The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	軽水炉核計算手法の高度化による炉心設計への影響評価
Author(s)	竹田, 敏
Citation	大阪大学, 2016, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/56003
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

博士学位論文

軽水炉核計算手法の高度化による
炉心設計への影響評価

竹田　敏

2016 年 1 月

大阪大学大学院　工学研究科

環境・エネルギー工学専攻

原子力社会工学領域

要旨

本研究では、信頼性及び経済性向上の観点で、誤差要因を排除することが可能な軽水炉核計算手法を炉心設計へ適用した場合の影響を評価した。本論文は以下に示す五章で構成される。

第一章は序論であり、背景として原子力発電所における燃料の多様化と現行の軽水炉核計算手法が示されている。また、軽水炉核計算手法の高度化の利点を示したうえで、本研究の目的と概要がまとめられている。

第二章では、軽水炉での利用を想定した様々な燃料に対するドップラー係数の検討結果がまとめられている。この検討では、まず、実用化が検討されているトリウム燃料について、ドップラー係数がウラン燃料よりも負側に大きくなる物理的な理由を調査した。また、従来の軽水炉核計算手法では考慮されていない熱外領域の熱振動を計算モデルに取り入れ、様々な燃料を対象としてドップラー係数への影響評価を実施した。この評価により、MOX 燃料ではウラン燃料よりも熱振動の影響は小さく、U-238 の捕獲反応による影響が支配的であることがわかった。また、トリウム燃料については、Th-232 の熱振動が及ぼすドップラー反応度への影響は U-238 と比べて小さいものの、約 4%の影響が見られることを確認した。これらの結果から、MOX 燃料とトリウム燃料のドップラー係数について、現行の軽水炉核計算手法で用いられている計算モデルの誤差要因の影響評価を行うことができた。

第三章では、ガドリニア入りウラン燃料集合体を対象として、熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響を評価した。結果として、ガドリニアが存在しない場合では熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響が 10%程度であるにも関わらず、ガドリニアが少量添加された場合はドップラー係数へ影響が 12%まで上昇することが確認された。この現象についてさらに詳細に検討をするため、ドップラー係数の変化量を求めることができる簡略化された数式を導出して分析を行った。分析の結果、若干のガドリニアが添加されて増倍率が急に低下した場合に、熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響が大きくなることが確認され、この影響を定量的に評価した。この検討により、ガドリニアのような吸収体が存在する場合の燃料のドップラー係数についても、現行の軽水炉核計算手法で用いられている計算モデルの誤差要因の影響評価を行うことができた。

第四章では、計算誤差の小さい輸送計算手法である Method Of Characteristics(MOC)をより大きな体系でも実用的な時間内で計算できるようにするため、MOC コードの高速化への有効性が確認されている Krylov 部分空間法に対し、さらに高速でかつ安定した収束が行えるようにするための前処理に関する検討を実施した。まず、1 次元 MOC コードに Krylov 部分空間法である GMRES 法を導入し、前処理についての検討を行った。この検討では拡散理論を用いた加速手法である Diffusion Synthetic Acceleration(DSA)を前処理として導入し、DSA に基づく前処理手法と比較して本研究で開発した平均自由行程を用いる前処理手法の有効性を確認した。また、粗グリッドを用いた前処理手法を導入することで大幅に

GMRES 法内の反復回数を削減できることも確認した。1 次元 MOC コードに対するこれらの検討により、平均自由行程を用いる前処理手法と、前処理における均質化が有効であることを明らかにした。続いて、2 次元 MOC コードに対しても GMRES 法を適用し、多次元 MOC コードの前処理に関する検討を行った。多次元 MOC コードでは 1 次元 MOC コードよりも大幅に領域間の核的な結合が複雑になるため、前処理行列の作成が容易ではなくなる。そこで、平均自由行程を用いる前処理行列を、多次元体系においても効率よくかつ容易に作成する手法を考案した。また、計算のさらなる短縮を図るため、粗グリッドを有効に用いる前処理手法であるスケール法を新たに開発した。これらの手法を適用することで大幅に計算時間を短縮できたことから、開発した手法の有効性が確認できた。これらの手法を適用することで大幅に計算時間を短縮できたことから、計算精度の高い MOC について実用化の目処をたてられた。

第五章では結論と今後の展望がまとめられている。

目次

1. 序論 1
1.1. 背景 1
1.1.1. 日本の原子力発電所における燃料の多様化 1
1.1.2. 軽水炉の核計算手法 1
1.1.2.1. 実効断面積の作成 2
1.1.2.2. 集合体体系での計算 3
1.1.2.3. 炉心体系での計算 3
1.2. 軽水炉核計算手法の高度化の利点 4
1.3. 研究の目的と概要 5
1.4. 1 章の参考文献 7
2. 様々な燃料のドップラー係数に対する検討 9
2.1. 背景 9
2.2. トリウム燃料とウラン燃料のドップラー係数の比較 10
2.2.1. 計算手法 10
2.2.1.1. ドップラー効果 10
2.2.1.2. 実効断面積 12
2.2.1.3. 多群断面積作成に用いる重み関数 15
2.2.1.4. 感度係数を用いた計算手法 15
2.2.2. 計算条件 16
2.2.3. 計算結果と考察 17
2.3. 様々な燃料のドップラー係数に対する熱振動の影響の評価 21
2.3.1. 計算理論 21
2.3.1.1. 熱振動を無視した場合の減速方程式 21
2.3.1.2. 核種の熱振動を考慮した場合の減速方程式 23
2.3.1.3. 上方散乱中性子束を近似した減速方程式 25
2.3.2. 評価手法と計算条件 25
2.3.2.1. 評価方法 25

2.3.2.2. 幾何形状 26
2.3.3. 計算結果 28
2.3.4. 考察 31
2.4. 2 章の結論 39
2.5. 2 章の参考文献 39
3. 熱外領域の熱振動がガドリニア添加燃料のドップラー係数に与える影響の評価 . 41
3.1. 背景 41
3.2. 熱振動がガドリニア燃料のドップラー係数に与える影響の評価 41
3.2.1. 評価手順 41
3.2.2. 計算結果 42
3.3. 詳細な計算による影響の分析結果 43
3.3.1. 計算結果 43
3.4. 考察 45
3.4.1. 簡略化された数式の導出 45
3.4.2. ドップラー係数に対する影響 47
3.5. 3 章の結論 50
3.6. 3 章の参考文献 51
4. MOC コードに導入する Krylov 部分空間法に有効な前処理手法の開発 52
4.1. 背景 52
4.1.1. 核計算で用いられる計算モデルの動向 52
4.1.2. MOC コードの加速に関する研究 52
4.1.3. 研究の位置づけ 53
4.2. 1 次元 MOC コードの開発と前処理手法の比較 53
4.2.1. 1 次元 MOC コードで用いる理論 53
4.2.1.1. レイトレース 53
4.2.1.2. 中性子束計算 55

4.2.1.3. Krylov 部分空間法 59
4.2.1.4. GMRES 法 60
4.2.1.5. 前処理付き GMRES 法(FGMRES 法) 62
4.2.1.6. GMRES 法の MOC コードへの導入 63
4.2.1.7. 前処理としての DSA 65
4.2.1.8. 平均自由行程を用いた前処理 67
4.2.1.9. 粗メッシュを用いた前処理 70
4.2.2. 手法の比較と考察 73
4.2.2.1. GMRES 法の収束条件の決定 73
4.2.2.2. 固定源問題での収束過程の比較 77
4.2.2.3. 様々な計算体系での前処理手法の比較 81
4.2.2.4. 粗メッシュを用いた前処理手法の計算結果 95
4.2.3. まとめ 100
4.3. 2 次元 MOC コードへの前処理手法の導入 101
4.3.1. 計算コードと計算手法 101
4.3.1.1. 2 次元 MOC コード：BACH 101
4.3.1.2. 平均自由行程を用いた前処理 108
4.3.1.3. スケール法 112
4.3.2. 手法の検証と考察 115
4.3.2.1. 複数の燃料集合体からなる体系の計算結果 115
4.3.2.2. 散乱比の異なる体系での収束過程の比較 118
4.3.3. スケール法の検証 121
4.3.4. まとめ 125
4.4. MOC コードの加速に関する考察 126
4.5. 4 章の結論 128
4.6. 4 章の参考文献 129
5. 結論と今後の展望 131
5.1. 結論 131
5.2. 今後の展望 132
謝辞 133

関連する業績一覧 134

表目次

表 2.2-1　計算条件 16
表 2.2-2　ドップラー係数の反応別の内訳 17
表 2.2-3　Th-232 と U-238 の半値幅の比較 19
表 2.3-1　計算条件 27
表 2.3-2　燃料の濃縮度・富化度 27
表 2.3-3　ウラン燃料のドップラー係数に与える影響を各反応で分けた結果 28
表 2.3-4　ウラン燃料のドップラー係数に与える影響をエネルギーで分けた結果 28
表 2.3-5　MOX 燃料のドップラー係数に与える影響を各反応で分けた結果 29
表 2.3-6　MOX 燃料のドップラー係数に与える影響をエネルギーで分けた結果 29
表 2.3-7　トリウム燃料のドップラー係数に与える影響を各反応で分けた結果 30
表 2.3-8　トリウム燃料のドップラー係数に与える影響をエネルギーで分けた結果 . 30
表 3.2-1　ガドリニア入り燃料の解析に用いる計算条件 42
表 3.2-2　MVP で評価する熱振動がドップラー係数に与える影響 43
表 3.3-1　UA 法で評価する熱振動がドップラー係数に与える影響 43
表 3.3-2　熱振動がドップラー係数に与える影響を各反応で分けた結果 44
表 3.3-3　熱振動がドップラー係数に与える影響をエネルギーで分けた結果 45
表 4.2-1　分点セット 55
表 4.2-2　1 次元 MOC コードでの収束条件 64
表 4.2-3　体系 i での計算に必要とした GMRES 法の反復回数 75
表 4.2-4　体系 ii での計算に必要とした GMRES 法の反復回数 75
表 4.2-5　散乱比 c=0.5 の 1 群断面積セット 77
表 4.2-6　散乱比 c=0.75 の 1 群断面積セット 77
表 4.2-7　散乱比 c=0.9 の 1 群断面積セット 77
表 4.2-8　散乱比 c=0.999 の 1 群断面積セット 77
表 4.2-9　体系の大きさを決める値 X 82
表 4.2-10　GMRES 法内の平均反復回数：体系 i 83
表 4.2-11　GMRES 法内の平均反復回数：体系 iii 84
表 4.2-12　GMRES 法内の平均反復回数：体系 iv 85
表 4.2-13　GMRES 法内の平均反復回数：体系 v 86
表 4.2-14　断面積セット:case1~case3 88
表 4.2-15　case1 での GMRES 法内の平均反復回数 90
表 4.2-16　case1 での反復回数が 1 から離れる割合(前処理なしの反復回数を基準) 91
表 4.2-17　case2 での GMRES 法内の平均反復回数 92
表 4.2-18　case2 での反復回数が 1 から離れる割合(前処理なしの反復回数を基準) 92

表 4.2-19　case3 での GMRES 法内の平均反復回数 93
表 4.2-20　case3 での反復回数が 1 から離れる割合(前処理なしの反復回数を基準) 93
表 4.2-21　体系 i での平均反復回数..... 95
表 4.2-22　断面積セット:case4~case6..... 96
表 4.3-1　2 次元 MOC コードでの計算条件 115
表 4.3-2　GMRES 法内の平均反復回数：体系 I 116
表 4.3-3　総計算時間及び逆行列の計算時間の比較：体系 I 116
表 4.3-4　スケール法を導入することによる GMRES 法内の平均反復回数への影響 116
表 4.3-5　スケール法を導入することによる計算時間の変化.....117
表 4.3-6　散乱比の異なる断面積を用いた計算の平均反復回数の比較 118
表 4.3-7　散乱比の異なる断面積を用いた場合の計算時間の比較.....118
表 4.3-8　体系 II 及び体系 III での GMRES 法内の平均反復回数..... 122
表 4.3-9　体系 II 及び体系 III での GMRES 法内の計算時間 122
表 4.3-10　全断面積の異なる断面積セット 123
表 4.3-11　全断面積の異なる計算での GMRES 法内の平均反復回数の比較 123
表 4.3-12　全断面積の異なる計算の計算時間の比較..... 124

図目次

図 1.1-1　典型的な軽水炉の核設計 2
図 1.1-2　中性子スペクトルの体系依存性 3
図 2.2-1　共鳴断面積の温度依存性(核種は U-238, 共鳴エネルギー: 36.68eV) 12
図 2.2-2　U-238 の連続エネルギーの断面積 14
図 2.2-3　U-238 の多群断面積 14
図 2.2-4　燃料セル体系 16
図 2.2-5　エネルギー群ごとに分解したドップラー係数への寄与の内訳 18
図 2.2-6　エネルギー群ごとの感度係数 19
図 2.2-7　U-238 の捕獲断面積 20
図 2.2-8　Th-232 の捕獲断面積 20
図 2.2-9　エネルギー群ごとの温度上昇による断面積変化割合 21
図 2.3-1　燃料ピンセル体系 27
図 2.3-2　U-238 の熱外領域における全断面積と散乱断面積 31
図 2.3-3　U-238 の全断面積と散乱断面積の比較 32
図 2.3-4　U-238 の散乱カーネルの比較 33
図 2.3-5　Pu-240 の熱外領域における全断面積と散乱断面積 34
図 2.3-6　Pu-240 の全断面積と散乱断面積の比較 35
図 2.3-7　U-239 と Pu-239 の捕獲断面積と核分裂断面積の比較 36
図 2.3-8　Pu-239 の全断面積と散乱断面積の比較 36
図 2.3-9　熱外領域における Th-232 の全断面積と散乱断面積 37
図 2.3-10　Th-232 の全断面積と散乱断面積の比較 38
図 3.2-1　ガドリニア入り燃料の解析を実施した燃料セル体系 42
図 3.3-1　ガドリニア添加に伴うドップラー係数の推移 44
図 3.4-1　ガドリニアの添加に伴う断面積変化の推移 47
図 3.4-2　ガドリニア添加に伴う感度係数の推移 48
図 3.4-3　ガドリニア添加に伴う増倍率と増倍率の逆数の推移 48
図 3.4-4　熱振動を考慮したことによるドップラー係数の変化量の推移 49
図 3.4-5　熱振動を考慮したことによるドップラー係数の影響の推移 49
図 4.2-1　1 次元平板体系のレイトレース 54
図 4.2-2　GMRES 法のアルゴリズム 62
図 4.2-3　FGMRES 法のアルゴリズム 63
図 4.2-4　GMRES 法を導入した MOC コードのフローチャート 65
図 4.2-5　一次元平板体系での中性子束と中性子流 66
図 4.2-6　平均自由行程を用いて簡略化した前処理行列 69

図 4.2-7　粗いメッシュと細かいメッシュでの分布 70
図 4.2-8　粗いメッシュを用いた解の修正 71
図 4.2-9　粗いメッシュによる前処理を用いた FGMRES 法 72
図 4.2-10　2160 の領域で構成する平板体系(体系 i) 73
図 4.2-11　2100 の領域で構成する平板体系(体系 ii) 74
図 4.2-12　体系 i の中性子束分布 74
図 4.2-13　体系 ii の中性子束分布 75
図 4.2-14　散乱比 c=0.5 とした体系 i の収束過程の比較 78
図 4.2-15　散乱比 c=0.75 とした体系 i の収束過程の比較 78
図 4.2-16　散乱比 c=0.9 とした体系 i の収束過程の比較 79
図 4.2-17　散乱比 c=0.999 とした体系 i の収束過程の比較 79
図 4.2-18　散乱比 c=0.5 とした体系 ii の収束過程の比較 80
図 4.2-19　散乱比 c=0.75 とした体系 ii の収束過程の比較 80
図 4.2-20　散乱比 c=0.9 とした体系 ii の収束過程の比較 80
図 4.2-21　散乱比 c=0.999 とした体系 ii の収束過程の比較 81
図 4.2-22　体系 iii 82
図 4.2-23　大きさを変更する計算体系 82
図 4.2-24　計算時間の比較：体系 i 83
図 4.2-25　計算時間の比較：体系 iii 84
図 4.2-26　計算時間の比較：体系 iv 85
図 4.2-27　計算時間の比較：体系 v 86
図 4.2-28　局所的に核分裂性物質を配置した体系(体系 vi) 88
図 4.2-29　局所的に核分裂性物質を配置した体系の中性子束分布 89
図 4.2-30　case1 での計算時間の比較 91
図 4.2-31　case2 での計算時間の比較 92
図 4.2-32　case3 での計算時間の比較 93
図 4.2-33　粗メッシュの前処理の検討に用いる体系(体系 vii) 96
図 4.2-34　固定源問題における中性子束分布(case4~7) 97
図 4.2-35　case4 での収束過程の比較 97
図 4.2-36　case5 での収束過程の比較 98
図 4.2-37　case6 での収束過程の比較 98
図 4.2-38　case7 での収束過程の比較 99
図 4.3-1　2 次元 MOC の概念図 102
図 4.3-2　計算上での面積（斜線部） 103
図 4.3-3　セグメント長さを調整する面積補正 104
図 4.3-4　幅を調整する面積補正 104

図 4.3-5　複数の炉心燃料集合体からなる体系(体系Ⅰ)....115
図 4.3-6　散乱比 c=0.9 としたときの収束過程の比較....119
図 4.3-7　散乱比 c=0.99 としたときの収束過程の比較....119
図 4.3-8　散乱比 c=0.999 としたときの収束過程の比較.... 120
図 4.3-9　被覆管外径を 0.55cm とした体系(体系 II).... 121
図 4.3-10　被覆管外径を 1.00cm とした体系(体系 III).... 122
図 4.4-1　V-cycle スキーム.... 126

1. 序論

1.1. 背景

1.1.1. 日本の原子力発電所における燃料の多様化

2011 年に発生した東京電力福島第一原子力発電所の事故をふまえて、原子力施設に対して新しい規制基準が設けられ、2015 年には新規制基準に適合した原子力発電所が稼動し始めている。安全性の確保を前提として、原子力発電は電力供給の安定性に寄与する重要なベースロード電源として位置づけられており、新規制基準に適合した原子力発電所が今後も再稼動すると予想される。

日本で稼動している原子力発電所は軽水炉型原子力発電所であり、燃料としては主にウラン燃料が使用されている。ウラン燃料については、濃縮度の増加やガドリニウムを添加した燃料を開発することにより、原子炉の運転サイクル長期化と柔軟な炉心設計が可能となってきた。さらに、軽水炉で生成されたプルトニウムを有効利用するために、生成されたプルトニウムを軽水炉で再使用するいわゆるプルサーマルが進められている。現在は、再処理された燃料からプルトニウムが抽出され、これをウランと混ぜ合わせることで製造される MOX 燃料が実用化されている。また、国外に目を向けると、トリウム燃料を利用する燃料サイクルも考案されており、研究開発が進められている。このように、軽水炉の燃料は多様化が進められており、炉心内の中性子の挙動も多様化している。このような多様化した中性子の挙動を把握するため、軽水炉の核計算手法の高度化が進められてきた。

1.1.2. 軽水炉の核計算手法

原子炉内の出力分布などの物理現象を予測するためには、原子炉内の中性子のふるまいをシミュレートする必要がある。中性子による核反応としては、捕獲反応、核分裂反応など数多くあり、これらの反応を解析的に求めることで原子炉の挙動を予測することが可能である。中性子の飛行と核反応を直接的に追跡する手法としてはモンテカルロ法が開発されている。モンテカルロ法は確率論的手法であり、大量の中性子の追跡を行うことから膨大な計算コストを必要とするが、近年の計算機の発展により炉心体系での解析もなりつつある。ただし、軽水炉の炉心設計では炉心体系の計算は一度だけで完結せず、複数の状態を評価する必要がある。たとえば、制御棒バンクの軸方向の微分反応度価値を評価する際には、炉心上部から下部までの各制御棒位置に対して解析を行っており、この解析を全制御棒バンクについて実施している。このように多数の炉心体系の解析を実施することをふまえると、確率論的手法ではなく、計算コストを抑えられる決定論に基づく手法で炉心設計を行うことが望ましい。

決定論に基づく手法で軽水炉の炉心計算を行う場合、計算コストを抑えるために一般的には多段階に分けて解析を実施している。計算コードにより多少の違いはあるものの、図 1.1-1 に示すように、実効断面積の作成、集合体体系での計算、炉心体系での計算の 3 段階に分けられることが多い。

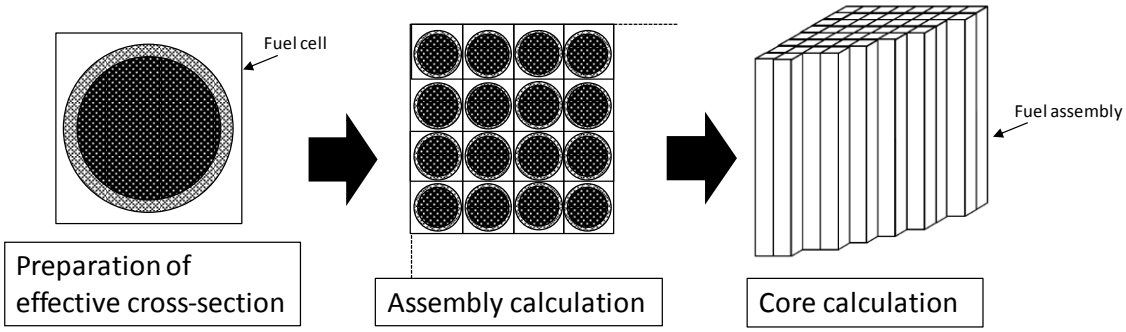


図 1.1-1　典型的な軽水炉の核設計

1.1.2.1.　実効断面積の作成

評価済み核データライブラリには実験や理論に基づいて得られたポイントワイズの断面積データが含まれるが、集合体計算や炉心計算ではエネルギー群ごとに与えられる実効断面積が使用される。そのため、一段階目の計算としては、後続の計算で使用する物質に対し、共鳴や中性子の上方散乱などの物理現象を考慮した上で、エネルギー群に分けられた実効的な断面積を算出する。

共鳴がある場合はそのエネルギー領域において中性子束がひずむため、中性子束が一定と仮定する場合と比較して反応率が小さくなる。この現象はエネルギー的な自己遮蔽または単に自己遮蔽と呼ばれており、自己遮蔽のために実効断面積は中性子束がエネルギー領域で一定と仮定した場合の断面積よりも小さくなる。

また、絶対零度でない核種は熱振動をしていることから、中性子と共鳴を引き起こす相手核種との相対速度には確率分布で示される幅が生じている。ここで、熱振動が大きくなると、相対速度の幅が大きくなることから共鳴の断面積の幅も大きくなる傾向が得られる。この現象はドップラー広がりと呼ばれており、実効断面積の計算時にはドップラー広がりも考慮することとなる。ドップラー広がりが生じると、断面積の幅が大きくなることから中性子束のひずみが小さくなり、結果的に実効断面積が大きくなる場合がある。代表例は軽水炉のウラン燃料における U-238 の吸収断面積であり、軽水炉では燃料温度が上昇すると U-238 の吸収率が上昇して負の反応度が投入されている。

さらに、実効断面積の作成時には、中性子が散乱前後でエネルギーを受け取る上方散乱についても考慮する必要がある。上方散乱は熱振動によって引き起こされる現象であり、数 eV 以下のエネルギー領域では上方散乱を考慮することによる実効断面積の変化が顕著に現れている。従来の実効断面積の作成では、上方散乱は数 eV 以下のエネルギー領域でのみ考慮され、数 eV 以上のエネルギー領域では無視されることが多かった。ただし、軽水炉におけるウラン燃料のドップラー係数に対しては、熱外領域における上方散乱が 10%程度の影響を及ぼすことが確認されている。このことから、軽水炉のウラン燃料に対してドップラー係数を精度良く求めるためには熱外領域の熱振動も考慮して実効断面積を求める必要

があると言える。

1.1.2.2.　集合体体系での計算

前段階で作成した実効断面積を用いて炉心体系の計算を行うことは可能であるが、燃料ペレットや被覆管などの非均質性を考慮して炉心設計を行うことは計算コストの観点で現実的とは言えない。そこで、軽水炉の核計算では、集合体体系の計算を実施し、燃料セル単位または集合体単位の少数群断面積を求め、これを炉心計算に引き渡す場合が多い。少数群断面積は、実効断面積を集合体計算で得られる中性子束で重みづけをした縮約により求められる。ここで、中性子スペクトルは燃料内の組成にも強く依存しており、図 1.1-2 に示されるようにガドリニウムなどの吸収体の存在によっても大きく左右される。このような中性子束の変化によって炉心計算で使用される小数群の断面積は大きく変化するため、集合体計算では断面積の体系依存性についても整理する。

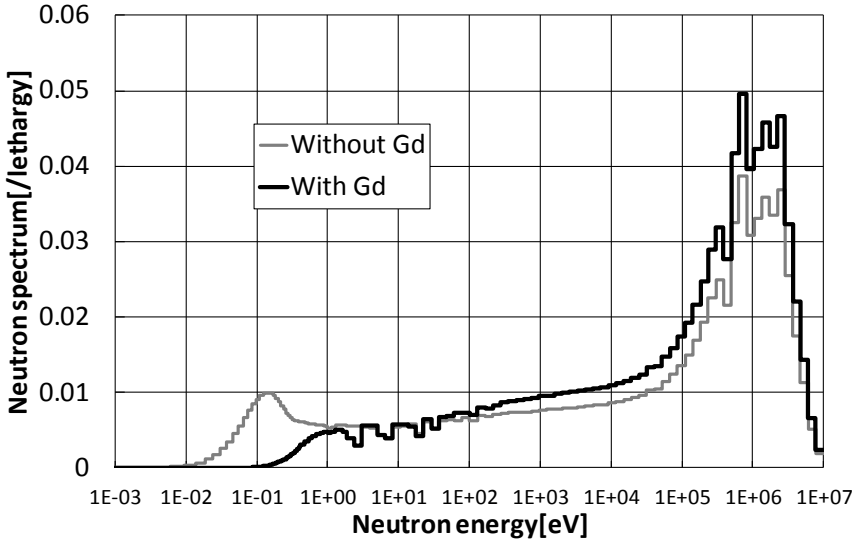


図 1.1-2　中性子スペクトルの体系依存性

1.1.2.3.　炉心体系での計算

炉心計算では、炉心の幾何形状、出力、減速材入口温度等を考慮して、集合体計算で作成された小数群断面積を用いて計算を行う。炉心体系の計算は BWR と PWR で大きく異なるため、それぞれ分けて示す。

BWR においては、燃料集合体はチャンネルボックスに囲まれており、燃料集合体同士は物理的な壁で分けられている。チャンネルボックス内では炉心上部のボイド率が高くなっており、平均すると 40%近くになっている。このことから、BWR では径方向だけでなく、軸方向の非均質性も高くなっているため、従来から 3 次元体系での設計が行われてきた。また、熱水力のフィードバック計算も設計に取り込まれていることが特徴としてあげられ

る。

PWR についてはチャンネルボックスが存在せず、ボイドが発生しない。このため、集合体間の核的な結合が強く、かつ軸方向の出力分布と径方向の出力分布が強く依存しないことが特徴として挙げられる。このため、軸方向の解析と径方向の解析を切り分けた 1, 2 次元合成法が古くは主流となっていた。ただし、ガドリニアが多く添加されている燃料が導入されるなど、燃料の多様化が進むに従って軸方向出力と径方向出力の依存性が強くなっているため、3 次元設計が主流になりつつある。

BWR と PWR どちらについても、実用的な計算時間で精度よく炉心体系の計算を行う必要がある。計算精度を高める観点では、体系の非均質性や非等方性を直接的に考慮できる中性子輸送計算手法の一つである Method Of Characteristics(MOC)法を適用する検討が過去に実施されてきた。ただし、これまでに検討された加速法を適用させたとしても、MOC の計算時間は膨大であり、多数の計算ケースが必要となる炉心設計には適していない。このため、現状の炉心設計では拡散理論に基づく手法が広く使われている。

1.2. 軽水炉核計算手法の高度化の利点

前節で示したとおり、軽水炉の核設計は計算コストの低減のために、多段階に分けられた計算に基づいて実施されており、いくつかの近似が使用されている。たとえば、炉心体系の計算では、集合体計算により均質化された断面積を使用しているため、断面積の均質化誤差が発生している。燃料セル単位で均質化している場合は SPH 因子を用いた誤差の低減、集合体単位で均質化している場合は集合体不連続因子を用いた誤差の低減が可能であるが、複雑な集合体間の中性子スペクトルの干渉がある場合は厳密に誤差を消すことは難しい。その他にも、使用している評価済み核データライブラリの誤差、熱外領域で熱振動を考慮しないことによる誤差、群縮約に起因する誤差、炉心体系で使用する計算理論の近似に起因する誤差なども発生している。高度化によって上記のような誤差を低減することができれば、信頼性向上の観点と、経済性向上の観点でメリットが得られる。

信頼性向上の観点では、特に、妥当性確認の観点から測定値が直接得られないパラメータに対して説明性を向上させられるメリットが大きい。直接的に測定値が得られていないパラメータについては、類似結果の実績(測定値-設計値)の内外挿によって計算値の妥当性を確認する場合がある。この場合は内外挿が適切であることを示すことになるが、設計値に誤差要因がある場合は、誤差要因の影響が内外挿によってどの程度変化するかを把握すべきといえる。この誤差要因の影響の変化傾向を把握する際に、高度化によって誤差要因を排除した結果は有用となる。高度化されるメリットがある具体例としてドップラー係数が挙げられる。ドップラー係数は関連するパラメータの測定実績が少なく、実機炉心での測定実績も乏しいことから、計算結果の妥当性を示す測定データは非常に限られている。さらに、熱外領域における熱振動がウラン燃料のドップラー係数に影響を与えていることが指摘されているが、現行の炉心設計で広く使用されている計算モデルでは熱外領域にお

ける熱振動は取り扱っておらず、誤差要因があるといえる。この誤差要因はウラン燃料以外にも影響があると考えられるため、ウラン燃料以外に対しても高度化による誤差要因の影響が明らかになれば、計算値の説明性を向上させることができる。

経済性向上の観点では、計算手法の精度向上による設計の最適化がもたらす燃料サイクルコストの低減が挙げられる。前述したとおり、現行の軽水炉核計算手法には多くの誤差要因がある。このため、ドップラー係数の計算手法を高度化することで評価結果の不確かさを低減できれば、過度な保守性を持たせることなく経済性の高い炉心を設計することが可能になる。また、計算手法の高度化により、装荷パターンが最適化されて PWR のピーキング係数を 1%低減することができれば､燃料コストは約 0.4%削減される可能性があることが示されている。

上記のように、軽水炉核計算手法の高度化が達成されれば、計算結果の信頼性と経済性を向上させられる。

1.3. 研究の目的と概要

前節までで述べたように、現行の軽水炉核計算手法で評価するパラメータには多くの誤差要因が含まれている。そこで、以下に示すように、信頼性向上と経済性向上の観点で誤差要因を排除することによる炉心設計への影響を評価し、更なる高度化に向けた検討を行った。具体的には、以下の 3 つの内容について検討を実施した。

熱外領域における熱振動を考慮することで、通常のウラン燃料のドップラー係数が 10%程度負側に大きくなることが確認されている。ただし、トリウム燃料や MOX 燃料といったその他の燃料については、熱外領域における熱振動を考慮することによるドップラー係数への影響評価は十分になされていなかった。さらに、Th-232 の熱外領域の吸収断面積の共鳴積分は U-238 よりも小さいことが確認されているが、トリウム燃料のドップラー係数はウラン燃料よりも負側に大きくなっており、共鳴積分のドップラー係数の傾向が逆になっている。このようにトリウム燃料のドップラー係数については不明な点が存在するため、まず、この現象のメカニズムを明らかにした。続いて、様々な燃料に対し、熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響を評価することで、これまで不明だった誤差要因の影響を評価した。

また、熱外領域の熱振動がドップラー係数に及ぼす影響は燃料の種類に依存するだけではなく、吸収体の存在にも依存すると考えられる。吸収体が添加されるとスペクトルの変化、U-238 の共鳴吸収の割合の低下、臨界性の低下といった複数の影響が発生するが、この場合の熱外領域の熱振動がドップラー係数に及ぼす影響は明らかになっていなかった。そこで、ガドリニア入りウラン燃料に対する解析を実施し、ガドリニアのような吸収体が存在する体系において熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響を評価した。

さらに、現在の炉心設計で広く使用されている拡散理論には多くの近似が用いられているため、計算精度の高い計算手法である MOC を高速化させた上で適用する検討を行った。

先行研究として、MOC コードに導入できる他の加速法として Krylov 部分空間法がこれまでに検討されており、高速でかつ安定した収束が行えることが確認されている。そこで、MOC を適用した Krylov 部分空間法にこれまでに開発されてきた手法よりも有効な前処理を開発し、炉心設計の適用性について検討した。

1.4. 1 章の参考文献

(1) M. Komeda, K. Yamamoto, T. Kusunoki, “Full core burn-up calculation at JRR-3 with MVP-BURN” International Conference on the Physics of Reactors, Nuclear Power; A Sustainable Resource (PHYSOR 2008), Interlaken, Switzerland.

(2) M. Tatsumi, T. Kan, K. Ishii, Y. Ando, T Yamamoto, Yutaka Iwata, M. Ueji, “Analysis of High Moderation PWR MOX Core MISTRAL-4 with SRAC and MVP” Journal of Nuclear Science and Technology, vol. 39, Supplement 2, 2002.

(3) A. Yamamoto, “Effect of Core Calculation Accuracy on Fuel Cycle Cost,” Procroc. Int. Topical Meeting on Advances in Reactor Physics and Mathematics and Computation into the Next Millennium (PHYSOR2000), Pittsburgh, USA, VII.A-2(2000).

(4) 中野 幸太郎, 遠藤 知弘, 山本 章夫, “最適出力分担を考慮した複数サイクル装荷パターン最適化”日本原子力学会, 2012 年秋の大会, 2013

(5) R. Le Tellier, A. Hébert, On the integration scheme along a trajectory for the characteristics method, *Annals of Nuclear Energy* 33, (2006), pp.1260-1269

(6) Ouisloumen, M., & Sanchez, R. (1991). A Model for Neutron Scattering Off Heavy Isotopes That Accounts for Thermal Agitation Effects. Nuclear Science and Engineering, 107, 189-200.

(7) Rothenstein, W., (2004), Proof of the formula for the ideal gas scattering kernel for nuclides with strongly energy dependent scattering cross sections. Annals of Nuclear Energy, 31, 9-23

(8) Dagan, R. (2005). On the use of S(α, β) tables for nuclides with well pronounced resonances. 32, 367-377.

(9) Becker, B., Dagan, R., Broders, (2009). C.H,M., An Alternatives Stochastic Doppler Broadening Algorithm. M&C2009

(10) Mori, T. & Nagaya, Y. (2009). Comparison of Resonance Elastic Scattering Models Newly Implemented in MVP Continuous-Energy Monte Carlo Code. Journal of Nuclear science and technology, 46, 793-798.

(11) Lee, D., Smith, K., & Rhodes, J. (2009). The impact of ^{238}U resonance elastic scattering approximations on thermal reactor Doppler reactivity. Annals of Nuclear Energy, 36, 274-280.

(12) Z. Liu, H. Wu, L. Cao , Q. Chen, Y. Li, A new three-dimensional method of characteristics for the neutron transport calculation, *Annals of Nuclear Energy* 38 (2011), pp. 447-454.

(13) T. Takeda, T. Kitada, H. Nishi, J. Ishibashi, “Application of method of characteristics to fast reactor core analysis” *PHYSOR 2010 – Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance*, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, May 9-14, (2010), [CD-ROM].

(14) H. A. van der Vorst and C. Vuik. The superlinear convergence behavior of GMRES. J. Comput. Appl. Math., Vol. 48, No. 3, pp. 327-341, 1993

(15) Andrew Chapman and Yousef Saad. Deflated and augmented Krylov subspace techniques. Numer. Linear Algebra Appl, Vol. 4, pp. 43-66, 1996.

(16) K. S. Smith, Nodal method storage reduction by nonlinear iteration, *Transactions of the American Nuclear Society* 44 (1983), pp. 265-266.

(17) S. Oliveira, Y. Deng, Preconditioned Krylov Subspace Methods for Transport Equations, *Progress in Nuclear Energy* 33 (1998), pp. 155-174.

(18) A. Gupta, R.S. Modak, Krylov sub-space methods for K-eigenvalue problem in 3-D neutron transport, *Annals of Nuclear Energy* 31 (2004), pp. 2113–2125.

(19) A. Gupta, R. S. Modak, On the use of conjugate gradient method for the solution of neutron transport equation, *Annals of Nuclear Energy* 29 (2002), pp. 1933–1951.

(20) J. S. Warsa, T. A. Wareing, J. E. Morrel, J. M. McGhee, R. B. Lehoucq, Krylov subspace iterations for deterministic K-eigenvalue calculations, *Nuclear Science and Engineering* 147 (2004), pp. 26–42.

(21) H. Zhang, H. Wu, L. Cao, An acceleration technique for 2D MOC based on Krylov subspace and domain decomposition methods, *Annals of Nuclear Energy* 38 (2011), pp. 2742–2751.

(22) B. W. Patton, J. P. Holloway, Application of preconditioned GMRES to the numerical solution of the neutron transport equation, *Annals of Nuclear Energy* 29 (2002), pp.109–136.

(23) M. Dahmani, R. Le Tellier, R. Roy, A. Hébert, An efficient preconditioning technique using Krylov subspace methods for 3D characteristics solvers, *Annals of Nuclear Energy* 32 (2005), pp. 876–896.

(24) R. Le Tellier, A. Hébert, “Application of the DSA Preconditioned GMRES formalism to the Method of Characteristics - First Results,” *PHYSOR 2004 -the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems: Global Developments*, Chicago, Illinois, April 25-29, (2004), [CD-ROM].

2. 様々な燃料のドップラー係数に対する検討

2.1. 背景

原子炉の安全性に関するパラメータとして反応度係数がある。反応度係数は原子炉の出力変動によって炉心の温度が変化し、それに伴って出力が変動するという機構を評価するための核特性である。反応度係数のうち燃料温度の変化に起因するものをドップラー係数と定義されており、原子炉の自己制御性に関わる重要なパラメータとして用いられる。他にも、減速材温度変化に伴う減速材数密度変化による減速材温度係数、減速材が沸騰した場合に考慮する減速材ボイド係数などがあり、原子炉は反応度係数が負となるように設計される。

ドップラー係数に関連する測定値のデータベース充実を図るための検討として、これまでに Hellstrand らによるウラン燃料の共鳴積分の測定や、FCA を用いる U-238 のドップラー反応度の測定が実施されている。ただし、高燃焼度燃料、MOX 燃料、トリウム燃料については測定値が乏しく、今後の測定値のデータベースの拡充が期待される。一方で、実際の原子炉において、炉心状態の中性子束などの情報を抽出することでドップラー反応度を測定する手法が開発されているが、この手法の普及は進んでいない。これらのことから、ドップラー係数の計算結果の妥当性を示す測定データは限られているといえる。このため、算出されるドップラー係数については高い信頼性が求められており、計算モデルにおける誤差要因の影響評価は重要となる。

従来の原子炉の解析手法では熱外エネルギーにおける U-238 などの重核種の弾性散乱を考えるとき、核種の熱運動を無視したモデル(Asymptotic モデル)で解析を行っていた。この取り扱いは軽核種については適切であるが、重核種については熱振動の散乱を精度よく表現できず、ドップラー係数に大きな影響を与えることが Ouisloumen と Sanchez により確認されている。

以上をふまえ、ウラン燃料を対象として、熱外領域における U-238 の熱振動がドップラー係数に与える影響についてこれまでに多くの検討がなされている。これらの調査は主に散乱カーネルを厳密に解くことに関するものであり、膨大な計算コストを使用することで、統計的手法や超多群における反復方を用いた決定論的手法によって検討されてきた。

ここで、膨大な計算コストを回避するため、散乱カーネルを簡略的に取り扱う手法が検討された。この手法は Up-scattering Approximation (UA) 法と呼ばれ、核データ処理コード NJOY のモジュールの一つである THERMOR に適用された。この手法を用いた結果、大幅に計算コストを削減させた上で、厳密な散乱カーネルを取り扱う方法と同程度の精度が得られることを確認されている。

上記の研究の多くはウラン燃料に対して実施されてきている。ただし、その他の燃料については、熱外領域における熱振動を考慮することによるドップラー係数への影響評価は十分になされていない。さらに、トリウム燃料のドップラー係数はウラン燃料よりも負側に大きくなることが確認されているが、Th-232 の共鳴積分は U-238 よりも小さく、ドップ

ラー係数の傾向と逆になっている。このように、このようにトリウム燃料のドップラー係数については不明な点も存在していた。そこで、まず、トリウム燃料のドップラー係数はウラン燃料よりも負側に大きくなる原因を明らかにし、さらにトリウム燃料と MOX 燃料を含んだ複数の種類の燃料を対象として、熱外領域における熱振動がドップラー係数に与える影響を評価した。

2.2. トリウム燃料とウラン燃料のドップラー係数の比較

Th-232 は U-238 よりも共鳴積分は小さいため、共鳴積分の比較ではトリウム燃料のほうがドップラー係数は小さくなるように考えられる。しかし、実際には、トリウム燃料はウラン燃料よりもドップラー係数が大きいことが確認されており、共鳴積分だけではドップラー係数の大小を説明できない。そこで、感度係数を用いることで、ドップラー係数に影響を及ぼす反応・エネルギー領域を調査し、ドップラー係数の大小関係を決定する要因を調査する。

本節では、感度係数を用いたドップラー係数の計算手法を 2.2.1 節にまとめ、計算条件を 2.2.2 節に、結果と考察を 2.2.3 節に示す。

2.2.1. 計算手法

本節では、2.2.1.1～2.2.1.3 節でドップラー効果を取り入れた断面積の算出方法をまとめる。2.2.1.4 節で感度係数を用いた計算手法をまとめる。

2.2.1.1. ドップラー効果

原子核の反応断面積はエネルギーの関数で与えられるが、核種の断面積が共鳴を持っている場合、原子核が熱運動をしていると中性子の相対速度に幅ができるため、中性子エネルギーに対する断面積にも広がりができる。核種の熱振動を考慮した実効的な断面積は核種の速度で平均化したミクロ反応率と釣り合うように定義される。

$$v\sigma^{T}(v)=\int\left|\vec{v}-\vec{V}\right|\sigma^{0}\left(\vec{v}-\vec{V}\right)P\left(\vec{V}\right)d\vec{V} \qquad (2\text{-}1)$$

核種の温度により断面積が変わるこの効果をドップラー効果と呼ぶ。
相対エネルギーEr は実験室系でのターゲット核種の運動エネルギーEa と z 軸方向の速さ Vz を用いて

$$E_r=\frac{1}{2}M_r\left(\vec{v}-\vec{V}\right)^2=\frac{M}{m+M}E+\frac{m}{m+M}E_A-\frac{mM}{m+M}\left(\frac{2E}{m}\right)^{\frac{1}{2}}V_z \qquad (2\text{-}2)$$

と表される。

重核種では M/.(m+M)≒1,m/(m+M)<<1 より次式のように示される。

$$E_r \approx \frac{M}{m+M}\left(E-(2mE)^{\frac{1}{2}}V_z\right) \approx E-(2mE)^{\frac{1}{2}}V_z \qquad (2\text{-}3)$$

ターゲット核種の熱運動による速度分布がマクスウェル分布であると仮定する。Er は Vz にのみ依存しているので、x,y 方向について独立に積分できるため以下のようになる。

$$\begin{aligned}\sigma(E) &= \frac{1}{v}\int_{-\infty}^{\infty} v_r\sigma(E_r)\left(\frac{M}{2\pi kT}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left(-\frac{M}{2kT}V_z^2\right)dV_z \\ &= \left(\frac{1}{E}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{m+M}{M}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{M}{2\pi kT}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty} E_r^{\frac{1}{2}}\sigma(E_r)\exp\left(-\frac{M}{2kT}V_z^2\right)dV_z\end{aligned} \qquad (2\text{-}4)$$

反応 a の断面積は Breit-Wigner の 1 準位公式より

$$\sigma_a(E_r) = \sigma_1\frac{\Gamma_\gamma}{\Gamma}\left(\frac{E_1}{E_r}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{1+y^2} \qquad (2\text{-}5)$$

と表される。ただし、以下のように

$$\begin{aligned}\sigma_1 &= \frac{4\pi\lambda'^2_1\, g_j\Gamma_n(E_1)}{\Gamma}, \\ y &= \frac{2}{\Gamma}(E_r - E_1)\end{aligned} \qquad (2\text{-}6)$$

と置いている。

式(2-4)と式(2-5)より

$$\begin{aligned}&\sigma_a(E) \\ &= \left(\frac{m+M}{M}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_1}{E}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{\sigma_1\Gamma_\gamma}{\Gamma}\left(\frac{M}{2\pi kT}\right)^{\frac{1}{2}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\exp\left(-\frac{MV_z^2}{2kT}\right)}{1+\left(2(E_r-E_1)/\Gamma\right)^2}dV_z\end{aligned} \qquad (2\text{-}7)$$

となる。ここで x を以下のようにおくことで式(2-8)のように変形できる。

$$x = \frac{2}{\Gamma}(E-E_1)$$

$$\sigma_a(E) = \frac{\sigma_1 \Gamma_\gamma}{\Gamma}\left(\frac{E_1}{E}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{\Gamma}{\Gamma_D} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(-\frac{\zeta^2}{4}(x-y)^2\right)}{1+y^2} dy$$

$$= \frac{\sigma_1 \Gamma_\gamma}{\Gamma}\left(\frac{E_1}{E}\right)^{\frac{1}{2}} \psi(\zeta, x) \qquad (2\text{-}8)$$

ここで、ψ 関数は以下のように定義される。

$$\psi(\zeta, x) = \frac{\zeta}{2\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp\left(-\zeta^2 (x-y)^2/4\right)}{1+y^2} dy \qquad (2\text{-}9)$$

0K のときの断面積と温度を上げたときの断面積を図 2.2-1 に示す。このように、断面積は温度上昇によって断面積の幅が広がり、ピークは下がるがその付近のエネルギーでの断面積が大きくなる。断面積のエネルギー積分値はほぼ変化しないが、断面積の変化によって中性子スペクトルの歪むため反応率は温度によって変化する。この温度による反応率の変化がドップラー効果である。

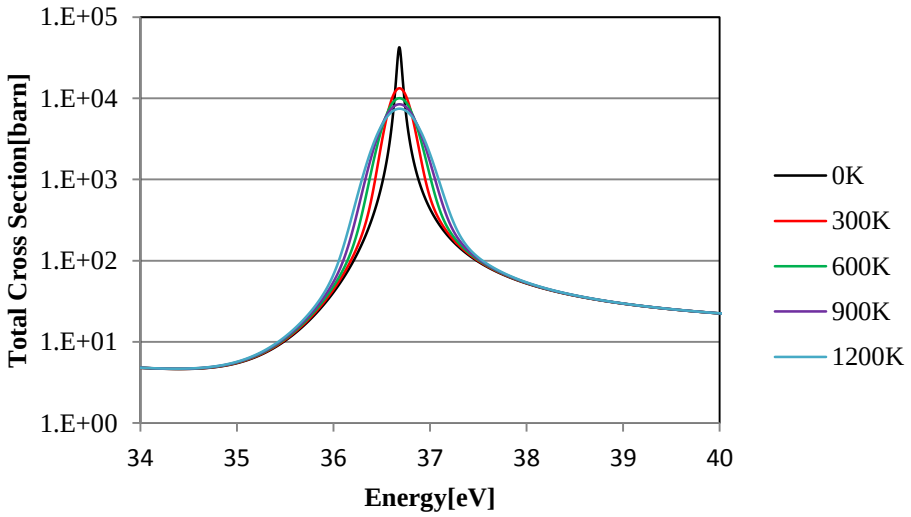


図 2.2-1　共鳴断面積の温度依存性(核種は U-238, 共鳴エネルギー: 36.68eV)

2.2.1.2.　実効断面積

核種の反応断面積は図 2.2-2 のようにエネルギーの関数であり連続した値をとる。しかし、決定論的手法で核特性を評価する場合、輸送方程式はエネルギーで離散化されているため、

区切られたエネルギー群ごとに平均化された断面積を用意する必要がある。エネルギー群で分けられた多群の実効断面積は単なるエネルギー平均値ではなく、式(2-10)で示すように中性子スペクトルを掛けて平均化した値である。そのため多群断面積はそのエネルギー群での反応率が一致するように定められている。

$$\sigma_x^g = \frac{\int_{E\in g} dE\sigma_x(E)\phi(E)}{\int_{E\in g} dE\phi(E)} \qquad (2\text{-}10)$$

中性子スペクトルは考えている体系の組成、温度等によって異なり詳細なエネルギー群での計算を行うことで求められるが、体系を厳密に模擬した上で詳細なエネルギー群を用いた計算を行うことは計算時間の観点で現実的とはいえない。そのため、実効断面積の計算はいくつかの近似と複雑な過程を経て求められることとなる。

中性子スペクトルは媒質のマクロ断面積によって凡そそのエネルギー分布が決まる。媒質中に共鳴核種が存在する場合、マクロ断面積における共鳴断面積の占める割合で、共鳴断面積による中性子スペクトルの窪みの程度が決まるといえる。共鳴断面積の中性子スペクトルの窪みに対する影響を定量的に表現するパラメータとして背景断面積と呼ばれる値が導入される。背景断面積は非共鳴核種の全マクロ断面積を共鳴核種のミクロ断面積に焼き直した値として考える断面積で、均質体系について以下のように定義される。

$$\sigma_0^j = \frac{\sum_i N_i\sigma_i - N_j\sigma_j}{N_j} \qquad (2\text{-}11)$$

このとき、共鳴核種は対象としている核種 j のみであると仮定している。
背景断面積が 0 のときは、完全遮蔽状態といい媒質が核種 j のみで構成されている場合である。また、背景断面積が無限に大きい場合、非共鳴核種中に共鳴核種 j がただ一つだけ存在しているとする状態で無限希釈状態と呼ばれる。この状態では核種の共鳴が中性子束に対して影響を持たないため、中性子スペクトルの窪みが存在しない。この状態の中性子スペクトルから計算される多群断面積を無限希釈断面積と呼ぶ。背景断面積の大きさによって中性子スペクトルの窪みの程度が変わり、作成される多群断面積の大きさも変化する。背景断面積と温度を指定した代表体系での中性子スペクトルを計算して式(2-10)より実効断面積を作成する。特定の背景断面積と温度に対して作成された多群断面積とある温度での無限希釈断面積の比から以下のように Bondarenko-type の自己遮蔽因子が定義される。

$$f(\sigma_0, T) = \frac{\sigma(\sigma_0, T)}{\sigma(\infty, T_{ref})} \qquad (2\text{-}12)$$

実効断面積は、体系の背景断面積と、温度でテーブルの値から内外挿することで求められる。実効断面積の計算に必要な無限希釈断面積と、背景断面積や温度について与えられる自己遮蔽因子のような補正因子をデータセットとしてまとめたものを炉定数ライブラリと呼ぶ。

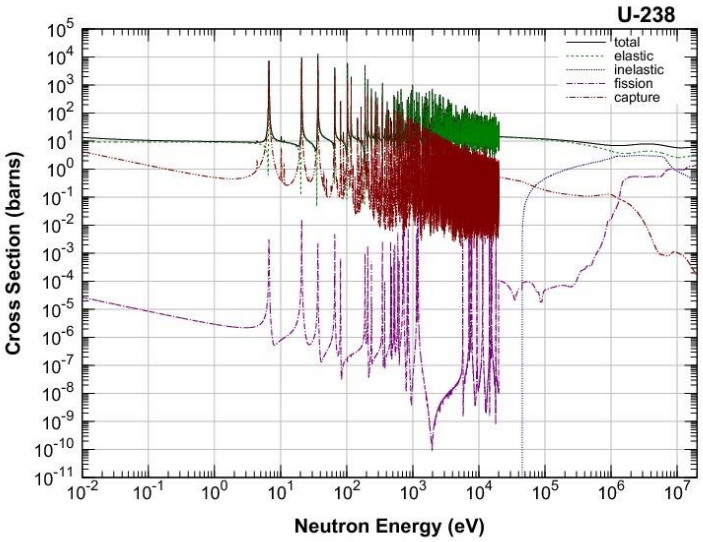


図 2.2-2　U-238 の連続エネルギーの断面積

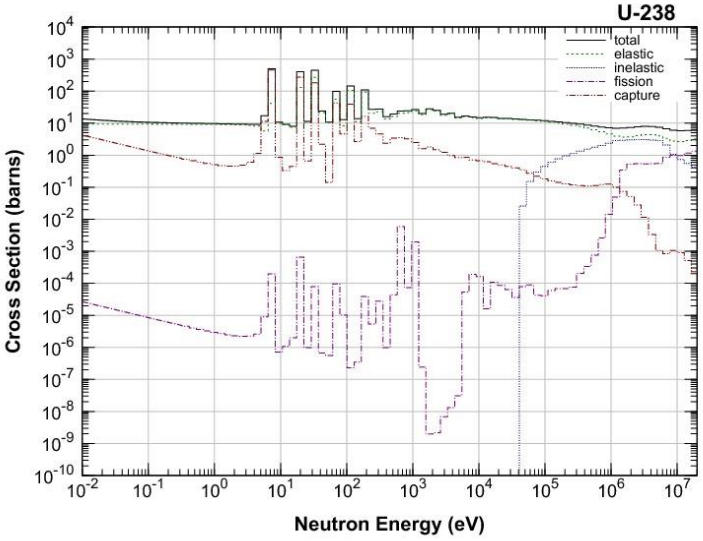


図 2.2-3　U-238 の多群断面積

出典) http://wwwndc.jaea.go.jp/jendl/j40/J40_J.html

2.2.1.3.　多群断面積作成に用いる重み関数

重み関数として用いる中性子スペクトルの近似的に表現する方法として、NR 近似や WR 近似、そしてそれらの中間である IR 近似と呼ばれるものがある。

重み関数として均質体系の中性子スペクトルを用いる場合、以下の減速方程式を用いて求める。

$$\left[\sigma_t(E)+\sigma_0\right]\phi(E)=\sigma_0 C(E)+\int_E^{E/\alpha} K(E'\rightarrow E)\sigma_s(E')\phi(E')dE \qquad (2\text{-}13)$$

ここで、*C(E)*は weight function で、Fission Source や他の核種による減速を考慮した項である。断面積が共鳴を持つようなエネルギー群では*C(E)*は散乱に起因する項のみである。*K(E→E')*は散乱カーネルと呼ばれるもので、*K(E'→E)dE* はエネルギー*E'*で散乱した中性子がエネルギー*E~Ed+E* へ散乱される確率を表す。この式により、多群の核計算に使用される断面積が得られる。

2.2.1.4.　感度係数を用いた計算手法

ドップラー係数は次式で評価することが可能である。

$$\mathrm{DRC}\equiv\frac{1/k-1/k'}{dT}=\frac{dk/kk'}{dT} \qquad (2\text{-}14)$$

また、断面積を σ、着目する核種をi、反応の種類をR、エネルギー群をgとすると、無限増倍率に対する断面積の感度係数 S は次式で求めることができる。

$$S_{i,R,g}\equiv\frac{dk/k}{(d\sigma/\sigma)_{i,R,g}} \qquad (2\text{-}15)$$

感度係数を用いると、ドップラー係数は次式のように、各核種、反応、エネルギー群の寄与の総和として求めることができる。

$$\mathrm{RC}=\sum_i\sum_R\sum_g\frac{\dfrac{dk/k}{(d\sigma/\sigma)_{i,R,g}}\times(d\sigma/\sigma)_{i,R,g}\times\dfrac{1}{k'}}{dT}=\sum_i\sum_R\sum_g\frac{S^k_{i,R,g}\times(d\sigma/\sigma)_{i,R,g}}{dT\times k'} \qquad (2\text{-}16)$$

式(2-16)に示されるように、ドップラー係数は寄与の総和として求められる。このため、核種iと反応Rのドップラー係数への寄与は、次式に示すように、全エネルギー群の寄与を足し合わせることで求めることができる。このように、感度係数を用いることで、ドップラ

一係数の内訳を調査することができる。

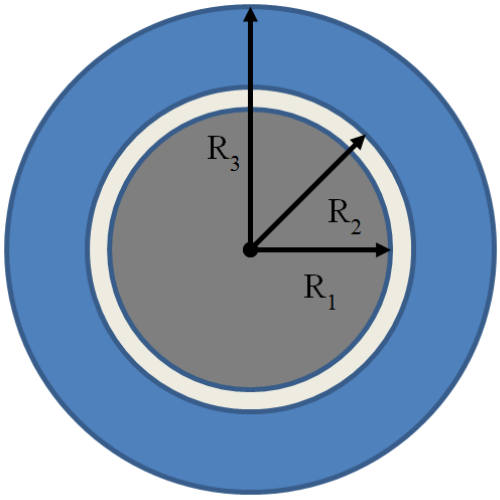
$$DRC_{i,R}=\sum_{g}\frac{S^{k}_{i,R,g}\times(d\sigma/\sigma)_{i,R,g}}{dT\times k'} \qquad (2\text{-}17)$$

2.2.2. 計算条件

計算は PWR の燃料セルを対象として実施した。計算体系を図 2.2-4 に示す。また、計算条件を表 2.2-1 に示す。また、Th-232 と U-238 のドップラー係数を比較するため、トリウム燃料とウラン燃料に存在する U-235 の重量割合は 3.0wt%に固定した。

表 2.2-1　計算条件

Fuel	Th-fuel : (U-235 + Th-232)O_2 U-fuel : (U-235 + U-238)O_2
U-235	3.0 wt%
Temperature	600 K, 900 K
Cladding	Zircalloy-4
Temperature	600 K
Moderator	H_2O (1.0 g/cc)
Temperature	600 K
Boundary condition	White reflection



R_1: 0.41 , R_2: 0.47 , R_3: 0.71 [cm]

図 2.2-4　燃料セル体系

感度係数を用いたドップラー係数への寄与を求めるために、SRAC2006 と SAINT-II を用いることとした。SRAC2006 は JAEA が開発した核計算コードシステムであり、様々な幾何形状に対して核特性を評価できることが可能となっている。SAINT-II は一般化摂動理論に基づいて感度係数を求めることが可能である大阪大学で開発された感度係数解析コードである。使用する評価済み核データライブラリは JENDL4.0(u)とし、107 群のエネルギー群構造で感度係数を求めた。

2.2.3. 計算結果と考察

ドップラー係数に影響を及ぼす核種とその反応について、ドップラー係数への寄与をまとめた結果を表 2.2-2 に示す。表 2.2-2 より、U-235 の影響はトリウム燃料とウラン燃料で差異はみられるものの、ドップラー係数への寄与は Th-232 と U-238 の捕獲反応にが支配的になっていることが確認できる。

表 2.2-2　ドップラー係数の反応別の内訳

	Th-232, U-238		U-235		Total
	Capture	Fission	Capture	Fission	
Th-fuel	-2.52E-5	9.92E-13	-5.95E-7	1.42E-7	-2.56E-5
U-fuel	-1.65E-5	7.53E-10	-4.12E-7	1.04E-7	-1.68E-5
Difference (Th-fuel – U-fuel)	-8.65E-6	-7.52E-10	-1.83E-7	+3.78E-8	-8.79E-6

ここで、ドップラー係数に対して支配的な反応である捕獲反応に着目する。U-238 と Th-232 の捕獲反応がドップラー係数に与える影響をエネルギー群に分解した結果を図 2.2-5 に示す。図 2.2-5 より、1KeV 以下の共鳴がドップラー係数に対して影響を及ぼしていることが確認できる。

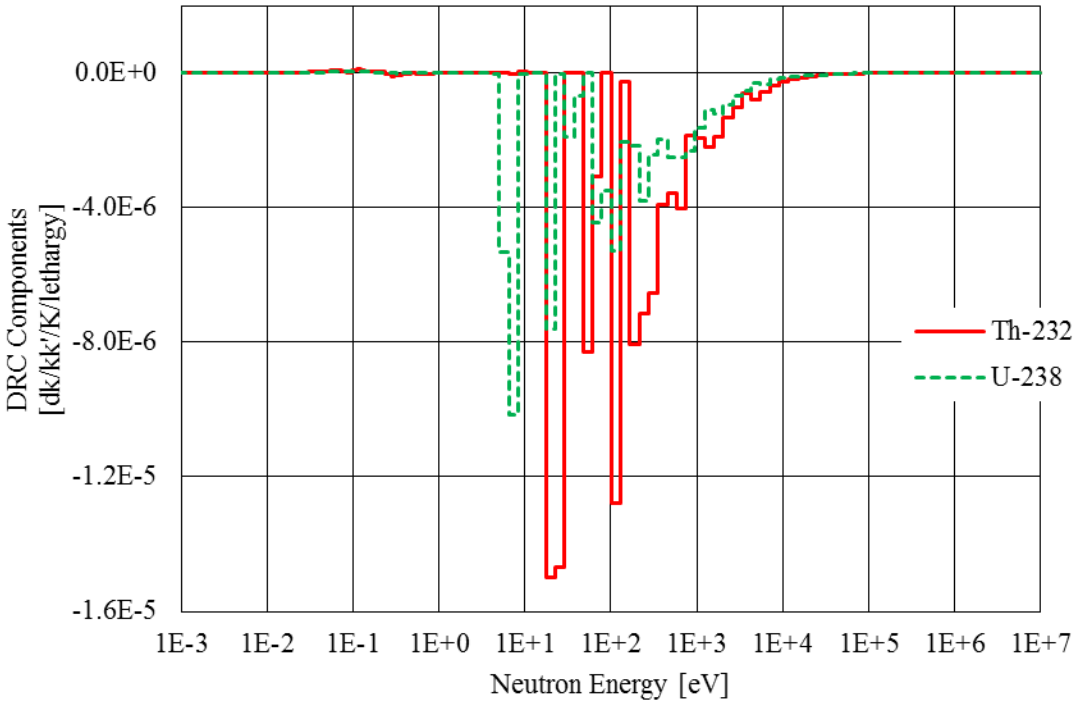


図 2.2-5　エネルギー群ごとに分解したドップラー係数への寄与の内訳

ドップラー係数への寄与は、感度係数と温度上昇による断面積変化割合の積によって表現できる。よって、さらに考察を深めるため、感度係数と温度上昇による断面積変化割合を以下に示す。

まず、Th-232 と U-238 の捕獲反応の感度係数を図 2.2-6 に示す。図 2.2-6 より、U-238 には 10eV 付近で大きな感度が見られており、これは図 2.2-7 に示される捕獲断面積から、6.7eV における巨大共鳴に起因していることが確認できる。また、Th-232 については 0.1eV 付近の感度が U-238 よりも大きく見られている。これは図 2.2-8 に示されるように 0.1eV 付近の Th-232 の捕獲断面積が高く、同じ割合で U-238 と Th-232 の捕獲断面積が変化したとしても、Th-232 の方が断面積変化量の絶対値が大きくなっていることに起因している。感度係数を比較しても、ドップラー係数への寄与の大きい数 eV 以上で Th-232 が U-238 よりも大きくなる傾向は確認できない。このことから、感度係数の影響は小さいことが確認できる。

続いて、温度上昇による捕獲断面積の相対変化を図 2.2-9 に示す。図 2.2-9 より、10eV 以上で、Th-232 の断面積変化割合が U-238 よりも大きくなっていることが確認できる。このことが、Th-232 が U-238 よりもドップラー係数が大きくなる主要因であることが分かる。

ここで半値幅を用いて捕獲断面積の相対変化について考察を深める。断面積の共鳴には幅があるが、温度が上昇すると共鳴の幅は断面積のエネルギー積分がほぼ保存された状態でさらに広がる。また、その広がりは熱振動に起因していることから、温度上昇による共

鳴の幅の広がりは共鳴の幅の大小に依存しない。よって、共鳴の幅が小さいときには、温度上昇時の形状の変化が大きくなると考えられる。ここで、JENDL-4.0(u)の共鳴データを使用して、10barn 以上の共鳴の半値幅の平均値をまとめた結果を表 2.2-3 に示す。表 2.2-3 より、Th-232 の半値幅は U-238 よりも小さいことが確認されることから、半値幅がドップラー広がりを評価するうえで、重要なパラメータの一つであることが確認できる。

表 2.2-3　Th-232 と U-238 の半値幅の比較

	Th-232	U-238
半値幅 [eV]	0.0983	0.149

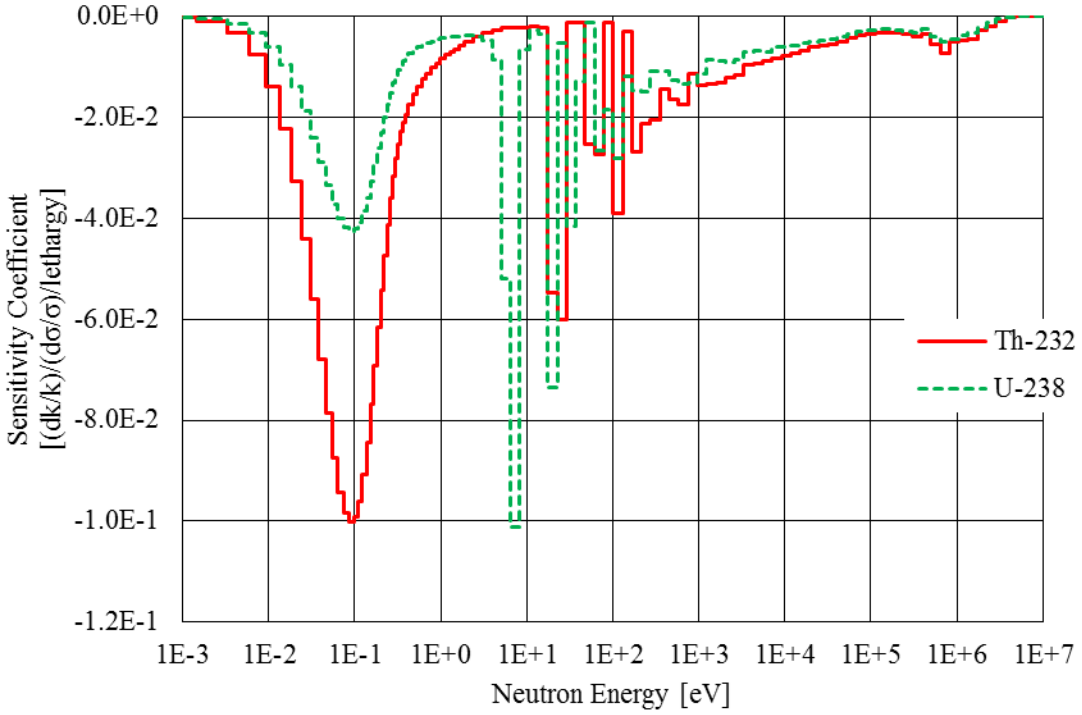


図 2.2-6　エネルギー群ごとの感度係数

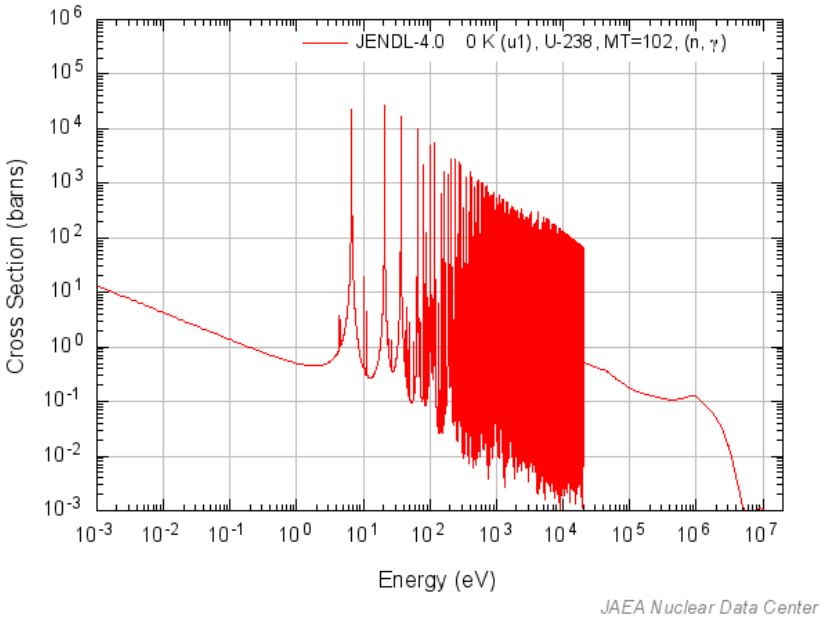


図 2.2-7 U-238 の捕獲断面積

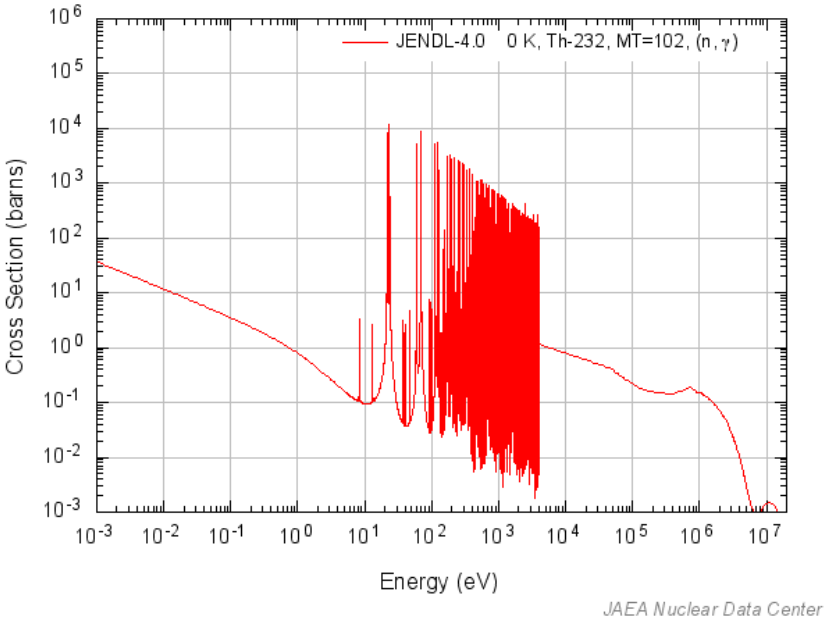


図 2.2-8 Th-232 の捕獲断面積

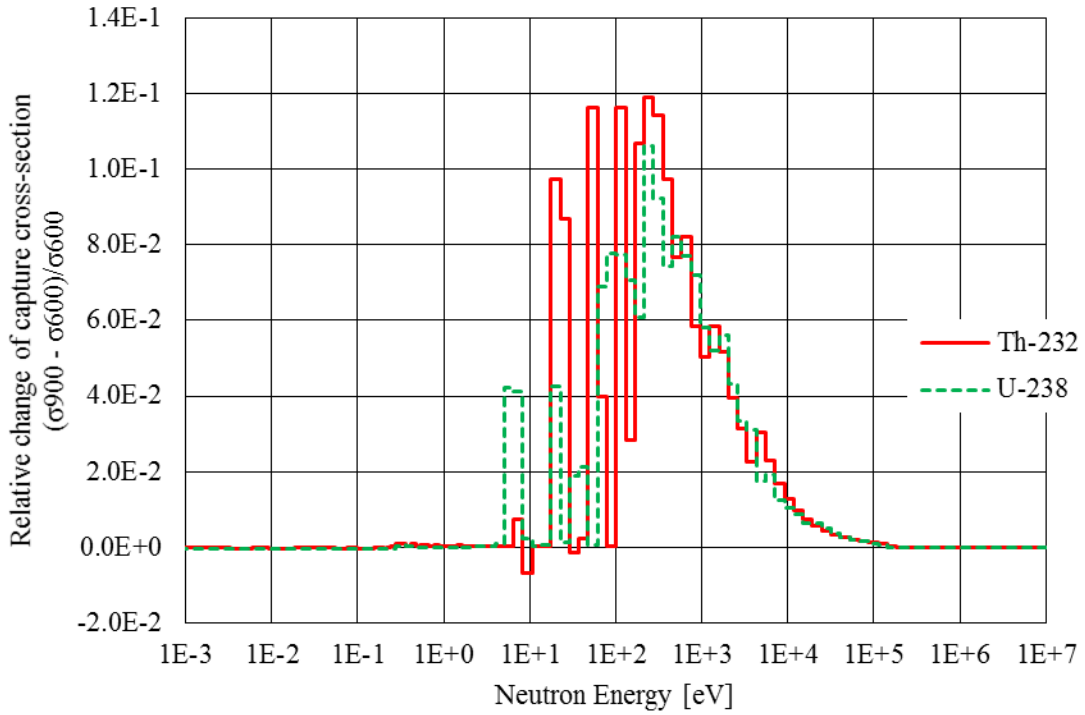


図 2.2-9　エネルギー群ごとの温度上昇による断面積変化割合

2.3. 様々な燃料のドップラー係数に対する熱振動の影響の評価

本節では、ウラン燃料、MOX 燃料、トリウム燃料を対象として、熱外領域における熱振動がドップラー係数に与える影響を評価しる。具体的には、感度係数と UA 法を用いることで、熱振動がドップラー係数に与える影響をエネルギーや反応について分解し評価を行う。

熱振動がドップラー係数に与える影響に関する計算理論を 2.3.1 節に、ドップラー係数の計算手法と計算条件をを 2.3.2 節に、計算結果を 2.3.3 節に、考察を 2.3.4 節にまとめる。

2.3.1. 計算理論

この節では、熱振動に関連する減速方程式について述べる。まず、核種が静止していると仮定したときの減速方程式を示し、次に重核種が熱運動している場合の減速方程式について述べる。最後に、決定論的手法で熱振動の影響を減速方程式に取り入れる手法である UA 法について示す。

2.3.1.1.　熱振動を無視した場合の減速方程式

実験室系での中性子、核種の速さを v_l,V_l、重心系での中性子と核種の速さを v_c,V_c とおく。ただし、核種は静止しているため $V_l=0$ である。また中性子質量を m、核種の質量を M とおき、$A=M/m$ とする。

運動量保存則とエネルギー保存則より

$$mv_c + MV_c = mv_c' + MV_c' \tag{2-18}$$

$$\frac{1}{2}mv_c^2 + \frac{1}{2}MV_c^2 = \frac{1}{2}mv_c'^2 + \frac{1}{2}MV_c'^2 \tag{2-19}$$

これらの式より、以下が成り立つ。

$$v_c = v_c' \tag{2-20}$$

$$V_c = V_c' \tag{2-21}$$

ここで、重心速度を$\vec{c}$とおくと、

$$\vec{c} = \frac{\vec{v}_l + A\vec{V}_l}{1+A} = \frac{\vec{v}_l}{1+A} \tag{2-22}$$

となり、

$$\vec{v}_c = \vec{v}_l - \vec{c} = \frac{A}{1+A}\vec{v}_l \tag{2-23}$$

$$\vec{V}_c = \vec{V}_l - \vec{c} = \frac{-1}{1+A}\vec{v}_l \tag{2-24}$$

衝突後の中性子速度を$\vec{v}_l'$とすると

$$\begin{gathered} \vec{v}_l' = \vec{v}_c' + \vec{c}, \\ v_l' = \sqrt{v_c'^2 + c^2 + 2v_c c\mu} \end{gathered} \tag{2-25}$$

散乱前後の中性子エネルギーの比をとると

$$\begin{aligned} \frac{E'}{E} &= \frac{\frac{1}{2}mv_l'^2}{\frac{1}{2}mv_l^2} = \frac{v_c'^2 + c^2 + 2v_c c\mu}{v_l^2} = \frac{\left(\frac{A}{1+A}\right)^2 v_l^2 + \left(\frac{1}{1+A}\right)^2 v_l^2 + \frac{2A}{(1+A)^2}\mu v_l^2}{v_l^2} \\ &= \frac{A^2 + 1 + 2A\mu}{(1+A)^2} \end{aligned} \tag{2-26}$$

ここで

$$\alpha = \left(\frac{A-1}{A+1}\right)^2$$

とおくと

$$\frac{E'}{E}=\frac{1+\alpha}{2}+\frac{1-\alpha}{2}\mu \qquad (2\text{-}27)$$

また重心系散乱角と実験室系散乱角の関係は次式で表される。

$$v_c'\cos\varphi_c+c=v_l'\cos\varphi_l \qquad (2\text{-}28)$$

$$\cos\varphi_l=\frac{1+A\cos\varphi_c}{1+A}\cdot\frac{v_l}{v_l'}=\frac{1+A\cos\varphi_c}{\sqrt{1+A^2+2A\cos\varphi_c}} \qquad (2\text{-}29)$$

$E\rightarrow E'$への散乱確率は重心系等方散乱の場合、散乱角がμ_cになる確率と対応する。

$$K(E\rightarrow E')dE'=f(\varphi_c)d\varphi_c=f(\mu_c)d\mu_c=\frac{d\Omega}{4\pi}=\frac{\sin\theta d\theta}{2}=\frac{1}{2}d\mu_c \qquad (2\text{-}30)$$

μ_cは-1~1 の積分範囲をとるので、

$$f(\mu_c)=\frac{1}{2}$$

であるため、散乱カーネルは

$$K(E\rightarrow E')=\frac{1}{2}\frac{d\mu_c}{dE'}=\frac{1}{2}\frac{2}{(1-\alpha)E}=\frac{1}{(1-\alpha)E} \qquad (2\text{-}31)$$

となる。つまり、核種が静止している場合、散乱カーネルは散乱後のエネルギーE'によらず、入射エネルギーE のみで決まる。また、このモデルでは下方散乱しか起こらない。核種が静止していると仮定するこの散乱モデルを Asymptotic Model と呼ぶこととする。Asymptotic Model を用いると減速方程式は以下のように表現される。

$$[\sigma_t(E)+\sigma_0]\phi(E)=\sigma_0C(E)+\int_E^{E/\alpha}\frac{1}{(1-\alpha)E'}\sigma_s(E')\phi(E')dE' \qquad (2\text{-}32)$$

2.3.1.2.　核種の熱振動を考慮した場合の減速方程式

核種の熱運動を考慮した場合、微分散乱断面積は以下のように表現される。

$$\sigma_s^T(v\rightarrow v')=\frac{1}{v}\int_0^\infty v_r\sigma_s(v,V\rightarrow v')M^T(V)dV \qquad (2\text{-}33)$$

ただし、核種の熱運動は Maxwell 分布に従うとしている。

$$M^T(V)=\left(\frac{Am}{2\pi kT}\right)^{\frac{3}{2}}\exp\left(-\frac{AmV^2}{2kT}\right) \qquad (2\text{-}34)$$

重心系等方散乱を仮定した場合、微分散乱断面積は Ouisroumen と Sanchez によって導かれ式(3.2-3)で表現される。核種の熱運動を考慮に入れたこの散乱モデルを Exact Model と呼ぶこととする。

$$\sigma_s^T(E\to E')=\frac{\beta^{\frac{5}{2}}}{4E}\exp\left(\frac{E}{kT}\right)\int_0^{\infty}t\sigma_s^{tab}\left(\frac{kT}{A}t^2\right)\exp\left(-\frac{t^2}{A}\right)\psi(t)dt \qquad (2\text{-}35)$$

$$\begin{aligned}\psi(t)&=H(t_+-t)H(t-t_-)[erf(t+\varepsilon_{\min})-erf(\varepsilon_{\max}-t)]\\&+H(t-t_+)[erf(t+\varepsilon_{\min})-erf(t-\varepsilon_{\min})]\end{aligned} \qquad (2\text{-}36)$$

ここで H(x)はヘビサイド関数、erf(x)は誤差関数と呼ばれる。以下のように表わされる。

$$H(x)=\begin{cases}0: x\le 0\\1: x>0\end{cases}$$

$$erf(x)=\frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x\exp(-t^2)dt$$

また t_+,t_-は以下で表される。

$$t_\pm=\frac{\varepsilon_{\max}\pm\varepsilon_{\min}}{2}$$

$$\varepsilon_{\max}^2=t^2kT\frac{A+1}{A}\max(E,E')$$

$$\varepsilon_{\min}^2=t^2kT\frac{A+1}{A}\min(E,E')$$

したがって、減速方程式は以下のように書き換えられる。

$$[\sigma_t(E)+\sigma_0]\phi(E)=\sigma_0C(E)+\int_{E_{\min}}^{E_{\max}}K^{Exact}(E'\to E)\sigma_s(E')\phi(E')dE' \qquad (2\text{-}37)$$

ただし、式における散乱カーネル $K^{Exact}(E\to E')$は式の微分散乱断面積をそのエネルギーにおけるドップラー広がりを考慮した断面積で割ったものである。

2.3.1.3.　上方散乱中性子束を近似した減速方程式

従来の減速方程式(2-32)を解く場合、エネルギーE での中性子束は $E' \geqq E$ のエネルギーからの散乱を考慮すれば求まったため、高エネルギー側から順に解いていくことができた。しかし式(2-37)を解く場合、エネルギーE の中性子束は $E_{max} \geqq E \geqq E_{min}$ のエネルギーからの散乱を考えるため、従来の減速方程式と同じく高エネルギー側から解いていくためには、$E \geqq E' \geqq E_{min}$ のエネルギーからの散乱項を計算する場合の中性子束に対して近似が必要となる。

近似的に表現する中性子束を $\phi'(E)$ と置くと、式(2-37)は以下のようになる。

$$\begin{aligned}\left[\sigma_t(E)+\sigma_0\right]\phi(E) = \sigma_0 C(E) &+ \int_E^{E_{\max}} K(E' \to E)\sigma_s(E')\phi(E')dE' \\ &+ \int_{E_{\min}}^{E} K(E' \to E)\sigma_s(E')\phi'(E')dE'\end{aligned} \tag{2-38}$$

右辺第三項である上方散乱項の中性子束に、NR 近似を仮定する。

$$\phi'(E') \propto \frac{1}{\sigma_t(E')+\sigma_0} \cdot \frac{1}{E'} \tag{2-39}$$

そのとき、式(2-38)は以下のように変形される。

$$\begin{aligned}\left[\sigma_t(E)+\sigma_0\right]\phi(E) = \sigma_0 C(E) &+ \int_E^{E_{\max}} K(E' \to E)\sigma_s(E')\phi(E')dE' \\ &+ \int_{E_{\min}}^{E} K(E' \to E)\sigma_s(E')\frac{1}{\sigma_t(E')+\sigma_0} \cdot \left(\sigma_t(E')+\sigma_0\right)\phi(E')dE'\end{aligned} \tag{2-40}$$

上方散乱項の中性子束に近似を用いることで従来と同じく高エネルギー側から解いていけるようになった。上方散乱項の中性子束に近似を用いているこの手法は Up-scattering Approximation(UA)法と呼ばれている。

2.3.2. 評価手法と計算条件

本節では、感度係数を用いる無限増倍率によるドップラー係数の評価方法と、計算を実施する体系について示す。

2.3.2.1.　評価方法

UA 法で求める無限増倍率 k_{UA} は次式で求めることができる。

$$k_{UA} = k_{conv} \cdot \left(1 + \sum_g d^g \cdot S^g\right) \tag{2-41}$$

ここで、gはエネルギー群を示しており、k_{conv}は Asymptotic モデルに基づいて SRAC2006 で計算される無限増倍率である。また、S^gは SRAC2006 と SAINT-II で計算される無限増倍率に対する断面積の感度係数となる。また、d^g は Asymptotic モデルと厳密な上方散乱モデルで計算される断面積の相対差となる。ここで、感度係数は次式で求めることができる。

$$S^g = \frac{dk/k}{d\sigma^g/\sigma^g} \qquad (2\text{-}42)$$

式(2-42)で使用されるσ^gはエネルギー群gにおける群平均の断面積である。

ドップラー係数は燃料温度の異なる二つの無限増倍率から求めることができるパラメータであり、次式のように求めることができる。

$$D.C_{method} = \left(\frac{1}{k_{low,method}} - \frac{1}{k_{high,method}}\right)/\Delta T\ , \qquad method = conv, UA. \qquad (2\text{-}43)$$

式(2-43)で、$k_{low,method}$と$k_{high,method}$は、それぞれ低い燃料温度と高い燃料温度で計算される無限増倍率となる。本節で示された感度係数を用いる評価方法は、熱外領域における上方散乱がドップラー係数に与える影響を調べるうえで有用な手法となる。

2.3.2.2.　幾何形状

ドップラー係数は図 2.3-1 に示される燃料ピンセル体系で評価した。計算条件と濃縮度・富化度は表 2.3-1 と表 2.3-2 に示されるとおりである。表 2.3-2 に記載されるとおり、濃縮度や富化度に対する依存性を評価するため、ウラン燃料、MOX 燃料、トリウム燃料については複数の濃縮度や富化度の計算ケースを設けている。

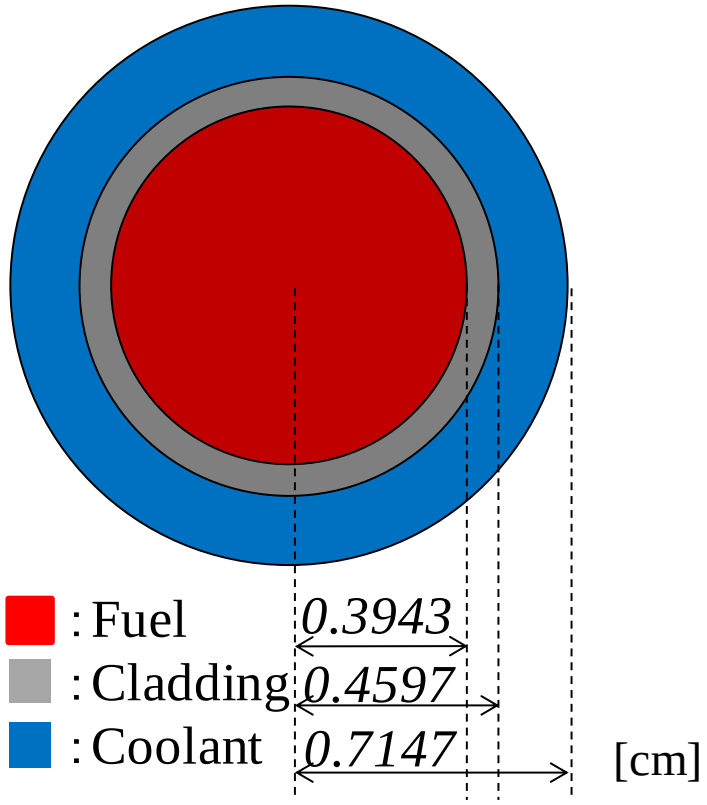


図 2.3-1　燃料ピンセル体系

表 2.3-1　計算条件

Fuel Temperature	600 K, 900 K
Cladding material	Zircalloy-4
Temperature	600 K
Coolant	H_2O [1.0 g/cc]
Temperature	600 K
Boundary condition	White reflection

表 2.3-2　燃料の濃縮度・富化度

UO_2 fuel	0.711~5wt%
MOX fuel	4~20wt% using following Pu vector
	Pu-239　45wt%
	Pu-240　30wt%
	Pu-241　15wt%
	Pu-242　10wt%
Thorium-based fuel	0.711~5wt%

2.3.3. 計算結果

熱外領域における熱振動がドップラー係数に与える影響を本節にまとめる。ウラン燃料のドップラー係数に対し、熱外領域の熱振動が与える影響を各反応で分解した結果を表 2.3-3 に、各エネルギー領域で分解した結果を表 2.3-4 に示す。MOX 燃料に対する同様の結果を表 2.3-5、表 2.3-6 に、トリウム燃料に対する同様の結果を表 2.3-7、表 2.3-8 示す。

表 2.3-3　ウラン燃料のドップラー係数に与える影響を各反応で分けた結果

Nuclide reaction	Enrichment [wt%]		
	0.711	3.1	5
U-238 Capture	8.9%	9.4%	9.4%
U-235 Capture	0.0%	0.0%	0.0%
U-235 Fission	0.0%	0.0%	0.0%
all	8.9%	9.4%	9.4%

表 2.3-4　ウラン燃料のドップラー係数に与える影響をエネルギーで分けた結果

Energy Range [eV]	Enrichment [wt%]		
	0.711	3.1	5
3.93 ~ 5.04	0.0%	0.0%	0.0%
5.04 ~ 6.48	-0.1%	-0.1%	-0.1%
6.48 ~ 8.32	0.9%	0.9%	0.9%
8.32 ~ 10.68	0.0%	0.0%	0.0%
10.68 ~ 13.71	0.0%	0.0%	0.0%
13.71 ~ 17.60	0.0%	0.0%	0.0%
17.60 ~ 22.60	2.0%	2.1%	2.1%
22.60 ~ 29.02	0.0%	0.0%	0.0%
29.02 ~ 37.27	4.3%	4.6%	4.6%
37.27 ~ 47.85	-0.2%	-0.2%	-0.2%
47.85 ~ 61.44	0.0%	0.0%	0.0%
61.44 ~ 78.89	1.3%	1.4%	1.4%
78.89 ~ 101.3	0.0%	0.0%	0.0%
101.3 ~ 130.1	0.7%	0.7%	0.7%

表 **2.3-5　MOX** 燃料のドップラー係数に与える影響を各反応で分けた結果

Nuclide reaction	Enrichment [wt%]		
	4	8	20
U-238 Capture	6.8%	6.4%	5.7%
Pu-239 Fission	0.0%	0.0%	0.0%
Pu-239 Capture	0.0%	0.0%	0.1%
Pu-240 Capture	0.0%	0.1%	0.5%
Pu-241 Fission	0.0%	0.0%	0.0%
Pu-241 Capture	0.0%	0.0%	0.0%
Pu-242 Capture	0.0%	0.0%	0.1%
all	6.8%	6.5%	6.3%

表 **2.3-6　MOX** 燃料のドップラー係数に与える影響をエネルギーで分けた結果

Energy Range [eV]	Enrichment [wt%]		
	4	8	20
3.93 ~ 5.04	0.0%	0.0%	0.0%
5.04 ~ 6.48	-0.1%	-0.1%	-0.1%
6.48 ~ 8.32	0.7%	0.6%	0.4%
8.32 ~ 10.68	0.0%	0.0%	0.0%
10.68 ~ 13.71	0.0%	0.0%	0.0%
13.71 ~ 17.60	0.0%	0.0%	0.0%
17.60 ~ 22.60	1.5%	1.4%	1.3%
22.60 ~ 29.02	0.0%	0.0%	0.0%
29.02 ~ 37.27	3.4%	3.2%	3.1%
37.27 ~ 47.85	-0.1%	0.0%	0.3%
47.85 ~ 61.44	0.0%	0.0%	0.1%
61.44 ~ 78.89	1.0%	0.9%	0.9%
78.89 ~ 101.3	0.0%	0.0%	0.0%
101.3 ~ 130.1	0.5%	0.5%	0.4%

表 **2.3-7**　トリウム燃料のドップラー係数に与える影響を各反応で分けた結果

Nuclide reaction	Enrichment [wt%]		
	0.711	3.1	5
Th-232 Capture	3.8%	3.8%	3.7%
U-235 Capture	0.0%	0.0%	0.0%
U-235 Fission	0.0%	0.0%	0.0%
all	3.8%	3.8%	3.7%

表 **2.3-8**　トリウム燃料のドップラー係数に与える影響をエネルギーで分けた結果

Energy Range [eV]	Enrichment [wt%]		
	0.711	3.1	5
3.93 ~ 5.04	0.0%	0.0%	0.0%
5.04 ~ 6.48	0.0%	0.0%	0.0%
6.48 ~ 8.32	0.0%	0.0%	0.0%
8.32 ~ 10.68	0.0%	0.0%	0.0%
10.68 ~ 13.71	0.0%	0.0%	0.0%
13.71 ~ 17.60	0.0%	0.0%	0.0%
17.60 ~ 22.60	0.7%	0.7%	0.7%
22.60 ~ 29.02	0.4%	0.4%	0.4%
29.02 ~ 37.27	0.0%	0.0%	0.0%
37.27 ~ 47.85	0.0%	0.0%	0.0%
47.85 ~ 61.44	0.2%	0.2%	0.1%
61.44 ~ 78.89	2.2%	2.2%	2.2%
78.89 ~ 101.3	0.0%	0.0%	0.0%
101.3 ~ 130.1	0.3%	0.3%	0.3%

2.3.4. 考察

この節では、散乱カーネルと断面積描画サイト ENDFPLOT-2.0 から引用する断面積を用いて、前節で示した熱振動がドップラー係数に与える影響について考察する。

表 2.3-3 で示したとおり、ウラン燃料においてドップラー係数に与える影響が最も大きい反応は U-238 の捕獲反応であることが確認できる。また、表 2.3-4 より、最も影響の大きいエネルギー領域は、図 2.3-2 に示されるように共鳴の存在する 21, 37, 66eV 付近であることが分かった。一方、6.7eV と 102eV の共鳴については、熱振動がドップラー係数に与える影響は小さいことが分かった。

ドップラー係数自体は 6.7eV の巨大共鳴に主に由来している。ただし、全断面積に対する散乱断面積の比σ_s/σ_tが低いエネルギー領域では低くなっているため、熱振動の影響が小さくなっていることがわかる。これは、捕獲断面積は$1/v$則に基づいており、一方で散乱断面積は比較的一定に推移していることに起因している。σ_s/σ_tが小さくなると、熱振動の影響も小さくなることから、低いエネルギー領域では熱振動の影響が小さくなっている。

エネルギーが高くなると、図 2.3-4 に示されるように散乱カーネルへの熱振動の影響は小さくなる。熱振動によって中性子が上方散乱時に受け取るエネルギーは、物質の温度に依存している。そのため、受け取るエネルギーの大きさはどのエネルギー領域についても同程度となる。このことにより、散乱カーネルの変化は低いエネルギーのほうが高くなる結果となっている。よって、熱振動がドップラー係数に与える影響は主に 100eV 以下の共鳴に起因している。

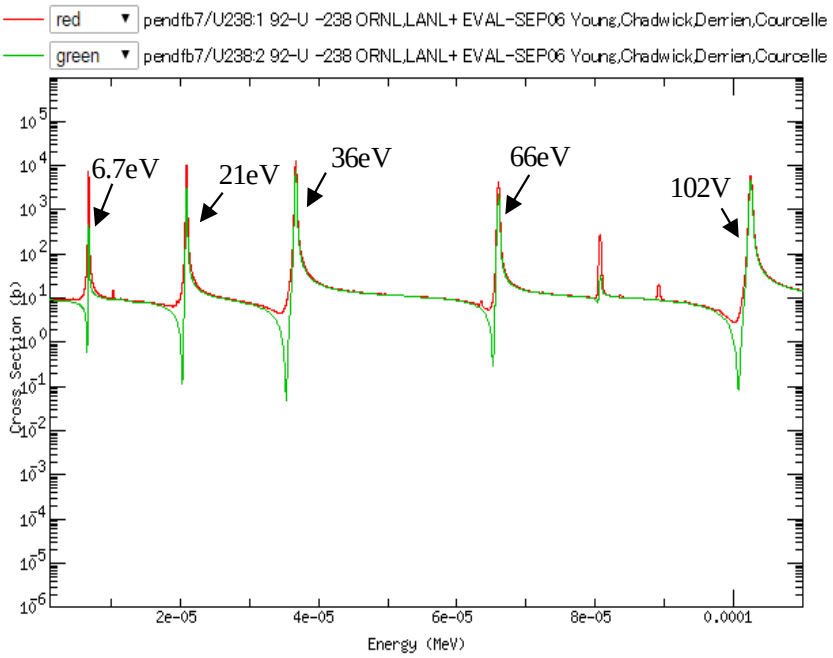
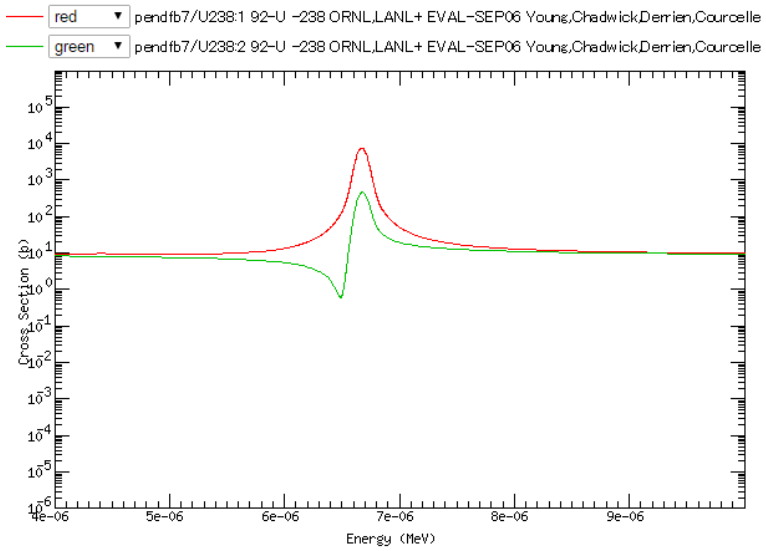
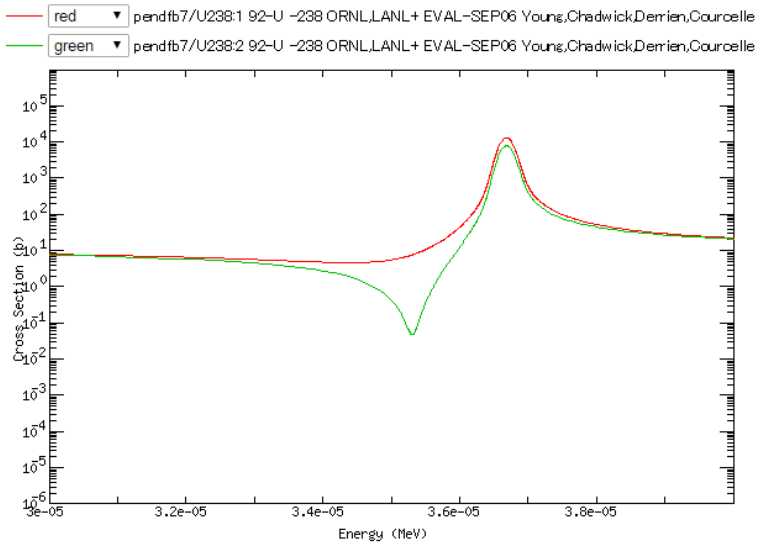


図 2.3-2　U-238 の熱外領域における全断面積と散乱断面積

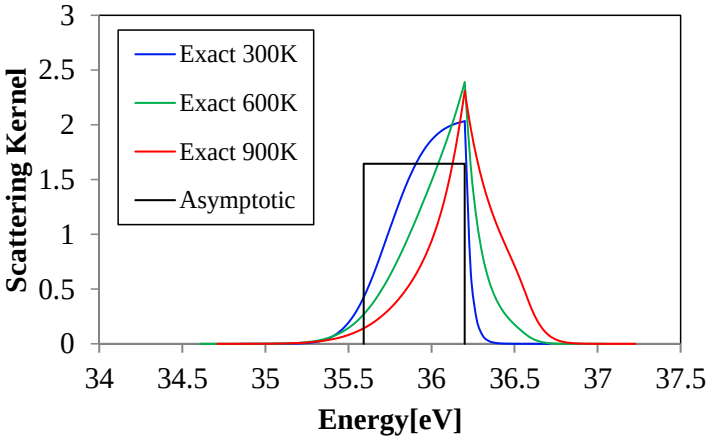


(a) cross-section around 6.7eV

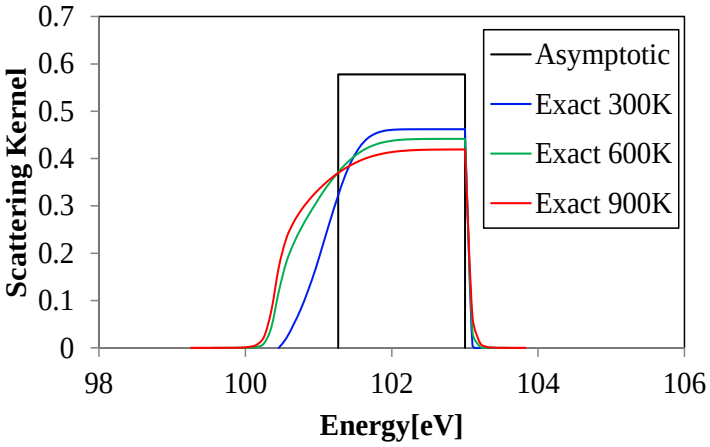


(b) cross-section around 37eV

図 2.3-3　U-238 の全断面積と散乱断面積の比較



(a) scattering kernel around 36eV



(b) scattering kernel around 102eV

図 2.3-4　U-238 の散乱カーネルの比較

MOX 燃料については、表 2.3-5 に示されるように熱振動がドップラー係数に与える影響はウラン燃料よりも小さくなっていた。また、表 2.3-6 より、Pu 核種はもっとも富化度が高いケースであっても、U-238 よりも影響が小さいことが分かった。これらの現象は Pu 核種の量と共鳴から説明ができる。ここで、ドップラー係数への影響は Pu-240 が支配的であることから、PU-240 に着目して考察を深める。Pu-240 には図 2.3-5 に示されるように熱外領域において複数の共鳴が存在しており、図 2.3-6 に示すようにいくつかの共鳴ではσ_s/σ_tが高くなっている。このことから Pu-240 の熱外領域の熱振動はドップラー係数に影響を及ぼしていることが確認できる。しかしながら、最も富化度が高いケースであっても、Pu-240 の重量割合は U-238 と比べて大幅に小さい。よって、Pu-240 の影響は U-238 よりも小さくなる結果となっている。さらに付け加えると、図 2.3-7 に示されるように、10eV から 100eV のエネルギー領域において、Pu-239 の捕獲と核分裂断面積は U-238 よりも高くなっており、MOX 燃料ではより多くの中性子が吸収されている。このことは、U-238 のドップラー係数に与える影響が小さくなる要因となっている。また、参考までに、影響の小さかった Pu-239 の全断面積と散乱断面積を図 2.3-8 に示す。図 2.3-8 より、散乱断面積が全断面積に比べて小さく、影響が小さくなることが断面積情報からも確認できる。

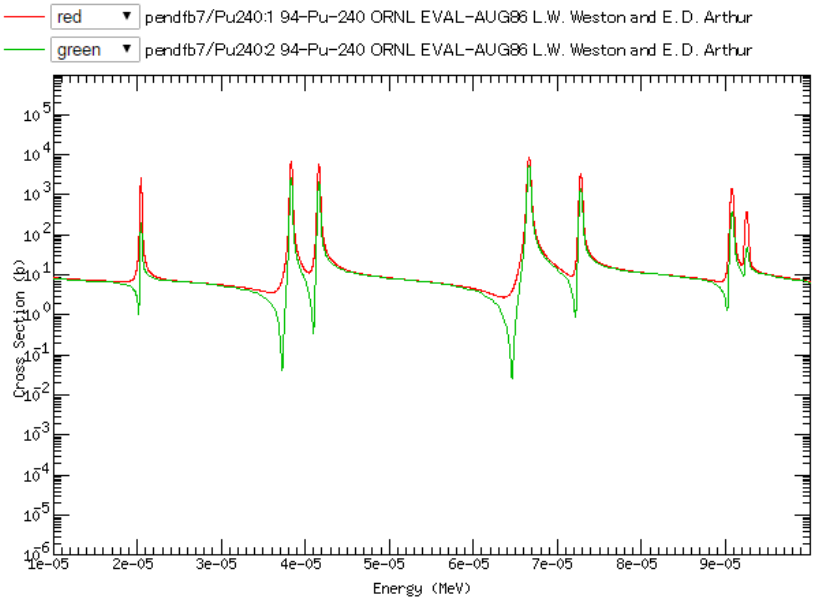
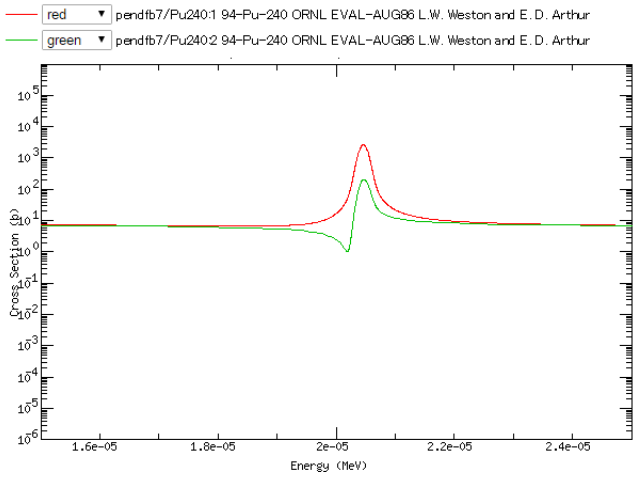
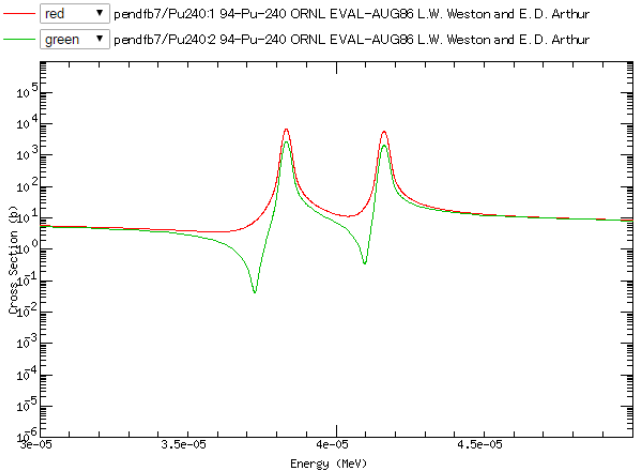


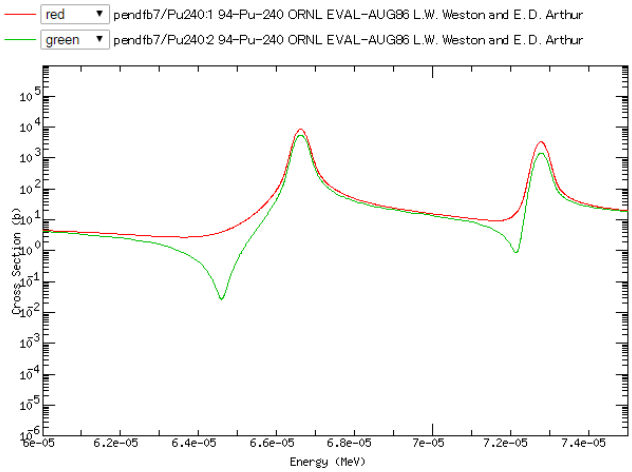
図 2.3-5　Pu-240 の熱外領域における全断面積と散乱断面積



(a) cross-section around 21eV



(b) cross-section around 40eV



(c) cross-section around 68eV

図 2.3-6　Pu-240 の全断面積と散乱断面積の比較

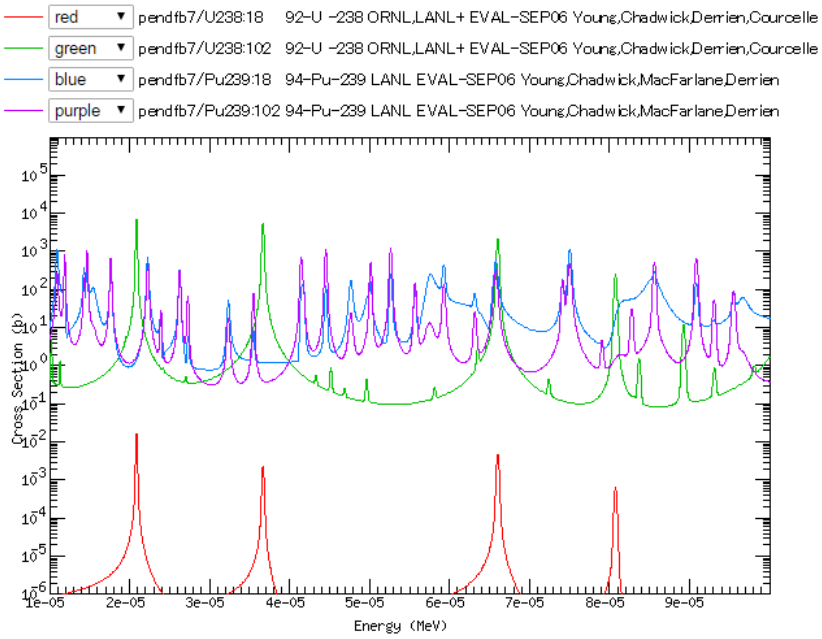


図 **2.3-7　U-239** と **Pu-239** の捕獲断面積と核分裂断面積の比較

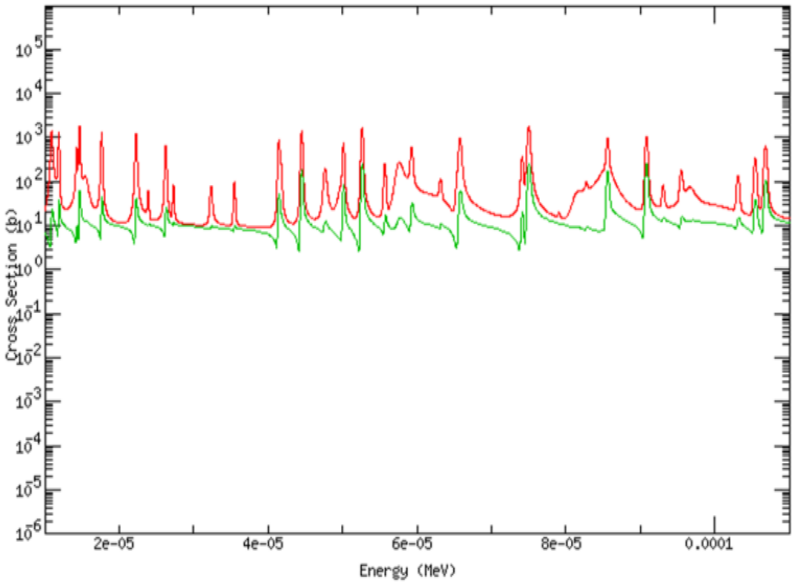


図 **2.3-8　Pu-239** の全断面積と散乱断面積の比較

表 2.3-7 より、Th-232 の熱外領域における熱振動がドップラー係数に与える影響は 4%程度であることがわかる。この結果から、影響の大きさは U-238 と比較して小さいといえる。表 2.3-8 から、熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響は、主に 69eV 付近の共鳴起因していることがわかる。Th-232 については、図 2.3-9 に示されるように、100eV よりもエネルギーの低い熱外領域で 4 つの共鳴があることが確認できる。図 2.3-10 から、23eV 付近と 60eV 付近の共鳴ではσ_s/σ_tは低くなっており、69eV 付近の共鳴でのみσ_s/σ_tが高くなっていることが確認できる。よって、Th-232 では熱外領域の熱振動がドップラー係数に影響を与えるような共鳴の数が一つのみであり、U-238 よりも少ない数となっている。このことが、Th-232 は U-238 よりもドップラー係数への影響が小さくなっていることがわかる。

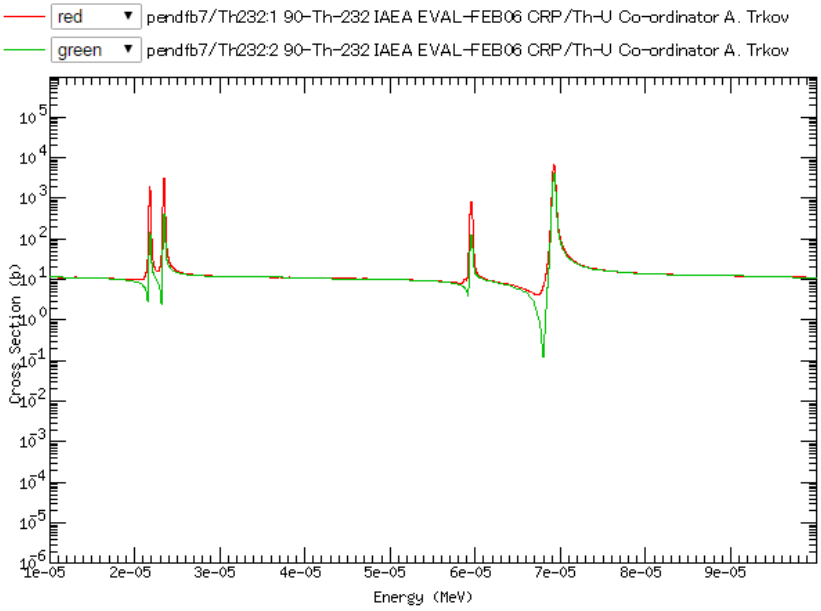
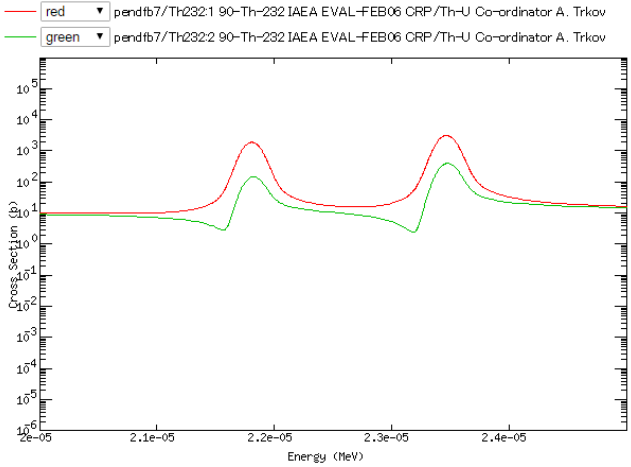
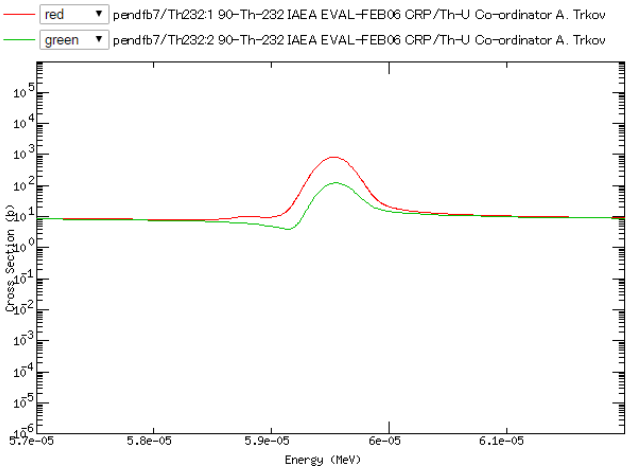


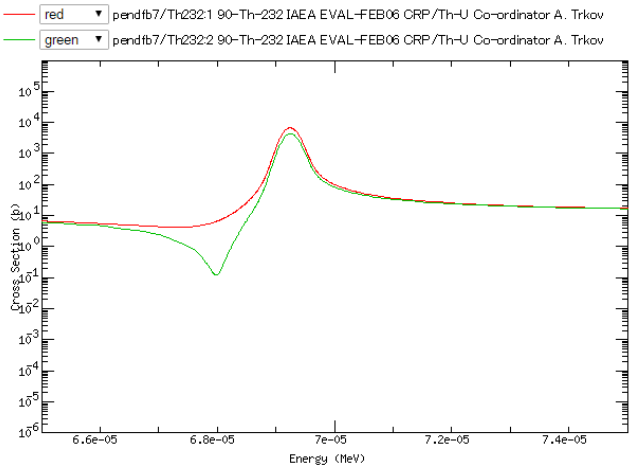
図 2.3-9　熱外領域における Th-232 の全断面積と散乱断面積



(a) cross-section around 23eV



(b) cross-section around 60eV



(c) cross-section around 69eV

図 2.3-10　Th-232 の全断面積と散乱断面積の比較

2.4. 2 章の結論

本章では、まずウラン燃料とトリウム燃料のドップラー係数を比較し、トリウム燃料のドップラー係数がウラン燃料よりも負側に大きくなる原因を究明した。続いて、ウラン燃料、MOX 燃料、トリウム燃料を対象として、熱外領域における熱振動がドップラー係数に与える影響を調査し、断面積や散乱カーネルの変化の観点で考察を実施した。

トリウム燃料のドップラー係数がウラン燃料よりも負側に大きくなる原因としては、ドップラー係数に影響を与える共鳴に対して、トリウム燃料の半値幅がウラン燃料よりも小さいことが挙げられることを確認した。このため、一般的に、トリウム燃料のドップラー係数はウラン燃料よりも負側に大きくなる傾向が得られるといえる。

続いて、様々な燃料に対して熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響を調査した。MOX 燃料では約 6~7%の影響が見られ、U-238 の捕獲反応による影響が支配的であった。そしてトリウム燃料では UO_2 燃料と比べて Th-232 のドップラー反応度への影響が小さく、約 4%の影響が見られることを確認した。これらの現象は熱外領域の熱振動がドップラー係数に影響を与えるエネルギー領域における断面積の形から説明できることを確認している。

以上より、トリウム燃料のドップラー係数に対する考察を実施したうえで、熱外領域における熱振動を考慮した場合のドップラー係数への影響を評価した。MOX 燃料とトリウム燃料については、熱外領域における熱振動がドップラー係数に与える影響は無視できるほど小さくはないが、ウラン燃料よりかは影響が小さくなることを確認できた。この検討により、これまで明らかになっていなかったドップラー係数の誤差要因の影響が示され、現行の設計手法におけるドップラー係数の精度を確認することができた。

2.5. 2 章の参考文献

(1) Kazimi M. S., Czerwinski K. R., Driscoll M.J., Hejzlar P. and Meyer J. E., “On the Use of Thorium in Light Water Reactors,” MIT-NFC-TR-016, April 1999.

(2) 川崎憲二, 安藤真樹, 岡嶋成晃, 福島昌宏, 中野誠, 松本英樹. (2006). FCA 軽水炉模擬体系における ^{238}U ドップラー効果の予測精度評価-JENDL-3.3 ライブラリーおよび SRAC システムによる解析-. JAEA-Reserch 2006-008

(3) 花山育志, 大岡靖典, 山崎正俊, 辻雅司, 高橋千絵, 奈良林直, 島津洋一郎.実機 PWR におけるドップラー反応度係数測定手法の開発, 日本原子力学会「2007 年秋の大会」

(4) Ouisloumen, M., & Sanchez, R. (1991). A Model for Neutron Scattering Off Heavy Isotopes That Accounts for Thermal Agitation Effects. Nuclear Science and Engineering, 107, 189-200.

(5) Rothenstein, W., (2004), Proof of the formula for the ideal gas scattering kernel for nuclides with strongly energy dependent scattering cross sections. Annals of Nuclear Energy, 31, 9-23

(6) Dagan, R. (2005). On the use of S(α,β) tables for nuclides with well pronounced resonances. 32, 367-377.

(7) Becker, B., Dagan, R., Broders, (2009). C.H,M., An Alternatives Stochastic Doppler Broadening Algorithm. M&C2009

(8) Mori, T. & Nagaya, Y. (2009). Comparison of Resonance Elastic Scattering Models Newly Implemented in MVP Continuous-Energy Monte Carlo Code. Journal of Nuclear science and technology, 46, 793-798.

(9) Lee, D., Smith, K., & Rhodes, J. (2009). The impact of ^{238}U resonance elastic scattering approximations on thermal reactor Doppler reactivity. Annals of Nuclear Energy, 36, 274-280.

(10) Application of a new resonance formalism to Pressurized Water Reactors

(11) MacFarlane R.E. & Muir D. W. (1994). The NJOY Nuclear Data Processing System Version 91, LA-12740-M

(12) Russell D. Mosteller, (2006), Computational Benchmarks for the Doppler Reactivity Defect, LA-UR-06-2968

3. 熱外領域の熱振動がガドリニア添加燃料のドップラー係数に与える影響の評価

3.1. 背景

2 章の背景で示したとおり、ウラン燃料を対象として、熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響の評価はこれまでになされている。一方で、ガドリニウムのような強吸収体が存在する場合は、燃料のスペクトルの硬化、増倍率の低下、U-238 の共鳴吸収の割合低下などの影響を及ぼし、ドップラー係数に与える影響も変化すると考えられる。ただし、強吸収体が存在する体系で、熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響は詳細に研究されたことがなく、熱振動がドップラー係数に与える影響の度合いは不明となっている。

そこで、本検討ではガドリニアが添加された燃料を対象として、熱振動がドップラー係数に与える影響を評価し、さらに影響を引き起こすメカニズムを調査する。3.2 節では様々なガドリニア添加率の燃料に対して熱振動がドップラー係数に与える影響を評価する。続いて、3.3 節では詳細な計算による影響の分析結果をまとめる。3.4 節では得られた結果をふまえて考察を行い、ガドリニアが添加された燃料において熱外領域の熱振動がドップラー係数に影響を与えるメカニズムを分析する。

3.2. 熱振動がガドリニア燃料のドップラー係数に与える影響の評価

3.2.1. 評価手順

計算は図 3.2-1 に示す単一燃料ピン体系で実施した。計算条件を表 3.2-1 にまとめる。この体系は PWR の 4.8wt%ウラン燃料ピンを模擬しており、ガドリニアを 0 から 20wt%に変化させている。また、ドップラー係数を計算する場合は、減速材温度と被覆管温度を固定させたまま燃料温度を 600K から 900K に変化させ、反応度を求めている。反応度の計算式を次式に示す。

$$D.C_{method} = \left(\frac{1}{k_{low,method}} - \frac{1}{k_{high,method}}\right)/\Delta T \ , \qquad (3\text{-}1)$$

$$method = asymptotic\ model, exact\ model \ ,$$

ここで、熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響は、従来の熱振動を考慮しない散乱モデル(Asymptotic モデル)で求めるドップラー係数と厳密な散乱モデルで求めるドップラー係数の相対差として求める。

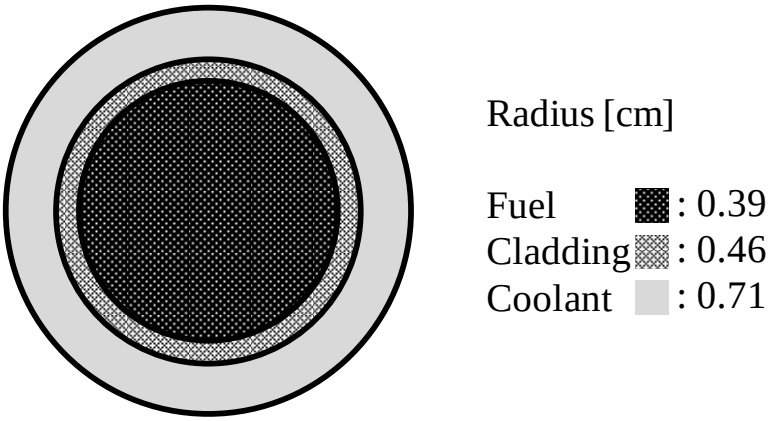


図 **3.2-1**　ガドリニア入り燃料の解析を実施した燃料セル体系

表 **3.2-1**　ガドリニア入り燃料の解析に用いる計算条件

Fuel	
Material	UO_2 with Gd_2O_3
U-235 enrichment	4.8wt%
Gd_2O_3 concentration	0~20wt% using following Gd vector
	Gd-152　0.2wt%
	Gd-154　2.2wt%
	Gd-155　14.8wt%
	Gd-156　20.5wt%
	Gd-157　15.6wt%
	Gd-158　24.8wt%
	Gd-160　21.9wt%
Temperature	600 K, 900 K
Cladding	
Material	Zircalloy-4
Temperature	600 K
Coolant	
Material	H_2O
Temperature	600 K
Boundary condition	White reflection

3.2.2. 計算結果

まず、厳密な評価手法により影響を確認するため、連続エネルギーモンテカルロ計算コード MVP を用いて計算を実施した。使用する評価済み核データライブラリは JENDL-4.0 であり、総ヒストリー数は 10^9 である。

計算結果を表 3.2-2 にまとめる。表 3.2-2 より、ガドリニアが少量添加されることにより、ガドリニアが添加されない燃料よりもドップラー係数に与える影響が大きくなる傾向が確認され、さらにガドリニアが多く添加すると、影響は小さくなる傾向が確認される。また、統計誤差はドップラー係数に与える影響に対して十分に小さいとは言い切れないといえる。このため、モンテカルロ計算のような統計論的手法によってより詳細な分析を行うことは、大幅にヒストリー数を増加させない限り適していないことがわかった。このため、次節で

は決定論的手法を用いた詳細な分析を行う。

表 3.2-2　MVP で評価する熱振動がドップラー係数に与える影響

Gd_2O_3 concentration [wt%]	impact on Doppler coefficient [%]		Error [%1σ]
0	8.1	±	0.3
0.2	10.6	±	0.5
2	9.9	±	0.7
5	8.9	±	0.7
10	7.7	±	0.7
20	5.6	±	0.7

3.3. 詳細な計算による影響の分析結果

本節では、確定論的手法である UA 法用いて詳細な分析を行う。計算手法は 2 章で示したものと同様に、Asymptotic モデルに基づいて計算される無限増倍率と、UA 法による厳密な散乱モデルに基づく無限増倍率からドップラー係数を求め、熱振動がドップラー係数に与える影響をエネルギーや反応について分解し評価を行う。以下、計算手順と結果をまとめる。

3.3.1. 計算結果

UA 法により熱振動がドップラー係数に与える影響を評価した結果を表 3.3-1 にまとめる。表 3.3-1 では、ガドリニアを少量添加した場合に最も影響が大きくなることが示されており、この傾向は MVP の結果をまとめた表 3.2-2 と整合している。UA 法でも MVP と同様の傾向が得られることを確認できたことから、UA 法によりより詳細な分析を実施する。

表 3.3-1　UA 法で評価する熱振動がドップラー係数に与える影響

Gd_2O_3 concentration [wt%]	impact on Doppler coefficient [%]
0	9.4
0.2	12.2
2	12.0
5	10.6
10	8.5
20	5.6

異なる添加率のガドリニア入りウラン燃料集合体に対して、熱外領域における熱振動がドップラー係数に与える影響を評価した結果をまとめる。まず、Asymptotic モデルに基づいて評価されたドップラー係数と、UA 法による厳密な散乱モデルに基づいて評価されたドップラー係数を図 3.3-1 に示す。図 3.3-1 から、ガドリニアの添加率の上昇に伴い、ドップラー係数はほぼ線形に負側に大きくなっていることがわかる。反応別に熱外領域における熱振動がドップラー係数に与える影響を評価した結果を表 3.3-2 に示す。また、エネルギー別で評価した結果は表 3.3-3 に示す。表 3.3-2 と表 3.3-3 から、U-238 の熱振動が影響として

は支配的になっており、特に 21, 37, 66eV 付近でその影響が大きく表れていることがわかる。さらに、熱外領域における熱振動がドップラー係数に与える影響は、ガドリニウムの添加率に依存していることも確認できる。

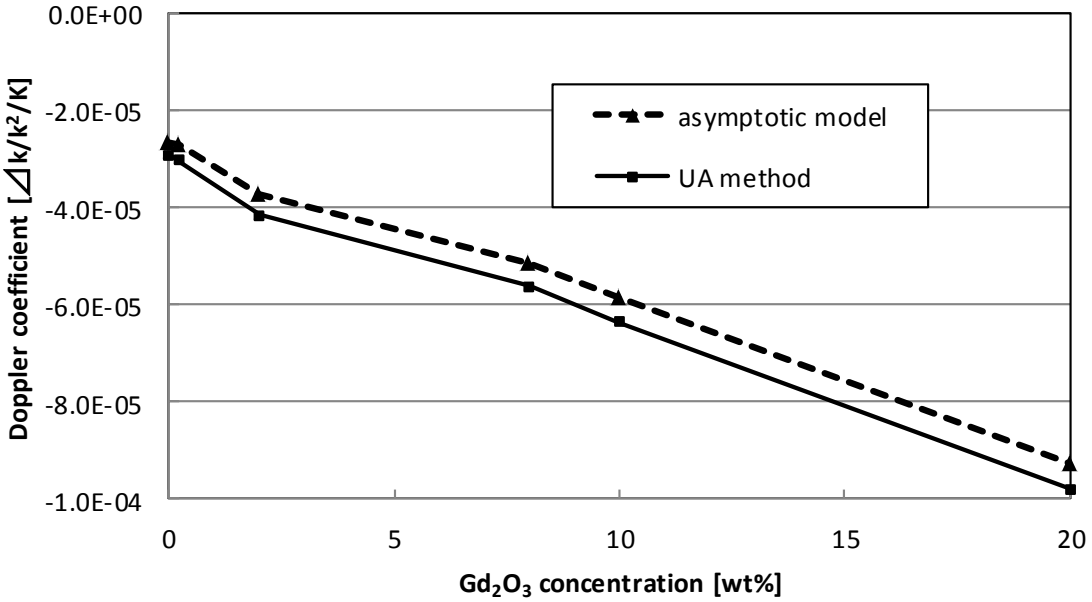


図 **3.3-1**　ガドリニア添加に伴うドップラー係数の推移

表 **3.3-2**　熱振動がドップラー係数に与える影響を各反応で分けた結果

Nuclide reaction	Gd_2O_3 concentration [wt%]					
	0	0.2	2	5	10	20
U-238 Capture	9.4%	12.2%	12.0%	10.6%	8.4%	5.4%
U-235 Capture	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%
Gd-155 Capture	-	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%
Gd-156 Capture	-	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.1%
Gd-157 Capture	-	0.0%	0.0%	0.0%	0.1%	0.1%
Gd-158 Capture	-	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%
all	9.4%	12.2%	12.0%	10.6%	8.5%	5.6%

表 **3.3-3**　熱振動がドップラー係数に与える影響をエネルギーで分けた結果

Energy Range [eV]			Gd_2O_3 concentration [wt%]					
			0	0.2	2	5	10	20
3.93	~	5.04	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%
5.04	~	6.48	-0.1%	-0.2%	-0.1%	-0.1%	-0.1%	0.0%
6.48	~	8.32	0.9%	1.1%	0.8%	0.7%	0.4%	0.2%
8.32	~	10.68	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%
10.68	~	13.71	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%
13.71	~	17.60	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.1%	0.1%
17.60	~	22.60	2.1%	2.7%	2.6%	2.2%	1.7%	1.0%
22.60	~	29.02	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%
29.02	~	37.27	4.6%	6.1%	6.2%	5.6%	4.6%	3.1%
37.27	~	47.85	-0.2%	-0.2%	-0.2%	-0.2%	-0.2%	-0.1%
47.85	~	61.44	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%
61.44	~	78.89	1.4%	1.8%	1.8%	1.6%	1.3%	0.8%
78.89	~	101.3	0.0%	-0.1%	0.0%	0.0%	0.0%	0.0%
101.3	~	130.1	0.7%	1.0%	0.9%	0.8%	0.7%	0.5%

3.4. 考察

表 3.3-2 に示したとおり、ガドリニアを 0.2wt%か 2wt%添加することで、熱振動がドップラー係数に与える影響は 12%程度まで上昇することが確認された。また、さらにガドリニアを添加すると、ドップラー係数への影響は 12%より小さくなる傾向が確認された。

この現象はスペクトル変化やドップラー係数の変化など、様々な要因が含まれて発生しているといえる。そこで、この現象を深く考察するため、本節ではまずドップラー係数への影響を新たに導出する数式で簡易的に評価する。続いて、簡略化された数式を使用して、熱振動がドップラー係数に与える影響を考察する。

3.4.1. 簡略化された数式の導出

この節では、熱外領域における熱振動を考慮した時のドップラー係数の変化量($\Delta D.C$)を数式化する。熱群 g におけるドップラー係数の変化量は次式で表現できる。

$$\begin{aligned}\Delta D.C^g &= \left\{\left(\frac{1}{k^g_{low,UA}} - \frac{1}{k^g_{high,UA}}\right) - \left(\frac{1}{k_{low,conv}} - \frac{1}{k_{high,conv}}\right)\right\}/\Delta T \\ &= \left\{\left(\frac{1}{k^g_{low,UA}} - \frac{1}{k_{low,conv}}\right) - \left(\frac{1}{k^g_{high,UA}} - \frac{1}{k_{high,conv}}\right)\right\}/\Delta T \\ &= \left\{\left(\frac{k_{low,conv} - k^g_{low,UA}}{k^g_{low,UA}k_{low,conv}}\right) - \left(\frac{k_{high,conv} - k^g_{high,UA}}{k^g_{high,UA}k_{high,conv}}\right)\right\}/\Delta T\end{aligned} \qquad (3\text{-}2)$$

ここで、k^g_{UA}は UA 法により厳密に上方散乱を考慮したエネルギー群gにおける増倍率であり、これは感度係数を用いて$k^g_{UA} = k_{conv} \cdot (1 + d^g \cdot S^g)$として求めることができる。このため、式(3-2)は次式のように変形できる。

$$\Delta D.C^g = \left\{\left(\frac{-k_{low,conv}d^g_{low}S^g_{low}}{k^g_{low,UA}k_{low,conv}}\right) - \left(\frac{-k_{high,conv}d^g_{high}S^g_{high}}{k^g_{high,UA}k_{high,conv}}\right)\right\}/\Delta T$$
$$= \left\{\left(\frac{-d^g_{low}S^g_{low}}{k^g_{low,UA}}\right) - \left(\frac{-d^g_{high}S^g_{high}}{k^g_{high,UA}}\right)\right\}/\Delta T \qquad (3\text{-}3)$$

ドップラー係数を求めるときの温度上昇をさせた場合、次節に示すように、他のパラメータと比較して感度係数S^gの変化量は小さい。このため、感度係数S^gは次式のように近似することができる。

$$S^g \cong S^g_{low} \cong S^g_{high} \qquad (3\text{-}4)$$

このため、式(3-3)は次式のように変形できる。

$$\Delta D.C^g \cong S^g\left(\frac{d^g_{high}}{k^g_{high,UA}} - \frac{d^g_{low}}{k^g_{low,UA}}\right)/\Delta T \qquad (3\text{-}5)$$

式(3-5)のさらなる簡略化のため、以下の簡略化を検討する。

ガドリニウム核種の捕獲断面積は熱群において非常に大きくなる。ただし、熱外領域における熱振動がドップラー係数に影響を与えるエネルギー領域において、U-238 の捕獲断面積の大きさはガドリニアの添加で大きく変化しない。そのため、断面積の相対変化d^gはガドリニアの添加率に強くは依存していない。実際に熱外領域における熱振動がドップラー係数に影響を与えるエネルギー群においてd^gを確認したところ、図 3.4-1 に示されるようにガドリニアの添加に対してほぼ一定となっている。このため、d^gの差異についてもガドリニアの添加に対してほぼ一定となっているため、ガドリニア添加に対する定数A^gを次式のように定義することが可能となる

$$A^g \cong d^g_{high} - d^g_{low} \qquad (3\text{-}6)$$

式(3-6)を用いると、式(3-5)は以下のように変形できる。

$$\Delta D.C^g \cong S^g\left(\frac{A^g + d^g_{low}}{k^g_{high,UA}} - \frac{d^g_{low}}{k^g_{low,UA}}\right)/\Delta T$$
$$= S^g\frac{k^g_{low,UA}\left(A^g + d^g_{low}\right) - k^g_{high,UA}d^g_{low}}{k^g_{high,UA}k^g_{low,UA}}/\Delta T \qquad (3\text{-}7)$$
$$= S^g\frac{d^g_{low}\left(k^g_{low,UA} - k^g_{high,UA}\right) + A^g k^g_{low,UA}}{k^g_{high,UA}k^g_{low,UA}}/\Delta T$$

ドップラー係数を求めるような微小な増倍率変化を解析する場合、式(3-7)において、$\left(k^g_{high,UA} - k^g_{low,UA}\right)$は$k^g_{low,UA}$に比べて十分に小さいといえる。そのため、式(3-7)は$\left(k^g_{high,UA} - k^g_{low,UA}\right)$を 0 として取り扱うことで次式のように変形できる。

$$\Delta D.C^g \cong A^g\frac{S^g}{k^g_{high,UA}}/\Delta T \qquad (3\text{-}8)$$

式(3-8)から、熱外領域における熱振動を考慮することによるドップラー係数の変化量は、

感度係数と増倍率の逆数の積に比例することが確認できる。

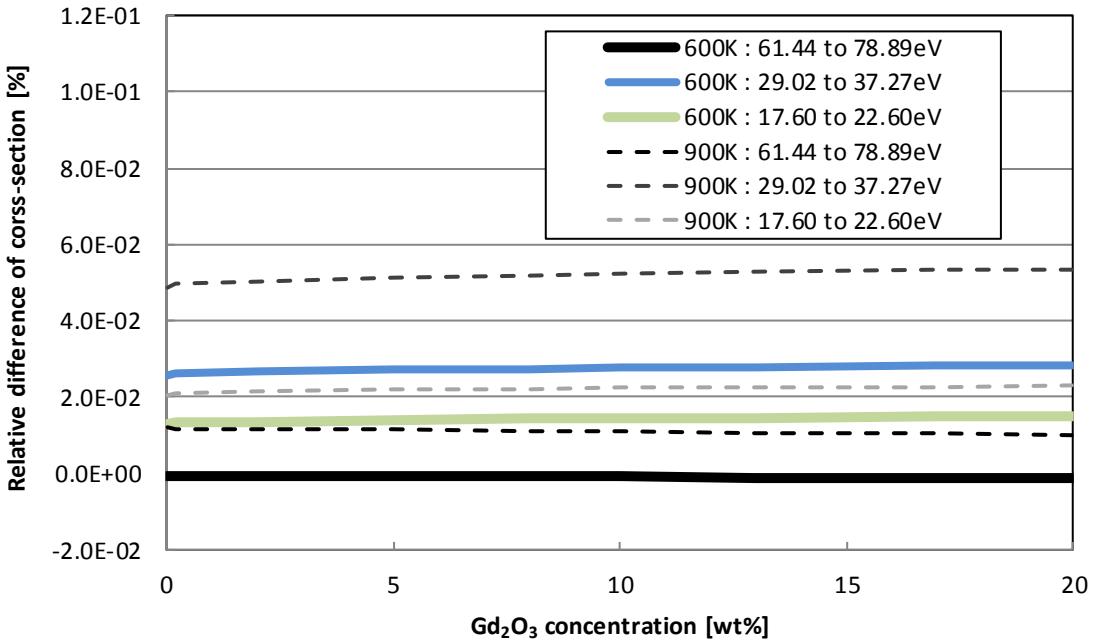


図 3.4-1　ガドリニアの添加に伴う断面積変化の推移

3.4.2. ドップラー係数に対する影響

本節では、前節で示した簡略化された数式を用いてドップラー係数への影響を考察する。熱振動がドップラー係数に影響を与えるエネルギー群の感度係数を図 3.4-2 に、増倍率の逆数を図 3.4-3 に示す。図 3.4-2 から、ガドリニアの添加によって U-238 の感度係数の絶対値は小さくなっていくことが確認できるが、これはガドリニアの添加によって U-238 の捕獲率が相対的に低減しているからである。また、図 3.4-3 からは、ガドリニアの大きな捕獲断面積のために、ガドリニアの少量の添加によって増倍率の逆数は大幅に上昇していることがわかる。図 3.4-4 は熱外領域の熱振動を考慮したことによるドップラー係数の変化量を示しており、これは図 3.4-2 と図 3.4-3 に示した感度係数と増倍率の逆数の積に依存している。参考までに、簡略化した式を用いることで$\Delta D.C/D.C$の傾向を表現できていることを図 3.4-5 に示す。

これらの結果から、熱外領域の熱振動を考慮したことによるドップラー係数の相対変化$\Delta D.C/D.C$は考察することが可能になる。まず、ガドリニアが少量添加された場合は、$1/k$が急上昇し、$1/k$の上昇に比べるとドップラー係数の大きさは緩やかな上昇となる。このため、ガドリニアの添加量が小さい場合は、ガドリニアの添加によって$\Delta D.C/D.C$が大きくなる傾向になる。一方、ガドリニアがある程度添加されると、ガドリニア添加に伴う$1/k$の上昇が緩やかになるため、$\Delta D.C/D.C$は小さくなる傾向となった。

この研究では、若干の強吸収体が存在する場合では、熱外領域の熱振動を考慮した場合のドップラー係数への影響が大きくなることを評価し、この原因は増倍率の急激な変化に由来することを確認した。この傾向はガドリニアだけでなく、他の吸収体が存在する場合にも発生すると考えられるため、強吸収体が存在する場合にドップラー係数を評価する場合は熱外領域の熱振動の影響に注意する必要があると考えられる。

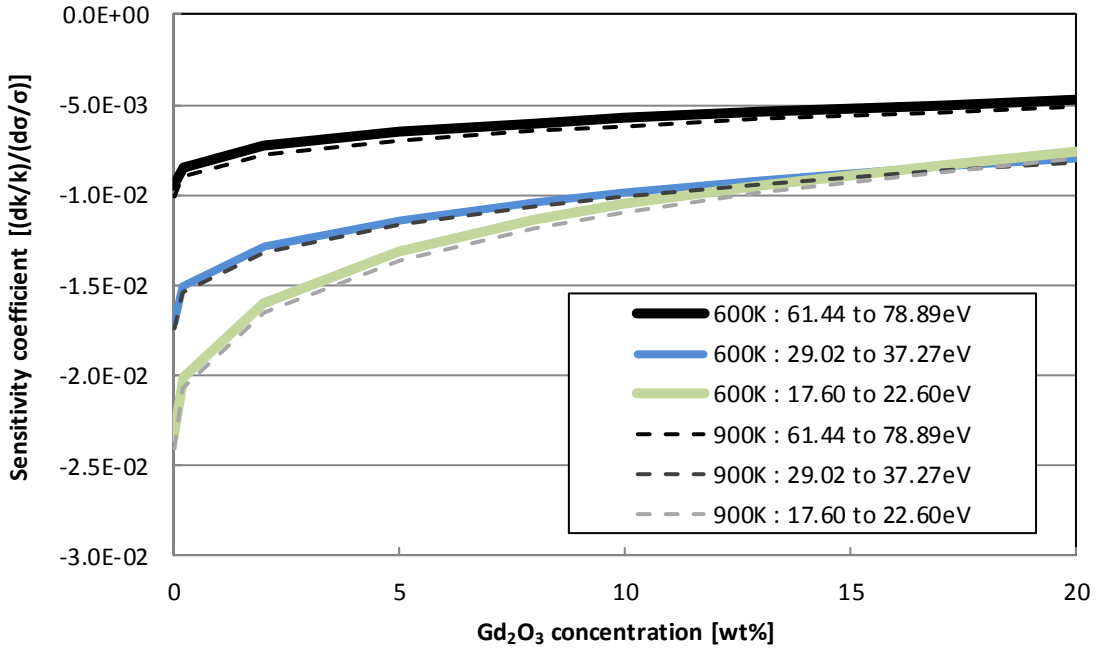


図 3.4-2　ガドリニア添加に伴う感度係数の推移

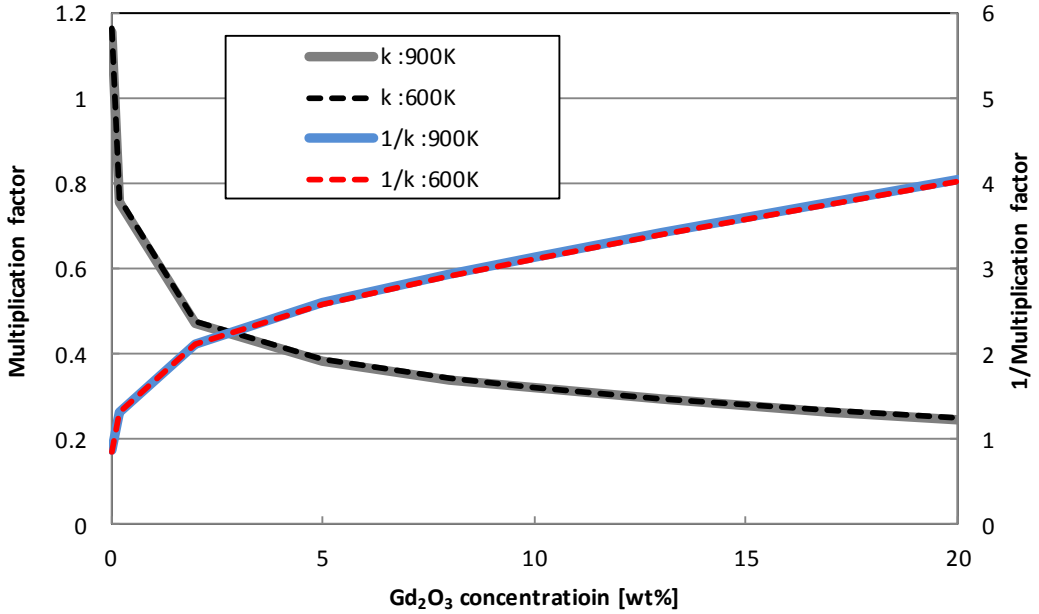


図 3.4-3　ガドリニア添加に伴う増倍率と増倍率の逆数の推移

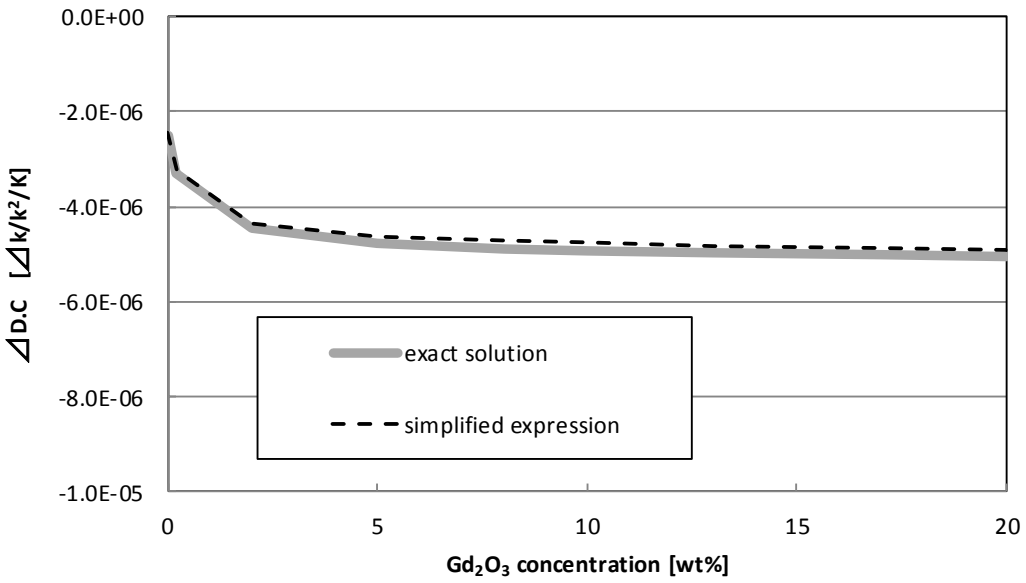


図 **3.4-4**　熱振動を考慮したことによるドップラー係数の変化量の推移

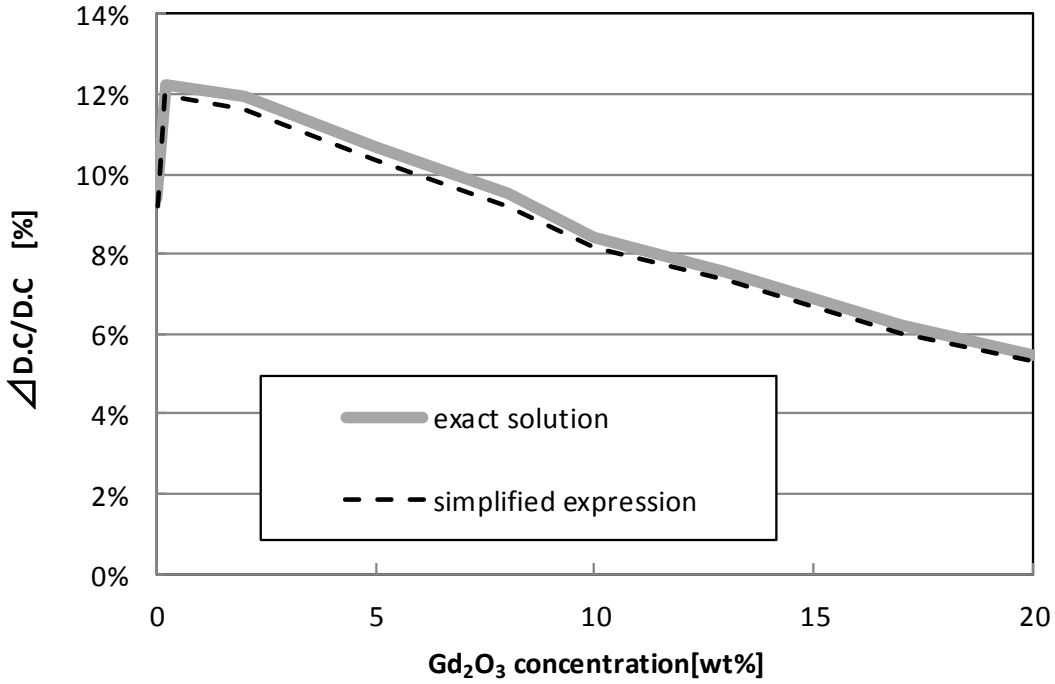


図 **3.4-5**　熱振動を考慮したことによるドップラー係数の影響の推移

3.5. 3 章の結論

ガドリニアが存在する燃料を対象として、熱外領域における熱振動がドップラー係数に与える影響を調査した。結果として、ガドリニアが存在しない場合で影響が 10%程度であるにも関わらず、ガドリニアが少々添加された場合ではドップラー係数へ影響は 12%まで上昇することが確認された。この現象について理解を深めるため、ドップラー係数の変化量$\Delta D.C$に対し、簡略化した数式を導出した。

簡略化した数式を用いることで、ガドリニア添加によるドップラー係数への影響の変化についてメカニズムを明らかにした。まず、ガドリニアが少量添加されている場合は、増倍率の急激な低下とほぼ線形のドップラー係数の絶対値の増加によってドップラー係数への影響は大きくなった。また、ガドリニアの添加率が 2wt%を超える場合は、ガドリニアの添加によっても増倍率は大きく変化しなくなり、ドップラー係数は線形に絶対値が大きくなることから、ドップラー係数への影響は小さくなっていることがわかった。

本章では、若干の強吸収体が存在する場合に熱外領域の熱振動がウラン燃料のドップラー係数に与える影響が大きくなる場合があることが示され、その影響と要因を調査した。この検討により、これまで明らかになっていなかった可燃性毒物が存在する燃料におけるドップラー係数の誤差要因の影響が示され、現行の設計手法におけるドップラー係数の精度を確認することができた。

3.6. 3 章の参考文献

(1) M. Ouisloumen, R. Sanchez, “A Model for Neutron Scattering Off Heavy Isotopes That Accounts for Thermal Agitation Effects,” Nuclear Science and Engineering, 107, 189-200, 1991.

(2) R. Dagan, “On the use of S(α,β) tables for nuclides with well pronounced resonances,” Annals of Nuclear Energy, 32, 367-377, 2005.

(3) B. Becker, R. Dagan, C. H. M. Broders, “An Alternative Stochastic Doppler Broadening algorithm”, International Conference on Mathematics, Computational Methods & Reactor Physics, Satatoga Springs, New York, 2009.

(4) T. Mori, Y. Nagaya, “Comparison of Resonance Elastic Scattering Models Newly Implemented in MVP Continuous-Energy Monte Carlo Code,” J. Nucl. Sci. Technol., 46[8], 793-798, 2009.

(5) D. Lee, K. Smith, J. Rhodes, “The impact of ^{238}U resonance elastic scattering approximations on thermal reactor The Doppler reactivity,” Annals of Nuclear Energy, 36, 274-280, 2009.

(6) M. Ono, K. Wada, T. Kitada, “Simplified treatment of exact resonance elastic scattering model in deterministic slowing down equation,” PHYSOR-2012, Tennessee, USA, 2012.

(7) K. Okumura, T. Kugo, K. Kaneko, K. Tsuchihashi, “SRAC2006 : A Comprehensive Neutronics Calculation Code System,” JAEA-Data/Code 2007-004, 2007.

(8) M. Nakano, T. Takeda, H. Takano, “Sensitivity Analysis of Cell Neutronic Parameters in High-Conversion Light-Water Reactors,” J. Nucl. Sci. Technol. 24, 610-620, 1986.

(9) K. Shibata, T. Kawano, T. Nakagawa et al., “JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering,” J. Nucl. Sci. Technol. 48, 1, 1-30, 2011.

(10) M.B. Chadwick, P. Obložinský, M. Herman et al., “ENDF/B-VII.0: Next Generation Evaluated Nuclear Data Library for Nuclear Science and Technology,” Nucl. Data Sheets 107, 2931-3060, 2006.

4. MOC コードに導入する Krylov 部分空間法に有効な前処理手法の開発

4.1. 背景

4.1.1. 核計算で用いられる計算モデルの動向

現状のコード体系では、過去の経緯に基づいて簡易的な計算モデルが採用されることが多く、モデルに保守性を含めることで炉心の安全性を担保している。モデルの安全裕度が大きくなる場合は、炉心燃料、プラント設計、原子炉運転の自由度が低下し、経済性が失われる可能性がある。そこで従来のモデルより原子炉の特性を詳細に評価できるコード体系が着目されている。

1 章で示したとおり、核設計手法の多くは炉心計算コードに用いる核定数の計算と、中性子束分布などを求める炉心計算は別々に行われる。近似的に炉心計算を行う場合では、核定数は燃料集合体内部を均質化した値が用いられる。一方で炉心性能試験における反応率分布測定データを高精度に評価するためには、ドシメータの放射化量などの解析を精度よく行う必要がある。このような精度のよい評価を行うためには、燃料集合体内の非均質性を厳密に取り扱うことが必要となる。

計算体系の非均質性を厳密に扱うことのできる計算手法として、モンテカルロ法や MOC が挙げられる。モンテカルロ法は統計論的手法であり、微小な領域や、中性子の挙動を追いにくいブランケット領域では統計誤差が大きくなってしまうという欠点がある。一方、MOC は決定論的手法であり、統計誤差を含まないため微小領域の解析にも有効である。また幾何形状の自由度が高く、大規模計算に適用可能であるという利点を持つ。MOC コードは従来の拡散理論に基づく計算コードと比較すると計算時間が大幅に増大するが、近年の計算機能力の向上によって着目されている手法となっている。

4.1.2. MOC コードの加速に関する研究

MOC は体系上に様々な方向へ多数のレイトレースを描き、そのレイトレース上で積分型輸送方程式を解く手法である。MOC の計算時間は基本的にレイトレースの本数で決まるので、領域数を増やした場合の計算時間の増加は衝突確率法と比べて緩やかになる。また、MOC は直接的な非等方散乱の扱いが可能であり、高次散乱を考慮することで計算精度を向上させることができる。以上のことから、MOC は核定数計算としての燃料集合体の計算に用いられている。さらに、炉心体系のような大規模体系へも導入されつつある。しかし、大規模体系においては、メモリ使用量の問題や計算時間の増加は重大な問題となる。そのため、これまでに大規模体系における計算負荷を削減する手法が開発されてきた。

MOC コードに導入できる加速法はいくつかある。一つは粗メッシュ有限差分法(Coarse Mesh Finite Difference, CMFD)であり、近年多くの輸送計算コードに導入されている。MOC コードは一般的に反復計算によって解を求めており、CMFD はこの反復回数を削減することによって計算時間を効果的に抑えることができる。しかし、この手法は有限差分法に基づいているため、非構造メッシュへの導入は容易ではない。この欠点を克服するため、一

般化再釣り合い法(Generalized Coarse Mesh Rebalance, GCMR)が開発された。さらに GCMR を用いた場合、CMFD の収束が不安定となるような体系においても、安定した収束が可能であることが確認されている。しかし、GCMR は計算の前に予め適切なパラメータを設定する必要がある。一方、MOC コードに導入できる他の加速法として、Krylov 部分空間法は広く用いられてきた。この手法の利点は、導入の容易性、安定した収束、そして前処理の導入の容易性である。

4.1.3. 研究の位置づけ

Krylov 部分空間法である GMRES 法はこれまでに核計算へ導入され、前処理に関する研究が進められてきた。これまでに開発された前処理手法としては、前処理としての SCR(Self-Collision Rebalancing)と DSA がある。SCR は計算体系における領域間の結合を考慮しておらず、簡単な体系においてその有効性が確認されている。また、DSA もその有効性は確認されているが、拡散係数を求める計算を行う必要があるため、MOC コードに対して特別な計算を別途行う必要がある。

以上をふまえ、本研究では、特別な計算を必要とせず、MOC コードのルーチンを直接用いることで容易に導入できる前処理を開発する。1 次元コードに関する検討を 4.2 節、2 次元コードに関する検討を 4.3 節に記載する。

4.2. 1 次元 MOC コードの開発と前処理手法の比較

前処理の開発を行うため、領域間の結合を評価しやすい 1 次元 MOC コードを作成した。この MOC コードは平板体系の計算が可能であり、非等方散乱をルジャンドル関数によって表現している。以下、1 次元 MOC コードで用いた理論、前処理手法の理論、前処理手法を用いた計算結果、そしてまとめを記す。

4.2.1. 1 次元 MOC コードで用いる理論

4.2.1.1. レイトレース

本節では 1 次元 MOC コードのレイトレースについて記述する。この MOC コードは 1 次元平板体系について中性子束分布を求めることができる。図 4.2-1 に示すように、中性子の飛行方向は x 軸に対しての角度θによって決定することができる。

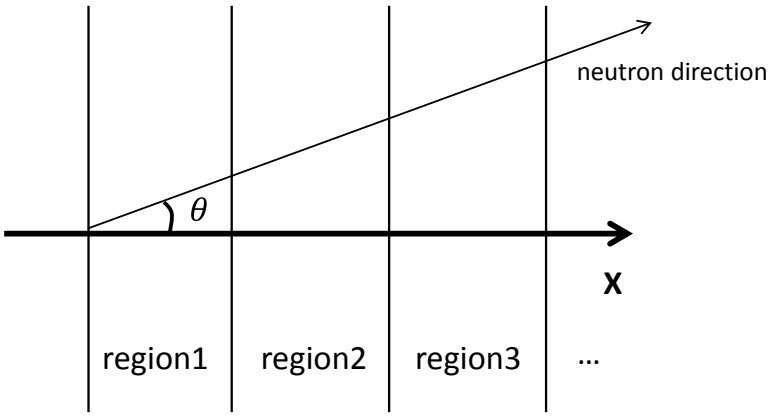


図 **4.2-1　1** 次元平板体系のレイトレース

中性子飛行方向 n に対応する角度は$\mu^n = \cos(\theta^n)$で定義する。1 次元平板体系において、この値の範囲は$-1 \leq \mu^n \leq 1$で与えられる。また、計算を行うためには中性子飛行方向 n に対応する方向重みを与える必要がある。本研究で開発した 1 次元 MOC コードでは、Gauss-Legendre 求積公式を用いてこれらの値を計算する。

多項式 f(x)について、$\mu \in (-1,1)$の区間の積分を以下の求積公式で求める。

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{f}(\mu) d\mu = \sum_{n=1}^{N} \mathrm{f}(\mu^n)\omega^n \qquad (4\text{-}1)$$

2N-1 次多項式の積分は N 点の Gauss-Legendre 求積により求まる。ここで、重みとなるω^nはルジャンドル関数を用いることで求めることができる。

$$\omega^n = \frac{2(1-(\mu^n)^2)}{\left(nP_{m-1}(\mu^n)\right)^2} \qquad (4\text{-}2)$$

この求積法を用いることによって、表 4.2-1 に示される分点セットを得ることができる。

表 4.2-1　分点セット

N	$\pm\mu^n$	ω^n
2	0.5773502691	1.00000000000
4	0.3399825852	0.6521451548
	0.8611363115	0.3478548451
6	0.2386191860	0.4679139345
	0.6612093864	0.3607615730
	0.9324695142	0.1713244923
8	0.1834346424	0.3626837833
	0.5255324099	0.3137066458
	0.7966664774	0.2223810343
	0.9602898564	0.1012285362
10	0.1488743389	0.2955242239
	0.4333953941	0.2692667193
	0.6794095682	0.2190863625
	0.8650633666	0.1494513490
	0.9739065285	0.0666713443

4.2.1.2.　中性子束計算

パスライン上のボルツマン方程式は以下のように表現できる。

$$\frac{d}{ds}\varphi_g^{k,n}(s) + \Sigma_{\mathrm{t},g}^{n,k}(s)\varphi_g^{k,n}(s) = Q_g^{n,k}(s) \qquad (4\text{-}3)$$

ここで、式(4-3)の記号は以下の通りである。

g　：　エネルギー群

n　：　中性子の飛行方向

k　：　ある中性子の飛行方向に対するパスラインの番号

s　：　パスラインに沿った座標

$\varphi_g^{k,n}(s)$　：　角度中性子束

$Q_g^{n,k}(s)$　：　中性子ソース

$\Sigma_{\mathrm{t},g}^{n,k}(s)$　：　座標sにおける全断面積

本研究で作成する 1 次元 MOC コードにおいては、ルジャンドル関数を用いることによって、次式のように輸送方程式を書き直すことができる。

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \varphi_g(x,\mu) + \Sigma_{\mathrm{t},g}(x)\varphi_g(x,\mu) = \sum_{m=0}^{M} \Sigma_{\mathrm{s},g\to g,m}(x)\varphi_{g,m}(x)P_m(\mu) + S_g(x,\mu) \qquad (4\text{-}4)$$

ここで、式(4-4)の記号は以下の通りである。

x	:	基準となる x 軸に沿った座標
μ	:	基準となる x 軸となす角度の余弦
M	:	散乱カーネルの最大次数
$\varphi_{g,m}^{n}(x)$	:	次数mのルジャンドル多項式に対応する角度中性子束
$\Sigma_{\mathrm{s},g\to g,m}(x)$	:	次数mの自群散乱断面積
$\Sigma_{\mathrm{t},g}(x)$	:	次数mの全断面積
$S_g(x,\mu)$	:	自群散乱によって発生する中性子を除いた中性子ソース項

ルジャンドル多項式を規格化した値$P_m(\mu)$は、次式を用いることで得られる。

$$\int_{-1}^{1} d\mu\, P_m(\mu)P_{m'}(\mu) = \delta_{m,m'} \qquad (4\text{-}5)$$

上式で用いられる$\delta_{m,m'}$は規格化に用いる因子である。ソース項の展開は散乱項の次数に制限されると仮定すると、式(4-4)の右辺は次式のように変形させることができる。

$$\begin{aligned}
&\sum_{m=0}^{M} \Sigma_{\mathrm{s},g\to g,m}\varphi_{g,m}(x)P_m(\mu) + S_g(x,\mu) \\
&\qquad = \sum_{m=0}^{M} \left\{\Sigma_{\mathrm{s},g\to g,m}\varphi_{g,m}(x) + S_{g,m}(x)\right\} P_m(\mu) \qquad (4\text{-}6) \\
&\qquad = \sum_{m=0}^{M} Q_{g,m}(x)\, P_m(\mu)
\end{aligned}$$

$S_{g,m}(x)$と$Q_{g,m}(x)$はそれぞれルジャンドル多項式で展開した自群散乱以外によって発生する中性子ソースと、各反応によって発生する中性子を足し合わせたトータルソースとなる。ここで、空間メッシュ内の中性子束と断面積を一定と仮定しており、空間メッシュ内の中性子ソース項は一定であると仮定する。

$$\Sigma_{\mathrm{t},g}(x) = \Sigma_{\mathrm{t},g}^{i}$$

$$\Sigma_{\mathrm{s},g\to g,m}(x) = \Sigma_{\mathrm{s},g\to g,m}^{i}$$

$$Q_{g,m}(x) \approx Q_{g,m}^{i} = \frac{1}{\Delta x_i}\int_{\Delta x_i} dx Q_{g,m}(x) \tag{4-7}$$

$$= \frac{1}{\Delta x_i}\int_{\Delta x_i} dx \Sigma_{\mathrm{s},g\to g,m}^{i}\varphi_{g,m}(x) + \frac{1}{\Delta x_i}\int_{\Delta x_i} dx S_{g,m}(x)$$

$$= \Sigma_{\mathrm{s},g\to g,m}^{i}\langle\varphi_{g,m}\rangle_i + \langle S_{g,m}\rangle_i$$

上式において、iは体系内の領域であり、$\langle\varphi_{g,m}\rangle_i$と$\langle S_{g,m}\rangle_i$はそれぞれ領域内の平均角度中性子束、自群散乱以外によって発生する領域内の平均中性子ソースである。式(4-4), (4-6), (4-7)を用いると、ある方向において($\mu \to \mu^n = \cos(\theta^n)$)、輸送方程式は数値問題として処理できる形に書き直すことができる。

$$\varphi_{out}^{i,n} = \varphi_{in}^{i,n} e^{-\Sigma_{\mathrm{t},g}^{i}\frac{\Delta x_i}{\mu^n}} + \frac{1 - e^{-\Sigma_{\mathrm{t},g}^{i}\frac{\Delta x_i}{\mu^n}}}{\Sigma_{\mathrm{t},g}^{i}}\sum_{m=0}^{M} Q_{g,m}^{i} P_m(\mu^n) \tag{4-8}$$

ここで、式(4-8)で用いる記号は以下の通りである。

$\varphi_{out}^{i,n}$ ： 方向nに対する、領域iにおける放出中性子束

$\varphi_{in}^{i,n}$ ： 方向nに対する、領域iにおける入射中性子束

領域iにおいて体積平均をとった$\langle S_{g,m}\rangle_i$が既知であるものと仮定すると、式(4-8)を解くためには$\langle\varphi_{g,m}\rangle_i$を求める必要がある。角度方向を決める変数と座標位置を決める変数がそれぞれ独立していると仮定すると、$\langle\varphi_{g,m}\rangle_i$は次式のように変形できる。

$$\langle\varphi_{g,m}\rangle_i = \frac{1}{\Delta x_i}\int_{\Delta x_i} dx \int_{-1}^{1} d\mu\, P_m(\mu)\varphi_{g,m}^{n}(x) \tag{4-9}$$

$$= \int_{-1}^{1} d\mu\, P_m(\mu)\frac{1}{\Delta x_i}\int_{\Delta x_i} dx\, \varphi_{g,m}^{n}(x)$$

求積公式を用いて角度積分をすると次式のように表現できる。

$$\langle\varphi_{g,m}\rangle_i = \sum_{n=1}^{N} \omega^n P_m(\mu^n) \frac{1}{\Delta x_i} \int_{\Delta x_i} dx\, \varphi_{g,m}^n(x) = \sum_{n=1}^{N} \omega^n P_m(\mu^n) \langle\varphi_{g,n}\rangle_i \qquad (4\text{-}10)$$

ここで、式(4-10)で用いる記号は以下の通りである。

$\langle\varphi_{g,n}\rangle$ ： 方向nに対する、領域iにおける角度中性子束

ω^n ： 方向nの重み

射影演算子$\frac{1}{\Delta x_i}\int_{\Delta x_i} dx$を式(4-8)に導入すると、次式のように変形できる。

$$\frac{1}{\Delta x_i} \int_{\Delta x_i} dx\, \varphi_{g,n}^n(x) = \langle\varphi_{g,n}\rangle = \frac{1}{\Sigma_{\mathrm{t},g}^i} \left\{ \frac{\mu^n}{\Delta x_i} \left(\varphi_{in}^{i,n} - \varphi_{out}^{i,n} \right) + \sum_{m=0}^{M} Q_{g,m}^i P_m(\mu^n) \right\} \qquad (4\text{-}11)$$

式(4-8), (4-9), (4-10), (4-11)は全ての方向について計算する必要がある。領域iにおいて解くべき方程式をまとめると、以下の 2 式となる。

$$\left[\begin{array}{l} \varphi_{out}^{i,n} = \varphi_{in}^{i,n} e^{-\Sigma_{\mathrm{t},g}^i \frac{\Delta x_i}{\mu^n}} + \dfrac{1 - e^{-\Sigma_{\mathrm{t},g}^i \frac{\Delta x_i}{\mu^n}}}{\Sigma_{\mathrm{t},g}^i} \displaystyle\sum_{m=0}^{M} \left(\Sigma_{\mathrm{s},g\to g,m}^i \langle\varphi_{g,m}\rangle_i + \langle S_{g,m}\rangle_i \right) P_m(\mu^n) \\ \langle\varphi_{g,m}\rangle_i = \displaystyle\sum_{n=1}^{N} \omega^n P_m(\mu^n) \frac{1}{\Sigma_{\mathrm{t},g}^i} \left\{ \begin{array}{c} \dfrac{\mu^n}{\Delta x_i} \left(\varphi_{in}^{i,n} - \varphi_{out}^{i,n} \right) + \\ \displaystyle\sum_{m'=0}^{M} \left(\Sigma_{\mathrm{s},g\to g,m'}^i \langle\varphi_{g,m'}\rangle_i + \langle S_{g,m'}\rangle_i \right) P_{m'}(\mu^n) \end{array} \right\} \end{array} \right. \qquad (4\text{-}12)$$

式(4-12)は、中性子ソースの掃出し計算を行うことによって中性子束を求める方程式となる。数値計算としては、エネルギー群$\boldsymbol{g}$の中性子束を収束させる計算として以下の行列表現ができる。

$$\boldsymbol{\Phi}_g = \mathbb{L}_g \left(\mathbb{W}_g \boldsymbol{\Phi}_g + \boldsymbol{S}_g \right) \qquad (4\text{-}13)$$

計算体系の領域数を N とすると、式(4-13)において$\boldsymbol{\Phi}_g$、$\mathbb{L}_g$、$\mathbb{W}_g$、$\boldsymbol{S}_g$はそれぞれ、N の要素を持つ領域内の平均中性子束ベクトル、掃出し計算を行う N×N 行列、自群散乱断面積を持つ N×N 行列、自群散乱以外によって発生する中性子ソースのベクトルとなる。Krylov 部分空間法の導入と前処理行列の作成は式(4-13)に着目して行う。

また、Krylov 部分空間法や、その前処理を導入することによる計算時間の削減を確認する

ために、加速法を用いない計算を導入した。この手法は以下 Source Iteration(SI)と記載する。

4.2.1.3. Krylov 部分空間法

計算技術計算の分野においては、計算機の高性能化が急速に進み、自然科学や工学などで現れた非線形問題を計算機で数値的にシミュレートできるようになってきた。ここで、数値的にシミュレートするとは、自然現象や光学現象などを記述する偏微分方程式の解を数値的に求めることをさし、さらに偏微分方程式を有限差分法や有限要素法などで離散化して近似解を求めることとなる。多くの場合において、最終的に次式で表される大規模連立 1 次方程式を解くことに帰着する。

$$\mathbb{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{4-14}$$

式(4-14)のサイズが小さい場合には、標準的な求解のアプローチとしてガウスの消去法をはじめとする直接解法(direct method)が有用である。しかし、対象とする問題が大規模になると、記憶容量の増大、計算時間の長大化などの問題が重要となり、従来の直接解法が必ずしも有用とはならなくなる。そのため、効率と精度の良い反復解法が必要となる。

反復解法は逐次過剰緩和法(Successive Over Relaxation method, SOR)を代表とする通常反復解法(stationary iterative method)系統と、共役勾配法(Conjugate Gradient method, CG)を代表とする非定常反復解法(non-stationary iterative method)系統の大きく 2 つに分類できる。定常反復解法には Jacobi 法、Gauss-Seidel 法、SSOR 法など、実際の応用問題の性質に応じて様々な変形がある。

非定常反復解法の元祖となる CG 法が発表された当時(1950 年代)は、少ない反復回数で連立 1 次方程式を解ける可能性を持つことから注目を浴びた。しかし、実際の計算には丸め誤差が蓄積しやすいことから一般にまで普及するまでには至らなかった。しかし、1970 年代後半からは前処理技術と組み合わされることで収束の安定性が広く知られるようになった。さらに、1980 年代になると共役勾配法を Krylov 部分空間法と位置付け、アーノルディ原理(Arnoldi process)、ランチョス原理(Lanczos process)に基づく反復解法の開発が盛んに行われるようになった。

もし、式(4-14)の行列$\mathbb{A}$が対称であり、固有値が正であるならば、CG 法は良いパフォーマンスを示すことが知られている。しかし多くの場合において、空間的に離散化された中性子束を求める計算における行列$\mathbb{A}$が対称となることはない。そのため、核計算においては、非対称行列を直接取り扱うことのできる Krylov 部分空間法が適していると言える。前述したとおり、Krylov 部分空間法はアーノルディ原理に基づく手法とランチョス原理に基づく手法の二つに大別できる。前者ではアーノルディベクトルと呼ばれる直交化されたベクトルを用いて、グラムシュミットの処理(Gram-Schmidt proces)を安定化させている。また、後者はランチョスの双直交化の処理(Lanzchos bi-orthogonalization process)に基づく処理となる。計算の前に Krylov 部分空間法の中で最も良い手法を求めることは非常に困難となる。しか

し、アーノルディ原理に基づく GMRES は多くの計算ケースにおいて良いパフォーマンスを示している。

4.2.1.4. GMRES 法

GMRES 法は Y. Saad と M. H. Schults らによって開発された手法であり、式の残差が最も小さくなるような解を求める解法である。数値処理における最初の残差$\boldsymbol{r}_0$は次式で与えられる。

$$\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - \mathbb{A}\boldsymbol{x_0} \tag{4-15}$$

ここで$\boldsymbol{x_0}$は GMRES 法の計算の前に推定される最初の解である。この時、解となる$\boldsymbol{x}$は Krylov 部分空間において求めることになる。

$$K_{\mathrm{j}}(\mathbb{A}, \boldsymbol{r}_0) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{r}_0, \mathbb{A}\boldsymbol{r}_0, \mathbb{A}^2\boldsymbol{r}_0, \dots, \mathbb{A}^{\mathrm{j}-1}\boldsymbol{r}_0\} \tag{4-16}$$

ここで、j は GMRES 法内の反復計算回数と考えることができる。反復回数jでの残差ベクトル$\boldsymbol{r}_j$は次の最小条件から求まる。

$$\min_{\mathrm{z}\in \mathrm{K_j}} \| \mathbf{b} - \mathbb{A}(\mathbf{x}_0 + \mathbf{z}) \| = \min_{\mathrm{z}\in \mathrm{K_j}} \| \boldsymbol{r}_0 - \mathbb{A}\mathbf{z} \| \tag{4-17}$$

GMRES 法内の具体的な処理について述べる。$\boldsymbol{v}_1 = \frac{\boldsymbol{r}_0}{\|\boldsymbol{r}_0\|}$とおくと、アーノルディ原理を用いることによって$\mathrm{K_j}$の正規直交系$V_{\mathrm{j}}\{\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_{\mathrm{j}}\}$を得る。この時$\boldsymbol{z} = V_{\mathrm{j}}\boldsymbol{y}$とおくと、$V_{\mathrm{j+1}}$がユニタリ行列であることから、式(4-17)の最小問題はj次元関数の最小 2 乗問題に帰着する。

$$J_j(\boldsymbol{y}) = \| \| \boldsymbol{r}_0 \| \boldsymbol{v}_1 - \mathbb{A}V_{\mathrm{j}}\boldsymbol{y} \| = \| V_{\mathrm{j+1}}\big(\| \boldsymbol{r}_0 \| \boldsymbol{e}_1 - \mathbb{H}_j\boldsymbol{y}\big) \| = \| \| \boldsymbol{r}_0 \| \boldsymbol{e}_1 - \mathbb{H}_{\boldsymbol{j}}\boldsymbol{y} \| \tag{4-18}$$

ここで、$\mathbb{H}_j$はヘッセンベルグ行列、$\boldsymbol{e}_1$は一番目の要素に$\| \boldsymbol{r}_0 \|$を持つベクトルである。

$$\mathbb{H}_{\boldsymbol{j}} = \begin{pmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & \dots & h_{1,j-1} & h_{1,j-1} \\ h_{1,1} & h_{1,2} & \dots & h_{1,j-1} & h_{1,j-1} \\ 0 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & h_{1,1} & h_{1,1} \\ 0 & \dots & \dots & 0 & h_{1,1} \end{pmatrix}$$

$$\boldsymbol{e}_1 = (\| \boldsymbol{r}_0 \| ,0, \cdots ,0))^{\mathrm{T}}$$

一般に最小 2 乗問題を解く方法は多くあるが、Saad と Schults は次式で示すギブンズ回転行列(Gvens rotation matrix) $\mathbb{F}$を用いた。

$$\mathbb{F}_j = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & 0 & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & c_j & -s_j & & & \\ & & & -s_j & c_j & & & \\ & & & & & 1 & & \\ & 0 & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}19)$$

この行列$\mathbb{F}$を用いることで$\mathbb{H}_j$を QR 分解し、最小 2 乗解を求める。ギブンズ回転行列$\mathbb{F}_1$,$\mathbb{F}_2 \cdots, \mathbb{F}_j$を$\mathbb{H}_j$に左から順に掛けると、次式に表す上三角行列へ変換することができる。

$$\mathbb{Z}_j = \begin{pmatrix} x & \dots & & \dots & x \\ 0 & x & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & x & \vdots \\ \vdots & & & 0 & x \\ 0 & \dots & & \dots & 0 \end{pmatrix} \qquad (4\text{-}20)$$

ここで、xは非ゼロ要素である。この上三角行列$\mathbb{Z}_j$を用いると、式(4-18)は次式に変形することができる。

$$J_j(\boldsymbol{y}) = \| \boldsymbol{g}_j - \mathbb{Z}_j \boldsymbol{y} \|$$

ここで、$\boldsymbol{g}_j = \| \boldsymbol{r}_0 \| \mathbb{F}_j \mathbb{F}_{j-1} \cdots \mathbb{F}_1 \boldsymbol{e}_1$ とする。上三角行列$\mathbb{Z}_i$の最後の行の要素はすべて 0 であるので、最小 2 乗解は上三角行列を解くことによって求められる。$\boldsymbol{g}_j$の最後の要素の絶対値は$J_j(\boldsymbol{y})$の最小値となり、定義によって残差$\boldsymbol{r}_j$の最小値になる。以上をまとめた GMRES 法のアルゴリズムをに示す。

Calculate $\mathbf{r_0 = Ax_0 - b}, \boldsymbol{v_1} = {}^{r_0}/_{\|r_0\|}$

Iterations: for j=1,…*m*

Arnoldi process

$\widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathbf{j+1}} = \mathbb{A}\boldsymbol{v}_{\mathbf{j}}$

$\boldsymbol{h}_{\mathbf{j,k}} = \langle \widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathbf{j+1}}, \boldsymbol{v}_{\mathbf{k}} \rangle$ **for k∈ [1,j]**

$\widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathbf{j+1}} = \mathbf{A}\boldsymbol{v}_{\mathbf{j}} - \sum_{\mathbf{k=1}}^{\mathbf{j}} \boldsymbol{h}_{\mathbf{j,k}}\boldsymbol{v}_{\mathbf{k}}$

$\boldsymbol{h}_{\mathbf{j+1,k}} = \| \widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathbf{j+1}} \|$

$\boldsymbol{v}_{\mathbf{j+1}} = \frac{\widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathbf{j+1}}}{\boldsymbol{h}_{\mathbf{j+1,k}}}$

Updating the QR decomposition

Calculation of $\| \boldsymbol{r}_{\mathbf{j}} \|$

Convergence reached?

↓ yes

End the iterative calculation and j =m

$\boldsymbol{V_m} = [\boldsymbol{v_1}, \cdots, \boldsymbol{v_m}]$

Update x= $\mathbf{x_0}$**+**$\boldsymbol{V_m y_m}$ **where** $\boldsymbol{y_m}$**=argmin** $\| \boldsymbol{\beta e_1} - \mathbb{H}_{\boldsymbol{j}}\boldsymbol{y} \|$

図 4.2-2 GMRES 法のアルゴリズム

4.2.1.5. 前処理付き GMRES 法(FGMRES 法)

実際に連立 1 次方程式を Krylov 部分空間法で解くとき、方程式に前処理(preconditioning)という操作を行い、収束が早くなる方程式に変換してから Krylov 部分空間の反復解法を用いることが多い。本研究では前処理を導入するために、FGMRES 法を用いる。前処理を行った場合では、Krylov 部分空間法を用いて次式を解くこととなる。

$$\mathbb{A}\mathbb{M}^{-1}(\mathbb{M}\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} \qquad (4\text{-}21)$$

ここで、行列$\mathbb{M}$は行列$\mathbb{A}$に対する前処理行列である。前処理行列$\mathbb{M}$を用いると、Krylov 部分空間は次式で表される。

$$K_{\mathrm{j}}(\mathbb{A}, \boldsymbol{r}_0) = \mathrm{span}\{\boldsymbol{r}_0, \mathbb{A}\mathbb{M}^{-1}\boldsymbol{r}_0, (\mathbb{A}\mathbb{M}^{-1})^2\boldsymbol{r}_0, \dots, (\mathbb{A}\mathbb{M}^{-1})^{\mathrm{j}-1}\boldsymbol{r}_0\} \qquad (4\text{-}22)$$

前処理行列$\mathbb{M}$が行列$\mathbb{A}$と一致する場合、FGMRES 法のアルゴリズム内の反復計算は一度で収束する。しかし、アルゴリズムでは前処理行列$\mathbb{M}$の逆行列$\mathbb{M}^{-1}$を用いる。よって、行列$\mathbb{M}$が複雑となるときは、逆行列を求める計算時間が増大する。そのため行列$\mathbb{M}$は単純なものが有用とされる。FMGRES 法は、数学的に GMRES 法と同じ手法であり、十分に解が収束したときに得られる結果は同値となる。一方で FGMRES 法は GMRES 法と比べて保存すべきベクトルが多くなる。有効な前処理を行うことで、FGMRES 法は GMRES 法と比較して収束

の安定性を高め、収束が早くすることができる。FGMRES のアルゴリズムを図 4.2-3 に示す。

Calculate $\mathbf{r_0} = \mathbf{A}\mathbf{x_0} - \mathbf{b}, \boldsymbol{v_1} = {}^{r_0}/_{\|r_0\|}$

Iterations: for j=1,…*m*

Arnoldi process

$\boldsymbol{z}_{\mathbf{j}} = \mathbb{M}^{-1}\boldsymbol{v}_{\mathbf{j}}$

$\widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathbf{j+1}} = \mathbb{A}\boldsymbol{z}_{\mathbf{j}}$

$\boldsymbol{h}_{\mathbf{j,k}} = \langle \widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathbf{j+1}}, \boldsymbol{v}_{\mathbf{k}} \rangle$ **for k∈ [1,j]**

$\widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathbf{j+1}} = \widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathbf{j+1}} - \sum_{\mathbf{k=1}}^{\mathbf{j}} \boldsymbol{h}_{\mathbf{j,k}}\boldsymbol{v}_{\mathbf{k}}$

$\boldsymbol{h}_{\mathbf{j+1,k}} = \| \widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathbf{j+1}} \|$

$\boldsymbol{v}_{\mathbf{j+1}} = \frac{\widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathbf{j+1}}}{\boldsymbol{h}_{\mathbf{j+1,k}}}$

Updating the QR decomposition

Calculation of $\| \boldsymbol{r}_{\mathbf{j}} \|$

Convergence reached?

↓ yes

End the iterative calculation and j =m

$\boldsymbol{Z_m} = [\boldsymbol{z_1}, \cdots, \boldsymbol{z_m}]$

Update x= $\mathbf{x_0} + \boldsymbol{Z_m}\boldsymbol{y_m}$ **where** $\boldsymbol{y_m}$**=argmin** $\| \boldsymbol{\beta e_1} - \mathbb{H}_j \boldsymbol{y} \|$

図 4.2-3 FGMRES 法のアルゴリズム

4.2.1.6. GMRES 法の MOC コードへの導入

本研究では GMRES 法を 1 次元 MOC コードに導入し、前処理手法の開発を行う。作成した 1 次元 MOC コードは領域内の角度中性子束を積分することでエネルギー群ごとの平均中性子束を求める。計算の収束性を高めるため、1 次元 MOC コードでは反復計算を内側反復と外側反復に分けて行う。多くの MOC コードでは、Gauss-Seidel 法を用いて計算を収束させているが、本研究ではさらに効率よく計算を行うため、GMRES 法を内側反復に導入する。式(4-13)で与えられる離散化された MOC システムは次式のように変形できる。

$$\left(\mathbb{I} - \mathbb{L}_g \mathbb{W}_g\right)\boldsymbol{\Phi}_g = \mathbb{L}_g \boldsymbol{S}_g \qquad (4\text{-}23)$$

固定された中性子ソース$\mathbb{L}_g \boldsymbol{S}_g$に対する中性子ベクトル$\boldsymbol{\Phi}_g$を計算することは、内側反復の計算に相当する。式(4-23)を用いると、中性子束ベクトル$\boldsymbol{\Phi}_g$は$\mathbb{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$の解として取り扱うことができ、これを GMRES 法で解くべき式とする。

GMRES 法の計算では、収束条件を設定し、次式を満たすまで GMRES 法内の反復を繰り返す。

$$\frac{\| \boldsymbol{r}_{\mathrm{j}} \|}{\| \boldsymbol{r}_0 \|} < \varepsilon_g \tag{4-24}$$

また、反復回数の上限を設定できる。GMRES 法では、反復回数に応じて用いる配列が変化する。そのため、反復回数の上限を非常に高く設定するとメモリ使用量の問題が発生する。本研究においては収束過程の比較を行うため、GMRES 法内の反復回数の上限を 30 と高めの設定をしている。GMRES 法を導入した MOC コードの計算スキームを図 4.2-4 に記載する。

この MOC コードにおいては、実効増倍率を求める方法としてべき乗法を採用した。MOC の計算システムは、階差法によって固有値Keff^{-1}に対する行列の固有値問題となる。この固有値問題の解はべき乗法(power method)として知られており、数値解法の一般的な方法として広く用いられている。核分裂中性子源項を$\mathrm{S}(\boldsymbol{r})$とする。ここで、$\boldsymbol{r}$は体系内の位置を示すベクトルとする。この時、反復回数$h+1$回目の実効増倍率 k はべき乗法によって次式で与えられる。

$$\mathrm{k}^{h+1} \cong \frac{\int d^3 r \mathrm{S}^{h+1}(\boldsymbol{r})}{\frac{1}{\mathrm{k}^h} \int d^3 r \mathrm{S}^h(\boldsymbol{r})} \tag{4-25}$$

MOC の計算の収束には、中性子束の収束条件であるε_fと、実効増倍率の収束条件であるε_kを用いている。1 次元 MOC コードの計算は以下の二式を満たすことで収束しているものとみなす。

$$\max_{i,g} \left| \frac{\phi_{g,h}^i - \phi_{g,h-1}^i}{\phi_{g,h-1}^i} \right| < \varepsilon_f \tag{4-26}$$

$$\left| \frac{K_h - K_{h-1}}{K_{h-1}} \right| < \varepsilon_k \tag{4-27}$$

1 次元 MOC コードの計算においては、表 4.2-2 に示す計算条件を用いている。

表 4.2-2 1 次元 MOC コードでの収束条件

ε_f	10^{-8}
ε_k	10^{-8}
Number of SI	5
GMRES 法内の反復回数の上限	30
Polar angles for π	10(Equally-divided)
Boundary condition	Vacuum

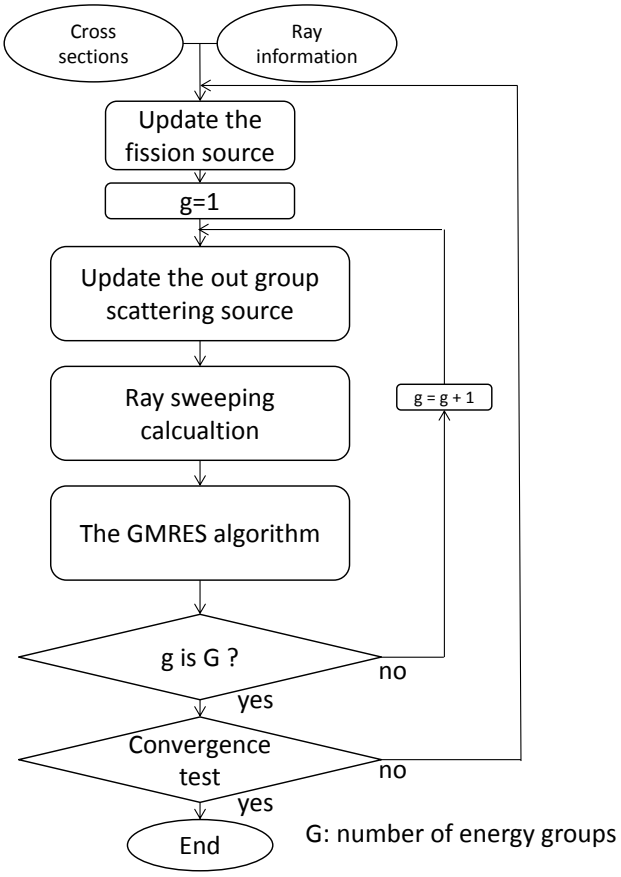


図 4.2-4　GMRES 法を導入した MOC コードのフローチャート

4.2.1.7.　前処理としての DSA

背景で述べたとおり、近年の研究された加速手法として DSA がある。DSA とは、次式で示す拡散法を用いて計算の加速を図る手法である。

$$-\mathrm{div}D_g(\vec{r})\mathrm{grad}\Phi_g(\vec{r}) + \Sigma_\mathrm{t}(\vec{r})\Phi_g(\vec{r}) = \Sigma_{\mathrm{s},g\to g}(\vec{r})\Phi_g(\vec{r}) + S_g(\vec{r}) \qquad (4\text{-}28)$$

ここで、$D_g(\vec{r})$、$\Phi_g(\vec{r})$、$\Sigma_\mathrm{t}(\vec{r})$、$\Sigma_{\mathrm{s},g\to g}(\vec{r})$、$S_g(\vec{r})$はそれぞれ体系内の位置$\vec{r}$における拡散係数、中性子束、全断面積、自群散乱断面積、自群散乱によって発生する中性子を除いた中性子ソースである。本研究では、式(4-28)を中心メッシュ差分方程式に離散化させて前処理を行う。一次元平板体系においては、領域iと領域$i+1$の境界線における中性子流$\mathrm{J}_g^{i+\frac{1}{2}}$を考慮する(図 4.2-5)。

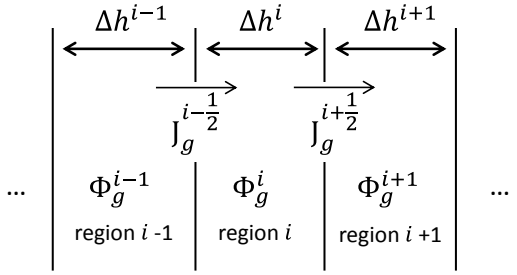


図 4.2-5　一次元平板体系での中性子束と中性子流

中心メッシュ差分方程式では、領域の境界面での中性子のやり取りを考える。領域iと領域$i+1$の境界線における中性子流は近似的に次式で示される。

$$\mathrm{J}_g^{i+\frac{1}{2}} = -D_g^{i+\frac{1}{2}}\left(\Phi_g^{i+1} - \Phi_g^{i}\right) \tag{4-29}$$

ここで$D_g^{i+\frac{1}{2}}$は領域iと領域$i+1$の境界線における拡散係数である。この拡散係数は、空間メッシュ内の平均拡散係数で与えることができる。

$$D_g^{i+\frac{1}{2}} = -\frac{2D_g^{i}D_g^{i+1}}{D_g^{i}\Delta h^{i} + D_g^{i+1}\Delta h^{i+1}} \tag{4-30}$$

ここで、D_g^{i}は領域iにおける拡散係数となる。この前処理では拡散係数を用いることによって行列$\mathbb{A}$に相当する前処理行列$\mathbb{M}$を作成する。領域iにおいて、式(4-28)の右辺第一項を左辺に移項した方程式は次式で表される。

$$-\nabla\cdot D_g\nabla\Phi|_i + \Sigma_{\mathrm{t},g}^{i}\Phi_g^{i} - \Sigma_{\mathrm{s},g\to g}^{i}\Phi_g^{i} = S_g^{i} \tag{4-31}$$

ここで、$-\nabla\cdot D_g\nabla\Phi|_i$は式(4-29), (4-30)を用いて次式で表される。

$$\begin{aligned}&-\nabla\cdot D_g\nabla\Phi|_i\\&= -2\frac{\left\{\left(\frac{\Delta h^{i}}{D_g^{i}} + \frac{\Delta h^{i+1}}{D_g^{i+1}}\right)^{-1}\left(\Phi_g^{i+1} - \Phi_g^{i}\right) + \left(\frac{\Delta h^{i-1}}{D_g^{i-1}} + \frac{\Delta h^{i}}{D_g^{i}}\right)^{-1}\left(\Phi_g^{i} - \Phi_g^{i-1}\right)\right\}}{\Delta h^{i}}\end{aligned} \tag{4-32}$$

以上から、拡散方程式である式(4-31)は行列を用いて次式で表現できる。

$$\mathbb{E}_g\boldsymbol{\Phi}_{Diffusion,g} = \boldsymbol{S}_g \tag{4-33}$$

ここで、$\boldsymbol{\Phi}_{Diffusion,g}$は拡散方程式で得られる領域の平均中性子束のベクトルである。一次元平板体系においては、$\mathbb{E}_g$は次式で示すような 3 重対角行列となり、変形などの数値処理が容易となる。

$$\mathbb{E}_g = \begin{pmatrix} e_{1,1} & e_{1,2} & & & & & \\ e_{2,1} & e_{2,2} & e_{2,3} & & & 0 & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & \\ & & e_{j,i-1} & e_{j,i} & e_{j,i+1} & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & & e_{I-1,I-2} & e_{I-1,I-1} & e_{I-1,I} \\ & & & & & e_{I,I-1} & e_{I,I} \end{pmatrix} \tag{4-34}$$

一方で、MOC の理論式は式から次式のように変形できる。

$$\left(\mathbb{L}_g{}^{-1} - \mathbb{W}_g\right)\boldsymbol{\Phi}_g = \boldsymbol{S}_g \tag{4-35}$$

式(4-33)と式(4-35)を比べると、次の近似式が導かれる。

$$\mathbb{E}_g \approx \mathbb{L}_g{}^{-1} - \mathbb{W}_g \tag{4-36}$$

$\mathbb{A} = \mathbb{I} - \mathbb{L}_g\mathbb{W}_g$であることから、式(4-36)を用いて行列$\mathbb{A}$を行列$\mathbb{E}_g$で表現すれば DSA による前処理行列を作れる。実際に前処理を行う場合、$\mathbb{A}$の逆行列$\mathbb{A}^{-1}$が必要となる。この逆行列を$\mathbb{E}_g$用いて計算するために、具体的には式(4-36)を用いた次式で示す変形を用いる。

$$\begin{aligned} \mathbb{A}^{-1} = \left(\mathbb{I} - \mathbb{L}_g\mathbb{W}_g\right)^{-1} = \left\{\mathbb{L}_g\left(\mathbb{L}_g{}^{-1} - \mathbb{W}_g\right)\right\}^{-1} \approx \left(\mathbb{L}_g\mathbb{E}_g\right)^{-1} = \mathbb{E}_g{}^{-1}\mathbb{L}_g{}^{-1} \\ = \mathbb{E}_g{}^{-1}\left(\mathbb{E}_g + \mathbb{W}_g\right) = \mathbb{I} + \mathbb{E}_g{}^{-1}\mathbb{W}_g \end{aligned} \tag{4-37}$$

$\mathbb{E}_g$は式で示す通り三重対角行列なので、その逆行列$\mathbb{E}_g{}^{-1}$の計算時間は$\left(\mathbb{I} - \mathbb{L}_g\mathbb{W}_g\right)$の逆行列の計算時間と比べて大幅に短くなる。このことを踏まえ、DSA に基づく前処理では、$\left(\mathbb{I} + \mathbb{E}_g{}^{-1}\mathbb{W}_g\right)$を前処理行列の逆行列$\mathbb{M}^{-1}$とする。なお、DSA に基づく前処理は、拡散理論で得られる結果と輸送計算で得られる結果が近い時に有効である。

4.2.1.8. 平均自由行程を用いた前処理

本節では、新たに開発する前処理手法について記述する。DSA に基づく前処理は、拡散理論で得られる行列$\left(\mathbb{I} + \mathbb{E}_g{}^{-1}\mathbb{W}_g\right)$と行列$\left(\mathbb{I} - \mathbb{L}_g\mathbb{W}_g\right)^{-1}$が数値計算上で近しい時に有効となる。しかし、輸送効果が大きくなる炉心においては、拡散理論を用いて輸送理論と同等の結果を得ることが難しくなる。そこで MOC の理論式で使われる係数を直接用い、領域間の結合を計算し前処理行列を作成する。行列$\mathbb{L}_g\mathbb{W}_g$は全領域の中性子束が$1/\mathrm{cm}^3$であるときに自群散乱によって発生する中性子を掃出し、新たな中性子束を求める数値処理と同等となる。以上を踏まえて、ある領域で自群散乱によって発生した中性子がその領域の放出中性

子束となる量$\varphi'^{i,n}_{out}$を考える。

$$\varphi'^{i,n}_{out} = \beta^{i,n}\Sigma^{i}_{\mathrm{s},g\to g}\Phi^{i}_{g} \tag{4-38}$$

ここで、

$$\beta^{i,n} = \frac{1-e^{-\Sigma^{i}_{\mathrm{t},g}\frac{\Delta x_i}{\mu^n}}}{\Sigma^{i}_{\mathrm{t},g}} \tag{4-39}$$

である。

i. $0<\theta<\frac{\pi}{2}$ の場合

放出中性子が隣接する領域$i+1$に入射すると、その領域内で$\varphi'^{i,n}_{out}$は減衰する。領域iで自群散乱によって発生した中性子が、領域$i+1$の放出中性子になる量$\varphi'^{i\to i+1,n}_{out}$は次式で与えられる。

$$\varphi'^{i\to i+1,n}_{out,0<\theta<\frac{\pi}{2}} = \gamma^{i+1,n}\beta^{i,n}\Sigma^{i}_{\mathrm{s},g\to g}\Phi^{i}_{g} \tag{4-40}$$

ここで、

$$\gamma^{i,n} = e^{-\Sigma^{i}_{\mathrm{t},g}\frac{\Delta x_i}{\mu^n}} \tag{4-41}$$

である。同様に減衰されていくことを考えると、領域i^*の放出中性子になる量は次式で与えられる。

$$\varphi'^{i\to i^*,n}_{out,0<\theta<\frac{\pi}{2}} = \gamma^{i^*,n}\gamma^{i^*-1,n}\cdots\gamma^{i+2,n}\gamma^{i+1,n}\beta^{i,n}\Sigma^{i}_{\mathrm{s},g\to g}\Phi^{i}_{g} \tag{4-42}$$

領域iで自群散乱によって発生した中性子が領域i^*の中性子束になる量は、式(4-12)の第 2 式を用いて求めることができる。

$$\mathrm{P}^{*}_{i\to i^*,0<\theta<\frac{\pi}{2}} = \sum_{n}\omega^{n}\frac{1}{\Sigma^{i}_{\mathrm{t},g}}\left\{\frac{\mu^n}{\Delta x_i}\left(\varphi'^{i\to i^*-1,n}_{out} - \varphi'^{i\to i^*,n}_{out}\right)\right\} \tag{4-43}$$

ii. $\frac{\pi}{2}<\theta<\pi$ の場合

領域iの放出中性子は隣接する領域$i-1$に入射する。$0<\theta<\frac{\pi}{2}$の場合と同様に、減衰する放出中性子を求めればよいが、飛行する方向が異なるため、領域i^*の放出中性子になる量は次式で与えられる。

$$\varphi'^{i\to i^*,n}_{out,\frac{\pi}{2}<\theta<\pi} = \gamma^{i^*,n}\gamma^{i^*+1,n}\cdots\gamma^{i-2,n}\gamma^{i-1,n}\beta^{i,n}\Sigma^{i}_{\mathrm{s},g\to g}\Phi^{i}_{g} \tag{4-44}$$

領域iで自群散乱によって発生した中性子が領域i^*の中性子束になる量は次式で与えられる。

$$\mathrm{P}^{*}_{i\to i^*,\frac{\pi}{2}<\theta<\pi} = \sum_{n}\omega^{n}\frac{1}{\Sigma^{i}_{\mathrm{t},g}}\left\{\frac{\mu^{n}}{\Delta x_i}\left(\varphi'^{i\to i^*+1,n}_{out} - \varphi'^{i\to i^*,n}_{out}\right)\right\} \tag{4-45}$$

場合分けして得られた領域間の結合によって行列$\mathbb{L}_g\mathbb{W}_g$は作成される。ただし、このまま逆行列を計算するには多大な計算時間を必要とする。そこで、この行列を簡略化するために平均自由行程に注目した。式(4-42), (4-44)で得られる放出中性子は領域を進むごとに減衰されていき、やがて 0 に近づく。そこで、弱い領域間の結合を無視するために、平均自由行程の m 倍よりも遠い領域においてこの放出中性子が 0 になると仮定した。領域$i, i+1, \cdots i^*$における領域幅で重みづけした平均自由行程$L_{i\to i^*,g}$を次式で与える。

$$L_{i\to i^*,g} = \frac{\Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \cdots + \Delta x_{i^*}}{\Delta x_i\Sigma^{i}_{\mathrm{t},g} + \Delta x_{i+1}\Sigma^{i+1}_{\mathrm{t},g} + \cdots + \Delta x_{i^*}\Sigma^{i^*}_{\mathrm{t},g}} \tag{4-46}$$

領域iを基準として、平均自由行程の m 倍よりも近い領域を$i^{left}, i^{left}+1, \cdots, i, \cdots, i^{right}-1, i^{right}$とすると、これらの領域は次式を満たす。

$$\left[\begin{array}{l} \Delta x_{i^{left}} + \Delta x_{i^{left}+1} + \cdots + \Delta x_i < \mathrm{m}L_{i^{left}\to i,g} \\ \qquad < \Delta x_{i^{left}-1} + \Delta x_{i^{left}} + \cdots + \Delta x_i \\ \\ \Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \cdots + \Delta x_{i^{right}} < \mathrm{m}L_{i\to i^{right},g} \\ \qquad < \Delta x_i + \Delta x_{i+1} + \cdots + \Delta x_{i^{right}+1} \end{array}\right. \tag{4-47}$$

一次元 MOC において、この簡略化をすることは逆行列の計算時間を大幅に削減できる。これは**図 4.2-6** に示すように、簡略化によって行列の対角化が効率よく行えるからである。

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} P_{1,1} & \cdots & P_{1,a} & & & & \\ \vdots & \ddots & \cdots & \ddots & & 0 & \\ \ddots & \cdots & \ddots & \cdots & \ddots & & \\ & P_{b,c} & \cdots & P_{j,i} & \cdots & P_{d,e} & \ddots \\ & 0 & \mathbf{r} & \ddots & \mathbf{r} & \ddots & \vdots \\ & & & & P_{I,f} & \cdots & P_{I,I} \end{pmatrix}$$

r =m×(mean free path)　m=1,2,3,..

図 4.2-6　平均自由行程を用いて簡略化した前処理行列

4.2.1.9.　粗メッシュを用いた前処理

一般的に細かいメッシュから粗いメッシュに変換すると、扱う情報量は少なくなる。本節ではこの粗いメッシュを用いて、前処理行列の逆行列を短い時間で作成することを目的とする。メッシュの変換は、変換前後で情報が大きく変わらないときに有効となる。具体的には、細かいメッシュでの分布が滑らかである時に有効であると言える。これは、粗いメッシュから細かいメッシュへの変換を行うときに、本来の分布を再現しやすくなるからである。一方で細かいメッシュにおいて分布の起伏が激しい時は、粗いメッシュから細かいメッシュに変換する際、本来の分布を再現できないためにこの手法は不適といえる(図4.2-7)。

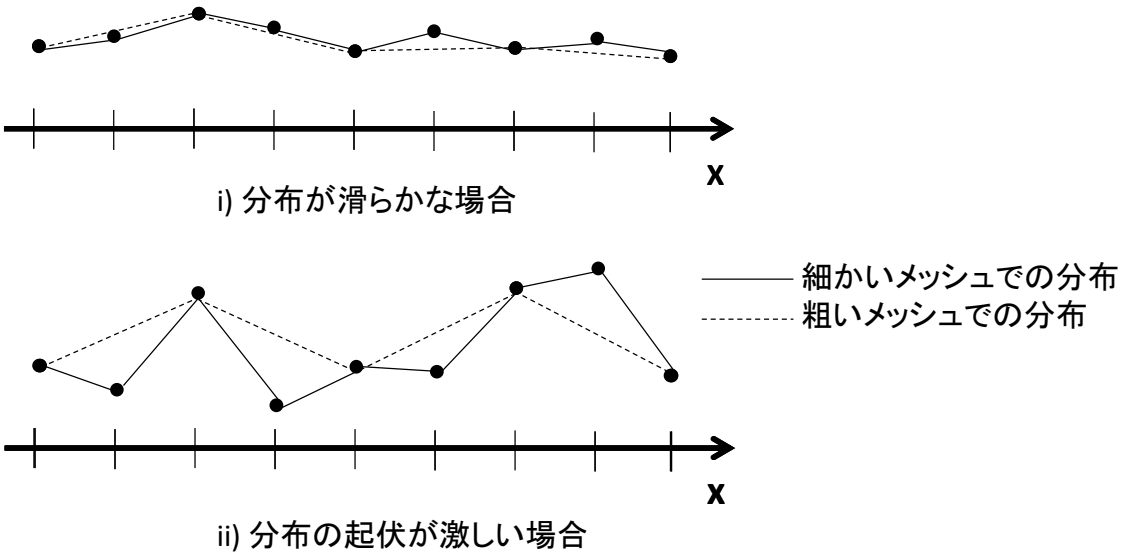


図 4.2-7　粗いメッシュと細かいメッシュでの分布

まず、粗いグリッドを用いた計算の加速について述べる。細かいメッシュにおいて作成された前処理行列を粗いグリッドに変換すると、行列の要素は大幅に削減される。変換を行うために、次式で示す行列を定める。

$$\mathbb{I}_{2h}^{h} = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\begin{pmatrix} \mathbf{1} & & & & \\ \mathbf{2} & & & & \\ \mathbf{1} & \mathbf{1} & & & \\ & \mathbf{2} & & & \\ & \mathbf{1} & \ddots & & \\ & & \ddots & \mathbf{1} & \\ & & & \mathbf{2} & \\ & & & \mathbf{1} & \end{pmatrix} \tag{4-48}$$

$$\mathbb{I}_h^{2h} = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{4}}\begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{1} & & & & \\ & & \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{1} & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

細かいメッシュにおける行列$\mathbb{A}$に対し、粗いメッシュにおける行列を$\mathbb{A}^{2h}$とすると、この行列は式(4-48)の変換行列を用いて次式のように書くことができる。

$$\mathbb{A}^{2h} = \mathbb{I}_h^{2h}\mathbb{A}\mathbb{I}_{2h}^{h} \tag{4-49}$$

この手法では$\mathbb{A}^{2h}$を用いて残差$\boldsymbol{r}$を減らす計算を行う。具体的には、$\mathbb{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$を解く際、近似的に得られる解$\boldsymbol{x}^*$に対して誤差$\mathbf{e}$を求め、$\boldsymbol{x}^*$を$\mathbf{e}$で修正する計算を行う。これらの記号を用いると、式(4-14)は次式のように書き換えられる。

$$\mathbb{A}(\boldsymbol{x}^* + \mathbf{e}) = \boldsymbol{b} \tag{4-50}$$

ここで、残差$\boldsymbol{r}$を用いると、

$$\mathbb{A}\mathbf{e} = \boldsymbol{r} \tag{4-51}$$

となる。この誤差$\mathbf{e}$を細かいメッシュにおいて解くことは、真値である$\boldsymbol{x}$を求めることと同義である。そこで、粗いメッシュにおける残差$\boldsymbol{r}_{coarse}$及び誤差$\mathbf{e}_{coarse}$を求めることで計算負荷を削減する。以上をまとめると、計算フローは図 4.2-8 で表される。

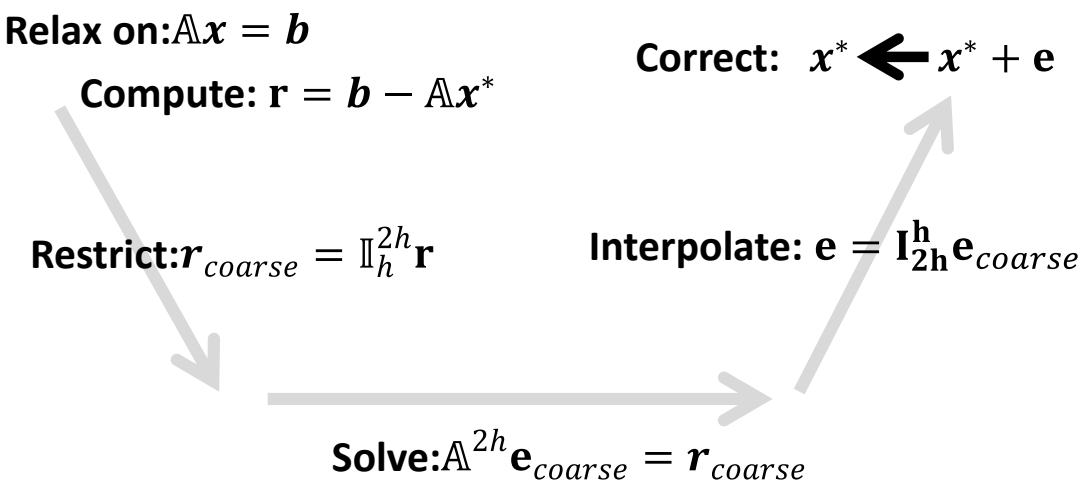


図 4.2-8　粗いメッシュを用いた解の修正

この加速手法を前処理として導入した FGMRES 法の計算フローは図 4.2-9 で示される。この計算では、通常の前処理行列に加え、粗いメッシュに対する行列$\mathbb{A}^{2h}$を用いて残差を削減させている。

Calculate $\mathbf{r_0} = \mathbf{A x_0} - \mathbf{b}$, $\boldsymbol{v_1} = {}^{r_0}/_{\|r_0\|}$, $\mathbb{B} = \mathbb{A}\mathbb{I}_{2h}^{h}$

Iterations: for j=1,…*m*

Arnoldi process

Solve: $\mathbb{A}^{2h}\boldsymbol{q_c}=\mathbb{I}_h^{2h}\boldsymbol{v}_\mathrm{j}$

$\boldsymbol{q_0} = \mathbb{I}_{2h}^{h}\boldsymbol{q_c}$

$\dot{\boldsymbol{v}}_\mathrm{j} = \boldsymbol{v}_\mathrm{j} - \mathbb{A}\boldsymbol{q_0}=\boldsymbol{v}_\mathrm{j} - \mathbb{B}\boldsymbol{q_c}$

$\boldsymbol{q_1}=\mathbb{M}^{-1}\dot{\boldsymbol{v}}_\mathrm{j}$

$\boldsymbol{z}_\mathrm{j}=\boldsymbol{q_0}+\boldsymbol{q_1}$

$\widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathrm{j}+1} = \mathbb{A}\boldsymbol{z}_\mathrm{j}$

$\boldsymbol{h}_{\mathrm{j,k}}= \langle\widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathrm{j}+1}, \boldsymbol{v}_\mathrm{k}\rangle$ **for k∈ [1,j]**

$\widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathrm{j}+1} = \widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathrm{j}+1} - \sum_{\mathrm{k}=1}^{\mathrm{j}} \boldsymbol{h}_{\mathrm{j,k}}\boldsymbol{v}_\mathrm{k}$

$\boldsymbol{h}_{\mathrm{j+1,k}} = \| \widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathrm{j}+1} \|$

$\boldsymbol{v}_{\mathrm{j}+1} = \frac{\widehat{\boldsymbol{v}}_{\mathrm{j}+1}}{\boldsymbol{h}_{\mathrm{j+1,k}}}$

Updating the QR decomposition

Calculation of $\| \boldsymbol{r}_\mathrm{j} \|$

Convergence reached?

↓ yes

End the iterative calculation and j =m

$\boldsymbol{Z_m} = [\boldsymbol{z_1}, \cdots, \boldsymbol{z_m}]$

Update x= $\mathrm{x}_0+\boldsymbol{Z_m}\boldsymbol{y_m}$ **where** $\boldsymbol{y_m}$**=argmin** $\| \boldsymbol{\beta e_1} - \mathbb{H}_j\boldsymbol{y} \|$

図 4.2-9　粗いメッシュによる前処理を用いた FGMRES 法

4.2.2. 手法の比較と考察

本節では、1 次元 MOC コードに GMRES 法及び前処理を導入した場合の計算結果を記載し、手法の検討をする。まず、内側反復の収束条件に相当するパラメータである GMRES 法内の収束条件について検討を行う。検討で決定した GMRES 法内の収束条件を用いて、固定源の計算を行うことで、収束過程の比較を行う。さらに、異なる体系において、DSA と本研究で開発した前処理手法の比較をする。また、本研究で開発した前処理手法が局所的に核分裂性物質を配置した体系によって有効性を保てるかどうかの確認を行う。最後に均質化の効果を確認するため、粗メッシュを用いた前処理手法の計算体系での検討を行う。

4.2.2.1. GMRES 法の収束条件の決定

GMRES 法では式(4-24)で示す収束条件ε_gを計算の前に定める。適切な収束条件ε_gを定めるために、ε_gを変化させた場合の反復回数を比較する。収束のしやすさは、領域の大きさや、領域分割数に依存する。そこで、2 つの体系で計算を行い検討した。体系図を図 4.2-10 及び図 4.2-11 に示す。以下、図 4.2-10 で示す体系を体系 i、図 4.2-11 で示す体系を体系 ii とする。図 4.2-11 では体系を均等に 2100 分割している。また、エネルギー群の分割数は 7 として計算する。

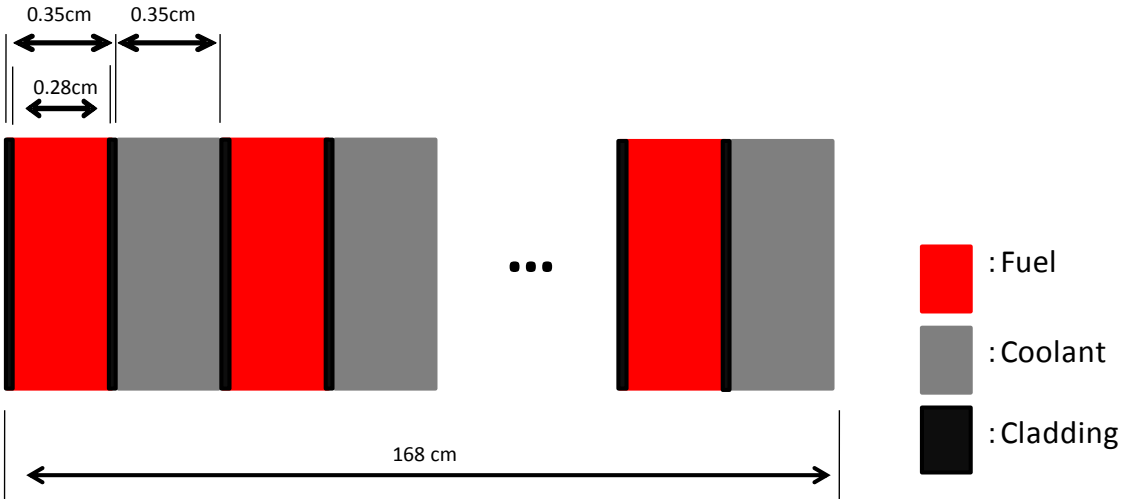


図 4.2-10　2160 の領域で構成する平板体系(体系 i)

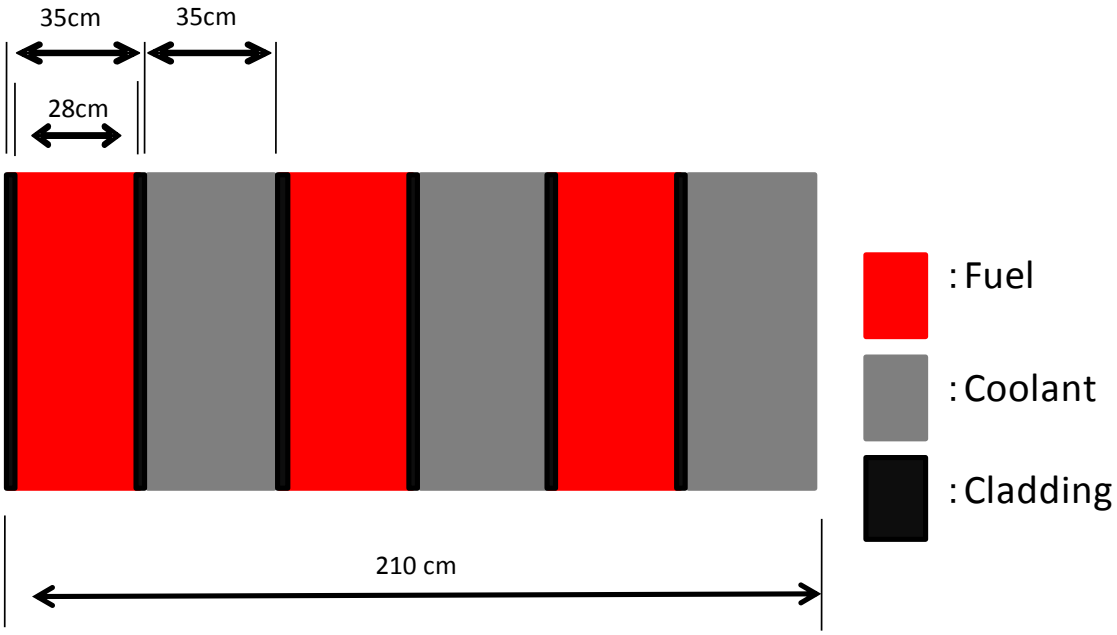


図 4.2-11　2100 の領域で構成する平板体系(体系 ii)

計算結果として、体系 i の中性子束分布を図 4.2-12 に、体系 ii の中性子束分布を図 4.2-13 に示す。MOC コードでは、収束するまでに何度も外側反復を繰り返し、外側反復ごとに全エネルギー群に対して GMRES 法の計算を行う。よって、収束の速さを比較するためには、MOC コードが収束するまでに行った、GMRES 法内の反復回数を比較することが有効といえる。MOC コードの計算が収束するまでに必要となったエネルギー群ごとの反復回数及び全エネルギー群に対して行った総反復回数を、体系 i については表 4.2-3 に、体系 ii については表 4.2-4 に示す。なお、極角の分割数は 10 とする。

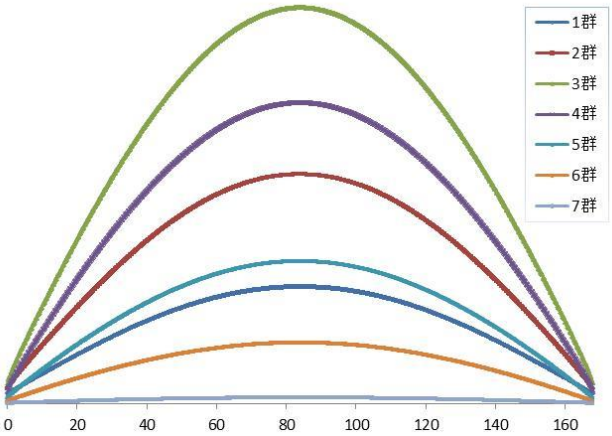


図 4.2-12　体系 i の中性子束分布

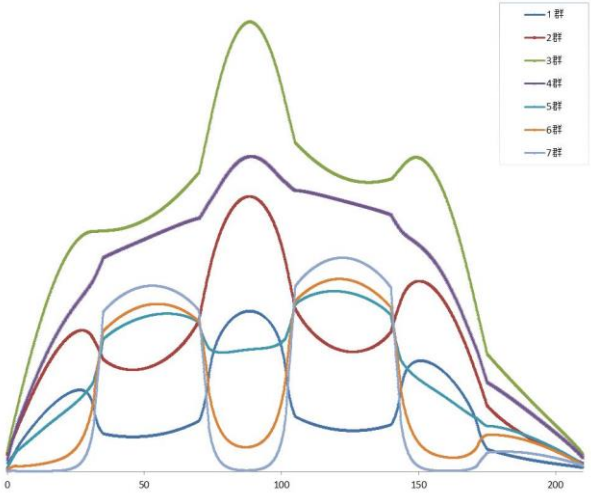


図 4.2-13　体系 ii の中性子束分布

表 4.2-3　体系 i での計算に必要とした GMRES 法の反復回数

ε g	1.0E-04	1.0E-03	1.0E-02	1.0E-01	5.0E-01
1群	148	118	70	38	48
2群	226	159	120	64	89
3群	360	255	180	102	120
4群	394	279	197	111	136
5群	395	273	193	109	132
6群	361	245	183	117	126
7群	239	156	130	84	94
総反復回数	2123	1485	1073	625	745

表 4.2-4　体系 ii での計算に必要とした GMRES 法の反復回数

ε g	1.0E-04	1.0E-03	1.0E-02	1.0E-01	5.0E-01
1群	432	321	259	129	85
2群	710	548	391	228	151
3群	1046	770	558	320	209
4群	1167	896	606	273	216
5群	1217	956	651	319	213
6群	1251	946	654	325	251
7群	1126	844	637	326	240
総反復回数	6949	5281	3756	1920	1365

本研究に用いた MOC コードは内側反復と外側反復を分けており、内側反復で十分計算を収束させるほうが計算全体の安定性は高くなると言える。そのため、ε_gの値が大きすぎると、計算が不安定になる可能性がある。体系 i と体系 ii の反復回数を比較すると、体系 i については$\varepsilon_g = 0.1$のとき、体系 ii については$\varepsilon_g = 0.5$のときに最も少ない反復回数で MOC コードの計算は収束する。計算の安定性を考えると、$\varepsilon_g = 0.1$としたほうがよいと考えられる。また、体系 ii の中性子束分布は、体系 i の中性子束分布と比べると起伏が激しく、実際の炉心の中性子束分布としては考えにくい。一般的な炉心を考えると、余弦関数で中性子束分布を模擬できるような体系 i で適したε_gを基準をとることが現実的である。以上から、1 次元 MOC コードでの計算において$\varepsilon_g = 0.1$とする。

4.2.2.2.　固定源問題での収束過程の比較

1 次元 MOC コード内の GMRES 法の収束条件は前節で決定した通り、$\varepsilon_g = 0.1$とする。一方で、前処理手法の比較を行うためには、残差が非常に小さくなるまでの過程を検討に加えるべきである。そこで、本節では$\varepsilon_g = 10^{-8}$とし、固定源問題の収束過程を比較する。各領域の中性子ソースは、各領域の中性子束が全て$1/\mathrm{cm}^3$である時に核分裂によって発生する中性子量として固定する。この計算は、エネルギー群の分割数を 1 とし、収束過程は前節で用いた体系 i と体系 ii を用いる。一般的に、散乱比が大きい体系では GMRES 法で計算する内側反復の収束は遅くなる。このため、異なる散乱比を用いてそれぞれの収束過程を比較した。固定源問題での収束過程を比較するために用いる断面積を表 4.2-5、表 4.2-6、表 4.2-7、表 4.2-8 に示す。なお、極角の分割数は 10 とする。

表 4.2-5　散乱比 c=0.5 の 1 群断面積セット

	$\nu\Sigma_\mathrm{f}$	χ	Σ_t	Σ_s
Fuel	5.00E-01	1.00E+00	1.00E+00	5.00E-01
Coolant	0.00E+00	0.00E+00	1.00E+00	5.00E-01
Cladding	0.00E+00	0.00E+00	1.00E+00	5.00E-01

表 4.2-6　散乱比 c=0.75 の 1 群断面積セット

	$\nu\Sigma_\mathrm{f}$	χ	Σ_t	Σ_s
Fuel	5.00E-01	1.00E+00	1.00E+00	7.50E-01
Coolant	0.00E+00	0.00E+00	1.00E+00	7.50E-01
Cladding	0.00E+00	0.00E+00	1.00E+00	7.50E-01

表 4.2-7　散乱比 c=0.9 の 1 群断面積セット

	$\nu\Sigma_\mathrm{f}$	χ	Σ_t	Σ_s
Fuel	5.00E-01	1.00E+00	1.00E+00	9.00E-01
Coolant	0.00E+00	0.00E+00	1.00E+00	9.00E-01
Cladding	0.00E+00	0.00E+00	1.00E+00	9.00E-01

表 4.2-8　散乱比 c=0.999 の 1 群断面積セット

	$\nu\Sigma_\mathrm{f}$	χ	Σ_t	Σ_s
Fuel	5.00E-01	1.00E+00	1.00E+00	9.99E-01
Coolant	0.00E+00	0.00E+00	1.00E+00	9.99E-01
Cladding	0.00E+00	0.00E+00	1.00E+00	9.99E-01

表 4.2-5、表 4.2-6、表 4.2-7、表 4.2-8 の断面積を用いたときの体系 i における収束過程の比較をそれぞれ図 4.2-14、図 4.2-15、図 4.2-16、図 4.2-17 に示す。また、体系 ii については収束過程をそれぞれ図 4.2-18、図 4.2-19、図 4.2-20、図 4.2-21 に示す。

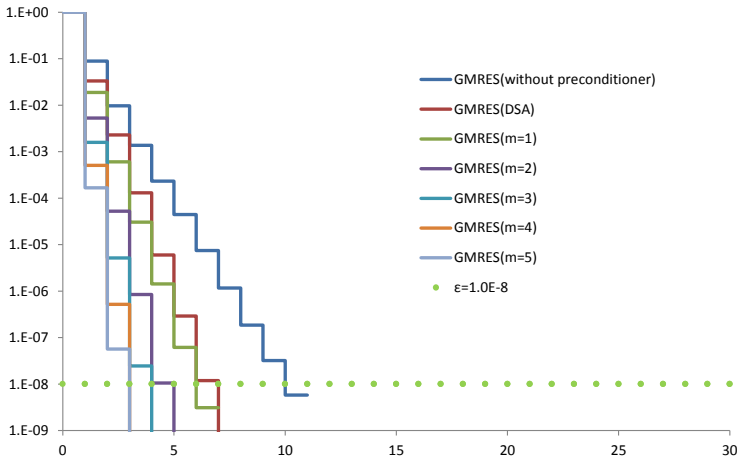


図 4.2-14　散乱比 c=0.5 とした体系 i の収束過程の比較

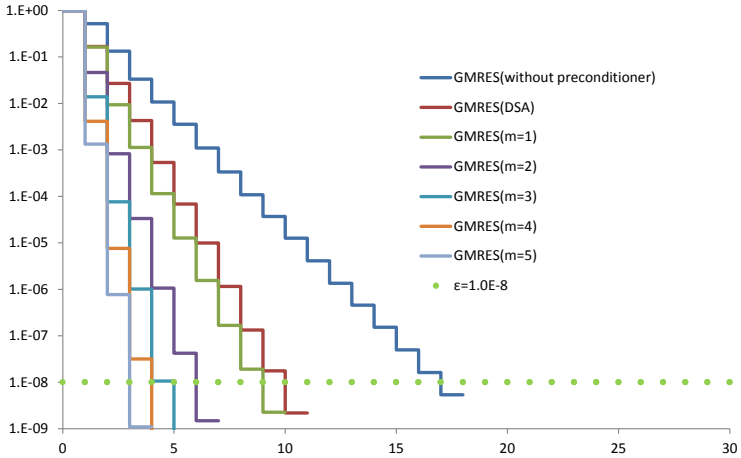


図 4.2-15　散乱比 c=0.75 とした体系 i の収束過程の比較

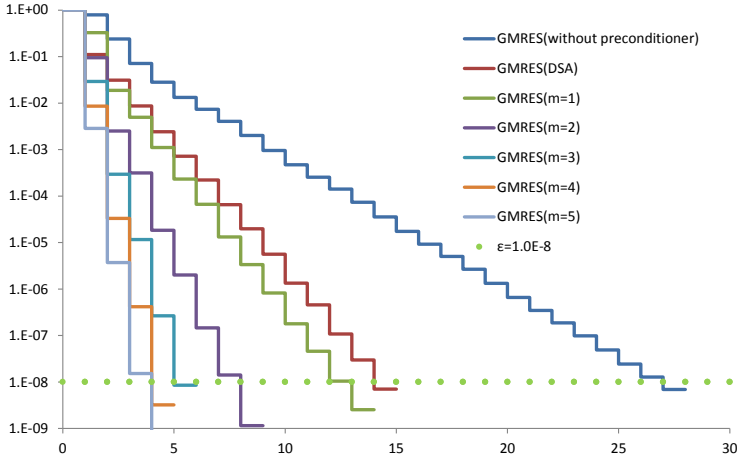


図 4.2-16　散乱比 c=0.9 とした体系 i の収束過程の比較

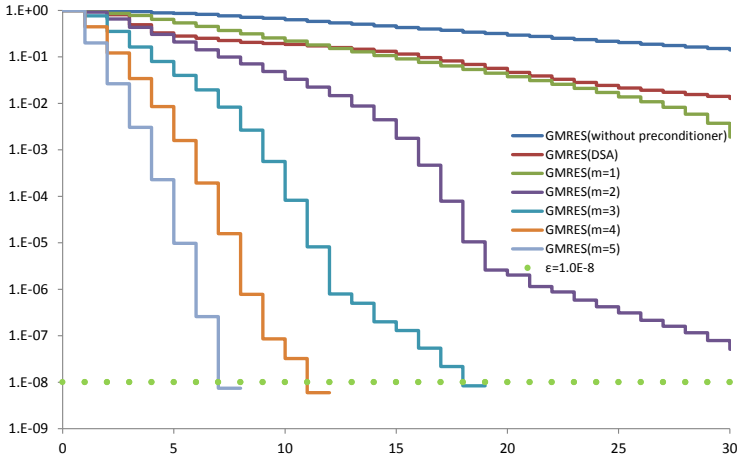


図 4.2-17　散乱比 c=0.999 とした体系 i の収束過程の比較

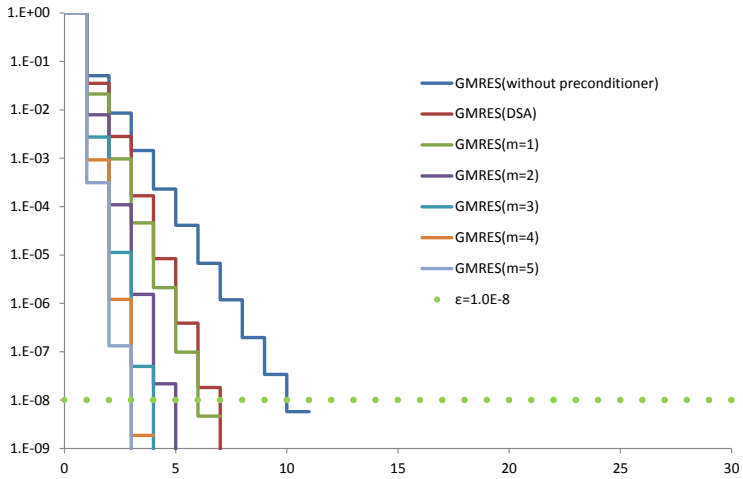


図 4.2-18　散乱比 c=0.5 とした体系 ii の収束過程の比較

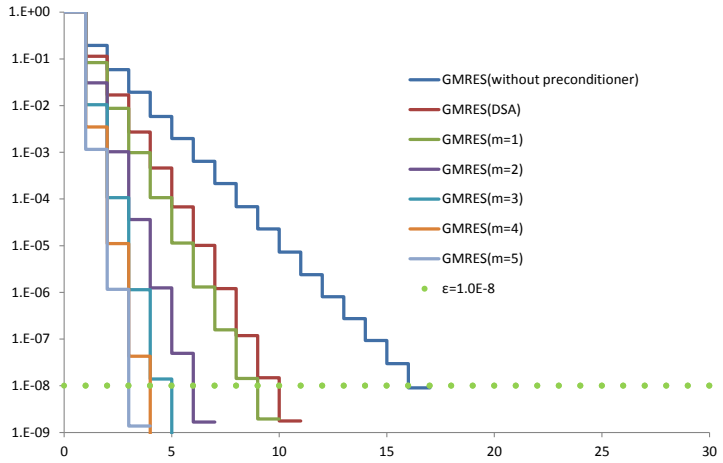


図 4.2-19　散乱比 c=0.75 とした体系 ii の収束過程の比較

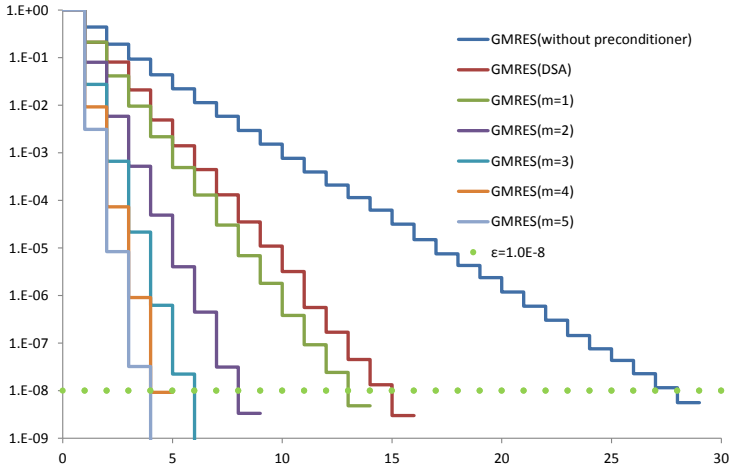


図 4.2-20　散乱比 c=0.9 とした体系 ii の収束過程の比較

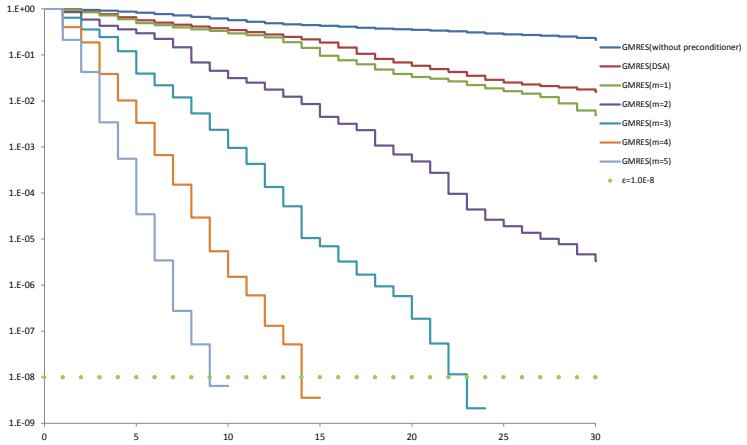


図 4.2-21　散乱比 c=0.999 とした体系 ii の収束過程の比較

上記の結果から、GMRES 法に前処理を行うことで収束の安定性を向上させることができることを確認した。DSA に基づく前処理は全ての計算ケースで収束に必要な反復回数を削減できることを確認したが、散乱比が 1 に近づく体系においては反復回数が大幅に増えることが分かった。平均自由行程を用いた前処理においても、散乱比が 1 に近づく体系において収束に必要な反復回数は増大する。しかし、パラメータ m を増加させることによって、散乱比が高い体系においても少ない反復回数で収束させることができることを確認した。GMRES 法の収束に必要な反復回数は散乱比によって変化するが、パラメータ m を 2～5 程度としたときは、安定した収束ができることを確認した。

4.2.2.3.　様々な計算体系での前処理手法の比較

前節では、仮想的な材料を用いる計算体系での収束過程を確認した。本節では、実際の材料を用いて GMRES 法内の反復回数や計算時間を確認する。前処理手法の有効性を確認するため、大きさの異なる体系間で前処理手法の比較を行った。さらに、平均自由行程を用いる前処理手法は近くの領域間の結合のみを考慮するため、局所的に核分裂性物質を配置した場合でも手法が有効であるかどうか確認した。

A)　大きさの異なる体系間の前処理手法の比較

DSA は拡散理論に基づいて加速を行うため、拡散理論で得られる計算結果と輸送理論で得られる計算結果が大きく異なる場合においては、加速の効果が低下する。そこで、小さい体系においても開発した平均自由行程を用いる前処理手法が有効であるかを確認し、これを DSA に基づく前処理と比較した。計算体系は図 4.2-10 に示す体系 i、図 4.2-22 に示す体系 iii、図 4.2-23 にある X を変更して決定した。変化させる X の値を表 4.2-9 に示す。X の値を変更することによって得られる体系を体系 iv、体系 v とする。なお、計算において

極角の分割数は 10 とする。

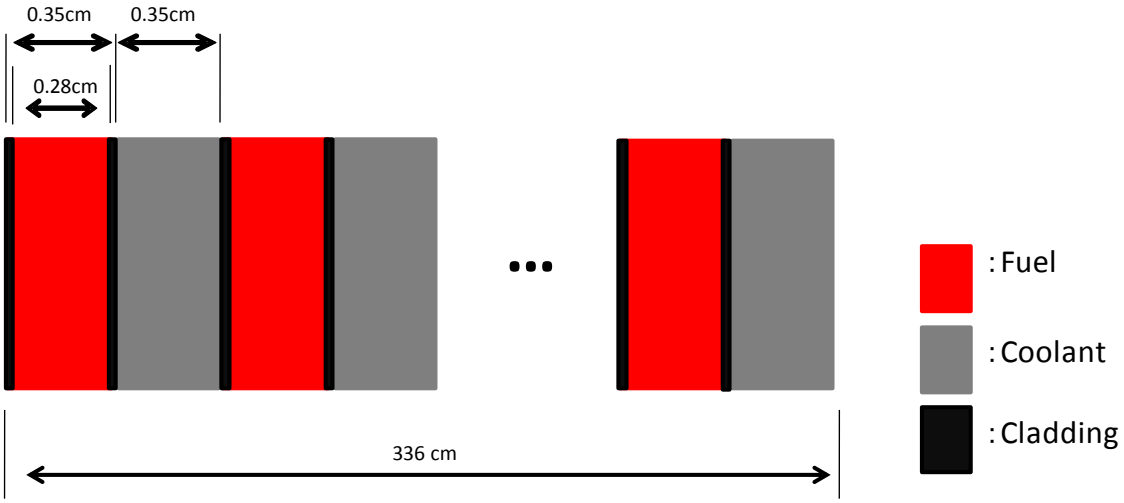


図 4.2-22　体系 iii

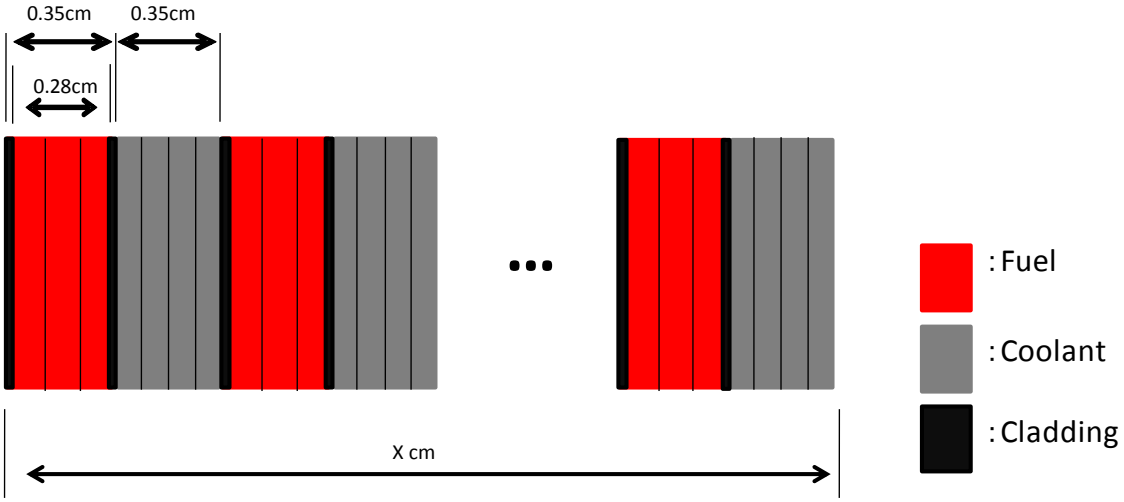


図 4.2-23　大きさを変更する計算体系

表 4.2-9　体系の大きさを決める値 X

	体系 iv	体系 v
X	84	21

GMRES 法の反復回数と計算時間に着目する。GMRES 法は外側反復を繰り返すたびに全エネルギー群に対して行う。各エネルギー群に要した外側反復ごとの GMRES 法内の平均反復回数を表 4.2-10、表 4.2-11、表 4.2-12、表 4.2-13 に示す。それぞれの体系における、各前処理を施した場合の計算時間を図 4.2-24、図 4.2-25、図 4.2-26、図 4.2-27 に記載する。

表 4.2-10　GMRES 法内の平均反復回数：体系 i

	without preconditioner	with preconditioner					
		DSA	simprefied preconditioner				
			m=1	m=2	m=3	m=4	m=5
1群	1.3	1.2	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
2群	2.3	1.7	1.3	1.0	1.0	1.0	1.0
3群	3.5	2.3	2.0	1.1	1.0	1.0	1.0
4群	3.8	2.6	2.1	1.1	1.0	1.0	1.0
5群	3.8	2.7	1.8	1.2	1.0	1.0	1.0
6群	4.0	2.5	1.9	1.2	1.0	1.0	1.0
7群	2.9	1.6	1.6	1.0	1.0	1.0	1.0
平均反復回数	3.1	2.1	1.7	1.1	1.0	1.0	1.0

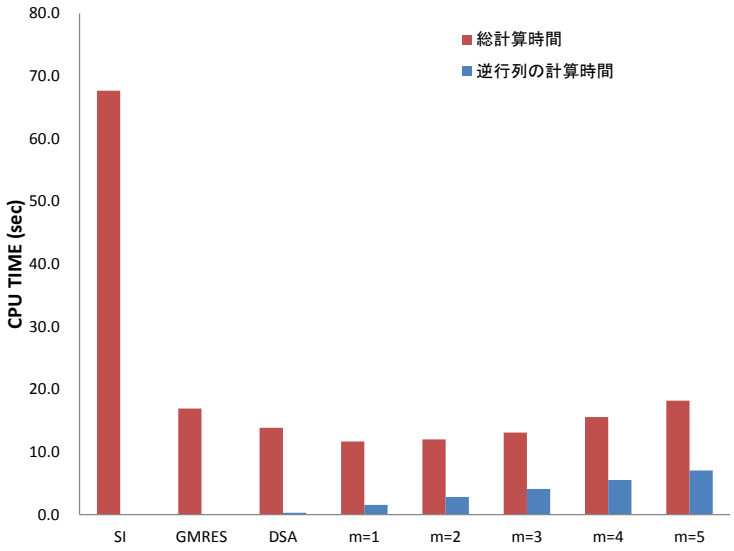


図 4.2-24　計算時間の比較：体系 i

表 4.2-11　GMRES 法内の平均反復回数：体系 iii

	without preconditioner	with preconditioner					
		DSA	simprefied preconditioner				
			m=1	m=2	m=3	m=4	m=5
1群	1.3	1.7	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
2群	2.3	2.3	1.3	1.0	1.0	1.0	1.0
3群	3.5	2.8	2.0	1.1	1.0	1.0	1.0
4群	3.8	2.9	2.1	1.1	1.0	1.0	1.0
5群	3.9	2.8	2.1	1.2	1.0	1.0	1.0
6群	4.1	2.6	2.0	1.2	1.0	1.0	1.0
7群	2.9	2.0	1.5	1.0	1.0	1.0	1.0
平均反復回数	3.1	2.4	1.7	1.1	1.0	1.0	1.0

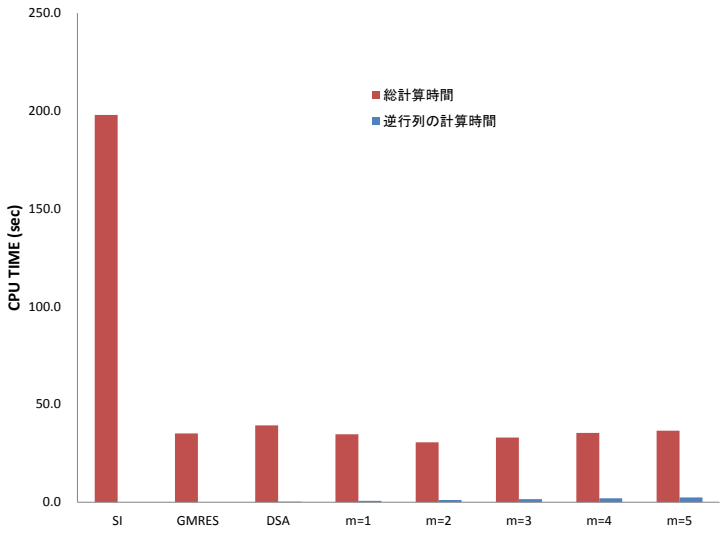


図 4.2-25　計算時間の比較：体系 iii

表 4.2-12　GMRES 法内の平均反復回数：体系 iv

	without preconditioner	with preconditioner					
		DSA	simprefied preconditioner				
			m=1	m=2	m=3	m=4	m=5
1群	1.8	1.2	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
2群	3.2	1.9	1.9	1.0	1.0	1.0	1.0
3群	4.6	2.5	2.5	1.8	1.0	1.0	1.0
4群	4.5	2.8	2.6	1.8	1.0	1.0	1.0
5群	4.7	2.9	2.2	1.4	1.0	1.0	1.0
6群	4.8	3.0	2.2	1.4	1.0	1.0	1.0
7群	3.6	2.1	1.8	1.2	1.0	1.0	1.0
平均反復回数	3.9	2.3	2.0	1.4	1.0	1.0	1.0

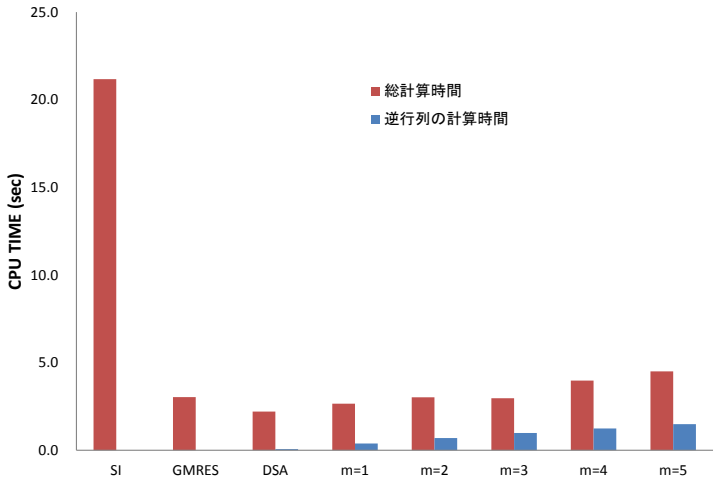


図 4.2-26　計算時間の比較：体系 iv

表 4.2-13　GMRES 法内の平均反復回数：体系 v

	without preconditioner	with preconditioner					
		DSA	simprefied preconditioner				
			m=1	m=2	m=3	m=4	m=5
1群	1.7	1.4	1.0	1.0	1.0	1.0	1.0
2群	2.7	2.4	1.5	1.0	1.0	1.0	1.0
3群	3.2	2.8	1.7	1.0	1.0	1.0	1.0
4群	3.9	3.4	2.0	1.2	1.0	1.0	1.0
5群	4.4	3.5	2.0	1.4	1.0	1.0	1.0
6群	4.4	3.5	2.0	1.6	1.0	1.0	1.0
7群	3.2	2.6	2.0	1.0	1.0	1.0	1.0
平均反復回数	3.4	2.8	1.7	1.2	1.0	1.0	1.0

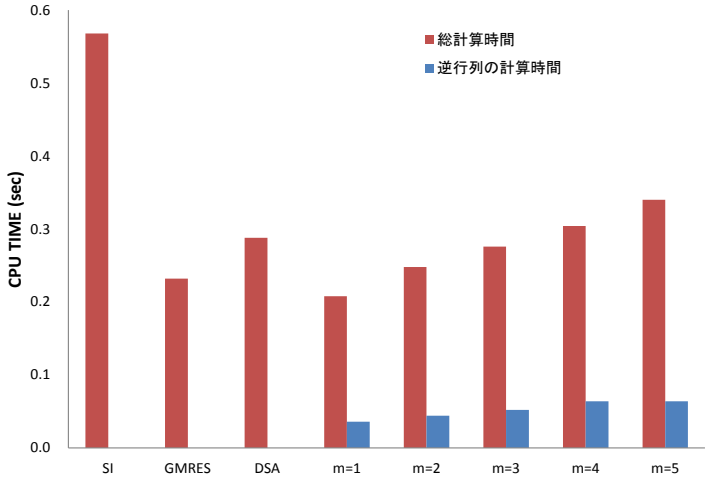


図 4.2-27　計算時間の比較：体系 v

まず、DSA に基づく前処理に着目する。この前処理をした場合の平均反復回数は、前処理を行わない GMRES 法と比べ、削減されている。また、逆行列の計算時間$\mathbb{E}_g{}^{-1}$の計算時間は MOC コード全体の計算時間と比較すると短い。しかし、この前処理手法では反復回数を大幅に削減することは難しいことを確認した。体系 i や体系 iii などの体系が大きい場合、前処理を行うことによって、約 30%程度削減できることができる。しかし、体系 v のような、規模の小さい体系においては 20%以下しか反復回数を削減できなかった。また、この手法で計算時間を削減することは難しいことを確認した。この計算時間の増加は、前処理を行うことによる数値処理の増加に由来する。

平均自由行程を用いた前処理に着目する。この前処理手法は、DSA に基づく前処理手法よりも反復回数を削減できる。また、m=3 とした場合、一度の計算で GMRES 法の反復計算を収束させた。体系 iv や体系 v などの計算体系の規模が小さい場合は、前処理に必要な数値処理のために計算時間を削減することは難しい、しかし、極端に小さくない体系においては m=2、3 程度のときに計算時間を削減できることを確認した。この手法は、DSA による前処理手法とは違い、体系の大きさに対して収束に必要な反復回数は強く依存しないことを確認した。

B)　局所的に核分裂性物質を配置した計算体系での前処理手法の比較

開発した前処理手法では、平均自由行程の m 倍よりも近い領域間の結合を考慮している。よって、その距離よりも遠い位置に出力の大きい領域がある場合では反復回数を削減することが困難になる可能性がある。そこで、本節では局所的に核分裂性物質を配置した計算体系において前処理手法を比較する。計算体系(体系 vi) を図 4.2-28 に示す。この体系において、核分裂性物質が配置してある領域と遠く離れた領域との結合の強さによって、前処理行列の効果は変化する。そこで、表 4.2-14 に示す異なる三つの断面積を用いて、前処理の比較をした。これらの断面積は図 4.2-28 に示した MIX2 の領域における吸収断面積が異なる。

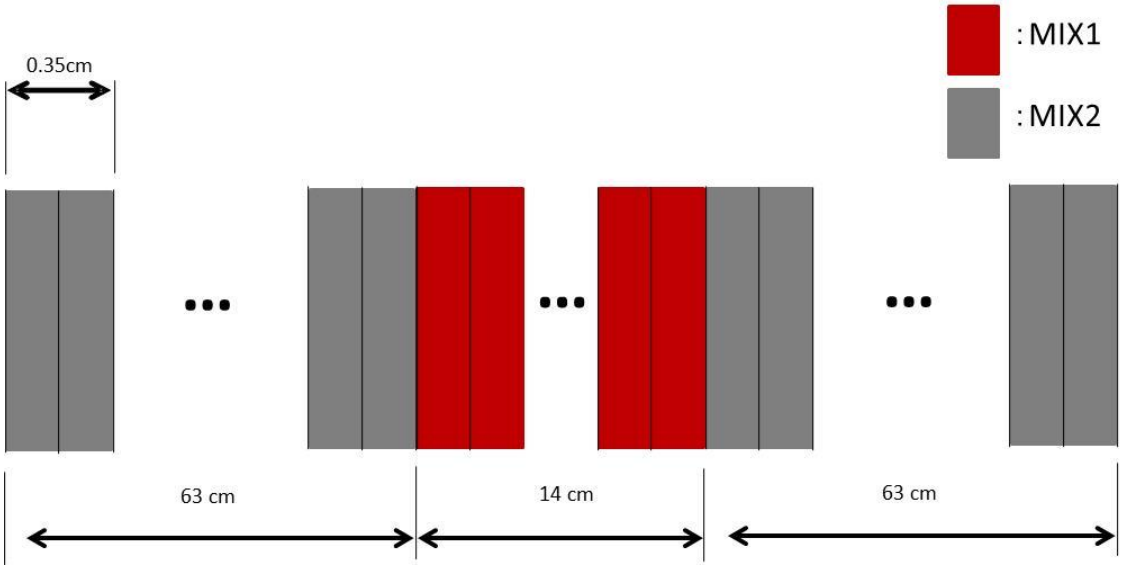


図 4.2-28　局所的に核分裂性物質を配置した体系(体系 vi)

表 4.2-14　断面積セット:case1~case3

		$\nu\Sigma_f$	χ	Σ_t	Σ_s
case1	MIX1	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+01	9.000E+00
	MIX2	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	9.990E-01
case2	MIX1	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+01	9.000E+00
	MIX2	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	9.975E-01
case3	MIX1	1.000E+00	1.000E+00	1.000E+01	9.000E+00
	MIX2	0.000E+00	0.000E+00	1.000E+00	9.900E-01

case3 を用いた場合、MIX2 の吸収断面積は case1 と比べて高くなる。そのため、核分裂性物質から離れるにつれて中性子束は比較的速やかに 0 に近づく。計算時間を削減することによって得られる規格化した中性子束分布を図 4.2-29 に示す。この図では、中性子束の最も高くなる体系中心部が 1 となるように中性子束を規格化している。

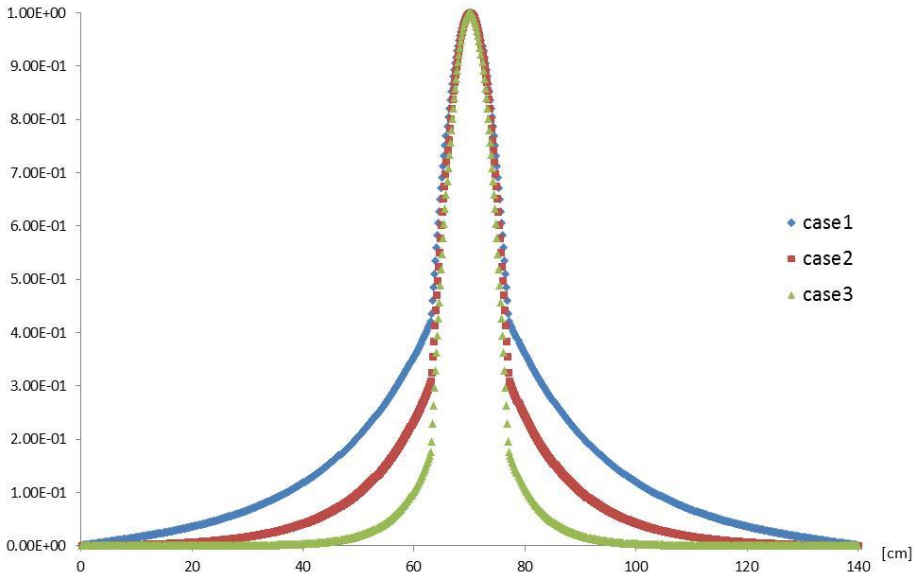


図 4.2-29　局所的に核分裂性物質を配置した体系の中性子束分布

図 4.2-29 からわかるように、case1 では case3 と比較して、ある領域で発生した中性子がより遠くの領域の中性子束に影響を及ぼす。この体系において、前処理をした場合の反復回数及び計算時間の比較を行う。case1、case2、case3 の計算結果を以下に示す。前処理を行うことによって、平均反復回数がどれだけ 1 に近づくかを評価するため、次式で表す値を用いて比較した。

$$\frac{\{(\text{前処理をした場合の平均反復回数}) - 1\}}{\text{前処理をしない場合の平均反復回数}} \tag{4-1}$$

case1 での平均反復回数の比較を表 4.2-15、式(4-1)で与えられる値の比較を

表 4.2-16、計算に必要とする計算時間を図 4.2-30 に示す。case2、 case3 についても同様の計算結果を表 4.2-17、
表 4.2-18、図 4.2-31、表 4.2-19、表 4.2-20、図 4.2-32 に示す。

表 4.2-15　case1 での GMRES 法内の平均反復回数

	without preconditioner	with preconditioner					
		DSA	simprefied preconditioner				
			m=1	m=2	m=3	m=4	m=5
平均反復回数	11.5	7.2	4.7	2.5	1.2	1.0	1.0

表 4.2-16　case1 での反復回数が 1 から離れる割合(前処理なしの反復回数を基準)

DSA	simprefied preconditioner				
	m=1	m=2	m=3	m=4	m=5
53.8%	32.4%	12.6%	1.5%	0.1%	0.0%

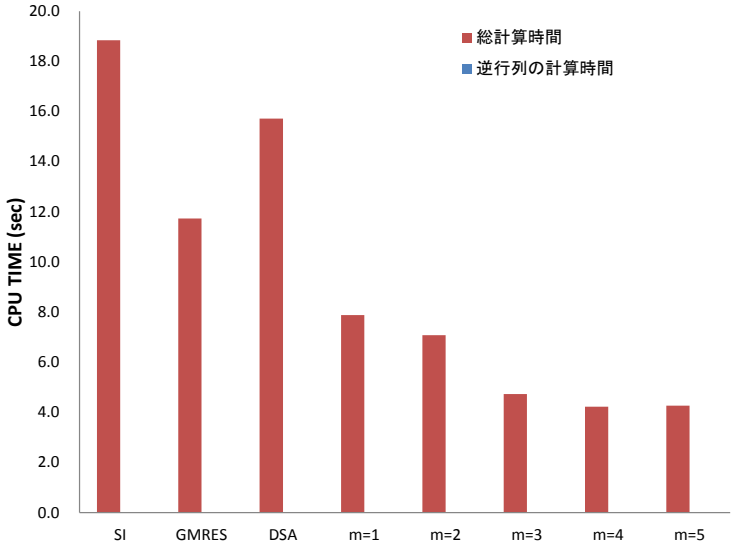


図 4.2-30　case1 での計算時間の比較

表 4.2-17　case2 での GMRES 法内の平均反復回数

	without preconditioner	with preconditioner					
		DSA	simprefied preconditioner				
			m=1	m=2	m=3	m=4	m=5
平均反復回数	9.0	5.6	3.7	2.1	1.0	1.0	1.0

表 4.2-18　case2 での反復回数が 1 から離れる割合(前処理なしの反復回数を基準)

DSA	simprefied preconditioner				
	m=1	m=2	m=3	m=4	m=5
50.8%	30.4%	12.0%	0.5%	0.0%	0.0%

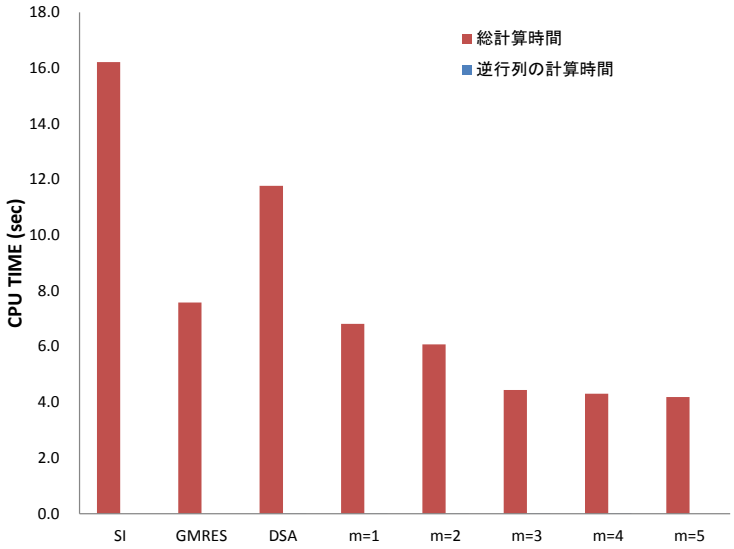


図 4.2-31　case2 での計算時間の比較

表 4.2-19　case3 での GMRES 法内の平均反復回数

	without preconditioner	with preconditioner					
		DSA	simprefied preconditioner				
			m=1	m=2	m=3	m=4	m=5
平均反復回数	5.6	3.1	2.4	1.2	1.0	1.0	1.0

表 4.2-20　case3 での反復回数が 1 から離れる割合(前処理なしの反復回数を基準)

DSA	simprefied preconditioner				
	m=1	m=2	m=3	m=4	m=5
37.9%	25.8%	2.8%	0.2%	0.0%	0.0%

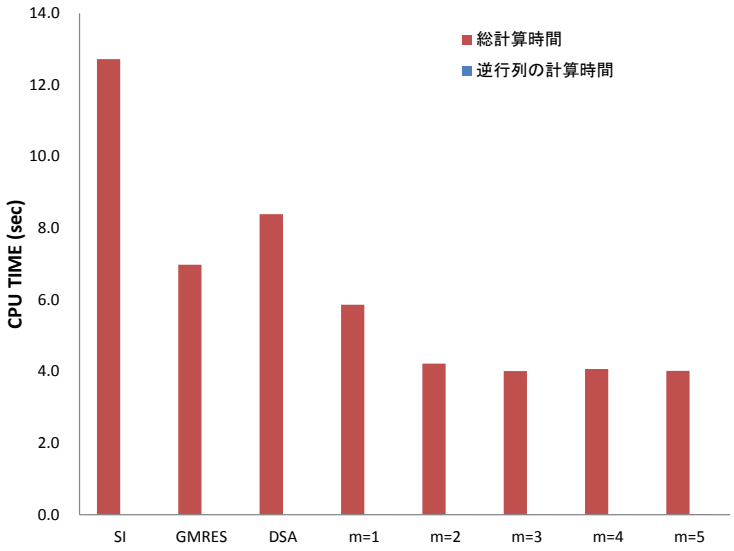


図 4.2-32　case3 での計算時間の比較

DSA に基づく前処理については、前処理なしの GMRES 法と比較して全ての計算において反復回数を削減した。case1、case2、case3 での中性子束は体系中心において高く、体系外への中性子の漏れは少ない。そのため、すべてのケースで 40%前後と高い削減割合となった。平均自由行程を用いた前処理に着目する。計算に用いた MIX2 の全断面積は、すべてのケースで 1.0(1/cm)と固定しているため、この材料内における平均自由行程は 1cm となる。具体的には m=1、2、3、4、5 としたとき、平均自由行程を用いた前処理ではそれぞれ 1cm、2cm、3cm、4cm、5cm の距離より近くにある領域間の結合のみ考慮する。

m=1 の場合、反復回数が 1 から離れる割合は case1 で約 32%、case2 で約 30%、case3 で約 26%となり、散乱比の高い計算体系のほうが相対的により多くの反復回数を必要とすることが分かった。これは、散乱比が高くなると、中性子が発生した領域からより遠くの領域へ中性子が散乱を繰り返して飛行するためであると考えられる。そのため、吸収断面積が低く、遠くに配置される領域間の結合が多くなる体系においてはパラメータ m の値は多くする必要がある。一方で、m=4、5 のときは局所的に核分裂性物質が配置され、かつ散乱比が高い場合でも反復回数は 1 に十分近づくことを確認した。

4.2.2.4.　粗メッシュを用いた前処理手法の計算結果

この節では粗メッシュを用いた前処理手法の計算結果を記載する。この手法は前処理行列$\mathbb{M}$を粗メッシュでの行列で修正させるため、修正した後の前処理行列は元となる$\mathbb{M}$に依存する。本節では、m=1 として平均自由行程を用いた前処理行列を作成し、粗メッシュを用いた前処理手法を導入して検討する。まず、体系 i に対して計算を行った結果を表 4.2-21 に示す。

表 4.2-21　体系 i での平均反復回数

	m=1	m=1+coarse frid correction
1群	1.0	1.0
2群	1.3	1.0
3群	2.0	1.0
4群	2.1	1.0
5群	1.8	1.0
6群	1.9	1.0
7群	1.6	1.0

前述したように、この手法は中性子束の起伏の激しい体系においては有効性が低下する可能性がある。そこで、図 4.2-33 に示す体系(体系 vii)において、異なる断面積を用いた計算結果を比較することで有効性を検討した。MIX2 の散乱断面積の異なる断面積を表 4.2-22 に示す。粗メッシュを用いる前処理手法の有効性を確認するため、核分裂によって発生する中性子ソースと固定とする固定源問題を解き、$\varepsilon_g = 10^{-8}$として収束過程を比較する。なお、各領域の中性子ソースは、各領域の中性子束が全て$1/\mathrm{cm}^3$である時に核分裂によって発生する中性子量として固定する。

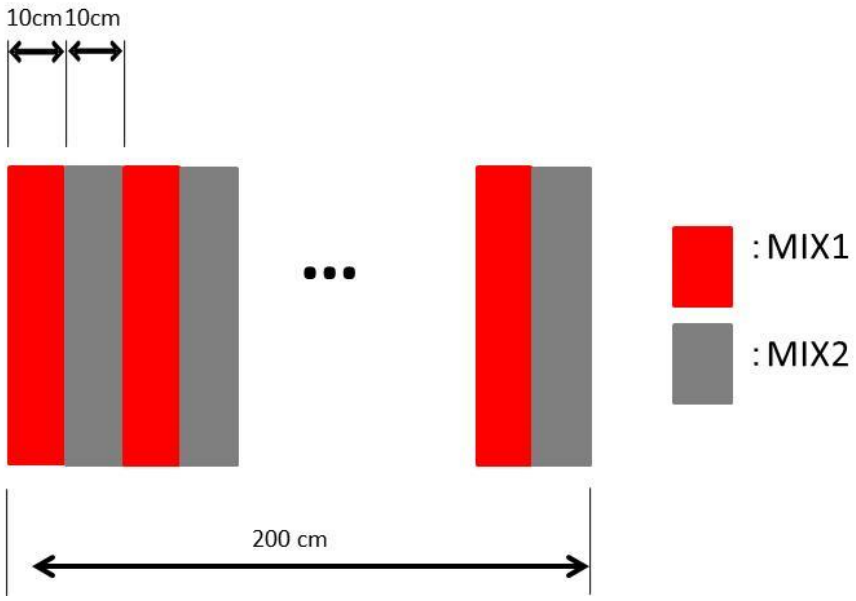


図 4.2-33　粗メッシュの前処理の検討に用いる体系(体系 vii)

表 4.2-22　断面積セット:case4~case6

		$\nu\Sigma_f$	χ	Σ_t	Σ_s
case4	MIX1	1.00E-01	1.00E+00	1.00E+00	7.00E-01
	MIX2	0.00E+00	0.00E+00	1.00E+00	7.00E-01
case5	MIX1	1.00E-01	1.00E+00	1.00E+00	9.00E-01
	MIX2	0.00E+00	0.00E+00	1.00E+00	9.00E-01
case6	MIX1	1.00E-01	1.00E+00	1.00E+00	9.90E-01
	MIX2	0.00E+00	0.00E+00	1.00E+00	9.90E-01
case7	MIX1	1.00E-01	1.00E+00	1.00E+00	9.99E-01
	MIX2	0.00E+00	0.00E+00	1.00E+00	9.99E-01

case4、case5、case6、case7 の断面積を用いて計算で得られる、規格化した中性子束分布を図 4.2-34 に記載する。この図にでは中性子束が最も高くなる値を 1 となるように規格化している。また、case4、case5、case6、case7 での収束過程をそれぞれ図 4.2-35、図 4.2-36、図 4.2-37、図 4.2-38 に記載する。

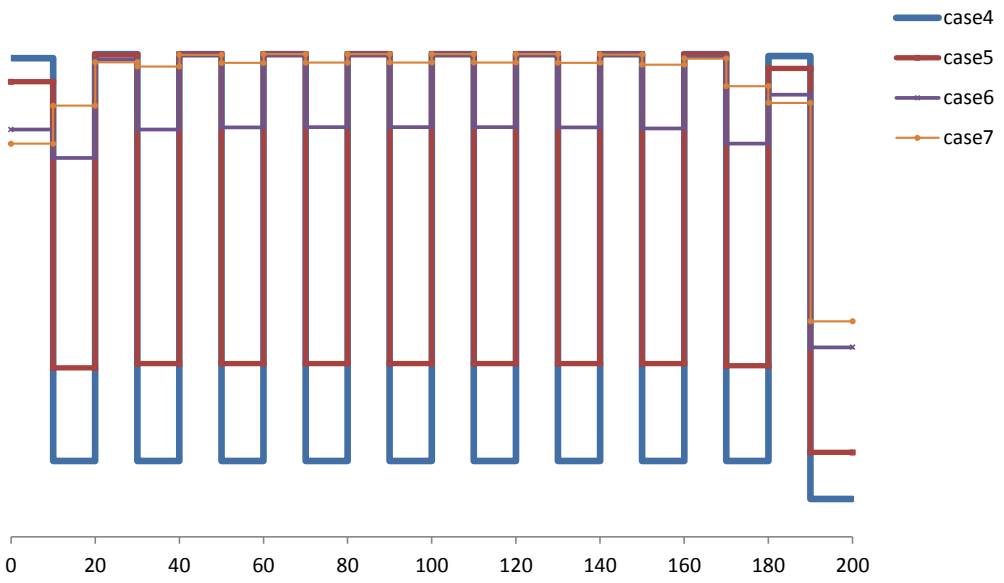


図 4.2-34　固定源問題における中性子束分布(case4~7)

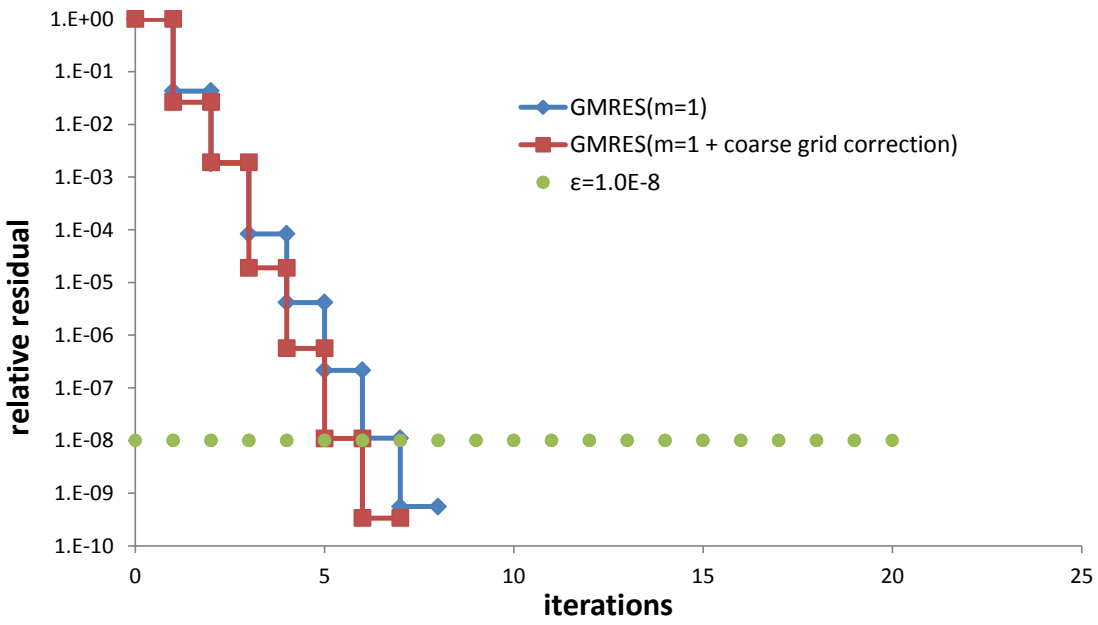


図 4.2-35　case4 での収束過程の比較

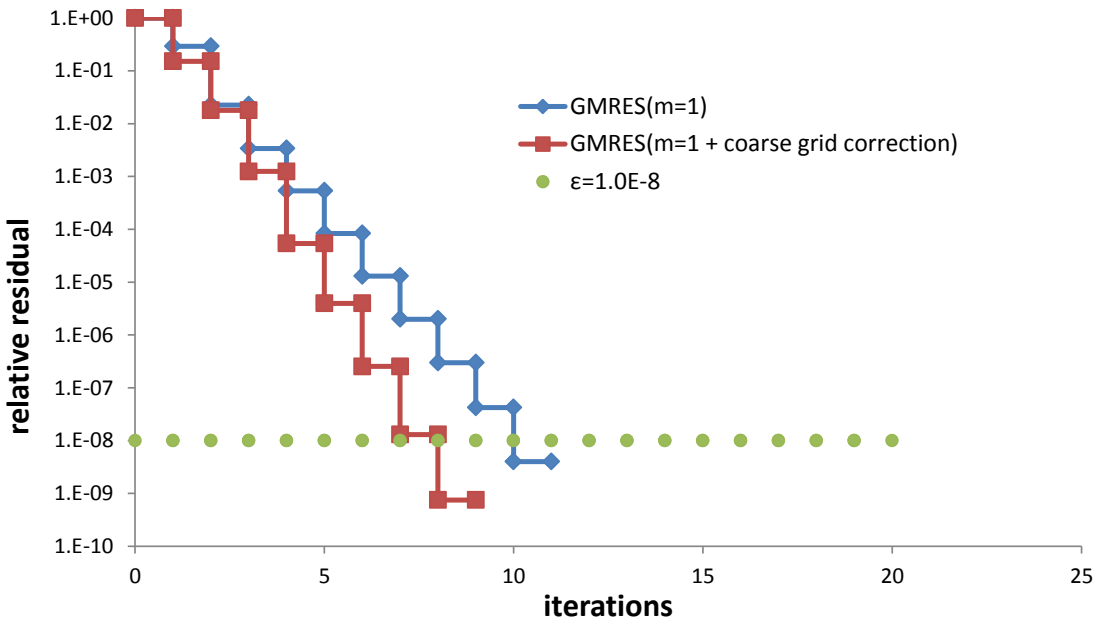


図 4.2-36　case5 での収束過程の比較

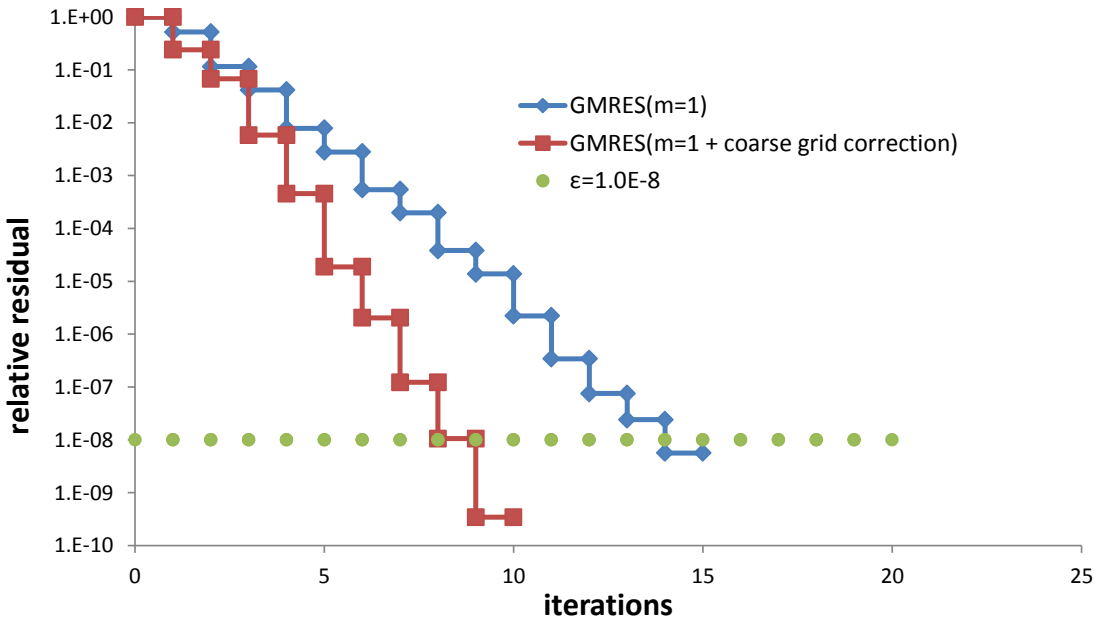


図 4.2-37　case6 での収束過程の比較

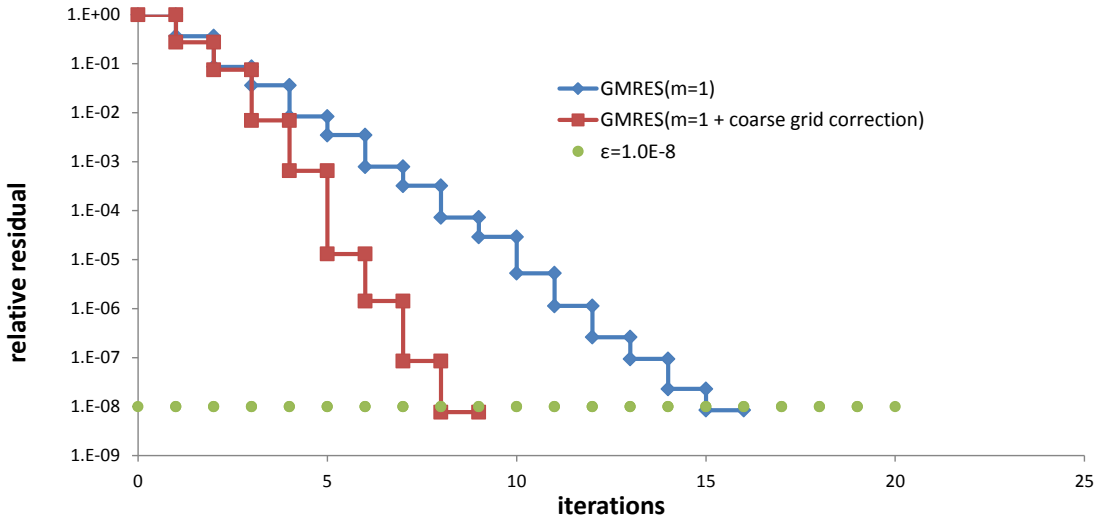


図 4.2-38　case7 での収束過程の比較

case4 のような中性子束の起伏が激しい計算体系においても、粗メッシュを用いた前処理手法は有効に働くことを確認した。case4 については残差の相対値が10^{-8}に達するまでの反復回数は 20%削減した。一方で、case5、case6 についてはそれぞれ約 35%、約 45%削減している。以上から、中性子束の起伏が激しい体系に関しては、粗メッシュを用いる前処理手法の有効性が低下することを確認した。起伏が激しい場合においても反復回数の削減はできるが、中性子束分布がなだらかな場合においては反復回数を半分程度までは削減可能であることを確認した。

4.2.3. まとめ

いくつかの前処理手法を 1 次元 MOC に導入し、それぞれの有効性について検討を行った。DSA に基づく前処理については多くの体系において GMRES 法内の反復回数を削減できることが分かった。しかし、体系の大きさが小さい場合では、この前処理手法を導入しても大幅に反復回数を削減できないことを確認した。一方で、新たに開発した平均自由行程を用いた前処理については、体系の大きさに関わらず、大幅に GMRES 法内の反復回数を削減できることを確認した。散乱比が高い体系に対しては、GMRES 法や、DSA に基づく前処理では大幅に収束が遅くなる。しかし、このような体系においても、平均自由行程を用いた前処理手法は大幅に反復回数を削減できることが分かった。

1 次元平板体系に対して平均自由行程を用いた前処理手法を導入する場合、m=2,3,4 とすることで多くの体系において計算時間の短縮ができた。平均自由行程を用いる前処理には、DSA に基づく前処理と比較して前処理行列作成やその逆行列の作成により多くの計算を必要とする。1 次元平板体系においては、体系の領域分割数は比較的少ないため、この前処理手法が有効であった。しかし、領域分割数が多くなる多次元においては、均質化などを用いることによって前処理に関わる計算を削減することが必要になると推測される。

均質化による前処理行列の簡略化について検討を行うため、粗メッシュを用いた前処理手法を用いた。結果として、中性子束分布の起伏が激しい体系においても、収束を速めることを確認した。中性子束分布がなだらかな体系に関しては、起伏の激しい体系によりも粗メッシュを用いる前処理手法は効果的であり、反復回数を 50%程度削減できることを確認した。

4.3. 2 次元 MOC コードへの前処理手法の導入

本節では、2 次元 MOC コード BACH に GMRES 法を導入し、さらに前処理を行うことによる収束過程の変化及び計算時間の削減について検討する。前節で有効であると確認した前処理手法を直接 2 次元 MOC コードへ導入することは計算時間や要する導入に要する労力の観点から現実的とは言えない。そこで、容易に前処理を導入する手法について検討する。また、均質化による更なる計算時間の削減についても検討する。

4.3.1. 計算コードと計算手法

4.3.1.1. 2 次元 MOC コード：BACH

有効であると確認した前処理手法を 2 次元 MOC コード Beneficial and Advanced transport Characteristics method for Hexagonal cell (BACH)に導入した。キャラクタリスティクス法では、計算体系全体に対して中性子の飛ぶ道筋（パスライン）を様々な角度に対して与え、それらパスライン一本一本に沿って、中性子輸送計算を行い、それらを領域ごとに積分し、各領域の中性子束を計算する手法である。

キャラクタリスティクス法に基づく中性子輸送方程式は次式のように 1 次元 MOC と同様に表現できる。

$$\frac{d\phi_{k,i}^{g}}{ds_k} + \Sigma_i^g \phi_{k,i}^{g} = Q_{k,i}^{g} \qquad (4\text{-}52)$$

この式に用いる記号は以下の通りとなる。

g ： エネルギー群

k ： 中性子飛行方向

i ： 領域

s ： パスラインに沿った距離

$\phi_{k,i}^{g}$ ： 中性子飛行方向

Σ_i^g ： マクロ断面積

$Q_{k,i}^{g}$ ： 中性子ソース

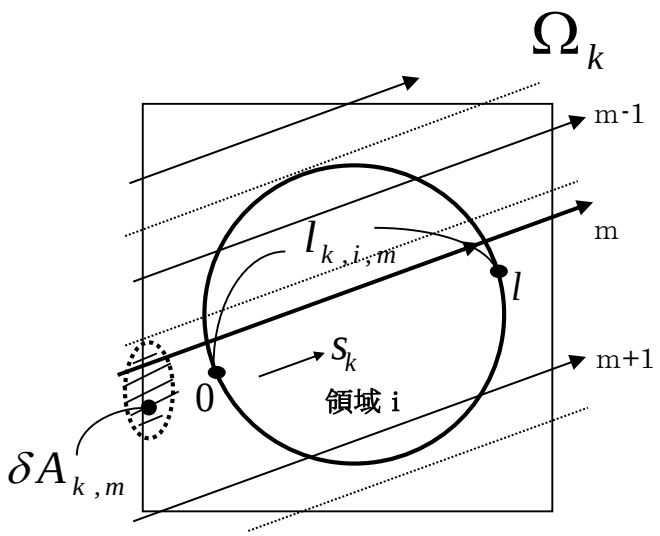


図 4.3-1　2 次元 MOC の概念図

中性子ソースを等方と仮定した場合、$Q_{k,i}^g$ は次のように書ける。

$$Q_{k,i}^g = \frac{1}{4\pi}\left[\sum_{g'}\Sigma_s^{g'\to g}\overline{\Phi}_i^{g'} + \frac{\chi^g}{k_{eff}}\sum_{g'}\nu\Sigma_f^{g'}\overline{\Phi}_i^{g'}\right] \qquad (4\text{-}53)$$

この式を積分すると、

$$\phi_{k,i}^g(out) = \phi_{k,i}^g(in)\exp(-\Sigma_i^g l) + \frac{Q_{k,i}^g}{\Sigma_i^g}\left(1-\exp(-\Sigma_i^g l)\right) \qquad (4\text{-}54)$$

となる。ただし、l はセグメントの長さ（ある領域におけるパスライン通過長さ）である。これによりセグメント平均の角度中性子束は、次のようになる。

$$\overline{\phi}_{k,i}^g = \frac{\int_0^l \phi_{k,i}^g ds_k}{\int_0^l ds_k} = \frac{Q_{k,i}^g}{\Sigma_i^g} + \frac{\phi_{k,i}^g(in) - \phi_{k,i}^g(out)}{\Sigma_i^g l} \qquad (4\text{-}55)$$

前式はパスラインごとに与えられ、次のようにその領域を通過するパスラインでの値をまとめて、領域での角度中性子束を求める。

$$\Phi_{k,i}^{g} = \frac{\sum_{m} \overline{\phi}_{k,i,m}^{g} l_{k,i,m} \delta A_{k,m}}{\sum_{m} l_{k,i,m} \delta A_{k,m}} \qquad (4\text{-}56)$$

この値を中性子飛行方向 k ごとに求め、それらを立体角で重み付けして積分することにより、その領域の中性子束が求められる。

$$\overline{\Phi}_{i}^{g} = \sum_{k} \omega_{k} \Phi_{k,i}^{g} \qquad (4\text{-}57)$$

ここで、ω_k は、方向 k の立体角（$\sum_{k} \omega_k = 4\pi$）である。

4.3.1.1.1.　面積補正

キャラクタリスティクス法においては計算上、（セグメントの長さ）×（パスライン間隔）の面積空間を対象として計算が行われることになる。

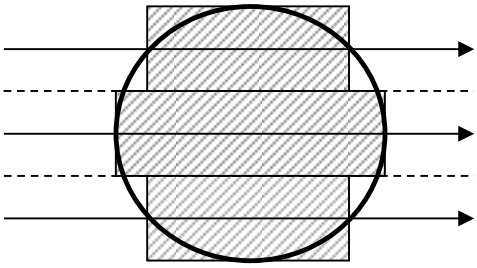


図 4.3-2　計算上での面積（斜線部）

パスラインの間隔が狭ければ狭いほど、計算上の面積は真の値に近づくが、計算時間や計算機メモリなどの観点から、むやみにパスラインの本数を増やすのは得策ではない。そこで、面積を正確に評価する補正として主要な方法として、次の２つがある。

方法１ ： 領域ごとにセグメント長さ L を調整（図 4.3-3）
方法２ ： 領域ごとに幅 W を調整（図 4.3-4）

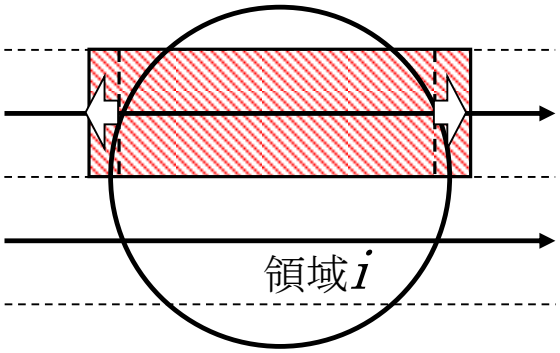


図 4.3-3　セグメント長さを調整する面積補正

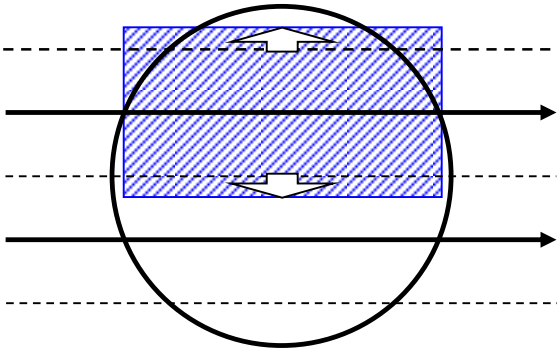


図 4.3-4　幅を調整する面積補正

具体的には、次のような調整を行っている。セグメント j の長さを L_j、パスライン幅(間隔)を W とすると、領域 i の計算上の面積 S_i は、次のように表される。

$$S_i = \sum_{region \in j} L_j W \qquad (4\text{-}58)$$

領域 i の正確な面積を $S_{i\,真}$としたとき、S_i に計数 C_i を掛け $S_{i\,真}$と同じ値になるようにする。この C_i を面積の補正係数とした。つまり、S_i と $S_{i\,真}$の比が領域 i の補正係数 C_i である。

$$C_i = \frac{S_{i真}}{S_i} = \frac{S_{i真}}{\sum_{region \in j} L_j W} \qquad (4\text{-}59)$$

この係数 C_i を各領域で求め、セグメント長さ L_j または幅 W に掛けるという補正を行った。

$$L_j' = C_i L_j \qquad (4\text{-}60)$$

$$W_i' = C_i W \qquad (4\text{-}61)$$

ここで注意しておきたいのは、L_j'はセグメントごとの補正、W_i'は領域ごとの補正である。

4.3.1.1.2.　セル境界面でのパスラインの関連付け

あるセルから隣接するセルに移る時、パスラインは連続的につながることが理想であり、理論的には可能である。そのためには、方位角は決められた角度をとる必要があり、パスライン間隔は角度によって異なるものとなる。しかし現時点での本コードは、方位角分割は等間隔、パスライン間隔は一定のみ扱っている。そのため本コード内において、次のセルに移る時の次のパスラインは、飛行方向を変化させない、一対一でつなげる、ずれが小さいものとつなげる、といった条件を満たすように選択している。この場合、パスラインは連続的につながらない部分が生じることになる。これによる誤差は、パスライン間隔が十分狭い時には問題にならないが、間隔が広いときに影響が大きくなる。

4.3.1.1.3.　セグメントデータの共有

パスラインが領域を通過する長さ（セグメント）は、幾何形状の問題だけなので、セグメント長さと面積補正項は六角セルの種類ごとに一度だけ計算しておく。そして中性子束計算時に、パスラインが通過するセルの種類を判定したのち、計算するパスラインに対応するセグメント情報を呼び出すようにしている。

4.3.1.1.4.　パスライン間隔について

パスライン間隔は一定でしか計算できない。基本的にある領域に対しては、飛行方向ごとに一本以上のパスラインが通過していることが望ましい。そのことに関連して、前述の面積補正を入れた場合は、面積補正の係数を計算するときに領域ごと、飛行方向ごとに計算上の面積を求め、その値を領域の真の体積(面積)で割るので、ある飛行方向に対してパスラインが一本も通過していない領域がある場合は、割り算の分母が 0 になって計算が止まる。

4.3.1.1.5.　角度分割数について

極角の分割は基本的に正の整数値であれば、幾つでも可能である。しかし、方位角の分割は、現時点では 2 で割り切れる正の整数値の必要がある。これは A 点から B 点への情報と B 点から A 点への情報を共有させているためである。

4.3.1.1.6.　断面積について

計算を行う際はインプットとして断面積を与えて計算を行う。この際エネルギー群数は任意となっている。計算に必要な断面積は全断面積、吸収断面積、生成断面積、散乱断面積であるが、核分裂スペクトルも別途入力が必要となる。さらに 3 次元輸送ノード法に用いる断面積作成のために核分裂断面積も必要となる。

4.3.1.1.7.　自群散乱断面積の取り扱いについて

収束を早めるために、自群散乱を 0 としてその分を全断面積から差し引くか自群散乱断面積をそのまま扱うかを入力で選択可能となっている。この場合、境界が真空境界であるときは自群散乱を 0 にすると全断面積が小さくなるため、中性子の飛程が大きくなるので漏れの効果が大きくなり、固有値を小さく評価する（同時に中性子スペクトルが軟らかく評価される）ため注意が必要である。境界条件がすべて反射境界条件である時については現在のところ不都合な点は見られていない。

4.3.1.1.8.　収束について

収束過程において固有値が振動することにより、固有値のみの収束判定では本来収束すべきところと異なるところで擬似収束してしまうことがある。そのため固有値の収束判定と同時に中性子束の収束判定を行っている。中性子と固有値が同時に収束するということは、最終的な収束時にしか起こりえないからである。また、本研究においては、べき乗法を導入して評価している。

4.3.1.1.9.　境界条件について

境界条件は反射境界条件と真空境界条件の 2 パターンが可能であり、真空境界と反射境界が混在する体系でも計算を可能にするため、境界面毎に境界条件を入力するようになっている。境界条件が反射の時には境界面の法線ベクトルを用いて反射後のベクトルを計算し、反射後のあるパスラインの始点と反射前のパスラインの終点が最も近くなるパスライン同士を結びつけるようにしている。境界条件が真空の時には固有値計算に用いる漏れの量を計算し、境界面から入ってくる中性子の量を 0 にするようにしている。

(1)　反射境界条件時

$\vec{L}$ を入射ベクトル、$\vec{L}'$ を反射後のベクトル、$\vec{N}$ を境界面の法線ベクトルとすると、次の関係式が成り立つ。

$$-\vec{L}+\vec{L}'=2((-\vec{L})\cdot\vec{N})\cdot\vec{N} \qquad (4\text{-}62)$$

これより、次式が成り立つ。

$$\begin{aligned}\vec{L}' &= 2((-\vec{L})\cdot\vec{N})\cdot\vec{N}+\vec{L}\\ &= -2(\vec{L}\cdot\vec{N})\cdot\vec{N}+\vec{L}\end{aligned} \qquad (4\text{-}63)$$

(2) 真空境界条件時

漏れの量 L は角度中性子束の境界面に対する垂直成分 $\phi_{\perp}$ とパスラインの切り取る幅 $pw_{\perp}$ を用いて、

$$L = \phi_{\perp} \times pw_{\perp} \qquad (4\text{-}64)$$

で表される。ここで境界面から出て行く角度中性子束 ϕ と入射ベクトルと境界面の法線ベクトルのなす角 θ とパスライン幅 pw を用いて、角度中性子束の境界面に対する垂直成分 $\phi_{\perp}$ とパスラインの切り取る幅 $pw_{\perp}$ は

$$\phi_{\perp} = \phi\cos\theta \qquad (4\text{-}65)$$

$$pw_{\perp} = pw/\cos\theta \qquad (4\text{-}66)$$

と表されるので、漏れの量 L は次式のように簡単に表される。

$$L = \phi \times pw \qquad (4\text{-}67)$$

4.3.1.2.　平均自由行程を用いた前処理

前処理行列である$\mathbb{M}$が厳密に$(\mathbb{I}-\mathbb{LW})$と一致する場合、$\boldsymbol{\Phi}$は反復計算を行う必要がなく、$\mathbb{M}^{-1}\boldsymbol{S}$で解を与えることができる。しかし、$\mathbb{M}$が厳密に$(\mathbb{I}-\mathbb{LW})$と一致する場合の逆行列を作成することは計算時間の観点で現実的でないため、有効性を損なうことなく簡略化した前処理行列を求める必要がある。上記をふまえて、行列の各要素に着目して前処理方法を検討する。

前節で示したように、1 次元平板体系においては領域間の結合は簡単に計算することができる。これは、すべての領域番号がパスラインに沿って整然と与えられているからである。一方で、多次元の体系においては領域番号がパスラインに対して複雑に決められており、前処理行列の作成は容易でなくなる。そこで、多次元においては、ある中性子の飛行方向nに対して、k番目のパスラインついて着目して、簡略化した行列$\mathbb{P}$を求める。このパスラインに対する MOC の伝搬方程式は次式で与えられる。

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -d_g^{N(2,k,n)} & 1 & \ddots & & \vdots \\ 0 & -d_g^{N(3,k,n)} & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -d_g^{N(R_{k,n},k,n)} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_g^{1,k,n} \\ \varphi_g^{2,k,n} \\ \varphi_g^{3,k,n} \\ \vdots \\ \varphi_g^{R_{k,n},k,n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_g^{N(1,k,n)}\varphi_g^{0,k,n} + c_g^{N(1,k,n)}Q_g^{N(1,k,n)} \\ c_g^{N(2,k,n)}Q_g^{N(2,k,n)} \\ c_g^{N(3,k,n)}Q_g^{N(3,k,n)} \\ \vdots \\ c_g^{N(R_{k,n},k,n)}Q_g^{N(R_{k,n},k,n)} \end{bmatrix} \tag{4-68}$$

ここで使用されるパラメータは以下のとおりである。

$R_{k,n}$ ：パスラインが通過する分割された領域数

$N(j,k,n)$ ：パスラインがj 番目に通過する領域番号

$\varphi_g^{j,k,n}$: パスラインがj 番目に通過する領域の放出中性子束

$\varphi_g^{0,k,n}$ ：パスラインがj 番目に通過する領域の入射中性子束

$$c_g^{N(j,k,n)} = \frac{1-\exp(-\Sigma_{\mathrm{t},g}^{N(j,k,n)} l^{j,k,n})}{\Sigma_{\mathrm{t},g}^{i}},$$

$$d_g^{N(j,k,n)} = \exp\left(-\Sigma_{\mathrm{t},g}^{N(j,k,n)} l^{j,k,n}\right).$$

式(4-68)は、パスラインに沿ったある領域における入射中性子束と放出中性子束との関係

を示している。全ての入射中性子束は、パスラインに沿って前の領域で得られる放出中性子束与えることができる。以上のことを考慮すると、放出中性子束や入射中性子束の角度中性子束は次式のように、いくつかの項に展開することができる。

$$\boldsymbol{\varphi}_g^{j,k,n} = [K_{N(1,k,n)} \quad K_{N(2,k,n)} \quad \dots \quad K_{N(j,k,n)} \quad 0 \quad \dots \quad 0]^T \tag{4-69}$$

ここで、ベクトル$\boldsymbol{\varphi}_g^{j,k,n}$は$R_{k,n}$個の要素を持ち、$K_{N(p,k,n)}(p = 1,2,\dots,j)$は領域$N(p,k,n)$で発生した中性子が$j$ 番目に通過する領域に到達する中性子の量である。この時、ベクトル$\boldsymbol{\varphi}_g^{j,k,n}$の要素を全て足し合わせた値は、$\varphi_g^{j,k,n}$と一致する。そのため、領域間の結合の強さは式(4-69)から容易に与えることができる。そして、平均自由行程を与えることによって、ベクトル$\boldsymbol{\varphi}_g^{j,k,n}$の各要素を容易に無視し、簡略化することができる。簡略化した角度中性子束$\widehat{\boldsymbol{\varphi}_g^{j,k,n}}$は次式で与えることができる。

$$\widehat{\boldsymbol{\varphi}_g^{j,k,n}} = [0 \quad \dots \quad 0 \quad K_{N(j^*,k,n)} \quad \dots \quad K_{N(j,k,n)} \quad 0 \quad \dots \quad 0]^T \tag{4-70}$$

ここで、領域$N(j^*,k,n), N(j^*+1,k,n), \cdots, N(j,k,n)$はあるパスラインに沿って領域$N(j,k,n)$から比較的近い領域となる。無視されない領域を選択するためには、次式で与えられる平均自由行程で決めることができる。

$$L_{j^*\to j,n,k,g} = \frac{l^{N(j^*,k,n),k,n,} + l^{N(j^*+1,k,n),k,n} + \dots + l^{N(j,k,n),k,n}}{l^{N(j^*,k,n),k,n}\Sigma_{\mathrm{t},g}^{N(j^*,k,n)} + l^{N(j^*+1,k,n),k,n}\Sigma_{\mathrm{t},g}^{N(j^*+1,k,n)} + \dots + l^{N(j,k,n).k,n}\Sigma_{\mathrm{t},g}^{N(j,k,n)}} \tag{4-71}$$

領域$N(j^*,k,n), N(j^*+1,k,n), \cdots, N(j,k,n)$は領域$N(j,k,n)$から平均自由行程$L_{j^*\to j,n,k}$よりも近い領域として決めることができる。これを満たすためには領域$N(j^*,k,n), N(j^*+1,k,n), \cdots, N(j,k,n)$は次式を満たせばよい。

$$\begin{aligned} l^{N(j^*,k,n),k,n} + l^{N(j^*+1,k,n),k,n} + \dots + l^{N(j,k,n),k,n} &< L_{j^*\to j,n,k,g} \\ &< l^{N(j^*-1,k,n),k,n} + l^{N(j^*,k,n),k,n} + \dots + l^{N(j,k,n),k,n} \end{aligned} \tag{4-72}$$

平均自由行程$L_{j^*\to j,n,k}$は、計算する体系を考えるとそこまで長くはならない。前処理行列がより多くの領域を考慮できるように、1 次元 MOC の検討と同様にパラメータ m を導入する。パラメータ m を導入すると、式(4-72)は次式のようになる。

$$\begin{aligned} l^{N(j^*,k,n),k,n} + l^{N(j^*+1,k,n),k,n} + \dots + l^{N(j,k,n),k,n} &< \mathrm{m}L_{j^*\to j,n,k,g} \\ &< l^{N(j^*-1,k,n),k,n} + l^{N(j^*,k,n),k,n} + \dots + l^{N(j,k,n),k,n} \end{aligned} \tag{4-73}$$

m=1 の時、式(4-72)は式(4-73)と一致する。式(4-72)を導入した場合、$N(j^*,k,n), N(j^*+$

$1,k,n),\cdots,N(j,k,n)$と領域$N(j,k,n)$との距離は$\mathrm{m}L_{j^*\to j,n,k}$以下になると考えることができる。簡略化の程度はパラメータ m に依存する。多次元においてパラメータ m を変えることによる影響は後に記す。式(4-70)を用いてベクトル$\boldsymbol{\varphi}_g^{j,k,n}$を簡略化すると、伝搬方程式(4-68)は次式のように表現することができる。

$$\begin{bmatrix} \mathbb{I} & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -d_g^{2,k,n} & \mathbb{I} & \ddots & & \vdots \\ 0 & -d_g^{3,k,n} & \mathbb{I} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & -d_g^{R_{k,n},k,n} & \mathbb{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \widehat{\boldsymbol{\varphi}_g^{1,k,n}} \\ \widehat{\boldsymbol{\varphi}_g^{2,k,n}} \\ \widehat{\boldsymbol{\varphi}_g^{3,k,n}} \\ \vdots \\ \widehat{\boldsymbol{\varphi}_g^{R_{k,n},k,n}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_g^{1,k,n}\widehat{\boldsymbol{\varphi}_g^{0,k,n}} + c_g^{1,k,n}\boldsymbol{Q}_g^{1,k,n} \\ c_g^{2,k,n}\boldsymbol{Q}_g^{2,k,n} \\ c_g^{3,k,n}\boldsymbol{Q}_g^{3,k,n} \\ \vdots \\ c_g^{R_{k,n},k,n}\boldsymbol{Q}_g^{R_{k,n},k,n} \end{bmatrix} \tag{4-74}$$

行列$\mathbb{L}$ $\mathbb{W}$ は全領域の中性子束が$1/\mathrm{cm}^3$であるときに自群散乱によって発生する中性子を掃出す。そのため、式(4-74)で用いるベクトル$\boldsymbol{Q}_g^{j,k,n}$は次式で与えることができる。

$$\boldsymbol{Q}_g^{j,k,n} = [0 \quad \ldots \quad 0 \quad 1 \quad 0 \quad \ldots \quad 0]^T \tag{4-75}$$

ベクトル$\boldsymbol{Q}_g^{j,k,n}$は j 番目の要素で値 1 を持つ。この時、領域$N(j,k,n)$におけるベクトル化した角度中性子束 $\boldsymbol{P}^*$は次式で与えられる。

$$\boldsymbol{P}^*_{N(j,k,n),k,n,g} = \begin{bmatrix} P^*_{N(j,k,n),N(1,k,n),k,n,g} \\ P^*_{N(j,k,n),N(2,k,n),k,n,g} \\ \vdots \\ P^*_{N(j,k,n),N(j,k,n),k,n,g} \end{bmatrix} = \frac{1}{\Sigma_{\mathrm{t},g}^{N(j,k,n)}} \left\{ \frac{\widehat{\boldsymbol{\varphi}_g^{j-1,k,n}} - \widehat{\boldsymbol{\varphi}_g^{j,k,n}}}{l^{j,k,n}} + \boldsymbol{Q}_g^{j,k,n} \right\} \tag{4-76}$$

領域i^*で自群散乱によって発生した中性子が領域$i\big(=N(j,k,n)\big)$において飛行方向nの中性子束となる量はパスラインごとの足し合わせによって得られる。

$$P_{i,i^*,n,g} = \omega_n \left(\sum_k P^*_{i,i^*,k,n,g} l^{j,k,n} \delta A \right) \Big/ \left(\sum_k l^{j,k,n} \delta A \right) \tag{4-77}$$

ここで、ω_nは方向nの重みであり、領域$N(j,k,n)$の体積は近似的に$\sum_k l^{j,k,n}\delta A$で与えている。最終的に、すべての方向で足し合わせを行うことによって行列$\mathbb{P}$を次式のように求めることができる。

$$\mathbb{P} = \begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{Y} P_{1,1,n,g} & \sum_{n=1}^{Y} P_{1,2,n,g} & \cdots & \sum_{n=1}^{Y} P_{1,I,n,g} \\ \sum_{n=1}^{Y} P_{2,1,n,g} & \sum_{n=1}^{Y} P_{2,2,n,g} & \cdots & \sum_{n=1}^{Y} P_{2,I,n,g} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum_{n=1}^{Y} P_{I,1,n,g} & \sum_{n=1}^{Y} P_{I,2,n,g} & \cdots & \sum_{n=1}^{Y} P_{I,I,n,g} \end{bmatrix} \tag{4-78}$$

ここで、

Y	:	中性子飛行方向の総数
I	:	全領域分割数

となる。m→∞のとき、行列$\mathbb{P}$の各要素は第一飛行トランスミッション確率(first-flight transmission probability)となる。

4.3.1.3.　スケール法

領域分割数が多くなる体系において、前述した平均自由行程を用いる前処理手法の導入は困難になる。これは逆行列の計算時間やメモリ使用量に起因する。このため、本研究では前処理を有効に活用するためにスケール法を開発した。スケール法は、均質化プロセスと伸張プロセスからなる。

4.3.1.3.1.　均質化プロセス

均質化プロセスは均質化する前の行列を変形する処理に相当するため、本節では簡単のために均質化前の行列から導出を行う。しかし、実際の計算においては均質化前の行列をメモリに保存する必要はない。このプロセスは一つの領域として均質化を行う領域の選択から始まる。本研究では、燃料領域とその領域と取り巻く被覆管領域を一つの領域としてあつかい、均質化プロセスを行う。均質化を行うにあたって、ターゲットとなる行列は次式で与えられる。

$$\mathbb{PW} = \begin{pmatrix} \ddots & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & \\ & & & P_{a\to a}\Sigma_{s,a} & P_{b\to a}\Sigma_{b} & & & \\ & & & P_{a\to b}\Sigma_{a} & P_{b\to b}\Sigma_{b} & & & \\ & & & & & \ddots & & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & \ddots \end{pmatrix} \tag{4-79}$$

式(4-79)において、領域 a と領域 b はそれぞれ燃料領域とそれを取り巻く被覆管領域とする。ここで、燃料領域及びそれを取り巻く被覆管領域で自群散乱により発生する中性子の数に着目する。均質化を行った体系においては、これらの中性子を足し合わせた数が均質化した領域内で発生し、体系内の領域の中性子束になると近似的に考えられる。この近似は、次式で表される行列$\mathbb{R}$を右から掛けることと同義となる。

$$\mathbb{R} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & 1 & & & & \\ & & & 1 & & & & \\ & & & & 1 & & & \\ & & & & & \ddots & & \\ 0 & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \tag{4-80}$$

次に、ある領域で発生した中性子が燃料領域の中性子束となる量と、それを取り巻く被覆管領域の中性子束となる量を考える。本プロセスにおいては、これらの二つの中性子束の平均が均質化した領域での中性子束となる量と仮定する。この過程は、次式で表す行列を左から掛けることと同義となる。

$$\mathbb{S} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & 1/2 & 1/2 & & & \\ & & & & & 1 & & \\ & & & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \tag{4-81}$$

この節で示した二つの過程を用いると、行列$\mathbb{PW}$を均質化することによって得られる行列$\mathbb{Q}$は次式で表すことができる。

$$\mathbb{Q} = \mathbb{I} - \mathbb{SPWR} \tag{4-82}$$

4.3.1.3.2.　伸張プロセス

均質化プロセスによって得られる行列$\mathbb{Q}$は元となる前処理行列$\mathbb{I} - \mathbb{PW}$と比較してより少ない要素をもつ。よって行列$\mathbb{Q}$の逆行列の計算量は元の前処理行列と比較して大幅に削減することができる。もし、MOC コードを大幅に変更するならば、行列$\mathbb{Q}$は計算の加速に直接用いることができる。具体的な例としては、均質化した体系での計算を行うマルチグリッドなどの手法が挙げられる。一方で、行列$\mathbb{Q}$ はもともとの前処理行列と比べて行列の要素が少なくなるため、MOC コードの計算ルーチンを変更せずに行列$\mathbb{Q}$を用いるためには行列の伸張にあたる数値処理が必要となる。本節では、行列$\mathbb{Q}^{-1}$を容易に導入できるようにするため、核計算に有効な伸張プロセスについて述べる。もし、計算において自群散乱反応を取り入れない場合、行列$\mathbb{Q}^{-1}$は単位行列と等しくなる。このことから、自群散乱による領域間の結合のみを取り扱うために、行列$\mathbb{Q}^{-1}$から単位行列の要素を取り除いて伸張プロセスを始める。

$$\mathbb{T} = \mathbb{Q}^{-1} - \mathbb{I} \tag{4-83}$$

行列$\mathbb{T}$の要素は自群散乱反応によって変化する中性子束の割合と近似的に考えることができる。この行列$\mathbb{T}$を用いて均質化した領域における中性子束の挙動を考え、伸張プロセスを行う。均質化した領域において自群散乱反応により発生する中性子を考える。この中性子によって変化する中性子束は、均質化を行った領域の体積Vと自群散乱断面積を用いて分けることができる。伸張プロセスにおいて、均質化前の領域aと領域bにおいて自群散乱により発生する中性子に由来する中性子束の変化する割合は近似的に分離した要素として扱う。この近似は次式で示す行列$\mathbb{U}$を右から掛けることで行うことができる。

$$\mathbb{U} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & 0 & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & \mathrm{U}_a & \mathrm{U}_b & & & \\ & & & & & 1 & & \\ & 0 & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \tag{4-84}$$

ここで、$\mathrm{U_a}$、$\mathrm{U_b}$は次式で求められる。

$$\mathrm{U_a} = \frac{\mathrm{V}_a \Sigma^a_{\mathrm{s},g\to g}}{\mathrm{V}_a \Sigma^a_{\mathrm{s},g\to g} + \mathrm{V}_b \Sigma^b_{\mathrm{s},g\to g}},$$

$$\mathrm{U_b} = \frac{\mathrm{V}_b \Sigma^b_{\mathrm{s},g\to g}}{\mathrm{V}_a \Sigma^a_{\mathrm{s},g\to g} + \mathrm{V}_b \Sigma^b_{\mathrm{s},g\to g}}.$$

ここで、自群散乱によって発生した中性子が、均質化した領域の中性子束に由来する量に着目して伸張プロセスを行う。伸張後において、この中性子束となる量は燃料領域の中性子束とそれを取り巻く被覆管領域の中性子束の二つに分ける必要がある。容易に伸張を行うために、本プロセスではこの二つの中性子束の値を近似的に同じものとして扱う。この近似は次式で表す行列$\mathbb{V}$を左から掛けることで行うことができる。

$$\mathbb{V} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & 1 & & & & \\ & & & 1 & & & & \\ & & & & 1 & & & \\ & & & & & \ddots & & \\ 0 & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \tag{4-85}$$

この行列$\mathbb{V}$を掛けた後は、最後に単位行列を足し合わせることで伸張プロセスを完了することができる。結果として、前処理行列の逆行列である$\mathbb{M}^{-1}$は、伸張プロセスによって次式で与えることができる。

$$\mathbb{M}^{-1} = \mathbb{V}\mathbb{T}\mathbb{U} + \mathbb{I} \tag{4-86}$$

このプロセスを有効に用いるためには、均質化する領域は空間的に近く、均質化する領域内で中性子束は大きく変わらないことが望ましい。

4.3.2. 手法の検証と考察

この節では、本研究によって開発した手法がどの程度有効であるかを確認する。一般的に、散乱比が 1 に近づくと収束が遅くなることから、散乱比が 1 に近づいた場合において、前処理を行うことでどれだけ収束を速められるかの検討を行う。スケール法は一つの領域に均質化する領域間で中性子束が同じであるという仮定をしている。そこで、この仮定がどれほど収束に影響するかの検討を行う。

4.3.2.1. 複数の燃料集合体からなる体系の計算結果

本節では、複数の燃料集合体で構成される体系での計算結果を比較する。この計算体系(体系 I)を図 4.3-5 に、計算条件を表 4.3-1 に記載する。図 4.3-5 に示す計算体系は 2877 の領域から構成され、実効増倍率とそれぞれの領域の平均中性子束が収束するまで反復計算を繰り返す。加速法として比較を行うため、加速法を用いない場合の計算時間も記載する。加速法を用いない場合、Source Iteration(SI)を用い、内側反復の回数を表 4.3-1 に記載する通り 5 と固定する。

表 4.3-1　2 次元 MOC コードでの計算条件

ε_G	10^{-1}
Criterion of flux	10^{-6}
Criterion of eigenvalue	10^{-6}
Number of SI	5
GMRES 法内の反復回数の上限	30
Azimuthal angles for 2π	18(Equally-divided)
Polar angles for π/2	10(Equally-divided)
Boundary condition	Vacuum

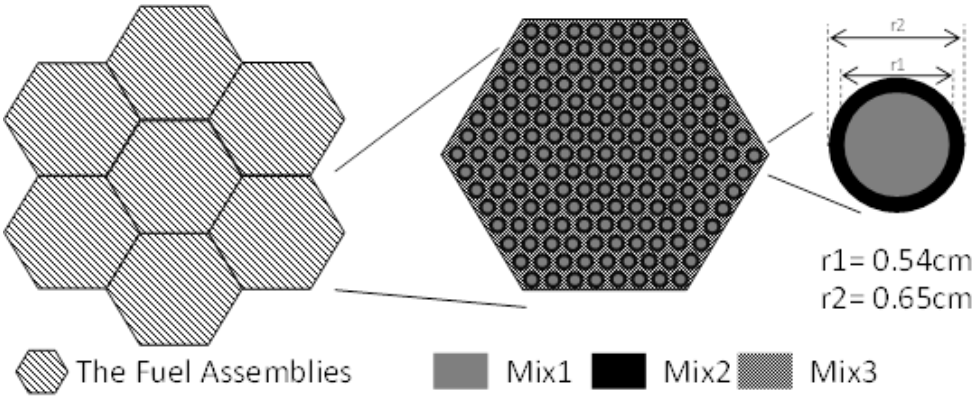


図 4.3-5　複数の炉心燃料集合体からなる体系(体系Ⅰ)

前処理を行わない場合と、平均自由行程を用いる前処理を導入した場合の平均反復回数を表 4.3-2 に記載する。また、加速法を用いない場合(SI)と、前処理行列を用いない GMRES 法、平均自由行程を用いる前処理行列を導入した GMRES 法の計算時間を表 4.3-3 に記載する。

表 4.3-2　GMRES 法内の平均反復回数：体系 I

without preconditioner	simplified preconditioner			
	m=2	m=3	m=4	m=5
3.6	1.8	1.6	1.4	1.1

表 4.3-3　総計算時間及び逆行列の計算時間の比較：体系 I

SI	GMRES				
	without preconditioner	simplified preconditioner			
		m=2	m=3	m=4	m=5
2052	527	565(147*)	561(172*)	559(188*)	551(194*)

*CPU time of inverse matrix of preconditioner [sec]

表 4.3-2 から前処理を行うことによって GMRES 法内の平均反復回数を大幅に削減できていることが確認できる。一方で、表 4.3-3 からこの計算において前処理行列を導入しても大幅に計算時間を削減できていないことがわかる。これは、2877×2877 の要素を持つ前処理行列逆行列の計算時間が主な原因である。この逆行列の計算時間を削減するため、スケール法を導入する。スケール法を導入した際の GMRES 法の平均反復回数を表 4.3-4 に記載する。また、スケール法を導入した場合の計算時間変化を表 4.3-5 に記載する。

表 4.3-4　スケール法を導入することによる GMRES 法内の平均反復回数への影響

simplified preconditioner	
m=5 without scaling technique	m=5 with scaling technique
1.1	1.1

表 4.3-5　スケール法を導入することによる計算時間の変化

simplified preconditioner	
m=5 without scaling technique	m=5 with scaling technique
551(194*)	381(37*)

*CPU time of inverse matrix of preconditioner [sec]

スケール法を導入することにより、計算時間を大きく削減できることを確認した。スケール法を導入した場合、逆行列を計算する行列の要素は 2877×2877 から 1694×1694 に削減される。そのため、逆行列の計算時間は大幅に削減された。表 4.3-5 から、逆行列の計算時間は約 80%削減され、総計算時間はおおよそ約 150 秒削減された。この削減時間は、おおよそ逆行列の計算時間の削減時間と対応する。

4.3.2.2.　散乱比の異なる体系での収束過程の比較

一般的に、体系の散乱比が低い場合では内側反復の収束に必要な回数は少なくて良い。一方で、散乱比が 1 に近づく体系においては多くの反復回数を必要とする。2 次元体系において散乱比が 1 に近づいた時の収束過程を調べるために、本節では、散乱比 c を 0.9、0.99、0.999 として前処理行列を導入し、計算時間及び収束過程の比較を行う。

体系 I における計算を行った。2 次元計算において散乱比を変えた場合の反復回数への影響を調べるため、前処理を用いない場合、m=2 として前処理を行った場合、m=5 として前処理を行った場合、m=5 としてさらにスケール法を用いた場合の平均反復回数を調べた。平均反復回数の比較を表 4.3-6 に記載する。また、MOC コードが収束するまでに必要とした計算時間を表 4.3-7 に記載する。

表 4.3-6　散乱比の異なる断面積を用いた計算の平均反復回数の比較

	without preconditioner	simplified preconditioner		
		m=2 without scaling technique	m=5 without scaling technique	m=5 with scaling technique
c=0.9	2.9	1.7	1.1	1.1
c=0.99	3.9	1.9	1.2	1.2
c=0.999	4.0	1.9	1.2	1.2

表 4.3-7　散乱比の異なる断面積を用いた場合の計算時間の比較

	SI	GMRES			
		without preconditioner	simplified preconditioner		
			m=2 without scaling technique	m=5 without scaling technique	m=5 with scaling technique
c=0.9	1232	599	674(138*)	570(185*)	461(38*)
c=0.99	3272	538	581(136*)	517(185*)	386(38*)
c=0.999	3998	532	547(137*)	535(183*)	370(38*)

*CPU time of inverse matrix of preconditioner [sec]

散乱比が 1 に近い場合においても、m=5 とするときには GMRES 法内の反復回数を 1 に近づけさせられることを確認した。前処理を行わない場合においては、c=0.9 と c=0.999 の場合を比較して平均反復回数が 30%程度増加する。一方で前処理を行った場合はこの増加割合は少なく、SI と比 f 較して散乱比の依存性は 2 次元においても相対的に低いことを確認した。散乱比の異なる断面積を用いた場合の収束過程を図 4.3-6、図 4.3-7、図 4.3-8 に示す。これらの計算では収束過程を調べるために GMRES 法で与える収束判定を$\varepsilon_g = 10^{-8}$とした。

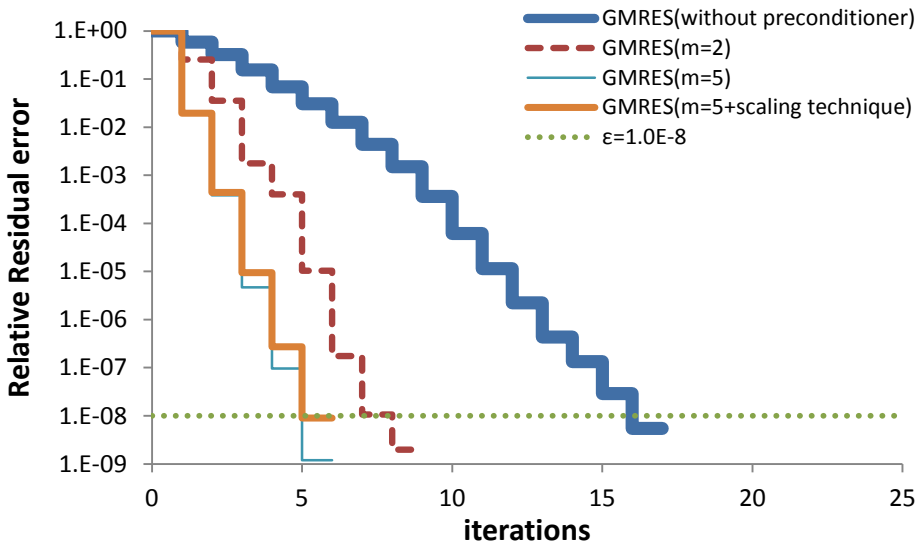


図 4.3-6　散乱比 c=0.9 としたときの収束過程の比較

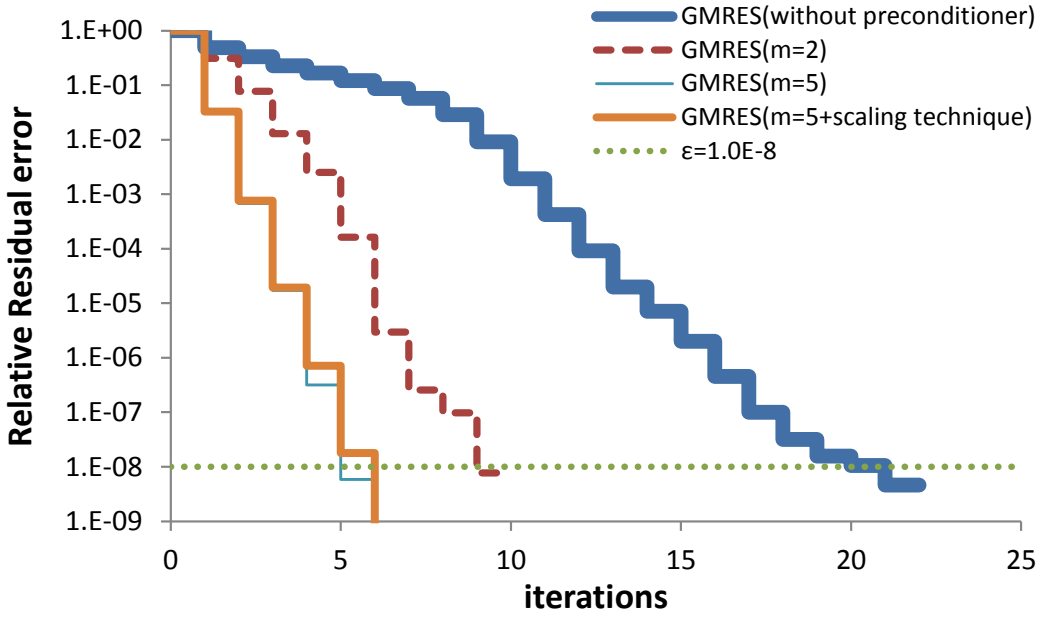


図 4.3-7　散乱比 c=0.99 としたときの収束過程の比較

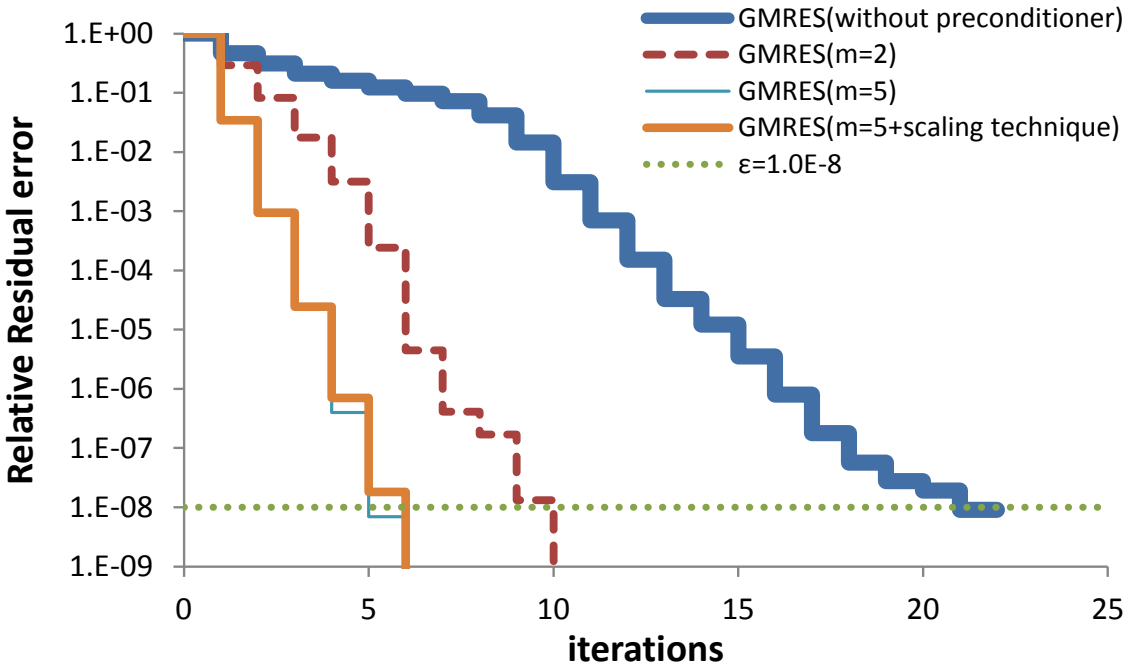


図 4.3-8　散乱比 c=0.999 としたときの収束過程の比較

GMRES 法に前処理を行うことで 2 次元 MOC の計算においても収束の安定性を向上させることができることを確認した。平均自由行程を用いた前処理においても、散乱比が 1 に近づく体系において収束に必要な反復回数は増大する。しかし、パラメータ m を増加させることによって、散乱比が高い体系においても少ない反復回数で収束させることができることを確認した。GMRES 法の収束に必要な反復回数は散乱比によって変化するが、パラメータ m=5 としたときは、安定した収束ができることを確認した。また、スケール法は残差が非常に小さい場合においも有効であり、元の前処理行列の反復回数を増加させないことを確認した。これらの計算から、スケール法は散乱比に大きく依存しないことを確認した。

4.3.3. スケール法の検証

本節ではスケール法の有効性について検討を行う。まず、均質化する領域の大きさを変更させた場合の計算結果の比較を行う。さらに、大幅に中性子束分布を変化させた場合における有効性を確認するため、異なる全断面積を用いた場合の計算結果の比較を行う。

A) スケール法で均質化する領域の大きさを変更した計算結果

スケール法の導入には、均質化する領域内における中性子束が一定であるという仮定を用いている。そのため、一つの領域に均質化するノードの大きさが変化すると、スケール法の有効性が低下する可能性がある。そこで、本節では均質化を行う燃料領域と被覆管領域の大きさを変更することによって均質化する領域の大きさを変更し、スケール法がどれほど有効であるかを検証する。

燃料集合体の対面距離は体系 I と同等であるが、燃料ピンの大きさが異なる体系 II 、体系 III をそれぞれ図 4.3-9、図 4.3-10 に示す。これらの体系での GMRES 法内の平均反復回数及び、計算時間を比較した結果をそれぞれ表 4.3-8、表 4.3-9 に示す。

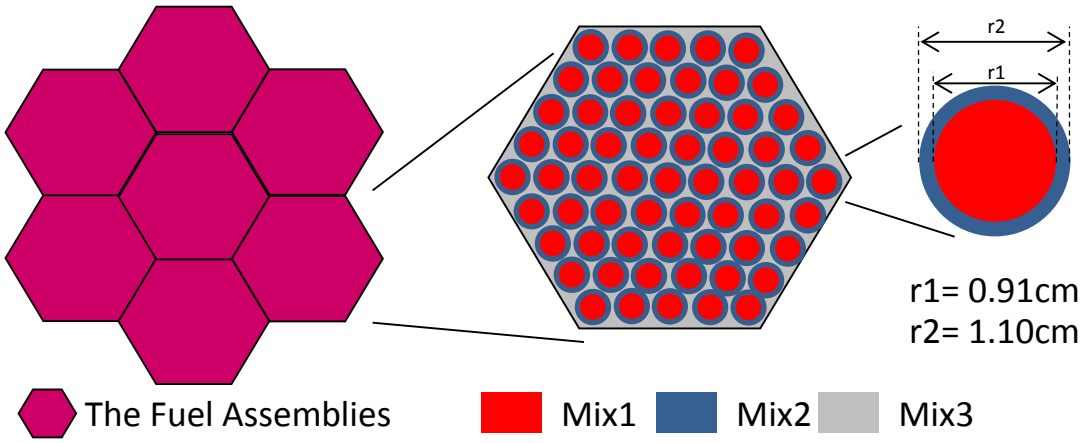


図 4.3-9 被覆管外径を 0.55cm とした体系(体系 II)

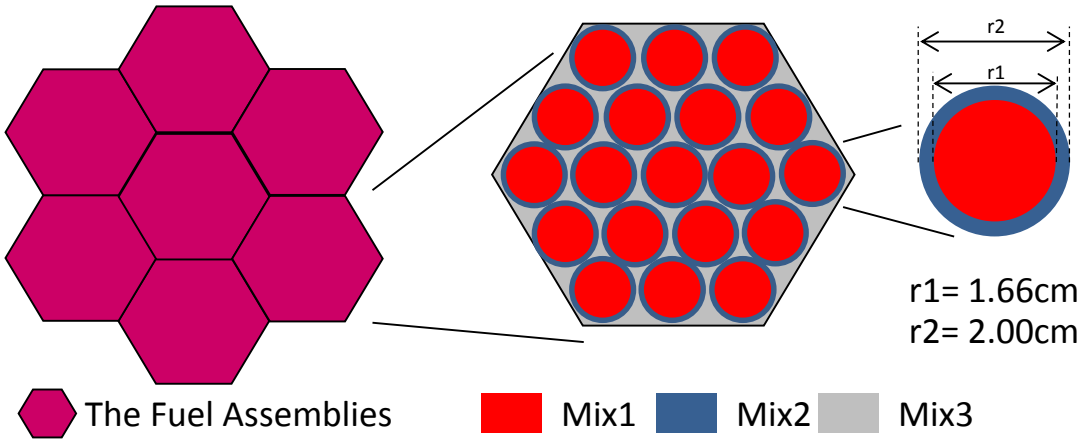


図 4.3-10　被覆管外径を 1.00cm とした体系(体系 III)

表 4.3-8　体系 II 及び体系 III での GMRES 法内の平均反復回数

	without preconditioner	simplified preconditioner	
		m=5	m=5 + scaling technique
体系II	3.6	1.1	1.1
体系III	3.6	1.1	1.2

表 4.3-9　体系 II 及び体系 III での GMRES 法内の計算時間

	SI	GMRES		
		without preconditioner	simplified preconditioner	
			m=5	m=5 + scaling technique
体系II	1378	348	233(19*)	220(6*)
体系III	925	218	145(3*)	148(2*)

*CPU time of inverse matrix of preconditioner [sec]

体系 I と比較して、体系 II と体系 III の燃料ピンは大幅に大きくなる。体系 III においてはスケール法を用いることで、GMRES 法内の平均反復回数は 10%未満の範囲で増加した。しかし、この増加は計算時間を見ると影響は小さいと言える。m=5 とするときの平均自由行程を用いた前処理にスケール法を用いることで GMRES 法内の平均反復回数は削減され、逆行列の計算時間も削減することができた。

B)　全断面積を変更した場合の前処理手法の比較

体系 I での計算に用いる断面積を変更し、均質化する燃料領域とそれを取り巻く被覆管領域での中性子束の値を変化させ、スケール法の有効性がどの程度変化するかを考察する。中性子束分布が大幅に変化した時の比較を行うため、表 4.3-10 に示すように全断面積を変更させて計算を行った。なお、これらの断面積セットではすべてケースにおいて散乱比 c=0.9 としている。

表 4.3-10　全断面積の異なる断面積セット

	$\Sigma_{t,Fuel}(\mathrm{cm}^{-1})$	$\Sigma_{t,Cladding}(\mathrm{cm}^{-1})$	$\Sigma_{t,Na}(\mathrm{cm}^{-1})$
case①	1.0	0.5	0.01
case②	1.0	0.5	0.1
case③	1.0	0.5	0.5
case④	1.0	0.25	0.5
case⑤	1.0	0.1	0.5

case①~③については冷却材領域における全断面積が異なり、case③～⑤については被覆管領域での全断面積が異なる。case①~③では均質化を行わない冷却材領域における断面積が変化することによって、どれだけスケール法の有効性が変化するかを確認する。また case③～⑤では、均質化する領域での中性子束分布が変化することによる、スケール法への影響を確認する。case①～⑤の断面積セットを用いた場合の GMRES 法内の平均反復回数及び計算時間をそれぞれ表 4.3-11、表 4.3-12 に記載する。

表 4.3-11　全断面積の異なる計算での GMRES 法内の平均反復回数の比較

	without preconditioner	simplified preconditioner	
		m=5	m=5 + scaling technique
case①	2.9	1.0	1.0
case②	2.9	1.0	1.0
case③	2.8	1.2	1.3
case④	2.8	1.0	1.0
case⑤	2.8	1.0	1.0

表 4.3-12　全断面積の異なる計算の計算時間の比較

	SI	GMRES		
		without preconditioner	implified preconditioner	
			m=5	m=5 + scaling technique
case①	832	647	637(198*)	491(40*)
case②	829	723	674(193*)	541(53*)
case③	1030	834	789(209*)	669(48*)
case④	881	752	725(224*)	535(48*)
case⑤	900	771	728(230*)	551(50*)

*CPU time of inverse matrix of preconditioner in second

全ての計算において、スケール法を導入することによる GMRES 法内の平均反復回数の増加は 10%未満となり、大きな増加は確認できなかった。結果として、均質化する領域内部で中性子束の値が大幅に変化しない限りスケール法は有効に働くことを確認した。計算時間についても、m=5 として平均自由行程を用いる前処理手法にスケール法を加えて導入することで計算時間を削減できることを確認した。

4.3.4. まとめ

2 次元 MOC コード BACH に GMRES 法を新たに導入するだけでなく、有効な前処理開発し、導入することによって計算時間を大幅に短縮した。1 次元 MOC コードで有効性を確認した前処理を、ベクトル化を用いることによって、MOC の計算ルーチンから容易に前処理行列を作成する手法を考案した。さらに、領域分割数の多くなる体系においても前処理の作成に関わる計算時間を低く抑えるため、均質化後に相当する行列への変換処理を含むスケール法を新たに開発した。この手法を用いた場合、GMRES 法のアルゴリズムを変更させることなく、前処理行列の逆行列の作成時間を大幅に削減させることを確認した。このスケール法は、均質化した領域の大きさへの依存性は大きくなく、また、均質化する領域内での中性子束の変化が大きくない時においても有効であることを確認した。

4.4. MOC コードの加速に関する考察

本研究において、スケール法は燃料領域とその領域を取り巻く被覆管領域でのみ均質化し、検証を行った。このスケール法は、いくつかの燃料集合体で構成させる体系において有効であることを確認した。しかし炉心体系など、大規模体系への前処理の導入においては更なる均質化が必要と思われる。例えば、燃料集合体単位で均質化を行う場合、均質化する領域における中性子束の分布は複雑になる。本研究で開発したスケール法は体積と巨視的断面積で重み付けをしているが、大規模体系へ導入する場合では衝突確率などを用いることによってスケール法の有用性は大幅に向上すると思われる。

また、MOC コードの計算ルーチンを大幅に変更することで、計算時間を大幅に短縮し、本研究で開発した前処理によって計算時間の削減が可能と思われる。計算ルーチンを大幅に変更することで計算時間を削減する手法の一つとしてマルチグリッド法が考えられる。本研究では前処理行列の計算を行う際に均質化を用いたが、この手法は MOC の計算ルーチンにおいて直接粗いグリッドでの計算を行う。MOC コードにマルチグリッド法を導入した研究は過去行われているが、fine グリッドと coarse グリッドの 2 レベルのグリッドしか用いていないことや、他の加速法との組み合わせを検討していないことから更なる加速は可能と考えられる。マルチグリッド法の例として、**図 4.4-1** に示す V-cycle スキームによって中性子束の修正を行い、計算時間を削減することができる。

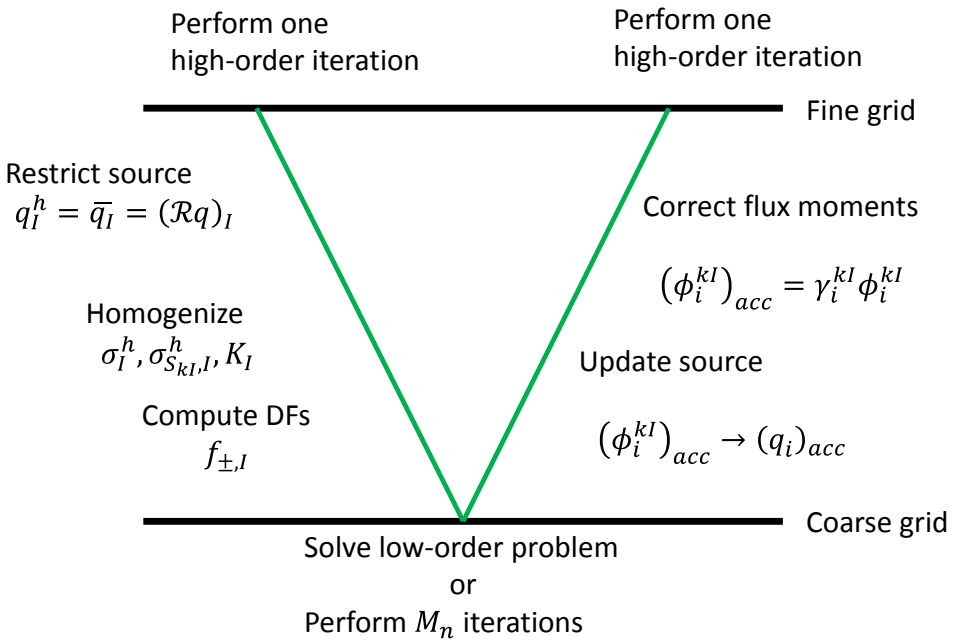


図 4.4-1　V-cycle スキーム

本研究では、内側反復にて GMRES 法を導入し、検証を行った。一方で外側反復に導入する加速法も多く存在する。Krylov 部分空間に基づく計算手法を外側反復に導入した例はいくつかあるが、前処理を行うことによって収束の安定性を向上させ、計算の加速を図る研

究は進んでいない。外側反復に Krylov 部分空間法を導入するためには、固有値問題を解くこととなる次式に着目する必要がある。

$$\begin{aligned}\Omega \cdot \nabla\psi(\boldsymbol{r}, E, \Omega) + \Sigma_t(\boldsymbol{r}, E)\psi(\boldsymbol{r}, E, \Omega) \\ - \int dE' \int d\Omega' \, \Sigma_s(\boldsymbol{r}, E' \to E, \Omega' \to \Omega)\psi'(\boldsymbol{r}', E', \Omega') \\ = \left(\frac{\chi(E)}{4\pi K}\right) \int dE' \int d\Omega' \, \nu\Sigma_f(\boldsymbol{r}, E')\psi'(\boldsymbol{r}', E', \Omega')\end{aligned} \tag{4-87}$$

一般的な数値計算では、エネルギーや空間メッシュは離散化される。離散化された式(4-87)は、次式のように行列で表現することができる。

$$\mathbb{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbb{B}\mathbf{x} \tag{4-88}$$

ここで、$\mathbb{A}$、$\mathbb{B}$はどちらも正方行列である。導入方法によってこれらの行列の要素数は変化するが、前処理を導入するためにはできるだけ要素を削減したほうが良いと考えられる。過去の研究では輸送計算手法である Sn 法の外側反復に Krylov 部分空間法である ORTHOMIN(1)が導入された。この手法の導入によって計算時間の削減が確認されているが、今後は MOC コードへの導入も期待される。

4.5. 4 章の結論

本章では、設計に対する信頼性向上と設計の最適化による経済性向上を目的として、MOC コードの計算時間を大幅に作成することが可能な前処理手法を開発した。

まず、本研究にて開発した手法の有効性の確認をするため、領域間の結合を考慮しやすい 1 次元 MOC コードに対して検討を行った。この検討では本研究で開発した前処理と従来の加速法である DSA を用いた前処理と比較し、本研究で開発した前処理は GMRES 法内の反復回数を大幅に削減できることを確認した。一方で、前処理行列はその逆行列を求める計算が必要となるため、領域の数が大きくなる大規模体系への導入は困難になる。そこで領域の数を削減させる前処理手法についての検討をするため、粗いグリッドを用いた前処理方法を加えて導入した。検討の結果、均質化を用いる手法で有効な前処理が可能であることを確認した。

次に、2 次元 MOC コードに対して前処理の検討をした。多次元においては領域間の結合が複雑になるため、前処理行列の作成は困難になる。そこで、MOC の伝搬方程式を直接用いることで、1 次元 MOC コードへ導入した前処理行列の容易な作成手法を開発した。多次元体系においては一次元体系と比較して領域数が増大する。そのため、前処理行列の逆行列の作成に必要な計算時間は大幅に増える。逆行列の計算時間を削減するためには、粗いグリッドを用いることが有効であると考えられる。そこで、核計算に対して粗グリッドを有効に用いる手法であるスケール法を開発し、前処理の有効性を損なうことなく逆行列の計算時間を削減することができた。

以上の検討により、現行の炉心設計で使用される手法より計算精度の高い手法である MOC を導入した場合でも、前処理によって大幅に削減できることが確認された。MOC の実用化により、設計に対する信頼性向上と燃料運用の最適化による経済性向上が期待される。

4.6. 4 章の参考文献

(1) M. Komeda, K. Yamamoto, T. Kusunoki, “Full core burn-up calculation at JRR-3 with MVP-BURN” International Conference on the Physics of Reactors, Nuclear Power; A Sustainable Resource (PHYSOR 2008), Interlaken, Switzerland.

(2) T. Takeda, T. Kitada, H. Nishi, J. Ishibashi, “Application of method of characteristics to fast reactor core analysis” *PHYSOR 2010 – Advances in Reactor Physics to Power the Nuclear Renaissance*, Pittsburgh, Pennsylvania, USA, May 9-14, (2010), [CD-ROM].

(3) Z. Liu, H. Wu, L. Cao , Q. Chen, Y. Li, A new three-dimensional method of characteristics for the neutron transport calculation, *Annals of Nuclear Energy* 38 (2011), pp. 447-454.

(4) S. Santandrea, R. Sanchez, Acceleration techniques for the characteristics method in unstructured meshes, *Annals of Nuclear Energy* 29 (2002), pp. 323–352.

(5) G. J. Wu, R. Roy, Acceleration techniques for trajectory-based deterministic 3D transport solvers, *Annals of Nuclear Energy* 30 (2003), pp. 567–583.

(6) M. R. Zika, M. L. Adams, Transport synthetic acceleration for long-characteristics assembly-level problems, *Nuclear Science and Engineering* 134 (2000), pp. 135–158.

(7) G. L. Ramone, M. L. Adams, P. F. Nowak, A transport synthetic acceleration method for transport iterations, *Nuclear Science and Engineering* 125 (1997), pp. 257–283.

(8) K. S. Smith, Nodal method storage reduction by nonlinear iteration, *Transactions of the American Nuclear Society* 44 (1983), pp. 265-266.

(9) J. Y. Cho, K. S. Kim, H. J. Shim, J. S. Song, C. C. Lee, H. G. Joo, Whole core transport calculation employing hexagonal modular ray tracing and CMFD formulation, *NUCLEAR SCIENCE and TECHNOLOGY* 45 (2008), pp. 740–751.

(10) C. Tang, S. Zhang, Development and verification of an MOC code employing assembly modular ray tracing and efficient acceleration techniques, *Annals of Nuclear Energy* 36 (2009), pp. 1013–1020.

(11) A. Yamamoto, Y. Kitamura, T. Ushio, N. Sugimura, Convergence Improvement of Coarse Mesh Rebalance Method for Neutron Transport Calculations, *Journal of NUCLEAR SCIENCE and TECHNOLOGY* 41 (2004), pp. 781–789.

(12) S. Oliveira, Y. Deng, Preconditioned Krylov Subspace Methods for Transport Equations, *Progress in Nuclear Energy* 33 (1998), pp. 155-174.

(13) A. Gupta, R.S. Modak, Krylov sub-space methods for K-eigenvalue problem in 3-D neutron transport, *Annals of Nuclear Energy* 31 (2004), pp. 2113–2125.

(14) R.S. Modak, A Gupta, New applications of Orthomin(1) algorithm for K-eigenvalue problem in Reactor Physics, *Annals of Nuclear Energy* 33 (2006), pp. 538–543.

(15) J. S. Warsa, T. A. Wareing, J. E. Morel, “Krylov iterative methods applied to multidimensional SN calculations in the presence of material discontinuities,” *Nuclear Mathematical and*

Computational Sciences: A Century in Review, A Century Anew, Gatlinburg, Tennessee, April 6-11, (2003).

(16) A. Gupta, R. S. Modak, On the use of conjugate gradient method for the solution of neutron transport equation, *Annals of Nuclear Energy* 29 (2002), pp. 1933–1951.

(17) J. S. Warsa, T. A. Wareing, J. E. Morrel, J. M. McGhee, R. B. Lehoucq, Krylov subspace iterations for deterministic K-eigenvalue calculations, *Nuclear Science and Engineering* 147 (2004), pp. 26–42.

(18) H. Zhang, H. Wu, L. Cao, An acceleration technique for 2D MOC based on Krylov subspace and domain decomposition methods, *Annals of Nuclear Energy* 38 (2011), pp. 2742–2751.

(19) B. W. Patton, J. P. Holloway, Application of preconditioned GMRES to the numerical solution of the neutron transport equation, *Annals of Nuclear Energy* 29 (2002), pp.109–136.

(20) M. Benzi, Preconditioning Techniques for Large Linear Systems: A Survey, *Journal of Computational Physics* 182 (2002), pp. 418–477.

(21) M. Dahmani, R. Le Tellier, R. Roy, A. Hébert, An efficient preconditioning technique using Krylov subspace methods for 3D characteristics solvers, *Annals of Nuclear Energy* 32 (2005), pp. 876–896.

(22) R. Le Tellier, A. Hébert, "Application of the DSA Preconditioned GMRES formalism to the Method of Characteristics - First Results," *PHYSOR 2004 -the Physics of Fuel Cycles and Advanced Nuclear Systems: Global Developments*, Chicago, Illinois, April 25-29, (2004), [CD-ROM].

(23) Y. Saad, M. Schultz, GMRES: A Generalized Minimal RESidual algorithm for solving nonsymmetric linear systems, *SIAM Journal on Scientific Computing* 7 (1986), pp. 856-869.

(24) S. Fujino, S. Zhang, *Hanpukuhou no suri*, asakura shoten, Tokyo, (1996), pp.70-72, ISBN 4254114044, [in Japanese].

(25) Y. Saad, A Flexible Inner-Outer Preconditioned GMRES Algorithm, *SIAM Journal on Scientific Computing* 14 (1993), pp. 461–469.

(26) S. Takeda, M. A. Smith, T. Kitada, "Investigation of GMRES for MOC code acceleration," *2011 Annual Meeting of the Atomic Energy Society of Japan*, Fukui, Japan, March 28-30, (2011), [CD-ROM] [in Japanese].

(27) G. Grassi, "A non-linear spatial multi-grid acceleration for the method of characteristics in unstructured meshes," *Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications*, Palais des Papes, Avignon, France, September 12-15, (2005), [CD-ROM].

5. 結論と今後の展望

本章では、結論と今後の展望をまとめる。

5.1. 結論

本研究では、信頼性向上と経済性向上の観点で、誤差要因を排除することによる炉心設計への影響を評価し、更なる高度化に向けた検討を行った。

2 章では、軽水炉での利用を想定した様々な燃料に対するドップラー係数の検討結果をまとめた。この検討では、まず、実用化が検討されているトリウム燃料について、ドップラー係数がウラン燃料よりも負側に大きくなる物理的な理由を調査した。また、従来の軽水炉核計算手法では考慮されていない熱外領域の熱振動を計算モデルに取り入れ、様々な燃料を対象としてドップラー係数への影響評価を実施した。この評価により、MOX 燃料ではウラン燃料よりも熱振動の影響は小さく、U-238 の捕獲反応による影響が支配的であることがわかった。また、トリウム燃料については、Th-232 の熱振動が及ぼすドップラー反応度への影響は U-238 と比べて小さいものの、約 4%の影響が見られることを確認した。ここで、熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響は全断面積と散乱断面積と断面積の比から説明できることを確認し、熱外領域の熱振動がドップラー係数に影響を与える要因を明らかにした。これらの結果から、MOX 燃料とトリウム燃料についても、熱外領域における熱振動がドップラー係数に与える影響を定量的に評価できた。このことにより、様々な種類の燃料のドップラー係数に対して、現行の軽水炉核計算手法で用いられている計算モデルの誤差要因の影響評価を行うことができた。

3 章では、ガドリニア入りウラン燃料集合体を対象として、熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響を評価した。結果として、ガドリニアが存在しない場合では熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響が 10%程度であるにも関わらず、ガドリニアが少量添加された場合はドップラー係数へ影響が 12%まで上昇することが確認された。この現象についてさらに詳細に検討をするため、ドップラー係数の変化量を求めることができる簡略化された数式を導出して分析を行った。分析の結果、若干の強吸収体が添加されて増倍率が急に低下した場合に熱外領域の熱振動がドップラー係数に与える影響が大きくなることが確認され、この影響を定量的に評価した。この検討により、ガドリニアのような吸収体が存在する場合の燃料のドップラー係数についても、現行の軽水炉核計算手法で用いられている計算モデルの誤差要因の影響評価を行うことができた。

4 章では、計算誤差の小さい輸送計算手法である Method Of Characteristics(MOC)をより大きな体系でも実用的な時間内で計算できるようにするため、MOC コードの高速化への有効性が確認されている Krylov 部分空間法に対し、さらに高速でかつ安定した収束が行えるようにするための前処理に関する検討を実施した。まず、1 次元 MOC コードに Krylov 部分空間法である GMRES 法を導入し、前処理についての検討を行った。この検討では拡散理論を用いた加速手法である Diffusion Synthetic Acceleration(DSA)を前処理として導

入し、DSA に基づく前処理手法と比較して本研究で開発した平均自由行程を用いる前処理手法の有効性を確認した。また、粗グリッドを用いた前処理手法を導入することで大幅に GMRES 法内の反復回数を削減できることも確認した。1 次元 MOC コードに対するこれらの検討により、平均自由行程を用いる前処理手法と、前処理における均質化が有効であることを明らかにした。続いて、2 次元 MOC コードに対しても GMRES 法を適用し、多次元 MOC コードの前処理に関する検討を行った。多次元 MOC コードでは 1 次元 MOC コードよりも大幅に領域間の核的な結合が複雑になるため、前処理行列の作成が容易ではなくなる。そこで、平均自由行程を用いる前処理行列を、多次元体系においても効率よくかつ容易に作成する手法を考案した。また、計算のさらなる短縮を図るため、粗グリッドを有効に用いる前処理手法であるスケール法を新たに開発した。これらの手法を適用することで大幅に計算時間を短縮できたことから、開発した手法の有効性が確認できた。この検討により、信頼性向上と経済性向上が期待できる精度の高い手法について実用化の目処をたてられた。

上記に示したとおり、本研究では炉心設計値の一つであるドップラー係数に対して、熱外領域の熱振動を考慮することによる影響評価を様々な燃料に対して実施した。また、本研究で開発した前処理手法を適用することにより、出力ピークなどの様々な炉心設計値を精度良く評価できる核計算手法である MOC をより実用的な計算時間で実施できるようになることが分かった。これらの研究により、軽水炉核計算手法の高度化することによる影響を明らかにした。

5.2. 今後の展望

本研究ではドップラー係数と炉心計算手法に着目して高度化に向けた検討を実施したが、その他のパラメータや手法に着目することで更なる高度化も可能である。高度化を図る対象は複数あり、例えば実効断面積の作成における共鳴の干渉の取り扱いが挙げられる。軽水炉炉心設計で使用する実効断面積の作成において、一つの核種の共鳴を厳密に取り扱う手法は採用されつつあるが、複数核種の共鳴の干渉効果を取り扱う手法は広くは使用されていない。このため、複数核種の共鳴の干渉効果を厳密に設計に取り入れれば、誤差要因をより低減することが可能となる。その他の高度化の観点として、マルチフィジックスによる設計の最適化も挙げられる。現行の設計では、核特性とその他の熱水力や機械的の特性は分けて評価されている。ここで、これらの特性の相互干渉を直接考慮すれば、より最適な設計が可能になると期待できる。

謝辞

本研究を進めるにあたって、ご多忙の身にもかかわらず常に熱心なアドバイスを頂いた北田孝典教授に対して心から感謝致します。北田孝典教授の適切なご指導がなければ、この研究は到底達成し得ないものでした。

次に、本論文の作成について適切な助言を下さいました村田勲教授、福田武司教授、帆足英二准教授に深く感謝致します。村田勲教授からは原子核物理の観点で貴重なコメントを頂き、本論文を作成する上で大変参考になりました。福田武司教授からは、工学の進歩という観点で、研究の方針についてご指導を頂きました。今後の研究の方針を検討する場合においても参考にさせて頂きたいと思います。帆足英二准教授からはシミュレーションについて参考となるご意見を頂き、数値解析の知見を深めることができました。

さらに、研究について北田研究室の他の学生と活発に議論したことは、民間企業で働く私にとって刺激があり、またとても嬉しいことでありました。今後も研究について議論をさせていただければと思います。

最後になりましたが、研究生活を支援してくれた両親、身体面・精神面でサポートをしてくれた妻・千尋に対し、この場を借りてお礼を申し上げます。

関連する業績一覧

Publications

(1) **Satoshi Takeda**, Satoshi Ino, Kazuhiro Wada, Michitaka Ono, Takanori Kitada, Study on the impact of thermal agitation on Doppler Coefficient in epithermal range for Gd-bearing fuel, Science and Technology of Nuclear Installations, vol. 2016, ID 5834614, 2016.

(2) **Satoshi Takeda**, Michitaka Ono, Kazuhiro, Kazuhiro Wada, Takanori Kitada, Study on the Doppler reactivity considering thermal agitation in epithermal range for various types of nuclear fuels, Annals of Nuclear Energy, under review.

(3) Noboru Dobuchi, **Satoshi Takeda**, Takanori Kitada, Study on the Relation between Doppler Reactivity Coefficient and Resonance Integrals of Thorium and Uranium in PWR Fuels, Annals of Nuclear Energy, to be published, 2016.

(4) **Satoshi Takeda**, Takanori Kitada, Development of efficient Krylov preconditioning techniques for multi-dimensional method of characteristics, Journal of Nuclear Science and Technology, volume 49, issue 4, pages 457-465, 2012.

Conferences

(1) **Satoshi Takeda**, Michael A. Smith, Takanori Kitada, "Research on an efficient preconditioner using GMRES method for the MOC," *Transactions of the Korean Nuclear Society Spring Meeting*, May 26, pp.149-150, (2011).

(2) 竹田　敏, 北田孝典, Michael A. Smith, "MOC コードの加速のための GMRES に関する検討," 2011 年春の年会, 2011 年 3 月 29 日, pp.293.

(3) 竹田　敏, 北田孝典, "MOC コードの加速のための GMRES に関する検討（2）," 2011 年秋の年会, 2011 年 9 月 20 日, pp.657.