

汎用炉物理解析コードシステム CBZ の概要

千葉豪

平成 30 年 1 月 15 日

概要

汎用炉物理解析コードシステム CBZ は、核分裂物質を含む系の核分裂連鎖反応、核燃料の燃焼、放射線の遮蔽といった、原子炉内とその周囲における中性子、ガンマ線の輸送、それらと原子核、原子との相互作用に関わる物理現象を数値的に模擬するためのコードシステムである。日本原子力研究開発機構で開発されたコードシステム CBG をベースとして、2012 年 4 月より北大・原子炉工学研究室で開発が行われている。

プログラムはコンピュータ言語 C++ で記述されており、原子炉物理の計算に関連する情報（原子炉や燃料集合体を表現するための幾何形状や、原子炉を構成する媒質といったものに加えて、計算手法や収束条件なども含む）は全て C++ の「クラス」として定義される。中性子、ガンマ線の輸送方程式、拡散方程式を解くソルバーが複数実装されており、それらソルバーはそれぞれ関連する複数のクラスで構成されている。また、ソルバー間のデータ（例えば中性子反応断面積データ）のやり取りはクラスのインスタンスを通して行われることから、複数のソルバーを組み合わせた多種多様な炉物理計算が容易に実現可能であることが特徴である。

1 多群断面積ライブラリ CBZLIB

CBZ は決定論的手法に基づく計算コードシステムであるため、エネルギーを離散化して取り扱う必要がある。従って、共鳴自己遮蔽効果を考慮した実効群断面積を計算することになるが、その際に用いる多群ライブラリとして CBZLIB が実装されている。CBZLIB はいわゆる Bondarenko 型の炉定数であり、無限希釈断面積、非等方散乱の高次のルジャンドル係数を含む散乱マトリクスに加えて、共鳴自己遮蔽因子を有している。ライブラリは NJOY-99 コード等を用いて評価済み核データファイル进行处理することにより作成され、エネルギー群構造は任意である。CBZ を用いた一般的な解析では、軽水炉を対象とした場合には 107 群（SRAC-2K6 コードのライブラリと同一の群構造）、高速炉の場合には 70 群（JAERI Fast-set と同一の群構造）、もしくは 175 群のライブラリ¹を使用する。

軽水炉解析用の CBZLIB には、中性子の減速をより厳密に考慮するため、共鳴自己遮蔽因子の計算では、荷重関数として一点炉詳細群減速方程式を解いて得られる中性子束エネルギースペクトルを用いているものもある。また、核種間の共鳴干渉効果を考慮するため、重核種に対しては多重 R 因子法 [1] を適用し、FP 核種に対しては U-238 との共鳴干渉効果を考慮した荷重関数（U-238 の巨大共鳴による中性子束エネルギースペクトルの歪みを一意的に考慮したもの）を炉定数作成時に用いる工夫 [2] を行っているものもある。さらに、ピンセル体系におけるカレント重みの実効全断面積の計算精度を向上させるための補正因子を、U-238 と Pu-242 のいくつかのエネルギー群に対して導入している。これらは「Advanced Bondarenko method」と呼称しており、文献 [3] にまとめられている。

CBZLIB では、個々の核種のデータがそれぞれ単一のテキストファイルとして与えられている。「Pu239」のように核種の名前がファイル名となっているものは、NJOY-99 コードで作成された

¹この 175 群ライブラリの群構造は VITAMIN-J と呼ばれるものであり、主に中性子遮蔽計算のために開発された。超小型の高速炉の解析など、中性子の漏洩寄与が大きく 70 群構造では不十分となる場合にこの群構造が用いられる。

ものを意味しており、中性子束エネルギースペクトルはNR近似²が仮定されている。「Pu239T」のように末尾に「T」がつけられたものは、中性子エネルギースペクトルが減速方程式を用いて計算されたものであり、「T」がつかないものよりも高精度の計算が期待できる。また、「Pu239.U8」のように、末尾にピリオドとともに原子核の略称（「U8」の場合は「U238」）がつけられているときは、中性子エネルギースペクトルが減速方程式を用いて計算され、かつR因子によりピリオドのあとに示された核種との共鳴干渉効果が考慮されていることを意味する。ピリオドのあとに「mix」が付けられているものは、エネルギー群に応じて共鳴干渉効果を考慮する核種を変更しているものであり、共鳴干渉効果が最適化されていると考えて良い（どのエネルギー群でどの核種との共鳴干渉効果を考慮しているかについては、文献[3]のTable 4にまとめられている）。最後に、ピリオドのあとに「T2」がつけられているものは、前述した「U-238との共鳴干渉効果を考慮した荷重関数」を用いて作成された[2]ことを意味する。

2 実効群断面積の計算（共鳴自己遮蔽効果の処理）

均質媒質における実効群断面積の計算は、個々の共鳴核種について背景断面積を求め、背景断面積、温度とR因子³をパラメータとした自己遮蔽因子テーブルから自己遮蔽因子を内挿することで行う。一方、非均質格子系における共鳴自己遮蔽効果の計算は等価原理に基づいて行う。非均質格子系での背景断面積の評価は、燃料ピンセル体系に対しては以下の方法で行う。まず燃料からの脱出確率はBell因子を用いた一項有理近似で記述する[4]。ここで、Bell因子は軽水炉の燃料ピンセル系に対してエネルギー群毎に最適化された値を用いている[1]。また、格子効果はエネルギー群依存のDancoff係数により考慮する[4]。高速炉解析で馴染みの深い東捻の方法[5]も利用可能である。

3 中性子、ガンマ線の輸送・拡散ソルバー

CBZには中性子、ガンマ線の輸送方程式、拡散方程式を解くための多様なソルバーが実装されている。これらのうち、ただひとつのソルバーを除いて、全てが同一の基底クラス（GeneralSystemクラス）を継承した構造となっている。これは、それらソルバーがべき乗法による固有値計算や固定源計算の枠組みを共有できるからである。また、拡散方程式、輸送方程式いずれにおいても現れる物理量であるスカラー中性子束（ガンマ線束）を用いた種々の計算（反応率分布の計算や摂動計算の一部）は基底クラスに実装されている。随伴方程式の計算も殆どのソルバーで可能となっている。

拡散方程式を解くためのソルバーとしては、PLOS、DHEXがある。これらは有限差分法に基づいたコードであり、PLOSはデカルト座標系、円筒体系、球体系に、DHEXはHexagonal-Z体系に適用することが出来る。DHEXは、六角メッシュに加えて、六角メッシュを6等分した三角メッシュ体系での計算も可能となっている。内部反復の加速にはSOR法を、外部反復の加速には粗メッシュ有限差分（CMFD）加速[6]を採用している。これらに加えて、階層領域分割型境界要素法[7]に基づくソルバーABEMIEも実装されている。ABEMIEは任意の線分で構成される二次元体系の計算が可能である。

²中性子束 $\phi(E)$ が全断面積 $\Sigma(E)$ に反比例するという近似である。

³ある共鳴核種の実効断面積の計算では、通常、それ以外の核種は非共鳴核種であると仮定される。しかし実際には種々の異なる共鳴核種が混在しており、その干渉効果（共鳴干渉効果）が重要となる。R因子は着目共鳴核種と共鳴干渉を考慮する核種の数密度の比として定義される。R因子のいくつかの値で、予め共鳴干渉効果を考慮した自己遮蔽因子を計算しておくことで、実効断面積計算において特定の核種との共鳴干渉効果を考慮することが可能となる。

輸送方程式を解くためのソルバーとしては、SNR、SNRZ、SNTがある。これらはいずれも離散座標法に基づいており、それぞれ球体系、円筒体系、デカルト座標系に適用する。離散座標法は中性子の角度方向を離散的に扱う方法であり、Sn法とも呼ばれる[8, 9]。いずれのソルバーも、内側反復には拡散合成法[10]を、外側反復にはCMFD法を採用し、計算の高速化を図っている。

また、燃料ピンセルや燃料集合体など、二次元平面上の複雑形状における輸送方程式を扱うためのソルバーとしてはPJI、MECがある。PJIは衝突確率法[9]、MECは特性曲線法(Characteristic法)に基づくソルバーであり、Ray-tracing[11, 12]により衝突確率やパスラインの計算を行う。なお、Ray-tracingの計算はPJI、MECともに同一のモジュールを利用している。

Simplified P3(SP3)方程式[13, 14]に対する計算も可能である。デカルト座標系についてはPLOSの固定源機能を組み合わせて用いることにより実現している。また、エネルギー1群に限定しているが、ABEMIEソルバーもSP3方程式を解くことが出来る[15]。

また、通常はベクトル形式で考慮する核分裂スペクトルに対して、入射中性子エネルギー依存性を陽に取り込んだ計算(核分裂スペクトルを行列形式で考慮する計算)も可能である[16]。

4 燃焼計算

原子燃料に含まれる種々の原子核は、原子炉の運転に伴い数密度が時々刻々変化する。この計算はいわゆる「燃焼方程式」を解くことで実現されるが、CBZにはこのためのモジュールとしてBurnupクラスが実装されている。燃焼方程式の数値解法としては行列指数法を採用し、行列指数はMini-Max Polynomial Approximation(MMPA)[17]、もしくはChebyshev有理近似法[18]により評価している(これらの方法ではKrylov部分空間法[19]で解けない短半減期核種を含むチェーンでも対応可能である)。また、燃焼チェーンを作成するモジュールBurnupChainGeneratorが実装されており、評価済みの崩壊データファイル、核分裂収率データファイルから、ユーザーが必要と判断した核種で構成される任意の燃焼チェーンを作成することが可能である。なお、一般的な燃焼計算ではSRACコードにおいて最も詳細なチェーン(取り扱うFP核種は193)に4核種加えたものを用いている。このチェーンでは、原子炉停止1年後以降の崩壊熱、放射能を精度良く評価することが可能である。Burnupクラスは入力された核種数密度、中性子束情報(エネルギースペクトル、レベル)、燃焼期間から、燃焼後の数密度を計算する。中性子束の情報は、中性子輸送・拡散ソルバーから引き渡すことになる。

また、ピンセル体系に対する燃焼計算のためのツールとしてBurnerが実装されている。Burnerは、燃料、被覆管、冷却材の三領域からなる正方、六角格子体系の燃焼計算を行う。なお、中性子束計算は衝突確率法に基づくPJIモジュールで行う。Burnerでは、出力運転中の計算とともに、原子炉運転後の冷却計算も行うことが可能であり、燃焼(冷却)期間に依存した各種原子核の数密度や放射能、崩壊熱といった、燃焼に伴う諸量を計算することが出来る。また、燃焼後の核特性(数密度、実効増倍率、反応率比)の核データに対する感度を計算するメソッドも実装されている[2, 20, 21]。

また、高速炉の全炉心を二次元円筒体系に模擬した燃焼計算もFRBurnerRZモジュールにより可能となっている。このモジュールでは燃料集合体は均質で扱い、燃料交換も簡略的に考慮する。

5 感度計算、不確かさ評価

実効増倍率の感度係数は中性子束と随伴中性子束から計算出来るため、随伴中性子束を計算できるソルバーでは感度係数の計算が可能である(拡散/輸送、ピンセル/全炉心)。反応度の感度係数は実効増倍率の感度係数の差をとることにより求める。反応率比の感度係数では一般化随伴中

中性子束の計算 [22] が必要となるが、基本的には固定源随伴問題となるため、GeneralSystem クラスに実装されているメソッドで対応可能である。なお、感度係数は SensitivityData クラスで定義する。

また、実効遅発中性子割合、中性子生成時間等、定義に随伴中性子束が現れるパラメータの感度については、Modified k-ratio 法ベースの方法で計算を行う [23]。

不確かさ評価は、NJOY-99 の ERRORR モジュールが計算した多群共分散ファイルを CBZ 固有のフォーマットに変換した多群共分散ライブラリと SensitivityData クラスのインスタンスを用いて、UNC モジュールが行う。

6 中性子・ガンマ線結合計算

ガンマ線の輸送計算を行う場合、中性子核反応によるガンマ線生成データ、ガンマ線輸送データについては、NJOY-99 で処理を行った CBZ 固有の多群ライブラリを用いる。ガンマ線の輸送計算は、はじめに中性子輸送計算を行い、それに基づいてガンマ線源を求め、ガンマ線に対する固定源計算を行うという手続きをとる。燃焼計算と組み合わせた遅発ガンマ線放出の時間依存性を正確に取り扱った計算も実現可能である [24]。

参考文献

- [1] G. Chiba, “CBGLIB: a multi-group neutron library for precise neutronics simulations,” *Proc. of the 2007 symposium on Nuclear Data*, JAEA-Conf 2008-008, p.114 (2008).
- [2] G. Chiba, K. Okumura, A. Oizumi, M. Saito, “Sensitivity analysis of fission product concentrations for light water reactor burned fuel,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **47**, p.652 (2010).
- [3] G. Chiba, T. Narabayashi, “Advanced Bondarenko method for resonance self-shielding calculations in deterministic reactor physics code system CBZ,” *Ann. Nucl. Energy*, **96**, p.277 (2016).
- [4] R. J. J. Stamm’ler, M. J. Abbate, *Methods of steady state reactor physics in nuclear design*, Academic, London, New York (1983).
- [5] T. Tone, “A numerical study of heterogeneity effects in fast reactor critical assemblies,” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **12**, p.467 (1975).
- [6] K. S. Smith, “Nodal method storage reduction by non-linear iteration,” *Trans. Am. Nucl. Soc.*, **44**, p.265 (1984).
- [7] G. Chiba, M. Tsuji, Y. Shimazu, “A hierarchical domain decomposition boundary element method with a higher order polynomial expansion for solving 2-D multi-region neutron diffusion equations,” *Ann. Nucl. Energy*, **28**, p.895 (2001).
- [8] E. E. Lewis, W. F. Miller Jr., *Computational methods of neutron transport*, American Nuclear Society (1993).
- [9] 小林啓祐、「原子炉物理」、コロナ社 (1996)。
- [10] M. L. Adams, E. W. Larsen, “Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations,” *Prog. Nucl. Energy*, **40**, p.3 (2002).

- [11] K. Tsuchihashi, "Collision probability in two-dimensional lattice by ray-trace method and its applications to cell calculations," JAERI-M 85-034 (1985).
- [12] R. Sanchez, L. Mao, S. Santandrea, "Treatment of boundary conditions in trajectory-based deterministic transport methods," *Nucl. Sci. Eng.*, **140**, p.23 (2002).
- [13] E. W. Larsen, J. E. Morel, J. M. McGhee, "Asymptotic derivation of the multigroup P_1 and simplified P_N equations with anisotropic scattering," *Nucl. Sci. Eng.*, **123**, p.328 (1996).
- [14] P. S. Brantley, E. W. Larsen, "The simplified P_3 approximation," *Nucl. Sci. Eng.*, **134**, p.1 (2000).
- [15] G. Chiba, "Application of the hierarchical domain decomposition boundary element method to the simplified P_3 equation," *Ann. Nucl. Energy*, **38**, p.1033 (2011).
- [16] G. Chiba, "Criticality calculations with fission spectrum matrix," *Proc. of the 2008 Symp. on Nuclear Data*, JAEA-Conf 2009-004, p.107 (2009).
- [17] Y. Kawamoto, G. Chiba, M. Tsuji, T. Narabayashi, "Numerical solution of matrix exponential in burn-up equation using mini-max polynomial approximation," *Ann. Nucl. Energy*, **80**, p.219 (2015).
- [18] M. Pusa, J. Leppanen, "Computing the matrix exponential in burnup calculations," *Nucl. Sci. Eng.*, **164**, p.140 (2010).
- [19] T. Yamamoto, *et al.*, "Numerical Solution of stiff burnup equation with short half lived nuclides by the Krylov subspace method," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **44**, p.147 (2007).
- [20] G. Chiba, M. Tsuji, T. Narabayashi, "Uncertainty quantification of neutronics parameters of light water reactor fuel cells with JENDL-4.0 covariance data," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **50**, p.751 (2013).
- [21] G. Chiba, T. Narabayashi, "Development of a fuel depletion sensitivity calculation module for multi-cell problems in a deterministic reactor physics code system CBZ," *Ann. Nucl. Energy*, **96**, p.313 (2016).
- [22] 三谷浩、黒井英雄、「積分量の感度係数と一般化摂動法」, JAERI-M 4760 (1972).
- [23] G. Chiba, M. Tsuji, K. Sugiyama, T. Narabayashi, "JENDL-4.0 benchmarking for effective delayed neutron fraction of fast neutron systems," *J. Nucl. Sci. Technol.*, **48**, p.1471 (2011).
- [24] G. Chiba, M. Tsuji, T. Narabayashi, "Photon transport effect on intra subassembly thermal power distribution in fast reactor," *Ann. Nucl. Energy*, **65**, p.41 (2013).