psi^\dagger \bar{\mathbf{\Omega}} \nabla \psi \quad (3-2-3-8)$$

上式を全空間で積分して、左辺に対してガウスの発散定理を用いると次式が得られる。

$$\int_S dS \int_{4\pi} d\bar{\mathbf{\Omega}} \bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{\Omega}} \psi \psi^\dagger = \int_V dV \int_{4\pi} d\bar{\mathbf{\Omega}} \psi \bar{\mathbf{\Omega}} \cdot \nabla \psi^\dagger + \int_V dV \int_{4\pi} d\bar{\mathbf{\Omega}} \psi^\dagger \bar{\mathbf{\Omega}} \cdot \nabla \psi \quad (3-2-3-9)$$

ただし、 S は全体系 V の境界の表面積、 $\bar{\mathbf{n}}$ はその表面に対する法線ベクトルである。(3-2-3-6)式が成立するためには上式左辺の面積積分がゼロになる必要がある。もし体系の外側が真空で外側から体系内に入射する中性子がゼロである場合、角度中性子束 ψ は境界条件として以下の条件を満足することになる。

$$\psi(\bar{\mathbf{r}}_{境界}, \bar{\mathbf{\Omega}}_m) = 0 \quad \bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{\Omega}}_m < 0 \quad (3-2-3-10)$$

これは境界面での入射角度中性子がゼロであることを表している。これに対応する形で随伴角度中性子束は境界条件として以下を満たす必要がある。

$$\psi^\dagger(\bar{\mathbf{r}}_{境界}, \bar{\mathbf{\Omega}}_m) = 0 \quad \bar{\mathbf{n}} \cdot \bar{\mathbf{\Omega}}_m > 0 \quad (3-2-3-11)$$

これは境界面から出て行く随伴角度中性子束がゼロであることを示している。真空境界条件において、随伴角度中性子束が(3-2-3-11)式の境界条件を満足する場合、(3-2-3-9)式より下式を導くことができる。

$$\psi \bar{\mathbf{\Omega}} \nabla \psi^\dagger = -\psi^\dagger \bar{\mathbf{\Omega}} \nabla \psi \quad (3-2-3-12)$$

すなわち、以下の関係が成立する。

$$\mathbf{L}^\dagger = -\bar{\mathbf{\Omega}} \nabla = -\mathbf{L} \quad (3-2-3-13)$$

次に、右辺第二項の衝突項の随伴系の導出を行う。対象の演算子を \mathbf{T} とするとその随伴演算子は \mathbf{T}^\dagger と表せる。これらの関係は下式により表すことができる。

$$\langle \psi^\dagger \mathbf{T} \psi \rangle = \langle \psi^\dagger \Sigma_i \psi \rangle = \langle \psi \Sigma_i \psi^\dagger \rangle = \langle \psi \mathbf{T}^\dagger \psi^\dagger \rangle \quad (3-2-3-14)$$

すなわち、演算子 \mathbf{T} は自己随伴であり、随伴演算子 \mathbf{T}^\dagger は以下のように表せる。

$$\mathbf{T}^\dagger = \mathbf{T} \quad (3-2-3-15)$$

続いて、右辺第三項の散乱項の随伴系の導出を行う。なお、ここでは簡単のため、無限

均質体系で考えることとする。以降では、散乱を表す演算子を $\mathbf{S}_{scatter}$ と以下の関係を持つ随伴演算子 $\mathbf{S}_{scatter}^\dagger$ を導く。

$$\langle \psi^\dagger \mathbf{S}_{scatter} \psi \rangle = \langle \psi \mathbf{S}_{scatter}^\dagger \psi^\dagger \rangle \quad (3-2-3-16)$$

ただし、(3-2-3-16)式は(3-2-3-3)式の随伴の性質に基づいている。(3-2-3-16)式左辺の積分を実行することで下式を得る。

$$(\text{左辺}) = \int_0^\infty dE \int_{4\pi} d\bar{\Omega} \psi^\dagger(E, \bar{\Omega}) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}) \psi(E', \bar{\Omega}') \quad (3-2-3-17)$$

さらに、(3-2-3-17)式を変形することで下式を得る。

$$\begin{aligned} (\text{左辺}) &= \int_0^\infty dE \int_{4\pi} d\bar{\Omega} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \psi^\dagger(E, \bar{\Omega}) \Sigma_s(E' \rightarrow E, \bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}) \psi(E', \bar{\Omega}') \\ &= \int_0^\infty dE \int_{4\pi} d\bar{\Omega} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \psi(E', \bar{\Omega}') \Sigma_s(E' \rightarrow E, \bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}) \psi^\dagger(E, \bar{\Omega}) \end{aligned} \quad (3-2-3-18)$$

ここで、(3-2-3-18)式の E と E' を、 $\bar{\Omega}$ と $\bar{\Omega}'$ をそれぞれ入れ替えることで、下式が得られる。

$$(\text{左辺}) = \int_0^\infty dE \int_{4\pi} d\bar{\Omega} \psi(E, \bar{\Omega}) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \Sigma_s(E \rightarrow E', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}') \psi^\dagger(E', \bar{\Omega}') \quad (3-2-3-19)$$

一方、右辺の積分を実行することで下式を得る。

$$(\text{右辺}) = \int_0^\infty dE \int_{4\pi} d\bar{\Omega} \psi(E, \bar{\Omega}) \mathbf{S}_{scatter}^\dagger \psi^\dagger(E, \bar{\Omega}) \quad (3-2-3-20)$$

(3-2-3-19)式と(3-2-3-20)式の比較により、散乱演算子 $\mathbf{S}_{scatter}$ に対する随伴演算子 $\mathbf{S}_{scatter}^\dagger$ が得られ、

$$\mathbf{S}_{scatter}^\dagger = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \Sigma_s(E \rightarrow E', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}') \quad (3-2-3-21)$$

となる。

続いて核分裂項の随伴系の導出を行う。なお、ここでも簡単のために無限均質体系において考えることとする。以降では、核分裂を表す演算子 \mathbf{F} と以下のような関係を持つ随伴演算子 \mathbf{F}^\dagger の導出を行う。

$$\langle \psi^\dagger \mathbf{F} \psi \rangle = \langle \psi \mathbf{F}^\dagger \psi^\dagger \rangle \quad (3-2-3-22)$$

ただし、(3-2-3-22)式は(3-2-3-3)式の随伴の性質に基づいている。(3-2-3-22)式左辺の積分を実行することで下式を得る。

$$(\text{左辺}) = \int_0^\infty dE \int_{4\pi} d\bar{\Omega} \frac{\chi(E)}{4\pi} \psi^\dagger(E, \bar{\Omega}) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \nu \Sigma_f(E') \psi(E', \bar{\Omega}') \quad (3-2-3-23)$$

ここで、(3-2-3-23)式の演算の順序を入れ替え、 E と E' 、 $\bar{\Omega}$ と $\bar{\Omega}'$ をそれぞれ入れ替えることで下式を導く。

$$(\text{左辺}) = \int_0^\infty dE \int_{4\pi} d\bar{\Omega} \nu \Sigma_f(E) \psi(E, \bar{\Omega}) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \frac{\chi(E')}{4\pi} \psi^\dagger(E', \bar{\Omega}') \quad (3-2-3-24)$$

一方、右辺の積分を実行することで下式を得る。

$$(\text{右辺}) = \int_0^\infty dE \int_{4\pi} d\bar{\Omega} \psi(E, \bar{\Omega}) \mathbf{F}^\dagger \psi^\dagger(E, \bar{\Omega}) \quad (3-2-3-25)$$

ここで、(3-2-3-24)式と(3-2-3-25)式の比較により核分裂の演算子 \mathbf{F} に対する随伴演算子 \mathbf{F}^\dagger が得られ、

$$\mathbf{F}^\dagger = \nu \Sigma_f(E) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \frac{\chi(E')}{4\pi} \quad (3-2-3-26)$$

となる。

以上で導出した随伴演算子を利用して、(3-2-3-4)式の輸送方程式に対する随伴方程式を以下にまとめる。まず、前述の輸送方程式は輸送演算子 \mathbf{B} を用いて以下のように記述される。

$$\begin{aligned} \mathbf{B}\psi &= \left(\mathbf{A} - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F} \right) \psi = 0 \\ \mathbf{A} &= \bar{\Omega} \nabla + \Sigma_t(\bar{\mathbf{r}}, E) - \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \Sigma_s(\bar{\mathbf{r}}, E' \rightarrow E, \bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}) \quad (3-2-3-4)(再掲) \\ \mathbf{F} &= \frac{\chi(\bar{\mathbf{r}}, E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \nu \Sigma_f(\bar{\mathbf{r}}, E') \end{aligned}$$

この輸送方程式に対する随伴方程式は、本項で導出した随伴演算子を代入することにより、以下により記述されることが分かる。

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^\dagger \psi^\dagger &= \left(\mathbf{A}^\dagger - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \right) \psi^\dagger = 0 \\ \mathbf{A}^\dagger &= -\bar{\Omega} \nabla + \Sigma_t(\bar{\mathbf{r}}, E) - \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \Sigma_s(\bar{\mathbf{r}}, E \rightarrow E', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}') \quad (3-2-3-27) \\ \mathbf{F}^\dagger &= \nu \Sigma_f(\bar{\mathbf{r}}, E) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \frac{\chi(\bar{\mathbf{r}}, E')}{4\pi} \end{aligned}$$

中性子輸送方程式は、ある位置、あるエネルギー、ある角度で飛行している中性子に対して、その正味の中性子消滅量(漏れ・衝突)と中性子生成量(核分裂・散乱)のバランスを表す。一方で、中性子輸送方程式の随伴方程式では、随伴散乱行列演算子および随伴核分裂行列演算子が輸送方程式の転置行列になっていることから、随伴方程式はある位置、あるエネルギー、ある角度で飛行している中性子が、どこから飛んできたのかを表現する方程式であると解釈できる。一般的に、炉心中心部のような多くの中性子の発生している領域において制御棒の挿入や冷却材でのボイド(気泡)の発生などの反応度変化が生じた場合には、炉心表面部などの炉内の核分裂連鎖反応にあまり貢献していない空間領域においてそのような事象が生じた場合に比べ、原子炉により大きな正負の反応度を与えると推察される。このとき、原子炉内の中性子の挙動を遡って追跡すれば、その多くは炉心中心部のような多くの中性子が発生している領域、すなわち重要度の大きい領域に帰着すると考えられる。それ故、中性子がどのような反応を経て、どこから来たのかを表す随伴方程式によって記述される随伴角度中性子束は重要度関数(インポートランス関数)と呼ばれる。

3.3 断面積転置法

本研究では通常の輸送計算コードを solver として利用し、一般化摂動論の計算を行う手法の開発を試みた。そこで、(一般化)摂動論の計算を通常の輸送計算を利用して行なう手法が不可欠である。本研究では、本節で説明する断面積転置法を利用することで、通常の輸送計算コードを用いて(一般化)摂動論の計算を行なうことを可能とした。本節ではこの断面積転置法について説明する。

Forward 計算において取り扱う輸送方程式は下式により表される。

$$\mathbf{B}\psi = \left(\mathbf{A} - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F} \right) \psi = 0$$

$$\mathbf{A} = \bar{\Omega} \nabla + \Sigma_t(\bar{\mathbf{r}}, E) - \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \Sigma_s(\bar{\mathbf{r}}, E' \rightarrow E, \bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}) \quad (3-2-3-4)(再掲)$$

$$\mathbf{F} = \frac{\chi(\bar{\mathbf{r}}, E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \nu \Sigma_f(\bar{\mathbf{r}}, E')$$

また、これに対する随伴方程式は

$$\mathbf{B}^\dagger \psi^\dagger = \left(\mathbf{A}^\dagger - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \right) \psi^\dagger = 0$$

$$\mathbf{A}^\dagger = -\bar{\Omega} \nabla + \Sigma_t(\bar{\mathbf{r}}, E) - \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \Sigma_s(\bar{\mathbf{r}}, E \rightarrow E', \bar{\Omega} \rightarrow \bar{\Omega}')$$

$$\mathbf{F}^\dagger = \nu \Sigma_f(\bar{\mathbf{r}}, E) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \frac{\chi(\bar{\mathbf{r}}, E')}{4\pi}$$

(3-2-3-27)(再掲)

である。これらの方程式を空間、エネルギーおよび中性子の飛行方向について離散化すると、下式のように記述することができる。ただし、以下では中性子の散乱を等方として扱うこととする。

$$\bar{\Omega}_m \nabla \psi_{i,g,m} + \Sigma_{t,i,g} \psi_{i,g,m} - \frac{1}{4\pi} \sum_{g'}^{NG} \Sigma_{s,i,g' \rightarrow g} \sum_{m'} w_m \psi_{i,g',m'} - \frac{\chi_{i,g}}{4\pi k_{eff}} \sum_{g'}^{NG} \nu \Sigma_{f,i,g'} \sum_{m'} w_m \psi_{i,g',m'} = 0 \quad (3-3-1)$$

$$-\bar{\Omega}_m \nabla \psi_{i,g,m}^\dagger + \Sigma_{t,i,g} \psi_{i,g,m}^\dagger - \frac{1}{4\pi} \sum_{g'}^{NG} \Sigma_{s,i,g \rightarrow g'} \sum_{m'} w_m \psi_{i,g',m'}^\dagger - \frac{\nu \Sigma_{f,i,g}}{k_{eff}} \sum_{g'}^{NG} \frac{\chi_{i,g'}}{4\pi} \sum_{m'} w_m \psi_{i,g',m'}^\dagger = 0 \quad (3-3-2)$$

なお、(3-3-1)式は離散化された輸送方程式、(3-3-2)式は離散化された随伴方程式である。これらと比較することにより、(3-3-1)式と(3-3-2)式が非常に良く似た形になっていることが分かる。一方、これら2つの式の相違点として以下の3点が挙げられる。

- ①左辺第1項(漏れの項)の符号
- ②左辺第3項(散乱項)の散乱演算子
- ③左辺第4項(生成項)の核分裂演算子

断面積転置法では上記の相違点に対して、入力断面積を操作することで、Forward 計算と同じアルゴリズムを用いて、Adjoint 計算を行う。以下では、この操作についての説明を行う。まず初めに②と③の相違点に着目する。

Forward 計算において散乱項は以下の行列計算により計算することができる。

$$\begin{pmatrix} \sum_{g'}^{NG} \Sigma_{s,i,g' \rightarrow 1} \phi_{i,g'} \\ \sum_{g'}^{NG} \Sigma_{s,i,g' \rightarrow 2} \phi_{i,g'} \\ \vdots \\ \sum_{g'}^{NG} \Sigma_{s,i,g' \rightarrow NG} \phi_{i,g'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma_{s,i,1 \rightarrow 1} & \Sigma_{s,i,2 \rightarrow 1} & \cdots & \Sigma_{s,i,NG \rightarrow 1} \\ \Sigma_{s,i,1 \rightarrow 2} & \Sigma_{s,i,2 \rightarrow 2} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \Sigma_{s,i,1 \rightarrow NG} & & & \Sigma_{s,i,NG \rightarrow NG} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{i,1} \\ \phi_{i,2} \\ \vdots \\ \phi_{i,NG} \end{pmatrix} = \mathbf{S}_{scatter,i} \boldsymbol{\Phi}_i \quad (3-3-3)$$

これに対し、Adjoint 計算における散乱項は以下の行列計算により計算可能である。

$$\begin{pmatrix} \sum_{g'}^{NG} \Sigma_{s,i,1 \rightarrow g'} \phi_{i,g'}^\dagger \\ \sum_{g'}^{NG} \Sigma_{s,i,2 \rightarrow g'} \phi_{i,g'}^\dagger \\ \vdots \\ \sum_{g'}^{NG} \Sigma_{s,i,NG \rightarrow g'} \phi_{i,g'}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Sigma_{s,i,1 \rightarrow 1} & \Sigma_{s,i,1 \rightarrow 2} & \cdots & \Sigma_{s,i,1 \rightarrow NG} \\ \Sigma_{s,i,2 \rightarrow 1} & \Sigma_{s,i,2 \rightarrow 2} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \Sigma_{s,i,NG \rightarrow 1} & & & \Sigma_{s,i,NG \rightarrow NG} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{i,1}^\dagger \\ \phi_{i,2}^\dagger \\ \vdots \\ \phi_{i,NG}^\dagger \end{pmatrix} = \mathbf{S}_{scatter,i}^\dagger \boldsymbol{\Phi}_i^\dagger \quad (3-3-4)$$

ここで、(3-3-3)式と(3-3-4)式の比較により、散乱演算子 $\mathbf{S}_{scatter,i}$ と随伴散乱演算子 $\mathbf{S}_{scatter,i}^\dagger$ が転置行列になっていることが分かる。

また、Forward 計算において生成項は以下の行列計算により計算することが可能である。

$$\begin{pmatrix} \chi_{i,1} \sum_{g'}^{NG} \nu \Sigma_{f,i,g'} \phi_{i,g'} \\ \chi_{i,2} \sum_{g'}^{NG} \nu \Sigma_{f,i,g'} \phi_{i,g'} \\ \vdots \\ \chi_{i,NG} \sum_{g'}^{NG} \nu \Sigma_{f,i,g'} \phi_{i,g'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_{i,1} \nu \Sigma_{f,i,1} & \chi_{i,1} \nu \Sigma_{f,i,2} & \cdots & \chi_{i,1} \nu \Sigma_{f,i,NG} \\ \chi_{i,2} \nu \Sigma_{f,i,1} & \chi_{i,2} \nu \Sigma_{f,i,2} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \chi_{i,NG} \nu \Sigma_{f,i,1} & & & \chi_{i,NG} \nu \Sigma_{f,i,NG} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{i,1} \\ \phi_{i,2} \\ \vdots \\ \phi_{i,NG} \end{pmatrix} = \mathbf{S}_{fission,i} \boldsymbol{\Phi}_i \quad (3-3-5)$$

一方で、Adjoint 計算における生成項は以下の行列計算により計算可能である。

$$\begin{pmatrix} \nu\Sigma_{f,i,1} \sum_{g'}^{NG} \chi_{i,g'} \phi_{i,g'}^\dagger \\ \nu\Sigma_{f,i,2} \sum_{g'}^{NG} \chi_{i,g'} \phi_{i,g'}^\dagger \\ \vdots \\ \nu\Sigma_{f,i,NG} \sum_{g'}^{NG} \chi_{i,g'} \phi_{i,g'}^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nu\Sigma_{f,i,1} \chi_{i,1} & \nu\Sigma_{f,i,1} \chi_{i,2} & \cdots & \nu\Sigma_{f,i,1} \chi_{i,NG} \\ \nu\Sigma_{f,i,2} \chi_{i,1} & \nu\Sigma_{f,i,2} \chi_{i,2} & & \\ \vdots & & \ddots & \\ \nu\Sigma_{f,i,NG} \chi_{i,1} & & & \nu\Sigma_{f,i,NG} \chi_{i,NG} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{i,1}^\dagger \\ \phi_{i,2}^\dagger \\ \vdots \\ \phi_{i,NG}^\dagger \end{pmatrix} = \mathbf{S}_{fission,i}^\dagger \boldsymbol{\Phi}_i^\dagger \quad (3-3-6)$$

ここで、(3-3-5)式と(3-3-6)式を比較することで、核分裂演算子 $\mathbf{S}_{fission,i}$ と随伴核分裂演算子 $\mathbf{S}_{fission,i}^\dagger$ において生成断面積 $\nu\Sigma_{f,i,g}$ と核分裂スペクトル $\chi_{i,g}$ の扱いが逆になっていることが分かる。

上記の散乱演算子と核分裂演算子の取り扱いに準じて断面積データを転置することで、すなわち、散乱断面積の断面積データを転置し、核分裂断面積と核分裂スペクトルを入れ替えることで、Forward 計算と同じ計算アルゴリズムを用いて、Adjoint 計算を行うことが可能となる。しかし、①の相違点について考えなければならない。この相違点について考えるために、中性子の飛行方向 $\vec{\Omega}_m$ に対して逆方向を示すベクトル $\vec{\Omega}_m^{opposite}$ を定義する。 $\vec{\Omega}_m^{opposite}$ は $\vec{\Omega}_m$ に対する逆ベクトルであるので、下式を満たす。

$$\vec{\Omega}_m^{opposite} = -\vec{\Omega}_m \quad (3-3-7)$$

これを(3-3-2)式に代入することで、

$$\vec{\Omega}_m^{opposite} \nabla \psi_{i,g,m}^\dagger + \Sigma_{t,i,g} \psi_{i,g,m}^\dagger - \frac{1}{4\pi} \sum_{g'}^{NG} \Sigma_{s,i,g \rightarrow g'} \phi_{i,g'}^\dagger - \frac{\nu\Sigma_{f,i,g}}{4\pi k_{eff}} \sum_{g'}^{NG} \chi_{i,g} \phi_{i,g'}^\dagger = 0 \quad (3-3-8)$$

従って、行列転置法を用いた計算により得られた随伴中性子束の角度分布を、逆の飛行方向として解釈すれば①の相違点については問題なく計算することができる。すなわち、Adjoint 計算の場合は、Forward 計算の際に境界条件を与えられる角度中性子束の向きを逆とした上で、放出随伴角度中性子束 ψ_{out}^\dagger から入射随伴角度中性子束 ψ_m^\dagger を計算することと解釈すればよい。しかしながら、既存の計算コードで断面積転置法により Adjoint 計算を行う際には以下の点に留意しなければならない。

Forward 計算において、べき乗法を用いて臨界計算を行う際には、中性子束分布を計算する内部反復と実効増倍率を計算する外部反復を繰り返して計算を行うこととなる。このとき、外部反復では次式により反復回ごとに実効増倍率を更新する。

$$\lambda_0^{(m)} = \frac{\langle \mathbf{F}\mathbf{v}^{(m)} \rangle}{\langle \mathbf{A}\mathbf{v}^{(m)} \rangle} = \frac{\langle \mathbf{F}\mathbf{v}^{(m)} \rangle}{\left\langle \frac{1}{\lambda_0^{(m-1)}} \mathbf{F}\mathbf{v}^{(m-1)} \right\rangle} \quad (3-3-9)$$

上式は、空間、エネルギーおよび立体角について離散化した角度中性子束と断面積を用いて以下のように表すことができる。

$$\lambda_0^{(m)} = \frac{\langle \mathbf{F} \boldsymbol{\psi}^{(m)} \rangle}{\left\langle \frac{1}{\lambda_0^{(m-1)}} \mathbf{F} \boldsymbol{\psi}^{(m-1)} \right\rangle} = \frac{\sum_i^{NL} V_i \sum_g^{NG} \chi_{i,g} \sum_{g'}^{NG} \nu \Sigma_{f,i,g'} \sum_m W_m \boldsymbol{\psi}_{i,g',m}^{(m)}}{\lambda_0^{(m-1)} \sum_i^{NL} V_i \sum_g^{NG} \chi_{i,g} \sum_{g'}^{NG} \nu \Sigma_{f,i,g'} \sum_m W_m \boldsymbol{\psi}_{i,g',m}^{(m-1)}} \quad (3-3-10)$$

このとき、分母と分子に現れる各領域の核分裂スペクトルの和は 1 となる。すなわち、下式が成り立つ。

$$\sum_g^{NG} \chi_{i,g} = 1 \quad (3-3-11)$$

従って、一般的には Forward 計算を行う場合、(3-3-10)式として下式を代用する。

$$\lambda_0^{(m)} = \frac{\langle \mathbf{F} \boldsymbol{\psi}^{(m)} \rangle}{\left\langle \frac{1}{\lambda_0^{(m-1)}} \mathbf{F} \boldsymbol{\psi}^{(m-1)} \right\rangle} = \frac{\sum_i^{NL} V_i \sum_{g'}^{NG} \nu \Sigma_{f,i,g'} \sum_m W_m \boldsymbol{\psi}_{i,g',m}^{(m)}}{\lambda_0^{(m-1)} \sum_i^{NL} V_i \sum_{g'}^{NG} \nu \Sigma_{f,i,g'} \sum_m W_m \boldsymbol{\psi}_{i,g',m}^{(m-1)}} \quad (3-3-12)$$

一方、行列転置法を用いた Adjoint 計算の場合、実効増倍率の更新は下式により行う。

$$\lambda_0^{(m)} = \frac{\langle \mathbf{F}^\dagger \boldsymbol{\psi}^{\dagger(m)} \rangle}{\left\langle \frac{1}{\lambda_0^{(m-1)}} \mathbf{F}^\dagger \boldsymbol{\psi}^{\dagger(m-1)} \right\rangle} = \frac{\sum_i^{NL} V_i \sum_g^{NG} \nu \Sigma_{f,i,g} \sum_{g'}^{NG} \chi_{i,g'} \sum_m W_m \boldsymbol{\psi}_{i,g',m}^{\dagger(m)}}{\lambda_0^{(m-1)} \sum_i^{NL} V_i \sum_g^{NG} \nu \Sigma_{f,i,g} \sum_{g'}^{NG} \chi_{i,g'} \sum_m W_m \boldsymbol{\psi}_{i,g',m}^{\dagger(m-1)}} \quad (3-3-13)$$

この場合、各領域の生成断面積の和が必ずしも 1 になるとは限らないため、Adjoint 計算においては Forward 計算で用いた(3-3-12)式で示した簡略化を行うことができない。従って、Forward 計算における実効増倍率の更新に(3-3-12)式を用いているコードにおいて、断面積転置法により Adjoint 計算を行う際には生成断面積を規格化する必要がある。以下では、この規格化について説明する。

領域 i 、エネルギー群 g の規格化後の生成断面積を $\nu \Sigma'_{f,i,g}$ 、領域 i 、エネルギー群 g の規格化後の核分裂スペクトルを $\chi'_{i,g}$ とすると、これらの規格化は以下のように行われる。

$$\nu \Sigma'_{f,i,g} = \frac{\nu \Sigma_{f,i,g}}{\sum_{g'} \nu \Sigma_{f,i,g'}} \quad (3-3-14)$$

$$\chi'_{i,g} = \chi_{i,g} \sum_{g'} \nu \Sigma_{f,i,g'} \quad (3-3-15)$$

以上の規格化を行った上、規格化後の生成断面積と核分裂スペクトルを転置することで、既存の核計算コードにおいても断面積転置法を適用することができる。

以上において、断面積転置法による Adjoint 計算手法について説明した。これにより、事前に断面積データを転置することで、Forward 計算と同じアルゴリズムを用いて Adjoint 計算を行うことができる。

3.4 輸送理論に基づく一般化摂動論の導出

本節では前述の感度係数を輸送理論に基づく一般化摂動計算により計算する手法について説明する[29]。ただし、3.2.1項では絶対感度係数を例に取り感度解析手法の説明を行なったが、ここでは相対感度係数を計算する方法について説明する。なお、これらの違いは断面積および炉心特性の変化量を絶対量として計算するか、相対量として計算するかの違いのみであり、本質的には同等である。

3.2.3項で述べたように、輸送方程式に対する随伴方程式を解くことで得られる随伴中性子束を利用すれば、核分裂連鎖反応に対しての重要度、すなわち、反応度に対する重要度を表すことができる。故に、これを利用することで、反応度に対する感度係数を求めることができる。しかしながら、反応度以外の物理量、たとえば核分裂反応率比や燃料棒相対出力などに対する重要度関数は輸送方程式の随伴方程式を解くだけでは求めることができない。そこで、一般化摂動論を利用することで、反応度以外の物理量についても重要度関数を求めることを考える。その手法について本節で説明を行う。なお、本節では以下のように定義される反応率比 R に対する感度解析手法について説明する。

$$R = \frac{\langle \Sigma_1 \psi \rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} \quad (3-4-1)$$

ただし、(3-4-1)式において、 Σ_1 および Σ_2 は任意の断面積、 ψ は角度中性子束、ブラケットは全位相空間に対する積分を表す。(3-4-1)式で定義された反応率比 R に対する相対感度係数 G は次式で表される。

$$G = \frac{\delta R / R}{\delta \Sigma / \Sigma} = \frac{\langle \Sigma_2 \psi \rangle}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} \cdot \frac{\delta R}{\delta \Sigma} \cdot \Sigma \quad (3-4-2)$$

(3-4-2)式右辺の微分を計算することで、(3-4-2)式はさらに次ように変形される。

$$\begin{aligned} G &= \frac{\langle \Sigma_2 \psi \rangle}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} \left\{ \frac{\delta \langle \Sigma_1 \psi \rangle}{\delta \Sigma \langle \Sigma_2 \psi \rangle} \right\} \Sigma \\ &= \frac{\langle \Sigma_2 \psi \rangle}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} \left\{ \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_1}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} + \frac{\left\langle \Sigma_1 \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} - \frac{\langle \Sigma_1 \psi \rangle \left\langle \frac{\delta \Sigma_2}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle^2} - \frac{\langle \Sigma_1 \psi \rangle \left\langle \Sigma_2 \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle^2} \right\} \Sigma \\ &= \left\{ \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_1}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_2}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} + \frac{\left\langle \Sigma_1 \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\left\langle \Sigma_2 \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} \right\} \Sigma \end{aligned} \quad (3-4-3)$$

3.2.1項でも述べたが、炉心特性値に対する断面積の感度は断面積の変化が直接的に炉心特性値に与える影響(直接効果)と断面積の変化が中性子束の変化を経て炉心特性値に与える影響(間接効果)から成る。ここで、(3-4-3)式に着目すると、右辺第一、二項は断面積 Σ_1 、 Σ_2 の摂動が反応率比 R に与える変化量を表しており、右辺第三、四項は断面積 Σ_1 、 Σ_2 の摂動

に起因する中性子束の変化を通じて反応率比 R に生じた変化量を表していることが分かる。なお、基準状態の計算において角度中性子束 ψ が得られ、また、 Σ_1 および Σ_2 が既知であることを考慮すれば、直接効果の項は容易に計算できることが分かる。具体的には、 $\delta\Sigma_1/\delta\Sigma$ および $\delta\Sigma_2/\delta\Sigma$ は摂動を加える断面積のみ 1 となる微分項であり、容易に求めることができる。一方、間接効果の項に含まれる $\delta\psi/\delta\Sigma$ は断面積の変化に対する角度中性子束の変化量を表すが、これを求めるためには断面積 $\delta\Sigma$ の摂動を与えた系における中性子束分布を再計算する必要がある。さらにこの計算は各摂動ごとに(異なる断面積に対する摂動ごとに)行なう必要があり、領域、核種、エネルギー群数の増加とともに計算すべき量が増加する。そこで、この間接効果を近似的に取り扱うことで、感度解析に必要となる計算コストの低減を図る。一般化摂動論では、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を導入することで $\delta\psi/\delta\Sigma$ の項を変形し、断面積を微小に変化させる摂動計算を行うこと無く間接効果を評価する。本節では、その変形を輸送理論に基づき導出し、一般化摂動論の計算原理について説明することとする。

いま、定常状態の原子炉が存在するとする。この時、この原子炉における輸送方程式は適当な実効増倍率によりバランスがとられ、(3-2-3-4)式を満たす。

$$\mathbf{B}\psi = \left(\mathbf{A} - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F} \right) \psi = 0$$

$$\mathbf{A} = \bar{\Omega} \nabla + \Sigma_t(\bar{\mathbf{r}}, E) - \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \Sigma_s(\bar{\mathbf{r}}, E' \rightarrow E, \bar{\Omega}' \rightarrow \bar{\Omega}) \quad (3-2-3-4)(再掲)$$

$$\mathbf{F} = \frac{\chi(\bar{\mathbf{r}}, E)}{4\pi} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \nu \Sigma_f(\bar{\mathbf{r}}, E')$$

ここで、体系内のある断面積が微小に変化したと仮定し、その微小変化後の輸送方程式を考える。断面積の変化により輸送演算子 \mathbf{B} と中性子束分布 ψ がそれぞれ $\delta\mathbf{B}$ 、 $\delta\psi$ 変化するが、その変化後も輸送方程式を満たすので、下式が成立する。

$$(\mathbf{B} + \delta\mathbf{B})(\psi + \delta\psi) = 0 \quad (3-4-4)$$

上式を展開後、(3-2-3-4)式で示される $\mathbf{B}\psi = 0$ を代入し、さらに、2 次の微小項を無視することで下式が得られる。

$$\mathbf{B}\delta\psi + \delta\mathbf{B}\psi = 0 \quad (3-4-5)$$

ここで一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を導入し、(3-4-5)式の両辺に γ^\dagger を左から乗じ全空間、全エネルギーおよび全立体角で積分すると次の関係式が得られる。

$$\langle \gamma^\dagger \mathbf{B} \delta\psi \rangle + \langle \gamma^\dagger \delta\mathbf{B} \psi \rangle = 0 \quad (3-4-6)$$

(3-4-6)式左辺第一項に注目して、左辺第一項を断面積の微小変化分 $\delta\Sigma$ で除した後に、(3-2-3-3)式に示した随伴の性質を利用することで、

$$\left\langle \gamma^\dagger \mathbf{B} \frac{\delta\psi}{\delta\Sigma} \right\rangle = \left\langle \frac{\delta\psi}{\delta\Sigma} \mathbf{B}^\dagger \gamma^\dagger \right\rangle \quad (3-4-7)$$

を得る。なお、 \mathbf{B}^\dagger は輸送演算子 \mathbf{B} に対する随伴演算子である。また、ここで(3-2-3-3)式を再掲する。

$$\langle \bar{\mathbf{u}} \mathbf{M} \bar{\mathbf{v}} \rangle = \langle \bar{\mathbf{v}} \mathbf{M}^\dagger \bar{\mathbf{u}} \rangle \quad (3-2-3-3)(\text{再掲})$$

ここで、(3-4-6)式および(3-4-7)式より次の関係式を得る。

$$\left\langle \gamma^\dagger \frac{\delta \mathbf{B}}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle = - \left\langle \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \mathbf{B}^\dagger \gamma^\dagger \right\rangle \quad (3-4-8)$$

次に、発見的ではあるが、 $\mathbf{B}^\dagger \gamma^\dagger$ が次の関係式を満たすように設定する。

$$\mathbf{B}^\dagger \gamma^\dagger = \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} \quad (3-4-9)$$

(3-4-9)式を(3-4-8)式に代入すると、

$$\begin{aligned} \left\langle \gamma^\dagger \frac{\delta \mathbf{B}}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle &= - \left\langle \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \mathbf{B}^\dagger \gamma^\dagger \right\rangle \\ &= - \left\langle \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \left\{ \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} \right\} \right\rangle \\ &= - \frac{\left\langle \Sigma_1 \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} + \frac{\left\langle \Sigma_2 \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} \end{aligned} \quad (3-4-10)$$

となり、さらに(3-4-10)式の符号を変えれば、

$$- \left\langle \gamma^\dagger \frac{\delta \mathbf{B}}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle = \frac{\left\langle \Sigma_1 \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\left\langle \Sigma_2 \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} \quad (3-4-11)$$

が導かれる。この時、(3-4-11)式の右辺は(3-4-3)式右辺第三、四項の間接効果の項と一致する。ここで、(3-4-3)式を再掲する。

$$G = \left\{ \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_1}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_2}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} + \frac{\left\langle \Sigma_1 \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\left\langle \Sigma_2 \frac{\delta \psi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} \right\} \Sigma \quad (3-4-3)(\text{再掲})$$

従って、(3-4-11)式を(3-4-3)式に代入することで、感度係数を次式により表すことができる。

$$G = \left\{ \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_1}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_2}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} - \left\langle \gamma^\dagger \frac{\delta \mathbf{B}}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle \right\} \Sigma \quad (3-4-12)$$

このとき、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger は反応率比に対する重要度関数となっており、角度中性子束に対する空間、エネルギーおよび立体角についての重みとなる。なお、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger は物理的には、1個の中性子がある位置 $\bar{\mathbf{r}}$ 、エネルギー E 、角度 $\bar{\Omega}$ に投入された時に、反応率比 R をどれだけ変化させるかという意味を持つ。また、本節で示したように、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を導入することで $\delta\psi/\delta\Sigma$ の項を取り除くことができ、断面積ごとに微小変化後の角度中性子束 ψ を計算することなく感度係数を求めることが可能になる。

ここまでの説明において、発見的に次に再掲する(3-4-9)式を定義した。

$$\mathbf{B}^\dagger \gamma^\dagger = \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} \quad (3-4-9)(\text{再掲})$$

(3-4-9)式を満たす一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を利用することで、以上の導出に基づき感度係数を求めることが可能である。従って、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger が満たすべき方程式は(3-4-9)式に他ならない。以降では、これを一般化随伴方程式と呼ぶこととする。

3.5 ノイマン級数法

本節では、既存の輸送計算コードの固定源計算を利用して一般化随伴角度中性子束を計算するために必要となるノイマン級数法について説明する[30]。なお、以下ではノイマン級数法に基づく一般化随伴角度中性子束の計算手法に先立ち、一般化随伴角度中性子束計算における問題点とノイマン級数について簡単に説明することとする。

[一般化随伴角度中性子束計算における問題点]

前述のように、一般化随伴中性子束 γ^\dagger が従う一般化随伴方程式は(3-4-9)式により定義される。

$$\mathbf{B}^\dagger \gamma^\dagger = \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} \quad (3-4-9)(\text{再掲})$$

一方、3.2.3 項で示したように、随伴角度中性子束 ψ^\dagger は次式を満たす関数として定義される。

$$\mathbf{B}^\dagger \psi^\dagger = 0 \quad (3-2-3-27)(\text{再掲})$$

すなわち、一般化随伴方程式は輸送方程式の随伴方程式に源の項を付加した形で定義されていることが分かる。ここで、輸送演算子 \mathbf{B} に対する随伴演算子 \mathbf{B}^\dagger は次式により定義される。

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^\dagger &= \mathbf{A}^\dagger - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \\ \mathbf{A}^\dagger &= -\vec{\Omega} \nabla + \Sigma_t(\vec{\mathbf{r}}, E) - \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{\mathbf{r}}, E \rightarrow E', \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}') \\ \mathbf{F}^\dagger &= \nu \Sigma_f(\vec{\mathbf{r}}, E) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \frac{\chi(\vec{\mathbf{r}}, E')}{4\pi} \end{aligned} \quad (3-5-1)$$

随伴演算子 \mathbf{B}^\dagger が(3-5-1)式により定義されることを考慮すれば、輸送方程式の随伴方程式を満たす随伴角度中性子束 ψ^\dagger は(3-2-3-27)式を満たす固有ベクトルである。より厳密に言えば、(3-5-1)式中の実効増倍率 k_{eff} は(3-2-3-27)式を満足する最大固有値と一致し、随伴角度中性子束 ψ^\dagger はその最大固有値に対応する基本モードの固有ベクトルである。そのため、随伴角度中性子束 ψ^\dagger は一意に定まらず、規格化を行うことにより一意性を持たせることができる。一方、(3-4-9)式の一般化随伴方程式では、輸送方程式あるいはその随伴方程式を解くことにより得られた実効増倍率 k_{eff} を既知として扱い、また、(3-2-3-27)式の固有値方程式に源の項を加えるため、一般化随伴方程式を満たす一般化随伴角度中性子束は規格化を行うことなく一意に定まることとなる。

さて、(3-2-3-27)式の両辺を定数 α で乗じ、(3-4-9)式に足し合わせることを考えれば、次式が得られる。

$$\mathbf{B}^\dagger(\gamma^\dagger + a\psi^\dagger) = \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} \quad (3-5-2)$$

これは、(3-4-9)式を満たす関数が一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger のみではなく、(3-2-3-27)式を満たす随伴角度中性子束 ψ^\dagger 成分と一般化随伴角度中性子 γ^\dagger との和、すなわち、 $\gamma^\dagger + a\psi^\dagger$ もまた(3-4-9)式を満たすことを意味している。しかしながら、一般化随伴方程式を満たす $\gamma^\dagger + a\psi^\dagger$ は一般化随伴角度中性子 γ^\dagger の一意性の観点から一般化随伴方程式の解となりえない。従って、一般化随伴角度中性子 γ^\dagger は一般化随伴方程式の一意解を求める事によってのみ求める事ができる。そのため、(3-5-2)式を満たす解のうち、基本モード成分を含まない解($\alpha = 0$ となる解)を求めるための手法が必要となる。この手法の1つが本節で説明するノイマン級数法である。

[ノイマン級数]

下式で表される方程式について考える。

$$(\mathbf{I} - \mathbf{U})\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{c}} \quad (3-5-3)$$

ただし、 \mathbf{I} は単位行列、 \mathbf{U} は任意の正方行列である。ここで、以下のような式変形を行う。

$$\begin{aligned} (\mathbf{I} - \mathbf{U})\bar{\mathbf{x}} &= \bar{\mathbf{c}} \\ (\mathbf{U} - \mathbf{U}^2)\bar{\mathbf{x}} &= \mathbf{U}\bar{\mathbf{c}} \\ &\vdots \\ (\mathbf{U}^n - \mathbf{U}^{n+1})\bar{\mathbf{x}} &= \mathbf{U}^n\bar{\mathbf{c}} \end{aligned} \quad (3-5-4)$$

さらに、(3-5-4)式の両辺に対して総和をとれば、次式が得られる。

$$(\mathbf{I} - \mathbf{U}^{n+1})\bar{\mathbf{x}} = (\mathbf{I} + \mathbf{U} + \mathbf{U}^2 + \dots + \mathbf{U}^n)\bar{\mathbf{c}} \quad (3-5-5)$$

ここで、行列 \mathbf{U} のスペクトル半径が1未満であることを仮定した上で、 $n \rightarrow \infty$ の極限をとれば、(3-5-5)式は下式に変形することが出来る。

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{x}} &= \lim_{n \rightarrow \infty} (\mathbf{I} + \mathbf{U} + \mathbf{U}^2 + \dots + \mathbf{U}^n)\bar{\mathbf{c}} \\ &= \mathbf{Q}\bar{\mathbf{c}} \end{aligned} \quad (3-5-6)$$

このとき、級数 \mathbf{Q} がノイマン級数と呼ばれる。ノイマン級数法では、この原理を利用することで一般化随伴中性子束を求める。

[ノイマン級数法に基づく一般化随伴角度中性子束の計算手法]

ここまでの説明では、一般化随伴角度中性子束の計算における問題点とノイマン級数について説明した。次に、一般化随伴方程式に対してノイマン級数法を適用し、一般化随伴中性子束を計算する方法について説明する[31]。

一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger が従う一般化随伴方程式は下式によって記述される。

$$\left(\mathbf{A}^\dagger - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \right) \gamma^\dagger = \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} = Q^\dagger \quad (3-5-7)$$

ここで、演算子 \mathbf{A}^\dagger および \mathbf{F}^\dagger を行列とみなし、(3-5-7)式の両辺に対して逆行列 $(\mathbf{A}^\dagger)^{-1}$ を作用させることで下式を得る。

$$\left(\mathbf{I} - \frac{1}{k_{eff}} (\mathbf{A}^\dagger)^{-1} \mathbf{F}^\dagger \right) \gamma^\dagger = (\mathbf{A}^\dagger)^{-1} Q^\dagger \quad (3-5-8)$$

ここで、(3-5-8)式と(3-5-3)式が同じ形で表されていることが分かる。そこで、ノイマン級数を導入すると下式を導くことが出来る。

$$\begin{aligned} \gamma^\dagger &= \left(\mathbf{I} - \frac{1}{k_{eff}} (\mathbf{A}^\dagger)^{-1} \mathbf{F}^\dagger \right)^{-1} (\mathbf{A}^\dagger)^{-1} Q^\dagger \\ &= \left\{ \mathbf{I} + \frac{1}{k_{eff}} (\mathbf{A}^\dagger)^{-1} \mathbf{F}^\dagger + \left(\frac{1}{k_{eff}} (\mathbf{A}^\dagger)^{-1} \mathbf{F}^\dagger \right)^2 + \dots \right\} (\mathbf{A}^\dagger)^{-1} Q^\dagger \\ &= \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{k_{eff}} (\mathbf{A}^\dagger)^{-1} \mathbf{F}^\dagger \right)^n \right\} (\mathbf{A}^\dagger)^{-1} Q^\dagger \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n^\dagger \end{aligned} \quad (3-5-9)$$

ただし、(3-5-9)式中の γ_n^\dagger は次式により定義される。

$$\gamma_n^\dagger = \left(\frac{1}{k_{eff}} (\mathbf{A}^\dagger)^{-1} \mathbf{F}^\dagger \right)^n (\mathbf{A}^\dagger)^{-1} Q^\dagger \quad (3-5-10)$$

すなわち、(3-5-9)式および(3-5-10)式に基づくことで、一般化随伴角度中性子束を得ることができる。また、さらにわかりやすい形で表記すれば、これらの計算は次式に落とし込まれる。

$$\begin{aligned} \gamma^\dagger &= \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n^\dagger \\ \mathbf{A}^\dagger \gamma_0^\dagger &= Q^\dagger \\ \mathbf{A}^\dagger \gamma_{n+1}^\dagger &= \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \gamma_n^\dagger \end{aligned} \quad (3-5-11)$$

なお、以上の式変形においては、源の項 Q^\dagger に基本モード成分(最大固有値に対応する成分)が含まれていないという条件と、行列 \mathbf{U} に相当する演算子行列のスペクトル半径が 1 未満であること、すなわち下式が成立する仮定を用いた。

$$\rho \left\{ \frac{1}{k_{eff}} (\mathbf{A}^\dagger)^{-1} \mathbf{F}^\dagger \right\} < 1 \quad (3-5-12)$$

以上が一般化随伴中性子束の計算におけるノイマン級数法の基本原理である。ただし、数値計算においてノイマン級数法を実装する場合、打ち切り誤差等の数値計算誤差により一般化随伴角度中性子束の各項 γ_n^\dagger に基本モードの随伴角度中性子束成分が混入する可能性がある。その場合、上述の理由により正しい一般化随伴角度中性子束が得られなくなるため、一般化随伴角度中性子束計算において随伴角度中性子束成分を除去する処理が必要となる。

ノイマン級数法を利用した一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger の計算においては、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger 中に含まれる基本モード成分を除去するために、各 γ_n^\dagger に対して随伴角度中性子束成分を除去する処理を行う。この処理においては、次式に示される一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger の性質を利用する。

$$\langle \psi \mathbf{F}^\dagger \gamma^\dagger \rangle = 0 \quad (3-5-13)$$

以降では、基本モード成分除去手法の説明のため、ノイマン級数の各項を次のように表すこととする。

$$\varepsilon_n^\dagger = \gamma_n^\dagger + \alpha_n \cdot \psi^\dagger \quad (3-5-14)$$

ただし、 α_n は任意定数であり、ノイマン級数の各項は求めるべき一般化随伴角度中性子束成分と基本モード成分によりなることを意味する。ここで、(3-5-14)式両辺に演算子 \mathbf{F}^\dagger を作用させた後、左から角度中性子束 ψ を乗じて、全位相空間についての積分を行うことで下式を得る。

$$\langle \psi \mathbf{F}^\dagger \varepsilon_n^\dagger \rangle = \langle \psi \mathbf{F}^\dagger \gamma_n^\dagger \rangle + \alpha_n \langle \psi \mathbf{F}^\dagger \psi^\dagger \rangle \quad (3-5-15)$$

さらに、(3-5-13)式の性質を利用することで、数値計算により得られた解 ε_n^\dagger から基本モード成分を含まない一般化随伴角度中性子束の n 番目の項 γ_n^\dagger を次式から求めることができる。

$$\gamma_n^\dagger = \varepsilon_n^\dagger - \frac{\langle \psi \mathbf{F}^\dagger \varepsilon_n^\dagger \rangle}{\langle \psi \mathbf{F}^\dagger \psi^\dagger \rangle} \psi^\dagger \quad (3-5-16)$$

ここまで説明した手法に基づけば、以下の手順により一般化随伴角度中性子束を計算することができる。

$$\gamma^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n^\dagger \quad (3-5-17)$$

$$\mathbf{A}^\dagger \varepsilon_0^\dagger = \mathbf{Q}^\dagger \quad (3-5-18)$$

$$\mathbf{A}^\dagger \varepsilon_n^\dagger = \frac{1}{k} \mathbf{F}^\dagger \gamma_{n-1}^\dagger \quad (n \geq 1) \quad (3-5-19)$$

$$\gamma_n^\dagger = \varepsilon_n^\dagger - \frac{\langle \psi \mathbf{F}^\dagger \varepsilon_n^\dagger \rangle}{\langle \psi \mathbf{F}^\dagger \psi^\dagger \rangle} \psi^\dagger \quad (3-5-20)$$

しかしながら、(3-5-17)式から(3-5-20)式において、源の項 \mathbf{Q}^\dagger 及び一般化随伴角度中性子束の n 番目の項 γ_n^\dagger は正負の分布を持つ値である。輸送計算を行う際、外部中性子源として負の値を用いると計算が不安定になるという問題点がある。従って、この不安定化を避ける

ため、以下のように外部中性子源を正負で場合分けし、これらを別々に計算する。

$$\gamma^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \gamma_n^\dagger \quad (3-5-21)$$

$$\mathbf{A}^\dagger \varepsilon_{0+}^\dagger = Q_+^\dagger \quad (3-5-22)$$

$$\mathbf{A}^\dagger \varepsilon_{0-}^\dagger = |Q_-^\dagger| \quad (3-5-23)$$

$$\varepsilon_0^\dagger = \varepsilon_{0+}^\dagger - \varepsilon_{0-}^\dagger \quad (3-5-24)$$

$$\mathbf{A}^\dagger \varepsilon_{n+}^\dagger = \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \gamma_{(n-1)+}^\dagger \quad (n \geq 1) \quad (3-5-25)$$

$$\mathbf{A}^\dagger \varepsilon_{n-}^\dagger = \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger |\gamma_{(n-1)-}^\dagger| \quad (n \geq 1) \quad (3-5-26)$$

$$\varepsilon_n^\dagger = \varepsilon_{n+}^\dagger - \varepsilon_{n-}^\dagger \quad (3-5-27)$$

$$\gamma_n^\dagger = \varepsilon_n^\dagger - \frac{\langle \psi \mathbf{F}^\dagger \varepsilon_n^\dagger \rangle}{\langle \psi \mathbf{F}^\dagger \psi^\dagger \rangle} \psi^\dagger \quad (3-5-28)$$

(3-5-21)式から(3-5-28)式に示された計算を行うことで、随伴角度中性子束 ψ^\dagger 成分を取り除いた真の一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を得ることができる。しかしながら、(3-5-21)式から(3-5-28)式に基づき一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を計算するためには、角度成分ごとに基本モード成分除去の処理を行う必要がある。MOC計算では、極角および方位角に対して多くのCharacteristics Lineを引くことで多くの角度成分を考慮しているため、すべての角度成分に対して基本モード成分除去処理を行うことは使用メモリ量の観点から実用的な方法とは言えない。一方、拡散計算、あるいは非等方散乱を考慮しない輸送計算においては、一般化随伴角度中性子 γ^\dagger の代わりに一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger を用いることで、以下のように簡略化することが可能である。ただし、以下ではブラケットを全空間および全エネルギーでの積分、 Γ_n^\dagger を一般化随伴全中性子束の n 番目の項、 E^\dagger は随伴全中性子束 ϕ^\dagger 成分を含む一般化随伴全中性子束を意味する。

$$\Gamma^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \Gamma_n^\dagger \quad (3-5-29)$$

$$\mathbf{A}^\dagger E_{0+}^\dagger = Q_+^\dagger \quad (3-5-30)$$

$$\mathbf{A}^\dagger E_{0-}^\dagger = |Q_-^\dagger| \quad (3-5-31)$$

$$E_0^\dagger = E_{0+}^\dagger - E_{0-}^\dagger \quad (3-5-32)$$

$$\mathbf{A}^\dagger E_{n+}^\dagger = \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \Gamma_{(n-1)+}^\dagger \quad (n \geq 1) \quad (3-5-33)$$

$$\mathbf{A}^\dagger E_{n-}^\dagger = \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger |\Gamma_{(n-1)-}^\dagger| \quad (n \geq 1) \quad (3-5-34)$$

$$E_n^\dagger = E_{n+}^\dagger - E_{n-}^\dagger \quad (3-5-35)$$

$$\Gamma_n^\dagger = E_n^\dagger - \frac{\langle \phi \mathbf{F}^\dagger E_n^\dagger \rangle}{\langle \phi \mathbf{F}^\dagger \phi^\dagger \rangle} \phi^\dagger \quad (3-5-36)$$

なお、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger は一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger の立体角に対する平均値、全中性子束 ϕ は角度中性子束 ψ の立体角に対する積分値、随伴全中性子束 ϕ^\dagger は随伴角度中性子束 ψ^\dagger の立体角に対する平均値を表す。すなわち、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger 、角度中性子束 ψ および随伴角度中性子束 ψ^\dagger を角度に対する連続関数として定義すれば、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger 、全中性子束 ϕ および随伴全中性子束 ϕ^\dagger はそれぞれ下式により定義される。

$$\Gamma^\dagger(\vec{r}, E) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \gamma^\dagger(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (3-5-37)$$

$$\phi(\vec{r}, E) = \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (3-5-38)$$

$$\phi^\dagger(\vec{r}, E) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \psi^\dagger(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (3-5-39)$$

なお、全中性子束と随伴全中性子束および一般化随伴全中性子束の定義式の相違に関しては、本節で後述する。ただし、ここではこれらの関数を離散化して取り扱っているため、 m 番目の代表角度成分の立体角に対する重み ω_m を利用して、それぞれ次式に基づき計算される。

$$\Gamma^\dagger = \sum_m \frac{\omega_m}{4\pi} \gamma_m^\dagger \quad (3-5-40)$$

$$\phi = \sum_m \omega_m \psi_m \quad (3-5-41)$$

$$\phi^\dagger = \sum_m \frac{\omega_m}{4\pi} \psi_m^\dagger \quad (3-5-42)$$

なお、重み ω_m は次式を満たす。

$$\sum_m \omega_m = 4\pi \quad (3-5-43)$$

(3-5-29)式から(3-5-36)式に示した手順に基づき一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger を計算すれば、使用メモリ量を抑えながら一般化随伴中性子束を計算することが可能である。しかしながら、これまでの説明で述べてきたように、輸送理論に一般化摂動論を導入するためには一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger ではなく、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger が必要となる。従って、本研究では、次節で説明する角度分布再計算法を利用することで、(3-5-29)式から(3-5-36)式に基づき計算した一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger から一般化随伴角度中性子束を計算する。故に、本研究の開発手法では角度分布再計算法と併せて、(3-5-29)式から(3-5-36)式に示される方法を採用した。

[全中性子束 ϕ と随伴全中性子束 ϕ^\dagger 及び一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger の定義式について]

ここでは、本節の(3-5-37)式から(3-5-39)式で示した全中性子束 ϕ と随伴全中性子束 ϕ^\dagger 及び一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger の定義における立体角の取り扱いの違いについて説明する。ここで、(3-5-37)式から(3-5-39)式を再掲する。

$$\Gamma^\dagger(\vec{r}, E) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \gamma^\dagger(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (3-5-37)(\text{再掲})$$

$$\phi(\vec{r}, E) = \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (3-5-38)(\text{再掲})$$

$$\phi^\dagger(\vec{r}, E) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \psi^\dagger(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (3-5-39)(\text{再掲})$$

これらの式は、Forward の全中性子束は角度中性子束の立体角についての積分量として定義されるのに対して、(一般化)随伴全中性子束は(一般化)角度中性子束の立体角についての平均値として定義されることを意味する。ここでは、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger が満たす一般化随伴方程式と一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger が満たす一般化随伴方程式を比較することで、この理由を説明する。なお、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger が満たす一般化随伴方程式の導出仮定は Appendix E に示される。

一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger が満たす一般化随伴方程式は次式で与えられる。

$$\mathbf{B}^\dagger \gamma^\dagger = \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} = Q^\dagger \quad (3-5-44)$$

なお、上式の各記号は

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^\dagger &= \mathbf{A}_{tran}^\dagger - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}_{tran}^\dagger \\ \mathbf{A}_{tran}^\dagger &= -\vec{\Omega} \nabla + \Sigma_t(\vec{r}, E) - \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E \rightarrow E', \vec{\Omega} \rightarrow \vec{\Omega}') \\ \mathbf{F}_{tran}^\dagger &= \nu \Sigma_f(\vec{r}, E) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \frac{\chi(\vec{r}, E')}{4\pi} \end{aligned} \quad (3-5-45)$$

により表される。一方、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger が満たす一般化随伴方程式は次式で与えられる。

$$\mathbf{M}^\dagger \Gamma^\dagger = \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} = Q^\dagger \quad (3-5-46)$$

なお、上式の各記号の意味は

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^\dagger &= \mathbf{A}_{diff}^\dagger - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}_{diff}^\dagger \\ \mathbf{A}_{diff}^\dagger &= -\nabla D(\vec{r}, E) \nabla + \Sigma_t(\vec{r}, E) - \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, E \rightarrow E') \\ \mathbf{F}_{diff}^\dagger &= \nu \Sigma_f(\vec{r}, E) \int_0^\infty dE' \chi(\vec{r}, E') \end{aligned} \quad (3-5-47)$$

により表される。ここで、簡単のために、輸送計算における散乱断面積に等方近似を適用した上で、均質で大きさが無限大な原子炉を考えるとする。この仮定の下では、(3-5-45) 式の散乱項の立体角積分を簡易化することができ、かつ、(3-5-44)式及び(3-5-46)式の中性子の漏れの項を無視することができる。さらに言えば、この仮定の下では(3-5-44)式の両辺を立体角積分して得られる式が(3-5-46)式と等価となる。ここで、上記の仮定の下で(3-5-44)式の両辺を立体角に対して積分した式変形を次式に示す。

$$\int_{4\pi} d\bar{\Omega} \left\{ \begin{aligned} &\Sigma_t(\bar{\mathbf{r}}, E) \gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E, \bar{\Omega}) - \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \Sigma_s(\bar{\mathbf{r}}, E \rightarrow E') \gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E', \bar{\Omega}') \\ &\quad - \nu \Sigma_f(\bar{\mathbf{r}}, E) \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \frac{\chi(\bar{\mathbf{r}}, E')}{4\pi} \gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E', \bar{\Omega}') \end{aligned} \right\} = \int_{4\pi} d\bar{\Omega} Q^\dagger$$

$$\Sigma_t(\bar{\mathbf{r}}, E) \int_{4\pi} d\bar{\Omega} \gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E, \bar{\Omega}) - \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\bar{\mathbf{r}}, E \rightarrow E') \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E', \bar{\Omega}')$$

$$- \nu \Sigma_f(\bar{\mathbf{r}}, E) \int_0^\infty dE' \chi(\bar{\mathbf{r}}, E') \int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E', \bar{\Omega}') = 4\pi Q^\dagger \quad (3-5-48)$$

ここで、さらに(3-5-48)式の両辺を 4π で除する。

$$\Sigma_t(\bar{\mathbf{r}}, E) \frac{\int_{4\pi} d\bar{\Omega} \gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E, \bar{\Omega})}{4\pi} - \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\bar{\mathbf{r}}, E \rightarrow E') \frac{\int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E', \bar{\Omega}')}{4\pi}$$

$$- \nu \Sigma_f(\bar{\mathbf{r}}, E) \int_0^\infty dE' \chi(\bar{\mathbf{r}}, E') \frac{\int_{4\pi} d\bar{\Omega}' \gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E', \bar{\Omega}')}{4\pi} = Q^\dagger \quad (3-5-49)$$

一方、無限均質体系において一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger の従う一般化随伴方程式は次式で与えられる。

$$\Sigma_t(\bar{\mathbf{r}}, E) \Gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E) - \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\bar{\mathbf{r}}, E \rightarrow E') \Gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E')$$

$$- \nu \Sigma_f(\bar{\mathbf{r}}, E) \int_0^\infty dE' \chi(\bar{\mathbf{r}}, E') \Gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E') = Q^\dagger \quad (3-5-50)$$

ここで、(3-5-49)式と(3-5-50)式が等価であることから、これら2式を比較すると次の関係式が得られる。

$$\Gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \gamma^\dagger(\bar{\mathbf{r}}, E, \bar{\Omega}) d\bar{\Omega} \quad (3-5-37)(再掲)$$

以上により数学的観点から(3-5-37)式が示された。次に、物理的観点から(3-5-37)式の関係式について考察する。

前述のように、一般化随伴角度中性子束はある領域・あるエネルギー群・ある角度に一つの中性を投入したときの着目する反応率比への正負の寄与の大きさを表す。一方で、一般化随伴全中性子束はある領域・あるエネルギー群に一つの中性を投入したときの着目する反応率への正負の寄与の大きさを表す。すなわち、一般化随伴角度中性子束と一般化随伴全中性子束のいずれにおいても評価しているものは「中性子が一つ投入されたときの寄与の大きさ」である。よって、一般化随伴全中性子束が一般化随伴角度中性子束の立体角に関する平均値と定義されることは物理的に妥当である。なお、ここまでの説明では一般化随伴中性子束について着目して、数学的観点及び物理的観点から一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger と一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger の関係性を紐解いてきたが、随伴角度中性子束 ψ^\dagger と随伴全中性子束 ϕ^\dagger の関係性については、それらが固有ベクトルであることからその大きさ(ノルム)が一意に定まらないために数学的観点からその関係性を議論することができない。しかしながら、物理的観点から随伴角度中性子束 ψ^\dagger と随伴全中性子束 ϕ^\dagger の関係性について考えれば、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger と一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger は随伴角度中性子束 ψ^\dagger

と随伴全中性子束 ϕ^\dagger を一般化したものであるため、同様な物理的観点に基づく議論を経て、次の関係性を持つことが分かる。

$$\phi^\dagger(\vec{r}, E) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \psi^\dagger(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (3-5-39)(\text{再掲})$$

3.6 角度分布再計算法

本節では、本研究で開発した角度分布再計算法について説明する。

前述のように、ノイマン級数法をそのまま用いて既存 MOC コードにより一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を計算するためには、(3-5-21)式から(3-5-28)式に基づき計算を行う必要がある。しかしながら、ノイマン級数法をそのまま用いて(3-5-21)式から(3-5-28)式に基づき一般化随伴角度中性子束を計算するためには、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger の角度成分ごとにノイマン級数和を計算する必要があり、この方法は計算量および使用メモリ量の観点から実用的な手法ではないと言える。そこで、角度分布再計算法ではノイマン級数和により一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger を求め、これを利用してその角度分布すなわち一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を再計算する。なお、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger はノイマン級数法を用いて次式により計算することができる。

$$\Gamma^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \Gamma_n^\dagger \quad (3-5-29)(\text{再掲})$$

$$\mathbf{A}^\dagger \mathbf{E}_{0+}^\dagger = \mathbf{Q}_+^\dagger \quad (3-5-30)(\text{再掲})$$

$$\mathbf{A}^\dagger \mathbf{E}_{0-}^\dagger = \left| \mathbf{Q}_-^\dagger \right| \quad (3-5-31)(\text{再掲})$$

$$\mathbf{E}_0^\dagger = \mathbf{E}_{0+}^\dagger - \mathbf{E}_{0-}^\dagger \quad (3-5-32)(\text{再掲})$$

$$\mathbf{A}^\dagger \mathbf{E}_{n+}^\dagger = \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \Gamma_{(n-1)+}^\dagger \quad (n \geq 1) \quad (3-5-33)(\text{再掲})$$

$$\mathbf{A}^\dagger \mathbf{E}_{n-}^\dagger = \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \left| \Gamma_{(n-1)-}^\dagger \right| \quad (n \geq 1) \quad (3-5-34)(\text{再掲})$$

$$\mathbf{E}_n^\dagger = \mathbf{E}_{n+}^\dagger - \mathbf{E}_{n-}^\dagger \quad (3-5-35)(\text{再掲})$$

$$\Gamma_n^\dagger = \mathbf{E}_n^\dagger - \frac{\langle \phi \mathbf{F}^\dagger \mathbf{E}_n^\dagger \rangle}{\langle \phi \mathbf{F}^\dagger \phi^\dagger \rangle} \phi^\dagger \quad (3-5-36)(\text{再掲})$$

なお、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger と一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger は以下の関係を持つ。

$$\Gamma^\dagger(\vec{r}, E) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \gamma^\dagger(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (3-5-37)(\text{再掲})$$

上述のように、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger は一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger の角度に対する平均値を意味する。このとき、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger はエネルギー群、領域、角度分点ごとに定義される物理量であるのに対して、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger は一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger の角度に対する平均値であることから、エネルギー群、領域ごとに定義される物理量であることが分かる。MOC では詳細な角度分点を設定し中性子の飛行方向に対して計算を行うため、角度分点が詳細に設定される。従って、必要となるメモリ量を大幅に低減す

ることが可能となる。角度分布再計算法では、上記の方法を用いて計算された一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger の収束解から一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を再計算する。具体的な方法を以下に説明する。なお、以下では一般化随伴全中性子束の収束解を Γ_{con}^\dagger と表すこととする。

非等方散乱を考慮しないという条件の下では、一般随伴角度中性子束が満たす方程式は下式のように記述される。

$$-\bar{\Omega}\nabla\gamma_{g,m}^\dagger + \Sigma_{t,g}\gamma_{g,m}^\dagger = \frac{1}{4\pi} \sum_{g'} \Sigma_{s,g \rightarrow g'} \sum_{m'} \omega_{m'} \gamma_{g',m'}^\dagger + \frac{\nu\Sigma_{f,g}}{k_{eff}} \sum_{g'} \frac{\chi_{g'}}{4\pi} \sum_{m'} \omega_{m'} \gamma_{g',m'}^\dagger + Q_g^\dagger \quad (3-6-1)$$

(3-6-1)式に一般化随伴全中性子束の収束解 Γ_{con}^\dagger を代入することで下式を得る。

$$-\bar{\Omega}\nabla\gamma_{g,m}^\dagger + \Sigma_{t,g}\gamma_{g,m}^\dagger = \sum_{g'} \Sigma_{s,g \rightarrow g'} \Gamma_{con,g'}^\dagger + \frac{\nu\Sigma_{f,g}}{k_{eff}} \sum_{g'} \chi_{g'} \Gamma_{con,g'}^\dagger + Q_g^\dagger = q_g^\dagger \quad (3-6-2)$$

すなわち、(3-6-2)式右辺の随伴散乱源および随伴核分裂源は反復計算により更新する必要がなく、 Γ_{con}^\dagger から求められれば外部中性子源として扱うことが可能となる。角度分布再計算法では随伴散乱源および随伴核分裂源を外部中性子源として扱い、散乱断面積および核分裂断面積を0とし吸収のみの体系で固定源計算を行うことにより一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を再計算する。本手法は、真空境界条件であれば反復無しで、また、完全反射境界条件であっても体系境界の一般化随伴角度中性子束が収束するまで反復することで、一般化随伴角度中性子束を計算することが可能となる。なお、本手法で加速法を使用する場合、(3-6-2)式をそのまま適用すると外部中性子源として負数の源の項が使用されるために正しく計算が行われない。これを解決する為、下式に基づき源の項の正負を分離し、個々に加速法を適用した輸送計算を行う。

$$-\bar{\Omega}\nabla\gamma_{g,m,+}^\dagger + \Sigma_{t,g}\gamma_{g,m,+}^\dagger = \begin{cases} q_g^\dagger & q_g^\dagger \geq 0 \\ 0 & q_g^\dagger < 0 \end{cases} \quad (3-6-3)$$

$$-\bar{\Omega}\nabla\gamma_{g,m,-}^\dagger + \Sigma_{t,g}\gamma_{g,m,-}^\dagger = \begin{cases} -q_g^\dagger & q_g^\dagger < 0 \\ 0 & q_g^\dagger \geq 0 \end{cases} \quad (3-6-4)$$

さらに、得られた解を下式のように差をとることで求めるべき一般化随伴角度中性子束を計算することができる。

$$\gamma_{g,m}^\dagger = \gamma_{g,m,+}^\dagger - \gamma_{g,m,-}^\dagger \quad (3-6-5)$$

しかしながら、実際の正負分離法を適用した計算において、あるエネルギーの外部中性子源が0となる可能性がある。角度分布再計算法では吸収のみの体系で固定源計算を行う為、外部中性子源が存在しないエネルギー群があると計算が収束しない。そこで、本研究では(3-6-3)式と(3-6-4)式の代わりに下式を用いることとした。

$$-\bar{\Omega}\nabla\gamma_{g,m,+}^\dagger + \Sigma_{t,g}\gamma_{g,m,+}^\dagger = \begin{cases} q_g^\dagger + a & q_g^\dagger \geq 0 \\ a & q_g^\dagger < 0 \end{cases} \quad (3-6-6)$$

$$-\bar{\Omega} \nabla \gamma_{g,m,-}^\dagger + \Sigma_{t,g} \gamma_{g,m,-}^\dagger = \begin{cases} -q_g^\dagger + a & q_g^\dagger < 0 \\ a & q_g^\dagger \geq 0 \end{cases} \quad (3-6-7)$$

(3-6-6)式および(3-6-7)式は全ての領域、エネルギー群の源の項に対して定数値を加えたものを源の項として扱うことを意味している。なお、(3-6-6)式から(3-6-7)式を引くことで下式を導くことができる。

$$-\bar{\Omega} \nabla (\gamma_{g,m,+}^\dagger - \gamma_{g,m,-}^\dagger) + \Sigma_{t,g} (\gamma_{g,m,+}^\dagger - \gamma_{g,m,-}^\dagger) = \begin{cases} q_g^\dagger + a - a & q_g^\dagger \geq 0 \\ a - (-q_g^\dagger + a) & q_g^\dagger < 0 \end{cases} \quad (a \text{ は定数}) \quad (3-6-8)$$

すなわち、

$$-\bar{\Omega} \nabla \gamma_{g,m}^\dagger + \Sigma_{t,g} \gamma_{g,m}^\dagger = q_g^\dagger \quad (3-6-9)$$

となり、(3-6-2)式と一致することが分かる。これより、(3-6-6)式及び(3-6-7)式の計算において、十分に収束した解が得られていれば、任意定数 a を全ての外部中性子源に加算する角度分布再計算法の計算によって確実に一般化随伴角度中性子束を計算することが可能となる。また、任意定数 a を全ての外部中性子源に加算する手法は、角度分布再計算法に限らずノイマン級数法における正負分離法にも使用することができ、本研究で開発したコードにおけるノイマン級数法でも使用した。

以上に示した内容が、本研究で開発した角度分布再計算法となる。本研究において開発した一般化摂動計算コードでは、(3-6-6)式及び(3-6-7)式を使用した角度分布再計算法を適用することにより、効率的に一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を計算することを可能にした。

3.7 一般化摂動計算コードの開発

本節では、本研究で開発した一般化摂動計算コードの計算フローおよびコード仕様について説明する。本コードには本章で説明したノイマン級数法および角度分布再計算法を適用したが、本研究では既存の MOC コードを輸送計算 solver として使用したため、ここまでに述べた計算手法をそのまま適用することができなかつた箇所が存在する。そのため、それらの点に関しては近似的な取り扱いをすることとした。以下では、本研究で開発した一般化摂動計算コードの計算フローおよび上述のコード仕様について説明する。

前述のように、本コードにおいてはノイマン級数法を用いて一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger を計算し、その解を用いて角度分布再計算法により一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を計算する。ただし、一般化随伴中性子束の計算を行うにあたり、中性子束、随伴中性子束および実効増倍率が必要となる為、一般化随伴中性子束の計算に先立ちこれらの計算を行う必要がある。そこで、本研究では Fig. 3-7-1 に示される計算フローに基づき、一般化摂動計算コードを作成した。

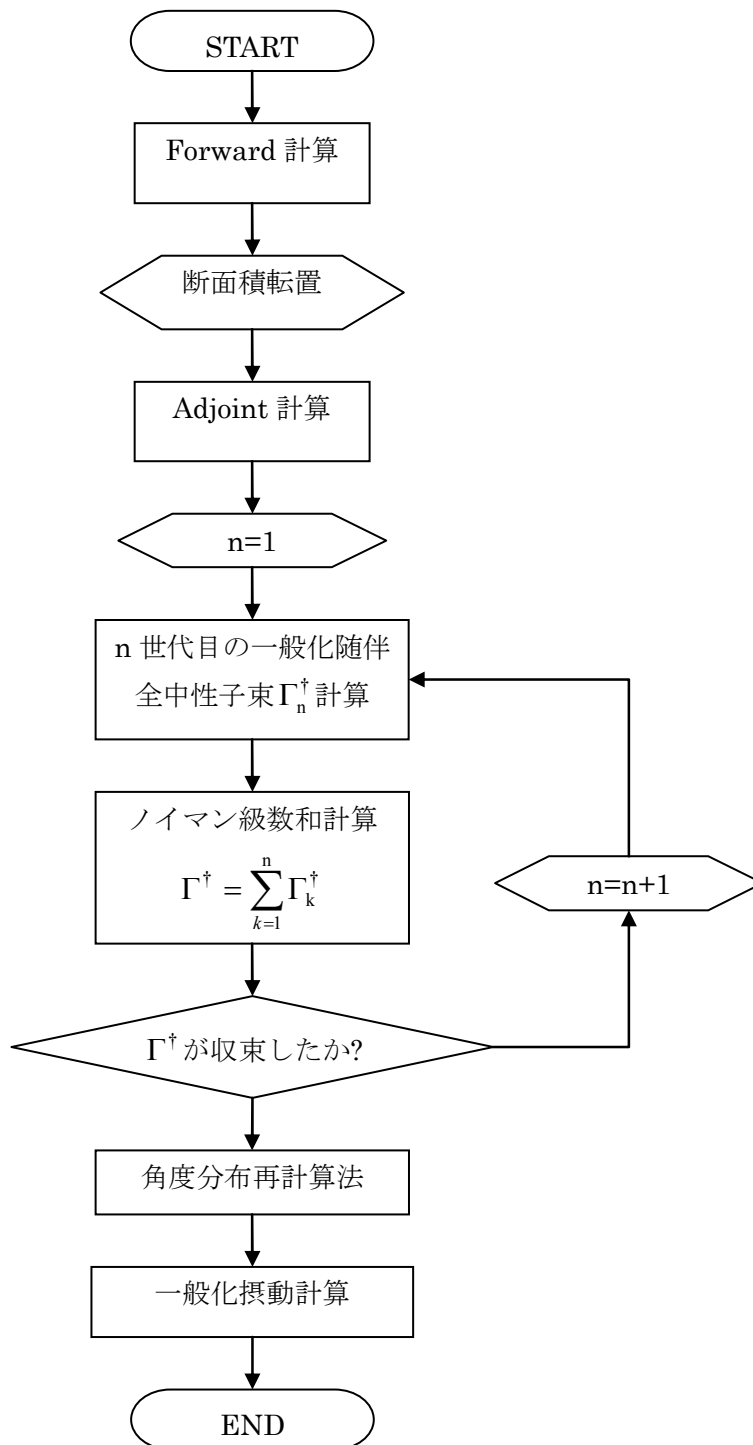


Fig. 3-7-1 一般化摂動計算コードの計算フロー

Figure 3-7-1 に示される各処理について、基本的には本章で説明した手法をそのまま適用している。しかし、本コードでは既存の MOC コードを用いて一般化随伴角度中性子束を計算していることから、これに起因する制約条件が生じたため、一部計算手順を変更した箇所が存在する。その主な点としては以下の 3 点である。

- ①外部中性子源の扱い方
- ②角度積分の方法
- ③角度分布再計算法

以降では、これらの変更点について個別に説明する。

① 外部中性子源の扱い方

一般化随伴角度中性子束が満足する方程式は下式により表される。

$$\left(\mathbf{A}^\dagger - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \right) \gamma^\dagger = \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} = Q^\dagger \quad (3-5-7)(再掲)$$

一方、通常の MOC 計算で扱われる輸送方程式で固定源計算を行う際には、下式に基づき角度中性子束の計算がなされる。

$$(\mathbf{A} - \mathbf{F})\psi = \frac{Q}{4\pi} \quad (3-7-1)$$

すなわち、通常の MOC 計算コードでは与えた外部中性子源強度を立体角で除すことで、ある角度の単位立体角に対する外部中性子源強度として扱う。一方、一般化摂動計算においてはその処理を行わない。故に、一般的な MOC コードを用いて一般化随伴角度中性子束の計算を行う際には、本来計算で用いるべき値に対して 4π で除された値が外部中性子源として扱われることになる。本研究において開発したコードにおいても、輸送計算 solver として一般的な MOC コードを利用しているため、コード上の特性により本来与えるべき外部中性子源が 4π で除された値として用いられている。しかしながら、次に述べる角度積分の際に生じる取り扱いの相違と上記の取り扱い相違が相殺し、結果として正しい一般化随伴角度中性子束が得られることになる。

② 角度積分の方法

前節で述べたように、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger と一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger は以下の関係を持つ。

$$\Gamma^\dagger(\vec{r}, E) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \gamma^\dagger(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (3-5-37)(再掲)$$

すなわち、一般化全中性子束 Γ^\dagger は一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger の角度に対する平均値として定義される。一方、通常の MOC 計算で得られる全中性子 ϕ は角度中性子束 ψ と以下の関係を持つものとして定義される。

$$\phi(\vec{r}, E) = \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (3-5-38)(再掲)$$

すなわち、全中性子束 ϕ は角度中性子束 ψ の角度に対する積分量として定義されている。従って、通常の MOC 計算コードを用いて一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger の計算を行う際には、求めるべき一般化随伴全中性子束に 4π が乗じられた値として得られることとなる。しかし、①で述べたように①の取り扱い相違と②の取り扱い相違は相殺されるため、特別な措置を

取らずとも正しく一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger を求めることが可能である。

③ 角度分布再計算法

既存の MOC コードを利用して角度分布再計算法を適用する場合には、①で示した外部中性子源の取り扱いの違いに対して対策をとる必要がある。前述のように、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger を求める際には源の項に対して行われる 4π で除される効果と一般化随伴角度中性子束を計算する際に行われる立体角積分の効果がキャンセルされる。しかし、その一方で、一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を求める角度分布再計算法においては立体角積分が行われず、それによるキャンセル(4π を乗ずる効果)が生じないので本来行う固定源計算の外部中性子源に比べて 4π で除された形となる。故に、得られた一般化随伴角度中性子束も本来求めたい値の $1/4\pi$ の値となる。そこで、本研究で開発した一般化摂動計算コードにおいては、角度分布再計算法を用いて得られた一般化随伴角度中性子束に対して 4π を乗ずることで、この点を修正している。

本研究では、以上に示したアルゴリズムに基づき、株式会社原子力エンジニアリングにより開発された非均質輸送計算コード AEGIS[25] を輸送計算 solver として利用した一般化摂動論に基づく集合体感度解析コードを作成した。開発コードでは、単一集合体体系に対して完全反射境界条件で任意の反応率比に対する一般化摂動計算が可能である。

3.8 検証計算

本節では開発コードの検証計算について説明する。

本研究では、集合体感度解析手法として一般化摂動論に基づく既存 MOC を用いた感度解析コードを開発した。また、開発コードの検証計算では直接法(Forward 法)に基づき評価した感度係数と開発コードにより評価した同一計算体系の感度係数の比較を行った。本節では、当該検証計算について説明する。なお、3.8.1 項では検証計算で用いた計算体系について説明し、3.8.2 項ではその計算条件について説明する。そして、3.8.3 項で一般化摂動計算コードと直接法の比較結果について説明する。

3.8.1 計算体系

本項では検証計算の計算体系について説明する。本検証計算では Peach Bottom 原子力発電所 2 号機(PB-2)で初装荷燃料として使用された 7×7 燃料集合体の幾何形状を模擬した体系を計算体系として扱った。具体的な計算体系を Fig. 3-8-1-1 に示す。

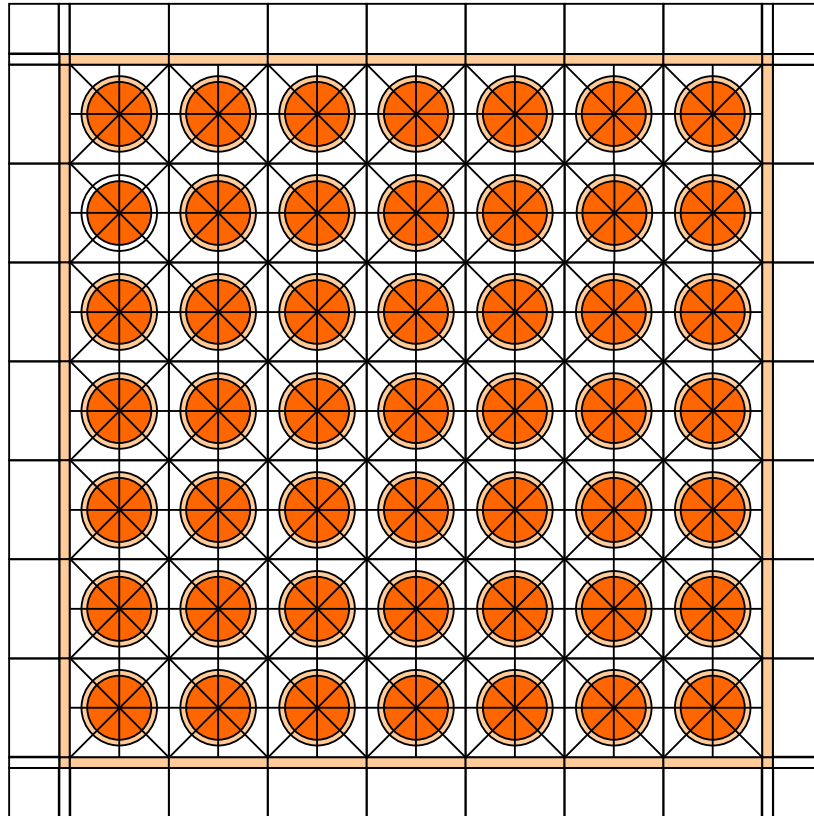


Fig 3-8-1-1 PB-2 炉心 7×7 燃料集合体を模擬した計算体系

なお、Fig. 3-8-1-1 において濃いオレンジ色の領域は燃料領域、薄いオレンジ色の領域は被覆管・チャンネルボックス領域、白抜きの領域は減速材領域を示す。さらに、各部位の設計情報を以下に示す。

Table 3-8-1-1 各部位の設計情報[24]

項目	[cm]
チャンネルボックス厚さ	0.2032
ウォーターギャップ	1.905
燃料ペレット直径	1.21158
単位セルピッチ	1.875
被覆管厚さ	0.9398

ただし、本検証計算は一般化摂動計算コードの妥当性確認を目的としたものである為、計算体系を簡易的に扱っている。具体的には、チャンネルボックスの端の湾曲形状を無視している点、チャンネルボックスの断面積を被覆管の断面積と同じとして扱っている点、さらには計算結果の物理的考察を簡易化するために全ての燃料に同じ断面積を割り当てている点などで近似的な取り扱いをした。

3.8.2 計算条件

本項では検証計算で使用した計算条件について説明する。

まず、本検証計算で使用した各領域の断面積データについて説明する。前述のように、本検証計算は本研究で開発したコードの検証を目的としたものであり、一般化摂動計算により算出した感度係数と直接法により算出した感度係数の比較を行うためのものである。本来であれば、本体系において断面積を作成するべきであるが、簡略化のため別の体系で得られた非均質多群巨視的断面積を用いて検証計算を行った。具体的には、次世代軽水炉ベンチマーク問題に記載されている幾何形状及び原子数密度を用いて作成された非均質 8 群巨視的断面積を使用した[32]。また、先に述べたようにチャンネルボックスと燃料被覆管の断面積は等しいと仮定して計算を行った。以下に使用した断面積データを示す。

Table 3-8-2-1 燃料領域の断面積データ

g'	g							
	1	2	3	4	5	6	7	8
$\Sigma_{s,g' \rightarrow g}$	2.17E-01	4.92E-02	9.24E-09	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
1	2.17E-01	4.92E-02	9.24E-09	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
2	0.00E+00	4.19E-01	2.55E-03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
3	0.00E+00	0.00E+00	4.80E-01	2.36E-03	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
4	0.00E+00	0.00E+00	7.49E-04	3.68E-01	1.72E-02	2.16E-04	6.29E-08	1.18E-08
5	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.03E-02	3.31E-01	5.30E-02	7.33E-07	8.43E-08
6	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.21E-06	5.35E-03	3.67E-01	2.57E-02	6.87E-04
7	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	2.24E-08	4.56E-02	3.24E-01	3.35E-02
8	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	2.98E-03	8.13E-02	3.32E-01
$\Sigma_{t,g}$	2.77E-01	4.30E-01	5.84E-01	4.57E-01	5.06E-01	6.99E-01	9.12E-01	1.42E+00
$\Sigma_{a,g}$	1.12E-02	8.31E-03	1.02E-01	7.01E-02	1.11E-01	3.01E-01	5.08E-01	9.99E-01
$\Sigma_{f,g}$	9.89E-03	2.43E-03	3.07E-02	4.35E-02	8.88E-02	2.35E-01	4.09E-01	8.09E-01
$\nu\Sigma_{f,g}$	2.75E-02	5.95E-03	7.47E-02	1.06E-01	2.16E-01	5.73E-01	9.98E-01	1.97E+00
χ	7.66E-01	2.33E-01	1.58E-04	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

Table 3-8-2-2 被覆管・チャンネルボックス領域の断面積データ

g'	g							
	1	2	3	4	5	6	7	8
$\Sigma_{s,g' \rightarrow g}$	1.90E-01	2.31E-02	8.12E-07	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
1	1.90E-01	2.31E-02	8.12E-07	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
2	0.00E+00	3.80E-01	7.89E-04	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
3	0.00E+00	0.00E+00	2.95E-01	6.12E-04	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
4	0.00E+00	0.00E+00	4.69E-04	2.69E-01	5.70E-03	9.14E-07	4.17E-08	7.81E-09
5	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	5.37E-03	2.51E-01	1.88E-02	1.56E-07	2.94E-08
6	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	2.43E-03	2.61E-01	1.18E-02	3.97E-07
7	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.71E-02	2.44E-01	1.53E-02
8	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	9.49E-08	3.11E-02	2.47E-01
$\Sigma_{t,g}$	2.13E-01	3.81E-01	2.99E-01	2.76E-01	2.77E-01	2.78E-01	2.80E-01	2.87E-01
$\Sigma_{a,g}$	2.84E-04	7.97E-04	3.57E-03	9.69E-04	1.53E-03	2.63E-03	4.48E-03	8.07E-03
$\Sigma_{f,g}$	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
$\nu\Sigma_{f,g}$	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
χ	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00

Table 3-8-2-3 減速材領域の断面積データ

g'	g								
	1	2	3	4	5	6	7	8	
$\Sigma_s, g' \rightarrow g$	1	1.06E-01	7.75E-02	4.80E-04	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
	2	0.00E+00	4.85E-01	9.78E-02	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
	3	0.00E+00	0.00E+00	8.86E-01	7.24E-02	9.49E-03	1.13E-02	1.98E-03	1.21E-03
	4	0.00E+00	0.00E+00	1.99E-04	5.53E-01	2.00E-01	2.20E-01	3.05E-02	1.18E-02
	5	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	8.14E-03	3.96E-01	5.62E-01	7.38E-02	2.80E-02
	6	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	2.42E-06	6.57E-03	8.83E-01	2.99E-01	9.76E-02
	7	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	1.38E-08	2.18E-05	2.50E-01	1.06E+00	3.71E-01
	8	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	8.35E-09	1.28E-05	1.22E-01	6.30E-01	1.77E+00
Σ_t, g	1.84E-01	5.83E-01	9.83E-01	1.02E+00	1.07E+00	1.29E+00	1.69E+00	2.54E+00	
Σ_a, g	2.04E-04	8.49E-06	2.66E-04	1.70E-03	2.66E-03	4.60E-03	7.82E-03	1.42E-02	
Σ_f, g	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	
$\nu \Sigma_f, g$	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	
χ	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00	

次に、本検証計算の計算条件を示す。本検証計算では以下の計算条件を用いて計算を行った。

Table 3-8-2-4 計算条件

Ray trace法	FluxRegionMacroband
最大Ray trace幅	0.05cm
方位角分点	等角度分点
方位角分割数	64
極角分点	TYE分点
極角分割数	2
ψ の収束条件	10^{-5}
ϕ の収束条件	10^{-8}
k_{eff} の収束条件	5×10^{-8}
境界条件	完全反射境界条件

3.8.3 一般化摂動計算コードと直接法の比較

本項では、一般化摂動計算コードの計算結果と摂動量 1%における直接法の計算結果の比較について説明する。なお、直接法の断面積摂動量の選定に関する検討については Appendix F に記載した。また、本計算では計算体系が 1/8 対称であることから、計算時間削減のために直接法では 1/8 集合体において感度解析を実施することとした。

本項で示す検証計算においては、Fig. 3-8-3-1 においてピンク色で示される集合体中心の燃料ピンの相対出力に対する各領域、各断面積、各エネルギー群の相対感度係数について一般化摂動計算コードにより評価された相対感度係数と直接法により評価された相対感度係数を比較した。

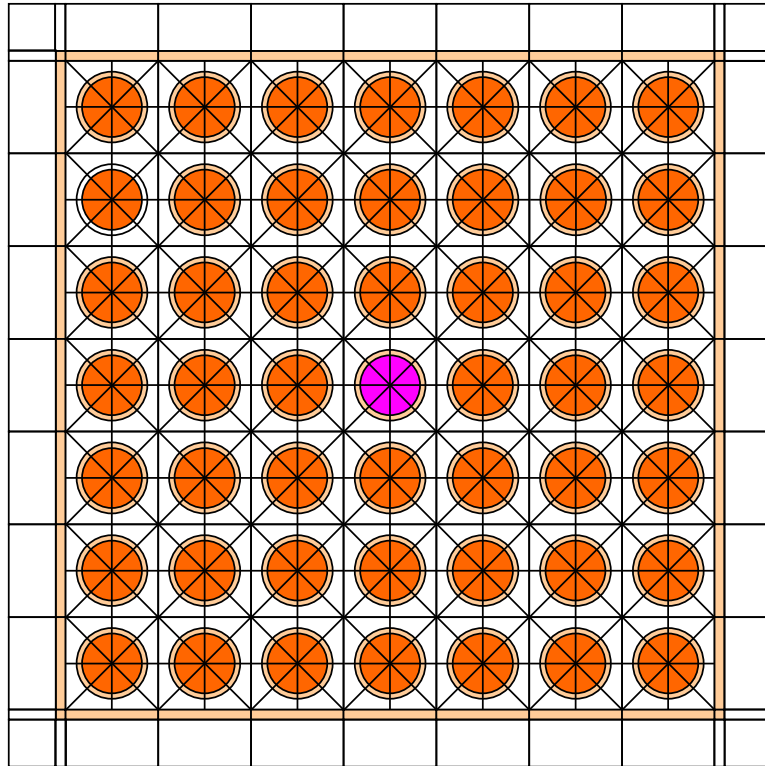


Fig. 3-8-3-1 集合体中心の燃料ピン

なお、燃料集合体中心の燃料ピンの相対出力は下式の反応率比 R により定義される。

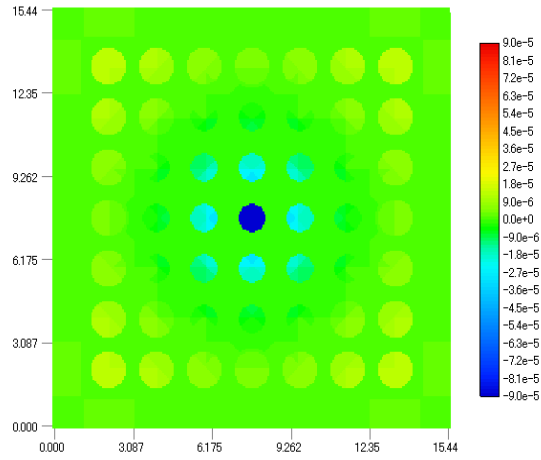
$$R = \frac{\sum_j V_j \sum_{g'} \Sigma'_{f,j,g'} \sum_{m'} w_{m'} \psi_{i,g',m'}}{\sum_i V_i \sum_g \Sigma_{f,i,g} \sum_m w_m \psi_{i,g,m}} \quad (3-8-3-1)$$

ただし、

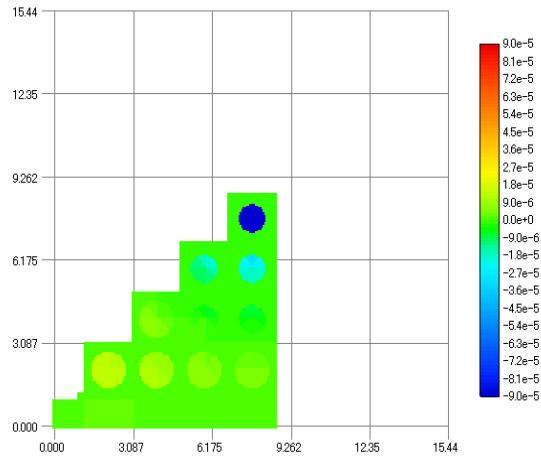
$$\Sigma'_{f,i,g} = \begin{cases} \Sigma_{f,i,g} & \text{領域 } i \in \text{集合体中心の燃料ピン} \\ 0 & \text{領域 } i \notin \text{集合体中心の燃料ピン} \end{cases} \quad (3-8-3-2)$$

また、本項では集合体中心の燃料ピンの相対出力に対する吸収断面積の相対感度係数と自群散乱断面積の相対感度係数に着目して、これらの計算結果について一般化摂動計算と直接法の比較を行う。この理由としては、これらの断面積の変化は核分裂断面積に変化を及ぼさないために間接効果のみを比較することができると考えたためである。上述のように、一般化摂動論は間接効果の項の計算のために一般化随伴角度中性子束を利用し、近似的に間接効果を評価する手法である。故に、開発コードの検証のためには直接効果が現れない条件を利用することが好ましいと考えた。

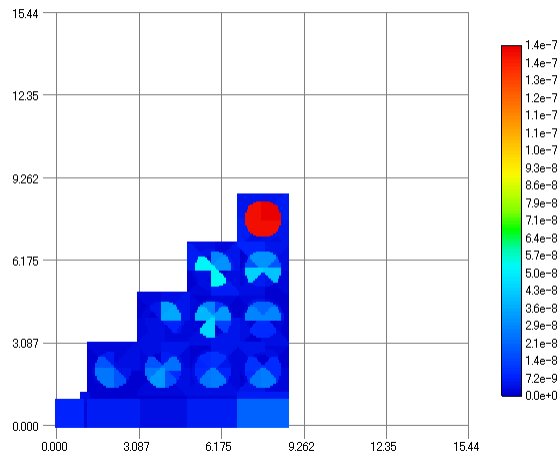
以降では、本検証計算の計算結果を示す。以下、Fig. 3-8-3-2 から Fig. 3-8-3-9 には一般化摂動計算コードおよび直接法により算出された 1 から 8 群の吸収断面積の感度係数の比較、ならびにそれらの差異の絶対値の分布を示す。



(a) 一般化摂動計算

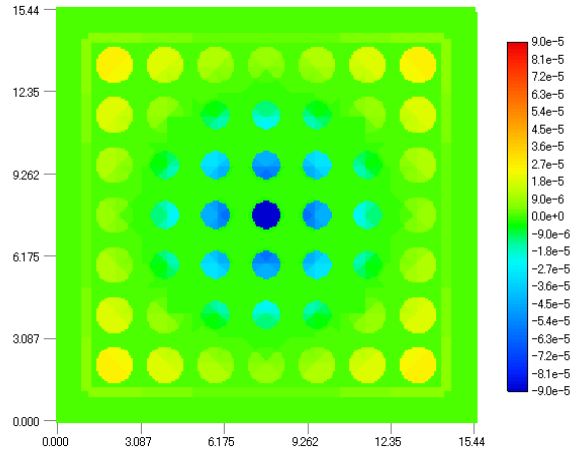


(b) 直接法

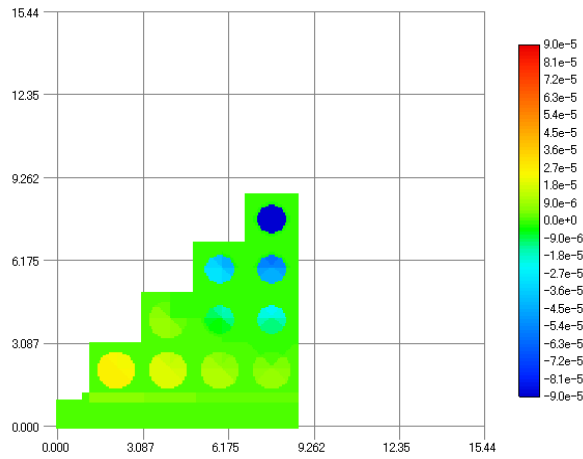


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

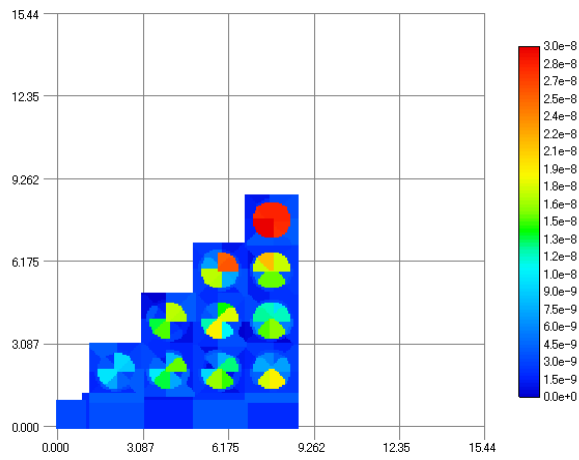
Fig. 3-8-3-2 一般化摂動計算および直接法により得られた1群吸収断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算

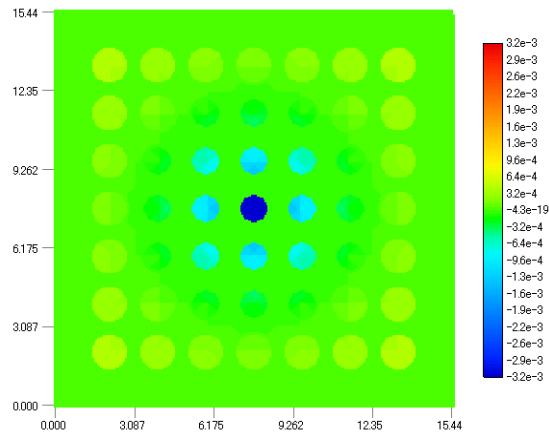


(b) 直接法

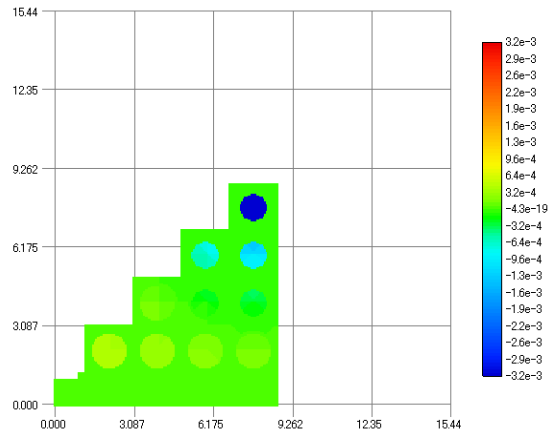


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

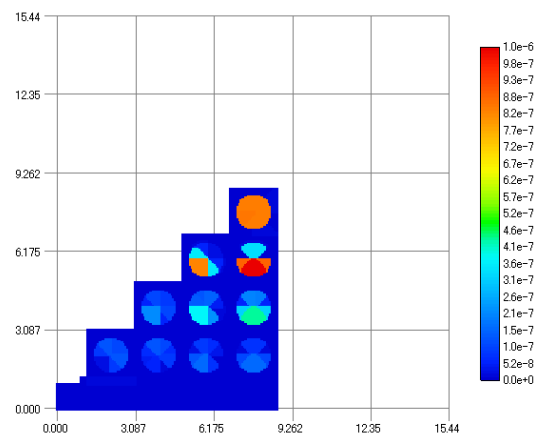
Fig. 3-8-3-3 一般化摂動計算および直接法により得られた2群吸収断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算

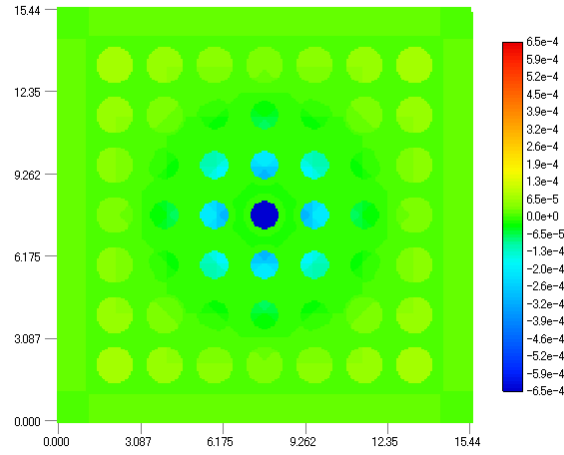


(b) 直接法

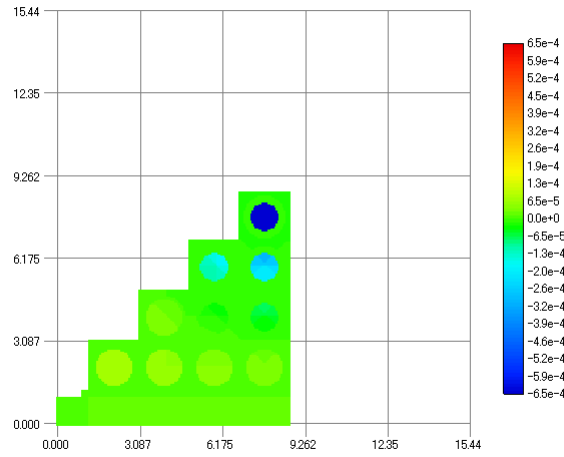


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

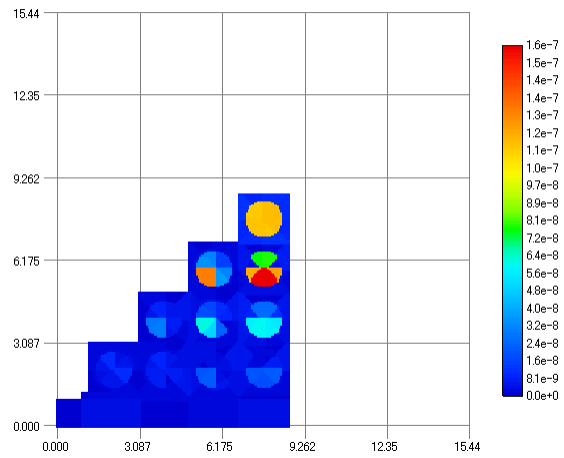
Fig. 3-8-3-4 一般化摂動計算および直接法により得られた3群吸収断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算

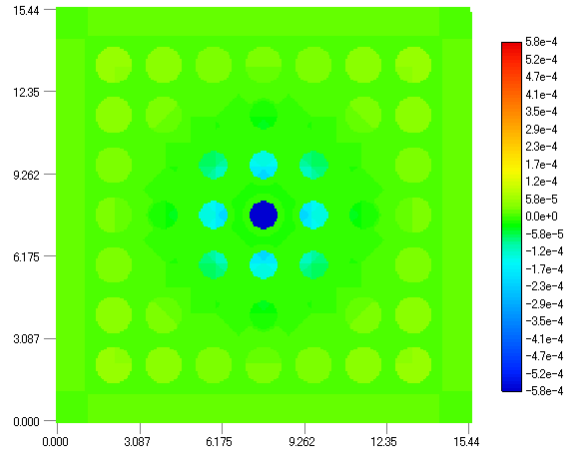


(b) 直接法

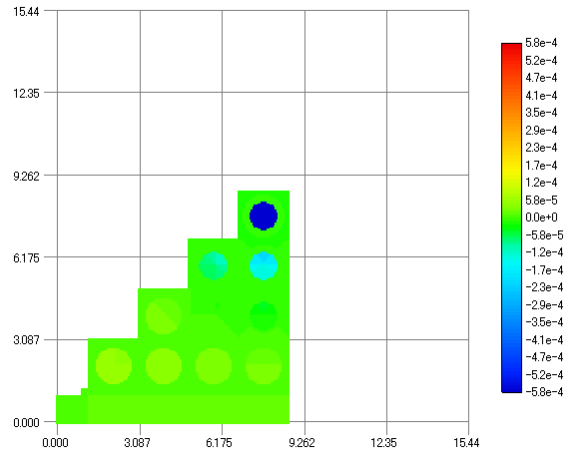


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

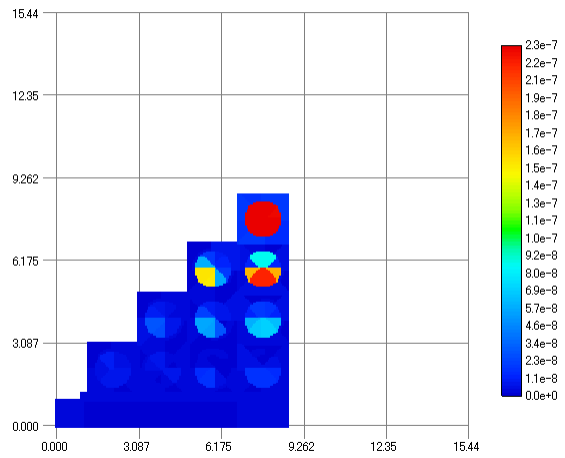
Fig. 3-8-3-5 一般化摂動計算および直接法により得られた4群吸収断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算

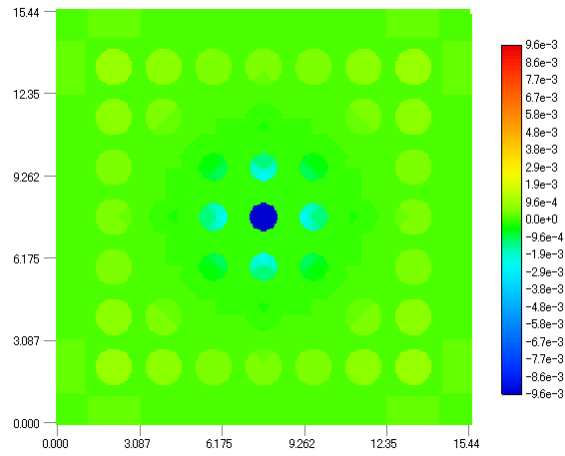


(b) 直接法

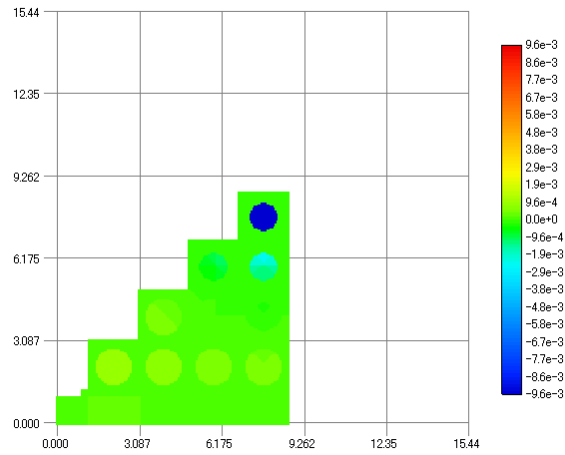


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

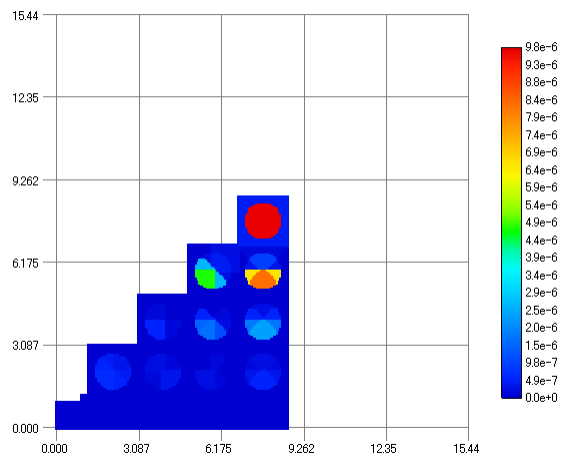
Fig. 3-8-3-6 一般化摂動計算および直接法により得られた5群吸収断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算

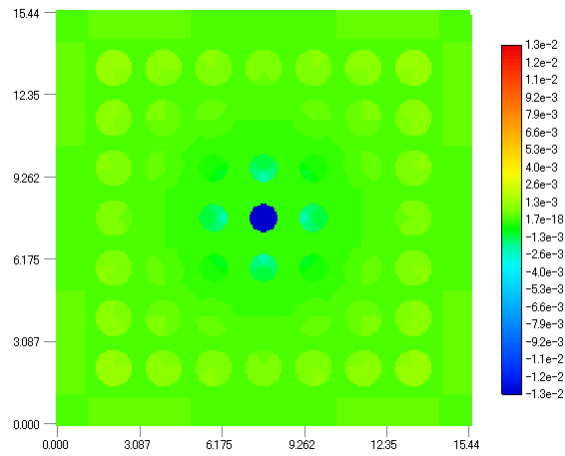


(b) 直接法

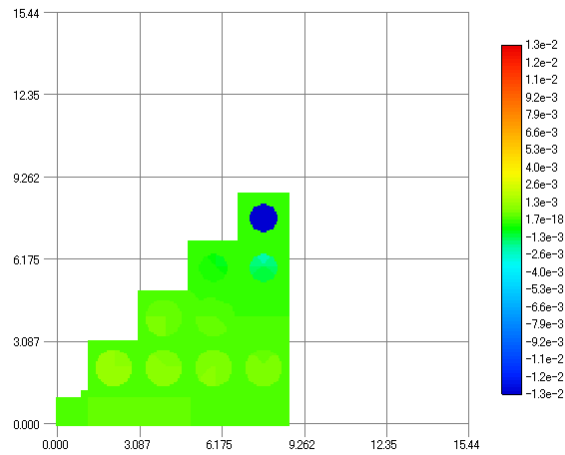


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

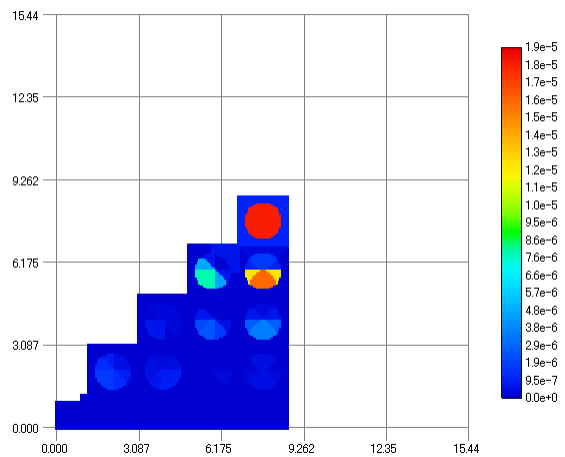
Fig. 3-8-3-7 一般化摂動計算および直接法により得られた6群吸収断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算

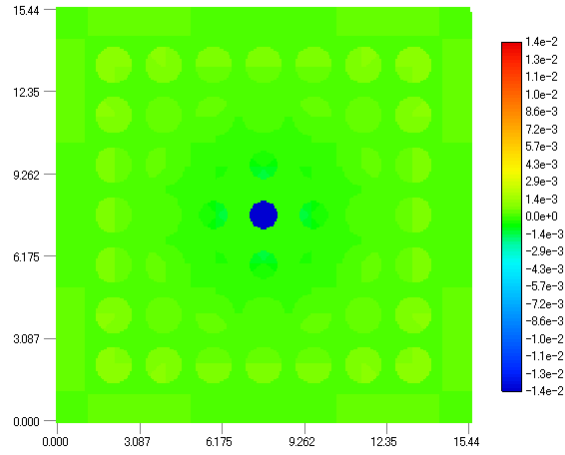


(b) 直接法

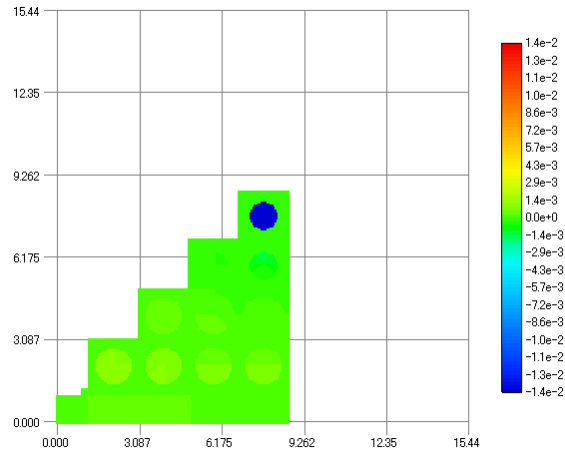


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

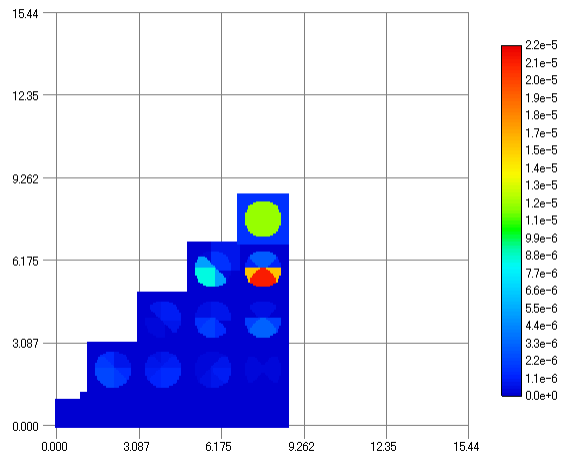
Fig. 3-8-3-8 一般化摂動計算および直接法により得られた7群吸収断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算



(b) 直接法



(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

Fig. 3-8-3-9 一般化摂動計算および直接法により得られた8群吸収断面積の感度係数と差異の絶対値

Figure 3-8-3-2 から Fig. 3-8-3-9 で示した結果において、(a)および(b)は一般化摂動論もしくは直接法による相対感度係数の分布を示し、(c)では相対感度係数の差異の絶対値を示している。すなわち、(a)および(b)の図では「各領域・各エネルギー群の吸収断面積が1%変化した際に、集合体中心の燃料ピンの相対出力が何%変化するか」を意味する。Figure 3-8-3-2 から Fig. 3-8-3-9 に示される結果より、一般化摂動計算コードにより得られた感度数の分布傾向と直接法により算出された感度係数の分布傾向が一致し、その差異の絶対値が十分小さいことが分かる。また、Fig. 3-8-3-2 から Fig. 3-8-3-9 に示された結果のすべてにおいて、集合体中心の燃料ピンの感度係数が負になっていることが確認できるが、これは集合体中心の燃料ピンの中性子捕獲が増加することにより当該燃料ピンでの核分裂反応率が低下し、集合体中心の燃料ピンの相対出力が低下するためである。なお、本検証計算で感度解析の対象とした相対出力は体系内の全核分裂反応率に対する着目燃料ピンの核分裂反応率の比として定義される。故に、断面積の摂動により着目燃料ピンの核分裂反応率への直接的な影響がない場合でも、分母への影響により正あるいは負の感度を持ち得ることに留意されたい。具体的には、各群の感度係数の分布図において燃料集合体の最外周の燃料ピンの感度が正の感度を有していることがわかるが、これは最外周の燃料ピンの中性子捕獲が増加したことにより相対的に集合体中心の燃料ピンの核分裂率が増加したため、これらの領域の吸収断面積の感度が正となったと考えられる。ここでは、燃料集合体中心の燃料ピンと燃料集合体最外周の燃料ピンに着目して、それらの感度係数の傾向について簡単に説明したが、いずれにおいてもこれらの感度は吸収断面積の増加に伴う中性子束分布の歪みに起因するもの、すなわち間接効果である。従って、これらの感度は摂動領域の位置関係に大きく依存しており、各群の感度係数の分布図から集合体中心から外周部に向かうに連れて燃料ピンの感度が負側から正側に変化することが確認できる。しかし、この点に関してエネルギー群によって感度係数の空間的な変化の様子が大きく異なっていることが分かる。具体的には、各群の感度係数の分布図における集合体中心燃料ピン付近の燃料ピン(Fig. 3-8-3-10 参照)に注目すると、このエネルギー群による感度係数の空間的な変化の違いは顕著に現れる。

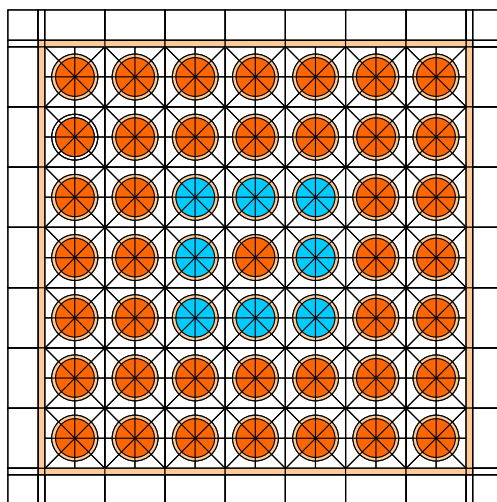
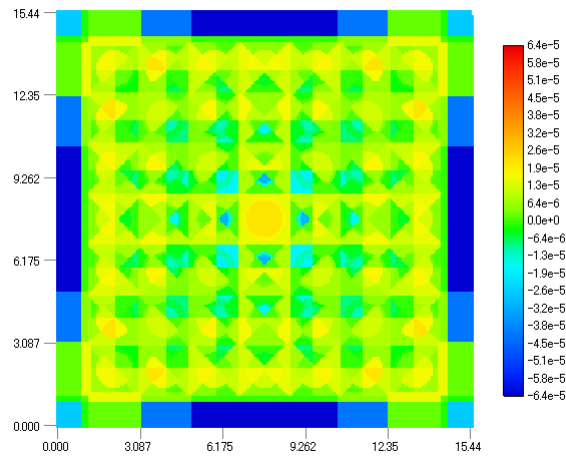


Fig. 3-8-3-10 集合体中心燃料ピン付近の燃料ピン(水色)

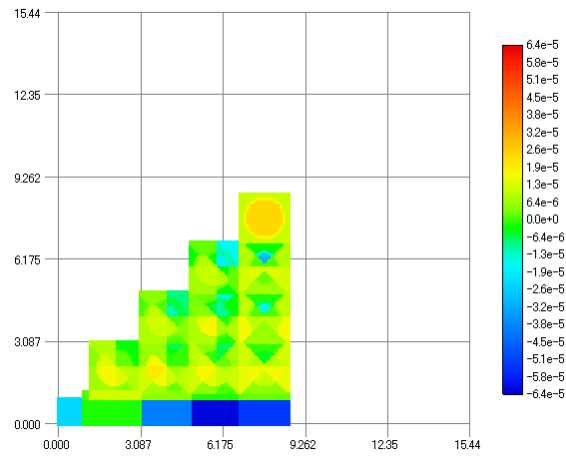
この点について物理的観点から考察する。まず、前述のように本検証計算で感度解析の対象とした相対出力は体系全体の核分裂反応率に対する着目領域の核分裂反応率比として定義されることから、その変化は分母と分子の相殺関係により定まる。具体的には、ここでは吸収断面積が増加した場合の影響を考えていることから、物理的には分母と分子はいずれも減少する変化を受けるため、感度はそれらの相殺関係によって定まるといえる。ただし、分母が体系全体の積分量であるのに対し、分子が着目領域のみでの積分量であることから、断面積の変化によってもたらされる分母の変化よりも断面積の変化による分子の変化の方が感度係数に大きな影響を与えると予想される。また、高速中性子と熱中性子の飛程について考えると、高速中性子の方が熱中性子に比べて長い飛程を持つ。従って、高速群の方が熱群に比べて集合体中心の燃料ピンから遠い領域まで負の感度をもたらしものと推測される。ここで再度 Figure 3-8-3-2 から Fig. 3-8-3-9 に示される結果に注目すると、中性子エネルギーが大きい場合には集合体中心の燃料ピンから遠い領域まで負の感度係数が分布しているのに対し、中性子エネルギーが小さい場合には負の感度係数の分布が集合体中心の燃料ピン付近にとどまっていることが分かる。また、被覆管領域及び減速材領域において、いずれのエネルギー群についても燃料領域に比べ感度が小さくなっていることに関しては、被覆管領域および減速材領域については燃料領域に比べ吸収断面積の大きさが小さく、相対摂動量 1%に対する断面積の絶対的な摂動量が小さいものであったため、中性子束の変化量が他の領域の断面積変化時に比べて相対的に小さくなったことに起因すると考えられる。さらに、2 群吸収断面積の感度係数では、他のエネルギーに比べ被覆管及びチャンネルボックスの感度が大きくなっているが、これは燃料領域及び減速材領域の 2 群吸収断面積が他のエネルギー群よりも小さくなっていることにより、被覆管及びチャンネルボックスの感度が相対的に大きく見えることによるものと考えられる。

以上に示された結果から、一般化摂動計算コードにより算出された感度係数が直接法により算出された相対感度係数と一致し、かつ、これらの感度係数の分布が物理的に説明できることを確認することができた。この検証結果から、本研究で開発した一般化摂動計算コードは、実機規模の集合体体系においても正しく吸収断面積の感度係数を算出することができると考えられる。

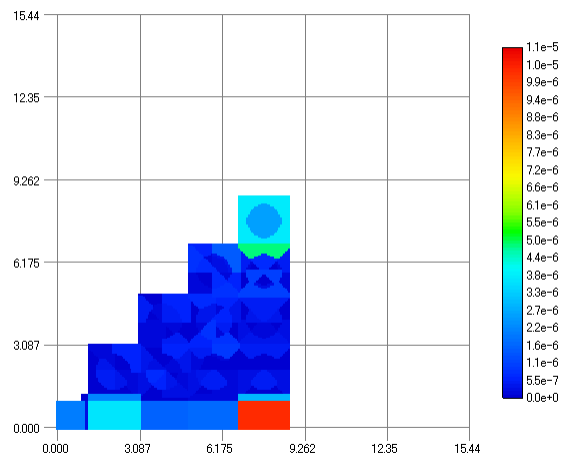
次に、集合体中心の燃料ピンの相対出力に対する自群散乱断面積の相対感度係数の比較を示す。以下、Fig. 3-8-3-11 から Fig. 3-8-3-18 には一般化摂動計算コードおよび直接法により算出された 1 から 8 群の自群散乱断面積の感度係数の比較、ならびにそれらの差異の絶対値の分布を示す。



(a) 一般化摂動計算

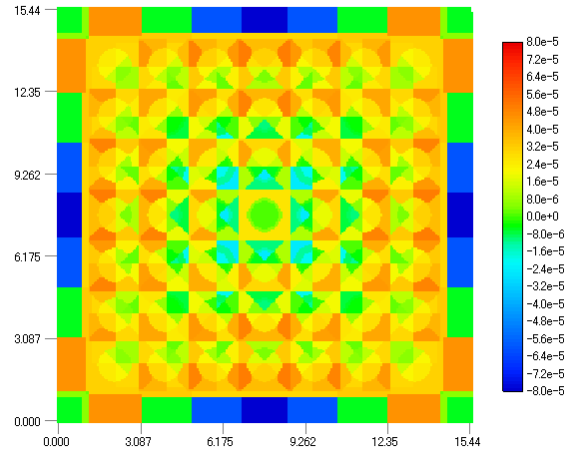


(b) 直接法

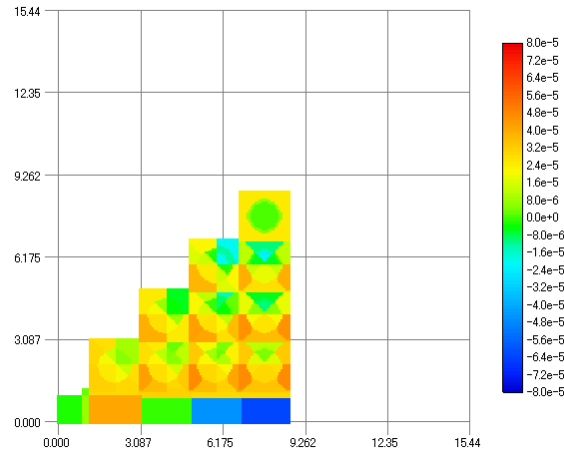


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

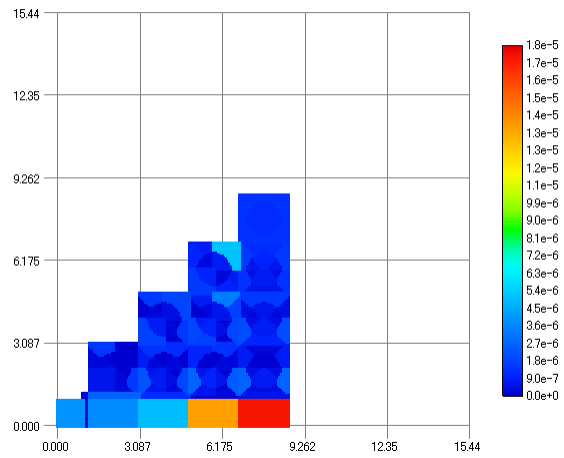
Fig. 3-8-3-11 一般化摂動計算および直接法により得られた1群自群散乱断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算

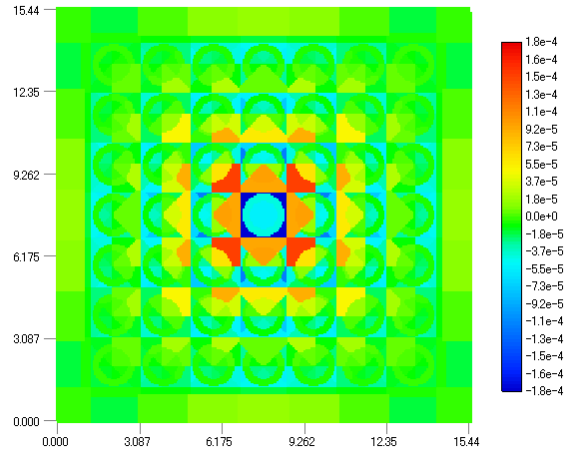


(b) 直接法

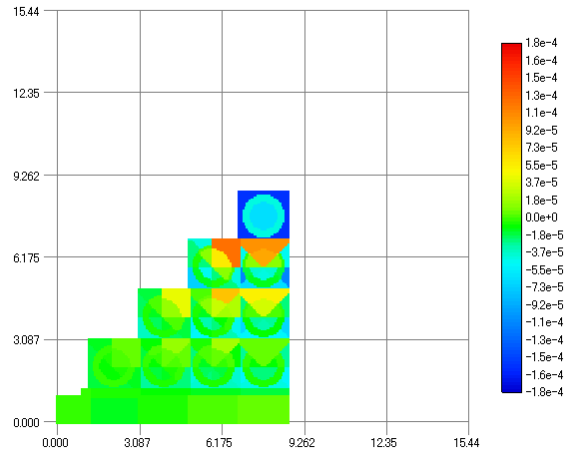


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

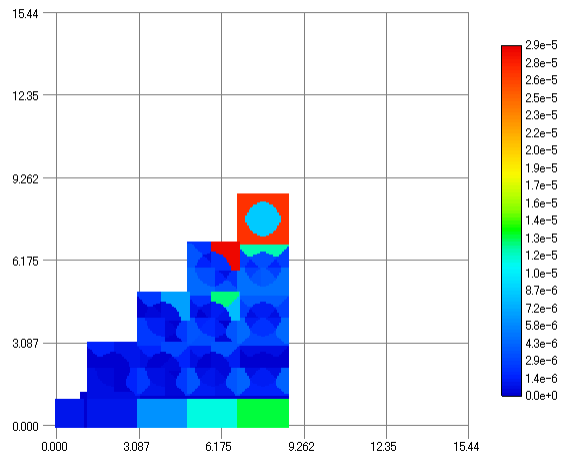
Fig. 3-8-3-12 一般化摂動計算および直接法により得られた2群自群散乱断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算

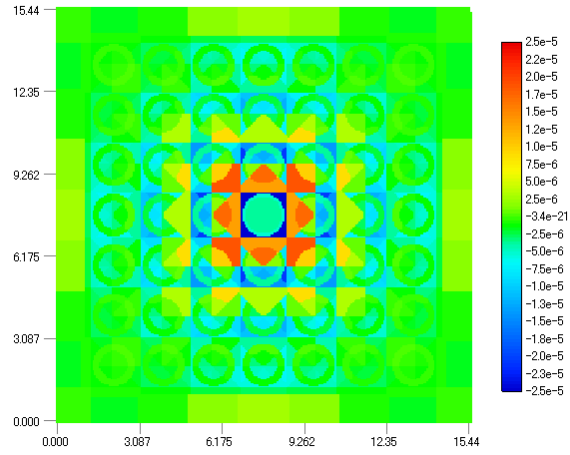


(b) 直接法

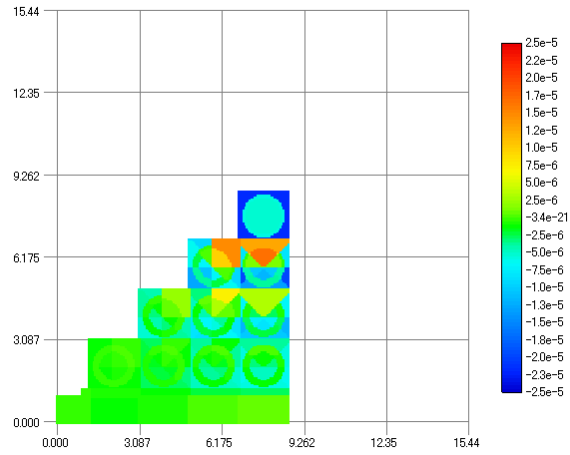


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

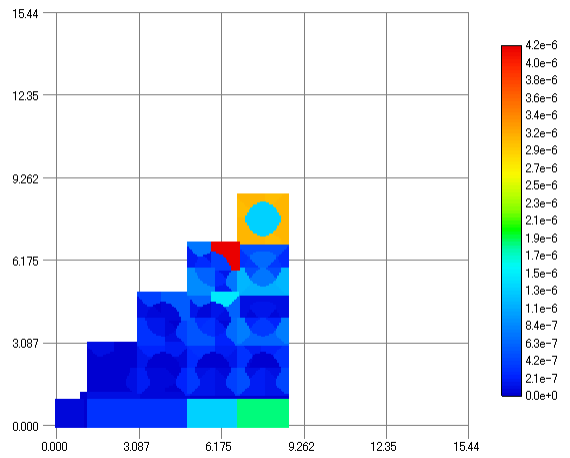
Fig. 3-8-3-13 一般化摂動計算および直接法により得られた3群自群散乱断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算

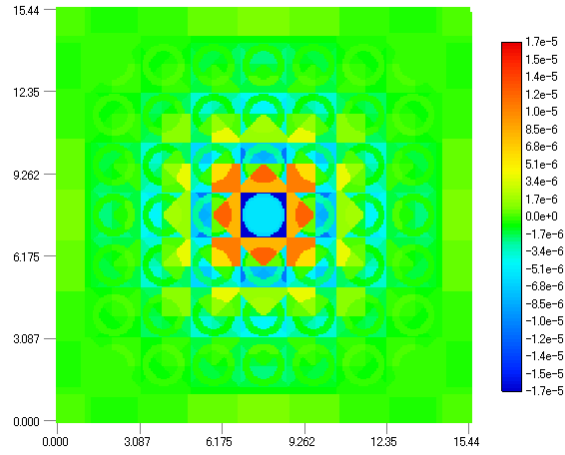


(b) 直接法

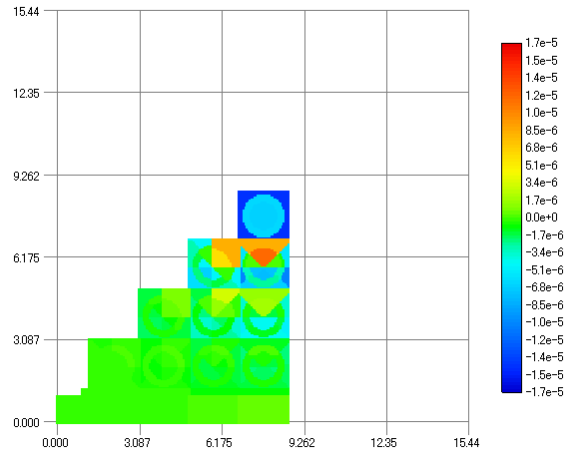


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

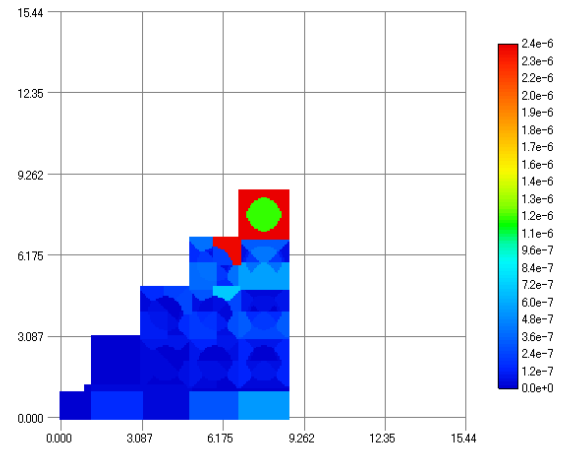
Fig. 3-8-3-14 一般化摂動計算および直接法により得られた4群自群散乱断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算

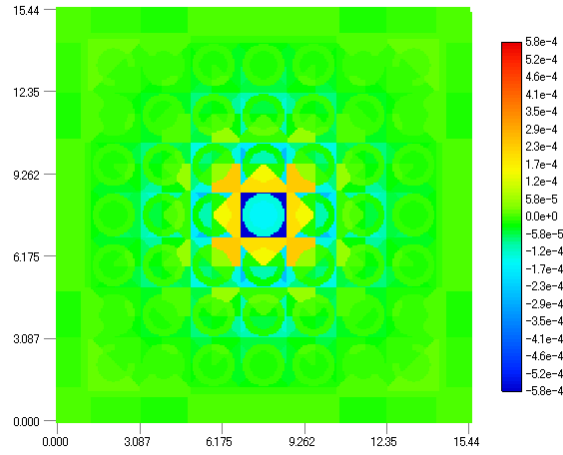


(b) 直接法

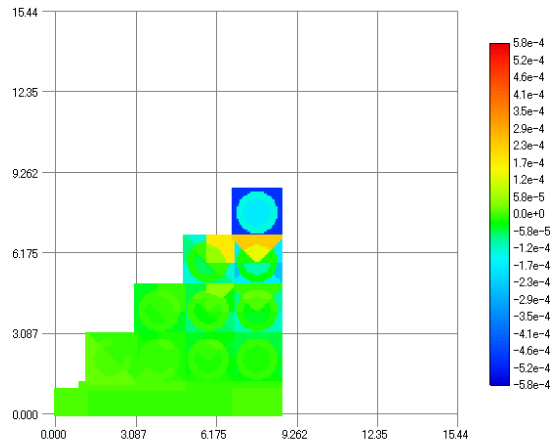


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

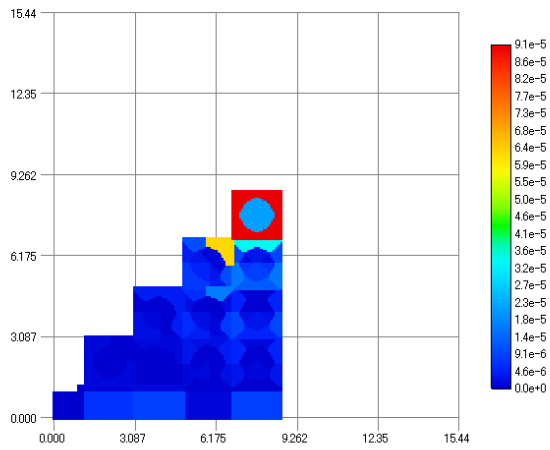
Fig. 3-8-3-15 一般化摂動計算および直接法により得られた5群自群散乱断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算

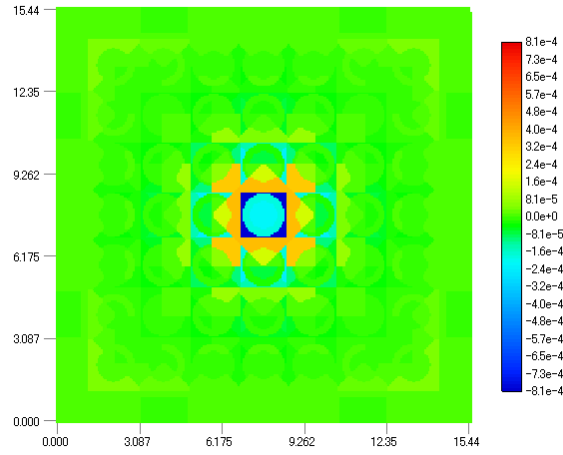


(b) 直接法

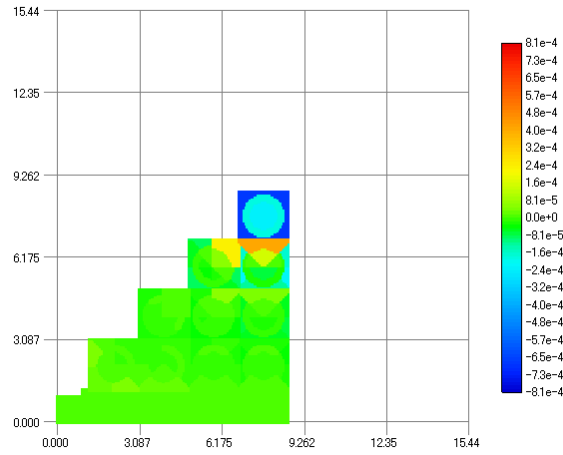


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

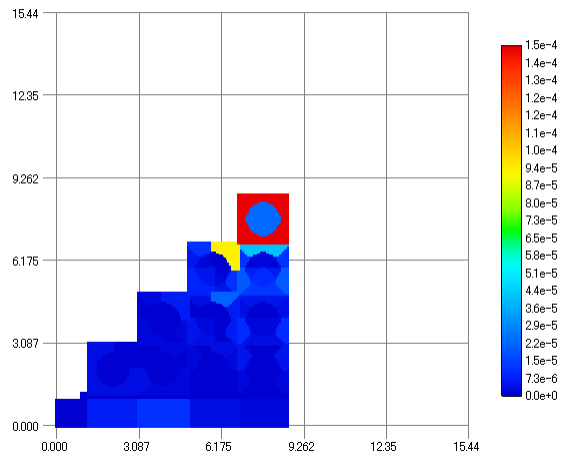
Fig. 3-8-3-16 一般化摂動計算および直接法により得られた6群自群散乱断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算

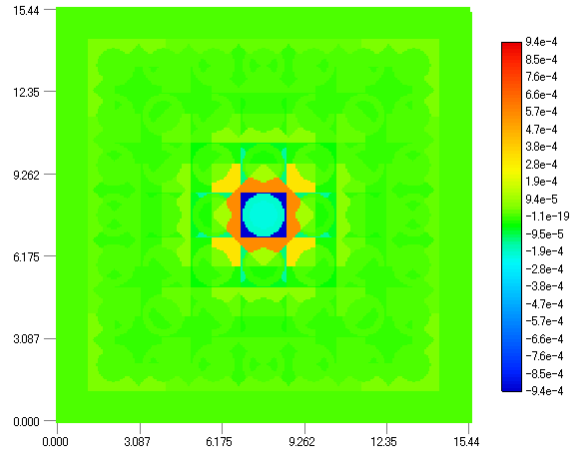


(b) 直接法

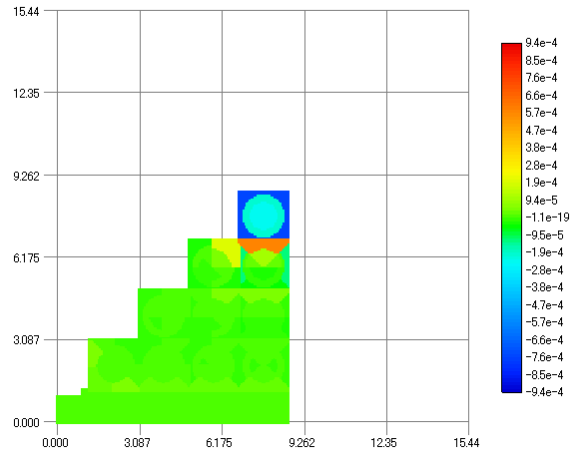


(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

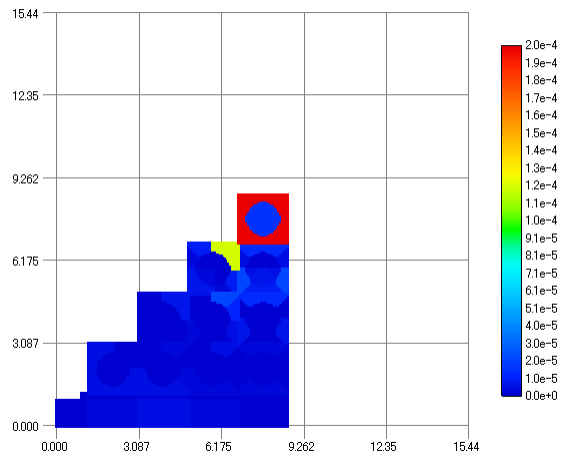
Fig. 3-8-3-17 一般化摂動計算および直接法により得られた7群自群散乱断面積の感度係数と差異の絶対値



(a) 一般化摂動計算



(b) 直接法



(c) 一般化摂動計算と直接法で得られた感度係数の差異の絶対値

Fig. 3-8-3-18 一般化摂動計算および直接法により得られた 8 群自群散乱断面積の感度係数と差異の絶対値

Figure 3-8-3-11 から Fig. 3-8-3-18 に示される計算結果に共通する特徴として、低エネルギー群の感度係数の分布では集合体中心の燃料ピン付近に比較的大きな正または負の感度を持つ領域が集中しているのに対して、高エネルギー群の感度係数の分布においては感度係数が大きい領域が集合体全体に分布している傾向が見受けられる。ここで、先に述べた「(3-8-3-1)式で定義される集合体中心の燃料ピンの相対出力への影響は、断面積摂動の体系全体への効果(分母の変化)よりも断面積の摂動の集合体中心ピンへの効果(分子の変化)が優位に現れる」という推測に基づけば、上述したエネルギー群による感度係数分布傾向の違いは物理的には中性子の飛程の違いに起因するものと推測できる。すなわち、低エネルギー群の中性子は飛程が短いため集合体中心の燃料ピン付近に感度が大きい領域が集中し、高エネルギー群では中性子の飛程が長くなるために大きな感度を持つ領域が体系全体に分散したものと考えられる。以上に示したように、本計算で得られた計算結果に対しては物理的観点に基づく一定の説明を与えることができる。しかしその一方で、Fig. 3-8-3-11 から Fig. 3-8-3-18 に示される計算結果からは正の感度領域と負の感度領域が隣り合って存在する点など、物理的に不可解な点も確認できる。これらの点について物理的考察を試みたが、本研究においてはその解釈に至らなかった。自群散乱断面積の摂動は中性子束へ「中性子の漏れ量」という形で変化を及ぼすが、中性子漏れ量の変化は着目領域(集合体中心の燃料ピン)の中性子束に対して正負いずれの影響も起こしうる。そのため、吸収断面積の感度係数に対する物理的考察のように簡単に解釈することが出来ない。しかし、一般化摂動計算コードの計算結果と直接法の計算結果の比較に着目すれば、感度係数の分布傾向が一致していることが分かる。これにより、一般化摂動計算の妥当性は確認されるものと考えている。また、上記の自群散乱断面積の感度係数の差異の絶対値の分布と前述の吸収断面積の感度係数の差異の絶対値の分布を比較すると、吸収断面積の感度係数の差異の絶対値が 10^{-5} 以下のオーダーであるのに対して、自群散乱断面積の感度係数の差異の絶対値は 10^{-4} 以下のオーダーであることが分かる。本研究ではこの原因について考察し、その改善手法を提案した。しかし、提案手法を開発コードにそのまま実装することは計算コストの観点から困難であるため、この内容については Appendix G に記載した。

本節では、ここまで集合体中心の燃料ピンの相対出力を着目パラメータとして、開発コードと直接法により計算した吸収断面積と自群散乱断面積の感度係数比較結果について説明してきた。これにより、開発コードにより算出された感度係数が直接法により算出された感度係数と概ね一致していることが示され、開発コードの妥当性が示された。

次に、一般化摂動計算の計算コストについて言及する。なお、前述のように Forward 法である直接法と Adjoint 法である一般化摂動論の計算コストは入力パラメータ数と出力パラメータ数に強く依存するため、一般的には単純に比較することはできない。そこで、ここでは本検証計算で一般化摂動論の計算に必要とされた計算時間と同様の条件で通常の MOC 計算を行うために必要とされた計算時間を示し、それに対して考察を加えることとする。Table 3-8-3-1 には本計算条件における通常の MOC 計算(Forward MOC 計算)で必要な計算時

間と開発コード(一般化摂動論)の計算に必要な計算時間の比較を示す。

Table 3-8-3-1 通常の MOC 計算と開発コードの計算時間の比較

	Forward MOC計算	開発コード
計算時間[s]	231	7676
相対値	1	33.2

なお、Table 3-8-3-1 には Forward MOC 計算 1 回あたりに必要な計算時間と一般化摂動計算 1 回あたりに必要な計算時間を示した。すなわち、断面積変化後の体系あるいは異なる着目パラメータに対しても同等な計算時間で計算が行えると仮定すれば、 n 個の入力パラメータと m 個の出力パラメータを持つ体系において直接法と一般化摂動論ではそれぞれ以下の計算時間が必要となると推定される。

$$\text{直接法} : (n+1) \times 231 [\text{s}]$$

$$\text{一般化摂動論} : m \times 7676 [\text{s}]$$

すなわち、出力パラメータ数 m に対して入力パラメータ数 n がおよそ 33 倍以上の条件であれば、開発コードの方が有効な感度解析手法となり得ると言える。本検証計算において、入力パラメータ数は 10 万個程度(領域数×エネルギー群数×断面積種類数)存在し、一方考慮すべき出力パラメータ数は 10 数個程度(縮約断面積数)である。従って、本検証計算の条件下では開発手法は計算コストの観点から直接法に比べて非常に有効であるといえる。

しかしその一方で、開発手法による集合体感度解析には Forward MOC 計算の 33 倍程度の計算時間が必要となると推定されることから、開発手法をさらに計算時間が必要となる燃焼感度解析に拡張することが困難であることが示唆される。本研究では燃焼感度解析の具体的な計算手法についての検討を行っていないため燃焼感度解析に必要な計算コストの評価は行っていないが、最低限の計算量として本検証計算で実施した集合体体系での感度解析を燃焼ステップ分だけ行うことが必要であると推定される。一般的に、軽水炉の集合体燃焼計算では 100 ステップ程度の燃焼ステップを与えることから、本手法を集合体計算に拡張した場合には最低でも 100 回分の集合体感度解析と同等の計算コストが必要となるものと推定される。具体的には、本研究で利用した計算機と同等の性能の計算機を使用した場合には、集合体タイプ・ブランチ²³あたり

$$7676[\text{s}] \times 100[\text{回}] = 767600[\text{s}] \approx 210[\text{h}] \quad (3-8-3-3)$$

程度の計算時間が必要となると推定される。また、本研究の検証計算で取り扱った Peach Bottom2 号機を例にとれば集合体タイプは 6 種類[24]であり、考慮するブランチを数点から数十点と仮定すれば、一般化摂動論を利用した集合体燃焼感度解析には全体としてさらに 100 倍程度のオーダーの計算コストが最低限必要であると見込まれる。よって、集合体タイプやブランチごとに並列計算を行ったとしても、本手法に基づく燃焼感度解析を行うことは現状の計算機性能では実用的な手法とは言えない。従って、実用的な燃焼感度解析手法の開発のためにはより効率的な感度解析手法を検討する必要があると思われる。

²³ 集合体計算ではボイド率や制御棒挿入履歴を変化させた複数の条件で同一の燃焼集合体の少数群巨視的断面積を評価する。また、この計算をブランチ計算と呼ぶ。

3.9 集合体均質化断面積に対する一般化摂動計算の適用

本節では、本研究で開発した一般化摂動計算コードを用いた集合体均質化 1 群縮約断面積に対する感度解析について説明する。3.8 節においては、考察を簡単化するために燃料集合体中心の燃料ピンの相対出力を着目パラメータに設定し、検証計算・考察を行った。しかし、本研究の最終目的である炉心特性値の不確かさを評価し、断面積調整法の適用に必要な多群微視的断面積の感度係数を評価するためには、炉心計算で用いられる集合体均質縮約断面積に対する多群断面積の感度係数を評価する必要がある。すなわち、感度解析の着目パラメータとして下式で定義される縮約断面積を選ぶ必要がある。

$$R = \Sigma_x = \frac{\langle \Sigma_{x,g} \psi_g \rangle}{\langle \psi_g \rangle} \quad (3-9-1)$$

ここで Σ_x は縮約後の集合体均質化断面積、 $\Sigma_{x,g}$ は縮約前の g 群断面積、 ψ_g は g 群角度中性子束である。なお、ここでは簡単のため縮約後の断面積を 1 群として扱っているが、積分範囲を修正することで縮約後の群数を変えることができる。上記の縮約断面積を感度解析の着目パラメータとして選ぶ際、一般化随伴角度中性子束が従う一般化随伴方程式は以下のように表すことができる。

$$\left(\mathbf{A}^\dagger - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \right) \gamma^\dagger = \frac{\Sigma_{x,g}}{\langle \Sigma_{x,g} \psi \rangle} - \frac{1}{\langle \psi \rangle} \quad (3-9-2)$$

以下では、(3-9-2)式から得られた一般化随伴角度中性子束 γ^\dagger を用いて計算した吸収断面積の縮約断面積に対する感度解析結果を示す。なお、ここでは縮約後のエネルギー群数を 1 群として計算を行った。

以下、Fig. 3-9-1 から Fig. 3-9-8 には、開発コードの一般化摂動計算により得られた集合体均質化吸収断面積に対する感度係数を示す。

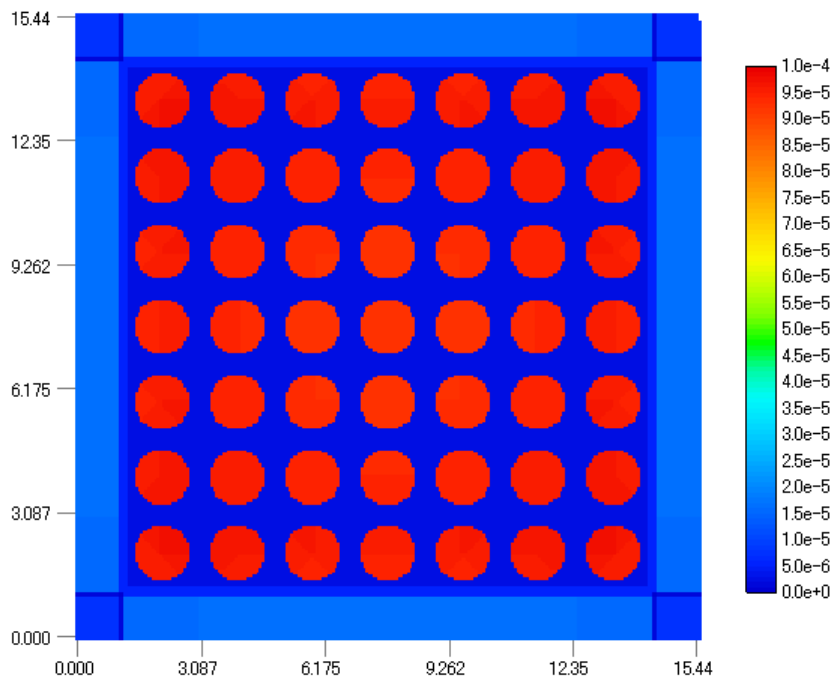


Fig. 3-9-1 集合体均質化吸収断面積に対する 1 群吸収断面積の感度係数

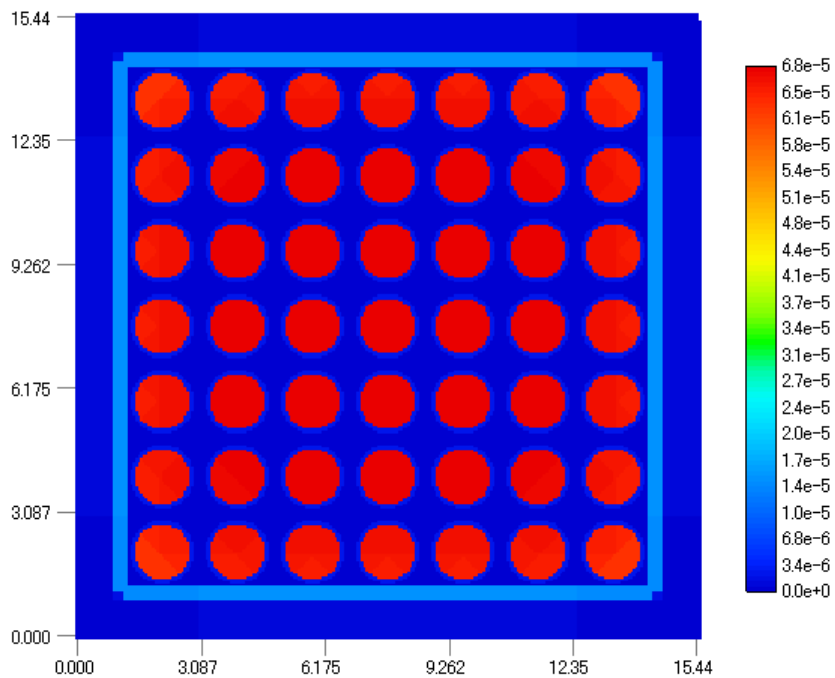


Fig. 3-9-2 集合体均質化吸収断面積に対する 2 群吸収断面積の感度係数

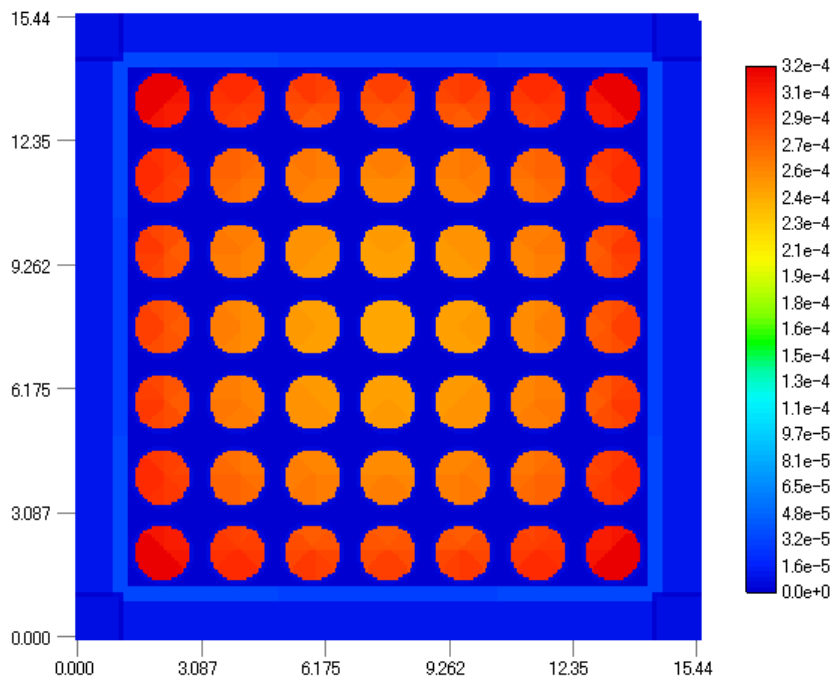


Fig. 3-9-3 集合体均質化吸収断面積に対する 3 群吸収断面積の感度係数

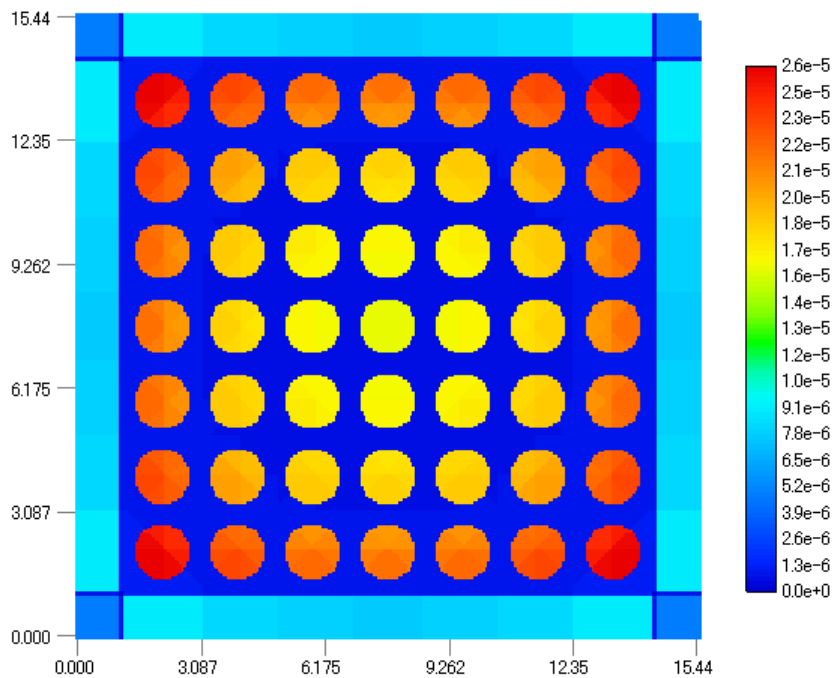


Fig. 3-9-4 集合体均質化吸収断面積に対する 4 群吸収断面積の感度係数

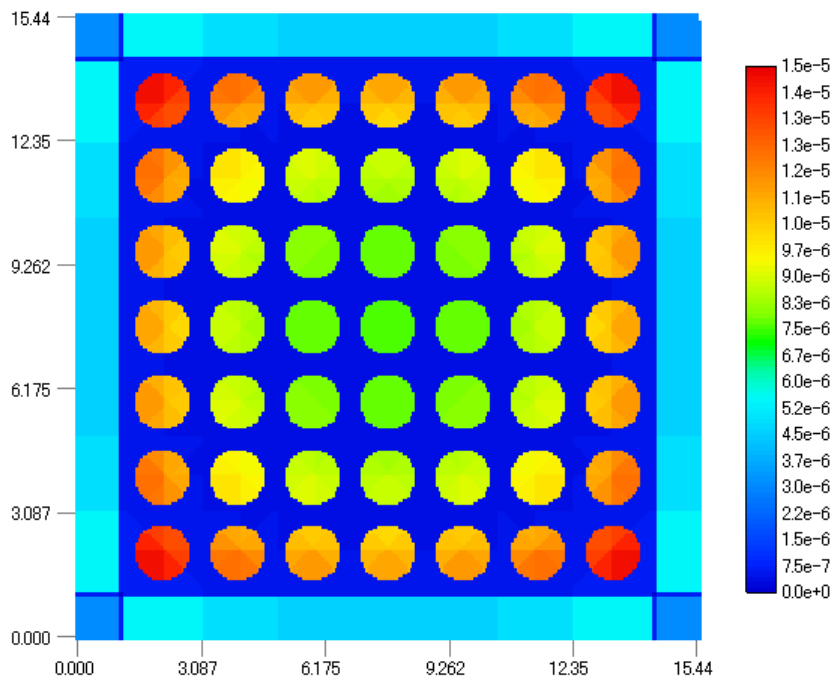


Fig. 3-9-5 集合体均質化吸収断面積に対する 5 群吸収断面積の感度係数

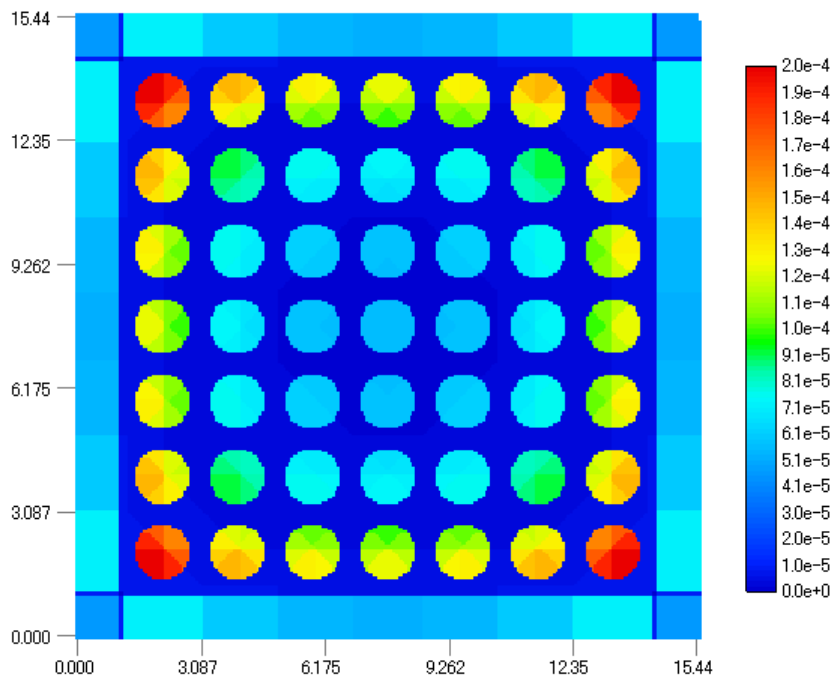


Fig. 3-9-6 集合体均質化吸収断面積に対する 6 群吸収断面積の感度係数

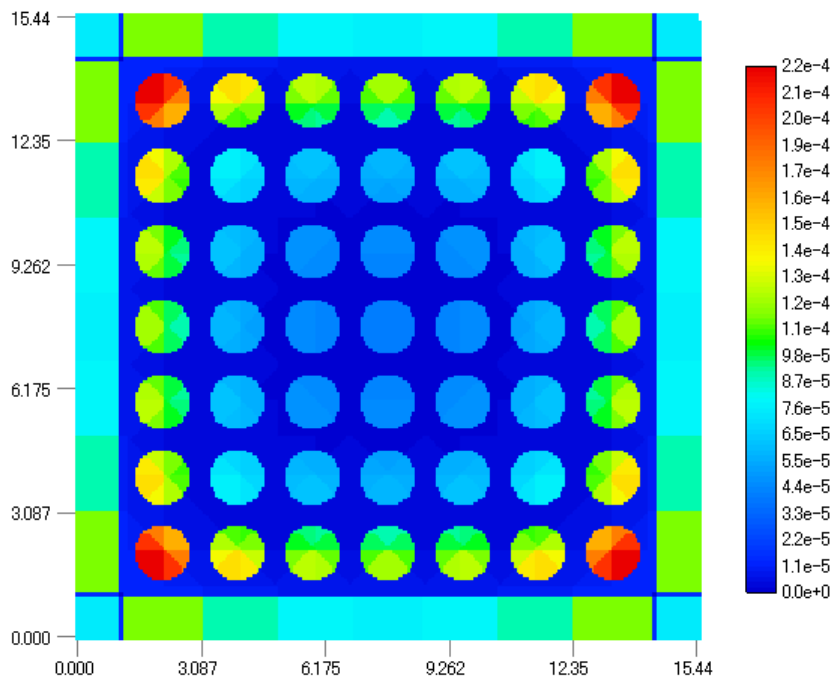


Fig. 3-9-7 集合体均質化吸収断面積に対する 7 群吸収断面積の感度係数

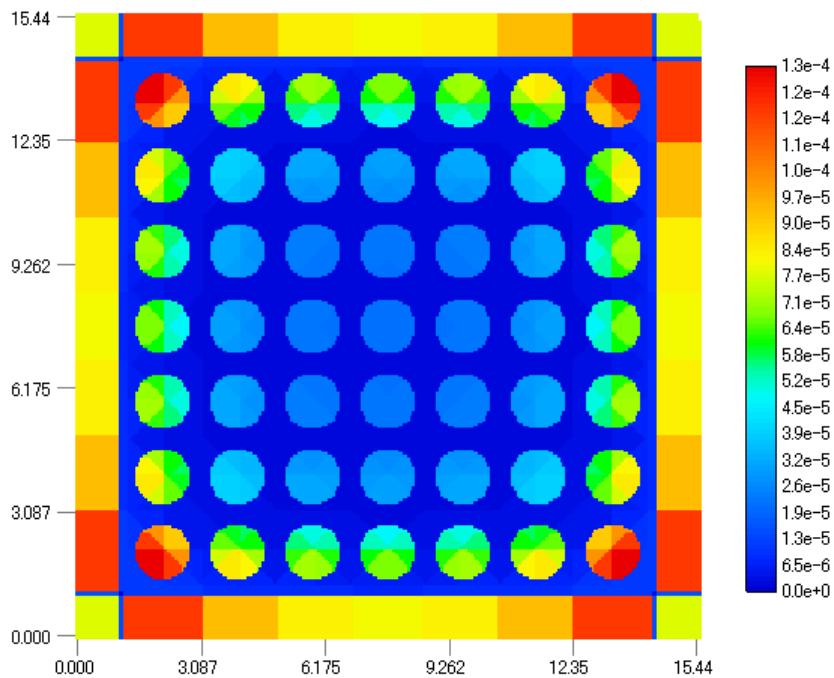


Fig. 3-9-8 集合体均質化吸収断面積に対する 8 群吸収断面積の感度係数

Figure 3-9-1 から Fig. 3-9-8 に示される結果より、低エネルギー群の燃料領域の吸収断面積が集合体均質化縮約断面積に対して大きな感度を持つ傾向が確認できる。また、低エネルギー側のエネルギー群における感度係数の分布から外周部の燃料が大きな感度を持つことが分かるが、これは集合体の外側のウォーターギャップにおいて中性子の減速が進み、この領域で熱中性子の吸収反応が多く生じることに起因するものと思われる。特徴的な分布としては、Fig. 3-9-8 に示した 8 群吸収断面積の感度係数の分布においてウォーターギャップ領域の感度が大きいことが分かるが、これは減速材の減速効果によりウォーターギャップで中性子束が大きくなる為、吸収断面積の感度が大きくなったものと考えられる。さらに、各群のウォーターギャップ領域の端において局所的に感度の小さい部分が存在するが、これは摂動が加わる領域が小さい為はその部分の感度が小さくなったものと考えられる。

本節には集合体均質化吸収断面積に対する感度係数のみを記載したが、一般化摂動計算では一般化随伴中性子束を計算する際の源の項を変えることで、任意の反応率比に対する感度解析を実施することができ、他の集合体均質化断面積に対しても容易に感度解析ができることをここに明記しておく。

3.10 本章のまとめ

本章では、一般化摂動論に基づく集合体感度解析手法の開発について説明した。

3.1 節においては、本章で説明した研究の概説を述べた。ここで、本章で説明した研究と 2 章で説明した研究の関連性についても言及した。次に、3.2 節で本研究の理解のために必要な数学的・物理的基礎について説明した。

3.3 節において既存の輸送計算コードを用いて随伴中性子束を求めるための断面積転置法について説明し、3.4 節において輸送理論に基づく一般化摂動論の導出を示した。また、3.5 節では一般化摂動論の計算に必要な一般化随伴中性子束の計算方法の 1 つであるノイマン級数法について説明した。さらに、3.6 節では一般化随伴全中性子束から一般化随伴角度中性子束を計算するための角度分布再計算法について説明した。

その後、3.7 節で本研究の提案手法に基づく一般化摂動計算コードの開発について説明した。そこでは、開発コードの仕様についても言及した。次に、3.8 節で開発コードの検証計算について説明し、開発コードの妥当性を示すとともに、計算コストの観点から開発コードが直接法(Forward 法)に比べて有効であると結論づけた。一方で、開発手法の燃焼感度解析への適用性についても言及し、実用的な燃焼感度解析手法の開発のためにはより高効率な手法を検討する必要があると考察した。最後に、3.9 節において、本章で説明した手法の目的である集合体均質化縮約断面積に対する多群吸収断面積の感度解析の適用計算結果を示した。

第4章 結論

4.1 結論

炉心解析では数値シミュレーションによって原子炉内の中性子や流体の挙動を評価し、様々な原子炉の特性を評価する。しかしながら、炉心解析により評価される炉心特性は様々な要因に起因する不確かさを含む。この不確かさ要因は、数値シミュレーションにおけるモデル化に起因するものと入力パラメータに起因するものの2つに大別できる。前者に関しては、近年の計算機性能の大幅な向上を背景に、その低減を目的とした解析手法の高度化のための研究が進められつつある。しかし、後者の入力パラメータに起因する炉心特性値の不確かさ評価および低減に関する検討はこれまでに十分に行われていない。そこで、本研究においては、不確かさを有する入力パラメータのうち核断面積に着目し、核断面積の不確かさに起因する炉心特性予測値の不確かさ評価および、断面積調整法を利用した不確かさ低減を目的とした。そのために、本研究では次の2つの検討を実施した。1つ目は2章で説明したランダムサンプリング法に基づく断面積調整法の軽水炉炉心解析への適用性の研究、2つ目は3章で説明した一般化摂動論に基づく集合体感度解析手法の開発である。まず、前者のランダムサンプリング法に基づく断面積調整法の軽水炉炉心解析への適用性の研究によって得られた結論を以下に示す。

- ① ランダムサンプリング法と組み合わせた断面積調整法を軽水炉炉心解析へ適用することにより、核断面積の不確かさに起因する炉心特性値の不確かさを大幅に低減できる可能性が示された。
- ② 提案手法を実機炉心解析へ適用するためには、炉心計算において炉心特性値に対する集合体均質化断面積の感度係数を実用的な計算コストで評価するための高効率な燃焼感度解析手法が必要であることが示唆された。

一方、3章で説明した一般化摂動論に基づく集合体感度解析手法の開発に関する検討では、2章で説明した手法と異なった手順により、軽水炉炉心解析へ断面積調整法を適用することを目的とした。具体的には、2章で説明した手法では集合体均質化少数群断面積を断面積調整法の調整対象としたのに対し、3章で説明した手法では多群微視的断面積を調整対象として捉えた。また、それと同時に、3章で開発した手法を炉心燃焼計算の燃焼感度解析に拡張することで、上記の②に示した問題点に対する解決策を示すことができると考えた。以下には、一般化摂動論に基づく集合体感度解析手法の開発に関する検討により得られた結論を示す。

- ① 輸送理論に基づく一般化摂動論を既存の輸送計算コードに適用し、現行の加速法を利用した **Characteristics** 法に基づく集合体感度解析手法を開発した。
- ② 検証計算により、開発コードの妥当性ととも、直接法と比較して効率的に感度解析を実施できる可能性が示された。
- ③ 開発手法を燃焼感度解析へ拡張することに対する計算コスト上の問題点が示唆された。

よって、輸送理論に基づく炉心燃焼計算の実用的な燃焼感度解析手法を開発するためには、より高効率な手法を検討する必要があると結論づけた。

本研究により、ランダムサンプリング法に基づく断面積調整法の軽水炉炉心解析への適用性およびに集合体固有値計算に対する一般化摂動論に基づく集合体感度解析手法の有用性が示された。しかし、これと同時に、軽水炉炉心解析へ断面積調整法を体系的に導入するためには、より効率的な燃焼感度解析手法が必要であることが示された。また、ランダムサンプリング法に基づく断面積調整法の適用計算においても、本研究では乱数を利用した仮想的な実験を利用し、多くの近似を用いた。これらを踏まえ、次節に今後の課題を示す。

4.2 今後の課題

今後の課題として以下の点が挙げられる。

1. 高効率な燃焼感度解析手法の検討

上述のように、ランダムサンプリング法に基づく断面積調整法の軽水炉炉心解析への適用性の研究において、断面積調整法を軽水炉炉心解析へ適用するためには高効率な燃焼感度解析手法が必要であることが示された。一方で、一般化摂動論に基づく集合体感度解析手法の開発の検討では一般化摂動論を炉心燃焼計算に拡張することは計算コストの観点から非現実的であると結論付けた。従って、断面積調整法を軽水炉炉心解析へ適用するためには、GPT Free[22]や Ep GPT[23]などの高効率な感度解析手法を検討する必要があると思われる。

2. ボイド率・制御棒履歴を考慮した断面積調整法の適用性の評価

実際の軽水炉炉心解析では、集合体燃焼計算において燃焼度をはじめ、原子炉運転時のボイド率や制御棒の挿入履歴を考慮して、1つの燃料集合体に対して多くの状態の集合体均質化断面積をテーブル化する。しかしながら、本研究ではこれを簡易化して、燃料集合体の平均燃焼度のみを変化させた断面積をテーブル化した。従って、本研究の提案手法を実用化するためには、平均燃焼度に加えてボイド率や制御棒履歴を考慮する必要がある。なお、この際には入力パラメータ数が大幅に増加することにより、感度解析の計算コストが更に増大すると推定され、より一層高効率な燃焼感度解析手法の必要性が高まるものと考えられる。

3. 熱水カフィードバック効果を考慮した断面積調整法の適用性の評価

実機軽水炉の炉心解析においては、原子炉内の核的な特性評価とプラント内の熱水力的な特性評価を反復しながら、原子炉の核的特性と熱水力特性を評価する。しかし、本研究の適用計算では、これを簡易化して熱水力的な特性評価を実施せず、核的な特性のみに着目して適用計算を実施した。従って、提案手法を実用化するためには、熱水力的な特性評価を考慮する手法を検討し、その適用性を評価する必要がある。ただし、この際には熱水カフィードバック効果が生じることにより非線形な特性が強く現れるものと考えられ、1次精度の感度係数を利用した断面積調整法の適用性を精査する必要があると考えられる。

4. 実機軽水炉実験値に基づく断面積調整法の適用性の検討

本研究においては、実験炉心の測定実験値を入手することができなかった点と検証の簡易性を考慮して、断面積調整法の適用計算では乱数を利用した仮想的な実験値を用いた。また、仮想的な実験値は設計炉心の解析手法と同一のコードに基づいたため、実験および解析誤差を 0 として取り扱った。従って、本研究における適用計算は、非常に仮想的な条件の下で適用性の評価を実施したにすぎない。故に、本研究で提案した断面積調整法を実機炉心解析に適用するためには、これらを厳密に取り扱い、実機プラントの実験値を利用した適用計算を実施して手法の適用性を評価する必要がある。

5. その他の不確かさ要因の考慮

炉心解析により算出される炉心特性値には、様々な要因による不確かさが付随する。本研究では、これらの不確かさのうち、断面積の不確かさに起因する炉心特性値の不確かさのみに着目し、これを評価/低減する手法について検討した。しかし、炉心特性値の不確かさを正しく評価するためには、すべての不確かさの要因について評価を行う必要がある。具体的には、炉内構造物の幾何形状、原子数密度、解析モデルなどの不確かさが考慮すべき不確かさとして挙げられる。

参考文献

- [1] エネルギー白書 2010 第2部 エネルギー動向(2010/06),
“<http://www.enecho.meti.go.jp/topics/hakusho/2010/2.pdf>”(参照 2013/01/07).
- [2] 日本と世界の原子力(2012/07/05),
“http://www.jaif.or.jp/ja/nuclear_world/overseas/f0101.html”(参照 2013/01/07).
- [3] 不確かさの入門ガイド, 独立行政法人製品評価技術基盤機構認定センター(2004/05/01)
“http://www.iajapan.nite.go.jp/jcss/pdf/koukaib_f/ASG104-03.pdf”(参照 2013/01/07)
- [4] T. Kamei and T. Yoshida, “Error due to nuclear data uncertainties in the prediction of large liquid-metal fast breeder reactor core performance parameters,” *Nucl. Sci. Eng.*, **84**, 83 (1983).
- [5] T. Takeda and Y. Yoshimura, “Prediction uncertainty evaluation methods to core performance parameters in large liquid-metal fast breeder reactors,” *Nucl. Sci. Eng.*, **103**, 157 (1989).
- [6] Hany S. Abdel-Khalik, “Adaptive Core Simulation,” 博士論文, ノースカロライナ州立大学 (2004).
- [7] 山本章夫ほか, “第42回 炉物理夏期セミナー 『高速炉の炉物理・軽水炉の炉物理 — 共存の時代を見据えて—』,” 社団法人日本原子力学会(2010).
- [8] 吉川恒夫, *ロボット制御基礎論*, コロナ社, 東京, (1988), pp. 222-227, ISBN 4-339-04130-0.
- [9] 柳井晴夫, 竹内啓, *射影行列・一般化逆行列・特異値分解*, 東京大学出版会, 東京, (1983), pp. 111-124.
- [10] M.L. Eaton, *Multivariate Statistics: A Vector Space Approach*, John Wiley & Sons, New York, (1983), pp.116–117, ISBN 0471027766. Available at <http://projecteuclid.org/>
- [11] Robb J. Muirhead, *Aspects of multivariate statistical theory*, John & Sons, New York, (1982), pp. 1-14, ISBN 0471094420.
- [12] K. Yokoyama, M. Ishikawa, T. Kugo, “Extended cross-section adjustment method to improve the prediction accuracy of core parameters,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, 49 (2012), pp. 1165-1174.
- [13] 石川眞, 沼田一幸, 佐藤若英, 杉野和輝, *高速炉用統合炉定数 ADJ2000 の作成*, JNC TN9400 2001-071, 核燃料サイクル開発機構, (2001).
- [14] K. Okumura, T. Kugo, K. Kaneko and K. Tsuchihashi, *SRAC2006 : A Comprehensive Neutronics Calculation Code System*, JAEA-Data/Code 2007-004, Japan Atomic Energy Agency, (2007).
- [15] 平岡和幸, 堀玄, *プログラミングのための線形代数*, オーム社, 東京, (2004), ISBN 4-274-06578-2.

- [16] EIGEN Main Page (2013/01/04)
 “http://eigen.tuxfamily.org/index.php?title=Main_Page”(参照 2013/01/07)
- [17] M. Matsumoto and T. Nishimura, "Mersenne Twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator", *ACM Trans. on Modeling and Computer Simulation*, 8 (1998), pp. 3-30.
- [18] 酒井友宏, 柴茂樹, 齋藤邦義, “UAM ベンチマーク問題の解析(6)統計的サンプリング法を用いた炉心問題の解析”, 日本原子力学会 秋の大会, 広島大学, 9月19日-9月21日, 2012, (2012).
- [19] Joel Rhodes and Malte Edenius, *CASMO-4, A Fuel Assembly Burnup Program, User's Manual*, Studsvik/SOA-95/1, Studsvik of America Inc. (1995).
- [20] K. S. Smith, et al., *SIMULATE-3: The Studsvik Steady-State Nodal Reactor Analysis Code*, Studsvik/SOA-89/03, Studsvik of America Inc. (1989).
- [21] JENDL-4.0u (2012/11/15),
 “<http://www.wndc.jaea.go.jp/jendl/j40/update/>”(参照 2013/01/30).
- [22] Chris Kennedy, Cristian Rabiti and Hany Abdel-Khalik, “GPT-Free Sensitivity Analysis for Eigenvalue Problems,” *Trans. Am. Nucl. Soc.*, 105, (2011), pp. 869-871.
- [23] Congjian Wang and Hany S. Abdel-Khalik, “An EpGPT-Based Approach for Uncertainty Quantification,” *Proc. PHYSOR 2012*, Knoxville, Tennessee, USA, April 15-20, 2012, (2012), [CD-ROM]
- [24] K. Ivanov, M. Avramova, I. Kodeli and E. Sartori, *Benchmark for Uncertainty Analysis in Modelling (UAM) for Design, Operation and Safety Analysis of LWRs, Specification and Support Data for the Neutronics Cases (Phase I), vol. I*, NEA/NSC/DOC(2007)23, OECD Nuclear Energy Agency, (2007).
- [25] A. Yamamoto, T. Endo, M. Tabuchi, N. Sugimura, T. Ushio, M. Mori, M. Tatsumi and Y. Ohoka, “AEGIS: An Advanced Lattice Physics Code for Light Water Reactor Analysis,” *Nucl. Eng. Tech.*, 42 (2010), pp. 501-519.
- [26] N. Sugimura, T. Ushio, A. Yamamoto and M. Tatsumi, “Calculation Models of AEGIS/SCOPE2, a Core Calculation System of Next Generation,” *Proc. PHYSOR-2006*, Vancouver, Canada, Sep. 10-14, 2006, (2006), ISBN 0894486977. [CD-ROM].
- [27] 小林啓祐, *原子炉物理*, コロナ社, 東京, (1996), pp. 152-158, ISBN 4339065838.
- [28] ジェームス J. ドウデルスタット, ルイス J. ハミルトン, *原子炉の理論と解析(上巻)*, 現代工学社, 東京, (1980), pp. 246-224, ISBN 4874720803.
- [29] T. Takeda, K. Asano and T. Kitada, “Sensitivity Analysis based on Transport Theory,” *J.*

Nucl. Sci. Technol., 43 (2006), pp. 743-749.

- [30] 坂本達也, “一般化摂動論を用いたスペクトル干渉効果の補正方法に関する研究”, 卒業論文, 名古屋大学, (2012).
- [31] A. Hara, T. Takeda, Y. Kikuchi, *SAGEP: Two-Dimensional Sensitivity Analysis Code Based on Generalized Perturbation Theory*, JAERI-M 84-027, Japan Atomic Energy Agency, (1984).
- [32] A. Yamamoto, T. Ikehara, T. Ito and E. Saji, “Benchmark Problem Suite for Reactor Physics Study of LWR Next Generation Fuels,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, 39 (2002), pp. 900-912.
- [33] T. Sano and T. Takeda, “Generalized bias factor method for accurate prediction of neutronic characteristics,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, 43 (2006), pp. 1465-.
- [34] 久語輝彦, “核特性予測値の不確かさ評価と低減のための拡張バイアス因子法に関する研究,” 博士論文, 大阪大学, (2007).
- [35] Gaël Guennebaud, “An overview of Eigen. First Plafirim scientific day,” Bordeaux, 31st May 2011. (http://downloads.tuxfamily.org/eigen/eigen_plafirim_may_2011.pdf)
- [36] K. Tsuchihashi, Y. Ishiguro, K. Kaneko and M. Ido, *Revised SRAC Code System*, JAERI-1302, Japan Atomic Energy Research Institute, (1986).
- [37] 武田充司, 仁科浩二郎, *ラマーシュ: 原子炉の初等理論(下)*, 吉岡書店, 京都, (1976), pp. 782-818, ISBN 4842701803.

公刊論文

1. S. Kato, T. Endo, A. Yamamoto, Y. Kimura, “Development of a Lattice Physics Code for Sensitivity Analysis Based on Generalized Perturbation Theory,” *Trans. Am. Nucl. Sci.*, 105 (2011), pp. 851-854.
2. 加藤慎也, 遠藤知弘, 山本章夫, 木村佳央, “Characteristics 法を用いた一般化摂動論に基づく集合体感度解析手法の開発”, 日本原子力学会 春の年会, 福井大学, 3月19日-3月21日, 2012 (2012).
3. 加藤慎也, 遠藤知弘, 山本章夫, 山内英人, 木村佳央, “BWR 炉心解析への断面積調整法の適用可能性に関する検討”, *KURRI-KR(CD)*, 39 (2013), pp. 92-101.
4. 加藤慎也, 遠藤知弘, 山本章夫, 山内英人, “軽水炉炉心解析に対するランダムサンプリング法に基づく断面積調整法の適用”, 日本原子力学会 春の年会, 近畿大学, 3月26日-3月28日, 2013 (2013).

Appendix A 断面積調整法とバイアス因子法の比較

これまでの研究により、臨界実験等で得られた積分データを利用して炉心特性予測値の不確かさを低減する手法が幾つか開発されてきた。これらの手法は大きく 2 つに分けられる。1 つ目は本研究で検討した断面積調整法であり、2 つ目はバイアス因子法と呼ばれる手法である。これら 2 つの手法は、いずれも炉心特性予測値の不確かさを低減を目的とした手法であるが、その概念は全く異なっており、異なる性質を持っている。本 Appendix ではこれら手法の特徴について説明する。断面積調整法については、本論文中で詳細な説明を記載したためここでは説明を割愛し、本 Appendix ではバイアス因子法について説明をした後にこれら 2 つの手法の比較を行う。なお、バイアス因子法には、従来バイアス因子法[4]、一般化バイアス因子法[33]、拡張バイアス因子法[34]などの幾つかの方法があるが、本 Appendix ではこれら手法の基礎であり、最も導出が容易である従来バイアス因子法について説明することとする。

[従来バイアス因子法基礎式の導出]

ここでは、参考文献[34]を引用して、従来バイアス因子法の基礎式の導出について説明する。

従来バイアス因子法では、モックアップ炉心における実験値 E_M と実験解析値 C_M の比をバイアス因子 f_M として定義する。

$$f_M = \frac{E_M}{C_M} \quad (\text{A-1})$$

次式に示すように、実機炉心の核特性 R に対する設計計算値 R_C に、上記のモックアップ炉心のバイアス因子を乗じて、実機炉心の設計予測値 R_R として補正を施し、設計計算値の改善が図られる。

$$R_R = R_C \cdot f_M = R_C \frac{E_M}{C_M} \quad (\text{A-2})$$

(A-2)式が従来バイアス因子法における補正の基礎式である。次に、従来バイアス因子法による補正に伴う炉心特性予測値の不確かさの変化について説明する。

設計計算値には、断面積誤差に起因する誤差と手法誤差が含まれ、実験値には実験誤差が含まれているものと仮定すると、設計予測値は以下のように表すことができる。

$$R_R = R_t (1 + S_R \Delta\sigma + \Delta M_R) \frac{R_M (1 + \Delta E_M)}{R_M (1 + S_M \Delta\sigma + \Delta M_M)} \quad (\text{A-3})$$

ここで、 S および ΔM はそれぞれ核特性に対する断面積の感度係数及び手法誤差を意味し、添字の R 及び M はそれぞれ実機炉心及びモックアップ炉心を意味する。断面積の感度係数は、(A-4)式に示されるように断面積の相対変化に対する核特性の相対変化により定義される。

$$S = \frac{dR/R}{d\sigma/\sigma} \quad (\text{A-4})$$

また、 $\Delta\sigma$ は断面積の相対誤差を表しており、(A-5)式で定義される量である。

$$\Delta\sigma = d\sigma/\sigma \quad (\text{A-5})$$

モックアップ炉心での実験値の実験誤差は ΔE_M により表される。 R_i 及び R_M は、それぞれ、実機炉心及びモックアップ炉心における核特性の真値である。

これらの誤差の絶対値が1に比べて十分に小さいものと仮定すると、(A-3)式は以下のように変形できる。

$$R_R = R_i \{1 + (S_R - S_M)\Delta\sigma + (\Delta M_R - \Delta M_M) + \Delta E_M\} \quad (\text{A-6})$$

断面積誤差に起因する誤差、手法誤差及び実験誤差の間で相関がないものと仮定すると、バイアス補正後に得られる設計予測値の分散は、以下のように表す事ができる。

$$V\left(\frac{R_R}{R_i}\right) = (S_R - S_M)V_\sigma(S_R - S_M)^T + V(\Delta M_R - \Delta M_M) + V(\Delta E_M) \quad (\text{A-7})$$

ここで、 V_σ は各断面積の共分散行列である。一方、バイアス補正前の実機炉心の設計計算値のもつ分散は以下で与えられる。

$$V\left(\frac{R_C}{R_i}\right) = S_R V_\sigma S_R^T + V(\Delta M_R) \quad (\text{A-8})$$

理想的なモックアップ炉心、すなわち完全モックアップ炉心による実験結果は実機炉心での結果に相当し、実機炉心に対する設計計算値は実機炉心での結果で補正されることになる。(A-7)式と(A-8)式を比較すると、(A-7)式は、モックアップ炉心で得られたバイアス因子を設計計算値に乗じることで、断面積誤差に起因する誤差及び手法誤差による解析誤差を相殺することができるため、設計計算値に含まれる不確かさを大幅に低減できることを意味している。ただし、モックアップ炉心の実験値に含まれる実験誤差が新たに不確かさとして加えられることが(A-7)式より分かる。以上より、従来バイアス因子法では、実験誤差の小さいモックアップ実験の結果を用いることが肝要である。

[断面積調整法とバイアス因子法の比較]

ここまでの説明で、従来バイアス因子法の基礎式の導出を示した。ここでは、従来バイアス因子法と断面積調整法の比較を行い、それぞれの手法の特徴について言及する。

まず、比較の対象としてそれぞれの手法の基礎式を以下に示す。

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_0 + \mathbf{M}\mathbf{G}^T(\mathbf{V}\mathbf{e} + \mathbf{V}\mathbf{m} + \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T)^{-1}(\mathbf{R}\mathbf{e} - \mathbf{R}\mathbf{c}(\mathbf{T}_0)) \quad (\text{2-3-5-1})(\text{再掲})$$

$$\mathbf{M}' = \mathbf{M} - \mathbf{M}\mathbf{G}^T(\mathbf{V}\mathbf{e} + \mathbf{V}\mathbf{m} + \mathbf{G}\mathbf{M}\mathbf{G}^T)^{-1}\mathbf{G}\mathbf{M}$$

$$R_R = R_C \cdot f_M = R_C \frac{E_M}{C_M} \quad (\text{A-2})(\text{再掲})$$

$$V\left(\frac{R_R}{R_i}\right) = (S_R - S_M)V_\sigma(S_R - S_M)^T + V(\Delta M_R - \Delta M_M) + V(\Delta E_M) \quad (\text{A-7})(\text{再掲})$$

なお、(2-3-5-1)式が断面積調整法の基礎式、(A-2)式及び(A-7)式が従来バイアス因子法の基礎式である。(2-3-5-1)式の意味は2.3.5式で説明したため、ここでの説明は省略する。

これらの式から断面積調整法とバイアス因子法の最も大きな相違点の1つとして、補正

の対象が異なっていることが分かる。すなわち、断面積調整法は積分データを利用して、入力パラメータである各断面積を補正するのに対して、バイアス因子法では積分データを利用して出力パラメータである炉心特性予測値を補正する。この相違点から、質の良い(感度係数が近似した)モックアップ炉心が存在し、かつ、実験誤差が小さな積分データが得られている場合に、設計対象の炉心の不確かさを効率良く低減することが出来るのはバイアス因子法であるといえる。すなわち、断面積調整法では実験炉心²⁴における実験値と計算値の誤差ノルムを最小にするように断面積を調整するが、その調整により得られた調整断面積が設計炉心における実験値と設計計算値を最小化することは保証されない。一方で、バイアス因子法では設計計算値に対して直接補正を施すため、質の良いモックアップ炉心の実験値が存在する場合には、断面積調整法よりも効果的に不確かさを低減することが可能であると考えられる。ただし、バイアス因子法の欠点として、バイアス因子法を適用するためにはモックアップ炉心が必要であり、効果的にバイアス因子法を適用するためには設計炉心と感度係数が近似したモックアップ炉心を用いる必要がある。

また、バイアス因子法においてはバイアス補正後の炉心特性予測値の分散にモックアップ炉心の実験誤差の項が線形結合により付加されることが(A-7)式から分かる。従って、モックアップ炉心の実験誤差が非常に大きい場合には、バイアス補正前の炉心特性値の不確かさよりバイアス補正後の炉心特性値の不確かさが大きくなることとなる。一方、断面積調整法では、(2-3-5-1)式に従い断面積の分散が低減される。この時、実験炉心における測定値の実験誤差が非常に大きい場合には、断面積調整による断面積の不確かさ低減量が小さくなることにより、補正後の炉心特性予測値の不確かさが補正前の炉心特性予測値の不確かさに帰着する。従って、断面積調整法の方がバイアス因子法に比べ実験誤差に対して堅牢であるといえる。

²⁴ 「モックアップ炉心」は「設計炉心を模擬する炉心」を含意するが、「実験炉心」はこれを含意しない。

Appendix B 特異値分解の具体例

2.2.2 項においては、本研究を理解するための数学的準備として特異値分解(Singular Value Decomposition : SVD)について抽象的な説明を行なった。本 Appendix においては、具体的な行列を例に挙げて特異値分解の数学的意味を説明することとする。

いま、次に示す 2×3 実行列を考える。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B-1})$$

この行列 \mathbf{A} を(2-2-2-3)式に示される形に特異値分解する。

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{W} \mathbf{V}^T \quad (\text{2-2-2-3})(\text{再掲})$$

まず、行列 \mathbf{W} の要素である特異値を求める。このためには、行列 $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ あるいは $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ の固有値の平方根を求めればよい。この時、 $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ の固有値と $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ の固有値の数およびその値は一致するので計算が容易な方法を固有値計算の対象として選択すべきである。すなわち、 2×3 行列 \mathbf{A} に対する $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ は 3×3 行列であるのに対して、 $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ は 2×2 行列であることから $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ の固有値を求める。 $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ は次式により計算される。

$$\mathbf{A} \mathbf{A}^T = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 14 & 6 \\ 6 & 3 \end{pmatrix} \quad (\text{B-2})$$

さらに、 $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ の固有値は次式で得られる。

$$\begin{aligned} \det \begin{pmatrix} 14 - \lambda & 6 \\ 6 & 3 - \lambda \end{pmatrix} &= 0 \\ \lambda^2 - 17\lambda + 6 &= 0 \\ \lambda &= \frac{17 \pm \sqrt{265}}{2} \end{aligned} \quad (\text{B-3})$$

この固有値の平方根をとったものが 2×3 行列 \mathbf{W} の対角成分となる。次に、直交行列 \mathbf{U} の要素を求める。直交行列 \mathbf{U} の要素は $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ の固有ベクトルであることから、次式に基づきこれを求める。

$$\begin{pmatrix} 14 & 6 \\ 6 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{17 \pm \sqrt{265}}{2} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \quad (\text{B-4})$$

(B-4)式を解くことで、それぞれの固有値に対応した以下の固有ベクトルが得られる。

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{11 + \sqrt{265}}{12} \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \frac{11 - \sqrt{265}}{12} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B-5})$$

さらにこれを各ベクトルのノルムが 1 となるように規格化すれば、

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{144} (11 + \sqrt{265})^2}} \begin{pmatrix} \frac{11 + \sqrt{265}}{12} \\ 1 \end{pmatrix}, \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{144} (11 - \sqrt{265})^2}} \begin{pmatrix} \frac{11 - \sqrt{265}}{12} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B-6})$$

を得る。同様に $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ の固有ベクトルも求める。

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \\ 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 3 & 5 & 7 \\ 4 & 7 & 10 \end{pmatrix} \quad (\text{B-7})$$

なお、行列の固有値はすでに得られているため、ここでは求めないこととし、(B-7)式で定義される行列の固有ベクトルを求めると次のベクトルが求まる。

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{9}{5} + \frac{1}{15}(17 + \sqrt{265}) \\ -\frac{2}{5} + \frac{1}{30}(17 + \sqrt{265}) \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -\frac{9}{5} + \frac{1}{15}(17 - \sqrt{265}) \\ -\frac{2}{5} + \frac{1}{30}(17 - \sqrt{265}) \\ 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B-8})$$

なお、(B-8)式の最後に示されるベクトルは $\lambda = 0$ の固有値に対応する固有ベクトルである。これらを同様に各ベクトルのノルムで規格化すると以下のベクトルが得られる。

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(-\frac{9}{5} + \frac{1}{15}(17 + \sqrt{265})\right)^2 + \left(-\frac{2}{5} + \frac{1}{30}(17 + \sqrt{265})\right)^2}} \begin{pmatrix} -\frac{9}{5} + \frac{1}{15}(17 + \sqrt{265}) \\ -\frac{2}{5} + \frac{1}{30}(17 + \sqrt{265}) \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\frac{1}{\sqrt{1 + \left(-\frac{9}{5} + \frac{1}{15}(17 - \sqrt{265})\right)^2 + \left(-\frac{2}{5} + \frac{1}{30}(17 - \sqrt{265})\right)^2}} \begin{pmatrix} -\frac{9}{5} + \frac{1}{15}(17 - \sqrt{265}) \\ -\frac{2}{5} + \frac{1}{30}(17 - \sqrt{265}) \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{B-9})$$

以上を利用すると、行列 \mathbf{A} の特異値分解は下式により得られる。

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{W} \mathbf{V}^T \quad (2-2-2-3)(\text{再掲})$$

ただし、

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \frac{11 + \sqrt{265}}{12\sqrt{1 + \frac{1}{144}(11 + \sqrt{265})^2}} & \frac{11 - \sqrt{265}}{12\sqrt{1 + \frac{1}{144}(11 - \sqrt{265})^2}} \\ 1 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{144}(11 + \sqrt{265})^2}} & \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{144}(11 - \sqrt{265})^2}} \end{pmatrix} \quad (\text{B-10})$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{17 + \sqrt{265}}{2}} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{17 - \sqrt{265}}{2}} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B-11})$$

$$\mathbf{V} = \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} & V_{13} \\ V_{21} & V_{22} & V_{23} \\ V_{31} & V_{32} & V_{33} \end{pmatrix} \quad (\text{B-12})$$

$$V_{11} = \frac{1 + \frac{1}{12}(11 + \sqrt{265})}{\sqrt{\left(1 + \frac{1}{12}(11 + \sqrt{265})\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{6}(11 + \sqrt{265})\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{4}(11 + \sqrt{265})\right)^2}} \quad (\text{B-13})$$

$$V_{12} = \frac{1 + \frac{1}{12}(11 - \sqrt{265})}{\sqrt{\left(1 + \frac{1}{12}(11 - \sqrt{265})\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{6}(11 - \sqrt{265})\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{4}(11 - \sqrt{265})\right)^2}} \quad (\text{B-14})$$

$$V_{13} = \frac{1}{\sqrt{6}} \quad (\text{B-15})$$

$$V_{21} = \frac{1 + \frac{1}{6}(11 + \sqrt{265})}{\sqrt{\left(1 + \frac{1}{12}(11 + \sqrt{265})\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{6}(11 + \sqrt{265})\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{4}(11 + \sqrt{265})\right)^2}} \quad (\text{B-16})$$

$$V_{22} = \frac{1 + \frac{1}{6}(11 - \sqrt{265})}{\sqrt{\left(1 + \frac{1}{12}(11 - \sqrt{265})\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{6}(11 - \sqrt{265})\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{4}(11 - \sqrt{265})\right)^2}} \quad (\text{B-17})$$

$$V_{23} = -\sqrt{\frac{2}{3}} \quad (\text{B-18})$$

$$V_{31} = \frac{1 + \frac{1}{4}(11 + \sqrt{265})}{\sqrt{\left(1 + \frac{1}{12}(11 + \sqrt{265})\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{6}(11 + \sqrt{265})\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{4}(11 + \sqrt{265})\right)^2}} \quad (\text{B-19})$$

$$V_{32} = \frac{1 + \frac{1}{4}(11 - \sqrt{265})}{\sqrt{\left(1 + \frac{1}{12}(11 - \sqrt{265})\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{6}(11 - \sqrt{265})\right)^2 + \left(1 + \frac{1}{4}(11 - \sqrt{265})\right)^2}} \quad (\text{B-20})$$

$$V_{33} = \frac{1}{\sqrt{6}} \quad (\text{B-21})$$

本 Appendix においては実例を挙げながら、解析的な特異値分解の方法について説明した。なお、本研究で開発したコードでは数値計算により特異値分解を行なうために、線形代数ライブラリ EIGEN を利用した[16]。ここで、EIGEN において行われる数値計算による特異値分解についても言及する。

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_1 &= \mathbf{R}_1^T \mathbf{A} \mathbf{R}_1 \\
\mathbf{A}_2 &= \mathbf{R}_2^T \mathbf{A}_1 \mathbf{R}_2 \\
\mathbf{A}_3 &= \mathbf{R}_3^T \mathbf{A}_2 \mathbf{R}_3 \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{B-26}$$

のような演算を繰り返し、全ての非対角要素が $\mathbf{0}$ になるまで順次 $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \mathbf{A}_3 \dots$ を求める方法である。さらに、 m 回の繰り返しにより非対角成分が $\mathbf{0}$ の行列 \mathbf{A}_m が得られたとすれば、相似の関係より \mathbf{A}_m の対角要素のそれぞれが行列 \mathbf{A} の固有値を表す。また、

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_m &= \mathbf{R}_m^T \cdots \mathbf{R}_2^T \mathbf{R}_1^T \mathbf{A} \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 \cdots \mathbf{R}_m \\
&= \mathbf{R}_m^{-1} \cdots \mathbf{R}_2^{-1} \mathbf{R}_1^{-1} \mathbf{A} \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 \cdots \mathbf{R}_m \\
&= (\mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 \cdots \mathbf{R}_m)^{-1} \mathbf{A} \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 \cdots \mathbf{R}_m
\end{aligned} \tag{B-27}$$

となるため、行列 \mathbf{S} を $\mathbf{S} = \mathbf{R}_1 \mathbf{R}_2 \cdots \mathbf{R}_m$ により定義すれば、

$$\mathbf{S} \mathbf{A}_m = \mathbf{A} \mathbf{S} \tag{B-28}$$

を得る。 \mathbf{A}_m の第 i 対角要素を λ_i 、 \mathbf{S} の第 i 列を \mathbf{S}_i とすれば、

$$\lambda_i \mathbf{S}_i = \mathbf{A} \mathbf{S}_i \tag{B-29}$$

となり、 \mathbf{S}_i は固有値 λ_i に対応した固有ベクトルとなる。従って、Jacobi 法では任意の実対称行列の固有値と固有ベクトルを同時に評価することが可能である。

次に、適当な行列 \mathbf{R} の作成方法、すなわち(B-23)式に示された行列 \mathbf{R} における p 、 q および θ の決定方法について説明する[15]。そこで、(B-25)式の相似変換により行列 \mathbf{A} がどのように変化するかを考える。

まず、 \mathbf{R}^T を \mathbf{A} に左から掛けると \mathbf{A} がどのように変化するかに着目すれば、 \mathbf{R} を転置した \mathbf{R}^T は \mathbf{R} の $\sin \theta$ の符号が逆になったものであるので、 \mathbf{R}^T を左から掛けた場合も次のように第 p, q 行のみが変化する。

$$\begin{pmatrix} a'_{p1} & \cdots & a'_{pn} \\ a'_{q1} & \cdots & a'_{qn} \end{pmatrix} = \mathbf{R}^T \begin{pmatrix} a_{p1} & \cdots & a_{pn} \\ a_{q1} & \cdots & a_{qn} \end{pmatrix} \tag{B-30}$$

また、各成分の具体的な値は次のようになる。

$$\begin{aligned}
a'_{pj} &= a_{pj} \cos \theta + a_{qj} \sin \theta \\
a'_{qj} &= -a_{pj} \sin \theta + a_{qj} \cos \theta
\end{aligned} \quad (j = 1, \dots, n) \tag{B-31}$$

一方で、(B-30)式及び(B-31)式の転置を考えると、それは行列 \mathbf{A} に \mathbf{R} を右から掛けたものと同値であることから、次のように第 p, q 列のみが影響を受けることが分かる。

$$\begin{pmatrix} a'_{1p} & a'_{1q} \\ \vdots & \vdots \\ a'_{np} & a'_{nq} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1p} & a_{1q} \\ \vdots & \vdots \\ a_{np} & a_{nq} \end{pmatrix} \mathbf{R} \quad (\text{B-32})$$

また、各成分は次のようになる。

$$\begin{aligned} a'_{ip} &= a_{ip} \cos \theta + a_{iq} \sin \theta \\ a'_{iq} &= -a_{ip} \sin \theta + a_{iq} \cos \theta \end{aligned} \quad (i = 1, \dots, n) \quad (\text{B-33})$$

以上より、(B-25)式の相似変換により次のように行列 \mathbf{A} の第 p, q 行と第 p, q 列から成る井桁状の部分だけが変化することとなる。

$$\begin{pmatrix} & a'_{1p} & & a'_{1q} & & \\ & \vdots & & \vdots & & \\ a'_{p1} & \cdots & a'_{pp} & \cdots & a'_{pq} & \cdots & a'_{pn} \\ & & \vdots & & \vdots & & \\ a'_{q1} & \cdots & a'_{qp} & \cdots & a'_{qq} & \cdots & a'_{qn} \\ & & \vdots & & \vdots & & \\ & & a'_{np} & & a'_{nq} & & \end{pmatrix} = \mathbf{R}^T \begin{pmatrix} & a_{1p} & & a_{1q} & & \\ & \vdots & & \vdots & & \\ a_{p1} & \cdots & a_{pp} & \cdots & a_{pq} & \cdots & a_{pn} \\ & & \vdots & & \vdots & & \\ a_{q1} & \cdots & a_{qp} & \cdots & a_{qq} & \cdots & a_{qn} \\ & & \vdots & & \vdots & & \\ & & a_{np} & & a_{nq} & & \end{pmatrix} \mathbf{R} \quad (\text{B-34})$$

なお、井桁の交点以外の成分について、変換後の値は(B-31)式及び(B-33)式の通りである。

一方で、交点の4つの成分についての変換後の値は以下ようになる。

$$\begin{aligned} a'_{pp} &= (a_{pp} \cos \theta + a_{qp} \sin \theta) \cos \theta + (a_{pq} \cos \theta + a_{qq} \sin \theta) \sin \theta \\ &= a_{pp} \cos^2 \theta + a_{qq} \sin^2 \theta + (a_{pq} + a_{qp}) \sin \theta \cos \theta \\ a'_{pq} &= -(a_{pp} \cos \theta + a_{qp} \sin \theta) \sin \theta + (a_{pq} \cos \theta + a_{qq} \sin \theta) \cos \theta \\ &= a_{pq} \cos^2 \theta - a_{qp} \sin^2 \theta + (a_{qq} - a_{pp}) \sin \theta \cos \theta \\ a'_{qp} &= (-a_{pp} \sin \theta + a_{qp} \cos \theta) \cos \theta + (-a_{pq} \sin \theta + a_{qq} \cos \theta) \sin \theta \\ &= a_{qp} \cos^2 \theta - a_{pq} \sin^2 \theta + (a_{qq} - a_{pp}) \sin \theta \cos \theta \\ a'_{qq} &= -(-a_{pp} \sin \theta + a_{qp} \cos \theta) \sin \theta + (-a_{pq} \sin \theta + a_{qq} \cos \theta) \cos \theta \\ &= a_{pp} \sin^2 \theta + a_{qq} \cos^2 \theta - (a_{pq} + a_{qp}) \sin \theta \cos \theta \end{aligned} \quad (\text{B-35})$$

ここで、行列 \mathbf{A} が対称行列であることから $a_{pq} = a_{qp}$ が成り立つことを利用した上で、井桁の交点部以外の成分もまとめて書くと次のようになる。

$$\begin{aligned}
a'_{pj} &= a_{pj} \cos \theta + a_{qj} \sin \theta & (j \neq p, q) \\
a'_{qj} &= -a_{pj} \sin \theta + a_{qj} \cos \theta \\
a'_{ip} &= a_{ip} \cos \theta + a_{iq} \sin \theta & (i \neq p, q) \\
a'_{iq} &= -a_{ip} \sin \theta + a_{iq} \cos \theta \\
a'_{pp} &= a_{pp} \cos^2 \theta + a_{qq} \sin^2 \theta + 2a_{pq} \sin \theta \cos \theta \\
a'_{qq} &= a_{pp} \sin^2 \theta + a_{qq} \cos^2 \theta - 2a_{pq} \sin \theta \cos \theta \\
a'_{pq} &= a_{pq} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) + (a_{qq} - a_{pp}) \sin \theta \cos \theta
\end{aligned} \tag{B-36}$$

次に、平面回転の回転角 θ について考える。Jacobi 法では相似変換した結果 $a'_{pq} = 0$ となるような回転角 θ を選んで相似変換を行なう。そこで、 $a'_{pq} = 0$ となる回転角 θ を求めるため、(B-36)式において $a'_{pq} = 0$ とすれば、

$$\begin{aligned}
a'_{pq} &= a_{pq} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) + (a_{qq} - a_{pp}) \sin \theta \cos \theta = 0 \\
\Rightarrow \frac{a_{pq}}{a_{qq} - a_{pp}} &= \frac{\sin \theta \cos \theta}{\cos^2 \theta - \sin^2 \theta}
\end{aligned} \tag{B-37}$$

となり、右辺に 2 倍角の公式 $\sin 2\theta = 2 \sin \theta \cos \theta$, $\cos 2\theta = \cos^2 \theta - \sin^2 \theta$ を代入すると、

$$\frac{a_{pq}}{a_{qq} - a_{pp}} = \frac{1}{2} \frac{\sin 2\theta}{\cos 2\theta} = \frac{1}{2} \tan 2\theta \tag{B-38}$$

となるため、 $a'_{pq} = 0$ となる回転角 θ は次式で表せる。

$$\theta = \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{2a_{pq}}{a_{pp} - a_{qq}} \tag{B-39}$$

ここで、平面回転による相似変換によりどの程度行列 \mathbf{A} が対角行列に近づいたかを評価するために、行列 \mathbf{A} に対して次の 2 つの関数を定義する。

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{i \neq j} a_{ij}^2, g(\mathbf{A}) = \sum_i a_{ii}^2 \tag{B-40}$$

これらの関数はそれぞれ、 \mathbf{A} の非対角成分と対角成分の自乗和を表す。また、 $f(\mathbf{A}) = 0$ となれば対角化が完成したことになる。

ここで、平面回転による相似変換を 1 回行なうことを考える。まず、 \mathbf{A} に \mathbf{R}^T を左から掛けたときの更新式である(B-31)式から、更新後の 2 つの成分の自乗和を考えると、

$$\begin{aligned}
a'^2_{pj} + a'^2_{qj} &= (a_{pj} \cos \theta + a_{qj} \sin \theta)^2 + (-a_{pj} \sin \theta + a_{qj} \cos \theta)^2 \\
&= a^2_{pj} + a^2_{qj}
\end{aligned} \tag{B-41}$$

となり、対応する成分の自乗和は変化しないことがわかる。同様に、右から掛けた場合の更新式においても対応する成分の自乗和は変化しないことがわかり、全体としては対角成分と非対角成分が対応している箇所、すなわち pq 平面回転による相似変換の場合 a_{pq} の自乗和だけが $f(\mathbf{A})$ から $g(\mathbf{A})$ に移ることがわかる。さらに、このような箇所が a_{pq} と a_{qp} の 2 箇所あるため、 $f(\mathbf{A})$ の値は相似変換一回につき

$$f(\mathbf{A}') = f(\mathbf{A}) - 2a^2_{pq} \tag{B-42}$$

のように減少する。従って、 $|a_{pq}|$ が最大の p と q を選びながら pq 平面回転を繰り返すこと

で最速で $f(\mathbf{A})$ を 0 に近づけることが可能であり、 $f(\mathbf{A})$ が十分に 0 に近づくまで反復を行なうことで対角化を行なうことができる。

Appendix C Moore-Penrose 逆行列の計算方法

本 Appendix においては、Moore-Penrose 逆行列の計算方法について説明する。なお、Moore-Penrose 逆行列を計算する手法は複数存在するが、ここでは特異値分解を利用した方法について説明する。

任意の $n \times m$ 実行列 \mathbf{A} を考えることとする。この行列を特異値分解することで、直交行列 \mathbf{U}, \mathbf{V} および対角行列 \mathbf{W} を用いて以下のように表せる。

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{W} \mathbf{V}^T \quad (2-2-2-3)(\text{再掲})$$

ただし、添字 T は転置行列を意味する。この時、対角行列 \mathbf{W} は以下のように表される。

$$\mathbf{W} = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_r | \mathbf{0}_{n \times (m-r)}) \quad (2-2-2-2)(\text{再掲})$$

なお、 σ は実行列 \mathbf{A} の特異値を表し、その添字は特異値の大きさの順になっている。ここで、 \mathbf{U} は $n \times n$ 直交行列、 \mathbf{V} は $m \times m$ 直交行列である。また、ここで一般化逆行列の定義式(2-2-3-3)式に注目する。

$$\mathbf{A} \mathbf{A}^+ \mathbf{A} = \mathbf{A} \quad (2-2-3-3)(\text{再掲})$$

次に、(2-2-3-3)式の行列 \mathbf{A} を特異値分解することで、すなわち(2-2-3-3)式の両辺の行列 \mathbf{A} を(2-2-2-3)式で置換することで次の式変形を得る。

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \mathbf{A}^+ \mathbf{A} &= \mathbf{A} \\ (\mathbf{U} \mathbf{W} \mathbf{V}^T) \mathbf{A}^+ (\mathbf{U} \mathbf{W} \mathbf{V}^T) &= \mathbf{U} \mathbf{W} \mathbf{V}^T \end{aligned} \quad (C-1)$$

さらに、(C-1)式両辺に左から $(\mathbf{U} \mathbf{W} \mathbf{V}^T)^{-1}$ 、右から $(\mathbf{V}^T)^{-1}$ を乗じることで、次式が得られる。

$$\mathbf{V}^T \mathbf{A}^+ \mathbf{U} \mathbf{W} = \mathbf{I} \quad (C-2)$$

続いて、(C-2)式両辺に左から $(\mathbf{V}^T)^{-1}$ 、右から $(\mathbf{U} \mathbf{W})^{-1}$ を乗じた上に、行列 \mathbf{V} が直交行列であることを考慮すれば次式が得られる。

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{V} \mathbf{W}^{-1} \mathbf{U}^{-1} \quad (C-3)$$

ここで、発見的ではあるが、対角行列 \mathbf{W} の一般化逆行列 \mathbf{W}^+ は次のように表せる。

$$\mathbf{W}^+ = \text{diag} \left[\frac{1}{\sigma_1}, \frac{1}{\sigma_2}, \dots, \frac{1}{\sigma_r}, 0, \dots \right] \quad (C-4)$$

なお、添字 r は行列 \mathbf{A} のランクである。これを用いて、 \mathbf{A} に対する Moore-Penrose 逆行列は下式で求められる。

$$\mathbf{A}^+ = \mathbf{V} \mathbf{W}^+ \mathbf{U}^T \quad (C-5)$$

Appendix D 衝突確率法の計算理論

本 Appendix において、SRAC コードシステムの PIJ コードで用いられている衝突確率法について参考文献[36]に基づいて説明する。なお、中性子束等の表記法に関しても参考文献を踏襲するため、本文中の表記と整合しないことに留意されたい。

いま、定常状態の原子炉を考える。原子炉内の位置 \mathbf{r} において、エネルギー E をもって方向 $\vec{\Omega}$ に向かう角度中性子束 $\varphi(\mathbf{r}, \vec{\Omega}, E)$ は次式の積分型ボルツマン輸送方程式を満たす。

$$\varphi(\mathbf{r}, \vec{\Omega}, E) = \int_0^\infty dR \exp(-\overline{\Sigma R}) \times \left\{ \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\mathbf{r}', \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E' \rightarrow E) \varphi(\mathbf{r}', \vec{\Omega}', E') + S(\mathbf{r}', \vec{\Omega}, E) \right\} \quad (\text{D-1})$$

ここで、 R は点 \mathbf{r} と \mathbf{r}' の間の距離、 $\vec{\Omega}$ は $\vec{\Omega} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}')/R$ によって与えられる方向ベクトル、 $\overline{\Sigma R} = \int_0^\infty \Sigma(s, E) ds$ は点 \mathbf{r} と \mathbf{r}' の間の光学距離、 $\Sigma_s(\mathbf{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E' \rightarrow E)$ は点 \mathbf{r} において方向 $\vec{\Omega}'$ 、エネルギー E' から方向 $\vec{\Omega}$ 、エネルギー E への散乱カーネル、 $S(\mathbf{r}', \vec{\Omega}, E)$ は点 \mathbf{r}' 、方向 $\vec{\Omega}$ 、エネルギー E の中性子源である。上記の方程式において、核分裂中性子源は明示的に取り扱われていないが、これは散乱項または中性子源項に含まれることとなる。ここで、中性子散乱と中性子源が等方であることを仮定する。すなわち、

$$\Sigma_s(\mathbf{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}, E' \rightarrow E) = \frac{1}{4\pi} \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \quad (\text{D-2})$$

$$S(\mathbf{r}, \vec{\Omega}, E' \rightarrow E) = \frac{1}{4\pi} S(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \quad (\text{D-3})$$

となることを仮定する。さらに、(D-1)式を立体角 $\vec{\Omega}$ に対して積分することで下式を得る。

$$\varphi(\mathbf{r}, E) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega}' \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty dR \exp(-\overline{\Sigma R}) \left\{ \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}', E' \rightarrow E) \varphi(\mathbf{r}', E') + S(\mathbf{r}', E) \right\} \quad (\text{D-4})$$

ここで、 $\varphi(\mathbf{r}, E)$ は点 \mathbf{r} 、エネルギー E の中性子束であり、次式で定義される。

$$\varphi(\mathbf{r}, E) = \int_{4\pi} d\vec{\Omega} \varphi(\mathbf{r}, \vec{\Omega}, E) \quad (\text{D-5})$$

(D-4)式は $d\mathbf{r}' = R^2 dR d\vec{\Omega}$ の関係式を利用することで次のように書きなおすことができる。

$$\Sigma(\mathbf{r}, E) \varphi(\mathbf{r}, E) = \int d\mathbf{r}' P(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, E) \left\{ \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\mathbf{r}', E' \rightarrow E) \varphi(\mathbf{r}', E') + S(\mathbf{r}', E) \right\} \quad (\text{D-6})$$

ここで、

$$P(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, E) = \frac{\Sigma(\mathbf{r})}{4\pi R^2} \exp\left(-\int_0^R \Sigma(s) ds\right) \quad (\text{D-7})$$

(D-8)式の形から次の関係式が得られる。

$$\Sigma(\mathbf{r}', E) P(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, E) = \Sigma(\mathbf{r}, E) P(\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}', E) \quad (\text{D-8})$$

次に、全体の系をいくつかの領域に分割することを考える。このとき、それぞれの領域は核的な特性に対して均質であると仮定するが、異なる領域は必ずしも異なる材質である必要はない。衝突確率法において、この領域は空間的な変数である。ここで、空間依存の

断面積を各領域に対して定義し、領域に対する添え字を i として表す。さらに、(D-6)式を V_j に対して積分すると次式を得る。

$$\Sigma_j(E) \int_{V_j} \varphi(\mathbf{r}, E) d\mathbf{r} = \sum_i \int_{V_j} d\mathbf{r} \int_{V_i} d\mathbf{r}' \left\{ \int_0^\infty \Sigma_s(E' \rightarrow E) \varphi(\mathbf{r}', E') dE' + S(\mathbf{r}', E) \right\} \times P(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, E) \quad (\text{D-9})$$

ここで、Flat Flux 近似を導入し、各領域の中性子束を一定とすれば、領域 i の中性子束は $\varphi_i(E)$ によって表され、(D-9)式を次のように離散化することができる。

$$\Sigma_j(E) V_j \varphi_j(E) = \sum_i P_{ij}(E) V_i \left\{ \int_0^\infty \Sigma_{s,i}(E' \rightarrow E) \varphi_i(E') + S_i(E) \right\} \quad (\text{D-10})$$

ここで、衝突確率 $P_{ij}(E)$ は次式で定義される。

$$P_{ij}(E) = \frac{\Sigma_j(E)}{4\pi V_i} \int_{V_j} d\mathbf{r} \int_{V_i} d\mathbf{r}' \frac{\exp(-\bar{\Sigma}R)}{R^2} \quad (\text{D-11})$$

これは、領域 i で等方かつ一様に放出された中性子が領域 j で次の衝突を起こす確率として表される。

さらに、ここで中性子エネルギーを多群に分割することを考える。このため、エネルギー一区間 ΔE_g の平均中性子束を φ_{ig} と表せば、(D-10)式は次の連立方程式に変形できる。

$$\Delta E_g \Sigma_{jg} V_j \varphi_{jg} = \sum_i P_{ijg} V_i \left[\sum_{g'} \Delta E_{g'} \Sigma_{sig' \rightarrow g} \varphi_{ig'} + \Delta E_g S_{ig} \right] \quad (\text{D-12})$$

ここで、 ΔE_g と $\Delta E_{g'}$ はエネルギー群 g と g' のエネルギー幅であり、 $\Sigma_{sig' \rightarrow g}$ は下式で定義される領域 i におけるエネルギー群 g' から g への散乱断面積である。

$$\Sigma_{sig' \rightarrow g} = \int_{\Delta E_{g'}} dE' \int_{\Delta E_g} dE \Sigma_{si}(E' \rightarrow E) \varphi_i(E') / \int_{\Delta E_{g'}} dE' \varphi_i(E') \quad (\text{D-13})$$

上記の導出に見られるように、一度衝突確率が得られれば、中性子束は(D-12)式の連立方程式を、逆行列を用いる方法か反復解法により容易に計算することができる。

ここで、再度(D-11)式の衝突確率の定義に着目すると、この(D-11)式は次式でも同等に表現する事ができる。

$$P_{ij}(E) = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_j} d\mathbf{r} \int_{4\pi} d\bar{\Omega} \int_{R_{j-}}^{R_{j+}} dR \Sigma_j \exp\left\{ - \int_0^R \Sigma(s) ds \right\} \quad (\text{D-14})$$

(D-14)式においてエネルギー群を示す添字は簡単のために省略した。以降の議論においても簡単のためにエネルギー群に関する添字を省略することとする。また、 R_{j-} と R_{j+} は点 \mathbf{r} と \mathbf{r}' を結ぶ直線における点 \mathbf{r} から領域 j の内側と外側の境界の距離を表す。

また、(D-11)式から次の関係式が容易に導かれる。

$$P_{ji} \Sigma_j V_j = P_{ij} \Sigma_i V_i \quad (\text{D-15})$$

この関係は角度に関する積分範囲を減らすために利用することができる。

いま、再度(D-14)式に着目すると、(D-14)式における R に対する積分は均質な領域 j において解析的に計算することができる。すなわち、

$$\begin{aligned}
\int_{R_{j-}}^{R_{j+}} dR \Sigma_j \exp(-\overline{\Sigma R}) &= \exp(-\overline{\Sigma R_{j-}}) \times (1 - \exp(-\Sigma_j (R_{j+} - R_{j-}))) \\
&= \exp(-\overline{\Sigma R})_{R=R_{j-}} - \exp(-\overline{\Sigma R})_{R=R_{j+}}
\end{aligned} \tag{D-16}$$

となる。また、方向 $\vec{\Omega}$ に沿った領域 j に対する総和は $\exp(-\overline{\Sigma R})_{R=0} = 1$ の最初の項のみを残すため、保存則は以下のように簡単に表せる。

$$\sum_j P_{ij} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_i} d\mathbf{r} \int_{4\pi} d\vec{\Omega} = 1 \tag{D-17}$$

同様に、方向に対する確率 P_{ijk} も次のように表すことができる。

$$P_{ijk} = \frac{1}{4\pi V_i} \int_{V_j} d\mathbf{r} \int_{4\pi} d\vec{\Omega} 3\Omega_k^2 \int_{R_{j-}}^{R_{j+}} dR \Sigma_j \exp\left\{-\int_0^R \Sigma(s) ds\right\} \tag{D-18}$$

ここで、添字 k は角度を、 Ω_k は方向 k における方向余弦を表し、次式を満たす。

$$\sum_k \Omega_k^2 = 1 \tag{D-19}$$

ここまでの説明では、参考文献[36]に基づき衝突確率法の計算理論を示した。ここに示された計算理論から分かるように、衝突確率法では中性子の飛行方向を考慮して中性子の移動を評価することができるため輸送計算の一つであるということが出来る。また、領域間の距離が得られれば計算が行えるため、格子メッシュを取り扱う必要がなく、計算体系の幾何形状の自由度が高いという特徴もある。しかしながら、大きな特徴の1つとして、領域 i と領域 j 間の中性子の輸送を考えるために、計算量が領域数の2乗に比例して増大するという特徴を有する。従って、計算体系の領域数を過度に多く設定した場合には非常に膨大な計算時間が必要とされるために、複雑な非均質体系で現実的な計算時間で計算を行なうためには体系の設定を簡易化する必要がある。

Appendix E 拡散理論に基づく一般化随伴方程式の導出

本研究ではMOCを用いて一般化随伴角度中性子束を計算するために、輸送理論に基づき一般化随伴方程式を導出した。その一方で、一般化随伴全中性子束と一般化随伴角度中性子束の関係を導くためには、一般化随伴全中性子束の従う一般化随伴方程式を考える必要がある。そこで、本Appendixでは拡散理論に基づき一般化随伴全中性子束の従う一般化随伴方程式を導出する。

原子炉内の中性子の挙動は、(3-2-3-4)式に示した輸送方程式により記述される。この輸送方程式は角度中性子束 ψ について記述された方程式であるが、「中性子束の角度分布を1次の球面調和関数で近似」、「中性子流をフィックの法則で近似」等の条件の下で輸送方程式を変形し、全中性子束 ϕ に関する式に変形したものは拡散方程式と呼ばれ、拡散演算子 \mathbf{M} を用いて以下のように表される。

$$\mathbf{M}\phi = \left(\mathbf{A} - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F} \right) \phi = 0$$

$$\mathbf{A} = -\nabla \cdot D(\vec{r}, E) \nabla + \Sigma_t(\vec{r}, E) - \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E)$$

$$\mathbf{F} = \chi(\vec{r}, E) \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E')$$
(E-1)

ここで、 \mathbf{A} は漏れ、吸収、散乱を表す演算子、 \mathbf{F} は核分裂を表す演算子であり、 ϕ は全中性子束である。また全中性子束 ϕ と角度中性子束 ψ は(3-5-38)式の関係を持つ。ここで、(3-5-38)式を再掲する。

$$\phi(\vec{r}, E) = \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega}$$
(3-5-38)(再掲)

さらに、(E-1)式の拡散方程式に対する随伴方程式は拡散演算子 \mathbf{M} に対する随伴演算子 \mathbf{M}^\dagger を用いて、下式により表される[37]。

$$\mathbf{M}^\dagger \phi^\dagger = \left(\mathbf{A}^\dagger - \frac{1}{k_{eff}} \mathbf{F}^\dagger \right) \phi^\dagger = 0$$

$$\mathbf{A}^\dagger = -\nabla D(\vec{r}, E) \nabla + \Sigma_t(\vec{r}, E) - \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, E \rightarrow E')$$

$$\mathbf{F}^\dagger = \nu \Sigma_f(\vec{r}, E) \int_0^\infty dE' \chi(\vec{r}, E')$$
(E-2)

ここで、 \mathbf{A}^\dagger は漏れ、吸収、散乱を表す演算子に対する随伴演算子、 \mathbf{F}^\dagger は核分裂を表す演算子に対する随伴演算子、 ϕ^\dagger は随伴全中性子束である。以降では、拡散理論に基づき、3.4節の説明と同様な手順により一般化随伴全中性子束の従う一般化随伴方程式を導出する。

反応率比 R は、全中性子束 ϕ を用いれば以下のように表される。

$$R = \frac{\langle \Sigma_1 \phi \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle}$$
(E-3)

このとき、ブラケット $\langle \rangle$ は空間およびエネルギーに対する積分を意味し、 Σ_1 および Σ_2 は任意の断面積を表す。この反応率比に対する断面積の相対感度係数 G は次式により定義される。

$$G = \frac{\delta R/R}{\delta \Sigma/\Sigma} = \frac{\langle \Sigma_1 \phi \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} \cdot \frac{\delta R}{\delta \Sigma} \cdot \Sigma \quad (\text{E-4})$$

さらに、(E-4)式は次のように変形できる。

$$\begin{aligned} G &= \frac{\langle \Sigma_2 \phi \rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} \left\{ \frac{\delta \langle \Sigma_1 \phi \rangle}{\delta \Sigma \langle \Sigma_2 \phi \rangle} \right\} \Sigma \\ &= \frac{\langle \Sigma_2 \phi \rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} \left\{ \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_1}{\delta \Sigma} \phi \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} + \frac{\langle \Sigma_1 \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} - \frac{\langle \Sigma_1 \phi \rangle \left\langle \frac{\delta \Sigma_2}{\delta \Sigma} \phi \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle^2} - \frac{\langle \Sigma_1 \phi \rangle \left\langle \Sigma_2 \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle^2} \right\} \Sigma \quad (\text{E-5}) \\ &= \left\{ \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_1}{\delta \Sigma} \phi \right\rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} - \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_2}{\delta \Sigma} \phi \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} + \frac{\langle \Sigma_1 \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} - \frac{\left\langle \Sigma_2 \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} \right\} \Sigma \end{aligned}$$

ここまでの式変形から、3.4節で示した輸送理論に基づく一般化随伴方程式の導出と同様な形で相対感度係数を直接効果と間接効果の項に分けることができたことが分かる。ただし、大きな相違点として、ブラケット $\langle \rangle$ のもつ意味が3.4節の説明とは異なっていることに留意が必要である。次に、輸送理論に基づく一般化摂動論と同様に、間接効果の項を変形することを考える。

断面積の微小変化により、拡散演算子 \mathbf{M} と全中性子束 ϕ にそれぞれ $\delta \mathbf{M}$ 、 $\delta \phi$ の変化が生じるが、断面積の微小変化後も拡散方程式を満足するため下式を満たす。

$$(\mathbf{M} + \delta \mathbf{M})(\phi + \delta \phi) = 0 \quad (\text{E-6})$$

上式を展開後、定常状態の原子炉の拡散方程式である(E-1)式を適用し、さらに2次の微小項を無視すれば、

$$\mathbf{M} \delta \phi + \delta \mathbf{M} \phi = 0 \quad (\text{E-7})$$

を得る。ここで、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger を導入し、 Γ^\dagger を(E-7)式の両辺に左から乗じた後、全空間、全エネルギーで積分すると次の関係式が得られる。

$$\langle \Gamma^\dagger \mathbf{M} \delta \phi \rangle + \langle \Gamma^\dagger \delta \mathbf{M} \phi \rangle = 0 \quad (\text{E-8})$$

ここで、(E-8)式左辺第1項を断面積の微小変化分 $\delta \Sigma$ で除し、(4-2-1-3)式で示した随伴の性質を利用すると、

$$\left\langle \Gamma^\dagger \mathbf{M} \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \right\rangle = \left\langle \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \mathbf{M}^\dagger \Gamma^\dagger \right\rangle \quad (\text{E-9})$$

を得る。(E-8)式、(E-9)式より次の関係式を得る。

$$\left\langle \Gamma^\dagger \frac{\delta \mathbf{M}}{\delta \Sigma} \phi \right\rangle = - \left\langle \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \mathbf{M}^\dagger \Gamma^\dagger \right\rangle \quad (\text{E-10})$$

ここで、 $\mathbf{M}^\dagger \Gamma^\dagger$ が下式を満たすように設定する。

$$\mathbf{M}^\dagger \Gamma^\dagger = \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} \quad (\text{E-11})$$

(E-11)式を(E-10)式に代入すると、

$$\begin{aligned}
 \left\langle \Gamma^\dagger \frac{\delta \mathbf{M}}{\delta \Sigma} \phi \right\rangle &= - \left\langle \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \mathbf{M}^\dagger \Gamma^\dagger \right\rangle \\
 &= - \left\langle \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \left\{ \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} \right\} \right\rangle \\
 &= - \frac{\left\langle \Sigma_1 \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} + \frac{\left\langle \Sigma_2 \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle}
 \end{aligned} \tag{E-12}$$

を得る。(E-12)式の符号を変えれば、

$$- \left\langle \Gamma^\dagger \frac{\delta \mathbf{M}}{\delta \Sigma} \phi \right\rangle = \frac{\left\langle \Sigma_1 \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} - \frac{\left\langle \Sigma_2 \frac{\delta \phi}{\delta \Sigma} \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} \tag{E-13}$$

が得られる。(E-13)式の右辺は(E-4)式右辺第3、4項目の間接効果の項と一致する。従って、(E-13)式を(E-4)式に代入すると、感度係数は次式により表すことができる。

$$G = \left\{ \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_1}{\delta \Sigma} \phi \right\rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} - \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_2}{\delta \Sigma} \phi \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} - \left\langle \Gamma^\dagger \frac{\delta \mathbf{M}}{\delta \Sigma} \phi \right\rangle \right\} \Sigma \tag{E-14}$$

このとき、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger は着目する反応率比に対する重要度関数となり、全中性子束に対する空間およびエネルギーについての重みとなる。また、一般化随伴全中性子束に対する方程式である(E-11)式が、一般化随伴全中性子束 Γ^\dagger が従う一般化随伴方程式である。

$$\mathbf{M}^\dagger \Gamma^\dagger = \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} - \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} \tag{E-11)(再掲)}$$

Appendix F 直接法における断面積摂動量の決定

本論文の 3.8.3 項では、本研究で開発した一般化摂動計算コードの検証計算について説明した。具体的には、直接法に基づき計算した感度係数を参照解として、一般化摂動計算コードで算出した感度係数との比較を実施した。このとき、後述の理由から、直接法に基づく感度解析において適切な断面積の摂動量を決定する必要がある。そこで、本研究においては本 Appendix で説明する検討を実施し、断面積摂動量を 1%に定めた。ここでは、その検討について説明する。

感度解析では、次式で定義される感度係数 G を評価する。

$$G = \frac{\delta R/R}{\delta \Sigma/\Sigma} \quad (\text{F-1})$$

なお、厳密には(F-1)式で定義される感度係数は相対感度係数を表すが、本 Appendix では相対感度係数を感度係数と呼ぶこととする。ここで、 R は出力パラメータ、 Σ は入力パラメータ、 δ はそれぞれの微小変化量を表す。また、ここでは Σ は断面積、 R は次式で定義される反応率比を表す。

$$R = \frac{\langle \Sigma_1 \psi \rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} \quad (\text{F-2})$$

ただし、 ψ は角度中性子束、 Σ_1 および Σ_2 は任意の断面積、ブラケット $\langle \rangle$ は全位相空間での積分を意味する。

3.4 節で示したように、一般化摂動論では次式に基づき感度係数を評価する。

$$G = \left\{ \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_1}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle}{\langle \Sigma_1 \psi \rangle} - \frac{\left\langle \frac{\delta \Sigma_2}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle}{\langle \Sigma_2 \psi \rangle} - \left\langle \gamma^\dagger \frac{\delta \mathbf{B}}{\delta \Sigma} \psi \right\rangle \right\} \Sigma \quad (\text{3-4-12})(\text{再掲})$$

(3-4-12)式を利用することで、断面積変化後の中性子束分布を再計算することなく、断面積の感度係数を評価することが可能である。また、(3-4-12)式右辺の各項に微分が存在するが、これらの微分は着目する(摂動を加える)断面積に対してのみ 1 となり、その他の断面積に対しては 0 となる。すなわち、實際上(3-4-12)式に基づき感度係数を計算する際には、断面積の摂動量 $\delta \Sigma$ を利用しない。これは一般化摂動論により算出される感度係数が、断面積の摂動量に依存しないことに他ならない。

一方、直接法では着目する入力パラメータを微小に変化させた体系で再度出力パラメータを計算し、それぞれの差分から感度係数を評価する。このとき、解析モデルが線形性を有する場合、すなわち、出力パラメータの変化量が入力パラメータの変化量に比例する場合には、(F-1)式で与えられる感度係数は断面積摂動量に依存せず、任意の断面積摂動量に対して感度係数は一意に定まる。しかしながら、解析モデルが線形性を有していない場合には、感度係数が断面積の摂動量に対する依存性を有することになる。さらに言えば、炉心解析の解析モデルの線形性は保証されない。従って、直接法により算出される感度係数は断面積摂動量に依存性を有すると考えられることから、直接法により算出した感度係数

と一般化摂動論により算出した感度係数を比較するためには、直接法における適切な断面積摂動量の決定を行わなければならない。そこで、本 Appendix では、直接法における断面積摂動量を決定するための断面積摂動量のパラメータサーベイと適切な断面積摂動量の決定方法について説明する。

前述のように、本研究では一般化摂動計算コードの検証計算に先立ち、直接法における断面積摂動量のパラメータサーベイを実施した。なお、本研究の検証計算においては、物理的考察の簡略化を図るため、感度解析対象の炉心特性値として集合体中心燃料ピンの相対出力を選んだ。すなわち、着目パラメータとなる反応率比 R を下式のように設定した。

$$R = \frac{\langle \Sigma'_f \psi \rangle}{\langle \Sigma_f \psi \rangle} \quad (\text{F-3})$$

ただし、

$$\Sigma'_{f,i} = \begin{cases} \Sigma'_{f,i} & i \in \text{集合体中心燃料ピン} \\ 0 & i \notin \text{集合体中心燃料ピン} \end{cases} \quad (\text{F-4})$$

なお、集合体中心燃料ピンを下図に示す。

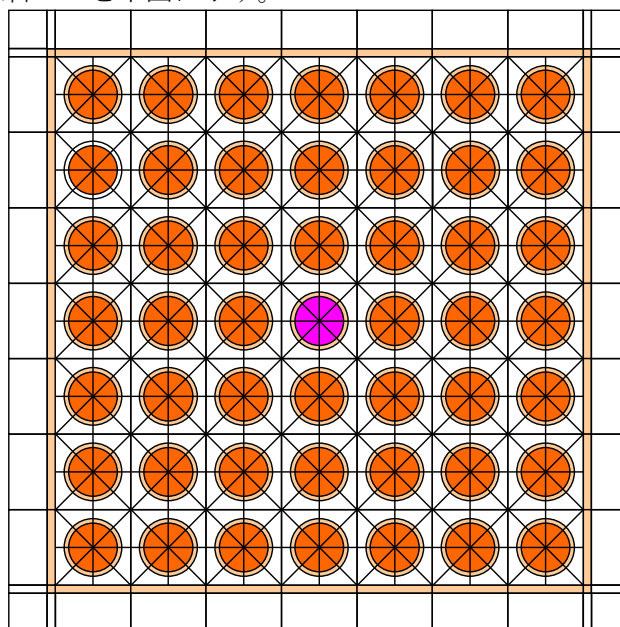
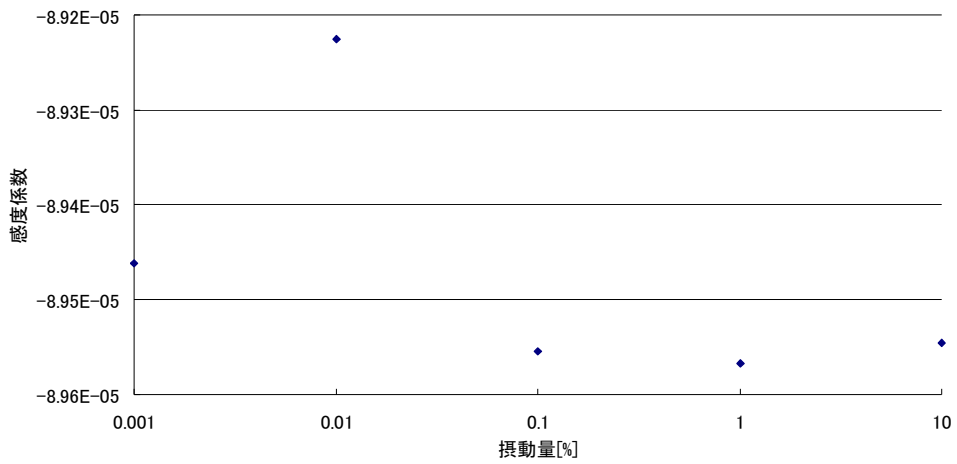


Fig. 3-8-3-1 集合体中心の燃料ピン(再掲)

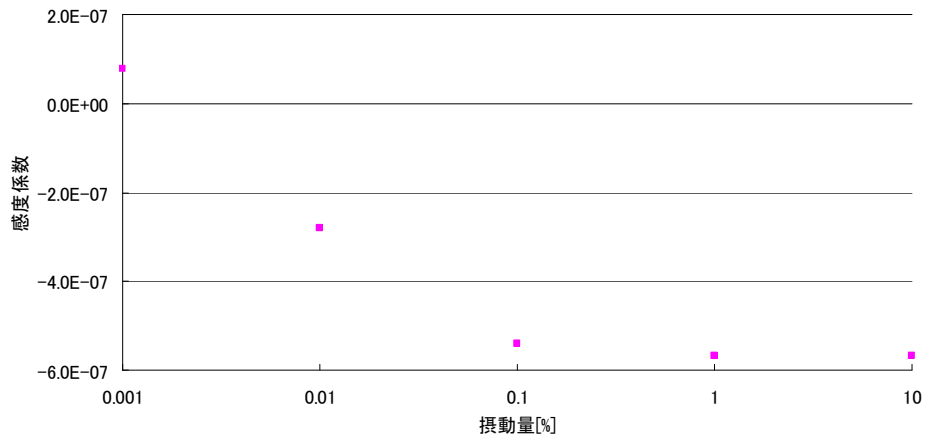
以上の条件の下、直接法における各領域の吸収断面積および自群散乱断面積の相対出力に対する感度係数の断面積摂動量依存性を評価した。本検討において、吸収断面積および自群散乱断面積に着目した理由としては、これらの断面積の変化は核分裂断面積に直接影響を与えず、間接効果のみを評価することができると考えたためである。以下では集合体中心のピンセルの燃料、被覆管及び減速材に対して吸収断面積と自群散乱断面積の感度解析を行った結果をそれぞれ示す。なお、本検証計算は 8 群での計算を行ったが、便宜上、1 群と 8 群の感度解析の結果のみ示すこととする。

まず、吸収断面積の感度解析の結果を示す。Figure F-1 には集合体中心燃料ピンの各領域における 1 群吸収断面積の感度解析結果、Fig. F-2 には集合体中心燃料ピンの各領域にお

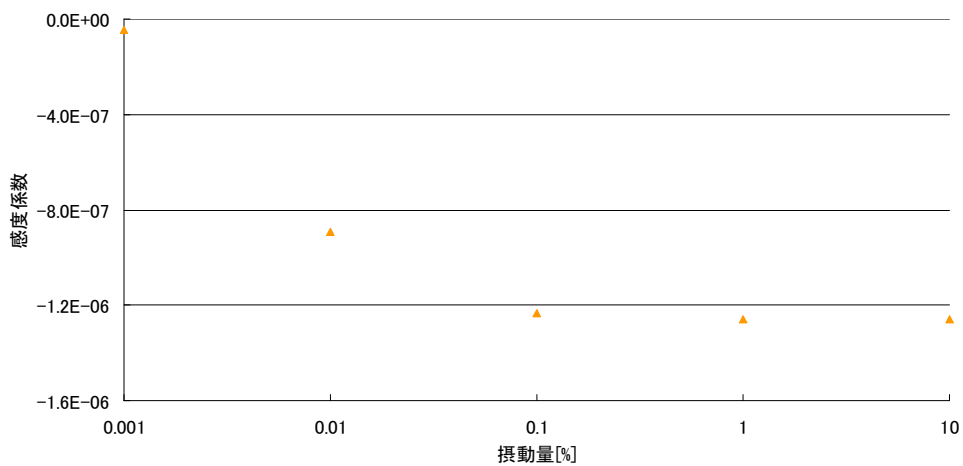
る 8 群吸収断面積の感度解析結果を示す。



(a) 燃料領域

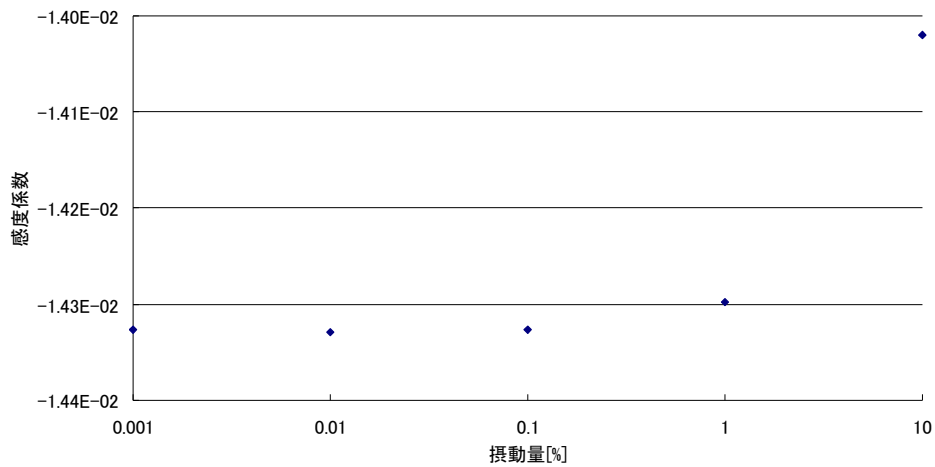


(b) 被覆管領域

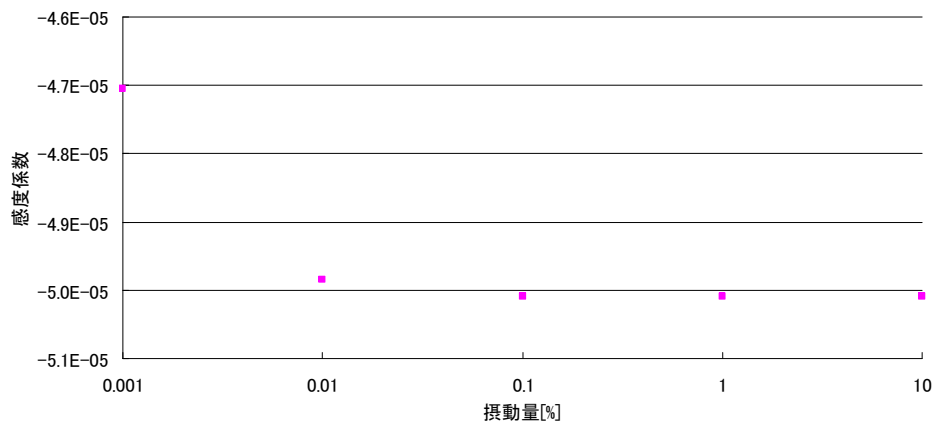


(c) 減速材領域

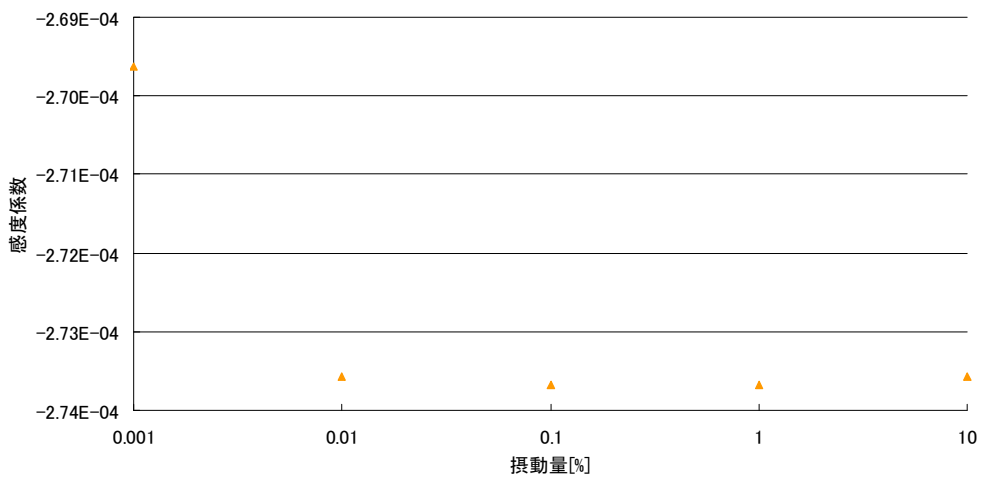
Fig. F-1 集合体中心燃料ピンの各領域における 1 群吸収断面積の感度解析結果



(a) 燃料領域



(b) 被覆管領域



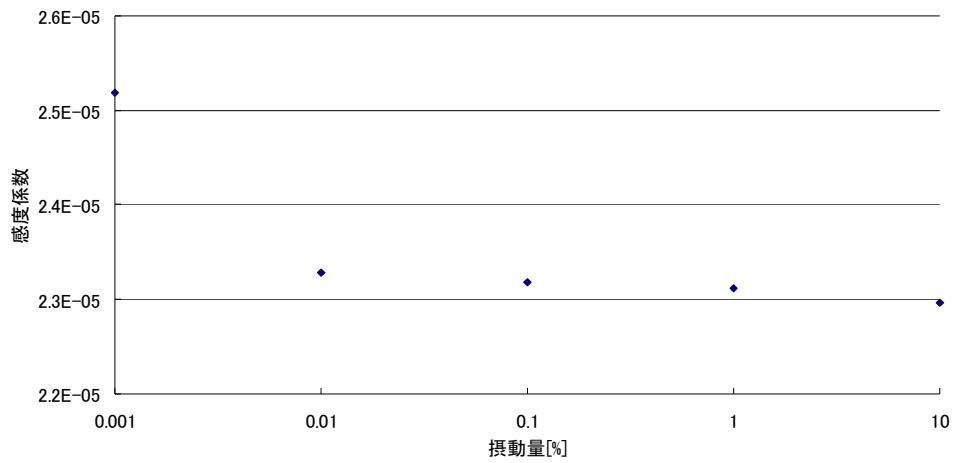
(c) 減速材領域

Fig. F-2 各領域における 8 群吸収断面積の感度解析結果

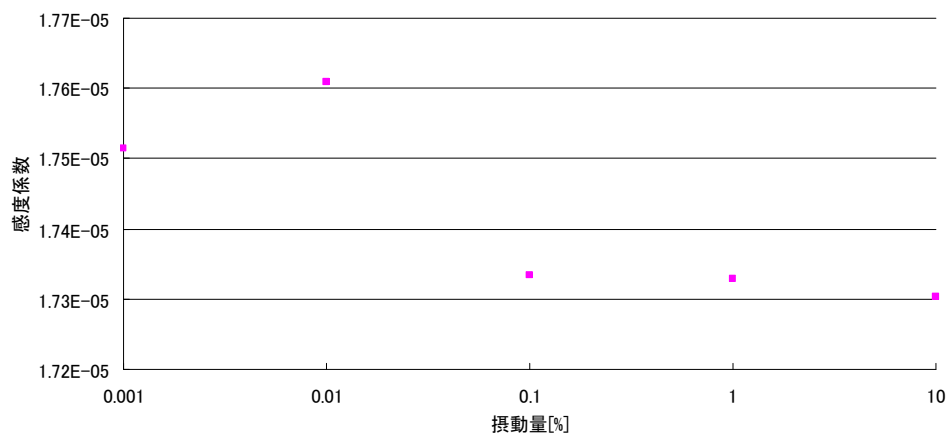
Figure F-1 に示される結果から、摂動量を 0.001%あるいは 0.01%として評価した感度係数はその他のプロット点と異なる傾向があり、かつ、これらの挙動に一貫性がないことが見受けられる。これは断面積の摂動量が過度に小さいために、打ち切り誤差等の影響を受けたためこのような挙動を呈したと考えられる。一方、Fig. F-2 に示される結果から、摂動量を

0.001%としたときの Fig. F-1 と同様の傾向に加え、(a)の燃料領域において摂動量を 10%としたときのプロット点が他のプロット点から外れることが確認できる。これは、断面積摂動量を過度に大きくしたことにより、解析モデルの非線形性が強く影響を与えたためこのような挙動を呈したと考えられる。そこで、すべての領域において吸収断面積の摂動量を 0.1%から 1%程度に設定すれば直接法において妥当な感度係数が得られると評価した。

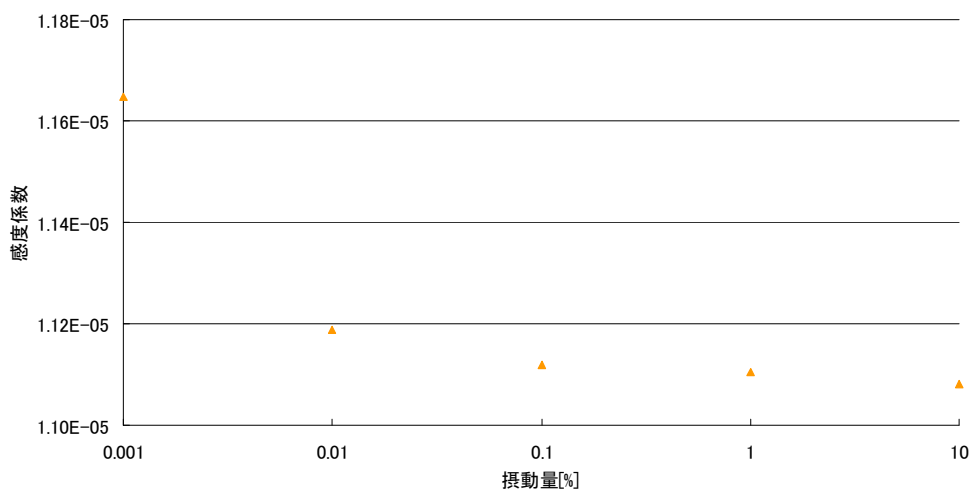
次に、自群散乱断面積の感度解析の結果を示す。Figure F-3 には集合体中心燃料ピンの各領域における 1 群自群散乱断面積の感度解析結果、Fig. F-4 には集合体中心燃料ピンの各領域における 8 群自群散乱断面積の感度解析結果を示す。



(a) 燃料領域

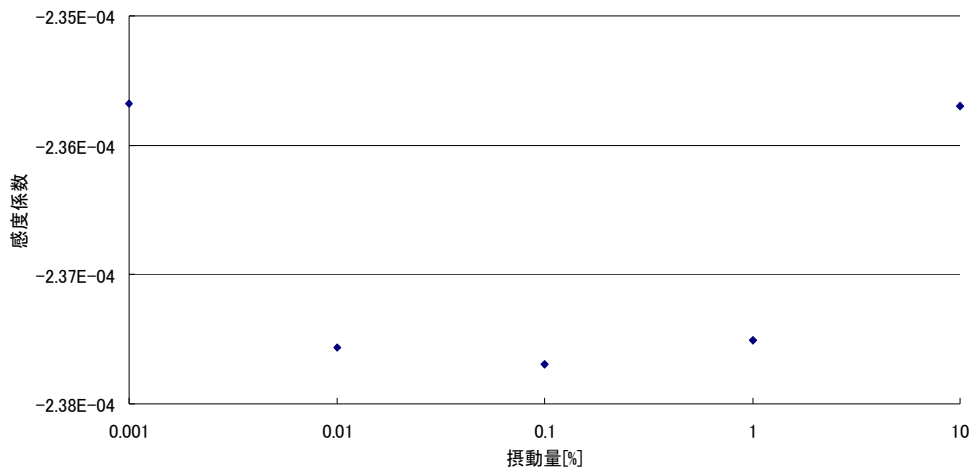


(b) 被覆管領域

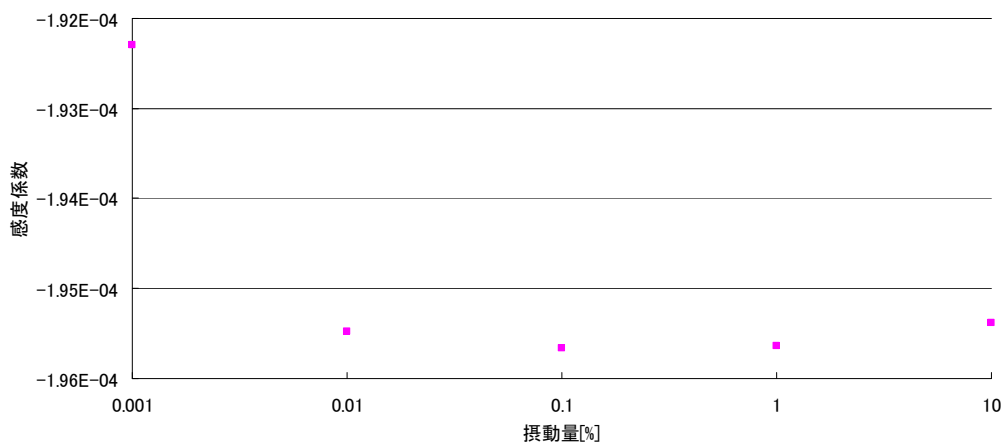


(c) 減速材領域

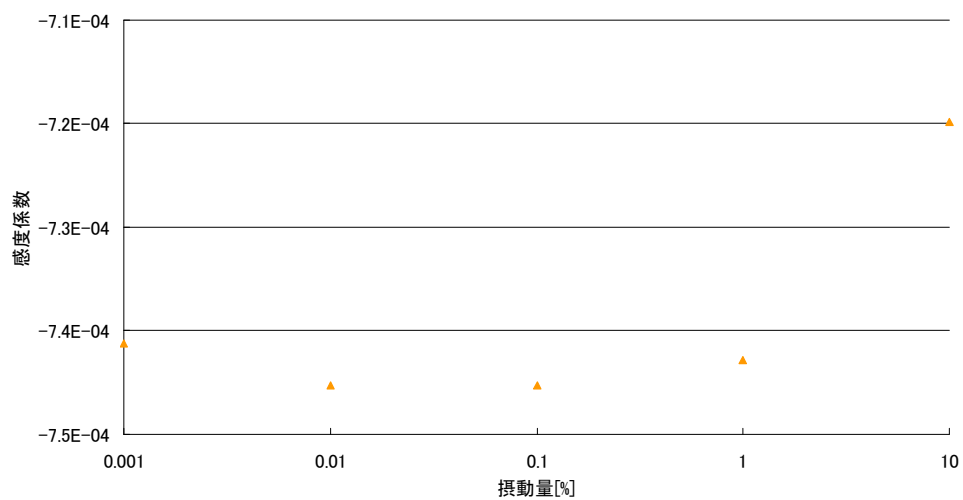
Fig. F-3 集合体中心燃料ピンの各領域における1群自群散乱断面積の感度解析結果



(a) 燃料領域



(b) 被覆管領域



(c) 減速材領域

Fig. F-4 集合体中心燃料ピンの各領域における 8 群自群散乱断面積の感度解析結果
 Figure F-3 および Fig. F-4 に示される結果からも Fig. F-1 および Fig. F-2 に示される結果と同様な傾向が見受けられる。従って、自群散乱断面積に対しても断面積摂動量を 0.1%から

1%に設定することが妥当であると評価した。

以上の断面積摂動量のパラメータサーベイの結果から、吸収断面積及び自群散乱断面積いずれに対しても摂動量を 0.1%から 1%に設定するのが妥当であることが明らかになった。それ故、3.8.3 項で説明した一般化摂動計算コードの直接法との比較による検証では、直接法における断面積の摂動量を 1%に設定することとした。

Appendix G 角度中性子束および一般化随伴角度中性子束の 領域内空間変化を考慮した一般化摂動計算手法

本研究では、Peach Bottom 原子力発電所 2 号機の初装荷燃焼の 7×7 燃料集合体を模擬した計算体系において、集合体中心の燃料棒の相対出力に対する吸収断面積および自群散乱断面積の感度係数を本研究で開発した一般化摂動計算コードおよび直接法で計算し、これらの比較を実施した。この検証計算の結果は本論文の 3.8.3 節に示されており、直接法に基づく参照解と一般化摂動計算コードにより算出した感度係数が良く一致していることから、一般化摂動計算コードの妥当性は確認できたものと結論付けた。しかし、本文中で述べたように自群散乱断面積については、一般化摂動計算と直接法の感度係数の差異が吸収断面積よりも大きくなることが明らかになった。そこで、本研究では予備研究として、この原因を一般化摂動計算における角度中性子束および一般化随伴角度中性子束の取り扱いにおける近似であるという仮定を立て、この問題を解決する手法を開発した。さらに、開発手法の適用計算を実施し、開発手法により上記の問題を解決することが可能であることが示された。しかし、本手法を適用するためにはコードに大幅な修正を加える必要があり、既存コードを用いた一般化摂動計算が実施できなくなると考えられる。故に、提案手法を本研究で開発した一般化摂動計算コードに実装しなかった。そこで、本 Appendix において上記の手法および適用計算の説明を行う。

以下では、自群散乱断面積の感度係数の直接法との差異が吸収断面積の場合よりも大きくなったことに関する考察を述べる。3.8.3 節において示した検証計算では、集合体中心の燃料ピンの相対出力を着目パラメータとして設定している。すなわち、着目パラメータ R は下式で定義される。

$$R = \frac{\langle \Sigma'_{f,i} \psi \rangle}{\langle \Sigma_{f,i} \psi \rangle} \quad (\text{G-1})$$

ただし、

$$\Sigma'_{f,i} = \begin{cases} \Sigma_{f,i} & i \in \text{集合体中心燃料ピン} \\ 0 & i \notin \text{集合体中心燃料ピン} \end{cases} \quad (\text{G-2})$$

従って、 R は吸収断面積あるいは自群散乱断面積の変化による直接効果を受けないので、吸収あるいは自群散乱断面積の相対出力に対する相対感度係数 G は下式によって求められる。

$$G = \left\{ - \left\langle \gamma^\dagger \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial \Sigma} \psi \right\rangle \right\} \Sigma \quad (\text{G-3})$$

ゆえに、吸収断面積および自群散乱断面積の感度係数を一般化摂動計算において求める場合は、それぞれ(G-4)式および(G-5)式を用いる。

$$G_{\Sigma_a} = - \langle \gamma^\dagger \psi \rangle \Sigma_a \quad (\text{G-4})$$

$$G_{\Sigma_{s,g \rightarrow g}} = - \left\langle \gamma^\dagger \left(\psi - \frac{\phi}{4\pi} \right) \right\rangle \Sigma_{s,g \rightarrow g} \quad (\text{G-5})$$

ここで、(G-4)式及び(G-5)式から一般化摂動計算で求める感度係数は断面積の大きさに比例することが分かる。また、直接法における断面積の摂動量が十分に小さいときの感度係数

と一般化摂動計算の感度係数の差異は、吸収断面積と自群散乱断面積に対してそれぞれ(G-6)式および(G-7)式の項に依存すると言える。

$$\langle \gamma^\dagger \psi \rangle \quad (\text{G-6})$$

$$\left\langle \gamma^\dagger \left(\psi - \frac{\phi}{4\pi} \right) \right\rangle \quad (\text{G-7})$$

さらに言えば、本研究で開発したコードでは(G-6)式の計算において角度中性子束および一般化随伴角度中性子束の空間分布の変化を無視し、領域平均の角度中性子束および領域平均の一般化随伴角度中性子束で代用するという近似を用いているため、感度係数の計算精度は(G-6)式に強く依存すると考えられる。また、(G-7)式の計算においては、ある方向の角度中性子束と平均角度中性子束の差を用いる計算であるので、一般的な計算体系であれば(中性子束の角度分布が非常に複雑な場合で無ければ)(G-7)式の計算により得られる値は(G-6)式により得られる値に比べ小さくなる(0に近い値となる)ことが予想される。つまり、自群散乱断面積の感度係数は吸収断面積の感度係数より0に近くなる。

以上に述べた特性を考慮すると、吸収断面積の感度係数に対する一般化摂動計算と直接法の比較では0.1%程度の相対差異で一致していたとしても、自群散乱断面積の感度係数に対する比較では数100%の相対差異が生じたり、符号が異なっていたりするなどの現象は十分に生じうる。加えて、(G-4)式及び(G-5)式に示されるように一般化摂動計算により得られる感度係数は断面積の大きさに比例する形で得られる。従って、断面積の大きさが大きい自群散乱断面積の感度係数の直接法との差異の絶対値は吸収断面積より大きく評価されたものと考えられる。そこで、(G-6)式の計算の近似を排除した計算手法であれば、自群散乱断面積の感度係数も精度よく計算することが可能であると考えられる。本 Appendix で述べる検討では(G-6)式を近似的な計算を用いることなく、角度中性子束および一般化随伴角度中性子束の空間分布を厳密に扱い計算することを試みた。次に、以上に述べた問題点に対する改善方法を示す。

吸収断面積および自群散乱断面積の感度係数はそれぞれ(G-8)式および(G-9)式によって求められる。

$$G_{\Sigma_a} = -\langle \gamma^\dagger_{i,g} \psi_{i,g} \rangle \Sigma_{a,i,g} \quad (\text{G-8})$$

$$G_{\Sigma_{s,g \rightarrow g}} = \left\{ -\langle \gamma^\dagger_{i,g} \psi_{i,g} \rangle + \left\langle \gamma^\dagger_{i,g} \frac{1}{4\pi} \phi_{i,g} \right\rangle \right\} \Sigma_{s,i,g \rightarrow g} \quad (\text{G-9})$$

ここで、ブラケットは全位相空間での積分を表す。これらは、それぞれ(G-10)式および(G-11)式のように式変形することができる。

$$\begin{aligned} G_{\Sigma_a} &= -\langle \gamma^\dagger_{i,g} \psi_{i,g} \rangle \Sigma_{a,i,g} \\ &= \left[- \int_V dV \int_{4\pi} \gamma^\dagger_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \psi_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \right] \Sigma_{a,i,g} \end{aligned} \quad (\text{G-10})$$

$$\begin{aligned}
G_{\Sigma_{s,g \rightarrow g}} &= \left\{ -\langle \gamma^\dagger_{i,g} \psi_{i,g} \rangle + \left\langle \gamma^\dagger_{i,g} \frac{1}{4\pi} \phi_{i,g} \right\rangle \right\} \Sigma_{s,g \rightarrow g} \\
&= \left[-\int_V dV \int_{4\pi} \gamma^\dagger_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \left\{ \psi_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) - \frac{\phi_{i,g}}{4\pi} \right\} d\vec{\Omega} \right] \Sigma_{s,g \rightarrow g}
\end{aligned} \tag{G-11}$$

さらに、(G-11)式は以下のように式変形できる。

$$\begin{aligned}
G_{\Sigma_{s,g \rightarrow g}} &= \left[-\int_V dV \int_{4\pi} \gamma^\dagger_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \left\{ \psi_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) - \frac{\phi_{i,g}}{4\pi} \right\} d\vec{\Omega} \right] \Sigma_{s,i,g \rightarrow g} \\
&= \left[-\int_V dV \int_{4\pi} \gamma^\dagger_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \psi_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} + \int_V dV \int_{4\pi} \gamma^\dagger_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \frac{\phi_{i,g}}{4\pi} \right] \Sigma_{s,i,g \rightarrow g} \\
&= \left[-\int_V dV \int_{4\pi} \gamma^\dagger_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \psi_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} + V_i \Gamma^\dagger_{i,g} \phi_{i,g} \right] \Sigma_{s,i,g \rightarrow g}
\end{aligned} \tag{G-12}$$

以上の式変形により、(G-10)式および(G-12)式中に以下の項が存在していることが分かる。

$$\int_V dV \int_{4\pi} \gamma^\dagger_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \psi_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \tag{G-13}$$

すなわち、一般化摂動計算で吸収断面積と自群散乱断面積の感度係数を求める際は、角度中性子束と一般化随伴角度中性子束の積について空間分布を考慮して積分を行う必要がある。しかし、本研究で開発した一般化摂動計算では、計算の簡略化の為にそれらの空間分布を無視し、領域平均の角度中性子束および一般化随伴角度中性子束で代用している。従って、この近似に起因する誤差が生じているものと考えられる。そこで、より精度良く感度係数を求める為には、(G-13)式の積分をより厳密に行なう必要があると考えられる。以下では、この手法について説明する。

Characteristics 法(MOC)における改善手法

ここでは、空間分布を考慮した角度中性子束と一般化随伴角度中性子束の積の積分について具体的な計算手法を示す。ここで再度着目している積分項を示す。

$$\int_V dV \int_{4\pi} \gamma^\dagger_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) \psi_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \tag{G-13}(再掲)$$

前述のように、上式を計算する際、厳密には角度中性子束と一般化随伴角度中性子束の空間分布を考慮して計算する必要がある。MOC の計算では Characteristics line ごとに γ^\dagger と ψ の積の積分を行うことにより、これらの空間分布を考慮した積分を行うことができる。以降では、その積分方法について説明する。

以下では、各 Characteristics line に沿って γ^\dagger と ψ の積の積分を行うことを考える。具体的には、下式について考える。

$$\int_0^l \psi(s) \gamma^\dagger(s) ds \tag{G-14}$$

ここで、 l は着目する Characteristics line のセグメント長、 s は Characteristics line 上の変位である。また、Forward 計算において、Characteristics line 上の角度中性子束は下式により求められる。

$$\begin{aligned}
\psi(s) &= \psi_{in} \exp(-\Sigma_t s) + \frac{Q}{\Sigma_t} \{1 - \exp(-\Sigma_t s)\} \\
&= \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t s) + \frac{Q}{\Sigma_t}
\end{aligned} \tag{G-15}$$

一方、Adjoint 計算および Generalized Adjoint 計算においては、行列転置法を用いてインポートランスの移動方向を逆向きと解釈することで計算していることから、Characteristics line 上の一般化随伴角度中性子束は以下のように表される。

$$\begin{aligned}
\gamma^\dagger(s) &= \gamma_{out}^\dagger \exp\{-\Sigma_t(l-s)\} + \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \{1 - \exp\{-\Sigma_t(l-s)\}\} \\
&= \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) \exp(\Sigma_t s) + \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t}
\end{aligned} \tag{G-16}$$

以上に基づけば、角度中性子束と一般化随伴角度中性子束の積は下式により表すことができる。

$$\begin{aligned}
\psi(s)\gamma^\dagger(s) &= \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) + \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t s) \\
&\quad + \frac{Q}{\Sigma_t} \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) \exp(\Sigma_t s) + \frac{QQ^\dagger}{\Sigma_t^2}
\end{aligned} \tag{G-17}$$

(G-17)式は長さ l の Characteristics line 上の位置 s における角度中性子束と一般化随伴角度中性子束の積を表している。次に、(G-17)式に対し Characteristics line の始点から終点までの積分を行う。

$$\begin{aligned}
\int_0^l \psi(s)\gamma^\dagger(s) ds &= \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) \cdot l - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t^2} \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) \\
&\quad + \frac{Q}{\Sigma_t^2} \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) \exp(\Sigma_t l) + \frac{QQ^\dagger}{\Sigma_t^2} \cdot l \\
&\quad + \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t^2} \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) - \frac{Q}{\Sigma_t^2} \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l)
\end{aligned} \tag{G-18}$$

ここで、以下の関係式に着目する。

$$\psi_{out} = \psi(l) = \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) + \frac{Q}{\Sigma_t} \tag{G-19}$$

$$\gamma_{in}^\dagger = \gamma^\dagger(0) = \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) + \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \tag{G-20}$$

まず、(G-18)式右辺第2項に(G-19)式を導入する。

$$\begin{aligned}
\int_0^l \psi(s) \gamma^\dagger(s) ds &= \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) \cdot l - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t^2} \left(\psi_{out} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \\
&\quad + \frac{Q}{\Sigma_t^2} \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) \exp(\Sigma_t l) + \frac{QQ^\dagger}{\Sigma_t^2} \cdot l \\
&\quad + \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t^2} \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) - \frac{Q}{\Sigma_t^2} \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l)
\end{aligned} \tag{G-21}$$

さらに、(G-21)式右辺第6項に(G-20)式を導入する。

$$\begin{aligned}
\int_0^l \psi(s) \gamma^\dagger(s) ds &= \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) \cdot l - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t^2} \left(\psi_{out} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \\
&\quad + \frac{Q}{\Sigma_t^2} \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) \exp(\Sigma_t l) + \frac{QQ^\dagger}{\Sigma_t^2} \cdot l \\
&\quad + \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t^2} \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) - \frac{Q}{\Sigma_t^2} \left(\gamma_{in}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right)
\end{aligned} \tag{G-22}$$

これを展開、整理すると、

$$\begin{aligned}
\int_0^l \psi(s) \gamma^\dagger(s) ds &= \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) \cdot l - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t^2} \psi_{out} + \frac{QQ^\dagger}{\Sigma_t^3} \\
&\quad + \frac{Q}{\Sigma_t^2} \gamma_{out}^\dagger - \frac{QQ^\dagger}{\Sigma_t^3} + \frac{QQ^\dagger}{\Sigma_t^2} \cdot l + \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t^2} \psi_{in} - \frac{QQ^\dagger}{\Sigma_t^3} - \frac{Q}{\Sigma_t^2} \gamma_{in}^\dagger + \frac{QQ^\dagger}{\Sigma_t^3} \\
&= \left\{ \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \left(\gamma_{out}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) \exp(-\Sigma_t l) + \frac{QQ^\dagger}{\Sigma_t^2} \right\} l \\
&\quad + \frac{1}{\Sigma_t^2} \{ Q^\dagger (\psi_{in} - \psi_{out}) - Q (\gamma_{in}^\dagger - \gamma_{out}^\dagger) \}
\end{aligned} \tag{G-23}$$

となり、さらに(G-23)式右辺第1項に(G-20)式を導入することで下式を得る。

$$\int_0^l \psi(s) \gamma^\dagger(s) ds = \left\{ \left(\psi_{in} - \frac{Q}{\Sigma_t} \right) \left(\gamma_{in}^\dagger - \frac{Q^\dagger}{\Sigma_t} \right) + \frac{QQ^\dagger}{\Sigma_t^2} \right\} l + \frac{1}{\Sigma_t^2} \{ Q^\dagger (\psi_{in} - \psi_{out}) - Q (\gamma_{in}^\dagger - \gamma_{out}^\dagger) \} \tag{G-24}$$

(G-24)式を利用することで、角度中性子束と一般化随伴角度中性子束の空間分布を考慮し、一般化摂動計算を行うことが可能となる。ここでは、角度中性子束と一般化随伴角度中性子束の積の積分について説明したが、同様の手法で角度中性子束と随伴角度中性子束の積の積分も計算することができる。

検証計算

次に、上述の計算手法の検証計算について説明する。なお、上記の説明では、角度中性子束と一般化随伴角度中性子束の積の積分について説明した。しかし、本検証では簡単のため、角度中性子束と随伴角度中性子束の積の積分を用いた実効増倍率への断面積の感度係数を用いて検証計算を実施した。以下ではこの計算結果について説明する。

計算体系

本検証計算では、下図に示される 1 次元平板体系を計算体系として計算を行った。

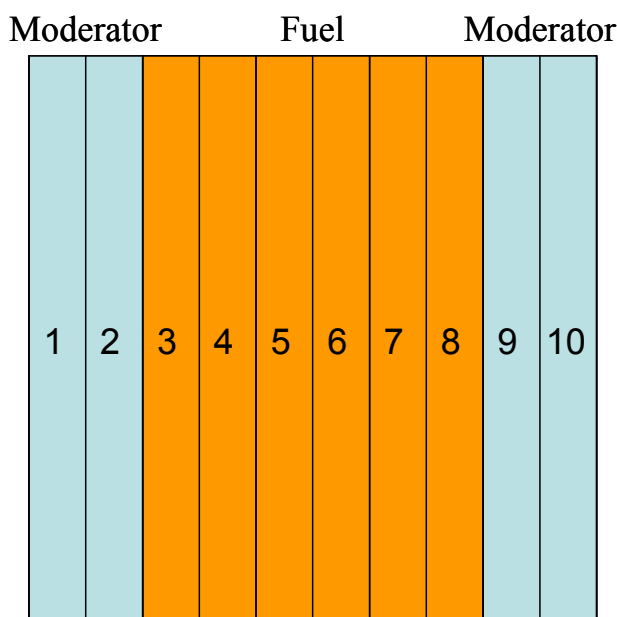


Fig. G-1 計算体系

なお、上計算体系は厚さ 1cm の平板を 0.1cm ごとに領域分けしており、領域 1,2,9,10 が減速材領域、領域 3~8 が燃料領域であると仮定している。上計算体系において、真空境界条件、2 群計算を行い、摂動計算および直接法で実効増倍率に対する各領域、各エネルギー群の吸収断面積および自群散乱断面積の感度係数を計算し、それらの比較を行なった。ここで、Table G-1 には使用した断面積データを記載する。

Table G-1 使用した断面積データ

region	gr	$\Sigma_{s,1 \rightarrow g}$ [1/cm]	$\Sigma_{s,2 \rightarrow g}$ [1/cm]	Σ_f [1/cm]	Σ_a [1/cm]	$\nu \Sigma_f$ [1/cm]	Σ_d [1/cm]	χ [-]
fuel	1	3.249E-01	0.000E+00	3.561E-01	6.013E-03	5.622E-03	2.158E-03	1.000E+00
	2	2.521E-02	7.883E-01	8.723E-01	8.398E-02	1.202E-01	4.937E-02	0.000E+00
moderator	1	3.062E-01	0.000E+00	3.650E-01	3.002E-04	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00
	2	5.848E-02	2.168E+00	2.198E+00	2.991E-02	0.000E+00	0.000E+00	0.000E+00

計算結果

本検証計算の結果を以下に示す。ただし、Table G-2、G-3 は吸収断面積の感度係数の比較であり、それぞれ角度束の空間分布の考慮なしおよび空間分布の考慮ありの結果である。さらに、Table G-4、G-5 は自群散乱断面積の感度係数の比較であり、角度束の空間分布の考慮なしおよび空間分布の考慮ありの結果である。

Table G-2 吸収断面積の感度係数の比較(空間分布の考慮なし)

SIGA	領域	摂動論		直接法		相対差異	
		1群	2群	1群	2群	1群	2群
空間分布の 考慮なし	1	-6.30E-06	-6.16E-04	-6.47E-06	-6.33E-04	-3%	-3%
	2	-2.20E-05	-1.87E-03	-2.22E-05	-1.89E-03	-1%	-1%
	3	-1.07E-03	-8.90E-03	-1.07E-03	-8.90E-03	0%	0%
	4	-1.60E-03	-1.07E-02	-1.60E-03	-1.07E-02	0%	0%
	5	-1.85E-03	-1.16E-02	-1.85E-03	-1.16E-02	0%	0%
	6	-1.85E-03	-1.16E-02	-1.85E-03	-1.16E-02	0%	0%
	7	-1.60E-03	-1.07E-02	-1.60E-03	-1.07E-02	0%	0%
	8	-1.07E-03	-8.90E-03	-1.07E-03	-8.90E-03	0%	0%
	9	-2.20E-05	-1.87E-03	-2.22E-05	-1.89E-03	-1%	-1%
	10	-6.30E-06	-6.16E-04	-6.47E-06	-6.33E-04	-3%	-3%

Table G-3 吸収断面積の感度係数の比較(空間分布の考慮あり)

SIGA	領域	摂動論		直接法		相対差異	
		1群	2群	1群	2群	1群	2群
空間分布の 考慮あり	1	-6.47E-06	-6.33E-04	-6.47E-06	-6.33E-04	0%	0%
	2	-2.22E-05	-1.89E-03	-2.22E-05	-1.89E-03	0%	0%
	3	-1.07E-03	-8.90E-03	-1.07E-03	-8.90E-03	0%	0%
	4	-1.60E-03	-1.07E-02	-1.60E-03	-1.07E-02	0%	0%
	5	-1.85E-03	-1.16E-02	-1.85E-03	-1.16E-02	0%	0%
	6	-1.85E-03	-1.16E-02	-1.85E-03	-1.16E-02	0%	0%
	7	-1.60E-03	-1.07E-02	-1.60E-03	-1.07E-02	0%	0%
	8	-1.07E-03	-8.90E-03	-1.07E-03	-8.90E-03	0%	0%
	9	-2.22E-05	-1.89E-03	-2.22E-05	-1.89E-03	0%	0%
	10	-6.47E-06	-6.33E-04	-6.47E-06	-6.33E-04	0%	0%

Table G-4 自群散乱断面積の感度係数の比較(空間分布の考慮なし)

SIGS,自群散乱	領域	摂動論		直接法		相対差異	
		1群	2群	1群	2群	1群	2群
空間分布の 考慮なし	1	2.05E-02	3.93E-02	2.03E-02	3.80E-02	1%	3%
	2	1.45E-02	2.17E-02	1.42E-02	2.07E-02	2%	5%
	3	-4.96E-03	-7.39E-04	-4.84E-03	-7.08E-04	2%	4%
	4	-2.42E-02	-6.60E-03	-2.40E-02	-6.51E-03	1%	1%
	5	-3.36E-02	-9.60E-03	-3.32E-02	-9.49E-03	1%	1%
	6	-3.36E-02	-9.60E-03	-3.32E-02	-9.49E-03	1%	1%
	7	-2.42E-02	-6.60E-03	-2.40E-02	-6.51E-03	1%	1%
	8	-4.96E-03	-7.39E-04	-4.84E-03	-7.08E-04	2%	4%
	9	1.45E-02	2.17E-02	1.42E-02	2.07E-02	2%	5%
	10	2.05E-02	3.93E-02	2.03E-02	3.80E-02	1%	3%

Table G-5 自群散乱断面積の感度係数の比較(空間分布の考慮あり)

SIGS,自群散乱	領域	摂動論		直接法		相対差異	
		1群	2群	1群	2群	1群	2群
空間分布の 考慮あり	1	2.03E-02	3.81E-02	2.03E-02	3.80E-02	0%	0%
	2	1.43E-02	2.07E-02	1.42E-02	2.07E-02	0%	0%
	3	-4.88E-03	-7.25E-04	-4.84E-03	-7.08E-04	1%	3%
	4	-2.40E-02	-6.54E-03	-2.40E-02	-6.51E-03	0%	0%
	5	-3.33E-02	-9.52E-03	-3.32E-02	-9.49E-03	0%	0%
	6	-3.33E-02	-9.52E-03	-3.32E-02	-9.49E-03	0%	0%
	7	-2.40E-02	-6.54E-03	-2.40E-02	-6.51E-03	0%	0%
	8	-4.88E-03	-7.25E-04	-4.84E-03	-7.08E-04	1%	3%
	9	1.43E-02	2.07E-02	1.42E-02	2.07E-02	0%	0%
	10	2.03E-02	3.81E-02	2.03E-02	3.80E-02	0%	0%

Table G-2 から Table G-5 に示したように、1次元平板体系において、(G-24)式を用いて角度束の空間分布を考慮した積分を行うことで、吸収断面積および自群散乱断面積の感度係数の計算精度を向上させることが可能であることが明らかになった。なお、Table G-5 の領域3と領域8で比較的大きな相対差異が生じていることに関しては、これらの領域が感度係数の正負の入れ替わる境界となった為、感度係数の絶対値が小さくなり、相対的な差異が大きくなったことが原因であると考えている。それ以外の領域では改善手法の導入により大幅に誤差が低減されていることが確認でき、精度よく輸送計算に基づく感度解析を行う上で角度中性子束、随伴角度中性子束および一般化随伴角度中性子束の空間分布を考慮し、Characteristics line に沿った積分を行なう必要があることが分かる。

2次元体系への拡張

次に、上述の計算手法の2次元体系への拡張方法について説明する。前述のように、一般化摂動計算を行う際に角度中性子束および一般化随伴角度中性子束の空間分布を考慮することで、その計算精度を向上させることができる。そこで、本研究で開発する集合体計算感度解析コードにおいても、精度よく感度係数を計算する為にはこの手法を適用する必要がある。しかしながら、本手法を1次元体系と同じ計算アルゴリズムで適用する為には、膨大なメモリ量を必要とする。具体的には、全ての各 Characteristics line 上の Flat flux region における入射角度中性子束、放出角度中性子束、入射一般化随伴角度中性子束、放出一般化随伴角度中性子束を保存する必要がある。このデータ量としては、エネルギー群数×セグメント数×極角分割数×4となり、集合体体系ではセグメント数が非常に膨大なものとなる為使用メモリ量が膨大なものになる。そこで、メモリ使用量を低減する何らかの工夫が必要となる。以下では、その手法として考えられる方法を示す。

積分量のみを保存する方法

2次元体系で角度中性子束と一般化随伴角度中性子束の空間分布を考慮した一般化摂動計算を行うにあたって、使用メモリ量を低減する計算アルゴリズムとして積分量のみ保存する手法が考えられる。ここで、一般化随伴角度中性子束および角度中性子束の空間分布を考慮した一般化摂動計算で求めるべき物理量は下式で表される。

$$\int_V dV \int_{4\pi} \gamma_{i,g}^\dagger(\vec{r}, \vec{\Omega}) \nu_{i,g}(\vec{r}, \vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \quad (\text{G-13})(\text{再掲})$$

前述のように、一般化摂動計算で用いられる物理量は積分量のみであり、各エネルギー群および各領域について与えられる値のみである。そこで、この積分量のみを保存することによって、保存すべき情報を大幅に低減し、使用メモリ量を低く抑えることができると考えられる。具体的には、各 Characteristics line 上で以下の計算フローに基づく計算を行うことで使用メモリ量を抑えながら、提案手法を導入した一般化摂動計算が可能であると考えられる。

- ① Forward 計算および Generalized adjoint 計算を行うことで得られた領域平均の中性子束および一般化随伴中性子束を用いて Forward 計算の源の項 Q および一般化随伴の源の項 Q^\dagger を求める。
- ② Q を固定源として吸収のみの体系で 1 本目の Characteristics line に対して transport sweep を行う。
- ③ Q^\dagger を固定源として吸収のみの体系で 1 本目の Characteristics line に対して transport sweep を行う。
- ④ 該当 Characteristics line に対して角度中性子束と一般化随伴角度中性子束の積分を行う。
- ⑤ 全ての Characteristics line に対して計算できるまで、②③④を繰り返す。
- ⑥ 境界条件により境界面での入射束を設定しなおし、積分値が収束を得るまで②③④⑤⑥を繰り返す。

なお、ここでは Q および Q^\dagger を固定源とし、吸収のみの計算を行っていることから内部反復による源の項の更新は行われず、境界面の入射角度束の更新のみが行われることとなる。以上の計算を行うことで、メモリ使用量を抑えて角度分布を考慮した一般化摂動計算を行うことができると考えている。本手法を用いれば、多集合体問題のような大きな体系であっても計算が可能であると思われる。しかし、本手法を適用した場合、これまでのように solver 部分に既存コードを使用することができない。本研究の大きな特色は、既存コードを solver として用いて感度解析を行うことにあるが、本手法の適用によりこの長所が失われる。

テキストファイルとして保存する方法

2つ目の方法としては、入射角度中性子束、放出角度中性子束、入射一般化随伴角度中性子束、放一般化随伴角度中性子束をテキストファイルとして保存する方法が考えられる。本手法を適用すれば、使用メモリ量を抑えつつ、既存コードを用いて角度束の空間分布を考慮した一般化摂動計算を行うことが可能であると思われる。ただし、本手法の問題としては計算体系が大型化や領域分割の詳細化に伴いテキストファイルの容量が大きくなることが挙げられる。それゆえに、計算体系や領域分割の限界が生じることが考えられるが、現時点ではテキストファイルを使用する本手法が最も現実的な方法であると考えている。

ここでは、本 Appendix で説明した手法を実際に適用するために考えられる方法を 2 つ示した。しかしながら、ここで示した手法はそれぞれ、既存コードが使用できない点と大型体系で計算コストが大きくなる点という短所を有する。そこで、本研究で開発した一般化撮影計算コードには本 Appendix で説明した手法を適用していない。