

決定論的手法に基づく核燃料燃焼計算における
計算誤差に関する研究
原子炉工学研究室
原田大輝

第1章	緒論	3
1.1	研究背景	3
1.2	研究目的と進め方	4
第2章	検討手法	5
2.1	計算手法	5
2.1.1	汎用炉物理解析コード CBZ	5
2.1.2	CBZ を用いた燃焼計算	5
2.1.3	汎用中性子・光子輸送計算モンテカルロ計算コード MVP/GMVP	6
2.1.4	MVP-BURN	6
2.2	計算体系	7
2.2.1	PWR ピンセルモデル	7
2.2.2	BWR ピンセルモデル	8
2.2.3	計算体系一覧	10
2.3	比較条件	11
2.3.1	燃焼条件	11
2.3.2	断面積ライブラリ	11
2.3.3	燃焼チェーンモデル	11
第3章	解析結果	14
3.1	無限中性子増倍率と反応度	14
3.2	核種数密度	16
3.2.1	燃焼度点での数密度誤差	16
3.2.2	重要核種の選定	23
3.2.3	数密度誤差の燃焼度依存性	24
3.3	計算誤差の発生過程	34
第4章	一般化最小二乗法を用いた実効断面積誤差の定量化	35
4.1	単一の積分データを用いた単一の核データの調整	35
4.2	複数の積分データを用いた場合の複数の核データの調整	37
第5章	一般化最小二乗法の適用と結果	41
5.1	適用の流れ	41
5.2	適用結果	43
5.2.1	計算比と不確かさ	43
5.2.2	多群断面積	45
第6章	結論	53
	謝辞	54
	参考文献	55

第1章 緒論

1.1 研究背景

核燃料は、その使用（燃焼）に伴い、核分裂反応による核分裂性核種の減少や、核分裂生成物の蓄積、親核種からの転換による核分裂性核種の増加など、その組成を時々刻々と変化させる。核燃料の組成の時間変化を正確に予測することは、原子炉の運転はもとより、使用済み核燃料の管理・処分など、多くの局面において重要である。核燃料の燃焼に伴う組成変化を数値的に計算することを「燃焼計算」と呼ぶ。

燃焼計算では、着目する燃焼度点において中性子輸送方程式を数値的に解き、核燃料中の個々の核種の中性子との反応率を計算する。そして、その反応率に基づいて定義される燃焼方程式（核種の生成・消滅を記述する方程式）を解き、次の燃焼度点における核燃料の組成を計算する。この計算を、燃料が所定の燃焼度に達するまで繰り返して行う。各燃焼度点における中性子輸送方程式の数値解法として、エネルギーや空間、方向といった位相変数を離散化して扱う決定論的手法と、乱数を用いて中性子の挙動をモデル化する確率論的手法がある。後者の確率論的手法では、位相変数の離散化を行わず、原式を忠実に解くため、基本的には厳密解相当の解を得ることが出来る。ただし、確率論的手法であるが故、計算結果には統計的不確かさが伴い、その不確かさが無視できる程度の解を得るためには膨大な計算量が必要になる。燃焼計算では、複数の燃焼度点での中性子輸送方程式を解く必要があることから、特に原子力発電所の炉心設計計算など、相当数の燃焼計算を行う必要がある場合には、決定論的手法が一般的に用いられている。

決定論的手法には前述の通り、位相変数の離散化に伴う誤差が生じる。ただし、燃料ピンセルや燃料集合体を対象とした場合には、空間・方位に対する離散化はそれによる誤差が無視できる程度まで詳細に行うことが比較的容易となっている。一方、エネルギーに関しては、離散化誤差を無視出来る程度にするには数 10 万程度のグリッド（エネルギー群）が必要になることから、100 から 200 程度で離散化することが一般的であり、それによる誤差が生じる。従って、決定論的手法に基づく燃焼計算においては、特にエネルギーについての離散化に起因する計算誤差を定量的に把握し、その要因を明らかにすることが重要である。

原子炉物理分野において、数値計算に起因する誤差に関する研究はこれまでにいくつか行われており、例えば、複数の異なる条件に基づく計算を行い、その結果のばらつきを利用することで、数値計算に起因する誤差を定量化する試み[1]や、計算誤差と種々のパラメータの関係性に着目し、その関係性を明確にすることで、未知の計算対象における計算誤差を推定しようという試み[2]などがあげられる。一方、燃焼計算における離散化に起因する誤差に関する研究は、これまでに行われていない。

1.2 研究目的と進め方

燃焼計算において、エネルギーについての離散化誤差は、エネルギー離散化後の断面積である実効断面積の評価誤差として現れ、それが燃焼による核種の変換過程を通じて、複数の核種の燃焼後数密度の計算誤差となる。そこで本研究では、決定論的手法に基づく燃焼計算における計算誤差が実効断面積の計算誤差のみによって記述できると仮定し、核データ調整手法として一般的に用いられている一般化最小二乗法を適用し、実効断面積に誤差を生じさせているエネルギー群を特定することを目的とする。

本研究では計算誤差を定量化する対象として決定論的手法で燃焼計算を行う汎用炉物理解析コード CBZ の Burner モジュール、比較対象として厳密解相当の解を得るために、確率論的手法に基づく汎用中性子・光子輸送計算モンテカルロコード MVP の BURN モジュールを用いる。

進め方としては、ORIGEN ライブラリの作成で想定された軽水炉ピンセルモデル 2 体系について、無限中性子増倍率とある燃焼度点での 28 の重核種と 193 の FP の核種数密度の計算誤差を整理する。その後、ORIGEN ライブラリの作成で想定された軽水炉ピンセルモデル 8 体系について重要核種の核種数密度の計算誤差を整理して、計算誤差の燃焼度との依存性を調べる。さらに、整理した計算結果のうち 21 の重核種について一般化最小二乗法を適用し、調整された多群断面積を確認し、誤差を生じさせた断面積の特定を行う。

ここで、核データ調整とは、「核データ自体における不確かさ・誤差」を、種々の情報を追加することによって「調整」することである。一般化最小二乗法は、不確かさをもつ入力パラメータに依存して決まる出力パラメータが観測されたときに、その情報を入力パラメータに反映させる手法である。本研究での観測された計算結果は MVP-BURN で求められた厳密解相当の数密度となる。入力パラメータを実効断面積とし、出力パラメータを数密度として、離散化誤差が生じない解を用いて、離散化誤差を含む多群断面積を調整することになる。

第2章 検討手法

2.1 計算手法

本研究において、燃焼計算は決定論的手法として汎用炉物理解析コードシステム **CBZ** の **Burner** モジュールを、確率論的手法として汎用中性子・光子輸送計算モンテカルロコード **MVP/GMVP** 第3版に **BURN** モジュールをインストールしたものを使用する。

2.1.1 汎用炉物理解析コード **CBZ**

汎用炉物理解析コードシステム **CBZ** は、核分裂性物質を含む系の核分裂連鎖反応、核燃料の燃焼、放射線の輸送と減衰といった、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の構造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。

2.1.2 **CBZ** を用いた燃焼計算

核燃料に含まれる種々の原子核は、原子炉の運転に伴いその数密度が時々刻々と変化する。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。**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。**Burnup** モジュールは一群断面積に基づく燃焼計算モジュールであるが、一般的な燃焼計算では、燃焼領域の中性子束のエネルギースペクトルを計算し、それに基づいて一群断面積を求め燃焼方程式を解く、という手続きがとられる。**CBZ** では、単一のピンセル体系もしくは複数のピンセルからなる体系の燃焼計算を行うための基底クラス **GeneralBurner** が実装されており、それを継承する形で単ピンセル体系向けのモジュール **Burner** が実装されている。**Burner** は燃料、被覆管、減速材の三領域からなる正方及び六角格子体系について燃焼計算を行うモジュールであり、本研究での計算誤差の特定・定量化の対象として選択した。

2.1.3 汎用中性子・光子輸送計算モンテカルロ計算コード MVP/GMVP

三次元の複雑な体系における中性子や光子等の粒子輸送計算にはモンテカルロ法が用いられることが多い。この方法は特に幾何形状表現の自由度が大きくかつ正確なモデルが作れる点に特徴がある。さらに、連続エネルギーモンテカルロ法では多群近似を用いることなく、すべての核データをエネルギー点毎に与えることと、粒子と物質の衝突過程を可能な限り厳密に取り扱うことに特徴がある。このような利点から、モンテカルロ法は、炉心核特性計算をはじめ遮蔽、臨界安全、核融合炉中性子工学等の分野では高精度の参照解を得る方法として用いられるとともに、実験解析や詳細な設計を行う手段として用いられている。

高速かつ高精度な中性子・光子輸送モンテカルロ計算を実現するため、日本原子力研究開発機構において、2つのモンテカルロ計算コード MVP（連続エネルギー法）と GMVP（多群法）が開発されてきた。[3]

2.1.4 MVP-BURN

既存の MVP/GMVP コードシステムに BURN モジュールを追加インストールすることにより、MVP-BURN として燃焼計算が可能になる。BURN モジュールは、燃焼方程式を解いて核種組成の燃焼変化を追跡するとともに、計算全体の制御、ファイル管理を担当する。

幾何形状と組成データを与えれば MVP による輸送計算が可能であり、その結果、track length estimator または collision estimator による微視的反応率分布が得られる。微視的反応率分布が得られれば、BURN により燃焼方程式を解くことができ、燃焼時間が経過した後の組成データが得られる。MVP-BURN は、これら MVP 計算と BURN 計算を繰り返し実行することにより燃焼計算を行う。

MVP と BURN の結合においては、UNIX のシステムコール機能を利用して、BURN の中で MVP コードを呼び出す仕組みになっている。MVP と BURN は密に結合していないため、双方のコード改良を独立して行うことができる他、MVP の持つ機能をほとんどそのまま MVP-BURN でも利用することができる。また、異なるバージョンの MVP を即座に MVP-BURN に利用することができる。[4]

2.2 計算体系

ORIGEN ライブラリの作成で想定された軽水炉ピンセルモデル 8 体系を計算対象とした。加圧水型原子炉(PWR)ピンセルモデルから 2 体系、沸騰水型原子炉(BWR)ピンセルモデルから 6 体系を定めた。図 2-1 に示すような燃料、燃料被覆管、減速材の 3 領域からなるピンセル体系を想定した。

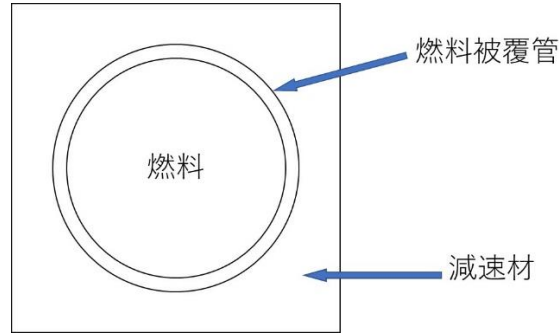


図 2-1 ピンセル体系

2.2.1 PWR ピンセルモデル

PWR ピンセル体系に関するデータを表 2-1 に、このときの UO_2 燃料の原子数密度及び被覆管、減速材領域の原子数密度を表 2-2 に示す。

表 2-1 PWR ピンセル体系のデータ

ピッチ(cm)	1.265
ペレット半径(cm)	0.412
被覆管外半径(cm)	0.476
被覆管厚さ(cm)	0.064
燃料温度(K)	968.8
被覆管温度(K)	604.0
減速材温度(K)	574.2

表 2-2 PWR ピンセル各領域の原子数密度(1/barn/cm) (UO_2 燃料)

燃料	
U-235初期濃縮度(%)	4.1
U-235	9.349E-04
U-238	2.159E-02
O-16	4.505E-02
被覆管	
Zr	3.786E-02
Fe	2.382E-04
Cr	6.770E-05
減速材	
H-1	5.572E-02
O-16	2.786E-02
B-10	4.592E-06
Ni	3.688E-04
Cr	1.609E-04
Fe	1.306E-04

ORIGEN ライブラリでは、PWR ピンセルの MOX 燃料については、Pu 富化度と Pu 組成をパラメータとして5つのライブラリが作成されている。このデータは国内の PWR で使用されることが予定されている MOX 燃料の燃料組成仕様に基づいて作られたものである。本研究では、Pu 富化度が 10%、Pu 組成が Composition2 として定められたものを使用する。そのデータを表 2-3 に示す。また、燃料の原子数密度を表 2-4 に示す。なお、MOX 燃料の被覆管及び減速材の原子数密度は表 2-2 の UO₂ 燃料と同一である。

表 2-3 PWR MOX 燃料のパラメータ

Pu組成		Composition 2
Isotopic Weight ratio(%)	Pu-238	2.1
	Pu-239	54.5
	Pu-240	25
	Pu-241	9.3
	Pu-242	6.4
	Am-241	2.7
U-235濃縮度(%)		0.2
Pu富化度(%)		10

表 2-4 PWR ピンセル MOX 燃料の原子数密度(1/barn/cm)

Pu組成	Composition 2
Pu富化度(%)	10
U-235	4.104E-05
U-238	2.022E-02
Pu-238	4.731E-05
Pu-239	1.223E-03
Pu-240	5.586E-04
Pu-241	2.069E-04
Pu-242	1.418E-04
Am-241	6.007E-05
O-16	4.500E-02

上記 PWR ピンセルのうち、UO₂ 燃料のものを **PWR-UO₂**、MOX 燃料のものを **PWR-MOX** と呼称する。

2.2.2 BWR ピンセルモデル

BWR ピンセルでは、複数の異なる減速材ボイド率の体系について考える。BWR 燃料集合体の型は STEP-N で表されるが、本研究では STEP-3 型を対象とした。BWR ピンセル体系の体系に関するデータを表 2-5 に示す。また、このときの UO₂ 燃料の原子数密度及び被覆管、減速材領域の原子数密度を表 2-6 に示す。

ORIGEN ライブラリでは、BWR ピンセルの MOX 燃料については、Pu 富化度と Pu 組成をパラメータとして 7 つのライブラリが作成されている。このデータは国内の BWR で使用されることが予定されている MOX 燃料の燃料組成仕様に基づいて作られたものである。本研究では、Pu 富化度が 4%、Pu 組成が Standard のものを使用した。そのデータを表 2-7 に示す。MOX 燃料の原子数密度及び被覆管、減速材領域の原子数密度を表 2-8 に示す。

表 2-5 BWR ピンセル体系のデータ

	STEP-3
ピッチ(cm)	1.44
ペレット半径(cm)	0.490
被覆管外半径(cm)	0.560
被覆管厚さ(cm)	0.070
燃料温度(K)	968.8
被覆管温度(K)	559.0
減速材温度(K)	559.0

表 2-7 BWR MOX 燃料のパラメータ

Pu組成		Standard
Isotopic Weight ratio(%)	Pu-238	1.53
	Pu-239	58.70
	Pu-240	26.62
	Pu-241	8.32
	Pu-242	4.01
	Am-241	0.82

表 2-6 BWR ピンセル各領域の原子数密度(1/barn/cm) (UO₂ 燃料)

燃料		
		STEP-3
U-234		8.053E-06
	U-235	8.888E-04
	U-236	5.419E-06
	U-238	2.104E-02
	O-16	4.438E-02
減速材		
Void=0%	H-1	8.8510E-02
	O-16	4.4255E-02
Void=40%	H-1	6.8436E-02
	O-16	3.4218E-02
Void=70%	H-1	5.3380E-02
	O-16	2.6690E-02
被覆管		
Zr		4.3371E-02

表 2-8 BWR ピンセル各領域の原子数密度(1/barn/cm) (MOX 燃料)

燃料			
Pu富化度(%)		4	
Pu組成		Standard	
U-234		1.991E-06	
	U-235	2.487E-04	
	U-236	1.660E-06	
	U-238	2.111E-02	
	Pu-238	1.361E-05	
	Pu-239	5.205E-04	
	Pu-240	2.351E-04	
	Pu-241	7.318E-05	
	Pu-242	3.511E-05	
	O-16	7.206E-06	
	減速材		
	Void=0%	H-1	8.198E-02
		O-16	4.099E-02
Void=40%	H-1	6.245E-02	
	O-16	3.147E-02	
Void=70%	H-1	4.857E-02	
	O-16	2.429E-02	
被覆管			
Zr		4.337E-02	

上記 BWR ピンセルのうち、 UO_2 燃料でボイド率が 0%、40%、70%のものをそれぞれ **BWR-UO2-V0**、**BWR-UO2-V40**、**BWR-UO2-V70** とし、MOX 燃料でボイド率が 0%、40%、70%のものを、**BWR-MOX-V0**、**BWR-MOX-V40**、**BWR-MOX-V70** と呼称する。

2.2.3 計算体系一覧

上で説明した軽水炉ピンセルモデル 8 体系を表 2-9 にまとめる。

表 2-9 計算体系一覧

	体系
1	PWR-UO2
2	PWR-MOX
3	BWR-UO2-V0
4	BWR-UO2-V40
5	BWR-UO2-V70
6	BWR-MOX-V0
7	BWR-MOX-V40
8	BWR-MOX-V70

2.3 比較条件

2.3.1 燃焼条件

前節で述べたピンセル体系について、線出力を 179W/cm とし、45GWD/t まで燃焼させた。燃焼ステップは GWD/t 単位で 0.1、1.0、2.5、5.0、7.5、10.0、12.5、15.0、17.5、20.0、22.5、25.0、27.5、30.0、32.5、35.0、37.5、40.0、42.5、45.0 に区切った。

2.3.2 断面積ライブラリ

MVP-BURN による燃焼計算に先立って、ART を使用して必要な固定温度ライブラリを作成した。MVP 計算に必要な連続エネルギー断面積ライブラリは、LICEM システムにより核種ごとに作成される。LICEM システムは任意の温度に対する断面積ライブラリを作成出来るが、非分離共鳴領域を断面積確率テーブルにより扱うため、これに要する計算時間は膨大なものとなる。MVP では、常温ベースで LICEM により作成された任意温度ライブラリを、Doppler Broadening させるとともに、離散温度点に対する断面積確率テーブル及び熱散乱断面積の温度内装処理を行って、ユーザーが必要な任意温度ライブラリを高速・高精度に作成するユーティリティコード ART を開発してこの問題に対処している。ART と同じ機能は、MVP コード本体にも内蔵されおり、物質温度の指定を行えば、輸送計算に先立ち、必要なライブラリが自動作成されることになっている。

MVP-BURN と CBZ/Burner では、多群断面積データとして、評価済み核データファイル JENDL-4.0[5]に基づいたものを読み込んでおり、この点で両者は整合している。

2.3.3 燃焼チェーンモデル

燃焼計算に必要なデータは、燃焼チェーンデータで与えられる。このデータには、半減期などの崩壊データや、核分裂収率データ、中性子核反応の分岐比データが収録されている。MVP-BURN では、開発者用チェーン th2cm6fp193bp6T が用意されており、本研究ではこの燃焼チェーンを用いた。これは、核データ評価がある FP をほとんど含めたものであり、疑似 FP を含んでいない。他のチェーンモデルの検証や疑似 FP を作成するために用いられている。参考として図 2-2 から図 2-4 に文献[4]に示されている開発者用チェーンを示す。

CBZ/Burner の燃焼計算で用いる燃焼チェーンは「BurnupChain」クラスで定義されたものを使用した。重核種によるチェーンは MVP-BURN と同様の 28 核種のものを使い、FP のチェーンデータを外部ファイルから読み込んでいる。なお、FP については MVP-BURN と同様に 193 の FP を考慮したモデルであり、また疑似 FP を含んでいない。

崩壊・収率データについては、CBZ/Burner は JENDL/FPD-2011、FPY-2011 に基づくデータを使っているが、MVP-BURN とは必ずしも同じデータを用いていないため、崩壊・収率データで CBZ/Burner と MVP-BURN とが整合がとれていない部分がある。

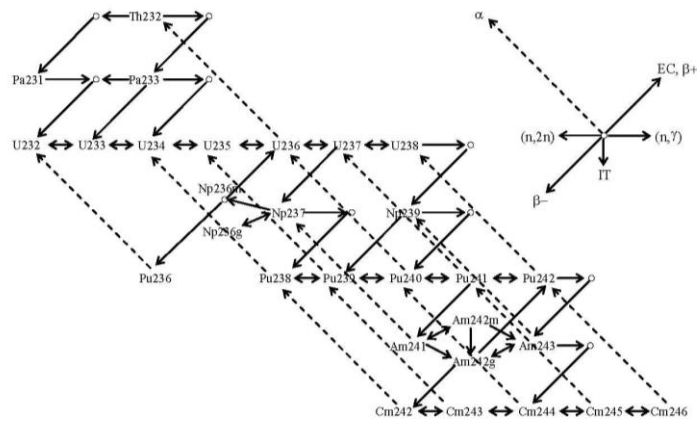


図 2-2 MVP-BURN の開発者用重核種チェーン



図 2-3 MVP-BURN の開発者用 FP チェーン(次頁に続く)

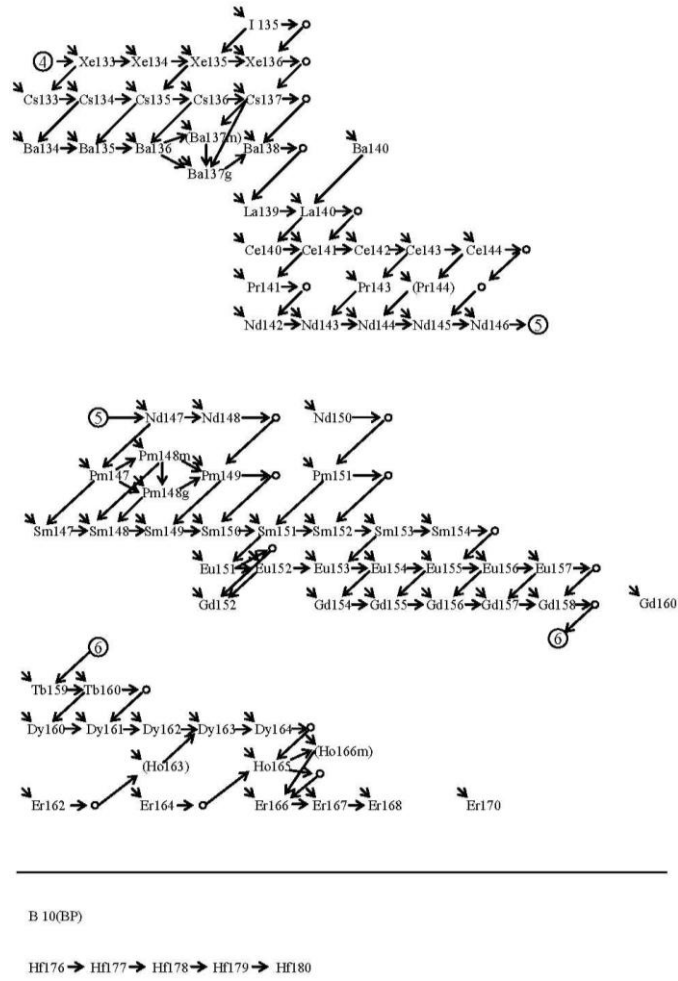


図 2-4 MVP-BURN の開発者用 FP チェーン (前頁から続く)

第3章 解析結果

3.1 無限中性子増倍率と反応度

まず、MVP-BURN と CBZ/Burner の計算結果について、無限中性子増倍率について比較した結果を図 3-1、図 3-2 に示す。比較の対象体系は、PWR-UO₂ と PWR-MOX の 2 体系とした。

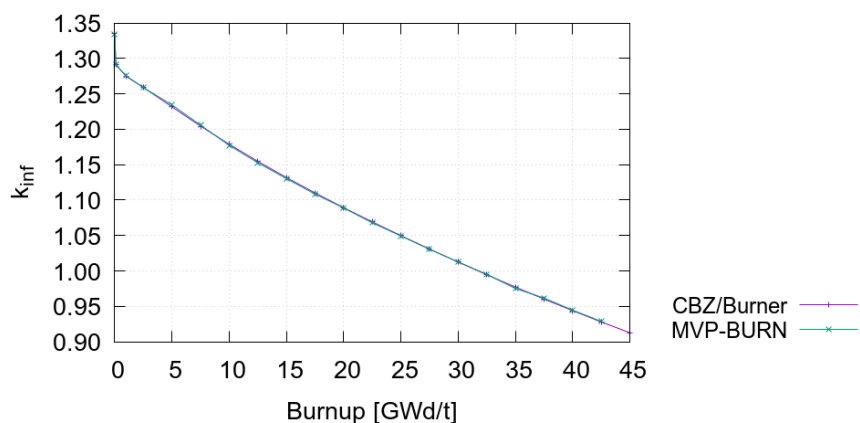


図 3-1 PWR-UO₂ についての無限中性子増倍率の比較

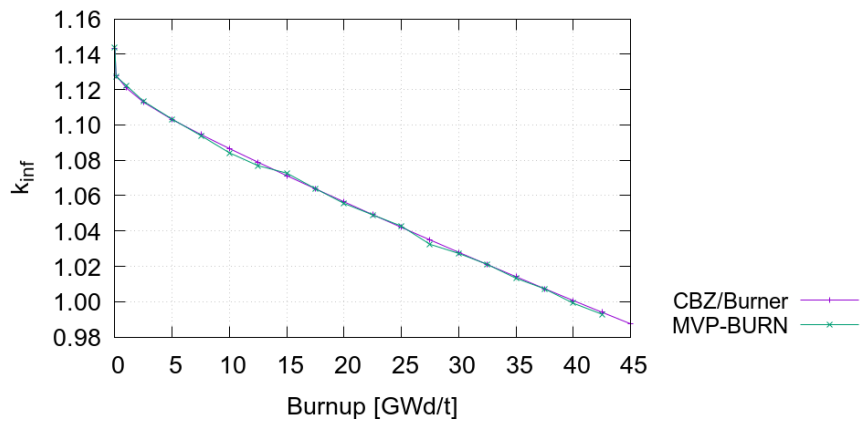


図 3-2 PWR-MOX についての無限中性子増倍率の比較

次に、無限中性子増倍率の差異を反応度単位で計算した。反応度 ρ は、以下の式で求められる。

$$\rho = 1 - 1/k_{inf}$$

反応度単位の無限増倍率の誤差を図 3-3、図 3-4 に示す。図の誤差棒は MVP-BURN の統計誤差を表す。縦軸は以下の式で表される。添え字の c は CBZ/Burner、 m は MVP-BURN である。

$$\frac{k_{inf_c} - k_{inf_m}}{k_{inf_c} k_{inf_m}} = \rho_c - \rho_m$$

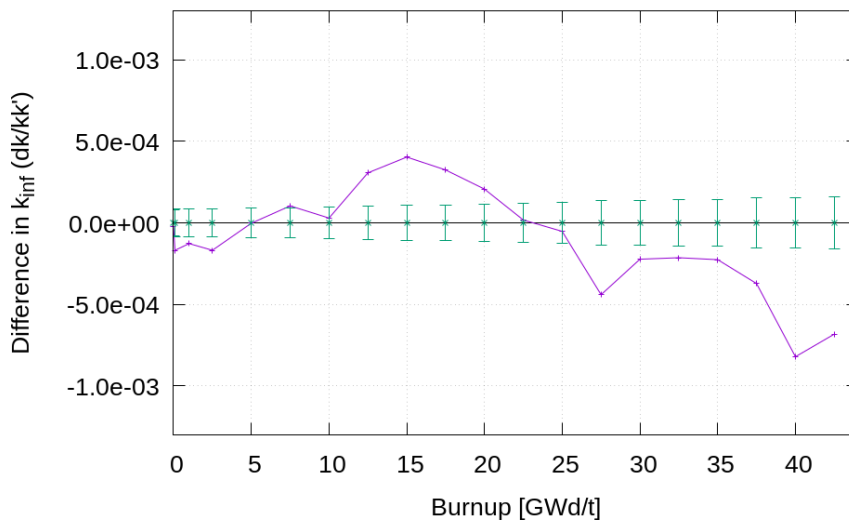


図 3-3 PWR-UO2 の無限増倍率における誤差

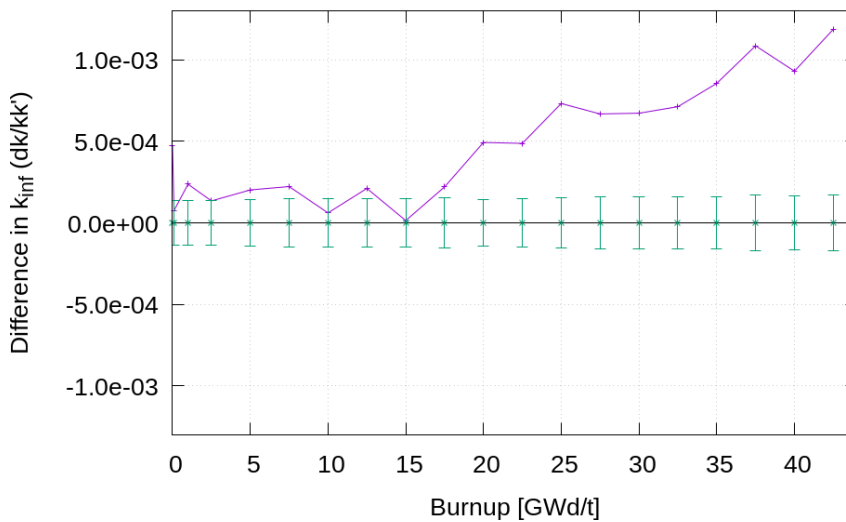


図 3-4 PWR-MOX の無限増倍率における誤差

反応度誤差は0.1%以内が望ましいとされている。PWR-MOXで、20GWD/t付近で誤差が大きくなり始め、燃焼末期には誤差が0.1%に達した。

3.2 核種数密度

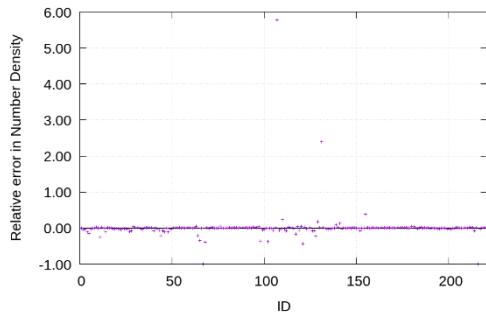
3.2.1 燃焼度点での数密度誤差

PWR-UO₂、PWR-MOXについて、20GWD/tおよび40GWD/t時点での28の重核種と193のFPの核種数密度の相対誤差を調べた。図3-5、図3-6にそれぞれの体系について各燃焼度点での核種数密度の相対誤差を示す。相対誤差はMVP-BURNの値を真値として以下の式で表される。

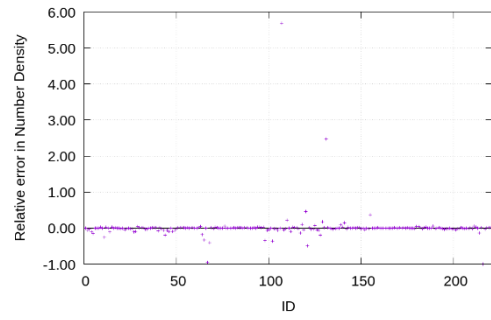
$$(\text{数密度相対誤差}) = \frac{(\text{CBZ/Burner での数密度誤差}) - (\text{MVP - BURN での数密度誤差})}{(\text{MVP - BURN での数密度誤差})}$$

それぞれ①②③は同じグラフを示しているが、y軸方向の縮尺が異なったものである。IDについては重核種、FPの順に、原子番号にならって機械的につけたものである。IDに対応する核種、相対誤差の数値を表3-1に示す。

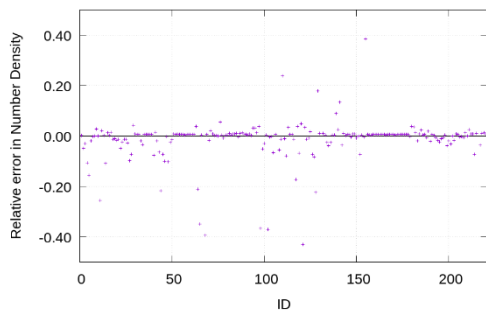
Er-162については、CBZ/Burnerにおいては数密度がゼロであった。また、大きな誤差として表れているのは、Te-129mとSn-119mである。これらについては、CBZ/BurnerとMVP-BURNにおいて、使用している崩壊・収率データが違うことに起因していると考えられる。



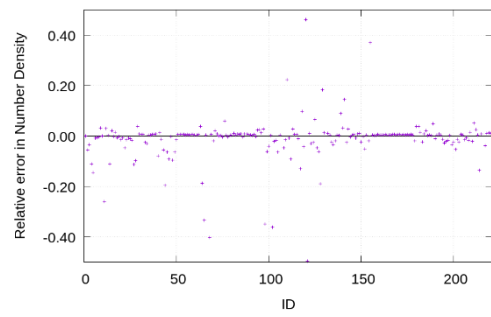
20GWD/t①



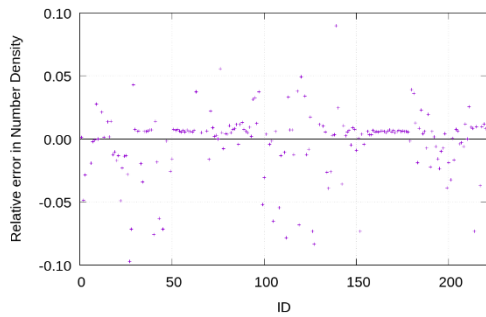
40GWD/t①



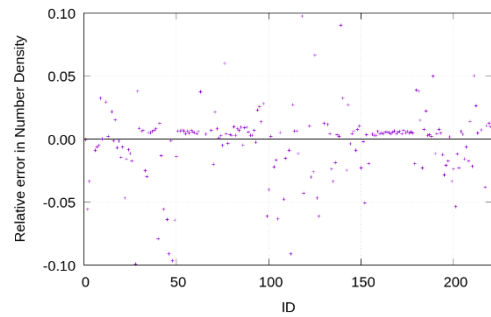
20GWD/t②



40GWD/t②



20GWD/t③



40GWD/t③

図 3-5 PWR-UO2 の各燃焼度点での数密度相対誤差

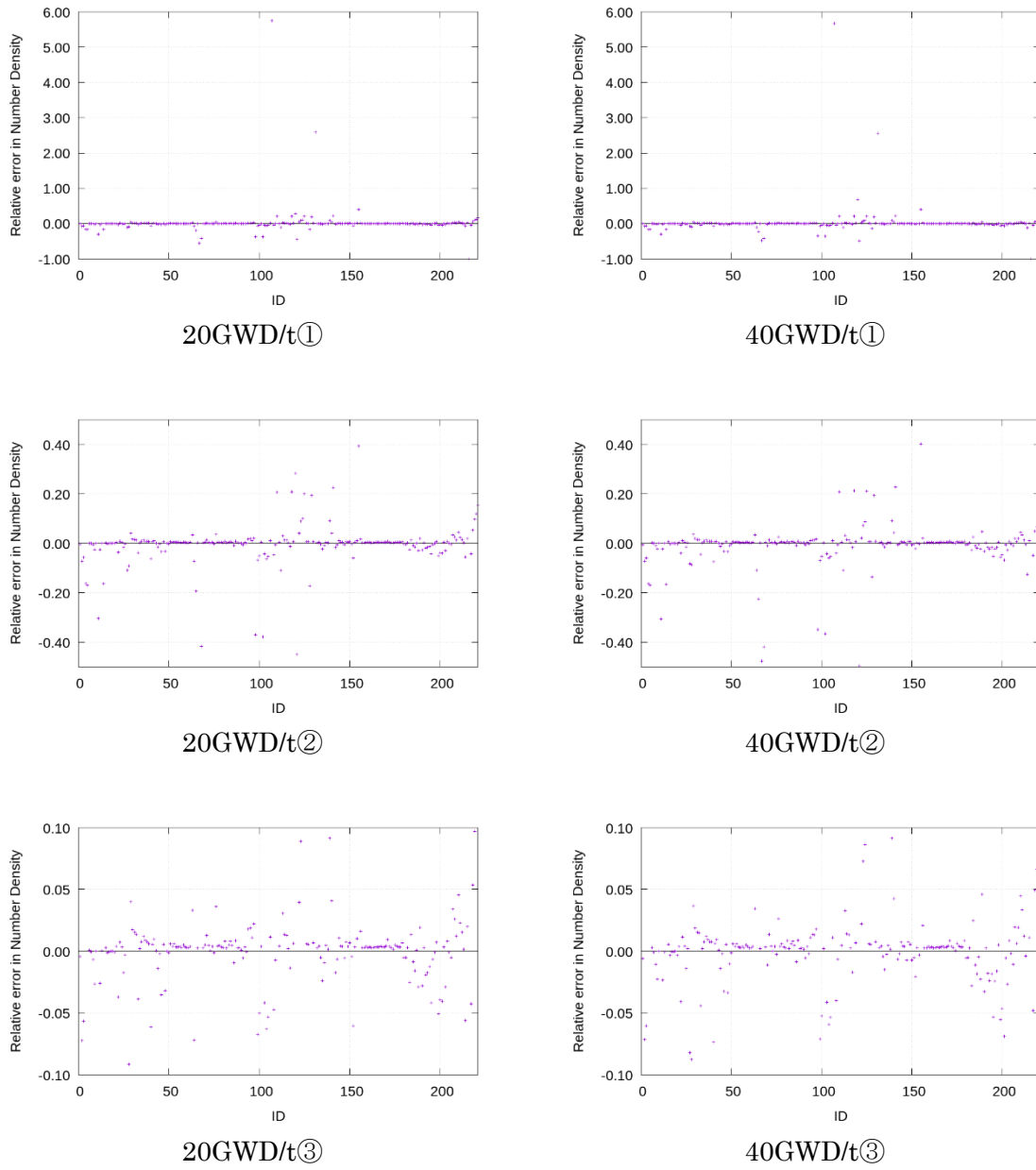


図 3-6 PWR-MOX の各燃焼度点での数密度相対誤差

表 3-1 各核種の燃焼度点での数密度相対誤差

ID	Nuclide	PWR-UO2(20GWD/t)	PWR-UO2(40GWD/t)	PWR-MOX(20GWD/t)	PWR-MOX(40GWD/t)
1	TH232	1.16E-03	-4.88E-04	-4.27E-03	-5.95E-03
2	PA231	-4.84E-02	-5.59E-02	-7.22E-02	-7.15E-02
3	PA233	-2.87E-02	-3.36E-02	-5.65E-02	-6.04E-02
4	U0232	-1.07E-01	-1.10E-01	-1.62E-01	-1.64E-01
5	U0233	-1.56E-01	-1.46E-01	-1.70E-01	-1.71E-01
6	U0234	-1.93E-02	-9.07E-03	8.15E-04	2.91E-03
7	U0235	-2.06E-03	-6.50E-03	-4.47E-04	-9.95E-04
8	U0236	-1.05E-03	-4.93E-03	-6.63E-03	-1.07E-02
9	U0237	2.77E-02	3.21E-02	-2.65E-02	-2.25E-02
10	U0238	-1.03E-04	-1.95E-04	-1.10E-04	-2.03E-04
11	NP236	-2.56E-01	-2.59E-01	-3.04E-01	-3.06E-01
12	NP237	2.14E-02	2.95E-02	-2.60E-02	-2.35E-02
13	NP239	1.29E-03	1.96E-03	5.20E-04	-9.27E-04
14	PU236	-1.08E-01	-1.10E-01	-1.64E-01	-1.65E-01
15	PU238	1.35E-02	2.15E-02	2.99E-03	5.41E-03
16	PU239	1.66E-03	-1.29E-03	-1.12E-03	-3.46E-03
17	PU240	1.42E-02	1.54E-02	-2.91E-04	-4.40E-04
18	PU241	-1.25E-02	-6.72E-03	8.22E-05	-4.80E-04
19	PU242	-1.04E-02	-1.65E-03	-4.07E-05	1.70E-04
20	AM241	-1.71E-02	-1.46E-02	-7.95E-04	-3.35E-03
21	AM242	-1.31E-02	-6.44E-03	3.90E-03	3.93E-03
22	AM242M	-4.88E-02	-4.67E-02	-3.71E-02	-4.09E-02
23	AM243	-2.28E-02	-1.58E-02	7.43E-03	1.15E-02
24	CM242	-1.35E-02	-8.47E-03	3.34E-03	4.16E-03
25	CM243	-1.33E-02	-1.14E-02	-1.74E-02	-1.40E-02
26	CM244	-2.80E-02	-1.75E-02	-2.95E-03	2.01E-03
27	CM245	-9.69E-02	-1.12E-01	-1.09E-01	-8.22E-02
28	CM246	-7.16E-02	-9.90E-02	-9.16E-02	-8.78E-02
29	GE073	4.30E-02	3.78E-02	3.99E-02	3.66E-02
30	GE074	7.86E-03	8.49E-03	1.75E-02	1.89E-02
31	GE076	6.02E-03	5.79E-03	1.51E-02	1.54E-02
32	AS075	6.31E-03	6.69E-03	1.38E-02	1.51E-02
33	SE076	-1.97E-02	-2.52E-02	-3.89E-02	-4.42E-02
34	SE077	-3.41E-02	-2.98E-02	2.01E-03	2.20E-03
35	SE078	5.88E-03	5.10E-03	7.66E-03	7.70E-03
36	SE079	5.74E-03	5.09E-03	1.18E-02	1.20E-02
37	SE080	6.47E-03	6.15E-03	9.13E-03	9.32E-03
38	SE082	7.21E-03	6.61E-03	7.54E-03	7.56E-03
39	BR081	7.15E-03	8.11E-03	6.13E-03	7.52E-03
40	KR082	-7.59E-02	-7.90E-02	-6.13E-02	-7.37E-02
41	KR083	1.41E-02	1.25E-02	5.71E-03	6.38E-03
42	KR084	-1.83E-02	-1.34E-02	9.77E-03	9.34E-03
43	KR085	-6.31E-02	-5.57E-02	4.34E-04	8.33E-04
44	KR086	-2.17E-01	-1.97E-01	-1.39E-02	-1.39E-02
45	RB085	-7.14E-02	-6.37E-02	-2.29E-03	-2.00E-03
46	RB086	-1.00E-01	-9.08E-02	-3.51E-02	-3.25E-02
47	RB087	-1.91E-03	-1.37E-03	5.52E-03	5.45E-03
48	SR086	-1.03E-01	-9.67E-02	-3.20E-02	-3.36E-02
49	SR087	-2.55E-02	-6.42E-02	0.00E+00	-1.03E-02
50	SR088	-1.56E-02	-1.42E-02	-1.26E-03	-1.34E-03

ID	Nuclide	PWR-UO2(20GWD/t)	PWR-UO2(40GWD/t)	PWR-MOX(20GWD/t)	PWR-MOX(40GWD/t)
51	SR089	7.48E-03	6.34E-03	6.00E-03	5.90E-03
52	SR090	6.82E-03	6.35E-03	3.96E-03	3.85E-03
53	Y0089	7.52E-03	7.16E-03	5.78E-03	5.74E-03
54	Y0090	6.50E-03	6.24E-03	3.56E-03	3.49E-03
55	Y0091	5.40E-03	4.21E-03	3.22E-03	3.05E-03
56	ZR090	6.62E-03	6.47E-03	3.71E-03	3.65E-03
57	ZR091	5.37E-03	4.50E-03	2.85E-03	2.35E-03
58	ZR092	7.04E-03	6.96E-03	5.00E-03	5.20E-03
59	ZR093	6.08E-03	5.73E-03	3.47E-03	3.72E-03
60	ZR094	5.94E-03	5.03E-03	3.13E-03	2.69E-03
61	ZR095	5.42E-03	4.29E-03	2.80E-03	2.71E-03
62	ZR096	6.79E-03	5.95E-03	3.85E-03	3.65E-03
63	NB093M	3.76E-02	3.74E-02	3.32E-02	3.43E-02
64	NB093	-2.11E-01	-1.87E-01	-7.17E-02	-1.08E-01
65	NB094	-3.48E-01	-3.35E-01	-1.93E-01	-2.26E-01
66	NB095	5.16E-03	4.02E-03	2.44E-03	2.33E-03
67	MO092	-9.94E-01	-9.58E-01	-5.49E-01	-4.76E-01
68	MO094	-3.94E-01	-4.02E-01	-4.17E-01	-4.19E-01
69	MO095	6.42E-03	6.66E-03	2.66E-03	3.23E-03
70	MO096	-1.62E-02	-2.00E-02	5.09E-03	-1.11E-02
71	MO097	2.19E-02	2.12E-02	1.26E-02	1.35E-02
72	MO098	8.82E-03	8.06E-03	4.50E-03	4.38E-03
73	MO099	2.08E-03	1.06E-03	4.13E-04	1.05E-04
74	MO100	2.79E-03	2.70E-03	3.75E-03	3.68E-03
75	TC099	-1.43E-04	-5.03E-03	-1.32E-03	-2.35E-03
76	RU100	5.57E-02	5.98E-02	3.62E-02	2.63E-02
77	RU101	4.97E-03	4.45E-03	4.05E-03	3.73E-03
78	RU102	-7.55E-03	-3.49E-03	4.67E-03	5.93E-03
79	RU103	4.17E-03	3.25E-03	3.54E-03	3.42E-03
80	RU104	3.90E-03	2.78E-03	2.85E-03	2.69E-03
81	RU105	1.06E-02	9.69E-03	8.10E-03	8.43E-03
82	RU106	4.91E-03	3.15E-03	2.42E-03	2.27E-03
83	RH103	7.50E-03	8.22E-03	4.88E-03	5.91E-03
84	RH105	8.25E-03	6.90E-03	8.05E-03	8.03E-03
85	RH106	1.14E-02	9.38E-03	4.83E-03	4.80E-03
86	PD104	-4.22E-03	-4.83E-03	-9.36E-03	-8.72E-03
87	PD105	1.14E-02	8.89E-03	8.71E-03	9.09E-03
88	PD106	1.32E-02	9.52E-03	2.52E-03	2.27E-03
89	PD107	7.75E-03	5.51E-03	2.80E-03	2.38E-03
90	PD108	5.89E-03	3.16E-03	8.97E-04	1.52E-03
91	PD110	5.24E-03	2.82E-03	-5.45E-03	-5.67E-03
92	AG107	9.43E-03	6.68E-03	3.33E-03	3.73E-03
93	AG109	1.99E-03	-2.71E-03	-6.01E-04	-2.06E-03
94	AG110M	3.16E-02	2.31E-02	1.78E-02	1.08E-02
95	CD110	3.27E-02	2.54E-02	1.87E-02	1.35E-02
96	CD111	1.24E-02	1.38E-02	1.10E-02	1.32E-02
97	CD112	3.73E-02	2.80E-02	2.19E-02	1.78E-02
98	CD113M	-3.66E-01	-3.50E-01	-3.70E-01	-3.49E-01
99	CD113	-5.21E-02	-6.12E-02	-6.73E-02	-7.09E-02
100	CD114	-3.07E-02	-3.99E-02	-5.04E-02	-5.24E-02

ID	Nuclide	PWR-UO2(20GWD/t)	PWR-UO2(40GWD/t)	PWR-MOX(20GWD/t)	PWR-MOX(40GWD/t)
101	CD116	3.68E-03	2.05E-03	3.95E-03	2.27E-03
102	IN113	-3.69E-01	-3.62E-01	-3.79E-01	-3.66E-01
103	IN115	-4.27E-03	-2.20E-02	-4.18E-02	-4.15E-02
104	SN116	-1.70E-03	-1.67E-02	-6.29E-02	-5.92E-02
105	SN117	-6.52E-02	-6.33E-02	-5.34E-02	-5.38E-02
106	SN118	5.92E-03	4.89E-03	1.14E-02	1.12E-02
107	SN119M	5.77E+00	5.69E+00	5.75E+00	5.68E+00
108	SN119	-5.44E-02	-4.77E-02	-4.73E-02	-4.02E-02
109	SN120	-1.32E-02	-1.53E-02	-7.10E-03	-6.29E-03
110	SN121M	2.39E-01	2.24E-01	2.06E-01	2.08E-01
111	SN121	-1.04E-02	-8.96E-03	4.06E-03	4.80E-03
112	SN122	-7.83E-02	-9.11E-02	-1.11E-01	-1.09E-01
113	SN123	3.31E-02	2.74E-02	3.08E-02	3.27E-02
114	SN124	7.04E-03	6.44E-03	1.36E-02	1.40E-02
115	SN126	7.25E-03	6.37E-03	1.28E-02	1.30E-02
116	SB121	-1.21E-02	-1.16E-02	2.30E-03	2.65E-03
117	SB123	-1.72E-01	-1.30E-01	-1.35E-02	-1.70E-02
118	SB124	3.78E-02	9.73E-02	2.08E-01	2.12E-01
119	SB125	-6.79E-02	-4.32E-02	6.57E-03	6.70E-03
120	SB126M	4.95E-02	4.61E-01	2.82E-01	6.82E-01
121	SB126	-4.29E-01	-4.96E-01	-4.49E-01	-4.96E-01
122	TE122	3.41E-02	1.02E-02	3.95E-02	2.22E-02
123	TE123M	-1.25E-02	-3.02E-02	8.89E-02	7.26E-02
124	TE123	-8.09E-03	-2.61E-02	1.01E-01	8.64E-02
125	TE124	1.75E-02	6.63E-02	1.99E-01	2.10E-01
126	TE125M	-7.33E-02	-4.69E-02	5.77E-03	5.90E-03
127	TE125	-8.33E-02	-6.15E-02	5.50E-03	5.41E-03
128	TE126	-2.24E-01	-1.89E-01	-1.72E-01	-1.37E-01
129	TE127M	1.78E-01	1.82E-01	1.94E-01	1.94E-01
130	TE128	1.15E-02	1.22E-02	6.83E-03	7.53E-03
131	TE129M	2.39E+00	2.47E+00	2.59E+00	2.55E+00
132	TE130	1.01E-02	1.13E-02	2.65E-03	2.93E-03
133	TE132	5.36E-03	4.43E-03	4.33E-03	4.22E-03
134	I0127	-2.63E-02	-2.36E-02	-4.92E-03	-4.18E-03
135	I0129	-3.92E-02	-3.35E-02	-2.40E-02	-1.50E-02
136	I0130	-2.61E-02	-1.87E-02	-9.30E-03	-2.49E-03
137	I0131	3.18E-03	3.32E-03	4.56E-03	4.51E-03
138	I0135	3.32E-03	2.19E-03	1.69E-03	1.52E-03
139	XE126	8.98E-02	9.03E-02	9.15E-02	9.17E-02
140	XE128	2.47E-02	3.22E-02	4.06E-02	4.26E-02
141	XE129	1.34E-01	1.46E-01	2.24E-01	2.27E-01
142	XE130	-3.59E-02	-2.46E-02	-1.76E-02	-6.29E-03
143	XE131	1.06E-02	2.71E-02	-6.57E-03	-1.93E-03
144	XE132	2.39E-03	-4.01E-03	1.05E-02	7.15E-03
145	XE133	5.51E-03	4.48E-03	4.31E-03	4.28E-03
146	XE134	6.64E-03	5.83E-03	3.77E-03	3.65E-03
147	XE135	-4.69E-03	-8.95E-03	-5.61E-03	-7.31E-03
148	XE136	8.79E-03	7.84E-03	7.61E-03	7.70E-03
149	CS133	7.44E-03	1.02E-02	4.00E-03	5.49E-03
150	CS134	-9.05E-03	-2.32E-02	6.75E-03	-7.17E-03

ID	Nuclide	PWR-UO2(20GWD/t)	PWR-UO2(40GWD/t)	PWR-MOX(20GWD/t)	PWR-MOX(40GWD/t)
151	CS135	4.52E-04	-2.17E-03	-4.05E-03	-5.26E-03
152	CS136	-7.31E-02	-5.05E-02	-6.06E-02	-2.06E-02
153	CS137	3.69E-03	3.35E-03	3.22E-03	3.13E-03
154	BA134	-4.05E-03	-1.94E-02	1.03E-02	-3.02E-03
155	BA135	3.86E-01	3.71E-01	3.93E-01	4.03E-01
156	BA136	5.81E-03	3.70E-03	1.63E-02	2.10E-02
157	BA137M	3.29E-03	2.95E-03	2.82E-03	2.73E-03
158	BA137	3.41E-03	3.02E-03	2.82E-03	2.71E-03
159	BA138	6.70E-03	5.92E-03	3.86E-03	3.79E-03
160	BA140	5.66E-03	4.47E-03	3.15E-03	3.02E-03
161	LA139	5.83E-03	5.16E-03	3.25E-03	3.22E-03
162	LA140	5.54E-03	4.27E-03	3.04E-03	2.76E-03
163	CE140	6.32E-03	5.46E-03	3.02E-03	2.83E-03
164	CE141	6.41E-03	5.34E-03	3.34E-03	3.28E-03
165	CE142	5.88E-03	5.07E-03	3.28E-03	3.10E-03
166	CE143	5.33E-03	4.15E-03	3.34E-03	3.22E-03
167	CE144	6.46E-03	5.48E-03	4.17E-03	4.13E-03
168	PR141	7.04E-03	6.34E-03	3.21E-03	3.14E-03
169	PR143	5.60E-03	4.43E-03	3.39E-03	3.33E-03
170	PR144	6.63E-03	5.62E-03	4.45E-03	4.31E-03
171	ND142	4.90E-03	5.85E-03	9.28E-03	8.62E-03
172	ND143	6.07E-03	4.47E-03	3.78E-03	4.02E-03
173	ND144	6.70E-03	6.76E-03	3.12E-03	2.90E-03
174	ND145	5.84E-03	4.91E-03	1.90E-03	3.81E-04
175	ND146	6.42E-03	5.83E-03	5.15E-03	6.31E-03
176	ND147	5.89E-03	4.84E-03	4.38E-03	4.30E-03
177	ND148	6.17E-03	5.40E-03	3.62E-03	3.55E-03
178	ND150	5.53E-03	4.62E-03	3.30E-03	3.30E-03
179	PM147	-1.92E-03	-1.94E-02	6.70E-03	8.35E-03
180	PM148M	3.94E-02	3.88E-02	-5.19E-03	-5.54E-03
181	PM148	3.64E-02	3.78E-02	-5.05E-03	-4.88E-03
182	PM149	1.28E-02	1.48E-02	3.06E-03	2.76E-03
183	PM151	-1.85E-02	-2.28E-02	-2.53E-02	-2.82E-02
184	SM147	8.56E-03	7.75E-03	1.34E-02	2.45E-02
185	SM148	2.32E-02	2.22E-02	-8.37E-03	-1.10E-02
186	SM149	4.33E-03	3.07E-03	-1.57E-02	-1.83E-02
187	SM150	5.85E-03	3.50E-03	8.85E-04	-4.85E-03
188	SM151	-7.11E-03	2.23E-03	-2.87E-02	-2.25E-02
189	SM152	1.97E-02	4.98E-02	1.90E-02	4.61E-02
190	SM153	-2.21E-02	-1.13E-02	-2.79E-02	-3.26E-02
191	SM154	5.83E-03	4.40E-03	2.79E-03	2.64E-03
192	EU151	1.70E-03	7.76E-03	-1.91E-02	-1.80E-02
193	EU152	-6.03E-03	4.60E-03	-1.75E-02	-2.38E-02
194	EU153	-1.59E-02	-1.22E-02	-1.22E-02	-1.81E-02
195	EU154	-2.34E-02	-2.83E-02	-4.18E-02	-5.32E-02
196	EU155	-9.82E-03	-2.09E-02	-6.29E-03	-2.44E-02
197	EU156	-7.15E-03	-1.74E-02	-6.52E-04	-1.62E-02
198	EU157	4.11E-03	1.76E-03	7.09E-03	4.98E-03
199	GD152	-3.89E-02	-3.37E-02	-5.07E-02	-5.52E-02
200	GD154	-1.89E-02	-2.37E-02	-3.90E-02	-4.64E-02

ID	Nuclide	PWR-UO2(20GWD/t)	PWR-UO2(40GWD/t)	PWR-MOX(20GWD/t)	PWR-MOX(40GWD/t)
201	GD155	-3.25E-02	-5.37E-02	-4.03E-02	-6.90E-02
202	GD156	2.63E-04	-1.20E-02	3.33E-03	-5.41E-03
203	GD157	-1.66E-02	-2.30E-02	-2.87E-02	-2.69E-02
204	GD158	7.76E-03	5.80E-03	8.09E-03	8.70E-03
205	GD160	6.31E-03	3.83E-03	-7.95E-04	-1.58E-03
206	TB159	-3.69E-03	-1.58E-02	-4.96E-03	-1.05E-02
207	TB160	-2.87E-03	-6.56E-03	3.39E-02	1.95E-02
208	DY160	-5.75E-03	-1.75E-02	2.59E-02	6.22E-03
209	DY161	1.20E-02	1.40E-02	1.25E-02	1.91E-02
210	DY162	7.30E-06	-2.19E-02	4.54E-02	4.48E-02
211	DY163	2.54E-02	5.01E-02	2.31E-02	3.35E-02
212	DY164	9.40E-03	2.64E-02	1.55E-02	1.24E-02
213	HO163	8.40E-03	4.57E-03	1.67E-03	-4.00E-03
214	HO165	-7.32E-02	-1.37E-01	-5.60E-02	-1.26E-01
215	HO166M	9.73E-03	7.41E-03	2.01E-02	1.09E-02
216	ER162	-1.00E+00	-1.00E+00	-1.00E+00	-1.00E+00
217	ER164	-3.72E-02	-3.82E-02	-4.27E-02	-4.80E-02
218	ER166	9.93E-03	1.06E-02	5.38E-02	4.93E-02
219	ER167	1.18E-02	1.24E-02	9.71E-02	6.65E-02
220	ER168	8.02E-03	9.73E-03	1.20E-01	9.69E-02
221	ER170	8.99E-03	1.37E-02	1.56E-01	1.22E-01

3.2.2 重要核種の選定

以降の比較は、重核種については 28 核種から Th-232、Pa-231、-233、U-232、-233、Np-236、Pu-236 を除いた 21 核種、FP については文献[6]で重要とされた 51 核種を対象とした。なお、核種数密度が 10^{-10} [個/cm³]よりも小さな核種は不安定性が強い核種であるため、対象から外した。対象核種を表 3-2 に示す。

表 3-2 重要核種

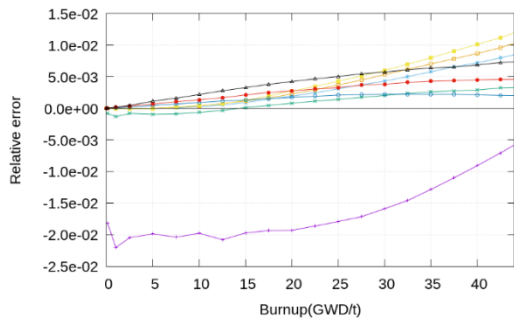
重核種	U-234, -235, -236, -237, -238, Np-237, -239, Pu-238, -239, -240, -241, -242, Am-241, -242, -242m, -243, Cm-242, -243, 244, -245 -246 以上 21 核種
FP	Se-79, Sr-90, Zr-93, Mo-94, -95, -96, -97, -98, -99, -100, Te-99, Ru-100, -101, -102, -103, -104, -105, -106, Rh-103, -105, Pd-104, -105, -106, -107, -108, -110, I-127, -129, -130, -131, -135, Xe-131, -133, -135, Cs-133, -134, -135, -136, -137, Ce-144, Nd-143, -145, -148, Pm-147, Sm-147, -149, -150, -152, Eu-153, Eu-154, Gd-155 以上 51 核種

3.2.3 数密度誤差の燃焼度依存性

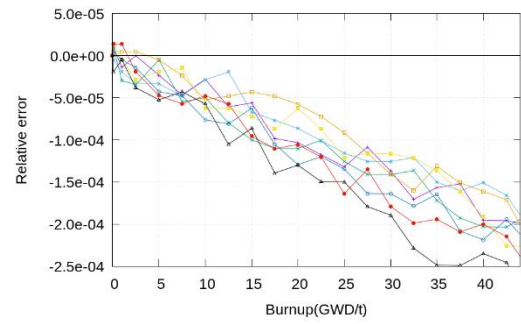
上記 72 核種について、核種数密度の相対誤差の燃焼度依存性を図 3-7 に示す。

ここで、燃焼度が 0GWD/t の時点で誤差が生じているように見える核種があるが、実際には 0.1GWD/t 時点での誤差が反映されているだけであり、0GWD/t 時点では誤差はない。

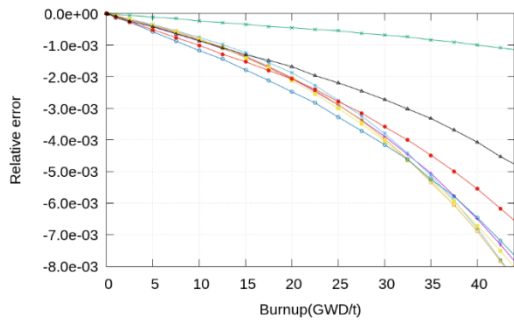
全体的な傾向として、 UO_2 燃料同士や MOX 燃料同士で似たような挙動を示すことが分かった。燃焼初期で誤差が 0 付近で推移する核種と燃焼初期から誤差がある程度発生するものがある。初期組成の時点で存在している核種については前者となり、FP や Np-239 といった燃焼後に発生する核種は後者である。U-234 に着目すると、PWR の 2 体系が燃焼初期から誤差をある程度持っている。一方、BWR の 6 体系に関しては燃焼初期の誤差はほぼゼロと言える。これは BWR に使用する燃料には U-234 が初めから含まれているのに対して、PWR に使用する燃料については U-234 が含まれていないからである。



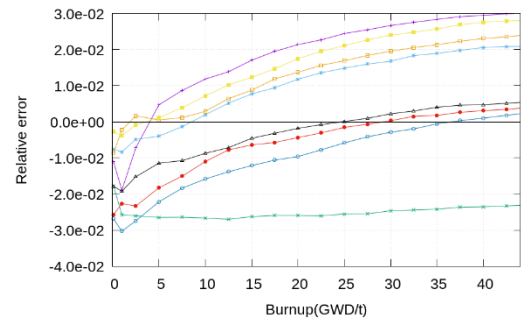
U-234



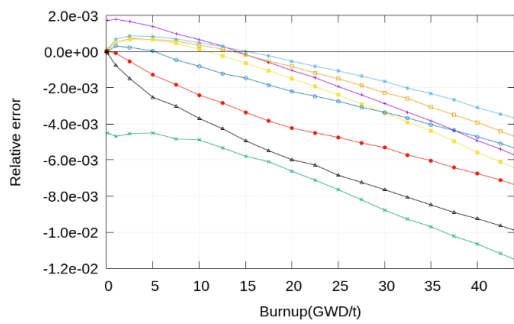
U-238



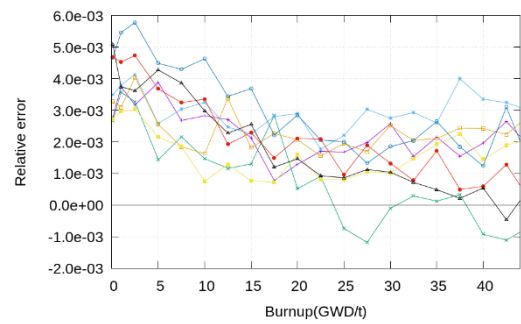
U-235



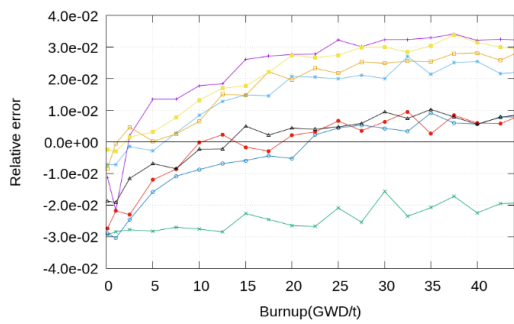
Np-237



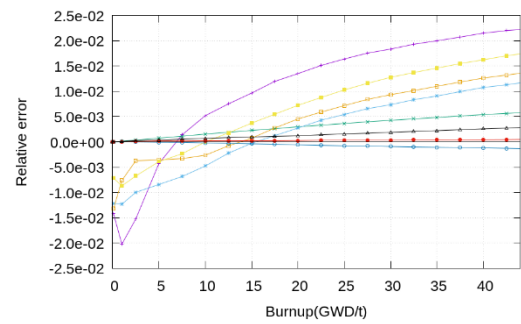
U-236



Np-239



U-237



Pu-238

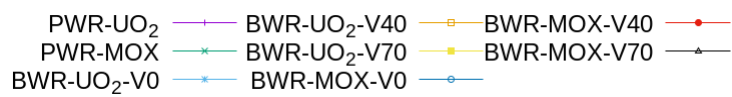
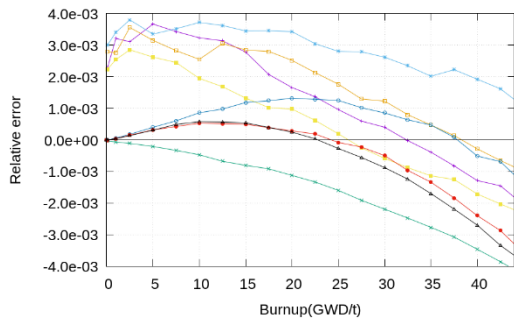
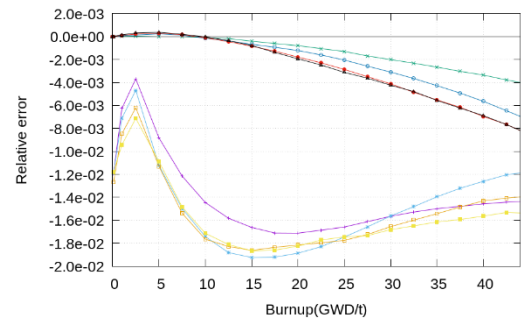


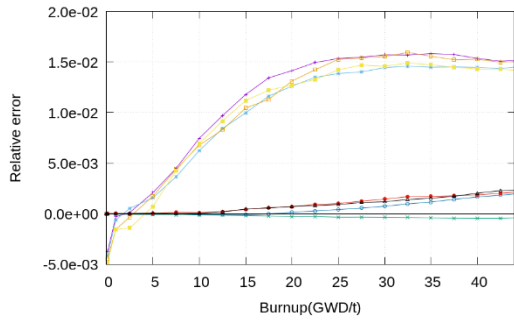
図 3-7 核種数密度の燃焼度依存性(1/9)



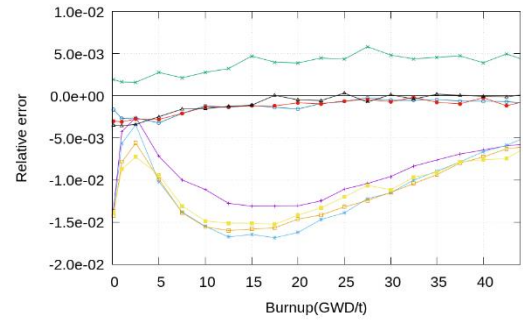
Pu-239



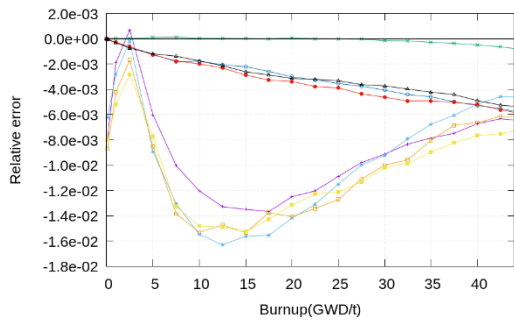
Am-241



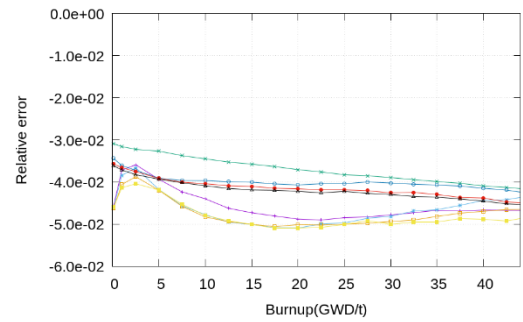
Pu-240



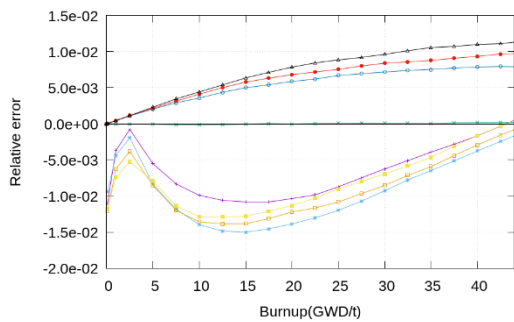
Am-242



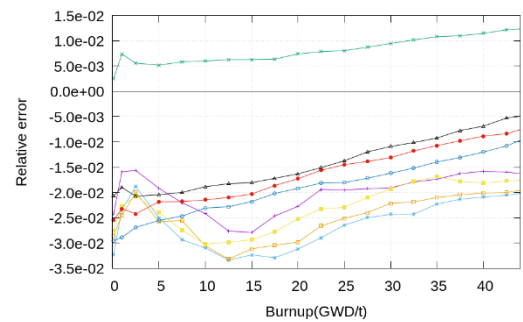
Pu-241



Am-242m



Pu-242



Am-243

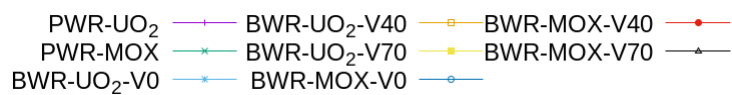
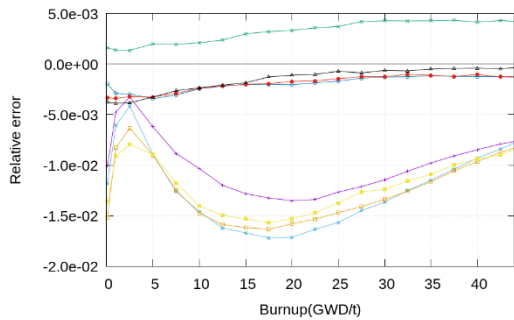
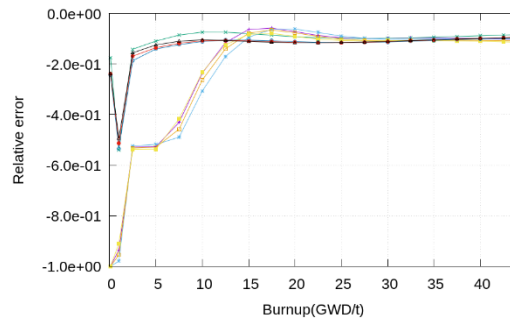


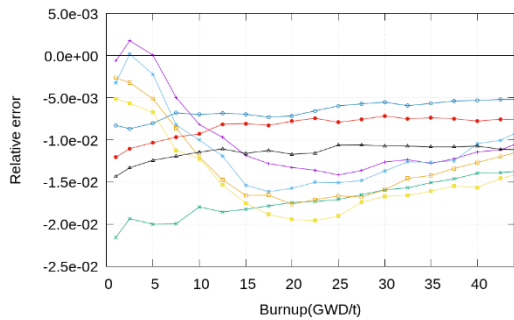
図 3-7 核種数密度の燃焼度依存性(2/9)



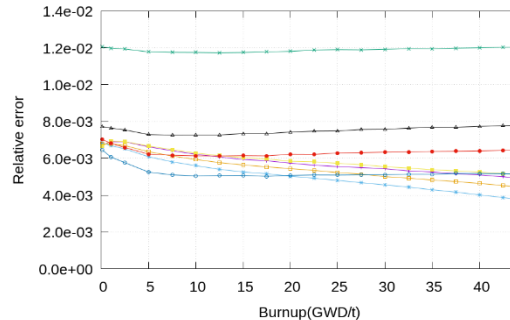
Cm-242



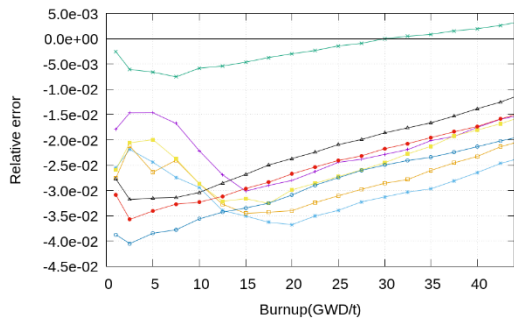
Cm-246



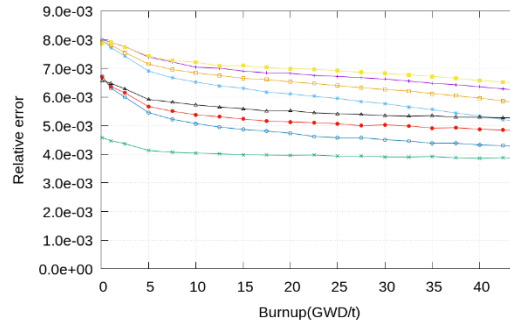
Cm-243



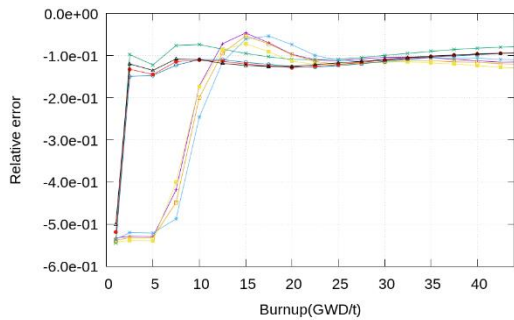
Se-79



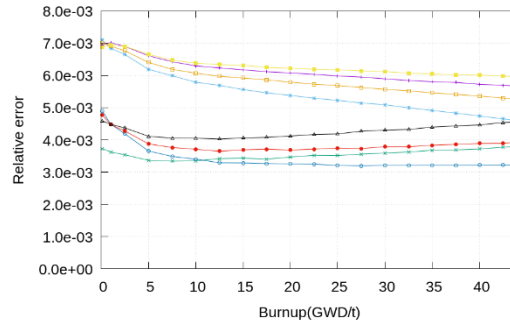
Cm-244



Sr-90



Cm-245



Zr-93

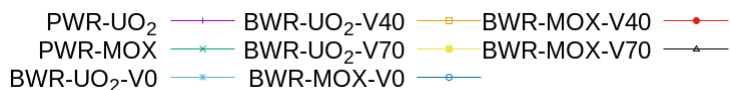
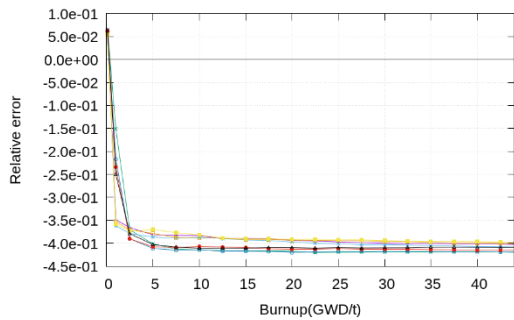
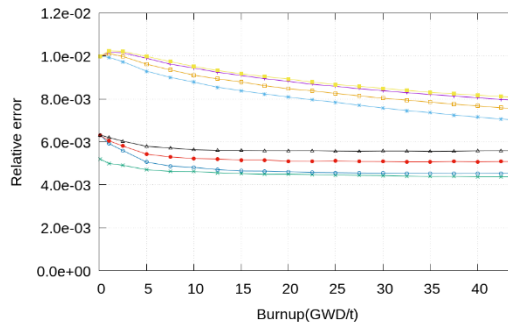


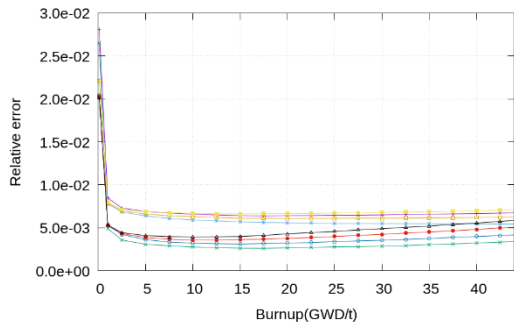
図 3-7 核種数密度の燃焼度依存性 (3/9)



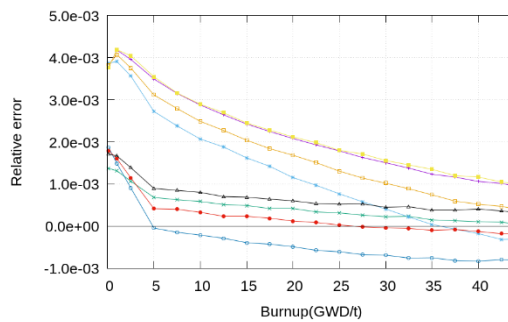
Mo-94



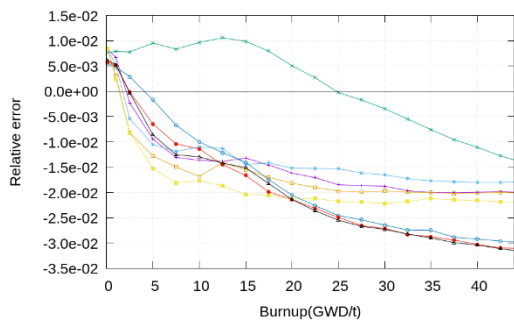
Mo-98



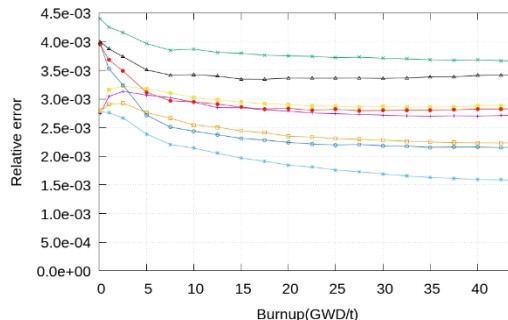
Mo-95



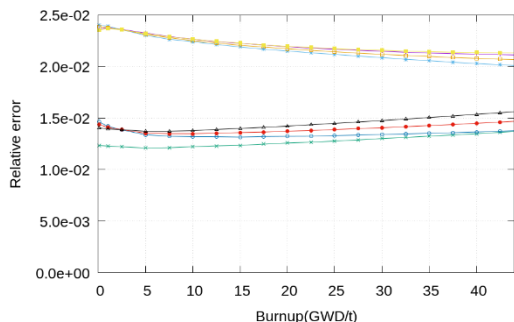
Mo-99



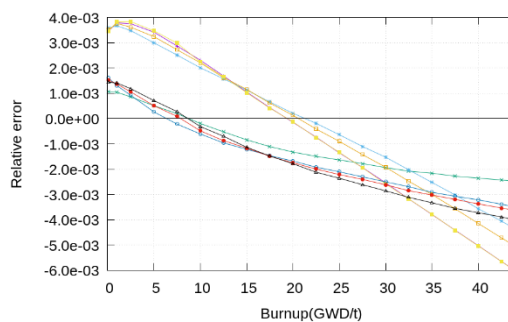
Mo-96



Mo-100



Mo-97



Tc-99

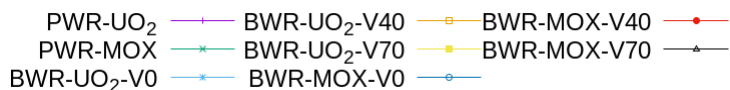
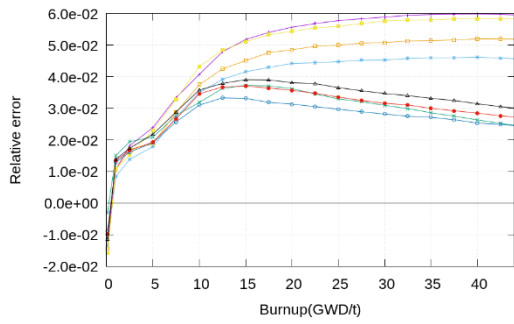
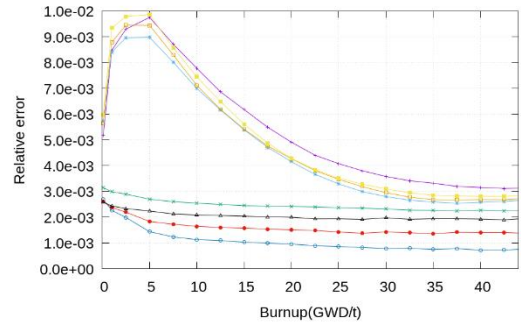


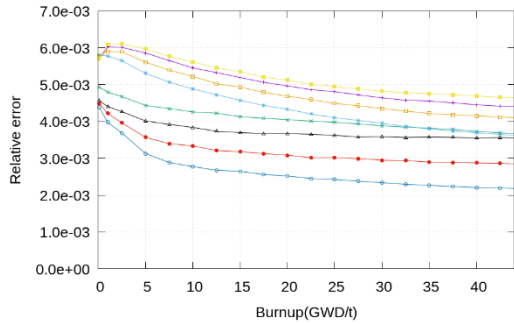
図 3-7 核種数密度の燃焼度依存性 (4/9)



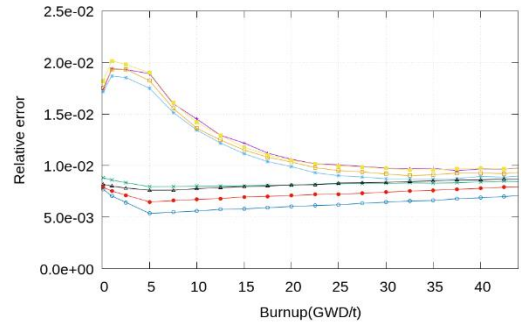
Ru-100



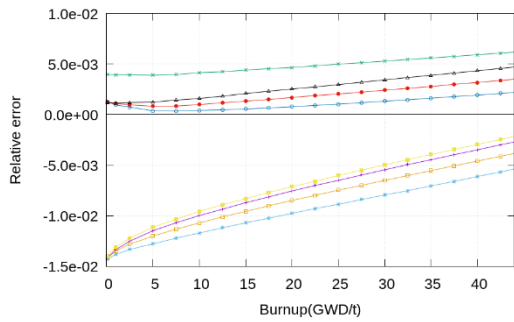
Ru-104



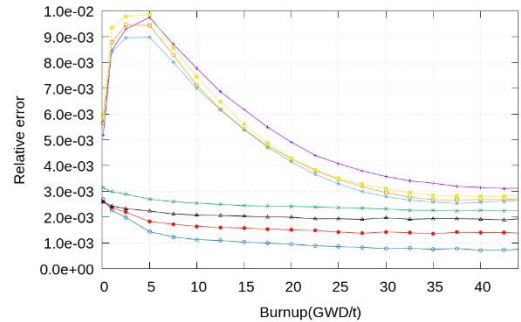
Ru-101



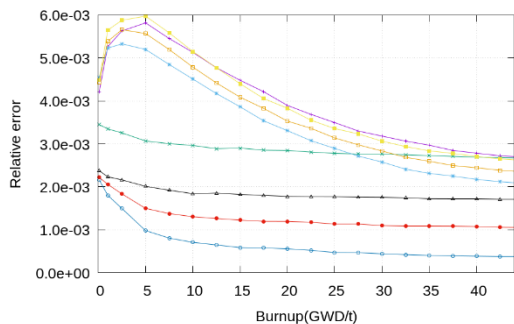
Ru-105



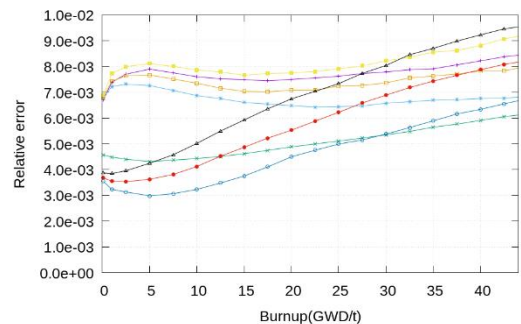
Ru-102



Ru-106



Ru-103



Rh-103

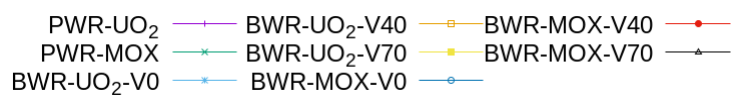
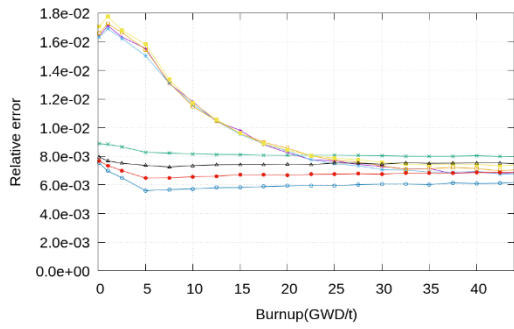
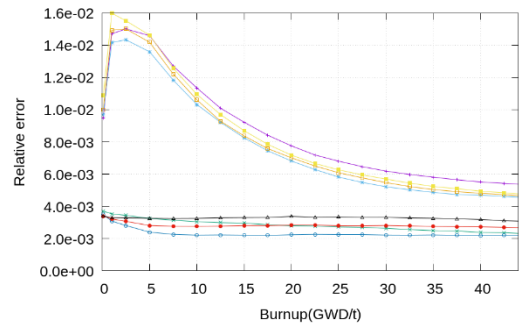


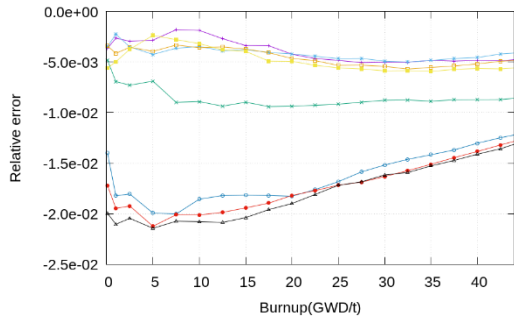
図 3-7 核種数密度の燃焼度依存性 (5/9)



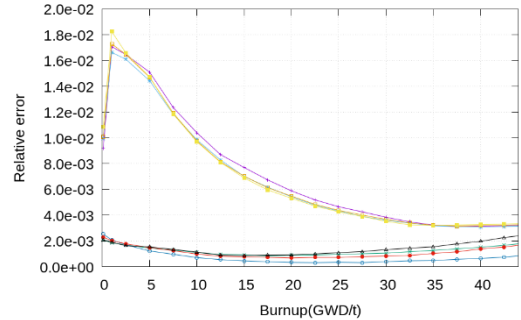
Rh-105



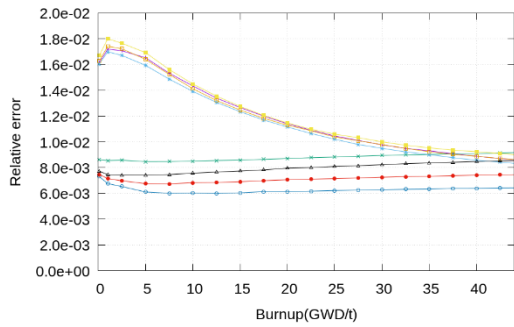
Pd-107



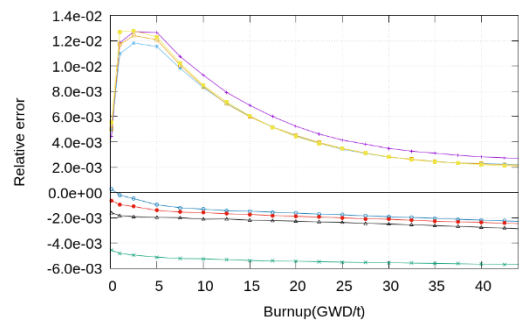
Pd-104



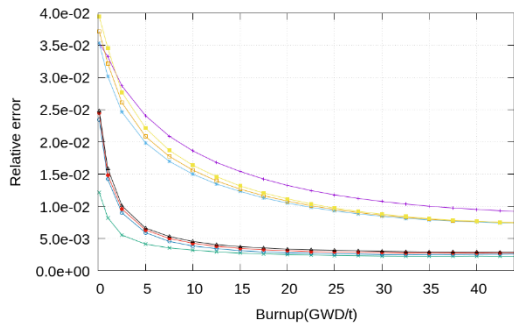
Pd-108



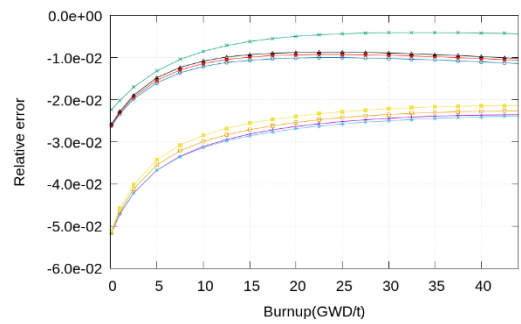
Pd-105



Pd-110



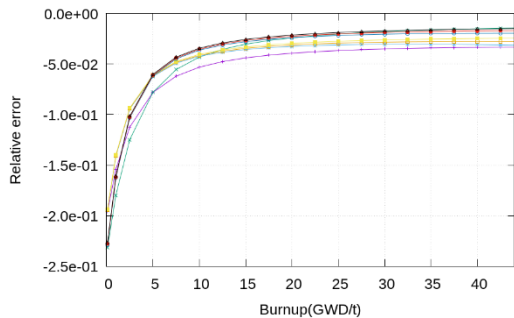
Pd-106



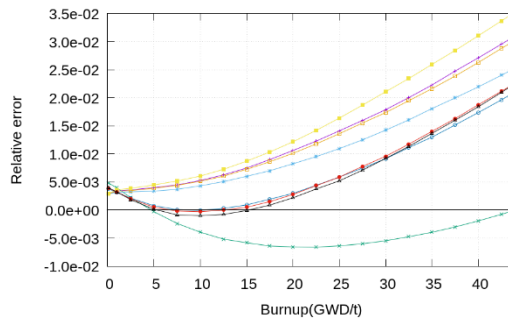
I-127

PWR-UO₂ — BWR-UO₂-V40 — BWR-MOX-V40 — ● —
 PWR-MOX — BWR-UO₂-V70 — BWR-MOX-V70 — ▲ —
 BWR-UO₂-V0 — BWR-MOX-V0 — ○ —

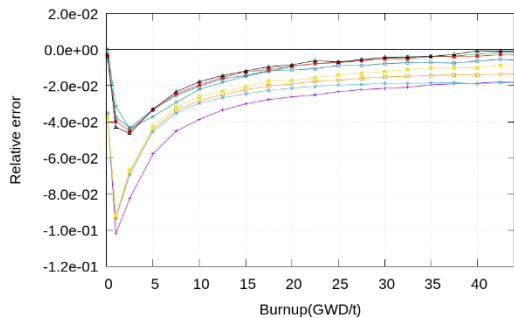
図 3-7 核種数密度の燃焼度依存性 (6/9)



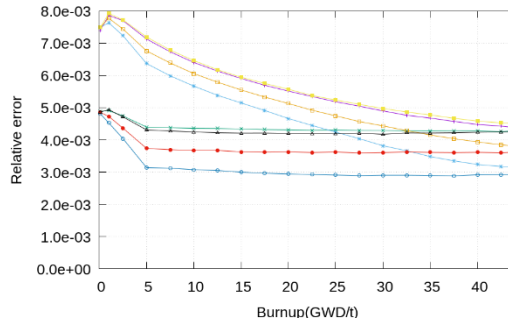
I-129



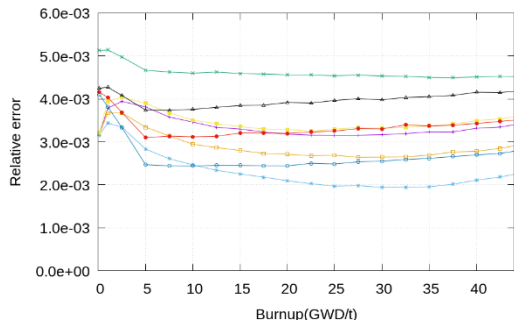
Xe-131



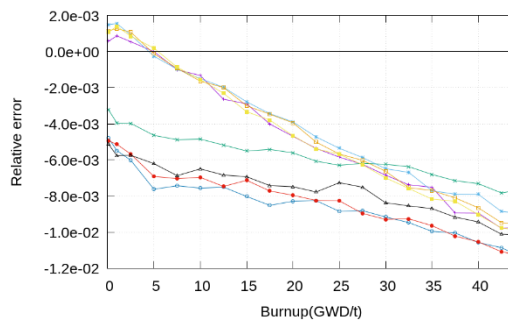
I-130



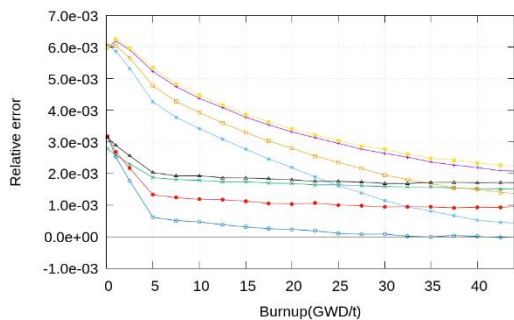
Xe-133



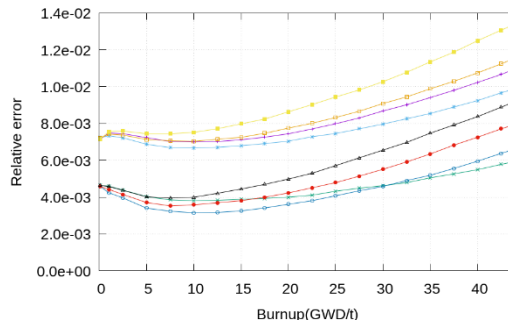
I-131



Xe-135



I-135



Cs-133

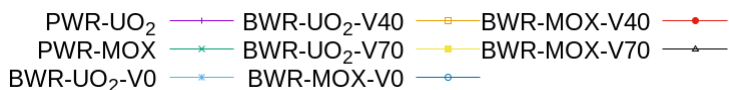
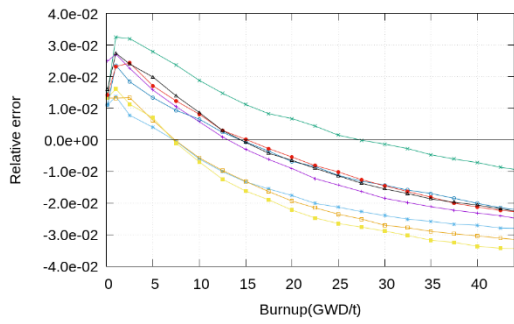
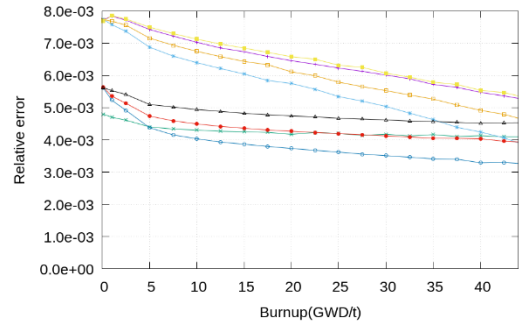


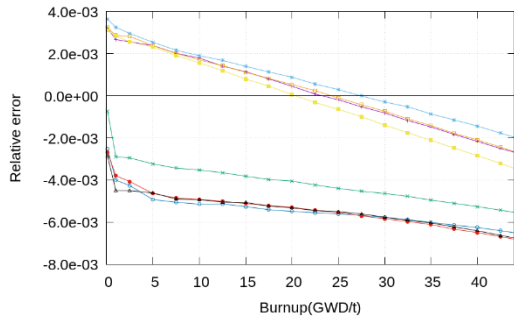
図 3-7 核種数密度の燃焼度依存性 (7/9)



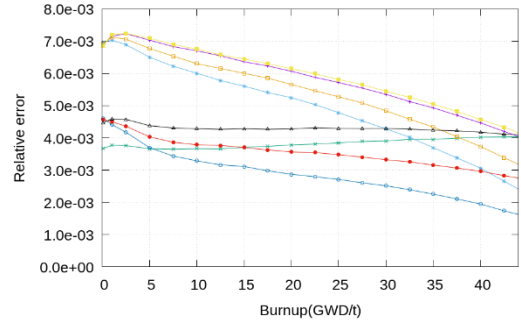
Cs-134



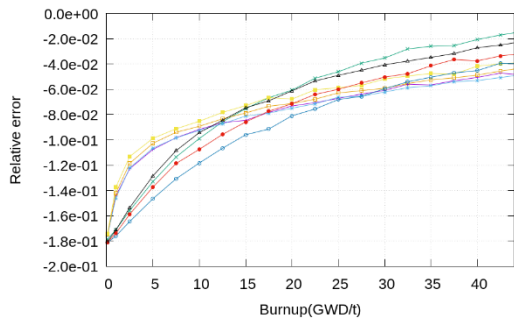
Ce-144



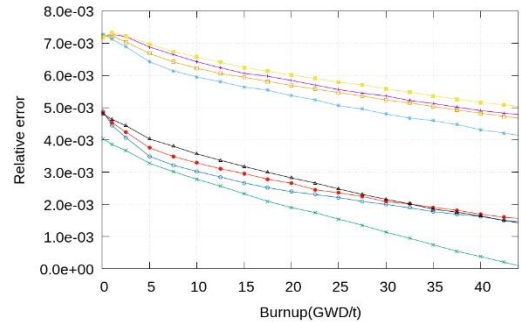
Cs-135



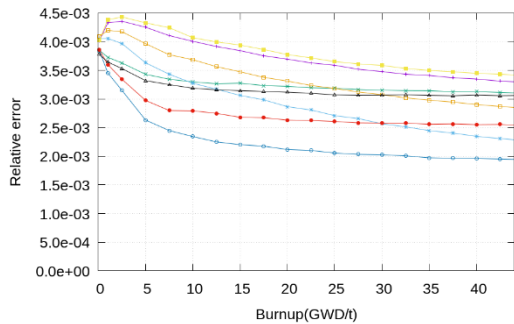
Nd-143



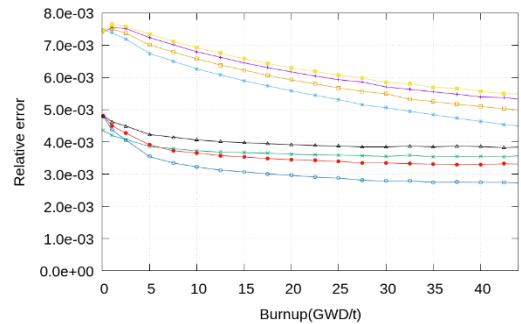
Cs-136



Nd-145



Cs-137



Nd-148

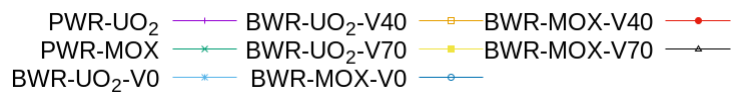
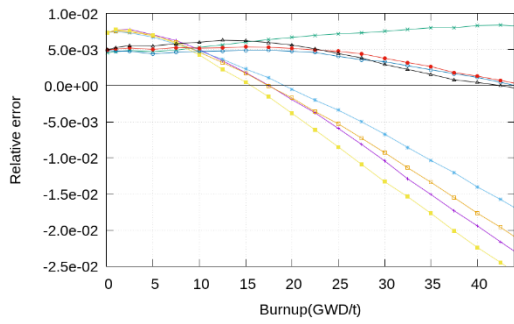
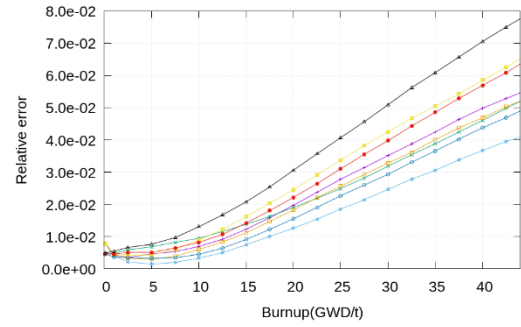


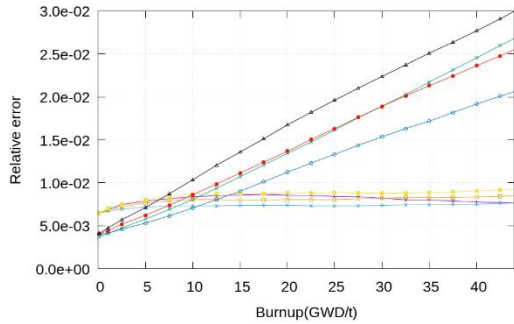
図 3-7 核種数密度の燃焼度依存性 (8/9)



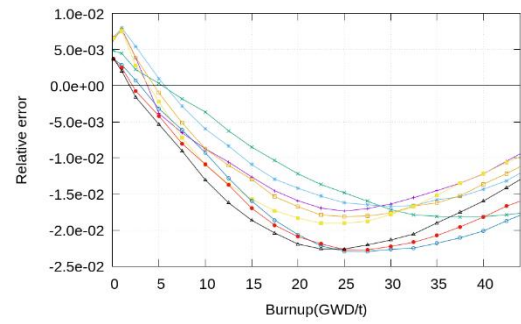
Pm-147



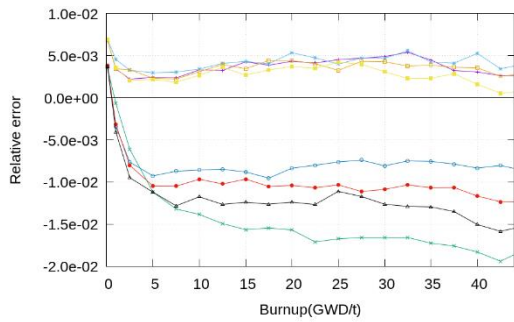
Sm-152



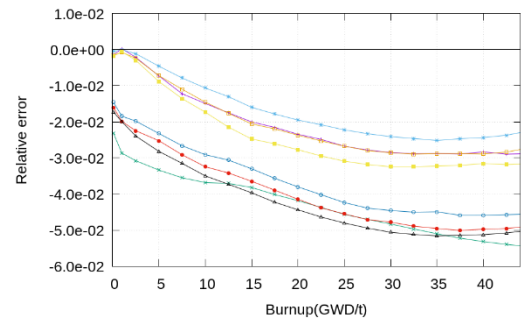
Sm-147



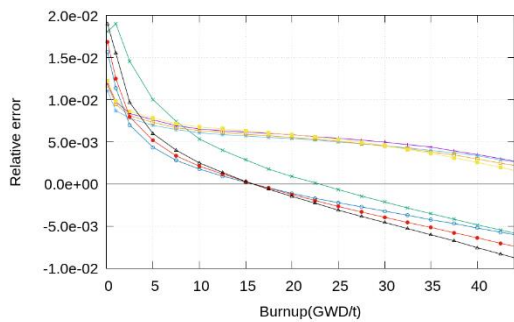
Eu-153



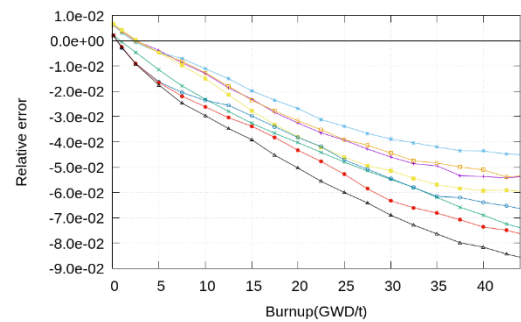
Sm-149



Eu-154



Sm-150



Gd-155

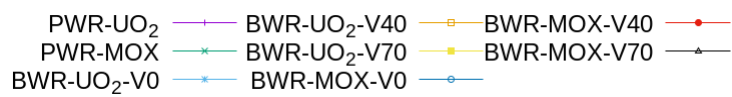


図 3-7 核種数密度の燃焼度依存性 (9/9)

3.3 計算誤差の発生過程

決定論的手法における誤差は離散化誤差によるものだと述べてきた。ここでは、エネルギーの離散化誤差について詳しく説明する。

燃焼計算では、中性子と個々の原子核がどれだけ反応したか（反応率）を定量的に知る必要がある。CBZ/Burner では中性子エネルギーを 107 メッシュ（群）で扱っているため、中性子断面積、中性子束ともに 107 群で与えられる。この場合、核種 i の（微視的）中性子捕獲反応率は、 $\sum_{g=1}^{107} \sigma_g^i \phi_g$ で与えられる。ここで、 σ_g^i は核種 i の g 群の反応断面積、 ϕ_g は g 群の中性子束を示す。

燃焼計算では、一般的に全中性子束 $\Phi = \sum_{g=1}^{107} \phi_g$ を入力として与えるので、反応率を計算するためには、反応率を保存するような「平均」断面積をあらかじめ計算しておく必要がある。この平均断面積を一群断面積（エネルギーを 1 群として扱った場合の断面積）と呼び、

$$\sigma_i = \frac{\sum_{g=1}^{107} \sigma_g^i \phi_g}{\sum_{g=1}^{107} \phi_g}$$

で計算される。このようにして決められた一群断面積を用いることで、任意

の大きさの中性子束 $\bar{\Phi}$ に対する反応率を $\sigma_i \bar{\Phi}$ と計算することが出来る。

本研究の計算においては、エネルギーの離散化誤差、つまり σ_g における誤差が一群断面積の評価誤差につながり、核種の変換過程を通じて、中性子増倍率や核種数密度の評価誤差へとつながったと考えることができる。

第4章 一般化最小二乗法を用いた実効断面積誤差の定量化

第3章で計算誤差について整理した。次に、整理したデータを用い、炉物理分野で核データ調整に用いている一般化最小二乗法を計算誤差の要因の特定に用いる。本章ではベイズの定理を用いた一般化最小二乗法[7]を用いた核データ調整の定式化について述べる。

4.1 単一の積分データを用いた単一の核データの調整

核データ σ と、それに依存して決まる原子炉の積分パラメータ(積分データ) k を考える。なお、ここでの議論は、ある入力パラメータとそれに依存して決まる出力パラメータに対して適用できる一般的なものである。

核データ σ が正規分布に従うと仮定するならば、 σ の確率分布 $p(\sigma)$ は以下のように書ける。

$$p(\sigma) \propto \exp\left(-\frac{(\sigma - \bar{\sigma})^2}{2V_\sigma}\right) \quad (1)$$

ここで、 $\bar{\sigma}$ は σ の期待値、 V_σ は σ の分散を示す。

一方、 σ が与えられたときに k が従う確率分布 $p(k|\sigma)$ も以下のように正規分布に従うものとする。

$$p(k|\sigma) \propto \exp\left(-\frac{(k - \tau(\sigma))^2}{2V_k}\right) \quad (2)$$

ここで、 $\tau(\sigma)$ は σ を入力として用いた数値計算によって得られる k の値を示す。数値計算は不確かさを伴うため、 k は $\tau(\sigma)$ の周りに幅(分散 V_k)をもって分布する確率変数となる。

また、 k が与えられたときの σ の確率分布 $p(\sigma|k)$ はベイズの定理より

$$p(\sigma|k) = \frac{p(\sigma)p(k|\sigma)}{p(k)} \propto p(\sigma)p(k|\sigma) \quad (3)$$

と与えられることから、 $p(\sigma|k)$ は次のように書ける。

$$p(\sigma|k) \propto \exp\left(-\frac{(\sigma - \bar{\sigma})^2}{2V_\sigma} - \frac{(k - \tau(\sigma))^2}{2V_k}\right) = \exp(-J) \quad (4)$$

ここで

$$J = \frac{(\sigma - \bar{\sigma})^2}{2V_\sigma} + \frac{(k - \tau(\sigma))^2}{2V_k} \quad (5)$$

である。この J 値を χ^2 値とする。

積分データを用いた核データの調整というのは、積分データを考慮しない場合での σ の確率 $p(\sigma)$ に対して、積分データ k を考慮した場合での σ の確率 $p(\sigma|k)$ を考え、その確率が最大となる σ と、この確率分布の幅を求めることを意味する。このことは、 J 値、

すなわち χ^2 値を最小にする σ を求める問題と言い換えることも出来、一般化最小二乗法として広く知られている。

ここで、 $\tau(\sigma)$ を以下のように近似する。

$$\tau(\sigma) \approx \tau(\bar{\sigma}) + \left. \frac{d\tau(\sigma)}{d\sigma} \right|_{\sigma=\bar{\sigma}} (\sigma - \bar{\sigma}) = \bar{k} + S(\sigma - \bar{\sigma}) \quad (6)$$

なお、感度 S は以下で定義される。

$$S = \left. \frac{d\tau(\sigma)}{d\sigma} \right|_{\sigma=\bar{\sigma}} \quad (7)$$

すると、式 (5) で定義された J は次のように書ける。

$$J = \frac{(\sigma - \bar{\sigma})^2}{2V_\sigma} + \frac{(k - \bar{k} + S\bar{\sigma} - S\sigma)^2}{2V_k} = \frac{(\sigma - \bar{\sigma})^2}{2V_\sigma} + \frac{(\alpha - S\sigma)^2}{2V_k} \quad (8)$$

ここで、 $\alpha = k - \bar{k} + S\bar{\sigma}$ である。これをさらに整理すると

$$J = \left(\frac{1}{2V_\sigma} + \frac{S^2}{2V_k} \right) \sigma^2 - \left(\frac{\bar{\sigma}}{V_\sigma} + \frac{\alpha S}{V_k} \right) \sigma + \frac{\bar{\sigma}^2}{2V_\sigma} + \frac{\alpha^2}{2V_k} \quad (9)$$

と書けるので、 $p(\sigma|k)$ は次のように書き直せる。

$$\begin{aligned} p(\sigma|k) &= \exp(-J) \propto \exp\left(-\left(\left(\frac{1}{2V_\sigma} + \frac{S^2}{2V_k}\right)\sigma^2 - \left(\frac{\bar{\sigma}}{V_\sigma} + \frac{\alpha S}{V_k}\right)\sigma\right)\right) = \exp(-(\beta_1\sigma^2 - \beta_2\sigma)) \\ &= \exp(-\beta_1(\sigma^2 - \beta_2')) = \exp\left(-\beta_1\left(\left(\sigma - \frac{\beta_2'}{2}\right)^2 + \left(\frac{\beta_2'^2}{4}\right)\right)\right) \propto \exp\left(-\frac{\left(\sigma - \frac{\beta_2'}{2}\right)^2}{2/(2\beta_1)}\right) \quad (10) \end{aligned}$$

これより、 $p(\sigma|k)$ は、期待値 $\frac{\beta_2'}{2}$ 、分散 $\frac{1}{2\beta_1}$ の正規分布に従うことが分かる。正規分布であるため、この期待値は確率を最大化させる最頻値と一致することになる。

以上より、 k が得られたときの σ が従う確率 $p(\sigma|k)$ の期待値 $\bar{\sigma}_k$ は以下となる。

$$\begin{aligned} \bar{\sigma}_k &= \frac{\beta_2'}{2} = \left(\frac{\bar{\sigma}}{V_\sigma} + \frac{\alpha S}{V_k}\right) / \left(\frac{1}{V_\sigma} + \frac{S^2}{V_k}\right) = \left(\frac{\bar{\sigma}}{V_\sigma} + \frac{(k - \bar{k} + S\bar{\sigma})S}{V_k}\right) / \left(\frac{1}{V_\sigma} + \frac{S^2}{V_k}\right) \\ &= (V_k\bar{\sigma} + SV_\sigma(k - \bar{k} + S\bar{\sigma})) / (V_k + S^2V_\sigma) \\ &= ((V_k + S^2V_\sigma)\bar{\sigma} + SV_\sigma(k - \bar{k})) / (V_k + S^2V_\sigma) \\ &= \bar{\sigma} + \frac{SV_\sigma}{V_k + S^2V_\sigma}(k - \bar{k}) \quad (11) \end{aligned}$$

また、 $p(\sigma|k)$ の分散 V_{σ_k} は以下となる。

$$V_{\sigma_k} = \frac{1}{2\beta_1} = \frac{V_\sigma V_k}{V_k + S^2V_\sigma} = V_\sigma - \frac{S^2V_\sigma^2}{V_k + S^2V_\sigma} \quad (12)$$

これら $\bar{\sigma}_k$ 、 V_{σ_k} は、以下のように表せる。

$$\bar{\sigma}_k = \bar{\sigma} + \frac{S^2 V_\sigma}{V_k + S^2 V_\sigma} (k - \bar{k}) = \bar{\sigma} + \gamma \left(\frac{k - \bar{k}}{S} \right) \quad (13)$$

$$V_{\sigma_k} = V_\sigma - \gamma V_\sigma \quad (14)$$

式(13)に現れている $(k - \bar{k})$ は、 k に関して核データ $\bar{\sigma}$ から予測される値 \bar{k} と、実際に測定によって得られた値 k の差異を示している。これを S で除することによって、 k に関する予測値と実測値の差異を核データの差異に置き換えた量となっている。また、 γ については、 $S^2 V_\sigma$ が σ の不確かさによって生じる k の分散であることを考えると、「 k における予測値と実測値の差異の要因において σ の不確かさが及ぼす影響の割合」を示していると考えられる。式(13)では、 $\frac{k - \bar{k}}{S}$ に対して γ が乗ぜられており、 γ の値が大きいほど $\bar{\sigma}_k$ と σ の差は大きくなることが分かる。

また、 V_{σ_k} においては、 V_σ からの減少量が γ に比例していることが分かる。これはつまり、核データの調整に用いた積分データにおいて σ に起因する不確かさの寄与が大きいほど、核データの調整により σ の不確かさを低減できることを意味している。また、 V_σ の減少量には \bar{k} と k との差は影響していない。

4.2 複数の積分データを用いた場合の複数の核データの調整

ここでは複数の積分データを用いたときの複数の核データの調整について述べる。核データを \mathbf{T} 、積分データを \mathbf{R} と、それぞれベクトル表記することとする。また、 \mathbf{T} を用いた数値計算で得られる \mathbf{R} を $\mathbf{R}(\mathbf{T})$ と書くこととする。

核データ \mathbf{T} が従う確率分布を $p(\mathbf{T})$ 、積分データ \mathbf{R} が従う確率分布を $p(\mathbf{R})$ とし、 \mathbf{T} 、 \mathbf{R} の同時確率を $p(\mathbf{T}, \mathbf{R})$ とする。 $p(\mathbf{T}, \mathbf{R})$ は条件付き確率を用いて次のように書くことができる。

$$p(\mathbf{T}, \mathbf{R}) = p(\mathbf{T}|\mathbf{R})p(\mathbf{R}) = p(\mathbf{R}|\mathbf{T})p(\mathbf{T}) \quad (15)$$

ここで、 $p(\mathbf{R}|\mathbf{T})$ は核データとして \mathbf{T} が与えられたときに \mathbf{R} が従う確率分布である。また、 $p(\mathbf{T}|\mathbf{R})$ も同様な条件付き確率である。

核データ \mathbf{T} が従う確率分布 $p(\mathbf{T})$ が、期待値が \mathbf{T}_0 、共分散行列が \mathbf{V}_σ である多変量正規分布に従うとすると、 $p(\mathbf{T})$ は次のように記述される。

$$p(\mathbf{T}) \propto \exp\left(-\frac{(\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)}{2}\right) \quad (16)$$

また、核データとして \mathbf{T} が与えられたときに \mathbf{R} が従う条件付き確率 $p(\mathbf{R}|\mathbf{T})$ は、前節と同様の考え方に基づいて、期待値 $\mathbf{R}(\mathbf{T})$ 、共分散行列 \mathbf{V}_m の多変量正規分布に従うと考えることができ、次のように書くことができる。

$$p(\mathbf{R}|\mathbf{T}) \propto \exp\left(-\frac{(\mathbf{R} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))^T \mathbf{V}_m^{-1} (\mathbf{R} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))}{2}\right) \quad (17)$$

ここで、 \mathbf{V}_m は核データを用いた積分データの計算値に対する共分散行列（数値計算に起因する誤差）である。

\mathbf{R} に関する情報が全く与えられていない場合は、 $p(\mathbf{T}, \mathbf{R}) = p(\mathbf{R}|\mathbf{T})p(\mathbf{T})$ を最大化する \mathbf{T} 、 \mathbf{R} として、自明のことながら以下が与えられる。

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_0 \quad (18)$$

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}(\mathbf{T}_0) \quad (19)$$

一方、積分データ \mathbf{R} について測定によって $\tilde{\mathbf{R}}$ が得られたとき、核データ \mathbf{T} が従う確率分布 $p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}})$ はベイズの定理より次のように書ける。

$$p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}}) = \frac{p(\tilde{\mathbf{R}}|\mathbf{T})p(\mathbf{T})}{p(\tilde{\mathbf{R}})} \propto p(\tilde{\mathbf{R}}|\mathbf{T})p(\mathbf{T}) \quad (20)$$

従って、 $p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}})$ は次のように書ける。

$$p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}}) \propto \exp\left(-\frac{(\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))^T \mathbf{V}_m^{-1} (\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))}{2} - \frac{(\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)}{2}\right) \quad (21)$$

ただし、実際には、積分データの真値を測定によって得ることは出来ないため、 $\tilde{\mathbf{R}}$ は誤差 \mathbf{V}_e をもった確率分布として与えられることになる。そこで、積分データの測定誤差 \mathbf{V}_e を $\mathbf{R}(\mathbf{T})$ に対して考慮すると、式(17)は次のように変形される。

$$p(\tilde{\mathbf{R}}|\mathbf{T}) \propto \exp\left(\frac{(\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))^T (\mathbf{V}_e + \mathbf{V}_m)^{-1} (\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))}{2}\right) \quad (22)$$

これを用いると、式(21)は次のように書ける。

$$p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}}) \propto \exp\left(-\frac{(\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))^T (\mathbf{V}_e + \mathbf{V}_m)^{-1} (\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))}{2} - \frac{(\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)}{2}\right) \quad (23)$$

ここで、積分データ $\tilde{\mathbf{R}}$ が得られたときの核データ \mathbf{T} が従う確率分布 $p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}})$ における最頻値 $\hat{\mathbf{T}}$ を求めることを考える。最頻値は以下の関数 J を最小とするものに対応する。

$$J = (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) + (\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}))^T (\mathbf{V}_e + \mathbf{V}_m)^{-1} (\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T})) \quad (24)$$

また、 J を最小化する \mathbf{T} は、以下の式から計算することが出来る。

$$\frac{dJ}{d\mathbf{T}} = 0 \quad (25)$$

式(25)を計算するために、 $\mathbf{R}(\mathbf{T})$ を次のように近似する。

$$\mathbf{R}(\mathbf{T}) \approx \mathbf{R}(\mathbf{T}_0) + \mathbf{G}(\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) \quad (26)$$

ここで、 \mathbf{G} は感度係数行列であり、行数は積分データ数、列数は断面積数である。これを用いると、 J は次のように書ける。

$$J = \mathbf{X}^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} \mathbf{X} + (\mathbf{R}_{00} - \mathbf{G}\mathbf{X})^T \mathbf{V}_{em}^{-1} (\mathbf{R}_{00} - \mathbf{G}\mathbf{X}) \quad (27)$$

ここで、

$$\mathbf{X} = \mathbf{T} - \mathbf{T}_0 \quad (28)$$

$$\mathbf{R}_{00} = \tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}_0) \quad (29)$$

$$\mathbf{V}_{em} = \mathbf{V}_e + \mathbf{V}_m \quad (30)$$

である。これを式(25)に代入すると

$$\mathbf{X}^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} - (\mathbf{R}_{00} - \mathbf{G}\mathbf{X})^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G} = \mathbf{0} \quad (31)$$

が得られる。また、さらにこれを整理して

$$\mathbf{X} = (\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{R}_{00} \quad (32)$$

が得られる。この式だと逆行列を含む行列の逆行列となっており見通しが悪いため、さらなる変形を行う。この右辺について

$$(\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} = \mathbf{A} (\mathbf{G}\mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} \quad (33)$$

とおくと、 \mathbf{A} として

$$\mathbf{A} = \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T \quad (34)$$

が得られることから、式(32)は

$$\mathbf{X} = \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T (\mathbf{G}\mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} \mathbf{R}_{00} \quad (35)$$

と書き直せることが分かる。これより、確率 $p(\mathbf{T}|\mathbf{R}_0)$ を最大化させる \mathbf{T} 、すなわち $p(\mathbf{T}|\mathbf{R}_0)$ の最頻値 $\hat{\mathbf{T}}$ は

$$\hat{\mathbf{T}} = \mathbf{T}_0 + \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T (\mathbf{G}\mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} (\tilde{\mathbf{R}} - \mathbf{R}(\mathbf{T}_0)) \quad (36)$$

と得られる。

次に、確率分布 $p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}})$ における分散を求めよう。式(24)は以下のように書くことができる。

$$J = (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0)^T \mathbf{V}_\sigma^{-1} (\mathbf{T} - \mathbf{T}_0) + (\mathbf{G}\mathbf{T} - \boldsymbol{\alpha})^T \mathbf{V}_{em}^{-1} (\mathbf{G}\mathbf{T} - \boldsymbol{\alpha}) \quad (37)$$

ここで、

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{G}\mathbf{T}_0 + \mathbf{R}_{00} \quad (38)$$

である。 $\mathbf{T} = \hat{\mathbf{T}}$ のとき J が極値をとることから、式(37)は $\hat{\mathbf{T}}$ を用いて以下のように書き直せる。

$$J = (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}})^T (\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G}) (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}}) + \tilde{J} = J_0 + \tilde{J} \quad (39)$$

従って、 J_0 について

$$J_0 = (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}})^T (\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G}) (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}}) = (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}})^T \hat{\mathbf{V}}^{-1} (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}}) \quad (40)$$

のように変形したときの $\hat{\mathbf{V}}$ が $p(\mathbf{T}|\tilde{\mathbf{R}})$ の分散となる。すなわち、 $(\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})$ の逆行列を求める問題に帰着する。式(33)、(34)より

$$(\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})^{-1} \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} = \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T (\mathbf{G}\mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} \quad (41)$$

が得られる。この両辺の転置をとることで、以下の式が得られる。

$$\mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G} (\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})^{-1} = (\mathbf{G}\mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} \mathbf{G}\mathbf{V}_\sigma \quad (42)$$

これを以下のように変形する。

$$\begin{aligned}
\mathbf{G}(\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})^{-1} &= \mathbf{V}_{em} (\mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \\
\mathbf{G}(\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})^{-1} &= (\mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em} - \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T) (\mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \\
\mathbf{G}(\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})^{-1} &= \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma - \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T (\mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \\
\mathbf{G}(\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})^{-1} &= \mathbf{G} (\mathbf{V}_\sigma - \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T (\mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma) \quad (43)
\end{aligned}$$

ここで、 $\mathbf{G}\mathbf{X} = \mathbf{G}\mathbf{Y}$ のときに $\mathbf{X} = \mathbf{Y}$ が成り立つか考える。積分データ数を p 、核データ数を q としたとき、 \mathbf{G} は $p \times q$ の行列、 \mathbf{X} 、 \mathbf{Y} は $q \times q$ の行列となる。ただし、 $p < q$ である。この式は $\mathbf{G}(\mathbf{X} - \mathbf{Y}) = \mathbf{G}\mathbf{Z} = \mathbf{0}$ と書き直せる。正方行列である \mathbf{Z} が non-singular であるとするならば、 \mathbf{Z}^{-1} を両辺の右から乗じることで $\mathbf{G} = \mathbf{0}$ となってしまうため、 \mathbf{Z} は singular でなければならないことになる。 $\mathbf{Z} = \mathbf{0}$ すなわち $\mathbf{X} = \mathbf{Y}$ の場合はこの条件が満足され、以下の式が得られることになる

$$(\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})^{-1} = \mathbf{V}_\sigma - \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T (\mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T + \mathbf{V}_{em})^{-1} \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \quad (44)$$

一方、行列の逆行列は一意に求まらなければならないことから、上の式が $(\mathbf{V}_\sigma^{-1} + \mathbf{G}^T \mathbf{V}_{em}^{-1} \mathbf{G})$ の逆行列の表式であることが言える。

以上の議論より、最終的に J_0 として以下が得られる。

$$J_0 = (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}})^T (\mathbf{V}_\sigma - \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T (\mathbf{V}_{em} + \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T)^{-1} \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma)^{-1} (\mathbf{T} - \hat{\mathbf{T}}) \quad (45)$$

すなわち、確率分布 $p(\mathbf{T}|\hat{\mathbf{R}})$ における分散 $\hat{\mathbf{V}}$ は以下となる。

$$\hat{\mathbf{V}} = \mathbf{V}_\sigma - \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T (\mathbf{V}_{em} + \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T)^{-1} \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \quad (46)$$

調整後の核データを用いて、ある炉物理パラメータの予測を行ったときの精度について考える。感度ベクトルを $\hat{\mathbf{G}}$ とするならば、式 (46) の両辺の左から $\hat{\mathbf{G}}$ 、右から $\hat{\mathbf{G}}^T$ を作用させることで、この炉物理パラメータの不確かさが以下のように求められる。

$$\hat{\mathbf{G}} \hat{\mathbf{V}} \hat{\mathbf{G}}^T = \hat{\mathbf{G}} \mathbf{V}_\sigma \hat{\mathbf{G}}^T - \hat{\mathbf{G}} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T (\mathbf{V}_{em} + \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T)^{-1} \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \hat{\mathbf{G}}^T \quad (47)$$

上式の右辺第一項が調整前の核データを用いたときの予測精度に対応し、右辺第二項が核データ調整による予測精度向上の程度を示している。この右辺第二項における $\hat{\mathbf{G}} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T$ は、核データ調整に用いた積分データ群と着目している炉物理パラメータの共分散に対応するため、これを $\tilde{\mathbf{V}}$ と記述する。 $\tilde{\mathbf{V}}$ は、核データ調整に用いた積分データ群の個数を要素数とするベクトルである。また、右辺第二項における $(\mathbf{V}_{em} + \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T)$ は実験値と計算値の不確かさも含めた、調整前の核データを用いたときの予測精度に対応する共分散行列であるが、これを \mathbf{V}' とする。以上で定義した $\tilde{\mathbf{V}}$ 、 \mathbf{V}' を用いると、右辺第二項は以下のように書き直せる。

$$\begin{aligned}
-\hat{\mathbf{G}} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T (\mathbf{V}_{em} + \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \mathbf{G}^T)^{-1} \mathbf{G} \mathbf{V}_\sigma \hat{\mathbf{G}}^T &= -\tilde{\mathbf{V}} \mathbf{V}'^{-1} \tilde{\mathbf{V}}^T \\
&= -\sum_i \sum_j \tilde{V}_i \tilde{V}_j \mathbf{V}'_{i,j}^{-1} = -\sum_i \tilde{V}_i^2 \mathbf{V}'_{i,i}^{-1} - \sum_i \sum_{j \neq i} \tilde{V}_i \tilde{V}_j \mathbf{V}'_{i,j}^{-1} \quad (48)
\end{aligned}$$




つまり、核データ調整による炉物理パラメータの予測精度の向上は、核データ調整に用いた積分データ毎の寄与(式 (48) 最右辺第1項)と積分データ間の相関による寄与(式 (48) 最右辺第2項)に分けて考えられることが出来る。

第5章 一般化最小二乗法の適用と結果

5.1 適用の流れ

第3章で得られた結果を用いて、CBZ/Burner の多群断面積に対して核データ調整を行い、多群断面積の変動を整理し、誤差の原因を特定することを目的とする。対象とする多群断面積は、表 3-2 に示す 21 の重核種の核分裂断面積と捕獲断面積とする。

まず、8種のピンセル体系について、20GWD/t と 40GWD/t における 21 の重核種の MVP-BURN と CBZ/Burner の数密度についての計算比を取得する。ここでの計算比とは、(CBZ/Burner での計算結果)÷(MVP-BURN での計算結果)を表す。数密度の実効断面積に対する感度は一般化摂動論を用いて CBZ/Burner により計算した。この時点で、8体系×21核種×2燃焼度点の計算比データと、感度係数データが取得されている。その後、一般化最小二乗法を適用した。なお、本研究では CBZ/Burner と MVP-BURN の計算誤差はそれぞれ 0.1%と仮定している。

本研究では、初期誤差の与え方の異なる 2 ケースについて一般化最小二乗法を適用した。Case1 では、107 群のエネルギー群それぞれの初期誤差を 10%に設定した。Case2 では、共鳴領域にのみ誤差を与えることとして、共鳴領域の特定に共鳴自己遮蔽因子を用いた。多群断面積ライブラリ CBZLIB 内に与えられている核分裂断面積 (n,f) と捕獲断面積 (n,g) の共鳴自己遮蔽因子のうち、背景断面積を 100barn、温度を 300K とした条件のものを取得し、共鳴自己遮蔽因子が 0.95 以上となるエネルギー群に対しては離散化誤差がないとして初期誤差を 0.1%に設定し、0.95 未満となるエネルギー群に対しては、離散化誤差があるとして、初期誤差を 10%に設定した。例として、U-235 の捕獲断面積について、 5-1、 5-2、 5-3 に示す。Case1 ではすべてのエネルギー群が初期誤差を 10%と与えられるのに対して、Case2 では共鳴領域では初期誤差を 10%に、それ以外の領域で 0.1%に設定することになる。

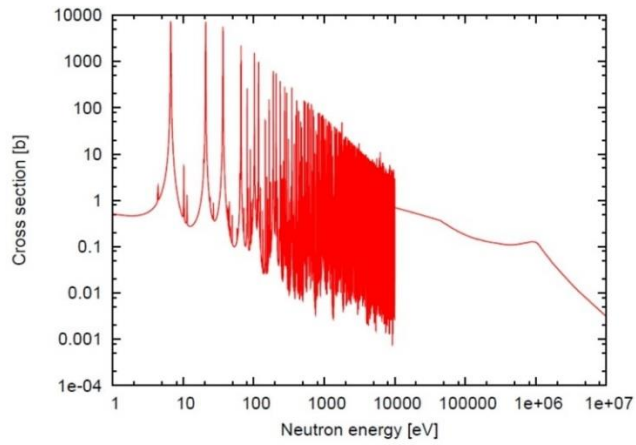


図 5-1 U-235 捕獲断面積

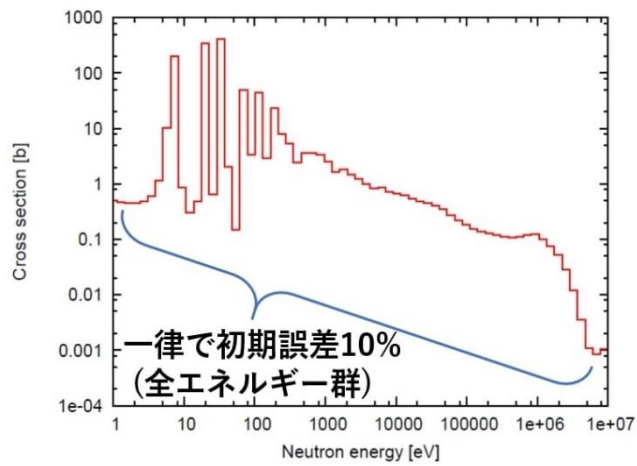


図 5-2 Case1 の初期誤差の与え方

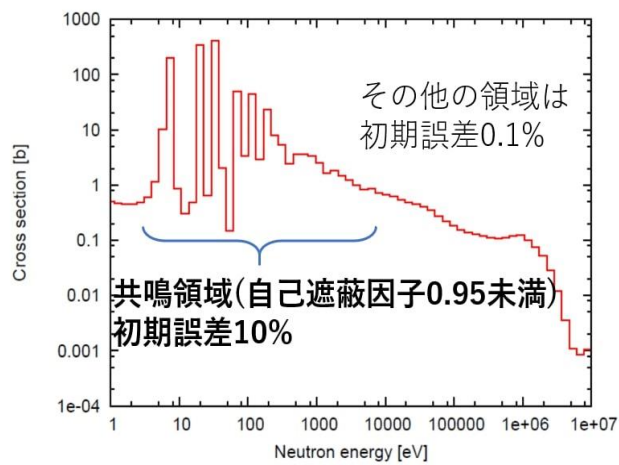


図 5-3 Case2 の初期誤差の与え方

5.2 適用結果

5.2.1 計算比と不確かさ

8 体系×21 核種×2 燃焼度点の適用前後の相対誤差について、**図 5-4** に示す。横軸の N_0 は以下の式を満たす。また、PWR-UO2 について抜き出したものを **図 5-5** に示す。

$$N_0 = 42 \times A + 21B + C$$

A	0	1	2	3	4	5	6	7
	PWR-UO2	PWR-MOX	BWR-UO2-V0	BWR-UO2-V40	BWR-UO2-V70	BWR-MOX-V0	BWR-MOX-V40	BWR-MOX-V70

B	0	1
	20GWD/t	40GWD/t

C	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	
	U-234	U-235	U-236	U-237	U-238	Np-237	Np-238	Np-239	Pu-238	Pu-239	
	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
	Pu-240	Pu-241	Pu-242	Am-241	Am-242m	Am-243	Cm-242	Cm-243	Cm-244	Cm-245	Cm-246

図から一般化最小二乗法の核データ調整によって、計算誤差が小さくなっていることを確認した。

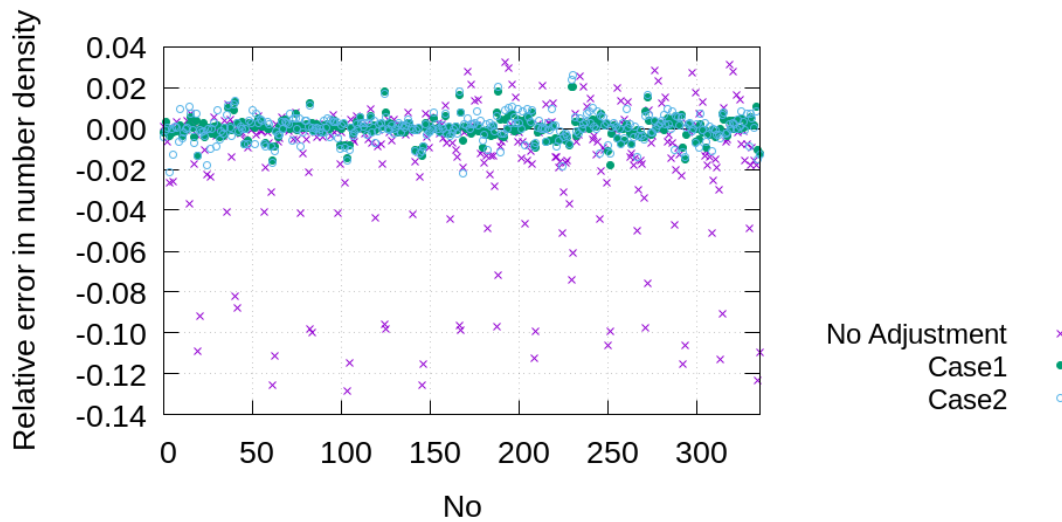


図 5-4 一般化最小二乗法適用前後の相対誤差

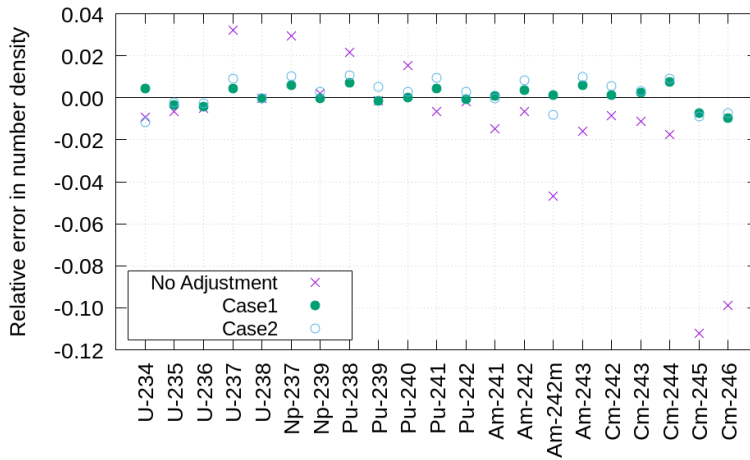


図 5-5 PWR-UO2 での数密度相対誤差

また、適用前後の実効断面積に想定した計算誤差に起因する数密度の不確かさを図 5-6 に示す。横軸の N_0 については図 5-4 と同様である。実効断面積の計算誤差が圧縮され、その結果、それに起因する数密度の不確かさが小さくなったことを確認した。

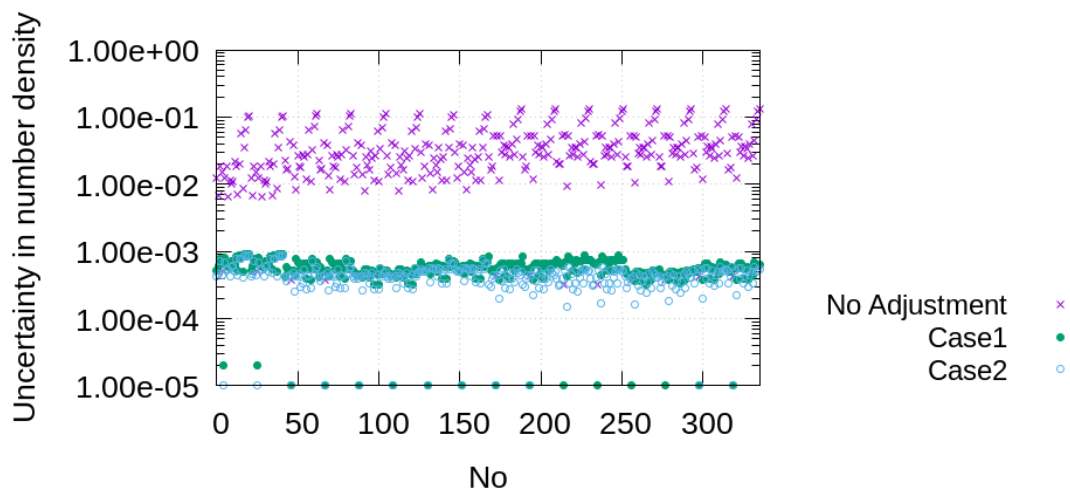


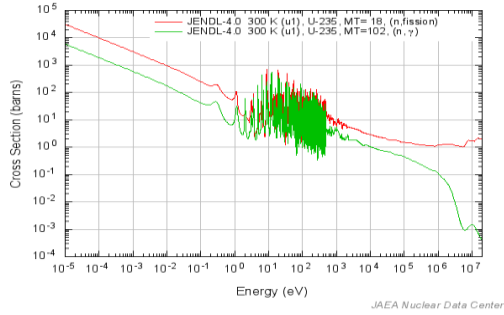
図 5-6 初期誤差が数密度に与える不確かさ

5.2.2 多群断面積

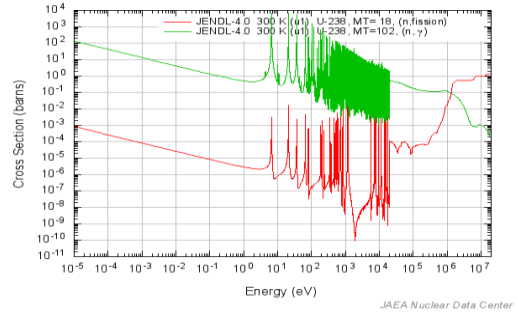
U-235 と U-238 について詳しく見ていく。U-235 と U-238 の核分裂断面積と捕獲断面積を図 5-7 の(a)、(d)に示す。また、U-235 と U-238 の各断面積の相対変化量を図 5-7 の(b)、(c)、(e)、(f)に示す。これらの図から、Case2 では離散化誤差が存在するとされた共鳴領域で核データ調整が行われたが、Case1 では、そのような調整が行われなかったことが分かる。4.2でも述べたように複数の核データを用いた一般化最小二乗法の解は一意には定まらない。初期誤差を自己遮蔽因子によって定めることで、核データの調整が行われる範囲を限定することができ、より現実的な調整が行われたことがわかる。

その他の断面積に関しての、一般化最小二乗法を適用した場合の多群断面積の相対変化量を図 5-8 に表す。前節の図 5-5 を見ると、Cm-245 と Cm-246 の数密度が CBZ/Burner では大幅に過少評価されていたことがわかる。ここで、Cm-244 の捕獲断面積についての、調整による各エネルギー群断面積の相対変化量を確認する。Case2 の結果を見ると、共鳴領域での断面積が大幅に過少評価されており、これが Cm-245 と Cm-246 の数密度に大きな誤差を与えていたことが分かった。

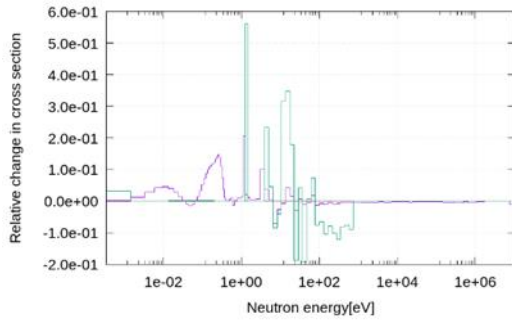
本研究では、自己遮蔽因子に基準値を設定しその大小によって、一律に初期誤差を定めたが、自己遮蔽因子に初期誤差を比例させるなどより相関を持たせることができれば、さらに適切な核データ調整が行われると考えられる。



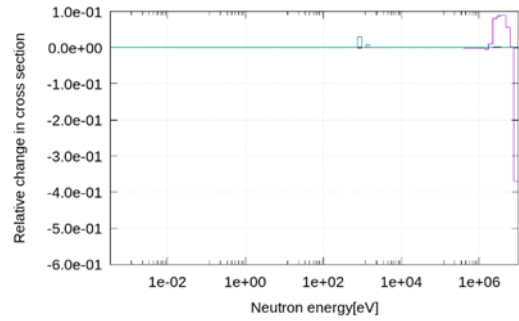
(a)U-235 の核分裂断面積(MT=18)と捕獲断面積 (MT=102)



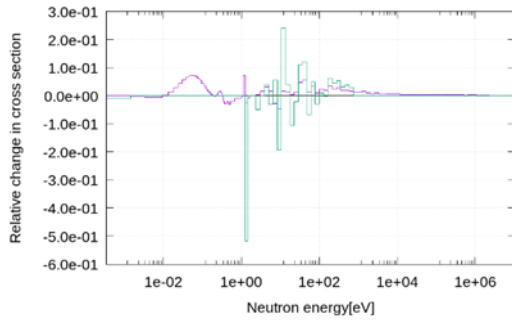
(d)U-238 の核分裂断面積(MT=18)と捕獲断面積 (MT=102)



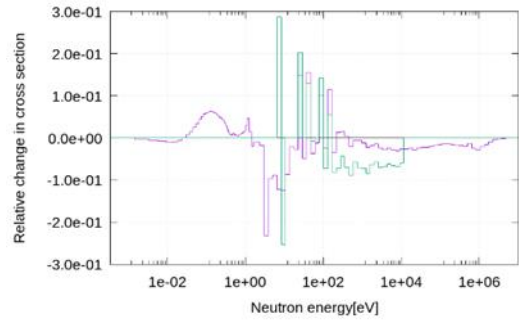
(b)U-235 の核分裂多群断面積の相対変化量



(e)U-238 の核分裂多群断面積の相対変化量



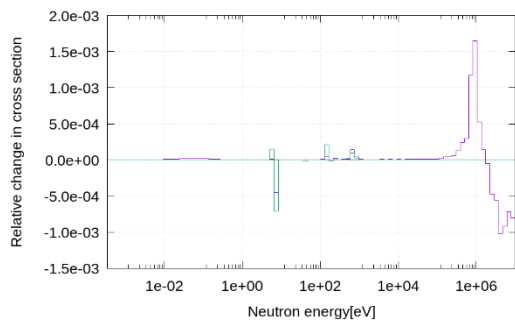
(c)U-235 の捕獲多群断面積の相対変化量



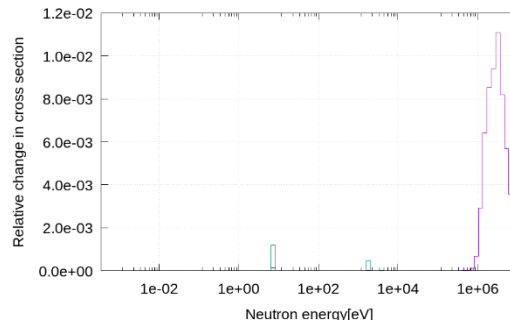
(f)U-238 の捕獲多群断面積の相対変化量

Case1 ———
Case2 ———

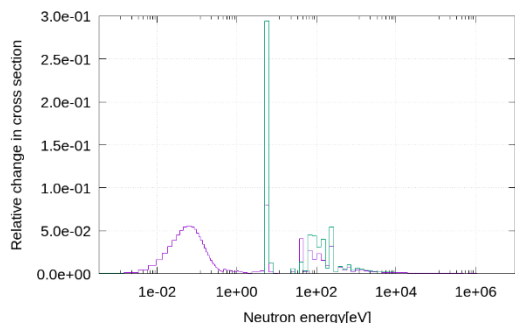
図 5-7 U-235 と U-238 の一般化最小二乗法適用結果



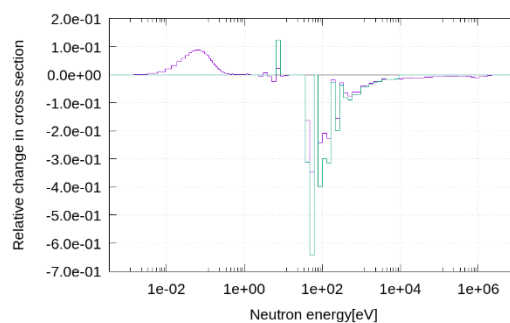
U-234/18



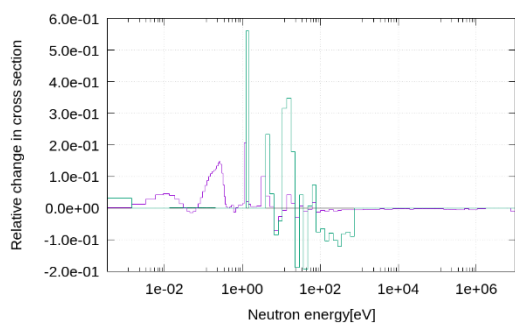
U-236/18



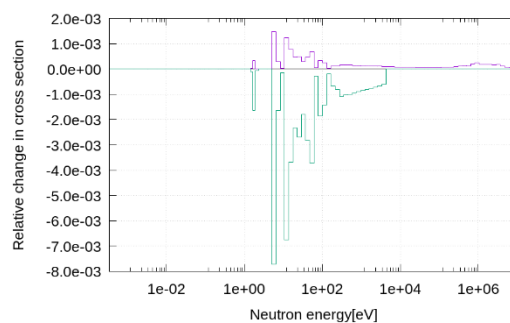
U-234/102



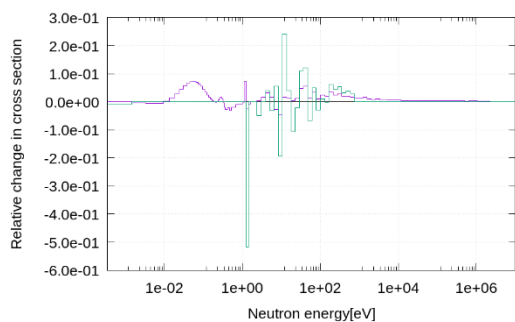
U-236/102



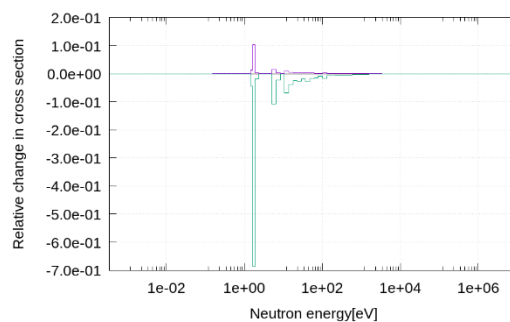
U-235/18



U-237/18



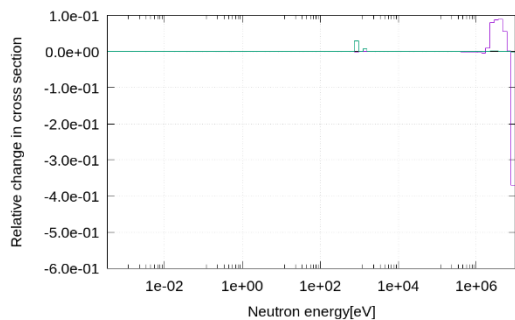
U235/102



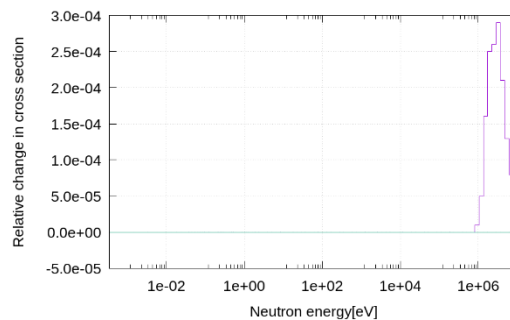
U-237/102

Case1 ———
Case2 ———

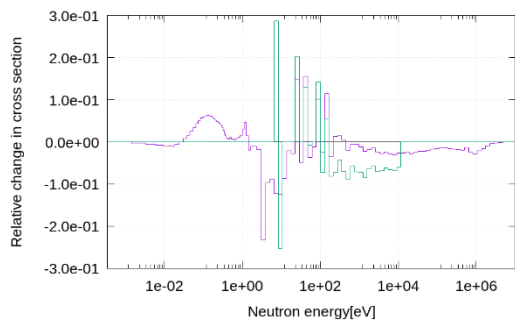
図 5-8 各エネルギー群の断面積の相対変化量(18-核分裂断面積、102-捕獲断面積) (1/6)



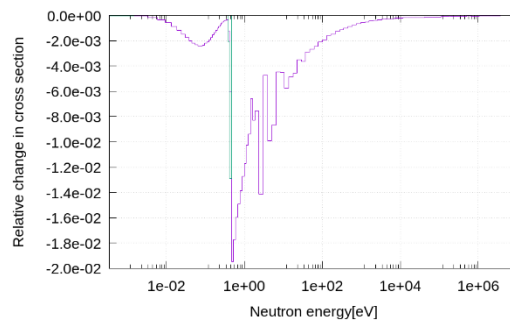
U-238/18



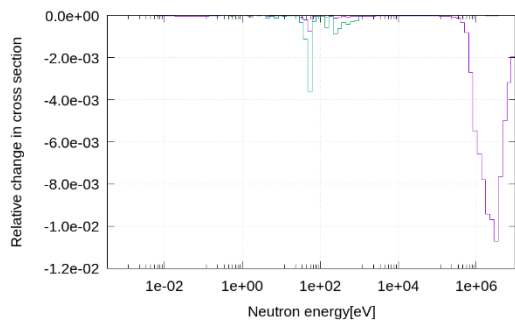
Np-239/18



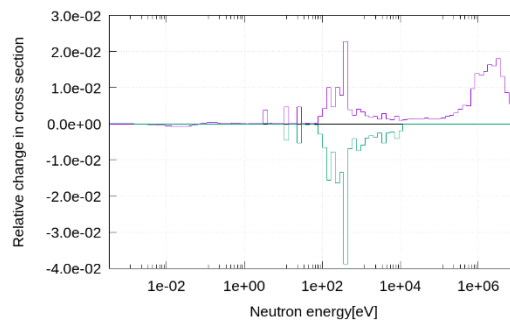
U-238/102



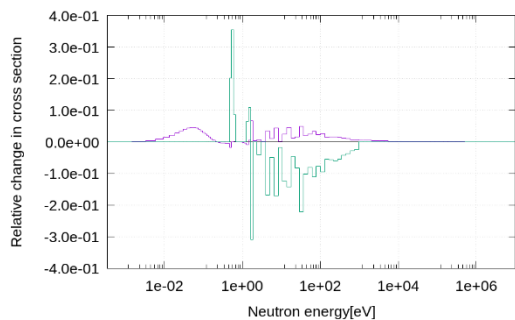
Np-239/102



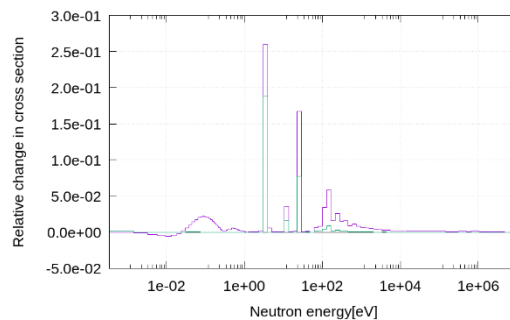
Np-237/18



Pu-238/18



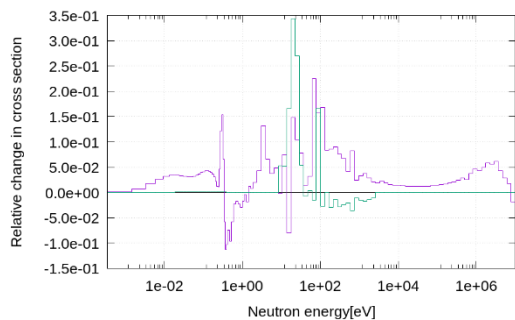
Np-237/102



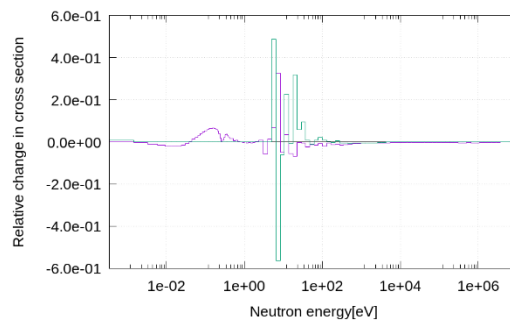
Pu-238/102

Case1 ———
Case2 ———

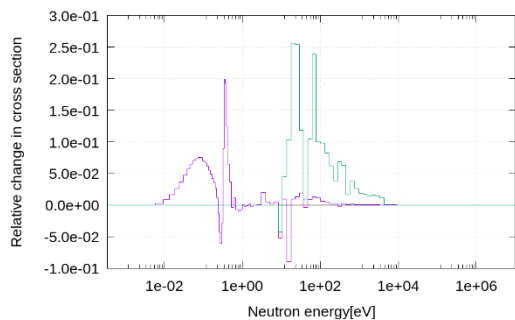
図 5-8 各エネルギー群の断面積の相対変化量(18-核分裂断面積、102-捕獲断面積) (2/6)



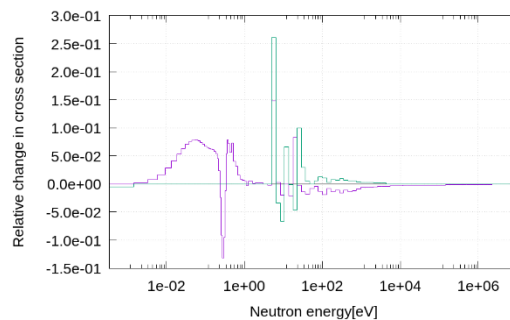
Pu-239/18



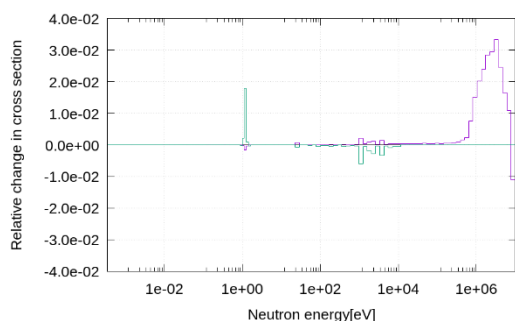
Pu-241/18



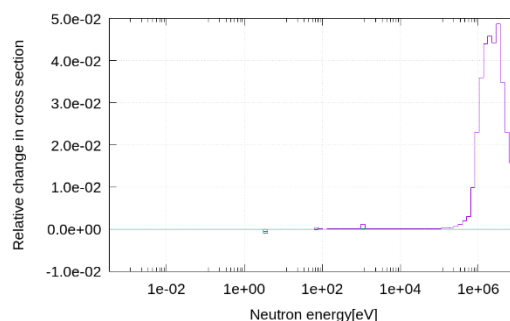
Pu-239/102



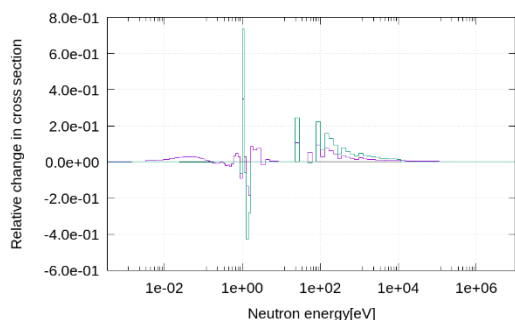
Pu-241/102



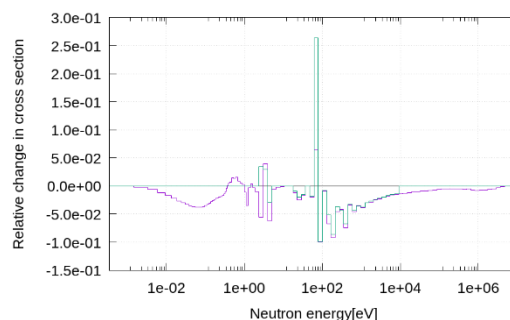
Pu-240/18



Pu-242/18



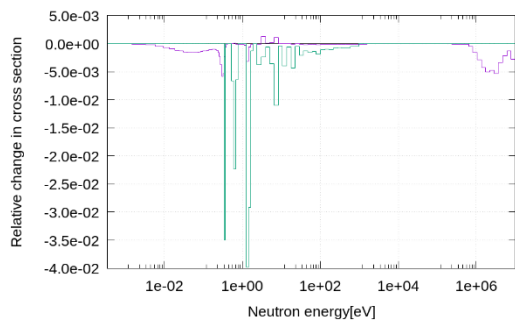
Pu-240/102



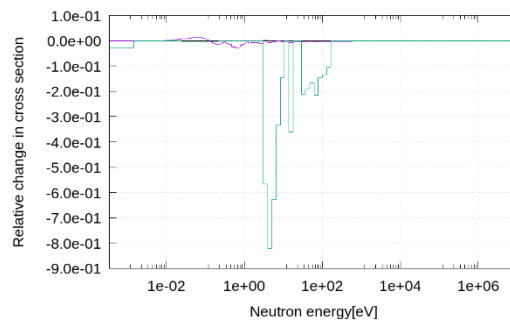
Pu-242/102

Case1 ———
Case2 ———

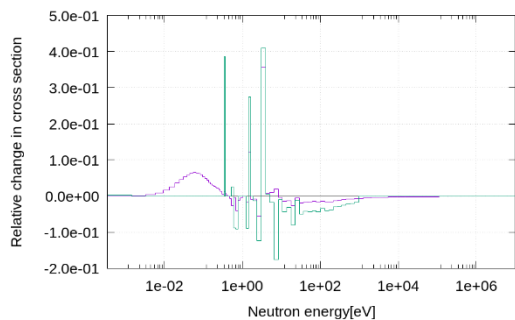
図 5-8 各エネルギー群の断面積の相対変化量(18-核分裂断面積、102-捕獲断面積) (3/6)



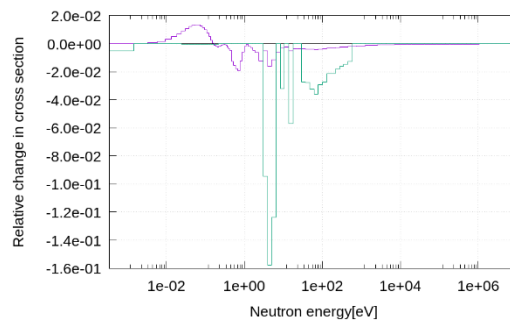
Am-241/18



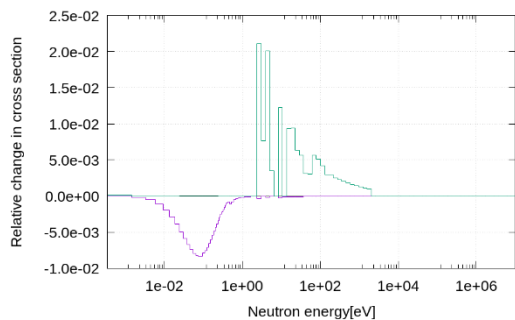
Am-242m/18



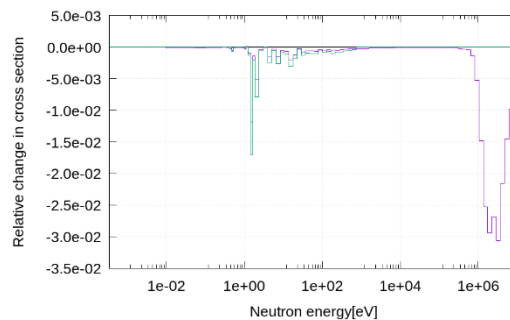
Am-241/102



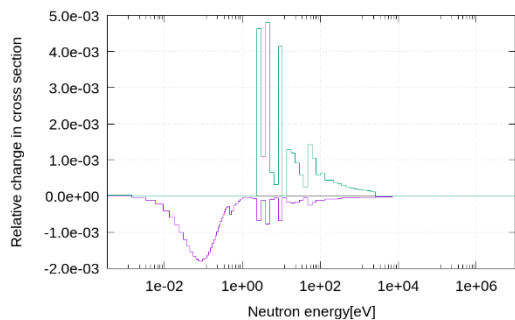
Am-242m/102



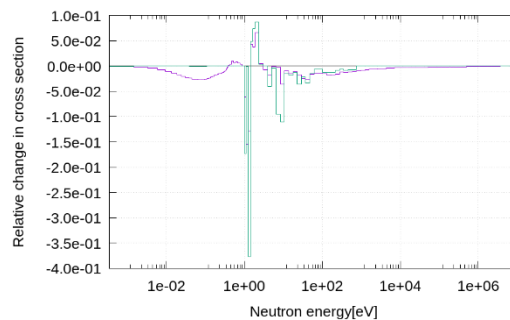
Am-242/18



Am-243/18



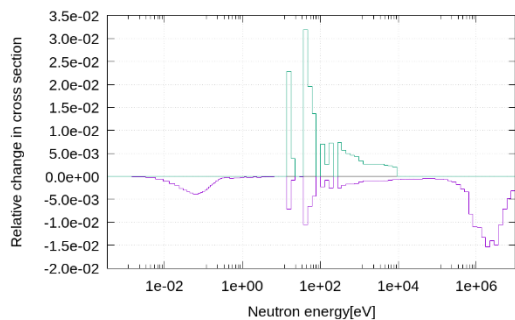
Am-242/102



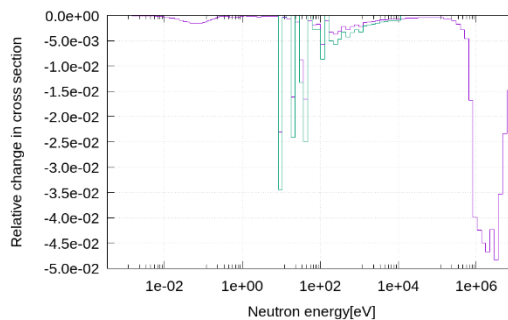
Am-243/102

Case1 ———
Case2 ———

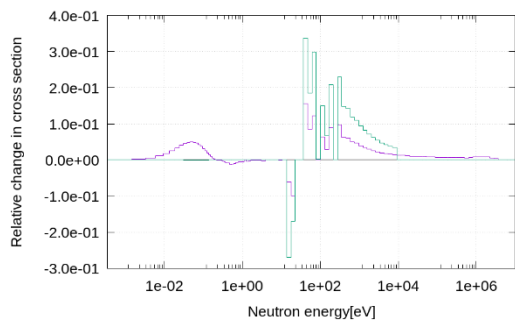
図 5-8 各エネルギー群の断面積の相対変化量(18-核分裂断面積、102-捕獲断面積) (4/6)



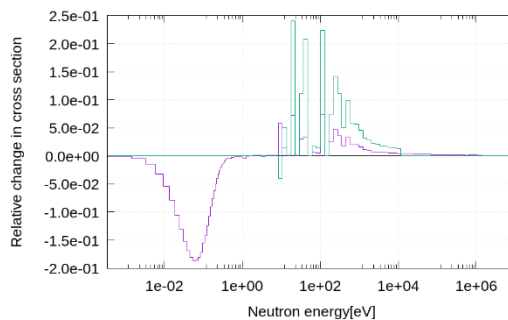
Cm-242/18



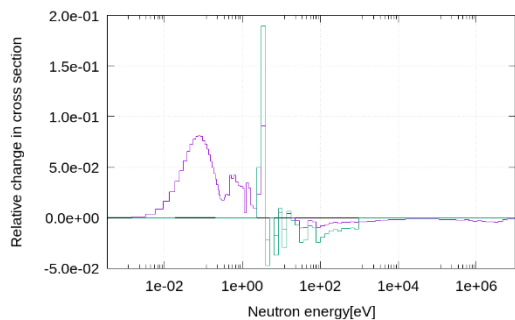
Cm-244/18



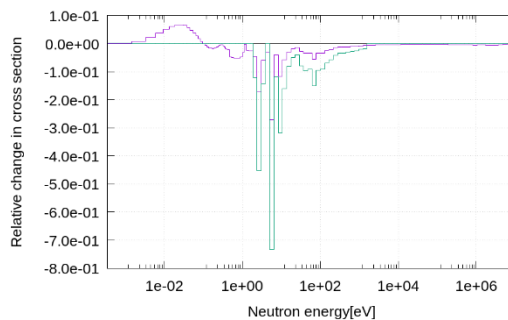
Cm-242/102



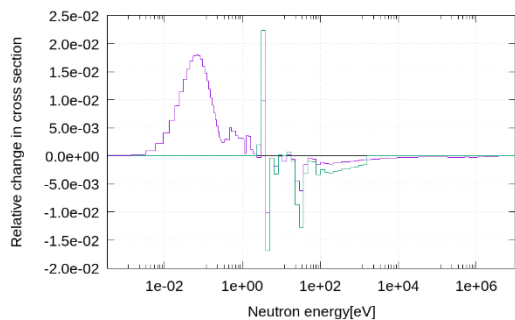
Cm-244/102



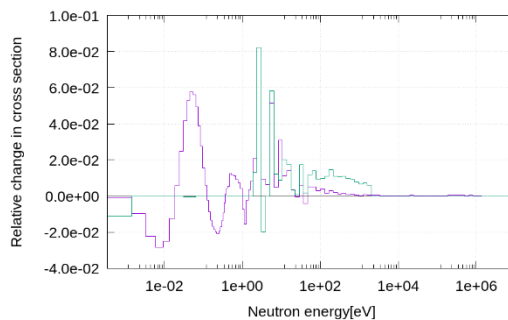
Cm-243/18



Cm-245/18



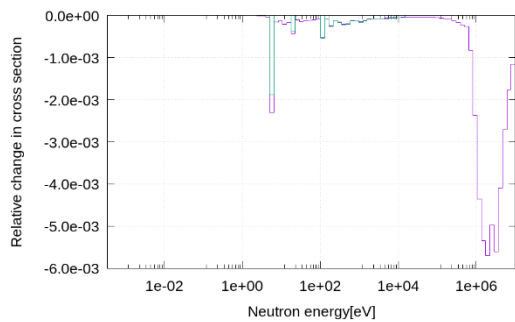
Cm-243/102



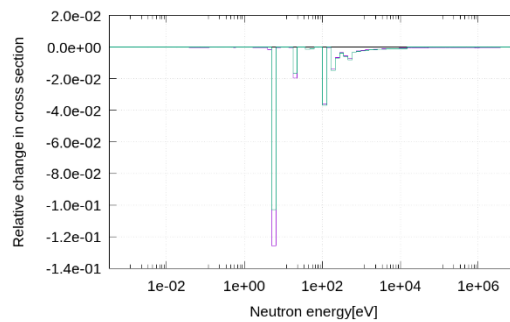
Cm-245/102

Case1 — Case2

図 5-8 各エネルギー群の断面積の相対変化量(18-核分裂断面積、102-捕獲断面積) (5/6)



Cm-246/18



Cm-246/102

Case1 ———
Case2 ———

図 5-8 各エネルギー群の断面積の相対変化量(18-核分裂断面積、102-捕獲断面積) (6/6)

第6章 結論

エネルギーの離散化誤差が燃焼計算に与える誤差に関する研究を行った。計算誤差を定量化する対象として決定論的手法で燃焼計算を行う汎用炉物理解析コード **CBZ** の **Burner** モジュール、比較対象として厳密解相当の解を得るために、確率論的手法に基づく汎用中性子・光子輸送計算モンテカルロコード **MVP** の **BURN** モジュールを用いた。

ピンセル体系においては、決定論的手法において、無限中性子増倍率を反応度単位で比較すると、誤差 0.1%以内での計算が可能であることを確認した。次に、数密度の燃焼度依存性を整理した。整理した数密度誤差の結果を用いて一般化最小二乗法を適用することで、計算誤差の原因となるエネルギー群を特定した。重核種では、**Cm-245**、**Cm-246** 数密度が **CBZ/Burner** では大幅に過少評価されていたが、これは **Cm-244** の共鳴領域での捕獲断面積が大幅に過少評価されていたからだと分かった。

今後の展望としては、燃料集合体体系等での精度の確認をすることが挙げられる。また、一般化最小二乗法については、初期誤差を共鳴自己遮蔽因子の値に相関するように設定し、本研究で得られた結果と比較する予定である。

謝辞

本研究を進めるにあたり、指導教官である千葉豪准教授には研究や卒業論文執筆の際に多大なる手助けを頂きました。個人的な部活に集中したいという思いから、研究のスタートが遅れてしまった中에서도見捨てることなく、終始丁寧にご教授、ご指導いただきありがとうございました。また、分からないことを教えてくださった研究室の皆様にも厚く御礼申し上げます。

参考文献

- [1] H.Abdel-Khalik, "Uncertainty characterization framework for CANDU reactor physics calculations," Proc. Of 7th Int. Conf.on Modeling and Simulation in Nucl. Sci. Eng., Ottawa, Canada, Oct. 18-21,2015 (2015).
- [2] A. Yamamoto, K. Kinoshita, T. Endo, "Estimation of modeling approximation errors using data assimilation with the minimum variance approach," J. Nucl. Sci. Technol., 54, pp.459-471 (2017)
- [3] 長家康展, 他 「MVP/GMVP 第3版連続エネルギー法及び多群法に基づく汎用中性子・光子輸送計算モンテカルロコード(翻訳資料)」 JAERI-Data/Code 2016-019, (2017)
- [4] 奥村啓介, 他 「MVP-BURN 利用マニュアル暫定版(Ver051011)」,(2005)
- [5]K. Shibata, O. Iwamoto, T. Nakagawa, N. Iwamoto, A. Ichihara, S. Kunieda, S. Chiba, K. Furutaka, N. Otuka, T. Ohsawa, T. Murata, H. Matsunobu, A. Zukeran, S. Kamada, and J. Katakura: "JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering," J. Nucl. Sci. Technol. 48(1), 1-30 (2011).
- [6] 千葉豪, 「(4)原子力エネルギーシステム応用の観点から」,日本原子力学会「2019年春の年会」核データ部会セッション 「核分裂生成物核種の核データ研究のフロンティア」,(2019)
- [7] D.L. Smith, 'Probability, statistics, and data uncertainties in nuclear science and technology,' In: Vol. 4 of Neutron Physics and Nuclear Data in Science and Technology. American Nuclear Society (1991).