

Verification : 決定論的感度解析手法

北海道大学 千葉豪
(go_chiba@eng.hokudai.ac.jp)

1 はじめに

ある出力パラメータが入力パラメータから受ける影響の定量的な情報が「感度係数」である。その感度係数の計算の方法としては、入力パラメータに変動を与えて出力の変動を観察する方法と（一般化）摂動論を用いる方法とがある。前者は入力パラメータに変動を与えた計算を行うだけで済む一方、後者ではそれ相応のツール開発が必要となることから、私などは、前者を「手抜き」の方法、後者を「賢い」方法と見做していたような時期があったが、これが誤解であることを文献 [1] から学んだ。

複数個の出力パラメータがあるとする。これについて、膨大な数の入力パラメータに対する感度を計算する場合には、摂動論に基づく、通常の計算に加え出力パラメータの個数だけ随伴計算を行うことで感度係数を得ることができ、非常に効率的である。しかし、例えば入力パラメータがひとつだけしかない場合はどうであろうか。この場合、出力パラメータの個数回の随伴計算を行うまでもなく、通常の計算に加え入力パラメータに変動を与えた計算を一度行えばよいだけである。要は、場面に応じた適切なアプローチの選択が重要、ということであり、「何がなんでも摂動論」というのは誤りである¹。

ここで、摂動論で現れる随伴関数について簡単な説明を行う。中性子源 S が分布する中性子の非増倍系において、中性子束が ϕ のように分布するとし、 $R = \langle \Sigma \phi \rangle$ として定義されるパラメータに着目する。中性子束分布 ϕ は中性子の損失を示す演算子 A を用いて記述された以下の中性子輸送方程式に従う。

$$A\phi = S \quad (1)$$

一方、以下の随伴方程式を考える。

$$A^+\phi^+ = \Sigma \quad (2)$$

この式の両辺に ϕ を乗じ、全位相空間について積分すると、以下の式を得る。

$$R = \langle \Sigma \phi \rangle = \langle \phi, A^+\phi^+ \rangle = \langle \phi^+, A\phi \rangle = \langle \phi^+, S \rangle \quad (3)$$

すなわち、観測パラメータ R は、 $\langle S\phi^+ \rangle$ でも計算できることが分かる。いずれの方法でも R として得られる値は同じであるが、得られる情報は大きく異なる。すなわち、 $\langle \Sigma \phi \rangle$ からはパラメータに対する応答関数の寄与割合を知ることができる一方、 $\langle S\phi^+ \rangle$ からはパラメータに対する「中性子源の」寄与割合を知ることが出来る。原子炉で起こる物理過程を理解するためには、このいずれのアプローチも相補的に重要である。

本稿では、一般化摂動論を中心に、決定論に基づく感度解析手法の解説を行う。

¹ただし、核データからの誤差伝播計算では、核データのパラメータ数が膨大であることから、摂動論に基づくアプローチをとることが一般的である。

2 一般化摂動論

本節では、原研の三谷・黒井のレポート [2]、小林先生の「原子炉物理」第 10 章 [3] を基に、一般化摂動論について解説する。

2.1 世代別インポートランスの概念

一般化摂動論について議論する前に、世代別インポートランスの概念について述べる。外部中性子源の無い体系の中性子輸送方程式とその随伴方程式は次のように書ける。

$$A\phi = \frac{1}{k}F\phi, \quad (4)$$

$$A^+\phi^+ = \frac{1}{k}F^+\phi^+ \quad (5)$$

ここで、 F は中性子の生成を示す演算子であり、 F^+ はその随伴演算子に対応する。また、 k は実効増倍率を示す。

ここで、以下のような式を考える。

$$A^+\Gamma_0^+ = \Sigma \quad (6)$$

この式で定義される Γ_0^+ の物理的な意味を考えるため、以下のようなグリーン関数を考える。

$$A^+G^+(x, x_1) = \delta(x - x_1), \quad (7)$$

$$AG(x, x_0) = \delta(x - x_0) \quad (8)$$

ここでは位相空間を示す変数を簡単のため x とした。式 (8) より、グリーン関数 $G(x, x_0)$ は、位相位置 x_0 に置かれた点中性子源によって生じる x における中性子束に対応することが分かる。なお、ここでは核分裂による中性子の増倍は考慮されていない。また、随伴演算子の性質より、以下の関係が得られる。

$$\langle G^+(x, x_1), AG(x, x_0) \rangle = \langle G(x, x_0), A^+G^+(x, x_1) \rangle \quad (9)$$

式 (7)(8) を式 (9) に代入することにより、以下の相反定理が得られる。

$$G^+(x_0, x_1) = G(x_1, x_0) \quad (10)$$

これより、グリーン関数 $G^+(x, x_1)$ は、 x に置かれた点中性子源により生じる x_1 における中性子束（ただし核分裂による中性子の増倍は無視）に対応していると言える。

グリーン関数 $G^+(x, x')$ を用いると、式 (6) における Γ_0^+ は以下の積分方程式で記述することが出来る。

$$\Gamma_0^+(x) = \int G^+(x, x')\Sigma(x')dx' = \int \Sigma(x')G(x', x)dx' \quad (11)$$

すなわち、 $\Gamma_0^+(x)$ は、 x に置かれた点中性子源が生じさせる、体系全体での Σ で規定される反応の総数に対応することが分かる。つまり Γ_0^+ は、反応率 $\langle \Sigma\phi \rangle$ に対するインポートランスと考えることが出来る。なお、くどいようだが、ここでは中性子の核分裂による増倍を考えていないことに注意が必要である。

次に以下の式を考える。

$$A^+\Gamma_1^+ = F^+\Gamma_0^+ \quad (12)$$

この式をグリーン関数を用いて書き直すと、次の積分方程式を得る。

$$\begin{aligned} \Gamma_1^+(x) &= \int G^+(x, x')F^+\Gamma_0^+(x')dx' = \int G(x', x)F^+\Gamma_0^+(x')dx' \\ &= \int \Gamma_0^+(x')FG(x', x)dx' = \int \Gamma_0^+(x')FG^+(x, x')dx' \\ &= \int \Gamma_0^+(x')K^+(x, x')dx' \end{aligned} \quad (13)$$

ここで、カーネル $K^+(x, x')$ は、 x に置かれた点中性子源から発生した中性子が核分裂反応を起こし x' に発生させる中性子に対応する。 Γ_0^+ は反応率 $\langle \Sigma \phi \rangle$ に対するインポートンスであることから、 $\Gamma_1^+(x)$ は、 x に置かれた点中性子源から発生した中性子が核分裂反応を起こして発生させた次の世代の中性子による Σ で規定される反応の総数に対応する。

さらに以下の式を考える。

$$A^+\Gamma_n^+ = F^+\Gamma_{n-1}^+ \quad (14)$$

$n \geq 2$ について、 Γ_n^+ は以下の積分方程式で記述される。

$$\Gamma_n^+(x) = \int \Gamma_0^+(x')K_n^+(x, x')dx' \quad (15)$$

ここで

$$K_n^+(x, x') = \int \cdots \int K^+(x, x_1)K^+(x_1, x_2) \cdots K^+(x_{n-1}, x')dx_1 \cdots dx_{n-1} \quad (16)$$

である。以上の議論から、 $\Gamma_n^+(x)$ は、 x に点中性子源が置かれた際、 n 世代を経て発生する中性子による Σ で規定される反応の総数に対応するということが分かるであろう。

系が未臨界である場合、 Γ_n^+ は n が大きくなるにつれて減少する。一方、系が超過臨界である場合には Γ_n^+ は n とともに増大する。固有値方程式では核分裂中性子源が世代毎に規格化されることを考慮するため実効増倍率 k を導入すると、 $K^+(x, x')$ は以下で定義される $\bar{K}^+(x, x')$ で置換できる。

$$\bar{K}^+(x, x') \equiv \frac{1}{k}K^+(x, x') = \frac{1}{k}FG^+(x, x') = \lambda FG^+(x, x') \quad (17)$$

ここで $\lambda = 1/k$ である。この場合の Γ_n^+ は、反応率 $\langle \Sigma \phi \rangle$ に対する「世代毎に規格化された」世代毎インポートンスということになる。

ここで世代毎に規格化された Γ_n^+ についてまとめて示す。

$$A^+\Gamma_0^+ = \Sigma, \quad (18)$$

$$A^+\Gamma_1^+ = \lambda F^+\Gamma_0^+, \quad (19)$$

...

$$A^+\Gamma_n^+ = \lambda F^+\Gamma_{n-1}^+, \quad (20)$$

...

世代別のインポートランスはこのように計算されるが、この計算は固有値を固定したべき乗法に対応することがすぐに分かるであろう。従って、 n を十分に大きくとった場合は、 $\Gamma_n^+ \rightarrow a\phi^+$ 、すなわち世代別のインポートランスは通常随伴中性子束の定数倍に一致することになる²。つまり、多くの世代を介したインポートランスは、着目したパラメータ（ここでは反応率）に依らないことが分かる。

定数 a は以下のように決定される。式 (18) の両辺に ϕ を乗じて積分すると次の関係が得られる。

$$\langle \Sigma \phi \rangle = \langle \phi, A^+ \Gamma_0^+ \rangle = \langle \Gamma_0^+, A \phi \rangle = \langle \Gamma_0^+, \lambda F \phi \rangle \quad (21)$$

式 (20) に対しても同様の手続きを施すと以下の式が得られる。

$$\langle \Gamma_{n-1}^+, \lambda F \phi \rangle = \langle \Gamma_n^+, A \phi \rangle = \langle \Gamma_n^+, \lambda F \phi \rangle \quad (22)$$

これらより、 n が十分に大きい場合、次の関係が得られる。

$$\langle \Sigma \phi \rangle = \langle \Gamma_n^+, \lambda F \phi \rangle = a \langle \phi^+, \lambda F \phi \rangle \quad (23)$$

よって、定数 a は以下のように決まる。

$$a = \frac{\langle \Sigma \phi \rangle}{\langle \phi^+, \lambda F \phi \rangle} \quad (24)$$

ϕ^+ の大きさは任意であるため、式 (24) の分母が 1 になるように ϕ^+ を規格化すると

$$a = \langle \Sigma \phi \rangle \quad (25)$$

となる。

2.2 反応率比に対する感度係数の計算

一般化摂動論の概念を理解するため、反応率比に対する感度係数の世代別インポートランスを用いた計算方法について述べる。

基準体系の中性子輸送方程式を次のように書く。

$$(A - \lambda F)\phi = B\phi = 0 \quad (26)$$

また、摂動体系の中性子輸送方程式を次のように書く。

$$(A' - \lambda' F')\phi' = B'\phi' = (B + \Delta B)(\phi + \Delta\phi) = 0 \quad (27)$$

二次以上の項を無視することにより、これらの式から以下の式を得る。

$$\Delta B\phi + B\Delta\phi = 0 \quad (28)$$

式 (28) の両辺に ϕ^+ を乗じ内積をとると、以下の関係式を得る。

$$\langle \phi^+, \Delta B\phi \rangle = -\langle \phi^+, B\Delta\phi \rangle = -\langle \Delta\phi, B^+\phi^+ \rangle = 0 \quad (29)$$

²この繰り返し計算が $n = N$ で一定値に収束するとするならば、 $A^+\Gamma_N^+ = \lambda F^+\Gamma_N^+$ となり、 $\Gamma_N^+ = a\phi^+$ であることが分かるであろう。

すなわち、演算子の摂動について、 ϕ と ϕ^+ は直交関係にあることが分かる。

ここで、着目するパラメータとして反応率比 R を以下のように定義する。

$$R = \frac{\langle \Sigma_2 \phi \rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} \quad (30)$$

このとき、摂動に伴う反応率比の変動 ΔR は、高次の項を無視した場合に次のように書ける。

$$\Delta R = R \left\{ \frac{\langle \Delta \Sigma_2 \phi \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} - \frac{\langle \Delta \Sigma_1 \phi \rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} + \frac{\langle \Sigma_2 \Delta \phi \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} - \frac{\langle \Sigma_1 \Delta \phi \rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} \right\} \quad (31)$$

この式において右辺第一項と第二項は容易に計算することができるが、第三項、第四項を計算するためには摂動による中性子束の変動を計算しなければならない。一般化摂動論では、これらの項を演算子の変動から計算する。それにより、任意の摂動に対する応答の変動を、摂動後の中性子束を計算することなく求めることが出来る。

まず、前節で説明した反応率 $\langle \Sigma_i \phi \rangle$ に対する世代別のインポートランスを考える。

$$A^+ \Gamma_{i,0}^+ = \Sigma_i, \quad (32)$$

$$A^+ \Gamma_{i,1}^+ = \lambda F^+ \Gamma_{i,0}^+, \quad (33)$$

...

$$A^+ \Gamma_{i,n}^+ = \lambda F^+ \Gamma_{i,n-1}^+, \quad (34)$$

...

$\Gamma_{i,n}^+$ が $n \geq N$ で一定値に収束するとするならば、前述の通り、 ϕ^+ を適切に規格化することにより $\Gamma_{i,n}^+ = \langle \Sigma_i \phi \rangle \phi^+$ (ただし $n \geq N$) となる。

それでは、式 (31) における $\Delta \phi$ の項を演算子の変動で記述する。式 (32) の両辺に $\Delta \phi$ を乗じて積分すると、

$$\langle \Delta \phi, A^+ \Gamma_{i,0}^+ \rangle = \langle \Gamma_{i,0}^+, A \Delta \phi \rangle = \langle \Sigma_i \Delta \phi \rangle \quad (35)$$

が得られる。式 (28) より得られる以下の関係式

$$A \Delta \phi = \lambda F \Delta \phi - \Delta B \phi \quad (36)$$

を用いると式 (35) は次のように書ける。

$$\langle \Sigma_i \Delta \phi \rangle = \langle \Gamma_{i,0}^+, \lambda F \Delta \phi \rangle - \langle \Gamma_{i,0}^+, \Delta B \phi \rangle \quad (37)$$

この式について ΔB を明示すると以下のように書ける。

$$\langle \Sigma_i \Delta \phi \rangle = \langle \Gamma_{i,0}^+, \lambda F \Delta \phi \rangle + \langle \Gamma_{i,0}^+, \lambda' \Delta F \phi \rangle - \langle \Gamma_{i,0}^+, \Delta A \phi \rangle \quad (38)$$

この式の右辺第一項は中性子束の変動に伴う核分裂源の変動による反応率への影響を、第二項は生成演算子の変動に伴う核分裂源の変動による反応率への影響をそれぞれ示している。また第三項は消滅演算子の変動による反応率への影響を示していると考えてよいであろう。この式ではまだ $\Delta \phi$ が含まれるので、これを消去する必要がある。式 (34) の両辺に $\Delta \phi$ を乗じて積分すると以下の式を得る。

$$\langle \Gamma_{i,n}^+, A \Delta \phi \rangle = \langle \Gamma_{i,n-1}^+, \lambda F \Delta \phi \rangle \quad (39)$$

これを式 (36) を用いて変形すると、次の関係式が得られる³。

$$\begin{aligned}\langle \Gamma_{i,n-1}^+, \lambda F \Delta \phi \rangle &= \langle \Gamma_{i,n}^+, \lambda F \Delta \phi \rangle - \langle \Gamma_{i,n}^+, \Delta B \phi \rangle \\ &= \langle \Gamma_{i,n}^+, \lambda F \Delta \phi \rangle + \langle \Gamma_{i,n}^+, \lambda' \Delta F \phi \rangle - \langle \Gamma_{i,n}^+, \Delta A \phi \rangle\end{aligned}\quad (40)$$

これより、式 (37) は次のように書くことができる。

$$\langle \Sigma_i \Delta \phi \rangle = \langle \Gamma_{i,N}^+, \lambda F \Delta \phi \rangle - \sum_{n=0}^N \langle \Gamma_{i,n}^+, \Delta B \phi \rangle \quad (41)$$

従って、これまでの議論より、以下が得られる。

$$\langle \Sigma_i \Delta \phi \rangle = \langle \Sigma_i \phi \rangle \langle \phi^+, \lambda F \Delta \phi \rangle - \sum_{n=0}^N \langle \Gamma_{i,n}^+, \Delta B \phi \rangle \quad (42)$$

式 (42) を式 (31) の形式に直すと以下のようにになる。

$$\frac{\langle \Sigma_i \Delta \phi \rangle}{\langle \Sigma_i \phi \rangle} = \langle \phi^+, \lambda F \Delta \phi \rangle - \sum_{n=0}^N \frac{\langle \Gamma_{i,n}^+, \Delta B \phi \rangle}{\langle \Sigma_i \phi \rangle} \quad (43)$$

この右辺第一項には $\Delta \phi$ の項が残っているが、これは反応の種類 i に依存しないため、式 (31) ではふたつの反応間で相殺され消える。最終的に、式 (31) の $\Delta \phi$ に関わる項は以下のように書ける。

$$\frac{\langle \Sigma_2 \Delta \phi \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} - \frac{\langle \Sigma_1 \Delta \phi \rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} = - \sum_{n=0}^N \frac{\langle \Gamma_{2,n}^+, \Delta B \phi \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} + \sum_{n=0}^N \frac{\langle \Gamma_{1,n}^+, \Delta B \phi \rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} \quad (44)$$

以上で、式 (31) における $\Delta \phi$ の項が、演算子の摂動 ΔB と世代別インポートانس $\Gamma_{i,n}^+$ から計算できることが示された。

2.3 一般化随伴中性子束とその計算方法

反応率比の変動における $\Delta \phi$ が関わる成分を示す式 (44) を次のように書き直す。

$$\frac{\langle \Sigma_2 \Delta \phi \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} - \frac{\langle \Sigma_1 \Delta \phi \rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} = - \sum_{n=0}^N \left\langle \left(\frac{\Gamma_{2,n}^+}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} - \frac{\Gamma_{1,n}^+}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} \right) \Delta B \phi \right\rangle = - \sum_{n=0}^N \langle \Gamma_n^+ \Delta B \phi \rangle \quad (45)$$

ここで、 Γ_n^+ は以下で定義される。

$$A^+ \Gamma_0^+ = \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} - \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle}, \quad (46)$$

$$A^+ \Gamma_1^+ = \lambda F^+ \Gamma_0^+, \quad (47)$$

...

$$A^+ \Gamma_n^+ = \lambda F^+ \Gamma_{n-1}^+, \quad (48)$$

...

³この式の意味するところは、「中性子束の変動に伴う核分裂源の変動により $(n-1)$ 世代後に引き起こされる反応率の変動は、そのひとつ前の世代の中性子束、演算子の変動により引き起こされる反応率の変動と等しい」ということになるであろうか。

Γ_n^+ は反応率比に対する世代別インポートランスに対応する。 $n \geq N$ で $\Gamma_n^+ = a\phi^+$ となるとすると、式 (46) で定義された源の場合は $a = 0$ となるため、 $n \geq N$ で $\Gamma_n^+ = 0$ となる。上の式の両辺の和をとると、以下の式を得る。

$$A^+\Gamma^+ = \lambda F^+\Gamma^+ + \frac{\Sigma_2}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} - \frac{\Sigma_1}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} \quad (49)$$

ここで、 $\Gamma^+ = \sum_{n=0}^{\infty} \Gamma_n^+ = \sum_{n=0}^N \Gamma_n^+$ である。この Γ^+ を用いれば、式 (44) は以下のように簡略化して書くことができる。

$$\frac{\langle \Sigma_2 \Delta \phi \rangle}{\langle \Sigma_2 \phi \rangle} - \frac{\langle \Sigma_1 \Delta \phi \rangle}{\langle \Sigma_1 \phi \rangle} = -\langle \Gamma^+, \Delta B \phi \rangle \quad (50)$$

これが反応率比に対する一般化摂動論としてよく知られた式であり、 Γ^+ は反応率比に対する一般化随伴中性子束と呼ばれる。

ここで、式 (49) について、源を S^+ として以下のように記述する。

$$A^+\Gamma^+ = \lambda F^+\Gamma^+ + S^+ \quad (51)$$

$S^+ = 0$ のときには通常の随伴輸送方程式となることから、 Γ^+ が ϕ^+ の値をとるとするならば、 $A^+\Gamma^+$ と $\lambda F^+\Gamma^+$ 自体が釣り合うため、この方程式は成立しない。

中性子束 ϕ を式 (51) に乗じ、全空間、エネルギー群について積分すると以下の式を得る。

$$\langle \phi, A^+\Gamma^+ \rangle = \langle \phi, \lambda F^+\Gamma^+ \rangle + \langle \phi S^+ \rangle \quad (52)$$

随伴演算子の性質と $A\phi = \lambda F\phi$ の関係を用いることにより以下の式を得る。

$$\langle \phi S^+ \rangle = 0 \quad (53)$$

これより、式 (51) が解を持つためには源 S^+ が中性子束 ϕ と直交しなければならないことが分かる。実際、式 (46) の源でもその条件を満たしていることが確認できる。

以下、一般化随伴中性子束の計算方法について説明するため、次のような未臨界体系における固定源中性子輸送方程式を考える。

$$A\phi = F\phi + S \quad (54)$$

この式を数値的に解く場合、通常、以下のような反復法を用いるであろう。

$$\phi^{(0)} = A^{-1}S, \quad (55)$$

$$\phi^{(n)} = A^{-1}F\phi^{(n-1)} + A^{-1}S, \quad (n \geq 1) \quad (56)$$

従って、

$$\begin{aligned} \phi^{(n)} &= A^{-1}F \left(A^{-1}F\phi^{(n-2)} + A^{-1}S \right) + A^{-1}S \\ &= \left\{ \left(A^{-1}F \right)^n + \left(A^{-1}F \right)^{n-1} + \left(A^{-1}F \right)^{n-2} + \dots + I \right\} A^{-1}S \end{aligned} \quad (57)$$

と書ける。ここで、固有値方程式

$$A\phi_i = \frac{1}{k_i}F\phi_i = \lambda_i F\phi_i \quad (58)$$

を考え $A^{-1}S$ を以下のように固有関数で展開する。

$$A^{-1}S = \sum_{i=0} a_i \phi_i \quad (59)$$

これらを式 (57) に代入すると、以下の式を得る。

$$\begin{aligned} \phi^{(n)} &= \left\{ (A^{-1}F)^n + (A^{-1}F)^{n-1} + (A^{-1}F)^{n-2} + \dots + I \right\} \sum_{i=0} a_i \phi_i \\ &= \sum_{i=0} a_i k_i^n \phi_i + \sum_{i=0} a_i k_i^{n-1} \phi_i + \sum_{i=0} a_i k_i^{n-2} \phi_i + \dots + \sum_{i=0} a_i \phi_i \end{aligned} \quad (60)$$

系が未臨界で $k_i < 1$ であることから、 n が大きくなると $k_i^n \rightarrow 0$ となり、収束解が得られることが保証される。

それでは、一般化随伴方程式のように固有値方程式に固定源が付加された場合、すなわち

$$A\phi = \frac{1}{k}F\phi + S \quad (61)$$

の形式の方程式を解く場合はどうなるであろうか。ここで、 $1/k$ を導入するかわりに、演算子 F を F/k としたと考えれば (F/k を演算子 F と見做せば)、式 (54) に基づく前述の考え方を適用できる。この場合、基本モードの固有値は 1 となるため、前述の反復計算では $n \rightarrow \infty$ でも基本モード成分が残ることになり、収束解を得ることが出来ない。

ただし、例外として、 $A^{-1}S (= \phi^{(0)})$ に基本モード成分が含まれない場合、すなわち $a_0 = 0$ の場合には、この方法で収束解を得ることが理論的には可能と言える。その観点から考えると、上述の方法は次に述べるノイマン級数展開による方法と手続き上は同一と考えてよいかもしれない。

ノイマン級数展開による一般化随伴方程式の計算方法は次の通りである。一般化随伴方程式 (51) を以下のように変形する。

$$\left(I - (A^+)^{-1} \lambda F^+ \right) \Gamma^+ = (A^+)^{-1} S^+ \quad (62)$$

ここで、行列 $(A^+)^{-1} \lambda F^+$ のスペクトル半径が 1 未満である場合、ノイマン級数での展開が可能となる⁴。なお、この行列のスペクトル半径が 1 未満であるかどうかの議論はここでは行わない⁵。 Γ^+ はノイマン級数展開により以下のように書ける。

$$\Gamma^+ = \left\{ \sum_{n=0} \left((A^+)^{-1} \lambda F^+ \right)^n \right\} (A^+)^{-1} S^+ = \sum_{n=0} \Gamma_n^+ \quad (64)$$

⁴ $(I - B)x = c$ なる連立一次方程式を解く場合に、以下のように $(I - B)$ の逆行列として無限級数 Q を考える。

$$x = (I - B)^{-1}c = (I + B + B^2 + B^3 + \dots)c = Qc \quad (63)$$

この無限級数 Q をノイマン級数と呼び、この級数が収束するための条件は行列 B のスペクトル半径が 1 より小さくなることである。

⁵ λ が固定された値であるとする、この行列の固有値 $\bar{\lambda}$ は、 $A^+x = (1/\bar{\lambda})\lambda F^+x$ を満たす。従って、 $\bar{\lambda}$ の最大固有値は 1.0 であり、スペクトル半径は 1 となる。ただし、後述のように $\Gamma_0 = (A^+)^{-1}S$ は基本随伴モードを含まないため、実効的なスペクトル半径は 1 未満となる (と思う)。

この式に基づいて Γ_n^+ を $n = 0$ から書き下していくと、 Γ_n^+ が本節冒頭で示した世代別インポートランスに対応することが分かる。

さて、ここで、随伴固有関数を

$$A^+ \phi_i^+ = \lambda_i F^+ \phi_i^+ \quad (65)$$

で定義し、式 (46) における Γ_0^+ を以下のように随伴固有関数で展開する。

$$\Gamma_0^+ = \sum_{i=0} g_i \phi_i^+ \quad (66)$$

すると、式 (46) は次のように書ける。

$$A^+ \sum_{i=0} g_i \phi_i^+ = S^+ \quad (67)$$

この両辺に中性子束 ϕ を乗じ積分すると、以下の関係式を得る。

$$\sum_{i=0} g_i \langle \phi, A^+ \phi_i^+ \rangle = \sum_{i=0} g_i \lambda_i \langle \phi, F^+ \phi_i^+ \rangle = \langle \phi, S^+ \rangle \quad (68)$$

固有関数と随伴固有関数は演算子 F について直交すること (文献 [3]、p.679) と、式 (53) の関係を用いることにより、以下の式を得る。

$$g_0 = 0 \quad (69)$$

すなわち、一般化随伴中性子束の計算では、 Γ_0^+ には基本随伴モード成分が含まれないことが分かる⁶。

べき乗法では高次モードはドミナンス比に応じて減衰していくため、形式的にはべき乗法と同一であるノイマン級数法による計算では、 Γ_0^+ に基本モード成分が含まれない場合には、反復を行うにつれて Γ_n^+ はゼロに収束していく。従って、一般化随伴中性子束 Γ^+ を計算することが出来ると言える。しかし、計算の過程で数値誤差により基本随伴モード成分が混入するおそれがあるため、反復毎に基本随伴モード成分を引き抜くという対応がとられる。すなわち、以下のように Γ_n^+ から基本随伴モード成分 $c\phi^+$ を引き抜いた $\bar{\Gamma}_n^+$ を計算することになる。

$$\bar{\Gamma}_n^+ = \Gamma_n^+ - c\phi^+ \quad (70)$$

定数 c を決めるため、この両辺に F^+ を作用させ ϕ を乗じ積分すると、以下の式を得る。

$$\langle \phi, F^+ \bar{\Gamma}_n^+ \rangle = \langle \phi, F^+ \Gamma_n^+ \rangle - c \langle \phi, F^+ \phi^+ \rangle \quad (71)$$

$\bar{\Gamma}_n^+$ は ϕ^+ を含まないため ϕ と $\bar{\Gamma}_n^+$ は F^+ について直交する。従って、式 (71) の左辺はゼロとなり、 c は以下のように決まる。

$$c = \frac{\langle \phi, F^+ \Gamma_n^+ \rangle}{\langle \phi, F^+ \phi^+ \rangle} \quad (72)$$

⁶従って、理論的には、前述した通常の反復計算であっても解は求められる筈である。

2.4 固有関数展開を用いた場合

ここでは、中性子束の変動を固有関数展開で記述した場合と世代別インポートランスを用いた場合との関係について述べる（文献 [2] の V 章に対応）。

基準体系の輸送方程式を $B\phi = 0$ と記述し、演算子 B に ΔB なる摂動が加えられたとする。ここで、摂動による中性子束の変動を以下のように固有関数展開で記述する。

$$\Delta\phi = \sum_{i=0} a_i \phi_i \quad (73)$$

これを式 (28) に代入すると、以下の関係式を得る。

$$\Delta B\phi = -B\Delta\phi = -\sum_{i=0} a_i B\phi_i \quad (74)$$

定数 a_i は以下のように決まる。まず、 a_0 を求めるために、この式の両辺に ϕ^+ を乗じ内積をとると、以下の式を得る。

$$\langle \phi^+, \Delta B\phi \rangle = -\sum_{i=0} a_i \langle \phi^+, B\phi_i \rangle = -\sum_{i=0} a_i \langle \phi^+, (A - \lambda F)\phi_i \rangle = -\sum_{i=0} a_i (\lambda_i - \lambda) \langle \phi^+, F\phi_i \rangle \quad (75)$$

式 (29) より、この式の左辺はゼロとなる。また、固有関数と随伴固有関数とは F について直交すること、 $\lambda_0 = \lambda$ であることから、右辺もゼロとなり、 a_0 は不定となる。これは固有値方程式では中性子束の大きさが任意であることに由来する。また、高次項の係数は以下のように決まる。式 (74) の両辺に ϕ_j^+ （ただし $j \geq 1$ ）を乗じて内積をとると以下の式を得る。

$$a_j = \frac{-\langle \phi_j^+, \Delta B\phi \rangle}{(\lambda_j - \lambda) \langle \phi_j^+, F\phi_j \rangle} \quad (76)$$

以上より中性子束の変動による反応率の変動は以下のように書ける。

$$\langle \Sigma\Delta\phi \rangle = a_0 \langle \Sigma\phi \rangle - \sum_{i=1} \frac{\langle \phi_i^+, \Delta B\phi \rangle}{(\lambda_i - \lambda) \langle \phi_i^+, F\phi_i \rangle} \langle \Sigma\phi_i \rangle \quad (77)$$

ここで、

$$\bar{\Gamma}^+ = \sum_{i=1} \frac{\langle \Sigma\phi_i \rangle \phi_i^+}{(\lambda_i - \lambda) \langle \phi_i^+, F\phi_i \rangle} \quad (78)$$

とおけば、式 (77) は

$$\langle \Sigma\Delta\phi \rangle = a_0 \langle \Sigma\phi \rangle - \langle \bar{\Gamma}^+, \Delta B\phi \rangle \quad (79)$$

と書くことが出来る。これが固有関数展開を行った場合の $\langle \Sigma\Delta\phi \rangle$ の表式である。

一方、世代別インポートランスを用いた場合、 $\langle \phi^+, \lambda F\phi \rangle = 1$ と規格化すると、 $\langle \Sigma\Delta\phi \rangle$ は以下のように書けた。

$$\langle \Sigma\Delta\phi \rangle = \langle \Sigma\phi \rangle \langle \phi^+, \lambda F\Delta\phi \rangle - \sum_{n=0}^N \langle \Gamma_n^+, \Delta B\phi \rangle \quad (80)$$

この両者を比較する。

まず、式 (80) を以下のように変形する。

$$\begin{aligned}
\langle \Sigma \Delta \phi \rangle &= \langle \Sigma \phi \rangle \langle \phi^+, \lambda F \Delta \phi \rangle + \sum_{n=0}^N \left\langle \left(\Gamma_N^+ - \Gamma_n^+ \right), \Delta B \phi \right\rangle - \sum_{n=0}^N \left\langle \Gamma_N^+, \Delta B \phi \right\rangle \\
&= \langle \Sigma \phi \rangle \langle \phi^+, \lambda F \Delta \phi \rangle + \sum_{n=0}^N \left\langle \left(\Gamma_N^+ - \Gamma_n^+ \right), \Delta B \phi \right\rangle \\
&= \langle \Sigma \phi \rangle \langle \phi^+, \lambda F \Delta \phi \rangle + \left\langle \sum_{n=0}^N \left(\Gamma_N^+ - \Gamma_n^+ \right), \Delta B \phi \right\rangle \\
&= \langle \Sigma \phi \rangle \langle \phi^+, \lambda F \Delta \phi \rangle - \left\langle \hat{\Gamma}^+, \Delta B \phi \right\rangle
\end{aligned} \tag{81}$$

導出は省略するが、 $\hat{\Gamma}^+$ が従う方程式は以下のように書ける。

$$A^+ \hat{\Gamma}^+ = \lambda F^+ \hat{\Gamma}^+ - \lambda F^+ \Gamma_N^+ + \Sigma \tag{82}$$

この $\hat{\Gamma}^+$ を随伴固有関数で展開した場合、以下のように書ける。

$$\hat{\Gamma}^+ = \sum_{i=0} b_i \phi_i^+ \tag{83}$$

係数 b_i を決めるため、この式を式 (82) に代入し、両辺に固有関数 ϕ_j を乗じて内積をとると、以下の式を得る。

$$\sum_{i=0} b_i \langle \phi_j, B^+ \phi_i^+ \rangle = - \langle \phi_j, \lambda F^+ \Gamma_N^+ \rangle + \langle \Sigma \phi_j \rangle = - \langle \Sigma \phi \rangle \langle \phi_j, \lambda F^+ \phi^+ \rangle + \langle \Sigma \phi_j \rangle \tag{84}$$

$j = 0$ では $\langle \phi^+, \lambda F \phi \rangle = 1$ と規格化されていることから $b_0 = 0$ が得られる。また、 $j \neq 0$ では、 ϕ_i^+ と ϕ_j の演算子 F についての直交関係を利用することにより、

$$b_j = \frac{\langle \Sigma \phi_j \rangle}{\langle \phi_j, B^+ \phi_j^+ \rangle} = \frac{\langle \Sigma \phi_j \rangle}{\langle \phi_j^+, B \phi_j \rangle} = \frac{\langle \Sigma \phi_j \rangle}{\langle \phi_j^+, (A - \lambda F) \phi_j \rangle} = \frac{\langle \Sigma \phi_j \rangle}{\langle \phi_j^+, (\lambda_j - \lambda) F \phi_j \rangle} \tag{85}$$

が得られ、 $\hat{\Gamma}^+$ は以下のように書ける。

$$\hat{\Gamma}^+ = \sum_{i=1} \frac{\langle \Sigma \phi_i \rangle \phi_i^+}{(\lambda_i - \lambda) \langle \phi_i^+, F \phi_i \rangle} \tag{86}$$

これと式 (78) を比較することにより、 $\bar{\Gamma}^+$ と $\hat{\Gamma}^+$ は全く等しいことが分かる。

また、式 (80) の右辺第一項であるが、式 (73) を代入すると、 $\langle \Sigma \phi \rangle \langle \phi^+, \lambda F \Delta \phi \rangle = a_0 \langle \Sigma \phi \rangle$ となり、式 (79) の右辺第一項と一致する。

以上、固有関数展開を用いた方法と世代別インポートンスを用いた方法とが一致することを示した。文献 [2] には、固有関数展開を用いた方法では高次固有関数の計算が必要となるため、複雑な体系での適用は難しいのではないかという記述がある。ただし、数多くの炉心パラメータに対する感度を計算する場合には、世代別インポートンスを用いた方法ではパラメータの数だけ計算を行う必要があるが、固有関数展開を用いた方法では予め計算しておいた固有関数を用いればよい。従って、高次固有関数の計算が容易であれば、固有関数展開を用いた方法も有効であるとの記述もある。

3 衝突確率法に基づく感度解析手法

歴史的に、感度解析は高速炉解析の分野を中心に行われてきたため、感度解析のツールとしては全炉心計算を想定したものが多く開発されてきた。それと比較して、燃料ピンセル、燃料集合体に対する感度解析ツールの開発例はそれほど多くない。国内の例としては、阪大グループによる衝突確率法に基づくコード SAINT[4] や、名大グループが開発している MOC に基づくコード [5] などが挙げられるであろう。また、海外に目を向けると、モントリオール工科大学の Marleau らが、衝突確率法、MOC に基づく感度計算コードを開発している [6, 7, 8, 9]。

筆者が衝突確率法に基づく感度解析計算を行おうと思いつき、関連の文献を眺めていたときに、Williams の文献 [10] の以下の記述が目にとまった。「Interestingly, the adjoint function for the integral flux equation is not the same quantity as the previously discussed adjoint function for the integro-differential transport equation, even though the forward solutions of course are identical!」。Williams 氏が記述した通り、「面白い」と感じたので、本節ではその解説を行う。

3.1 微積分型輸送方程式と積分型輸送方程式の随伴中性子束の定義の違い

微積分型の輸送演算子 D 、積分型の輸送演算子 T 、散乱演算子 C をそれぞれ

$$D(\mathbf{r}, E, \Omega) = \Omega \cdot \nabla + \Sigma_t, \quad (87)$$

$$T(\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}, E, \Omega) = \int \frac{e^{-\tau(E, \mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r})} dV}{4\pi |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2}, \quad (88)$$

$$C(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega) = \int_{E'} \int_{4\pi} \Sigma(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, \Omega' \rightarrow \Omega) d\Omega' dE' \quad (89)$$

とする。なお、 $\tau(E, \mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r})$ は位置 \mathbf{r} と \mathbf{r}' の間の光学距離を示す。また、核分裂による生成演算子を F とする。

これらを用いて微積分型の輸送方程式を記述すると、

$$D\phi = C\phi + \lambda F\phi \quad (90)$$

となり、積分型は、

$$\phi = T(C\phi + \lambda F\phi) \quad (91)$$

となる。また、式 (90)(91) より、 $D^{-1} = T$ なる関係があることが分かる。

積分型輸送方程式の随伴形は

$$\begin{aligned} \phi^+ &= (TC)^+\phi^+ + \lambda(TF)^+\phi^+ = C^+T^+\phi^+ + \lambda F^+T^+\phi^+ \\ &= (C^+ + \lambda F^+)T^+\phi^+ \end{aligned} \quad (92)$$

と書ける。一方、微積分型輸送方程式の随伴形は

$$D^+\hat{\phi}^+ = C^+\hat{\phi}^+ + \lambda F^+\hat{\phi}^+ \quad (93)$$

と書け、これを変形すると、

$$\begin{aligned}\hat{\phi}^+ &= (D^+)^{-1}(C^+\hat{\phi}^+ + \lambda F^+\hat{\phi}^+) = (D^{-1})^+(C^+\hat{\phi}^+ + \lambda F^+\hat{\phi}^+) \\ &= T^+(C^+ + \lambda F^+)\hat{\phi}^+\end{aligned}\quad (94)$$

と書ける。文献 [10] によると、 ϕ^+ は flux importance function、 $\hat{\phi}^+$ は source importance function と呼ぶようである。

これらを衝突確率法ベースの式で比較する。随伴方程式は以下のように書ける⁷。

$$\phi_i^{+g} = \frac{1}{V_i} \sum_{g'} \left\{ \left(\Sigma_i^{g \rightarrow g'} + \frac{\nu \Sigma_{fi}^g}{k} \chi^{g'} \right) \left(\sum_j \frac{P_{ji}^{g'}}{\Sigma_{ti}^{g'}} V_j \phi_j^{+g'} \right) \right\} \quad (95)$$

ここで、衝突確率 P_{ij} は領域 i で発生した中性子が領域 j で初めて媒質の原子核と衝突する確率である。この式から明らかなように、forward 計算用の衝突確率法コードに随伴束計算機能を付加する場合には、アルゴリズムの構築に少々考える時間が必要となるであろう。

一方、式 (94) に対応する衝突確率法ベースの方程式は次のように書ける。

$$\hat{\phi}_i^{+g} = \sum_j \frac{P_{ji}^g}{V_i \Sigma_{ti}^g} \left\{ \sum_{g'} \left(\Sigma_j^{g \rightarrow g'} + \frac{\nu \Sigma_{fj}^g}{k} \chi^{g'} \right) V_j \hat{\phi}_j^{+g'} \right\} \quad (96)$$

この場合は至極簡単で、核分裂源と散乱源の計算部分を変更してやれば、forward 計算用のコードで容易に計算することが出来る。

次に、 ϕ^+ と $\hat{\phi}^+$ の関係を導く。式 (92) の両辺に演算子 T^+ を作用させると、

$$T^+ \phi^+ = T^+(C^+ + \lambda F^+)T^+ \phi^+ \quad (97)$$

が得られる。この式と式 (94) は形式が一致し、

$$T^+ \phi^+ = \hat{\phi}^+ \quad (98)$$

の関係が成り立つことが分かる。

3.2 摂動計算の例

積分型輸送方程式では随伴束の定義が微積分型のものとは異なることを述べたが、実際には随伴束自体が必要ではなく、それを用いた内積計算が出来ればよい場合が殆どである。その点について、摂動計算を例として具体的に説明する。

摂動系の積分型輸送方程式と基準系の随伴式を以下に示す。

$$(I - TC')\phi' = \lambda' TF'\phi', \quad (99)$$

$$(I - C^+T^+)\phi^+ = \lambda F^+T^+\phi^+ \quad (100)$$

⁷衝突確率を用いた場合、演算子 T は $T = \sum_j \frac{P_{ji}^g}{V_i \Sigma_{ti}^g}$ と記述され、その随伴演算子 T^+ は $T^+ = \sum_j \frac{P_{ij}^g}{V_j \Sigma_{tj}^g}$ と記述される。相反定理 $P_{ji}^g \Sigma_{tj}^g V_j = P_{ij}^g \Sigma_{ti}^g V_i$ より $T = T^+$ が成り立つことが分かる。また、 $\langle \phi^+, T\phi \rangle = \langle \phi, T^+\phi^+ \rangle$ が成り立つことも容易に確認できる。

ここで、摂動系の式では T に対する摂動を考慮していないことに注意が必要である。系に摂動が加えられた場合、全断面積を介して衝突確率が変動するため T も変動する。この衝突確率の摂動を扱うには大変な労力を要すると考えられるため、一般的には、全断面積の摂動を自群散乱断面積の摂動と考えて処理する [4, 7]。すなわち、輸送方程式左辺の衝突項に現れる $\Delta\Sigma_t\psi(\Omega)$ を $\Delta\Sigma_t(1/4\pi)\phi$ と近似して右辺に移動させる。これにより、 T における摂動を無視することが出来る⁸。

導出は割愛するが、摂動による反応度 ρ は以下の式で計算される。

$$\begin{aligned}\rho &= \lambda - \lambda' = \frac{\lambda' \langle \phi^+, T\Delta F\phi' \rangle - \langle \phi^+, T\Delta C\phi' \rangle}{\langle \phi^+, TF\phi' \rangle} \\ &= \frac{\lambda' \langle T^+\phi^+, \Delta F\phi' \rangle - \langle T^+\phi^+, \Delta C\phi' \rangle}{\langle T^+\phi^+, F\phi' \rangle} = \frac{\lambda' \langle \hat{\phi}^+, \Delta F\phi' \rangle - \langle \hat{\phi}^+, \Delta C\phi' \rangle}{\langle \hat{\phi}^+, F\phi' \rangle} \quad (101)\end{aligned}$$

以上のように、衝突確率法に基づく摂動計算は、微積分型輸送方程式の随伴中性子束 $\hat{\phi}$ を用いて行うことができることが分かる。すなわち、微積分型輸送方程式の随伴中性子束としては ϕ^+ が正確であるが、摂動論で反応度を計算する場合には $\hat{\phi}^+$ のみを計算すればよいことになる。

4 燃焼後数密度の核断面積に対する感度の計算

核燃料の燃焼を考慮した感度、いわゆる「燃焼感度」は、その実用性が非常に高いものではあるが、理論が複雑であり、燃焼の伴わない感度計算よりも敷居が高いと考えられる。燃焼感度に関する日本語の文献もいくつかあるが、ここでは燃焼後数密度の感度を例に、出来るだけ噛み砕いた解説を行うことを試みる。

4.1 燃焼計算の概要

燃焼計算では通常、燃焼期間をいくつかのステップに分け、さらに各ステップをサブステップに分割する。なお本稿では、ステップとサブステップは区別せず、燃焼ステップを i と表記し、ステップ総分割数を I とする。従って、燃焼初期および末期の数密度は、それぞれ N_0 、 N_I と記述される。

また、ここで想定する体系は、燃焼計算を行う燃料領域とそれ以外の領域からなるものとする。

燃焼計算で必要となる中性子束の空間、エネルギー分布は、各燃焼ステップにおいて以下の中性子輸送方程式を解くことによって得る⁹。

$$B_i\phi_i = (A_i - \lambda_i F_i)\phi_i = 0 \quad (102)$$

⁸この取扱いはあくまで近似であることに注意が必要である。例えば、この方法では、自群散乱断面積の摂動に起因する反応度を評価することが出来ない。従って、衝突確率の計算に全断面積を使った場合と輸送断面積を使った場合の実効増倍率の差や、輸送断面積の定義の違い（カレント重みと中性子束重み）に起因する実効増倍率の差は、このような摂動計算では評価出来ない。

⁹本来、演算子、中性子束ともにベクトル表記すべきであるが、これまでの記述との一貫性を考え、通常の手体とした。

なお、中性子束 ϕ_i は以下のように出力 P で規格化する。

$$P = \int_{r \in V_f} \sum_n \kappa^n N_i^n \sum_g \sigma_{f,i,g}^n \phi_{i,g}(r) dr = [\kappa \sigma_f \mathbf{N}_i \phi_i] \quad (103)$$

タイムステップ i での中性子束 ϕ_i と数密度 \mathbf{N}_i に基づいて、次のタイムステップ ($i+1$) での数密度 \mathbf{N}_{i+1} が以下の燃焼方程式から計算される。

$$\mathbf{N}_{i+1} = \mathbf{N}_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{M}(\phi_i) \mathbf{N}(t) dt \quad (104)$$

燃焼計算では、以上の手続きが燃焼末期まで繰り返される。

4.2 燃焼感度の計算

着目する核種を k 、その燃焼後数密度を N_I^k とした場合、その核断面積 σ に対する感度 S は以下の式で計算される。

$$S = \frac{\sigma}{N_I^k} \frac{dN_I^k}{d\sigma} = \frac{\sigma}{N_I^k} \mathbf{e}_k^T \frac{d\mathbf{N}_I}{d\sigma} \quad (105)$$

ここで、 \mathbf{e}_k は k 番目の要素が 1、それ以外は 0 のベクトルである。また、上添字 T は転置を意味する。

さて、式 (105) の項 $dN_I^k/d\sigma$ を計算する準備として燃焼方程式を書く。

$$\frac{\partial \mathbf{N}(t)}{\partial t} = \mathbf{M}\mathbf{N}(t) \quad (106)$$

この両辺に重み $\mathbf{w}^T(t)$ を乗じ全燃焼期間について積分すると、以下の式を得る。

$$\begin{aligned} \int \mathbf{w}^T(t) \frac{\partial \mathbf{N}(t)}{\partial t} dt &= \int \mathbf{w}^T(t) \mathbf{M}\mathbf{N}(t) dt, \\ \left[\mathbf{w}^T(t) \mathbf{N}(t) \right]_{t_0}^{t_I} - \int \frac{\partial \mathbf{w}^T(t)}{\partial t} \mathbf{N}(t) dt &= \int \mathbf{w}^T(t) \mathbf{M}\mathbf{N}(t) dt, \\ \mathbf{w}_I^T \mathbf{N}_I &= \mathbf{w}_0^T \mathbf{N}_0 + \int \frac{\partial \mathbf{w}^T(t)}{\partial t} \mathbf{N}(t) dt + \int \mathbf{w}^T(t) \mathbf{M}\mathbf{N}(t) dt \end{aligned} \quad (107)$$

ここで、 $\mathbf{w}_I = \mathbf{e}_k$ とすることにより、 N_I^k を以下のように書くことができる。

$$N_I^k = \mathbf{e}_k^T \mathbf{N}_I = \mathbf{w}_0^T \mathbf{N}_0 + \int \frac{\partial \mathbf{w}^T(t)}{\partial t} \mathbf{N}(t) dt + \int \mathbf{w}^T(t) \mathbf{M}\mathbf{N}(t) dt \quad (108)$$

式 (108) の両辺を σ で微分すると、以下の式を得る。

$$\frac{dN_I^k}{d\sigma} = \int \frac{\partial \mathbf{w}^T}{\partial t} \frac{d\mathbf{N}}{d\sigma} dt + \int \mathbf{w}^T \frac{d\mathbf{M}}{d\sigma} \mathbf{N} dt + \int \mathbf{w}^T \mathbf{M} \frac{d\mathbf{N}}{d\sigma} dt \quad (109)$$

なお、 \mathbf{w} 、 \mathbf{N} の時間依存性は省略して記述した。

式 (109) の右辺第一項、第三項に現れる $d\mathbf{N}/d\sigma$ の項は、重み関数 \mathbf{w} を適切に選択することによりゼロとすることが出来る。その詳細は後述する。

ここで式 (109) 右辺第二項に含まれる全微分 $dM/d\sigma$ について考える。この全微分を偏微分の形式に書き直すと、この項は以下のように書ける。

$$\int \mathbf{w}^T \frac{dM}{d\sigma} \mathbf{N} dt = \int \mathbf{w}^T \frac{\partial M}{\partial \sigma} \mathbf{N} dt + \sum_g \frac{d\phi_g^f}{d\sigma} \int \mathbf{w}^T \frac{\partial M}{\partial \phi_g^f} \mathbf{N} dt \quad (110)$$

ここで、 ϕ^f は燃料領域の平均中性子束を示す。式 (110) の右辺第一項は燃焼行列に対する核断面積の直接的な影響を示しており、偏微分 $\partial M/\partial \sigma$ は容易に計算することができる。また、右辺第二項は燃焼行列に対する中性子束を介した核断面積の間接的な影響を示している。燃焼行列 M は反応率（中性子束）に依存する成分 \bar{M} と依存しない成分（崩壊成分）とに分けることが出来るため、 $\partial M/\partial \phi^f = \partial \bar{M}/\partial \phi^f$ となる。行列 \bar{M} を構成するのは反応率 $R = \sum_g \sigma_g \phi_g^f$ であるが、反応率 R の ϕ_g^f に対する偏微分 $\partial R/\partial \phi^f$ は σ_g となることから、 $\partial M/\partial \phi^f$ も同様に容易に計算することが出来る。

計算が困難と考えられるのは、式 (110) の右辺第二項に現れる $d\phi^f/d\sigma$ である。そこで、以下、その計算方法について述べる。タイムステップ i での中性子輸送方程式 (102) の両辺を σ で微分すると次の式を得る。

$$\left(\frac{\partial B_i}{\partial \sigma} + \frac{\partial B_i}{\partial \mathbf{N}_i} \frac{d\mathbf{N}_i}{d\sigma} \right) \phi_i + B_i \frac{d\phi_i}{d\sigma} = 0 \quad (111)$$

ここで、式 (102) に対して一般化随伴方程式を以下のように定義する。

$$B_i^+ \Gamma_i^+ = S_i^+ \quad (112)$$

このようにして定義される一般化随伴中性子束 Γ_i^+ を式 (111) の両辺に乘じ、全エネルギー、空間について積分すると以下の式を得る。

$$\begin{aligned} & \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \sigma} \phi_i \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}_i}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \mathbf{N}_i} \phi_i \right\rangle + \left\langle \Gamma_i^+, B_i \frac{d\phi_i}{d\sigma} \right\rangle \\ &= \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \sigma} \phi_i \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}_i}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \mathbf{N}_i} \phi_i \right\rangle + \left\langle \frac{d\phi_i}{d\sigma}, B_i^+ \Gamma_i^+ \right\rangle \\ &= \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \sigma} \phi_i \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}_i}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \mathbf{N}_i} \phi_i \right\rangle + \left\langle \frac{d\phi_i}{d\sigma} S_i^+ \right\rangle = 0 \end{aligned} \quad (113)$$

ここで、式 (113) の項 $\left\langle \frac{d\phi_i}{d\sigma} S_i^+ \right\rangle$ を陽に記述する。

$$\left\langle \frac{d\phi_i}{d\sigma} S_i^+ \right\rangle = \int \sum_g \frac{d\phi_{i,g}(r)}{d\sigma} S_{i,g}^+(r) dr \quad (114)$$

S_i^+ として燃料領域にのみ平坦な源

$$S_{i,g}^+(r) = -\frac{1}{V_f} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial M}{\partial \phi_{i,g}^f} \mathbf{N} dt \quad (115)$$

を与えたとすると、

$$\int_{r \in V_f} \phi_{i,g}(r) dr = \phi_{i,g}^f V_f \quad (116)$$

より、式 (113) は次の式に書き換えられ、式 (110) の右辺第二項の計算式を得ることが出来る。

$$\sum_g \frac{d\phi_{i,g}^f}{d\sigma} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \phi_{i,g}^f} \mathbf{N} dt = \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \sigma} \phi_i \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}_i}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \mathbf{N}_i} \phi_i \right\rangle \quad (117)$$

前述のように一般化随伴方程式において源は中性子束 ϕ_i と直交しなければならないが、式 (115) で示される源はこの条件を満足しない。これは、輸送方程式 (102) のみでは中性子束が一意的に決定されないことに由来する。そこで、源として、中性子束に直交する以下のものを新たに考える。

$$\begin{aligned} S_{i,g}^+ &= -\frac{1}{V_f} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \phi_{i,g}^f} \mathbf{N} dt + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \bar{\mathbf{M}} \mathbf{N} dt \cdot \frac{\sum_n \kappa^n N_i^n \sigma_{f,i,g}^n}{P_i} \\ &= -\frac{1}{V_f} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \phi_{i,g}^f} \mathbf{N}_i dt + P_i^+ \sum_n \kappa^n N_i^n \sigma_{f,i,g}^n \end{aligned} \quad (118)$$

ここで、 $P_i^+ = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \bar{\mathbf{M}} \mathbf{N} dt / P_i$ は随伴出力と呼ばれる。その物理的意味は、 $P_i^+ \Delta P_i = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \bar{\mathbf{M}} \mathbf{N} dt \cdot (\Delta P_i / P_i)$ について考えれば理解することが出来る。

式 (118) で示される源が ϕ_i と直交していることは、以下のように、両辺に ϕ_i を乗じて、全エネルギー、空間について積分することで示すことが出来る。燃焼行列 \mathbf{M} のうち、中性子束に依存する項の各要素は反応率で表現される。すなわち、

$$\bar{M}_{ij} = a \left(\sum_g \sigma_g \phi_g^f \right) \quad (119)$$

のような形式で書ける。従って、

$$\frac{\partial M_{ij}}{\partial \phi_g^f} = a \sigma_g \quad (120)$$

であり、

$$\sum_g \frac{\partial M_{ij}}{\partial \phi_g^f} \phi_g^f = a \sum_g \sigma_g \phi_g^f = \bar{M}_{ij} \quad (121)$$

である。

式 (118) で示した源を用いた場合、式 (110) の右辺第二項は次のように書ける。

$$\sum_g \frac{d\phi_{i,g}^f}{d\sigma} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \phi_{i,g}^f} \mathbf{N} dt = \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \sigma} \phi_i \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}_i}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \mathbf{N}_i} \phi_i \right\rangle + P_i^+ \left[\kappa \sigma_f \mathbf{N}_i \frac{d\phi_i}{d\sigma} \right] \quad (122)$$

源に新たな項を付加したため、式 (122) の右辺第三項には $d\phi_i/d\sigma$ が残る。そこで、出力規格化の式 (103) を σ で微分した以下の式を考える¹⁰。

$$\left[\kappa \frac{d\sigma_f}{d\sigma} \mathbf{N}_i \phi_i \right] + \left[\kappa \sigma_f \frac{d\mathbf{N}_i}{d\sigma} \phi_i \right] + \left[\kappa \sigma_f \mathbf{N}_i \frac{d\phi_i}{d\sigma} \right] = 0 \quad (123)$$

¹⁰式 (118) の段階では源に付加される項は任意と言えるが、ここでの条件から、付加される源が一意的に決まると考えてよいであろう。当然のことながら、中性子束の規格化の方法に応じて、式 (118) で付加される源は異なる。

式 (123) の関係を用いて、式 (122) 中の $d\phi_i^f/d\sigma$ を消去すると、次の式を得る。

$$\begin{aligned}
& \sum_g \frac{d\phi_{i,g}^f}{d\sigma} \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \phi_{i,g}^f} \mathbf{N} dt \\
&= \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \sigma} \phi_i \right\rangle + \frac{d\mathbf{N}_i}{d\sigma} \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \mathbf{N}_i} \phi_i \right\rangle - P_i^+ \left[\kappa \frac{d\sigma_f}{d\sigma} \mathbf{N}_i \phi_i \right] - P_i^+ \left[\kappa \sigma_f \frac{d\mathbf{N}_i}{d\sigma} \phi_i \right] \\
&= \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \sigma} \phi_i \right\rangle - P_i^+ \left[\kappa \frac{d\sigma_f}{d\sigma} \mathbf{N}_i \phi_i \right] + \frac{d\mathbf{N}_i^T}{d\sigma} \left(\left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \mathbf{N}_i} \phi_i \right\rangle - P_i^+ [\kappa \sigma_f \phi_i] \right) \\
&= \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \sigma} \phi_i \right\rangle - P_i^+ \left[\kappa \frac{d\sigma_f}{d\sigma} \mathbf{N}_i \phi_i \right] + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{d\mathbf{N}^T}{d\sigma} \mathbf{C}(t) dt \tag{124}
\end{aligned}$$

ここで、

$$\mathbf{C}(t) = \delta(t - t_i) \left(\left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \mathbf{N}_i} \phi_i \right\rangle - P_i^+ [\kappa \sigma_f \phi_i] \right) = \delta(t - t_i) \mathbf{C}_i \tag{125}$$

である。

以上より、式 (110) は次のように整理される。

$$\int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{d\mathbf{M}}{d\sigma} \mathbf{N} dt = \int_{t_i}^{t_{i+1}} \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \sigma} \mathbf{N} dt + \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \sigma} \phi_i \right\rangle - P_i^+ \left[\kappa \frac{d\sigma_f}{d\sigma} \mathbf{N}_i \phi_i \right] + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \frac{d\mathbf{N}^T}{d\sigma} \mathbf{C}(t) dt \tag{126}$$

従って、式 (109) は以下のように書き直せる。

$$\begin{aligned}
\frac{dN_I^k}{d\sigma} &= \int \frac{\partial \mathbf{w}^T}{\partial t} \frac{d\mathbf{N}}{d\sigma} dt + \int \mathbf{w}^T \frac{d\mathbf{M}}{d\sigma} \mathbf{N} dt + \int \mathbf{w}^T \mathbf{M} \frac{d\mathbf{N}}{d\sigma} dt \\
&= \int \frac{\partial \mathbf{w}^T}{\partial t} \frac{d\mathbf{N}}{d\sigma} dt + \int \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \sigma} \mathbf{N} dt + \sum_i \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \sigma} \phi_i \right\rangle \\
&\quad - \sum_i P_i^+ \left[\kappa \frac{d\sigma_f}{d\sigma} \mathbf{N}_i \phi_i \right] + \int \frac{d\mathbf{N}^T}{d\sigma} \bar{\mathbf{C}} dt + \int \mathbf{w}^T \mathbf{M} \frac{d\mathbf{N}}{d\sigma} dt \\
&= \int \mathbf{w}^T \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \sigma} \mathbf{N} dt + \sum_i \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \sigma} \phi_i \right\rangle - \sum_i P_i^+ \left[\kappa \frac{d\sigma_f}{d\sigma} \mathbf{N}_i \phi_i \right] \\
&\quad + \int \frac{d\mathbf{N}^T}{d\sigma} \left(\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \bar{\mathbf{C}} + \mathbf{M}^T \mathbf{w} \right) dt \tag{127}
\end{aligned}$$

ここで、

$$\bar{\mathbf{C}} = \sum_{i=0}^{I-1} \delta(t - t_i) \mathbf{C}_i \tag{128}$$

である。従って、重み \mathbf{w} として、以下の方程式を満たす \mathbf{N}^+ を用いれば、式 (127) の右辺最後の項を落とすことができる。

$$-\frac{\partial \mathbf{N}^+}{\partial t} = \mathbf{M}^T \mathbf{N}^+ + \bar{\mathbf{C}} \tag{129}$$

これが随伴燃焼方程式であり、 \mathbf{N}^+ は随伴数密度と呼ばれる。また、 \mathbf{N}^+ の終条件は、前述の通り $\mathbf{N}_I^+ = \mathbf{e}_k$ である。式 (128) に示されるように、源 $\bar{\mathbf{C}}$ は燃焼ステップの境界点におい

てのみ値をもつ。\$[t_i - \delta, t_i + \delta]\$ の区間について上式を積分し、\$\delta \to 0\$ の極限をとると、以下の式を得る。

$$\mathbf{N}^+(t_i - \delta) = \mathbf{N}^+(t_i + \delta) + \mathbf{C}_i \quad (130)$$

これは燃焼ステップの境界点において随伴数密度が不連続に変化することを示しており、jump condition と呼ばれる。

随伴数密度を重み関数として用いることにより、最終的に式 (127) は次のように整理される。

$$\frac{dN_I^k}{d\sigma} = \int \mathbf{N}^{+T} \frac{\partial \mathbf{M}}{\partial \sigma} \mathbf{N} dt + \sum_i \left\langle \Gamma_i^+, \frac{\partial B_i}{\partial \sigma} \phi_i \right\rangle - \sum_i P_i^+ \left[\kappa \frac{d\sigma_f}{d\sigma} \mathbf{N}_i \phi_i \right] \quad (131)$$

この式の右辺第一項は「数密度項」、第二項は「中性子束項」、第三項は「出力規格化項」と、それぞれ呼ばれる。

4.3 随伴数密度の物理的意味

最後に、随伴数密度の物理的意味についてまとめる。はじめに、出力規格化および中性子束場の影響を考えない一点炉の問題について考える。

燃焼方程式を以下に再掲する。

$$\frac{\partial \mathbf{N}(t)}{\partial t} = \mathbf{M}\mathbf{N}(t) \quad (132)$$

また、この系に対する随伴式は、一点炉の場合、以下で与えられる。

$$-\frac{\partial \mathbf{N}^+(t)}{\partial t} = \mathbf{M}^+ \mathbf{N}^+(t) \quad (133)$$

ここで、\$\mathbf{N}^+\$ を核種 \$j\$ の燃焼後数密度に対する随伴数密度と定義するため、終条件として \$\mathbf{N}_I^+ = \mathbf{e}_j\$ を与える。

式 (132) の両辺に \$\mathbf{N}^{+T}\$、式 (133) の両辺に \$\mathbf{N}^T\$ を乗じ時間 \$[t_i, t_I]\$ で積分し、辺々引くことにより以下の式を得る。

$$\int \mathbf{N}^{+T} \frac{\partial \mathbf{N}}{\partial t} dt + \int \mathbf{N}^T \frac{\partial \mathbf{N}^+}{\partial t} dt = \int \mathbf{N}^{+T} \mathbf{M}\mathbf{N} dt - \int \mathbf{N}^T \mathbf{M}^+ \mathbf{N}^+ dt \quad (134)$$

随伴演算子の性質を用いることにより、式 (134) の右辺はゼロとなる。その結果、式 (134) は次のように書ける。

$$\left[\mathbf{N}^{+T} \mathbf{N} \right]_{t_i}^{t_I} = \mathbf{N}_I^{+T} \mathbf{N}_I - \mathbf{N}_i^{+T} \mathbf{N}_i = 0 \quad (135)$$

これより、\$N_I^j\$ は以下の式で与えられる。

$$N_I^j = \mathbf{N}_i^{+T} \mathbf{N}_i = \sum_k N_i^{+,k} N_i^k \quad (136)$$

すなわち、積 \$N_i^{+,k} N_i^k\$ は、燃焼後 (\$t_I\$) における \$j\$ 核種の数密度に対して、時刻 \$t_i\$ において核種 \$k\$ がどの程度寄与しているかを示す指標にほかならない。また、仮に \$\mathbf{N}_i = \mathbf{e}_k\$ とするならば、\$N_I^j = N_i^{+,k}\$ となり、\$N_i^{+,k}\$ は \$t_i\$ において系に単位個数密度の核種 \$k\$ が投入されたと

きの t_I で生成される核種 j の数密度に対応する。以上より、 \mathbf{N}^+ は $t = t_I$ での数密度 N_I^j に対するインポートランスに対応していることが分かる。

次に、この議論を中性子束場、出力規格化を考慮した場合に拡張する。

数密度と随伴数密度は以下の式に従う。

$$\frac{\partial \mathbf{N}(t)}{\partial t} = \mathbf{M}\mathbf{N}(t), \quad (137)$$

$$-\frac{\partial \mathbf{N}^+(t)}{\partial t} = \mathbf{M}^T \mathbf{N}^+(t) + \bar{\mathbf{C}} \quad (138)$$

式 (137) の両辺に \mathbf{N}^{+T} 、式 (138) の両辺に \mathbf{N}^T を乗じ、時間 $[t_i, t_I]$ で積分する。そして両辺の差をとると、最終的に以下の式を得る。

$$N_I^j = \mathbf{N}_i^T \mathbf{N}_i^+ - \sum_{k=i}^{I+1} \mathbf{N}_k^T \mathbf{C}_k \quad (139)$$

$$= \mathbf{N}_i^T \mathbf{N}_i^+ - \sum_{k=i}^{I+1} \mathbf{N}_k^T \left(\left\langle \Gamma_k^+, \frac{\partial B_k}{\partial \mathbf{N}_k} \phi_k \right\rangle - P_k^+ [\kappa \sigma_f \phi_k] \right) \quad (140)$$

この式を以下のように書き直す。

$$N_I^j = \sum_l \left(N_i^l N_i^{+,l} - \sum_{k=i}^{I+1} N_k^l C_k^l \right) = \left(\sum_l \text{CF}_i^l \right) N_I^j \quad (141)$$

ここで、燃焼後における核種 j の数密度に対する、 t_i 時点での核種 l の寄与割合を示す Contribution function、 CF_i^l を定義した。

5 おわりに

「決定論的感度解析手法」ということで、一般化摂動論とそれに関連する事柄について解説を行った。書き終えてみると、「三谷・黒井のレポートと小林先生の教科書を紹介するだけで良かったのではないか」とも思ったが、あまり飲み込みのよくない人間が書いたものなので、それらのテキストと比べてより平易になっているのではないかと思う。

三谷・黒井のレポートの発行年は1972年、今から40年前である。そんな古典の解説を一生懸命行ってみて、なんとも言いようのない気持ちとなる。筆者がこの道に入って十年強、三谷・黒井のレポートは何度か目を通しているのだが、未だ十分理解しているとは言いがたい。一般化摂動論に限らず、万事この調子である。古典の解読のみに一生を費やすことになるのではないかという気もする。

一般化摂動論に基づく感度計算は大変有用なものではあるが、軽水炉の燃焼特性など、その適用が極めて困難な場合がある。最近になって、一般化摂動論とは異なる枠組み（ないしは一般化摂動論を使ったより広い枠組み）での感度・不確かさ解析が米国の Abdel-Khalik 博士のもとで精力的に研究されている（例えば文献 [1] など）。私が今出来ることは「古典の解読」しかないが、真に実力のある方々（特に若い方々）には、困難さを突破する研究をどんどん進めていって欲しいと思うし、私もいつかはそんな研究をしたいと考えて（空想して？）いる。

本稿をまとめるにあたって、名古屋大学の遠藤知弘氏には本稿の詳細なレビューをしていただいた。ここに深い謝意を表する。

参考文献

- [1] H.S.Abdel-Khalik, *et al.*, *Nucl. Sci. Eng.*, **159**, pp.256 (2008).
- [2] 三谷浩、黒井英雄、「積分量の感度係数と一般化摂動法」、JAERI-M 4760 (1972).
- [3] 小林啓祐、「原子炉物理」、コロナ社 (1996) .
- [4] T.Takeda, M.Nakano, *J. Nucl. Sci. Technol.*, **23**[8], pp.681 (1986).
- [5] S.Kato, T.Endo, A. Yamamoto, "A new calculation method for the generalized adjoint flux using the method of characteristics," *Proc. 19th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE19)*, Makuhari, Japan, May 2011.
- [6] T.Courau, G.Marleau, *Nucl. Sci. Eng.*, **141**, pp.46 (2002).
- [7] T.Courau, G.Marleau, *Nucl. Sci. Eng.*, **143**, pp.19 (2003).
- [8] M.Assawaroongruengchot, G.Marleau, *Nucl. Sci. Eng.*, **155**, pp.37 (2007).
- [9] M.Assawaroongruengchot, G.Marleau, *Nucl. Sci. Eng.*, **157**, pp.30 (2007).
- [10] M.L.Williams, 'Perturbation theory for reactor analysis,' *CRC Handbook of Nuclear Reactors Calculations*, Vol.3, pp.63, CRC Press, Boca Raton, Florida (1986).