

平成 29 年度原子力規制庁委託成果報告書

燃焼感度解析に関する研究

北海道大学

平成 30 年 3 月

本報告書は、原子力規制委員会原子力規制庁からの委託により実施した業務の成果をとりまとめたものです。

本報告書に関する問い合わせは、原子力規制庁までお願いします。

1. 本委託研究の目的

原子力規制庁では、炉心管理コードシステムCASMO5/SIMULATE-5 に、評価済核データライブラリJENDL-4.0 の分散・共分散データを用いた核特性パラメータの不確かさを評価する機能を整備している。本委託研究では、CASMO5/SIMULATE-5 コードシステムの不確かさ評価機能拡充及び検証に係る知見収集の一環として、汎用炉物理解析コードシステムCBZを用いた不確かさ解析評価手法の適用範囲の確認を目的とする。

2. 本委託研究の概要

原子力規制庁が実施する核反応断面積等の誤差に起因する核特性パラメータの燃焼に伴う不確かさ評価に資するため、以下を実施する。

(1) 燃料集合体系と等価となるピンセル体系の導出方法の検討

昨年度行った検討では、共鳴自己遮蔽効果についてピンセル体系で評価を行ったので、今年度は共鳴自己遮蔽効果の影響、およびそれと中性子束空間分布の影響を併せた評価を行う。さらにGd燃料を含む集合体系での燃焼感度計算のため、予測子・修正子法を導入した場合の燃焼感度計算アルゴリズムを整備し、最終的な等価ピンセル体系の導出を行う。

(2) リバースサンプリング法の有効性の評価

昨年度に行った検討では、リバースサンプリング法による誤差伝播計算の有効性評価を、U-238捕獲反応によるPu-239生成量の不確かさを対象として行った。今年度はより一般的な（汎用的な）結論を得るために、代表的な核種及び核反応へ適用範囲を拡大した検討を行い、誤差伝播計算に対する有効性評価を行う。

(3) 燃料集合体の燃焼度依存の反応度（無限増倍率）に対する不確かさ評価

これまでに整備した燃焼感度計算機能、不確かさ計算機能を活用して、燃料集合体の燃焼度依存の反応度（無限増倍率）に対する不確かさ評価を行うとともに、各種PIEデータを活用して核データの調整を行い不確かさの低減を図る。

(4) 本事業に係る最新知見に関する調査

上記（1）から（3）までの実施内容が最新知見に基づいて実施できるよう、国内外の専門家による研究会等への参加を通して、当該知見に関する調査を実施する。

3. 本報告書の構成

報告書を作成するにあたって、上記の委託研究内容（1）～（3）について以下のよう
に整理を行った。

（1） 燃料集合体体系と等価となるピンセル体系の導出方法の検討

- ・ Gd 入り燃料棒の影響を考慮した等価ピンセル体系の導出方法の検討
- ・ 燃料集合体の物質配置を考慮した共鳴自己遮蔽効果の取り扱いが燃焼後数密度に与える影響の評価
- ・ 予測子・修正子法のための燃焼感度計算アルゴリズムの整備

（2） リバースサンプリング法の有効性の評価

- ・ 燃焼後数密度の統計量評価に対するリバースサンプリング法の有効性の評価
- ・ リバースサンプリング法の理論的考察と簡易モデルでの性能評価

（3） 燃料集合体の燃焼度依存の反応度に対する不確かさ評価

- ・ 簡易燃焼チェーンのための核データ共分散行列の作成
- ・ Gd 入り燃料棒を含むマルチセル体系における無限増倍率に対する不確かさ評価
- ・ PIE データを用いた核データ調整による不確かさ低減

本報告書では、検討結果の詳細は全て付録としてまとめることとした。付録は、上記の整理を踏まえて、以下のように構成される。

付録 1： 等価ピンセル体系導出法に関する検討

付録 2： 予測子・修正子法のための燃焼感度計算アルゴリズムの整備

付録 3： 燃料集合体の物質配置を考慮した共鳴自己遮蔽効果取り扱いが燃焼後数密度に与える影響の評価

付録 4： リバースサンプリング法の有効性評価

付録 5： 燃料集合体の燃焼度依存の反応度に対する不確かさ評価

付録 6： PIE データを活用した反応度の不確かさの低減

付録 1、等価ピンセル体系導出方法に関する検討

1 背景

燃焼感度計算においては大きな計算負荷がかかるため、簡易的な計算体系の需要があるといえる。つまり、燃料集合体系の燃焼感度計算を行う際、ピンセル体系でモデル化することができれば計算負荷を軽減することができる。そこで、燃料集合体の燃焼特性つまり、燃焼後の核種インベントリを再現させるピンセルモデルの導出について検討を行った。

昨年度の検討によって、以下の4つが課題となっていた。

- ① ピンセルモデルでの (H/HM) に対する減速材密度とピンピッチの影響の差異の評価
- ② 燃焼中の情報として中性子エネルギースペクトルを用いての f_k 式の導出
- ③ Gd入り燃料棒による影響を考慮しての f_k 式の導出
- ④ f_k 式の指数 l 、 m 、 n の最適化（昨年度は $l = m = n = 1/2$ ）

$$\left(\frac{H}{HM}\right)_{3 \times 3} = \frac{\left(\frac{H}{HM}\right)_a + \frac{1}{r_i} \left(\frac{H}{HM}\right)_b}{1 + \frac{1}{r_i}} \quad (1.1)$$

$$d_k = \frac{\sum_i d_{k \rightarrow i}}{N_{gt}} \quad (1.2)$$

$$f_k = \left(\frac{H}{HM}\right)_{1 \times 1}^l \times \left(\frac{H}{HM}\right)_{3 \times 3}^m \times \left(\frac{d_{ave}}{d_k}\right)^n \quad (1.3)$$

2 検討条件

本検討における燃料集合体系とピンセル体系の計算条件を以下のように設定した。

2.1 燃料集合体系

典型的な PWR（加圧水型原子炉）燃料集合体を模擬した 17×17 体系を用いた。

2.2.1 幾何形状

全ての方向で境界条件は完全反射条件とする。なお、燃料ペレットと被覆管の間ギャップは無いものとして計算を行った。また、図 1 にピン No.を含んだ体系図を示す。図 1 の通り、燃料集合体は 8 分の 1 対称な図形であることから、ナンバリングをした燃料ピンを検討の対象とした。対象燃料ピンのナンバリングは 0~13、22~33、42~52 の総数は 37 本である。表 1、表 2 にそれぞれ各寸法、減速材の組成を示す。出力密度は 218[W/cm]で一定とし、燃料集合体内のボイド率は 0[%]とした。

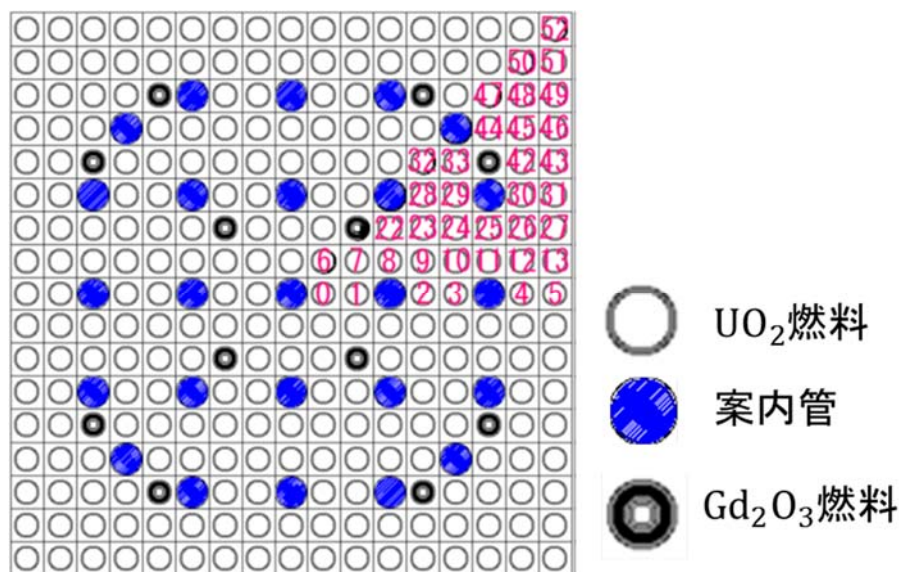


図 1：燃料集合体 17×17 体系図

表 1：燃料集合体内各寸法

内容	寸法[cm]
燃焼棒ピッチ	1.2588
ペレット外径	0.805
燃料被覆管内径	0.805
燃料被覆管外径	0.95
案内管内径	0.569
案内管外径	0.61

表 2 : 減速材の組成

核種	原子数密度[/barn/cm]
H-1	6.6735E-2
O-16	3.3368E-2
B-10	3.7989E-6
B-11	1.529E-5

2.2.2 組成

表 3 に UO_2 燃料、表 4 に Gd_2O_3 燃料の原子数密度を示した。

表 3 : UO_2 燃料の組成

核種	原子数密度[/barn/cm]
U-234	8.9648E-6
U-235	9.2114E-4
U-238	2.1482E-2
O-16	4.4824E-2

表 4 : Gd_2O_3 燃料の組成

核種	原子数密度[/barn/cm]
U-234	4.4824E-6
U-235	5.8944E-4
U-238	2.1796E-2
O-16	5.0129E-2
Gd-152	7.0725E-7
Gd-154	7.7090E-5
Gd-155	5.2337E-4
Gd-156	7.2387E-4
Gd-157	5.5342E-4
Gd-158	8.7841E-4
Gd-160	7.7302E-4

2.2.3 温度

表 5 に各領域の温度を示した。なお、 UO_2 燃料と Gd_2O_3 燃料は同じ燃料温度を使用する。

表 5：各領域における温度

領域	温度[K]
燃料	900
被覆管	600
減速材（水）	591

2.2.5 k_{inf}

図 2 に燃料集合体体系の k_{inf} を示した。

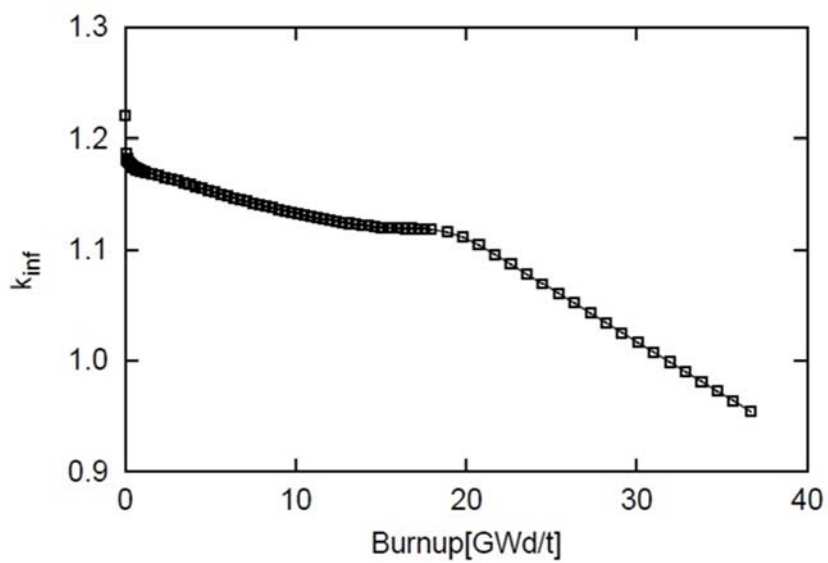


図 2：燃料集合体の k_{inf}

2.3 ピンセル体系

幾何形状、組成、温度、燃焼条件については、燃料集合体系と同一とした。図3にピンセル体系を示す。

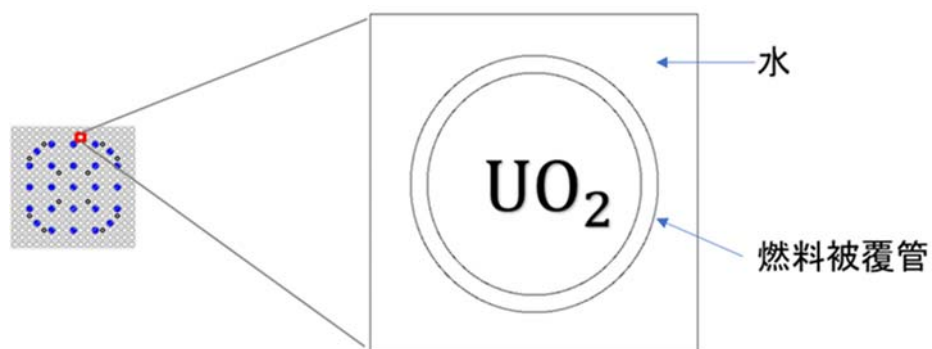


図3：ピンセル体系

2.3.1 k_{inf}

図4にピンセル体系の k_{inf} を示した。

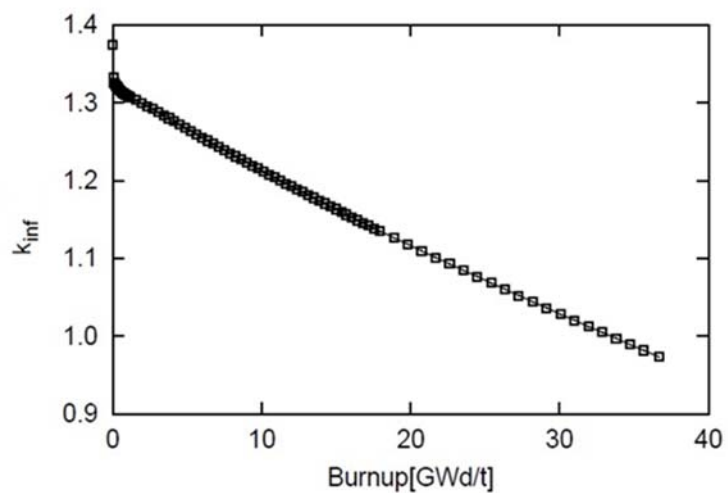
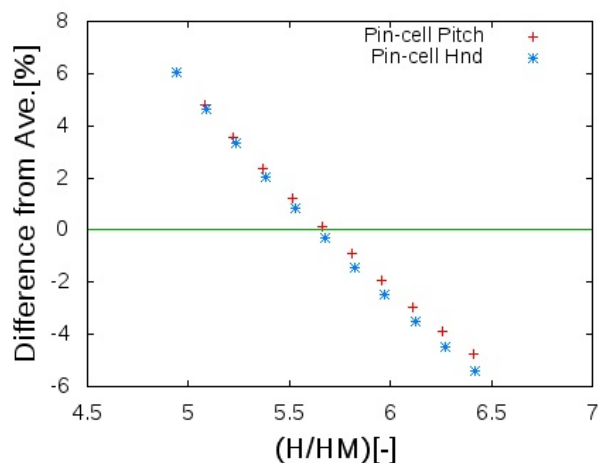


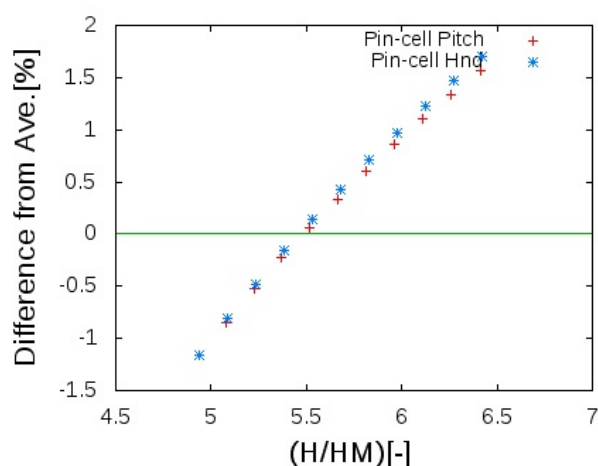
図4：ピンセル体系の k_{inf}

3 ピンセルモデルでの(H/HM)に対する減速材密度とピンピッチの影響の差異の評価

等価ピンセルモデルを導出するにあたって、ピンセル体系の(H/HM)を変更させるパラメータとしてピンピッチと減速材である水密度を変更させることの影響を評価した。図 5 に、ピンピッチを変更した場合と水密度を変更した場合の、ピンセルモデルでの(H/HM)における核種生成量の結果を示す。対象核種は Cs-134、U-234 である。水密度は 6.6735～8.6735[/barn/cm]の範囲で 0.2 ずつ、ピンピッチは 1.2588～1.3588[cm]の範囲で 0.01[cm] ずつ変化させた。ピンピッチ、水密度は前述の通り、いずれも(H/HM)を変更させる効果を持っているが、同じ(H/HM)の値であっても核種生成量に差異があることが確認された。しかしながら、この効果は燃料集合体の位置依存性に対して比較的小さいといえる。そこで本研究は、ピンピッチを変更させることで等価ピンセルモデルを作成することとした。



Cs-134



U-234

図 5：ピンセル体系のピンピッチと水密度変更の差異

4 PWR 燃料集合体中の各ピンにおける核種インベントリの位置依存性について

燃料集合体と等価となるピンセル体系を検討するに当たって、燃料集合体における燃焼後組成の位置依存特性を調べた。燃料集合体内の位置による依存性のみを調べるため、燃料ピンの燃焼度のずれを線形補間により 30[GWd/t]に補正した。図 6 に燃料集合体計算における燃料ピンによる各核種数密度の違いを示した。この結果より燃料集合体内のピンによって燃焼後燃料組成が異なり、位置依存性を確認することができた。

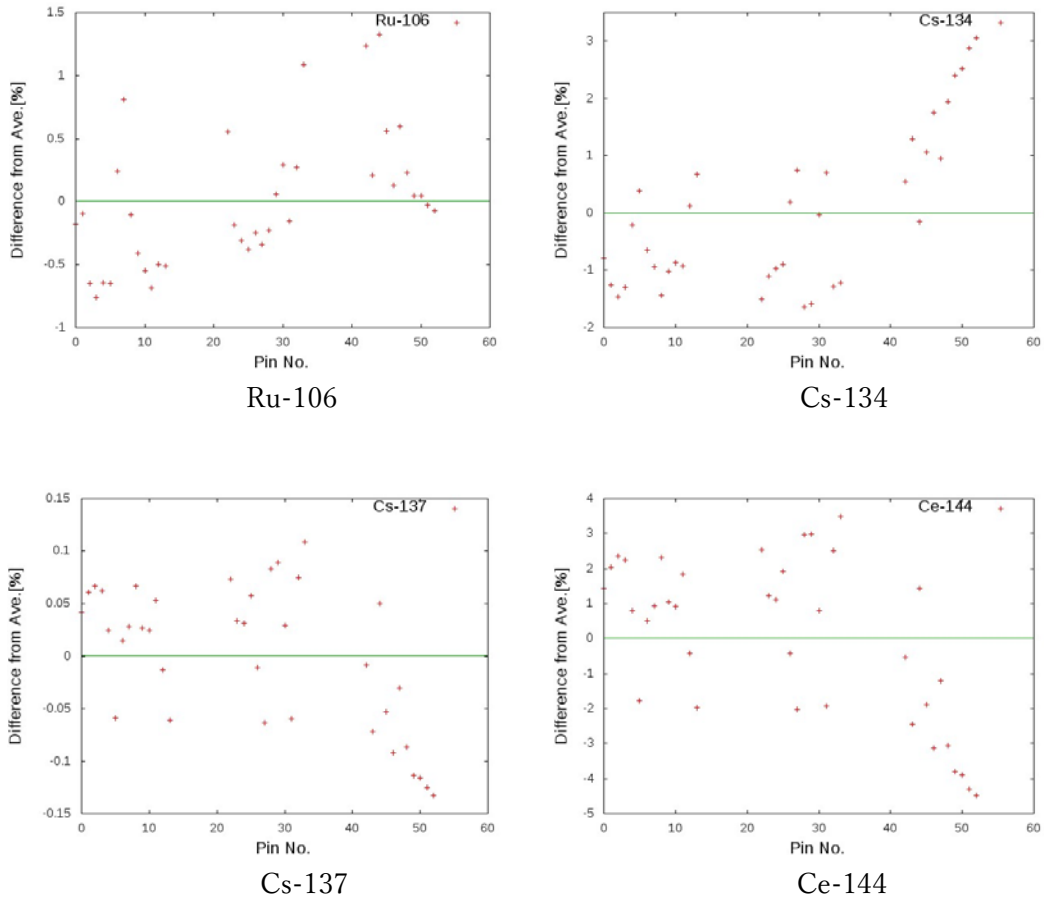
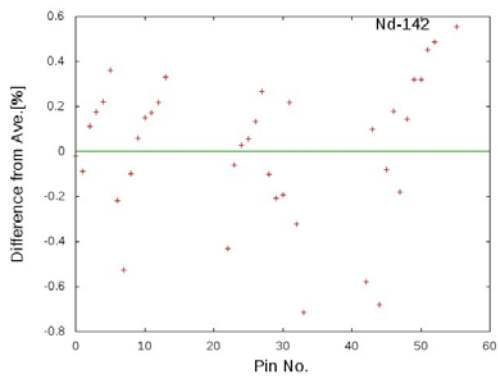
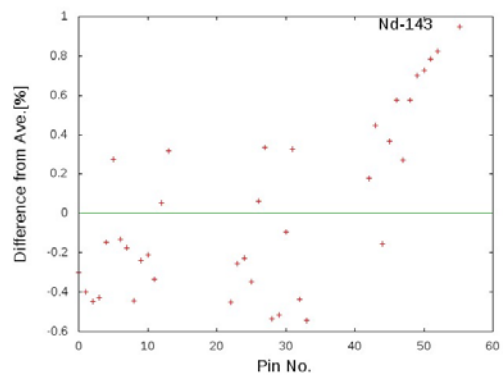


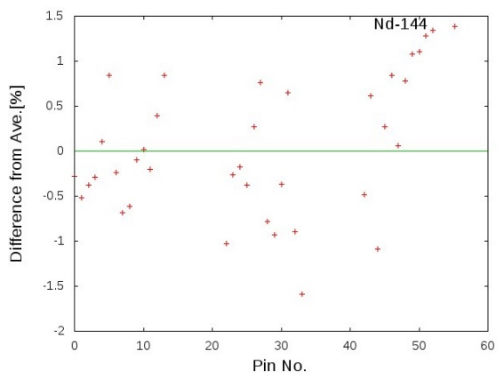
図 6：各ピンによる数密度の差異 (1/5)



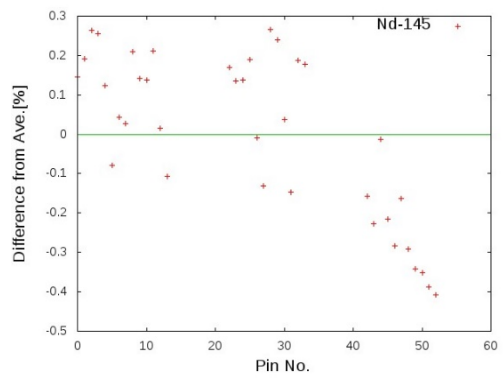
Nd-142



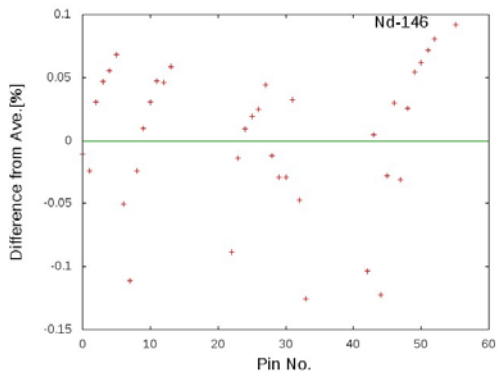
Nd-143



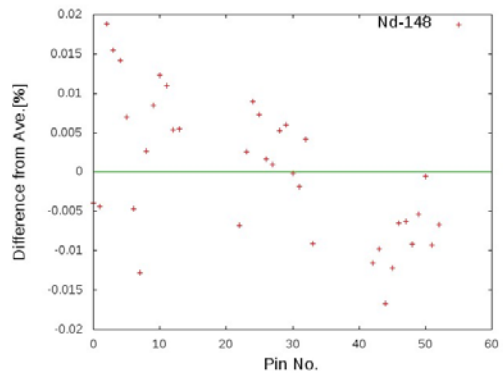
Nd-144



Nd-145

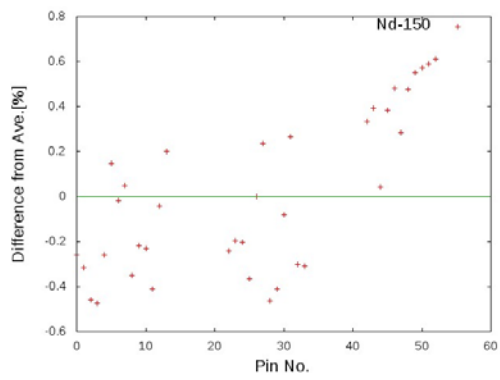


Nd-146

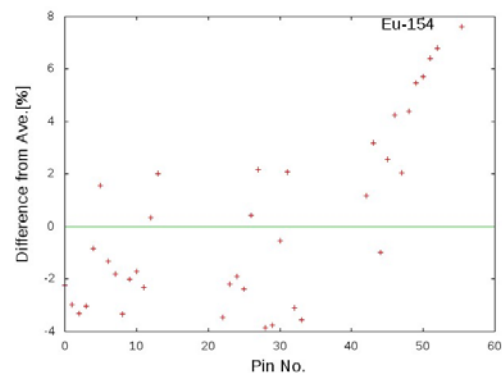


Nd-148

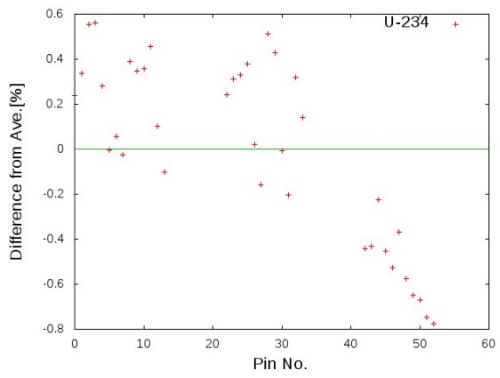
図6：各ピンによる数密度の差異 (2/5)



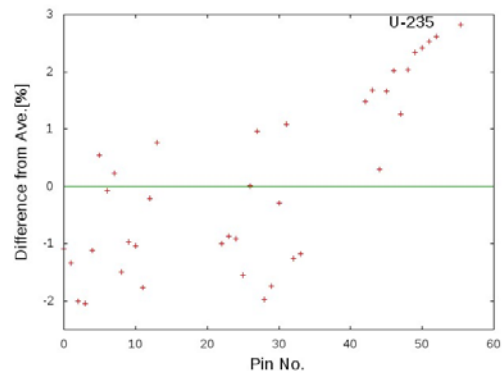
Nd-150



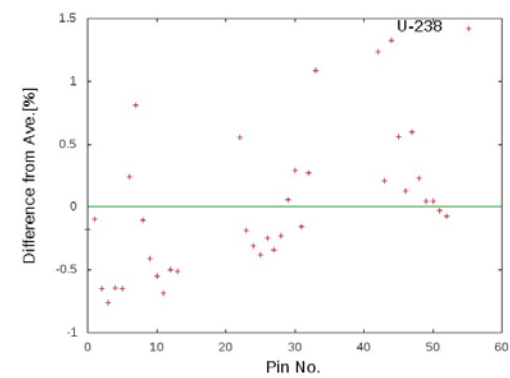
Eu-154



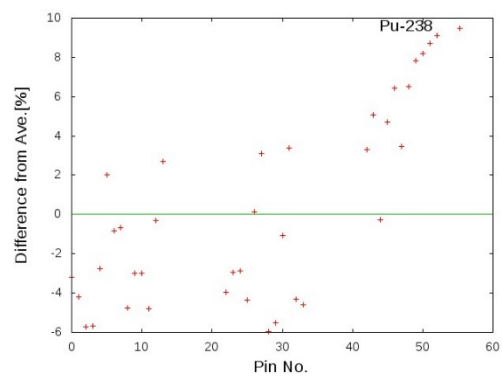
U-234



U-235

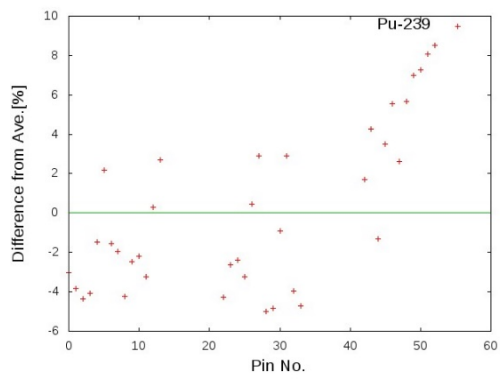


U-238

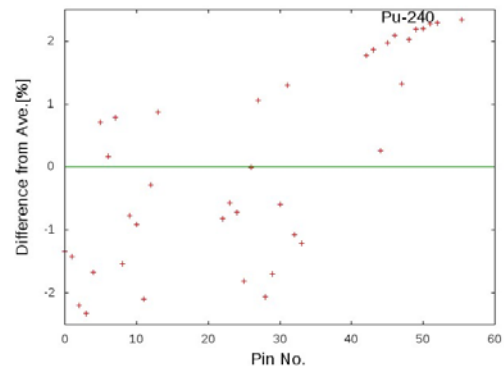


Pu-238

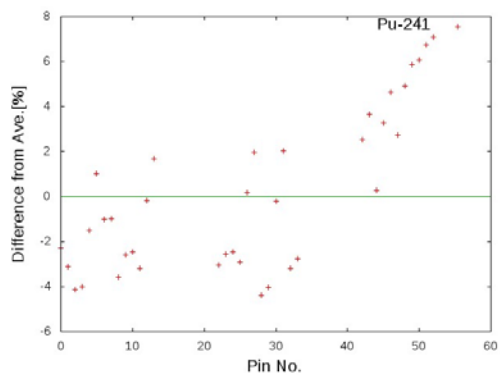
図6：各ピンによる数密度の差異 (3/5)



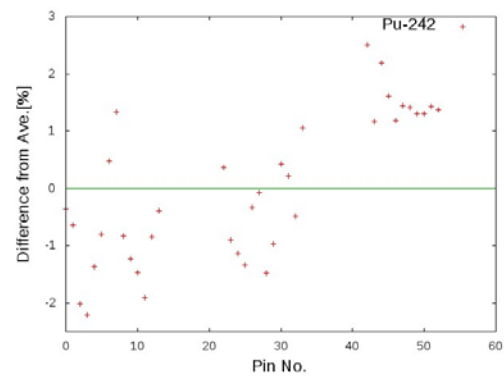
Pu-239



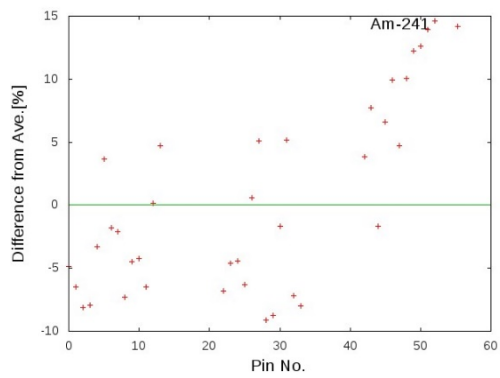
Pu-240



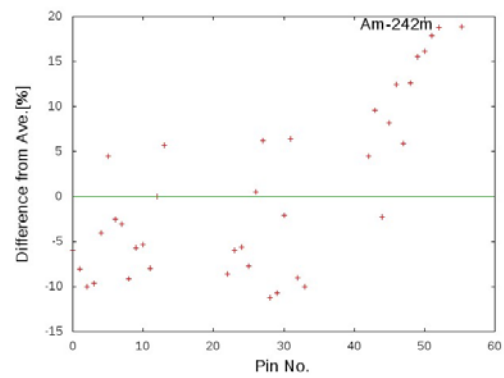
Pu-241



Pu-242

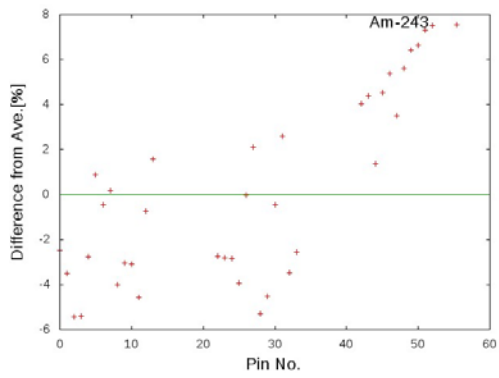


Am-241

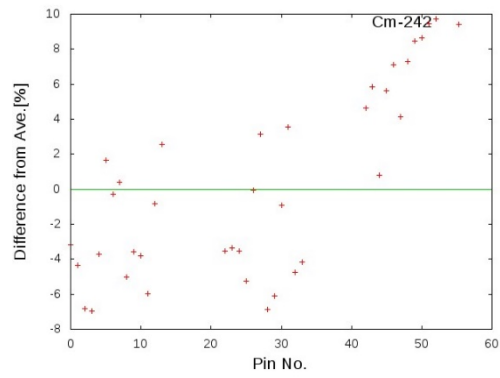


Am-242m

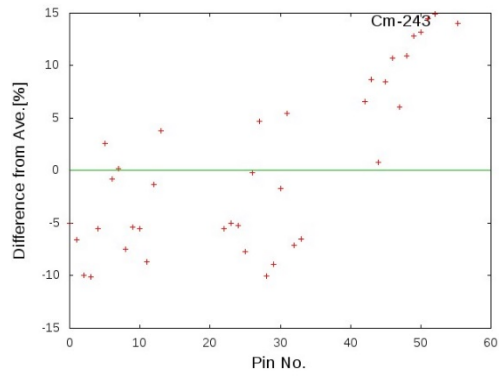
図6：各ピンによる数密度の差異（4/5）



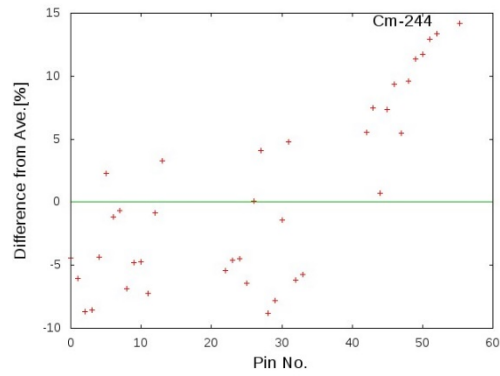
Am-243



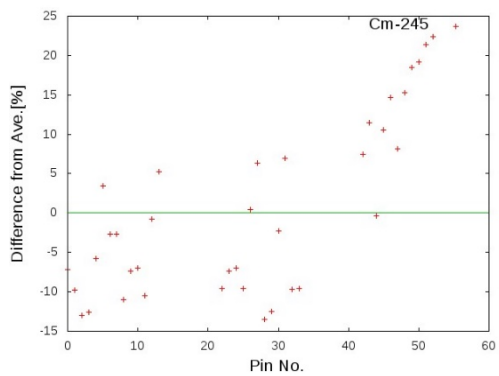
Cm-242



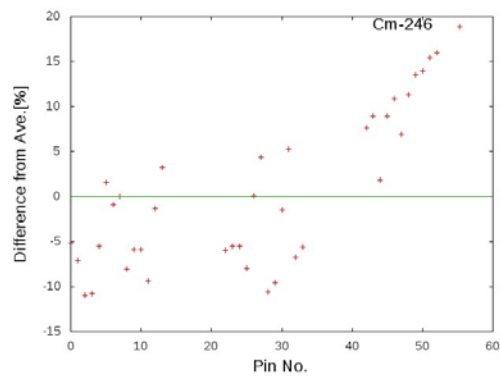
Cm-243



Cm-244



Cm-245



Cm-246

図6：各ピンによる数密度の差異 (5/5)

5 位置依存性を表すパラメータの設定

等価ピンセルモデルを作る上での条件として以下のものが考えられる。

1. 燃焼感度計算の情報が必要
2. 燃焼計算の情報が必要
3. 燃焼開始時点での情報が必要
4. 計算体系の情報のみが必要

必要な情報量が多いほど良い再現が可能であると考えられる。しかしながら、中性子束の情報を加味した結果、核種生成への寄与は二次的であることが分かったため、本検討では、昨年同様に事前の計算を必要としないモデルを作成こととし、上記4の条件で検討を行った。等価ピンセルモデルを作る際、燃料集合体中の位置依存性を表すパラメータを設定することができれば、そのパラメータをピンセル体系で保存することで、目標とするピンセルモデルを作ることができる考えた。昨年度の式を参考に、水燃料比(H/HM)に基づいてパラメータを設定することとした。

本研究で設定したパラメータを $(H/HM)_{Equiv.}$ として(5.1)式に示す。(5.1)式の右辺第一項は、燃料集合体全体の平均の (H/HM) である。右辺第二項は、 α 、 β を変数として、対象ピン k 周り 17×17 体系におけるそれぞれの制御棒案内管 i との距離 $d_{k \rightarrow i}$ の平均 \hat{d}_k を、全対象ピンの案内管までの平均距離 $\hat{d}_{Ave.}$ と比較して評価している項である。(5.2)、(5.3)式はそれぞれ、 \hat{d}_k 、 $\hat{d}_{Ave.}$ についての導出式である。 N_{gt} は燃料集合体内の制御棒案内管の本数、 N_f は対象ピンの本数である。具体的には、 $N_{gt} = 20$ 、 $N_f = 37$ である。 α によって、案内管距離との平均との差異に重み付けを行い、 β によって、案内管距離 $d_{k \rightarrow i}$ に重み付けを行った。制御棒案内管は、制御棒が挿入されていない場合は水で満たされており、対象燃料ピンが案内管に近いほど水の影響が大きくなり、 (H/HM) は大きく評価されこととなる。

$$\left(\frac{H}{HM}\right)_{Equiv.} = \left(\frac{H}{HM}\right)_{Ave.} \times \left(1 + \alpha \times \left(\frac{\hat{d}_{Ave.} - \hat{d}_k}{\hat{d}_{Ave.}}\right)\right) \quad (5.1)$$

$$\hat{d}_k = \frac{\sum_{i=1}^{N_{gt}} d_{k \rightarrow i}^{\beta}}{N_{gt}} \quad (5.2)$$

$$\hat{d}_{Ave.} = \frac{\sum_{k=1}^{N_f} \hat{d}_k}{N_f} \quad (5.3)$$

6 $(H/HM)_{Equiv.}$ の変数 α 、 β を変化させることによる影響

$(H/HM)_{Equiv.}$ に対して2つの変数 α 、 β を設定したが、それぞれの変数を変化させることで $(H/HM)_{Equiv.}$ がどのように変化するかを評価した。対象の核種はCs-134とした。ピンセル体系ではピンピッチを変更した。“ $\alpha = -0.5$ ”として β を“-0.5、-1.0、-1.5”の3つに変化させた結果を図7に示す。 β の符号によって(5.2)式の値の大小が変化し、それに伴って(5.1)式右辺第二項の平均からの大小の評価も変化するため、 α の値は同じであっても α の符号も β と同じように設定する必要がある。この変数 β は指数であるため、正の場合は、対象ピンと案内管との遠さが強調され、負の場合は、案内管との近さが強調される。さらに、図7を基に“ $\beta = -1.0$ ”として、“ $\alpha = -0.5$ 、-1.0、-1.5”の3つに変化させた結果を図8に示す。図8中では、 α が大きければ、燃料集合体内の位置依存性の傾きがx軸に近づき、 α が小さくなれば、傾きはy軸に近づくことが分かった。

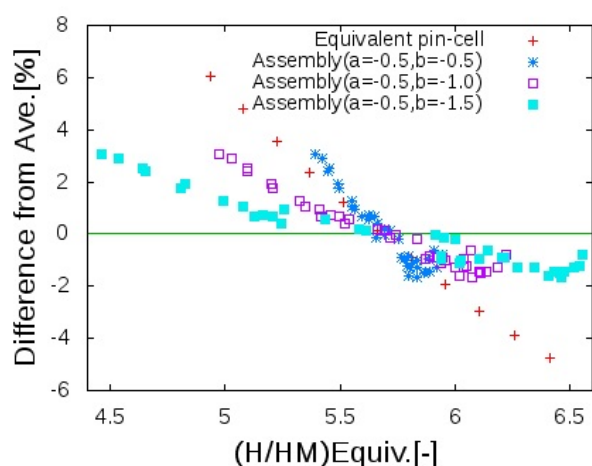


図7: “ $\alpha = -0.5$ ”として β を変化させた $(H/HM)_{Equiv.}$ の評価

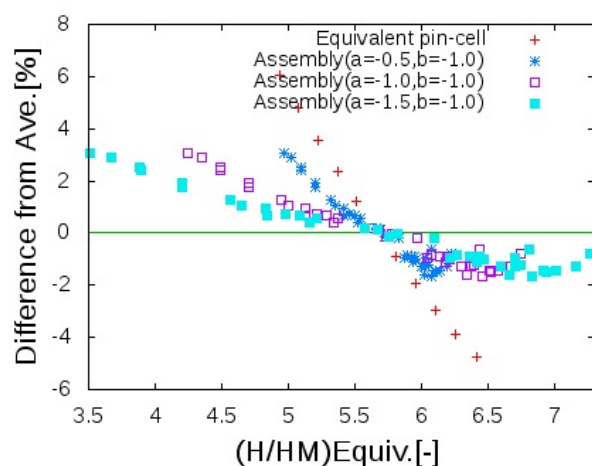


図8: “ $\beta = -1.0$ ”として α を変化させた $(H/HM)_{Equiv.}$ の評価

7 PWR 燃料における燃料集合体と等価となるピンセル体系の検討

前章により設定したパラメータを保存したピンセル体系の計算を行った。本検討ではピンセル体系のピンピッチを 1.2588~1.3588[cm]まで 0.01[cm]刻みで合計 11 個のモデルを作成した。図 9 に燃料集合体の結果と等価ピンセルモデルの計算結果と重ねたものを示す。図 9 では、 $(H/HM)_{Equiv.}$ の変数 $\beta = -1$ で一定として、 α については核種ごとに図内に示した値に設定した。図 9 から、核種生成において、(5.1) 式の位置依存性のパラメータとピンセル体系のピンピッチには相関があることが分かった。以下の表 6 では、燃料集合体計算とピンセル体系の計算との RMS (Root Mean Square、二乗平均平方根) を、ピンセル体系の計算間を内挿することで定量的に評価した。

図 9 の多くの核種では燃料集合体計算とピンセル計算のプロットは一次式上に重なるようにプロットされた。これらの核種中の燃料集合体計算の $(H/HM)_{Equiv.}$ が大きい部分では、ピンセル計算からのずれが比較的大きいものいくつか確認できた。これらはピン No.が 0,1,6,7,8 の燃料集合体の中心部分に位置している。核種の生成量から、 $(H/HM)_{Equiv.}$ の過大評価がなされていると考えられる。また、燃料集合体とピンセルのプロットの重なりが薄い、Cs-137、Nd-142、Nd-144、Nd-146、Ru-106、U-238 では、他の核種に比べて比較的差異が小さいものが多かった。なお、Ce-144 は傾向としては再現可能といえ得るが、 $(H/HM)_{Equiv.}$ の範囲が 0~10 となっており、そのほかの核種では 4.5~6.5 程度の範囲に収まっていることを考慮すると特異な性質が得られた。

表 6：燃料集合体体系と等価ピンセルモデルの RMS

核種	RMS[%]	核種	RMS[%]
Ru-106	1.3	U-238	0.53
Cs-134	0.42	Pu-238	2.4
Cs-137	0.075	Pu-239	1.0
Ce-144	-----	Pu-240	1.5
Nd-142	0.78	Pu-241	1.0
Nd-143	0.13	Pu-242	1.9
Nd-144	1.7	Am-241	2.2
Nd-145	0.11	Am-242m	2.4
Nd-146	0.15	Am-243	2.4
Nd-148	0.065	Cm-242	2.5
Nd-150	0.32	Cm-243	3.2
Eu-154	0.87	Cm-244	6.8
U-234	0.46	Cm-245	5.2
U-235	0.92	Cm-246	6.3

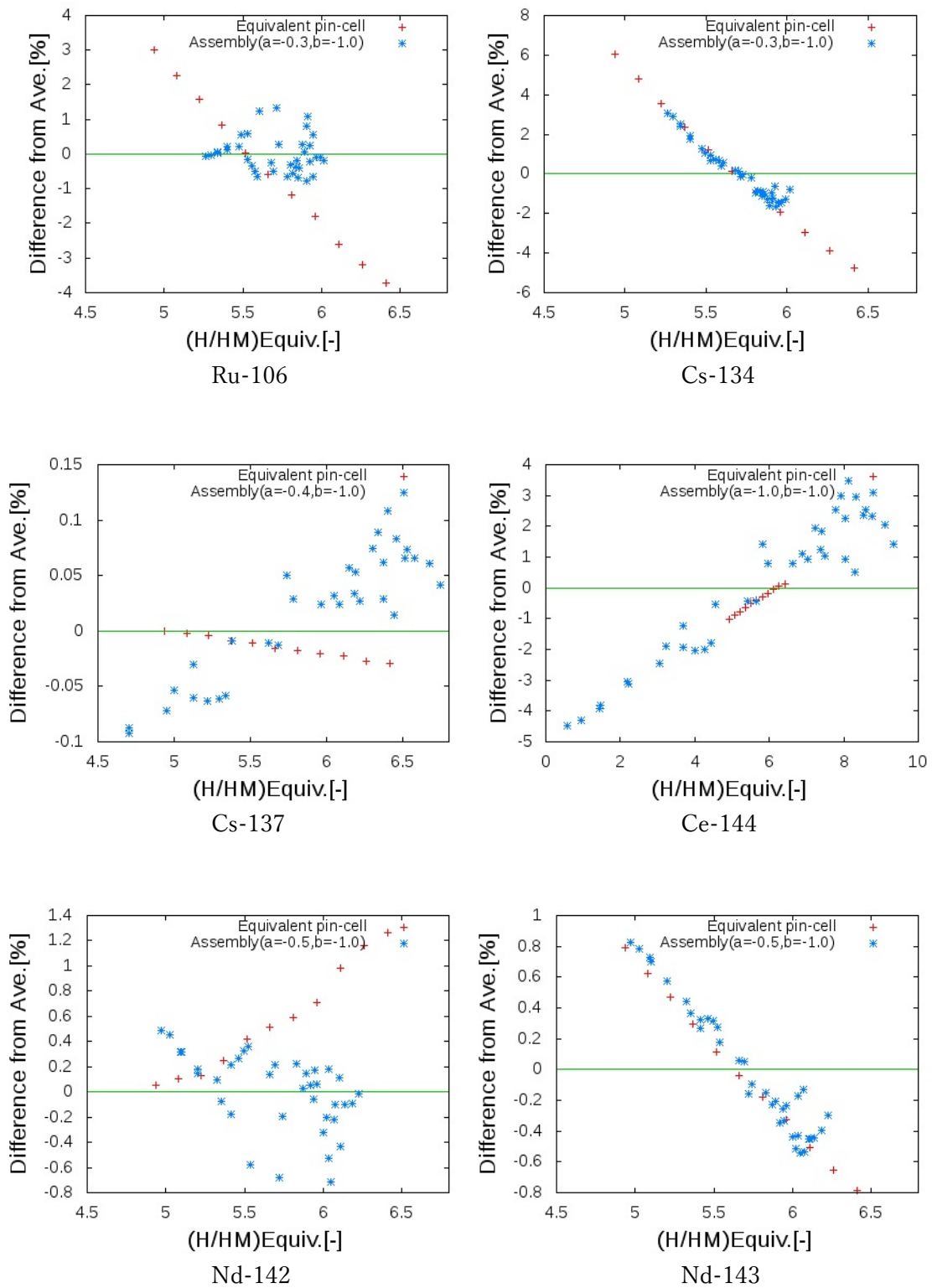


図9： $(H/HM)_{Equiv.}$ による燃料集合体計算と等価ピンセルモデル (1/5)

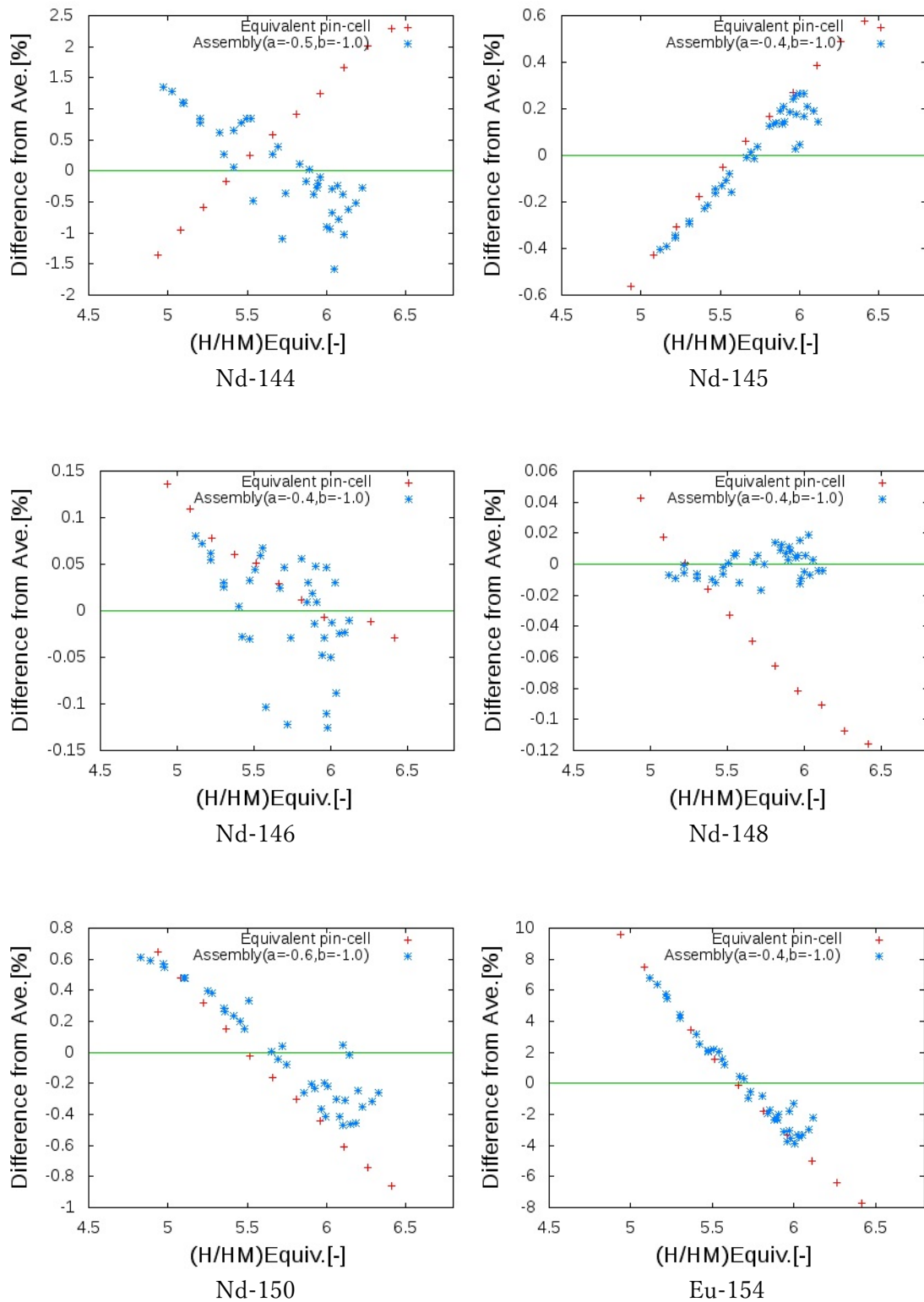


図9: $(H/HM)_{Equiv.}$ による燃料集合体計算と等価ピンセルモデル (2/5)

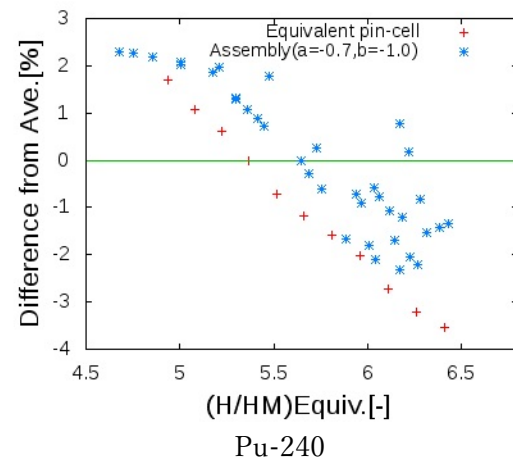
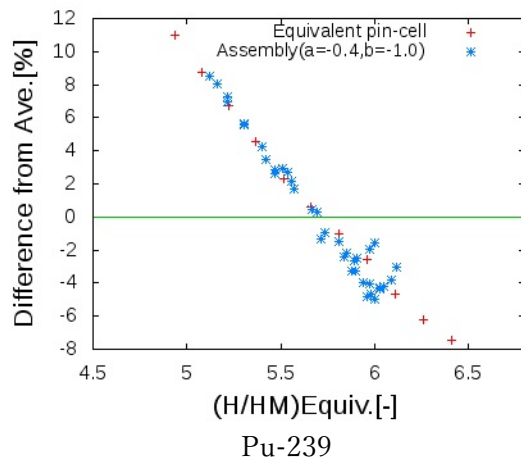
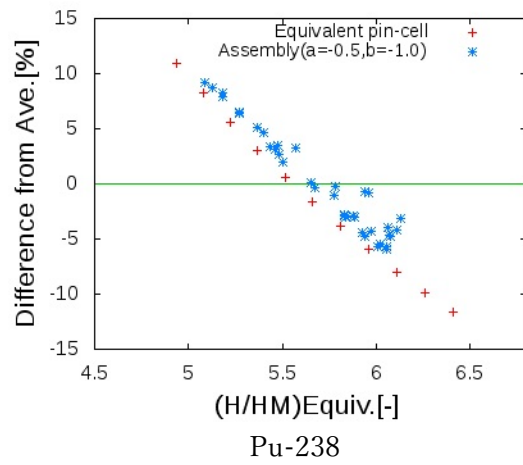
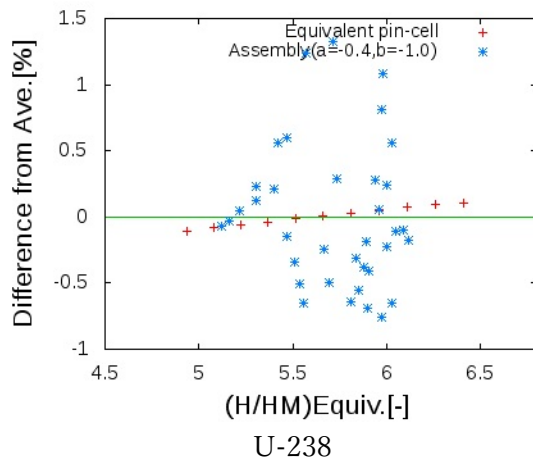
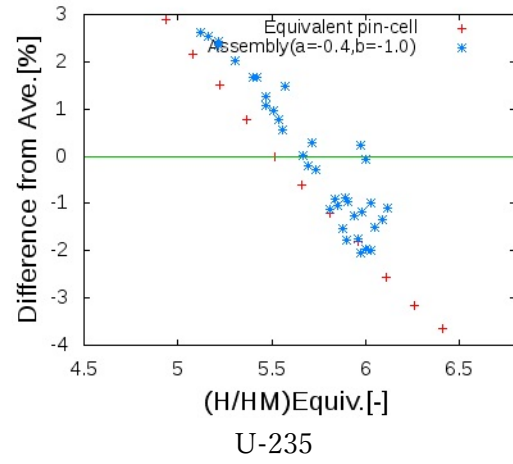
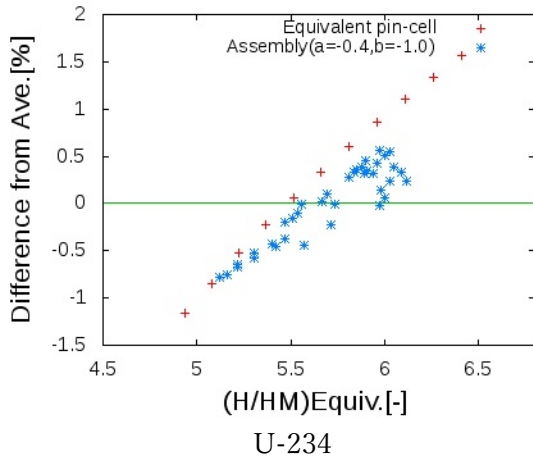


図9： $(H/HM)_{Equiv.}$ による燃料集合体計算と等価ピンセルモデル (3/5)

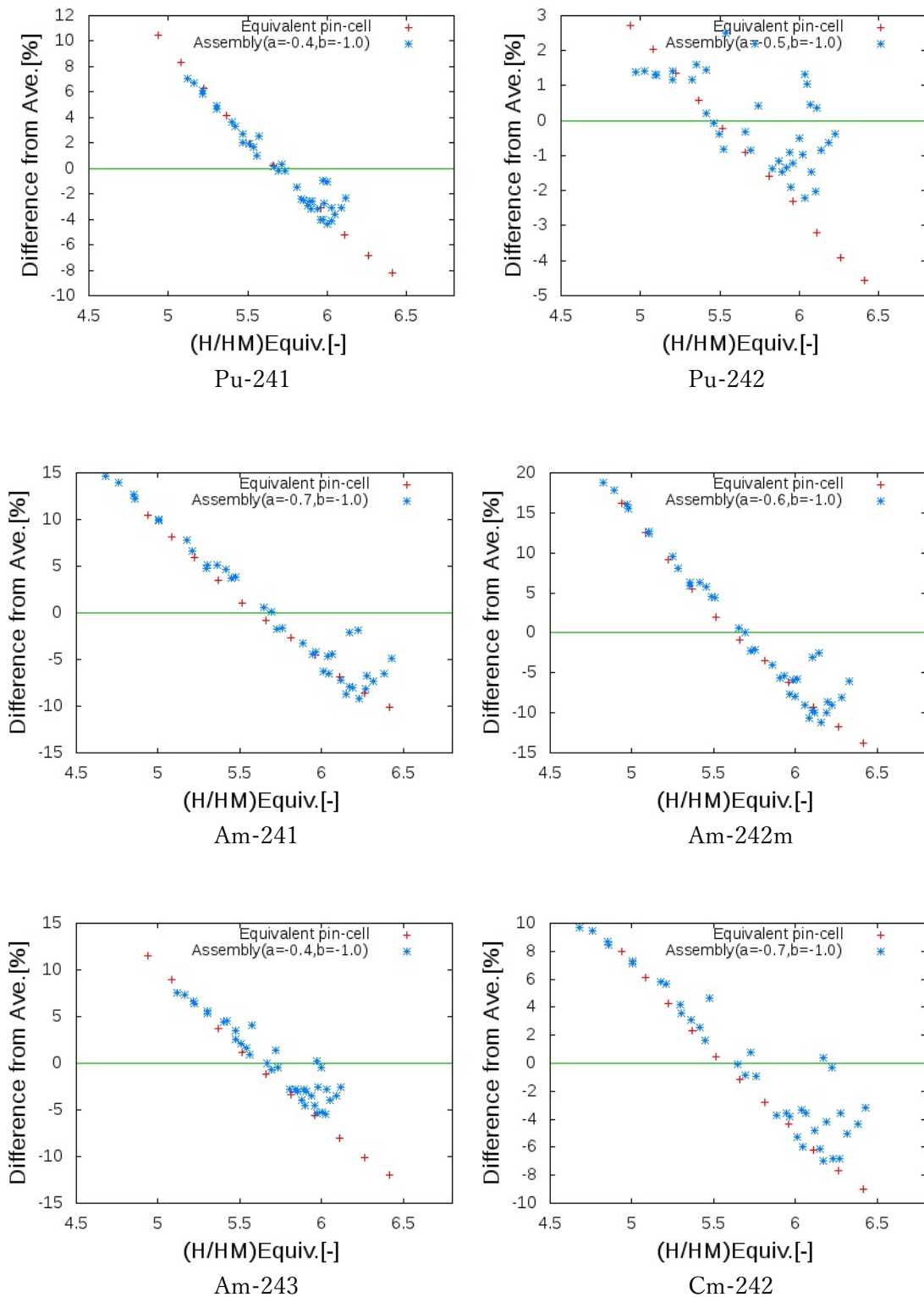


図9： $(H/HM)_{Equiv.}$ による燃料集合体計算と等価ピンセルモデル (4/5)

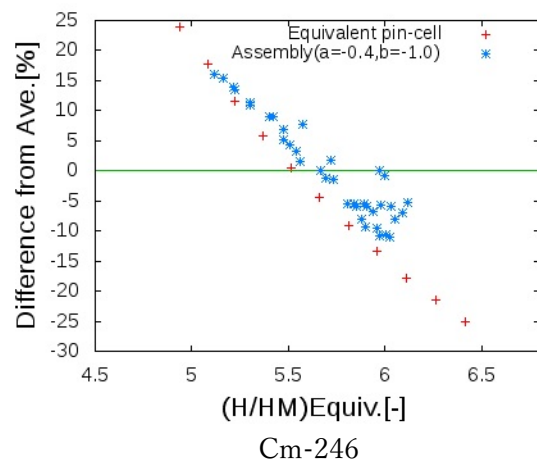
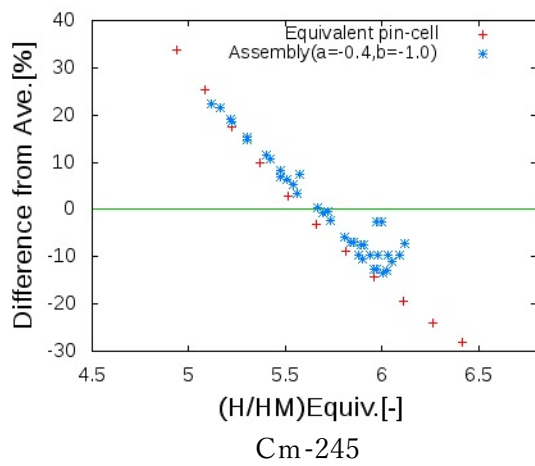
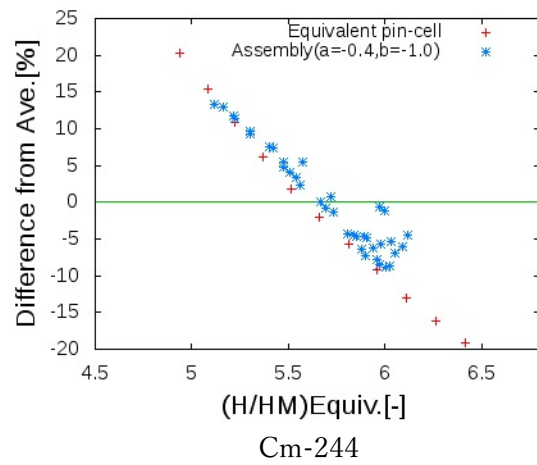
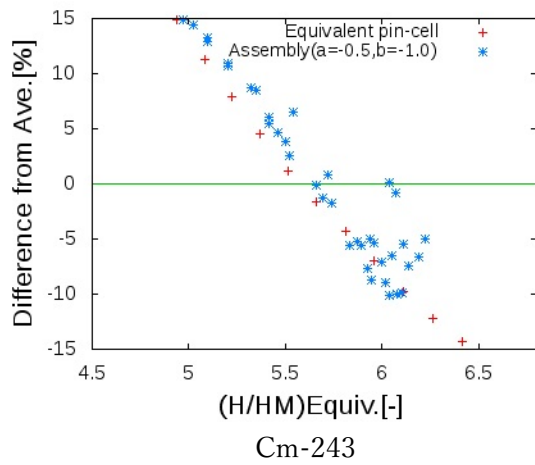


図9： $(H/HM)_{Equiv.}$ による燃料集合体計算と等価ピンセルモデル (5/5)

8 Gd 入り燃料棒による核種生成への影響評価

Gd 燃料の影響を評価するため、燃料集合体体系の Gd 燃料を全て UO_2 燃料に置き換えて、再計算を行った。図 10 には、図 9 に示したものに加えて、Gd 燃料無しの燃料集合体の燃焼計算結果を重ねたものを示した。表 7 には Gd 燃料の有無による核種生成量の差異（[Gd あり] - [Gd 無し]）を示した。

図 10、表 6 から、 Gd_2O_3 燃料の有無による核種生成量の影響は、対象とした核種ではほとんど 1[%]未満でありその効果は二次的であったといえることが分かった。また、U-238 では Gd_2O_3 燃料が無くなることで燃料集合体内の核種生成量の位置依存性が低くなり、等価ピンセル計算の結果との差異が 0.02[%]まで低下した。

表 7 : Gd 燃料無し燃料集合体と等価ピンセルモデルの平均差異

核種	Gd_2O_3 燃料あり RMS[%]	Gd_2O_3 燃料無し RMS [%]	Gd_2O_3 燃料による差異 [%]
Cs-134	0.42	0.38	0.039
Ce-144	----	-----	-----
Nd-144	1.7	1.6	0.16
Nd-145	0.11	0.098	0.0070
U-235	0.92	0.91	0.0066
U-238	0.53	0.020	0.51
Pu-238	2.4	2.3	0.12
Am-241	2.2	2.3	-0.13
Am-242m	2.4	2.5	-0.098
Am-243	2.4	2.0	0.37
Cm-245	5.2	4.8	0.36

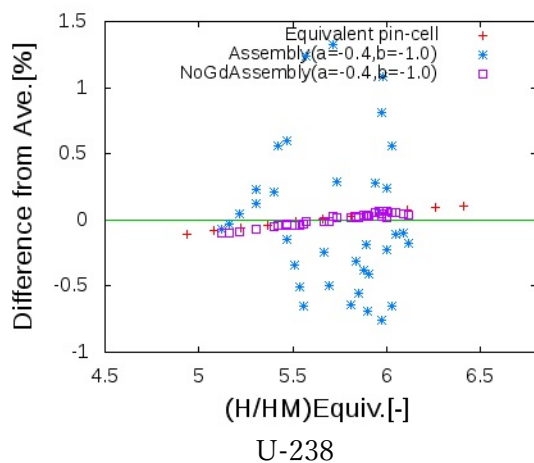
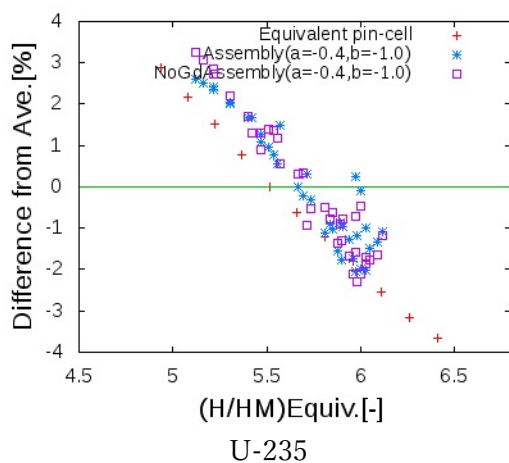
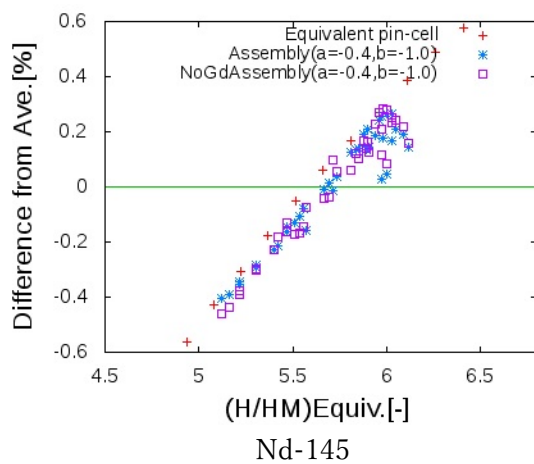
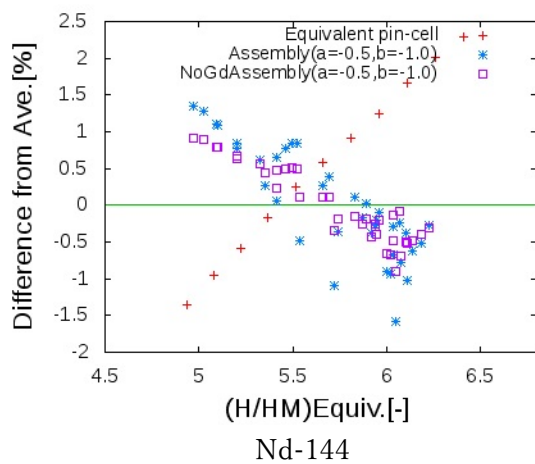
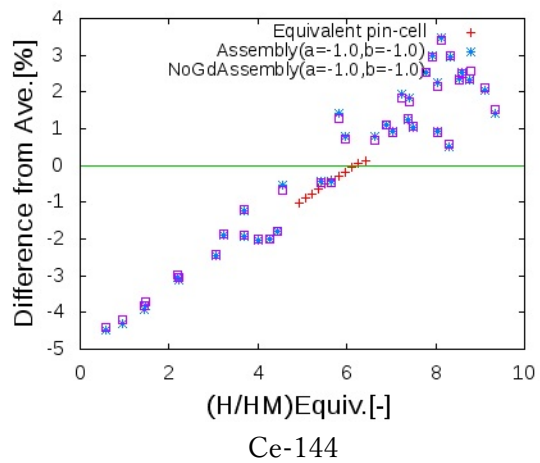
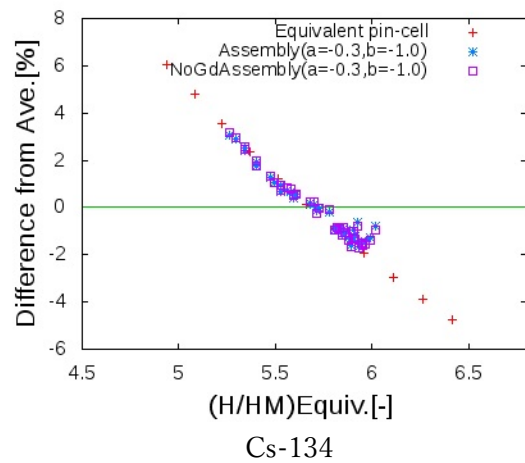


図 10 : Gd₂O₃ 燃料による核種生成量の差異 (1/2)

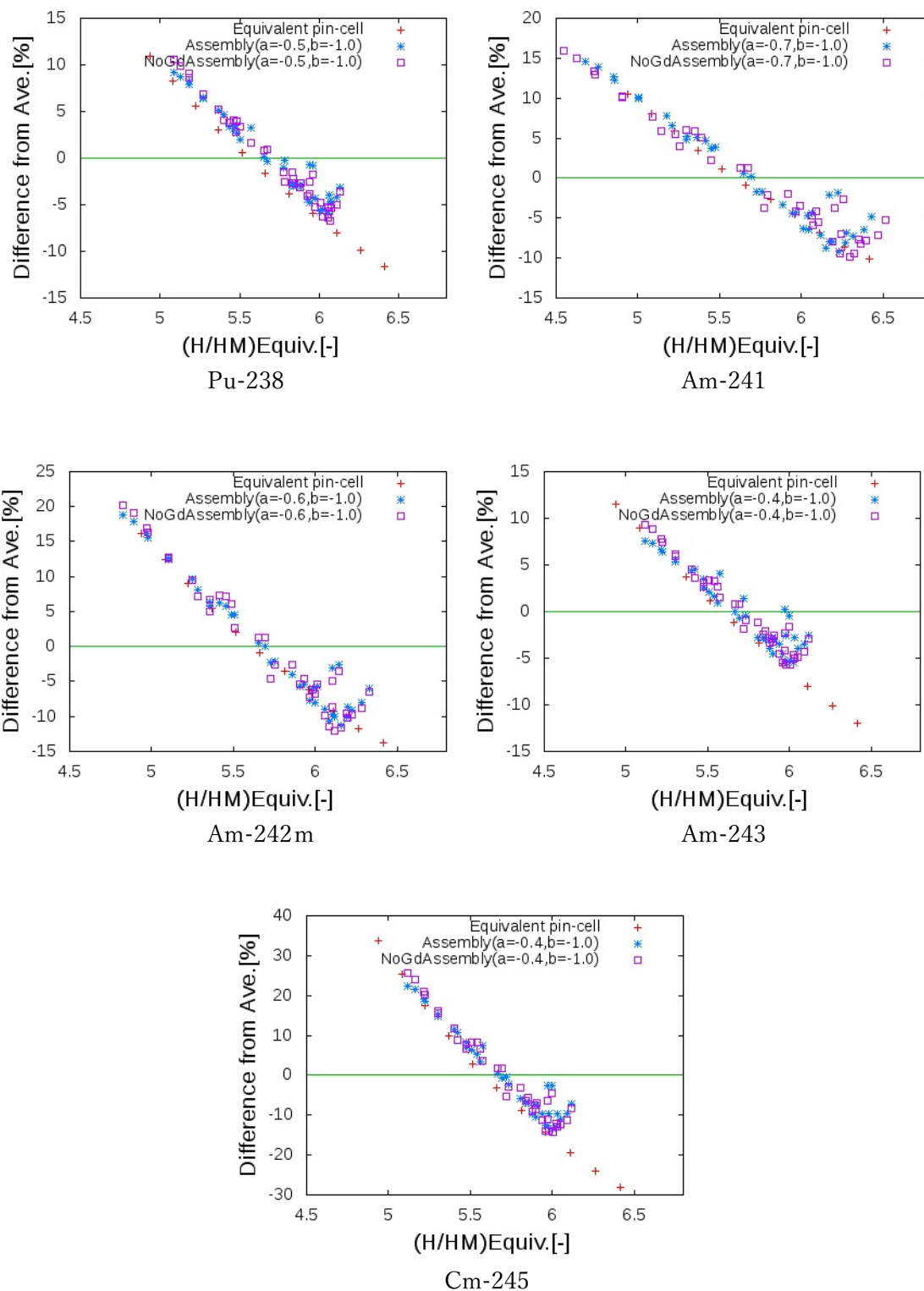


図 10 : Gd_2O_3 燃料による核種生成量の差異 (2/2)

9 結論

燃料集合体の位置依存性を表すパラメータを設定することで、そのパラメータを保存するピンセル体系の燃焼計算によって燃焼特性を再現するモデルを考案した。以上の検討の結果、より良い等価ピンセルモデルの導出のために以下の課題があると考えられる。

- 本検討は無限集合体体系で燃焼度 30[GW d/t]行っており、実際の燃料集合体内における位置による依存性や任意の燃焼度への汎用性の確認が必要である。
- 7章で示した通り、燃料集合体の中心部分に位置しているピン No.0,1,6,7,8 の再現性が低くなっているが、対象燃料とその周辺の燃料ピンとの影響の度合いを表す Dancoff 係数の影響を評価した式の導出する方法が考えられる。
- 本検討で導出した位置依存性を表すパラメータ $(H/HM)_{Equiv.}$ の変数 α 、 β は核種によって異なる最適値が存在している。等価ピンセルモデルの燃料集合体計算との差異を最小とし、差異の定量化をするため、この最適値を求めることが望まれる。
- 本検討では、28 核種を対象とした。しかしながら、本検討では対象としていなかった核種には、I-129、Pd-107 等の燃料中のインベントリの評価が重要な核種が多く残っており、対象とする核種を増やし、その差異について評価する必要がある。

付録 2 : 予測子・修正子法のための燃焼感度計算アルゴリズムの整備

核燃料の燃焼特性に対する感度、不確かさ解析において、燃焼摂動理論 (Depletion Perturbation Theory, DPT) がこれまでに開発されてきた [1, 2]。当研究グループで開発している CBZ コードシステムでは、複数の燃料セルで構築される体系に対して DPT を適用して燃焼感度を計算することが可能となっている [3]。DPT を軽水炉燃料集合体の計算に適用することを考えた場合、可燃性毒物の燃焼を取り扱うことが必須となる。可燃性毒物を含む体系の燃焼計算では、時間に対する離散化誤差が大きくなるため、予測子・修正子法 (Predictor-Corrector method、PC 法) のような離散化誤差低減手法の導入が必須となる。従って、燃料集合体体系に対する DPT には PC 法などの適用が前提となり、そのための定式化が必要となる。

本付録では、PC 法を用いた燃焼計算に対する DPT の理論の定式化を行うとともに、CBZ に実装した結果を述べる。

1 理論と実装

1.1 PC 法を用いない燃焼計算のための DPT

最初に PC 法を用いない燃焼計算のための DPT について説明を行う。ここでは簡単のため、単一の燃焼領域を持つ体系を対象とする。また、燃焼ステップにおける中性子束規格化のためのサブステップ分割についても省略する。複数の燃焼領域を持つ体系を対象とした場合や、サブステップ分割を行った場合については文献 [3] に詳述されている。

時間ステップ i の規格化していない中性子束 Φ_i を以下の中性子輸送方程式の解として定義する。

$$\mathbf{B}_i \Phi_i = \left(\mathbf{A}_i - \frac{1}{k_{\text{eff},i}} \mathbf{F}_i \right) \Phi_i = 0 \quad (1)$$

ここで k_{eff} は実効中性子増倍率、 \mathbf{A} と \mathbf{F} はそれぞれ中性子の損失、生成の演算子を示す。中性子束は以下の規格化条件を満足するように決められる。

$$\mathbf{G}_i \phi_i = \mathbf{G}_i \Phi_i f_i = P \quad (2)$$

ここで、 \mathbf{G} は規格化の演算子、 f は規格化因子、 P は原子炉熱出力などの規格化パラメータの値である。 Φ_i について空間的に平均化し、エネルギー積分したものの、すなわち空間平均全中性子束を $\tilde{\Phi}_i$ とすると、以下のように定義される。

$$\tilde{\Phi}_i = \frac{\int dE \int d\mathbf{r} \Phi_i(\mathbf{r}, E)}{\int d\mathbf{r}} \quad (3)$$

ここで、空間積分は燃焼領域について行われるものとする。同様に、規格化された中性子束についても以下を定義する。

$$\tilde{\phi}_i = f_i \tilde{\Phi}_i \quad (4)$$

時間ステップ i での燃焼方程式は以下のように記述される。

$$\frac{d\mathbf{N}(t)}{dt} = \mathbf{M}_i \mathbf{N}(t), \quad (t_i \leq t < t_{i+1}) \quad (5)$$

ここで $\mathbf{N}(t)$ は t における核種数密度ベクトルである。ステップ i における燃焼行列 \mathbf{M}_i は以下のように分解される。

$$\mathbf{M}_i = \mathbf{M}_\lambda + \mathbf{M}_{\phi,i} \tilde{\phi}_i = \mathbf{M}_\lambda + \mathbf{M}_{\phi,i} f_i \tilde{\Phi}_i \quad (6)$$

ここで \mathbf{M}_λ と $\mathbf{M}_{\phi,i}$ はそれぞれ崩壊と中性子核反応に対応する成分である。行列 $\mathbf{M}_{\phi,i}$ の要素是一群（エネルギー平均）断面積からなることに留意されたい。

大きさが \mathbf{N} と同一であるベクトル $\mathbf{w}(t)$ を式 (5) の両辺に左から乗じ、両辺を区間 $[t_i, t_{i+1}]$ で積分すると、以下の式を得ることができる。

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{d\mathbf{N}}{dt} dt &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \mathbf{M}_i \mathbf{N} dt, \\ [\mathbf{w}^T \mathbf{N}]_{t_i}^{t_{i+1}} &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{d\mathbf{w}^T}{dt} \mathbf{N} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \mathbf{M}_i \mathbf{N} dt, \\ \mathbf{w}^T(t_{i+1}) \mathbf{N}(t_{i+1}) &= \mathbf{w}^T(t_i) \mathbf{N}(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{d\mathbf{w}^T}{dt} \mathbf{N} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \mathbf{M}_i \mathbf{N} dt \end{aligned} \quad (7)$$

ここで、肩添字 T は行列とベクトルの転置を示す。これ以降、 \mathbf{N} と \mathbf{w} の時間 t に対する依存性は省略して記述する。この式の両辺について核データ σ で微分すると以下の式を得る。

$$\mathbf{w}^T(t_{i+1}) \frac{d\mathbf{N}(t_{i+1})}{d\sigma} = \mathbf{w}^T(t_i) \frac{d\mathbf{N}(t_i)}{d\sigma} + I_i \quad (8)$$

ここで、

$$I_i = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{d\mathbf{w}^T}{dt} \frac{d\mathbf{N}}{d\sigma} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{d\mathbf{M}_i}{d\sigma} \mathbf{N} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \mathbf{M}_i \frac{d\mathbf{N}}{d\sigma} dt \quad (9)$$

である。ベクトル \mathbf{e}_j を j 番目の要素が 1 でそれ以外がゼロであるものとして、 $\mathbf{w}(t_{i+1}) = \mathbf{e}_j$ とすると、式 (8) は

$$\frac{dN_j(t_{i+1})}{d\sigma} = \mathbf{w}^T(t_i) \frac{d\mathbf{N}(t_i)}{d\sigma} + I_i \quad (10)$$

と書き直せる。同様に、 $t = t_i$ における微分 $\frac{d\mathbf{N}}{d\sigma}$ については以下のように記述される。

$$\mathbf{w}^T(t_i) \frac{d\mathbf{N}(t_i)}{d\sigma} = \mathbf{w}^T(t_{i-1}) \frac{d\mathbf{N}(t_{i-1})}{d\sigma} + I_{i-1} \quad (11)$$

数密度ベクトルの初期条件が $t = t_1$ で定義されるとした場合、 $\frac{d\mathbf{N}(t_1)}{d\sigma} = 0$ のため、以下の方程式が得られる。

$$\frac{dN_j(t_{i+1})}{d\sigma} = \mathbf{w}^T(t_1) \frac{d\mathbf{N}(t_1)}{d\sigma} + \sum_{j=1}^i I_j = \sum_{j=1}^i I_j \quad (12)$$

以降については、式 (9) で定義される積分項 I_i について考える。

式 (9) の右辺第一項及び第三項は、後述するようにベクトル \mathbf{w} を適切に定義することで消去することができる。第二項を以下のように書き直す。

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{d\mathbf{M}_i}{d\sigma} \mathbf{N} dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \sigma} \mathbf{N} dt + \sum_g \frac{d\tilde{\Phi}_{i,g}}{d\sigma} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \tilde{\Phi}_{i,g}} \mathbf{N} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{df_i}{d\sigma} \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial f_i} \mathbf{N} dt \quad (13)$$

ここで $\tilde{\Phi}_{i,g}$ は、燃焼領域における g 群の空間平均中性子束を示す。式 (13) の右辺第一項は核データの燃焼行列に対する直接的な影響に対応し、この項の偏微分 $\frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \sigma}$ は容易に計算することができる。第二、第三項は、核データの燃焼行列に対する、中性子束の空間、エネルギー分布や中性子束の規格化を介した間接的な効果に対応している。

式 (13) の右辺第二項の積分は以下のように書き直せる。

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \tilde{\Phi}_{i,g}} \mathbf{N} dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \left(\mathbf{M}_{\phi,i} \tilde{\Phi}_i f_i \right)}{\partial \tilde{\Phi}_{i,g}} \mathbf{N} dt = f_i \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \mathbf{M}_{\phi,i,g} \mathbf{N} dt \quad (14)$$

ここで、

$$\mathbf{M}_{\phi,i,g} = \frac{\partial \left(\mathbf{M}_{\phi,i} \tilde{\Phi}_i \right)}{\partial \tilde{\Phi}_{i,g}} \quad (15)$$

である。行列 $\mathbf{M}_{\phi,i} \tilde{\Phi}_i$ の要素は反応率であるため、行列 $\mathbf{M}_{\phi,i,g}$ の要素は g 群の断面積に関連するもののみ非ゼロとなる。

次に、式 (13) の右辺第三項について整理する。式 (2) を σ で微分すると、以下の式を得る。

$$\frac{df_i}{d\sigma} \frac{P}{f_i} + f_i \frac{d\mathbf{G}_i}{d\sigma} \Phi_i + f_i \mathbf{G}_i \frac{d\Phi_i}{d\sigma} = 0 \quad (16)$$

ここで、議論を簡略化するため、以下を仮定するものとする。

$$\frac{d\mathbf{G}_i}{d\sigma} = 0 \quad (17)$$

すると、以下の式が得られる。

$$\frac{df_i}{d\sigma} = -\frac{f_i^2}{P} \mathbf{G}_i \frac{d\Phi_i}{d\sigma} \quad (18)$$

式 (18) を用いて、式 (13) の右辺第三項は以下のように書き直せる。

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{df_i}{d\sigma} \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial f_i} \mathbf{N} dt &= \frac{df_i}{d\sigma} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \left(\mathbf{M}_{\phi,i} \tilde{\Phi}_i \right) \mathbf{N} dt \\ &= -\frac{f_i^2}{P} \mathbf{G}_i \frac{d\Phi_i}{d\sigma} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \left(\mathbf{M}_{\phi,i} \tilde{\Phi}_i \right) \mathbf{N} dt = -f_i P_i^\dagger \mathbf{G}_i \frac{d\Phi_i}{d\sigma} \end{aligned} \quad (19)$$

ここで、

$$P_i^\dagger = \frac{\int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \left(\mathbf{M}_{\phi,i} \tilde{\Phi}_i f_i \right) \mathbf{N} dt}{P} \quad (20)$$

である。また、もし

$$\mathbf{G}_i \Phi_i = V \sum_g G_{i,g} \tilde{\Phi}_{i,g} \quad (21)$$

のように書けるとするならば、式 (13) の右辺第三項は

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{df_i}{d\sigma} \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial f_i} \mathbf{N} dt = -f_i P_i^\dagger V \sum_g G_{i,g} \frac{d\tilde{\Phi}_{i,g}}{d\sigma} \quad (22)$$

と書ける。ここで、 V は燃焼領域の体積を示す。

式 (13) と (14)、(22) を用いて、式 (9) の右辺第二項は以下のように書き直せる。

$$\begin{aligned} & \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{d\mathbf{M}_i}{d\sigma} \mathbf{N} dt \\ &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \sigma} \mathbf{N} dt + \sum_g \frac{d\tilde{\Phi}_{i,g}}{d\sigma} \left\{ \left(f_i \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \mathbf{M}_{\phi,i,g} \mathbf{N} dt - V G_{i,g} f_i P_i^\dagger \right) \right\} \quad (23) \end{aligned}$$

次に、式 (23) の右辺の項 $\frac{d\tilde{\Phi}_{i,g}}{d\sigma}$ について考えよう。中性子輸送方程式 (1) の両辺を σ により微分すると、以下を得ることが出来る。

$$\left(\frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \sigma} + \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \mathbf{N}^T(t_i)} \frac{d\mathbf{N}(t_i)}{d\sigma} \right) \Phi_i + \mathbf{B}_i \frac{d\Phi_i}{d\sigma} = 0 \quad (24)$$

ここで、式 (1) に対する一般化随伴方程式を以下のように定義する。

$$\mathbf{B}_i^\dagger \Gamma_i^\dagger = S_i^\dagger \quad (25)$$

ここで、肩添字 \dagger は随伴の演算子もしくはパラメータであることを示す。一般化随伴中性子束 Γ_i^\dagger に対する境界条件は Φ_i の境界条件に従って適切に決められる。この Γ_i^\dagger を式 (24) の両辺に乘じ、両辺を全位相空間で積分すると、以下の式が得られる。

$$\begin{aligned} & \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \sigma} \Phi_i \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}^T(t_i)}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \mathbf{N}(t_i)} \Phi_i \right\rangle + \left\langle \Gamma_i^\dagger, \mathbf{B}_i \frac{d\Phi_i}{d\sigma} \right\rangle \\ &= \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \sigma} \Phi_i \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}^T(t_i)}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \mathbf{N}(t_i)} \Phi_i \right\rangle + \left\langle \frac{d\Phi_i}{d\sigma}, \mathbf{B}_i^\dagger \Gamma_i^\dagger \right\rangle \\ &= \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \sigma} \Phi_i \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}^T(t_i)}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \mathbf{N}(t_i)} \Phi_i \right\rangle + \left\langle \frac{d\Phi_i}{d\sigma}, S_i^\dagger \right\rangle = 0 \quad (26) \end{aligned}$$

ここで、括弧 $\langle \rangle$ は全位相空間に対する積分を示す。源 S_i^\dagger を燃焼領域で一定と定義すると、式 (26) の第三項は以下のように書ける。

$$\left\langle \frac{d\Phi_i}{d\sigma}, S_i^\dagger \right\rangle = \sum_g S_{i,g}^\dagger \frac{d\tilde{\Phi}_{i,g}}{d\sigma} V \quad (27)$$

そして、源 S_i^\dagger を

$$S_{i,g}^\dagger = -\frac{1}{V} \left(f_i \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \mathbf{M}_{\phi,i,g} \mathbf{N} dt - V G_{i,g} f_i P_i^\dagger \right) \quad (28)$$

と定義すると、式 (23) の右辺第二項は

$$\sum_g \frac{d\tilde{\Phi}_{i,g}}{d\sigma} \left(f_i \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \mathbf{M}_{\phi,i,g} \mathbf{N} dt - V G_{i,g} f_i P_i^\dagger \right) = \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \sigma} \Phi_i \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}^T(t_i)}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \mathbf{N}(t_i)} \Phi_i \right\rangle \quad (29)$$

と書ける。なお、源 S_i^\dagger は中性子輸送方程式 (1) の解 Φ_i と直交するため、Fredholm alternative theorem が式 (25) に非ゼロの解が存在することを保証する。

最後に、積分項 I_i は

$$I_i = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{d\mathbf{w}^T}{dt} \frac{d\mathbf{N}}{d\sigma} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \mathbf{M}_i \frac{d\mathbf{N}}{d\sigma} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \sigma} \mathbf{N} dt + \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \sigma} \Phi_i \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}^T(t_i)}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \mathbf{N}(t_i)} \Phi_i \right\rangle \quad (30)$$

と書ける。微係数 $\frac{d\mathbf{N}}{d\sigma}$ を含む式 (30) の右辺第一、第二、そして第五項は、 \mathbf{w} を以下で定義することで消去される。式 (30) の右辺第四項は

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} \delta(t - t_i) \frac{d\mathbf{N}^T(t)}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \mathbf{N}(t_i)} \Phi_i \right\rangle dt \quad (31)$$

と書けるので、 $[t_i, t_{i+1}]$ について \mathbf{w} に関する以下の式を定義する。

$$\frac{d\mathbf{w}(t)}{dt} + \mathbf{M}_i^T \mathbf{w}(t) + \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \mathbf{N}(t_i)} \Phi_i \right\rangle \delta(t - t_i) = 0 \quad (32)$$

この式は、 $\mathbf{w}(t)$ について、 $\mathbf{w}(t_{i+1})$ に対する終条件を用いて時間的には逆方向に解くことが出来ることを示している。また、この式は時間ステップの初期、すなわち $t = t_i$ において、 \mathbf{w} に対して不連続な変動が与えられることも示しており、この変動を jump condition と呼ぶ。

\mathbf{w} に対する定義を用いて、積分項 I_i は以下のように簡略化される。

$$I_i = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}_i}{\partial \sigma} \mathbf{N} dt + \left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \sigma} \Phi_i \right\rangle \quad (33)$$

1.2 PC 法を用いた燃焼計算のための DPT

次に PC 法を用いた燃焼計算のための DPT について述べる。ここでは、より一般的な議論を行うため、重み付け PC 法 [4] を対象とする。

PC 法でははじめに予測子計算が行われる。これは PC 法を用いない燃焼計算と同一のものである。以下では、時間ステップ i の予測子計算で得られた $t = t_{i+1}$ での数密度ベクトルを $\mathbf{N}^p(t_{i+1})$ と記述する。次に、修正子計算が行われる。ここでは、中性子束 Φ_i^c が数密度 $\mathbf{N}^p(t_{i+1})$ を用いて以下のように再計算される。

$$\mathbf{B}_i^c(\mathbf{N}^p(t_{i+1}))\Phi_i^c = 0 \quad (34)$$

そしてこの中性子束は以下のように規格化される。

$$\mathbf{G}_i \phi_i^c = \mathbf{G}_i \Phi_i^c f_i^c = P \quad (35)$$

中性子束 ϕ_i^c と Φ_i^c から計算された一群断面積を用いて、燃焼計算が初期条件 $\mathbf{N}^c(t_i) = \mathbf{N}(t_i)$ の下で以下の方程式に基づいて行われる。

$$\frac{d\mathbf{N}^c(t)}{dt} = \mathbf{M}_i^c \mathbf{N}^c(t), \quad (t_i \leq t < t_{i+1}) \quad (36)$$

式 (36) を解くことにより、 $\mathbf{N}^c(t_{i+1})$ が得られる。 $t = t_{i+1}$ における $\mathbf{N}(t_{i+1})$ を以下で計算するものとする。

$$\mathbf{N}(t_{i+1}) = \omega_p \mathbf{N}^p(t_{i+1}) + \omega_c \mathbf{N}^c(t_{i+1}) \quad (37)$$

重み ω_p 及び ω_c は正であり、その和は 1 となるように決められる。

式 (37) の両辺を σ で微分すると以下の式を得る。

$$\frac{dN_j(t_{i+1})}{d\sigma} = \omega_p \frac{dN_j^p(t_{i+1})}{d\sigma} + \omega_c \frac{dN_j^c(t_{i+1})}{d\sigma} \quad (38)$$

式 (10) と同様に、 $\frac{dN_j^p(t_{i+1})}{d\sigma}$ と $\frac{dN_j^c(t_{i+1})}{d\sigma}$ は以下のように書ける。

$$\frac{dN_j^p(t_{i+1})}{d\sigma} = \mathbf{w}^{pT}(t_i) \frac{d\mathbf{N}^p(t_i)}{d\sigma} + I_i^p = \mathbf{w}^{pT}(t_i) \frac{d\mathbf{N}(t_i)}{d\sigma} + I_i^p, \quad (39)$$

$$\frac{dN_j^c(t_{i+1})}{d\sigma} = \mathbf{w}^{cT}(t_i) \frac{d\mathbf{N}^c(t_i)}{d\sigma} + I_i^c = \mathbf{w}^{cT}(t_i) \frac{d\mathbf{N}(t_i)}{d\sigma} + I_i^c \quad (40)$$

ここで、 \mathbf{w}^p と \mathbf{w}^c については共通の終条件 $\mathbf{w}^p(t_{i+1}) = \mathbf{w}^c(t_{i+1}) = \mathbf{e}_j$ が適用される。式 (39) と (40) を式 (38) に代入すると、以下の式を得る。

$$\begin{aligned} \frac{dN_j(t_{i+1})}{d\sigma} &= \left(\omega_p \mathbf{w}^{pT}(t_i) + \omega_c \mathbf{w}^{cT}(t_i) \right) \frac{d\mathbf{N}(t_i)}{d\sigma} + \omega_p I_i^p + \omega_c I_i^c \\ &= \tilde{\mathbf{w}}^T(t_i) \frac{d\mathbf{N}(t_i)}{d\sigma} + \omega_p I_i^p + \omega_c I_i^c \end{aligned} \quad (41)$$

ここで、

$$\tilde{\mathbf{w}}(t_i) = \omega_p \mathbf{w}^p(t_i) + \omega_c \mathbf{w}^c(t_i) \quad (42)$$

である。これは、随伴数密度の計算において、時間ステップの始点で \mathbf{w}^p と \mathbf{w}^c から $\tilde{\mathbf{w}}$ が計算され、それが前の時間ステップの終条件として用いられることを示している。もし $t = t_1$ において数密度の初期条件が与えられるとするならば、以下の式が得られる。

$$\frac{dN_j(t_{i+1})}{d\sigma} = \tilde{\mathbf{w}}^T(t_1) \frac{d\mathbf{N}(t_1)}{d\sigma} + \sum_{j=1}^i \left(\omega_p I_j^p + \omega_c I_j^c \right) = \sum_{j=1}^i \left(\omega_p I_j^p + \omega_c I_j^c \right) \quad (43)$$

次に、積分項 I^p と I^c について述べる。

I^p は以下のように書ける。

$$\begin{aligned} I_i^p &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{d\mathbf{w}^{pT}}{dt} \frac{d\mathbf{N}^p}{d\sigma} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^{pT} \mathbf{M}_i^p \frac{d\mathbf{N}^p}{d\sigma} dt \\ &\quad + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^{pT} \frac{\partial \mathbf{M}_i^p}{\partial \sigma} \mathbf{N}^p dt + \left\langle \Gamma_i^{\dagger,p}, \frac{\partial \mathbf{B}_i^p}{\partial \sigma} \Phi_i^p \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}^{pT}(t_i)}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^{\dagger,p}, \frac{\partial \mathbf{B}_i^p}{\partial \mathbf{N}^p(t_i)} \Phi_i^p \right\rangle \end{aligned} \quad (44)$$

これは式 (30) と同一であるが、修正子の計算のものと区別するために肩添字 p を付している。一方、 I^c を計算する際には、修正子計算では中性子輸送演算子 \mathbf{B} が $\mathbf{N}(t_i)$ ではなく $\mathbf{N}^p(t_{i+1})$ に依存することに注意する必要がある。 I^c は以下のように書ける。

$$\begin{aligned} I_i^c &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{d\mathbf{w}^{cT}}{dt} \frac{d\mathbf{N}^c}{d\sigma} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^{cT} \mathbf{M}_i^c \frac{d\mathbf{N}^c}{d\sigma} dt \\ &\quad + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^{cT} \frac{\partial \mathbf{M}_i^c}{\partial \sigma} \mathbf{N}^c dt + \left\langle \Gamma_i^{\dagger,c}, \frac{\partial \mathbf{B}_i^c}{\partial \sigma} \Phi_i^c \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}^{pT}(t_{i+1})}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^{\dagger,c}, \frac{\partial \mathbf{B}_i^c}{\partial \mathbf{N}^p(t_{i+1})} \Phi_i^c \right\rangle \end{aligned} \quad (45)$$

従って、式 (41) の第二及び第三項は以下のように書き直せる。

$$\omega_p I_i^p + \omega_c I_i^c = \omega_p \bar{I}_i^p + \omega_c \bar{I}_i^c \quad (46)$$

ここで、

$$\begin{aligned} \bar{I}_i^p &= \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{d\mathbf{w}^{pT}}{dt} \frac{d\mathbf{N}^p}{d\sigma} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^{pT} \mathbf{M}_i^p \frac{d\mathbf{N}^p}{d\sigma} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^{pT} \frac{\partial \mathbf{M}_i^p}{\partial \sigma} \mathbf{N}^p dt \\ &+ \left\langle \Gamma_i^{\dagger,p}, \frac{\partial \mathbf{B}_i^p}{\partial \sigma} \Phi_i^p \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}^{pT}(t_i)}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^{\dagger,p}, \frac{\partial \mathbf{B}_i^p}{\partial \mathbf{N}^p(t_i)} \Phi_i^p \right\rangle + \frac{\omega_c}{\omega_p} \frac{d\mathbf{N}^{pT}(t_{i+1})}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^{\dagger,c}, \frac{\partial \mathbf{B}_i^c}{\partial \mathbf{N}^p(t_{i+1})} \Phi_i^c \right\rangle, \end{aligned} \quad (47)$$

$$\bar{I}_i^c = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{d\mathbf{w}^{cT}}{dt} \frac{d\mathbf{N}^c}{d\sigma} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^{cT} \mathbf{M}_i^c \frac{d\mathbf{N}^c}{d\sigma} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^{cT} \frac{\partial \mathbf{M}_i^c}{\partial \sigma} \mathbf{N}^c dt + \left\langle \Gamma_i^{\dagger,c}, \frac{\partial \mathbf{B}_i^c}{\partial \sigma} \Phi_i^c \right\rangle \quad (48)$$

である。

最終的に、 $[t_i, t_{i+1}]$ における \mathbf{w}^c と \mathbf{w}^p についての式が以下のように得られる。

$$\frac{d\mathbf{w}^p(t)}{dt} + \mathbf{M}_i^{pT} \mathbf{w}^p(t) + \left\langle \Gamma_i^{\dagger,p}, \frac{\partial \mathbf{B}_i^p}{\partial \mathbf{N}^p(t_i)} \Phi_i^p \right\rangle \delta(t-t_i) + \frac{\omega_c}{\omega_p} \left\langle \Gamma_i^{\dagger,c}, \frac{\partial \mathbf{B}_i^c}{\partial \mathbf{N}^p(t_{i+1})} \Phi_i^c \right\rangle \delta(t-t_{i+1}) = 0, \quad (49)$$

$$\frac{d\mathbf{w}^c(t)}{dt} + \mathbf{M}_i^{cT} \mathbf{w}^c(t) = 0 \quad (50)$$

ここで、jump condition について、予測子計算においては各時間ステップの始点及び終点で適用されること、また修正子計算では適用されないことが分かる。積分項 I^p と I^c は以下のように計算される。

$$\bar{I}_i^p = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^{pT} \frac{\partial \mathbf{M}_i^p}{\partial \sigma} \mathbf{N}^p dt + \left\langle \Gamma_i^{\dagger,p}, \frac{\partial \mathbf{B}_i^p}{\partial \sigma} \Phi_i^p \right\rangle, \quad (51)$$

$$\bar{I}_i^c = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^{cT} \frac{\partial \mathbf{M}_i^c}{\partial \sigma} \mathbf{N}^c dt + \left\langle \Gamma_i^{\dagger,c}, \frac{\partial \mathbf{B}_i^c}{\partial \sigma} \Phi_i^c \right\rangle \quad (52)$$

1.3 中性子束と一般化随伴中性子束の積に対する角度積分

ここまでの説明では、中性子束の角度依存性については、簡単のため陽には記述してはいなかった。厳密には、中性子束 Φ と一般化随伴中性子束 Γ^\dagger の積に対して角度についての積分が、式 (33) と (51)、(52) における感度の中性子束項の計算において必要とされる。

積分を陽に記述したとき、感度における中性子束項は以下のように記述される。

$$\left\langle \Gamma_i^\dagger, \frac{\partial \mathbf{B}_i}{\partial \sigma} \Phi_i \right\rangle = \sum_g \int \frac{\partial \mathbf{B}_i(\mathbf{r})}{\partial \sigma_g} d\mathbf{r} \int \Gamma_{i,g}^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) \Phi_{i,g}(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega \quad (53)$$

ここで Ω は角度を示す変数である。もし Φ と Γ^\dagger の角度依存性が弱ければ、角度についての積分計算において以下の近似を導入することが出来る。

$$\int \Gamma_{i,g}^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) \Phi_{i,g}(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega \approx \frac{1}{4\pi} \hat{\Gamma}_{i,g}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Phi}_{i,g}(\mathbf{r}), \quad (54)$$

ここで

$$\hat{\Gamma}_{i,g}^\dagger(\mathbf{r}) = \int \Gamma_{i,g}^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega, \quad (55)$$

$$\hat{\Phi}_{i,g}(\mathbf{r}) = \int \Phi_{i,g}(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega \quad (56)$$

である。ここで、この近似を isotropic approximation と呼称する。これまでの研究では、中性子輸送方程式の解法として古典的な衝突確率法を用いてきたため、この近似が陰に導入されていた

ことになる。この近似は、単一ピンセルや、 UO_2 や MOX など組成が異なった燃料が混在する体系の計算では、DPT で計算される感度に大きく影響しなかった。ところが、今回のようにガドリニアなど強吸収物質を含むような体系を対象とした場合、燃焼感度に大きな誤差を生じさせることが明らかとなった。中性子束や一般化随伴中性子束の角度依存性を考慮するために、ここでは中性子輸送方程式の解法として特性曲線法を用いることとした。なお、式 (32) や (49) で示されているように、jump condition による燃焼ステップの始点 (PC 法の場合は終点も) での随伴数密度の不連続な変動の計算においても、角度積分計算が必要となることを付記しておく。

1.4 CBZ への実装

これまでに述べた PC 法を用いた燃焼計算のための DPT を CBZ コードシステムに実装した。CBZ の燃焼計算の手続きを以下に述べる。

共鳴自己遮蔽効果の評価、すなわち実効断面積の計算は、完全反射境界条件を課した単ピンセルに対して行う。ここでは「advanced Bondarenko method」[5] と呼ばれる等価原理に基づいた方法と、JENDL-4.0 から作成した 107 群断面積ライブラリを用いる。計算した 107 群の実効断面積はそのまま (縮約されることなく) 引き続く中性子輸送計算、燃焼計算に用いられる。

中性子束と一般化随伴中性子束は前述の通り特性曲線法により計算する。CBZ における特性曲線法の妥当性は文献 [6] 等で検証されている。

燃焼による数密度の変動は燃焼方程式 (5) で記述され、この式は様々な数値計算法で解くことができる。CBZ では行列指数法を採用しており、行列指数の計算には Mini-Max Polynomial Approximation (MMPA) method[7] を用いている。軽水炉の燃料集合体を含むマルチセル体系に対する CBZ の燃焼計算機能については、文献 [4] で検証されている。MMPA 法では、計算負荷を増大させることなく複数の燃焼点における数密度を一度に計算することが可能であり、このことは燃焼ステップ中で大きく変動する N や w の時間積分計算が必要となる DPT において好ましい特性となっている。

なお、前節では燃焼後数密度の感度係数計算について説明したが、中性子増倍率やスペクトルインデックスなどの炉物理パラメータの感度係数についても計算が可能である [8]。

2 数値計算結果

2.1 問題設定

ここでは PWR の UO_2 燃料棒で構成される 3×3 のマルチセル体系を考えた。境界条件は完全反射とした。体系図を Figure 1 に示す。

UO_2 燃料棒 (図中の「pin 2」及び「pin 3」) のウラン 235 濃縮度は 4.1 wt% とした。体系の幾何情報及び数密度情報は文献 [9] のものを引用した。また、体系の中心位置にはガドリニアを含んだ UO_2 燃料棒を配した。この燃料棒におけるガドリニアの濃度は 10 wt% とし、ウラン 235 濃縮度は 4.0 wt% とした。このガドリニア燃料棒は径方向に 8 領域に分割し、燃焼計算では各々の領域を独立に扱った。その他の燃料棒については、燃料棒全体を一つの燃焼領域とした。実際の計算では、この 1/8 体系を完全反射条件で扱った。

2 つの異なる燃焼度 (9.6 GWD/t 及び 20.8 GWD/t) における数密度のいくつかの核データに対する感度を計算した。中性子束は燃料棒あたりの平均線出力が 179 W/cm となるように規格化した。軽水炉の反応度計算のために開発した 138 の FP 核種で構成される燃焼チェーン [10] を用いた。1 燃焼ステップの長さは 1.6 GWD/t とし、燃焼初期と末期についてはより短いステップを設定した。例えば、9.6 GWD/t の数密度の感度を計算する場合には燃焼ステップ分割数を 10 と

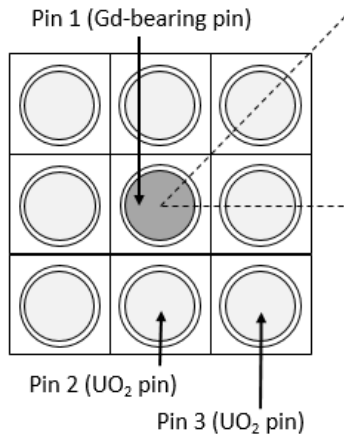


Fig. 1: Geometric configuration of a 3×3 multicell system including gadolinium-bearing UO₂ fuel pin.

し、それぞれのステップ長さを 0.04、0.36、1.2、1.6、1.6、1.6、1.6、1.2、0.36、0.04 GWD/t とした。燃焼末期に詳細なステップ分割とするのは、短半減期や強中性子吸収核種の随伴数密度の急峻な変動を考慮するためである。また、1 燃焼ステップはさらに 20 のサブステップに分割した。重み付き PC 法では、 ω_p と ω_c はそれぞれ 0.4 及び 0.6 とした。PC 法を用いた場合と用いない場合とで得られた中性子無限増倍率を Figure 2 に示す。

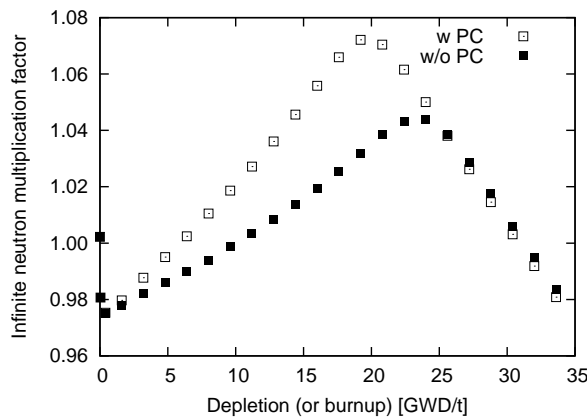


Fig. 2: Infinite neutron multiplication factors with fuel depletion.

2.2 感度計算の妥当性の検証

今回、定式化及び実装を行った PC 法のための DPT の妥当性を検証するため、DPT に基づいて計算した感度を、直接的な数値微分で得た感度と比較した。この数値微分においては、着目した核データを 1% 変動させたときの数密度の変動から感度を計算した。はじめに燃料棒 1 における Gd-157 数密度の感度について検討した。Figure 3 に、9.6 GWD/t における燃料棒 1 の外周領域での数密度の感度を示す。この図ではレサジーあたりの感度に 0.25 が乗せられているが、これは用いた 107 群のエネルギー群構造では 1.8554 eV 以上の領域の群のレサジー幅が 0.25 であることに由来する。DPT を用いた計算した感度は「DPT」で示されており、isotropic approximation

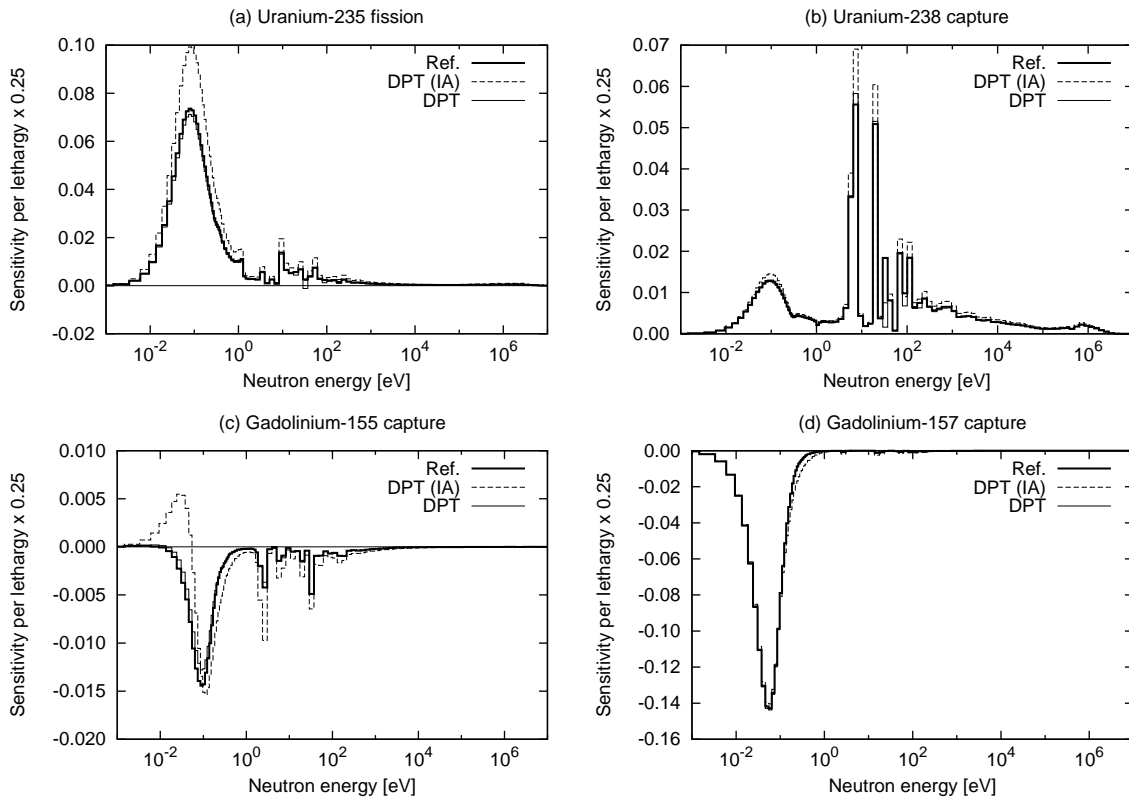


Fig. 3: Sensitivities of gadolinium-157 number density at peripheral region of pin 1 at 9.6 GWD/t

(IA)を導入したものは「DPT(IA)」として区別されている。IAを導入した場合にはいくつかの核データ、エネルギー群で参照解の再現性が悪い一方、IAを導入しない場合は参照解と良好な一致が見られている。このことは、DPT計算における中性子束と一般化随伴中性子束の角度依存性を陽に考慮することの重要性を示している。次に、Figure 4に、20.8 GWD/tにおける燃料棒1の中心領域での数密度の感度を示す。IAを導入しないDPTにおいて、参照解との良好な一致が見られる。

Gd-155や-157といった強中性子吸収核種については、それらの断面積が中性子束の空間、エネルギー分布に影響を与え、その結果、これらを含む燃料棒の周囲の燃料棒における燃焼挙動に影響を与える可能性が考えられる。Figure 5に、20.8 GWD/tにおける燃料棒2の数密度のGd-157捕獲断面積に対する感度を示すが、感度は一般的に小さいことが分かった。

以上の計算結果より、今回、定式化、実装を行ったDPTが妥当であることを確認した。

参考文献

- [1] Gandini A. A method of correlation of burnup measurements for physics prediction of fast power-reactor life. Nucl Sci Eng. 1969; 38: 1-7.
- [2] Williams ML. Development of depletion perturbation theory for coupled neutron/nuclide fields. Nucl Sci Eng. 1979; 70: 20-36.

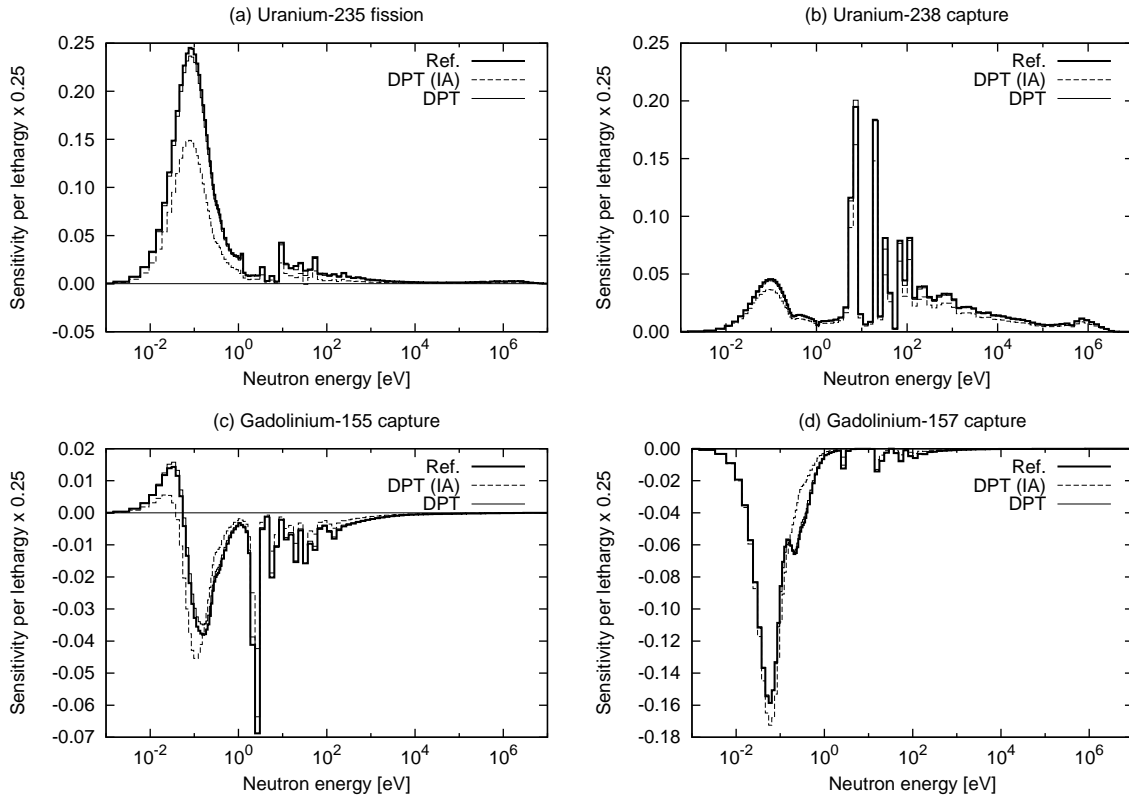


Fig. 4: Sensitivities of gadolinium-157 number density at center region of pin 1 at 20.8 GWD/t

- [3] Chiba G, Kawamoto Y, Narabayashi T. Development of a fuel depletion sensitivity calculation module for multi-cell problem in a deterministic reactor physics code system CBZ. *Ann Nucl Energy*. 2016; 96: 277-286.
- [4] Okumura S, Chiba G. Development of nuclear fuel depletion calculation capability for LWR fuel assembly in reactor physics code system CBZ. *Proc. Reactor Physics Asia 2017*; 2017 Aug 24-25; Chengdu (China).
- [5] Chiba G, Narabayashi T. Advanced Bondarenko method for resonance self-shielding calculations in deterministic reactor physics code system CBZ. *Ann Nucl Energy*. 2016; 96: 277-286.
- [6] van Rooijen WFG, Chiba G. Diffusion coefficients for LMFBR cells calculated with MOC and Monte Carlo methods. *Ann Nucl Energy*. 2011; 38: 133-144.
- [7] Kawamoto Y, Chiba G, Tsuji M, Narabayashi T. Numerical solution of matrix exponential in burn-up equation using mini-max polynomial approximation. *Ann Nucl Energy*. 2015; 80: 219-224.
- [8] Chiba G, Tsuji M, Narabayashi T. Uncertainty quantification of neutronic parameters of light water reactor fuel cells with JENDL-4.0 covariance data. *J Nucl Sci Technol*. 2013; 50: 751-760.

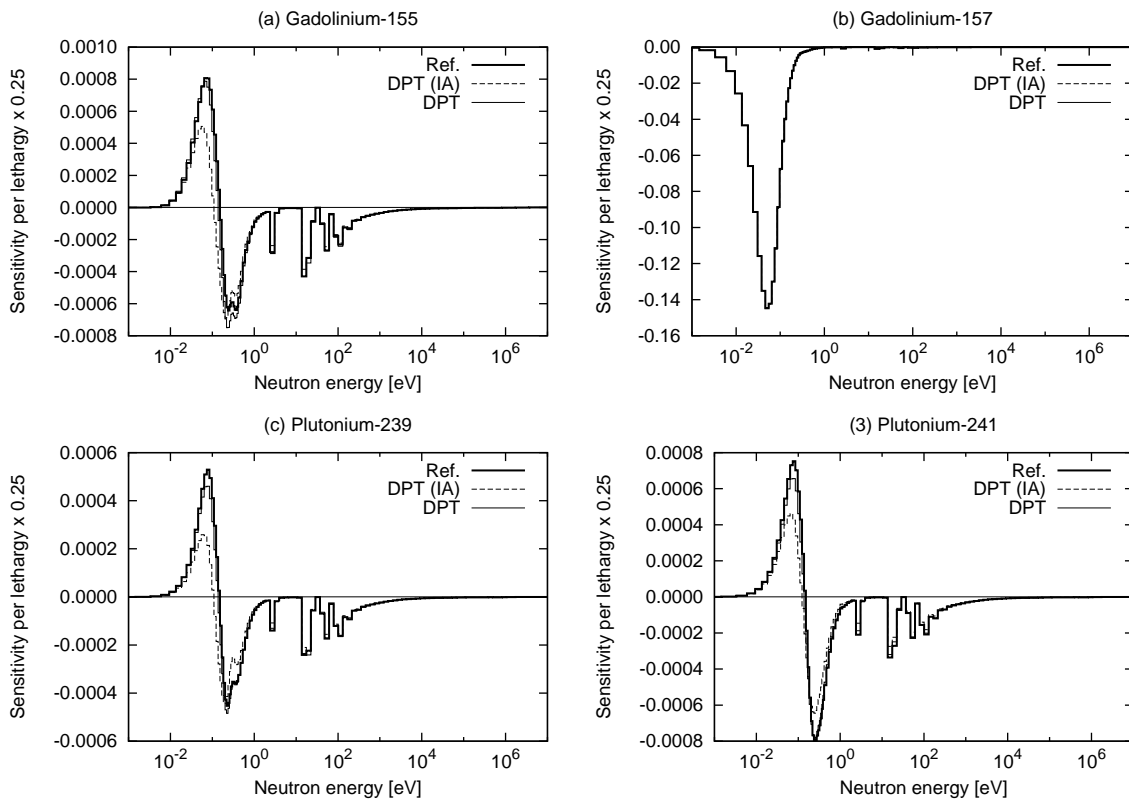


Fig. 5: Sensitivities of number densities at pin 2 at 20.8 GWD/t with respect to gadolinium-157 capture cross sections

- [9] Katakura J, Kataoka M, Suyama K, Jin T, Ohki S. A set of ORIGEN2 cross section libraries based on JENDL-3.3 library: ORLIBJ33. Japan: Japan Atomic Energy Research Institute; 2004, JAERI-Data/Code 2004-015.[in Japanese]
- [10] Chiba G, Tsuji M, Narabayashi T, Ohoka Y, Ushio T. Important fission product nuclides identification method for simplified burnup chain construction, J Nucl Sci Technol. 2015; 52: 953-960.

付録3 燃料集合体の物質配置を考慮した共鳴自己遮蔽効果の取り扱いが 燃焼後数密度に与える影響の評価

1. 背景

当研究室で開発中の炉物理計算コードシステム CBZ では、軽水炉の燃焼特性に関しては、ピンセル体系に加えて燃料集合体体系についての計算が可能となっている。しかし、これまでの実装では、共鳴自己遮蔽効果の評価（実効断面積の計算）を近似的に代表ピンセルで行っており、燃料集合体の物質配置を正確に考慮した共鳴自己遮蔽効果の取り扱いがなされていなかった。燃料集合体体系における燃焼挙動を再現する等価ピンセルモデルを構築するにあたっては、共鳴自己遮蔽効果の取り扱いが影響すると考えられることから、CBZ に対してこの機能を実装し、燃焼後数密度に与える影響を定量的に評価することとした。

2. CBZ への燃料集合体体系での Dancoff 係数計算機能の実装

CBZ では、多群断面積の計算には等価原理を採用しており、複数の燃料棒が配置されていることによる中性子の燃料からの脱出確率への影響は Dancoff 係数を用いて行っている。そこで、Dancoff 係数を燃料集合体体系の各燃料棒について計算させるものとする。

複数の燃料棒が規則的に配置され、適切な境界条件を課したピンセルモデルで模擬できるような場合は、燃料棒を黒体と仮定して燃料からの中性子脱出確率を直接的に計算することで Dancoff 係数を評価することができる。一方、核計装管などが部分的に配置されるような燃料集合体体系については、「Neutron current method」[1]の適用がもっとも効率的であると考えられるため、今回はこの方法を採用することとした。Neutron current method の詳細は省くが、Dancoff 係数（補正）を物理的な定義に従って計算するというもので、孤立系及び配列系についてのエネルギー1群の固定源計算を行うことで、燃料集合体に配置されている全ての燃料棒の Dancoff 係数を求めることができる。今回、CBZ に対して Neutron current method に基づく Dancoff 係数計算機能を実装した。

実装した機能を検証するため、文献[1]に与えられている PWR 燃料集合体体系に対して Dancoff 係数を計算し、文献[1]に与えられている結果と比較した。対象とした体系を図1に、巨視的断面積等の情報を表1に、それぞれ示す。また、CBZ により得られた Dancoff 係数と、参照値に対する相対差を図2に示す（1/8 対称であることから、1/8 集合体部分について示す）。この結果より、CBZ による計算結果は参照値を 0.2%以下の差異で再現しており、今回実装した機能が妥当であることを確認した。

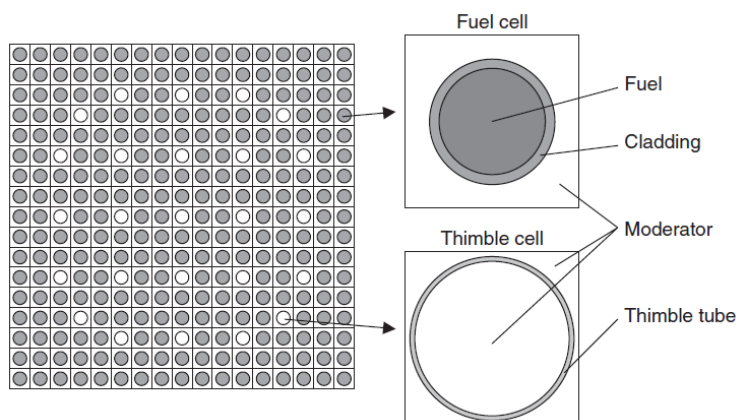


図1 Dancoff 係数計算機能の検証のための PWR 燃焼集合体体系図

表1 Dancoff 係数計算機能の検証のための PWR 燃料集合体に関するデータ

Macroscopic total cross section (cm^{-1})	Fuel	10^5
	Cladding	0.30
	Moderator	1.05
	Thimble tube	0.30
Radius (cm)	Fuel	0.41
	Cladding	0.48
	Thimble(inner)	0.57
	Thimble(outer)	0.61
Cell pitch (cm)		1.26

								0.6425 -0.1		
							0.6437 +0.2	0.6424 -0.1		
						0.6610 -0.0	0.6453 +0.0	0.6439 +0.2		
						0.6955 +0.1	0.6459 +0.1	0.6430 +0.0		
					0.6852 +0.1	0.7149 -0.0	0.7137 +0.1	0.6640 +0.1	0.6456 +0.0	
					0.6973 +0.1	0.6951 +0.1		0.6950 +0.1	0.6430 +0.0	
				0.6670 +0.2	0.6951 +0.1	0.6663 +0.1	0.6667 +0.1	0.6950 +0.0	0.6641 +0.0	0.6459 +0.1
			0.6671 +0.2	0.6660 +0.0	0.6948 +0.0	0.6664 +0.0	0.6659 +0.0	0.6956 +0.2	0.6642 +0.1	0.6455 +0.0
		0.6947 +0.0	0.6942 -0.0		0.6959 +0.2	0.6946 +0.0		0.6954 +0.1	0.6439 +0.2	

図2 PWR 燃焼集合体における Dancoff 係数計算結果
(上：CBZ による Dancoff 係数計算値、下：参照値との相対差[%])

また、Gd 入り燃料棒を含む PWR 燃料集合体体系の無限中性子増倍率について、連続エネルギーモンテカルロコード MVP-BURN との比較を行った。計算体系を図 3 に示す。なお、MVP-BURN と CBZ の燃焼計算手法の差異を可能な限り小さくするため、両者とも Predictor-Corrector 法は用いない計算とした。無限中性子増倍率の参照値に対する相対差について図 4 に示す。燃料集合体体系で計算した Dancoff 係数を用いない場合（図中「w/o Dancoff」、この場合はピンセル体系で Dancoff 係数を計算している）は、燃焼初期で 0.2% 程度の過大評価が見られ、燃焼に従ってその差異が減少していることが分かる。一方、燃料集合体体系で計算した Dancoff 係数を用いた場合（図中「w Dancoff」）は、燃料棒の無限配列仮定と比べて燃料棒からの脱出確率が大きく評価されることから、背景断面積が大きくなり、共鳴核種の共鳴自己遮蔽効果が緩和され実効断面積が大きくなる。その結果、U-238 の中性子捕獲断面積が大きくなり、無限中性子増倍率を小さくすることとなる。図 4 で示されているように、燃焼初期では無限中性子増倍率の参照値に対する相対差はほぼゼロとなった。また、U-238 の捕獲断面積が燃焼を通して大きく評価されることにより、Pu-239 の生成が促進されることになり、U-238 の捕獲断面積増加が無限中性子増倍率に与える負の影響が緩和される。その結果、燃料集合体体系で計算した Dancoff 係数を用いることにより、無限中性子増倍率における参照値との差異に見られた燃焼依存性が低減した。

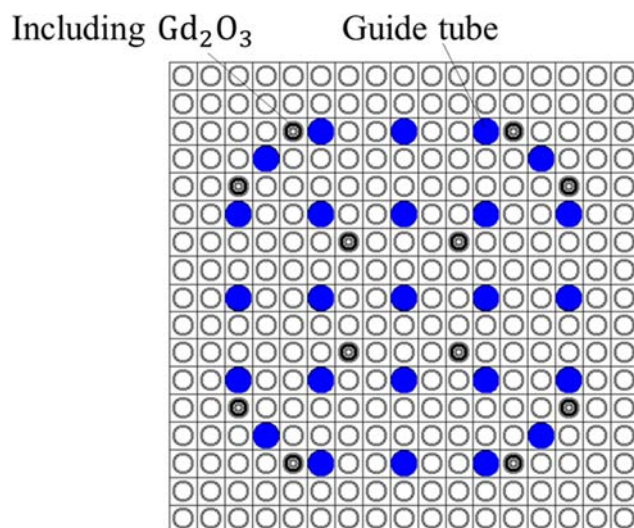


図 3 Gd 入り燃料棒を含む PWR 燃料集合体の体系図

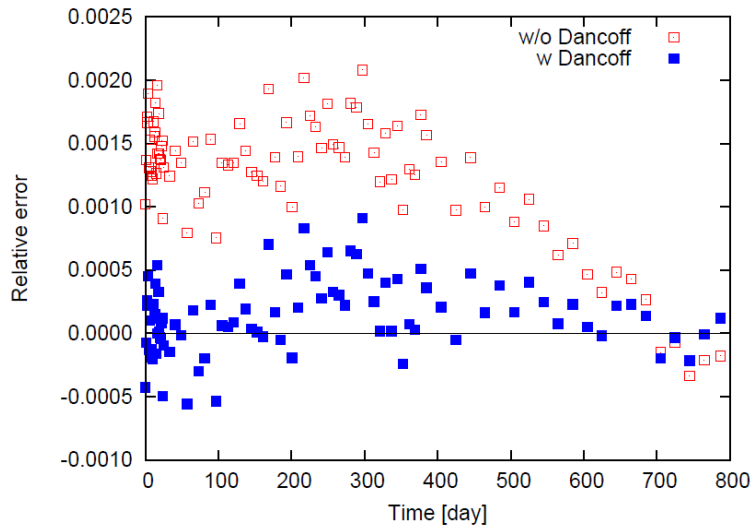


図4 Gd入り燃料棒を含むPWR燃料集合体の無限中性子増倍率の相対差

3. 燃料集合体の物質配置を考慮した共鳴自己遮蔽効果の取り扱いが燃焼後数密度に与える影響の評価

最後に、燃料集合体体系で計算したDancoff係数を用いることによって、燃焼後の核種数密度に与える影響を評価した。対象とした体系は前節で用いたGd入り燃料棒を含むPWR燃料集合体体系とし、着目した核種はCs-134、-137、Pu-239、Am-241とした。なお、ここではGd入り燃料棒以外の燃料棒についてのみ着目した。便宜的に燃料棒に付与したIDを図5に示す。

								37
							35	36
						32	33	34
						29	30	31
			25	26	(Gd)	27	28	
			21	22		23	24	
		(Gd)	15	16	17	18	19	20
	7	8	9	10	11	12	13	14
	1	2		3	4		5	6

図5 Gd入り燃料棒を含むPWR燃料集合体の燃料棒ID

Dancoff 係数の計算方法の違いによって生じる前述した 4 核種の数密度の差異を求めたが、ここでは、燃焼計算点毎の数密度を比較した。Dancoff 係数の計算方法の違いによって、燃料棒毎の燃焼度についても微妙な差異が生じることに留意されたい。図 6 から図 10 に、各燃料棒における、Dancoff 係数の計算方法の違いによって生じる数密度の相対差を示す。ここでは、ピンセルで近似的に Dancoff 係数を計算した場合の結果に対する、燃料集合体体系で Dancoff 係数を計算した場合の計算結果の差を示している。また、燃焼度についても同様に差異を示している。

Cs-137 の数密度の差異は燃焼度の差異とほぼ同一の挙動を示したが、影響は極めて小さい。Cs-134 の数密度は 0.1 から 0.2%程度小さくなる燃料棒があるものの、これについても影響は小さいと言える。また、Pu-239、Am-241 については、燃料集合体体系で Dancoff 係数を計算することにより U-238 の中性子捕獲実効断面積が増加するため、それらの数密度は大きく評価されるが、影響が大きい燃料棒でも 1%未満であった。

以上より、Dancoff 係数の計算方法が燃焼後数密度の燃料集合体内の分布に与える影響は 1%未満であった。付録 1 において、燃焼後数密度の燃料集合体内の分布が評価されているが、例えば Am-241 に関しては平均値の周りに-10%から+10%の範囲で分布しており、それと比べて Dancoff 係数の計算法の違いが与える影響は二次的なものと結論づけられる。

参考文献

- [1] N. Sugimura, A. Yamamoto, "Evaluation of Dancoff factors in complicated geometry using the method of characteristics," J. Nucl. Sci. Technol., 43[10], p.1182-1187 (2006).

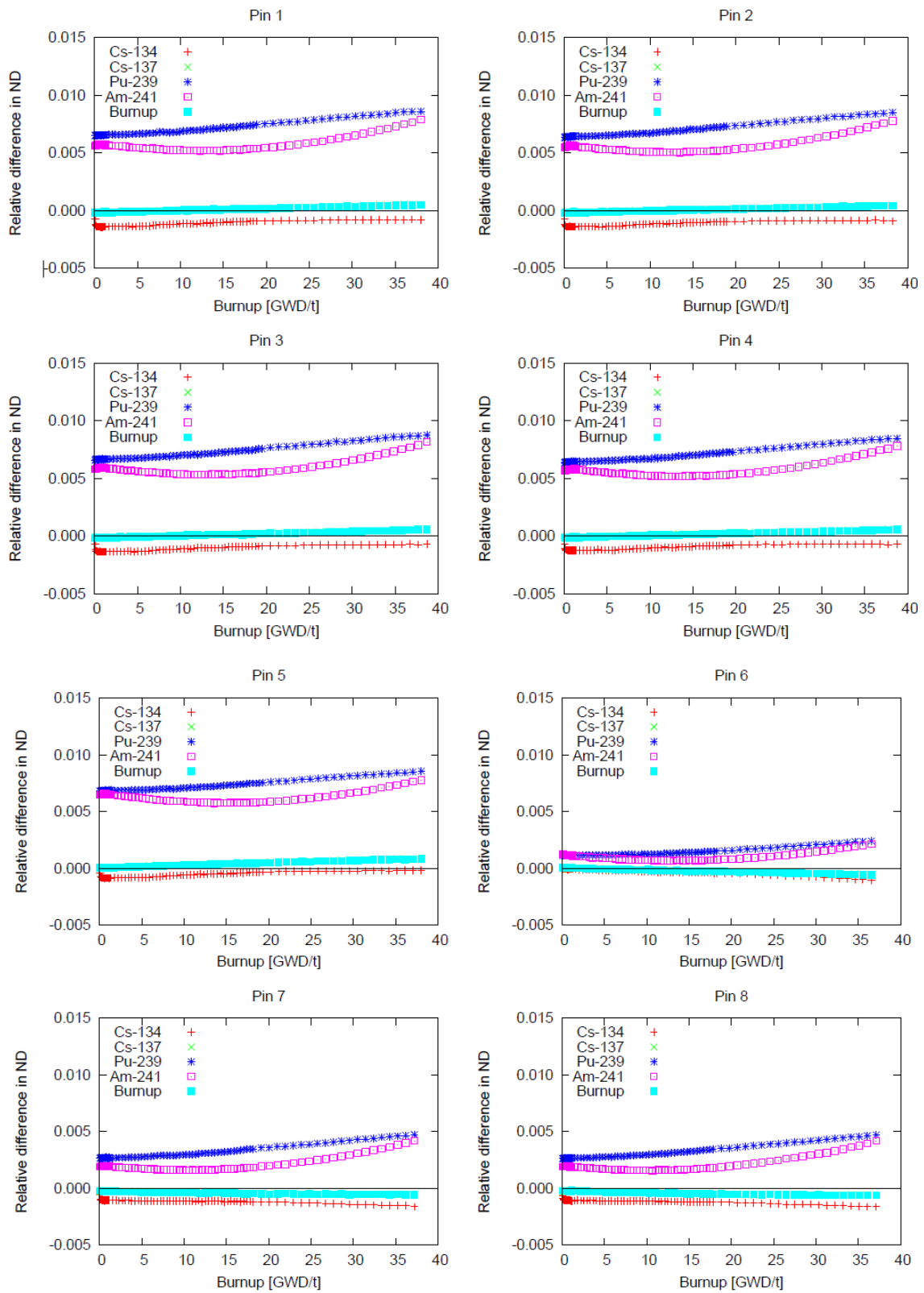


図6 燃焼後数密度の変動 (燃料棒 1~8)

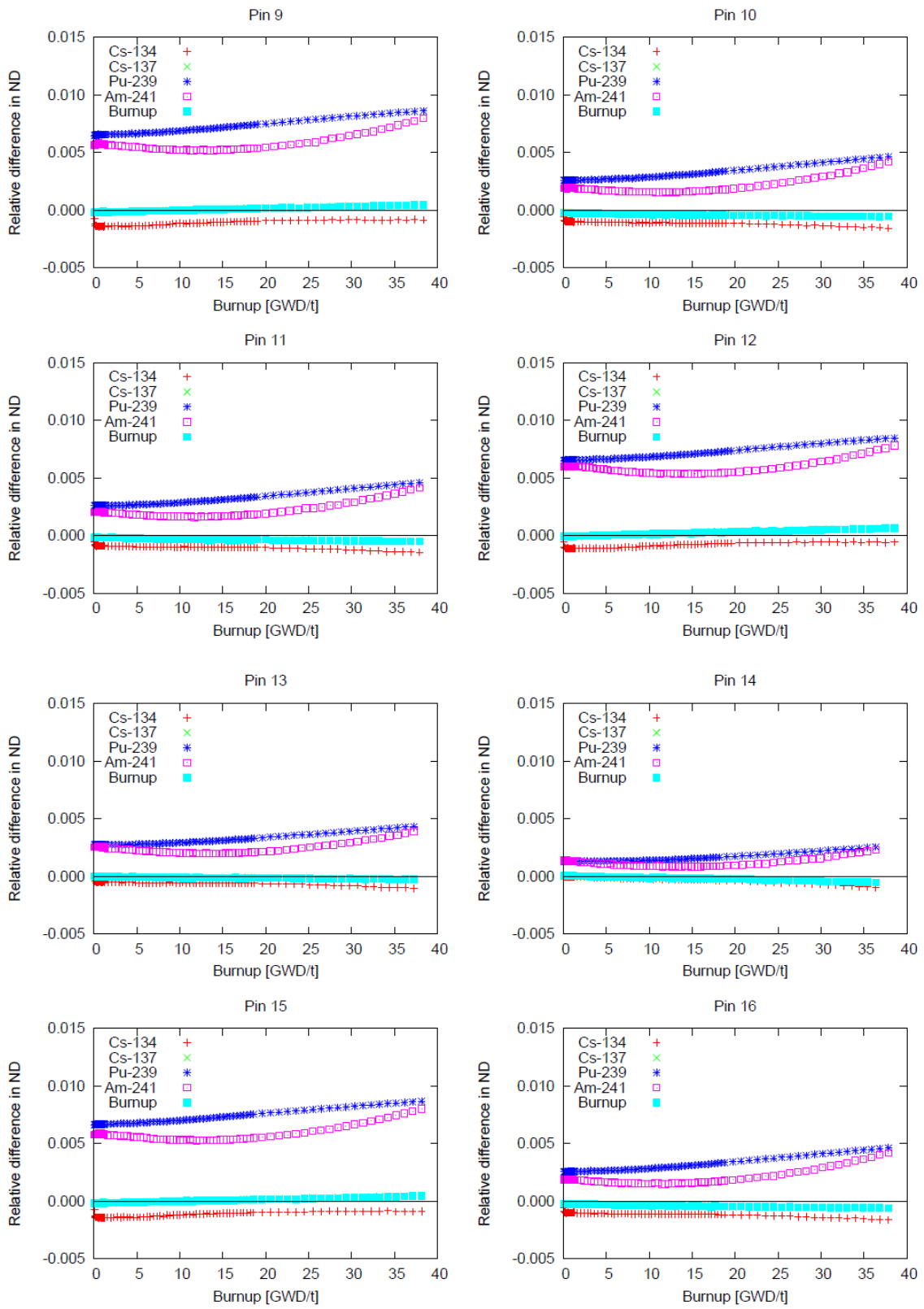


図7 燃焼後数密度の変動 (燃料棒 9~16)

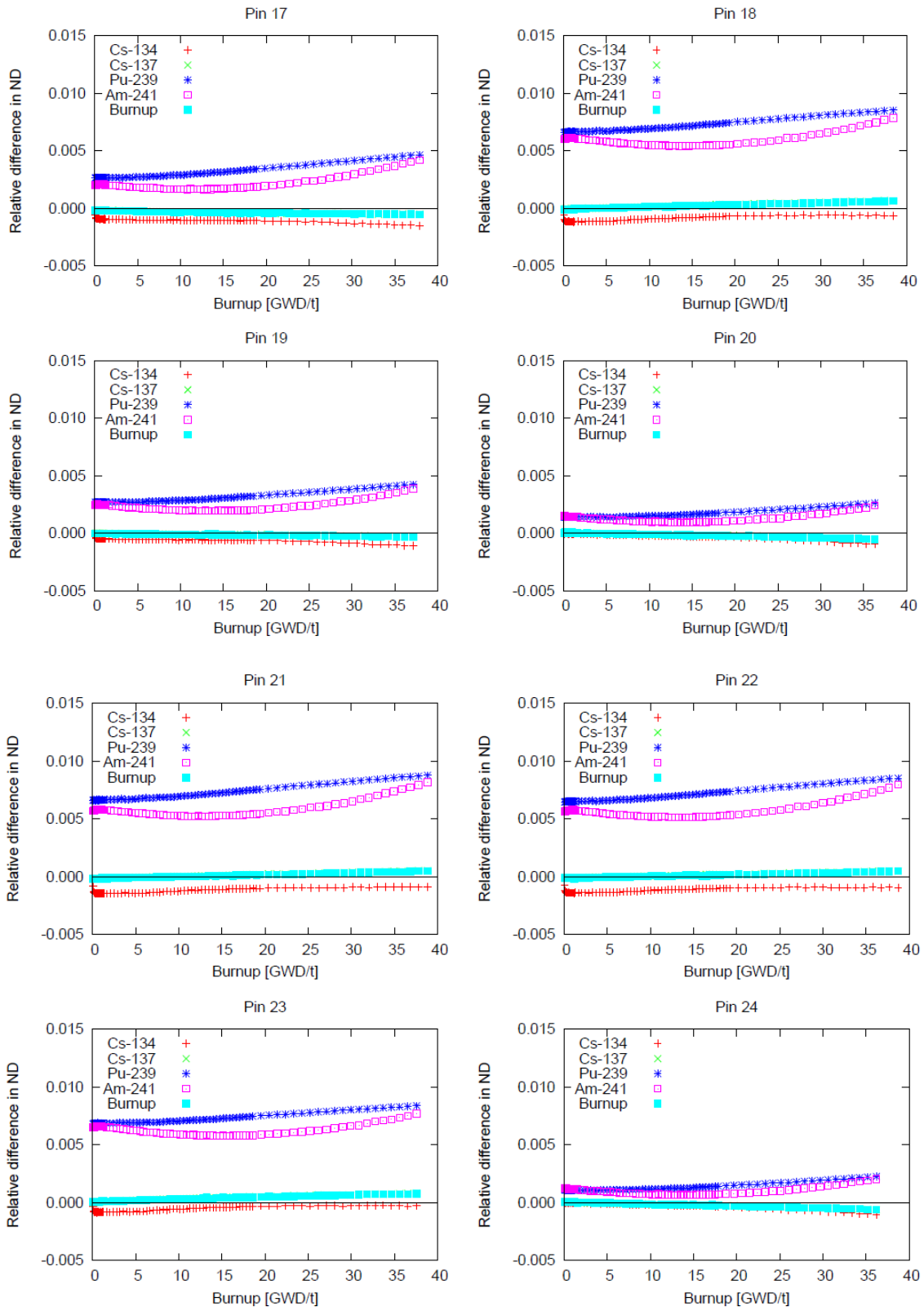


図8 燃焼後数密度の変動 (燃料棒 17~24)

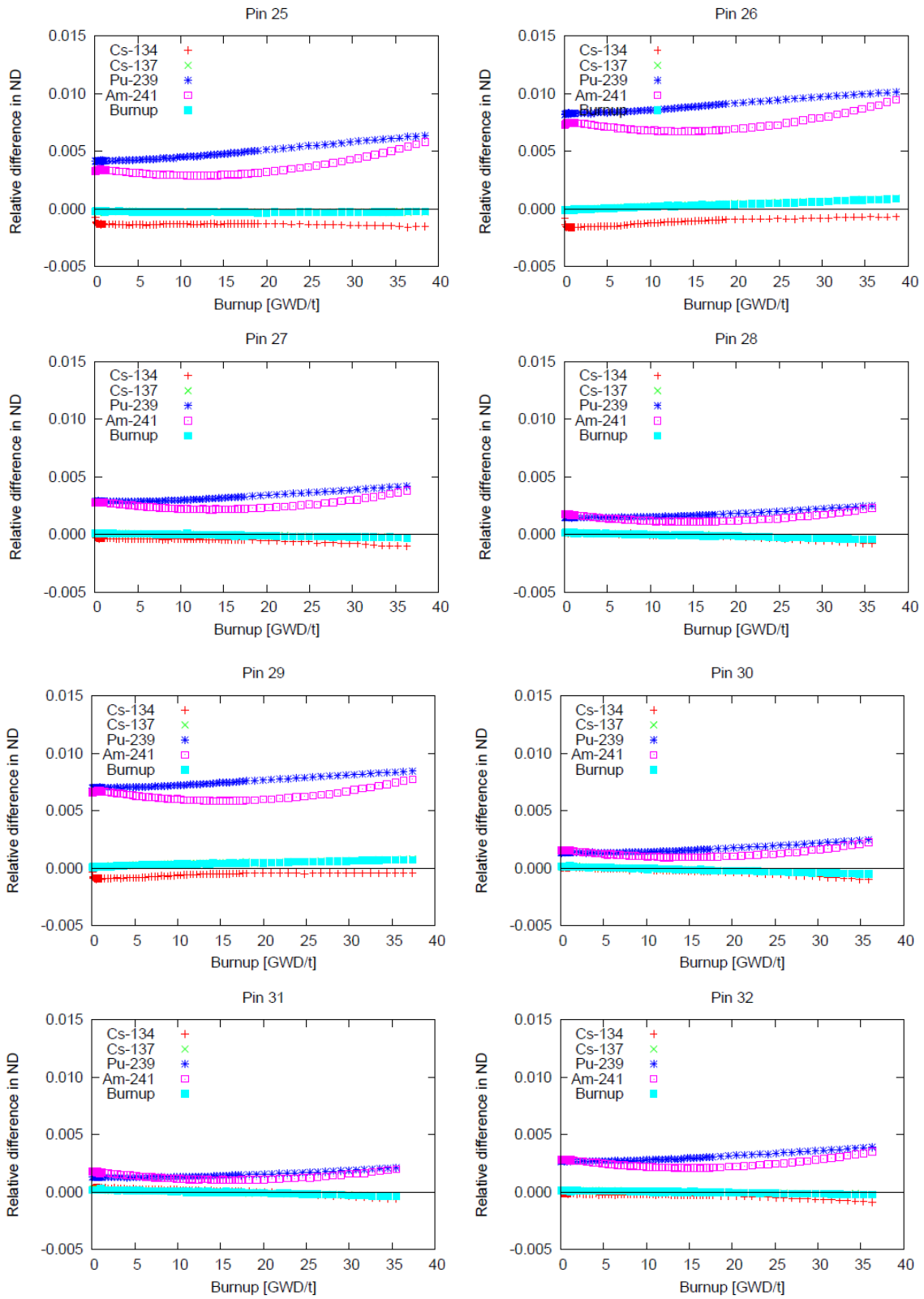


図9 燃焼後数密度の変動 (燃料棒 25~32)

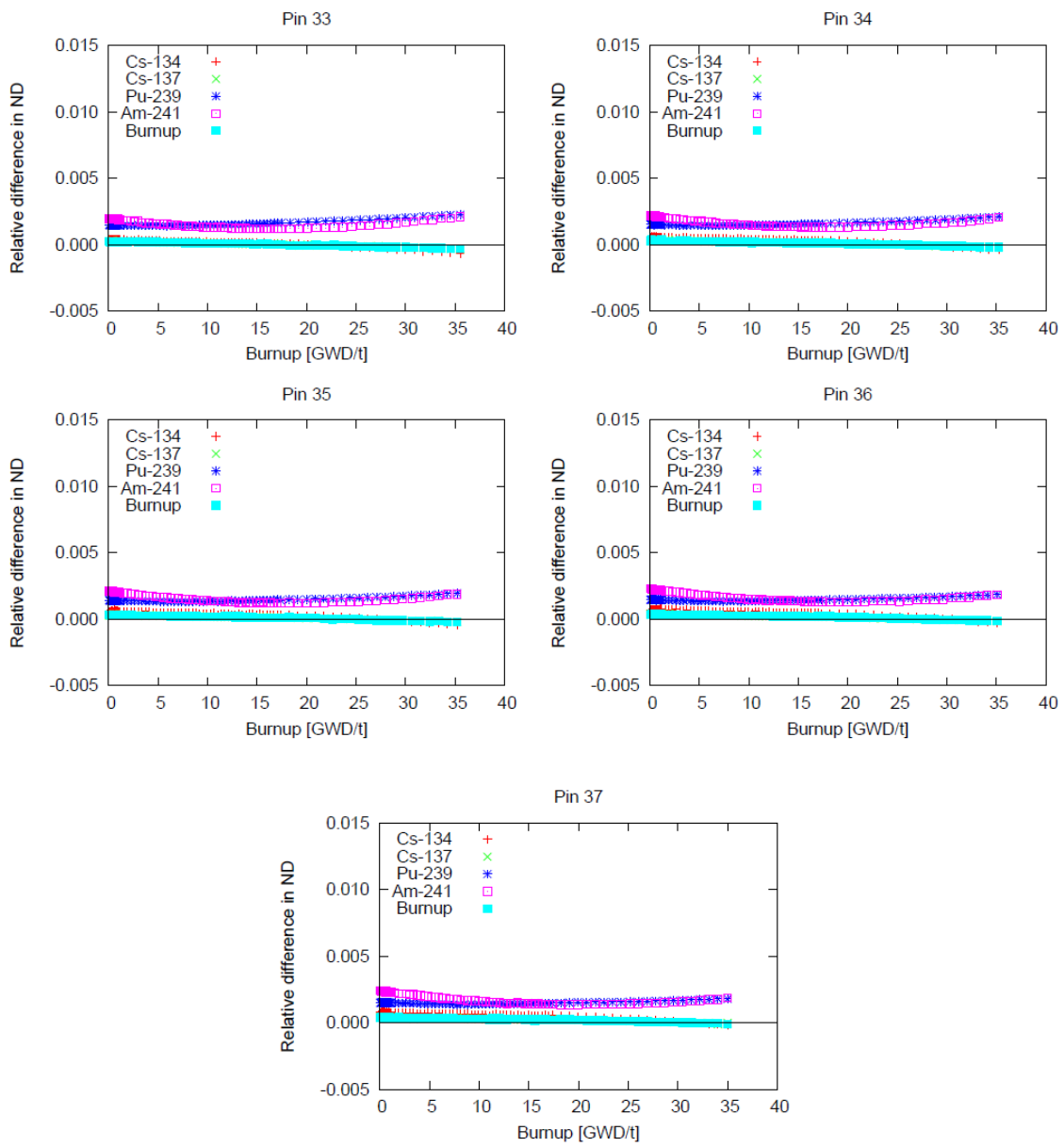


図 10 燃焼後数密度の変動 (燃料棒 33~37)

付録4 リバースサンプリング法の有効性に対する評価

1. 背景

前年度の委託研究において、複雑な体系（燃焼後核種数密度を求める燃焼計算）の不確かさ評価に対して、入出力間に線形性が担保されないことから決定論的な手法（感度ベース）ではなく確率論的な手法（ランダムサンプリング）を用いて線形性を確認するという研究が行われた。ここで、ランダムサンプリング法とは、入力値の不確かさに沿った標本を複数作成し計算を行ったのち、得られた複数の出力サンプルを統計的に評価するという手法であり、前述の通り入出力間の関係性に拠らず複雑な体系に対しても容易に導入できる利点を持つ不確かさ評価手法である。しかし、その標本数分だけ計算を繰り返す統計的な手法であるという点から、精度の高い評価には多くのサンプルを要し、それに応じて計算コストが非常に大きくなる傾向にある。（対して、当研究室で主に用いられる感度係数を用いた手法は計算コストこそ小さいものの、入出力間の線形性が前提として求められる）そのため、ランダムサンプリング法において少ない標本数で精度の高い不確かさ評価を行うことができるサンプリング手法が重要になると考えられる。

よって、本付録では、ランダムサンプリング法の効率化手法としてリバースサンプリング法を提案し、その有効性について評価を行った結果を報告する。

2. リバースサンプリング法とは

リバースサンプリング法とは端的に、ランダムサンプリングにおける正負の偏りを減じる効果を期待したサンプリング手法である。元来は感度係数をランダムサンプリングの結果から求めるために開発された。[1]

第一に、ランダムサンプリング法では通常、入力の不確かさに沿った乱数を複数作成し（入力 $a_i = \{a_1, a_2, a_3, \dots, a_1\}$ ）それを用いて標本の数だけ対象とする計算を行う。ここで、入力の不確かさが正規分布で表される場合（核データの不確かさなど）、平均値を軸とした対称値の確率はそれぞれ等し

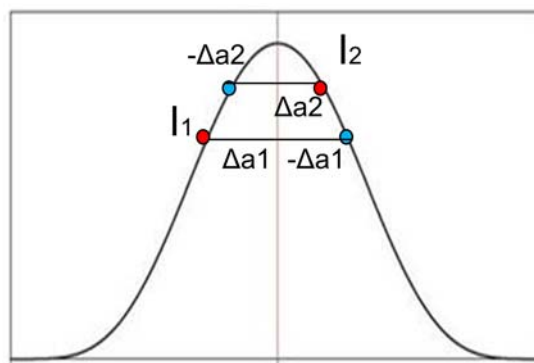


図1 リバースサンプリング模式図

くなる。つまり、入力 a_i の平均値を \bar{a} とし、入力 $a_i = \{\bar{a} + \Delta a_1, \bar{a} + \Delta a_2, \bar{a} + \Delta a_3, \dots, \bar{a} + \Delta a_1\}$ と表したとき、 $P(\bar{a} + \Delta a_1) = P(\bar{a} - \Delta a_1)$ となる。ここで、リバースサンプリング法とは実際的に、入力サンプル $a_i = \bar{a} + \Delta a_1$ を採集した際に、次のサンプルを必ず $a_i = \bar{a} - \Delta a_1$ とする手法のことである。これによって平均値を軸として左右均等にサンプリングを行うことが可能となり、正負の偏りを減じる効果が期待できる。

3. リバースサンプリング法の理論的評価

本節では、リバースサンプリング法を適用した際の効果を入出力の伝播式を整理することで予測した。結果として、線形性が強い場合は平均や歪度といった奇数次モーメントに関わる統計量で収束の高速化が見られ、それ以外の状況（偶数次モーメントに関わる統計量、非線形性の強い入出力間の関係）においては収束が遅くなる可能性が高いということが予想された。以下に詳細を記述する。

まず、前節でも用いた入力 a_i と出力 p_i について一度以下のように整理する。

$$\begin{aligned}
 p_i &= f(a_i) && \text{(伝播式: } p_i \text{ は } a_i \text{ の値によって一意に決まる)} \\
 f(\bar{a}) &= \bar{p} && \text{(入力の平均 } \bar{a} \text{ の時の出力値は } \bar{p} \text{ となる)} \\
 \Delta a_i &= a_i - \bar{a} && \text{(} i \text{ 番目のサンプル } a_i \text{ と平均値の差を } \Delta a_i \text{ と表す)} \\
 \Delta p_i &= p_i - \bar{p} && \text{(} a_i \text{ 時の出力 } p_i \text{ と } \bar{p} \text{ の差を } \Delta p_i \text{ と表す)}
 \end{aligned} \tag{1}$$

ここで、 p_i を $a=0$ に対してテーラー展開すると、下式のように表される。(式 2)

$$\begin{aligned}
 p_i &= \bar{p} + \left(\frac{dp}{da}\right) \Delta a_i + \frac{1}{2!} \left(\frac{d^2p}{da^2}\right) (\Delta a_i)^2 + \frac{1}{3!} \left(\frac{d^3p}{da^3}\right) (\Delta a_i)^3 + \frac{1}{4!} \left(\frac{d^4p}{da^4}\right) (\Delta a_i)^4 + \dots \\
 &= \bar{p} + S_1 \Delta a_i + S_2 (\Delta a_i)^2 + S_3 (\Delta a_i)^3 + S_4 (\Delta a_i)^4 + \dots \\
 &= \bar{p} + \Delta p_i
 \end{aligned} \tag{2}$$

ただし、(2)式の中央では $(\Delta a_i)^n$ にかかる係数をまとめて S_n と表している。これはすなわち、出力 p_i が入力値の変化量 Δa_i の関数で表現されているということを示す。(当然ではあるが)

ここで一度出力 p の各種統計量について考えてみる。平均、分散、歪度はそれぞれの定義式から、

$$\begin{aligned}
 E[p] &= \frac{1}{I} \sum p_i = \frac{1}{I} \sum (\bar{p} + \Delta p_i) = \bar{p} + \frac{1}{I} \sum (\Delta p_i) = \bar{p} + E[\Delta p] \\
 V[p] &= \frac{1}{I} \sum (p_i - E[p])^2 = \frac{1}{I} \sum (p_i - \bar{p} + \bar{p} - E[p])^2 = \frac{1}{I} \sum (\Delta p_i - E[\Delta p])^2 \\
 &= E[(\Delta p)^2] - (E[\Delta p])^2 \\
 S[p] &= \frac{1}{(V[p])^{3/2}} \cdot \frac{1}{I} \sum (p_i - E[p])^3 = \frac{1}{(V[p])^{3/2}} \cdot \frac{1}{I} \sum (\Delta p_i - E[\Delta p])^3 \\
 &= \frac{1}{(V[p])^{3/2}} \cdot \left\{ \frac{1}{I} \sum (\Delta p_i)^3 - 3 \cdot E[\Delta p_i] \cdot \frac{1}{I} \sum (\Delta p_i)^2 + 2 \cdot (E[\Delta p_i])^3 \right\} \\
 &= \frac{1}{(V[p])^{3/2}} \cdot \{ E[(\Delta p)^3] - 3 \cdot E[\Delta p] \cdot E[(\Delta p)^2] + 2 \cdot (E[\Delta p])^3 \}
 \end{aligned} \tag{3}$$

と表すことができ(式 3)、これらは全て $E[(\Delta p)^n]$ の関数となる。(網掛け部)

さらに、 Δp について(2)式から

$$\Delta p_i = S_1 \Delta a_i + S_2 (\Delta a_i)^2 + S_3 (\Delta a_i)^3 + S_4 (\Delta a_i)^4 + \dots \tag{4}$$

のように Δa_i の関数として表現が可能であることが分かる。

以上から $E[(\Delta p)^n]$ について、 Δa_i を用いて整理すると

$$\begin{aligned}
E[\Delta p] &= \frac{1}{I} \sum (S_1 \Delta a_i + S_2 (\Delta a_i)^2 + S_3 (\Delta a_i)^3 + S_4 (\Delta a_i)^4 + \dots) \\
&= S_1 \frac{1}{I} \sum \Delta a_i + S_2 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^2 + S_3 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^3 + S_4 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^4 + \dots \\
E[(\Delta p)^2] &= \frac{1}{I} \sum (S_1 \Delta a_i + S_2 (\Delta a_i)^2 + S_3 (\Delta a_i)^3 + S_4 (\Delta a_i)^4 + \dots)^2 \\
&= \frac{1}{I} \sum (S_1^2 (\Delta a_i)^2 + 2S_1 S_2 (\Delta a_i)^3 + (S_2^2 + 2S_1 S_3) (\Delta a_i)^4 + \dots) \quad (5) \\
&= S_1^2 \cdot \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^2 + 2S_1 S_2 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^3 + \dots \\
E[(\Delta p)^3] &= \frac{1}{I} \sum (S_1 \Delta a_i + S_2 (\Delta a_i)^2 + S_3 (\Delta a_i)^3 + S_4 (\Delta a_i)^4 + \dots)^3 \\
&= S_1^3 \cdot \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^3 + 3S_1^2 S_2 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^4 + \dots
\end{aligned}$$

すべて $\frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^n$ と感度係数 S_i^n の式で書き表せることが分かる。また $\frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^n$ の項は $\bar{a} + \Delta a_i$ をサンプリングし n 乗の平均値を取る項であるが、これは入力 a_i が正規分布であるとき『平均値を軸に左右対称である』という特徴から n が奇数のとき、サンプル数の増加に併せて 0 に収束することが容易に想像できる。

ここで、 $\frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^n$ の項について、リバースサンプリングを適用した際を考える。リバースサンプリング法では、その定義から前述の通り、 $a_i = \bar{a} + \Delta a_i$ を採集した次のサンプルは必ず $a_i = \bar{a} - \Delta a_i$ となることが決められている。つまり、サンプル数 I が偶数であるとき、一回一回の $\Delta a_i + \Delta a_i$ は必ず 0 になると言える。すなわち、 I が偶数であるとき n が奇数である $\frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^n$ の項は無限回サンプリングしたと同様の値に収束することが決まっている。

よって、 $E[\Delta p]$ や $E[(\Delta p)^3]$ といった n が奇数であるときの期待値は n が奇数となる $(\Delta a_i)^n$ の項が支配的である可能性が高く ((5)式より、また $S_1 > S_2 > S_3$ であることが多く、 $\Delta a_i < 1$ という場合を考えたとき)、奇数次の期待値が支配的となっている奇数次のモーメントに関わる統計量(平均や歪度)の収束も早くなるのではないかと予測できる。(式(3))

以上を統計量収束の点からまとめると、

○ $E[p]$ や $S[p]$ といった奇数次のモーメントに関わる統計量に対しては素早い収束が期待できるが

○偶数次のモーメントに関しては、 $2I$ 回のリバースサンプリングと I 回のランダムサンプリングで得られる情報量が等しくなり、収束が遅くなる可能性が高い。また、

○各項のどれが支配的かという問題には、感度係数 S_1, S_2, S_3 が大きく関わってくるため、これらの値についても留意する必要がある。

といったことが結論として予測された。

4. 簡易モデルを用いたリバースサンプリング法の性能評価

前節ではリバースサンプリング法の有効性を数式から評価したが、本節からは実際に確率論的な不確かさ評価に適用することを考える。ここでは手始めに、線形の一次方程式と考慮する高次項の少ない二次の方程式を簡易モデルの伝播式とし計算の対象とした。

具体的な簡易モデルを以下のように定義する。

$$\begin{aligned}
 p_i &= f(a_i) = S_1 \cdot a_i && \text{(線形時)} \\
 g(a_i) &= S_1 \cdot a_i + S_2 \cdot a_i^2 && \text{(二次の項を考慮)} \\
 \Delta a_i &= a_i && \text{(} a_i \text{を平均値} \bar{a} = 0 \text{となる正規分布で考える)}
 \end{aligned}
 \tag{6}$$

式にも記載したが、入力パラメータとなる a_i は平均値を0とする正規分布で考えるため、実質的に Δa_i と a_i は等しくなる。また、実際の不確かさ評価で対象とする入力パラメータも、対象とする核データの平均値とのずれを示すため、その平均は0となる。(入力パラメータが0となることは、核データがその期待値を取ることを意味する)

早速、入出力の関係性が線形で示される場合を考えていく(図2)。これはすなわち、(6)式の $p_i = f(a_i) = S_1 \cdot a_i$ でモデルが表され、以下の図では $S_1 = 1$ としている。

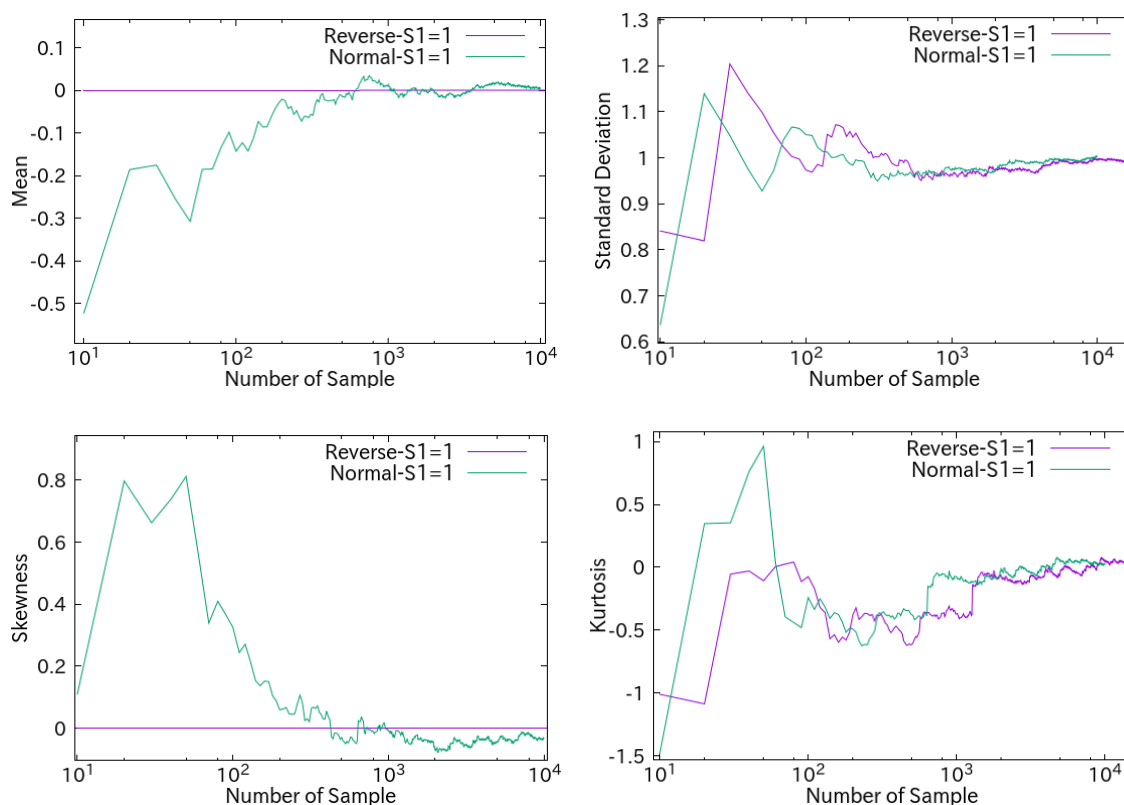


図2 標本数と各統計量の収束

上図2より読める通り、平均値と歪度(奇数次の統計量)は10サンプルにも満たない時点で収束していることが分かる。これは、前節で予測された結果と相違ない。また、標準偏差に関しては、リバースサンプリングを用いた有意性は一切得られず、尖度に関しては

大きな振れがあるものの少々振れる傾向の緩和が見られた。図2で見られた傾向の普遍性を確認するため、以下の図3（乱数を変化させたもの）図4（入力値の分散を変化させたもの）を考える。ここで、偶数次の統計量についてはリバースサンプリング法によって得られた結果のサンプル数を半分としている。

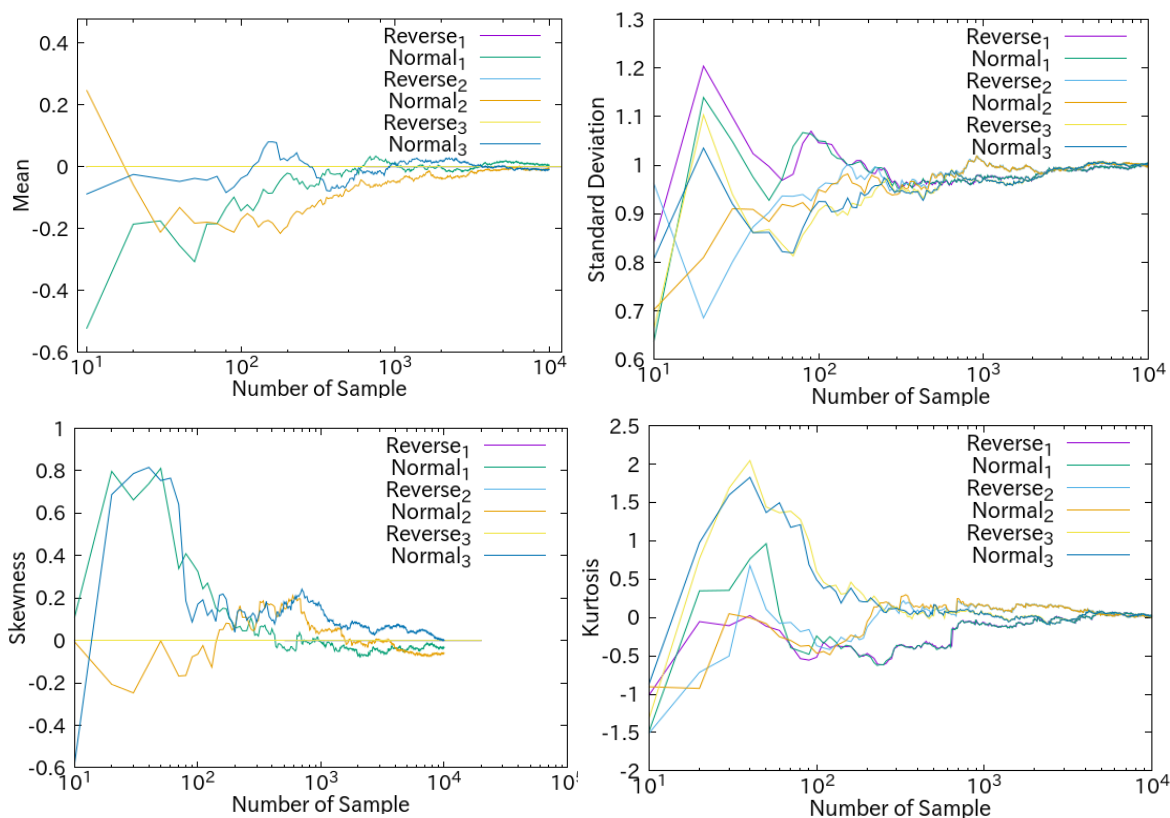


図3 標本数と統計量の変化（乱数を変更）

図3より、乱数を変更しても結果として同様の傾向を辿っていることが読みとれる。また、偶数時の統計量に関して、通常のランダムサンプリングにおける標本数 I の時点と、リバースサンプリングにおける標本数 $2 \cdot I$ の時点の傾向が似通うことが結果から読み取れた。これは前節での考察の式からも説明できる。また、次ページの図4より、入力値の分散を変化させた場合でも、奇数次統計量の収束傾向は変わらず、標準偏差については絶対値のみ変化し傾向は変わらない結果が得られた。また、歪度や尖度のような分布の形状を示す高次統計量については、傾向、値ともに分散による影響はなかった。

以上より、一次の微係数で収束の傾向のみを論じる際は入力分布の分散や乱数の順序などを考慮する必要はないと言える。

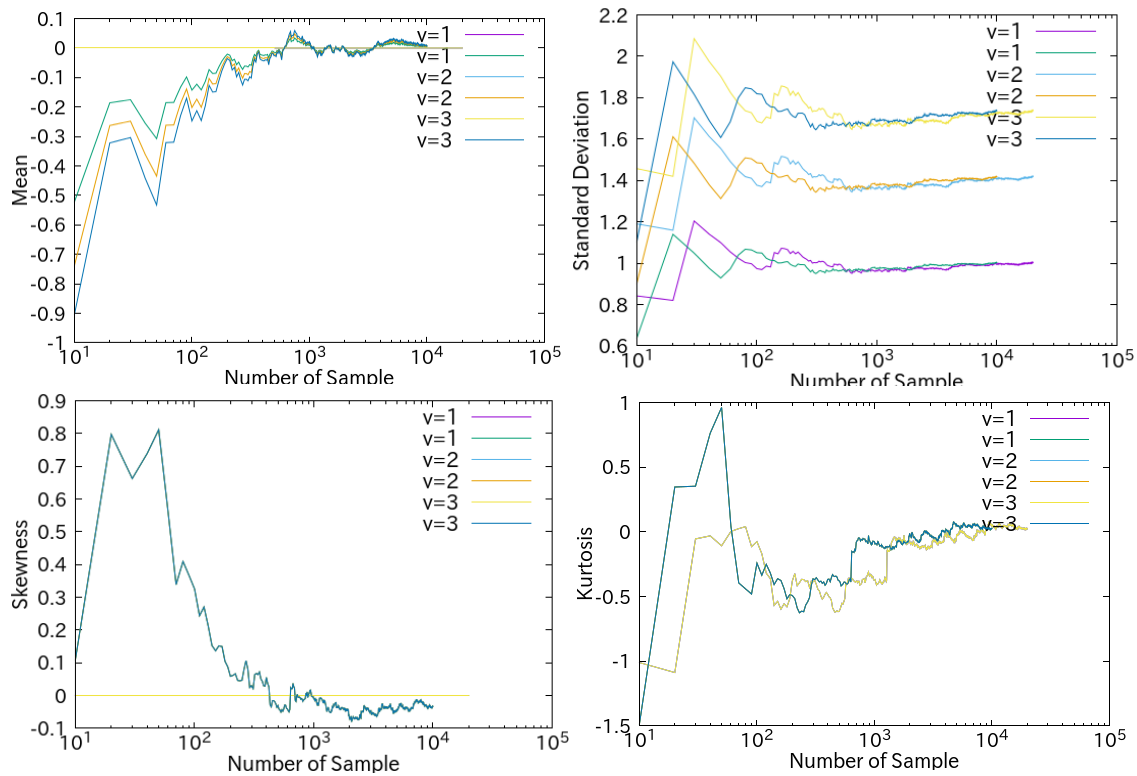


図4 標本数と統計量の変化（入力標本の分散を変更）

ここで、簡易モデルの微係数 S1 について考慮する。第一に、平均値や歪度のような即座に収束する統計量に関しては、S1 の値に関わらず同様の傾向を示した。また、尖度の収束については図5の通りであるが、これも S1 の値に関わらず、同様の収束傾向を辿ることが分かる。以上より、入出力間の関係が線形であるとき、以下の傾向が言える。

○平均値や歪度といった奇数次の統計量については、即座に(0に)収束する。

○また、上記の傾向は入力の分散、感度係数 S1 等の変化に関わらず不変である。

○偶数次の統計量(標準偏差や尖度)はリバースサンプリングにおいても有意性は見られなかった。また、通常のサンプリングに対して標本数が二倍の時点で同様の統計値を取っていることから、ある一定の収束の程度に二倍の標本数を要することから、収束に対して不利である可能性が高い。(ただし、尖度に関しては緩和されている可能性もある?)

また、これらは前節で求めた $\frac{1}{T} \sum (\Delta a_i)^n$ に対する関数で説明可能であり、前節の検討は妥当である可能性が高い。

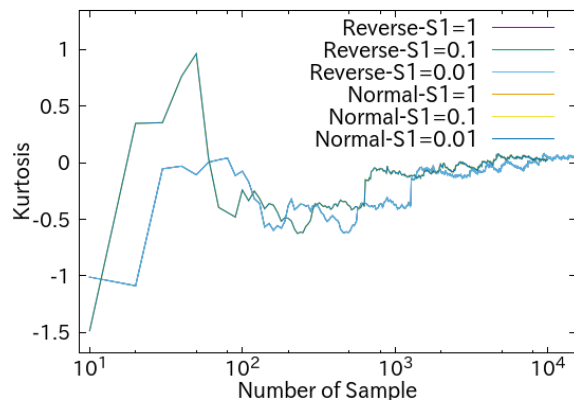


図5 標本数と尖度の変化(S1)

次に、入出力間が非線形である場合（ここでは二次の項までを考慮）を考える。ここで、 $S1, S2$ という係数はそれぞれ式(6) $g(a_i) = S_1 \cdot a_i + S_2 \cdot a_i^2$ の $S1, S2$ と対応する。

以下に、各統計量、各 $S1, S2$ の値ごとに計算を行った結果を掲載する。なお、Reverse(1/2)と記載されている凡例は、リバースサンプリングの標本数を半分にした値を横軸に取っている。

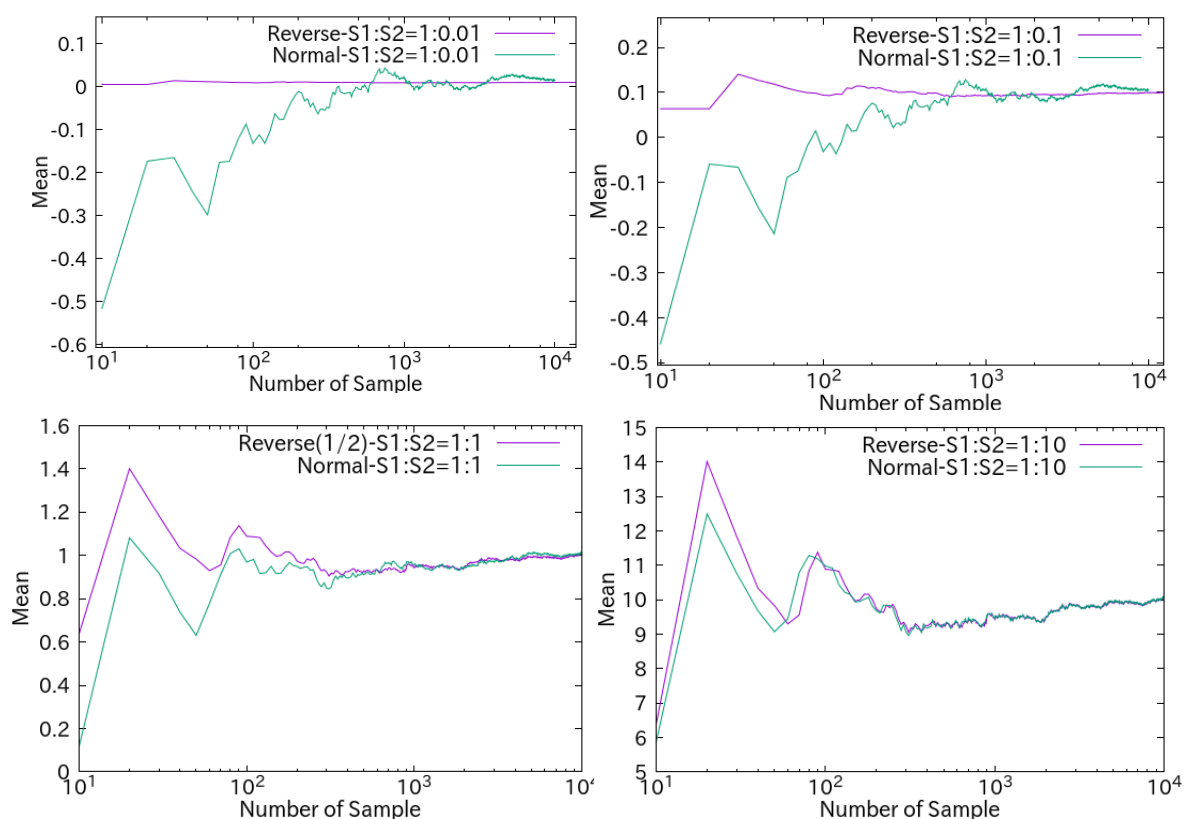


図6 標本数の増加に伴う平均値の変化

以上図6は平均値に関する図である。S1に対してS2が 10^{-2} 程度と相対的に小さいときは、前頁の入出力が線形であるものと同様の傾向を示しているが、相対的にS2が大きくなるほど通常のサンプリングと同様の傾向に近づく様子が見られる。（この傾向は通常のサンプリングとリバースサンプリングで同配列の乱数を用いているため生じている）二次以降の項の影響が大きいことはすなわち、線形性が弱くなることを意味するため、リバースサンプリングを平均値の推定に利用する有用性は、非線形性が強まるほど低くなると言える。

続いて、次頁図7に標本数に伴う標準偏差の収束の様子を示した。標準偏差に関しては、一次、二次の項に関わらずその収束の様子に変化はなかった。また、その収束の様子は通常のランダムサンプリングを行ったものと大差なかった。

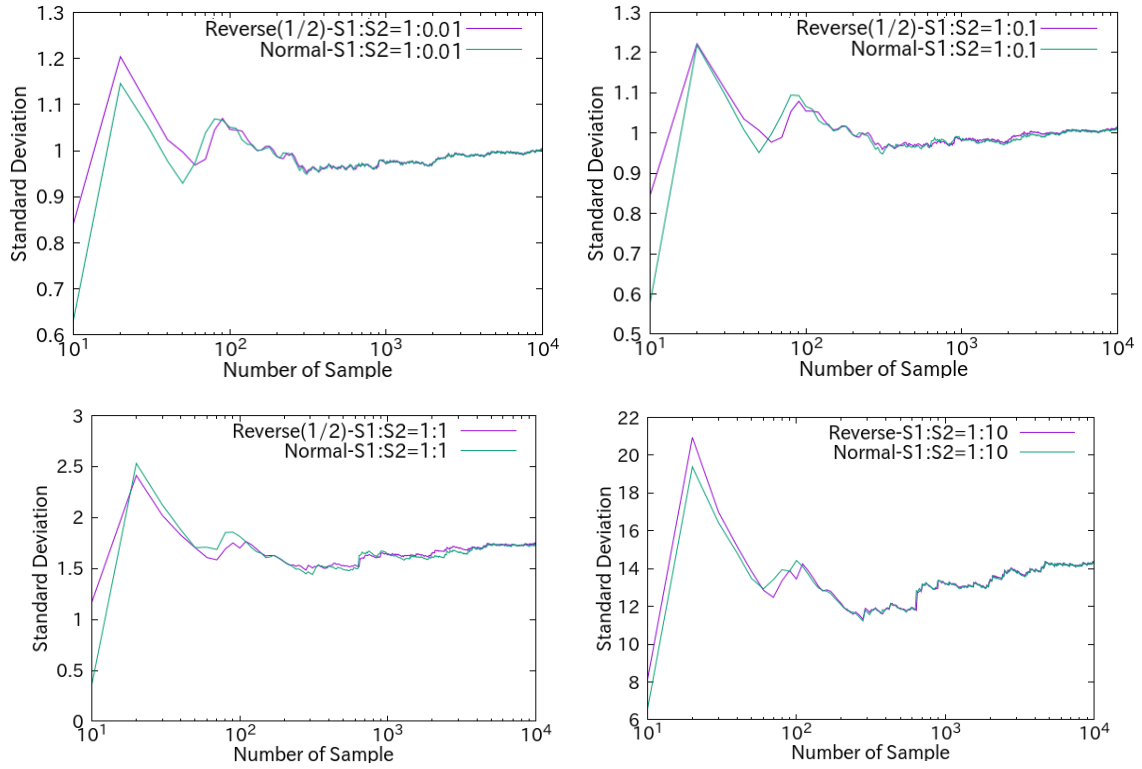
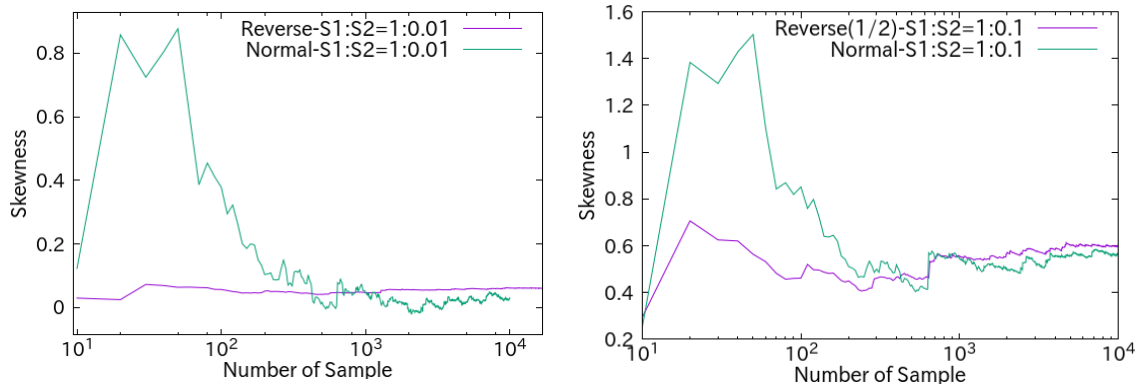


図7 標本数の増加に伴う標準偏差の変化



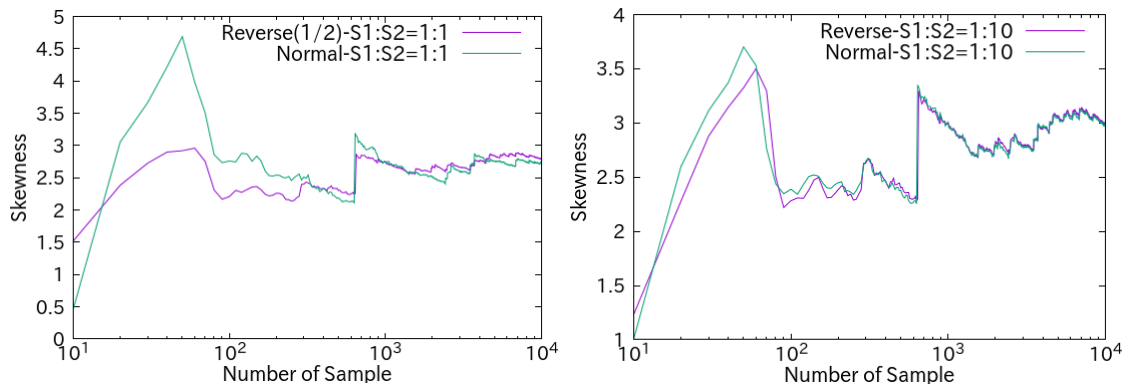


図8 標本数の増加に伴う歪度の変化

前頁図8に標本数の増加に伴う歪度の変化を示した。歪度は平均値同様、S1に対してS2が相対的に小さいとき（ $10^{-2} \sim 10^0$ 程度）は通常のサンプリングに対して収束が早い（1000サンプル程度まで）といえ、非線形が強くなった場合は結局、通常のサンプリングで得られる結果と大差ないものとなることが分かった。ただし、S1=S2の時点で、ある程度有意な統計量の収束を見せていることから、応用の可能性は大いにあると考えられる。

次に、以下へ尖度の収束について掲載する（図9）。

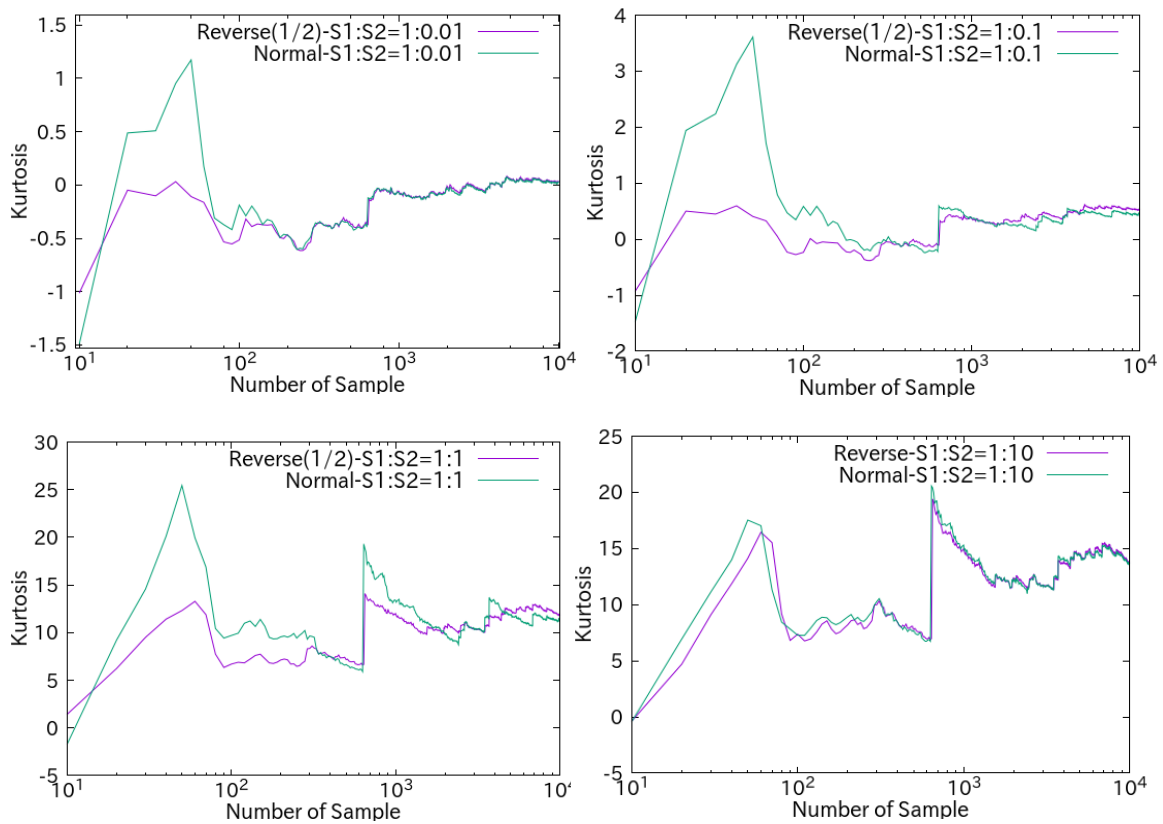


図9 標本数の増加に伴う尖度の変化

尖度に関しては4次の統計量であったが、当初の予測とは異なり、S1に対してS2がある

程度小さい場合は収束に有利な結果が得られた。これは、尖度に関する式中には $E[(\Delta p)^n]$ の式における $n=1\sim 4$ までが存在し、収束の早い $n=1,3$ の項がある程度支配的であるためだと予測できる。

以上より、 $n=1,3$ が支配的となる平均値、歪度に加え、尖度に関しては $S1$ が $S2$ に対して相対的に大きい場合は高速な収束が可能になると考えられる。しかし、二次の微係数の影響が大きくなる入出力においては使用できず、全ての場合ではなく、各高次項の微係数の大小がある程度判別できる必要があるという知見が得られた。

最後に次頁において、以上の結果の普遍性について論じる。

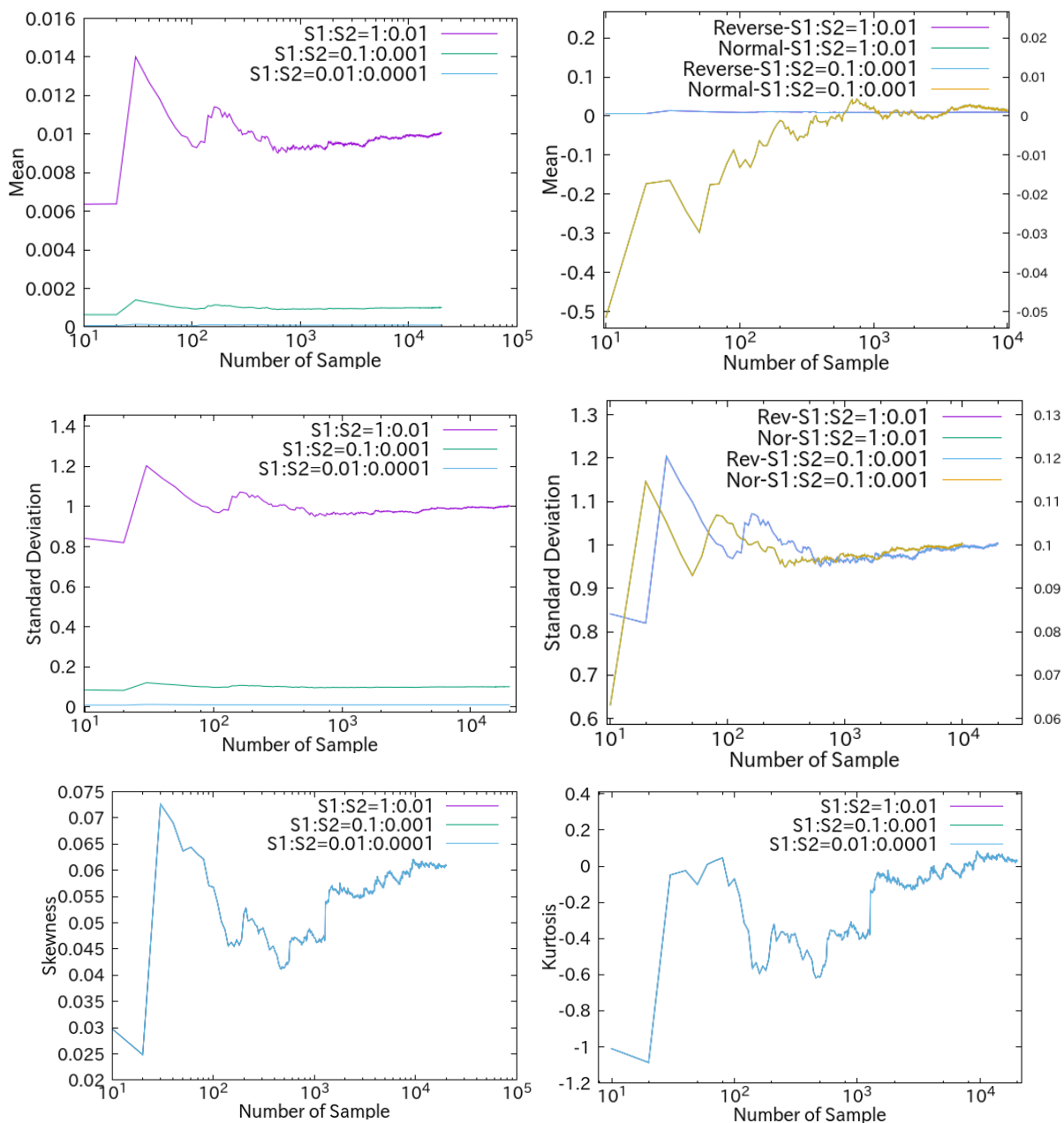


図 10 S1:S2 の比率を一定とした統計量収束

上図 10 は S1:S2 の比率を変えずに、値の大きさを変更した統計量収束の様子である。分布の形状を表す統計量である尖度や歪度は S1:S2 の値を変化させてもその様相が変化することはなかった。また、平均値や標準偏差は左側のように、絶対値を見ると S1,S2 の値によって変化しているように見えるが、通常のランダムサンプリングを基準とした収束の様子（右側）で表すと、その形状は完全に一致していることが分かる。

以上より、二次の微係数までを考慮する場合は S1:S2 の比率のみを考えればよいと言える。すなわち、図 6～9 で示した統計量変化の様子は S1,S2 の比率のみに依存しており、その値については考慮しなくてよいと言える。

5. 燃焼後核種数密度分布の統計量評価に対するリバースサンプリング法の適用

前節では、簡易モデルによって『線形性の強い入出力間においては、リバースサンプリングによる統計量推定の高速化が期待できる』ことが判明した。ここで、前年度の委託事業において考慮した、核燃料燃焼後の核種数密度の不確かさ評価に対してリバースサンプリング法を適用して評価を行う。

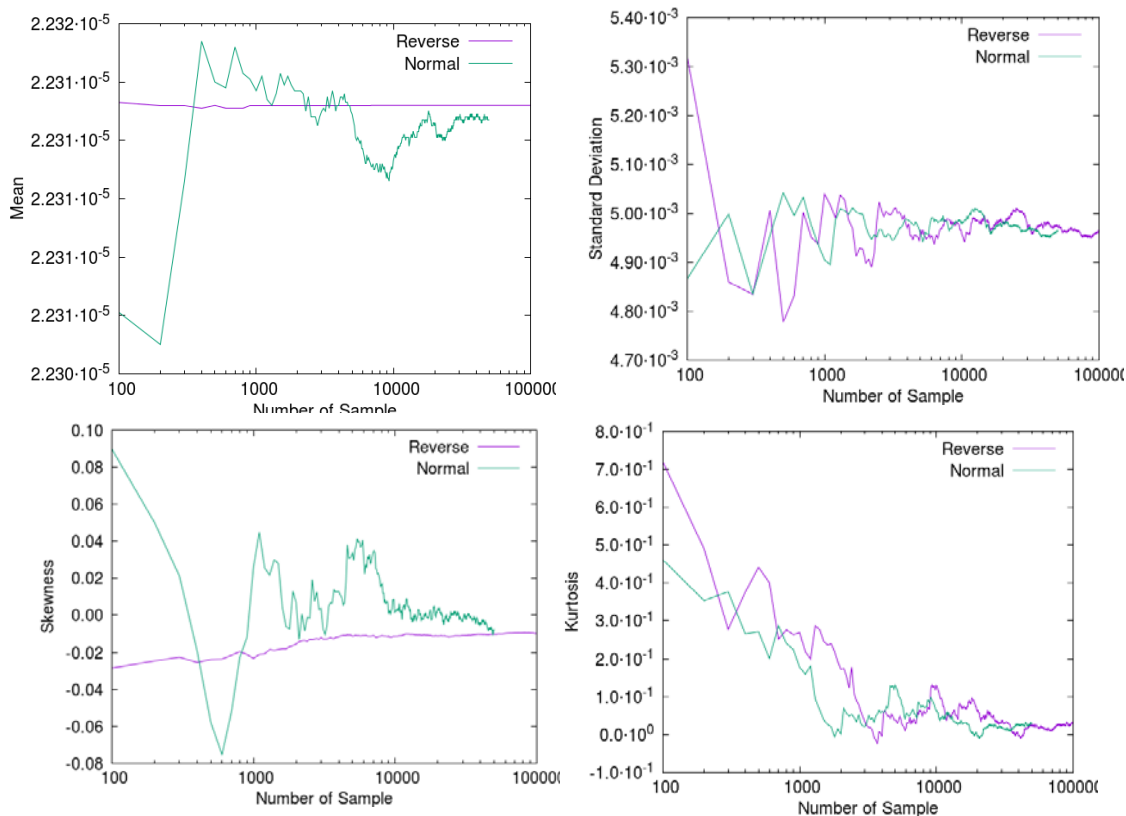


図 1 1 Xe-131 における比較

上図 11 は最も多く見られた核種の傾向の例として、Xe-131 の結果を示したものである。平均値や歪度に対して、簡易モデルや理論的考察によって予測された傾向を示していることが分かる。また、標準偏差や尖度に関しては、明らかに各サンプリング法で同様の収束傾向を辿っており、リバースサンプリングの標本数が二倍に対応することから、これらの統計量評価において、リバースサンプリング法が無意味であることが言える。

次に、平均や歪度に対しても有用性が見られなかった核種の収束例を記載する。第一に平均値についてだが、核種によってとりわけ予想された傾向を逸脱するような結果は得られなかった。ある程度簡易モデルと異なる結果が得られても右図 1 2 のような緩やかな収束を示す

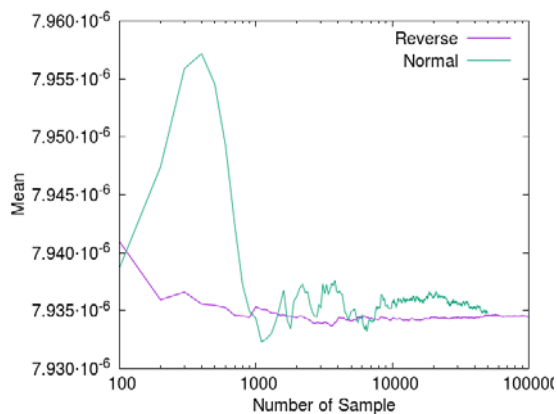


図 1 2 I-129 における平均値収束

程度であった。

また、I-129の歪度に関してみると、右図13のように通常のランダムサンプリングとリバースサンプリング法を適用した際の結果に大きな差異はなく、明らかにリバースサンプリング法による収束の優位性が得られないことが分かる。また、歪度に関してI-129のように優位性が見られなかった代表的な核種を以下に掲載する。(図14)

以下に掲載した殆どの核種において、歪度

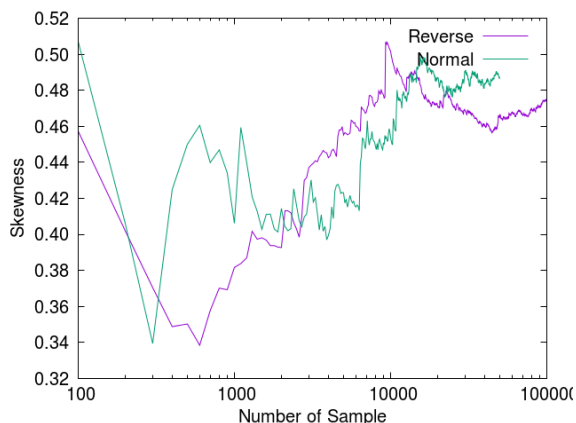


図13 I-129における歪度収束

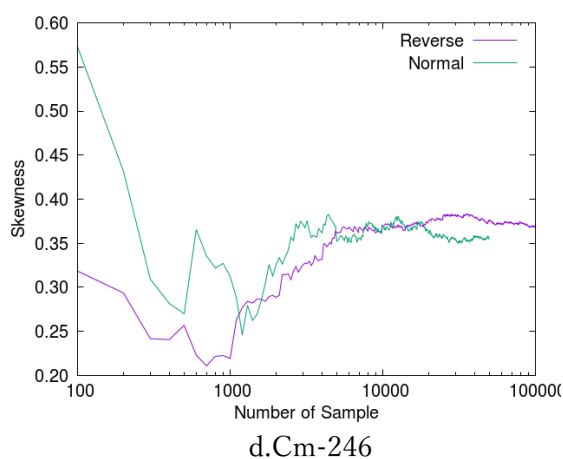
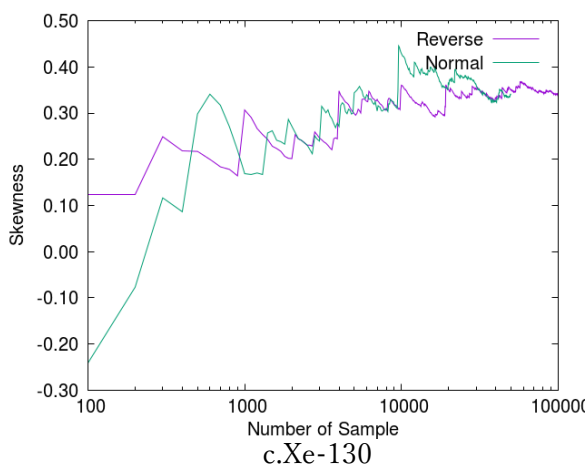
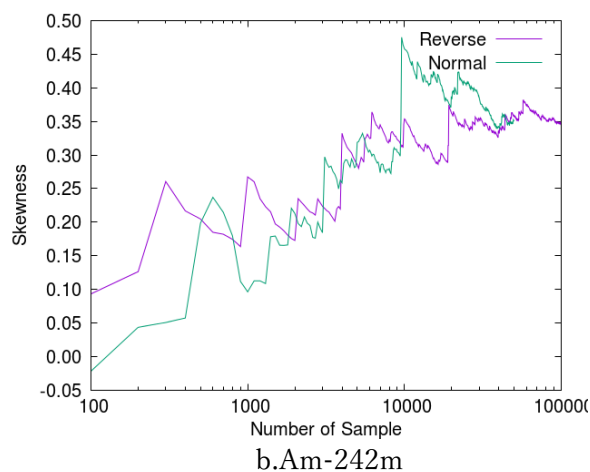
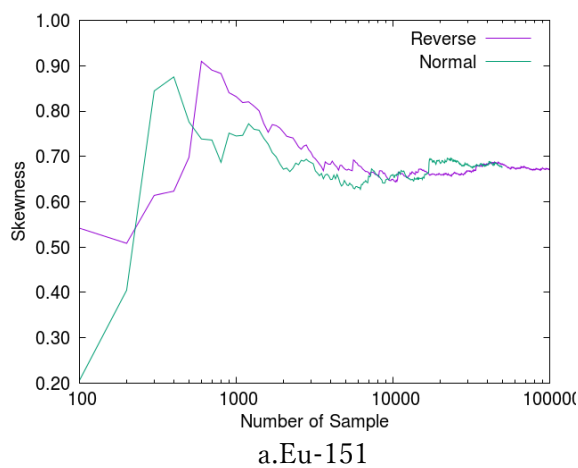


図15 各核種における、歪度収束の様子

の収束はリバースと通常のランダムサンプリングで大差なかった。加えて、これらの核種は歪度が 10^{-1} オーダーと、他の核種に比べて大きい値に収束する傾向があることが読み取れる(ただし、収束しきっていないため確実ではない)。ただし、Cm-246のような比較的大きな歪度に収束する予測ができる核種においても、リバースサンプリングによる収束の

高速化が僅かに確認できるなど、単純に歪度のみに比例する傾向ではないことが分かる。

例として、右図 16 に Mo-99 の収束傾向を示すが、収束の高速化が見られた殆どの核種と歪度の大きさが変わらないにも関わらず、統計量の収束に振れが見られるのが分かる。(大よその核種において、b.Nd-144 のような高速な収束を示した)

以上より、リバースサンプリングを用いた歪度予測の高速化については、比較的小さい歪度を示す核種にかんしては十分に効果が見られ、ある程度歪度の大きな核種については検討の必要があることが分かった。

また、FP 核種、アクチニド核種内で重要と考えられる 159 核種のうち、歪度の収束に振れが見られた核種は合計 15 核種と全体の 1 割程度であった。念のため、以下に列挙する。

1、明らかにリバースと通常のサンプリングとの間に差異が見られなかった核種

I-129, Xe-130, Eu-151, Eu-152, Gd-152, Gd-153, Am-242

2、通常のサンプリングに比べて、優位性は確認されたが、収束に多少の振れが見られた核種

Mo-99, Tc-99, Ru-100, Te-129m, U-234, Cm-243, Cm-245, Cm-246

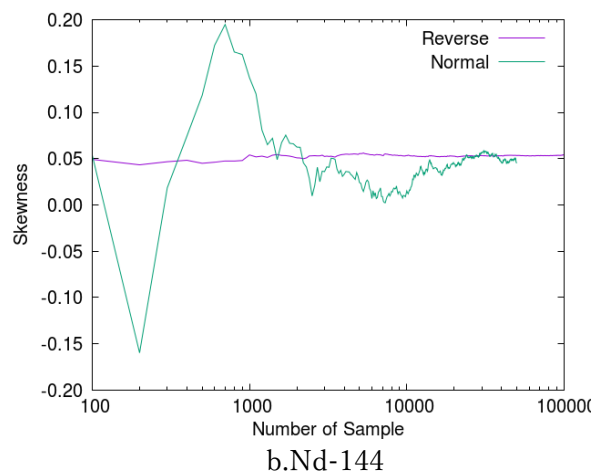
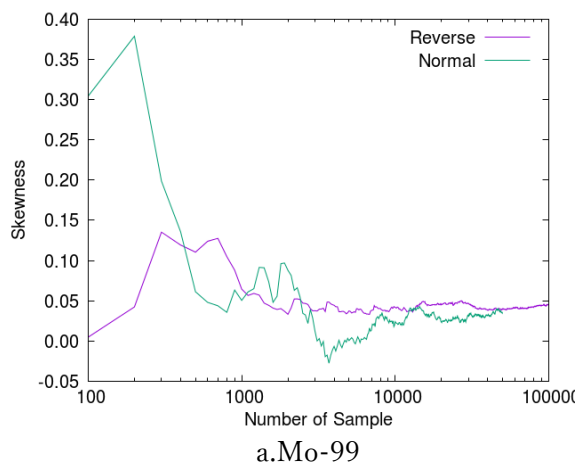


図 16 同程度の歪度における収束

6. 現段階での（今後の）課題

6-1. 推定された統計量に対する統計的な不確かさ評価の問題

ランダムサンプリング法を始めとする統計的手法を用いて推定された統計量には当然、統計的な不確かさが付随する。（これは標本を無限に採ることで排除できるが、現実的に不可能であるため必ず考慮しなければならない）

統計的な不確かさを評価する手法については、正規分布を前提として理論的に計算によって求める手法など種々存在するが、我々の研究ではブートストラップ法[2]と呼ばれるリサンプリング法を用いてきた。これは名前の通り、一度得られた出力標本群を改めて一様乱数で複数回サンプリングし統計量を複数回求めることで、その不確かさを評価する手法である。これはリサンプリングによって得られる統計値が母集団の不確かさに従うことを利用した不確かさ評価手法であるが、リバースサンプリング法では母集団からのサンプリングに特殊な手順を踏まえている。そのため、リバースサンプリング法によって推定された統計量の不確かさ評価にブートストラップ法が適用可能かは検証する必要があると言える。

また、通常の RS 法を用いた場合と統計的な不確かさの減少傾向を比較することでリバースサンプリング法の有効性について評価することができると考えられる。

以上のため、異なる乱数で同数の標本を採集しその不確かさを計算する手順を踏み、リバースサンプリングによって得られた統計量の統計的な不確かさ評価を行うことを考えている。

6-2. リバースサンプリング法による統計量高速化が可能か否か、判断の必要性

本研究においては 100000 サンプルまで小刻みに 10 サンプルずつ統計量評価を行い収束の傾向を判断したが、不確かさ評価法として実用する際は必要となるサンプル数ある程度決めておく必要がある。前項で述べた通り、得られた結果に統計的な不確かさを付加して考えることで標本数の少なさを補うことができるが、その幅がどの程度小さくある必要があるかなど、考慮すべき事情は多くある。

また、そもそもリバースサンプリング法を適用する意義があるのかについてだが、リバースサンプリング法では、ごく少数のサンプルから、歪度が 0 近傍か否か、すなわち出力の確率分布が正規分布を示しているかどうかを判断することが可能である。つまり、感度係数を用いた手法が適用可能かについての評価を少ないサンプル数から行うことができると考えられる。ただし、正規分布である核種を確定させることはできても、逆に「非正規分布」であることは確定させられない（図 16 より）ことには注意する必要がある。特に核種数密度の不確かさとして求めたい情報は、出力分布の標準偏差であるため、リバースサンプリング法を直接不確かさ評価に応用することは不可能であると言

ってもよい。しかし、上記のように入出力間の線形性を推定したり、後述のような非線形な入出を示す高次の項を推定することに応用することは可能であると考えられる。

7. リバースサンプリング法の応用

前節までリバースサンプリング法を用いて統計量の推定を高速化することを目的に評価を行ってきたが、本節では入出力の関係式をテーラー展開した際に得られる高次の感度推定（感度ベースの不確かさ評価手法では1次の感度を利用している）を目的とした応用について触れていく。第2節で触れたように、リバースサンプリング法には入力パラメータ変化における奇数次の項 $((\Delta a_i)^n : n = 1, 3, 5, \dots)$ を排除する特性を有している。そこで、リバースサンプリング法によって得られた平均値から、二次の感度係数を推定する手法を考案する。

以下に、リバースサンプリング法によって得られる平均値の計算式（式7）を示す。

$$\begin{aligned} E[p] &= \frac{1}{I} \sum p_i = \frac{1}{I} \sum (\bar{p} + \Delta p_i) = \bar{p} + \frac{1}{I} \sum (\Delta p_i) = \bar{p} + E[\Delta p] \\ &= \bar{p} + S_2 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^2 + S_4 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^4 + S_6 \frac{1}{I} \sum (\Delta a_i)^6 + \dots \end{aligned} \quad (7)$$

ここで、上式を以下のように変形する。

$$I(E[p] - \bar{p}) = S_2 \sum (\Delta a_i)^2 + S_4 \sum (\Delta a_i)^4 + S_6 \sum (\Delta a_i)^6 + \dots \quad (8)$$

また、 $I=2$ 、すなわち一回分のリバースサンプリングを行ったと仮定すると(8)式は、

$$\begin{aligned} 2(E[p] - \bar{p}) &= 2S_2(\Delta a_1)^2 + 2S_4(\Delta a_1)^4 + 2S_6(\Delta a_1)^6 + \dots \\ (E[p] - \bar{p}) &= S_2(\Delta a_1)^2 + S_4(\Delta a_1)^4 + S_6(\Delta a_1)^6 + \dots \end{aligned} \quad (9)$$

と表せ、ここで推定値となる二次の感度を \hat{S}_2 として、これを

$$\hat{S}_2 = \frac{(E[p] - \bar{p})}{(\Delta a_1)^2} \quad (10)$$

とすると、真の S_2 との関係は

$$\hat{S}_2 = S_2 + S_4(\Delta a_1)^2 + S_6(\Delta a_1)^4 + \dots \quad (11)$$

と表せる。このとき、 Δa_1 を極めて小さく採ることで、既知の値である $E[p]$, \bar{p} , $(\Delta a_1)^2$ から求められる二次の感度の推定値 \hat{S}_2 が真の二次の感度 S_2 と近似できることが予想される。

簡易モデルを用いて、以上の手法の検討を行った。以下に、結果を示す。

右図17は二次、三次、四次方程式それぞれを簡易的に仮定し、上記手法を用いて二次の感度を予測した結果を示したものである。縦軸は、本来の二次の微係数と比べた際の相対誤差、横軸は Δa_1 のサイズを示している。図17より、二次、三次の微

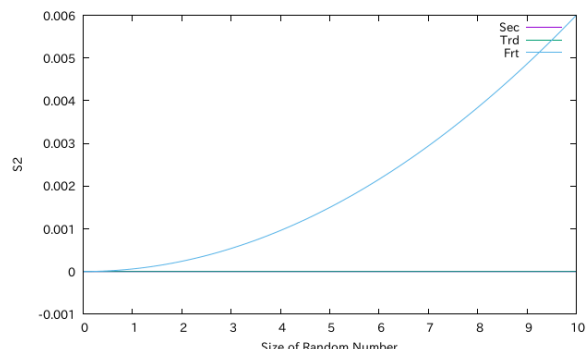


図17 Δa_1 と推定される S_2 の誤差

係数までを考慮している入出力間の式においては、リバースサンプリングの際の摂動量の大きさに関わらず、二次の感度の推定が可能であることが読み取れる。((式 11) よりそもそも自明であるが) よって、これより四次方程式において、推定手法を用いた際の結果を検討していく。ただし、(11)式より S1 や S3 といった値に結果が依存しないこと、また推定された S2 で規格化を行った場合 S2:S4 の絶対値に関わらず、各割合によってのみ Δa_1 と推定の様子に変化が生じることは自明であるため、今後は S2:S4 の割合のみを考える。

右図 18 は、二次の微係数と四次の微係数の割合を変化させた時の摂動量 Δa_1 と推定される二次の微係数の相対誤差を示したものである。微係数の比率に関わらず、摂動量 Δa_1 の増加に従って真の S_2 とのずれは大きくなり、その傾向は S2 に対して S4 が大きいほど強くなると、式(11)の予測に沿ったものとなった。ここで、 Δa_1 がより小さい範囲について拡大する。(また、ここで縦軸を logscale とした)

S2 と S4 の割合が 1:1 でも Δa_1 の大きさを 0.1 に設定している時点で、真の S_2 との誤差は 1%に留まる結果となった。

以上より、 Δa_1 を 0 に近づけることで、微係数の割合に関わらず、誤差の小さな二次の微係数推定が可能である可能性が高いと言える。

また、参考としてより高次の係数を考える必要性が予想される指数関数について、適用してみた。右図 20 はその結果である。簡易的に

$$f(x) = a \cdot e^{b \cdot x}$$

をモデルとして用いており、凡例の数値は a:b となっている。指数の肩が大きくても、 Δa_1 を小さくすることで、0.01%程度の差まで S_2 の推定が可能となることが分かる。

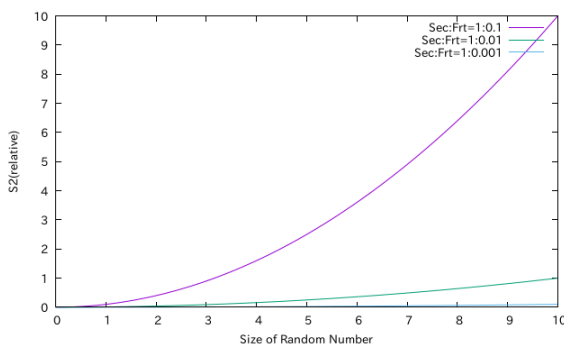


図 18 Δa_1 と推定される S_2 の誤差 (四次)

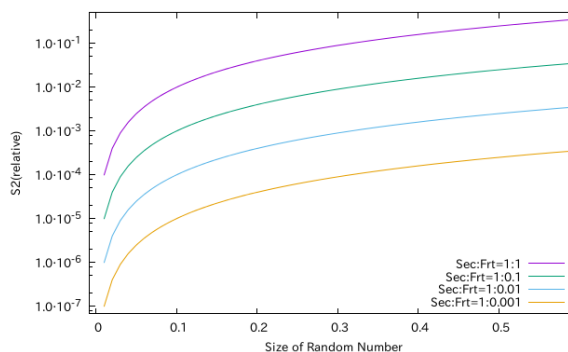


図 19 Δa_1 と推定される S_2 の誤差 (拡大)

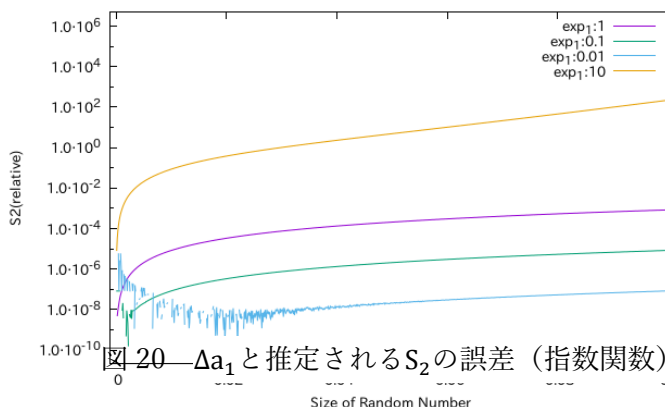


図 20 Δa_1 と推定される S_2 の誤差 (指数関数)

前頁までの結果より、リバースサンプリングを一回行うことで、二次の微係数の予測が可能である可能性が高いことが分かった。ただし、以下のような Δa_1 を0に近づけるほど精度が悪くなる例などが確認されていることから、この手法の普遍性や有効性には疑う余地が十分にあり、今後の検討が重要になると予測される。

また、得られた結果がどの程度真の値に近いかなどの情報を得る手法もなく、非常に中途半端な結果となった。これは、今後の検討によって改善される可能性がある。

参考文献

- [1] Go Chiba, "Estimation of neutronics parameter sensitivity to nuclear data in random sampling-based uncertainty quantification calculations" Annals of Nuclear Energy(2015)
- [2] Endo T, Watanabe T, Yamamoto A, "Confidence interval estimation by bootstrap method for uncertainty quantification using random sampling method," J. Nucl. Sci. Technol., 52, 993 (2015).

燃料集合体の燃焼度依存の反応度に対する不確かさ評価

1 背景

一般的に燃焼特性の不確かさの定量化手法として、ランダムサンプリング法と燃焼感度を用いる手法がある。ランダムサンプリング法の長所は、入出力間に何の仮定も必要としない点である。短所としては、統計誤差を伴う点と計算負荷が大きい点が挙げられる。一方、燃焼感度を用いる不確かさ計算は、統計誤差を伴わず、計算負荷が小さいという長所がある。また、物理的現象の考察に適していることも長所と言える。短所は、入出力間の線形関係を仮定する必要があることである。

当研究室で開発中の炉物理計算コードシステム CBZ では、マルチセル体系における燃焼感度計算及び燃焼感度を用いた不確かさ計算が可能である。核データに起因する反応度の不確かさには、核データから「直接的に」反応度の不確かさになるものと、核データから核種数密度を介して「間接的に」反応度の不確かさになるものがある。それぞれを直接的感度と間接的な感度から求めることとなる。燃料集合体の反応度に先んじて、Gdを含むマルチセル体系における核データに起因する反応度の不確かさ計算実施した。なお、本稿では反応度の代わりに無限中性子増倍率 k_{inf} の不確かさで議論することとする。

2 簡易化した燃焼チェーンを用いた不確かさ計算における核データの共分散行列

2.1 核データの不確かさ情報

燃焼チェーンを簡易化すると、用いる核データの値はもちろん、不確かさデータも変化する。簡易化した燃焼チェーンで用いる核データの不確かさを把握するためには、核種同士の不確かさの伝播を考慮する必要がある。さらには、簡易化した燃焼チェーンでは、相関が無い不確かさデータ同士が相関を持つようになるケースがあることにも注意が必要である。簡易化した燃焼チェーン用に不確かさデータを作成することで、簡易化した燃焼チェーンを用いた不確かさ計算が可能となる。燃焼チェーンの簡易化に伴い変化する核データは、核分裂収率と崩壊分岐比、反応分岐比である。

崩壊分岐比・反応分岐比の不確かさデータは、核種毎に分岐した後の核種同士に相関を持つ共分散行列で表現できる。燃焼チェーンが簡易化された場合は崩壊分岐比・反応分岐比の不確かさが核分裂収率の不確かさとして表れる場合がある。例えば、崩壊分岐前の核種が扱われず分岐後の核種が扱われる燃焼チェーンでは、分岐後の核種の核分裂収率に分岐前の核種の分岐比が関係してくる。この場合、核分裂収率の不確かさとして崩壊・反応分岐比の不確かさが表れる。さらに、このように核分裂収率として表れる分岐比の不確かさは、核分裂性核種同士に相関を持つ。そのため、核分裂収率として表れる分岐比の不確かさは、扱う全ての核分裂性核種、核分裂生成物のデータを持つ共分散行列で表現する必要がある。

2.2 ランダムサンプリング法

共分散行列の作成はランダムサンプリング法を用いて行った。手順は以下の通りである。

1. 疑似乱数を使用して、不確かさを持つデータを模擬したサンプルを作成する。
2. サンプルを使用し、CBZ の簡易化燃焼チェーン作成モジュールにて簡易化した燃焼チェーンを作成する。
3. サンプルの数だけ作成した燃焼チェーンから用いるデータの標本分散、標本共分散を求める。

2.3 計算条件

簡易化燃焼チェーンと詳細燃焼チェーンの違いが、燃焼計算結果に与える影響を調べるため、それぞれの燃焼チェーンでピンセルモデルにおける燃焼計算を行い、比較した。モデルの寸法、組成、その他の条件は3章と同様である。以下の条件の下で共分散行列を作成した。

- 疑似乱数は C++ の rand 関数で得た。
- 断面積データは JENDL-4.0、崩壊データは JENDL/FPD-2011、核分裂収率データは JENDL/FPY-2011 のものを使用した。
- 核種間の核データの相関は片倉の方法により求めたものを使用した。
- 核分裂収率として表れる反応分岐比の不確かさは無視した。
- 全ての核種を扱うチェーン（以下、詳細燃焼チェーン）と核分裂生成物を 138 種類に簡易化したチェーン（以下、簡易化燃焼チェーン）の二つを用いた。

感度係数は 40GWd/t 時点のものを CBZ で計算した。作成した共分散行列を用いて燃焼後の核種数密度と中性子増倍率の不確かさ計算を行った。

2.4 計算結果・考察

まず、簡易化燃焼チェーンと詳細燃焼チェーンを用いて、ピンセルモデルにおける燃焼後核種数密度の不確かさ計算を行った。燃焼チェーン間の核種数密度の相対差を図 2.1 に示す。簡易化燃焼チェーンで扱う 138 核種のほとんどの燃焼後数密度の燃焼チェーン間の差異は、1% 以内と小さかった。燃焼チェーン間の差異が大きい核種も見られたが、原子炉特性への影響が小さい核種のみであった。簡易化燃焼チェーンでは、原子炉特性上重要であり、詳細チェーンの燃焼後数密度を再現することを期待されている核種は Mo-95、Tc-99、Ru-101、Rh-103、Rh-105、Pd-105、Pd-107、Pd-108、Ag-109、I-135、Xe-131、Xe-135、Cs-133、Cs-134、Pr-141、Nd-143、Nd-145、Pm-147、Pm-148、Pm-148m、Pm-149、Sm-147、Sm-149、Sm-150、Sm-151、Sm-152、Eu-153、Eu-154、Eu-155、Gd-154、Gd-155、Gd-156、Gd-157 の 33 核種である。これらの核種の燃焼後数密度の差異は、最大でも Nd-143 の 0.41% と小さいことが確認できた。

核種数密度の不確かさの差異を図 2.2 に示す。ほとんどの核種で燃焼チェーン間の差異は小さかった。燃焼チェーン間の差異が大きい核種がいくつか見られたが、中性子増倍率への影響が小さい核種のみであった。

図 2.3 に燃焼チェーン間の核分裂収率データによる核種数密度の不確かさの差異を示す。核分裂収率による核種数密度の不確かさの燃焼チェーン間の差異はほとんどの核種で 2% 以内と小さかった。Cd-111 と In-115

の差異が比較的大きかったが、これらは詳細燃焼チェーンの燃焼後核種数密度を再現することが保証されていない核種であり、中性子増倍率への影響は小さい。

図 2.4 に燃焼チェーン間の崩壊分岐比データによる核種数密度の不確かさの差異と、不確かさの内の崩壊分岐比として表れる崩壊分岐比によるものの割合を示す。崩壊分岐比による核種数密度の不確かさの燃焼チェーン間の差異は多くの核種で 3% 以内であった。いくつかの核種で 5~12% の差異があったが、それらは中性子増倍率への影響が小さい核種であった。さらに、7 つの核種 (Ru-104、Pd-104、Cd-110、Sb-121、Gd-152、Gd-153、Gd-154) で 40% 以上の差異が生じた。差異が生じた原因は、反応分岐比による不確かさを無視していることと考えられる。この 7 つの核種も何れも中性子増倍率の影響は小さく、実用上の問題は無いと考えられる。

次に、簡易化燃焼チェーンと詳細燃焼チェーンを用いてピンセルモデルにおける中性子増倍率の不確かさ計算を行った。図 2.5 に中性子増倍率の不確かさを示す。また、不確かさの燃焼チェーン間のの相対差を図 2.6 に示す。核分裂収率による中性子増倍率の不確かさの燃焼チェーン間の差異は燃焼を通して-0.5% から 0.1% 程度であった。崩壊分岐比によるものは、燃焼を通して-0.2% から-0.1% 程度であった。これらを合わせると中性子増倍率の不確かさの燃焼チェーン間の差異は、0.05% 以内となった。従って、核データに起因する中性子増倍率の不確かさ計算において、簡易化燃焼チェーンで詳細燃焼チェーンの結果を概ね再現することができると言える。

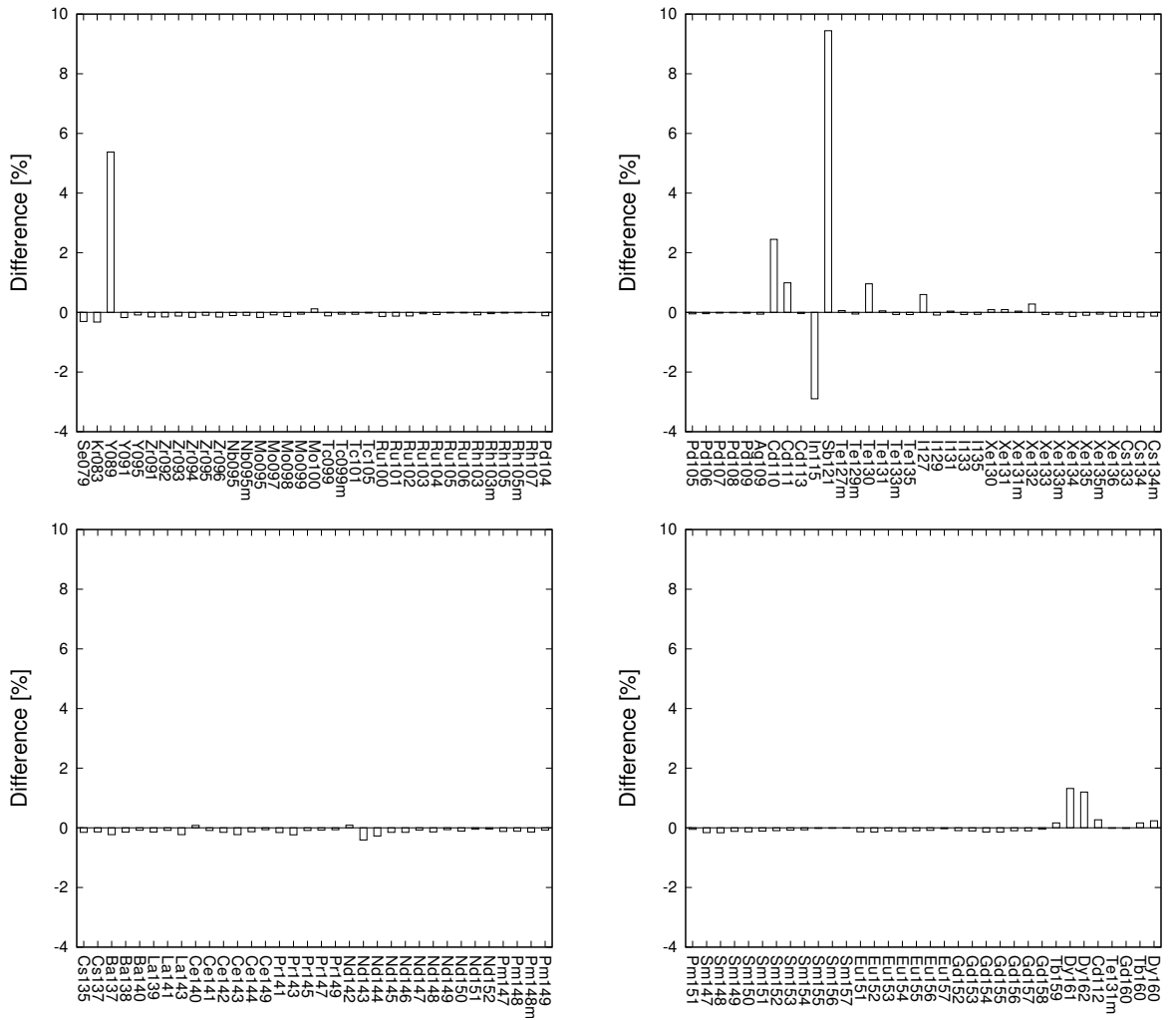


図 2.1: 核種数密度の差異

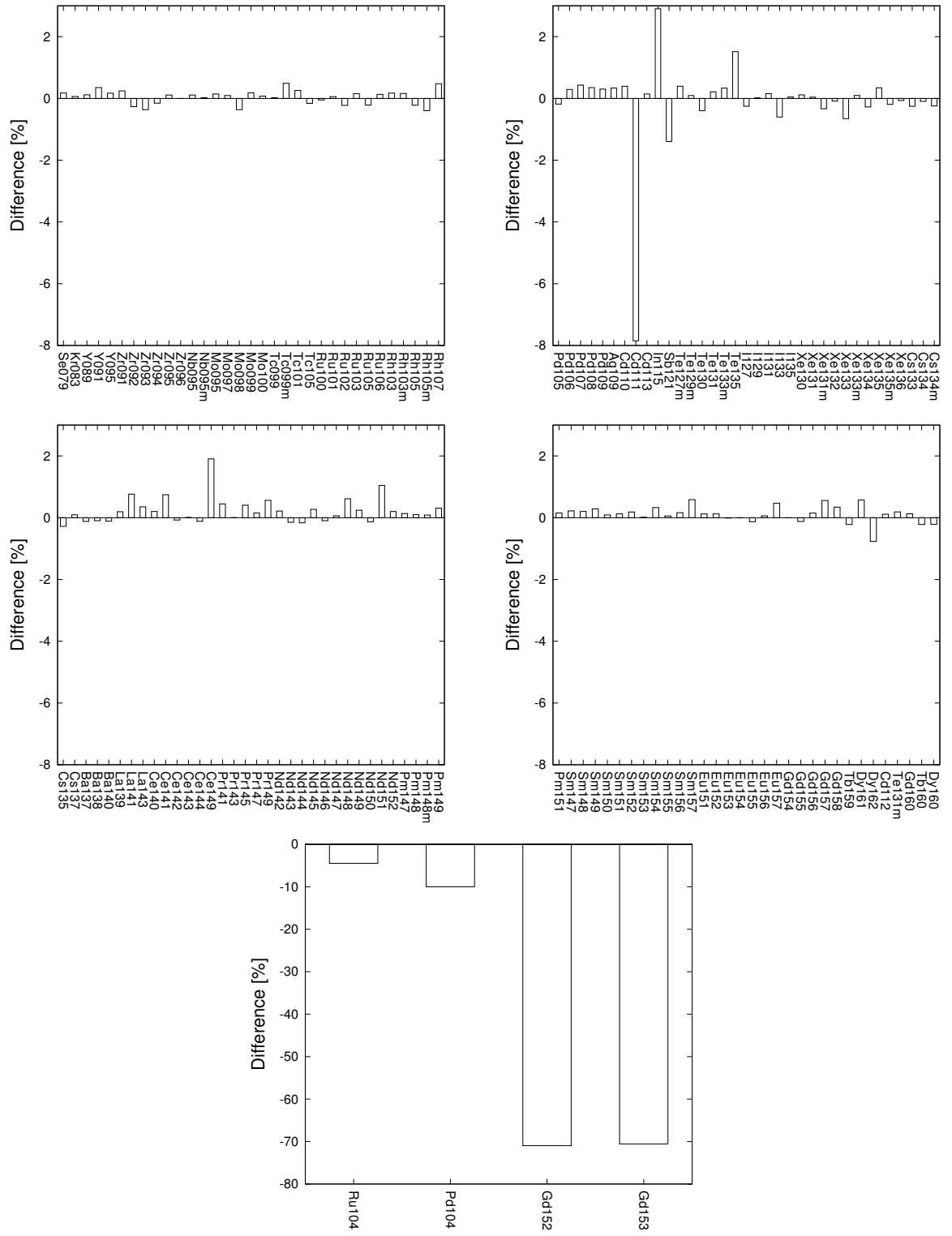


図 2.2: 核種数密度の不確かさの差異

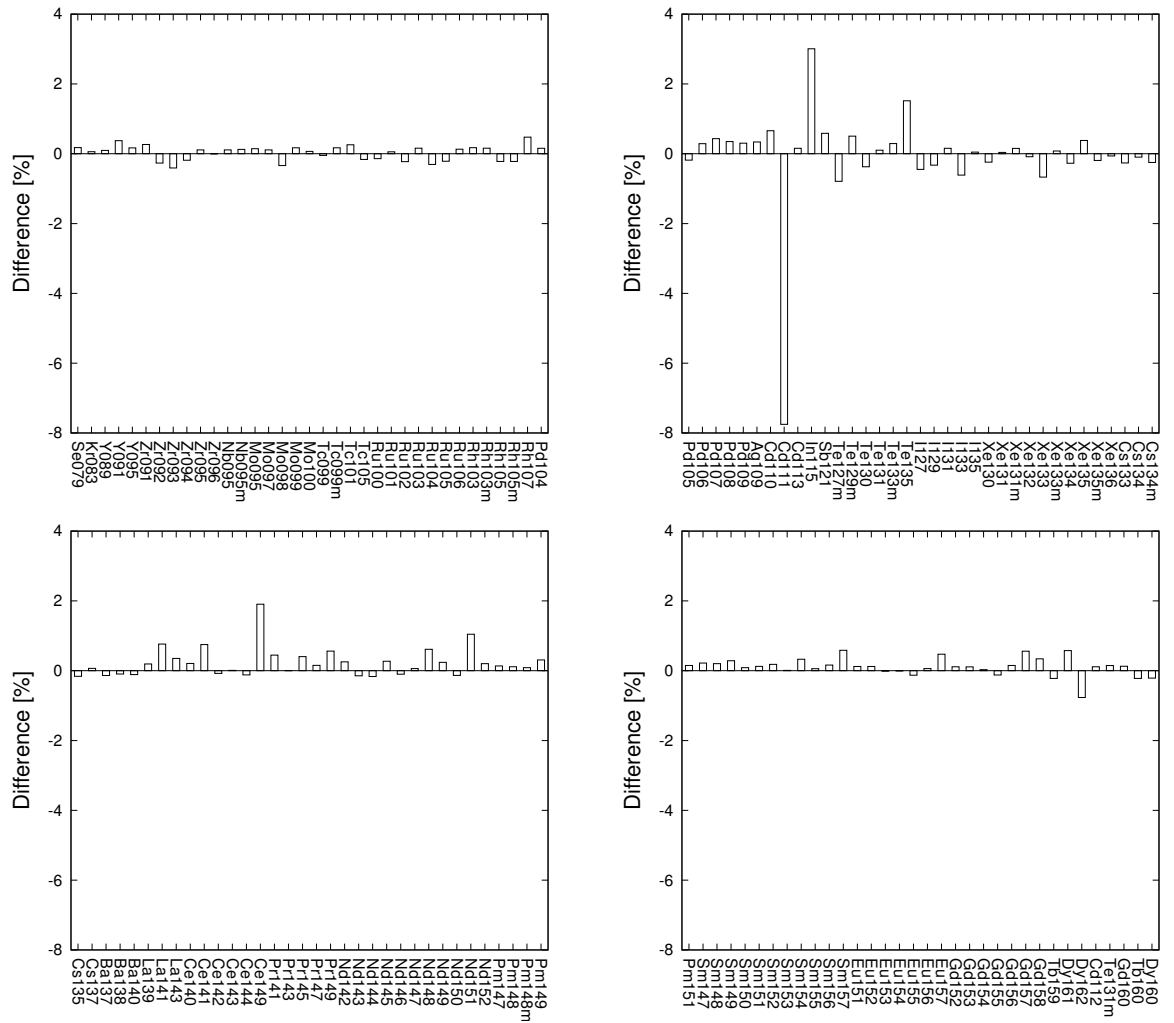


図 2.3: 核分裂収率データによる核種数密度の不確かさの差異

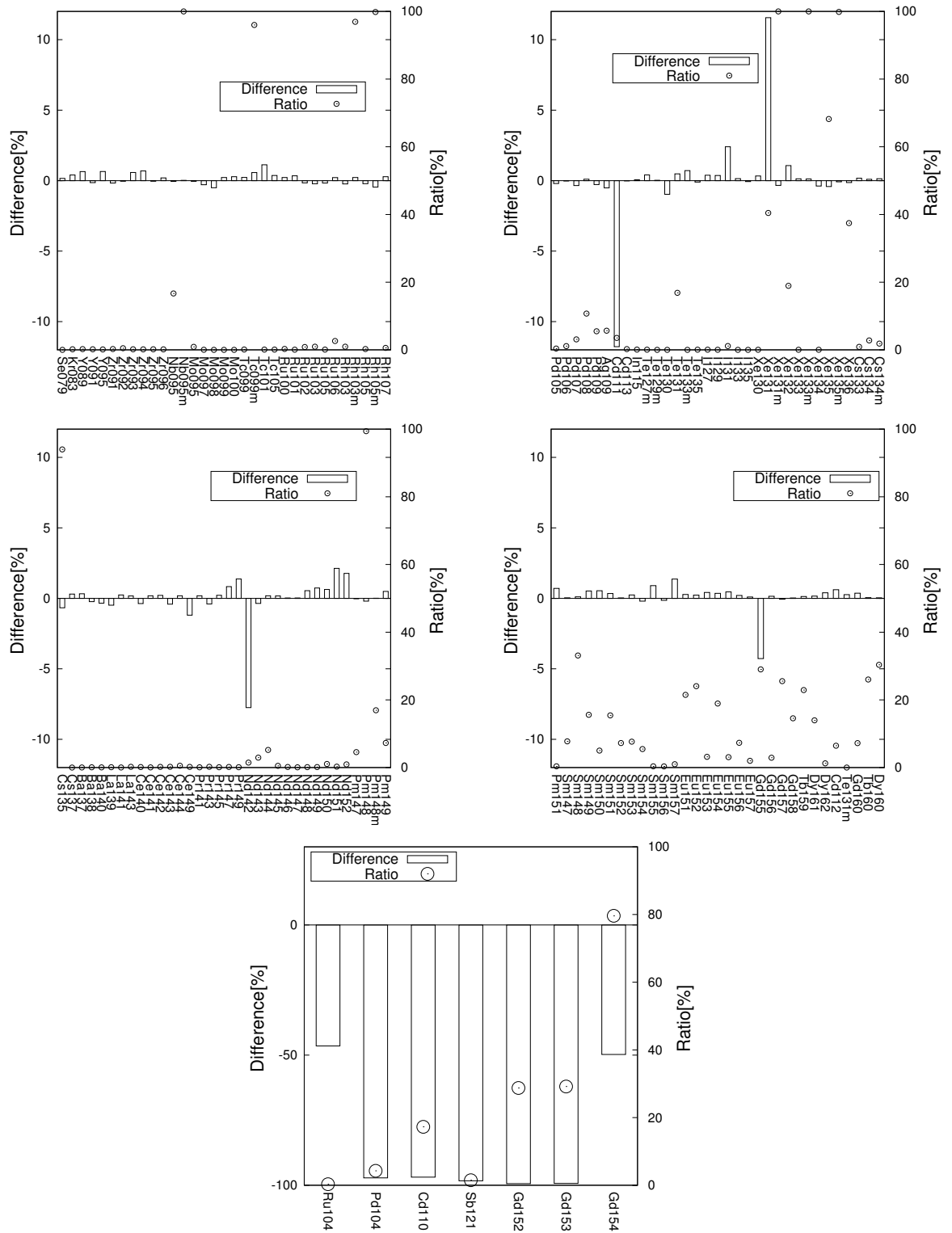


図 2.4: 崩壊分岐比データによる核種数密度の不確かさの差異

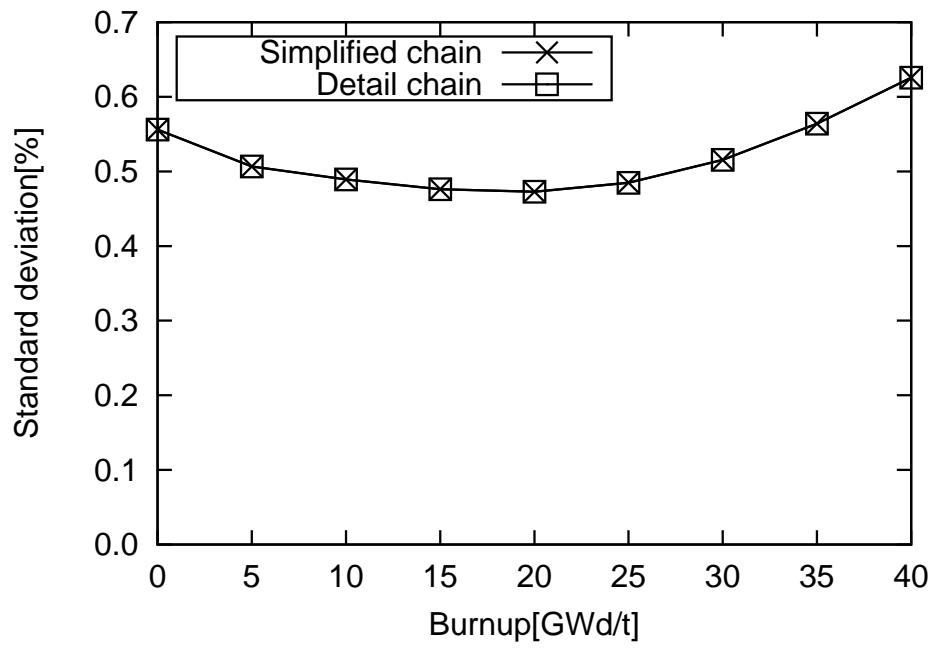


図 2.5: 各燃焼チェーンにおける中性子増倍率の不確かさ

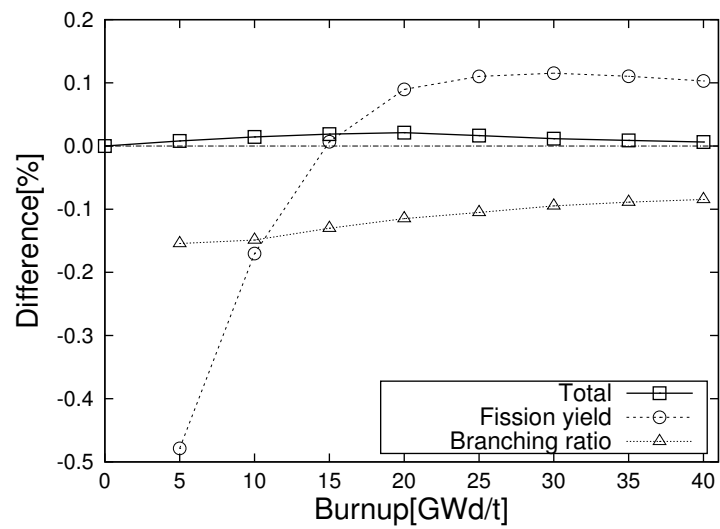


図 2.6: 燃焼チェーンの簡易化に伴う中性子増倍率の不確かさの変化

3 Gd を含むマルチセル体系における k_{inf} に対する不確かさ評価

3.1 計算条件

計算体系は、ピンセル体系と、中心に Gd_2O_3 燃料、その周りに 8 本の UO_2 燃料を配置した 3×3 セルモデルを用いた。図 3.1 に体系図を示す。 Gd_2O_3 燃料、被覆管、減速材の組成及び各領域の温度は同じものを用いたが、モデルの寸法及び UO_2 燃料の組成が異なる。表 3.1 に各寸法を示す。全ての方向で境界条件は完全反射条件とした。なお、燃料ペレットと被覆管の間のギャップは無いものとして計算した。表 3.2 に UO_2 燃料の原子数密度を示す。 UO_2 燃料のウラン濃縮度は濃縮度 3.4wt%、 Gd_2O_3 燃料のウラン濃縮度は 2.63wt%、ガドリニウム濃度は 10wt% である。何れのモデルも共鳴計算はピンセルモデルで行った。核データ及び不確かさデータは、2 章で作成したものを使用した。燃焼条件は以下の通りとした。

- 線出力密度は燃料ピン 1 本当たり 179W/cm で一定
- Gd_2O_3 燃料の燃焼領域は等面積で 8 分割
- 感度係数は 5GWd/t 刻みで 40GWd/t まで計算
- 燃焼チェーンは 2 章と同様に、FP を 138 核種に絞った簡易化燃焼チェーン

以上の条件の下、感度係数の計算及び不確かさ計算を行った。さらに、各燃焼点の燃焼後に 5 年もしくは 10 年の冷却期間を設けた計算を行った。加えて、核分裂生成物の断面積の不確かさ情報は JENDL に収録されていないため、全エネルギー領域の捕獲断面積に一律に 10% もしくは 30%、エネルギー間の相関が 1.0 の不確かさを仮定した計算も行った。



図 3.1: 計算体系

表 3.1: ピンセル及び 3 × 3 セルモデルの寸法

内容	寸法 [cm]
燃料棒ピッチ	1.265
ペレット外径	0.824
燃料被覆管内径	0.824
燃料被覆管外径	0.952
案内管内径	1.100
案内管外径	1.200

表 3.2: UO₂ 燃料の組成

核種	原子数密度 [/barn/cm]
U-235	7.753E-4
U-238	2.175E-2
O-16	4.505E-2

3.2 計算結果

核分裂生成物の捕獲断面積の不確かさをする場合としない場合のそれぞれで燃焼後の冷却を行う場合と行わない場合の 4 パターンの結果を示す。

3.2.1 核分裂生成物の反応断面積の不確かさを仮定しない場合 (冷却無し)

図 3.2 に核データに起因する中性子増倍率の不確かさを示す。

ピンセルモデルの場合、不確かさは燃焼を通して約 0.5% から 0.6% であった。燃焼に伴い、始めに不確かさが減少し、20GWd/t を境に増加した。

図 3.3 にピンセルモデルにおける中性子増倍率の不確かさの主な要因を示す。20GWd/t までの不確かさの減少は、U-238 の捕獲断面積による不確かさが減少していることが原因である。図 3.4 にピンセルモデルにおける U-238 の捕獲断面積に対する中性子増倍率の感度係数を示す。U-238 の捕獲断面積に対する感度は、中性子捕獲により中性子増倍率を変化させる直接的感度と、Pu 生成を介して中性子増倍率を変化させる間接的感度が打ち消し合う。燃焼に伴う Pu-239 の生成により、間接的感度が大きくなり、U-238 の捕獲断面積に対する感度が小さくなる。その結果、燃焼に伴う不確かさの減少が起きた。一方、図 3.3 より、燃焼後期の不確かさの増加の原因は、Pu-239 及び Pu-241 の断面積による不確かさが燃焼後期で増加することが原因である。図 3.5 に Pu-239 及び Pu-241 の燃焼に伴う核種数密度の変化を示す。これらの高次のプルトニウムは、燃焼前には存在しないが、燃焼に伴い増加していくため、燃焼後期中に中性子増倍率に影響を与える。

3×3 セルモデルの場合も、不確かさは燃焼を通して約 0.5% から 0.6% であった。どの燃焼点でもピンセルモデルの場合と比べて僅かに不確かさが大きかった。また、不確かさの燃焼変化がピンセルモデルの場合と大きく異なった。異なる点は、15GWd/t から 20GWd/t 辺りで不確かさが増加する点である。このモデル間の不確かさの燃焼変化の相違は、中性子束エネルギースペクトルの変化による影響の大きさの違いに起因する。

ピンセルモデルでは、U-238 の捕獲断面積に対する間接的感度が燃焼により増加する。しかし、3×3 セルモデルでは 15GWd/t から 20GWd/t 辺りで U-238 の捕獲断面積に対する間接的感度が減少する。図 3.7 に 3×3 セルモデルにおける U-238 の捕獲断面積に対する中性子増倍率の感度係数を示す。15GWd/t から 20GWd/t 辺りで間接的感度が減少する原因はまず、燃焼に伴う熱中性子を吸収しやすい核種である Pu-239 の増加により中性子エネルギースペクトルが硬化する。次に中性子エネルギースペクトルの硬化により、ガドリニウムの中性子吸収が減り、ガドリニウムが燃え残ることになる。ガドリニウムが残ることで中性子増倍率は小さくなるため、U-238 の捕獲断面積に対する間接的感度が減少する。その結果、U-238 の捕獲断面積に対する中性子増倍率の感度が大きくなったため、不確かさがピンセルモデルとは異なる挙動をした。

さらに、図 3.8、図 3.9 にデータ毎が起因する中性子増倍率の不確かさを示す。ピンセルモデル、3×3 セルモデル共に反応断面積による不確かさが大半を占めることが分かった。また、核分裂収率に起因する不確かさは燃焼に伴う増加が見られた。これは、核分裂生成物が増加していき、中性子増倍率に与える影響が強くなる事実と一致する。崩壊分岐比、核分裂収率として表れる崩壊分岐比、半減期に起因する不確かさは燃焼を通してほぼ一定であった。

図 3.10 にピンセルモデルと 3×3 セルモデルの各燃焼点における核データに起因する中性子増倍率の相関行列を示す。どちらのモデルでも近い燃焼点同士の相関が強く、遠い燃焼点同士の相関が弱い傾向が見られた。3×3 セルモデルで、遠い燃焼点同士の相関がピンセルモデルと比べて僅かに強かった。また、図 3.11、図 3.12 にピンセルモデル、3×3 セルモデルそれぞれの相関行列をデータ毎に示す。不確かさの大半が反応断面積によるものであるため、反応断面積に起因する相関行列と合計した核データに起因する相関行列はほとんど同じ傾向となった。核分裂収率に起因する相関行列は、近い燃焼点同士ほど相関が強かった。反応断面積に起因する相関行列と比べると、遠い燃焼点同士の相関が強い傾向があった。また、3×3 セルモデルの核分裂収率に起因する相関はピンセルモデルのものとは比べると、遠い燃焼点同士の相関が強かった。その他のデータに起因する相関に関しては、どの燃焼点も 1 に近かった。

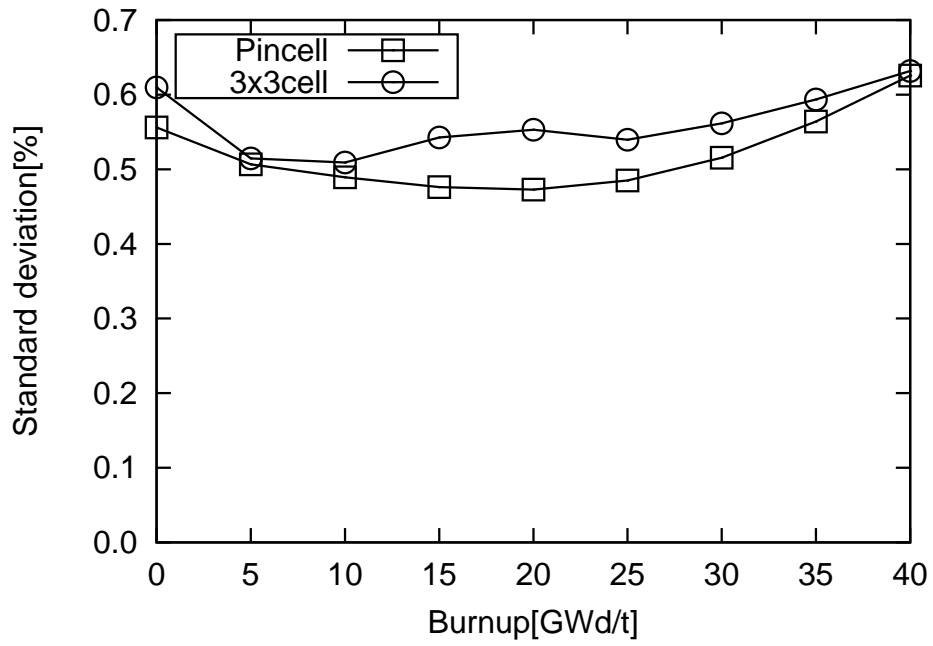


図 3.2: 核データによる中性子増倍率の不確かさ

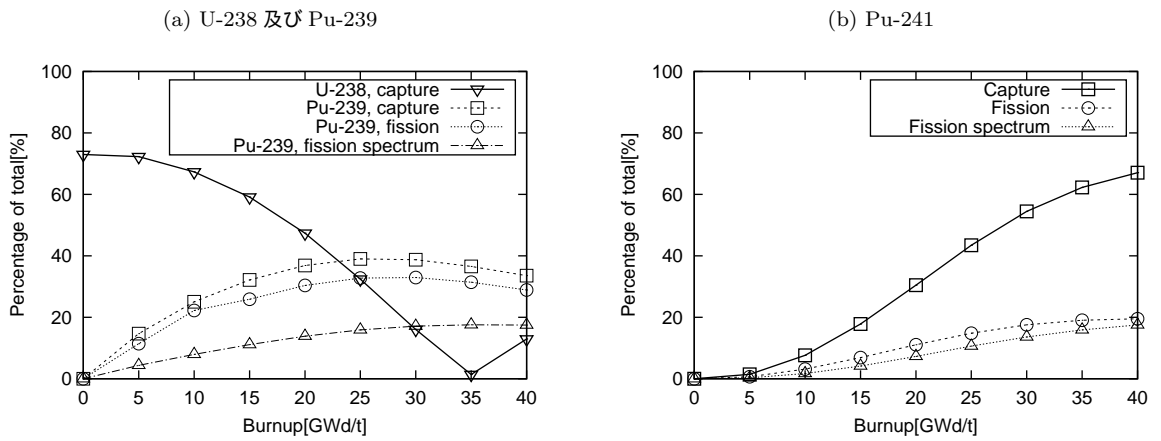


図 3.3: ピンセルモデルにおける中性子増倍率の不確かさの主要因

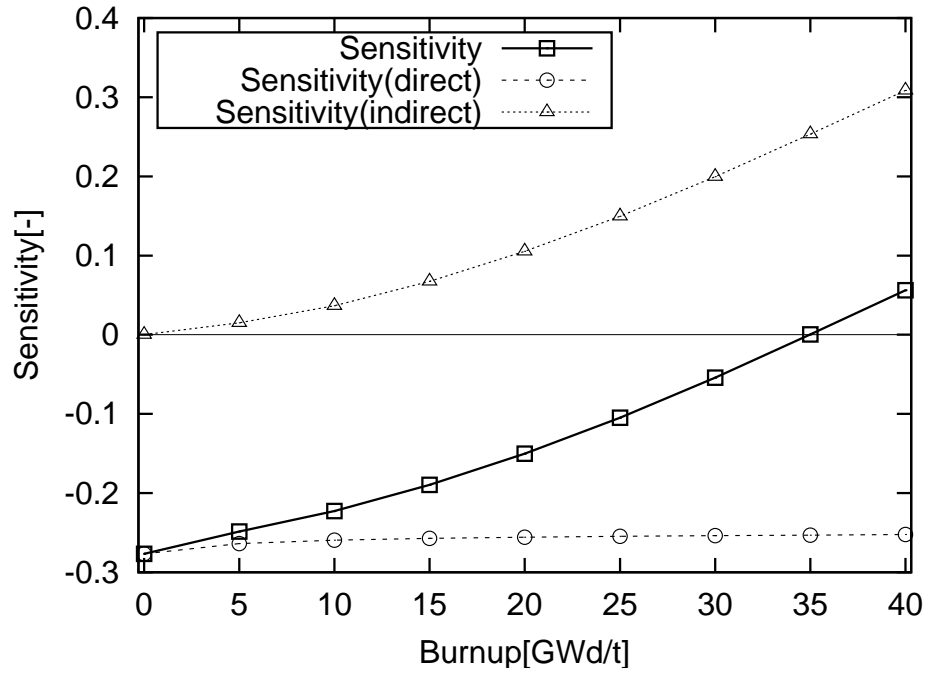


図 3.4: ピンセルモデルにおける U-238 の捕獲断面積に対する中性子増倍率の感度係数

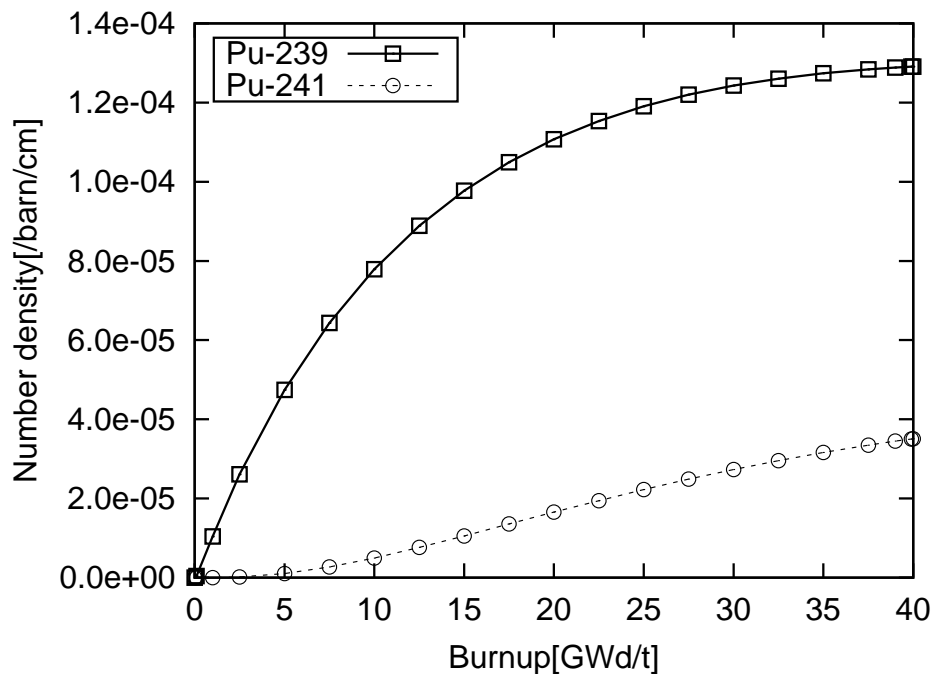


図 3.5: Pu-239 及び Pu-241 の数密度変化

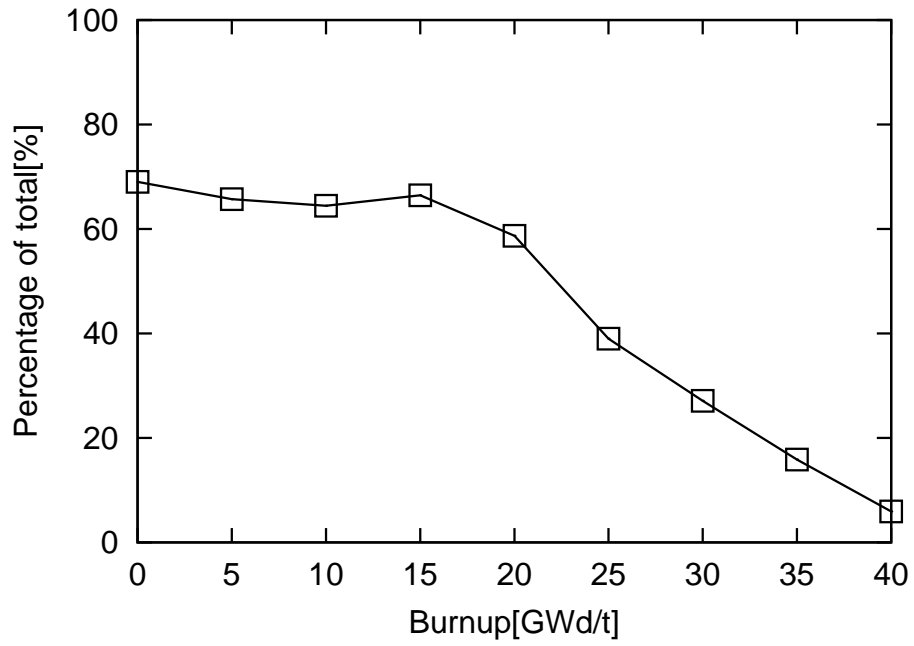


図 3.6: 3×3 セルモデルにおける U-238 の捕獲断面積に起因する中性子増倍率の割合

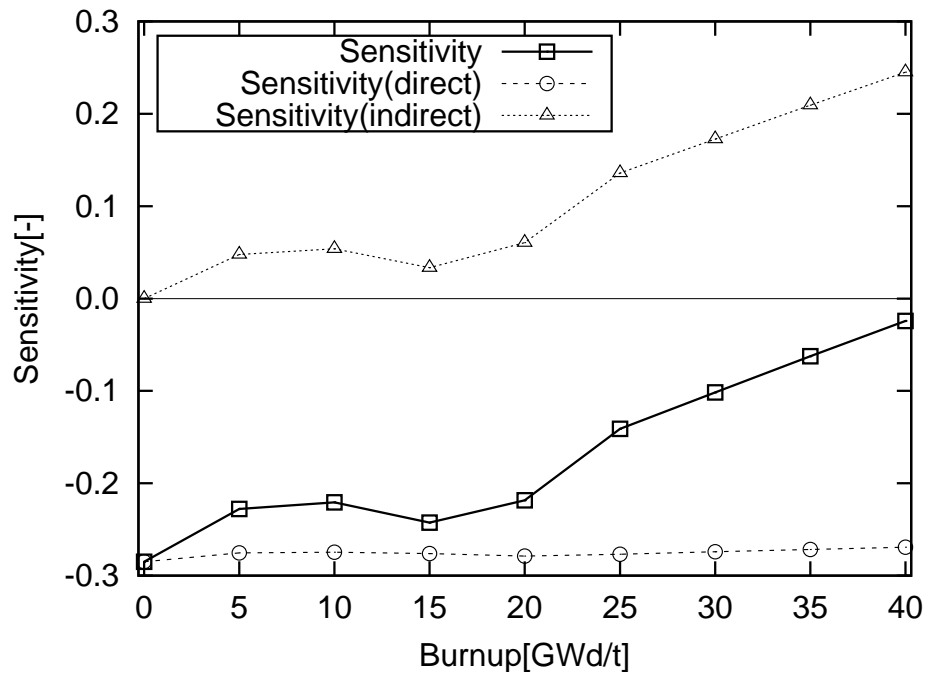


図 3.7: 3×3 セルモデルにおける U-238 の捕獲断面積に対する中性子増倍率の感度係数

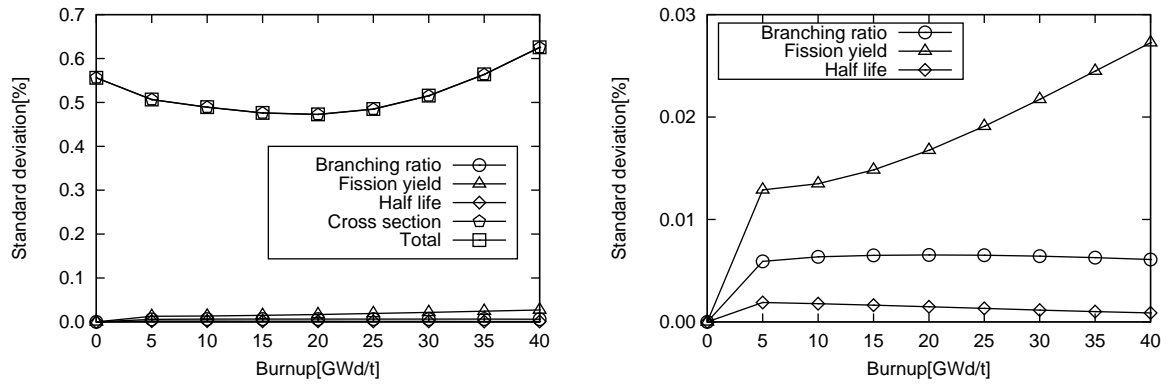


図 3.8: ピンセルモデルにおける核データによる中性子増倍率の不確かさ (右図は小さい値を拡大したもの)

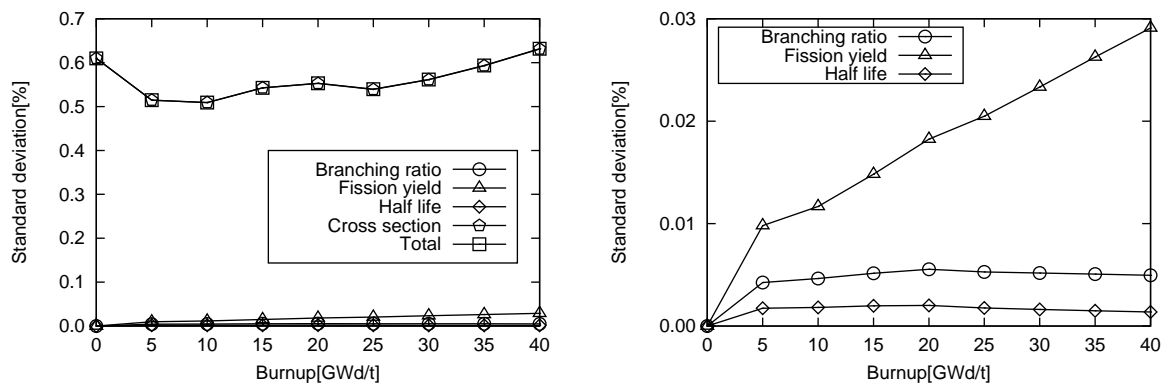


図 3.9: 3×3 モデルにおける核データによる中性子増倍率の不確かさ (右図は小さい値を拡大したもの)

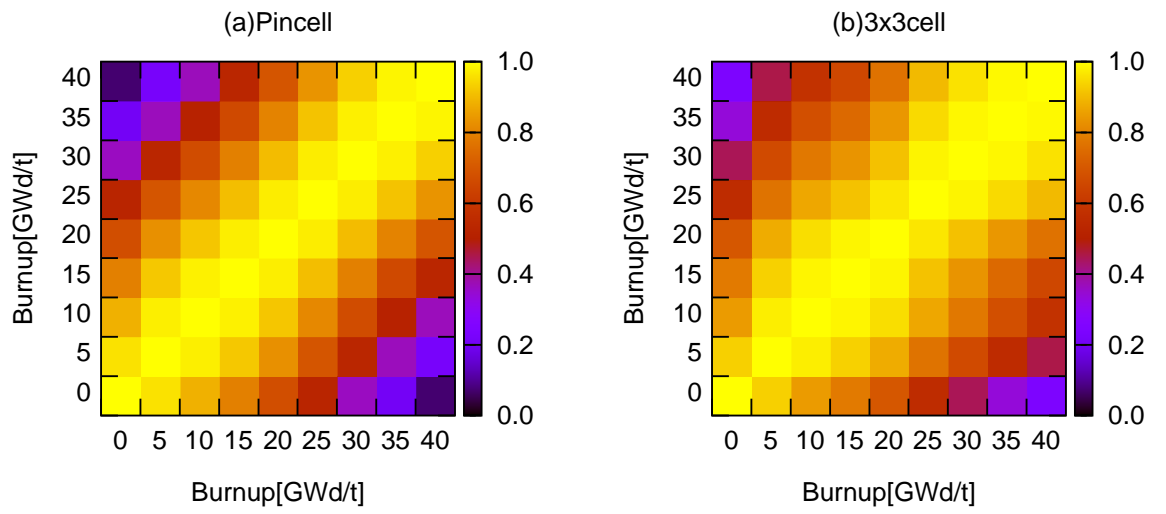


図 3.10: 各燃焼点における核データに起因する中性子増倍率の相関行列

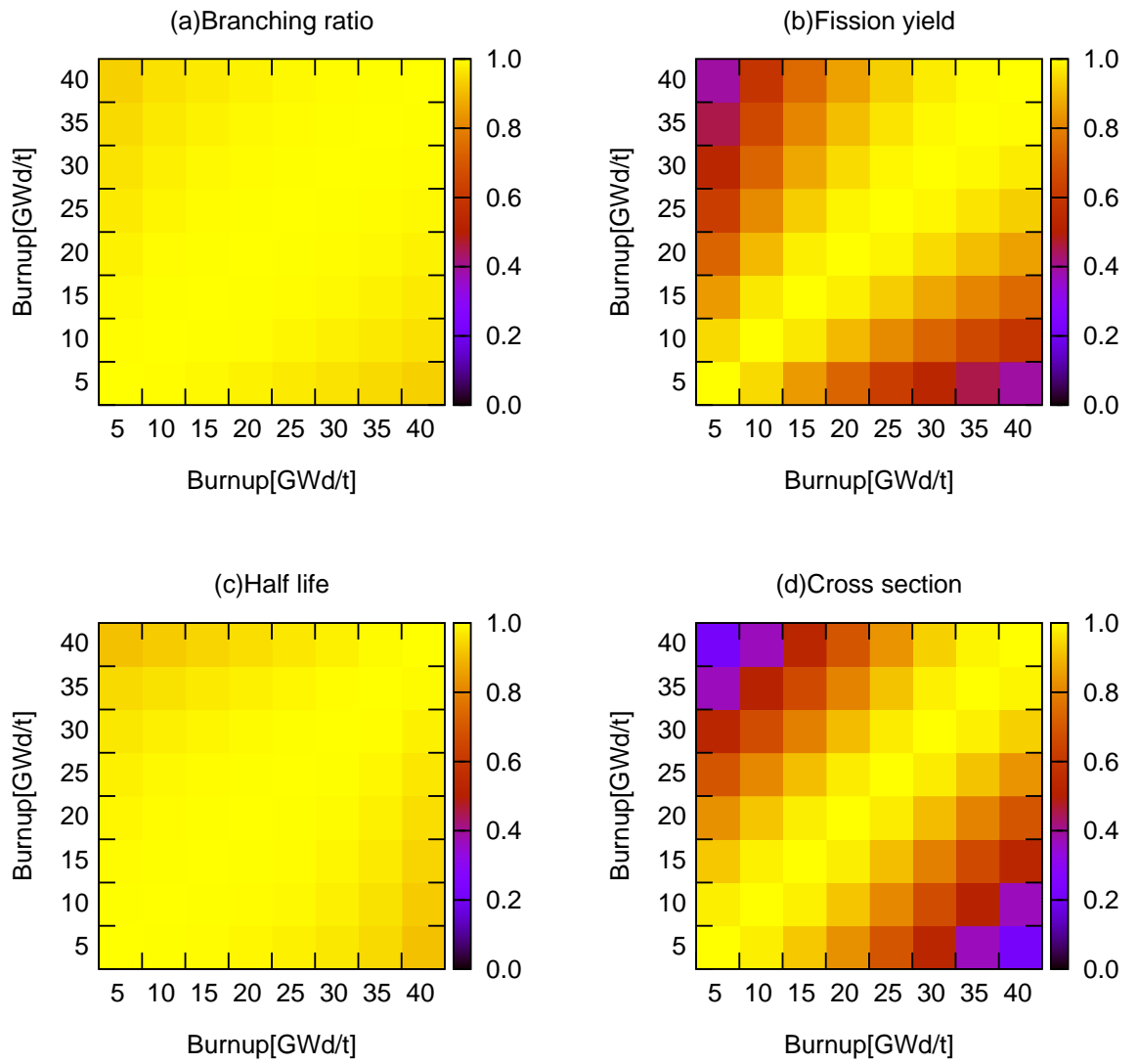


図 3.11: ピンセルモデルの各燃焼点における中性子増倍率の相関行列

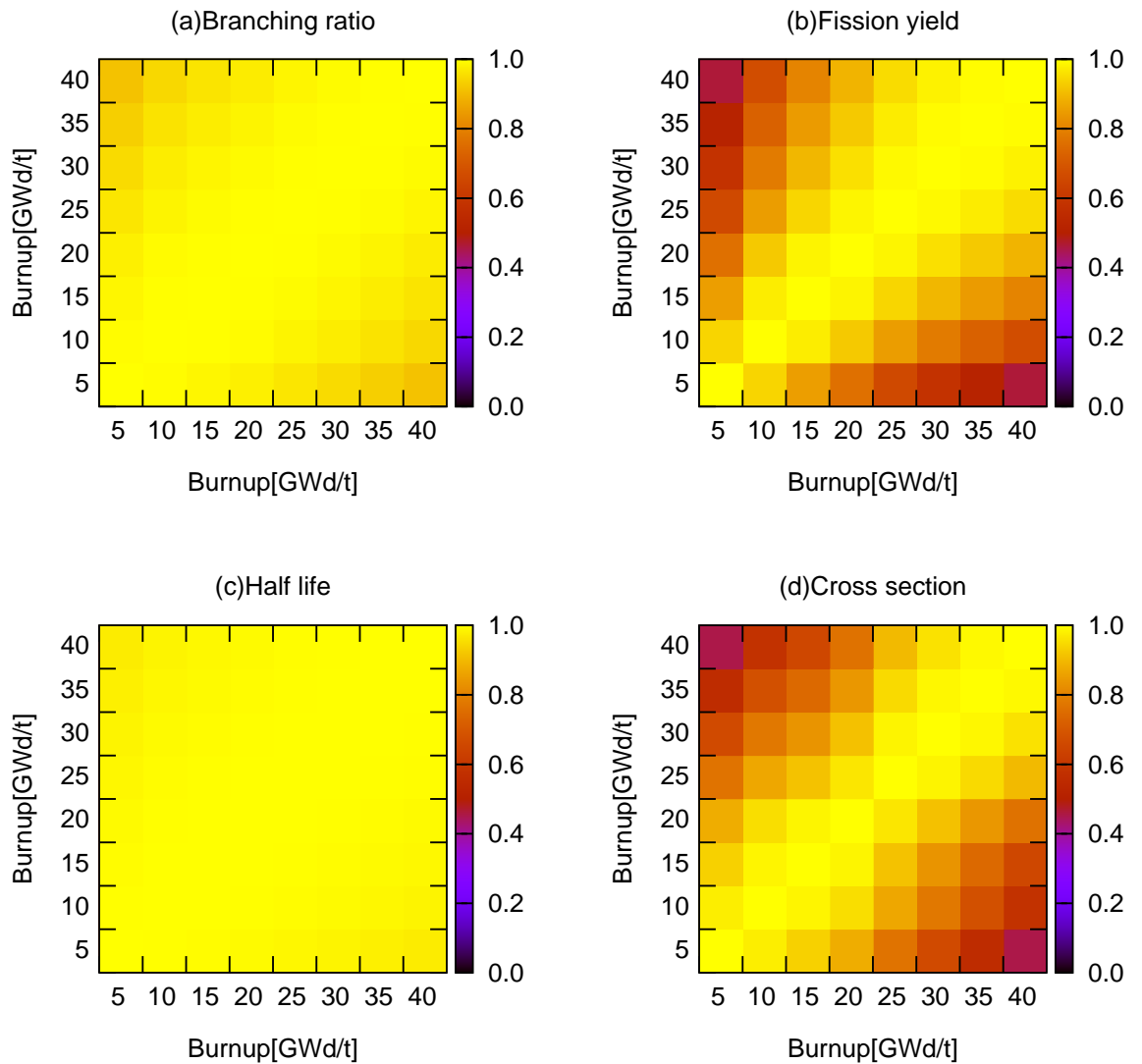


図 3.12: 3×3 セルモデルの各燃焼点における中性子増倍率の相関行列

3.2.2 核分裂生成物の反応断面積の不確かさを仮定しない場合 (冷却有り)

図 3.13 に燃焼後に冷却期間を設けた場合の核データに起因する中性子増倍率の不確かさを示す。ピンセルモデルでは、5GWd/t から 30GWd/t で冷却期間が長いほど不確かさが大きくなった。30GWd/t を越えると冷却による不確かさの増加は小さくなり、以降の燃焼度では冷却により不確かさは減少した。3×3 セルモデルでは、30GWd/t まで冷却期間が長いほど不確かさが大きくなった。以降の燃焼度では、5 年の冷却期間により不確かさが減少し、10 年の冷却期間により不確かさは増加した。冷却による変化を考える上で重要となる核種が Pu-241 と Am-241 である。図 3.14 に Pu-241 及び Am-241 の捕獲断面積による中性子増倍率の不確かさの冷却による変化を示す。Pu-241 は他のアクチノイド核種と比べて捕獲断面積が大きく、中性子増倍率に与える影響が強い。また、Pu-241 は半減期が約 14 年であり、冷却中に崩壊する。冷却によって Pu-241

の捕獲断面積による中性子増倍率の不確かさが小さくなる。Am-241 は強吸収核種であり、中性子増倍率に与える影響が強い。Pu-241 の娘核種であり、冷却中に増加するため、冷却によって Am-241 の捕獲断面積による中性子増倍率の不確かさが大きくなる。図 3.15 に Pu-241 及び Am-241 の捕獲断面積に対する中性子増倍率の感度の冷却による変化を示す。Pu-241 の捕獲断面積に対する中性子増倍率の感度の大きさは冷却により小さくなり、Am-241 の捕獲断面積に対する中性子増倍率の感度の大きさは冷却により大きくなることから分かる。燃焼初期から中期にかけては Am-241 の効果が大きく、燃焼後期では Pu-241 の効果が大きくなったため図 3.13 のような結果となったと考えられる。燃焼度によって、Pu-241 と Am-241 の効果の大きさが変化するのは、燃焼による中性子束エネルギースペクトルの変化によるものであると予想できる。つまり、スペクトルが比較的軟かい燃焼初期は Am-241 の効果が大きく、スペクトルが硬い燃焼後期は Pu-241 の効果が大きいと考えられる。さらに、3×3 セルモデルで、Pu-241 の効果が表れるのがピンセルモデルと比べると高燃焼度となったのは、ガドリニウムによって U-238 から Pu-239 の転換が阻害され、中性子束エネルギースペクトルの硬化が起きにくかったためであると考えられる。

また、図 3.16 から 3.18 に燃焼後に冷却期間を設けた場合の中性子増倍率の不確かさを起因するデータ毎に示す。崩壊分岐比、核分裂収率として現れる崩壊分岐比に起因する不確かさに関しては、冷却により小さくなった。核分裂収率に起因する不確かさは、冷却による変化は小さかった。

図 3.19、図 3.24 にピンセルモデル、3×3 セルモデルそれぞれの各燃焼点の冷却後における核データに起因する中性子増倍率の相関行列を示す。冷却をしない場合と比べると、どちらのモデルも全体的に僅かに相関が強い傾向が見られた。図 3.20 から図 3.23、図 3.25 から図 3.28 にピンセルモデル、3×3 セルモデルそれぞれの相関行列を起因するデータ毎に示す。崩壊分岐比に起因する中性子増倍率の相関行列は、どちらのモデルも全体的に相関が弱くなった。特に 3×3 セルモデルでは大きく変化した。核分裂収率に起因する中性子増倍率の相関行列は、どちらのモデルでも冷却によって全体的に相関が僅かに強くなった。3×3 セルモデルでは大きな変化は見られなかった。半減期に起因する中性子増倍率の相関行列は、どちらのモデルも全体的に弱まった。

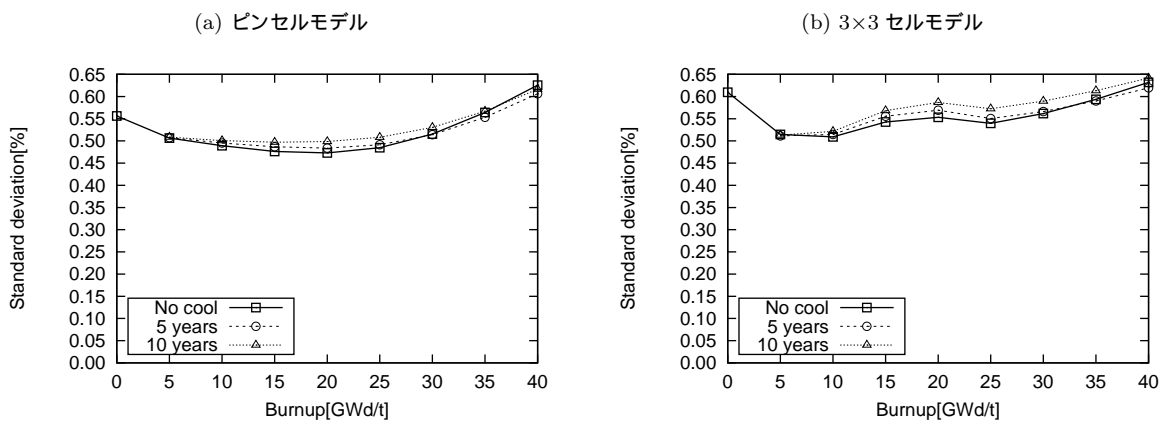


図 3.13: 冷却後の核データによる中性子増倍率の不確かさ

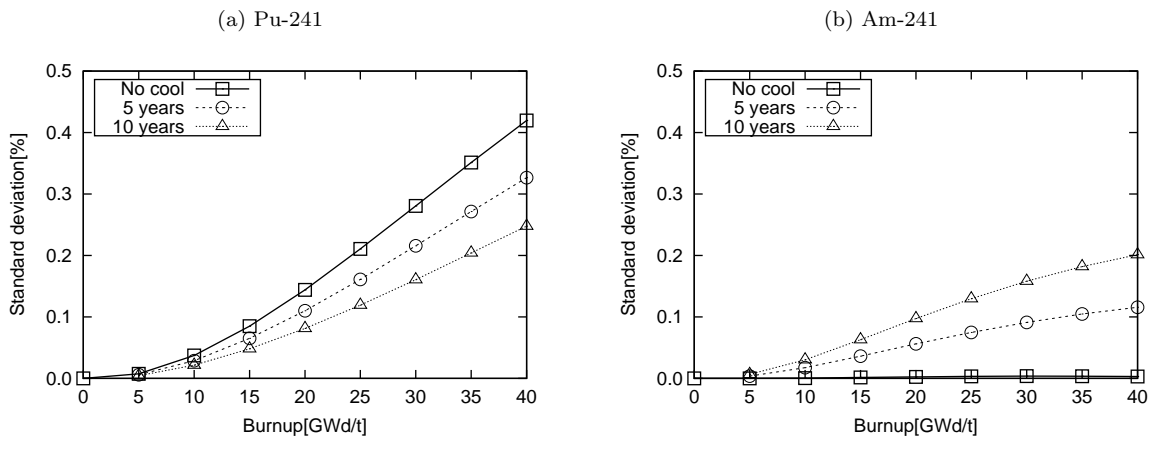


図 3.14: 冷却後の Pu-241 及び Am-241 の捕獲断面積による中性子増倍率の不確かさ

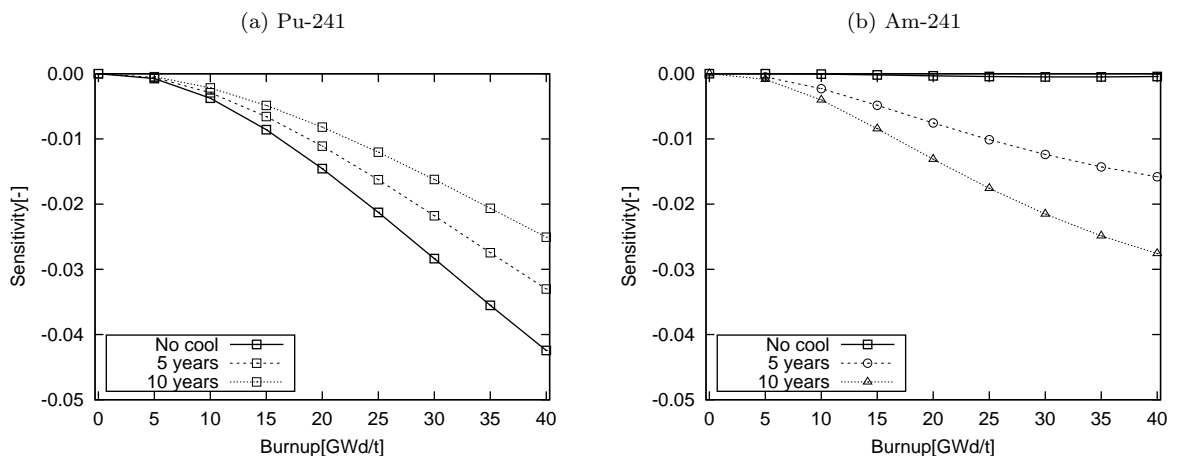


図 3.15: 冷却後の Pu-241 及び Am-241 の捕獲断面積に対する中性子増倍率の感度係数

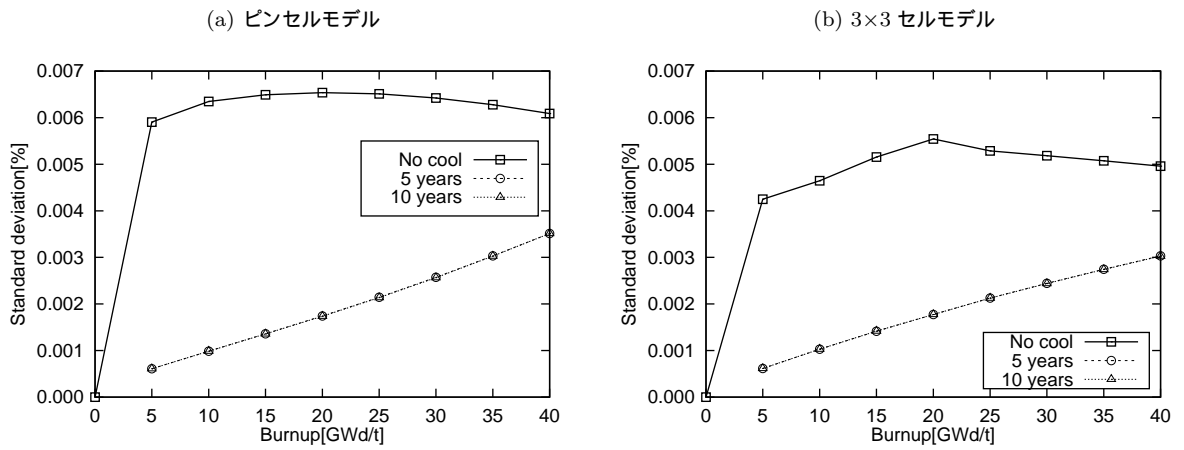


図 3.16: 冷却後の崩壊分岐比データによる中性子増倍率の不確かさ

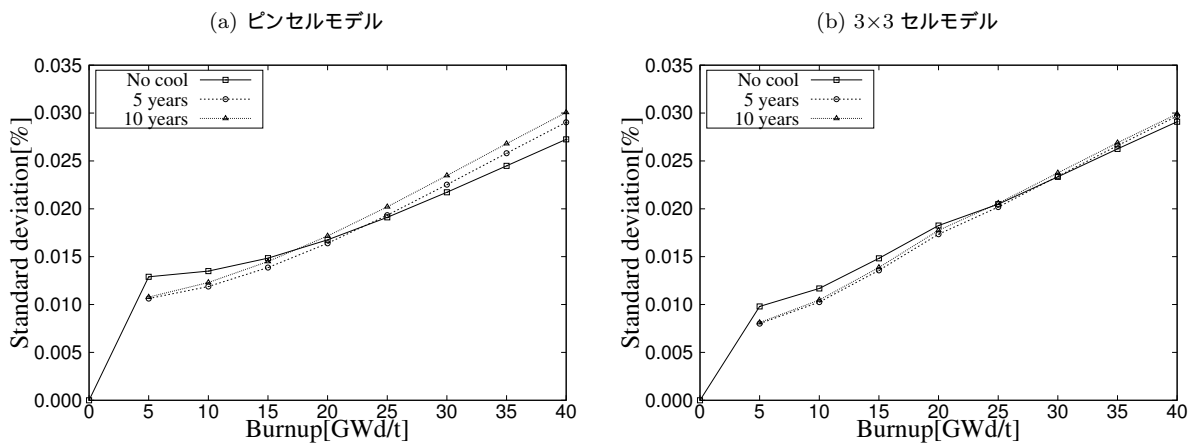


図 3.17: 冷却後の核分裂収率データによる中性子増倍率の不確かさ

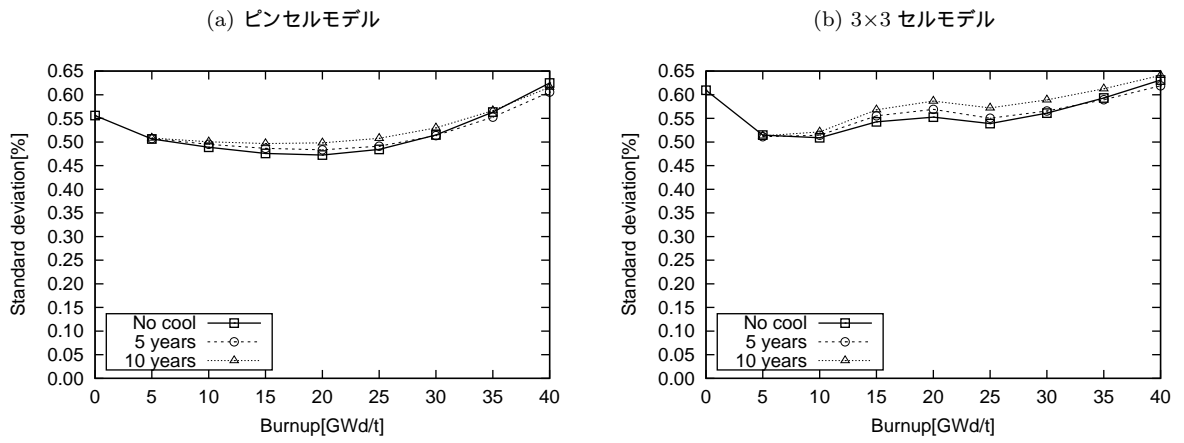


図 3.18: 冷却後の反応断面積データによる中性子増倍率の不確かさ

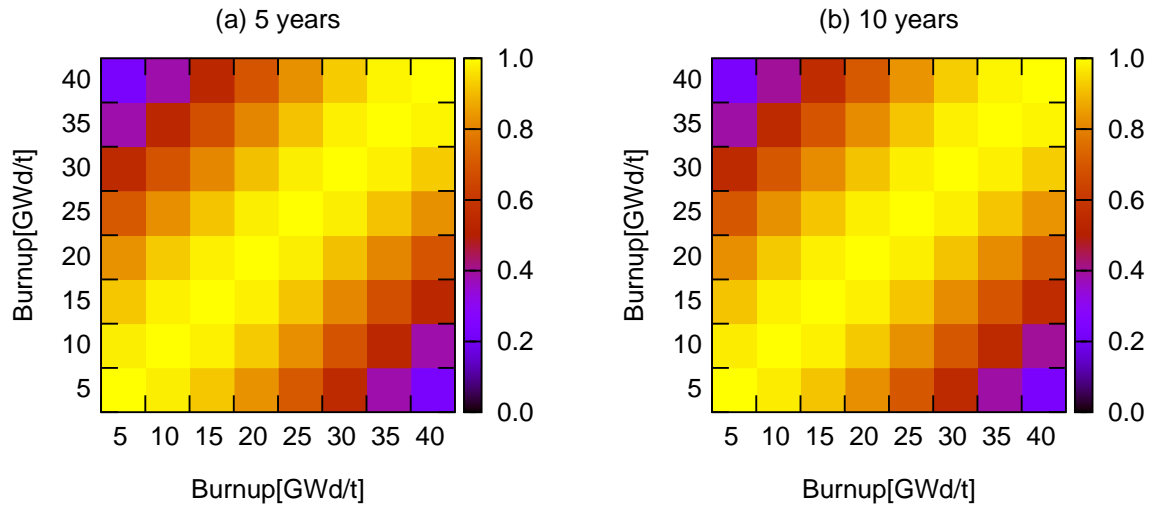


図 3.19: ピンセル体系の各燃焼点の冷却後における核データに起因する中性子増倍率の相関行列

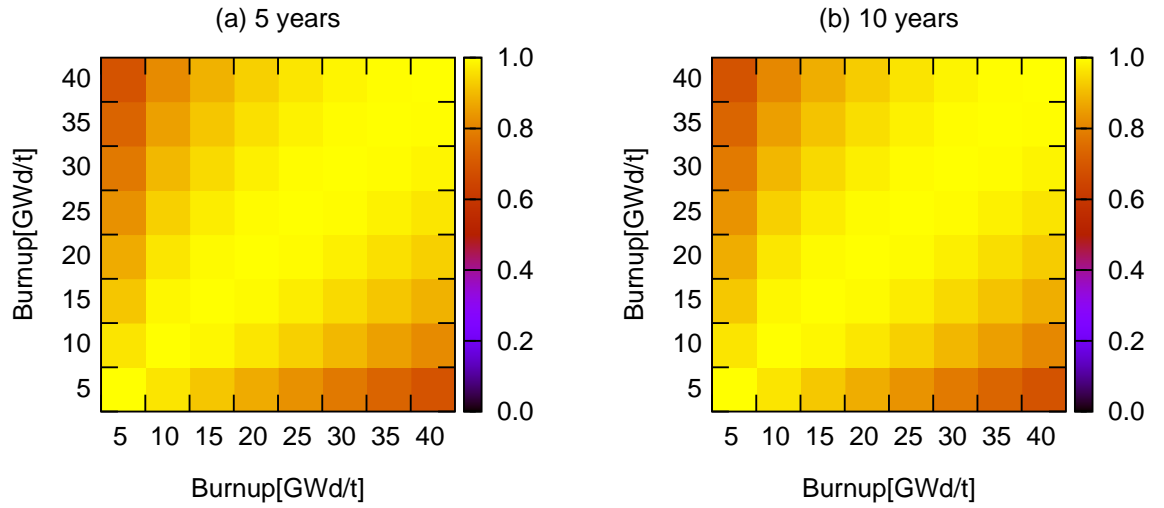


図 3.20: ピンセル体系の各燃焼点の冷却後における崩壊分岐比に起因する中性子増倍率の相関行列

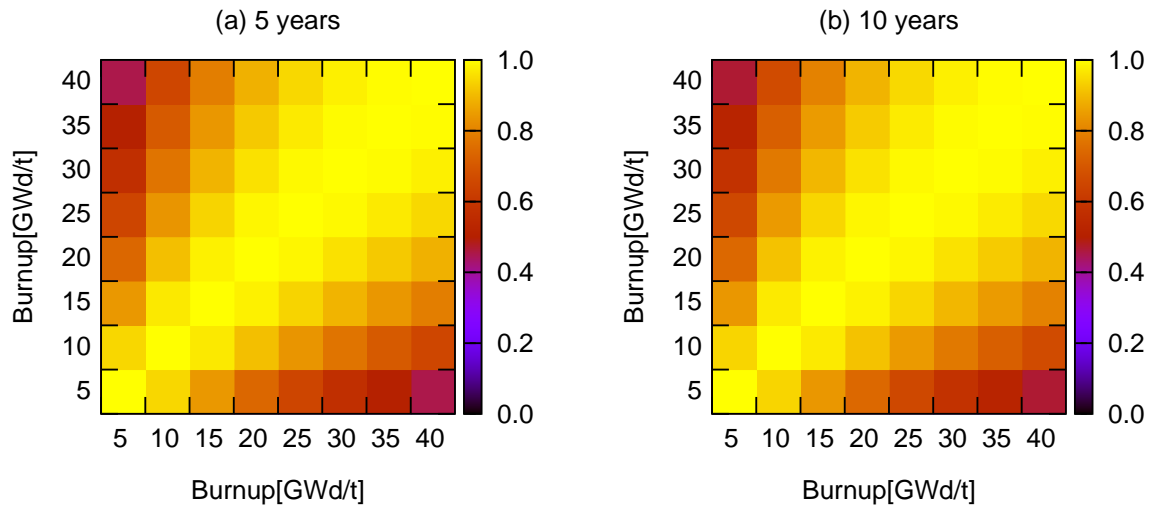


図 3.21: ピンセル体系の各燃焼点の冷却後における核分裂収率に起因する中性子増倍率の相関行列

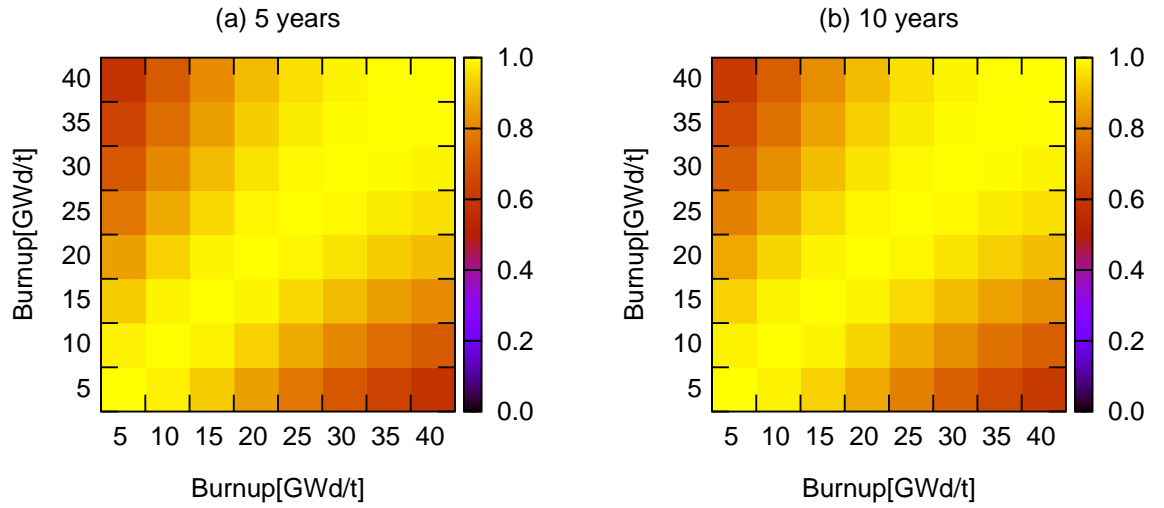


図 3.22: ピンセル体系の各燃焼点の冷却後における半減期に起因する中性子増倍率の相関行列

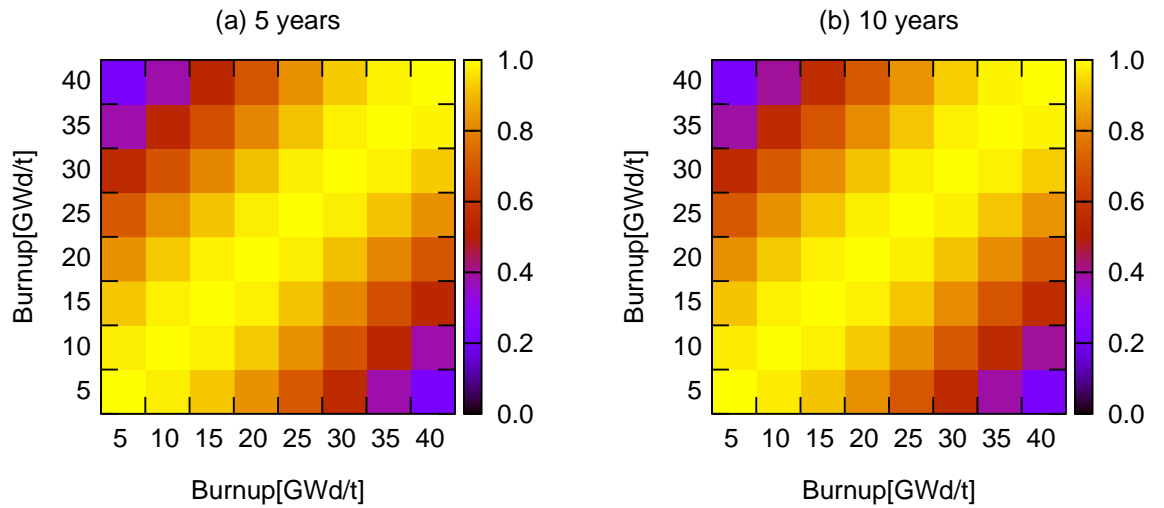


図 3.23: ピンセル体系の各燃焼点の冷却後における反応断面積に起因する中性子増倍率の相関行列

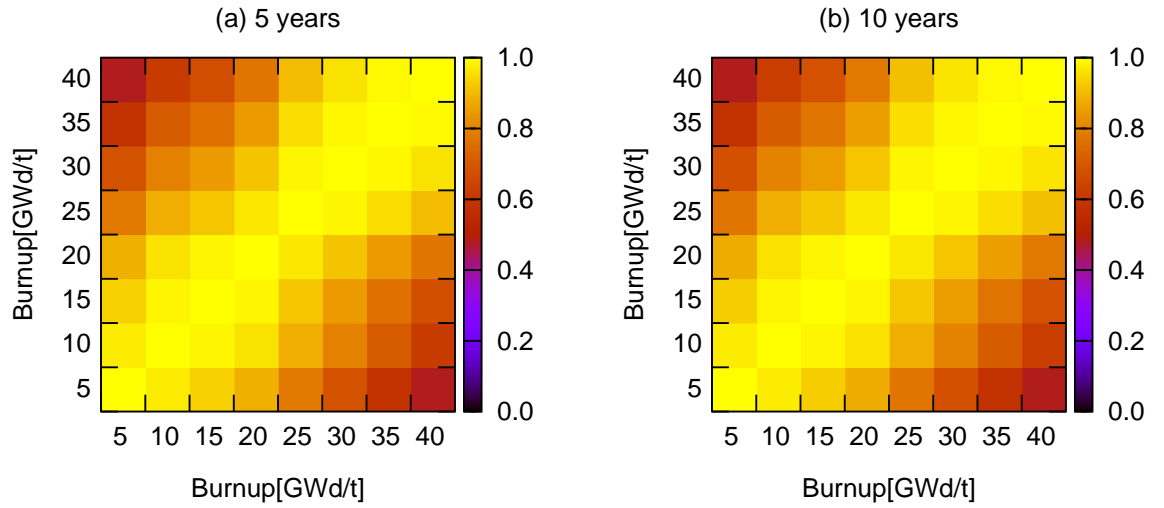


図 3.24: 3×3 セルモデルの各燃焼点の冷却後における核データに起因する中性子増倍率の相関行列

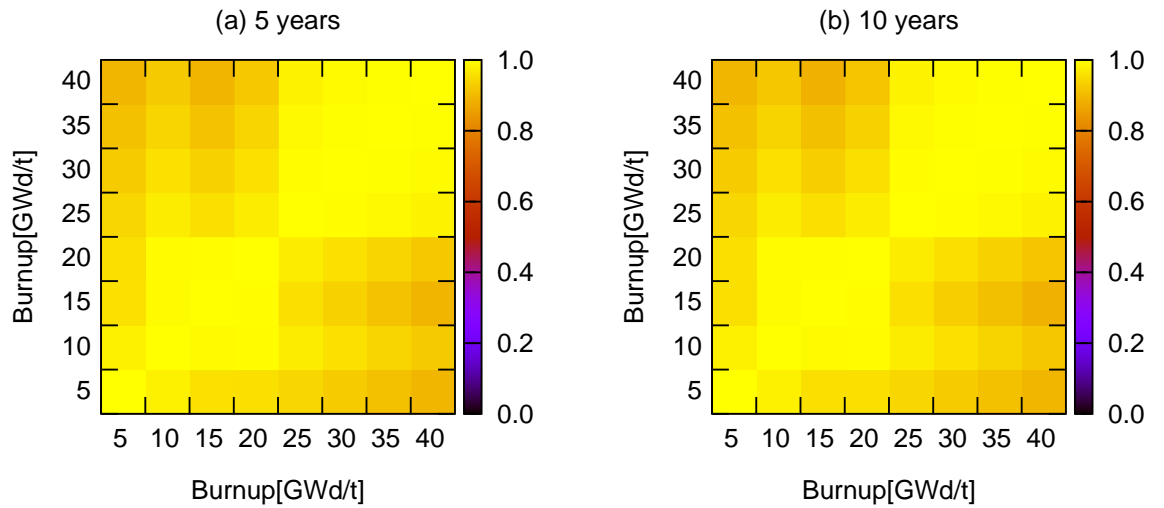


図 3.25: 3×3 セルモデルの各燃焼点の冷却後における崩壊分岐比に起因する中性子増倍率の相関行列

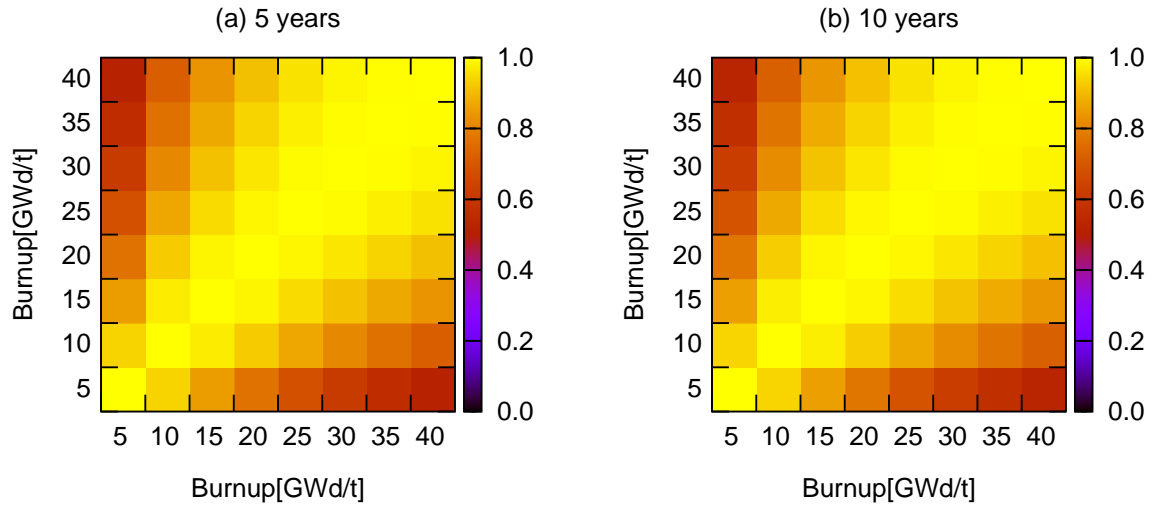


図 3.26: 3×3 セルモデルの各燃焼点の冷却後における核分裂収率に起因する中性子増倍率の相関行列

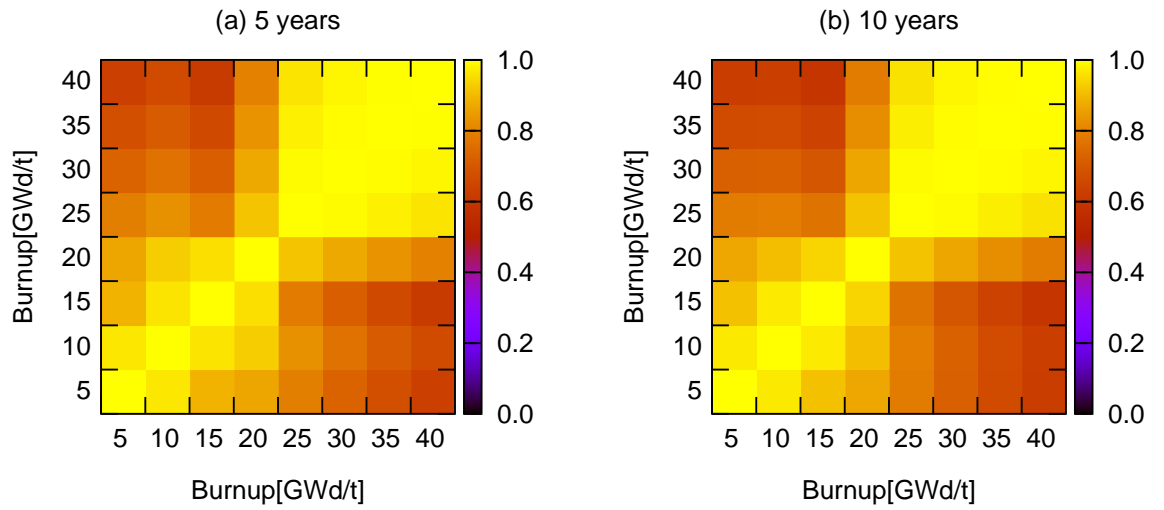


図 3.27: 3×3 セルモデルの各燃焼点の冷却後における半減期に起因する中性子増倍率の相関行列

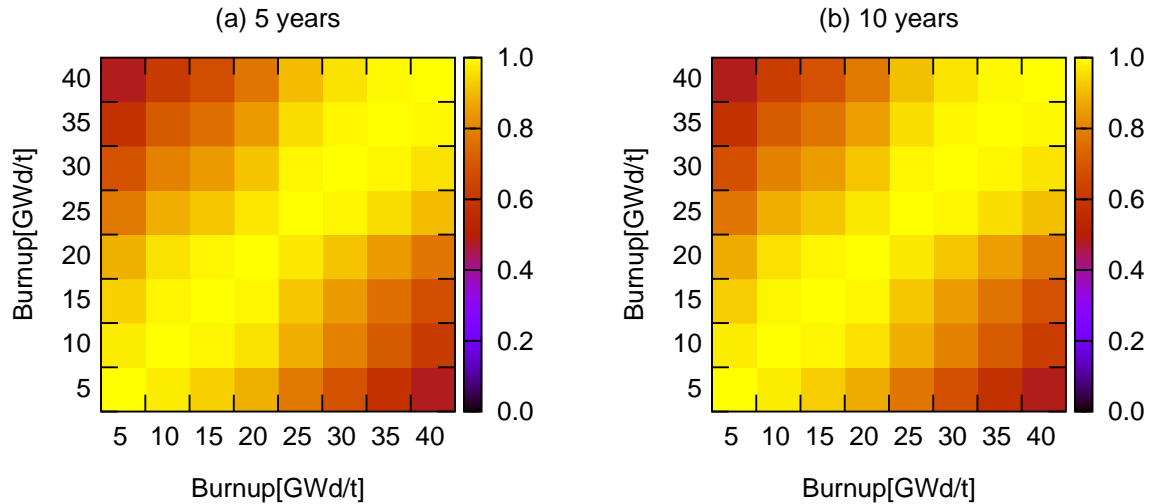


図 3.28: 3×3 セルモデルの各燃焼点の冷却後における反応断面積に起因する中性子増倍率の相関行列

3.2.3 FP 断面積データに不確かさを仮定した場合 (冷却無し)

図 3.29 に核分裂生成物の捕獲断面積の不確かさを仮定した場合の中性子増倍率の不確かさを示す。ピンセルモデルの場合、核分裂生成物の少ない燃焼初期は、核分裂生成物の断面積の不確かさの効果は弱い。燃焼により核分裂生成物が増加していくにつれて、核分裂生成物の断面積の不確かさの効果が大きくなる傾向が見られた。核分裂生成物の捕獲断面積を仮定したことによる中性子増倍率の不確かさの増加は、25GWd/t で最大となり 10% の仮定で約 5%、30% の仮定で 41% であった。

3×3 セルモデルの場合、初期組成にガドリニウムが含まれるため、燃焼初期の核分裂生成物の断面積の不確かさの効果は強い。ガドリニウムは減少していくが、他の核分裂生成物が生成されるため、核分裂生成物の断面積の不確かさの効果は、10GWd/t 付近で最小となる結果となった。核分裂生成物の捕獲断面積を仮定したことによる中性子増倍率の不確かさの増加は、0GWd/t で最大となり 10% の仮定で約 33%、30% の仮定で約 181% であった。

図 3.30、図 3.31 に Gd-155、Gd-157 を除く核分裂生成物の捕獲断面積に 10%、30% の不確かさを仮定した場合の中性子増倍率の不確かさをそれぞれ示す。ピンセルモデルの場合、全ての核分裂生成物の捕獲断面積に不確かさを仮定した場合と Gd-155、Gd-157 を除いた場合の中性子増倍率の不確かさにほとんど違いは見られなかった。従って、核分裂生成物として生成する Gd-155、Gd-157 の捕獲断面積の不確かさの中性子増倍率への影響は小さいといえる。

3×3 セルモデルでは、Gd-155、Gd-157 以外の核分裂生成物の捕獲断面積を仮定することによる中性子増倍率の不確かさの増加は、全ての核分裂生成物の捕獲断面積を仮定した場合と比べると少なかった。特に小さい燃焼度では、相違が顕著であった。核分裂生成物の捕獲断面積を仮定した場合の中性子増倍率の不確かさの増加の多くが Gd-155、Gd-157 によるものであったためである。全ての核分裂生成物の捕獲断面積を仮定した場合との差異が 10GWd/t で一度小さくなり、15GWd/t、20GWd/t で大きくなっていることは、10GWd/t で一度 Gd-155、Gd-157 による影響が小さくなり 15GWd/t、20GWd/t で再び大きくなったことを表してい

る。図 3.32 に 3×3 セルモデルにおける Gd-155 及び Gd-157 の捕獲断面積に対する中性子増倍率の感度係数を示す。Gd-155 及び Gd-157 の捕獲断面積に対する感度は、中性子捕獲により中性子増倍率を変化させる直接的感度と、毒物が他核種に変わることで中性子増倍率を変化させる間接的感度が打ち消し合う。これらの核種の燃焼による数密度の変化により、Gd-155 及び Gd-157 の捕獲断面積に対する直接的感度の大きさが減少、間接的感度の大きさが増加することで、図 3.32 のような感度となる。その結果、Gd-155、Gd-157 の捕獲断面積の不確かさが中性子増倍率へ与える影響が 10GWd/t で一度小さくなり、15GWd/t、20GWd/t で再び大きくなったと考えられる。25GWd/t 以降は、ピンセルモデルの場合と同様の結果となった。

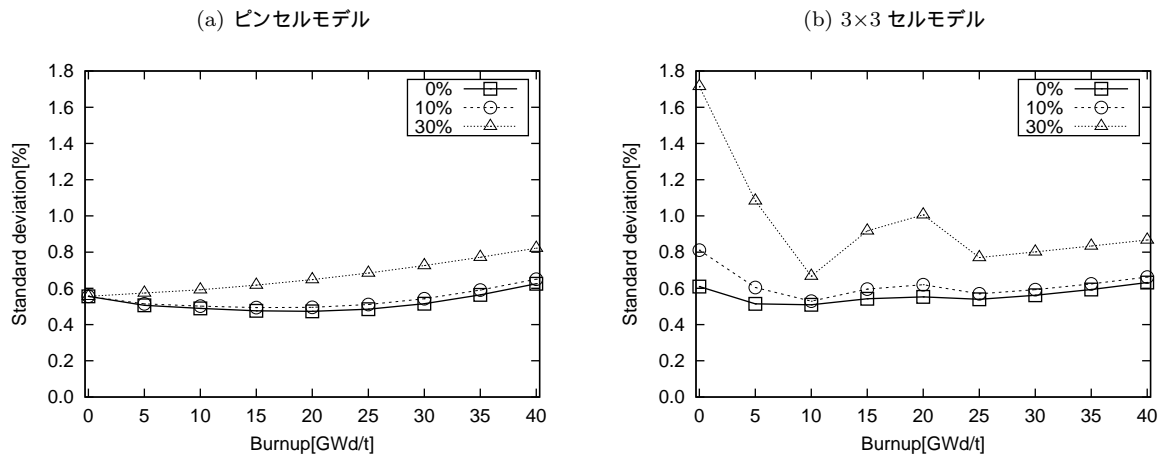


図 3.29: 核分裂生成物の捕獲断面積を仮定した場合の中性子増倍率の不確かさ

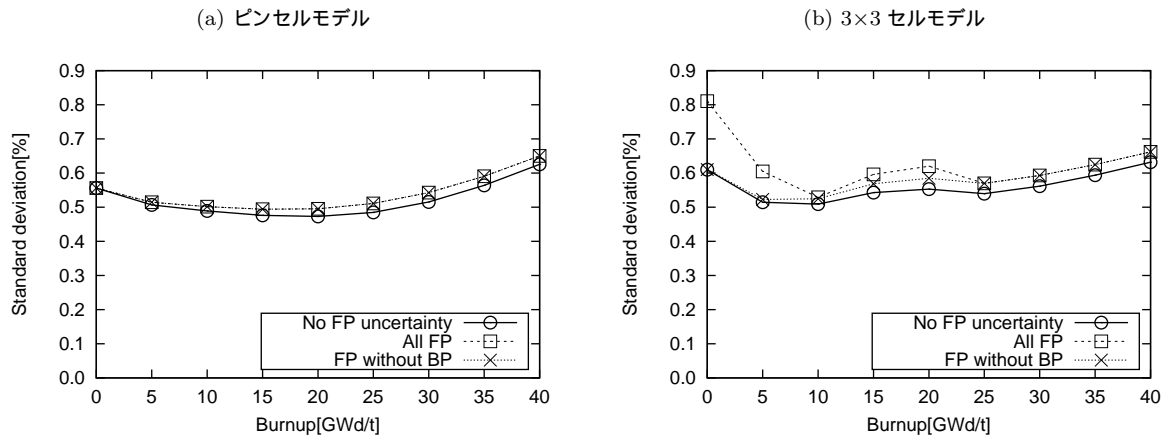


図 3.30: Gd-155, Gd-157 を除く核分裂生成物の捕獲断面積の不確かさ (10%) を仮定した場合の中性子増倍率の不確かさ

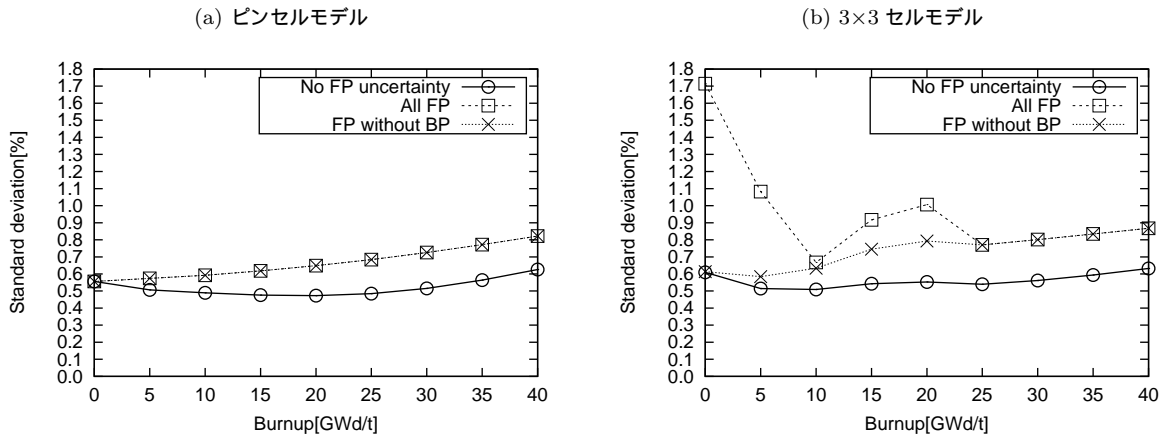


図 3.31: Gd-155, Gd-157 を除く核分裂生成物の捕獲断面積の不確かさ (30%) を仮定した場合の中性子増倍率の不確かさ

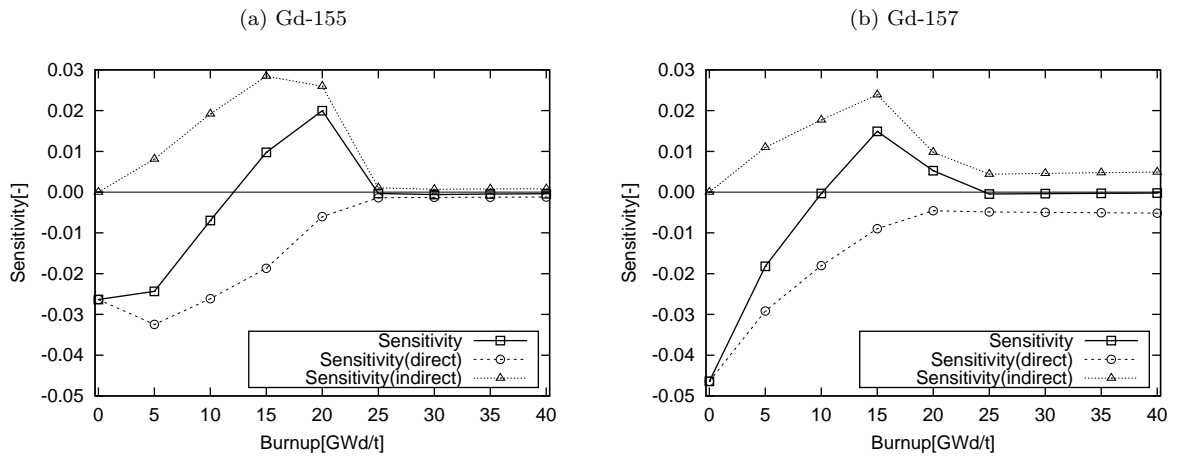


図 3.32: 3x3 セルモデルにおける Gd-155 及び Gd-157 の捕獲断面積に対する中性子増倍率の感度係数

3.2.4 FP 断面積データに不確かさを仮定した場合 (冷却有り)

図 3.33、図 3.34 に 10%、30% の核分裂生成物の捕獲断面積の不確かさを仮定し、燃焼後に冷却期間を設けた場合の中性子増倍率の不確かさをそれぞれ示す。ピンセルモデルの場合、5GWd/t から 15GWd/t で、冷却によって不確かさが小さくなった。これは、Xe-135 の断面積の不確かさが冷却により小さくなることの原因である。Xe-135 は強吸収核種であり、中性子増倍率への影響が大きいが、短半減期核種でもあるため、冷却後はほとんど無くなってしまふ。そのため、冷却後の中性子増倍率の不確かさが小さくなった。5 年の期間でほとんど無くなってしまふため、冷却期間が 5 年の場合と 10 年の場合の不確かさがほとんど変わらないのもそのためである。以降の燃焼度において、FP 断面積に不確かさを仮定しない場合は、冷却期間が長いと燃焼後期に不確かさの減少が見られた。対して FP の捕獲断面積の不確かさを仮定した場合は、燃焼後期で冷却によって不確かさが大きくなる傾向があった。これは、冷却期間に増加する Gd-155 の生成が原因である。

Gd-155 は親核種の Eu-155 と比べ半減期が長い為、冷却に伴い増加する。従って、冷却によって不確かさが増加する原因となった。図 3.35 に冷却による Gd-155 の核種数密度変化を示す。FP の断面積の不確かさを仮定しなければ見えない傾向を見ることができた。3×3 セルモデルの場合で、燃焼初期でピンセルモデルと同様の冷却による不確かさの減少が見られないのは、ガドリニウムの捕獲断面積に起因する不確かさが大きく、潰されているのが原因である。燃焼後期の冷却による不確かさの増加の原因はピンセルモデルの場合と同様である。

図 3.36、図 3.37 に Gd-155、Gd-157 を除く核分裂生成物の捕獲断面積に 10%、30% の不確かさを仮定した場合の中性子増倍率の不確かさをそれぞれ示す。ピンセル、3×3 セルの何れモデルにおいても、冷却による中性子増倍率の不確かさの変化は、Gd-155 及び Gd-157 の捕獲断面積の不確かさを仮定した場合と同じ傾向であった。燃焼初期の Xe-135 の効果は同様に表れるので妥当である。燃焼後期に関しては、ベータ崩壊によって Gd-155 となる Eu-155 の不確かさに起因する間接的に中性子増倍率の不確かさが生じていると考えられる。

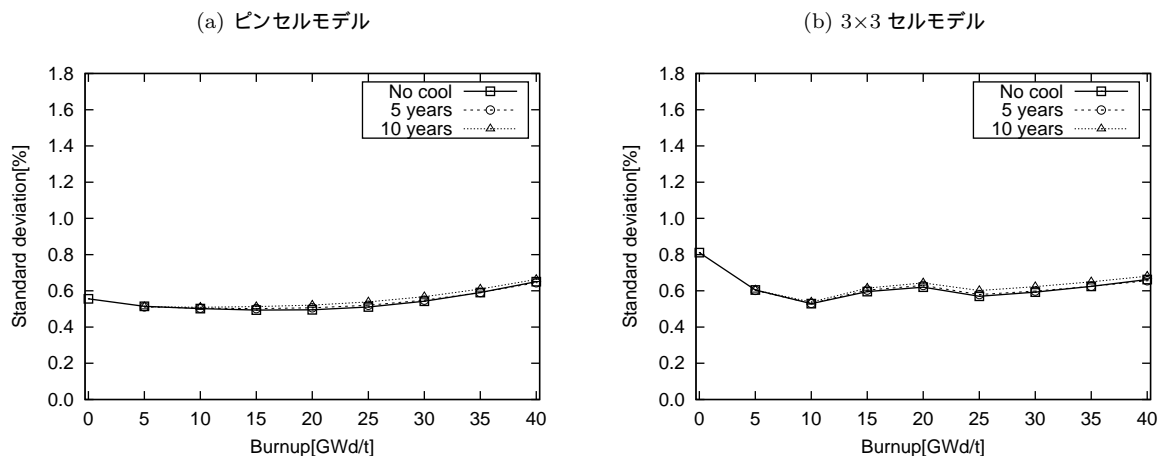


図 3.33: 核分裂生成物の捕獲断面積の不確かさ (10%) を仮定した場合の中性子増倍率の不確かさ

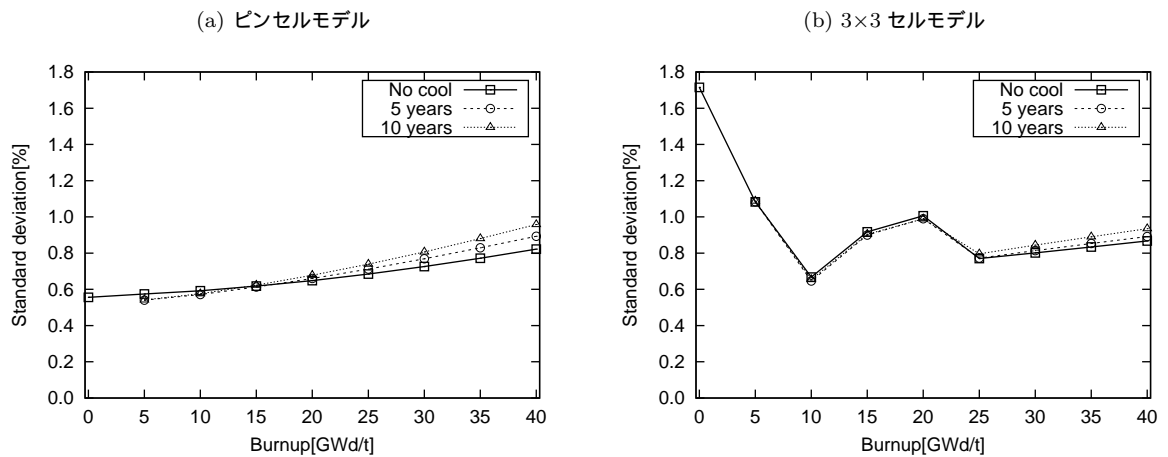


図 3.34: 核分裂生成物の捕獲断面積の不確かさ (30%) を仮定した場合の中性子増倍率の不確かさ

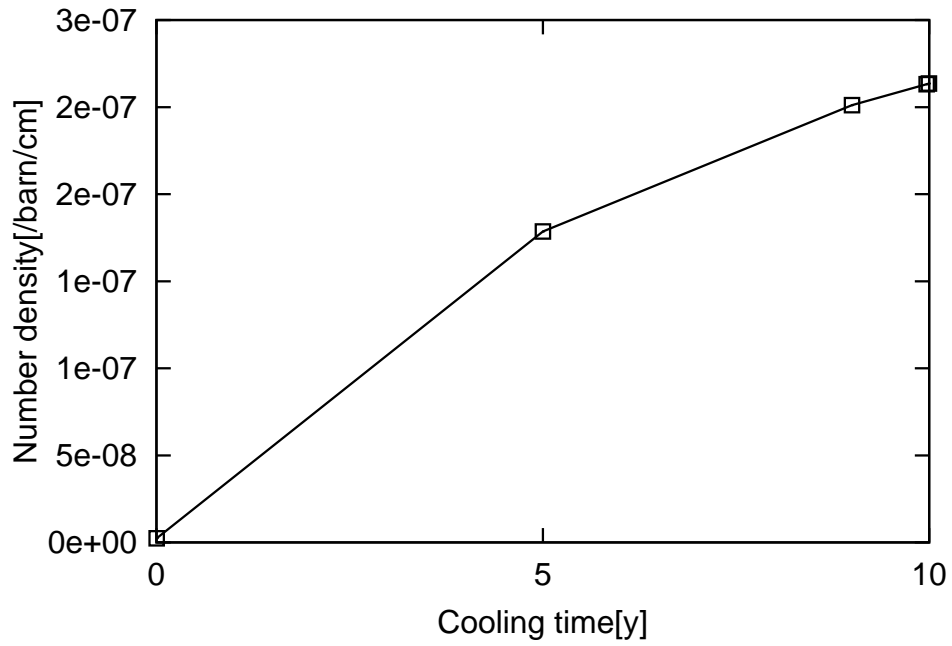


図 3.35: 冷却による Gd-155 の核種数密度変化

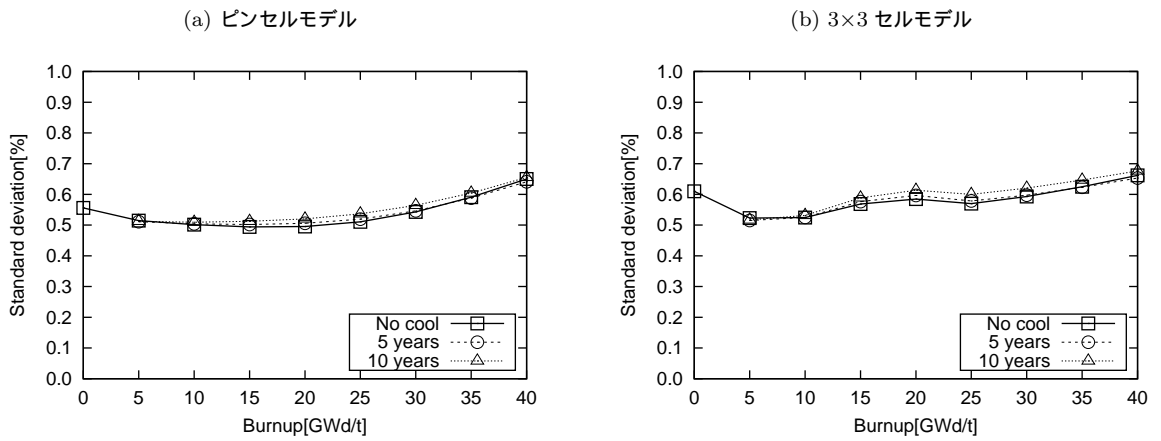


図 3.36: 冷却後における Gd-155, Gd-157 を除く核分裂生成物の捕獲断面積の不確かさ (10%) を仮定した場合の中性子増倍率の不確かさ

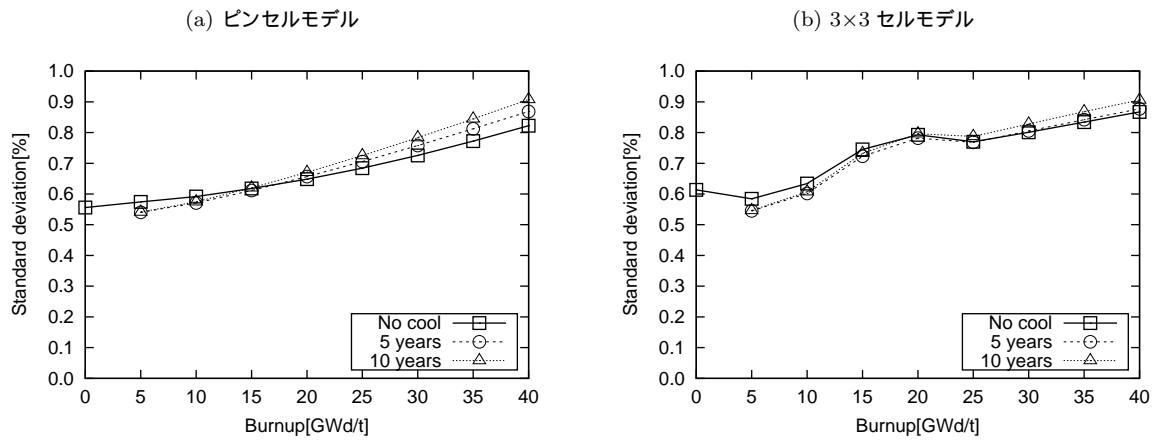


図 3.37: 冷却後における Gd-155, Gd-157 を除く核分裂生成物の捕獲断面積の不確かさ (30%) を仮定した場合の中性子増倍率の不確かさ

付録 6 : PIE データを活用した反応度の不確かさの低減

核燃料の照射後試験 (Post Irradiation Examination, PIE) においては、燃焼後の核燃料中の核種インベントリが測定され、燃焼に伴う核種生成量の予測計算の妥当性を確認するデータとして活用されている。本報告書の付録 5 で、燃焼中の核燃料の反応度について核データに起因する不確かさの定量化を行ったが、この不確かさには直接的な成分と燃焼に伴う核種生成量を介した間接的な成分が含まれており、特に後者に対して、PIE によって取得されたデータ (PIE データ) を活用することで、その不確かさを低減できる可能性がある。そこで本検討では、仮想的な PIE データを考え、それらによって燃焼中の核燃料の反応度の不確かさがどの程度低減可能か、定量的な評価を行う。

PIE データを用いた反応度の不確かさの低減は、具体的には、核データ、炉物理の分野で広く用いられている「核データ調整法」を利用する。核データ調整法では、新たな積分特性のデータ (ここでは PIE データ) を活用することで、核データの不確かさの低減を図るというものである。核データの共分散行列を V_σ 、複数の PIE データの核データに対する感度行列を G 、PIE データの C/E 値が内包する、数値計算および実験に起因する不確かさを V_{em} としたとき、核データ調整後の核データの共分散行列 \tilde{V}_σ は以下のように書ける。

$$\tilde{V}_\sigma = V_\sigma - V_\sigma G^T (V_{em} + G V_\sigma G^T)^{-1} G V_\sigma \quad (1)$$

なお、この式から明らかなように、PIE データにおける予測計算値 (C 値) と実験値 (E 値) の差異の大きさは、調整後の核データの共分散行列には影響しない。

今回の検討で対象とする体系は、付録 5 で使用したもの (可燃性毒物を含む 3×3 マルチセル) とした。付録 5 で示したように、燃焼中の反応度の核データに起因する不確かさは主にアクチノイド核種の反応断面積に起因するため、本検討ではアクチノイド核種の反応断面積の不確かさのみに着目した。また、PIE データを想定したデータとして、同様に付録 5 で使用した単ピンセルを 40 GWD/t まで燃焼させた直後の核種数密度を用いた。考慮した核種は、U-234、-235、-238、Np-237、Pu-238、-239、-240、-241、-242、Am-241、-242m、Cm-242、-243、-244、-245、-246 の計 16 核種とした。

はじめに C/E 値の不確かさ (すなわち V_{em}) を変動させて核データの調整計算を行った。なお、ここでは V_{em} については対角行列を仮定し (すなわちデータ間の相関はゼロとし)、各 C/E 値の標準偏差を同一の値として計算した。燃焼中の反応度における核データに起因する不確かさを Fig. 1 に示す。PIE データを活用することにより不確かさの低減が図られており、C/E 値の不確かさを 1% と仮定した場合は、40 GWD/t 時点の反応度に対して標準偏差が半分程度に低減した。

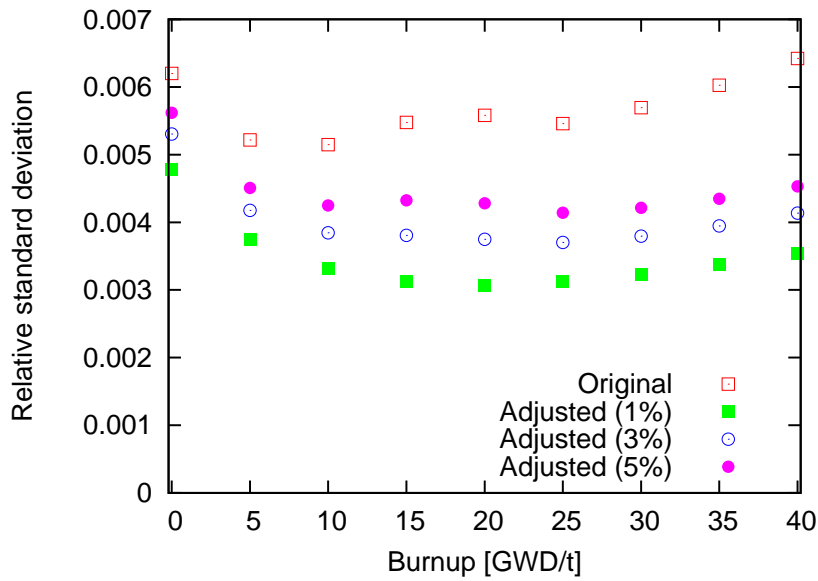


Fig. 1: Nuclear data-induced uncertainty of infinite neutron multiplication factors with fuel depletion

次に、PIE データを用いることによる不確かさの低減に寄与する核種を特定するため、C/E 値の標準偏差を 1% に固定し、調整に用いる PIE データを U 同位体のみ、Pu 同位体のみ、MA 核種 (Np, Am, Cm) のみとして同様の計算を行った。結果を Fig. 2 に示す。Pu 同位体の PIE データが最も効果が大きく、MA 同位体のデータも燃焼を通じて有意な効果が観察される。また、U 同位体の PIE データは燃焼初期の反応度には有効であるが、中期および末期には殆ど効果がないことが分かった。

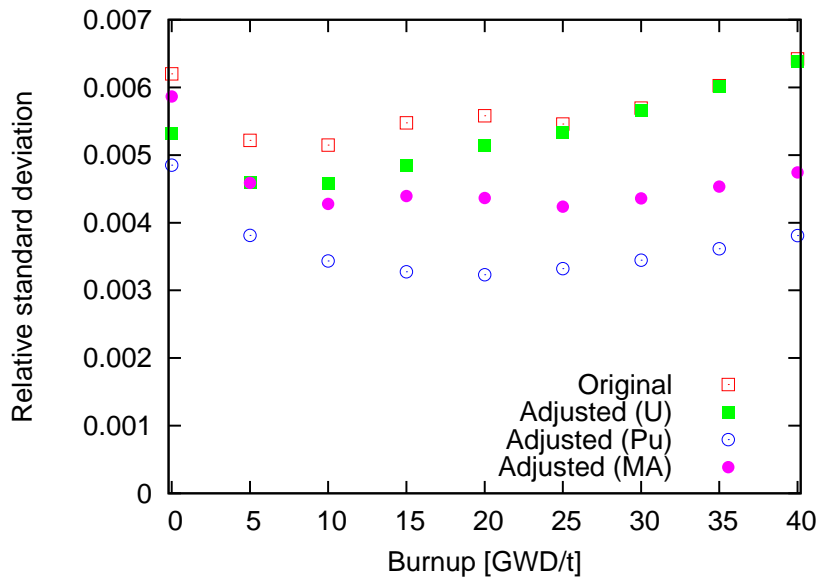


Fig. 2: Nuclear data-induced uncertainty of infinite neutron multiplication factors with fuel depletion(2)

