

炉物理プログラム演習： 上方散乱のある無限均質媒質における中性子の増倍

千葉 豪

多くの問題では、中性子は原子核との散乱反応によって必ずエネルギーを失うものとして考えるが、実際には原子（核）が熱振動していることから、原子核と反応する中性子のエネルギーが低い場合には、逆に原子核からエネルギーを得る、つまり散乱により中性子のエネルギーが増加することがある。このような散乱を上方散乱（up scattering）と呼び、軽水炉などの熱中性子炉では極めて重要な中性子-原子核反応の一つと言える。本演習では、上方散乱のある無限均質媒質における中性子の減速と増倍を考える。

体系が臨界でない場合でも成り立つように中性子無限増倍率 k_∞ を導入した無限均質媒質における中性子バランスの式は以下のように書ける。

$$\Sigma_{a,g}\phi_g + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g \rightarrow g'}\phi_{g'} = \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g}\phi_{g'} + \frac{\chi_g}{k_\infty} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}\phi_{g'}, \quad (g = 1, \dots, G) \quad (1)$$

ここで、除去断面積を $\Sigma_{r,g} = \Sigma_{a,g} + \sum_{g' \neq g} \Sigma_{s,g \rightarrow g'}$ と定義し、散乱源を下方散乱と上方散乱とに分けて記述すると、式 (1) は次のように書き直せる。

$$\Sigma_{r,g}\phi_g = \sum_{g'=1}^{g-1} \Sigma_{s,g' \rightarrow g}\phi_{g'} + \sum_{g'=g+1}^G \Sigma_{s,g' \rightarrow g}\phi_{g'} + \frac{\chi_g}{k_\infty} \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{f,g'}\phi_{g'}, \quad (g = 1, \dots, G) \quad (2)$$

この式において、右辺第一項が下方散乱源に、第二項が上方散乱源に対応する。

上方散乱が無い場合には、散乱源においては高いエネルギー群からの寄与のみを考えればよいため、高いエネルギー群から計算することにより、各エネルギー群の中性子束を計算するときには散乱源を既知とすることが出来た。一方、上方散乱がある場合には、あるエネルギー群の中性子束を計算する際に、それよりも低いエネルギー群の中性子束の値も散乱源の計算において必要となる。従って、中性子の減速計算を繰り返し行い、解を求める必要がある。

数値計算のためのプログラムのコーディングは具体的には以下のようなになるであろう。

1. Σ_a 、 $\nu \Sigma_f$ 、 χ 、 Σ_r といった断面積データや中性子束 ϕ については一次元の配列を、散乱元と散乱先の群の情報が必要となる Σ_s については二次元の配列を、それぞれ用意する。
2. 全核分裂中性子数 $S = \sum_g (\nu \Sigma_{f,g} \phi_g) / k_\infty$ の初期値として適当な値を仮定する（例えば 1.0）。なお、式 (2) から明らかのように中性子束の大きさは不定となるため、中性子束によって決まる核分裂中性子数も不定となる。従って、今回の計算では、全核分裂中性子数は常にここで指定した値となるように設定することになる。
3. エネルギーの高い群から中性子束の計算を行う。核分裂源は χ_g と全核分裂中性子数 S から計算し、 g 群に入ってくる上方散乱源、下方散乱源は、その時点での最新の中性子束の値を用いて計算する。
4. 上記ステップ 3 を全てのエネルギー群について繰り返す。
5. 全てのエネルギー群で計算が終了したら、計算した中性子束 ϕ_g に基づいて全核分裂中性子数 $S' = \sum_g \nu \Sigma_{f,g} \phi_g$ を計算する。
6. S 個の中性子が一世代後に S' となったことから、無限中性子増倍率の推定値 k'_∞ は S'/S と与えられる。なお、ステップ 2 で述べたように、全核分裂中性子数は一定値としているので、次の世代の計算でも、ステップ 2 で初期値として設定した値を使用する（ $k'_\infty = S'/S$ より $S'/k'_\infty = S$ であるため、 $S = 1$ とした場合には S'/k'_∞ は常に 1 となる、と理解してもよい）。
7. k_∞ の値にある程度の収束を見た時点で計算を終了する。

この例では、各エネルギー群の中性子束を計算する際に他の群からの散乱源を計算するようにしている。各エネルギー群の中性子束を計算した直後に他の群への散乱源を計算させる方法も勿論可能であるが、上方散乱源を考慮する必要があるため、僅かながら複雑になる（なお、この場合、散乱源配列は上方散乱と下方散乱とに分ける必要がないことを付記しておく）。

また、外部中性子源を含み、かつ核分裂による中性子の増倍が無い場合には、第 1 群から計算を行い第 G 群まで計算が終わった時点で、上方散乱源を更新し、再び第 1 群からの計算を行う、という流れとなる。ここで、体系に含まれる媒質の上方散乱における散乱後のエネルギー群の最小値 g' を計算しておけば、この反復においては毎回第 1 群から計算を行う必要はなく、2 回目の反復以降は第 g' 群から計算を行えばよいことが分かるであろう。

問題 1 : UO₂ 燃料を用いた軽水炉の燃料組成について、エネルギー群数を 107 としたときの定数を外部ファイル xs_uo2 に与えた。このファイルには、エネルギー群の境界エネルギー（データ数はエネルギー群数に 1 を加えたもの、すなわち 108 となる）、吸収断面積、核分裂生成断面積 $\nu\Sigma_{f,g}$ 、核分裂スペクトル、散乱断面積行列^a が与えられている。この媒質が無限に存在する系について、中性子無限増倍率 k_∞ と中性子束 ϕ_g を求めよ。なお、中性子束については、横軸をエネルギー、縦軸を中性子束として図示すること（横軸については log とし、縦軸については linear と log の 2 種類を作成すること）。

^a $\Sigma_{1\rightarrow 1}$ 、 $\Sigma_{1\rightarrow 2}$ 、 \dots 、 $\Sigma_{1\rightarrow 107}$ 、 $\Sigma_{2\rightarrow 1}$ 、 \dots 、 $\Sigma_{107\rightarrow 106}$ 、 $\Sigma_{107\rightarrow 107}$ の順で、計 107×107 個のデータが与えられている。

以下は、解答するうえでの補足である。

- g 群の上下限エネルギーをそれぞれ E_2 、 E_1 とした場合、 g 群の中性子束 ϕ_g は $\phi_g = \int_{E_1}^{E_2} \phi(E)dE$ と定義される。この式から明らかなように、群中性子束はエネルギー積分量であるので、これを図示する時にはヒストグラム状で示すべきである。この際、例えば横軸をエネルギーとして図示する場合は、エネルギー群のエネルギー幅 ($E_2 - E_1$) で割った値をプロットすべきである（単位エネルギーあたり、とする）。一方、横軸をエネルギーの対数として図示する場合は、エネルギー群のエネルギー対数に対する幅 $\log(E_2) - \log(E_1) = \log(E_2/E_1)$ で割った値をプロットすべきである。
- Python で log 関数を用いる際は、math 関数をインポートする必要がある。
- 1 次元で数値が並んだ外部ファイルが用意されている。これを Excel 等でインポートするのがきつい、という人は、別途連絡をすること（Excel 向けのデータ提供も可能）。

問題 2 : 熱平衡状態を仮定すると、熱中性子束がピークをとるエネルギー E_T は媒質の温度を $T[K]$ としたとき、 $E_T = 8.62 \times 10^{-5}T[eV]$ と与えられる。問題 1 で与えた媒質の温度を 1,000[K] としたときの E_T を求め、問題 1 で得られた中性子束エネルギースペクトルにおける E_T と比較せよ。なお、問題 1 の結果から得られた E_T は、理論値と一致しないが、これは実際には中性子の吸収や、熱エネルギーより高いエネルギーからの中性子の散乱の影響により、実際には熱中性子が熱平衡状態にはないことに由来する。

問題 3 : 無限中性子増倍率 k_∞ は、中性子の核分裂による全生成量 $P = \sum_g \nu\Sigma_{f,g}\phi_g$ 、吸収量 $L = \sum_g \Sigma_{a,g}\phi_g$ を用いて $k_\infty = P/L$ と定義できる。問題 1 で得た中性子束を用いて、この定義式で k_∞ を求め、問題 1 の結果と比較せよ（なお、(n,2n) 反応があるため、厳密には一致しない^a）。

^a散乱により中性子が 2 つ発生する反応が (n,2n) 反応である。例えば、 g 群から g' 群への (n,2n) 反応断面積が $\Sigma_{n2n,g\rightarrow g'}$ と書けるとしよう。この場合、 g 群の中性子の消滅という観点からは、 $\Sigma_{n2n,g\rightarrow g'}\phi_g$ なる項を g 群のバランス式の左辺に導入すればよいが、 g' 群の中性子の生成という観点からは、 $2\Sigma_{n2n,g\rightarrow g'}\phi_g\phi_{g'}$ なる項を g' 群のバランス式の右辺に導入する必要がある。従って、式 (1) の枠組みでは厳密に取り扱うことはできていないのである。

式 (2) は行列を用いて記述すると以下のように書ける。

$$A\phi = \frac{1}{k_\infty} F\phi \tag{3}$$

この両辺に全ての要素が 1.0 であるベクトル w^T を左から作用させ式を変形すると、以下の式を得ることができる。なお、肩添字 T は転置を意味する。

$$k_\infty = \frac{w^T F\phi}{w^T A\phi} = \frac{P}{L} \tag{4}$$

一方、反復計算の手続きは以下のように書ける。

$$A\phi^{(n+1)} = \frac{1}{k_\infty^{(n)}} F\phi^{(n)} \tag{5}$$

(n + 1) 回目の反復における k_∞ の推定値 $k_\infty^{(n+1)}$ は

$$k_\infty^{(n+1)} = \frac{\mathbf{w}^T \mathbf{F} \phi^{(n+1)}}{\mathbf{w}^T \mathbf{A} \phi^{(n+1)}} = \frac{\mathbf{w}^T \mathbf{F} \phi^{(n+1)}}{\mathbf{w}^T (1/k_\infty^{(n)}) \mathbf{F} \phi^{(n)}} \quad (6)$$

と書けることから、今回挙げた 2 つの k_∞ の推定法が等価であることが分かるであろう。

問題 4 : 問題 1 について、上方散乱断面積を全てゼロとして計算を行い、 k_∞ と ϕ_g を求めよ。また、上方散乱を考慮した問題 1 の結果との差異の理由について、説明を試みよ。

参考問題 : ウランとプルトニウムの混合酸化物燃料のデータを外部ファイル `xs_mox` に与えた。この燃料組成について、 k_∞ と ϕ_g を求めよ。また、 UO_2 燃料について計算した問題 1 の結果と比較すると、中性子束のエネルギースペクトル ϕ_g に差異が見られる。この差異の原因について、吸収断面積の差異に基づいて説明を試みよ。また、中性子無限増倍率 k_∞ の UO_2 燃料と MOX 燃料の大小の理由についても、吸収断面積、生成断面積、中性子束エネルギースペクトルの差異から説明を試みよ。