CBZ の摂動計算に関するクラス

1　はじめに

本テキストでは、摂動計算と実効遅発中性子割合の計算に関するクラスについての解説を行う。摂動計算を行うクラスは各々のソルバーで実装しているが、基本的には `GeneralMesh` クラスが保持する情報で計算が可能であるため、その構造は類似している。

2　理論のレビュー

2.1　摂動公式の導出

前進および随伴中性子輸送 (拡散) 方程式を演算子を用いて以下のように記述する。

$$Hf = \frac{1}{k}Gf, \tag{1}$$

$$H^+f^+ = \frac{1}{k}G^+f^+ \tag{2}$$

また、摂動体系の輸送方程式を以下のように記述する。

$$H'f' = \frac{1}{k'}G'f' \tag{3}$$

ここで、$H' = H + \Delta H$、$G' = G + \Delta G$ である。

断面積の摂動により生じる反応度は摂動理論により以下のように計算できる。

$$\frac{dk}{kk'} = \left[\frac{1}{k'}\left\langle f^+\Delta G f'\right\rangle - \left\langle f^+\Delta H f'\right\rangle\right] / \left\langle f'G^+f^+\right\rangle \tag{4}$$

2.2　拡散理論に基づく摂動公式

拡散方程式を書き下すと

$$-D_g\nabla^2\phi_g + \Sigma_{r,g}\phi_g - \sum_{g'\neq g}\Sigma_{g'\to g}\phi_{g'} = \frac{1}{k}\chi_g\sum_{g'}\nu\Sigma_{f,g'}\phi_{g'} \tag{5}$$

となる。

摂動分母は以下のように計算される。

$$\left\langle f'G^+f^+\right\rangle = \int dr\sum_g \phi'_g\nu\Sigma_{f,g}\sum_{g'}\chi_{g'}\phi^+_{g'} \tag{6}$$

ここで、上式に現れる $\Sigma_{f,g}$ は非摂動体系のものであるため、摂動分母を非摂動随伴系の中性子源と摂動系の中性子源との積で計算することは出来ないことに注意が必要である（一次摂動であれば可能）。

ΔG に関わる項は「生成項」と呼ばれ、以下のように計算される。

$$\left\langle f^+\Delta G f'\right\rangle = \sum_g\int dr\phi^+_g\chi_g\sum_{g'}\Delta\nu\Sigma_{f,g'}\phi'_{g'} + \sum_g\int dr\phi^+_g\Delta\chi_g\sum_{g'}\nu\Sigma'_{f,g'}\phi'_{g'} \tag{7}$$

右辺第一項は生成断面積による摂動項、第二項は核分裂スペクトルによる摂動項に対応する。

次に ΔH に関わる項を考える。除去断面積は散乱行列を用いて次の式で書ける（(n,3n) 等の反応は無視した)。

$$\Sigma_{r,g} = \Sigma_{a,g} + \sum_{g'\neq g}\Sigma_{g\to g'} - \Sigma_{n2n,g} \tag{8}$$

吸収断面積の摂動による項は「吸収項」、(n,2n) 断面積の摂動による項は「(n,2n) 項」として、以下のように計算される。

$$\left\langle f^{+}\Delta H f'\right\rangle_{Abs.} = \sum_{g}\int dr\phi_g^{+}\Delta\Sigma_{a,g}\phi'_g \tag{9}$$

$$\left\langle f^{+}\Delta H f'\right\rangle_{(n,2n)} = -\sum_{g}\int dr\phi_g^{+}\Delta\Sigma_{(n,2n),g}\phi'_g \tag{10}$$

さらに、散乱断面積の摂動による項は以下の変形により「散乱項」として計算される。

$$\begin{aligned}\left\langle f^{+}\Delta H f'\right\rangle_{Scat.} &= \sum_{g}\int dr\phi_g^{+}\left(\sum_{g'\neq g}\Delta\Sigma_{g\to g'}\phi'_g - \sum_{g'\neq g}\Delta\Sigma_{g'\to g}\phi'_{g'}\right)\\ &= \int dr\sum_{g}\sum_{g'}\phi_g^{+}\Delta\Sigma_{g\to g'}\phi'_g - \phi_g^{+}\Delta\Sigma_{g'\to g}\phi'_{g'}\\ &= \int dr\sum_{g}\sum_{g'}\phi'_{g'}\left(\phi_{g'}^{+}-\phi_g^{+}\right)\Delta\Sigma_{g'\to g}\end{aligned} \tag{11}$$

拡散係数の摂動による「漏洩項」は以下のように計算される。

$$\begin{aligned}\left\langle f^{+}\Delta H f'\right\rangle_{Leak.} &= \int dr\sum_{g}\phi_g^{+}\left(-\Delta D_g\nabla^2\phi'_g\right)\\ &= \int dr\sum_{g}\Delta D_g\nabla\phi_g^{+}\cdot\nabla\phi'_g - \int_{Surface}\sum_{g}\phi_g^{+}\Delta D_g\nabla\phi'_g dA\end{aligned} \tag{12}$$

この最後の項はゼロ中性子束境界条件や反射条件ではゼロとなる。

$\nabla\phi$ はベクトル量であり各軸に対する中性子束の勾配を示す。上式の体積積分内ではふたつのベクトル量の内積が計算されているため、この積分は各軸に対する中性子束、随伴中性子束の勾配について行うことになる。拡散計算では、中性子束の勾配は該当メッシュ中心点とメッシュ端の中性子束を用いて計算され、その間の区間は勾配が一定であると仮定している (言うまでもないが、中性子束の勾配は拡散係数を用いてカレントと関連づけられる)。上の式の体積積分の項は、カレントを用いて以下のような形に変形される。

$$\left\langle f^{+}\Delta H f'\right\rangle_{Leak.} = \sum_{g}\sum_{i(=x,y,z)}\Delta D_{g,i}\sum_{j=+,-}\left(\frac{J'_{i,j}}{D'_{g,i}}\right)\left(\frac{J^{+}_{i,j}}{D_{g,i}}\right)\cdot V_{i,j} \tag{13}$$

ここで、体積 $V_{i,j}$ はメッシュを i 軸に対して垂直に分割した場合の j 側の体積であることを示す。なおこの式は、デカルト座標系のみならず、$i=r,z$ のように球体系や円筒体系にも適用できる（HexZ、TriZ 等、計算軸が直交しない場合は取り扱いが若干異なる）。

2.3 輸送理論に基づく摂動公式

輸送方程式を書き下すと

$$\Omega\cdot\nabla f(r,\Omega) + \Sigma_{t,g}f(r,\Omega) - \frac{1}{4\pi}\sum_{l}(2l+1)\sum_{g'}\Sigma^{l}_{g'\to g}\sum_{m}R_{lm}f_{lmg'} = \frac{1}{4\pi}\frac{\chi_g}{k}\sum_{g'}\nu\Sigma_{f,g'}f_{00g'} \tag{14}$$

となり、

$$f_{lm} = \int_{4\pi}d\Omega R_{lm}(\Omega)f(\Omega) = \sum_{i}\omega_i R_{lm}(\Omega_i)f(\Omega_i) \tag{15}$$

である。ここで、$\sum_{i}\omega_i = 4\pi$ である。なお、r、Ω はベクトル量である。この輸送方程式の両辺に対して随伴角度中性子束 $f^{+}(r,\Omega)$ を乗じ、全ての角度、空間、エネルギー群について積分をとることで摂動計算式が得られる。

摂動分母は以下のように計算される。

$$\left\langle f' G^+ f^+ \right\rangle = \sum_g \frac{1}{4\pi} \int dr f'_{00g} \nu \Sigma_{f,g} \sum_{g'} \chi_{g'} f^+_{00g'} \tag{16}$$

生成項は以下のように計算される。

$$\left\langle f^+ \Delta G f' \right\rangle = \sum_g \frac{1}{4\pi} \int dr f^+_{00g} \chi_g \sum_{g'} \nu \Sigma_{g'} f'_{00g'} \tag{17}$$

また、(スカラー中性子束を介した) 吸収断面積の摂動に関する項、すなわち吸収項は以下のように計算される。

$$\left\langle f^+ \Delta H f' \right\rangle_{Abs.} = \sum_g \frac{1}{4\pi} \int dr f^+_{00g} \Delta \Sigma_{a,g} f'_{00g} \tag{18}$$

全断面積の摂動に関する項は、前進、随伴角度中性子束を球面調和関数展開したその係数を用いて以下のように計算できる。

$$\begin{aligned}
\left\langle f^+ \Delta H f' \right\rangle_{Tot.} &= \sum_g \int dr \int d\Omega f^+_g(r,\Omega) \Delta\Sigma_{t,g} f_g(r,\Omega) \\
&= \sum_g \int dr \int d\Omega \left(\sum_l \sum_m \frac{2l+1}{4\pi} R_{lm}(\Omega) f^+_{lmg} \right) \Delta\Sigma_{t,g} \left(\sum_{l'} \sum_{m'} \frac{2l'+1}{4\pi} R_{l'm'}(\Omega) f'_{l'm'g} \right) \\
&= \sum_g \int dr \frac{1}{4\pi} \sum_l (2l+1) \sum_m f^+_{lmg} f'_{lmg} \Delta\Sigma_{t,g} \qquad (19)
\end{aligned}$$

ここで

$$\int_{4\pi} d\Omega R_{lm}(\Omega) R_{l'm'}(\Omega) = \frac{4\pi}{2l+1} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \tag{20}$$

を利用している。前述の吸収項はこの全断面積の摂動に関する項に含まれているため、それを考慮するならば、全断面積項の $l=0$、$m=0$ の成分を計算するときに $\Delta\Sigma_{t,g}$ から吸収断面積の寄与を差し引いてやる必要がある。なお、CBZ では f_{lm} は散乱断面積の最大展開次数までしか計算を行わないため、それ以上の l の成分をこの式に基づいて計算することができない。そこで、角度中性子束をそのまま求積公式に用いて、

$$\left\langle f^+ \Delta H f' \right\rangle_{Tot.} = \sum_g \int dr \sum_i \omega_i f^+_i \Delta\Sigma_{t,g} f'_i \tag{21}$$

として計算を行い、これと式 (19) の差分を「高次の漏洩成分」として計算する。なお、中性子輸送計算では一般に、内部反復で計算された角度中性子束そのものを保持しておく必要はなく、その球面調和関数の展開係数のみを散乱源計算のために保持しておけばよい。したがって、輸送ソルバー SNRZ や SNT では、デフォルトでは全てのエネルギー群の角度中性子束の情報は保持しない。しかし、前述の通り、摂動計算では全エネルギー群の角度中性子束の情報が必要となるため、そのような場合には `PutWriteFlux` メソッドにより、全エネルギー群の角度中性子束の情報を保持するように設定させてから、固有値計算を行う必要がある。

散乱中性子源における摂動の影響は

$$\left\langle f^+ \Delta H f' \right\rangle_{Scat.Src.} = -\int dr \frac{1}{4\pi} \sum_l \sum_m \sum_{g'} f'_{lmg'} \sum_g (2l+1) \Delta\Sigma^l_{g' \to g} f^+_{lmg} \tag{22}$$

として計算できる。

2.4 実効遅発中性子割合の計算

実効遅発中性子割合 $\beta_{\rm eff}$ は以下の式により計算される。

$$\beta_{\rm eff} = \sum_m \sum_i \left[\beta_i \gamma_i \right]^m \tag{23}$$

ここで、m は核分裂性核種の種類を示し、i は遅発中性子家系を示す。
　上式の右辺は、

$$[\beta_i\gamma_i]^m = \left[\int_V\int_{E'}\chi_{d,i}^m(E')\phi^+(E',r)dE'\int_E\nu_{d,i}^m(E)\Sigma_f^m\phi(E,r)dEdr\right]/D_p \tag{24}$$

であり、摂動分母 D_p は

$$\begin{aligned} D_p &= \sum_n\int_V\int_{E'}\chi^n(E')\phi^+(E',r)dE'\int_E\nu^n(E)\Sigma_f^n\phi(E,r)dEdV \\ &\approx \sum_n\int_V\int_{E'}\chi_p^n(E')\phi^+(E',r)dE'\int_E\nu_p^n(E)\Sigma_f^n\phi(E,r)dEdV \end{aligned} \tag{25}$$

であり (6) 式と一致する。
　なお、家系 i の遅発中性子収率 $\nu_{d,i}^m$ は、$\nu_{d,i}^m = a_{d,i}^m \times \nu_d^m$ で与えられる。