

1 はじめに

中性子の集団的な挙動は、以下に示すボルツマン型の中性子輸送方程式 (neutron transport equation) で記述される。

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int dE' \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') + S(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) \quad (1)$$

ここで、 ϕ が角度中性子束を示す。左辺の第一項、第二項はそれぞれ「流れの項」、「衝突項」、右辺第一項は「散乱項」と呼ばれる。また、右辺第二項は中性子源を示す。

式 (1) は一般的な中性子輸送方程式の表式であるが、核分裂連鎖反応に基づくシステムである原子炉 (炉心) を考えた場合には、以下のような固有値方程式を扱うことが一般的である。

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E, \vec{\Omega}) = \int dE' \int d\vec{\Omega}' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') + \frac{1}{4\pi} \frac{\chi(\vec{r}, E)}{k} \int dE' \int d\vec{\Omega}' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, E', \vec{\Omega}') \quad (2)$$

式 (1) において、中性子源が核分裂反応による中性子の発生 (核分裂中性子源) に置き換わっていることが分かる。また、核分裂中性子源項はこの方程式の固有値である k で除されており、これが中性子増倍率に対応する²。

原子炉など、中性子が介在するシステムにおいては、中性子による原子核反応が起こっている。この中性子による原子核反応によって決まるシステムの特性を核的特性 (核特性) と呼ぶ。例えば、原子炉での核的特性としては、中性子増倍率や、核分裂反応による熱出力の空間的な分布といったものが挙げられる。

本テキストの表題における炉物理計算は、「核分裂連鎖反応に基づくシステムである原子炉を対象とした中性子輸送方程式を解いて、原子炉の核的特性を予測、推定すること」と言い換えることが出来るであろう。

中性子輸送方程式の数値解法として、確率論的手法と決定論的手法が挙げられる。

前者では、中性子の一つ一つを追跡し、その発生から消滅までの追跡において、流れ、原子核との衝突、散乱、吸収、核分裂といった過程を確率的に厳密に取り扱う。このような計算を膨大な数の中性子について行い、その集団としての挙動を統計的に得ることによって、中性子輸送方程式の厳密解相当の結果を得ることが期待される³。中性子のエネルギーや空間位置、運動方向を連続的に扱うことが可能である点で、決定論的手法と大きくことなるが、有限個数の中性子の挙動に関する情報に基づいて集団の平均的挙動を推定することから、その結果には統計的な不確かさが伴う。

一方、後者では、中性子輸送方程式に現れる中性子束や反応断面積について、エネルギーや空間位置、運動方向といった変数に関して離散化を行い、各変数について離散化された輸送方程式を数値的に解く。従って、その解は一意的に得られるが、離散化による数値誤差が発生する。

中性子輸送方程式の数値解が必要とされる局面では、「計算結果の精度」と「計算時間」という異なる要請 (条件) が考えられる。例えば「計算時間はいくらかかってほしいので、可能な限り精度の良い解を得たい」という場合には確率論的手法が用いられるであろうし、「膨大な数の計算を行う必要があるため、そこそこの精度の解を高速に得たい」という場合には決定論的手法が用いられるであろう。また、「計算時間は今のままで十分短い、もう少しだけ精度がよい解を得たい」という場合には決定論的手法の高度化を図ることになるであろう。

例えば、原子力発電所を運転する際には、炉心にどのような組成、構造の燃料をどのような配置で装荷し、どのように運用するか、ということを考える必要があり、そこでは膨大な数の計算が要求される。従って、このような場では決定論的手法が現在でも一般的に用いられている。

¹/Document/Education/ReactorPhysicsCalculations

²この固有値方程式を満足する解は複数存在する。中性子増倍率は、固有値の解の中で値が最も大きいものになり、それに対応する固有関数が中性子束 ϕ となる。それ以外の固有関数は高次モード (High-order mode) と呼ばれる。

³従って、確率論的手法では中性子輸送方程式そのものを扱っているというわけではない [1]

本テキストでは、炉物理計算のうち、決定論的手法を対象とし、さらに問題を静的な問題（定常問題）に限定する。従って、動的な問題（動特性問題）や確率論的手法（モンテカルロ法）については触れないこととする。なお、燃焼問題（燃焼計算）については、本メモの最後に簡単に触れる。

原子炉の炉心全体に対して定義される中性子輸送方程式の解を求めることが炉物理計算の目的となる。従って、空間、エネルギー、角度について、適切なグリッドを設定し、それに基づいて定義される輸送方程式を解けばよいと考えられるが、現実的にはそれは極めて難しいと言える。その理由について以下に述べる。

まずは炉心の複雑な構造が挙げられる。炉心は複数の燃料集合体で構成され、燃料集合体内では、燃料ペレットが被覆管に収められた燃料棒が多数本配置される。また燃料集合体には、燃料棒群を取り囲むチャンネルボックス（BWR）やラッパ管（FBR）がその一部をなすものもある。さらに、燃料集合体といっても、通常の核燃料が収納されているものもあれば、中性子吸収材や中性子遮蔽材、照射用の機構が収納されているものもある。同一の燃料集合体であっても、そこに配置される燃料棒には異なるウラン濃縮度のものであれば、ガドリニア入りのものや水ロッド、計装管（放射線検出器など計測装置を挿入するための管）のようなものもある。炉心のこのような空間的な構造を一般的に非均質（Heterogeneous）構造と呼んでいるが、このような複雑な非均質構造を考慮して炉心全体の中性子輸送方程式を空間変数について離散化した場合には、膨大なグリッド数（メッシュ数）になることが容易に想像できるであろう。

また、中性子と原子核との反応確率（断面積）の、入射中性子のエネルギーに対する複雑な依存性が挙げられる。その例として、Fig. 1 に U-238 の中性子捕獲断面積を示す。断面積が極端に大きな値をとるピークの本一本を共鳴（Resonance）と呼ぶ。このような断面積のエネルギー依存性によって、中性子束のエネルギー依存性も極めて複雑なものとなる。従って、中性子輸送方程式をエネルギーについて離散化した場合も、膨大なグリッド数（エネルギー群数）になることが分かるであろう。

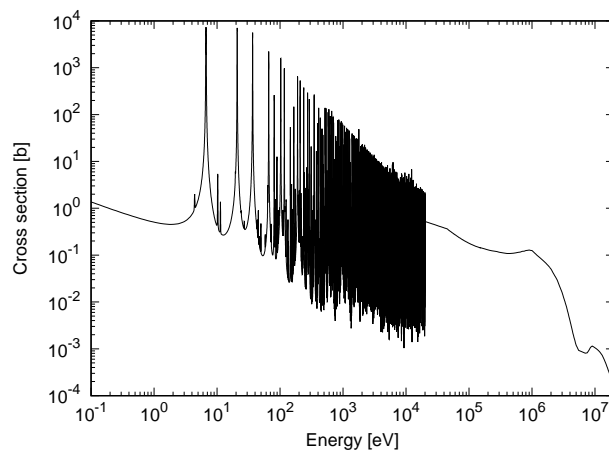


Fig. 1: U-238 の中性子捕獲断面積

主に以上のような理由で、全炉心の中性子輸送方程式を「そのまま」解くということは、多数の計算を繰り返す必要がある炉心の設計計算では一般的には行われていない⁴。ではどのような手続きを踏むのであろうか。簡単に説明するならば、以下のようにまとめられるのではないかと思います。

- 計算対象を全炉心ではなく炉心の一部に限定することで、空間、エネルギーについて高い解像度で中性子輸送方程式の解を得る。
- この（近似）解を用いて、空間、エネルギーについての解像度を下げる操作を行う。ただし、解像度を下げることにより生じる誤差をできるだけ小さく抑える。
- 空間、エネルギーの解像度を下げた状態で、計算する対象（空間）を広げていく。必要であればさらに空間、エネルギーの解像度を下げる。

⁴連続エネルギーモンテカルロ法ではこのようなことが可能であるが、多大な計算時間を要するため、原子炉の設計計算には現時点では適していないと言える。

- 最終的に、全炉心について、空間、エネルギーの適切な解像度のもとで中性子輸送方程式の解を得る。ここでは、必要であれば、中性子束の角度に関する解像度を下げる（解くべき方程式を簡略化する（中性子拡散方程式や簡易化 Pn (Simplified Pn) 方程式の解で代用する)）ということも行われる。

以上で説明した炉物理計算の一連の流れについて Fig. 2 にその概要を示す。(1) では、対象とする体系が限定されているため、空間的な構造やエネルギーについてかなり詳細に扱うことが可能である（エネルギーに対しては例えば数 10 万グリッド（エネルギー群）で離散化する場合もある）。(2) では、(1) と比べて空間的に広い範囲の体系を対象とするため、(1) と比べてエネルギーの解像度を下げて（例えば 100~200 群程度）計算を行う。(3) では、全炉心を対象としているため、(2) と比べてさらに空間、エネルギーの解像度を下げて計算を行う。

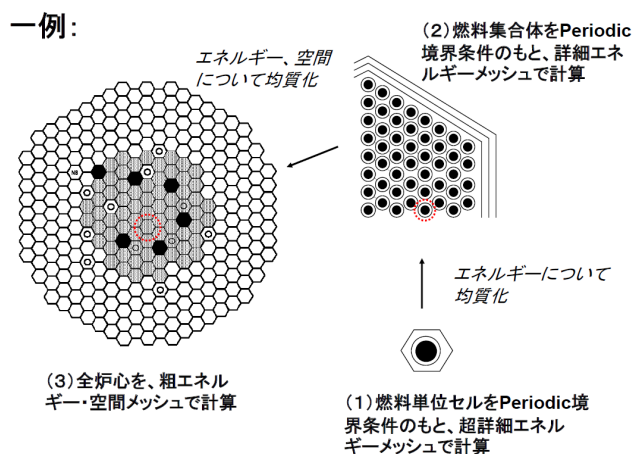


Fig. 2: 炉物理計算の一連の流れの概略

炉物理計算は大まかに格子計算（集合体計算）（Cell calculation, Lattice calculation, or Assembly calculation）と炉心計算（Core calculation or Whole-core calculation）に分けられ、「2段階計算」（2-step calculation）と呼ばれることもある。Fig. 2 においては、(1) と (2) は前者に、(3) は後者に該当する。炉心計算では、各々の燃料集合体は等価な単一の媒質に置き換えられ、集合体内の空間的な構造は考慮されない。また、中性子束や断面積などの中性子エネルギー依存性についても、2 から数十といった粗いメッシュ分割で取り扱われる。炉心計算で用いる、各々の集合体の情報（空間とエネルギーに関して平均化された断面積）を作成する過程を格子計算と言い換えることも出来るであろう。

以下では、この一連の流れの中での個々の局面について解説を行う。

2 格子計算（集合体計算）

2.1 評価済み核データファイルの利用

中性子輸送方程式 (2) に現れる Σ_t 、 Σ_s といったパラメータは中性子と原子核との反応確率を記述するものである。これらは媒質に対して定義される巨視的断面積（Macroscopic cross section）であり、微視的断面積（Microscopic cross section） σ_t^i 、 σ_s^i 等を用いて $\Sigma_t = \sum_i N^i \sigma_t^i$ のように定義される（ここで i は核種のインデックスに対応する）。この微視的断面積 σ を核データ（Nuclear data）と呼ぶ。核データは物理定数であるが、その真値を知ることは原理的に（ほぼ）不可能なので、核データに対する直接的な測定結果や、原子核反応の模型計算結果を用いて、その時点でもっとも確からしい値を推定する。この手続きを核データの評価（Nuclear data evaluation）と呼び、これによって決められる核データを評価済み核データ（Evaluated nuclear data）と呼ぶ。そして、様々な原子核についての様々な評価済み核データをまとめたものを評価済み核データファイル（もしくはライブラリ）（Evaluated nuclear data file or Evaluated nuclear data library）と呼ぶ。

評価済み核データファイルは世界のいくつかの国や機関で開発が進められており、米国の ENDF/B、欧州の JEFF、日本の JENDL が「世界三大ライブラリ」と称されている。

評価済み核データファイルは、一般的には ENDF-6 フォーマットと呼ばれる特定の形式で記述されたテキストファイルであるが、それをそのまま炉物理計算コードに用いることはなく、個々の炉物理コードに応じたデータ、形式に変換する必要がある。この変換の過程は評価済み核データファイルの処理 (Processing of evaluated nuclear data file) と呼ばれ、核データと炉物理をつなぐ重要な手続きである。核データファイルの処理を経て、それぞれの炉物理計算コード用の核データライブラリが作成されることになる (CBZ コードシステムでは CBZLIB という多群ライブラリを用いる)。

2.2 空間モデルの選択

炉心計算に用いる燃料集合体について空間的に均質化された少数エネルギー群の断面積を作成する際には、集合体の空間構造のモデル化の方法を選択する必要がある。

高速炉では中性子の平均自由行程が長いため、集合体内の詳細な非均質構造は軽水炉ほど重要ではない。そこで、それほど高い計算精度が要求されない設計計算などでは、燃料集合体内で構成媒質を「ごちゃまぜにした」扱いをする (厳密に言うと、各領域の核種数密度を体積荷重で平均化するという操作を行う)。このようなモデルを均質モデル (Homogeneous model) と呼ぶ。

一方、中性子の平均自由行程が短い軽水炉では、必ず燃料集合体内の非均質構造を考慮したモデル (非均質モデル (Heterogeneous model)) を用いる。また、非均質モデルでも、燃料集合体全体を考慮したモデルや燃料ピンセルのみからなるモデル (ピンセルモデル (Pin-cell model)) などがあり、さらに二次元の構造をそのままモデル化したものや一次元の円筒体系にモデル化したものなどがある。

以上についてまとめたものを Fig. 3 に示す。なお、格子計算では一般的に軸方向については無限を仮定するため、モデルは 2 次元もしくは 1 次元となる。

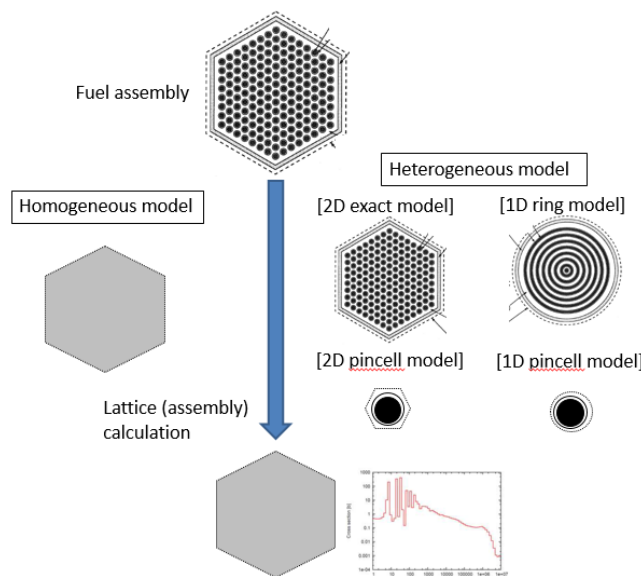


Fig. 3: 格子計算における空間モデルの例

2.3 共鳴処理・実効断面積の計算

格子計算の一般的な流れでは、はじめにエネルギーに関する解像度を下げる操作を行う。具体的には、本来は連続エネルギーで記述される核反応断面積や中性子束に対して、全エネルギー領域 (通常は 10^{-5} eV から 20 MeV) を複数のメッシュに分割してその各々のメッシュでこれらの値が一定と見做す操作を行う。このようにメッシュ分割されたエネルギー領域をエネルギー群 (Energy group) と呼び、その各々の群の断面積や中性子束を群断面積 (Group cross section or Multi-group cross section) や群中性子束 (Group neutron flux or Multi-group neutron flux) と呼んだりする。エネルギーを群で扱うことを、連続エネルギーに対して多群

(Multi-group) と呼ぶ。断面積の多群化の例を Fig. 4 に示す。この例ではエネルギーを 100 群程度に分割している。

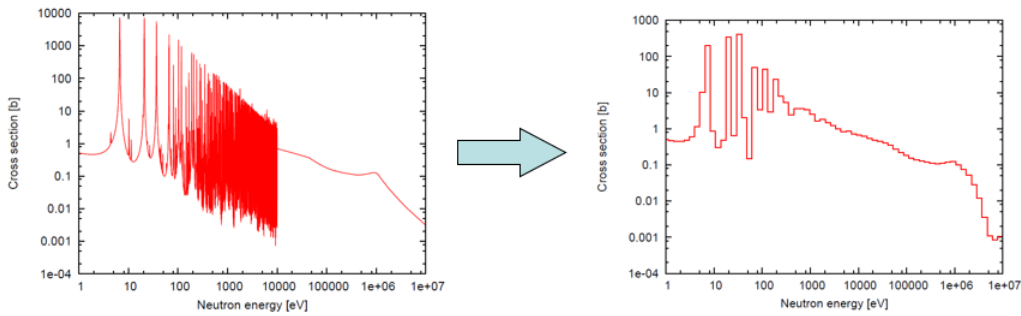


Fig. 4: 多群化の例

連続エネルギーで記述される断面積から多群の断面積を作成する最も精度の良い方法は、出来る限り多くの群に分割する（群数を大きくする）ことである。しかし、Fig. 4 の左図に示されているように、このような複雑なエネルギー依存性を有する断面積に対して、この構造を表現できる程度の群分割を行おうとするならば、数 10 万の群数が必要となる。このように断面積の共鳴構造を陽に取りこむような群構造は、超多群 (Ultra-fine or Super-fine) というような言い方がされ、ピンセルモデルなど計算対象とする体系が狭い範囲である場合に適用されることがある。このような場合、連続エネルギーから多群の断面積を作成するのはきわめて容易である（このような群分割のもとでは個々のエネルギー群で断面積は大きく変動しないため単純平均値を求めればよい）。

一般的には、格子計算では数 10 から 2000 程度に分割した群構造が用いられる。このような群構造だと、幅の狭い共鳴については、その個々について陽に表現することは出来ない。群断面積は反応率保存の観点から中性子束重みで平均化して求められるため、中性子束の歪みに応じて群断面積が変化することになる⁵。このような現象を考慮することを共鳴処理 (Resonance calculation) とよび、計算される群断面積を実効断面積 (Effective cross section) と呼ぶ。このあたりの理論については文献 [2] に解説しているので、そちらを参照されたい。

高速炉解析では、日本では JAERI Fast set (JFS) が採用した 70 群構造が有名であるが、例えばフランスの ECCO コードでは 1968 群が採用されている。一方、熱中性子炉解析では、日本では SRAC コードの 107 群構造が馴染み深い。最近ではフランスの SHEM-281 群や、CASMO-5 コードの 586 群構造など、群数の増加が図られている。このような詳細な群構造では、幅の広い共鳴は陽に扱われることになる。

いずれにしても、まずは炉心を構成する各媒質の断面積を多群化することにより、中性子輸送方程式を計算機で解くことが可能となるわけで、これが炉物理計算の最初のステップとなる。

エネルギーに関して離散化された（多群化された）中性子輸送方程式は以下のように記述される。これが（決定論的手法に基づく）炉物理計算が対象とする式となる。

$$\vec{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \Sigma_{t,g}(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \sum_{g'} \int d\vec{\Omega}' \Sigma_{s,g' \rightarrow g}(\vec{r}, \vec{\Omega}' \rightarrow \vec{\Omega}) \phi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') + \frac{1}{4\pi} \frac{\chi_g(\vec{r})}{k} \sum_{g'} \int d\vec{\Omega}' \nu \Sigma_{f,g'}(\vec{r}) \phi_{g'}(\vec{r}, \vec{\Omega}') \quad (4)$$

右辺は g 群の中性子の生成に関する項となっており、第一項は散乱中性子源、第二項は核分裂中性子源とも呼ばれる。

実効断面積の計算方法は均質モデルと非均質モデルとで異なるため、以下でそれぞれについて説明する。

⁵ 反応率 $\sigma(E)\phi(E)$ について、あるエネルギー区間の積分値を保存するようにそのエネルギー区間での群断面積 $\bar{\sigma}$ を決めるため、 $\bar{\sigma}$ は

$$\int \sigma(E)\phi(E)dE = \int \bar{\sigma}\phi(E)dE = \bar{\sigma} \int \phi(E)dE \quad (3)$$

から求められる。これはすなわち、中性子束 $\phi(E)$ を重みとした平均化操作に対応する。

2.3.1 均質モデルでの実効断面積計算

均質モデルでの実効断面積の計算は極めて容易である⁶。

2.3.2 非均質モデルでの実効断面積計算

最も一般的な非均質モデルでの実効断面積の計算方法は、1本の燃料ペレットとそれを取り囲む被覆管、冷却材で構成されるピンセルモデルを対象とするものである。境界条件としては、等方反射条件や完全反射条件が用いられる。イメージとしては、同じピンセルが平面上に無限に周期的に配置されているような体系から燃料ペレット1本分を代表して計算している、というものとなる。詳細は文献 [2] に説明されているが、燃料ペレットからの中性子の脱出確率に対して有理近似を適用することで、均質モデルと等価な扱いが可能となる。また、燃料ピンが周期的に並んでいる効果については、ダンコフ係数 (Dancoff factor) で考慮する (このあたりについては小林先生の「原子炉物理」や文献 [3] を参照のこと)⁷。なお、Dancoff 係数の計算は、燃料領域の全断面積を非常に大きくしたときの衝突確率 (詳しくは後述) を基にして行う。

実際の燃料集合体では、水ロッドや計装管、さらにはチャンネルボックスと水ギャップなどがあるため、個々の燃料ピンが置かれている環境はピンセルモデルとは厳密には異なり、それによる誤差が生じる。そこで、ダンコフ係数を実際の燃料集合体体系で計算する方法もあり、一般的にはそのような方法が用いられている。

2.4 ピンセルもしくは集合体での中性子輸送計算

実効断面積を非均質モデルで求めた場合には、非均質モデルにおける各領域 (媒質) の群断面積が決まるため、非均質モデルにおける中性子輸送方程式を解くことが可能となる。

2.4.1 ピンセルでの中性子輸送計算

ピンセルの空間平均断面積 (均質断面積) を計算する場合には、後述するように、ピンセルモデルの多群中性子輸送方程式を解き、そこで得られた中性子束を用いる必要がある。また、軽水炉燃料の燃焼特性を評価したり、新しい燃料概念についての定量評価を行ったりする場合には、ピンセルモデルでの燃焼計算を行う場合があり、このような場合もピンセルモデルの多群中性子輸送方程式を解くことになる。

ピンセルモデルでは、矩形の冷却材領域内に円形の燃料ペレットと被覆管が配置されることになるため、一般的な XY 直交座標系では体系を記述することができない。このような体系の中性子輸送方程式を解くための方法としては、衝突確率法 (Collision probability method) が一般的である⁸。

衝突確率法では、体系をいくつかの空間メッシュに分割し、領域 i で発生した中性子が領域 j ではじめて原子核と衝突して反応する衝突確率 $P_{i \rightarrow j}$ を計算する。すると、中性子輸送方程式は以下のように記述される。

$$\Sigma_{t,g,i} V_i \phi_{g,i} = \sum_j \left(\frac{1}{k} S_{f,g,j} + S_{s,g,j} \right) V_j P_{g,j \rightarrow i} \quad (5)$$

この式は領域 i での g 群の中性子バランスを示しており、 $\Sigma_{t,g,i}$ は領域 i での g 群の全断面積、 V_i は領域 i の体積、 $\phi_{g,i}$ は領域 i の g 群の中性子束、 k は中性子増倍率、 $S_{f,g,j}$ は領域 j の g 群の核分裂中性子源、 $S_{s,g,j}$ は領域 j の g 群の散乱中性子源をそれぞれ示す。左辺は領域 i での g 群の中性子によってどれだけの反応が起こっているかに対応し、右辺は他の領域で生まれた g 群の中性子が領域 i でどれだけ反応することになるかに対応している。これが等しいとされていることから、前述の通り、「領域 i での中性子バランスを示す」ことになる。この方程式は、空間領域数がそれほど大きくなければ、極めて容易に解くことができる。

衝突確率法の肝はむしろ衝突確率の計算自体にある。例えば、一次元の円筒体系や平板体系であれば、衝突確率は解析的に求めることができる。一方、ピンセル等、二次元で記述される体系については、射線追跡 (Ray-tracing) と呼ばれる方法で数値的に計算する必要がある。Ray-tracing では、いくつかの角度について全体系を網羅するように線を引き、その線上で積分計算を行い、最終的にそれを集約して衝突確率を求める。ここで考慮する角度の数や線の幅などが計算精度に直接影響する。Ray-tracing の概念を Fig. 5 に示す。

⁶CBZ では SelfShieldingCalculator モジュールの CalSelfShieldingInfiniteSystem メソッドあたりが対応。

⁷CBZ では SelfShieldingCalculator モジュールの CalThreeRegionDancoff メソッドあたりが対応。

⁸CBZ では PJI モジュールが対応。

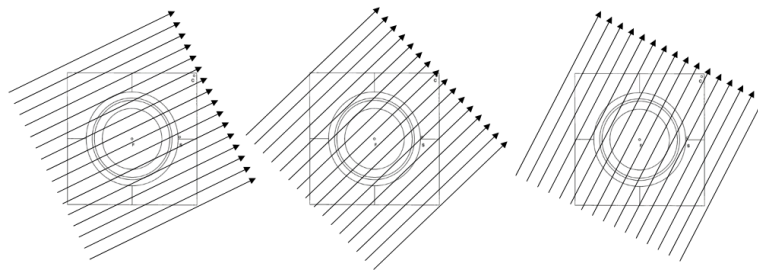


Fig. 5: Ray-tracing の概念

2.4.2 集合体での中性子輸送計算

ピンセルは簡易的なモデルであるため、より高い精度の計算が必要なときには燃料集合体モデルを採用することになる。

前述のように、衝突確率法では空間領域数が大きくなると計算負荷が極めて大きくなるため、燃料集合体の中性子輸送方程式を解く方法としては現実的ではない。そのため、カレント結合衝突確率法 (Current-coupling collision probability method) などが開発されてきたが、最近では特性曲線法 (Method of characteristics, MOC) を用いることが一般的である⁹。MOC は、特性曲線上の中性子輸送方程式を解き、その結果を集約して最終的な解を求めるというもので、衝突確率法と同様に Ray-tracing がベースとなっている。MOC についての文献は豊富で、日本語では例えば文献 [4] が挙げられるであろう。また、文献 [5] も非常に面白い。

2.5 断面積の均質化・縮約

炉心計算を行う場合、個々の燃料集合体の非均質構造を陽に取り扱うことは現実的ではない (ただし、現在、いろいろ研究開発は行われている)。そこで、燃料集合体内部を均質化 (Homogenization) するという操作が一般的に行われる。これは、非均質な燃料集合体の特性を保存するように集合体を均質としたときの断面積を決める、という問題となる。詳しくは、文献 [6] に記述があるので、そちらを参照してもらいたい。高速炉の燃料集合体を例にした均質化の概念を Fig. 6 に示す。

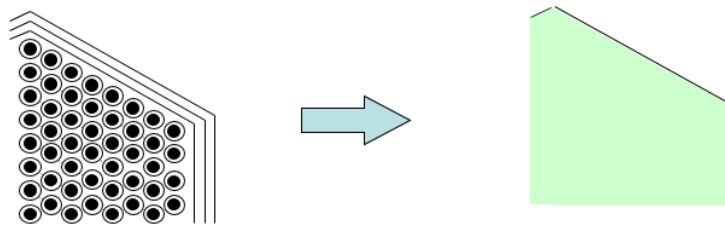


Fig. 6: 均質化の概念

均質化をもう少し具体的に説明すると、燃料集合体内の領域 (媒質) 毎に与えられている反応断面積から、各領域の中性子束を荷重にして集合体全体の平均断面積を求める、という操作になる。式で記述すると以下のようになる。

$$\tilde{\Sigma} = \frac{\sum_i \Sigma_i V_i \phi_i}{\sum_i V_i \phi_i} \quad (6)$$

ここで、 $\tilde{\Sigma}$ が均質化後の断面積、 Σ_i が領域 i の断面積を示す。 ϕ_i は、衝突確率法や MOC で求めたピンセルや燃料集合体の非均質モデルにおける領域 i の中性子束である。ここで求めた均質断面積 $\tilde{\Sigma}$ が、この燃料集合体を代表する断面積として (個々の燃料集合体を均質として扱う) 炉心計算に用いられる。

⁹CBZ では MEC モジュールが対応。

なお、この均質化の際に、断面積のエネルギー群数を小さくする操作が行われる場合がある。例えば、熱中性子炉解析では、全炉心計算は2群（高速群と熱群）で行う場合が一般的であるので、100群程度の群断面積から2群の断面積を計算することになる。このように、群断面積のエネルギー群数を小さくする操作を縮約（Collapsing or Condensation）と呼ぶ。断面積のエネルギー群縮約についても、文献 [6] に記述している。

以上のような説明からは、断面積の均質化は極めて簡単な手続きのように思えるかもしれないが、実はかなり奥が深い。不連続因子や Superhomogenization 法、拡散係数の決め方など、さまざまな関連する興味深いテーマがあるが、ここでは省略する。

3 炉心計算

これまでに述べたように、炉心計算では燃料集合体は均質媒質として扱われる。従って、燃料集合体が矩形である軽水炉については XYZ 体系でモデル化ができ、燃料集合体が六角柱である高速炉については六角座標（Hexagonal-Z）体系でモデル化できる。また、三次元の炉心を二次元円筒体系にモデル化する、ということも、特に高速炉でよく行われる。その概念図を Fig. 7 に示す。

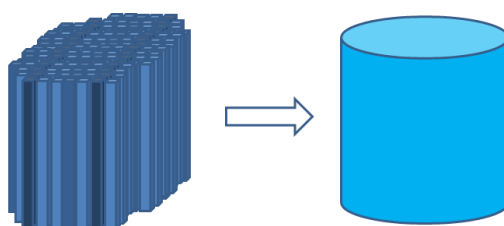


Fig. 7: 三次元炉心の二次元円筒体系へのモデル化の例

燃料集合体を均質媒質として扱った場合には、中性子束の角度依存性はそれほど大きくはならない。これは特に熱中性子炉で顕著である。このような場合は、中性子輸送方程式に対して角度中性子束に近似を導入して得られる中性子拡散方程式（Neutron diffusion equation）が用いられることも多い。拡散方程式では、角度中性子束ではなくスカラー中性子束（全角度について積分した中性子束）が計算対象となるため、角度依存中性子束を対象とする輸送方程式と比べて格段に計算負荷が小さくなる。輸送方程式、拡散方程式を数値的に解くことはそれぞれ輸送計算（Transport calculation）、拡散計算（Diffusion calculation）と呼ばれる。

3.1 輸送計算

XYZ 体系や Hexagona-Z 体系、RZ 体系等、比較的単純な座標系における中性子輸送方程式を解くための方法はいくつかあるが、中性子束の角度依存性の取り扱い方法の違いから、大きく離散座標法（Discrete-ordinate method or S_n method）と球面調和関数法（Spherical harmonics method or P_n method）とに分類される。 S_n 法は、角度中性子束について、いくつかの有限な方向のみについて考慮するというものであり、考慮する角度方向の数を大きくすることによって計算精度が向上する。一方、 P_n 法は、角度中性子束を球面調和関数によって展開し、その展開係数の空間分布を求めるというものであり、考慮する展開係数の次数を大きくすることによって計算精度が向上する。一般的には、 S_n 法のほうが、コーディングが容易ということもあり、多用されていると言えるであろう。

また、これらの方法は、空間についての取り扱い手法（離散化手法）の違いでさらに様々な方法に分けられる。 S_n 法で一般的な空間の取り扱い方法はダイヤモンド差分（Diamond-difference）と呼ばれるものであろう。ダイヤモンド差分の S_n 法に基づくコードとしては、日本では TRITAC が有名である [7]。また、 S_n コードとしては、米国ロスアラモス国立研究所（LANL）の DANTSYS や PARTISN、米国オークリッジ国立研究所（ORNL）の DOORS（TWOTRAN/THRETRAN）等が世界的に広く用いられている¹⁰。

¹⁰CBZ の SNT、SNRZ、SNR モジュールもダイヤモンド差分の S_n 法に基づく。なお、CBZ には一次元平板体系向けの P_n 法モジュール PNX もある。

3.2 拡散計算

中性子拡散方程式では角度依存性が現れないため、方程式を解くための方法は空間の取り扱いの違いのみで分類される。最もよく用いられるのが有限体積法 (Finite-volume method) であろう¹¹。なお、有限体積法は計算精度が空間メッシュ分割に強く依存するため、精度を確保するためにはある程度細かい空間メッシュが必要となり、計算負荷の増大を招く。そこで、原子炉の炉心がそれなりの大きさ (集合体サイズに相当) の均質な複数の媒質から構成されることに着目し、均質媒質内の中性子束分布を解析式や多項式で展開する近代ノード法 (Modern nodal method) もよく用いられている¹²。日本では MOSRA-Light コードが有名である [8]。

これ以外には、有限要素法や境界要素法¹³ を用いることもある。

4 燃焼計算

これまでに説明したのは、系を構成する媒質の核種数密度としてある値が与えられているという前提でのものであった。一方、原子炉では、運転に伴って、燃料中の核分裂性核種が減少するとともに、核分裂生成物が蓄積していく。すなわち、核燃料の組成が時々刻々と変化していくため、原子炉の運転を通じた挙動を考えるとときには、核燃料中の核種数密度の変化を追跡する必要がある。式 (2) で説明するならば、これまではこの式を構成する巨視的断面積 $\Sigma = \sum_i N_i \sigma_i$ は不変であると考えてきたが、燃焼問題では数密度 N_i の変化も考えなければならない、ということである¹⁴。

燃料中の核種数密度の変化を考慮する場合、すなわち燃焼問題を考慮する場合には、個々の核種がどれだけ中性子との核反応を起こしたか、すなわち反応率の情報が必要となる。核種 i 、反応 x の微視的反応率 $R_{i,x}$ は、対応する微視的断面積と中性子束 ϕ の積として計算されることから、燃焼中の中性子束の情報が必要となる。このことは、燃焼中のいくつかの時点において中性子輸送方程式 (もしくは拡散方程式) を解き、中性子束を計算する必要があることを意味する。

燃焼計算の手続きをもう少し具体的に述べるとするならば、以下のようなになるであろう。

1. 考える時間を I 個のステップに分割する。 $i=1$ とする。
2. i 番目の時間ステップについて、その始点での数密度は既知であるので、媒質の巨視的断面積が決まるので中性子輸送方程式が定義でき、それを解くことにより中性子束を得る。
3. 得られた中性子束から燃料中の全ての核種の微視的反応率を計算し、燃焼計算を行う。その結果、 i 番目の時間ステップ終点の数密度が得られる。
4. $i = I$ の場合は計算を終了する。そうでない場合は、 i に 1 を加えステップ 2 に戻る。

計算の対象が全炉心であれば「全炉心燃焼計算」であり、燃料集合体であれば「燃料集合体燃焼計算」¹⁵、ピンセルであれば「ピンセル燃焼計算」¹⁶に対応する。

なお、微視的反応率は全てのエネルギー範囲で積分したものとなる。多群近似で扱う場合には、以下の式で定義される。

$$R_{i,x} = \int \sigma_{i,x}(E) \phi(E) dE = \sum_{g=1}^G \sigma_{i,x,g} \phi_g \quad (7)$$

燃焼計算では中性子束の規格化条件を与える必要があるが、全中性子束レベルを指定する場合がある。従って、微視的反応率を以下のように計算すると便利である。

$$R_{i,x} = \bar{\sigma}_{i,x} \bar{\phi} \quad (8)$$

¹¹ 炉物理の分野では有限差分法 (Finite difference method) とされる場合もある。CBZ の PLOS モジュールもこれに該当する。ちなみに PLOSE モジュールは端メッシュ差分法に基づく拡散モジュールで、主に SNT の拡散合成加速法のために用いられている。

¹² 近大の人がこの方法に基づくコードを開発したら「近大近代ノード法コード」になるので是非実現してもらいたいものである。

¹³ CBZ には境界要素法に基づくソルバー ABEMIE がある。

¹⁴ エネルギーを多群で扱う場合には、共鳴自己遮蔽効果の影響によって、多群微視的断面積 σ_i も時間に依存して変化する。

¹⁵ CBZ では MulticellBurner モジュールが対応。

¹⁶ CBZ では Burner モジュールが対応。

ここで、 $\bar{\phi}$ は規格化条件として与えられる全中性子束レベルを示す。 $\bar{\sigma}_{i,x}$ は一群断面積と呼ばれ、中性子輸送方程式を解くことにより得られる中性子束 ϕ_g を用いて以下のように定義される。

$$\bar{\sigma}_{i,x} = \frac{\sum_{g=1}^G \sigma_{i,x,g} \phi_g}{\sum_{g=1}^G \phi_g} \quad (9)$$

5 おわりに

炉物理計算の一連の流れを紹介するためのテキストである。イメージしづらいところは適宜改訂するので連絡して欲しい。

参考文献

- [1] 山本俊弘、「Boltzmann 方程式の解法 -確率論的手法による解法-」、第 34 回炉物理夏期セミナーテキスト
- [2] 千葉豪、「共鳴自己遮蔽効果と実効断面積」、ホームページの「共鳴処理、共鳴自己遮蔽効果」の項
- [3] 宇根崎博信、「実効断面積計算手法の基礎 (超入門)」、第 36 回炉物理夏期セミナーテキスト
- [4] 牛尾直史、「Characteristics 法の基礎」、第 36 回炉物理夏期セミナーテキスト
- [5] 小坂進矢、「「私の EUREKA!」の舞台裏 ~大規模 Characteristics 計算手法の開発~」、第 35 回炉物理夏期セミナーテキスト
- [6] 千葉豪、「多群断面積の縮約と空間均質化の基礎」、ホームページの「断面積の縮約、均質化」の項
- [7] 山本敏久、「3次元 Sn コードの高速化」、第 35 回炉物理夏期セミナーテキスト
- [8] 奥村啓介、「近代ノード法と不連続因子の基礎」、第 36 回炉物理夏期セミナーテキスト